Lab 4 - Metodi iterativi (soluzione)

March 4, 2024

1 Lab 4 - Metodi iterativi

Consideriamo un sistema lineare nella forma

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b},$$

dove $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ e $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ sono noti, mentre $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ è il vettore incognito.

I metodi iterativi si basano sulla seguente idea: se $\mathbf{A} = \mathbf{M}-\mathbf{N}$, con $\mathbf{M}$ invertibile, allora la soluzione del sistema soddisfa

$$\mathbf{x} = \mathbf{M}^{-1}\left(\mathbf{N}\mathbf{x} + \mathbf{b}\right).$$

Visto che quest'ultima è un'equazione di punto fisso, la soluzione si può approssimare con lo schema iterativo

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{M}^{-1}\left(\mathbf{N}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}\right).$$

La matrice $\mathbf{B} := \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}$ è detta *matrice di iterazione*. Se chiamiamo $\mathbf{c} := \mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}$, abbiamo la scrittura equivalente

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{c}.$$

I metodi di Jacobi e di Gauss-Seidel, costruiscono le matrici $\mathbf{M}$ ed $\mathbf{N}$ a partire da una decomposizione in matrici diagonali e tridiagonali. In particolare, se

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{E} - \mathbf{F},$$

con $\mathbf{D}$ diagonale, $\mathbf{E}$ e $\mathbf{F}$ tridiagonali (inferiore e superiore, rispettivamente), allora abbiamo **Metodo di Jacobi** $\mapsto$ $\mathbf{M} = \mathbf{D}$, $\mathbf{N} = \mathbf{E} + \mathbf{F}$ **Metodo di Gauss-Seidel** $\mapsto$ $\mathbf{M} = \mathbf{D} - \mathbf{E}$, $\mathbf{N} = \mathbf{F}$

1.1 Parte 1 - Implementazione

Esercizio 1 Scrivete una function, chiamata *DEFsplit* che, data $\mathbf{A}$, restituisce le corrispondenti matrici $\mathbf{D}, \mathbf{E}, \mathbf{F}$.

Hint: sfruttate le funzioni *diag*, *tril* e *triu* di numpy (o, equivalentemente, di scipy.linalg)!

[ ]:
```python
import numpy as np

def DEFsplit(A):
  D = np.diag(np.diag(A))
  E = -np.tril(A, k = -1)
  F = -np.triu(A, k = 1)
  return D, E, F
```

[ ]:
```python
## Per verificarne il funzionamento...

A = np.array([[6,1,5,8],
              [2,9,1,1],
              [3,7,2,4],
              [7,1,3,5]])

D, E, F = DEFsplit(A)
```

Esercizio 2 Scrivete una function chiamata *Jacobi_Bc* che, dati $\mathbf{A}$ e $\mathbf{b}$, restituisce la matrice d'iterazione $\mathbf{B}$ ed il vettore di shifting $\mathbf{c}$ associati al metodo di Jacobi. Scrivete quindi una seconda funzione, *GS_Bc*, che faccia la stessa cosa ma per il metodo di Gauss-Seidel.

Hint: per Jacobi, $\mathbf{M}^{-1}$ è nota in forma chiusa. Per Gauss-Seidel, potete calcolare l'azione di $\mathbf{M}^{-1}$ su $\mathbf{N}$, piuttosto che $\mathbf{M}^{-1}$ (sfruttate la funzione *solve_triangular* del pacchetto *scipy.linalg*)!

[ ]:
```python
def Jacobi_Bc(A, b = None):

  D, E, F = DEFsplit(A)
  M = D
  N = E+F

  Minv = np.diag(1.0/np.diag(M))
  B = Minv @ N

  if(b is None):
    return B
  else:
    c = Minv @ b
    return B, c
```

[ ]:
```python
from scipy.linalg import solve_triangular

def GS_Bc(A, b = None):

  D, E, F = DEFsplit(A)
  M = D-E
  N = F

  B = solve_triangular(M, N, lower = True)
```

```python
  if(b is None):
    return B
  else:
    c = solve_triangular(M, b, lower = True)
    return B, c
```

