

Corso di Laurea in Ingegneria Civile

Progetto numerico al calcolatore

Parte II

Determinazione dell'autovalore minimo di matrici sparse, simmetriche e definite positive mediante la minimizzazione del quoziente di Rayleigh

Indice

1	Ricerca degli autovalori di matrici quadrate	1
1.1	Il metodo delle potenze	1
2	Applicazione del GCM al problema degli autovalori	3
2.1	Determinazione dell'autovalore minimo	3
2.2	Il problema generalizzato	6
2.3	Scelta della matrice di preconditionamento	8

1 Ricerca degli autovalori di matrici quadrate

Il problema della ricerca degli autovalori λ_i e degli autovettori \mathbf{v}_i ad essi associati in una matrice quadrata A di ordine n :

$$A\mathbf{v}_i = \lambda_i\mathbf{v}_i \quad i = 1, n \quad (1)$$

presenta numerose implicazioni a livello ingegneristico in funzione dell'origine della matrice analizzata. Per esempio, se la matrice A rappresenta la matrice di rigidezza di una struttura elastica, i suoi autovalori ed autovettori corrispondono rispettivamente alle frequenze proprie ed ai modi fondamentali di vibrare, la cui conoscenza costituisce un requisito fondamentale per una corretta progettazione. Un analogo significato viene riscontrato nel caso dell'analisi dinamica di un bacino idrico.

Per tale motivo, oggi esistono numerosi moduli, associati ai programmi in commercio per la soluzione di problemi agli elementi finiti, che consentono la determinazione degli autovalori e degli autovettori della matrice risultante dalla discretizzazione di un modello. Molto spesso l'interesse ingegneristico si concentra sulla conoscenza del solo autovalore massimo o di quello minimo, più raramente risulta necessario determinare l'intero spettro della matrice.

1.1 Il metodo delle potenze

Il metodo più semplice per la soluzione del problema agli autovalori è il cosiddetto *metodo delle potenze* o *di Von Mises*. Si assuma che gli autovalori di A siano ordinati $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|$ e che gli n autovettori corrispondenti siano linearmente indipendenti. Scelto arbitrariamente nello spazio \mathbb{R}^n il vettore iniziale \mathbf{z}_0 e costruita la successione di vettori \mathbf{z}_k mediante la formula ricorrente:

$$\mathbf{z}_{k+1} = A\mathbf{z}_k \quad (2)$$

il modulo dell'autovalore massimo di A si ottiene come limite del rapporto fra due norme di \mathbf{z}_{k+1} e \mathbf{z}_k :

$$|\lambda_1| = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|\mathbf{z}_{k+1}|}{|\mathbf{z}_k|} \quad (3)$$

L'implementazione dello schema definito dalle (2) e (3) è immediata. Infatti, dopo aver inizializzato l'iterazione scegliendo \mathbf{z}_0 , si procede a calcolare \mathbf{z}_1 mediante la (2) e la prima approssimazione di $|\lambda_1|$ dal rapporto $|\mathbf{z}_1|/|\mathbf{z}_0|$. Si torna quindi alla (2), si determina \mathbf{z}_2 e la nuova approssimazione di $|\lambda_1|$. La convergenza viene raggiunta quando lo scarto fra due iterate successive risulta inferiore ad una prefissata tolleranza. Si possiede, pertanto, una stima di λ_1 e l'ultimo vettore della successione \mathbf{z}_k rappresenta una stima dell'autovettore \mathbf{v}_1 .

Il metodo delle potenze per il calcolo dell'autovalore massimo risulta poco costoso in termini computazionali, dovendo calcolare un solo prodotto matrice-vettore per ciascuna iterazione. Si verifica che la convergenza dello schema è lineare con fattore asintotico pari al rapporto $|\lambda_2|/|\lambda_1|$.

Se la matrice A è simmetrica e definita positiva, come normalmente accade nella soluzione di problemi agli elementi finiti, l'uso della norma euclidea nella (3) consente di raddoppiare la velocità di convergenza.

