

– Typeset by GMNI & Foil_ETEX –

MÉTODOS SEMI-ITERATIVOS PARA GRANDES SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES: GMRES

J. París, H. Gómez, X. Nogueira, F. Navarrina, I. Colominas, M. Casteleiro



GMNI — GRUPO DE MÉTODOS NUMÉRICOS EN INGENIERÍA

E. T. S. de Ingeniería de Caminos, Canales y Puertos
Universidade da Coruña, Spain

página web: <http://caminos.udc.es/gmni>





ÍNDICE

- ▶ Planteamiento general del problema
- ▶ Métodos de proyección ortogonal
- ▶ Métodos basados en subespacios de Krylov
- ▶ Métodos de obtención de bases ortonormales
- ▶ Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi
- ▶ Método GMRES
- ▶ Método GMRES con preconditionamiento
- ▶ Método GMRES: Implementación práctica



Planteamiento general del problema (I)

Sea el sistema de ecuaciones lineales

$$\underline{A}\bar{x} = \bar{b}, \quad \text{con } \underline{A} \text{ regular en general no simétrica.}$$

Se pretende resolver mediante un método semi-iterativo este problema teniendo en cuenta:

- El algoritmo debe tener un coste computacional reducido.
- El algoritmo debe ser preciso y robusto.
- El algoritmo debe permitir el cálculo en paralelo.



Métodos de proyección ortogonal (I)

Sea \underline{A} una matriz real cuadrada de orden n .

Sean \mathcal{K} y \mathcal{L} dos subespacios de dimensión m en \mathcal{R}^n

Un método de proyección ortogonal a \mathcal{L} sobre el subespacio \mathcal{K} consiste en encontrar $\tilde{x} \in \mathcal{K}$ / $\bar{r} = \bar{b} - \underline{A}\tilde{x} \perp \mathcal{L}$

Si se parte de una aproximación inicial \bar{x}_o , el problema consiste en:

$$\text{Encontrar } \tilde{x} \in \bar{x}_o + \mathcal{K}_m \quad / \quad \bar{r} \perp \mathcal{L} \rightarrow (\bar{b} - \underline{A}\tilde{x}, \bar{w}) = 0 \quad \forall \bar{w} \in \mathcal{L}$$

Considerando $\bar{r}_o = \bar{b} - \underline{A}\bar{x}_o$, el problema consiste en

$$\text{Hallar } \bar{\delta} \in \mathcal{K} \quad / \quad (\bar{r}_o - \underline{A}\bar{\delta}, \bar{w}) = 0, \quad \forall \bar{w} \in \mathcal{L}$$

$$\tilde{x} = \bar{x}_o + \bar{\delta}$$



Métodos de proyección ortogonal (II)

Si definimos los subespacios de \mathcal{K} y \mathcal{L} a través de sendas bases de vectores colocadas por columnas en dos matrices \underline{V} y \underline{W} respectivamente.

$$\underline{V} = [\bar{v}_1 : \bar{v}_2 : \cdots : \bar{v}_n], \quad \underline{W} = [\bar{w}_1 : \bar{w}_2 : \cdots : \bar{w}_n]$$

Entonces:

$$\tilde{x} = \bar{x}_o + \underline{V}\bar{y}$$

Si ahora imponemos la condición de ortogonalidad:

$$(\bar{r}_o - \underline{A}\bar{\delta}, \bar{w}) = 0$$

con $\bar{\delta} = \bar{x} - \bar{x}_o$ obtenemos

$$(\bar{r}_o - \underline{A}\underline{V}\bar{y}, \bar{w}) = 0,$$

que en forma matricial se puede escribir como:

$$\underline{W}^T \bar{r}_o - \underline{W}^T \underline{A} \underline{V} \bar{y} = \bar{0},$$

$$\underline{W}^T \underline{A} \underline{V} \bar{y} = \underline{W}^T \bar{r}_o$$



Métodos de proyección ortogonal (III)

Obtenemos un sistema de ecuaciones con matriz $\underline{\underline{W}}^T \underline{\underline{A}} \underline{\underline{V}}$. Podemos garantizar que esta matriz es regular si:

- ▶ 1) $\underline{\underline{A}}$ es definida positiva y $\mathcal{L} = \mathcal{K} \longrightarrow$ FOM y PCG
- ▶ 2) $\underline{\underline{A}}$ es regular y $\mathcal{L} = \underline{\underline{A}}\mathcal{K} \longrightarrow$ GMRES

Se puede demostrar para 1) que si $\underline{\underline{A}}$ es simétrica y definida positiva el método de proyección presenta propiedades de minimización del residuo (Gradientes Conjugados). (Véanse los apuntes del Método PCG)

Del mismo modo para 2); si $\underline{\underline{A}}$ es una matriz cualquiera, el método de proyección también presenta propiedades de minimización del residuo. De ahí el nombre del Método GMRES (Generalized Minimum RESidual). La demostración se puede encontrar en las págs. 135-138 Saad²⁰⁰³.



Métodos basados en subespacios de Krylov (I)

Introducción

Un método de proyección para resolver sistemas de ecuaciones proporciona una solución aproximada \bar{x}_m del subespacio $\bar{x}_o + \mathcal{K}_m$ imponiendo las condiciones de Petrov-Galerkin:

$$\bar{b} - \underline{A}\bar{x}_m \perp \mathcal{L}_m$$

Un método de proyección sobre subespacios de Krylov es un método que utiliza como espacio de aproximación el subespacio de Krylov:

$$\mathcal{K}_m(\underline{A}, \bar{r}_o) = \text{span} \left\{ \bar{r}_o, \underline{A}\bar{r}_o, \underline{A}^2\bar{r}_o, \dots, \underline{A}^{m-1}\bar{r}_o \right\}$$

siendo $\bar{r}_o = \bar{b} - \underline{A}\bar{x}_o$. Los diferentes métodos sobre subespacios de Krylov se eligen en función de \mathcal{L}_m y del tipo de preconditionamiento utilizado. La solución \bar{x} se aproximará como:

$$\underline{A}^{-1}\bar{b} \approx \bar{x}_m = \bar{x}_o + q_{m-1}(\underline{A})\bar{r}_o$$

siendo $q_{m-1}(\underline{A})$ un polinomio de grado $m - 1$.



Métodos basados en subespacios de Krylov (II)

Así, tenemos dos grandes familias de Métodos de Krylov:

$$\blacktriangleright \mathcal{L}_m = \mathcal{K}_m \text{ ó } \mathcal{L}_m = \underline{\underline{A}}\mathcal{K}_m$$

$$\blacktriangleright \mathcal{L}_m = \mathcal{K}_m(\underline{\underline{A}}^T, \bar{r}_o)$$

$$\mathcal{K}_m(\underline{\underline{A}}, \bar{v}) = \text{span} \left\{ \bar{v}, \underline{\underline{A}}\bar{v}, \underline{\underline{A}}^2\bar{v}, \dots, \underline{\underline{A}}^{m-1}\bar{v} \right\}$$

\mathcal{K}_m es el subespacio de todos los vectores \mathcal{R}^n que se pueden expresar como combinación lineal de un polinomio de grado $m - 1$



Métodos de obtención de bases ortonormales (I)

Método de Gram-Schmidt (GS)

Sea una base de vectores $\{\bar{x}_i\}_{i=0,m-1}$

Calcular $r_{11} = \|\bar{x}_1\|_2$. Si $r_{11} = 0 \rightarrow STOP$

$$\bar{q}_1 = \bar{x}_1 / r_{11}$$

do $j = 2, \dots, m$

do $i = 1, j - 1$

$$r_{ij} = (\bar{x}_j, \bar{q}_i)$$

enddo

$$\hat{q} = \bar{x}_j - \sum_{i=1}^{j-1} r_{ij} \bar{q}_i$$

$$r_{jj} = \|\hat{q}\|_2$$

Si $r_{jj} = 0 \rightarrow STOP$

$$\bar{q}_j = \hat{q} / r_{jj}$$

enddo



Métodos de obtención de bases ortonormales (II)

Si lo expresamos en forma matricial:

$$\underline{\underline{X}} = [\bar{x}_1 : \bar{x}_2 : \dots : \bar{x}_m]$$

$$\underline{\underline{Q}} = [\bar{q}_1 : \bar{q}_2 : \dots : \bar{q}_m]$$

$$\underline{\underline{R}} = \{r_{ij}\}$$

siendo $\underline{\underline{R}}$ una matriz triangular superior de tamaño $m \times m$.