Esercizio 3 Scrivete una function chiamata *iterative_solve* che, dati

- $\mathbf{A}$ matrice del sistema
- $\mathbf{b}$ termine noto
- $\mathbf{x}_0$ guess iniziale
- il nome del metodo ("Jacobi" o "GS")

approssimi la soluzione $\mathbf{x}$ con il metodo iterativo corrispondente. La function dovrà accettare anche altri due parametri: **nmax**, cioè il numero massimo di iterazioni, **rtoll**, la tolleranza relativa richiesta. Il particolare, il metodo iterativo va arrestato se

$$\frac{\|\mathbf{r}^{(k)}\|}{\|\mathbf{b}\|} < \mathbf{rtoll},$$

dove $\mathbf{r}^{(k)} := \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{b}$ è il residuo alla k-esima iterazione.

Nota: costruite la function di modo che, in output, essa restituisca la lista delle iterate $[\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N]$.

[ ]:
```python
def iterative_solve(A, b, x0, method, nmax, rtoll):

  r = A @ x0 - b
  bnorm = np.linalg.norm(b)

  if(method == 'Jacobi'):
    B, c = Jacobi_Bc(A, b)
  elif(method == 'GS'):
    B, c = GS_Bc(A, b)
  else:
    raise RuntimeError("Metodo sconosciuto.")

  k = 0
  xiter = [x0]

  while( (np.linalg.norm(r)/bnorm) > rtoll  and k < nmax):
    xold = xiter[-1]
    xnew = B @ xold + c
    xiter.append(xnew)
    r = A @ xnew - b
    k = k+1

  return xiter
```

1.2 Parte 2 - Sperimentazione

Esercizio 4 Si consideri la seguente matrice quadrata

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ R_1 & -R_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & R_1 & -R_2 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & 0 & \ddots & \ddots & & \dots \\ \dots & \dots & & \ddots & \ddots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & R_1 & -R_2 \end{bmatrix}$$

di dimensione $n = 100$, avendo posto $R_1 = 1$ ed $R_2 = 2$. a) Assemblare le matrici di iterazione B_J e B_GS dei metodi di Jacobi e Gauss-Seidel, quindi calcolarne i rispettivi raggi spettrali. La condizione necessaria e sufficiente per la convergenza del metodo iterativo è soddisfatta in entrambi i casi?

Hint: usate la function `eigvals` di `scipy.linalg`. b) Sia $\mathbf{b} = [2, 1, 1, \dots, 1]^\top \in \mathbb{R}^n$. Approssimare la soluzione del sistema lineare $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ con il metodo di Jacobi. Si pongano

$$\mathbf{x}_0 = [0, \dots, 0]^\top, \quad \mathtt{rtoll} = 10^{-6}, \quad \mathtt{nmax} = 1000.$$

Il metodo converge? Se sì, in quante iterazioni?

[ ]:
```python
# Costruzione della matrice A
n = 100
R1, R2 = 1, 2

A = -R2*np.diag(np.ones(n))
A[0,:] = 1
A = A + R1*np.diag(np.ones(n-1), -1)
```

[ ]:
```python
# a) Raggi spettrali

from scipy.linalg import eigvals

Bj = Jacobi_Bc(A)
BGS = GS_Bc(A)

rhoj = np.max(np.abs(eigvals(Bj)))
rhoGS = np.max(np.abs(eigvals(BGS)))
```

[ ]:
```python
print("Raggio spettrale Jacobi: %.4f" % rhoj)
print("Raggio spettrale Gauss-Seidel: %.4f" % rhoGS)
```

```
Raggio spettrale Jacobi: 0.7071
Raggio spettrale Gauss-Seidel: 1.0000
```

[ ]:
```python
# b) Applicazione di Jacobi

b = np.ones(n)
```

```
b[0] = 2

x0 = np.zeros(n)

xiter = iterative_solve(A, b, x0, method = 'Jacobi', nmax = 1000, rtoll = 1e-6)
```

