

Esercitazione 3

Soluzione di Sistemi di Equazioni Lineari: Metodi Iterativi

I metodi del gradiente

Si tratta di metodi di Richardson *dinamici* corrispondenti a particolari scelte del parametro α_k e utilizzati con matrici A simmetriche e definite positive. In particolare, il metodo del *gradiente* corrisponde alla scelta $P = I$ e

$$\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}^{(k)})^T \mathbf{r}^{(k)}}{(\mathbf{r}^{(k)})^T A \mathbf{r}^{(k)}}, \quad \forall k \geq 0,$$

essendo $\mathbf{z}^{(k)} \equiv \mathbf{r}^{(k)}$ per ogni $k \geq 0$ in tal caso. Il metodo del *gradiente precondizionato* si ottiene invece per $P \neq I$ non singolare e

$$\alpha_k = \frac{(\mathbf{z}^{(k)})^T \mathbf{r}^{(k)}}{(\mathbf{z}^{(k)})^T A \mathbf{z}^{(k)}}, \quad \forall k \geq 0.$$

Il metodo del gradiente in particolare è un metodo iterativo che determina l'iterata $\mathbf{x}^{(k+1)}$ tale per cui $\Phi(\mathbf{x}^{(k+1)}) = \Phi(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{r}^{(k)})$ è minimo lungo la direzione di discesa $\mathbf{r}^{(k)}$, essendo $\Phi(\mathbf{y}) = \frac{1}{2} \mathbf{y}^T A \mathbf{y} - \mathbf{y}^T \mathbf{b}$. Nel metodo del gradiente le direzioni di discesa sono rappresentate dai residui $\mathbf{r}^{(k)}$, tali per cui $\mathbf{r}^{(k+1)} \cdot \mathbf{r}^{(k)} = 0$ per ogni $k \geq 0$.

Se A e P sono simmetriche e definite positive, il metodo del gradiente (precondizionato) converge per ogni scelta di $\mathbf{x}^{(0)}$ e vale:

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}\|_A \leq d^k \|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}\|_A, \quad \forall k \geq 0,$$

essendo $d = \frac{K(P^{-1}A) - 1}{K(P^{-1}A) + 1}$ e $K(P^{-1}A) = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}$ il numero di condizionamento spettrale di $P^{-1}A$; $\|\mathbf{v}\|_A = \sqrt{\mathbf{v}^T A \mathbf{v}}$ è la norma dell'energia del vettore \mathbf{v} con A una matrice simmetrica e definita positiva.

I metodi del gradiente coniugato

Una valida alternativa al metodo del gradiente è il metodo del *gradiente coniugato*. La principale differenza si trova nella scelta della direzione di discesa, che non sarà più $\mathbf{r}^{(k)}$, bensì una generica $\mathbf{p}^{(k)}$. Il parametro di rilassamento α_k sarà tale da minimizzare $\Phi(\mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)})$, perciò:

$$\alpha_k = \frac{(\mathbf{p}^{(k)})^T \mathbf{r}^{(k)}}{(\mathbf{p}^{(k)})^T A \mathbf{p}^{(k)}}.$$

Le direzioni di discesa $\mathbf{p}^{(k)}$ invece vengono costruite in modo tale da essere A -ortogonali, ovvero ortogonalili rispetto al prodotto scalare indotto da A tra di loro: $(\mathbf{p}^{(k)})^T A \mathbf{p}^{(j)} = 0$ per $k \neq j$. Osserviamo che il metodo del gradiente coniugato *non* è un metodo di Richardson. Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ è simmetrica e definita positiva, il metodo del *gradiente coniugato* converge a \mathbf{x} per ogni scelta di $\mathbf{x}^{(0)}$ in *al più n iterazioni* (in aritmetica esatta) e

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}\|_A \leq \frac{2c^k}{1+c^{2k}} \|\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{x}\|_A \quad \text{per } k = 0, 1, \dots,$$

dove $c = \frac{\sqrt{K(A)} - 1}{\sqrt{K(A)} + 1}$ e $K(A)$ è il numero di condizionamento spettrale di A .

