# Un Análisis del Método de Gradiente Conjugado

## 1 Introducción

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 de gradiente conjugado (CGM) se aplica a la ecuación $A\underline{u} = \underline{b}$, cuando $A$ es positiva definida y simétrica. Sin embargo en la sección (1.5), presentaremos 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 procediemiento 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 de gradiente conjugado radica en que cuando de 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.

### 1.1 Algunas Propiedades de los Espacios de Krylov

Considere la ecuación

$$A\underline{u} = \underline{b} \tag{1}$$

donde la matriz $A$ es simétrica. Si $u_s$ es la solución exacta de la Ec. (1), $A\underline{u_s} = \underline{b}$. Además, se utilizará la notación

$$\langle \cdot, \cdot \rangle \tag{2}$$

para el producto interior, el cual por ahora puede ser cualquiera.

Defina

$$e^k = u_s - u^k \tag{3}$$

y

$$r^k = b - Au^k = A(u_s - u^k). \tag{4}$$

El espacio de Krylov queda definido por

$$K_m = gen\left\{Ae^0, ..., A^m e^0\right\} = gen\left\{r^0, ..., r^{m-1}\right\}. \tag{5}$$

El espacio transladado (espacio afín) de Krylov

$$K_{m,T} = u^0 + K_m \tag{6}$$

recibirá también cierta atención en desarrollos posteriores.

En vista de su definición es claro que

$$AK_m \subset K_{m+1} \tag{7}$$

y que

$$K_1 \subset K_2 \subset .... \subset K_m \subset ... \tag{8}$$

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

**Propiedad de Ortogonalidad**.- Si $v \perp K_m$ entonces

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

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

$$\langle Av, w_{m-1}\rangle = \langle v, Aw_{m-1}\rangle = 0 \tag{9}$$

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

Observación.- 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 $Ae \subset K_{m+1}$.

Demostración.- porque $u^m = u^0 + w_m$ para algún $w_m \subset K_m$. Luego

$$Ae = A(u_s - u^0) - Aw_m = r^0 - Aw_m \tag{10}$$

además, $r^0 \in K_1 \subset K_{m+1}; m = 1, 2, ...$ y $Aw_m \in K_{m+1}$, por la Ec. (7).

Observación.- En general, construiremos aproximaciones $u^k$ con elementos del espacio transladado de Krylov correspondientes (así, $u^k \in K_{m,T}$). 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 Ec. (1). La propiedad de pertenencia nos dice que en esta clase de aproximaciones el transformado del error pertenece al siguiente espacio de Krylov.

## 1.2 Construcción de la Aproximación para Matriz Simétrica

Como se dijo antes, vamos a construir aproximaciones con elementos que pertenezcan a los subespacios transladados de Krylov. Así, definimos

$$u^k = u^0 + w_k \quad ; \quad \text{donde } w_k \in K_k. \tag{11}$$

En vista de la Ec. (3), se tiene

$$e^k = u_s - u^0 - w_k. \tag{12}$$

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 $\left\{p^1, ..., p^k\right\}$ una base ortogonal de $K_k$, donde $p^m$ pertenece a $K_m$ para cada $m = 1, 2, ..., k$. 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 $Ae^k$ pertenezcan 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

$$p^{k+1} = Ae^k - \beta^{k+1} p^k = r^k - \beta^{k+1} p^k. \tag{13}$$

La condición de ortogonalidad se satisface, si y sólo si

$$\beta^{k+1} = \frac{\left\langle r^k, p^k \right\rangle}{\left\langle p^k, p^k \right\rangle}. \tag{14}$$

Claramente, el sistema de vectores $\left\{p^1, ..., p^k, p^{k+1}\right\}$ 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

$$p^1 = r^0 = b - Au^0. \tag{15}$$

Debido a la condición de ortogonalidad impuesta al vector $e^k$, resulta que el vector $w_k$ de la Ec. (11) es la proyección del vector $e^0 = u_s - u^0$ en el espacio de Krylov $K_k$. Como la base $\left\{p^1, ..., p^{k+1}\right\}$ es ortogonal se tiene que

$$u^{k+1} = u^k + \alpha^{k+1} p^{k+1} \tag{16}$$

donde $\alpha^{k+1}$ es el coeficiente de Fourier dado por

$$\alpha^{k+1} = \frac{\left\langle e^0, p^{k+1} \right\rangle}{\left\langle p^{k+1}, p^{k+1} \right\rangle}. \tag{17}$$