[ ]:
```
print("Numero iterazioni: %d.\n" % len(xiter))
print("Soluzione approssimata:")
xiter[-1]
```

```
Numero iterazioni: 48.

Soluzione approssimata:
```

[ ]:
```
array([49.99999456, 24.5000007 , 11.75000307,  5.37500118,  2.18749906,
        0.59374894, -0.20312506, -0.601562  , -0.80078097, -0.90039074,
       -0.95019551, -0.9750977 , -0.98754875, -0.99377435, -0.99688722,
       -0.99844364, -0.99922181, -0.99961089, -0.99980544, -0.99990272,
       -0.99995137, -0.99997568, -0.99998784, -0.99999392, -0.99999696,
       -0.99999848, -0.99999924, -0.99999962, -0.99999981, -0.9999999 ,
       -0.99999995, -0.99999998, -0.99999999, -0.99999999, -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ,
       -1.        , -1.        , -1.        , -1.        , -1.        ])
```

Esercizio 5 Si considerino la matrice ed il termine noto

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 9 & -3 & 1 & & & & \\ -3 & 9 & -3 & 1 & & & \\ 1 & -3 & 9 & -3 & 1 & & \\ & 1 & -3 & 9 & -3 & 1 & \\ & & 1 & -3 & 9 & -3 & 1 \\ & & & 1 & -3 & 9 & -3 \\ & & & & 1 & -3 & 9 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 7 \\ 4 \\ 5 \\ 5 \\ 5 \\ 4 \\ 7 \end{bmatrix}.$$

a) Discutere le proprietà della matrice $\mathbf{A}$ (è simmetrica? è definita positiva*? è a dominanza diagonale per righe?) b) Approssimare la soluzione del sistema lineare $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ con i metodi di Jacobi e di Gauss-Seidel, utilizzando il vettore nullo come guess iniziale. Si ponga `rtoll` $= 10^{-6}$

e `nmax` = 1000. Confrontare il numero di iterazioni necessarie per arrivare a convergenza per i due metodi e commentare i risultati ottenuti. **Hint: sfruttate la function* ***eigvalsh*** *del pacchetto $scipy.linalg $ (perché??)*

[ ]:
```python
# a) Assemblaggio di A e check delle proprietà

n = 7
A = - 3*np.diag(np.ones(n-1), 1) + np.diag(np.ones(n-2), 2)
A = 9*np.diag(np.ones(n)) + A + A.T

# Simmetrica: sì, si vede ad occhio! (oppure, vedasi Es. 7 per un check "al␣
↪calcolatore")
# Dominanza diagonale per righe: sì, si vede ad occhio! (oppure, vedasi Es. 7␣
↪per un check "al calcolatore")

# Definita positiva? Guardiamo il più piccolo degli autovalori

from scipy.linalg import eigvalsh

np.min(eigvalsh(A))
```

[ ]:
```
4.904226454981309
```

[ ]:
```python
# b) Applicazione dei metodi e confronto
b = np.array([7, 4, 5, 5, 5, 4, 7])

x0 = np.zeros(n)

xj = iterative_solve(A, b, x0, method = 'Jacobi', rtoll = 1e-6, nmax = 1000)
xgs = iterative_solve(A, b, x0, method = 'GS', rtoll = 1e-6, nmax = 1000)
```

[ ]:
```python
print("\t\t\tJacobi\tGauss-Seidel\n" + "-"*44)
print("Convergenza:\t\t%s\t%s" % (len(xj)<1000, len(xgs)<1000))
print("Numero di iterazioni:\t%d\t%d" % (len(xj), len(xgs)))
```

```
                        Jacobi  Gauss-Seidel
--------------------------------------------
Convergenza:            True    True
Numero di iterazioni:   50      13
```

1.3 Parte 3 - Metodi pre-implementati: gradiente coniugato

Esercizio 6 La function `cg` del pacchetto `scipy.sparse.linalg` implementa il metodo del gradiente coniugato. Viceversa, la function `gdescent`, disponibile nello script `utils.py`, implementa il metodo del gradiente.

