



CALCOLO DEGLI AUTOVALORI E FONDAMENTI DELLA MATEMATICA NUMERICA (Il metodo delle potenze inverse e il metodo QR)

Nella lezione precedente abbiamo definito il metodo delle potenze per il calcolo dell'autovalore di modulo massimo di una matrice e abbiamo illustrato come stimare l'errore sulla base di dati calcolati a una determinata iterazione. In questa lezione, intendiamo applicare un ragionamento analogo per approssimare non più l'autovalore di modulo massimo, bensì, ad esempio, l'autovalore di modulo minimo. Infatti, in molte applicazioni è fondamentale conoscere gli autovalori estremi di una matrice, poiché essi spesso possiedono un significato fisico rilevante. Ad esempio, nel caso di una struttura soggetta a vibrazioni, può essere importante individuare la frequenza massima e minima di vibrazione. Andremo dunque a comprendere come la logica alla base del metodo delle potenze possa essere adattata per calcolare anche l'autovalore di modulo minimo. Questo metodo è noto come metodo delle potenze inverse.

Consideriamo un numero complesso arbitrario $\mu \in \mathbb{C}$ e definiamo la matrice M_μ , che dipende da μ , come segue

$$M_\mu = (A - \mu I),$$

dove A è la matrice di partenza e I è la matrice identità.

È evidente che, se μ appartiene allo spettro della matrice A , ossia è un autovalore di A , allora la matrice $M_\mu = (A - \mu I)$ risulta singolare, in quanto il determinante di $A - \mu I$ sarebbe nullo. Supponiamo pertanto che $\mu \in \mathbb{C}$ non sia un autovalore di A ed esaminiamo la struttura spettrale di M_μ . Osserviamo che lo spettro della matrice $A - \mu I$ è dato da

$$\sigma(M_\mu) = \{\lambda_1 - \mu, \dots, \lambda_n - \mu\},$$

dove $\lambda_i \in \sigma(A)$, cioè λ_i sono gli autovalori di A . Infatti, sottrarre una costante scalare μ dalla diagonale di A (ovvero considerare $A - \mu I$) comporta semplicemente una traslazione degli autovalori di A di $-\mu$. Questa affermazione si verifica direttamente calcolando il polinomio caratteristico della matrice $A - \mu I$. A questo punto possiamo osservare la matrice M_μ^{-1} ha uno spettro

$$\sigma(M_\mu^{-1}) = \{(\lambda_1 - \mu)^{-1}, \dots, (\lambda_n - \mu)^{-1}\},$$

ovvero, lo spettro della matrice inversa M_μ^{-1} , cioè $\sigma(M_\mu^{-1})$, sarà costituito dai reciproci degli autovalori di $A - \mu I$. Ne consegue che l'autovalore di modulo massimo di matrice M_μ^{-1} corrisponde a quello per cui il denominatore $|\lambda_i - \mu|$ è minimo

$$|\lambda_i - \mu| = \text{minimo}, \quad \lambda_i \in \sigma(A).$$

Poiché la matrice inversa M_μ^{-1} ha come autovalori i reciproci degli autovalori della matrice $M_\mu = A - \mu I$, ossia $(\lambda_i - \mu)^{-1}$, con $i = 1, \dots, n$, è evidente che l'autovalore di modulo massimo di M_μ^{-1} corrisponde al valore λ_i per cui il modulo $|\lambda_i - \mu|$ è minimo. Ne consegue che, applicando il metodo delle potenze alla matrice M_μ^{-1} , si otterrà una successione che converge verso l'autovalore λ_i della matrice A più vicino al numero complesso μ assegnato. In altre parole, il metodo delle potenze applicato a $(A - \mu I)^{-1}$ consente di individuare l'autovalore di A più prossimo a μ . Inoltre, ponendo

$$\mu = 0,$$

e assumendo che l'autovalore di modulo minimo della matrice sia unico (quindi una situazione duale rispetto a quella vista nella precedente lezione per il calcolo dell'autovalore di modulo massimo)



$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_{n-1}| > |\lambda_n|,$$

allora il metodo delle potenze inverse consente di approssimare l'autovalore di modulo minimo della matrice A e l'autovettore a esso associato. Infatti, se si assume $\mu = 0$, si ottiene la matrice

$$M_0^{-1} = (A - 0I)^{-1} = A^{-1}.$$

Applicando il metodo delle potenze alla matrice A^{-1} , si genera una successione che, attraverso il quoziente di Rayleigh, converge all'autovalore di modulo minimo della matrice A , a condizione che tale autovalore esista.

