Metodi iterativi per la soluzione di sistemi lineari

Alvise Sommariva

Università degli Studi di Padova
Dipartimento di Matematica Pura e Applicata

16 maggio 2012

Metodi iterativi e diretti

Supponiamo che siano $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (matrice non singolare), $b \in \mathbb{R}^n$ (vettore colonna) e di dover risolvere il problema $Ax = b$ avente sol. unica x^*. A tal proposito si può utilizzare la fatt. LU con pivoting. Il costo computazionale è in generale di $O(n^3/3)$ operazioni moltiplicative. Questo diventa proibitivo se n è particolarmente elevato.

L'idea dei metodi iterativi è quello di ottenere una successione di vettori $x^{(k)} \rightarrow x^*$ cosicchè per $\bar{k} \ll n$ sia $x^{(\bar{k})} \approx x^*$. In generale, la soluzione non è ottenuta esattamente come nei metodi diretti in un numero finito di operazioni (in aritmetica esatta), ma quale limite, accontentandosi di poche iterazioni ognuna dal costo quadratico. Quindi il costo totale sarà di ordine $O(\bar{k} \cdot n^2)$.

Metodi iterativi stazionari

Supponiamo che la matrice non singolare $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sia tale che

$$A = M - N, \text{ con M non singolare.}$$

Allora $Mx - Nx = Ax = b$ e quindi $Mx = Nx + b$. Moltiplicando ambo i membri per M^{-1} e posto $\phi(x) = M^{-1}Nx + b$ abbiamo $x = M^{-1}Nx + M^{-1}b = \phi(x)$. Viene quindi naturale utilizzare la succ. del metodo di punto fisso

$$x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)}) = M^{-1}Nx^{(k)} + M^{-1}b$$

La matrice $P = M^{-1}N$ si dice di *iterazione* e non dipende, come pure b dall'indice di iterazione k. Per questo motivo tali metodi si chiamano iterativi stazionari.

Quale utile notazione, sia inoltre $A = D - E - F$ con D la matrice diagonale estratta da A, E, F rispettivamente triangolari inferiore e superiore.

Esempio A, E, F

```
>> A=[1 2 3 4; 5 6 7 2; 8 9 1 2; 3 4 5 1]
A =
      1     2     3     4
      5     6     7     2
      8     9     1     2
      3     4     5     1
>> E=-(tril(A)-diag(diag(A)))
E =
      0     0     0     0
     -5     0     0     0
     -8    -9     0     0
     -3    -4    -5     0
>> F=-(triu(A)-diag(diag(A)))
F =
      0    -2    -3    -4
      0     0    -7    -2
      0     0     0    -2
      0     0     0     0
>> % A=diag(diag(A))-E-F.
```

Metodo di Jacobi e di Gauss-Seidel

Nel caso del metodo di Jacobi si ha

$$M = D, \ N = E + F \tag{1}$$

e quindi

$$\begin{aligned} P &= M^{-1}N = D^{-1}(E+F) = D^{-1}(D - D + E + F) \\ &= D^{-1}(D - A) = I - D^{-1}A \end{aligned} \tag{2}$$

Si osservi che se D è non singolare allora il metodo di Jacobi, almeno in questa versione di base, non può essere utilizzato visto che in (4) non ha senso la scrittura D^{-1}.
Il metodo di Gauss-Seidel è definito quale metodo stazionario in cui

$$M = D - E, N = F \tag{3}$$

e quindi

$$P = M^{-1}N = (D - E)^{-1}F \tag{4}$$

Teorema di Hensel

Siano $\{\lambda_k\}_{k=1,\ldots,n}$ gli autovalori di una matrice A. Si definisce raggio spettrale $\rho(A)$ la quantità

$$\max_{k=1,\ldots,n} |\lambda_k|.$$

Teorema. Un metodo iterativo stazionario consistente $x^{(k+1)} = Px^{(k)} + c$ converge per ogni vettore iniziale x_0 e termine noto c se e solo se $\rho(P) < 1$.

