COMUNICACIONES TECNICAS

1988 SERIE INVESTIGACION Nº 70

UN ANALISIS DEL METODO DE GRADIENTE CONJUGADO

Ismael Herrera-Revilla

Recibida: 25 de abril de 1988

Instituto de Geofísica, UNAM
Circuito Exterior - C.U.
Delegación Coyoacán
04510 México D.F.
México

UN ANALISIS DEL METODO DE GRADIENTE CONJUGADO

POR

ISMAEL HERRERA-REVILLA

1. INTRODUCCION.- El método del gradiente conjugado ha recibido mucha atención y ha sido ampliamente utilizado en años recientes. Aunque los pioneros de este método fueron Hestenes y Stiefel (1952), el interés actual arranca a partir de que Reid (1971) lo planteara como un método iterativo, que es la forma en que se le usa con mayor frecuencia en la actualidad.

El método del *gradiente conjugado* (CG) se aplica a la ecuación $A\underline{u} = \underline{b}$, cuando A es positiva definida y simétrica. Sin embargo, en la Sección 4, presentamos una forma de aplicar esta clase de procedimientos en el caso en que la matriz A, no es simétrica.

La idea básica en que descansa el método del gradiente conjugado consiste en construir una base de vectores ortogonales y utilizarla para realizar la búsqueda de la solución en forma más eficiente. Tal forma de proceder generalmente no sería aconsejable porque la construcción de una base ortogonal utilizando el *procedimiento* de *Gramm-Schmidt* requiere, al seleccionar cada nuevo elemento de la base, asegurar su ortogonalidad con respecto a cada uno de los vectores construídos previamente. La gran ventaja del método del gradiente conjugado radica en que cuando se utiliza este procedimiento, basta con asegurar la ortogonalidad de un nuevo miembro con respecto al último que se ha construido, para que automáticamente esta condición se cumpla con respecto a todos los anteriores.

2.- <u>ALGUNAS PROPIEDADES DE LOS ESPACIOS DE KRYLOV</u>.- Considere la ecuación

$$Au = b \tag{1}$$

donde la matriz A es simétrica. Si u_s es la solución exacta de (1), $Au_s=b$. Además, se utilizará la notación (,) para el producto interior, el cual por ahora puede ser cualquiera.

Defina

$$e^k = u_s - u^k \tag{2a}$$

y

$$r^k = b - Au^k = A(u_s-u^k) \tag{2b}$$

El espacio de Krylov queda definido por

$$K_m = gen\ \{Ae^0,\dots,A^m e^0\} = gen\{r^0,\dots,A^{m-1}\} \tag{3a}$$

El espacio transladado (espacio afín) de Krylov

$$K_{m,T} = u^0 + K_m \tag{3b}$$

recibirá también cierta atención en desarrollos posteriores.

En vista de su definición es claro que

$$AK_m \subset K_{m+1} \tag{4a}$$

y que

$$K_1 \subset K_2 \subset \dots \subset K_m \subset \dots \tag{4b}$$

Algunas propiedades interesantes de los espacios de Krylov son las siguientes:

PROPIEDAD DE ORTOGONALIDAD.- Si $v \perp K_m$ entonces

$$Av \perp K_{m-1} ,$$

DEMOSTRACION.- Sea $w_{m-1} \in K_{m-1}$. Entonces

$$(Av,\ w_{m-1}) = (v,\ Aw_{m-1}) = 0 \tag{5}$$

ya que $Aw_{m-1} \in K_m$.

OBSERVACION.- Esta propiedad nos dice que cualquier vector ortogonal a un espacio de Krylov se transforma bajo A en otro también ortogonal, pero al espacio de Krylov un orden menor.

PROPIEDAD DE PERTENENCIA.- Sea $e = u_s - u^m$, donde $u^m \in K_{m,T}$. Entonces $Ae \in K_{m+1}$.

DEMOSTRACION.- Porque $u^m = u^0 + w_m$ para algún $w_m \in K_m$.

Luego

$$Ae = A(u_s - u^0) - Aw_m = r^0 - Aw_m \tag{6}$$

Además, $r^0 \varepsilon K_1 \subset K_{m+1}$; $m = 1,\ 2,\ \ldots$

y $Aw_m \in K_{m+1}$, por la ecuación (4).

OBSERVACION.- En general, construiremos aproximaciones u^k con elementos del espacio transladado de Krylov correspondiente(así,

$u^k \in K_{k,T}$). El error de estas aproximaciones es un vector que va desde el espacio transladado de Krylov correspondiente, hasta la solución exacta u_s de la ecuación (1). La Propiedad de Pertenencia nos dice que en esta clase de aproximaciones el transformado del error pertenece al siguiente espacio de Krylov.