Il metodo delle potenze può essere utilizzato anche per determinare tutti gli altri autovalori ed autovettori di A seguendo il cosiddetto procedimento di *deflation*. Dopo aver determinato λ_1 e \mathbf{v}_1 , si costruisce la matrice A_1 :

$$A_1 = A - \mathbf{v}_1 \mathbf{a}_1^T \quad (4)$$

dove \mathbf{a}_1 è il vettore con componenti pari agli elementi della prima riga di A e l'autovettore \mathbf{v}_1 viene normalizzato in modo da avere la prima componente unitaria. La matrice A_1 avrà pertanto la prima riga nulla e può essere ridotta all'ordine $n - 1$ eliminando anche la prima colonna. Ora λ_2 risulta l'autovalore massimo di A_1 e può essere determinato mediante il metodo delle potenze. Il vettore \mathbf{z} a cui si converge è legato all'autovettore \mathbf{v}_2 dalla relazione:

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_1 + c\mathbf{z} \quad (5)$$

in cui si è aggiunta una prima componente nulla a \mathbf{z} . Premoltiplicando ambo i membri della (5) per \mathbf{a}_1 si ricava la costante c come:

$$c = \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\mathbf{a}_1^T \mathbf{z}} \quad (6)$$

e quindi \mathbf{v}_2 . Ripetendo il procedimento costituito dalla successione delle (4), (5) e (6) si possono ottenere tutti i λ_i ed i corrispondenti \mathbf{v}_i . Si noti che, nel caso in cui la matrice A sia simmetrica e definita positiva, si può sfruttare l'ortogonalità degli autovettori e sostituire la A_1 della (4) con:

$$A_1 = A - \lambda_1 \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^T \quad (7)$$

ripetendo poi l'applicazione del metodo delle potenze.

Si osservi che, tuttavia, la tecnica di deflation non può essere realisticamente sfruttata per la determinazione degli ultimi autovalori di A , sia perchè sarebbe necessario applicare il metodo delle potenze n volte con matrici di dimensione minore ma via via sempre più piene, sia perchè ben presto gli errori di arrotondamento sui primi autovalori ed autovettori si propagherebbero rendendo del tutto inaffidabili le stime degli ultimi λ_i .

Il metodo delle potenze può essere ancora sfruttato per il calcolo dell'autovalore minimo di A ricordando che, per le note proprietà delle matrici, A^{-1} possiede come autovalori i reciproci degli autovalori di A , e quindi l'autovalore massimo di A^{-1} è $1/\lambda_n$. Pertanto λ_n può essere determinato applicando il metodo delle potenze alla matrice A^{-1} , la quale, tuttavia, non può essere in genere calcolata esplicitamente. Si costruirà pertanto una successione di vettori \mathbf{z}_k tali che:

$$\mathbf{z}_{k+1} = A^{-1} \mathbf{z}_k \quad \Rightarrow \quad A \mathbf{z}_{k+1} = \mathbf{z}_k \quad (8)$$

risolvendo, cioè, ad ogni iterazione un sistema lineare. Se la matrice A è simmetrica e definita positiva, si può, ad esempio, applicare lo schema GCM ad ogni iterazione del metodo delle potenze. È chiaro, tuttavia, che per tale via la ricerca dell'autovalore minimo di un problema risulta particolarmente dispendiosa.

2 Applicazione del GCM al problema degli autovalori

A causa del significato e dell'importanza di λ_n e \mathbf{v}_n in molteplici applicazioni di ingegneria civile (corrispondono rispettivamente alla prima frequenza fondamentale ed al primo modo di vibrare di una struttura elastica) conviene applicare una tecnica più efficiente del metodo delle potenze.