Abbiamo esaminato il metodo delle potenze applicato alla matrice A , nonché una variante ibrida del metodo applicata alla matrice $M_\mu^{-1} = (A - \mu I)^{-1}$, con l'obiettivo di determinare l'autovalore di A più vicino a un dato numero complesso μ . Pertanto, qualora si desideri individuare l'autovalore di A più prossimo a un certo $\mu \in \mathbb{C}$, è sufficiente applicare il metodo delle potenze alla matrice M_μ^{-1} , ottenendo esattamente tale informazione. In particolare, nel caso in cui $\mu = 0$, la matrice diventa $M_0^{-1} = A^{-1}$. In tal modo, si ottiene l'autovalore di A con modulo minimo, poiché si sta cercando di minimizzare $|\lambda_i - 0| = |\lambda_i|$, che equivale a trovare l'autovalore di modulo minimo di A .

Esaminiamo ora l'applicazione del metodo delle potenze alla matrice M_μ^{-1} e cerchiamo di adattare l'algoritmo del metodo stesso a questo caso specifico. Mantenendo invariata la struttura del metodo delle potenze, otteniamo

$$\begin{aligned} (A - \mu I)\mathbf{z}^{(k)} &= \mathbf{q}^{(k-1)}, \\ \mathbf{q}^{(k)} &= \frac{\mathbf{z}^{(k)}}{\|\mathbf{z}^{(k)}\|_2}, \\ \eta^{(k)} &= (\mathbf{q}^{(k)})^T A \mathbf{q}^{(k)}. \end{aligned}$$

Tutto rimane invariato, con l'unica differenza che, mentre in precedenza si aveva avuto $\mathbf{z}^{(k)} = A \mathbf{q}^{(k-1)}$, ora il ruolo di A è assunto da $(A - \mu I)^{-1}$. Tuttavia, poiché l'operazione di moltiplicazione per $(A - \mu I)^{-1}$ a destra equivale a risolvere un sistema lineare con $(A - \mu I)$ a sinistra, la prima relazione dell'algoritmo diventa

$$(A - \mu I)\mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{q}^{(k-1)}.$$

Infine, mentre in precedenza l'approssimazione dell'autovalore era indicata con $\lambda^{(k)} = (\mathbf{q}^{(k)})^T A \mathbf{q}^{(k)}$, in questo contesto viene denotata con $\eta^{(k)} = (\mathbf{q}^{(k)})^T A \mathbf{q}^{(k)}$.

È importante sottolineare che, per il calcolo di $\mathbf{z}^{(k)}$, si verifica una differenza sostanziale rispetto al metodo delle potenze classico. In quest'ultimo caso, infatti, $\mathbf{z}^{(k)}$ veniva ottenuto semplicemente mediante la moltiplicazione della matrice A per il vettore $\mathbf{q}^{(k-1)}$, ossia

$$\mathbf{z}^{(k)} = A \mathbf{q}^{(k-1)}$$

un'operazione diretta di prodotto matrice-vettore. Nel caso del metodo delle potenze inverse, invece, è necessario risolvere un sistema lineare associato alla matrice $A - \mu I$, ovvero

$$(A - \mu I)\mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{q}^{(k-1)}.$$

Il procedimento relativo al metodo delle potenze inverse risulta complessivamente più oneroso rispetto a quello del metodo delle potenze classico, in quanto richiede, a ogni iterazione k , la risoluzione di un



sistema lineare. Tuttavia, poiché la matrice $M_\mu = A - \mu I$ rimane invariata al variare di k , risulta conveniente eseguire una fattorizzazione preliminare del tipo

$$M_\mu = L_\mu U_\mu,$$

come prodotto di una matrice triangolare inferiore L_μ e di una matrice triangolare superiore U_μ . In questo modo, a ogni iterazione, la risoluzione del sistema lineare si riduce alla soluzione sequenziale di due sistemi triangolari: uno con matrice triangolare inferiore e l'altro con matrice triangolare superiore

$$\begin{cases} L_\mu \mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{q}^{(k-1)} \\ U_\mu \mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{y}^{(k)} \end{cases}.$$

In particolare, dato il vettore $\mathbf{q}^{(k-1)}$, si procede innanzitutto al calcolo del vettore $\mathbf{y}^{(k)}$ come soluzione del sistema triangolare inferiore $L_\mu \mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{q}^{(k-1)}$. Successivamente, il vettore $\mathbf{y}^{(k)}$ viene impiegato come termine noto nella risoluzione del sistema triangolare superiore $U_\mu \mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{y}^{(k)}$, al fine di determinare il vettore $\mathbf{z}^{(k)}$.

