Métodos Iterativos

Repaso

- $Ax = b$
- $Px = (P-A)x + b$ usando un Precondicionador P

Iteración

$$P x_{k+1} = (P-A)x_k + b$$

Alternativas a los métodos directos y conveniente para matrices grandes esparsas

$$e_{k+1} = x_{k+1} - x \quad , \quad y \quad e_k = x_k - x$$

$$P e_{k+1} = (P-A)e_k$$

$$e_{k+1} = (I - P^{-1}A)e_k$$

$$\Rightarrow e_{k+1} = M e_k$$

- La convergencia estaba asegurada si $|\lambda(M)| < 1$
- La velocidad de convergencia lo definía el radio espectral

$$\rho(M) = \max\{|\lambda(M)|\}$$

$$e_k = b_1(\lambda_1)^k u_1 + b_2(\lambda_2)^k u_2 + \dots + b_m(\lambda_m)^k u_m$$

Dos métodos de selección del Precondicionador: si $A = D + L + U$

- Jacobi $\Rightarrow P = D$
- Gauss-Seidel $\Rightarrow P = D + L$

$$\rho(M_{GS}) = \rho(M_J)^2$$

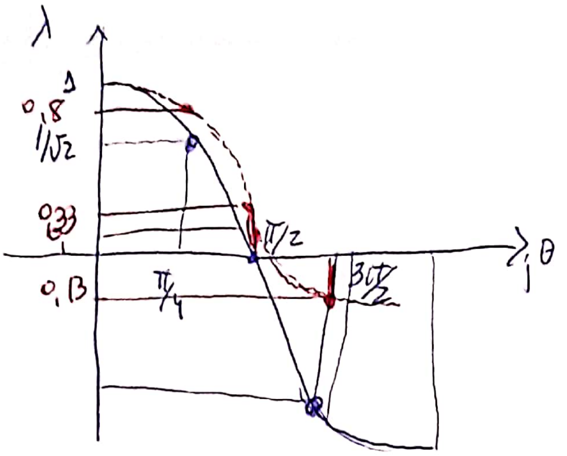
Ejemplo

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_j(A) = 2 - 2\cos j\theta \quad , \quad \theta = \frac{\pi}{n+1} = \frac{\pi}{4}$$

$$|\lambda_j(M_J)| = \cos j\theta \begin{cases} \lambda_1 = \sqrt{2}/2 \\ \lambda_2 = 0 \\ \lambda_3 = -\sqrt{2}/2 \end{cases}$$

$$|\lambda_j(M_{GS})| = (\cos j\theta)^2 \begin{cases} \lambda_1 = 1/2 \\ \lambda_2 = 0 \\ \lambda_3 = 0 \end{cases}$$



Jacobi Ponderado

El precondicionador se elige sumando un factor ω

$$P = \omega D \quad , \omega < 1$$

$$\Rightarrow M_\omega = I - \omega D^{-1} A$$

En nuestro ejemplo, $M = I - \frac{\omega}{2} A$

Luego: $\lambda_j (M_\omega) = 1 - \frac{\omega}{2} (2 - 2\cos j\theta) = 1 - \omega + \omega \cos j\theta$

con $\theta = \frac{\pi}{m+1}$

$$\lambda_j = \begin{cases} \lambda_1 = 0{,}8047 \\ \lambda_2 = 0{,}33 \\ \lambda_3 = -0{,}1381 \end{cases}$$

@ $\omega = \frac{2}{3}$

Successive Over-Relaxation (SOR) aka "Sobre relajación sucesiva"

La idea parte de una simple adición de un factor ω

$$\Rightarrow \omega A x = \omega b$$

Si $P x_{k+1} = (P - \omega A) x_k + b$

$P = D + \omega L \rightarrow$ Gauss-Seidel

$$(D + \omega L) x_{k+1} = ((1-\omega) D - \omega U) x_k + \omega b$$

$$M_{SOR} = (D + \omega L)^{-1} ((1-\omega) D - \omega U)$$

La idea es encontrar un ω_{opt} que minimice el $\rho(M_{SOR})$

SOR: (Continuación...) ③

Podemos también pensar al método como una magnificación de la dirección de x_k hacia x_{k+1} si es bueno con $\omega > 1$:

$$x_{k+1} = x_k + \omega(x_{k+1} - x_k)$$

$$x_{k+1} = (1-\omega)\, x_k + \omega\, x_{k+1} \rightarrow \text{Reescribo Gauss-Seidel}$$

$$= (1-\omega)\, x_k + \frac{\omega}{a_{ii}}\left(b - \sum_{j=0}^{i-1} x_j^{(k+1)} a_{ij} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}\, x_j^{(k)}\right)$$

$$x_{k+1}\underbrace{\left(a_{ii} - \omega\sum_{j=0}^{i-1} a_{ij}\right)}_{(D-\omega L)} = \underbrace{\left[(1-\omega)\, a_{ii} - \omega\sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}\right]}_{((1-\omega)D - \omega U)} x_k + \omega b$$

Tenemos 3 casos:

- $\omega = 1 \longrightarrow$ Gauss-Seidel
- $\omega < 1 \longrightarrow$ ~~xxxx~~ desaceleración
- $\omega > 1 \longrightarrow$ aceleración.

