Calcolo Scientifico

Tommaso Baiocchi

Anno Accademico 2025-26

Indice

1 Introduzione

Lo scopo di questo corso è sviluppare strategie numeriche efficaci per la soluzione di due classi di problemi, spesso incontrate nelle applicazioni:

Sistemi lineari della forma $Ax = b$, dove A è o quadrata e invertibile, o data come problema dei minimi quadrati $\min \|Ax - b\|_2$, con A rettangolare e non necessariamente di rango massimo.

Problemi agli autovalori della forma $Av = \lambda v$ per qualche $v \neq 0$. A volte, tutti gli autovalori e autovettori sono ricercati. In altri casi, solo alcuni di essi sono rilevanti. Esempi includono quelli con modulo più grande o più piccolo, o racchiusi in qualche regione $\Omega \subseteq \mathbb{C}$.

In entrambi i casi abbiamo bisogno di differenziare il nostro approccio per problemi che sono "piccoli" o "grandi". Nel primo caso, saranno applicabili i cosiddetti **metodi diretti**. Nel secondo, quando la matrice A è così grande che è impossibile memorizzarla a meno che non abbia qualche struttura particolare, avremo bisogno di impiegare tecniche di proiezione per ridurre la dimensionalità del problema. I metodi in quest'ultima categoria sono noti come **metodi iterativi**.

2 Discretizzazione alle differenze di problemi differenziali

Consideriamo il problema di Cauchy

$$\begin{cases} u''(x) = f(x), & x \in (a, b), \\ u(a) = \alpha, \\ u(b) = \beta, \end{cases} \tag{2.1}$$

per una funzione incognita $u : [a, b] \to \mathbb{R}$, e alcune condizioni al contorno $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Approssimiamo la soluzione $u(x)$ di (2.1) mediante i suoi valori nei punti discreti $x_j = a + \frac{j(b-a)}{n+1}$, per $j = 1, \ldots, n$. Si noti che, i punti x_j sono equispaziati su una griglia sul segmento lineare $[a, b]$, e la distanza tra due punti adiacenti è $h := \frac{b-a}{n+1}$. In pratica, cerchiamo un vettore $\hat{\mathbf{u}} \in \mathbb{R}^n$, tale che

$$\hat{\mathbf{u}}_j \approx u(x_j), \quad j = 1, \ldots, n.$$

L'idea è di esprimere $\hat{\mathbf{u}}$ come la soluzione di un sistema lineare che rappresenta una controparte discreta di (2.1). Per esempio, valutando (2.1) in ogni punto x_j otteniamo le n equazioni $u''(x_j) = f(x_j)$, dove possiamo facilmente ottenere i termini noti valutando $f(x)$. Tuttavia, abbiamo ancora bisogno di chiarire come trattare le valutazioni della derivata seconda della soluzione e come relazionare queste con il vettore $\hat{\mathbf{u}}$.

2.1 Discretizzazione di operatori differenziali

Un'idea naturale per approssimare la derivata prima a partire da valutazioni della funzione è utilizzare i rapporti incrementali. Ad esempio, possiamo fare uso delle espressioni

$$D_+ u(x_j) = \frac{u(x_{j+1}) - u(x_j)}{h}, \quad D_- u(x_j) = \frac{u(x_j) - u(x_{j-1})}{h},$$

che convergono a $u'(x_j)$ per $h \to 0$ (ovvero quando aumentiamo il numero n di punti della griglia all'interno di $[a, b]$), con un errore $\mathcal{O}(h)$.

Più in generale, possiamo ricavare formule di approssimazione di questo tipo combinando sviluppi di Taylor di u valutati nei vari punti che vogliamo coinvolgere.

Esempio 1 Calcoliamo una formula di approssimazione per $u'(x_j)$ che richieda solo la valutazione di u in x_{j-1} e x_{j+1}. Sviluppando u in x_j, e valutando lo sviluppo in x_{j+1} e x_{j-1}, otteniamo

$$u(x_{j+1}) = u(x_j) + u'(x_j)h + \frac{u''(x_j)}{2}h^2 + \mathcal{O}(h^3),$$
$$u(x_{j-1}) = u(x_j) - u'(x_j)h + \frac{u''(x_j)}{2}h^2 + \mathcal{O}(h^3).$$

Sottraendo la 2' equazione dalla 1' e isolando $u'(x_j)$ avremo $u'(x_j) = \frac{u(x_{j+1})-u(x_{j-1})}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$. Questo ci porta alla formula

$$D_0 u(x_j) = \frac{u(x_{j+1}) - u(x_{j-1})}{2h} \approx u'(x_j),$$

che è anche nota come *approssimazione alle differenze finite centrate*. L'errore associato tende a zero come $\mathcal{O}(h^2)$.

L'approccio utilizzato nell'esempio precedente può essere reso sistematico eseguendo i seguenti passi:

- **Selezionare** i $k > 1$ punti che vogliamo coinvolgere nella formula.
- **Calcolare** lo sviluppo di Taylor troncato in x_j di grado $k-1$, e valutarlo in tutti i punti selezionati nel passo precedente.
- **Considerare** una combinazione lineare con coefficienti incogniti degli k sviluppi troncati.
- **Ricavare** i coefficienti della combinazione lineare (che equivale a ricavare la formula), imponendo che il fattore che moltiplica $u'(x_j)$ sia uguale a 1, e che tutti gli altri fattori, che moltiplicano le altre derivate di u in x_j, siano 0.

Esempio 2. Per trovare un'approssimazione di $u'(x_j)$ che si basi solo su $u(x_j), u(x_{j-1}), u(x_{j-2})$, consideriamo gli sviluppi di Taylor centrati in x_j:

$$\begin{aligned}
u(x_j) &= u(x_j) \\
u(x_{j-1}) &= u(x_j) - u'(x_j)h + \frac{u''(x_j)}{2}h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\
u(x_{j-2}) &= u(x_j) - 2u'(x_j)h + \frac{u''(x_j)}{2}(2h)^2 + \mathcal{O}(h^3) \\
&= u(x_j) - 2u'(x_j)h + 2u''(x_j)h^2 + \mathcal{O}(h^3)
\end{aligned}$$

La combinazione lineare descritta sopra diventa

$$\begin{aligned}
c_1 u(x_j) &= c_1 u(x_j) \\
c_2 u(x_{j-1}) &= c_2 u(x_j) - c_2 u'(x_j)h + c_2 \frac{u''(x_j)}{2}h^2 + \mathcal{O}(h^3) \\
c_3 u(x_{j-2}) &= c_3 u(x_j) - 2c_3 u'(x_j)h + 2c_3 u''(x_j)h^2 + \mathcal{O}(h^3)
\end{aligned}$$

Quindi otteniamo

$$c_1u(x_j)+c_2u(x_{j-1})+c_3u(x_{j-2}) = (c_1+c_2+c_3)u(x_j)+(-c_2h-2c_3h)u'(x_j)+\left(\frac{c_2}{2}h^2+2c_3h^2\right)u''(x_j)+\mathcal{O}(h^3)$$

Imponiamo che questa combinazione approssimi $u'(x_j)$:

$$\begin{cases} c_1+c_2+c_3=0 & \text{(coefficiente di } u(x_j)=0) \\ -c_2h-2c_3h=1 & \text{(coefficiente di } u'(x_j)=1) \\ \frac{c_2}{2}h^2+2c_3h^2=0 & \text{(coefficiente di } u''(x_j)=0) \end{cases}$$

Dividendo la seconda equazione per h e la terza per h^2, otteniamo il sistema

$$\begin{cases} c_1+c_2+c_3=0 \\ -c_2-2c_3=\frac{1}{h} \\ \frac{c_2}{2}+2c_3=0 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} c_1+c_2+c_3=0 \\ c_2+2c_3=-\frac{1}{h} \\ c_2+4c_3=0 \end{cases}$$

che porta alla formula

$$u'(x_j) \approx D_2u(x_j) = \frac{3u(x_j)-4u(x_{j-1})+u(x_{j-2})}{2h}.$$

Lo stesso approccio può essere applicato per approssimare la derivata seconda, modificando il sistema lineare imponendo che il coefficiente di $u''(x_j)$ sia uguale a 1 e gli altri a 0. Per esempio, se consideriamo un'approssimazione della forma $u''(x_j) \approx c_1u(x_j)+c_2u(x_{j+1})+c_3u(x_{j-1})$ e combiniamo lo sviluppo di Taylor troncato al grado 2 otteniamo il sistema lineare

$$\begin{cases} c_1+c_2+c_3=0 \\ c_2-c_3=0 \\ c_2+c_3=\frac{2}{h^2} \end{cases}$$

che porta alla formula

$$u''(x_j) \approx D^2u(x_j) = \frac{u(x_{j-1})-2u(x_j)+u(x_{j+1})}{h^2}, \tag{2.2}$$

con un errore associato che tende a 0 come $\mathcal{O}(h^2)$. L'approccio si adatta analogamente a derivate di ordine superiore.