3.- <u>CONSTRUCCION DE LA APROXIMACION PARA MATRIZ SIMETRICA</u>.- Como se dijo antes, vamos a construír aproximaciones con elementos que pertenezcan a los subespacios transladados de Krylov. Así, definimos

$$u^k = u^0 + w_k \ ; \text{ donde } w_k \in K_k \tag{7}$$

En vista de la ecuación (2a), se tiene

$$e^k = u_s - u^0 - w_k \tag{8}$$

Una condición natural, es pedir que el error sea mínimo. Esta condición se cumple si y sólo si, $e^k \perp K_k$. En este caso el transformado Ae^k del error e^k es ortogonal al espacio de Krylov K_{k-1}, por la Propiedad de Ortogonalidad. Además, Ae^k pertenece al espacio K_{k+1}.

Estos hechos se pueden aprovechar para construir una base ortogonal de los espacios de Krylov. Sea $\{p^1, \ldots, p^k\}$ una base ortogonal de K_k, donde p^m pertenece a K_m para cada m=1,...,k. En tal caso tanto el vector p^k como el vector Ae^k pertenecen a K_{k+1}, son ortogonales al espacio K_{k-1} y junto con este subespacio generan al espacio K_{k+1} (a menos que Ae^k pertenezca a K_k, situación que solamente se da cuando u^k=u_s, como se demuestra en el Apéndice). Tomando esto en cuenta, podemos definir un vector

$p^{k+1} \in K_{k+1}$ ortogonal a K_k, por medio de la ecuación

$$p^{k+1} = Ae^k - \beta^{k+1} p^k = r^k - \beta^{k+1} p^k \qquad (9)$$

La condición de ortogonalidad se satisface, si y sólo si

$$\beta^{k+1} = (r^k, p^k)/(p^k, p^k) \qquad (10)$$

Claramente, el sistema de vectores $\{p^1, \ldots, p^k, p^{k+1}\}$ es ahora una base ortogonal del espacio K_{k+1} y con la propiedad de que p^m pertenece a K_m para m=1,...,k+1. La base ortogonal deseada se obtiene aplicando inductivamente la construcción anterior. Como punto de partida para el procedimiento inductivo se toma

$$p^1 = r^0 = b - Au^0 \qquad (11)$$

Debido a la condición de ortogonalidad impuesta al vector e^k, resulta que el vector w_k de la ecuación (7) es la proyección del vector $e^0 = u_s - u^0$ en el espacio de Krylov K_k. Como la base $\{p^1, \ldots, p^{k+1}\}$ es ortogonal se tiene que

$$u^{k+1} = u^k + \alpha^{k+1} p^{k+1} \qquad (12)$$

donde α^{k+1} es el coeficiente de Fourier dado por

$$\alpha^{k+1} = (e^0, p^{k+1})/(p^{k+1}, p^{k+1}) \qquad (13)$$

Debido a la utilización de una base ortogonal, la ecuación (13) es equivalente a

$$\alpha^{k+1} = (e^k, p^{k+1})/(p^{k+1}, p^{k+1}) \tag{14}$$

que es una forma utilizada con mayor frecuencia (ver, por ejemplo Allen, Herrera y Pinder [1988] o Birkhoff y Lynch [1984]). La ecuación (14) se puede reducir aún más usando la ecuación (9) y el hecho de que e^k es ortogonal a p^k. Así

$$\alpha^{k+1} = (e^k, r^k)/(p^{k+1}, p^{k+1}) \tag{15}$$

Hasta ahora nada se ha dicho respecto al producto interior (,) que vaya a utilizarse. Para definirlo, es conveniente observar que las ecuaciones (13), (14) o (15) no pueden aplicarse utilizando cualquier producto interior. Esto es debido a que el vector $e^k = u_s - u^k$ que ahí aparece se desconoce.

Cuando la matriz A es simétrica y positiva definida, A y cada una de sus potencias definen productos interiores. La elección más sencilla es definir

$$(u, v) = u^* A v \tag{16}$$

Con esta elección, las fórmulas (15) y (10), se convierten en

$$\alpha^{k+1} = r^{k*} r^k / p^{k+1*} A p^{k+1} \tag{17a}$$

y

$$\beta^{k+1} = p^{k*} A r^k / p^{k*} A p^k \tag{17b}$$

4.- CONSTRUCCION PARA MATRIZ NO SIMETRICA.- Considere la ecuación

$$Pu = b \tag{18}$$

en el caso en que el transpuesto P^* de la matriz P no es igual a P. Definamos a la matriz simétrica