Abbiamo dunque individuato una modalità operativa per applicare il metodo delle potenze inverse, al fine di determinare l'autovalore di modulo minimo di una matrice oppure quello più vicino a un numero complesso prefissato. La convergenza dell'algoritmo risulta del tutto analoga a quella osservata nel caso del metodo delle potenze classico: essa è lineare con velocità pari a $\left| \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}} \right|$ nel caso in cui la matrice sia diagonalizzabile, mentre è quadratica nel caso di una matrice simmetrica.

Passiamo ora all'applicazione del metodo delle potenze inverse al caso concreto della seguente matrice

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 \end{pmatrix},$$

i cui autovalori (reali) sono

$$\lambda_1 = 7.0747, \quad \lambda_2 = -3.1879, \quad \lambda_3 = -0.8868.$$

L'autovalore di modulo minimo in questo caso è

$$\lambda_3 = -0.8868,$$

il cui autovettore associato è

$$\mathbf{x}_3 = [0.155, -0.824, 0.545]^T.$$

Applicando il metodo delle potenze inverse, ovvero il metodo delle potenze applicato ad A^{-1} , partendo dal vettore

$$\mathbf{q}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{3}} [1, 1, 1]^T,$$

dopo cinque iterazioni risulta

$$\eta^{(5)} = -0.886, \quad \mathbf{q}^{(5)} = [0.156, -0.824, 0.544]^T.$$

Quindi stiamo commettendo un errore che è inferiore all'uno per cento.

Procedendo con la verifica dell'analisi a posteriori introdotta in precedenza, si osserva che la differenza tra l'autovalore esatto e l'autovalore approssimato è dell'ordine di due milionesimi

$$|\eta^{(5)} - \lambda_3| = 2.62 \cdot 10^{-6},$$

mentre il calcolo del residuo risulta

$$\|\hat{\mathbf{r}}\|_2 = \|A\hat{\mathbf{x}} - \hat{\eta}\hat{\mathbf{x}}\|_2 = 4.6 \cdot 10^{-3},$$

e dunque la stima a posteriori

$$\min_{\lambda \in \sigma(A)} |\hat{\eta} - \lambda| \leq \|\hat{\mathbf{r}}\|_2,$$

è perfettamente soddisfatta



$$2.62 \cdot 10^{-6} < 4.6 \cdot 10^{-3}.$$

Il procedimento del metodo delle potenze (e delle potenze inverse) consente di calcolare gli autovalori di modulo massimo e minimo della matrice A . Perseguiamo la nostra trattazione esaminando brevemente come sia possibile determinare tutti gli autovalori della matrice A , qualora tale operazione risultasse di interesse.

Supponiamo dunque di disporre di una matrice A e di voler calcolare simultaneamente l'intero spettro dei suoi autovalori. In questo contesto, il metodo delle potenze non risulta più applicabile, in quanto richiederebbe un'applicazione sequenziale: prima per l'autovalore di modulo massimo, quindi per il secondo, il terzo, e così via. Tale approccio risulterebbe non solo computazionalmente oneroso, ma inoltre non garantisce la possibilità di distinguere autovalori separati in modulo, qualora la matrice ne presenti di coincidenti o vicini tra loro.

A tal fine, introduciamo il cosiddetto metodo QR, il quale è basato su trasformazioni di similitudine. Utilizzando trasformazione per similitudine, si riformula il problema tenendo presente che, trasformando una matrice A attraverso trasformazioni di un determinato tipo, si ottengono matrici che condividono gli stessi autovalori di A .

Sia A una matrice arbitraria e sia P una matrice invertibile qualsiasi. Consideriamo la trasformazione di A definita da

$$S = P^{-1}AP,$$

allora la matrice risultante S si definisce simile ad A . Questo implica che gli autovalori della matrice S sono gli stessi della matrice A

$$\sigma(S) = \sigma(A),$$

ovvero gli spettri di S ed A coincidono. La trasformazione che manda A in S si dice trasformazione di similitudine.

Idealmente, si potrebbe partire da una matrice A qualsiasi e applicare una trasformazione di similitudine, al fine di ridurre A a una nuova matrice S in una forma significativamente più semplice, ad esempio triangolare o addirittura diagonale. In tal caso, il problema della determinazione degli autovalori risulterebbe risolto, poiché gli autovalori di A , essendo coincidenti con quelli di S , si troverebbero tutti sulla diagonale principale di S . Nella pratica, tuttavia, tale riduzione non avviene in un unico passaggio, bensì mediante una successione di trasformazioni per similitudine che, nel limite, conducono a una matrice S di forma particolarmente semplice.