Debido a la utilización de una base ortogonal, la Ec. (17) es equivalente a

$$\alpha^{k+1} = \frac{\left\langle e^k, p^{k+1} \right\rangle}{\left\langle p^{k+1}, p^{k+1} \right\rangle} \tag{18}$$

que es una forma utilizada con mayor frecuencia (ver, por ejemplo Allen, Herrera y Pinder [1988] o Birkhoff y Lynch [1984]). La Ec. (18) se puede reducir aún mas usando la Ec. (13) y el hecho de que $e^k$ es ortogonal a $p^k$. Así

$$\alpha^{k+1} = \frac{\left( e^k, r^k \right)}{\left( p^{k+1}, p^{k+1} \right)}. \tag{19}$$

Hasta ahora nada se ha dicho respecto al producto interior de la Ec. (2) que vaya a utilizarse. Para definirlo, es conveniente observar que las Ecs. (17), (18) o (19) 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

$$\langle u, v \rangle = u \cdot Av. \tag{20}$$

Con esta elección, las Ecs. (19) y (14), se convierten en

$$\alpha^{k+1} = \frac{r^k \cdot r^k}{p^{k+1} \cdot Ap^{k+1}} \tag{21}$$

y

$$\beta^{k+1} = \frac{p^k \cdot Ar^k}{p^k \cdot Ap^k}. \tag{22}$$

Generandose el siguiente algoritmo llamado Método de Gradienete Conjugado (CGM), en el cual los datos de entrada es el sistema $Ax = b$ y $u^0$ un vector de busqueda inicial. Se calcula para iniciar el algoritmo $r^0 = b - Au^0$,

$p^0 = r^0$ entonces el médodo quedaria esquematicamente como

$$\begin{aligned} \beta^{k+1} &= \frac{Ap^k \cdot r^k}{Ap^k \cdot p^k} \\ p^{k+1} &= r^k - \beta^{k+1} p^k \\ \alpha^{k+1} &= \frac{r^k \cdot r^k}{Ap^{k+1} \cdot p^{k+1}} \\ u^{k+1} &= u^k + \alpha^{k+1} p^{k+1} \\ r^{k+1} &= r^k - \alpha^{k+1} A p^{k+1}. \end{aligned} \tag{23}$$

Si denotamos $\{\lambda_i, V_i\}_{i=1}^N$ como las eigensoluciones de $A$, i.e. $AV_i = \lambda_i V_i$, $i = 1, 2, ..., N$. Ya que la matriz $A$ es simétrica, los eigenvalores son reales y podemos ordenanrlos por $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_N$. Definimos el número de condición por $Cond(A) = \lambda_N / \lambda_1$ y la norma de la energia asociada a $A$ por $\|u\|_A^2 = u \cdot Au$ entonces

$$\left\| u - u^k \right\|_A \leq \left\| u - u^0 \right\|_A \left[ \frac{1 - \sqrt{Cond(A)}}{1 + \sqrt{Cond(A)}} \right]^{2k}. \tag{24}$$

## 1.3 Método Precondicionado para Matriz Simétrica

Cuando la matriz $A$ es simétrica y positiva definida con $\lambda_1 \leq Cond(A) \leq \lambda_n$ el cual se puede escribir como

$$\lambda_1 \leq \frac{xA \cdot x}{x \cdot x} \leq \lambda_n \tag{25}$$

y tomando la matriz $C^{-1}$ como un precondicionador de $A$ con la condición de que

$$\lambda_1 \leq \frac{xC^{-1}A \cdot x}{x \cdot x} \leq \lambda_n \tag{26}$$

entonces la Ec. (1) se pude escribir como

$$C^{-1}Au = C^{-1}b \tag{27}$$

donde $C^{-1}A$ es también simétrica y positiva definida en el producto interior $\langle u, v \rangle = u \cdot Au$, por que

$$\begin{aligned} \left\langle u, C^{-1}Av \right\rangle &= u \cdot CC^{-1}Av \\ &= u \cdot Av \end{aligned} \tag{28}$$

que por hipótesis es simétrica y positiva definida en ese producto interior.