Si consideri il seguente campo scalare in \mathbb{R}^n :

$$q(\mathbf{z}) = \frac{\mathbf{z}^T A \mathbf{z}}{\mathbf{z}^T \mathbf{z}} \quad (9)$$

Si osservi che, se $\mathbf{z} = \mathbf{v}_i$ autovettore di A , allora:

$$q(\mathbf{v}_i) = \frac{\mathbf{v}_i^T A \mathbf{v}_i}{\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i} = \frac{\lambda_i \mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i}{\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_i} = \lambda_i \quad (10)$$

Inoltre q è stazionaria per ogni autovettore di A , cioè il gradiente del campo scalare q in \mathbf{v}_i è nullo. Infatti:

$$\mathbf{g} = \text{grad}[q(\mathbf{z})] = \frac{2}{\mathbf{z}^T \mathbf{z}} [A\mathbf{z} - q(\mathbf{z})\mathbf{z}] \quad (11)$$

e ricordando la (10), si nota immediatamente che \mathbf{g} calcolato in \mathbf{v}_i è il vettore nullo per la definizione (1) di autovalori ed autovettori. Ne consegue, quindi, che i λ_i sono massimi o minimi relativi per q e pertanto dovrà valere:

$$\lambda_n \leq q(\mathbf{z}) \leq \lambda_1 \quad (12)$$

cioè gli estremi di q coincidono con gli autovalori estremi di A e si determinano in corrispondenza degli autovettori ad essi collegati. La funzione $q(\mathbf{z})$ definita in (9), dotata di queste importanti caratteristiche, è chiamata *quoziente di Rayleigh*.

2.1 Determinazione dell'autovalore minimo

La ricerca dell'autovalore minimo di A e dell'autovettore ad esso collegato si può ricondurre alla minimizzazione del quoziente di Rayleigh in \mathbb{R}^n . Se A è una matrice simmetrica e definita positiva, il campo q è una forma quadratica definita positiva del tutto simile a quella utilizzata nella ricerca della soluzione di un sistema lineare. Si può, pertanto, pensare di applicare lo schema del gradiente coniugato per minimizzare q .

Anche in questo caso l'esperienza insegna che lo schema del gradiente coniugato viene notevolmente accelerato se si utilizza una opportuna matrice di preconditionamento K^{-1} per A . I criteri di scelta di K^{-1} sono del tutto analoghi a quelli adottati nella soluzione di un sistema lineare.

Il vettore \mathbf{z} che minimizza q viene cercato costruendo una successione \mathbf{z}_k mediante la formula ricorrente:

$$\mathbf{z}_{k+1} = \mathbf{z}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k \quad (13)$$

Affinchè la successione dei vettori così generata converga effettivamente a \mathbf{v}_n , il coefficiente scalare α_k viene calcolato in modo tale da minimizzare $q(\mathbf{z}_{k+1})$:

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_k} \left[\frac{(\mathbf{z}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k)^T A (\mathbf{z}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k)}{(\mathbf{z}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k)^T (\mathbf{z}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k)} \right] = \frac{\partial}{\partial \alpha_k} \left(\frac{\Phi_1}{\Phi_2} \right) = 0 \quad (14)$$

Il calcolo esplicito della (14) risulta abbastanza laborioso. Conviene determinare separatamente le derivate rispetto ad α_k di Φ_1 e Φ_2 :

$$\frac{\partial \Phi_1}{\partial \alpha_k} = \frac{\partial \Phi_1}{\partial \mathbf{z}_{k+1}} \cdot \frac{\partial \mathbf{z}_{k+1}}{\partial \alpha_k} = 2 \mathbf{p}_k^T A (\mathbf{z}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k) \quad (15)$$

$$\frac{\partial \Phi_2}{\partial \alpha_k} = \frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{z}_{k+1}} \cdot \frac{\partial \mathbf{z}_{k+1}}{\partial \alpha_k} = 2 \mathbf{p}_k^T (\mathbf{z}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k) \quad (16)$$

le quali possono essere scritte, per agevolare i calcoli, nel seguente modo:

$$\frac{\partial \Phi_1}{\partial \alpha_k} = 2(a + \alpha_k b) \quad (17)$$

$$\frac{\partial \Phi_2}{\partial \alpha_k} = 2(c + \alpha_k d) \quad (18)$$

mediante l'introduzione degli scalari a , b , c e d definiti come:

$$a = \mathbf{p}_k^T A \mathbf{z}_k \quad (19)$$

$$b = \mathbf{p}_k^T A \mathbf{p}_k \quad (20)$$

$$c = \mathbf{p}_k^T \mathbf{z}_k \quad (21)$$

$$d = \mathbf{p}_k^T \mathbf{p}_k \quad (22)$$

Si scriva ora in modo esplicito Φ_1 e Φ_2 :

$$\Phi_1 = \mathbf{z}_k^T A \mathbf{z}_k + 2\alpha_k \mathbf{p}_k^T A \mathbf{z}_k + \alpha_k^2 \mathbf{p}_k^T A \mathbf{p}_k \quad (23)$$

$$\Phi_2 = \mathbf{z}_k^T \mathbf{z}_k + 2\alpha_k \mathbf{p}_k^T \mathbf{z}_k + \alpha_k^2 \mathbf{p}_k^T \mathbf{p}_k \quad (24)$$

che, grazie agli scalari:

$$e = \mathbf{z}_k^T A \mathbf{z}_k \quad (25)$$

$$m = \mathbf{z}_k^T \mathbf{z}_k \quad (26)$$

diventano:

$$\Phi_1 = e + 2\alpha_k a + \alpha_k^2 b \quad (27)$$

$$\Phi_2 = m + 2\alpha_k c + \alpha_k^2 d \quad (28)$$

Sviluppando ora formalmente l'equazione (14), si ottiene:

$$\frac{\Phi_2 \frac{\partial \Phi_1}{\partial \alpha_k} - \Phi_1 \frac{\partial \Phi_2}{\partial \alpha_k}}{\Phi_2^2} = 0 \quad (29)$$

Introducendo nella (29) le (17), (18), (27) e (28), calcolate con l'uso delle (19)-(22), (25) e (26), si ricava con semplici calcoli:

$$\alpha_k^2 (bc - ad) + \alpha_k (bm - de) + (am - ce) = 0 \quad (30)$$

da cui si ha infine lo scalare α_k :

$$\alpha_{k1,2} = \frac{(de - bm) \pm \sqrt{\Delta}}{2(bc - ad)} \quad (31)$$

avendo posto:

$$\Delta = (de - bm)^2 - 4(bc - ad)(am - ce) \quad (32)$$

Si può facilmente verificare che per minimizzare Φ_1/Φ_2 è necessario scegliere nella (31) la soluzione con il segno “+” davanti alla radice quadrata.

Dopo aver calcolato la nuova approssimazione \mathbf{z}_{k+1} dell'autovettore \mathbf{v}_n mediante la (13), si può verificare se la convergenza dello schema è stata raggiunta. In base alla definizione (1) di autovalori ed autovettori, il vettore residuo \mathbf{r}_{k+1} del GCM applicato nella minimizzazione di $q(\mathbf{z})$ si definisce come:

$$\mathbf{r}_{k+1} = A\mathbf{z}_{k+1} - q(\mathbf{z}_{k+1})\mathbf{z}_{k+1} \quad (33)$$

Come già osservato nella verifica di convergenza del GCM per la soluzione di sistemi lineari, conviene adimensionalizzare il problema effettuando il controllo sul residuo relativo anziché su quello assoluto definito in (33). Pertanto, lo schema va terminato quando risulta verificata la condizione:

$$r_r = \frac{|\mathbf{r}_{k+1}|}{|A\mathbf{z}_{k+1}|} < \text{toll} \quad (34)$$

dove toll è un'opportuna tolleranza fissata arbitrariamente (ad esempio, 10^{-6}).

