

## Sistemi lineari e problemi di minimo

Consideriamo una matrice quadrata  $A$ , con elementi  $a_{ij}$ ,  $i, j = 1, \dots, n$ . Vogliamo risolvere il sistema lineare

$$(1) \quad \mathbf{Ax} = \mathbf{b},$$

dove  $\mathbf{b} \in \mathbf{R}^n$  è un vettore dato.

Assumiamo che

1.  $A$  sia simmetrica, cioè  $a_{ij} = a_{ji}$  per ogni  $i, j = 1, \dots, n$ ;
2.  $A$  sia definita positiva, cioè  $\mathbf{Ax} \cdot \mathbf{x} > 0$  per ogni  $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ .

Questo ha come conseguenza che gli autovalori di  $A$  sono reali (dall'ipotesi 1) e strettamente positivi (dall'ipotesi 2), per cui la matrice risulta non-singolare (il determinante è il prodotto degli autovalori, quindi in queste ipotesi è strettamente positivo). Il sistema lineare (1) ha dunque un'unica soluzione (Teorema di Cramer).

- Risolvere equivale a minimizzare

Il primo passo è mostrare come la soluzione  $\mathbf{x}^* = A^{-1}\mathbf{b}$  del sistema (1) sia l'unico punto di minimo della funzione di  $n$  variabili

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{Ax} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{x}$$

(cioè della forma quadratica associata ad  $A$ ).

Dall'algebra lineare sappiamo che  $\mathbf{Ax} \cdot \mathbf{x} \geq \lambda_{\min} \|\mathbf{x}\|^2$ , dove  $\lambda_{\min} > 0$  è il minimo autovalore di  $A$ . D'altro canto, dalla disuguaglianza di Schwarz si ha  $|\mathbf{b} \cdot \mathbf{x}| \leq \|\mathbf{b}\| \|\mathbf{x}\|$ . Quindi

$$\phi(\mathbf{x}) \geq \frac{1}{2} \lambda_{\min} \|\mathbf{x}\|^2 - \|\mathbf{b}\| \|\mathbf{x}\| \geq \|\mathbf{x}\| \left( \frac{1}{2} \lambda_{\min} \|\mathbf{x}\| - \|\mathbf{b}\| \right) \rightarrow +\infty$$

per  $\|\mathbf{x}\| \rightarrow +\infty$ . Siccome  $\phi$  è una funzione continua (è un polinomio di secondo grado in  $n$  variabili, dunque è infinitamente differenziabile), ne segue che in  $\mathbf{R}^n$  ha un valore minimo<sup>(1)</sup> e che i punti di minimo sono punti stazionari di  $\phi$ : si possono quindi trovare annullando il suo gradiente.

Calcoliamo le derivate parziali di  $\phi$ : per un generico indice  $k = 1, \dots, n$  si ha

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial x_k}(\mathbf{x}) &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} x_j x_i - \sum_{i=1}^n b_i x_i \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \left( \frac{\partial x_j}{\partial x_k} x_i + x_j \frac{\partial x_i}{\partial x_k} \right) - \sum_{i=1}^n b_i \frac{\partial x_i}{\partial x_k}. \end{aligned}$$

Siccome

$$\frac{\partial x_i}{\partial x_k} = \begin{cases} 1 & \text{se } i = k \\ 0 & \text{se } i \neq k \end{cases},$$

si conclude che

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_k}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n a_{ik} x_i + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n a_{kj} x_j - b_k.$$

---

<sup>(1)</sup> Siccome  $\phi(\mathbf{x}) \rightarrow +\infty$  per  $\|\mathbf{x}\| \rightarrow +\infty$ , fissata la soglia  $M = |\phi(\mathbf{0})|$  esiste  $r > 0$  per cui per  $\|\mathbf{x}\| > r$  si ha  $\phi(\mathbf{x}) \geq M$ . D'altro canto, dal Teorema di Weierstrass  $\phi$  ha un minimo sull'insieme chiuso e limitato  $B_r = \{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n \mid \|\mathbf{x}\| \leq r\}$ , cioè si ha  $\phi(\mathbf{x}) \geq m$  per  $\|\mathbf{x}\| \leq r$ , avendo definito  $m = \min_{B_r} \phi(\mathbf{x})$ ; in particolare  $\phi(\mathbf{0}) \geq m$ . Di conseguenza, per  $\|\mathbf{x}\| > r$  si ha  $\phi(\mathbf{x}) \geq M \geq \phi(\mathbf{0}) \geq m$ , e così  $m$  risulta il valore di minimo di  $\phi$  non solo in  $B_r$  ma in tutto  $\mathbf{R}^n$ .

