

Autovalores generalizados como problema de optimización: Una opción fácil para aplicaciones en problemas físicos reales

*Joyne Contreras

Recibido: 21 de Marzo 2009, Aceptado:10 de Julio 2009

Resumen

El problema de cálculo de autovalores ha ido tomando cada vez mayor valor, debido a las numerosas aplicaciones en las cuales se le ha encontrado un significado importante a los autovalores de las matrices que representan diversos sistemas reales. En aplicaciones específicas, como en mecánica de fluidos, lo que interesa es obtener un autovalor extremo; por tanto, el problema de autovalores puede ser abordado con un enfoque diferente, proponiéndolo como un problema de optimización. En este trabajo se describe la utilidad de calcular autovalores generalizados, de la matriz resultante del sistema de ecuaciones discretas de una aplicación real, como un problema de optimización empleando una función objetivo de tipo polinomial propuesta en 1991 por Auchmuty.

Palabras clave: Autovalores generalizados, optimización, difusión-convección.

Generalized eigenvalues as an optimization problem: an easy option for real applications in physics problems

Abstract

The problem of calculating eigenvalues has taken more importance, due to growing number of applications involving matrices that represents several real system. In specific applications as flow mechanics, the interest is getting an extreme eigenvalues; so the optimization approach emerge as a relevant option. In this work the utility of calculating generalized eigenvalues in the resulting matrix from a discrete equation coming from a real applications, is described as an optimization problem. A polynomial type objective function proposed by Auchmuty is used.

Keywords: Generalized eigenvalues, optimization, diffusion-connection.

Introducción

Desde hace algunos años, el problema de cálculo de autovalores ha ido tomando cada vez mayor valor debido a la gran cantidad de aplicaciones en las cuales se le ha encontrado un significado importante a los autovalores de las matrices que representan diversos sistemas reales, y al desarrollo de métodos numéricos que posibilitan realizar los cálculos. Una de las muchas aplicaciones reales donde el cálculo de autovalores generalizado tiene un significado especial es en el área de la mecánica de fluidos, o transporte de fluidos incompresibles, en los que se contemplan fenómenos del tipo difusivo y del tipo convectivo al mismo tiempo. Cuando se trata de simular el proceso de transporte de fluidos, las ecuaciones que rigen el fenómeno son las conocidas ecuaciones de Stoke o de Navier- Stoke, y los métodos más comunes con los cuales se buscan soluciones numéricas de dichas ecuaciones son: el Método de Diferencias Finitas y el método de los Elementos Finitos. Ambos métodos requieren la discretización de las ecuaciones, lo cual lleva a la formulación discreta del problema.

* *Departamento de Gerencia y Estudios Generales, Universidad Centroccidental "Lisandro Alvarado", Apdo. 400. Barquisimeto, Venezuela, joynecontreras@ucla.edu.ve*

En este tipo de aplicaciones, cuando se elige la metodología para la discretización, es importante conocer la influencia de los fenómenos reales presentes en el sistema en estudio, puesto que estos indicarán si se presentarán problemas en las soluciones numéricas. Es aquí en donde el cálculo de autovalores adquiere importancia física para quien realiza la formulación del modelo matemático del sistema. En este punto, lo que interesa es conocer un autovalor extremo de la matriz resultante luego de la discretización. En mecánica de fluidos, dicho valor está relacionado con una magnitud física adimensional conocida como Número de Péclet, el cual indica si se presentará inestabilidad en el método; es decir, si se tendrán oscilaciones en las soluciones numéricas. [1, 2, 3]. Así, en el caso de transporte de fluidos, interesa conocer un autovalor: el mayor de los autovalores del sistema de ecuaciones resultante de la discretización del modelo.

Al pretender conocer un autovalor del sistema, en este caso uno extremo, se puede pensar en formular el problema del cálculo de autovalores desde otro punto de vista, que resulte ser más conveniente y sencillo; es por eso que, en este trabajo se describe la utilidad de calcular autovalores generalizados, de la matriz resultante del sistema de ecuaciones discretas de una aplicación real, planteando el problema como un problema de optimización irrestricta en el cual se emplea como función objetivo una función polinomial propuesta en 1991 por Auchmuty [6].

