

METODI DEL GRADIENTE

Per il problema $Ax=b$, con A matrice simmetrica e definita positiva, consideriamo la classe di problemi equivalenti di punto fisso del tipo:

$$x = x + \alpha(x)(b - Ax) \quad \text{con } \alpha(x): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \text{ e } \alpha(x) \neq 0 \quad \forall x$$

Per questo problema consideriamo l'iterazione semplice:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha(x_k)(b - Ax_k) = x_k + \alpha(x_k)r_k$$

la quale, se converge, converge alla soluzione del sistema lineare assegnato. Tale metodo è caratterizzato dal fatto che ogni punto x_{k+1} della traiettoria è raggiunto dal punto precedente avanzando nella direzione del residuo. Più in generale consideriamo iterazioni del tipo

$$x_{k+1} = x_k + \alpha(x_k)p_k$$

dove le direzioni p_k sono a loro volta definite attraverso il residuo nel seguente modo:

$$p_k = r_k + \beta(x_k)p_{k-1} \quad \text{con } \beta(x_k): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$$

Soffermiamoci dapprima sulla scelta delle costanti $\alpha(x_k)$ che, per brevità di notazione, indicheremo semplicemente con α_k . Esse possono venir individuate, ad ogni passo, in modo da minimizzare la norma ellittica dell'errore, o equivalentemente, il suo quadrato.

Indicando la norma ellittica con:

$$\|z\|_A^2 := z^T A z$$

si tratta quindi di minimizzare, al passo $(k+1)$ -esimo, il funzionale:

$$\Phi(x_{k+1}) := \|x - x_{k+1}\|_A^2 = (x - x_{k+1})^T A (x - x_{k+1})$$

dove

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k.$$

Si ottiene così:

$$\begin{aligned}
\Phi(x_{k+1}) &= \|x - x_{k+1}\|_A^2 = (x - x_k - \alpha_k p_k)^T A (x - x_k - \alpha_k p_k) \\
&= (x - x_k)^T A (x - x_k) - 2(\alpha_k p_k)^T A (x - x_k) + (\alpha_k p_k)^T A (\alpha_k p_k) \\
&= \|x - x_k\|_A^2 - 2\alpha_k p_k^T r_k + \alpha_k^2 \|p_k\|_A^2
\end{aligned}$$

il cui minimo è raggiunto per

$$\alpha_k = \frac{p_k^T r_k}{\|p_k\|_A^2}$$

ed e:

$$\Phi(x_{k+1}) := \|x - x_k\|_A^2 - \frac{(p_k^T r_k)^2}{\|p_k\|_A^2} \quad (1)$$

Si osservi che con tale scelta ottimale del parametro α_k si ha, per ogni direzione di discesa p_k , un residuo r_{k+1} ortogonale alla direzione p_k stessa.

Infatti si ha:

$$r_{k+1} = b - Ax_{k+1} = A(x_k + \alpha_k p_k) - b = r_k - \alpha_k A p_k.$$

dalla quale si ricava:

$$\begin{aligned}
p_k^T r_{k+1} &= p_k^T (r_k - \alpha_k A p_k) = p_k^T r_k - \alpha_k p_k^T A p_k \\
&= p_k^T r_k - \frac{p_k^T r_k}{\|p_k\|_A^2} p_k^T A p_k = 0
\end{aligned} \quad (2)$$

E' utile considerare la seguente interpretazione geometrica del metodo.

