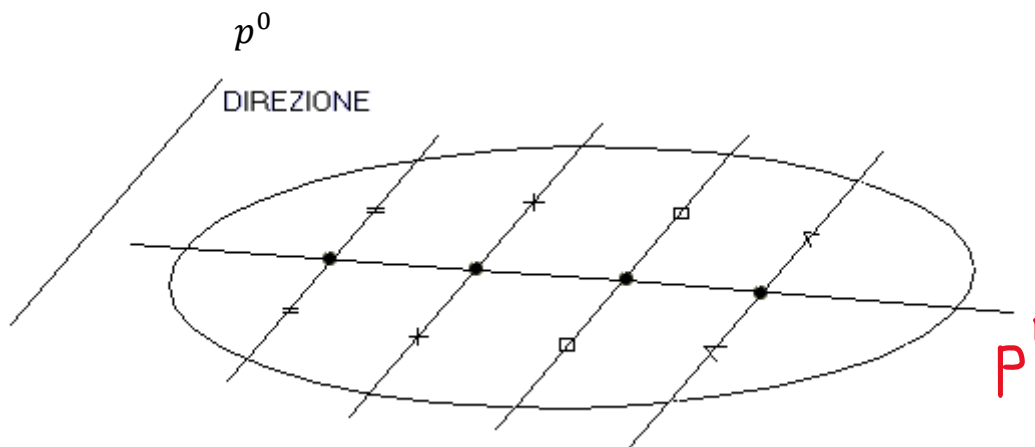


I METODI DI DISCESA

Il gradiente coniugato

Definizione di direzioni coniugate

Data un' ellisse ed una direzione p^0 , tutti i punti medi delle corde parallele alla direzione sono allineati e formano una direzione p^1 che si dice coniugata alla direzione data.



Due direzioni $p^{(k)}, p^{(k-1)}$ coniugate rispetto all'ellisse soddisfano la relazione:

$$\langle Ap^{(k)}, p^{(k-1)} \rangle = \langle p^{(k)}, Ap^{(k-1)} \rangle = 0.$$

dove A è la matrice dell'ellisse.

1. Metodo del Gradiente Coniugato

In questo metodo la scelta della direzione di discesa $p^{(k)}$ tiene conto non solo del gradiente della $F(x^{(k)})$ cioè di $r^{(k)}$, ma anche della direzione di discesa dell'iterazione precedente $p^{(k-1)}$. In particolare nel metodo del Gradiente Coniugato, al generico passo k , partendo dal punto $x^{(k)}$ che è stato ottenuto muovendosi lungo la direzione $p^{(k-1)}$, e in cui è stato calcolato il residuo $r^{(k)}$ (ortogonale a $p^{(k-1)}$), si sceglie la nuova direzione di discesa come quella appartenente al piano π_k passante per $x^{(k)}$ e individuato dai due vettori ortogonali $r^{(k)}$ e $p^{(k-1)}$.

Più precisamente si ha

$$p^{(k)} = -r^{(k)} + \gamma_k p^{(k-1)}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (6)$$

antigradiente di $f(x_k)$

Poiché il punto di minimo nel piano π_k coincide con il centro dell'ellisse, il parametro γ_k sarà scelto in modo che la direzione $p^{(k)}$ punti verso il centro dell'ellisse, cioè sia il **coniugato**, rispetto all'ellisse, di $p^{(k-1)}$. Ciò significa che deve soddisfare la seguente relazione:

$$\langle Ap^{(k)}, p^{(k-1)} \rangle = \langle p^{(k)}, Ap^{(k-1)} \rangle = 0. \quad (7)$$

Sostituendo l'espressione $p^{(k)} = -r^{(k)} + \gamma_k p^{(k-1)}$ nella seconda delle (7) si ottiene

$$\gamma_k = \frac{\langle r^{(k)}, Ap^{(k-1)} \rangle}{\langle p^{(k-1)}, Ap^{(k-1)} \rangle}. \quad (7\text{-bis})$$

