

2. Metodi di proiezione per matrici di grandi dimensioni e sparse. Dato un sistema lineare $Ax = b$, con $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matrice sparsa ed n grande, l'idea di fondo riguardo alla proiezione su spazi di Krylov è approssimare la soluzione del problema in un sottospazio di $\mathcal{V}_m \subset \mathbb{R}^n$, $m \ll n$.

Se m è la dimensione di \mathcal{V}_m , per estrarre tale approssimazione sono necessari m vincoli indipendenti. Un modo classico per descrivere questi vincoli è imporre m condizioni di **ortogonalità**. In particolare, se parliamo di sistemi lineari di equazioni, il residuo $Ax - b$ è vincolato a risultare ortogonale ad m vettori linearmente indipendenti. Questi vettori generano il sottospazio dei vincoli (o *sinistro*) \mathcal{W}_m . Nella pratica è utile distinguere tra due classi di metodi di proiezione: quella **ortogonale** (Galerkin), in cui \mathcal{V}_m e \mathcal{W}_m coincidono, e quella **obliqua** (Petrov-Galerkin), in cui possono anche non avere alcun tipo di legame.

Data un'approssimazione iniziale x_0 della soluzione, il problema di approssimazione mediante proiezione può essere formulato come segue:

$$(2.1) \quad \text{trovare} \quad \tilde{x} \in x_0 + \mathcal{V}_m : (A\tilde{x} - b) \perp \mathcal{W}_m$$

I metodi di proiezione costituiscono un approccio unificante per la risoluzione di molti problemi del calcolo scientifico.

Siano dunque $V_m = [v_1, \dots, v_m]$ e $W_m = [w_1, \dots, w_m]$ matrici le cui colonne formano una base per \mathcal{V}_m e \mathcal{W}_m . Allora, il problema (2.1) diventa:

$$(2.2) \quad \text{trovare} \quad \tilde{x} \in x_0 + V_m y : W_m^T \tilde{x} = W_m^T \cdot (r_0 + AV_m y) = 0$$

da cui

$$(2.3) \quad \tilde{x} = x_0 - V_m (W_m^T AV_m)^{-1} W_m^T r_0$$

Vediamo quali sono le condizioni per cui il metodo di proiezione fornisce una e una sola soluzione:

Teorema (buona posizione) : La **matrice proiettata** $A_p = W_m^T AV_m$ è non-singolare, qualunque siano le basi scelte per \mathcal{V}_m e \mathcal{W}_m , se vale una delle seguenti condizioni:

1. A è definita positiva e $\mathcal{V}_m = \mathcal{W}_m$;
2. A è non-singolare e $\mathcal{W}_m = AV_m$.

Prova [1]: per il primo caso, basta osservare che, essendo \mathcal{V}_m e \mathcal{W}_m coincidenti, allora necessariamente $W_m = V_m G$, con G non singolare, e dunque $A_p = W_m^T AV_m = G^T V_m^T AV_m$. Ora, $V_m^T AV_m$ è definita positiva in quanto A è definita positiva, e quindi A_p è non singolare.

Per il secondo caso, si ha necessariamente $W_m = AV_m G$, con G non singolare, e dunque $A_p = W_m^T AV_m = G^T V_m^T A^T AV_m = G^T (AV_m)^T AV_m$. Ora, AV_m ha rango pieno perchè A è nonsingolare, e dunque $(AV_m)^T AV_m$ è nonsingolare, quindi lo è pure A_p . \diamond

Vediamo ora nei teoremi seguenti la qualità dell'approssimazione:

Teorema : se A è simmetrica e definita positiva e $\mathcal{W}_m = \mathcal{V}_m$, allora \tilde{x} è il risultato di un metodo di proiezione ortogonale se e solo se, detta x la soluzione esatta:

$$E(\tilde{x}) = \min_{\bar{x} \in x_0 + \mathcal{V}_m} E(\bar{x}) \quad \text{con} \quad E(\bar{x}) = (A(\bar{x} - x), \bar{x} - x)^{\frac{1}{2}}$$

Teorema : se A é una matrice quadrata e $\mathcal{W} = A\mathcal{V}$, allora \tilde{x} é tale che

$$\|b - A\tilde{x}\|_2 = \min_{\tilde{x} \in x_0 + \mathcal{V}_m} \|b - A\tilde{x}\|_2$$

Notare che A non deve per forza essere non singolare. Se è singolare, ci possono essere infiniti vettori che soddisfano la condizione di ottimalità. Es. nel problema di Stokes, utilizzando un metodo iterativo si converge ad un vettore di pressione differente a seconda della condizione iniziale (ed in quel caso particolare tutti differiscono per una costante).

É importante sapere cosa succede se \mathcal{V} é un sottospazio invariante di A :

Teorema : se \mathcal{V} é un sottospazio invariante di A , $x_0 = 0$ e $b \in \mathcal{V}$, la soluzione ottenuta mediante un qualunque metodo di proiezione (ortogonale o obliqua) é esatta.

3. Metodi di proiezione su spazi di Krylov. A differenza dei metodi di rilassamento, che applicano le condizioni di annullamento del residuo componente-per-componente secondo una sequenza pre-determinata, i *metodi di Krylov* applicano simultaneamente tutte le condizioni di annullamento del residuo, relativamente ad uno spazio di Krylov la cui dimensione cresce ad ogni iterazione:

$$K_m(A, b) = \text{span}\{b, Ab, A^2b, \dots, A^{m-1}b\}$$

Essendo gli spazi di Krylov generati da vettori del tipo $p(A)v$, dove p è un polinomio, questi metodi approssimano $A^{-1}b$ attraverso $p(A)b$, e quindi $x_m = x_0 + p_{m-1}(A)r_0$ che sta nello spazio di Krylov $K_m(A, r_0)$.

