

ALN - Métodos Iterativos basados en subespacios de Krylov

In.Co.

Facultad de Ingeniería

Universidad de la República

Repaso...

- Intentamos resolver el problema:

$$Ax = b$$

- y lo transformamos en uno equivalente multiplicando por una matriz M invertible que “mejora” el problema:

$$Ax = b \Leftrightarrow M^{-1}Ax = M^{-1}b \Leftrightarrow Mx = (M - A)x + b$$

Repaso...

- Luego trabajamos con iteraciones de la siguiente forma:

$$Ax = b \Leftrightarrow Mx = (M - A)x + b$$

$$Mx^{(k+1)} = (M - A)x^{(k)} + b$$

- Definimos el residuo como: $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$
 - Nos dice cuán lejos está $Ax^{(k)}$ de b pero no cuán lejos está $x^{(k)}$ de la solución x

Repaso...

- Si introducimos el residuo en la ecuación anterior vemos que:

$$Mx^{(k+1)} = (M - A)x^{(k)} + b = Mx^{(k)} + r^{(k)}$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + M^{-1}r^{(k)}$$

- La iteración corrige $x^{(k)}$ en cada paso sumándole el residuo del sistema

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b$$

Repaso...

- Asumamos (por simplicidad) que $M = I$
- Tomamos $x^{(0)} = b$ y calculamos las primeras iteraciones:

$$x^{(1)} = (I - A)b + b = 2b - Ab$$

$$x^{(2)} = (I - A)(2b - Ab) + b = 3b - 3Ab + A^2b$$

- $x^{(k)}$ es una combinación lineal de los vectores $\{b, Ab, \dots, A^k b\}$!!!

Krylov les puso nombre...

■ Subespacio de Krylov

- Se define el subespacio de Krylov de dimensión m asociado a la matriz A y al vector v , como el subespacio generado por la base $\{v, Av, A^2v, \dots, A^{m-1}v\}$
- Se denota $K_m(A, v)$

Algunas propiedades...

■ Se puede ver que:

□ $AK_m \subset K_{m+1}$

□ $K_1 \subset K_2 \subset \dots \subset K_m \subset \dots$

□ Ortogonalidad

Si $v \perp K_m$ entonces $Av \perp K_{m-1}$

Cualquier vector ortogonal a un espacio de Krylov se transforma bajo A en otro también ortogonal, pero al espacio de Krylov un orden menor.

Métodos Iterativos basados en subespacios de Krylov

- Buscan la solución iterativamente en el subespacio $K(A,b)$ según distintos criterios.
- No estacionarios:
 - Hacen uso de información evaluada en cada iteración, esto les permite obtener la solución de modo dinámico.
- Suelen ser más eficientes que los métodos estacionarios vistos anteriormente.

Volviendo al ejemplo anterior...

$$M = I \Rightarrow x^{(k+1)} = x^{(k)} + r^{(k)}$$

- Agrego un parámetro $\alpha^{(k)}$ para intentar mejorar la convergencia.

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} r^{(k)}$$

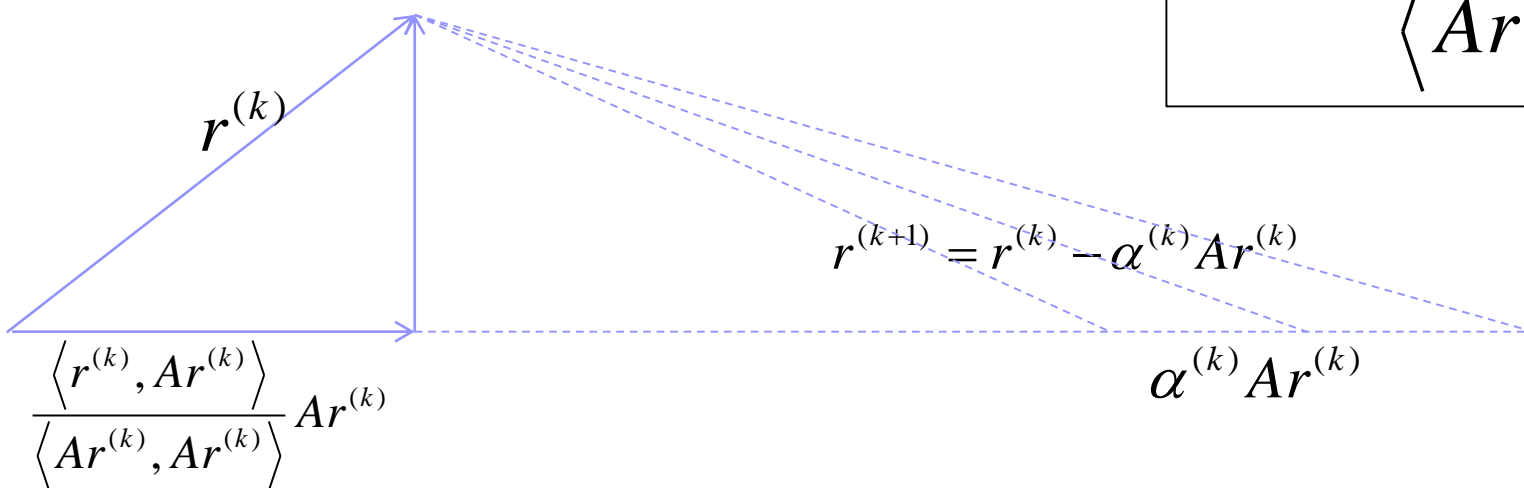
- Cómo elijo $\alpha^{(k)}$?