Una matrice A si dice tridiagonale se $A_{i,j} = 0$ qualora $|i - j| > 1$.

Esempio:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 5 & 7 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 6 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 3 \end{pmatrix}$$

Teorema. Per matrici tridiagonali $A = (a_{i,j})$ con componenti diagonali non nulle, i metodi di Jacobi e Gauss-Seidel sono o entrambi convergenti o divergenti e il tasso di convergenza del metodo di Gauss-Seidel è il doppio di quello del metodo di Jacobi (il che vuol dire che *asintoticamente* sono necessarie metà iterazioni del metodo di Gauss-Seidel per ottenere la stessa precisione del metodo di Jacobi).

Alcune definizioni

Ricordiamo che A è a predominanza diagonale (per righe) se per ogni $i = 1, \ldots, n$ risulta

$$|a_{i,i}| \geq \sum_{j=1, j \neq s}^{n} |a_{i,j}|$$

e per almeno un indice s si abbia

$$|a_{s,s}| > \sum_{j=1, j \neq s}^{n} |a_{s,j}|.$$

Se per tutti gli indici s si ha $|a_{s,s}| > \sum_{j=1, j \neq s}^{n} |a_{s,j}|$ allora la predominanza diagonale è in senso stretto. Ad esempio la matrice

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -4 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -4 & 4 \end{pmatrix}$$

è a predominanza diagonale per righe (non stretta).

Teoremi di convergenza

- Sia A una matrice quadrata a predominanza diagonale per righe, in senso stretto. Allora il metodo di Jacobi converge alla soluzione di $Ax = b$, qualsiasi sia il punto $x^{(0)}$ iniziale.
- Sia A è a predominanza diagonale per righe, in senso stretto. Allora il metodo di Gauss-Seidel risulta convergente, qualsiasi sia il punto $x^{(0)}$ iniziale.

Tali teoremi valgono se A^T è a predominanza diagonale per righe in senso stretto (cioè A è a predominanza diagonale per colonne in senso stretto).

Alcune definizioni

La matrice A è simmetrica se $A = A^T$. Una matrice A è definita positiva se ha tutti gli autovalori positivi. Ad esempio la matrice

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

è simmetrica e definita positiva:

```
>> A=[4 -1 0; -1 4 -1; 0 -1 4];
>> eig(A) % AUTOVALORI DI A.
ans =
     2.5858
     4.0000
     5.4142
>>
```

Alcuni teoremi di convergenza

Ricordiamo che equivalentemente una matrice A è definita positiva se
$$x^T A x > 0, \text{ per ogni } x \neq 0.$$

Teorema. Sia A una matrice simmetrica, non singolare con elementi principali $a_{i,i} \neq 0$. Allora il metodo di Gauss-Seidel è convergente per qualsiasi scelta del punto iniziale $x^{(0)}$ se e solo se A è definita positiva.

I metodi di discesa

Una classica famiglia di metodi iterativi è quella dei metodi di *discesa*. Sia A una matrice simmetrica definita positiva. Si osserva che se x^* è l'unica soluzione di $Ax = b$ allora è pure il minimo del funzionale

$$\phi(x) = \frac{1}{2} x^T A x - b^T x, \ \ x \in \mathbb{R}^n$$

Un generico *metodo di discesa* consiste nel generare una successione

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

dove $p^{(k)}$ è una direzione fissata secondo qualche criterio. Lo scopo ovviamente è che

$$\phi(x^{(k+1)}) < \phi(x^{(k)}),$$

e che il punto x^*, in cui si ha il minimo di ϕ, venga calcolato rapidamente.

Il gradiente coniugato è un classico esempio di metodo di discesa.

Il metodo del gradiente coniugato (1952).