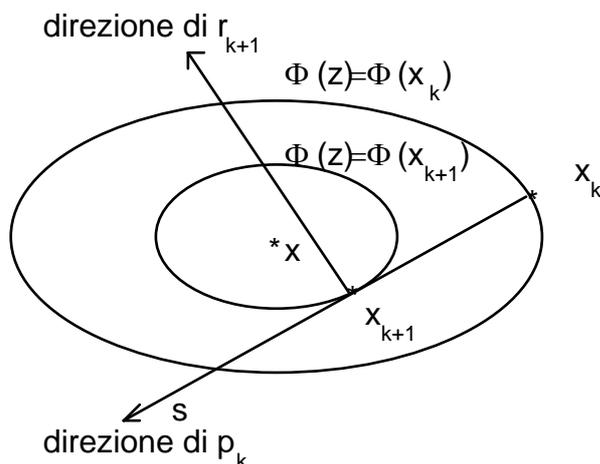
Cominciamo con l'osservare che l'equazione in z:

$$\Phi(z) = (z - x)^T A (z - x) = c$$

rappresenta, al variare di c in $\mathbb{R}^+ \cup \{0\}$, delle ellissi concentriche di centro x. In particolare il punto x_k della traiettoria si trova sull'ellisse

$$\Phi(z) = (x_k - x)^T A (x_k - x) = c.$$

Inoltre il minimo del funzionale $\Phi(z)$ è 0 ed è raggiunto nel punto $z=x$. Poichè il punto x_{k+1} è cercato sulla retta $s=x_k+\xi p_k$, $\xi \in \mathbb{R}$, in modo da minimizzare $(x-x_{k+1})^T A(x-x_{k+1})$, esso si trova sull'ellisse più interna tra tutte quelle che intersecano la retta s , cioè sull'ellisse tangente ad s .



Metodo del gradiente (di discesa piu' ripida). Quando la direzione di discesa è quella del residuo:

$$p_k = r_k,$$

allora la direzione del passo successivo, che è r_{k+1} , risulta ortogonale alla precedente, cioè ortogonale alla curva di livello nel punto x_{k+1} . Tale direzione è quella del gradiente della funzione $\Phi(z)$ nel punto x_{k+1} . Per questo motivo il metodo è detto **metodo del gradiente**. Va inoltre ricordato che per una qualunque funzione regolare $\Phi(z)$, la direzione del gradiente è quella di massima pendenza.

x_0 dato

per $k=0,1,\dots$

$$r_k = b - Ax_k$$

$$\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{r_k^T A r_k} = \frac{\|r_k\|_2^2}{\|r_k\|_A^2}$$

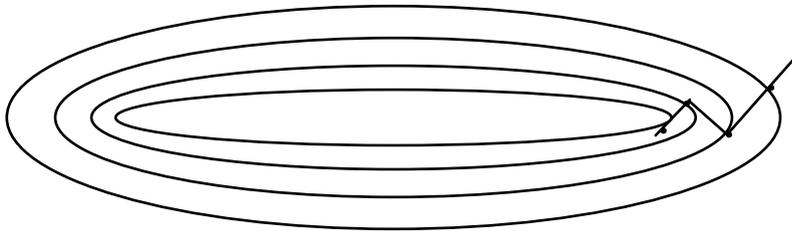
$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k r_k$$

Si dimostra che tale metodo converge per ogni punto iniziale x_0 , ed i valori dei funzionali $\Phi(x_k)$ sono legati dalla relazione:

$$\Phi(x_{k+1}) \leq \left(\frac{K_2(A)-1}{K_2(A)+1} \right)^2 \Phi(x_k) \quad (3)$$

dove $K_2(A)$ è l'indice di condizionamento di A .

Si osservi che quando le ellissi sono molto appiattite, il metodo può risultare molto lento, come illustrato in figura.



Viceversa quando le ellissi sono prossime a cerchi il metodo è molto veloce. Il caso estremo si ha quando $\Phi(z)=c$ è l'equazione di un cerchio centrato in x . In tal caso gli autovalori di A sono tutti uguali e quindi $K_2(A)=1$. Sia l'interpretazione geometrica che la stima (3) mostrano che la soluzione è raggiunta dopo un solo passo.