Por producto de matrices triangulares

$$\det(M_{SOR}) = (1-\omega)^n$$

Luego $\rho(M_{SOR}) \geq |1-\omega|$ recordando q' para la convergencia preciso $\rho(M_{SOR}) < 1$

$$\Rightarrow |1-\omega| \rightarrow \boxed{0 < \omega < 2}$$

Para nuestro ejemplo:

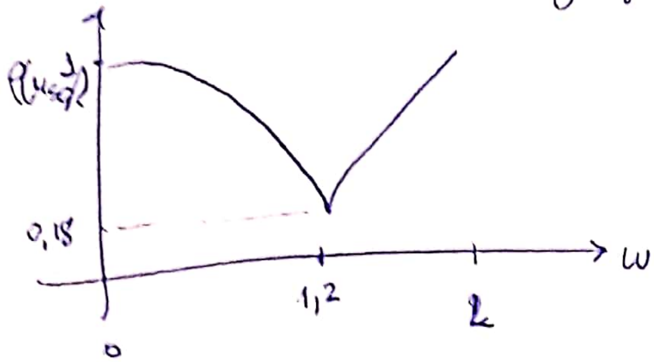
$$M_{SOR} = (D + \omega L)^{-1}\left((1-\omega)D - \omega U\right)$$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad D = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & - \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$M_{SOR} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -\omega & 2 & 0 \\ 0 & -\omega & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2(1-\omega) & +\omega & 0 \\ 0 & 2(1-\omega) & +\omega \\ 0 & 0 & 2(1-\omega) \end{pmatrix}$$

$$M_{SOR} = \begin{pmatrix} 1-\omega & \frac{\omega}{2} & 0 \\ \frac{\omega(2\omega-2)}{4} & \frac{\omega^2}{4} - \omega + 1 & \omega/2 \\ \frac{\omega^2(2\omega-2)}{8} & \frac{\omega^3}{8} - \frac{\omega(2\omega-2)}{4} & \frac{\omega^2}{4} - \omega + 1 \end{pmatrix}$$

Probamos todos los ω, y graficamos el radio espectral



- Residuo

$$Px = (P-A)\,x + b$$

$$x_{k+1} = (I - P^{-1}A)\,x_k + b$$

$$x_{k+1} = x_k + P^{-1}(-Ax_k + b)$$

$$x_{k+1} = x_k + P^{-1} r_k \quad \rightarrow \text{residuo } \boxed{\cancel{r_k = Ax_k - b}}$$

$$r_k = b - Ax_k$$

Método del Gradiente

Sea A simétrica definida positiva, $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $x \in \mathbb{R}^n$

Dos problemas planteados

(P1) Hallar $x \in \mathbb{R}^n \,/\, Ax = b$

(P2) Encontrar $x \in \mathbb{R}^n$ q́ minimice la función cuadrática de energía:

$$J(x) = \frac{1}{2} x^T A x - x^T b$$

Se puede probar que ambos objetivos coinciden.
La idea es reemplazar la resolución del P1 x una metodología del tipo P2.

$\Rightarrow$ La minimización se define como:

$$\text{Encontrar } x \in \mathbb{R}^n \setminus J(x) = \min_{y \in \mathbb{R}^n} J(y)$$

Demostración: $t \in \mathbb{R}$, $z \in \mathbb{R}^n$, $x \in \mathbb{R}^n$

Sea

$$h(t) = J(x+tz) = \frac{1}{2}(x+tz)^T A (x+tz) - (x+tz)^T b$$

Luego

$$h(t) = \frac{1}{2} t^2 z^T A z + t\,(z^T A x - z^T b) + \frac{1}{2} x^T A x - x^T b$$

una cuadrática de variable t con mínimo:

$$t_m = -\frac{z^T A x - z^T b}{z^T A z} = -\frac{z^T(Ax-b)}{z^T A z} = \frac{z^T(b-Ax)}{z^T A z}$$

