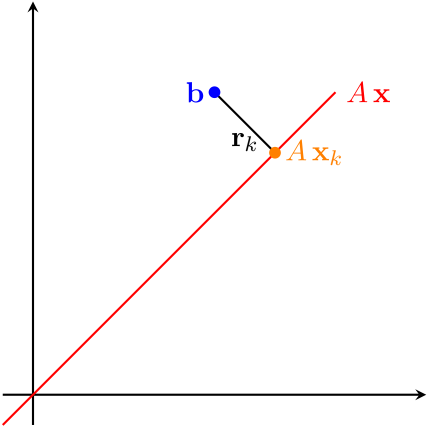
UNIVERSIDAD TECNICA
FEDERICO SANTA MARIA

DEPARTAMENTO
DE INFORMÁTICA

INF 285 - Computación Científica
Ingeniería Civil Informática

13: GMRes - Generalized Minimal Residual Method



Supongamos $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ y $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$.

Sea $\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - A\,\mathbf{x}_k$.

¿Cómo convertimos un sistema de ecuaciones lineales cuadrado en uno sobre-determinado?

Ejemplo 1

Consideremos $A\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$ *con* $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ *y* $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$.
¿Qué sucede si restringimos el espacio de búsqueda de $\mathbb{R}^n$ *a* $\mathbb{R}$*?*

$$\mathbf{x}_k \approx c_1\,\mathbf{q}_1 \Rightarrow A\,\underbrace{c_1\,\mathbf{q}_1}_{\mathbf{x}_k} \approx \mathbf{b} \Rightarrow \left(A\,\mathbf{q}_1\right)\,c_1 \approx \mathbf{b}$$

GMRes

Restringimos el dominio de $\mathbf{x}_k$ al sub-espacio de Krylov $\mathcal{K}_k$, es decir $\mathbf{x}_k \in \mathcal{K}_k$.

¿Qué es $\mathcal{K}_k$?

$$\mathcal{K}_k = \text{span}\left(\mathbf{b}, A\,\mathbf{b}, A^2\,\mathbf{b}, \ldots, A^{k-1}\,\mathbf{b}\right)$$

¿Cómo restringimos $\mathbf{x}_k \in \mathcal{K}_k$?

$$\mathbf{x}_k = \widetilde{c}_1\,\mathbf{b} + \widetilde{c}_2\,A\,\mathbf{b} + \cdots + \widetilde{c}_k\,A^{k-1}\,\mathbf{b}$$

¿Qué sucede si por ejemplo $k = 2$? ¿$k = 3$?

GMRes

Caso general:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{b} & A\,\mathbf{b} & \cdots & A^{k-1}\,\mathbf{b} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widetilde{c}_1 \\ \widetilde{c}_2 \\ \vdots \\ \widetilde{c}_k \end{bmatrix} = \mathbf{x}_k$$

donde queremos minimizar el error cuadrático:

$$\|A\,\mathbf{x}_k - \mathbf{b}\|_2^2 = \left\| A \begin{bmatrix} \mathbf{b} & A\,\mathbf{b} & \cdots & A^{k-1}\,\mathbf{b} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widetilde{c}_1 \\ \widetilde{c}_2 \\ \vdots \\ \widetilde{c}_k \end{bmatrix} - \mathbf{b} \right\|_2^2$$

$$\left\| \underbrace{\underbrace{A}_{n\times n} \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{b} & A\,\mathbf{b} & \cdots & A^{k-1}\,\mathbf{b} \end{bmatrix}}_{K_{n\times k}}}_{n\times k} \begin{bmatrix} \widetilde{c}_1 \\ \widetilde{c}_2 \\ \vdots \\ \widetilde{c}_k \end{bmatrix} - \mathbf{b} \right\|_2^2$$

Hemos convertido un sistema de ecuaciones lineales cuadrado a un problema de mínimos cuadrados 😃

La matriz $K_{n\times k}$ es mal condicionada porque sus columnas son "casi" linealmente independientes 😟

GMRes

Ortonormalización de Gram-Schmidt modificada al rescate!

$$\downarrow$$

Iteración de Arnoldi

$$\operatorname{span}\left(\mathbf{b}, A\,\mathbf{b}, A^2\,\mathbf{b}, \ldots, A^{k-1}\,\mathbf{b}\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\operatorname{span}\left(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \ldots, \mathbf{q}_k\right)$$

$$\Downarrow$$

$$\operatorname{span}\left(\mathbf{q}_1, A\,\mathbf{q}_1, A\,\mathbf{q}_2, \ldots, A\,\mathbf{q}_{k-1}\right)$$

¿Cómo se obtiene?

$$\downarrow$$

Descomposición parcial de Hessenberg

GMRes

Descomposición parcial de Hessenberg

$$\underbrace{A}_{n\times n}\underbrace{Q_k}_{n\times k} = \underbrace{Q_{k+1}}_{n\times(k+1)}\underbrace{\widetilde{H}_k}_{(k+1)\times k}$$

$$A\begin{bmatrix}\mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \cdots & \mathbf{q}_k\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \cdots & \mathbf{q}_{k+1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1,k} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2,k} \\ 0 & h_{32} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & h_{k,k} \\ 0 & \cdots & 0 & h_{k+1,k} \end{bmatrix}$$