2.2 Discretizzazione del problema di Poisson 1D

Abbiamo ora tutti gli ingredienti per associare un sistema lineare al problema di Cauchy (2.1), che è anche noto come *problema di Poisson*. Più specificamente, valutiamo $u''(x)=f(x)$ in ogni punto della griglia e sostituiamo $u''(x_j)$ con l'approssimazione alle differenze finite in (2.2); questo produce il sistema lineare di equazioni

$$\begin{cases} \dfrac{\widehat{\mathbf{u}}_{j-1}-2\widehat{\mathbf{u}}_j+\widehat{\mathbf{u}}_{j+1}}{h^2}=f(x_j) \\ \widehat{\mathbf{u}}_0=\alpha, \quad \widehat{\mathbf{u}}_{n+1}=\beta \end{cases} \quad , \qquad j=1,\dots,n.$$

Infine, riscriviamo quest'ultimo in forma matriciale come $T^{(h)}\widehat{\mathbf{u}} = \mathbf{f}^{(h)}$ dove

$$T^{(h)} := \frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad \mathbf{f}^{(h)} := \begin{bmatrix} f(x_1) - \dfrac{\alpha}{h^2} \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{n-1}) \\ f(x_n) - \dfrac{\beta}{h^2} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n. \tag{2.3}$$

Per ricapitolare, risolvere (2.3) fornisce un'approssimazione $\widehat{\mathbf{u}}$ del vettore $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ contenente le valutazioni $\mathbf{u}_j = u(x_j)$ della vera soluzione di (2.1) sulla griglia equispaziata; quanto è buona questa approssimazione? Idealmente, vorremmo avere $\|\mathbf{u} - \widehat{\mathbf{u}}\| = \mathcal{O}(h^2)$ per una certa norma matriciale. Per dare un'analisi dell'errore rigorosa, introduciamo alcune nozioni.

Definizione Sia $A^{(h)}\widehat{\mathbf{u}} = \mathbf{b}^{(h)}$ il sistema lineare risultante dalla discretizzazione di un'equazione differenziale lineare con un metodo alle differenze finite su una griglia equispaziata relativa al parametro h, e sia $\mathbf{u}$ il vettore contenente le valutazioni della vera soluzione sulla griglia. Chiamiamo *errore di troncamento locale* il vettore

$$\tau^{(h)} := A^{(h)}\mathbf{u} - \mathbf{b}^{(h)}$$

e *errore globale* il vettore

$$\mathbf{e}^{(h)} := \mathbf{u} - \widehat{\mathbf{u}}.$$

Osservazione Si noti che, sottraendo $A^{(h)}\widehat{\mathbf{u}} = \mathbf{b}^{(h)}$ da $A^{(h)}\mathbf{u} = \mathbf{b}^{(h)} + \tau^{(h)}$, otteniamo

$$A^{(h)}\mathbf{e}^{(h)} = \tau^{(h)} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{e}^{(h)} = (A^{(h)})^{-1}\tau^{(h)}$$

il che significa che l'errore globale è la soluzione dell'equazione differenziale discretizzata dove l'errore di troncamento locale sostituisce il termine noto.

Una volta fissati il problema di Cauchy e la griglia, l'errore di troncamento locale dipende solo dalla formula alle differenze finite utilizzata per discretizzare l'operatore differenziale. Per esempio, nel caso di (2.1) con la formula di approssimazione (2.2) otteniamo

$$\tau_j = (T^{(h)}\mathbf{u} - f^{(h)})_j = \frac{1}{h^2}(\mathbf{u}_{j-1} - 2\mathbf{u}_j + \mathbf{u}_{j+1}) - \mathbf{f}_j$$

Infatti se sviluppiamo in serie di Taylor ogni termine centrato in x_j:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{j-1} &= u(x_{j-1}) = u(x_j - h) = u(x_j) - hu'(x_j) + \frac{h^2}{2}u''(x_j) - \frac{h^3}{6}u'''(x_j) + \frac{h^4}{24}u^{(4)}(x_j) + \mathcal{O}(h^5) \\ \mathbf{u}_j &= u(x_j) \\ \mathbf{u}_{j+1} &= u(x_{j+1}) = u(x_j + h) = u(x_j) + hu'(x_j) + \frac{h^2}{2}u''(x_j) + \frac{h^3}{6}u'''(x_j) + \frac{h^4}{24}u^{(4)}(x_j) + \mathcal{O}(h^5) \end{aligned}$$

Calcoliamo la combinazione alle differenze finite:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{j-1} - 2\mathbf{u}_j + \mathbf{u}_{j+1} = &\left[u(x_j) - hu'(x_j) + \frac{h^2}{2}u''(x_j) - \frac{h^3}{6}u'''(x_j) + \frac{h^4}{24}u^{(4)}(x_j)\right] \\ &- 2u(x_j) \\ &+ \left[u(x_j) + hu'(x_j) + \frac{h^2}{2}u''(x_j) + \frac{h^3}{6}u'''(x_j) + \frac{h^4}{24}u^{(4)}(x_j)\right] + \mathcal{O}(h^5) \end{aligned}$$

Semplificando i termini otteniamo quindi

$$\mathbf{u}_{j-1} - 2\mathbf{u}_j + \mathbf{u}_{j+1} = h^2 u''(x_j) + \frac{h^4}{12} u^{(4)}(x_j) + \mathcal{O}(h^5)$$

Dividendo per h^2:

$$\frac{1}{h^2}(\mathbf{u}_{j-1} - 2\mathbf{u}_j + \mathbf{u}_{j+1}) = u''(x_j) + \frac{h^2}{12} u^{(4)}(x_j) + \mathcal{O}(h^3)$$

Ma dall'equazione differenziale originale sappiamo che $u''(x_j) = f(x_j) = \mathbf{f}_j$, quindi:

$$\begin{aligned}
\tau_j &= \frac{1}{h^2}(\mathbf{u}_{j-1} - 2\mathbf{u}_j + \mathbf{u}_{j+1}) - \mathbf{f}_j \\
&= \left[u''(x_j) + \frac{h^2}{12} u^{(4)}(x_j) + \mathcal{O}(h^3)\right] - u''(x_j) \\
&= \frac{h^2}{12} u^{(4)}(x_j) + \mathcal{O}(h^3)
\end{aligned}$$

Pertanto $\tau_j = \mathcal{O}(h^2)$. Per ottenere un limite superiore sull'errore globale possiamo scrivere:

$$\|\mathbf{e}^{(h)}\| = \|(T^{(h)})^{-1}\tau^{(h)}\| \leq \|(T^{(h)})^{-1}\|\|\tau^{(h)}\|.$$

La disuguaglianza precedente dice che per garantire la convergenza alla vera soluzione quando $h \to 0$, è sufficiente assicurare che il prodotto $\|(T^{(h)})^{-1}\|\|\tau^{(h)}\|$ tenda a zero. Questo motiva le seguenti definizioni.