Finalmente,

$$\underline{\underline{X}} = \underline{\underline{Q}}\underline{\underline{R}}$$

El Método de Gram-Schmidt equivale a una factorización $\underline{\underline{Q}}\underline{\underline{R}}$, con $\underline{\underline{Q}}$ ortonormal o unitaria.

Este planteamiento es matemáticamente exacto pero desde un punto de vista numérico propaga excesivamente los errores y no es recomendable.

Para evitar, en parte, estos efectos se propone una formulación alternativa: el Método de Gram-Schmidt modificado (MGS).



Métodos de obtención de bases ortonormales (III)

Método de Gram-Schmidt modificado

Sea una base de vectores $\{\bar{x}_i\}_{i=0,m-1}$

Calcular $r_{11} = \|\bar{x}_1\|_2$. Si $r_{11} = 0 \rightarrow STOP$

$$\bar{q}_1 = \bar{x}_1 / r_{11}$$

do $j = 2, \dots, m$

$$\hat{q} = \bar{x}_j$$

do $i = 1, j - 1$

$$r_{ij} = (\hat{q}, \bar{q}_i)$$

$$\hat{q} = \hat{q} - r_{ij} \bar{q}_i$$

enddo

$$r_{jj} = \|\hat{q}\|_2$$

Si $r_{jj} = 0 \rightarrow STOP$

$$\bar{q}_j = \hat{q} / r_{jj}$$

enddo

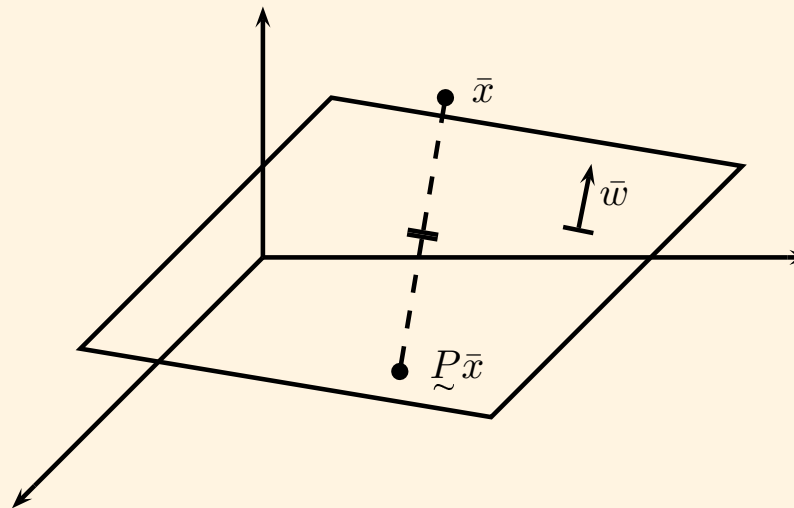


Métodos de obtención de bases ortonormales (IV)

Sin embargo, hay una técnica más fiable para generar bases de vectores ortonormales que propaga menos los errores que las técnicas propuestas anteriormente. Esta técnica se basa en la aplicación de Reflectores de Householder.

Ortogonalización de Householder

Una transformación de Householder es una transformación (\tilde{P}) que aplicada sobre un punto (\bar{x}) nos proporciona el punto simétrico ($\tilde{P}\bar{x}$) con respecto a un hiperplano dado definido por su vector normal \bar{w} .





Métodos de obtención de bases ortonormales (V)

Los reflectores son matrices de la forma:

$$\underline{P} = \underline{I} - 2\bar{w}\bar{w}^T$$

donde \bar{w} es el vector unitario normal al plano.

Así, $\underline{P}\bar{x}$ es un vector simétrico a \bar{x} con respecto al plano definido por \bar{w} .

Propiedad importante: Los reflectores son unitarios y ortonormales.

$$\underline{P}^T \underline{P} = (\underline{I} - 2\bar{w}\bar{w}^T)^T (\underline{I} - 2\bar{w}\bar{w}^T) = \underline{I} - 2\bar{w}\bar{w}^T - 2\bar{w}\bar{w}^T + 4\bar{w} \underbrace{\bar{w}^T \bar{w}}_1 \bar{w}^T = \underline{I}$$



Métodos de obtención de bases ortonormales (VI)

Elegiremos un vector \bar{w} de modo que:

$$\tilde{P}\bar{x} = \alpha\bar{e}_1$$

siendo α un escalar

$$(\tilde{I} - 2\bar{w}\bar{w}^T)\bar{x} = \alpha\bar{e}_1$$

$$2\bar{w} \underbrace{\bar{w}^T \bar{x}}_{\text{escalar}} = \bar{x} - \alpha\bar{e}_1$$

Por lo tanto,

$$\bar{w} = \pm \frac{\bar{x} - \alpha\bar{e}_1}{\|\bar{x} - \alpha\bar{e}_1\|_2}$$

dado que \bar{w} tiene que ser unitario.



Métodos de obtención de bases ortonormales (VII)

Imponemos ahora que se cumple $2(\bar{w}^T \bar{x})\bar{w} = \bar{x} - \alpha \bar{e}_1$

$$2 \frac{(\bar{x} - \alpha \bar{e}_1)^T \bar{x} (\bar{x} - \alpha \bar{e}_1)}{\|(\bar{x} - \alpha \bar{e}_1)\|_2^2} = (\bar{x} - \alpha \bar{e}_1)$$

$$2(\bar{x} - \alpha \bar{e}_1)^T \bar{x} = \|(\bar{x} - \alpha \bar{e}_1)\|_2^2$$

$$2\bar{x}^T \bar{x} - 2\alpha \xi_1 = \|\bar{x}\|_2^2 - 2\alpha \underbrace{\bar{x}^T \bar{e}_1}_{\xi_1} + \alpha^2$$

$$\|\bar{x}\|_2 = \pm \alpha$$

Habitualmente se toma:

$$\alpha = -\text{signo}(\xi_1) \|\bar{x}\|_2$$

Por lo tanto,

$$\bar{w} = \frac{\bar{x} + \text{signo}(\xi_1) \|\bar{x}\|_2 \bar{e}_1}{\|\bar{x} + \text{signo}(\xi_1) \|\bar{x}\|_2 \bar{e}_1\|_2}$$





Métodos de obtención de bases ortonormales (VIII)

En resumen, dada una matriz $n \times m$, podemos cambiar su primera columna y transformarla en un múltiplo de \bar{e}_1 premultiplicando por \underline{P}_1 .

$$\underline{X}_1 = \underline{P}_1 \underline{X}$$

siendo

$$\underline{X}_1 \bar{e}_1 = \alpha \bar{e}_1$$

Asumamos ahora que hemos aplicado esta técnica $k - 1$ veces. Entonces obtendríamos:

$$\underline{X}_{k-1} = \underline{P}_{k-1} \cdots \underline{P}_1 \underline{X} = \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & \cdots & x_{1,k} & \cdots & x_{1,m} \\ & x_{2,2} & x_{2,3} & \cdots & x_{2,k} & \cdots & x_{2,m} \\ & & x_{3,3} & \cdots & x_{3,k} & \cdots & x_{3,m} \\ & & & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & & x_{k,k} & \cdots & x_{k,m} \\ & & & & x_{k+1,k} & \cdots & x_{k+1,m} \\ & & & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & & x_{n,k} & \cdots & x_{n,m} \end{pmatrix}$$

donde esta matriz es triangular hasta la columna $k - 1$.