Si x resuelve P1 $\rightarrow$ $Ax-b=0$

$\rightarrow t_m = 0$

$$\Rightarrow J(x) = h(0) \le h(t) = J(x+tz), \ \forall t \quad (1)$$

con $J(x) = \min_{y\in\mathbb{R}^m} J(y)$ que significa q resuelve P2

De (1) vemos que su mínimo tiene que estar en $t=0$

$$\Rightarrow 0 = \frac{z^T A x - z^T b}{z^T A z} \Rightarrow z^T(Ax-b) = 0$$

y si dijimos $\forall z \neq 0$

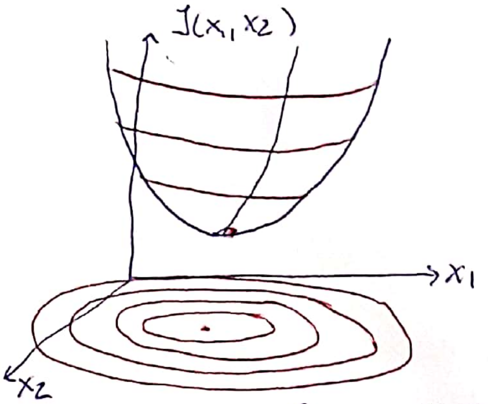
$\Rightarrow Ax - b = 0$

$\Rightarrow x$ resuelve P1

Descenso del Gradiente

Planteamos el problema $Ax=b$ como minimización de

$$J(x) = \frac{1}{2} x^* A x - x^* b$$



Atacamos la resolución de la minimización a partir de un método iterativo en $\mathbb{R}^m$.

Es un método por búsqueda de líneas, dado x_i se elige una dirección z_i y un escalar λ_i

$$x_{i+1} = x_i + \lambda_i z_i$$

$\Rightarrow$ Empezamos buscando λ_i /

$$J(x_i + \lambda_i z_i) = \min_{t\in\mathbb{R}} J(x_i + t z_i)$$

queda

$$\left.\frac{dJ(x_i + t z_i)}{dt}\right|_{t=\lambda_i} = \nabla J(x_i + \lambda_i z_i)^T z_i = 0$$

Descenso del gradiente (continuación ...)

Despejamos λ_i

$$\lambda_i = \frac{-z_i^T(Ax_i - b)}{z_i^T A z_i} = \frac{z_i^T r_i}{z_i^T A z_i}$$

Bien! Tenemos λ_i...
Pero nos falta fijar la dirección z_i: elegimos la dirección de mayor decrecimiento de J en x_i: $-\nabla J(x_i) = b - Ax_i = r_i$

$\Rightarrow$ Esto define el método de descenso del gradiente o su opción más rápido: $x_{i+1} = x_i + \frac{r_i^T r_i}{r_i^T A r_i} r_i$

Pero!!. puede ser muy lento

Gradiente Conjugado

Existe un modo de encontrar una dirección de búsqueda + adaptado.

Definimos, para una matriz simétrica definido positiva el producto interno de A:

$$x^T A x, \text{ con su } ~~proximo~~ \text{norma } \|x\|_A = \sqrt{x^T A x}$$

Lema: Supongamos las direcciones de búsqueda son A ortogonales $(z_i^T A z_j = 0)$, en cada paso se elige un λ_i para minimizar sobre la línea correspondiente:

$$\min_{x_i + \langle z_i \rangle} J(y) = J(x_{i+1}) = \min_{y \in x_0 + \langle z_0, z_1, \ldots, z_i \rangle} J(y)$$

Demostración

Sea $W_{i+1} = \langle z_0, z_1, \ldots, z_i \rangle$ y tomo $z \in x_0 + W_{i+1}$ arbitrario.
Luego puedo escribir: $z = y + t z_i$

Con $y \in x_0 + W_i = x_0 + \langle z_0, z_1, \ldots, z_{i-1} \rangle$

Observamos que

$$\min_{z \in x_0 + W_{i+1}} J(z) = \min_{y \in x_0 + W_i,\, t \in \mathbb{R}} J(y + t z_i)$$

Escribimos

$$J(z) = J(y + t z_i) = \frac{1}{2} t^2 z_i^T A z_i + t\left(z_i^T A y - z_i^T b\right) + \frac{1}{2} y^T A y - y^T b \quad (1)$$

Pero sabemos q' son A ortogonales : $z_i^T A z_j = 0$

$$z_i^T A y = z_i^T A x_0 = \boxed{z_i^T A x_i}$$ gracias a esto desprejo y de 1º término

$$J(y + t z_i) = \left(\frac{1}{2} t^2 z_i^T A z_i + t\left(\boxed{z_i^T A x_i} - z_i^T b\right)\right) + \frac{1}{2} y^T A y - y^T b$$

Para minimizar en Z basta minimizar ambos términos:

1º en t

2º en y (método descenso de líneas)

Pero el λ óptimo es $\lambda = \frac{z_i^T A r_i}{z_i^T A z_i}$ por los resultados ya encontrados

Lo interesante es que la minimización del $J(z)$:

Para $\min_{z \in x_0 + W_{i+1}} J(z)$ preciso $\underbrace{J(y)}_{y \in x_0 + W_i}$

para minimizar el espacio W_{i+1} preciso minimizar en W_i que es menor.