Definizione Sia $A^{(h)}\widehat{\mathbf{u}} = \mathbf{b}^{(h)}$ la discretizzazione di un'equazione differenziale lineare con un metodo alle differenze finite su una griglia equispaziata relativa al parametro h. Il metodo alle differenze finite si dice *consistente*, rispetto a una norma vettoriale $\|\cdot\|$, se

$$\lim_{h\to 0} \|\tau^{(h)}\| = 0$$

ed è *stabile* rispetto alla norma matriciale indotta se esistono $C, h_0 \in \mathbb{R}^+$ tali che

$$\|(A^{(h)})^{-1}\| \leq C < \infty, \qquad \forall h < h_0.$$

Infine, il metodo si dice *convergente* se

$$\lim_{h\to 0} \|\mathbf{e}^{(h)}\| = 0.$$

Osservazione È facile vedere che *consistente* + *stabile* $\Rightarrow$ *convergente*. Inoltre, quando il metodo è stabile, l'ordine di convergenza coincide con quello dell'errore di troncamento locale, infatti dall'equazione fondamentale $\mathbf{e}^{(h)} = (A^{(h)})^{-1}\tau^{(h)}$, prendendo le norme otteniamo:

$$\|\mathbf{e}^{(h)}\| = \|(A^{(h)})^{-1}\tau^{(h)}\| \leq \|(A^{(h)})^{-1}\| \cdot \|\tau^{(h)}\|$$

Se il metodo è *consistente*, allora $\|\tau^{(h)}\| \to 0$ per $h \to 0$.

Se il metodo è *stabile*, allora $\|(A^{(h)})^{-1}\| \leq C < \infty$ per h sufficientemente piccolo.

Combinando queste due proprietà

$$\|\mathbf{e}^{(h)}\| \leq C \cdot \|\tau^{(h)}\| \to 0 \quad \text{per } h \to 0$$

Quindi il metodo è convergente.

Per quanto riguarda l'ordine di convergenza: se $\|\tau^{(h)}\| = \mathcal{O}(h^p)$ e il metodo è stabile, allora

$$\|\mathbf{e}^{(h)}\| \leq C \cdot \mathcal{O}(h^p) = \mathcal{O}(h^p)$$

Questo significa che l'errore globale decade con lo stesso ordine p dell'errore di troncamento locale. Nel nostro caso specifico del problema di Poisson, poiché $\tau_j = \mathcal{O}(h^2)$ e il metodo è stabile, otteniamo $\|\mathbf{e}^{(h)}\| = \mathcal{O}(h^2)$.

2.3 Stabilità rispetto alla norma infinito per il problema di Poisson 1D

Dimostriamo che la norma infinito di $(T^{(h)})^{-1}$ è limitata superiormente da una costante indipendente da h (e da n). Per prima cosa, riscriviamo $T^{(h)} = -\frac{2}{h^2}B^{(h)}$, dove

$$B^{(h)} = I - C^{(h)} \qquad C^{(h)} := \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Per i teoremi di Gershgorin abbiamo che $\rho(C^{(h)}) < 1$, il che implica

$$(T^{(h)})^{-1} = -\frac{h^2}{2}(B^{(h)})^{-1} = -\frac{h^2}{2}\sum_{j\geq 0}(C^{(h)})^j.$$

infatti da $\rho(C^{(h)}) < 1$ la serie geometrica di matrici $\sum_{j\geq 0}(C^{(h)})^j$ converge a $(I - C^{(h)})^{-1} = (B^{(h)})^{-1}$.

Poiché $C^{(h)}$ è non negativa elemento per elemento, anche $(B^{(h)})^{-1}$ lo è; questo significa che la norma infinito di $(B^{(h)})^{-1}$ è ottenuta moltiplicando per il vettore e di tutti uno, ovvero

$$\|(T^{(h)})^{-1}\|_\infty = \frac{h^2}{2}\|(B^{(h)})^{-1}\|_\infty = \frac{h^2}{2}\|(B^{(h)})^{-1}e\|_\infty.$$

infatti per una matrice non negativa A, la norma infinito $\|A\|_\infty$ è il massimo della somma delle righe, che si ottiene proprio moltiplicando per il vettore di tutti uno.

Per stimare $(B^{(h)})^{-1}e$, introduciamo i vettori

$$p = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ \vdots \\ n \end{bmatrix}, \qquad s = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 9 \\ \vdots \\ n^2 \end{bmatrix},$$

e, con un calcolo diretto, osserviamo che

$$B^{(h)}p = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{n+1}{2} \end{bmatrix} \quad B^{(h)}s = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ \vdots \\ -1 \\ -1 + \frac{(n+1)^2}{2} \end{bmatrix} = -e + (n+1)B^{(h)}p.$$

Spiegazione dei calcoli

- Per $B^{(h)}p$: per le righe interne $j = 2, \ldots, n-1$ abbiamo:

$$(B^{(h)}p)_j = p_j - \frac{1}{2}(p_{j-1} + p_{j+1}) = j - \frac{1}{2}((j-1) + (j+1)) = 0$$

- Per la prima riga: $1 - \frac{1}{2}(0+2) = 0$
- Per l'ultima riga: $n - \frac{1}{2}(n-1+0) = \frac{n+1}{2}$

Pertanto $(B^{(h)})^{-1}e = -s + (n+1)p$, il che implica

$$\|(B^{(h)})^{-1}\|_\infty = \max_{j=1,\ldots,n} |(n+1)j - j^2| \leq \frac{(n+1)^2}{4},$$

e a sua volta

$$\|(T^{(h)})^{-1}\|_\infty \leq \frac{h^2}{2} \cdot \frac{(n+1)^2}{4} = \frac{(b-a)^2}{8},$$

che dimostra la stabilità del metodo, infatti dal calcolo della norma infinito

$$(B^{(h)})^{-1}e = -s + (n+1)p = \begin{bmatrix} -1 + (n+1)\cdot 1 \\ -4 + (n+1)\cdot 2 \\ -9 + (n+1)\cdot 3 \\ \vdots \\ -n^2 + (n+1)\cdot n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (n+1) - 1^2 \\ 2(n+1) - 2^2 \\ 3(n+1) - 3^2 \\ \vdots \\ n(n+1) - n^2 \end{bmatrix}$$

Quindi per $j = 1, \ldots, n$:

$$[(B^{(h)})^{-1}e]_j = j(n+1) - j^2 = -j^2 + (n+1)j$$

Questa è una parabola concava verso il basso. Il massimo si trova nel vertice:

$$j_{max} = \frac{n+1}{2}, \quad \text{valore massimo} = \frac{(n+1)^2}{4}$$

Dunque per sostituzione finale

$$\|(T^{(h)})^{-1}\|_\infty = \frac{h^2}{2}\|(B^{(h)})^{-1}e\|_\infty \leq \frac{h^2}{2} \cdot \frac{(n+1)^2}{4} = \frac{(b-a)^2}{8}$$

La maggiorazione è indipendente da h e n, quindi il metodo è stabile.