Una volta appurato che entrambi i metodi sono applicabile al problema dell'esercizio 5, a) Approssimare la soluzione del sistema con i metodi del gradiente e del gradiente coniugato. Si utilizzino gli stessi iperparametri usati all'es. 5 (guess iniziale, tolleranza relativa, numero massimo di iterazioni).

I metodi convergono? Che soluzione si ottiene? b) Nei due casi, quante iterazioni ci sono volute? *Hint: per* `cg`*, sfruttate l'input opzionale* `callback`!

[ ]:
```
from scipy.sparse.linalg import cg

x, info = cg(A, b, x0, tol = 1e-6, maxiter = 1000, callback = lambda xk:␣
 ↪print("step!"))

print("\nSoluzione approssimata (CG):")
print(x)
```

```
step!
step!
step!
step!

Soluzione approssimata (CG):
[1. 1. 1. 1. 1. 1. 1.]
```

[ ]:
```
from utils import gdescent
xg = gdescent(A, b, x0, nmax = 10000, rtoll = 1e-5)

print("Soluzione approssimata (Gradient descent):")
print(xg[-1])
```

```
Soluzione approssimata (Gradient descent):
[0.99999958 0.99999228 0.99999331 0.99998581 0.99999331 0.99999228
 0.99999958]
```

[ ]:
```
len(xg) # numero iterazioni metodo del gradiente
```

[ ]:
```
18
```

1.4 Esercizi per casa

Esercizio 7 Scrivete le seguenti function a valori booleani (vero o falso):

- **sym** che, data $\mathbf{A}$, restituisce `True` se e solo se $\mathbf{A}$ è simmetrica;
- **sdp** che, data $\mathbf{A}$, restituisce `True` se e solo se $\mathbf{A}$ è simmetrica definita positiva;
- **rowdom** che, data $\mathbf{A}$, restituisce `True` se e solo se $\mathbf{A}$ è a dominanza diagonale per righe.

[ ]:
```
def sym(A):
  return np.min(np.abs(A-A.T))<1e-15

def sdp(A):
  if(sym(A)):
    return np.min(eigvalsh(A))>0
```

```
  else:
    return False

def rowdom(A):
  d = np.diag(A)
  Aoff = A-np.diag(d)
  off_sums = np.sum(np.abs(Aoff), axis = 1)

  return np.all(np.abs(d) >= off_sums)
```

Esercizio 8 Si considerino la matrice pentadiagonale ed il termine noto

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 5 & -1 & -1 & & & & \\ -1 & 5 & -1 & -1 & & & \\ -1 & -1 & 5 & -1 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & -1 & 5 & -1 & -1 \\ & & & -1 & -1 & 5 & -1 \\ & & & & -1 & -1 & 5 \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.2 \\ 0.2 \\ \vdots \\ 0.2 \\ 0.2 \\ 0.2 \end{bmatrix}.$$

a) La matrice $\mathbf{A}$ è simmetrica definitiva positiva? b) Approssimare la soluzione del sistema lineare con i metodi di Jacobi, Gauss-Seidel, Gradiente e Gradiente Coniugato (si utilizzi il vettore nullo come guess iniziale, 10^{-5} come tolleranza relativa, 10000 come numero massimo di iterazioni). c) Plottare l'andamento del residuo relativo $\|\mathbf{r}^{(k)}\|/\|\mathbf{b}\|$ in funzione delle iterate k, mettendo così a paragone i quattro metodi.

[ ]:
```
# a) Assemblaggio matrice e check proprietà
n = 50
A = -np.diag(np.ones(n-1), 1)-np.diag(np.ones(n-2), 2)
A = 5*np.diag(np.ones(n)) + A + A.T

sdp(A)
```

[ ]:
```
True
```

[ ]:
```
# b) Applicazione dei metodi iterativi

b = 0.2*np.ones(n)
x0 = np.zeros(n)

# Gradiente
xgd = gdescent(A, b, x0 = x0, rtoll = 1e-5, nmax = 10000)

# Gradiente coniugato (sfruttiamo il callback per salvare le iterate: ci␣
↪servirà dopo)
xcg = [x0]
cg(A, b, x0 = x0, tol = 1e-5, maxiter = 10000, callback = lambda xk: xcg.
↪append(xk+0.0))
```

```python
# Jacobi
xj = iterative_solve(A, b, x0, method = 'Jacobi', rtoll = 1e-5, nmax = 10000)

# Gauss-Seidel
xgs = iterative_solve(A, b, x0, method = 'GS', rtoll = 1e-5, nmax = 10000)
```