Supponiamo di dover risolvere il sistema lineare $Ax = b$. Con il termine residuo in $x^{(k)}$ si intende la quantità $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$. La succ. delle iterazioni del gradiente coniugato è quella propria dei metodi di discesa,

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}, \;\; \alpha_k = \frac{(r^{(k)})^T r^{(k)}}{(p^{(k)})^T A p^{(k)}}$$

dove $p^{(0)} = r^{(0)}$ e

$$p^{(k)} = r^{(k)} + \beta_k p^{(k-1)}, \;\; \beta_k = \frac{(r^{(k)})^T r^{(k)}}{(r^{(k-1)})^T r^{(k-1)}}.$$

Con questa scelta si prova che $p^{(k)}$ e $p^{(k-1)}$ sono *A-coniugati*.

$$(p^{(k)})^T A p^{(k-1)} = 0.$$

Il metodo del gradiente coniugato: proprietà

Il metodo del gradiente coniugato ha molte proprietà particolari. Ne citiamo alcune.

- Se A è una matrice simmetrica e definita positiva di ordine n, si può dimostrare che il metodo è convergente e fornisce in aritmetica esatta la soluzione del sistema $Ax = b$ in al massimo n iterazioni.

Questo teorema tradisce un po' le attese, sia perchè in generale i calcoli non sono compiuti in aritmetica esatta, sia perchè in molti casi della modellistica matematica n risulta essere molto alto.

Il metodo del gradiente coniugato: proprietà

Si può dimostrare che se A è simmetrica e definita positiva,

$$\|x\|_A = \sqrt{x^T A x}$$

e

$$e_k = x^* - x^{(k)}$$

allora

$$\|e_k\|_A \leq \left(\frac{\sqrt{K_2(A)} - 1}{\sqrt{K_2(A)} + 1} \right)^{2k} \|e_0\|_A.$$

Questo risultato stabilisce che la convergenza del gradiente coniugato è lenta qualora si abbiano alti numeri di condizionamento

$$K_2(A) := \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\max_i |\lambda_i|}{\min_j |\lambda_j|}$$

(ove al solito $\{\lambda_i\}$ sono gli autovalori di A).

Gradiente coniugato in Matlab

Per quanto riguarda il codice del Gradiente Coniugato, un esempio è il file cg.m tratto da Netlib:

```
function [x,error,iter,flag]=cg(A,x,b,M,max_it,tol)
flag = 0;  iter = 0;  bnrm2 = norm( b );
if  ( bnrm2 == 0.0 ), bnrm2 = 1.0; end
r = b - A*x; error = norm( r ) / bnrm2;
if ( error < tol ) return, end
for iter = 1:max_it
  z  = M \ r; rho = (r'*z);
  if ( iter > 1 )
    beta = rho / rho_1; p = z + beta*p;
  else
    p = z;
  end
  q = A*p; alpha = rho / (p'*q ); x = x + alpha * p;
  r = r - alpha*q;  error = norm( r ) / bnrm2;
  if ( error <= tol ), break, end
  rho_1 = rho;
end
if ( error > tol ) flag = 1; end
```

Esercizio in Matlab I

- Eseguire una routine `iterstat` che implementi, date due matrici M ed N, un metodo iterativo stazionario. Quale criterio di arresto si utilizzi

$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_\infty < \text{tol}$$

  con `tol` tolleranza richiesta dall'utente (es. `tol` $= 10^{(-12)}$).
- Usare `iterstat` per definire `jacobi` e gs che implementano il metodo di Jacobi e Gauss Seidel, per risolvere il problema $Ax = b$. Se necessario usare i comandi `diag`, `tril` e `triu`.
- Si calcoli la matrice di Poisson P_{20} di ordine 20 aiutandosi con

```
>> help gallery
```

Che dimensione ha la matrice P_{20}?

Esercizio in Matlab II

- Sia b il vettore composto di componenti uguali a 1, avente lo stesso numero di righe di P_{20}. Si risolva col gradiente coniugato il problema $P_{20}x = b$. Quante iterazioni servono? E quante con Jacobi e Gauss-Seidel? Come si puó controllare che e' simmetrica attraverso la norma di $A - A^T$? E vedere che é definita positiva? E che il raggio spettrale é minore di 1?