- Un criterio puede ser minimizar la norma-2 del residuo de la siguiente iteración:

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha^{(k)} Ar^{(k)}$$

- Elijo $\alpha^{(k)}$ tal que $\alpha^{(k)} Ar^{(k)}$ sea la proyección de $r^{(k)}$ sobre $Ar^{(k)}$

$$\alpha^{(k)} = \frac{\langle r^{(k)}, Ar^{(k)} \rangle}{\langle Ar^{(k)}, Ar^{(k)} \rangle}$$



- Definimos el error en el paso k como:

$$e^k = x^k - x = x^k - A^{-1}b$$

- Se relaciona con el residuo de la siguiente manera:

$$e^k = A^{-1}b - x^k = A^{-1}b - A^{-1}Ax^k = A^{-1}r^k$$


- Otro criterio puede ser minimizar la norma-2 del error de la siguiente iteración:

$$e^{(k+1)} = e^{(k)} - \alpha^{(k)} r^{(k)}$$

- El problema es que para calcular $\alpha^{(k)} = \frac{\langle e^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}$ necesitamos A^{-1}

- Si A es simétrica y definida positiva una alternativa es minimizar el error de la siguiente iteración usando la norma-A, de esta forma:

$$\alpha^{(k)} = \frac{\langle e^{(k)}, r^{(k)} \rangle_A}{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle_A} = \frac{\langle e^{(k)}, Ar^{(k)} \rangle}{\langle r^{(k)}, Ar^{(k)} \rangle} = \frac{\langle A^{-1}r^{(k)}, Ar^{(k)} \rangle}{\langle r^{(k)}, Ar^{(k)} \rangle} = \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle r^{(k)}, Ar^{(k)} \rangle}$$

- 
- Con esta elección de $\alpha^{(k)}$ obtenemos el llamado “método del máximo descenso”
 - Por qué se llama así?
 - Veamos otra forma de interpretar el problema de resolver $Ax = b$ cuando A es simétrica y definida positiva

$Ax = b$ como problema de minimización

- Si $A \in R^{n \times n}$ es simétrica y definida positiva y $b \in R^n$, entonces la función cuadrática

$$\phi: R^n \rightarrow R$$

$$\phi(x) = \frac{1}{2} \langle Ax, x \rangle - \langle b, x \rangle$$

alcanza un único mínimo en el vector $x \in R^n$ solución del sistema $Ax = b$.

Nota:
$$\phi(x) = \frac{1}{2} \langle Ax, x \rangle - \langle b, x \rangle = \frac{1}{2} x^T Ax - x^T b$$

- A es simétrica entonces

$$\nabla \phi(x) = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}(x) \right) = \frac{1}{2} (Ax + A^T x) - b = Ax - b$$

- Entonces:

$$\nabla \phi(x) = 0 \Leftrightarrow Ax = b$$

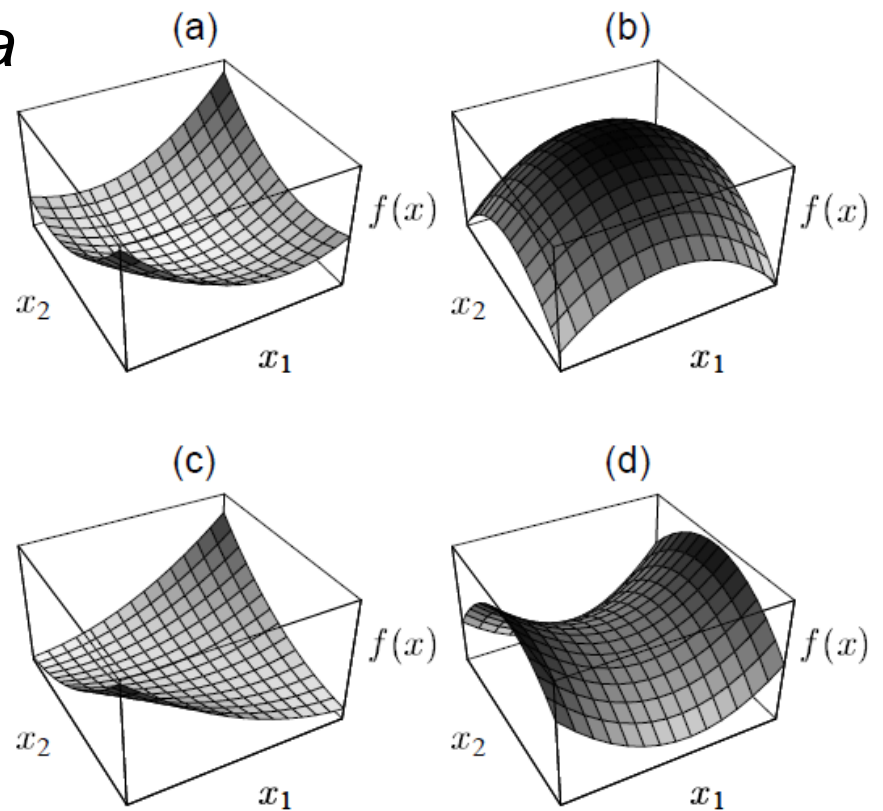
- Además $H\phi(x) = \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right) = (a_{ij}) = A$