2.4 Problema di Poisson 2D

È abbastanza naturale generalizzare la discretizzazione di (2.1) al problema di Cauchy bidimensionale:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u(x,y)}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u(x,y)}{\partial y^2} = f(x,y) & (x,y) \in \Omega := [a,b] \times [a,b] \\ u(x,y) = u_0(x,y) & (x,y) \in \partial\Omega \end{cases}, \tag{2.4}$$

per una funzione incognita $u : \Omega \to \mathbb{R}$, e una data funzione $u_0(x,y) : \partial\Omega \to \mathbb{R}$.
Consideriamo la griglia quadrata uniforme di punti

$$\{(x_i, y_j) = (a + ih, a + jh) : \ i,j = 1, \dots, n\} \subset \Omega,$$

dove, ancora, $h = \frac{b-a}{n+1}$. Quindi, cerchiamo un'approssimazione del vettore $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{n^2}$ contenente le valutazioni della vera soluzione di (2.4) sulla griglia quadrata, con un ordinamento lessicografico per gli indici (i,j):

$$\mathbf{u} := \begin{bmatrix} u(x_1,y_1) \\ u(x_1,y_2) \\ \vdots \\ u(x_1,y_n) \\ u(x_2,y_1) \\ \vdots \\ u(x_2,y_n) \\ \vdots \\ u(x_n,y_1) \\ \vdots \\ u(x_n,y_n) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n^2}.$$

Per ottenere approssimazioni delle derivate seconde che coinvolgano solo valutazioni di $u(x,y)$ sulla griglia possiamo impiegare (2.2) considerando una delle due variabili come fissa; questo significa:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u(x_i,y_j)}{\partial x^2} &\approx \frac{u(x_{i-1},y_j) - 2u(x_i,y_j) + u(x_{i+1},y_j)}{h^2}, \\ \frac{\partial^2 u(x_i,y_j)}{\partial y^2} &\approx \frac{u(x_i,y_{j-1}) - 2u(x_i,y_j) + u(x_i,y_{j+1})}{h^2}. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Mediante (2.5), approssimiamo l'equazione $\frac{\partial^2 u(x_i,y_j)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x_i,y_j)}{\partial y^2} = f(x_i,y_j)$ con

$$\frac{u(x_{i-1},y_j) - 4u(x_i,y_j) + u(x_{i+1},y_j) + u(x_i,y_{j-1}) + u(x_i,y_{j+1})}{h^2} = f(x_i,y_j),$$

per $i,j = 1,\dots,n$ (quindi per ogni punto della griglia). Impilando queste equazioni in un unico sistema lineare otteniamo

$$T_{2d}^{(h)} \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{f}_{2d}^{(h)}, \tag{2.6}$$

dove

$$T_{2d}^{(h)} = \frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} M & I & & & \\ I & M & I & & \\ & I & M & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & I \\ & & & I & M \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n^2\times n^2}, \quad M = \begin{bmatrix} -4 & 1 & & & \\ 1 & -4 & 1 & & \\ & 1 & -4 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & -4 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}.$$

Analogamente al caso 1D, il termine noto tiene conto delle condizioni al contorno

$$\begin{aligned} u_{n+1,j} &= u(b, y_j) = u_0(b, y_j), \\ u_{i,n+1} &= u(x_i, b) = u_0(x_i, b), \\ u_{0,j} &= u(a, y_j) = u_0(a, y_j), \\ u_{i,0} &= u(x_i, a) = u_0(x_i, a), \end{aligned}$$

in modo che

$$\mathbf{f}_{2d}^{(h)} = \begin{bmatrix} f(x_1,y_1) - \dfrac{u_0(a,y_1)}{h^2} - \dfrac{u_0(x_1,a)}{h^2} \\ f(x_1,y_2) - \dfrac{u_0(a,y_2)}{h^2} \\ \vdots \\ f(x_1,y_n) - \dfrac{u_0(a,y_n)}{h^2} - \dfrac{u_0(x_1,b)}{h^2} \\ f(x_2,y_1) - \dfrac{u_0(x_2,a)}{h^2} \\ f(x_2,y_2) \\ \vdots \\ f(x_2,y_{n-1}) \\ f(x_2,y_n) - \dfrac{u_0(x_2,b)}{h^2} \\ \vdots \\ f(x_n,y_n) - \dfrac{u_0(b,y_n)}{h^2} - \dfrac{u_0(x_n,b)}{h^2} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n^2}.$$

Spiegazione della struttura del termine noto:

- **Punti interni** (es: $f(x_2, y_2)$): Nessuna correzione al contorno
- **Punti sul bordo sinistro** ($x = a$): Sottrazione di $\dfrac{u_0(a, y_j)}{h^2}$
- **Punti sul bordo destro** ($x = b$): Sottrazione di $\dfrac{u_0(b, y_j)}{h^2}$
- **Punti sul bordo inferiore** ($y = a$): Sottrazione di $\dfrac{u_0(x_i, a)}{h^2}$
- **Punti sul bordo superiore** ($y = b$): Sottrazione di $\dfrac{u_0(x_i, b)}{h^2}$
- **Punti d'angolo**: Doppia correzione

2.5 Stabilità rispetto alla norma 2 per il problema di Poisson 2D

Per fornire un altro esempio di risultati di convergenza per la discretizzazione di equazioni differenziali, per vettori che rappresentano valutazioni di funzioni sulla griglia quadrata $n \times n$, consideriamo la norma 2 scalata:

$$\|u\|_{l_2} := h\|u\|_2 = \frac{b-a}{n+1}\sqrt{\sum_{j=1}^{n^2} |u_j|^2}.$$

Spiegazione della norma scalata:

- La norma standard $\|u\|_2 = \sqrt{\sum_{j=1}^{n^2} |u_j|^2}$ non è appropriata per l'analisi di convergenza
- Quando $h \to 0$ (cioè $n \to \infty$), il numero di punti n^2 cresce, quindi $\|u\|_2$ diverge
- Il fattore h compensa la densità dei punti sulla griglia
- In 2D, l'area elementare è h^2, ma nella norma usiamo h perché:

$$h\|u\|_2 = h\sqrt{\sum_{j=1}^{n^2} |u_j|^2} = \sqrt{h^2 \sum_{j=1}^{n^2} |u_j|^2}$$

- Questo corrisponde a un'approssimazione della norma L^2 integrale

Si noti che $\|\cdot\|_{l_2}$ induce la consueta norma matriciale 2, e che

$$\lim_{h\to 0} \|u\|_{l_2} = \sqrt{\int_\Omega |u(x,y)|^2 \, dx \, dy}.$$

Questa norma ci permette di studiare il comportamento dell'errore quando il passo della griglia tende a zero, garantendo che le stime siano indipendenti dal numero di punti di discretizzazione.

Prima di fornire una stima di $\|(T_{2d}^{(h)})^{-1}\|_2$, dobbiamo introdurre la nozione di prodotto di Kronecker, che sarà utile per scoprire le proprietà spettrali di $T_{2d}^{(h)}$.

Definizione Siano $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$,$B \in \mathbb{C}^{k\times p}$, chiamiamo *prodotto di Kronecker di A con B* la matrice

$$A \otimes B := \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \dots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \dots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \dots & a_{mn}B \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{mk\times np}.$$

Esempio

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1\cdot\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} & 2\cdot\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \\ 3\cdot\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} & 4\cdot\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b & 2a & 2b \\ c & d & 2c & 2d \\ 3a & 3b & 4a & 4b \\ 3c & 3d & 4c & 4d \end{bmatrix}$$

Il prodotto di Kronecker gode delle seguenti proprietà:

- $(A \otimes B)^* = A^* \otimes B^*$
- se A, B sono matrici quadrate invertibili
$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}$$
- se le matrici coinvolte hanno dimensioni compatibili, vale
$$(A \otimes B) \cdot (C \otimes D) \cdot (E \otimes F) = (ACE \otimes BDF).$$

Con un calcolo diretto, troviamo che la matrice che sorge dalla discretizzazione del problema di Poisson 2D è collegata con quella associata al problema 1D tramite la seguente relazione:

$$T_{2d}^{(h)} = I \otimes T^{(h)} + T^{(h)} \otimes I. \tag{2.7}$$

Spiegazione della relazione (2.7)

- $I \otimes T^{(h)}$: rappresenta la derivata seconda nella direzione x
- $T^{(h)} \otimes I$: rappresenta la derivata seconda nella direzione y
- Dimensione: se $T^{(h)} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, allora $T_{2d}^{(h)} \in \mathbb{R}^{n^2 \times n^2}$

L'equazione (2.7) collega anche gli autovalori di $T_{2d}^{(h)}$ con quelli di $T^{(h)}$, come spiegato nel prossimo risultato.

Lemma Gli autovalori di $T_{2d}^{(h)}$ sono dati da

$$\lambda_i(T^{(h)}) + \lambda_j(T^{(h)}), \quad i, j = 1, \ldots, n,$$

dove $\lambda_i(T^{(h)})$ denota l'i-esimo autovalore di $T^{(h)}$.