Introduciamo ora il concetto di matrici ortogonali. Una matrice ortogonale è una matrice quadrata la cui inversa coincide con la sua trasposta, ovvero, data una matrice P ortogonale, si ha

$$P^{-1} = P^T.$$

Le matrici ortogonali trovano impiego nelle trasformazioni di similitudine grazie a una proprietà fondamentale: trasformando una matrice A in una matrice simile S mediante matrici ortogonali P , il condizionamento del problema relativo al calcolo degli autovalori rimane invariato. In particolare, dall'analisi di stabilità del problema del calcolo degli autovalori (presentata nella precedente lezione), abbiamo mostrato che gli autovalori di A subiscono variazioni contenute in presenza di piccole perturbazioni. È dunque essenziale preservare tale proprietà durante le trasformazioni, evitando che gli errori vengano amplificati. Si può dimostrare che, adottando matrici ortogonali per la trasformazione di



A , il condizionamento del problema non peggiora. Questo è il motivo per cui le matrici ortogonali rivestono un ruolo di primaria importanza in questo ambito.

Una prima tipologia di matrici ortogonali è costituita dalle riflessioni rispetto a un iperpiano, dette anche riflessioni piane, che, sebbene così denominate, si estendono in uno spazio di dimensione n . Queste riflessioni permettono di trasformare un vettore \mathbf{v} in un nuovo vettore \mathbf{z} , che rappresenta la riflessione di \mathbf{v} rispetto a un iperpiano \mathbf{w} . In particolare, consideriamo il vettore \mathbf{z} quale immagine speculare di \mathbf{v} attraverso l'iperpiano \mathbf{w} , ottenendo

$$\mathbf{z} = P\mathbf{v},$$

che rappresenta la trasformazione del vettore \mathbf{v} per effetto dell'applicazione di una matrice di riflessione P . Le matrici P di riflessione vengono chiamate matrici di Householder. Si può verificare che tali matrici sono espresse dalla formula

$$P = H = I - 2\mathbf{w}\mathbf{w}^T.$$

Un'altra categoria di matrici ortogonali è costituita dalle matrici di rotazioni piane, note come matrici di Givens. Consideriamo un vettore \mathbf{v} nello spazio di dimensione n e applichiamo una rotazione piana a \mathbf{v} . Per rotazione piana si intende la rotazione del vettore \mathbf{v} , in uno specifico piano determinato da due coordinate, attraverso un angolo θ , tale che

$$\mathbf{z} = P\mathbf{v},$$

dove \mathbf{z} è il vettore ruotato di un angolo θ . La matrice P si può caratterizzare nel seguente modo

$$P = G = \begin{pmatrix} \sin(\theta) & \cos(\theta) \\ -\cos(\theta) & \sin(\theta) \end{pmatrix},$$

dove la matrice G indica la matrice di Givens e θ l'angolo di rotazione.

Il metodo QR sfrutta trasformazioni di similitudine basate su matrici ortogonali. Si tratta probabilmente del metodo più efficace per approssimare simultaneamente tutti gli autovalori della matrice A . Il metodo QR si sviluppa nel seguente modo: data la matrice iniziale $T^{(0)} = A$, si genera una successione di matrici $T^{(k)}$, con $k = 1, 2, \dots$, attraverso la fattorizzazione

$$Q^{(k)}R^{(k)} = T^{(k-1)},$$

detta fattorizzazione QR, e la trasformazione

$$T^{(k)} = R^{(k)}Q^{(k)},$$

Più precisamente, ad ogni iterazione k , si determina una matrice ortogonale $Q^{(k)}$, tale che $Q^{(k)-1} = Q^{(k)T}$, e una matrice triangolare superiore $R^{(k)}$, soddisfacendo la relazione $Q^{(k)}R^{(k)} = T^{(k-1)}$.