Métodos de obtención de bases ortonormales (IX)

Para conseguir que la estructura triangular avance hasta la columna k desde la columna $k - 1$ dejando los términos $(\bar{x}_k)_i$, $i = 1, k - 1$ intactos, elegimos $\underline{P}_k = \underline{I} - 2\bar{w}_k\bar{w}_k^T$ donde

$$\bar{w}_k = \frac{\bar{z}}{\|\bar{z}\|_2} \text{ con } z_i = \begin{cases} 0, & i < k \\ \beta + (\bar{x}_i)_i, & i = k \\ (\bar{x}_k)_i, & i > k \end{cases} \quad (1)$$

Nos falta obtener β como:

$$\beta = \text{signo}((\bar{x}_k)_k) \sqrt{\sum_{i=k}^n (\bar{x}_k)_i^2}$$



Métodos de obtención de bases ortonormales (X)

Comprobación

Paso 1): Las componentes $(\bar{x}_k)_i$ no deben alterarse para $i < k$ al aplicar la transformación.

$$((\underline{I} - 2\bar{w}_k\bar{w}_k^T)(\bar{x}_k))_i = (\bar{x}_k)_i \quad \text{para} \quad i < k$$

$$(\bar{x}_k)_i - (2\bar{w}_k \underbrace{(\bar{w}_k^T \bar{x}_k)}_{\text{escalar}})_i = (\bar{x}_k)_i$$

$$(\bar{x}_k)_i - 2\gamma(\bar{w}_k)_i = (\bar{x}_k)_i$$

$$(\bar{w}_k)_i = 0 \quad \forall i < k$$



Métodos de obtención de bases ortonormales (XI)

Paso 2): Las componentes $(\bar{x}_k)_i$ deben ser nulas para $i > k$ al aplicar la transformación.

$$((\underline{I} - 2\bar{w}_k\bar{w}_k^T)\bar{x}_k)_i = 0 \quad \text{para} \quad i > k$$

$$(\bar{x}_k)_i - 2(\bar{w}_k)_i\bar{w}_k^T\bar{x}_k = 0 \quad \text{para} \quad i > k$$

$$(\bar{x}_k)_i = 2(\bar{w}_k)_i \sum_{j=k}^n (\bar{w}_k)_j (\bar{x}_k)_j \quad \text{para} \quad i > k \quad (2)$$



Métodos de obtención de bases ortonormales (XII)

Paso 3): Además, el módulo de los vectores columna que componen la matriz \tilde{X} no debe cambiar tras la transformación de Householder. Por lo tanto, para la columna de estudio k se debe cumplir que:

$$\sum_{i=1}^n (\bar{x}_k)_i^2 = \underbrace{\sum_{i=1}^{k-1} (\bar{x}_k)_i^2}_{\text{términos no modificados}} + \underbrace{((\underline{I} - 2\bar{w}_k \bar{w}_k^T) \bar{x}_k)_k^2}_{\text{término de la diagonal}}$$

$$\sum_{i=k}^n (\bar{x}_k)_i^2 = \left((\bar{x}_k)_k - 2(\bar{w}_k)_k \sum_{j=k}^n (\bar{w}_k)_j^T (\bar{x}_k)_j \right)^2$$

Reemplazando ahora (2) en la ecuación anterior obtenemos que:

$$\sum_{i=k}^n (\bar{x}_k)_i^2 = \left((\bar{x}_k)_k - (\bar{w}_k)_k \frac{(\bar{x}_k)_i}{(\bar{w}_k)_i} \right)^2 \quad \text{para } i > k$$



Métodos de obtención de bases ortonormales (XIII)

Si ahora elegimos por simplicidad que $(\bar{w}_k)_i = (\bar{x}_k)_i$ para $i > k$, entonces:

$$\sum_{i=k}^n (\bar{x}_k)_i^2 = ((\bar{x}_k)_k - (\bar{w}_k)_k)^2$$

donde:

$$(\bar{w}_k)_k = \text{signo}((\bar{x}_k)_k) \sqrt{\sum_{i=k}^n (\bar{x}_k)_i^2 + (\bar{x}_k)_k}$$

El vector \bar{z} se obtiene de acuerdo con (1). Finalmente, se normaliza este vector \bar{z} para aplicar la transformación.

Es importante destacar que para aplicar la transformación de Householder no es necesario almacenar ni calcular las matrices \underline{P} .

$$\underline{P}_i \bar{v} = (\underline{I} - 2\bar{w}_i \bar{w}_i^T) \bar{v} = \bar{v} - \sigma \bar{w}_i \quad \text{con} \quad \sigma = \underbrace{2\bar{w}_i^T \bar{v}}_{\text{escalar}}$$



Métodos de obtención de bases ortonormales (XIV)

De este modo, la forma general de los reflectores de Householder sería:

$$\tilde{P}_i = \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ \hline & & & * & \dots & * \\ & & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & * & \dots & * \end{array} \right)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{i-1}$

Esta forma de las matrices tiene connotaciones muy importantes desde un punto de vista computacional.



Métodos de obtención de bases ortonormales (XV)

Por ejemplo, si se quiere aplicar la transformación sobre una matriz $\underline{\underline{X}}$.

$$\underline{\underline{X}}_m = \underline{\underline{P}}_m \underline{\underline{P}}_{m-1} \cdots \underline{\underline{P}}_1 \underline{\underline{X}} = \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & \cdots & x_{1,m} \\ & x_{2,2} & x_{2,3} & \cdots & x_{2,m} \\ & & x_{3,3} & \cdots & x_{3,m} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & x_{m,m} \end{pmatrix}$$

Por lo tanto, si $\underline{\underline{P}} = \underline{\underline{P}}_m \underline{\underline{P}}_{m-1} \cdots \underline{\underline{P}}_2 \underline{\underline{P}}_1$, $\underline{\underline{P}}^T$ contendrá las primeras m columnas de la matriz $\underline{\underline{Q}}$ de la factorización $\underline{\underline{Q}}\underline{\underline{R}}$, de modo que:

$$\underline{\underline{X}} = \underline{\underline{Q}}\underline{\underline{R}}$$

cuando $m = n$, donde las columnas de $\underline{\underline{R}}$ son las columnas de $\underline{\underline{X}}_m$ y corresponden a una matriz triangular superior.



Métodos de obtención de bases ortonormales (XVI)

Si $m < n$ como será habitual en la práctica:

$$\underline{\underline{P}} \underline{\underline{X}} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{Q}} \end{pmatrix}$$

donde $\underline{\underline{R}}$ es una matriz $m \times m$ triangular superior y $\underline{\underline{Q}}$ es una matriz nula de dimensión $(n - m) \times m$.

Dado que $\underline{\underline{P}}$ es unitaria (ortonormal):

$$\underline{\underline{X}} = \underline{\underline{P}}^T \begin{pmatrix} \underline{\underline{R}} \\ \underline{\underline{Q}} \end{pmatrix}$$

Sea ahora $\underline{\underline{E}}_m$ una matriz de dimensión $m \times m$ cuyas m primeras filas corresponden a una $\underline{\underline{I}}_{m \times m}$. Entonces:

$$\underline{\underline{X}} = \underline{\underline{P}}^T \underline{\underline{E}}_m \underline{\underline{R}}$$

donde $\underline{\underline{Q}} = \underline{\underline{P}}^T \underline{\underline{E}}_m$ representa las m primeras columnas de $\underline{\underline{P}}^T$ y satisface que:

$$\underline{\underline{Q}}^T \underline{\underline{Q}} = \underline{\underline{E}}_m^T \underline{\underline{P}} \underline{\underline{P}}^T \underline{\underline{E}}_m = \underline{\underline{I}}_{m \times m}$$



Métodos de obtención de bases ortonormales (XVII)

Algoritmo de ortogonalización:

Definimos $\underline{\underline{X}} = [\bar{x}_1 : \bar{x}_2 : \cdots : \bar{x}_m]$

do $k = 1, m$

Si ($k > 1$) calcular $\bar{r}_k = \underline{\underline{P}}_{k-1} \underline{\underline{P}}_{k-2} \cdots \underline{\underline{P}}_1 \bar{x}_k$

Calcular \bar{w}_k de acuerdo con (1)

Calcular el nuevo $\bar{r}_k = \underline{\underline{P}}_k \bar{r}_k$ donde $\underline{\underline{P}}_k = \underline{\underline{I}} - 2\bar{w}_k \bar{w}_k^T$

Calcular la columna $\bar{q}_k = \underline{\underline{P}}_1 \cdots \underline{\underline{P}}_k \bar{e}_k$

enddo

donde \bar{e}_k es la columna k -ésima de la matriz $\underline{\underline{I}}_{n \times n}$.