Dimostrazione. Le due matrici $I \otimes T^{(h)}$ e $T^{(h)} \otimes I$ commutano:

$$(I \otimes T^{(h)})(T^{(h)} \otimes I) = T^{(h)} \otimes T^{(h)} = (T^{(h)} \otimes I)(I \otimes T^{(h)})$$

Dunque sono simultaneamente diagonalizzabili, quindi la loro somma ha come autovalori la somma degli autovalori.
Siano v_i autovettori di $T^{(h)}$ con autovalori $\lambda_i(T^{(h)})$, e w_j autovettori di $T^{(h)}$ con autovalori $\lambda_j(T^{(h)})$.

Consideriamo il prodotto tensore $v_i \otimes w_j$:

$$(A \otimes B)(v_i \otimes w_j) = (Av_i) \otimes (Bw_j) = (\lambda_i(A)v_i) \otimes (\lambda_j(B)w_j) = \lambda_i(A)\lambda_j(B)(v_i \otimes w_j)$$

Nel nostro caso specifico, per $T_{2d}^{(h)} = I \otimes T^{(h)} + T^{(h)} \otimes I$:

$$\begin{aligned} T_{2d}^{(h)}(v_i \otimes w_j) &= (I \otimes T^{(h)})(v_i \otimes w_j) + (T^{(h)} \otimes I)(v_i \otimes w_j) = (Iv_i) \otimes (T^{(h)}w_j) + (T^{(h)}v_i) \otimes (Iw_j) \\ &= v_i \otimes (\lambda_j(T^{(h)})w_j) + (\lambda_i(T^{(h)})v_i) \otimes w_j = \lambda_j(T^{(h)})(v_i \otimes w_j) + \lambda_i(T^{(h)})(v_i \otimes w_j) \\ &= (\lambda_i(T^{(h)}) + \lambda_j(T^{(h)}))(v_i \otimes w_j) \end{aligned}$$

Quindi $v_i \otimes w_j$ è autovettore di $T_{2d}^{(h)}$ con autovalore $\lambda_i(T^{(h)}) + \lambda_j(T^{(h)})$. □

Siamo pronti per studiare $\|(T_{2d}^{(h)})^{-1}\|_2$.
Per prima cosa osserviamo che $T_{2d}^{(h)}$ è una matrice simmetrica, e così è la sua inversa; quindi, vale

$$\|(T_{2d}^{(h)})^{-1}\|_2 = \rho((T_{2d}^{(h)})^{-1}) = \frac{1}{\min_{i,j} |\lambda_i(T^{(h)}) + \lambda_j(T^{(h)})|} = \frac{1}{2\min_i |\lambda_i(T^{(h)})|},$$

dove l'ultima uguaglianza segue dal fatto che $T^{(h)}$ è simmetrica e definita negativa. Infine, abbiamo

$$\frac{1}{\min_i |\lambda_i(T^{(h)})|} = \rho((T^{(h)})^{-1}) \leq \|(T^{(h)})^{-1}\|_\infty \leq \frac{(b-a)^2}{8},$$

e questo implica

$$\|(T_{2d}^{(h)})^{-1}\|_2 \leq \frac{(b-a)^2}{16}.$$

2.6 Integrazione di problemi dipendenti dal tempo

In questa sezione discutiamo un altro approccio per risolvere l'equazione differenziale

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t}u(t,x) - \dfrac{\partial^2}{\partial x^2}u(t,x) = 0, \quad t \in [0, t_{\max}],\ x \in [0,1] \\ u(0,x) \equiv u_0(x), \\ u(t,0) = u(t,1) = 0. \end{cases}$$

La discussione in questa sezione si applicherebbe a problemi più generali della forma $\frac{\partial}{\partial t}u + Lu = f$, dove L è un operatore differenziale definito positivo con appropriate condizioni al contorno, e f è una funzione nota.

Il metodo presentato in questa sezione è talvolta noto come "metodo delle linee": discretizziamo la PDE nello spazio, lasciando solo una variabile continua (il tempo). Quindi, l'equazione differenziale ordinaria (ODE) risultante ad alta dimensione viene integrata con un metodo numerico appropriato. In pratica, possiamo basarci sulla discretizzazione alle differenze finite descritta nella sezione precedente, e ottenere la seguente ODE:

$$\begin{cases} \mathbf{u}' = T^{(h)}\mathbf{u}, \\ \mathbf{u}(0) = \mathbf{u}_0. \end{cases}$$

Nell'equazione precedente, abbiamo le seguenti quantità:
$\mathbf{u}(t)$ Il vettore dipendente dal tempo contenente la valutazione della soluzione al tempo t in tutti i punti della griglia $x_1, \ldots, x_n$.
$T^{(h)}$ La matrice tridiagonale che discretizza l'azione della derivata seconda, con passo di discretizzazione $h = 1/(n+1)$.

Consideriamo due possibili modi per discretizzare la ODE precedente nel tempo: i metodi di Eulero esplicito e implicito. Fissiamo una discretizzazione temporale con passo Δt, tale che possiamo definire $t_0 = 0$ e $t_i = i \cdot \Delta t$; facciamo variare i da 0 a $N \approx t_{\max}/\Delta t$. I metodi producono una sequenza di approssimazioni $\mathbf{u}^{(i)} \approx \mathbf{u}(t_i)$ definite dalle seguenti identità:

$$\mathbf{u}^{(i+1)} = \mathbf{u}^{(i)} + \Delta t \left(T^{(h)}\mathbf{u}^{(i)}\right) \tag{2.10}$$

$$\mathbf{u}^{(i+1)} = \mathbf{u}^{(i)} + \Delta t \left(T^{(h)} \mathbf{u}^{(i+1)} \right) \tag{2.11}$$

L'equazione (2.10) fornisce il metodo di Eulero esplicito, mentre l'equazione (2.11) fornisce la variante implicita.
La differenza chiave è che il primo ci permette di calcolare l'iterata successiva $\mathbf{u}^{(i+1)}$ mediante una formula esplicita, mentre il secondo richiede di risolvere un'equazione dove $\mathbf{u}^{(i+1)}$ è l'incognita. In pratica, per questa ODE lineare le iterazioni di Eulero esplicito e implicito possono essere riscritte come segue:

$$\mathbf{u}^{(i+1)} = (I + \Delta t\, T^{(h)})\mathbf{u}^{(i)}, \qquad \mathbf{u}^{(i+1)} = (I - \Delta t\, T^{(h)})^{-1}\mathbf{u}^{(i)}.$$

Quale metodo dovremmo preferire? Per rispondere a questa domanda, ricordiamo che poiché stiamo discretizzando un operatore definito negativo, ci aspettiamo che anche $T^{(h)}$ sia definita negativa; infatti, dal teorema di Gershgorin, sappiamo che lo spettro di $T^{(h)}$ è racchiuso nell'intervallo $[-4/h^2, 0]$. Poiché l'ODE è lineare e $T^{(h)}$ può essere diagonalizzata come $T^{(h)} = QD^{(h)}Q^*$, possiamo scrivere esplicitamente la soluzione al tempo t_i come

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}(t_i) = e^{t_i T^{(h)}}\mathbf{u}_0 &= \left(I + t_i T^{(h)} + \frac{1}{2} t_i^2 (T^{(h)})^2 + \dots \right) \mathbf{u}_0 \\
&= \left(I + t_i Q D^{(h)} Q^* + \frac{1}{2} t_i^2 (Q D^{(h)} Q^*)^2 + \dots \right) \mathbf{u}_0 \\
&= Q \left(I + t_i D^{(h)} + \frac{1}{2} t_i^2 (D^{(h)})^2 + \dots \right) Q^* \mathbf{u}_0 \\
&= Q \begin{bmatrix} e^{t_i \lambda_1^{(h)}} & & \\ & \ddots & \\ & & e^{t_i \lambda_n^{(h)}} \end{bmatrix} Q^* \mathbf{u}_0
\end{aligned}$$