Aquí sale la recursión -> es la clave del algoritmo

Método

Buscamos generar una base ortogonal sin hacer Gram-Schmidt.

La base de residuos es ortogonal:

$$r_i^T r_k = 0 \ , \ \forall i < k$$

- Δr es ortogonal a previos Δx

$$(x_i - x_{i+1})^T (r_k - r_{k-1}) = 0 \quad i < k$$

Δy y Δr directamente relacionados

$$r_k - r_{k+1} = (b - A x_k) - (b - A x_{k+1}) = -A(x_k - x_{k-1})$$

Método (Continuación...)

Luego $(x_i - x_{i+1})^T A (x_k - x_{k-1}) = 0 \quad i<k$

Los updates Δx son A ortogonales o "conjugados"

Escribimos la dirección de búsqueda en esa base de residuos (ortogonales) como su combinación lineal

$$z_i = \sum_{j=0}^{i} \frac{z_i^T r_j}{r_j^T r_j} r_j$$

Ya sabemos

① $- z_i^T r_i = r_i^T r_i$ (demostración en apunte)

② $- z_i^T (r_i - r_l) = z_i^T A (x_i - x_l) = 0$ / $x_i - x_l \in w_i$ y z_i es A ortogonal a w_i.

$$z_i = \sum_{j=0}^{i} \frac{z_i^T r_j}{r_j^T r_j} r_j \overset{\text{por ① y ②}}{=} \sum_{j=0}^{i} \frac{r_i^T r_i}{r_j^T r_j} r_j = r_i + r_i^T r_i \sum_{j=0}^{i-1} \frac{r_j}{r_j^T r_j}$$

Multiplico y divido x $r_{i-1}^T r_{i-1}$

$$z_i = r_i + \frac{r_i^T r_i}{r_{i-1}^T r_{i-1}} \sum_{j=0}^{i-1} \frac{r_{i-1}^T r_{i-1}}{r_j^T r_j} r_j = r_i + \frac{r_i^T r_i}{r_{i-1}^T r_{i-1}} z_{i-1}$$

Llegamos a la forma recursiva.

Tenemos todos los elementos para definir el método del gradiente conjugado:

for $i=0$, $x_0 = r_0$, $z_0 = r_0 = b$ (subespacios de Krylov)

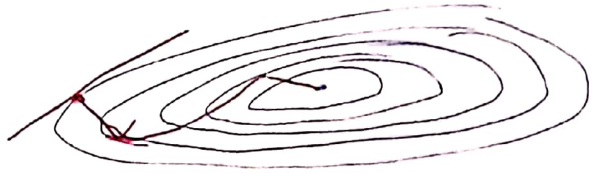
① $\lambda_{i+1} = \dfrac{r_i^T r_i}{z_i^T A z_i}$

② $x_{i+1} = x_i + \lambda_{i+1} z_i$

③ $r_{i+1} = r_i - \lambda_i A z_i$

④ $z_{i+1} = r_{i+1} + \dfrac{r_{i+1}^T r_{i+1}}{r_i^T r_i} z_i$

fin



Cota del error

$$\|x - x_k\|_A \le 2\left(\frac{\sqrt{k(A)}-1}{\sqrt{k(A)}+1}\right)^k \|x - x_0\|_A$$

La raíz de la condición de A favorece la convergencia.

Ejemplo

$$Ax = b \qquad A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$x_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \qquad r_0 = z_0 = b = \begin{bmatrix} 4 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_1 = \frac{16}{32} = 1/2$$

$$x_1 = x_0 + \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 4 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$r_1 = r_0 - \frac{1}{2} A z_0 = \begin{bmatrix} 4 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - \frac{1}{2} A \begin{bmatrix} 4 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$z_1 = r_1 + \frac{r_1^T r_1}{r_0^T r_0} z_0 = \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$\lambda_2 = \frac{r_1^T r_1}{z_1^T A z_1} = \frac{1}{2}$$

$$x_2 = x_1 + \frac{1}{2} z_1 = \begin{bmatrix} 3 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$r_2 = r_1 - \frac{1}{2} A z_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$ / stop