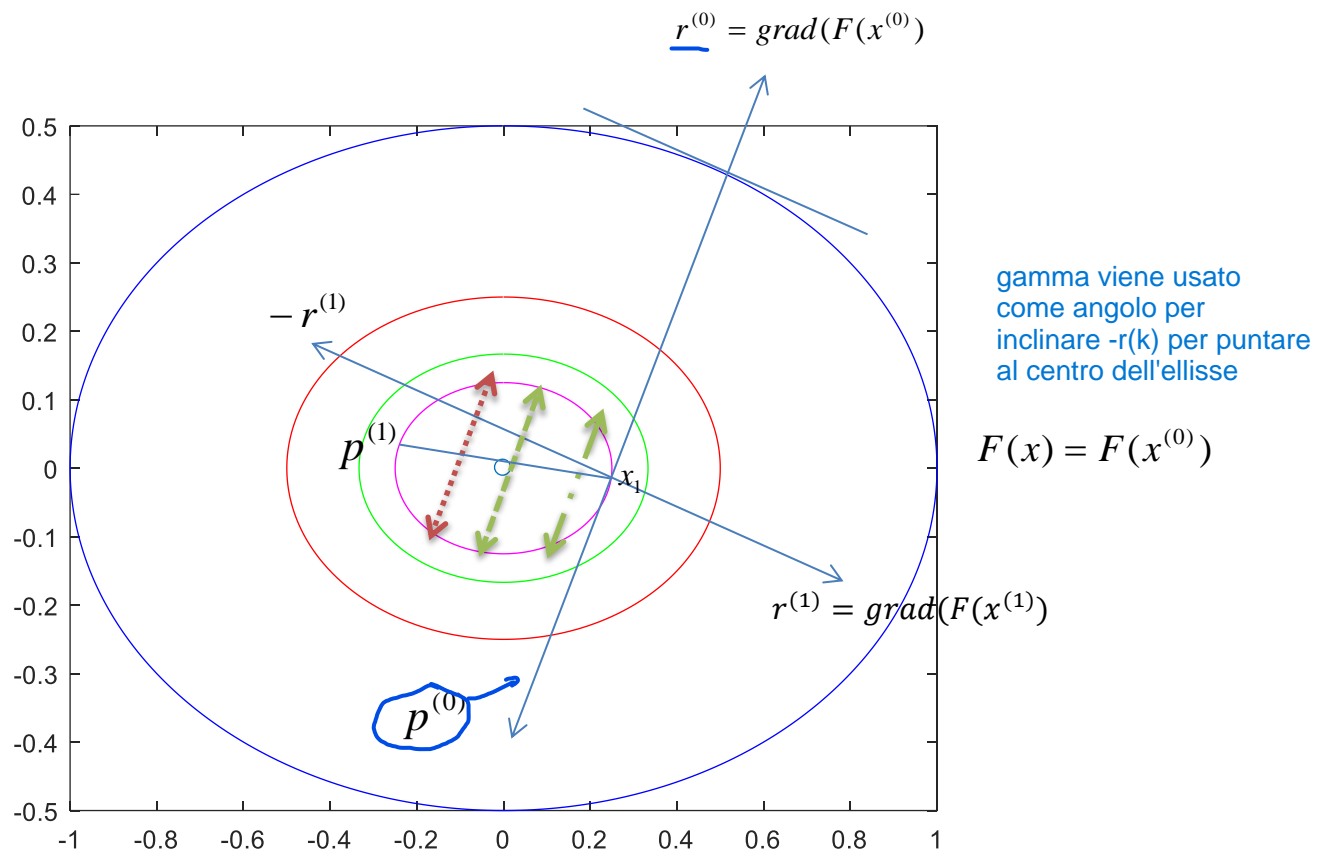
Utilizzando tale valore nella (6) si ottiene la nuova direzione $p^{(k)}$ e il nuovo punto $x^{(k)}$ viene calcolato come punto di minimo nella direzione $p^{(k)}$, cioè

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)} \quad (8)$$

con

$$\alpha_k = - \frac{\langle r^{(k)}, p^{(k)} \rangle}{\langle Ap^{(k)}, p^{(k)} \rangle} > \quad k = 1, 2, \dots \quad (9)$$

Le relazioni (6), (7-bis), (8) e (9) definiscono sostanzialmente il metodo del gradiente coniugato.



La direzione $p^{(1)}$ parte da $x^{(1)}$, appartiene al piano individuato da $-r^{(1)}$ e $p^{(0)}$ ed è coniugata rispetto a $p^{(0)}$, cioè è la direzione congiungente i punti medi delle corde parallele alla direzione $p^{(0)}$ e passa quindi per il centro delle ellissi che corrisponde al minimo del funzionale.

