Metodi Proiettivi (o del Gradiente) per la soluzione del sistema $Ax = b$

A = matrice (sparsa) simmetrica reale o non simmetrica reale (può essere anche complessa)

Scelta una soluzione iniziale arbitraria x_0 con residuo $r_0 = b - Ax_0$, si definisce spazio di Krylov di dim. ℓ:

$$K_\ell = \text{span}\{r_0, Ar_0, A^2 r_0, \dots, A^{\ell-1} r_0\}$$

Un metodo proiettivo cerca una soluzione approssimata nel sottospazio $x_0 + K_\ell$ imponendo le condizioni di ortogonalità (note col nome di Petrov-Galerkin):

$$r_\ell \perp L_\ell$$

essendo L_ℓ uno spazio ausiliario (test o peso) di dim. ℓ

Differenti metodi proiettivi a seconda:

1.) differente scelta di L_ℓ

2.) " " del precondizionatore

Richiamiamo il <u>Metodo dei Residui Pesati</u>

per integrare uno PDE (oppure anche una ODE)

$$Au(x,y,z) = f(x,y,z) \longrightarrow \text{b.v. problem}$$

Scelto uno spazio definito dalle funzioni base $\xi_i(x,y,z)$ si scrive la soluzione approssimata $u_\ell(x,y,z)$:

$$u_\ell(x,y,z) = u_0(x,y,z) + \sum_{i=1}^{\ell} a_i \xi_i(x,y,z)$$

Il residuo è $r_\ell = Au_\ell - f$. Col FEM si trovano i coeff. a_i (di Petrov-Galerkin) imponendo che r_ℓ sia <u>ortogonale</u> allo spazio delle funzioni test (peso) w_i :

$$\int_R (Au_\ell - f)\, w_i \, dR = 0 \qquad i = 1, 2, \ldots, \ell$$

Differenti FEM per differenti w_i :

- $w_i \equiv \xi_i \rightarrow$ Galerkin
- $w_i \equiv \delta(P - P_i) =$ delta di Dirac $\rightarrow$ Collocation
- $w_i \equiv A\xi_i \rightarrow$ Minimi Quadrati

Torniamo ai metodi proiettivi per risolvere $Ax = b$

1) $L_\ell \equiv K_\ell \longrightarrow$ metodo di Galerkin

Dimostriamo che se $A = A^T$ d.p. il metodo di Galerkin minimizza il prodotto scalare $r_\ell^T e_\ell$, essendo $e_\ell = x - x_\ell$, nello spazio di Krilov.

Essendo $e_\ell = A^{-1} r_\ell$ si ha $r_\ell^T e_\ell = r_\ell^T A^{-1} r_\ell$

$$\begin{cases} x_\ell = x_0 + a_1 r_0 + a_2 A r_0 + \cdots + a_\ell A^{\ell-1} r_0 \\ r_\ell = b - A x_\ell = r_0 - a_1 A r_0 - a_2 A^2 r_0 - \cdots a_\ell A^\ell r_0 \end{cases}$$

$$\frac{\partial}{\partial a_i}(r_\ell^T e_\ell) = \frac{\partial}{\partial a_i}\Big(\underbrace{-r_0^T + a_1 r_0^T A + a_2 r_0^T A^2 + \cdots + a_\ell r_0^T A^\ell}_{r_\ell^T}\Big)^T\Big(\underbrace{-A^{-1} r_0 + a_1 r_0 + a_2 A r_0 + \cdots + a_\ell A^{\ell-1} r_0}_{A^{-1} r_\ell}\Big)$$

$$= r_0^T A^i A^{-1} r_\ell + r_\ell^T A^{i-1} r_0 = 2 r_\ell^T A^{i-1} r_0 = 0 \qquad i = 1, \dots, \ell$$

Cioè: $\boxed{r_\ell^T r_0 = 0 \;;\; r_\ell^T A r_0 = 0 \;;\; \cdots,\; r_\ell^T A^{\ell-1} r_0 = 0}$

$\longrightarrow$ ℓ equazioni nei coeff. $a_1, \dots, a_\ell$

Poichè $r_\ell^T e_\ell = r_\ell^T A^{-1} r_\ell \geq 0$ il minimo sempre esiste per A simmetrica d.p.. È questo il metodo classico del Gradiente Coniugato

2) $L_\ell = A K_\ell = \text{span}\{A r_0, A^2 r_0, \dots, A^\ell r_0\} \longrightarrow$