Descomposición parcial de Hessenberg

$$A\,Q_k = Q_{k+1}\,\widetilde{H}_k$$

$$A\begin{bmatrix}\mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \cdots & \mathbf{q}_k\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \cdots & \mathbf{q}_{k+1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1,k} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2,k} \\ 0 & h_{32} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & h_{k,k} \\ 0 & \cdots & 0 & h_{k+1,k} \end{bmatrix}$$

$$A\,\mathbf{q}_1 = h_{11}\,\mathbf{q}_1 + h_{21}\,\mathbf{q}_2$$

$$A\,\mathbf{q}_2 = h_{12}\,\mathbf{q}_1 + h_{22}\,\mathbf{q}_2 + h_{32}\,\mathbf{q}_3$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{b}}{\|\mathbf{b}\|} \qquad \mathbf{q}_i^*\,\mathbf{q}_j = 0\ ,\, i \neq j \qquad \|\mathbf{q}_i\| = 1$$

GMRes

$$\left\| A \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{b} & A\,\mathbf{b} & \cdots & A^{k-1}\,\mathbf{b} \end{bmatrix}}_{K} \underbrace{\begin{bmatrix} \widetilde{c}_1 \\ \vdots \\ \widetilde{c}_k \end{bmatrix}}_{\widetilde{\mathbf{c}}} - \mathbf{b} \right\|_2^2 = \|A\,K\,\widetilde{\mathbf{c}} - \mathbf{b}\|_2^2$$

Descomposición de Hessenberg: $A\,Q_k = Q_{k+1}\,\widetilde{H}_k$

$$\mathrm{span}\left(\mathbf{b}, A\,\mathbf{b}, A^2\,\mathbf{b}, \dots, A^{k-1}\,\mathbf{b}\right)$$
$$\Downarrow$$
$$\mathrm{span}\left(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \dots, \mathbf{q}_k\right)$$
$$\Downarrow$$
$$\mathrm{span}\left(\mathbf{q}_1, A\,\mathbf{q}_1, A\,\mathbf{q}_2, \dots, A\,\mathbf{q}_{k-1}\right)$$

GMRes

$$\|A\,K\,\widetilde{\mathbf{c}}-\mathbf{b}\|_2^2 = \|A\,Q_k\,\mathbf{c}-\mathbf{b}\|_2^2 = \|Q_{k+1}\,\widetilde{H}_k\,\mathbf{c}-\mathbf{b}\|_2^2$$

Recordemos que $\mathbf{q}_1 = \dfrac{\mathbf{b}}{\|\mathbf{b}\|_2}$,
por lo tanto, se obtiene que $\mathbf{b} = \|\mathbf{b}\|_2\,Q_{k+1}\,\mathbf{e}_1$

$$\begin{aligned}\left\|Q_{k+1}\,\widetilde{H}_k\,\mathbf{c}-\mathbf{b}\right\|_2^2 &= \left\|Q_{k+1}\,\widetilde{H}_k\,\mathbf{c}-\|\mathbf{b}\|_2\,Q_{k+1}\,\mathbf{e}_1\right\|_2^2\\ &= \left\|Q_{k+1}\left(\widetilde{H}_k\,\mathbf{c}-\|\mathbf{b}\|_2\,\mathbf{e}_1\right)\right\|_2^2\\ &= \left\|\widetilde{H}_k\,\mathbf{c}-\|\mathbf{b}\|_2\,\mathbf{e}_1\right\|_2^2\end{aligned}$$

$$\underbrace{\|A\,K\,\widetilde{\mathbf{c}}-\mathbf{b}\|_2^2}_{\text{Mínimos cuadrados de } n\times k} \quad = \quad \underbrace{\left\|\widetilde{H}_k\,\mathbf{c}-\|\mathbf{b}\|_2\,\mathbf{e}_1\right\|_2^2}_{\text{Mínimos cuadrados de } (k+1)\times k}$$

$$\begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1,k} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2,k} \\ 0 & h_{32} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & h_{k,k} \\ 0 & \cdots & 0 & h_{k+1,k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \|\mathbf{b}\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

GMRes

$\mathbf{x}_0 =$ "initial guess"

$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$

$\mathbf{q}_1 = \dfrac{\mathbf{r}_0}{\|\mathbf{r}_0\|_2}$

for k **in** **range**(1,m+1):

  $\mathbf{y} = A\mathbf{q}_k$

  for j **in** **range**(1,k+1):

    $h_{jk} = \mathbf{q}_j^T \cdot \mathbf{y}$

    $\mathbf{y} = \mathbf{y} - h_{jk}\mathbf{q}_j$

  $h_{k+1,k} = \|\mathbf{y}\|_2$

  if $h_{k+1,k} > 0$:

    $\mathbf{q}_{k+1} = \dfrac{\mathbf{y}}{h_{k+1,k}}$

  $\bar{\mathbf{c}}_k = \underset{\mathbf{c}_k \in \mathbb{R}^k}{\operatorname{argmin}} \left\| \|\mathbf{r}_0\| \, \mathbf{e}_1 - \widetilde{H}_k \mathbf{c}_k \right\|_2$

  $\mathbf{x}_k = Q_k \bar{\mathbf{c}}_k + \mathbf{x}_0$