Breve descripción de una aplicación real: Transporte de fluidos

El transporte de fluidos involucra fenómenos de convección-difusión, y la ecuación en estado estacionario de estos fenómenos resulta de realizar balances de materia y balances de cantidad de movimiento sobre una región fluida Ω , dando como resultado

$$-\epsilon \nabla^2 u + w \nabla u = f \quad (1)$$

en donde $\epsilon > 0$, es conocido como coeficiente de difusión e indica la facilidad para la transferencia de masa; u representa la concentración de algún soluto que esté siendo transportado a través de una corriente de velocidad \vec{w} y que puede estar sometido a efectos difusivos; f representa fuerzas externas a las que puede estar sometida el fluido.

Al estudiar la ecuación convección difusión es conveniente conocer la relación entre la contribución del término convectivo y del término difusivo; esto se puede hacer normalizando la ecuación (1) respecto al tamaño del dominio y a la magnitud de la velocidad. Así, si denotamos L como escala de una longitud característica del dominio, se especifica la velocidad \vec{w} como $\vec{w} = W \vec{w}_*$ donde W es una constante positiva y \vec{w}_* esta normalizado, y si se trabaja sobre un dominio normalizado, en el cual $u_* = uL$, considerando además que el proceso es conservativo ($f = 0$), la ecuación (1) puede ser reescrita como

$$\nabla^2 u_* + \left(\frac{WL}{\epsilon}\right) \vec{w}_* \nabla u_* = 0 \quad (2)$$

con condiciones tipo Dirichlet

$$\varphi(0) = \varphi_0, \varphi(L) = \varphi_L$$

En la ecuación (2), la relación entre la contribución de la convección y de la difusión viene dada por el término que se conoce como Número de Péclet global

$$P_{eg} \frac{WL}{\epsilon}; \quad (3)$$

también se puede definir el número de Péclet local como

$$P_e \frac{Wh}{\epsilon} \quad (4)$$

en donde h es el tamaño de la partición que se hace al dominio.

La importancia del número de Péclet, radica esencialmente en que a través de él, se puede hacer un análisis de la relación que existe entre los términos convectivo y difusivo. Si el número de Péclet es menor o igual a 1, $Pe \leq 1$, la ecuación (2) está dominada por la difusión, pero si la ecuación (2) presenta $Pe > 1$ entonces quien domina el fenómeno es la convección [3], [1]. A partir de ello se puede hacer el análisis de los problemas de inestabilidad en la ecuación de transporte cuando hay predominancia de la convección. En la discretización por diferencias finitas del problema definido por la ecuación (2), para el caso en el que $Pe > 1$, las soluciones numéricas presentarían oscilaciones. Estas oscilaciones pueden asociarse a una falta de estabilidad del esquema numérico, sin embargo el esquema es estable, lo que sucede es que el término convectivo predomina restándole carácter parabólico a la ecuación [1].

En el caso dinámico, cuando se considera la variación de las variables en función del tiempo, la ecuación de convección-difusión queda expresada por

$$-\epsilon \nabla^2 u + w \nabla u + \frac{\partial u}{\partial t} = f \quad (5)$$

y cambios en el número de Péclet pueden hacer que se altere el tipo de ecuación en derivadas parciales que definen el fenómeno. Cuando $Pe \ll 1$ la ecuación (5) es parabólica, mientras que cuando $Pe > 1$ la ecuación se hace hiperbólica, por el predominio del término convectivo, esto influye en la forma de propagación del fluido. En el caso de ecuaciones hiperbólicas, la información acerca del campo vectorial es transmitida como ondas viajeras, por lo tanto, los efectos de los errores numéricos aparecen como oscilaciones en las soluciones, oscilaciones que no aparecen en la solución real [4].

Todo este análisis preliminar ayuda a escoger esquemas de discretización apropiados, o híbridos de esquemas, que permitan obtener las soluciones aproximadas sin problemas de oscilaciones. Para ello, como se mencionó antes, el conocimiento del autovalor mayor es importante, y el problema del cálculo de autovalores toma ahora sentido, añadiendo un paso previo a la resolución del problema físico.

Cálculo de autovalores por optimización

Existen muchos métodos para el cálculo de autovalores, están los métodos basados en subespacios de Krylov, algunos métodos alternativos tales como la resolución del problema de autovalores generalizados como un problema de sistemas de ecuaciones no lineales, métodos multinivel subestructurados y la resolución del problema de autovalores generalizados como un problema de optimización.