y, por lo tanto si A es definida positiva, el punto crítico de ϕ es un mínimo.

■ *Gráficamente:*

- a) *Forma cuadrática definida positiva*
- b) *Definida negativa*
- c) *singular indefinida positiva*
- d) *indefinida.*

En (a) el punto crítico es un mínimo y corresponde a $Ax=b$.



Métodos de Descenso

- Partiendo de un vector $u^0 \in R^n$, en cada paso $k=0,1,2,\dots$ se determina un nuevo “punto”

$$u^{k+1} \in R^n / \phi(u^{k+1}) < \phi(u^k)$$

de la siguiente manera:

1 - Se calcula una dirección de búsqueda p^k

2 - Se considera la recta L_k que pasa por el punto u^k con dirección p^k

3 - Se elige el punto $u^{k+1} \in L_k$ donde ϕ alcanza su mínimo (sobre L_k)

- Como $L_k = \{u^k + \alpha p^k : \alpha \in R\}$, entonces

$$\phi(u^k + \alpha p^k) = \left[\frac{1}{2} \langle Au^k, u^k \rangle - \langle b, u^k \rangle \right] + \langle Au^k - b, p^k \rangle \alpha + \frac{1}{2} \langle Ap^k, p^k \rangle \alpha^2$$

- Por lo tanto,

$$\frac{d\phi}{d\alpha}(u^k + \alpha p^k) = 0 \Leftrightarrow \alpha = \alpha^k = \frac{\langle r^k, p^k \rangle}{\langle Ap^k, p^k \rangle}$$

- Donde $r^k = b - Au^k$ es el residuo de u^k

- Luego $u^{k+1} = u^k + \alpha^k p^k$

Método del Máximo Descenso

- Los distintos métodos de descenso se distinguen por la manera de escoger la dirección p^k
- La elección más simple es escoger la dirección de máximo descenso de ϕ

$$p^k = -\nabla \phi(u^k) = b - Au^k = r^k$$

- Esta elección conduce al Método del Máximo Descenso o del Gradiente.

Método del Máximo Descenso

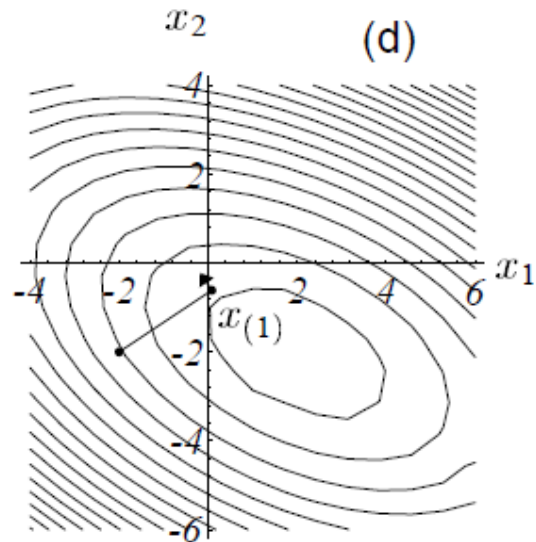
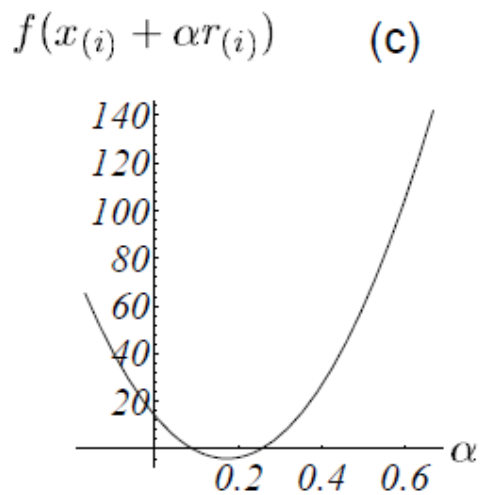
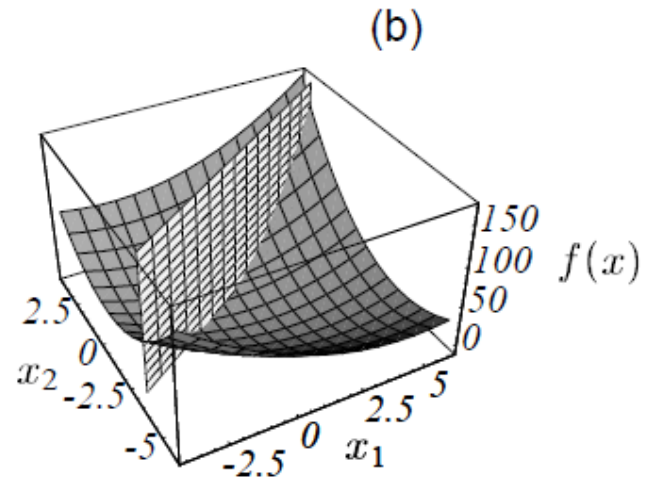
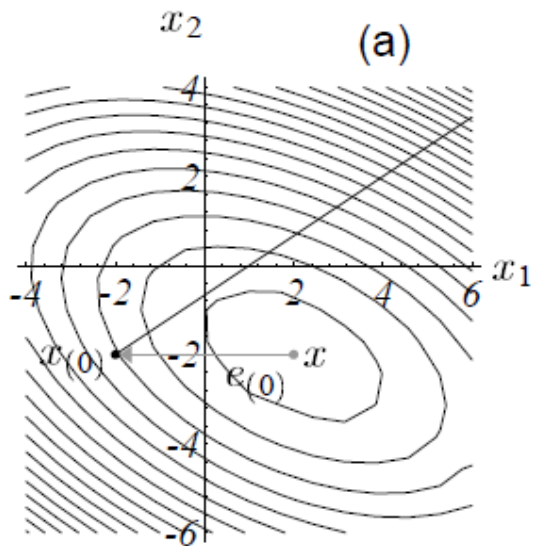
- Tenemos todo lo necesario !