Qualora la condizione (34) non sia verificata, è necessario aggiornare la direzione di ricerca \mathbf{p}_k e proseguire con lo schema iterativo. Come nel GCM per la soluzione di un sistema lineare il vettore \mathbf{p}_k era collegato al gradiente della forma quadratica da minimizzare (in quel caso coincidente con il residuo \mathbf{r}_k), così ora la nuova direzione di ricerca \mathbf{p}_{k+1} sarà funzione del gradiente \mathbf{g}_{k+1} di q calcolato in \mathbf{z}_{k+1} . La relazione ricorrente che definisce \mathbf{p}_{k+1} risulta pertanto:

$$\mathbf{p}_{k+1} = K^{-1}\mathbf{g}_{k+1} + \beta_k\mathbf{p}_k \quad (35)$$

dove K^{-1} è la matrice di preconditionamento (ad esempio, la decomposta incompleta di Cholesky), \mathbf{g}_{k+1} in virtù della (11) e della (33) viene calcolato come:

$$\mathbf{g}_{k+1} = \frac{2\mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{z}_{k+1}^T \mathbf{z}_{k+1}} \quad (36)$$

e β_k è uno scalare determinato imponendo che il vettore \mathbf{p}_{k+1} sia A -ortogonale a \mathbf{p}_k :

$$\beta_k = -\frac{\mathbf{g}_{k+1}^T K^{-1} A \mathbf{p}_k}{\mathbf{p}_k^T A \mathbf{p}_k} \quad (37)$$

Lo schema del GCM per determinare l'autovalore minimo e l'autovettore ad esso associato in una matrice simmetrica e definita positiva va inizializzato scegliendo un vettore arbitrario \mathbf{z}_0 , calcolando \mathbf{r}_0 , \mathbf{g}_0 e quindi $\mathbf{p}_0 = K^{-1} \mathbf{g}_0$. La nuova approssimazione dell'autovettore \mathbf{v}_n si calcola mediante la (13) con α_k definito dalla (31) in cui si prende il segno “+” davanti alla radice quadrata. Se è verificata la condizione (34) lo schema ha raggiunto la convergenza e pertanto $\mathbf{v}_n = \mathbf{z}_{k+1}$ e $\lambda_n = q(\mathbf{z}_{k+1})$. Altrimenti si calcola la nuova direzione di ricerca (35) mediante la (36) e la (37), e si torna alla (13) fino a che la condizione (34) non è verificata. Si può notare che il costo di una singola iterazione della procedura appena indicata è sostanzialmente dovuto a 3 prodotti matrice-vettore: $A \mathbf{p}_k$, $A \mathbf{z}_{k+1}$ e $K^{-1} \mathbf{g}_{k+1}$ (il prodotto $A \mathbf{z}_k$ è infatti disponibile dall'iterazione precedente), per l'implementazione dei quali si rimanda allo schema del GCM per la soluzione di un sistema lineare.

Si osservi che, se il vettore iniziale \mathbf{z}_0 possiede componente nulla lungo \mathbf{v}_n , vale a dire è ortogonale a \mathbf{v}_n , la successione dei \mathbf{z}_k non può convergere a \mathbf{v}_n e quindi il λ_n così determinato non è corretto. In pratica, gli errori di arrotondamento commessi nel corso della procedura fanno acquisire gradualmente ai vettori \mathbf{z}_k una componente diversa da 0 lungo \mathbf{v}_n , permettendo quindi ugualmente la convergenza, anche se in tempi più lunghi, all'autovettore cercato. La probabilità che tale inconveniente si ripeta cambiando il vettore iniziale \mathbf{z}_0 è praticamente nulla.

2.2 Il problema generalizzato

Date due matrici quadrate A e B di ordine n si definisce *problema generalizzato* agli autovalori ed autovettori la ricerca degli scalari λ_i e dei vettori \mathbf{v}_i tali che:

$$A \mathbf{v}_i = \lambda_i B \mathbf{v}_i \quad i = 1, n \quad (38)$$

La soluzione del problema generalizzato trova frequente applicazione nell'ingegneria civile, ad esempio per il calcolo delle lunghezze d'onda corrispondenti alle frequenze proprie di vibrazione di una struttura complessa caratterizzata da una matrice di rigidezza ed una matrice di capacità. Lo studio dinamico delle vibrazioni di una membrana elastica uniformemente tesa ricade in tale ambito.