Poiché tutti gli autovalori $\lambda_i^{(h)}$ sono reali e negativi, la soluzione tende a zero per $t_i \to \infty$. È naturale chiedere che la soluzione prodotta dallo schema di integrazione numerica abbia la stessa proprietà. Sfruttando ancora una volta la diagonalizzazione di $T^{(h)}$ possiamo scrivere la soluzione per Eulero esplicito:

$$\mathbf{u}^{(i)} = (I + \Delta t\, T^{(h)})^i \mathbf{u}_0 = Q \begin{bmatrix} (1 + \Delta t \lambda_1)^i & & \\ & \ddots & \\ & & (1 + \Delta t \lambda_n)^i \end{bmatrix} Q^* \mathbf{u}_0.$$

Assumendo che $\mathbf{u}_0$ possa essere arbitrario, l'espressione sopra è limitata per $i \to \infty$ se e solo se, per tutti gli autovalori di $T^{(h)}$, abbiamo $|1 + \Delta t \lambda_i| < 1$; poiché tutti gli autovalori sono reali e negativi, questo è equivalente alla condizione di stabilità $\Delta t < 2 \cdot (\max_i |\lambda_i|)^{-1}$. Poiché il più grande autovalore in modulo è vicino a $-4/h^2$, questa condizione è equivalente a imporre $\Delta t \lesssim h^2/2$, a meno di termini di ordine superiore in h. In conclusione, affinché la soluzione discreta rimanga limitata, abbiamo bisogno di soddisfare questa condizione (stretta) sul passo temporale, che è impraticabile nella maggior parte delle situazioni. Si noti che scegliere un passo temporale che non soddisfa questo vincolo farà andare la soluzione discreta all'infinito (in modulo) esponenzialmente veloce, e sarà quindi assolutamente inutile dal punto di vista del modello.

D'altra parte, effettuando la stessa analisi per lo schema di Eulero implicito, otteniamo

$$\mathbf{u}^{(i)} = (I - \Delta t\, T^{(h)})^{-i}\mathbf{u}_0 = Q \begin{bmatrix} (1-\Delta t\lambda_1)^{-i} & & \\ & \ddots & \\ & & (1-\Delta t\lambda_n)^{-i} \end{bmatrix} Q^*\mathbf{u}_0,$$

che è limitata se e solo se $|1 - \Delta t\lambda| > 1$ per tutti gli autovalori λ di $T^{(h)}$. Tuttavia, sappiamo che tutti i λ sono reali e strettamente negativi, e quindi questa condizione è banalmente vera: il metodo di Eulero implicito è stabile (cioè, restituisce soluzioni limitate) per tutte le scelte di Δt.

Questo esempio mostra che due delle principali sfide dell'algebra lineare numerica che esploreremo nei prossimi capitoli sono importanti per l'analisi delle PDE:

- Calcolare **autovalori**, per essere in grado di costruire metodi stabili e caratterizzare comportamenti a lungo termine delle soluzioni.
- Risolvere **sistemi lineari di grandi dimensioni**, per essere in grado di applicare metodi impliciti (per i quali Eulero implicito è il rappresentante più semplice).

Quindi, le PDE saranno spesso la fonte più naturale di esempi e casi di test (sebbene non saranno l'unica) per i metodi sviluppati nel resto del corso.

3 Problemi agli autovalori non simmetrici

Il problema agli autovalori (standard) può essere formulato come la ricerca di tutti gli scalari λ tali che $Av = \lambda v$, per qualche $v \neq 0$; molto spesso, siamo interessati anche agli autovettori destri o sinistri. Dalle prime lezioni di algebra lineare, sappiamo che il problema può essere riformulato come il calcolo delle radici del polinomio caratteristico:

$$p(\lambda) := \det(\lambda I - A).$$

Questa caratterizzazione può portare a un primo algoritmo tentativo per calcolare gli autovalori di una matrice A:

1. Determinare il polinomio $p(\lambda)$ calcolando il determinante (ciò è fattibile tramite una variante della fattorizzazione LU).
2. Usare qualche iterazione funzionale per calcolare tutte le radici.
3. Se sono necessari anche gli autovettori, calcolarli trovando una base per il nucleo di $A - \lambda I$.

Questo approccio, sebbene teoricamente valido, ha diversi svantaggi "numerici". Come può il nostro metodo essere inaccurato? La risposta a questa questione è sottile ma fondamentale per lo sviluppo di metodi numerici stabili. Quello che stiamo facendo è trasformare un problema in un altro (un problema agli autovalori in uno di ricerca delle radici di un polinomio), attraverso una mappa Γ:

$$\Gamma : \mathbb{C}^{n\times n} \to \mathbb{C}[\lambda], \quad A \mapsto \det(\lambda I - A)$$

Non possiamo garantire che piccole perturbazioni nei dati di ingresso di un problema corrispondano a piccole perturbazioni nei dati di ingresso dell'altro: piccole variazioni nei coefficienti di $p(\lambda)$ possono causare grandi cambiamenti nelle entrate della matrice originale A.

Poiché lavoriamo con l'aritmetica in floating point, introdurre errori di arrotondamento è inevitabile: abbiamo bisogno di assicurarci che qualsiasi algoritmo che sviluppiamo sia stabile sotto perturbazioni, e quindi costruire una teoria delle perturbazioni significativa per analizzarli.

3.1 Teoria delle perturbazioni per problemi agli autovalori

Studieremo ora l'effetto delle perturbazioni sugli spettri delle matrici. Questo argomento è strettamente correlato con il numero di condizionamento.

Definizione Sia A una matrice $n \times n$, e λ un autovalore in $\Lambda(A)$; allora, il *numero di condizionamento di* λ, denotato da $\kappa(A, \lambda)$, è definito da

$$\kappa(A, \lambda) := \lim_{h \to 0} \frac{\sup_{\|\delta A\| \leq h} \min \{|\mu - \lambda| \mid \mu \in \Lambda(A + \delta A)\}}{h}.$$

In generale, il numero di condizionamento può essere finito o infinito. Si noti che la definizione di numero di condizionamento dipende dalla scelta della norma. Spesso questa sarà la norma spettrale, per la quale usiamo la notazione $\kappa_2(A, \lambda)$.

Teorema Sia A una matrice complessa $n \times n$. Allora, esistono n funzioni continue $\lambda_i : \mathbb{C}^{n \times n} \to \mathbb{C}$ tali che

$$\Lambda(A + \delta A) = \{\lambda_1(A + \delta A), \ldots, \lambda_n(A + \delta A)\}$$

Dimostrazione. Iniziamo notando che $p(\lambda) := \det(\lambda I - A)$ ha coefficienti che sono funzioni continue delle entrate di A. Quindi, è sufficiente dimostrare che le radici di $p(\lambda)$ sono funzioni continue dei suoi coefficienti.

Siano $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$ gli autovalori di A, con le loro molteplicità m_i. Selezioniamo un $\epsilon > 0$ abbastanza piccolo affinché gli insiemi $B(\lambda_i, \epsilon)$ siano disgiunti; in particolare questo implica che $p(\lambda)$ non si annulla sul bordo di $\partial B(\lambda_i, \epsilon)$. Grazie al teorema dei residui abbiamo

$$m_i := \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial B(\lambda_i, \epsilon)} \frac{p'(z)}{p(z)}\, dz, \tag{3.1}$$

e la funzione p'/p è una funzione continua e limitata di z e dei coefficienti di $p(z)$ sull'insieme compatto $\mathcal{S}_\epsilon := \cup_{i=1}^{r} \partial B(\lambda_i, \epsilon)$. Pertanto, possiamo selezionare δ tale che per ogni perturbazione δp con norma del vettore dei coefficienti limitata da δ, vale

$$\max_{z \in \mathcal{S}_\epsilon} \left| \frac{p'(z) + \delta p'(z)}{p(z) + \delta p(z)} - \frac{p'(z)}{p(z)} \right| \leq \frac{1}{2\epsilon}$$

Se calcoliamo la formula integrale (3.1) per il polinomio perturbato $p(z) + \delta p(z)$ abbiamo che il numero di radici contate con molteplicità all'interno di ogni $B(\lambda_i, \epsilon)$ non può cambiare di più di $\frac{1}{2}$. Essendo un intero, questo implica che il numero non cambia, e quindi le radici non possono sfuggire dalle palle $B(\lambda_i, \epsilon)$, il che conclude la dimostrazione. □

Caratterizziamo ora il numero di condizionamento per autovalori semplici, cioè di molteplicità geometrica 1.