Quindi il metodo del gradiente coniugato, nel caso $n=2$, raggiunge la soluzione in 2 passi.

Ci avvaliamo ora di alcuni risultati che permettono di semplificarne le formule riducendone la complessità computazionale.

La prima semplificazione si ottiene osservando che per il residuo è possibile definire una formula ricorsiva che lo aggiorna utilizzando una quantità che è necessaria anche per calcolare altre grandezze, cioè

$$r^{(k)} = Ax^{(k)} - b = Ax^{(k-1)} - b + \alpha_k Ap^{(k)}$$

cioè

$$r^{(k)} = r^{(k-1)} + \alpha_k Ap^{(k)}. \quad (10)$$

La seconda semplificazione segue dal seguente

Teorema:

Nel metodo del gradiente coniugato le direzioni di discesa $p^{(k)}$, con $k=0,1,\dots$, formano un sistema di direzioni coniugate, mentre i vettori residui $r^{(k)}$, con $k=0,1,\dots$, formano un sistema ortogonale, cioè

$$\langle r^{(k)}, r^{(j)} \rangle = 0 \quad k \neq j, \quad j=0,1,\dots,k-1 \quad (11)$$

$$\langle Ap^{(k)}, p^{(j)} \rangle = 0 \quad k \neq j, \quad j=0,1,\dots,k-1. \quad (11\text{bis})$$

Ciò significa che la direzione $p^{(k)}$ è 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:

Osservazione: Poiché in \mathbb{R}^n non si possono avere più di n vettori che costituiscono un sistema ortogonale, in linea teorica questa classe di metodi appartiene ai metodi diretti poiché viene costruita una successione $\{x^{(k)}\}_{k=0,1,\dots}$ di vettori tali che

$$x^{(k)} = x^* = A^{-1}b \quad \text{quando } k = n-1.$$

In pratica, però, a causa degli errori di arrotondamento, il metodo non termina al passo $k=n-1$ e viene quindi utilizzato come metodo iterativo.

In molti casi comunque si verifica che il numero di iterazioni che occorrono per raggiungere la precisione richiesta è di gran lunga inferiore alla dimensione del sistema e questo rende il metodo molto utile per problemi di grosse dimensioni.

Utilizziamo ora il fatto che i residui in due passi successivi sono ortogonali per ottenere un'ulteriore proprietà di ortogonalità. Infatti sostituendo nella relazione che esprime il

risultato generale, (cioè che residuo ad ogni passo è ortogonale alla direzione del passo precedente),

$$\langle r^{(k+1)}, p^{(k)} \rangle = 0 \quad (12)$$

l'espressione di $p^{(k)}$ data dalla (6) si ottiene

$$\langle r^{(k+1)}, -r^{(k)} + \gamma_k p^{(k-1)} \rangle = 0$$

$$0 = -\langle r^{(k+1)}, r^{(k)} \rangle + \gamma_k \langle r^{(k+1)}, p^{(k-1)} \rangle$$

utilizzando la proprietà di ortogonalità (11), segue:

$$\langle r^{(k+1)}, p^{(k-1)} \rangle = 0.$$

Quando Prodotto Scalare di due vettori è uguale a zero, sono ortogonali

Si può verificare che in generale:.

$$\langle r^{(k+1)}, p^{(j)} \rangle = 0 \quad j < k+1$$

E' inoltre possibile trovare una nuova espressione semplificata per il parametro α_k dato dalla (9).

Infatti poiché

$$\langle r^{(k)}, p^{(k)} \rangle = \langle r^{(k)}, -r^{(k)} + \gamma_k p^{(k-1)} \rangle = -\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle$$

$$+ \gamma_k \langle r^{(k)}, p^{(k-1)} \rangle = -\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle$$

$\langle r^{(k)}, p^{(k-1)} \rangle = 0$ perché il residuo ad ogni passo è ortogonale alla direzione al passo precedente

si ottiene

$$\alpha_k = \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle A p^{(k)}, p^{(k)} \rangle} \quad k = 1, 2, \dots \quad (13)$$

Da questa formula si vede che se il residuo non è nullo α_k è sempre positivo.