Con este método se consigue obtener una base de vectores ortonormales en el subespacio de dimensión m con una menor propagación de errores que para los Métodos de Gram-Schmidt.

Obsérvese que cuando el proceso se completa y $m = n$ se obtiene una factorización $\underline{\underline{Q}}\underline{\underline{R}}$ de la matriz original $\underline{\underline{X}}$.



Métodos de obtención de bases ortonormales (XVIII)

Con esta técnica podría aplicarse un método de resolución directo aprovechando que la matriz \tilde{Q} es ortonormal y que la matriz \tilde{R} es triangular.

Para ello habría que partir de la matriz \tilde{A} del sistema para obtener la base de vectores ortonormales.

Sin embargo, este método no se suele utilizar dado que la matriz \tilde{Q} es, en general, una matriz llena, en oposición a los esquemas de almacenamiento que suele permitir la matriz \tilde{A} para los problemas habituales en Ingeniería.



Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (I)

Ortogonalización de subespacios de Krylov: Algoritmos de Arnoldi

Se trata de un método de proyección ortogonal en subespacios de Krylov (\mathcal{K}_m) para matrices generales no necesariamente Hermíticas.

El algoritmo de Arnoldi está desarrollado para obtener una base ortonormal del subespacio de Krylov \mathcal{K}_m .

Originalmente, basaba su funcionamiento en el método de orthogonalización de Gram-Schmidt.



Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (II)

Algoritmo original de Arnoldi

Elegir \bar{v}_1 tal que $\|\bar{v}_1\|_2 = 1$

do $j = 1, m$

do $i = 1, j$

$$h_{i,j} = (\underline{A}\bar{v}_j, \bar{v}_i)$$

enddo

$$\bar{w}_j = \underline{A}\bar{v}_j - \sum_{i=1}^j h_{i,j} \bar{v}_i$$

$$h_{j+1,j} = \|\bar{w}_j\|_2$$

Si $(h_{j+1,j} = 0) \rightarrow STOP$

$$\bar{v}_{j+1} = \frac{\bar{w}_j}{h_{j+1,j}}$$

enddo

En cada paso el algoritmo genera un nuevo vector de la base del subespacio de Krylov premultiplicando el vector \bar{v} del paso anterior por la matriz \underline{A} y luego genera a partir del este con el algoritmo de Gram-Schmidt un vector ortonormal a los anteriores que pertenece al subespacio de Krylov.



Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (III)

Propiedades importantes del algoritmo:

1) Los vectores \bar{v}_i son ortonormales por construcción.

Si el algoritmo no se detiene precipitadamente y llega al paso m , los vectores forman una base ortonormal de \mathcal{K}_m .

En la práctica dado que los vectores no ortonormales del subespacio de Krylov que genera inicialmente el algoritmo forman una base siempre se alcanzará la dimensión m establecida (salvo errores de redondeo en las operaciones). (Demostración: pág 160 Saad²⁰⁰³)



Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (IV)

2) Sea \underline{V}_m una matriz de dimensión $n \times m$ cuyas columnas son los vectores obtenidos \bar{v}_i .

Sea $\bar{\underline{H}}_m$ la matriz de Hessenberg de dimensión $(m+1) \times m$ cuyas columnas vienen definidas por los coeficientes $h_{i,j}$.

Definamos ahora la matriz \underline{H}_m como la matriz de dimensión $m \times m$ obtenida como resultado de eliminar la última fila de $\bar{\underline{H}}_m$.

Entonces se cumple que:

$$\underline{A}\underline{V}_m = \underline{V}_m\underline{H}_m + \bar{w}_m\bar{e}_m^T,$$

o lo que es lo mismo:

$$\underline{A}\underline{V}_m = \underline{V}_{m+1}\bar{\underline{H}}_m.$$



Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (V)

Así, se cumple que:

$$\underline{V}_m^T A \underline{V}_m = \underline{V}_m^T \underline{V}_{m+1} \bar{H}_m$$

El producto $\underline{V}_m^T \underline{V}_{m+1}$ da como resultado una matriz de dimensión $m \times (m + 1)$ cuyas m primeras columnas corresponden a una matriz $\underline{I}_{m \times m}$ y cuya columna $m + 1$ es una columna de ceros debido a las propiedades de ortogonalidad.

- 3) Se puede demostrar que cuando el algoritmo se detiene se habrá obtenido el subespacio de Krylov de grado mínimo capaz de representar todos los vectores \bar{v}



Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (VI)

Algoritmo de Arnoldi modificado (Arnoldi-Modified-Gram-Schmidt)

Elegir \bar{v}_1 tal que $\|\bar{v}_1\|_2 = 1$

do $j = 1, m$

$$\bar{w}_j = A\bar{v}_j$$

do $i = 1, j$

$$h_{i,j} = (\bar{w}_j, \bar{v}_i)$$

$$\bar{w}_j = \bar{w}_j - h_{i,j}\bar{v}_i$$

enddo

$$h_{j+1,j} = \|\bar{w}_j\|_2$$

Si $(h_{j+1,j} = 0) \rightarrow STOP$

$$\bar{v}_{j+1} = \frac{\bar{w}_j}{h_{j+1,j}}$$

enddo

Este algoritmo cumple exactamente las mismas propiedades que el algoritmo original de Arnoldi. Ambos algoritmos son equivalentes desde un punto de vista analítico.





Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (VII)

Algoritmo de orthogonalización de Householder-Arnoldi

La base del subespacio de partida se genera automáticamente y a medida que se va necesitando a partir de un vector inicial.

Seleccionar un vector \bar{v} no nulo

$$\bar{z}_1 = v$$

do $j = 1, m + 1$

Definir \bar{w}_j tal que $(\bar{w}_j)_i = 0 \quad i = 1, \dots, j - 1$

Aplicar el reflector de Householder de modo que $(\underline{P}_j \bar{z}_j)_i = 0 \quad j + 1, \dots, n$

donde $\underline{P}_j = \underline{I} - 2\bar{w}_j\bar{w}_j^T$

$$\bar{h}_{j-1} = \underline{P}_j \bar{z}_j$$

$$\bar{v}_j = \underline{P}_1 \underline{P}_2 \dots \underline{P}_j \bar{e}_j$$

Si $(j \leq m)$ calcular $\bar{z}_{j+1} = \underline{P}_j \underline{P}_{j-1} \dots \underline{P}_1 A \bar{v}_j$

enddo





Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (VIII)

Las matrices \underline{P}_j no se calculan de forma explícita. Para calcular h_{j-1} se colocan ceros en \bar{z}_i con $i = j + 1, \dots, n$ y se cambia la componente j de acuerdo con el algoritmo de orthogonalización. Las demás componentes no se cambian (tal y como se impone al indicar $(\bar{w}_j)_i = 0 \quad i = 1, \dots, j - 1$).

La matriz $[\bar{h}_0 : \bar{h}_1 : \dots : \bar{h}_m]$ tiene estructura triangular superior. Entonces este algoritmo realiza la factorización $\underline{Q}\underline{R}$ de la matriz de la base del subespacio de Krylov $[\bar{v}_1, \underline{A}\bar{v}_1, \underline{A}\bar{v}_2, \dots, \underline{A}\bar{v}_m]$.