Il problema generalizzato può facilmente ricondursi in linea teorica a quello fondamentale semplicemente premoltiplicando ambo i membri dell'equazione (38) per B^{-1} :

$$B^{-1} A \mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i \quad i = 1, n \quad (39)$$

Gli autovalori λ_i ed i corrispondenti autovettori \mathbf{v}_i sono pertanto gli autovalori e gli autovettori della matrice $B^{-1}A$. Tale osservazione, tuttavia, non è di aiuto per la determinazione di λ_i e

\mathbf{v}_i , in quanto l'inversione di una matrice non è mai un'operazione agevole e computazionalmente conveniente.

Si assuma che A e B siano due matrici simmetriche e definite positive. Questa eventualità è di norma verificata nelle applicazioni ingegneristiche in cui si voglia determinare l'autovalore minimo per il problema generalizzato in un modello discretizzato mediante gli elementi finiti. Si può in tal caso definire una nuova forma quadratica definita positiva:

$$q_g(\mathbf{z}) = \frac{\mathbf{z}^T A \mathbf{z}}{\mathbf{z}^T B \mathbf{z}} \quad (40)$$

dotata di n punti di stazionarietà corrispondenti agli autovettori \mathbf{v}_i e tale che $q_g(\mathbf{v}_i) = \lambda_i$. Si osservi come il quoziente di Rayleigh possa essere interpretato come il caso particolare della (40) in cui B è l'identità.

La minimizzazione del campo scalare q_g per determinare l'autovalore minimo del problema generalizzato può essere effettuata applicando sempre lo schema del GCM alla (40). Ripetendo la procedura descritta nel paragrafo precedente, si cercherà di approssimare \mathbf{v}_n mediante una successione di vettori \mathbf{z}_k costruiti secondo la formula ricorrente:

$$\mathbf{z}_{k+1} = \mathbf{z}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k \quad (41)$$

in cui α_k viene determinato minimizzando q_g in \mathbf{z}_{k+1} . Definendo per semplicità di notazione gli scalari:

$$a = \mathbf{p}_k^T A \mathbf{z}_k \quad (42)$$

$$b = \mathbf{p}_k^T A \mathbf{p}_k \quad (43)$$

$$c = \mathbf{p}_k^T B \mathbf{z}_k \quad (44)$$

$$d = \mathbf{p}_k^T B \mathbf{p}_k \quad (45)$$

$$e = \mathbf{z}_k^T A \mathbf{z}_k \quad (46)$$

$$m = \mathbf{z}_k^T B \mathbf{z}_k \quad (47)$$

e:

$$\Delta = (de - bm)^2 - 4(bc - ad)(am - ce) \quad (48)$$

il parametro α_k si calcola come:

$$\alpha_k = \frac{(de - bm) + \sqrt{\Delta}}{2(bc - ad)} \quad (49)$$

La convergenza dello schema va controllata mediante il residuo \mathbf{r}_{k+1} :

$$\mathbf{r}_{k+1} = A \mathbf{z}_{k+1} - q_g(\mathbf{z}_{k+1}) B \mathbf{z}_{k+1} \quad (50)$$

nella condizione:

$$r_r = \frac{|\mathbf{r}_{k+1}|}{|A \mathbf{z}_{k+1}|} < \text{toll} \quad (51)$$

Se la condizione (51) non è verificata, si aggiorna la direzione di ricerca \mathbf{p}_k mediante:

$$\mathbf{p}_{k+1} = K^{-1} \mathbf{g}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k \quad (52)$$

dove K^{-1} è un'opportuna matrice di preconditionamento, il gradiente \mathbf{g}_{k+1} è :

$$\mathbf{g}_{k+1} = \frac{2\mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{z}_{k+1}^T B \mathbf{z}_{k+1}} \quad (53)$$

e lo scalare β_k si determina imponendo la A -ortogonalità fra \mathbf{p}_{k+1} e \mathbf{p}_k :

$$\beta_k = -\frac{\mathbf{g}_{k+1}^T K^{-1} A \mathbf{p}_k}{\mathbf{p}_k^T A \mathbf{p}_k} \quad (54)$$