Teorema Sia $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, e λ un autovalore semplice. Allora,

$$\kappa_2(A,\lambda) = \frac{\|v\|_2\|w\|_2}{|w^*v|},$$

dove w e v sono rispettivamente gli autovettori sinistro e destro relativi a λ.

Dimostrazione. Poiché l'autovalore è semplice, possiamo fare uno sviluppo al primo ordine; assumendo che $Av = \lambda v$ possiamo scrivere

$$(A+\delta A)(v+\delta v) = (\lambda+\delta\lambda)(v+\delta v).$$

Riorganizzando gli addendi ignorando i termini del secondo ordine si ottiene

$$\delta A v + A\delta v - \lambda\delta v = \delta\lambda v + \mathcal{O}(\|\delta A\|_2^2)$$

e sviluppando i prodotti

$$Av + A\delta v + \delta A v + \delta A\delta v = \lambda v + \lambda\delta v + \delta\lambda v + \delta\lambda\delta v$$

Sappiamo che $Av = \lambda v$, quindi semplifichiamo

$$A\delta v + \delta A v + \delta A\delta v = \lambda\delta v + \delta\lambda v + \delta\lambda\delta v$$

Trascuriamo i termini del secondo ordine ($\delta A\delta v$ e $\delta\lambda\delta v$):

$$A\delta v + \delta A v = \lambda\delta v + \delta\lambda v$$

Riorganizziamo

$$A\delta v - \lambda\delta v + \delta A v = \delta\lambda v$$
$$(A-\lambda I)\delta v + \delta A v = \delta\lambda v$$

Ora moltiplichiamo a sinistra per w^* (l'autovettore sinistro):

$$w^*(A-\lambda I)\delta v + w^*\delta A v = w^*(\delta\lambda v)$$

Ma $w^*(A-\lambda I) = 0$ perché $w^*A = \lambda w^*$, quindi:

$$w^*\delta A v = \delta\lambda(w^*v)$$

Isoliamo $\delta\lambda$:

$$\delta\lambda = \frac{w^*\delta A v}{w^*v} + \mathcal{O}(\|\delta A\|^2)$$

Prendendo le norme:

$$|\delta\lambda| \le \frac{\|w^*\|_2\|\delta A\|_2\|v\|_2}{|w^*v|} = \frac{\|w\|_2\|v\|_2}{|w^*v|}\|\delta A\|_2$$

Per mostrare che il bound è ottimale, consideriamo:

$$\delta A = h\frac{wv^*}{\|v\|_2\|w\|_2}$$

Allora

$$w^*\delta A v = w^*\left(h\frac{wv^*}{\|v\|_2\|w\|_2}\right)v = h\frac{(w^*w)(v^*v)}{\|v\|_2\|w\|_2} = h\frac{\|w\|_2^2\|v\|_2^2}{\|v\|_2\|w\|_2} = h\|v\|_2\|w\|_2$$

che conclude la dimostrazione prendendo il limite per $h \to 0$. □

Vale la pena menzionare alcuni esempi di numeri di condizionamento di autovalori per classi speciali di matrici.

- Se $A = A^*$ allora gli autovettori sinistro e destro coincidono, e quindi $\kappa_2(A, \lambda) = 1$.

- Se A è un blocco di Jordan, gli autovettori sinistro e destro sono ortogonali; anche se il Teorema non copre questo caso, un'applicazione diretta della formula dà $\frac{1}{0}$, e infatti in questo caso il numero di condizionamento è uguale a ∞.

Esercizio Dimostrare che se una matrice è normale, cioè $AA^* = A^*A$, allora il numero di condizionamento dei suoi autovalori è uguale a 1 (come nel caso speciale delle matrici simmetriche menzionato sopra).

Soluzione. Sia A una matrice normale con $AA^* = A^*A$, e sia λ un autovalore semplice di A con autovettore destro v e autovettore sinistro w.

Per matrici normali, vale la proprietà fondamentale che gli autovettori sinistri e destri coincidono a meno di coniugio complesso. Più precisamente, se $Av = \lambda v$, allora $A^*v = \bar{\lambda}v$ (poiché A è normale).

Quindi l'autovettore sinistro w soddisfa $w^*A = \lambda w^*$, e possiamo prendere $w = v$.

Calcoliamo ora il numero di condizionamento:

$$\kappa_2(A, \lambda) = \frac{\|v\|_2 \|w\|_2}{|w^*v|} = \frac{\|v\|_2 \|v\|_2}{|v^*v|} = \frac{\|v\|_2^2}{\|v\|_2^2} = 1$$

□

Esercizio Dimostrare che per un blocco di Jordan, il numero di condizionamento dell'autovalore è uguale a $+\infty$. In particolare, le funzioni autovalore sono continue ma non C^1: cosa si può dire sulla loro regolarità?

Soluzione. Consideriamo un blocco di Jordan $J_n(\lambda_0)$ di dimensione n:

$$J_n(\lambda_0) = \begin{bmatrix} \lambda_0 & 1 & & \\ & \lambda_0 & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & \lambda_0 \end{bmatrix}$$

L'autovettore destro v e l'autovettore sinistro w (autovettore di $J_n(\lambda_0)^*$) sono

$$v = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \qquad w = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Calcoliamo il prodotto scalare:

$$w^*v = 0 \cdot 1 + \cdots + 0 \cdot 0 + 1 \cdot 0 = 0$$

Applicando la formula del numero di condizionamento:

$$\kappa_2(J_n(\lambda_0), \lambda_0) = \frac{\|v\|_2 \|w\|_2}{|w^* v|} = \frac{1 \cdot 1}{0} = \infty$$

Per quanto riguarda la regolarità: le funzioni autovalore sono sempre continue (per il Teorema), ma nel caso di autovalori multipli come nei blocchi di Jordan, la mappa $A \mapsto \lambda(A)$ non è differenziabile. In particolare, è solo Lipschitz ma non di classe C^1. Questo significa che esiste una costante C tale che:

$$|\delta\lambda| \leq C\|\delta A\|_2$$

ma la derivata non esiste in senso classico. □

Enunciamo ora un risultato che limita la distanza tra gli autovalori di A e $A + \delta A$.

Teorema (Bauer-Fike) Sia $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ una matrice diagonalizzabile con matrice di autovettori V:

$$V^{-1}AV = D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{bmatrix}.$$

Allora, per ogni $\delta A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ e autovalore μ di $A+\delta A$, esiste un autovalore λ_i che soddisfa $|\lambda_i - \mu| \leq \kappa(V)\|\delta A\|$, dove $\|\cdot\|$ è una qualsiasi norma matriciale subordinata indotta da una norma assoluta[1].

Dimostrazione. Sia $\mu \in \Lambda(A+\delta A)$; se μ è autovalore di A, il teorema è banalmente vero, altrimenti consideriamo la matrice singolare

$$V^{-1}(A + \delta A - \mu I)V = (D - \mu I) + V^{-1}\delta AV.$$

infatti poiché μ è autovalore di $A + \delta A$, la matrice $A + \delta A - \mu I$ è singolare. Moltiplicando per V^{-1} a sinistra e V a destra otteniamo una matrice ancora singolare.

Grazie alla non singolarità di $D - \mu I$ (poiché μ non è autovalore di A), possiamo fattorizzare:

$$V^{-1}(A + \delta A - \mu I)V = (D - \mu I)\left[I + (D - \mu I)^{-1}V^{-1}\delta AV\right]$$

abbiamo scritto la matrice come prodotto di due matrici. Poiché il prodotto è singolare e $D - \mu I$ è invertibile, deve essere singolare il secondo fattore.