Utilizzando ora la formula ricorrente (10) per il residuo e la nuova espressione (13) di α_k è possibile trovare una formula computazionalmente più efficiente per γ_k .

e quindi l'espressione di γ_k diviene

$$\gamma_k = \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}.$$

(14)

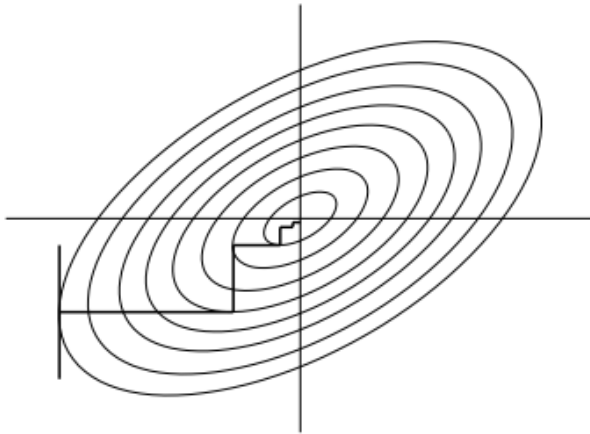
In definitiva l'algoritmo del **Gradiente Coniugato** può essere schematizzato come segue:

```

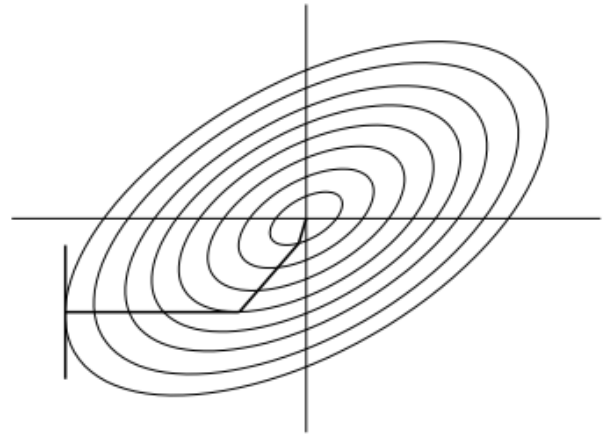
Scelto  $x^{(0)}$  arbitrario, si calcola  $r^{(0)} = Ax^{(0)} - b$ , si prende
 $p^{(0)} = -r^{(0)}$ 
 $k=0$ ;
while arresto  $\geq \varepsilon$ 
     $\alpha_k = \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle Ap^{(k)}, p^{(k)} \rangle}$ 
     $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$ 
     $r^{(k+1)} = r^{(k)} + \alpha_k Ap^{(k)}$ 
    arresto  $= \|r^{(k+1)}\|_2^2$ 
     $\gamma_{k+1} = \frac{\langle r^{(k+1)}, r^{(k+1)} \rangle}{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}$ 
     $p^{(k+1)} = -r^{(k+1)} + \gamma_{k+1} p^{(k)}$ 
     $k=k+1$ 
end while

```

Osservazione: l'algoritmo del gradiente coniugato così ottimizzato necessita di un'unica moltiplicazione matrice per vettore per ogni iterazione.



Steepest descent



Gradiente Coniugato

Velocità di Convergenza

Per il **metodo del gradiente coniugato** vale la seguente relazione

$$\|x^{(k)} - x^*\|_A \leq \left(\frac{\sqrt{K(A)} - 1}{\sqrt{K(A)} + 1} \right)^k \cdot \|x^{(0)} - x^*\|_A$$

cioè

$$e_A^k \leq \left(\frac{\sqrt{K(A)} - 1}{\sqrt{K(A)} + 1} \right)^k \cdot e_A^0$$

che mostra come la convergenza di questo metodo, pur rimanendo sempre legata all'indice di condizionamento di A sia più veloce di quella del metodo di Steepest Descent a parità di valori di $K(A)$.

Comunque, se la matrice A è molto mal condizionata può accadere che siano necessari molti passi di iterazione per ottenere la convergenza.

Poiché l'obiettivo dei metodi iterativi è quello di ottenere una buona approssimazione della soluzione del sistema $Ax = b$ con, mediamente, poche iterazioni, sono state studiate tecniche di preconditionamento che trasformano il problema originale in un problema equivalente ma meglio condizionato.

Osservazione:

Poiché la funzione quadratica $F(x)$ data dalla (2) assegnata la $F(x)=\text{cost}$ rappresenta l'espressione di un iperellissoide con eccentricità legata dal rapporto $\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$, possiamo dire che ad una matrice A mal condizionata corrisponde un' iperellissoide molto allungato, mentre ad un $K(A)$ piccolo corrisponde un iperellissoide più arrotondato.