La elección del producto interior de la Ec. (2) en este caso quedará definido como

$$\langle u, v \rangle = u \cdot C^{-1} A v \tag{29}$$

por ello las Ecs. (19) y (14), se convierten en

$$\alpha^{k+1} = \frac{r^k \cdot r^k}{p^{k+1} \cdot C^{-1} p^{k+1}} \tag{30}$$

y

$$\beta^{k+1} = \frac{p^k \cdot C^{-1} r^k}{p^k \cdot A p^k}. \tag{31}$$

Generando el método de Gradiente conjugado precondicionado con precondicionador $C^{-1}$, es necesario hacer notar que los métodos Gradiente Conjugado y Gradiente Conjugado Precondicionado sólo difieren el la elección del producto interior.

El Método de Gradienete Conjugado, en el cual los datos de entrada es el sistema $Ax = b$, $u^0$ un vector de busqueda inicial y el precondicionador $C^{-1}$. Se calculan para iniciar el algoritmo $r^0 = b - Au^0$, $p = C^{-1} r^0$ entonces el médodo quedaria esquematicamente como

$$\begin{aligned}
\beta^{k+1} &= \frac{p^k \cdot C^{-1} r^k}{p^k \cdot A p^k} \\
p^{k+1} &= r^k - \beta^{k+1} p^k \\
\alpha^{k+1} &= \frac{r^k \cdot r^k}{p^{k+1} \cdot C^{-1} p^{k+1}} \\
u^{k+1} &= u^k + \alpha^{k+1} p^{k+1} \\
r^{k+1} &= C^{-1} r^k - \alpha^{k+1} A p^{k+1}.
\end{aligned} \tag{32}$$

## 1.4 Algoritmo Cómputacional del Método

Dado el sistema $\underline{\underline{A}}\underline{u} = \underline{b}$, con la matriz $\underline{\underline{A}}$ simétrica y definida positiva de dimensión $n \times n$. La entrada al método será una elección de $\underline{u}^0$ como condición inicial, $\varepsilon > 0$ como la tolerancia del método, $N$ como el número máximo de iteraciones y la matriz de precondicionamiento $\underline{\underline{C}}^{-1}$ de dimensión $n \times n$, el algoritmo del método de gradiente conjugado precondicionado queda como:

$\underline{r} = \underline{b} - \underline{\underline{A}}\underline{u}$

$\underline{w} = \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{r}$
$\underline{v} = (\underline{\underline{C}}^{-1})^T\underline{w}$
$\alpha = \sum_{j=1}^{n} w_j^2$
$k = 1$
Mientras que $\quad k \leq N$

Si $\|\underline{v}\|_\infty < \varepsilon \quad$ Salir

$\underline{x} = \underline{\underline{A}}\underline{v}$

$t = \dfrac{\alpha}{\sum_{j=1}^{n} v_j x_j}$

$\underline{u} = \underline{u} + t\underline{v}$

$\underline{r} = \underline{r} - t\underline{x}$

$\underline{w} = \underline{\underline{C}}^{-1}\underline{r}$

$\beta = \sum_{j=1}^{n} w_j^2$

Si $\|\underline{r}\|_\infty < \varepsilon \quad$ Salir

$s = \dfrac{\beta}{\alpha}$

$\underline{v} = \left(\underline{\underline{C}}^{-1}\right)^T \underline{w} + s\underline{v}$

$\alpha = \beta$

$k = k + 1$

La salida del método será la solución aproximada $\underline{u} = (u_1, ..., u_n)$ y el resi-dual $\underline{r} = (r_1, ..., r_n)$.