Lo schema va inizializzato scegliendo un vettore arbitrario \mathbf{z}_0 e calcolando i corrispondenti \mathbf{r}_0 , \mathbf{g}_0 e \mathbf{p}_0 . Si procede con la stima della nuova approssimazione (41) mediante la (49), per la quale vanno adottate le definizioni (42)-(47) e (48). Se la condizione (51), calcolata mediante la (50), è verificata, si assume $\mathbf{v}_n = \mathbf{z}_{k+1}$ e $\lambda_n = q_g(\mathbf{z}_{k+1})$. Altrimenti, si aggiorna \mathbf{p}_k con la (52) mediante la (53) e la (54), e si ritorna alla (41).

Si osservi, infine, che la stima dell'autovalore minimo e dell'autovettore ad esso associato per un problema generalizzato è più costosa dell'analogo problema non generalizzato. Ad ogni iterazione si devono, infatti, calcolare 5 prodotti matrice-vettore: $A\mathbf{p}_k$, $A\mathbf{z}_{k+1}$, $B\mathbf{p}_k$, $B\mathbf{z}_{k+1}$ e $K^{-1}\mathbf{g}_{k+1}$ (i prodotti $A\mathbf{z}_k$ e $B\mathbf{z}_k$ sono infatti disponibili dall'iterazione precedente). Tale spesa aggiuntiva non è comunque paragonabile a quella che sarebbe necessaria invertendo inizialmente la matrice B ed applicando la procedura descritta nel precedente paragrafo alla matrice $B^{-1}A$.

2.3 Scelta della matrice di preconditionamento

L'efficienza del GCM per la minimizzazione del quoziente di Rayleigh dipende in gran parte dalla scelta della matrice di preconditionamento K^{-1} .

Analizziamo la convergenza del GCM applicato al campo scalare q . Con il cambio di variabile $\mathbf{y} = X\mathbf{z}$ il quoziente di Rayleigh (9) può essere riscritto come:

$$q_p(\mathbf{y}) = \frac{\mathbf{y}^T X^{-1} A X^{-1} \mathbf{y}}{\mathbf{y}^T X^{-1} X^{-1} \mathbf{y}} = \frac{\mathbf{y}^T G \mathbf{y}}{\mathbf{y}^T K^{-1} \mathbf{y}} \quad (55)$$

Come evidenziato al punto precedente, la minimizzazione del nuovo campo scalare q_p conduce alla determinazione dell'autovalore minimo del problema generalizzato:

$$G\mathbf{w} = \lambda K^{-1} \mathbf{w} \quad (56)$$

che coincide con l'autovalore minimo della matrice A . Infatti, procedendo con una trasformazione per similitudine, si ha:

$$KG = XXX^{-1}AX^{-1} = XAX^{-1} \quad (57)$$

Si noti che il medesimo risultato si otterrebbe con l'analogha sostituzione $\mathbf{y} = X\mathbf{z}$ nel quoziente di Rayleigh generalizzato q_g in (40).

Supponiamo di possedere l'approssimazione \mathbf{y}_k al passo k dell'autovettore \mathbf{w}_n associato all'autovalore minimo del problema generalizzato (56). Tale approssimazione differirà da \mathbf{w}_n per qualche vettore errore \mathbf{e} :

$$\mathbf{y}_k = \mathbf{w}_n + \mathbf{e} \quad (58)$$

Sviluppando in serie di Taylor $q_p(\mathbf{y}_k)$ attorno a \mathbf{w}_n troncata ai termini del secondo ordine si ottiene:

$$q_p(\mathbf{y}_k) \simeq q_p(\mathbf{w}_n) + \mathbf{e}^T q'_p(\mathbf{w}_n) + \frac{1}{2} \mathbf{e}^T q''_p(\mathbf{w}_n) \mathbf{e} = \lambda_n + \frac{1}{2} \mathbf{e}^T H_p(\mathbf{w}_n) \mathbf{e} \quad (59)$$