Non verrà descritto nel dettaglio l'algoritmo per effettuare la fattorizzazione QR. Tuttavia, è importante sottolineare che tale fattorizzazione può essere ottenuta mediante l'utilizzo delle matrici precedentemente introdotte, ossia le matrici di Givens (rotazioni) e le matrici di Householder (riflessioni). Attraverso questo procedimento, si ottengono due matrici $Q^{(k)}$ e $R^{(k)}$. Moltiplicandole tra loro, ma in ordine invertito, si genera una nuova matrice che indichiamo con $T^{(k)}$

$$T^{(k)} = R^{(k)}Q^{(k)}.$$

Continuando iterativamente in questa maniera, si genera una successione di matrici $\{T^{(k)}\}$. In particolare, partendo dall'iterazione $k = 1$, risulta che

$$\begin{aligned} Q^{(1)}R^{(1)} &= T^{(0)}, \\ T^{(1)} &= R^{(1)}Q^{(1)}, \end{aligned}$$

da cui, ricordando che $T^{(0)} = A$, segue che

$$T^{(1)} = Q^{(1)T}AQ^{(1)},$$



ovvero, $T^{(1)}$ è una matrice simile alla matrice A dato che, per ipotesi, $Q^{(1)}$ è una matrice ortogonale

$$Q^{(1)T} = Q^{(1)-1},$$

per cui

$$T^{(1)} = Q^{(1)-1} A Q^{(1)},$$

La trasformazione $T^{(1)} = Q^{(1)-1} A Q^{(1)}$ è una trasformazione di similitudine. Allora $T^{(1)}$ è simile ad A ed in particolare si dice che

$T^{(1)}$ è una matrice ortogonalmente simile ad A .

Osserviamo che questa relazione vale per ogni iterazione $k \geq 1$.

Analizziamo il comportamento limite di questo metodo di trasformazione per similitudine. Il teorema di convergenza del metodo QR, il quale si basa sulle iterazioni QR, afferma che, qualora gli autovalori della matrice A soddisfino la seguente relazione

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > \dots > |\lambda_{n-1}| > |\lambda_n|,$$

ovvero, se tali autovalori sono tutti distinti, allora la successione $\{T^{(k)}\}$ converge a una matrice triangolare superiore. Inoltre, nel caso in cui A sia simmetrica, la successione converge a una matrice diagonale. A questo punto, per la matrice finale, che sia essa triangolare superiore o diagonale, risulta immediato calcolare i suoi autovalori, in quanto questi corrispondono esattamente agli elementi presenti sulla diagonale principale. Inoltre, è possibile verificare che al passo k ,

$$|T_{ij}^{(k)}| \approx \left| \frac{\lambda_i}{\lambda_j} \right|^k, \quad i > j, \quad \text{per } k \rightarrow \infty,$$

ovvero, gli elementi $|T_{ij}^{(k)}|$ si comportano circa come $\left| \frac{\lambda_i}{\lambda_j} \right|^k$, con $i > j$, per k che tende all'infinito. Dato che,

per $i > j$, $\left| \frac{\lambda_i}{\lambda_j} \right| < 1$, allora la quantità $\left| \frac{\lambda_i}{\lambda_j} \right|^k$ tende a zero al crescere di k .

Analizziamo ora concretamente il comportamento del metodo QR applicato alla matrice

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 \end{pmatrix},$$

i cui autovalori (reali) in valore assoluto sono

$$|\lambda_1| = 7.04, \quad |\lambda_2| = 3.19, \quad |\lambda_3| = 0.88.$$

Dopo 20 iterazioni dal metodo QR troviamo che

$$T^{(20)} = \begin{pmatrix} 7.04 & 1.45 \cdot 10^{-6} & 2.19 \cdot 10^{-15} \\ 1.45 \cdot 10^{-6} & -3.18 & -1.95 \cdot 10^{-11} \\ 1.06 \cdot 10^{-17} & -1.95 \cdot 10^{-11} & -0.88 \end{pmatrix}.$$

La matrice $T^{(20)}$ presenta elementi diagonali che stanno convergendo verso gli autovalori della matrice iniziale A , mentre gli elementi fuori diagonale risultano molto piccoli e prossimi allo zero. Osserviamo che, in questo caso, il limite della successione delle trasformazioni QR è una matrice diagonale, poiché la matrice A è simmetrica. Se invece A non fosse stata simmetrica, il limite sarebbe stato rappresentato da una matrice triangolare superiore, pur mantenendo gli autovalori della matrice originaria sulla diagonale principale.

Abbiamo dunque esaminato due approcci distinti per il calcolo degli autovalori di una matrice arbitraria. Il metodo delle potenze, che permette di determinare gli autovalori estremi della matrice, e il metodo QR, che consente invece di calcolare simultaneamente tutti gli autovalori. Il metodo QR si basa



sull'impiego di trasformazioni per similitudine, le quali utilizzano matrici ortogonali, scelte per le loro favorevoli proprietà di condizionamento.