Los más frecuentes son los basados en subespacios de Krylov (KSM), que implican conocer una buena aproximación inicial. Se sabe que los autovalores dominantes, separados del resto del espectro de una matriz A , convergen rápidamente en un KSM estándar. Además, si el vector de arranque es una combinación lineal de algunos de los vectores propios que corresponden a los valores propios deseados, entonces los autovalores de la matriz proyectada son de hecho los autovalores de A [5, 6, 7]. Sin embargo, estas condiciones no son fáciles de satisfacer en aplicaciones reales, lo cual podría traer algunos inconvenientes. Cuando las matrices son mal condicionadas y cuando el autovalor de interés está cercano a los demás autovalores de la matriz, se podría necesitar la construcción de polinomios de alto orden en los KSM para obtener una buena precisión. Aunque el uso de restart implícito reduce el requisito de almacenaje y el coste de ortogonalización requeridos para construir tal polinomio, no se reduce el grado del mismo; por lo tanto, un KSM estándar puede no ser la forma más eficiente de resolver tales problemas debido al gran número de multiplicaciones matriz-vector requeridas.

No obstante, para ciertas aplicaciones, como por ejemplo, en mecánica de fluidos, el interés está en la obtención del mayor de los autovalores del sistema resultante y el problema puede ser abordado desde otra perspectiva, tal como la de optimización, formulando el problema de autovalores generalizados como un problema de optimización irrestricta para matrices simétricas [8, 9].

En los problemas en los cuales las matrices resultantes son hermitianas, y se desea el mayor (o menor) de los autovalores, se puede reformular el problema como uno de optimización, el cual generalmente implica la optimización del Cociente de Rayleigh Generalizado. Sin embargo, Auchmuty en 1991 [6],

presentó funciones objetivo alternativas para resolver el problema de obtener el mayor autovalor generalizado vía optimización. En este trabajo se ha utilizado una de estas funciones objetivos, una función polinomial de $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$P_A(x) = \|x\|^4 - 2\langle Ax, x \rangle. \quad (6)$$

Esta función es suave, no homogénea y sus propiedades variacionales fueron estudiadas por Auchmuty y se presentan en [6]. Una de las más resaltantes propiedades de esta función es que P_A está bien definida para cualquier matriz simétrica; así, si A es una matriz definida positiva, entonces

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} P_A(x) = -\lambda_1^2 \quad (7)$$

siendo $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{n-1} \geq \lambda_n$

Para la función P_A definida en (6), el conjunto de puntos críticos es:

$$\{0\} \cup \sqrt{\lambda_k} e_k | e_k \in S_{\lambda_k}, k = 1, \dots, n.$$

El mínimo de esta función se obtiene en $\sqrt{\lambda_1} e_1$, $e_1 \in S_{\lambda_1}$. Los demás puntos críticos, de la forma $\sqrt{\lambda_j} e_j$, con $\lambda_j \neq \lambda_1$ son puntos de ensilladura para la función. Además, $x=0$ es un máximo local de la función P_A . Por lo tanto, trabajando con (7) se puede obtener el resultado deseado programando cualquiera de los métodos de optimización sin restricciones. En el caso de autovalores generalizados, se puede optar por una factorización de Cholesky de la matriz B , la cual es simétrica positiva definida, y así reescribir el problema como un problema estándar, sustituyendo a la matriz A por $R^{-1}AR$, donde R es la matriz que resulta de la factorización de B . Para esta función resulta fácil determinar su gradiente, el cual queda expresado por

$$\nabla P_A(x) = 4\|x\|^2 x - 4Ax. \quad (8)$$

Usando la función P_A y su gradiente (∇P_A), se pueden lograr buenos resultados sin necesidad de programar algoritmos como Newton, que empleen la Hessiana de la función objetivo. El método de Newton, aunque tiene una convergencia cuadrática requiere, en cada iteración, resolver un sistema de ecuaciones que podría estar mal condicionado, resultando un poco “costoso” (detalles sobre el método de Newton se pueden encontrar en [10, 11]). En la siguiente sección se presentan algunos resultados numéricos, con matrices de prueba, de la optimización de (7) empleando el método de Gradiente Conjugado con line-search inexacto, considerando que para algunas aplicaciones reales (como en transporte de fluidos), lo que interesa es conocer el valor del mayor (o menor) autovalor de la matriz del sistema sin necesidad de una alta precisión; por tanto, puede evitarse el costo del cálculo continuo de la Hessiana de la función objetivo.