Metodo del gradiente coniugato. Consideriamo sempre iterazioni del tipo

$$x_{k+1} = x_k + \alpha(x_k)p_k$$

dove il parametro $\alpha(x_k)$ è scelto, come in precedenza, in maniera ottimale. Imponiamo ora che la direzione di discesa al passo k -esimo sia presa nel piano generato dai due vettori p_{k-1} e r_k relativi al passo precedente, che sappiamo essere tra loro ortogonali. Sia dunque, come già considerato all'inizio del paragrafo,

$$p_k = r_k + \beta(x_k)p_{k-1}$$

Fissata la direzione iniziale $p_0=r_0$, il parametro $\beta(x_k)$ sia ancora scelto in modo da minimizzare il funzionale $\Phi(x_{k+1})$. Prima di stabilire qual'è il valore di $\beta(x_k)$ che risponde a questa richiesta, si osservi che in dimensione due il metodo converge alla seconda iterazione. Infatti la prima direzione di ricerca, r_0 , ed il residuo del primo passo, r_1 , sono tra loro ortogonali e quindi generano tutto il piano dove giace la soluzione. Di conseguenza il secondo vettore dell'iterazione sarà la soluzione del sistema.

Per quanto riguarda la determinazione dei coefficienti β_k , si tratta di fissare il parametro β_k in modo da minimizzare il funzionale $\Phi(x_{k+1})$ dato dalla (1).

Poichè $p_k=r_k + \beta_k p_{k-1}$, esso assume la forma:

$$\Phi(x_{k+1}) = \|x-x_k\|_A^2 - \frac{(r_k^T r_k)^2}{\|p_k\|_A^2}$$

e quindi sarà minimizzato per quel valore di β_k che minimizza $\|p_k\|_A^2$.

In modo diretto si trova:

$$\beta_k = - \frac{p_{k-1}^T A r_k}{\|p_{k-1}\|_A^2}$$

Ferma restando la relazione (2) che stabilisce, ad ogni passo k , l'ortogonalità tra la direzione di discesa p_k ed il residuo relativo al punto x_{k+1} :

$$p_k^T r_{k+1} = 0,$$

in questo caso si osserva che *le due direzioni p_{k-1} e p_k sono ortogonali nel prodotto scalare $\langle z|w \rangle := z^T A w$, cioè sono **A-coniugate**.*

Si ha infatti:

$$p_{k-1}^T A p_k = p_{k-1}^T A (r_k + \beta_k p_{k-1}) = p_{k-1}^T A r_k + \beta_k \|p_{k-1}\|_A^2 = 0$$

Per questa ragione il metodo prende il nome di **metodo del gradiente coniugato**.

x_0 dato

$$p_0 = r_0 = b - Ax_0$$

per $k=0,1,\dots$

$$\alpha_k = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k} = \frac{p_k^T r_k}{\|p_k\|_A^2}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = -Ax_{k+1} + b = r_k - \alpha_k A p_k \quad (\text{I'ultima espressione e' piu' economica})$$

$$\beta_{k+1} = -\frac{p_{k-1}^T A r_k}{\|p_{k-1}\|_A^2} = \frac{\|r_{k+1}\|_2^2}{\|r_k\|_2^2} \quad (\text{I'ultima espressione e' piu' economica})$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$$

Si dimostra inoltre che la direzione p_k è A-coniugata non solo a p_{k-1} ma a tutte le precedenti direzioni di discesa e che il residuo r_k è ortogonale a tutti i precedenti residui:

$$p_k^T A p_i = 0, \quad r_k^T r_i = 0 \quad i=0,1,\dots,k-1.$$

Da quest'ultima si evince che il metodo del gradiente coniugato converge in un numero finito di passi non superiore ad n.

Analogamente al metodo del gradiente, vale la seguente stima tra le norme degli errori di due passi successivi:

$$\Phi(x_{k+1}) \leq \left(\frac{\sqrt{K_2(A)} - 1}{\sqrt{K_2(A)} + 1} \right)^2 \Phi(x_k).$$

Anche in questo caso minore è l'indice di condizionamento della matrice, più rapido è lo smorzamento dell'errore. Può accadere che, per matrici sufficientemente ben condizionate, il numero di iterazioni sufficienti ad ottenere una buona approssimazione sia considerevolmente inferiore ad n. In questo caso il metodo è fortemente competitivo con tutti gli altri metodi proposti.