$$u^{k+1} = u^k + \alpha^k p^k$$

$$p^k = -\nabla \phi(u^k) = b - Au^k = r^k$$

$$\frac{d\phi}{d\alpha}(u^k + \alpha p^k) = 0 \Leftrightarrow \alpha = \alpha^k = \frac{\langle r^k, p^k \rangle}{\langle Ap^k, p^k \rangle}$$

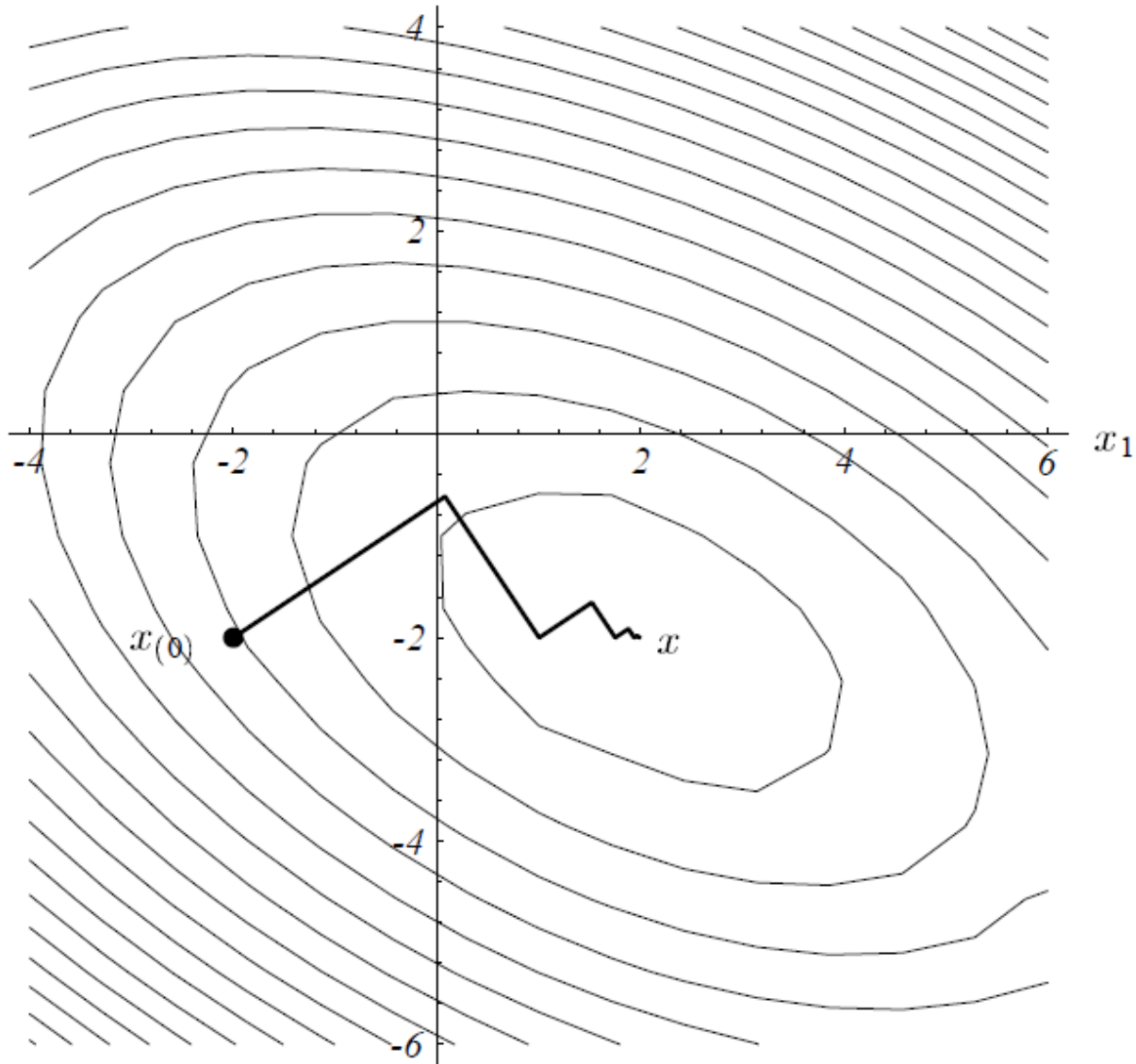
Método del Máximo Descenso



Método del Máximo Descenso

- a) Dada una solución inicial se elige la dirección de máximo descenso (igual al residuo $r = b - Ax$)
- b) Intersección entre la forma cuadrática y el plano determinado por la dirección de máximo descenso y la vertical
- c) La intersección es una parábola. Nos quedamos con el mínimo
- d) La dirección del gradiente en el punto elegido es ortogonal a la dirección de máximo descenso inicial.

Método del Máximo Descenso



Algoritmo del Método del Máximo Descenso:

Dado el vector inicial u^0

Para $k = 0, 1, 2, \dots$ hasta algún criterio de detención do

$$\begin{aligned}r^k &= b - Au^k \\ \alpha^k &= \frac{\langle r^k, r^k \rangle}{\langle Ar^k, r^k \rangle} \\ u^{k+1} &= u^k + \alpha^k r^k\end{aligned}$$

Requiere 2 productos
matriz–vector por
iteración

end

Algoritmo del Método del Máximo Descenso II

Dado el vector inicial u^0 , $r^0 = b - Au^0$

Para $k = 0, 1, 2, \dots$ hasta algún criterio de detención do