Metodo dei Minimi Quadrati

Per una assegnata dimensione ℓ, tale scelta realizza il minimo della norma euclidea del residuo:

$$r_\ell^T r_\ell = \min \qquad (A \text{ arbitraria})$$

Procedendo come prima si ricavano i coeff. $a_1, \dots, a_\ell$ dalle eq. di ortogonalità:

$$\underline{r_\ell^T A r_0 = 0 \; ; \; r_\ell^T A^2 r_0 = 0 \; ; \dots ; \; r_\ell^T A^\ell r_0 = 0}$$

La soluzione è una sol. di minimo, dunque esiste sempre

3) $L_\ell \equiv \text{span}\{r_0, A^T r_0, \dots, (A^T)^{\ell-1} r_0\}$

Questa scelta non corrisponde ad una procedura di minimo di una qualche norma di r_ℓ (a meno che $A = A^T$ d. p. nel qual caso ricadiamo in 1)), e pertanto il sistema che ne scaturisce nelle incognite $a_1, \dots, a_\ell$ non necessariamente ammette soluzione.

Con questa scelta il metodo proiettivo può fallire, cioè

Tutti i metodi proiettivi (del gradiente) sono in origine metodi di <u>ortogonalizzazione</u> del residuo costruito nello spazio di Krylov K_ℓ per rispetto allo spazio ausiliario L_ℓ. Alcuni sono anche metodi di <u>minimo del residuo</u> r_ℓ (in una norma opportuna (ad es. il metodo di Galerkin con $A=A^T$ d. p. ed il metodo dei minimi quadrati con A arbitraria).

Pertanto nel caso il metodo coincida con una procedura di minimo la soluzione <u>esisterà sempre</u> per ogni ℓ.

Diversamente x_ℓ non necessariamente esisterà per ogni ℓ e il metodo potrà fallire

I metodi di interesse pratico nei 3 casi sono noti e sono:

Classe 1 (Galerkin): <u>GC</u> (solo per $A=A^T$ p.d.)

Classe 2 (Minimi Quadrati): <u>GMRES</u> (Generalized Minimal Residual)

Classe 3 (ortogonalizzazione soltanto): <u>Bi-CGSTAB</u> (Biconjugate Gradient Stabilized) e <u>TFQMR</u> (Transpose Free Quasi Minimal Residual)

Proprietà teoriche dei metodi proiettivi (del gradiente)

1) convergono in N iterazioni, N essendo l'ordine di A

2) convergono in $l < N$ iterazioni se il residuo arbitrario iniziale r_0 ha componenti non nulle solo su l autovettori di A

3) il metodo del GC (per $A = A^T$ e d.p.) è implementato da 3 sole equazioni ricorrenti (per x_k, p_k ed r_k) che richiedono ad ogni iterazione un solo prodotto matrice-vettore

In pratica per N grande (>100) possono presentarsi i seguenti problemi:

1) causa errori di arrotondamento non si arriva a convergenza con $l = N$ iterazioni

2) anche se si convergesse dopo N iterazioni, se N è grande le iterazioni sarebbero eccessive

3) GMRES richiede la memorizzazione di l direzioni alla iterazione l. Pertanto di norma viene troncato (o "restarted") ogni m ($\ll N$) iterazioni.
Si perde così la garanzia teorica della convergenza ed andare incontro a fenomeni di "stallo".

4) Bi-CGSTAB e TFQMR possono divergere

5) Tutti i metodi proiettivi devono essere "precondizionati" ...

Accelerazione dei metodi proiettivi (o del gradiente) con la tecnica del precondizionamento

Sostanzialmente si risolve un altro sistema:

$$\underbrace{A_1^{-1} A A_2^{-1}}_{A'} \underbrace{A_2 x}_{x'} = \underbrace{A_1^{-1} b}_{b'}$$

Lo spazio di Krylov del sistema precondizionato è:

$$K_{\ell,pr} \equiv K_\ell \left[(\underset{\downarrow\, L}{A_1} \underset{\downarrow\, U}{A_2})^{-1} \underset{\downarrow\, LU}{A},\ (A_1 A_2)^{-1} r_0 \right]$$

L_ℓ è modificato coerentemente.

La convergenza è fortemente accelerata se $A_1 A_2 \simeq A$

Precondizionatori A_1 ed A_2 molto usati:

$A_1 = L$, $A_2 = U$ con L ed U fattori triangolari, rispettivamente, basso ed alto, di A, incompleti o parzialmente completi.

Prerequisito di un buon precondizionatore:

- essere poco costoso da costruire ed accelerare notevolmente la convergenza, due proprietà ovviamente in conflitto