Precondizionamento.

Data l'importanza di avere un indice di condizionamento piccolo sulla matrice del sistema, sarebbe vantaggioso considerare sistemi equivalenti con matrici meglio condizionate. A tale scopo supponiamo di disporre di una matrice simmetrica, definita positiva ed invertibile C tale che per il prodotto $C^{-1}A$ si abbia: $K_2(C^{-1}A) \ll K_2(A)$.

Allora conviene risolvere il sistema equivalente

$$C^{-1}Ax = C^{-1}b$$

Siccome la matrice prodotto $C^{-1}A$ non è più simmetrica si può procedere nel seguente modo. Sia $C^{1/2}$ una matrice simmetrica e definita positiva tale che $C^{1/2}C^{1/2} = C$ (si può dimostrare che una tale matrice, detta "radice quadrata" di C , esiste). Si consideri l'ulteriore sistema, equivalente al precedente:

$$C^{1/2}C^{-1}Ax = C^{1/2}C^{-1}b = C^{-1/2}b$$

$$C^{1/2}C^{-1}AC^{-1/2}C^{1/2}x = C^{-1/2}b$$

$$C^{1/2}C^{-1}AC^{-1/2}y = c \quad \text{dove } y = C^{1/2}x \quad \text{e} \quad c = C^{-1/2}b$$

Poichè la matrice $C^{1/2}C^{-1}AC^{-1/2}$ è simile a $C^{-1}A$, esse hanno lo stesso indice di condizionamento. L'ultimo sistema si può scrivere come

$$C^{-1/2}AC^{-1/2}y = c$$

e può essere risolto con il metodo del gradiente coniugato perchè la sua matrice è simmetrica e definita positiva.

In pratica, non occorre disporre della matrice $C^{1/2}$ o della sua inversa. Infatti l'algoritmo che realizza il metodo del **gradiente coniugato preconditionato** e' il seguente dove, ad ogni passo, e' necessario risolvere un sistema lineare nella matrice C .

Dal punto di vista computazionale, una volta trovata la matrice di preconditionamento C e la sua fattorizzazione LU (o meglio ancora la fattorizzazione di Choleski LL^T), l'unico aggravio consiste nella risoluzione, ad ogni passo, dei due sistemi triangolari in L ed U .

x_0 dato

$r_0 = b - Ax_0$; risolvi $Cp_0 = r_0$, e poni $z_0 = p_0$

per $k=0,1,\dots$

$$\alpha_k = \frac{r_k^T p_k}{p_k^T A p_k} = \frac{r_k^T p_k}{\|p_k\|_A^2}$$

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = b - Ax_{k+1} = r_k - \alpha_k A p_k \quad (\text{l'ultima espressione e' piu' economica})$$

Risolvi $Cz_{k+1} = r_{k+1}$

$$\beta_{k+1} = -\frac{r_{k+1}^T z_{k+1}}{r_k^T z_k}$$

$$p_{k+1} = z_{k+1} + \beta_{k+1} p_k$$

Esempi di preconditionatori:

Esistono in letteratura diversi tipi di preconditionatore, ma la loro individuazione e' basata piu' sull'empirismo che su argomentazioni teoriche. Spesso e' sufficiente prendere $C = \text{diag}(A)$. Un altro preconditionatore molto popolare e' la cosiddetta *fattorizzazione incompleta di Choleski*. Essa consiste nel realizzare l'algoritmo di fattorizzazione di Choleski ponendo pero' uguale a zero tutti gli elementi i cui corrispondenti di A (in riga e colonna) sono nulli. Si ottiene cosi' una matrice tridiagonale L' e si pone $C = L'L'^T$. Esistono varie generalizzazioni del metodo del gradiente per matrici non simmetriche. Essi sono noti come metodi di Krylov. Tra questi c'e' il metodo GMRES (metodo del residuo generalizzato) ed il metodo BiCG (bi-gradiente coniugato) e BiCGstab (bi-gradiente coniugato stabilizzato).