Definimos ahora:

$$\underline{Q}_j = \underline{P}_j \underline{P}_{j-1} \dots \underline{P}_1$$

Por lo tanto, a partir de la definición del algoritmo se establece que:

$$\underline{Q}_j \underline{A}\bar{v}_j = \bar{z}_{j+1}$$



Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (IX)

Una vez realizado un nuevo paso de orthogonalización se aplica \underline{P}_{j+1} sobre \bar{z}_{j+1} y se obtiene:

$$\bar{h}_j = \underline{P}_{j+1} \bar{z}_{j+1} = \underline{P}_{j+1} \underline{Q}_j A \bar{v}_j = \underline{Q}_{j+1} A \bar{v}_j$$

Obsérvese en este punto que las componentes $j+2, \dots, n$ de \bar{h}_j son nulas por construcción del método. Entonces:

$$\underline{P}_i \bar{h}_j = \bar{h}_j \quad \forall i \geq j+2$$

$$\underline{P}_i = \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ \hline & & & * & \dots & * \\ & & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & * & \dots & * \end{array} \right), \quad \bar{h}_j = \begin{pmatrix} * \\ \vdots \\ * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \rightarrow 1 \\ \\ \rightarrow j+1 \\ \rightarrow j+2 \\ \\ \rightarrow n \end{matrix}$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{i-1}$



Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (X)

Entonces:

$$\bar{h}_j = \bar{P}_m \bar{P}_{m-1} \dots \bar{P}_{j+2} \bar{h}_j = \underline{Q}_m \underline{A} \bar{v}_j \quad j = 1, \dots, m$$

Y esto nos conduce a la factorización:

$$\underline{Q}_m [\bar{v}, \underline{A} \bar{v}_1, \underline{A} \bar{v}_2, \dots, \underline{A} \bar{v}_m] = [\bar{h}_0, \bar{h}_1, \dots, \bar{h}_m]$$

donde $[\bar{h}_0, \bar{h}_1, \dots, \bar{h}_m]$ es una matriz triangular superior de dimensión $n \times (m+1)$ y \underline{Q}_m es una matriz unitaria (ortonormal).

Definamos ahora \bar{H}_m como la matriz de dimensión $(m+1) \times m$ obtenida como resultado de seleccionar las $m+1$ primeras filas de la matriz de dimensión $n \times m$ $[\bar{h}_1, \dots, \bar{h}_m]$.



Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (XI)

Dado que la matriz \underline{Q}_{j+1} es unitaria (ortonormal):

$$\underline{A}\bar{v}_j = \underline{Q}_{j+1} \underbrace{\sum_{i=1}^{j+1} h_{i,j} \bar{e}_i}_{\text{columna } j \text{ de } \underline{\bar{H}}_m}$$

siendo \bar{e}_i la columna i -ésima de la matriz identidad. Entonces operando se obtiene que:

$$\underline{A}\bar{v}_j = \sum_{i=1}^{j+1} h_{i,j} \underline{Q}_{j+1} \bar{e}_i.$$



Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (XII)

Dado que $\underline{P}_k \bar{e}_i = \bar{e}_i$ para $i < k$

$$\underline{P}_k = \left(\begin{array}{c|ccc} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \\ \hline & & & * \dots * \\ & & & \vdots \ddots \vdots \\ & & & * \dots * \end{array} \right), \quad \bar{e}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow i$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{k-1}$

se puede deducir que:

$$\underline{Q}_{j+1}^T \bar{e}_i = \underline{P}_1 \cdots \underline{P}_{j+1} \bar{e}_i = \underline{P}_1 \cdots \underline{P}_i \bar{e}_i = \bar{v}_i \quad \forall i \leq j+1.$$

Entonces:

$$\underline{A} \bar{v}_j = \sum_{i=1}^{j+1} h_{i,j} \bar{v}_i \quad j = 1, \dots, m,$$

que en forma matricial se puede escribir como:

$$\underline{A} \underline{V}_m = \underline{V}_{m+1} \bar{H}_m.$$



Ortogonalización de subespacios de Krylov: Arnoldi (XIII)

Se obtiene la misma relación que para el planteamiento de Gram-Schmidt.

$$\left(\begin{array}{l} \text{NOTA: Téngase en cuenta que los productos de las matrices } \tilde{P}_i \\ \text{por un vector se realizan sin ensamblar la matriz:} \\ (\tilde{I} - 2\bar{w}_i\bar{w}_i^T)\bar{v} = \bar{v} - \sigma\bar{w}_i \quad \text{con} \quad \sigma = \underbrace{2\bar{w}_i^T\bar{v}}_{\text{escalar}} \end{array} \right)$$

Coste Computacional de obtener las bases ortonormales

	Gram-Schmidt	M. Gram-Schmidt	HouseHolder
Complejidad computacional	$T(2m^2n)$	$T(2m^2n)$	$T(4m^2n - \frac{4}{3}m^3)$
Almacenamiento	$(m+1)n$	$(m+1)n$	$(m+1)n - \frac{1}{2}m^2$



Método GMRES (I)

Se trata de un método de proyección basado en tomar como $\mathcal{K} = \mathcal{K}_m$ y $\mathcal{L} = \underline{A}\mathcal{K}_m$ siendo \mathcal{K}_m el subespacio de Krylov a partir de un vector $\bar{v}_1 = \bar{r}_0 / \|\bar{r}_0\|_2$.

Se puede demostrar que este planteamiento permite obtener la aproximación a la solución del sistema de ecuaciones que minimiza la norma del residuo perteneciente al subespacio de Krylov $\bar{x}_0 + \mathcal{K}_m$

Planteamos dos formas alternativas de obtener el algoritmo:

- 1) Otra forma alternativa de plantear el problema consiste en aplicar las técnicas propuestas en los métodos de proyección teniendo en cuenta que:

$$\underline{W}_m = \underline{A}\underline{V}_m,$$

es decir, aplicamos técnicas de ortogonalización con respecto al subespacio $\mathcal{L}_m = \underline{A}\mathcal{K}_m$ en las técnicas de proyección.



Método GMRES (II)

2) Cualquier vector de $\bar{x}_0 + \mathcal{K}_m$ puede escribirse como:

$$\bar{x} = \bar{x}_0 + \underline{V}_m \bar{y}$$

siendo \underline{V}_m una base ortonormal de vectores del espacio de Krylov e \bar{y} un vector de coeficientes de dimensión m que permite expresar la aproximación a la solución como combinación lineal de los vectores de la base.

Definamos ahora:

$$J(\bar{y}) = \|\bar{b} - \underline{A}\bar{x}\|_2 = \|\bar{b} - \underline{A}(\bar{x}_0 + \underline{V}_m \bar{y})\|_2$$

como la norma del residuo. Así se establece el residuo como:

$$\bar{b} - \underline{A}\bar{x} = \bar{r}_0 - \underbrace{\underline{A}\underline{V}_m}_{\text{Arnoldi}} \bar{y} = \beta \bar{v}_1 - \underline{V}_{m+1} \bar{H}_m \bar{y} = \underline{V}_{m+1} (\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m) \bar{y},$$

siendo $\beta = \bar{e}_1^T \bar{h}_0$.





Método GMRES (III)

Dado que \underline{V}_{m+1} es ortonormal se cumple que:

$$J(\bar{y}) = \|\bar{b} - \underline{A}(\bar{x}_0 + \underline{V}_m \bar{y})\|_2 = \|\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m \bar{y}\|_2$$

$$\left(\begin{array}{l} \|\bar{b} - \underline{A}(\bar{x}_0 + \underline{V}_m \bar{y})\|_2^2 = \|\underline{V}_{m+1}(\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m \bar{y})\|_2^2, \\ \|\underline{V}_{m+1}(\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m \bar{y})\|_2^2 = (\underline{V}_{m+1}(\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m \bar{y}))^T \underline{V}_{m+1}(\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m \bar{y}) = \\ = (\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m \bar{y})^T \underbrace{\underline{V}_{m+1}^T \underline{V}_{m+1}}_{\underline{I}} (\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m \bar{y}) = \|\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m \bar{y}\|_2^2 \end{array} \right)$$

La aproximación GMRES corresponde al único $\bar{x}_m \in \bar{x}_0 + \mathcal{K}_m$ que minimiza $J(\bar{y})$. Por lo tanto,

$$\bar{x}_m = \bar{x}_0 + \underline{V}_m \bar{y}_m \quad \text{tal que} \quad \bar{y}_m \quad \text{minimiza} \quad J(\bar{y})$$

es la aproximación GMRES a la solución del sistema de ecuaciones para un subespacio de Krylov de dimensión m .