dove la derivata seconda di q_p è la matrice hessiana H_p . Con qualche calcolo si ricava:

$$H_p(\mathbf{y}) = \frac{2}{\mathbf{y}^T K^{-1} \mathbf{y}} [G - q_p(\mathbf{y}) K^{-1} - K^{-1} \mathbf{g}_p(\mathbf{y}) \mathbf{y}^T - \mathbf{y} \mathbf{g}_p^T(\mathbf{y}) K^{-1}] \quad (60)$$

con il vettore $\mathbf{g}_p(\mathbf{y})$ il gradiente del campo scalare q_p in \mathbf{y} . Ricordando le note proprietà del quoziente di Rayleigh generalizzato, si ricava facilmente che la matrice hessiana (60) calcolata in \mathbf{w}_n risulta:

$$H_p(\mathbf{w}_n) = \frac{2}{\mathbf{w}_n^T K^{-1} \mathbf{w}_n} (G - \lambda_n K^{-1}) \quad (61)$$

Si osservi che la matrice $(G - \lambda_n K^{-1})$ è simile a $(A - \lambda_n I) K^{-1}$. Infatti:

$$X (G - \lambda_n K^{-1}) X^{-1} = X X^{-1} A X^{-1} X^{-1} - \lambda_n X X^{-1} X^{-1} X^{-1} = (A - \lambda_n I) K^{-1} \quad (62)$$

Le equazioni (61) e (62) ci offrono delle interessanti indicazioni per la scelta più efficace di K^{-1} . Si noti, infatti, che l'espansione (59) ci dice che l'applicazione del GCM per la minimizzazione del campo scalare q_p è analoga alla minimizzazione della forma quadratica avente come matrice l'hessiano $H_p(\mathbf{w}_n)$. Pertanto, sfruttando i noti risultati del GCM relativi alla soluzione di un sistema lineare, se ne deduce che per accelerare la convergenza K^{-1} dovrà essere tale da rendere minimo il numero di condizionamento spettrale di $H_p(\mathbf{w}_n)$. Assumiamo, per esempio, $K^{-1} = A^{-1}$. La matrice $(G - \lambda_n K^{-1})$ risulta simile a $I - \lambda_n A^{-1}$ ed i suoi autovalori estremi sono:

$$\mu_1 = 1 - \lambda_n / \lambda_1 \quad (63)$$

$$\mu_n = 1 - \lambda_n / \lambda_{n-1} \quad (64)$$

Normalizzando \mathbf{w}_n in modo tale che $\mathbf{w}_n^T K^{-1} \mathbf{w}_n = 2$, si ricava il numero di condizionamento spettrale di $H_p(\mathbf{w}_n)$:

$$\kappa [H_p(\mathbf{w}_n)] = \frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_1} \frac{\lambda_1 - \lambda_n}{\lambda_{n-1} - \lambda_n} \quad (65)$$

che risulta generalmente piccolo in quanto $\lambda_{n-1} \ll \lambda_1$.

La scelta $K^{-1} = A^{-1}$ accelera al massimo la convergenza del GCM applicato alla minimizzazione del quoziente di Rayleigh, ma può non essere la più efficiente dal punto di vista computazionale.

Infatti, ad ogni iterazione del GCM il calcolo di $K^{-1}\mathbf{g}_{k+1}$ deve essere svolto risolvendo un sistema lineare con la matrice A . Ad esempio, questo può essere convenientemente effettuato definendo un altro GCM, generando così una sequenza di iterazioni "interne" per applicare il preconditionatore ad ogni iterazione "esterna" del GCM per il quoziente di Rayleigh. Si noti che interpretando A^{-1} come preconditionatore il sistema lineare interno può anche essere risolto con scarsa accuratezza senza un eccessivo peggioramento della convergenza globale. Una soluzione alternativa, e generalmente più efficiente, consiste nell'utilizzare per K^{-1} un'opportuna approssimazione di A^{-1} , come ad esempio la decomposta incompleta di Cholesky oppure D^{-1} .