$$A = P^* P \tag{19}$$

Entonces todos los desarrollos anteriores son aplicables, incluyendo las ecuaciones (9), (10), (12) y (13). Pero en este caso las expresiones de las ecuaciones (10) y (13), se pueden calcular cualquiera que sea el producto interior que se utilice. Utilizaremos el producto interior natural, pero modificaremos ligeramente la notación utilizada. Así

$$e^m = u_s - u^m \tag{20a}$$

pero

$$r^m = P(u_s - u^m) = b - Pu^m \tag{20b}$$

Además

$$p^{m+1} = Pe^m - \beta^{m+1} p^m = r^m - \beta^{m+1} p^m \tag{22a}$$

$$\beta^{m+1} = P^* r^m * P^* p^m / P^* p^m * P^* p^m \tag{22b}$$

y la definición inductiva se inicia con

$$p^1 = A(u_s - u^0) = r^0 = b - Pu^0 \tag{23}$$

Por otra parte

$$u^{m+1} = u^m + \alpha^{m+1} P^* p^{m+1} \tag{24a}$$

con

$$\alpha^{m+1} = r^m * r^m / P^* p^{m+1} * P^* p^{m+1} \tag{24b}$$

APENDICE

PROPOSICION .- Si $Ae^k \in K_k$ entonces $u_s \in K_{k,T}$.

DEMOSTRACION .- Utilizaremos el Lema siguiente

Lema A.1 .- Si $Ae^k \in K_k$ entonces $Ap^k \in K_k$.

DEMOSTRACION.- Usando las ecuaciones (12) y (15), se tiene

$$e^k = e^{k-1} - \alpha^k p^k \quad (A.1)$$

con

$$\alpha^K = (e^{k-1}, Ae^{k-1})/(p^k, p^k) \neq 0 \quad (A.2)$$

Aplicando la matriz A a esta ecuación se obtiene

$$Ae^k = Ae^{k-1} - \alpha^k Ap^k \quad (A.3)$$

La ecuación (A.3) muestra que los vectores Ae^k, Ae^{k-1} y Ap^k, son linealmente dependientes ya que $\alpha^k \neq 0$ por (A.2). Pero $Ae^k \in K_k$ por hipótesis y $Ae^{k-1} \in K_k$ por la Propiedad de Pertenencia; luego, $Ap^k \in K_k$, que era lo que nos proponíamos demostrar.

Demostración de la Proposición.- Observe que

$$K_k = K_{k-1} + \{p^k\} \quad (A.4)$$

por lo que

$$AK_k = AK_{k-1} + A\{p^k\} \quad (A.5)$$

Además

$$AK_{k-1} \subset K_k \quad y \quad A\{p^k\} \in K_k \quad (A.6)$$

en vista de la relación (4a) y el Lema A.1, respectivamente. Luego

$$AK_k \subset K_k \tag{A.7}$$

Como la matriz A es positiva definida, A no es singular y el mapeo definido por ella es biunívoco. Así

$$dim(AK_k) = dim\ (K_k) \tag{A.8}$$

Las relaciones (A.7) y (A.8) juntas, implican que

$$AK_k = K_k \tag{A.9}$$

La ecuación (A.9), significa que $g \in K_k$, si y sólo sí, existe $v \in K_k$, tal que

$$Av = g \tag{A.10}$$

Por otra parte, $Ae^k \in K_k$. Luego, existe $v_k \in K_k$, tal que

$$Av_k = Ae^k = A(u_s - u^k) \tag{A.11}$$

Multiplicando esta última ecuación por el inverso A^{-1} de A, se obtiene

$$u_s - u^k = v_k \tag{A.12}$$

Es decir

$$u_s = u^k + v_k = u^0 + w_k + v_k \tag{A.13}$$

donde tanto w_k como v_k, pertenecen a K_k. Claramente, la ecuación (A.13), exhibe a la solución u_s, como un miembro de $K_{k.T}$.

REFERENCIAS

Allen, M.B., I. Herrera and G. F. Pinder, "Numerical Modeling in Science and Engineering", John Wiley, 1988.

Birkhoff, G. and R. E. Lynch, "Numerical Solution on Elliptic Problems", SIAM, Phyladephia, 1984.

Hestenes, M.R. and E. Stiefel, "Methods of conjugate gradients for solving linear systems", J. Res. Natl. Bur. Stand., 49, pp.409-436, 1952.

Reid, J.K., "On the method of conjugate gradients for the solution of large sparse systems of linear equations", in J.K. Reid, Ed., Large Sparse Sets of Linear Equations, New York: Academic Press, pp.231-254, 1971.