$$\alpha^k = \frac{\langle r^k, r^k \rangle}{\langle Ar^k, r^k \rangle}$$

$$u^{k+1} = u^k + \alpha^k r^k$$

$$r^{k+1} = b - Au^{k+1} = r^k - \alpha^k Ar^k$$

Requiere 1 producto
matriz–vector por
iteración

end

Propiedad de convergencia finita

- Tras n iteraciones (como máximo) se alcanza la solución exacta suponiendo que no haya efecto de los errores de redondeo (aritmética exacta).
- Sin embargo, en aritmética finita este resultado ya no es válido. Debido a los errores de redondeo, pueden ser necesarios más de n pasos del método.

Criterio de detención

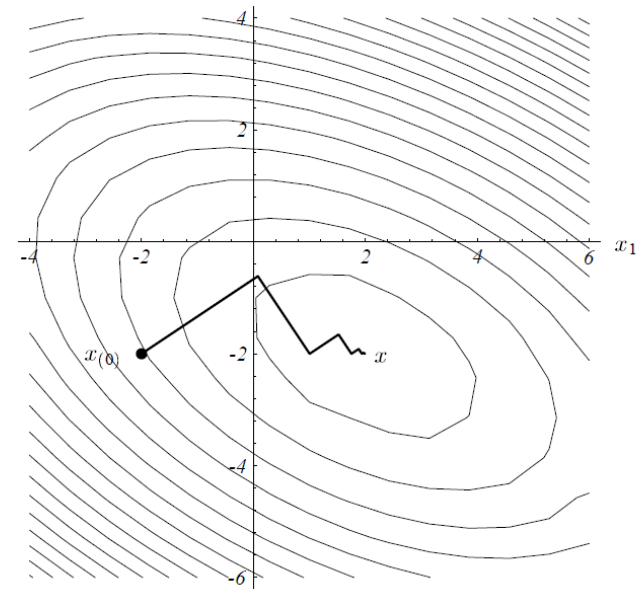
- Debido a errores de redondeo no se puede alcanzar cualquier nivel de precisión en el residuo.
- Establecer una cota de la precisión alcanzable en relación con factores como la precisión de la máquina, las normas de los vectores que manejamos y el número de condición del problema.

$$\|r^i\| \leq \text{cota}(\text{cond}(A), \|b\|, \varepsilon_M, \dots)$$

- Notar que el vector del residuo se computa en el método !!

Gradiente Conjugado

- Como se ve en la figura, el método de Máximo Descenso frecuentemente toma varios pasos en la misma dirección.
- Sería bueno poder seleccionar la dirección y longitud adecuadas en cada paso.
- GC utiliza las direcciones conjugadas.