Método GMRES (IV)

Algoritmo GMRES con Gram-Schmidt Modificado (MGS)

$$\bar{r}_0 = \bar{b} - \underline{A}\bar{x}_0; \beta = \|\bar{r}_0\|_2; \bar{v}_1 = \bar{r}_0/\beta$$

do $j = 1, m$

$$\bar{w}_j = \underline{A}\bar{v}_j$$

do $i = 1, j$

$$h_{i,j} = (\bar{w}_j, \bar{v}_i)$$

$$\bar{w}_j = \bar{w}_j - h_{i,j}\bar{v}_i$$

enddo

$$h_{j+1,j} = \|\bar{w}_j\|_2. \quad \text{Si}(h_{j+1,j} = 0) \rightarrow \text{STOP (Ya tenemos la base)}$$

$$\bar{v}_{j+1} = \frac{\bar{w}_j}{h_{j+1,j}}$$

enddo

Una vez conocida la base de vectores \bar{v}_j y \bar{h}_j

Definir la matriz de Hessember $\underline{\bar{H}}_m(m+1) \times m$

Minimizar $\|\beta\bar{e}_1 - \underline{\bar{H}}_m\bar{y}\|_2$ y obtener \bar{y}_m

Calcular $\bar{x}_m = \bar{x}_0 + \underline{V}_m\bar{y}_m$



Método GMRES (V)

Algoritmo GMRES con ortogonalización Householder. Antecedentes

Sea $\bar{y}_m = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_m)^T$. Entonces

$$\bar{x}_m = \bar{x}_0 + \eta_1 \bar{v}_1 + \eta_2 \bar{v}_2 + \dots + \eta_m \bar{v}_m$$

donde

$$\bar{v}_j = \underline{P}_1 \underline{P}_2 \cdots \underline{P}_j \bar{e}_j.$$

Desarrollando la aproximación de la solución \bar{x}_m se puede expresar como:

$$\bar{x}_m = \bar{x}_0 + \eta_1 \underline{P}_1 \bar{e}_1 + \eta_2 \underline{P}_1 \underline{P}_2 \bar{e}_2 + \dots + \eta_m \underline{P}_1 \underline{P}_2 \cdots \underline{P}_m \bar{e}_m$$

$$\bar{x}_m = \bar{x}_0 + \underline{P}_1 \left(\eta_1 \bar{e}_1 + \underline{P}_2 \left(\eta_2 \bar{e}_2 + \dots + \underline{P}_{m-1} (\eta_{m-1} \bar{e}_{m-1} + \underline{P}_m \eta_m \bar{e}_m) \right) \right).$$

De este modo, el cálculo de la solución aproximada se puede obtener como:

$$\begin{aligned} \bar{z} &= \bar{0} \\ \bar{z} &= \underline{P}_j (\eta_j \bar{e}_j + \bar{z}), \quad j = m, m-1, \dots, 1 \\ \bar{x}_m &= \bar{x}_0 + \bar{z} \end{aligned}$$



Método GMRES (VI)

Algoritmo GMRES con ortogonalización de Householder

$$\bar{r}_0 = \bar{b} - \underline{A}\bar{x}_0; \quad \bar{z} = \bar{r}_0$$

do $j = 1, m + 1$

Definir \bar{w}_j tal que $(\bar{w}_j)_i = 0 \quad i = 1, \dots, j - 1$

Aplicar el reflector de Householder de modo que $(\underline{P}_j \bar{z})_i = 0 \quad j + 1, \dots, n$

donde $\underline{P}_j = \underline{I} - 2\bar{w}_j\bar{w}_j^T$

$$\bar{h}_{j-1} = \underline{P}_j \bar{z}. \quad \text{Si } j = 1 \rightarrow \beta = \bar{e}_1^T \bar{h}_0$$

$$\bar{v} = \underline{P}_1 \underline{P}_2 \dots \underline{P}_j \bar{e}_j$$

Si $(j \leq m)$ calcular $\bar{z} = \underline{P}_j \underline{P}_{j-1} \dots \underline{P}_1 \underline{A} \bar{v}$

enddo

Definir la matriz de Hessember \underline{H}_m a partir de $[\bar{h}_1, \bar{h}_2, \dots, \bar{h}_m]$

Calcular \bar{y}_m que minimiza $\|\beta \bar{e}_1 - \underline{H}_m \bar{y}\|_2$

Sea $\bar{y}_m = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_m)^T$

$$\bar{z} = \bar{0}$$

do $j = m, 1, -1$

$$\bar{z} = \underline{P}_j (\eta_j \bar{e}_j + \bar{z})$$

enddo

Calcular $\bar{x}_m = \bar{x}_0 + \bar{z}$





Aspectos relevantes a estudiar del algoritmo GMRES

1. Minimización del residuo
2. Actualización de \bar{x}_m y de la norma del residuo en cada iteración

1) Minimización:

El problema de minimización consiste en minimizar la norma de un vector de dimensión $m + 1$ obtenido como:

$$\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m \bar{y}$$

La forma más habitual de obtener este mínimo consiste en aplicar transformaciones matriciales al vector anterior que no modifiquen la norma del resultado y que transformen la matriz de Hessemberg en una matriz triangular superior. Para ello aplicamos rotaciones matriciales en un plano.



Método GMRES (VIII)

La matriz de cada rotación Ω_i se define de modo que se eliminan los términos no nulos que están por debajo de la diagonal de la matriz \tilde{H}_m .

$$\Omega_i = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & C_i & S_i & \\ & & & -S_i & C_i & \\ & & & & & 1 & \ddots & \\ & & & & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} \rightarrow i \\ \rightarrow i+1 \end{matrix}$$

Por lo tanto, para eliminar el término $h_{i+1,i}$ premultiplicamos por Ω_i por la izquierda. Para que la matriz sea ortonormal y se elimine el término $h_{i+1,i}$ debe cumplirse que:

$$C_i = \frac{h_{i,i}^{(*)}}{\sqrt{h_{i,i}^{2(*)} + h_{i+1,i}^2}}, \quad S_i = \frac{h_{i+1,i}}{\sqrt{h_{i,i}^{2(*)} + h_{i+1,i}^2}}$$

donde el $(*)$ indica que ese término es el resultado de aplicar una rotación anterior correspondiente a la eliminación de una fila anterior (si existe).



Método GMRES (IX)

Si llamamos $T_m = \Omega_m \Omega_{m-1} \dots \Omega_1$:

$$\min \|\beta \bar{e}_1 - \bar{H}_m \bar{y}\|_2 = \min \|\bar{g}_m - \bar{R}_m \bar{y}\|_2$$

siendo

$$\bar{g}_m = T_m \beta \bar{e}_1,$$

$$\bar{R}_m = T_m \bar{H}_m,$$

donde la matriz \bar{R}_m de dimensiones $(m+1) \times m$ es triangular superior y el vector \bar{g}_m es un vector de dimension $m+1$.

Entonces, una vez obtenida la matriz triangular, el vector \bar{y}_m que minimiza la norma del residuo es el resultado de resolver el sistema triangular superior:

$$\bar{R}_m \bar{y}_m = \bar{g}_m,$$

siendo \bar{R}_m la matriz de dimensión $m \times m$ obtenida como resultado de eliminar la fila $m+1$ de la matriz \bar{R}_m y el vector \bar{g}_m se obtiene como resultado de eliminar la componente $m+1$ del vector \bar{g}_m .



Método GMRES (X)

Por construcción del método, el residuo se puede obtener como la componente $m + 1$ de $\bar{\bar{g}}_m$ tras realizar la triangularización. Por lo tanto, en cada iteración (cada aumento de la dimensión del subespacio de Krylov utilizado) se puede obtener el vector residuo como:

$$\bar{b} - \underline{A}\bar{x}_m = \underline{V}_{m+1}(\beta\bar{e}_1 - \bar{H}_m\bar{y}_m) = \underline{V}_{m+1}\underline{T}_m^T(\gamma_{m+1}\bar{e}_{m+1}),$$

si bien el valor realmente importante es la norma de ese residuo, que se obtiene como:

$$\|\bar{b} - \underline{A}\bar{x}_m\|_2 = |\gamma_{m+1}|$$

Por lo tanto, una vez que se han aplicado triangularizaciones al residuo de modo que se triangulariza la matriz \bar{H}_m hasta la fila m , se pueden calcular los coeficientes de la triangularización para la fila $m + 1$.