Experimentos numéricos

Se programó el método de Fletcher-Reeves, de Gradiente Conjugado, usando un line-search inexacto en matrices de prueba [10, 11, 13]. El algoritmo se muestra a continuación. **Algoritmo**

Dados x_0, ϵ
 Calcular $f(x_0), \nabla f(x_0)$
 Hacer $d_0 = -\nabla f(x_0), k = 0$
 Repetir mientras $|\nabla f(x_k)| > \epsilon$
 Calcular α_k , mediante un line-search
 $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$
 Calcular $\nabla f(x_{k+1})$
 $\beta_k = \frac{\nabla f(x_{k+1})^T \nabla f(x_{k+1})}{\nabla f(x_k)^T \nabla f(x_k)}$

$$d_{k+1} = -\nabla f(x_{k+1}) + \beta_k d_k$$

$$k = k + 1$$

Fin del mientras

La búsqueda del tamaño del paso se realizó mediante un linesearch inexacto, satisfaciendo la primera condición de Wolf.

Linesearch

Dados α_0

Calcular $f(x_k + \alpha_0 d_k)$

Hacer $k = 0$

Repetir mientras $f(x_k + \alpha_0 d_k) > f(x_k) + c_1 \alpha_k d_k$

$\alpha_k = \rho \alpha_k$

Fin del mientras

con $\rho \ll 1$ y $c_1 < \frac{1}{2}$. Se empleó como valor inicial de α , en cada iteración, un $\alpha_0 \in [0, 1, 0, 5]$.

Para matrices de prueba de tamaño $n = 10$ se buscó el autovalor más grande empleando el algoritmo presentado anteriormente, y se encontraron muy buenos resultados en pocas iteraciones. A continuación se presentan algunas gráficas de la norma del gradiente de P_A versus el número de iteraciones, ver figuras 1 En estos ejemplos, el autovalor generalizado más grande es $\lambda_1 = 1$, se empleó el mismo pencil de tamaño

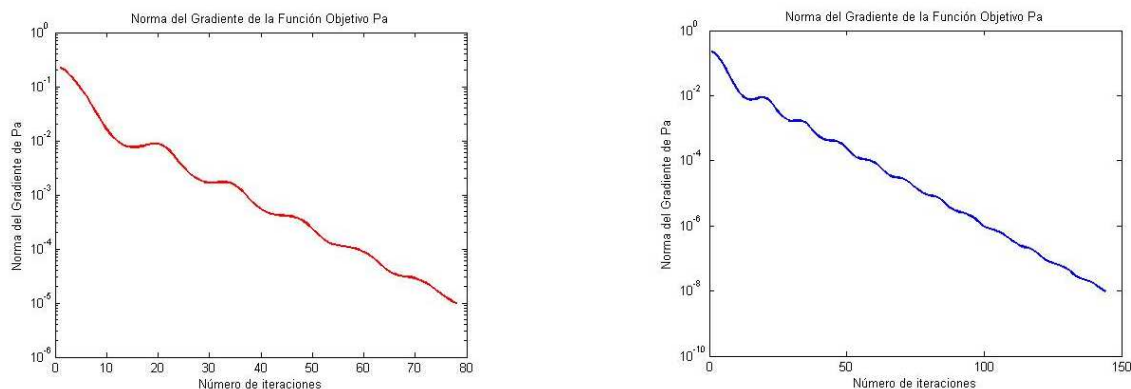


Figura 1: Normas del Gradiente para P_A , tamaño de matriz $n = 10$, empleando FlecherReeves, con $c_1 = 0,1$, $\alpha_0 = 0,5$, $\rho = 0,05$ y tolerancia $\epsilon = 1 \times 10^{-5}, \epsilon = 1 \times 10^{-8}$