Direcciones conjugadas

- Una elección de la dirección de descenso p^k que genera un método más eficiente se basa en ortogonalizar el residuo r^k respecto a todas las direcciones de descenso anteriores p^j , $j = 1, \dots, k-1$, en el producto interno


$$\langle x, y \rangle_A = \langle Ax, y \rangle, \quad x, y \in R^n$$

- Las direcciones obtenidas satisfacen

$$\langle Ap^k, p^j \rangle = 0 \quad \forall j \neq k$$

y son llamadas direcciones conjugadas o A-ortogonales.

- El procedimiento anterior conduce a otro método llamado Método del Gradiente Conjugado.

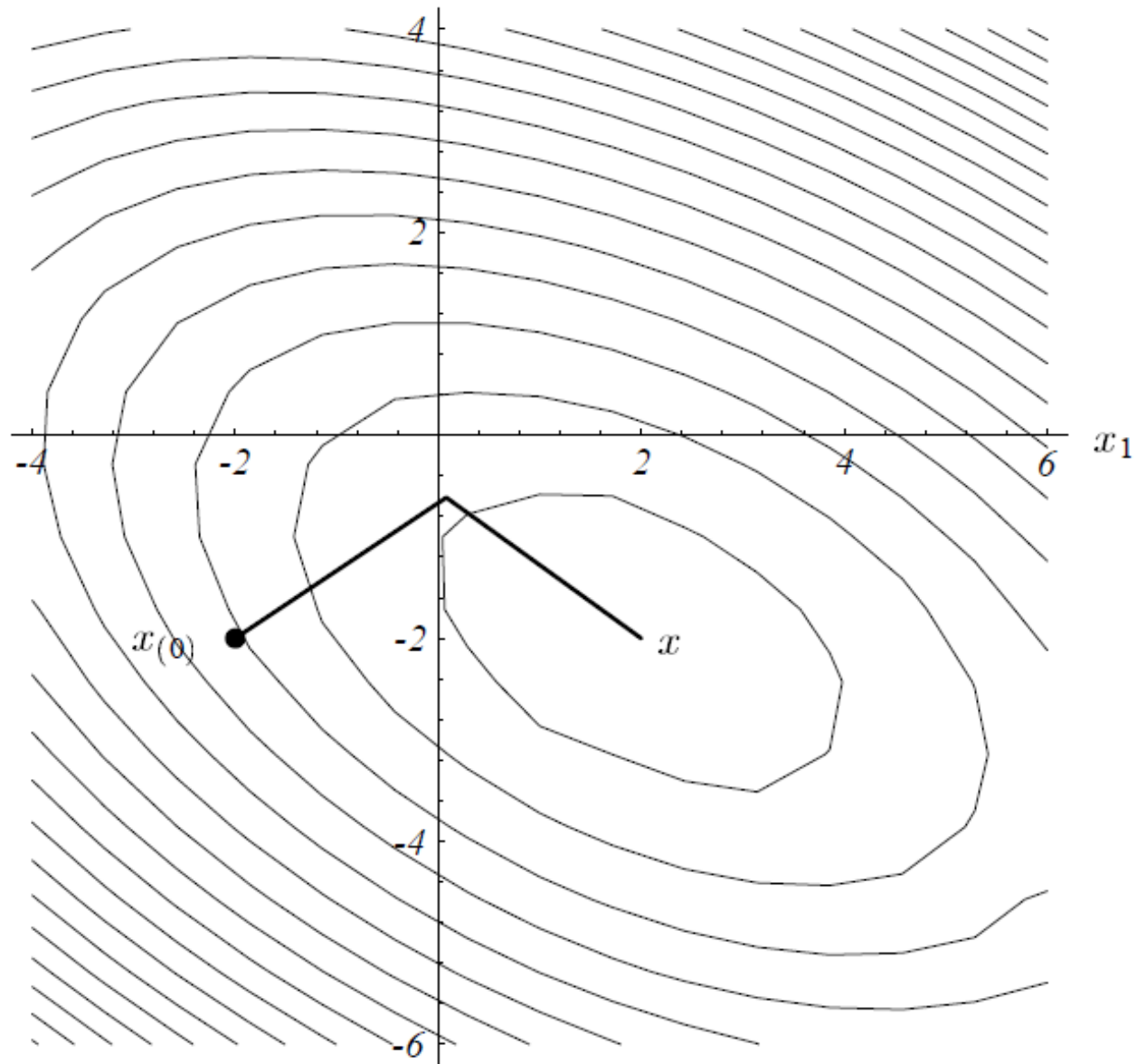
- 
- La idea básica del método del gradiente conjugado consiste en construir una base de vectores ortogonales y utilizarla para realizar la búsqueda de la solución en forma eficiente.
 - La ventaja del método radica en que únicamente necesita asegurar la ortogonalidad de un nuevo miembro con respecto al último que se ha construido.

- En las sucesivas iteraciones se obtienen soluciones aprox. al sistema (iterandos).
- Para cada iteración se calcula el residuo correspondiente a las distintas soluciones y una dirección de búsqueda (p^{k+1}).
- Residuo de la resolución del sistema

$$r^{k+1} = b - Au^{k+1}$$

- Variable de escalado α^{k+1} .
- La elección de β^k asegura que r^{k+1} y r^k sean ortogonales (a todos los previos).