La differenza tra i vari metodi di Krylov sta nella scelta di \mathcal{W}_m e nel modo in cui il sistema viene preconditionato. La scelta di \mathcal{W}_m avviene entro due grandi famiglie: la prima comprende $\mathcal{W}_m = \mathcal{V}_m$ e $\mathcal{W}_m = A\mathcal{V}_m$. La seconda é basata su uno spazio di Krylov \mathcal{W}_m costruito su A^T .

3.1. Il metodo di Arnoldi. La realizzazione di un metodo di proiezione richiede l'applicazione delle condizioni di ortogonalità a tutti gli elementi di una base dello spazio di Krylov K_m . Essa non può essere $\{r_0, Ar_0, A^2r_0, A^i r_0, \dots, A^{m-1}r_0\}$ in quanto tali vettori tendono all'autovettore dominante e quindi sempre più prossimi alla dipendenza lineare.

Invece, il metodo di Arnoldi costruisce la base tramite un processo di ortonormalizzazione, ad esempio di tipo Gram-Schmidt modificato, che ha comunque il vantaggio di richiedere solo di poter calcolare il prodotto di A per un vettore generico v_1 (es. $v_1 = r_0$):

```
V(:,1) = v1    % "v1" e' scelto arbitrariamente, ma di norma unitaria
for j=1,2,...,m
    w = A * V(:,j)
    for i=1:j
        H(i,j) = w' * V(:,i)
        w = w - H(i,j) * V(:,i)
    end
    H(j+1,j) = norm(w)
    if H(j+1,j) == 0 break, end
    V(:,j+1) = w / H(j+1,j)
end
```

Dall'algoritmo si può dedurre che:

$$(3.1) \quad v_{j+1} = (Av_j - h_{1,j}v_1 - \dots - h_{j,j}v_j) / h_{j+1,j}$$

ovvero

$$(3.2) \quad Av_j = \sum_{i=1}^{j+1} h_{i,j}v_i \quad j = 1, \dots, m$$

e quindi, in forma matriciale, avendo posto $H_m = H(1 : m, 1 : m)$,

$$(3.3) \quad AV_m = V_m H_m + h_{m+1,m}v_{m+1}e_m^T = V_{m+1}H$$

da cui

$$(3.4) \quad V_m^T AV_m = H_m$$

cioè la base ortogonale di vettori di Arnoldi, $\{v_j\}$, trasforma A per similitudine in forma di Hessenberg superiore.

Notare che il metodo di Arnoldi richiede come operazione su A solo il calcolo del prodotto Av , per un generico v .

3.1.1. perdita di ortogonalità. Le sottrazioni compiute nell'algoritmo al vettore w possono, in aritmetica a precisione finita, introdurre cancellazioni che amplificano disastrosamente l'errore di arrotondamento. Vi si può porre rimedio in due modi.

Il primo è quello di ripetere l'ortogonalizzazione nel caso in cui la norma di w alla fine dell'iterazione principale sia minore di una frazione prefissata di quella iniziale; è noto [Parlett] che ri-ortogonalizzazioni aggiuntive sono superflue.

Il secondo rimedio è computazionalmente più oneroso e si addice di più quindi al calcolo di autovalori/autovettori (dove il costo dell'ortogonalizzazione viene ammortizzato nel calcolo di più coppie autovalore/autovettore): l'ortogonalizzazione mediante trasformazioni di Householder.

3.1.2. Breakdown benigno. Se succede che $H(j+1, j) = 0$ allora significa che lo spazio di Krylov generato dai vettori $\{v_j\}$ è A -invariante.

In tal caso, la soluzione trovata con il metodo di proiezione è esatta e si parla di *breakdown benigno*.

4. Soluzione di sistemi lineari. Un buon tutorial ed algoritmi si trovano al sito www.netlib.org/templates.

4.1. GMRES.

$$\mathcal{V}_m = \mathcal{K}_m\left\{A, \frac{r_0}{\|r_0\|_2}\right\}$$

$$\mathcal{W}_m = A\mathcal{V}_m$$

Vediamo come calcolare y (cfr. 2.2). Dato che

$$\begin{aligned} b - Ax &= b - A(x_0 + V_m y) = r_0 - AV_m y = (\text{per la (3.3)}) \\ &= V_{m+1}(\|r_0\|_2 e_1 - Hy) \end{aligned}$$

e, ponendo $\beta = \|r_0\|_2$ e dato che le colonne di V_{m+1} sono a due a due ortonormali:

$$\|b - A(x_0 + V_m y)\|_2 = \|\beta e_1 - Hy\|_2$$

e quindi la soluzione diventa:

$$(4.1) \quad y_m = \arg \min_y \|\beta e_1 - Hy\|_2$$

Schematicamente, l'algoritmo GMRES diventa:

- data x_0 e fissato m ,
- $r_0 = b - Ax_0$, $\beta = \|r_0\|_2$, $v_1 = r_0/\beta$
- calcolo V_m con il metodo di Arnoldi;
- calcolo y_m come in (4.1);
- aggiornamento $x_m = x_0 + V_m y_m$;

L'implementazione è contenuta ad esempio nel file `gmres.m` della libreria presente al sito www.netlib.org/templates .

Due questioni fondamentali:

- aggiornamento del residuo senza ricalcolare y_m e tantomeno x_m ad ogni passo, con le trasformazioni di Givens;
- il *restart* dell'algoritmo.

RIFERIMENTI BIBLIOGRAFICI

- [1] Y.Saad, Iterative methods for sparse linear systems, 2nd edition, SIAM, 2003