Siccome  $a_{ik} = a_{ki}$ , si ha (cambiando l'indice muto  $i$  in  $j$ ...)

$$\frac{\partial \phi}{\partial x_k}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n a_{kj} x_j - b_k,$$

cioè  $\text{grad } \phi(\mathbf{x}) = A\mathbf{x} - \mathbf{b}$ .

Si è dunque verificato che i punti stazionari di  $\phi$  sono i punti  $\mathbf{x}$  per cui  $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ , cioè sono le soluzioni del sistema lineare (1). Siccome la soluzione di (1) è unica, c'è un solo punto stazionario,  $\mathbf{x}^* = A^{-1}\mathbf{b}$ . Siccome un punto di minimo è un punto stazionario, c'è un solo punto di minimo,  $\mathbf{x}^* = A^{-1}\mathbf{b}$ .

In conclusione, l'unica soluzione  $\mathbf{x}^* = A^{-1}\mathbf{b}$  di (1) è l'unico punto di minimo di  $\phi$ : per risolvere (1) basta trovare il punto di minimo di  $\phi$ .

- Come minimizzare? L'algoritmo del gradiente

Interpretiamo il valore  $\phi(\mathbf{x})$  come la quota nel punto  $\mathbf{x}$ . Vogliamo trovare una successione di punti  $\mathbf{x}^{(m)}$  che converga per  $m \rightarrow \infty$  a  $\mathbf{x}^* = A^{-1}\mathbf{b}$ , il punto di quota minima.

Vogliamo quindi un algoritmo di discesa, e una scelta naturale è quella di scendere lungo la direzione di discesa più ripida ("steepest descent" in inglese), cioè quella opposta alla direzione del gradiente della quota  $\phi$ . Per quanto verificato prima, questa direzione in un punto  $\mathbf{x}$  è data da  $-\text{grad } \phi(\mathbf{x}) = \mathbf{b} - A\mathbf{x}$ .

Supponiamo di essere, al passo  $m$ -esimo del processo iterativo, nel punto  $\mathbf{x}^{(m)}$ . Definiamo il residuo  $\mathbf{r}^{(m)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(m)}$  (la direzione di discesa più ripida in  $\mathbf{x}^{(m)}$ ). Il punto successivo sarà dunque ottenuto partendo da  $\mathbf{x}^{(m)}$  e muovendosi nella direzione di discesa più ripida  $\mathbf{r}^{(m)}$ :

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} + \alpha_m \mathbf{r}^{(m)}.$$

Il problema ora è la determinazione di quanto deve essere lungo il passo (cioè qual è la scelta ottimale del parametro  $\alpha_m$ ): con un passo troppo corto non si sfrutta al meglio la discesa, con un passo troppo lungo si può essere di nuovo in salita... (La direzione di  $\mathbf{r}^{(m)}$  è quella di discesa più ripida in  $\mathbf{x}^{(m)}$ , ma non quella di discesa più ripida in tutti i punti del segmento che congiunge  $\mathbf{x}^{(m)}$  con  $\mathbf{x}^{(m+1)}$ : in qualche punto di questo segmento può addirittura diventare una direzione di salita, se il punto  $\mathbf{x}^{(m+1)}$  è troppo lontano, cioè se il passo è troppo lungo.)

[Si noti che l'algoritmo non si ferma a meno che non sia  $\mathbf{r}^m = \mathbf{0}$  oppure  $\alpha_m = 0$ . Nel primo caso avremmo  $A\mathbf{x}^{(m)} = \mathbf{b}$ , dunque  $\mathbf{x}^{(m)}$  sarebbe la soluzione di (1); la stessa cosa accade nel secondo caso, come vedremo fra un attimo. In altre parole, possiamo supporre che sia  $\mathbf{r}^{(m)} \neq \mathbf{0}$  per ogni  $m \geq 0$ .]