Método del Gradiente Conjugado



Algoritmo del Método del Gradiente Conjugado:

Entrada: el sistema $Ax = b$ y un vector de búsqueda inicial u^0 .

Se calcula para iniciar el algoritmo $r^0 = b - Au^0$ y $p^0 = r^0$

Para $k = 1, 2, \dots$ hasta que se satisfaga un criterio de detención **do**

$$\begin{aligned}r^k &= b - Au^k \\ \beta^{k-1} &= -\frac{\langle Ap^{k-1}, r^k \rangle}{\langle Ap^{k-1}, p^{k-1} \rangle} \\ p^k &= r^k + \beta^{k-1} p^{k-1} \\ \alpha^k &= \frac{\langle r^k, p^k \rangle}{\langle Ap^k, p^k \rangle} \\ u^{k+1} &= u^k + \alpha^k p^k\end{aligned}$$

end

Algoritmo del Método del Gradiente Conjugado:

Entrada: el sistema $Ax = b$ y un vector de búsqueda inicial u^0 .

Se calcula para iniciar el algoritmo $r^0 = b - Au^0$ y $p^0 = r^0$

Para $k = 1, 2, \dots$ hasta que se satisfaga un criterio de detención **do**

$$\beta^{k-1} = \frac{\langle r^k, r^k \rangle}{\langle r^{k-1}, r^{k-1} \rangle}$$

$$p^k = r^k + \beta^{k-1} p^{k-1}$$

$$\alpha^{k+1} = \frac{\langle r^k, p^k \rangle}{\langle Ap^k \cdot p^k \rangle}$$

$$u^{k+1} = u^k + \alpha^k p^k$$

$$r^{k+1} = r^k - \alpha^k Ap^k$$

end

Algoritmo del Método del Gradiente Conjugado

- El método del gradiente conjugado necesita muy poca memoria extra para ser ejecutado.
- Se basa en la operación multiplicación matriz vector.
- Para cada iteración del algoritmo básico (sin preconditionador ni condición de convergencia) es necesario realizar:
 - un producto matriz-vector
 - Pocas actualizaciones vectoriales
 - Pocos productos escalares entre vectores.
- En el caso disperso, SPMV !!!

Velocidad de convergencia

- La velocidad de convergencia de los métodos iterativos es difícil de predecir con exactitud.
 - En general se dispone de cotas más o menos ajustadas.
- La convergencia del método dependerá, en gran manera, de las propiedades espectrales de la matriz.
- Un mal condicionamiento de la matriz provoca que converja lentamente.

Velocidad de convergencia

- Se verifica que:

$$\|u^i - x\| \leq 2 \left(\frac{\sqrt{k_2} - 1}{\sqrt{k_2} + 1} \right)^i \|u^0 - x\|$$

- u^i es la solución obtenida para la iteración i -ésima.
- x es la solución exacta del sistema.
- k_2 es el número de condición .

$$k_2 = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}$$

Precondicionadores

- Matriz invertible M que provoca que el sistema:

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b$$

tenga la misma solución de $Ax = b$ pero que sea más fácil de resolver.

- La ventaja que se obtiene mediante su uso es que la nueva matriz de coeficientes presenta propiedades espectrales favorables, que permiten una convergencia más rápida (PCG).

Precondicionadores

- La inclusión de un preconditionador en el PCG implica la resolución de un sistema lineal $Mx=y$ en cada iteración del método.
- Se trata de elegir M tal que M^{-1} se asemeje de cierta forma a A^{-1} pero que el sistema $Mx=y$ sea fácil de calcular de forma directa.
 - Usualmente se reduce la cantidad de iteraciones necesarias para converger pero aumenta el costo de cada iteración.
- Existen varios tipos de preconditionadores y su desempeño depende del tipo de problema.

Algunos preconditionadores

- Jacobi, Gauss-Seidel, SOR, SSOR:
 - Las matrices Jacobi, GS, SOR y SSOR pueden ser usadas como preconditionadores de otros métodos iterativos (por ejemplo GC o GMRES).
 - Son simples de calcular pero frecuentemente tienen un bajo desempeño (depende del problema).
- Factorizaciones Incompletas (Incomplete LU o ILU)
 - Consisten en factorizar la matriz A pero permitir solo cierto grado de fill-in. La variante ILU0 produce una factorización con el mismo patrón de dispersión que A .
- Inversa Aproximada
 - El preconditionador es una aproximación de la inversa de A , por lo que no es necesario resolver un sistema en cada iteración.

Otros métodos

- Generalized Minimal Residual (GMRES).
 - Ampliamente utilizado
 - Se basa en formar explícitamente una base ortogonal del subespacio de Krylov (A, r_0) utilizando la ortogonalización de Gram-Schmidt (método de Arnoldi).
 - En cada paso, el iterando x^i es una combinación lineal de esta base que minimiza $\| b - Ax^i \|$
 - Posee grandes requerimientos de memoria debido a que es necesario almacenar la base y el costo crece con cada iteración.
 - Se suele utilizar una variante que reinicia el método cada cierto número de pasos utilizando el iterando calculado hasta el momento como solución inicial. Se la suele llamar Restarted GMRES o GMRES(m) donde m es la cantidad de iteraciones cada cual se reinicia el método.