## 1.5 Construcción para Matriz no Simétrica

Considere la ecuación

$$Pu = b \tag{33}$$

en el caso en que el transpuesto $P^t$ de la matriz $P$ no es igual a $P$. Definimos a la matriz simétrica

$$A = P^t P. \tag{34}$$

Entonces todos los desarrollos anteriores son aplicables, incluyendo las Ec.s (13), (14), (16) y (17). Pero en este caso las expresiones de las Ecs. (14) y (17), se pueden calcular cualquiera que sea el producto interior que se utilice.

Utilizaremos el producto interior natural, pero modificaremos ligeramente la notación utilizada. Así

$$e^m = u_s - u^m \tag{35}$$

pero

$$r^m = P\left(u_s - u^m\right) = b - Pu^m. \tag{36}$$

Además

$$p^{m+1} = Pe^m - \beta^{m+1} p^m = r^m - \beta^{m+1} p^m \tag{37}$$

$$\beta^{m+1} = \frac{P^t r^m \cdot P^t p^m}{P^t p^m \cdot P^t p^m} \tag{38}$$

y la definición inductiva se inicia con

$$p^1 = A(u_s - u^0) = r^0 = b - Pu^0. \tag{39}$$

Por otra parte

$$u^{m+1} = u^m + \alpha^{m+1} P^t p^{m+1} \tag{40}$$

con

$$\alpha^{m+1} = \frac{r^m \cdot r^m}{P^t p^{m+1} \cdot P^t p^{m+1}} \tag{41}$$

## 1.6 Apéndice

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

Demostración.- Utilizaremos el Lema suguiente

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

Demostración.- Usando las Ecs. (16) y (19), se tiene

$$e^k = e^{k+1} - \alpha^k p^k \tag{42}$$

con

$$\alpha^k = (e^{k-1}, Ae^{k-1})/(p^k, p^k) \neq 0. \tag{43}$$

Aplicando la matriz $A$ a esta ecuación se obtiene

$$Ae^k = Ae^{k-1} - \alpha^k Ap^k. \tag{44}$$

La Ec. (44) muestra que los vectores $Ae^k, Ae^{k-1}$ y $Ap^k$, son linealmente dependientes ya que $\alpha^k \neq 0$ por la Ec. (43). Pero $Ae^k \in K_k$ por hipótesis y $Ae^{k-1} \in K_k$ por la propiedad de pertenencia; luego, $Ae^k \in K_k$, que era lo que nos proponiamos demostrar.

Demostración de la proposición.- Observe que

$$K_k = K_{k+1} + \{p^k\} \tag{45}$$

por lo que

$$AK_k = AK_{k-1} + A\{p^k\}. \tag{46}$$

Además

$$AK_{k-1} \subset K_k \quad y \quad A\{p^k\} \in K_k \tag{47}$$

en vista de la Ec. (7) y el Lema A.1, respectivamente. Luego

$$AK_k \subset K_k. \tag{48}$$

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

$$\dim(AK_k) = \dim(K_k). \tag{49}$$

Las Ecs. (48) y (49) juntas, implican que

$$AK_k = K_k. \tag{50}$$

La Ec. (50), significa que $g \in K_k$, si y sólo si, existe $v \in K_k$, tal que

$$Av = g. \tag{51}$$

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

$$Av_k = Ae^k = A(u_s - u^k). \tag{52}$$

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

$$u_s - u^k = v_k. \tag{53}$$

Es decir

$$u_s = u^k + v_k = u^0 + w_k + v_k \tag{54}$$

donde tanto $w_k$ como $v_k$, pertenecen a $K_k$. Claramente, la Ec. (54), exhibe a la solución $u_s$, como un miembro de $K_{k,T}$.

## 2 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, Phyladelphia, 1984.

hestenes, M. R. and E. Stiefel, "Methods of Congugate 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 Sparce Systems of Linear Equations", in J. K. Reid, Ed., Large Sparce Sets of Linear Equations, New York: Academic Press, pp. 231-254, 1971.