Sia P una matrice non singolare e simmetrica e definita positiva; inoltre sia $P^{\frac{1}{2}}$ la matrice tale che $P^{\frac{1}{2}}P^{\frac{1}{2}} = P$. Il metodo del *gradiente coniugato precondizionato* (PCG) per la soluzione del sistema lineare $Ax = b$ consiste nell'applicare l'algoritmo del gradiente coniugato sul sistema

$$P^{-\frac{1}{2}}AP^{-\frac{1}{2}}y = P^{-\frac{1}{2}}b, \quad x = P^{-\frac{1}{2}}y.$$

Se A e P sono simmetriche e definite positive, la convergenza del metodo del gradiente coniugato è garantita per ogni scelta di $x^{(0)}$ e la velocità di convergenza del metodo dipende da $K(P^{-1}A)$ invece che da $K(A)$.

La funzione Matlab® `pcg` implementa il metodo del gradiente coniugato precondizionato. La sintassi per il comando è `[x,FLAG,RES,ITER]=pcg(A,b,TOL,MAXIT,P)`, dove `TOL` è la tolleranza per il criterio d'arresto (se non specificata, impostata a 10^{-6}), `MAXIT` il numero massimo di iterazioni (default: 20), `P` la matrice di precondizionamento (se non specificata, viene considerata la matrice identità, ossia non viene effettuato il precondizionamento), `x0` di default `0`, `x` la soluzione del sistema, `RES` il residuo legato alla soluzione e `ITER` il numero di iterazioni effettuate.

Esercizio 1

Si consideri il problema lineare $Ax = b$, dove la matrice $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ è pentadiagonale:

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & & \\ -1 & 4 & -1 & -1 & \\ -1 & -1 & 4 & -1 & -1 \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & -1 & 4 & -1 & -1 \\ & & & -1 & -1 & 4 & -1 \\ & & & & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.2 \\ 0.2 \\ \vdots \\ 0.2 \\ 0.2 \\ 0.2 \end{bmatrix}. \quad (1)$$

Si vuole risolvere tale problema con i metodi del gradiente, soddisfacendo una tolleranza di 10^{-5} , a partire dal vettore soluzione iniziale $x^{(0)} = (0, \dots, 0)^T$.

1. Si implementi la funzione `gradiente.m` in grado di applicare il metodo del *gradiente precondizionato* ad un generico sistema lineare. La funzione deve avere la seguente intestazione:

```
[x, k] = gradiente(A, b, P, x0, tol, nmax),
```

dove A è la matrice del sistema lineare, b è il termine noto, P è il precondizionatore, $x0$ è il vettore iniziale, tol è la tolleranza (per il criterio di arresto del residuo normalizzato) e $nmax$ è il numero massimo di iterazioni; in uscita la funzione restituisce la soluzione ottenuta x ed il numero di iterazioni svolte k .

2. Si risolva ora il sistema lineare (1) precedente con il metodo del gradiente usando opportunamente la funzione `gradiente.m`. Quante iterazioni vengono effettuate? Rappresentare, in scala semilogaritmica, l'andamento degli errori relativi e dei residui normalizzati in funzione delle iterazioni k .
3. Si ripeta il punto precedente usando ora il metodo del gradiente coniugato tramite la funzione Matlab® `pcg`.
4. Si risolva il sistema lineare (1) per $n = 16, 32, 64, 128$, e 256 , visualizzando in un grafico l'andamento del numero di iterazioni effettuate da `gradiente.m` e `pcg`. Cosa si osserva? Confrontare, al variare di n , l'andamento del numero di iterazioni necessarie per il metodo con l'andamento del numero di condizionamento spettrale di A .

5. Si ripetano i punti 2 e 3 con i metodi del gradiente e gradiente coniugato precondizionato usando la matrice

$$P = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Esercizio 2

Si testi l'efficacia del precondizionamento sul seguente problema.

Per $n = \{10, 20, \dots, 100\}$

1. si costruisca la matrice A simmetrica e definita positiva di Wathen di ordine $n \times n$, mediante il comando `A = gallery('wathen',n,n)`, ed il termine noto $\mathbf{b} = (1, \dots, 1)^T$ di dimensioni compatibili con A;
2. si risolva il sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ con il comando `pcg`, senza precondizionamento, con tolleranza 10^{-6} ;
3. si risolva il sistema mediante il comando `pcg`, con la medesima tolleranza, utilizzando la matrice di precondizionamento di Jacobi (ossia la matrice D che ha gli stessi elementi di A sulla diagonale principale ed è nulla altrove).

Si confronti quindi il numero di iterazioni necessarie per la convergenza dei due metodi PCG (con e senza precondizionatore), al variare di n .