L'idea è dunque quella di scegliere  $\alpha_m$  in modo che la quota  $\phi$  sia minima lungo la semiretta  $\mathbf{x}^{(m)} + \alpha \mathbf{r}^{(m)}$ ,  $\alpha > 0$ . Si ha (poiché  $A\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{x}^{(m)} = A\mathbf{x}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)}$ , grazie alla simmetria di  $A$ )

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}^{(m)} + \alpha \mathbf{r}^{(m)}) &= \frac{1}{2} A(\mathbf{x}^{(m)} + \alpha \mathbf{r}^{(m)}) \cdot (\mathbf{x}^{(m)} + \alpha \mathbf{r}^{(m)}) - \mathbf{b} \cdot (\mathbf{x}^{(m)} + \alpha \mathbf{r}^{(m)}) \\ &= \left( \frac{1}{2} A\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)} \right) \alpha^2 + \left( \frac{1}{2} A\mathbf{x}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)} + \frac{1}{2} A\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{r}^{(m)} \right) \alpha \\ &\quad + \frac{1}{2} A\mathbf{x}^{(m)} \cdot \mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{x}^{(m)} \\ &= \left( \frac{1}{2} A\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)} \right) \alpha^2 + (A\mathbf{x}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)} - \mathbf{b} \cdot \mathbf{r}^{(m)}) \alpha + \left( \frac{1}{2} A\mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{b} \right) \cdot \mathbf{x}^{(m)} \\ &= \left( \frac{1}{2} A\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)} \right) \alpha^2 - \mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)} \alpha + \left( \frac{1}{2} A\mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{b} \right) \cdot \mathbf{x}^{(m)}, \end{aligned}$$

e questa espressione rispetto al parametro  $\alpha$  rappresenta una parabola con concavità rivolta verso l'alto (dato che  $\frac{1}{2} A\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)} > 0$  per  $\mathbf{r}^{(m)} \neq \mathbf{0}$ ). Per trovare il minimo basta eguagliare a 0 la derivata rispetto ad  $\alpha$ , il che fornisce

$$\alpha = \alpha_m = \frac{\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)}}{A\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)}}.$$

[Si noti che  $\alpha_m = 0$  se e solo se  $\mathbf{r}^{(m)} = \mathbf{0}$ , cioè se  $\mathbf{x}^{(m)}$  è la soluzione di (1). Inoltre, il denominatore verifica  $A\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)} > 0$  per  $\mathbf{r}^{(m)} \neq \mathbf{0}$ .]

Un semplice calcolo dà anche:

$$\mathbf{r}^{(m+1)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{b} - A(\mathbf{x}^{(m)} + \alpha_m \mathbf{r}^{(m)}) = \mathbf{r}^{(m)} - \alpha_m A\mathbf{r}^{(m)}.$$

L'algoritmo del gradiente si scrive dunque così: scelto arbitrariamente  $\mathbf{x}^{(0)}$  e calcolato  $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)}$ , per  $m \geq 0$  si calcoli

$$\begin{aligned}\alpha_m &= \frac{\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)}}{A\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)}} \\ \mathbf{x}^{(m+1)} &= \mathbf{x}^{(m)} + \alpha_m \mathbf{r}^{(m)} \\ \mathbf{r}^{(m+1)} &= \mathbf{r}^{(m)} - \alpha_m A\mathbf{r}^{(m)}.\end{aligned}$$

La parte computazionalmente più significativa è il calcolo del prodotto matrice–vettore  $A\mathbf{r}^{(m)}$ , che in generale richiede  $O(n^2)$  operazioni; comunque questo calcolo viene fatto una sola volta per iterazione.

Si dimostra che nelle ipotesi 1 e 2 l'algoritmo è convergente, cioè  $\mathbf{x}^{(m)} \rightarrow \mathbf{x}^* = A^{-1}\mathbf{b}$ .

- Come minimizzare? L'algoritmo del gradiente coniugato

Sorprendentemente, l'algoritmo del gradiente non è il più efficace nell'approssimazione della soluzione del sistema (1). Un altro algoritmo, detto del gradiente coniugato, ha proprietà di convergenza migliori (l'errore fra  $\mathbf{x}^{(m)}$  e  $\mathbf{x}^*$  al crescere di  $m$  diventa piccolo più rapidamente).