$n = 10$, $c_1 = 0,1$, $\alpha_0 = 0,5$ y $\rho = 0,05$, la única diferencia entre los dos experimentos numéricos es la tolerancia, ϵ , colocada en el método para que se detenga. Los resultados obtenidos se pueden ver en el cuadro 1. Se presentan los resultados de otros experimentos con pencil de tamaño $n = 15$, ver figuras 2. En estos ejemplos, el autovalor generalizado más grande es $\lambda_1 = 2,92836074658561$, se empleó el mismo pencil de tamaño $n = 15$, $c_1 = 0,1$, $\alpha_0 = 0,2$ y $\rho = 0,05$, la única diferencia entre los dos experimentos numéricos es la tolerancia, ϵ , colocada en el método para que se detenga. Los resultados obtenidos se pueden ver en el cuadro 2. En los ejemplos se aprecia que la minimización de la función P_A da buenos resultados sin necesidad de exigir una tolerancia muy pequeña para detener el método; vemos como valores de tolerancia de $1e-05$ en el algoritmo, pueden dar buenas aproximaciones al valor del mayor de los autovalores de la matriz, nótese la diferencia entre $\lambda_{1approx}$ y λ_{1real} la cual está en el orden de $1e-09$ a $1e-11$, esto puede ser suficiente cuando se trabaja en aplicaciones reales y se requiere cierta información sobre un autovalor extremo para continuar con el estudio del fenómeno que se esté tratando.

	$Exp1.\varepsilon = 1e^{-05}$	$Exp2.\varepsilon = 1e^{-08}$
k	77	143
$\lambda_{1_{aprox}}$	0.99999999888	1.00000000000
$ \lambda_1 - \lambda_{1_{aprox}} $	$1,1164008606e^{-09}$	$1,11022302462e^{-15}$

Cuadro 1: Resultados para un pencil de $n = 10$

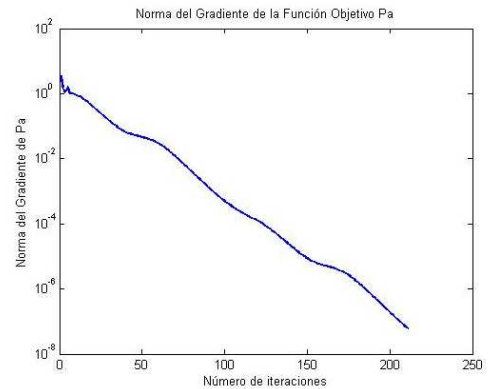
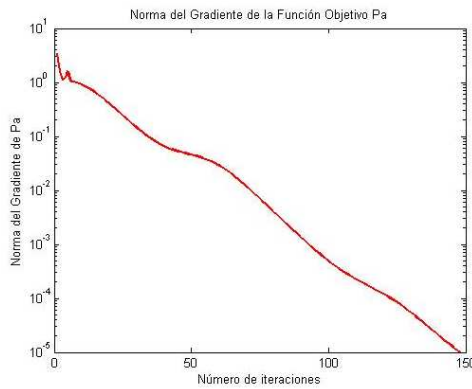


Figura 2: Normas del Gradiente para P_A , tamaño de matriz $n = 15$, empleando FlecherReeves, con $c_1 = 0,1$, $\alpha_0 = 0,2$, $\rho = 0,05$ y tolerancia $\epsilon = 1 \times 10^{-5}, \epsilon = 1 \times 10^{-7}$

Por otra parte, en los ensayos numéricos se observó también, que el número de iteraciones, así como el número de backtracking por iteración, van a depender de la escogencia de los parámetros c_1 y α_0 . Para los experimentos, se comenzó con un valor $\alpha_0 = 0,5$ y se observó que el método tardaba un poco más, realizando en algunas iteraciones un mayor número de backtracking cuando los valores de $c_1 > 0,1$. Se repitieron los mismos ensayos variando los valores de c_1 y α_0 . Con valores de $c_1 = 0,1$, el método realizaba menos iteraciones. En los experimentos 3 y 4, al disminuir α_0 hasta el valor de 0,2 se obtienen los resultados reportados, pero para $\alpha_0 = 0,5$ se pierde la dirección de descenso en la iteración 139, y el algoritmo se queda buscándola, ver cuadros 3 y 4.

	$Exp3.\varepsilon = 1e^{-05}$	$Exp4.\varepsilon = 1e^{-07}$
k	147	210
λ_{1aprox}	2.92836074658561	2.92836074658561
$ \lambda_1 - \lambda_{1aprox} $	$1,322275622328561e^{011}$	$4,440892098500626e^{016}$

Cuadro 2: Resultados para un pencil $n = 15$

$\alpha_0 = 0,5$	Exp. 1	Exp. 2
backtracking por iteración	0	0

Cuadro 3: Promedio de Backtracking por iteración en los experimentos 1 y 2

La función objetivo usada, P_A , presenta todos sus puntos críticos, excepto el que corresponde al mayor de sus autovalores, como puntos de ensilladura por lo que puede resultar fácil que el método pierda la dirección de descenso para tamaños de paso moderados, alrededor de $\alpha_0 = 0,5$