Otros métodos

- Gradiente Bi-conjugado (BiCG).
 - No exige que la matriz sea simétrica.
 - Se basa en reemplazar las secuencias ortogonales de residuos por dos secuencias mutuamente ortogonales.
 - La actualización de relaciones para los residuos son aumentadas por relaciones que son similares pero basadas en A^T en lugar de A .
 - Para matrices simétricas y definidas positivas obtiene los mismos resultados que el método del GC.

Algoritmo del Método del Gradiente Bi-conjugado:

Elegir x_0 , calcular $r_0 = b - Ax_0$ y elegir $r'_0 = r_0; p_0 = p'_0; \rho_0 = 0$

Para $k = 0, 1, 2, \dots$ hasta que se satisfaga un criterio de detención **do**

$$\beta_{k+1} = \frac{\rho_{k+1}}{\rho_k}$$

$$p_{k+1} = r_k + \beta_{k+1} \cdot p_k$$

$$p'_{k+1} = r'_k + \beta_{k+1} \cdot p'_k$$

$$r_{k+1} = r_k + \alpha_{k+1} \cdot Ap_{k+1}$$

$$r'_{k+1} = r'_k + \alpha_{k+1} \cdot A^T p'_{k+1}$$

$$\rho_{k+1} = \langle r'_{k+1}, r_{k+1} \rangle$$

$$\alpha_{k+1} = \frac{\rho_{k+1}}{\langle p'_{k+1}, Ap_{k+1} \rangle}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_{k+1} \cdot p_{k+1}$$

end

Otros métodos

- Gradiente Conjugado Cuadrático (CGS).
 - Variante del Gradiente Bi-Conjugado.
 - Cantidad de operaciones muy similar al BiCG, pero no es necesario usar A^T .
 - En la práctica la convergencia puede ser mucho más irregular que para el BiCG.

Algoritmo del Método del Gradiente Conjugado Cuadrático:

Elegir x_0 , calcular $r_0 = b - Ax_0$ y elegir $r'_0 = r_0; p_0 = q_0; \rho_0 = 0$

Para $k = 0, 1, 2, \dots$ hasta que se satisfaga un criterio de detención **do**

$$\rho_{k+1} = \langle r'_0, r_k \rangle$$

$$\beta_{k+1} = \frac{\rho_{k+1}}{\rho_k}$$

$$u = r_k + \beta_{k+1} \cdot q_k$$

$$p_{k+1} = u + \beta_{k+1} \cdot (q_k + \beta_{k+1} \cdot p_k)$$

$$\alpha_{k+1} = \frac{\rho_{k+1}}{\langle p'_0, Ap_{k+1} \rangle}$$

$$q_{k+1} = u - \alpha_{k+1} \cdot p_{k+1}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_{k+1} \cdot (u + q_{k+1})$$

$$r_{k+1} = x_k + \alpha_{k+1} \cdot (u + q_{k+1})$$

end

Otros métodos

- Gradiente Bi-conjugado Estabilizado (BiCGSTAB).
 - Resuelve sistemas lineales no simétricos.
 - Evita la irregular convergencia del método de Gradiente Conjugado Cuadrático modificando el polinomio que se usa para el cálculo del residuo.
 - Requiere dos productos internos más que BiCG y CGS.

Algoritmo del Método del Gradiente Bi-conjugado Estabilizado:

Elegir x_0 , calcular $r_0 = b - Ax_0$ y elegir $r'_0 = r_0$; $p_0 = q_0 = 0$; $\rho_0 = \alpha_1 = \omega_0 = 1$

Para $k = 0, 1, 2, \dots$ hasta que se satisfaga un criterio de detención **do**

$$\rho_{k+1} = \langle r'_0, r_k \rangle$$

$$\beta_{k+1} = \frac{\rho_{k+1}}{\rho_k} \frac{\alpha_{k+1}}{\omega_k}$$

$$p_{k+1} = r_k + \beta_{k+1} \cdot (p_k - \omega_k q_k)$$

$$q_{k+1} = Ap_{k+1}$$

$$\alpha_{k+1} = \frac{\rho_{k+1}}{\langle r'_0, q_{k+1} \rangle}$$

$$s_{k+1} = r_k - \alpha_{k+1} \cdot q_{k+1}$$

$$t_{k+1} = As_{k+1}$$

$$\omega_{k+1} = \frac{\langle t_{k+1}, s_{k+1} \rangle}{\langle t_{k+1}, t_{k+1} \rangle}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_{k+1} \cdot p_{k+1} + \omega_{k+1} \cdot s_{k+1}$$

$$r_{k+1} = s_{k+1} + \omega_{k+1} \cdot t_{k+1}$$

end