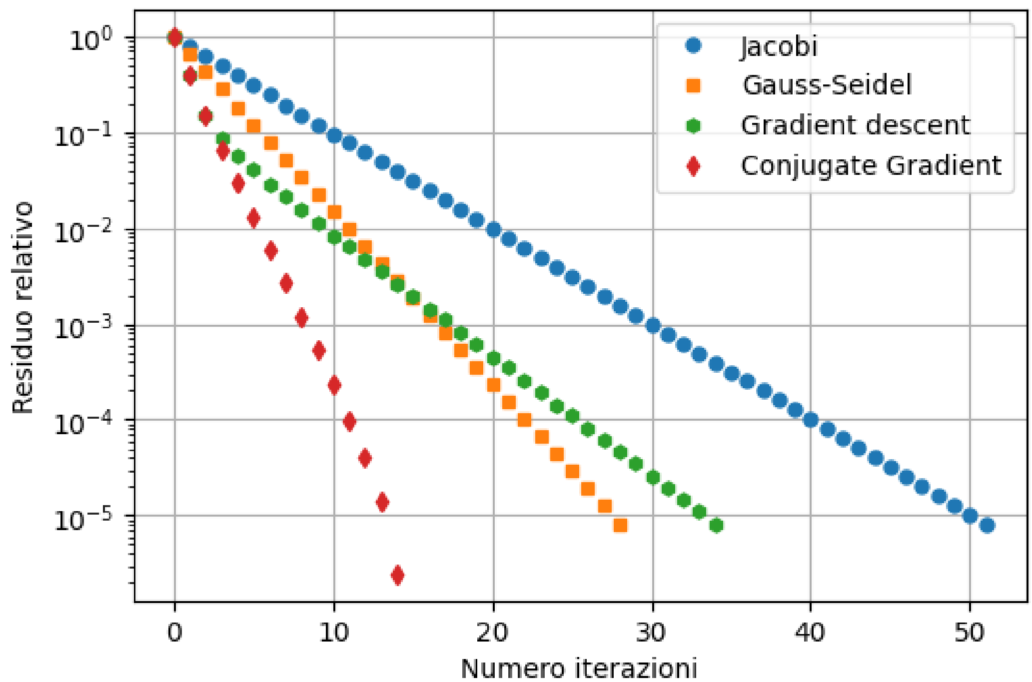
[ ]:
```python
# c) Calcolo dei residui e plot
bnorm = np.linalg.norm(b)

rj = [np.linalg.norm(A@xk-b)/bnorm for xk in xj]
rgs = [np.linalg.norm(A@xk-b)/bnorm for xk in xgs]
rgd = [np.linalg.norm(A@xk-b)/bnorm for xk in xgd]
rcg = [np.linalg.norm(A@xk-b)/bnorm for xk in xcg]
```

[ ]:
```python
import matplotlib.pyplot as plt

# Plot in scala logaritmica sulle y

plt.figure(figsize = (6, 4))
plt.semilogy(rj, 'o', label = 'Jacobi', markersize = 5)
plt.semilogy(rgs, 's', label = 'Gauss-Seidel', markersize = 5)
plt.semilogy(rgd, 'h', label = 'Gradient descent', markersize = 5)
plt.semilogy(rcg, 'd', label = 'Conjugate Gradient', markersize = 5)
plt.grid()
plt.legend()
plt.xlabel("Numero iterazioni")
plt.ylabel("Residuo relativo")
plt.show()
```


Jacobi
Gauss-Seidel
Gradient descent
Conjugate Gradient
Residuo relativo
Numero iterazioni
10^0
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
10^{-4}
10^{-5}
0
10
20
30
40
50