Método GMRES (XI)

Así, en particular se puede calcular:

$$S_m = \frac{h_{m+1,m}}{\sqrt{h_{m,m}^{2(*)} + h_{m+1,m}^2}}$$

donde el $(*)$ indica que ese término ha sido modificado en la rotación anterior.

Si se realizan las operaciones de rotación indicadas se puede obtener una ley de recurrencia que permite obtener la norma del residuo como:

$$\gamma_{m+1} = -S_m \gamma_m \longrightarrow \|\bar{r}_{m+1}\|_2 = -S_m \|\bar{r}_m\|_2.$$

Por lo tanto, partiendo de $m = 0$ y del residuo \bar{r}_0 se puede calcular la norma del residuo obtenido como resultado de aplicar el algoritmo GMRES ampliando en una unidad la dimensión del subespacio de Krylov utilizado sin necesidad de realizar el cálculo de $\tilde{A}\bar{x}_m$.

Además, cuando $S_m = 0$ se alcanza la solución exacta del problema (si no tenemos en cuenta la propagación de errores en las operaciones).



Método GMRES (XII)

Variantes del Método GMRES

- ▶ GMRES truncado: Sólo se ortogonalizan los nuevos vectores con respecto a un conjunto de vectores anteriores. No se ortogonaliza con respecto a todos los vectores del subespacio de Krylov
- ▶ GMRES (m): Se reinicia el cálculo cada m pasos con la última aproximación a la solución obtenida



Método GMRES (XIII)

GMRES(m)

- 1) Calcular $\bar{r}_0 = \bar{b} - \tilde{A}\bar{x}_0$, $\beta = \|\bar{r}_0\|_2$, $\bar{v}_1 = \bar{r}_0/\beta$
Generar la base de Arnoldi y la matriz \tilde{V}_m
Generar la matriz de Hessemberg \tilde{H}_m a partir de \bar{v}_1
Calcular \bar{y}_m que minimiza $\|\beta\bar{e}_1 - \tilde{H}_m\bar{y}_m\|_2$
Calcular $\bar{x}_m = \bar{x}_0 + \tilde{V}_m\bar{y}_m$
Si hay convergencia $\rightarrow STOP$
De lo contrario, $\bar{x}_0 = \bar{x}_m$ y *GOTO* 1)

Este algoritmo tiene un coste computacional menor que el algoritmo GMRES original pero la convergencia a la solución no está garantizada salvo que la matriz \tilde{A} sea definida positiva.

En general, este método sólo garantiza que:

$$\|\bar{r}_{m+1}\|_2 \leq \|\bar{r}_m\|_2.$$



Método GMRES con preconditionamiento (I)

Precondicionamiento por la izquierda

Sea \underline{L} la matriz de preconditionamiento por la izquierda. Entonces:

$$\underline{A}\bar{x} = \bar{b} \rightsquigarrow \underline{L}^{-1}\underline{A}\bar{x} = \underline{L}^{-1}\bar{b}$$

El nuevo sistema con preconditionamiento presenta la misma solución \bar{x} .
Sólo cambia el cálculo del residuo que se obtiene como:

$$\hat{r} = \underline{L}^{-1}\bar{b} - \underline{L}^{-1}\underline{A}\bar{x}$$

$$\hat{r} = \underline{L}^{-1}\bar{r}$$



Método GMRES con preconditionamiento (II)

Algoritmo GMRES con preconditionamiento (M. Gram-Schmidt)

$$\bar{r}_0 = \underline{L}^{-1} (\bar{b} - \underline{A}\bar{x}_0) ; \beta = \|\bar{r}_0\|_2 ; \bar{v}_1 = \bar{r}_0 / \beta$$

do $j = 1, m$

$$\bar{w}_j = \underline{L}^{-1} (\underline{A}\bar{v}_j)$$

do $i = 1, j$

$$h_{i,j} = (\bar{w}_j, \bar{v}_i)$$

$$\bar{w}_j = \bar{w}_j - h_{i,j}\bar{v}_i$$

enddo

$$h_{j+1,j} = \|\bar{w}_j\|_2. \quad \text{Si } (h_{j+1,j} = 0) \rightarrow STOP \text{ (Ya tenemos la base)}$$

$$\bar{v}_{j+1} = \frac{\bar{w}_j}{h_{j+1,j}}$$

enddo

Una vez conocida la base de vectores \bar{v}_j y \bar{h}_j

Definir $\underline{V}_m = [\bar{v}_1, \dots, \bar{v}_m]$ y $\underline{\bar{H}}_m = \{h_{i,j}\}_{\substack{j=1,m \\ i=1,j+1}}$

Minimizar $\|\beta \bar{e}_1 - \underline{\bar{H}}_m \bar{y}\|_2$ y obtener \bar{y}_m

Calcular $\bar{x}_m = \bar{x}_0 + \underline{V}_m \bar{y}_m$



Método GMRES con preconditionamiento (III)

Todos los residuos se calculan sobre el espacio preconditionado. Si se quieren obtener sobre el espacio original es necesario calcular:

$$\bar{r}_m = \underline{L} \hat{r}_m$$

siendo \hat{r}_m el vector residuo del problema preconditionado.



Método GMRES con preconditionamiento (IV)

Algoritmo GMRES con preconditionamiento (Householder).

$$\bar{r}_0 = \underline{L}^{-1}(\bar{b} - \underline{A}\bar{x}_0); \quad \bar{z} = \bar{r}_0$$

do $j = 1, m + 1$

Definir \bar{w}_j tal que $(\bar{w}_j)_i = 0 \quad i = 1, \dots, j - 1$

Aplicar el reflector de Householder de modo que $(\underline{P}_j \bar{z})_i = 0 \quad j + 1, \dots, n$

donde $\underline{P}_j = \underline{I} - 2\bar{w}_j\bar{w}_j^T$

$$\bar{h}_{j-1} = \underline{P}_j \bar{z}. \quad \text{Si } j = 1 \rightarrow \beta = \bar{e}_1^T \bar{h}_0$$

$$\bar{v} = \underline{P}_1 \underline{P}_2 \dots \underline{P}_j \bar{e}_j$$

$$\text{Si } (j \leq m) \text{ calcular } \bar{z} = \underline{P}_j \underline{P}_{j-1} \dots \underline{P}_1 \underline{L}^{-1} \underline{A} \bar{v}$$

enddo

Definir la matriz de Hessemberg $\underline{\bar{H}}_m$ a partir de $[\bar{h}_1, \bar{h}_2, \dots, \bar{h}_m]$

Calcular \bar{y}_m que minimiza $\|\beta \bar{e}_1 - \underline{\bar{H}}_m \bar{y}\|_2$

Sea $\bar{y}_m = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_m)^T$

$$\bar{z} = \bar{0}$$

do $j = m, 1, -1$

$$\bar{z} = \underline{P}_j(\eta_j \bar{e}_j + \bar{z})$$

enddo

$$\text{Calcular } \bar{x}_m = \bar{x}_0 + \bar{z}$$





Método GMRES con preconditionamiento (V)

Precondicionamiento por la derecha

$$\underline{\underline{A}}\underline{\underline{U}}^{-1}\underbrace{\underline{\underline{U}}\bar{x}}_{\bar{u}} = \bar{b} \quad \longrightarrow \quad \underline{\underline{A}}\underline{\underline{U}}^{-1}\bar{u} = \bar{b}$$

En la práctica nunca trabajaremos con la nueva solución \bar{u} salvo en el primer paso en el que calculamos el residuo como

$$\bar{b} - \underline{\underline{A}}\bar{x}_0 = \bar{b} - \underline{\underline{A}}\underline{\underline{U}}^{-1}\bar{u}_0$$

A partir de este primer cálculo no se trabajará ya con las variables \bar{u} . La solución aproximada para el problema preconditionado se obtendrá como:

$$\bar{u}_m = \bar{u}_0 + \sum_{i=1}^m \bar{v}_i \eta_i$$

siendo $\bar{u}_0 = \underline{\underline{U}}\bar{x}_0$.