L'algoritmo è ancora un procedimento di discesa, ma la direzione di spostamento per passare da  $\mathbf{x}^{(m)}$  a  $\mathbf{x}^{(m+1)}$  è solo al primo passo ( $m = 0$ ) quella di discesa più ripida  $\mathbf{r}^{(m)}$ , mentre in seguito è la direzione  $\mathbf{p}^{(m)}$  che ha la proprietà  $A\mathbf{p}^{(m)} \cdot \mathbf{p}^{(m-1)} = 0$ .

**[Approfondimento sul tema:**

Si scrive dunque  $\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} + \alpha_m \mathbf{p}^{(m)}$  (e quindi  $\mathbf{r}^{(m+1)} = \mathbf{r}^{(m)} - \alpha_m A\mathbf{p}^{(m)}$ ), e poi l'iterazione sulle direzioni di spostamento si esprime in questo modo:

$$\mathbf{p}^{(m+1)} = \mathbf{r}^{(m+1)} + \beta_{m+1} \mathbf{p}^{(m)},$$

con il parametro  $\beta_{m+1}$  che deve essere scelto in modo che  $A\mathbf{p}^{(m+1)} \cdot \mathbf{p}^{(m)} = 0$ .

Un calcolo analogo a quello fatto per l'algoritmo del gradiente dà il parametro  $\alpha$  che minimizza la quota  $\phi$  sulla semiretta  $\mathbf{x}^{(m)} + \alpha \mathbf{p}^{(m)}$ , fornendo

$$\alpha_m = \frac{\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{p}^{(m)}}{A\mathbf{p}^{(m)} \cdot \mathbf{p}^{(m)}};$$

per calcolare  $\beta_{m+1}$  si impone invece  $A\mathbf{p}^{(m+1)} \cdot \mathbf{p}^{(m)} = \mathbf{p}^{(m+1)} \cdot A\mathbf{p}^{(m)} = 0$ , e questo dà:

$$\beta_{m+1} = -\frac{\mathbf{r}^{(m+1)} \cdot A\mathbf{p}^{(m)}}{A\mathbf{p}^{(m)} \cdot \mathbf{p}^{(m)}}.$$

(Si può anche dimostrare che

$$\alpha_m = \frac{\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)}}{A\mathbf{p}^{(m)} \cdot \mathbf{p}^{(m)}}, \quad \beta_{m+1} = \frac{\mathbf{r}^{(m+1)} \cdot \mathbf{r}^{(m+1)}}{\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)}},$$

per cui il calcolo di questi coefficienti richiede principalmente il prodotto matrice–vettore  $A\mathbf{p}^{(m)}$ .)

In conclusione l'algoritmo del gradiente coniugato si scrive così: scelto arbitrariamente  $\mathbf{x}^{(0)}$ , calcolato  $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)}$  e posto  $\mathbf{p}^{(0)} = \mathbf{r}^{(0)}$ , per  $m \geq 0$  si calcoli

$$\begin{aligned}\alpha_m &= \frac{\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)}}{A\mathbf{p}^{(m)} \cdot \mathbf{p}^{(m)}} \\ \mathbf{x}^{(m+1)} &= \mathbf{x}^{(m)} + \alpha_m \mathbf{p}^{(m)} \\ \mathbf{r}^{(m+1)} &= \mathbf{r}^{(m)} - \alpha_m A\mathbf{p}^{(m)} \\ \beta_{m+1} &= \frac{\mathbf{r}^{(m+1)} \cdot \mathbf{r}^{(m+1)}}{\mathbf{r}^{(m)} \cdot \mathbf{r}^{(m)}} \\ \mathbf{p}^{(m+1)} &= \mathbf{r}^{(m+1)} + \beta_{m+1} \mathbf{p}^{(m)}.\end{aligned}$$

Il costo computazionale più rilevante è, come per il metodo del gradiente, il calcolo di un prodotto matrice–vettore (in questo caso  $A\mathbf{p}^{(m)}$ ). Si dimostra inoltre che nelle ipotesi 1 e 2 l’algoritmo fornisce la soluzione del sistema (1) in al massimo  $n$  passi ( $n$  è la dimensione della matrice  $A$ ); più importante, l’errore fra  $\mathbf{x}^{(m)}$  e  $\mathbf{x}^*$  al crescere di  $m$  diventa piccolo molto più rapidamente che nel caso dell’algoritmo del gradiente.]