$\alpha_0 = 0,5$	Exp. 3	Exp. 4
backtracking por iteración (primeras 139 iteraciones)	1	1
backtracking por iteración (primeras 140 iteraciones)	Indefinido	Indefinido
$\alpha_0 = 0,2$		
backtracking por iteración (primeras 150 iteraciones)	1	1
backtracking por iteración (primeras 10 iteraciones)	-	1-4

Cuadro 4: Promedio de Backtracking por iteración en los experimentos 3 y 4

Conclusiones

Los métodos alternativos para tratar el problema de autovalores generalizados, como un problema de optimización irrestricta pueden ser una buena elección cuando se desea conocer un autovalor extremo, tal como sucede en ciertas aplicaciones reales.

La idea de trabajar el cálculo de autovalores extremos mediante el planteamiento de un problema de optimización irrestricto, usando algunas de las funciones objetivo propuestas por algunos investigadores en lugar de trabajar con la optimización del Cociente generalizado de Rayleigh, puede dar muy buenos resultados en pocas iteraciones, incluso programando algoritmos que no requieran del cálculo de Hessianas en cada iteración, como sucede con el método de Fletcher-Reeves de Gradiente Conjugado, y sin la necesidad de emplear una tolerancia muy pequeña para detener el método. Trabajando con la función polinómica P_A , propuesta por Auchmuty, puede bastar exigir una tolerancia, para la norma del gradiente de la función, del orden de $1e-05$ para obtener una buena aproximación al autovalor deseado.

En el método de Fletcher-Reeves, con la función objetivo P_A , la escogencia de ciertos parámetros tales como el tamaño inicial del paso, α_0 , y la constante c_1 de la condición de Wolf, juega un papel importante debido a que puede perderse de la dirección de descenso, sobretodo cuando se tienen varios puntos críticos que son del tipo ensilladura. Sin embargo, una adecuada escogencia de los parámetros (c_1 y α_0) puede lograrse fácilmente realizando algunos ensayos numéricos. Así, la opción de un análisis preliminar que permita a priori advertir el comportamiento de algunos fenómenos, por medio del conocimiento de un autovalor extremo, puede incluirse en el estudio del fenómeno a través de una simple optimización irrestricta con un método que no exija mucho.

Referencias

- [1] A. Medina, e I. Herrera. El Número de Péclet y su Significación en la Modelación de Transporte Difusivo de Contaminantes. 4to Congreso Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería y Ciencias Aplicadas. México 2007.
- [2] H. Gómez, I. Colominas, F. Navarrina1, M. Casteleiro. Un Nuevo Enfoque para El Tratamiento de los Términos Difusivos de la Ecuación de Convección-Difusión en el Método de Galerkin Discontinuo. CMNE/CILAMCE 2007
- [3] H. Elman, D. Silvester y A. Whaten. Finite Elements and Fast Iterative Solver: whit Applications in Incompressible Fluid Dynamics. Oxford University Press. 2005.
- [4] K. Beers. Numerical Methods for Chemicals Engineering. Cambridge University Press. 2007.
- [5] B. Parlet. The Symmetric Eigenvalue Problems. SIAM. Classics in Applied Mathematics. 1998.
- [6] D. Watkins. The Matrix Eigenvalue Problem. SIAM. 2007.
- [7] D. Kressner. Numerical Methods for General and Structured Eigenvalue Problems. Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer. 2000.
- [8] C. Yang. Solving Large-Scale Eigenvalue Problems in SciDAC Applications. Computational Research Division, Lawrence Berkeley National Lab.
- [9] G. Auchmuty. Globally and Rapidly Convergent Algorithms for Symmetric eigenproblems. SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 12:690-706, 1991.
- [10] Nocedal and Wright. Numerical Optimizations. Springer. 2006.
- [11] D. Bertsekas. Nonlinear Programming. Athena Scientific. 1999.

- [12] M. Al-Baali. Descent Property and Global Convergence of the Fletcher-Reeves Method with Inexact Line Search. *IMA JOURNAL of Numerical Analysis*, 5(1):121-124. 1985.
- [13] G. Liu; J. Han; H. Yin. Global Convergence of the Fletcher-Reeves algorithm with Inexact Line-search. *Applied Mathematics*, 10(1):75-82. 1995.