Método GMRES con preconditionamiento (VI)

Si ahora queremos obtener la aproximación de la solución del sistema original sin preconditionar será necesario premultiplicar la ecuación anterior por \underline{U}^{-1} de modo que:

$$\bar{x}_m = \bar{x}_0 + \underline{U}^{-1} \left[\sum_{i=1}^m \eta_i \bar{v}_i \right].$$

Entonces, es necesario deshacer las operaciones de preconditionamiento al final del proceso.

El residuo del problema preconditionado coincide con el residuo del problema original.

Ésta es una diferencia importante con respecto al preconditionamiento por la izquierda.



Método GMRES con preconditionamiento (VII)

Algoritmo GMRES con preconditionamiento por la derecha (Gram-Schmidt).

$$\bar{r}_0 = \bar{b} - \underline{A}\bar{x}_0; \beta = \|\bar{r}_0\|_2; \bar{v}_1 = \bar{r}_0/\beta$$

do $j = 1, m$

$$\bar{w}_j = \underline{A}\underline{U}^{-1}\bar{v}_j$$

do $i = 1, j$

$$h_{i,j} = (\bar{w}_j, \bar{v}_i)$$

$$\bar{w}_j = \bar{w}_j - h_{i,j}\bar{v}_i$$

enddo

$$h_{j+1,j} = \|\bar{w}_j\|_2. \quad \text{Si } (h_{j+1,j} = 0) \rightarrow STOP \text{ (Ya tenemos la base)}$$

$$\bar{v}_{j+1} = \frac{\bar{w}_j}{h_{j+1,j}}$$

enddo

Una vez conocida la base de vectores \bar{v}_j y \bar{h}_j

Definir $\underline{V}_m = [\bar{v}_1, \dots, \bar{v}_m]$ y $\underline{\bar{H}}_m = \{h_{i,j}\}_{\substack{j=1, m \\ i=1, j+1}}$

Minimizar $\|\beta\bar{e}_1 - \underline{\bar{H}}_m\bar{y}\|_2$ y obtener \bar{y}_m

Calcular $\bar{x}_m = \bar{x}_0 + \underline{U}^{-1}\underline{V}_m\bar{y}_m$





Método GMRES con preconditionamiento (VIII)

Algoritmo GMRES con preconditionamiento por la derecha (Householder).

$$\bar{r}_0 = \bar{b} - \underline{A}\bar{x}_0; \bar{z} = \bar{r}_0$$

do $j = 1, m + 1$

Definir \bar{w}_j tal que $(\bar{w}_j)_i = 0 \quad i = 1, \dots, j - 1$

Aplicar el reflector de Householder de modo que $(\underline{P}_j \bar{z})_i = 0 \quad j + 1, \dots, n$

donde $\underline{P}_j = \underline{I} - 2\bar{w}_j \bar{w}_j^T$

$$\bar{h}_{j-1} = \underline{P}_j \bar{z}. \quad \text{Si } j = 1 \rightarrow \beta = \bar{e}_1^T \bar{h}_0$$

$$\bar{v} = \underline{P}_1 \underline{P}_2 \dots \underline{P}_j \bar{e}_j$$

$$\text{Si } (j \leq m) \text{ calcular } \bar{z} = \underline{P}_j \underline{P}_{j-1} \dots \underline{P}_1 \underline{A} \underline{U}^{-1} \bar{v}$$

enddo

Definir la matriz de Hessember $\underline{\bar{H}}_m$ a partir de $[\bar{h}_1, \bar{h}_2, \dots, \bar{h}_m]$

Calcular \bar{y}_m que minimiza $\|\beta \bar{e}_1 - \underline{\bar{H}}_m \bar{y}\|_2$

Sea $\bar{y}_m = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_m)^T$

$$\bar{z} = \bar{0}$$

do $j = m, 1, -1$

$$\bar{z} = \underline{P}_j (\eta_j \bar{e}_j + \bar{z})$$

enddo

$$\text{Calcular } \bar{x}_m = \bar{x}_0 + \underline{U}^{-1} \bar{z}$$





Método GMRES con preconditionamiento (IX)

Precondicionamiento por la izquierda y por la derecha

En este caso la matriz de preconditionamiento se descompone como el producto de dos matrices como:

$$\underline{P} = \underline{L}\underline{U}$$

Entonces el sistema quedará ahora como:

$$\underline{L}^{-1}\underline{A}\underline{U}^{-1}\underbrace{\underline{U}\bar{x}}_{\bar{u}} = \underline{L}^{-1}\bar{b}$$

En este caso, el algoritmo se obtendrá como la aplicación de las dos técnicas de preconditionamiento anteriores conjuntamente.



Método GMRES: Implementación práctica (I)

Implementación práctica. Pasos a realizar:

1. Calcular el vector residuo y su norma a partir de la aproximación inicial.
2. Calcular el vector de proyección de Householder \bar{w} cuyos terminos no nulos se almacenan por columnas en la parte inferior de una matriz \underline{H} de dimension $(n + 1) * (m + 1)$.
3. Definir la columna de la matriz de Hessemberg a partir del residuo y del vector \bar{w} . Sólo es necesario calcular la componente de la diagonal. Los términos no nulos se almacenan en la parte superior de la matriz \underline{H} .
4. Si $j = 1$ (primera iteración), definir el vector \bar{y} inicial como $\beta \bar{e}_1$ a partir de la matriz \underline{H} .
5. Si $j > 1$ (siguientes iteraciones), aplicar triangularización de la nueva columna de la matriz \underline{H} y del vector \bar{y} . (Téngase en cuenta que es necesario aplicar las transformaciones de triangularización de todas las columnas anteriores a esta nueva columna de la matriz \underline{H} antes de aplicar la triangularización de la columna actual).
6. El último término calculado en el vector \bar{y} (en valor absoluto) indica la norma del residuo para el subespacio de Krylov utilizado y sirve para establecer la convergencia del método. Si hay convergencia pasamos al paso 9.





Método GMRES: Implementación práctica (I)

7. Calcular \bar{v} aplicando recurrentemente los proyectores de Householder a partir de los vectores \bar{w} almacenados en la parte inferior de la matriz \underline{H}
8. Calcular el nuevo vector \bar{z} con el que comenzar de nuevo todo el proceso y volver al paso 2 (lo que equivale a aumentar el tamaño del subespacio de Krylov utilizado).
9. Resolver el sistema de ecuaciones triangular superior almacenado en la parte superior de la matriz \underline{H} cuyo vector de términos independientes es el vector \bar{y} .
10. Calcular la nueva aproximación a la solución de forma recurrente aplicando los proyectores de Householder definidos por los vectores \bar{w} almacenados en la parte inferior de la matriz \underline{H} .
11. Calcular el residuo para la nueva solución obtenida. Si no hay convergencia, reiniciar el cálculo en el paso 1 con la nueva solución obtenida en el paso 10 (*restart*).



Método GMRES: Implementación práctica (II)

Imposición de condiciones de vinculación. Consideraciones:

- ▶ Fijar los valores prescritos en la aproximación inicial de la solución \bar{x}_0 .
- ▶ En las multiplicaciones matriz por vector copiar reemplazando las componentes correspondientes a variables prescritas del vector dato en el vector producto, lo que equivale a remplazar la fila de la matriz correspondiente a una variable prescrita por la misma fila de la matriz identidad.
- ▶ Imponer que las componentes del vector residuo correspondientes a variables prescritas son nulas.
- ▶ Al aplicar preconditionamiento después de realizar un producto matriz por vector, no modificar las componentes correspondientes a variables prescritas.
- ▶ Una vez obtenida la solución mediante el método GMRES calcular el residuo aplicando productos matriz por vector sin tener en consideración las variables prescritas y obtener los valores opuestos a las reacciones en las componentes correspondientes a variables prescritas. Para obtener estas reacciones no se debe aplicar preconditionamiento en el cálculo del residuo.



Bibliografía

Saad Y. (2003) Iterative Methods for Sparse Linear Systems. 2nd Edition. Society for Industrial and Applied Mathematics.

http://www-users.cs.umn.edu/~saad/IterMethBook_2ndEd.pdf