Quindi $I+(D-\mu I)^{-1}V^{-1}\delta AV$ è singolare, e pertanto -1 appartiene allo spettro di $(D-\mu I)^{-1}V^{-1}\delta AV$. Per il teorema di Hirsch (che lega il raggio spettrale alla norma), abbiamo:

$$1 \leq \rho\left((D - \mu I)^{-1}V^{-1}\delta AV\right) \leq \|(D - \mu I)^{-1}V^{-1}\delta AV\|$$

Il raggio spettrale è sempre minore o uguale alla norma, e se -1 è autovalore, allora il raggio spettrale è almeno 1.
Maggioriamo ulteriormente usando le proprietà delle norme subordinate:

$$\|(D - \mu I)^{-1}V^{-1}\delta AV\| \leq \|(D - \mu I)^{-1}\| \cdot \|V^{-1}\| \cdot \|\delta A\| \cdot \|V\|$$

[1]Una norma assoluta è una norma per cui la proprietà componente per componente $|x_i| > |y_i|$ implica $\|x\| > \|y\|$. Per tali norme abbiamo $\|D\| = \max_i |d_{ii}|$ per ogni matrice diagonale D.

Ricordando che $\kappa(V) = \|V\| \cdot \|V^{-1}\|$, otteniamo

$$1 \leq \|(D - \mu I)^{-1}\| \cdot \kappa(V) \cdot \|\delta A\|$$

Poiché $\|\cdot\|$ è una norma subordinata assoluta, per una matrice diagonale $D - \mu I$ vale

$$\|(D - \mu I)^{-1}\| = \max_{i=1,\dots,n} \frac{1}{|\lambda_i - \mu|} = \frac{1}{\min_{i=1,\dots,n} |\lambda_i - \mu|}$$

Sostituendo nell'equazione precedente:

$$1 \leq \frac{1}{\min_{i=1,\dots,n} |\lambda_i - \mu|} \cdot \kappa(V) \cdot \|\delta A\|$$

che conclude la dimostrazione. □

Applicando il teorema di Bauer-Fike a una matrice normale con la norma spettrale si ottiene il limite superiore

$$|\lambda_i - \mu| \leq \|\delta A\|_2,$$

poiché le matrici normali sono diagonalizzate da matrici unitarie o ortogonali con numero di condizionamento uguale a 1. Questo risultato è più forte del fatto che il numero di condizionamento per tali matrici è uguale a 1, poiché non è coinvolta alcuna approssimazione del primo ordine.

Definizione Sia $\lambda \in \mathbb{C}$, e $v \in \mathbb{C}^n$. L'*errore all'indietro di λ, v come autocoppia di A* è definito come

$$BE(A, \lambda, v) := \min\{\|\delta A\| \mid (A + \delta A)v = \lambda v\}.$$

Analogamente, l'*errore all'indietro di λ come autovalore di A* è definito come

$$BE(A, \lambda) := \min\{\|\delta A\| \mid \lambda \in \Lambda(A + \delta A)\}.$$

Chiaramente, abbiamo $BE(A, \lambda) \leq BE(A, \lambda, v)$, per ogni scelta di v. L'errore all'indietro della coppia eigen può essere facilmente calcolato a posteriori, in contrasto con l'errore in avanti.

Teorema Sia $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ una matrice quadrata, e λ, v una coppia eigen candidata. Allora, per la norma spettrale $\|\cdot\|_2$,

$$BE_2(A, \lambda, v) = \frac{\|Av - \lambda v\|_2}{\|v\|_2}.$$

Dimostrazione. La dimostrazione procede in due parti: prima mostriamo una disuguaglianza, poi dimostriamo che è raggiungibile. Sia δA una perturbazione qualsiasi di A tale che λ e v siano autovalore e autovettore di $A + \delta A$. Allora abbiamo

$$(A + \delta A)v = \lambda v \implies Av - \lambda v = -\delta A v$$

Prendendo le norme e usando le proprietà delle norme subordinate

$$\|Av - \lambda v\|_2 = \|\delta A v\|_2 \leq \|\delta A\|_2 \cdot \|v\|_2$$

Da cui ricaviamo

$$\|\delta A\|_2 \geq \frac{\|Av - \lambda v\|_2}{\|v\|_2}$$

Poiché questo vale per ogni δA che soddisfa la condizione, abbiamo

$$BE_2(A, \lambda, v) \geq \frac{\|Av - \lambda v\|_2}{\|v\|_2}$$

Definiamo il residuo: $r := Av - \lambda v$ e consideriamo la perturbazione $\delta A := -\frac{rv^*}{\|v\|_2^2}$.

Verifichiamo che questa perturbazione funziona:

$$\begin{aligned}(A + \delta A)v = Av + \delta Av = Av - \frac{rv^*}{\|v\|_2^2}v = Av - r\frac{v^*v}{\|v\|_2^2} = Av - r\frac{\|v\|_2^2}{\|v\|_2^2} = \\ = Av - r = Av - (Av - \lambda v) = \lambda v\end{aligned}$$

Quindi λ, v è effettivamente una coppia eigen di $A + \delta A$.

Calcoliamo ora la norma di δA:

$$\|\delta A\|_2 = \left\| -\frac{rv^*}{\|v\|_2^2} \right\|_2 = \frac{\|rv^*\|_2}{\|v\|_2^2}$$

Per una matrice di rango 1 della forma xy^*, la norma spettrale è $\|xy^*\|_2 = \|x\|_2\|y\|_2$. Sostituendo:

$$\|\delta A\|_2 = \frac{\|r\|_2\|v\|_2}{\|v\|_2^2} = \frac{\|r\|_2}{\|v\|_2} = \frac{\|Av - \lambda v\|_2}{\|v\|_2}$$

Abbiamo quindi costruito una perturbazione δA che raggiunge esattamente il valore $\frac{\|Av-\lambda v\|_2}{\|v\|_2}$, dimostrando che

$$BE_2(A, \lambda, v) = \frac{\|Av - \lambda v\|_2}{\|v\|_2}$$

□

Una caratterizzazione simile può essere enunciata per l'errore all'indietro di un autovalore.

Teorema Sia $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ una matrice quadrata, e λ un autovalore candidato. Allora, per la norma spettrale $\|\cdot\|_2$, abbiamo

$$\mathrm{BE}_2(A, \lambda) = \|(A - \lambda I)^{-1}\|_2^{-1}, \qquad \forall\ \lambda \notin \Lambda(A)$$

Dimostrazione. La dimostrazione procede in due parti.

Sia δA una perturbazione tale che $(A + \delta A)v = \lambda v$ per qualche $v \neq 0$. Allora

$$(A + \delta A)v = \lambda v \implies (A - \lambda I)v = -\delta Av$$

Poiché $\lambda \notin \Lambda(A)$, la matrice $A - \lambda I$ è invertibile, quindi

$$v = -(A - \lambda I)^{-1}\delta Av$$

Prendendo le norme

$$\|v\|_2 = \|(A - \lambda I)^{-1}\delta Av\|_2 \leq \|(A - \lambda I)^{-1}\|_2 \cdot \|\delta A\|_2 \cdot \|v\|_2$$

Dividendo entrambi i membri per $\|v\|_2$ (che è non nullo)

$$1 \leq \|(A - \lambda I)^{-1}\|_2 \cdot \|\delta A\|_2$$

Da cui

$$\|\delta A\|_2 \geq \frac{1}{\|(A - \lambda I)^{-1}\|_2} = \|(A - \lambda I)^{-1}\|_2^{-1}$$

Poiché questo vale per ogni δA tale che $\lambda \in \Lambda(A + \delta A)$, abbiamo

$$\mathrm{BE}_2(A, \lambda) \geq \|(A - \lambda I)^{-1}\|_2^{-1}$$

Consideriamo adesso v e w tali che

$$(A - \lambda I)^{-1} v = w, \quad \|v\|_2 = \|(A - \lambda I)^{-1}\|_2^{-1}, \quad \|w\|_2 = 1$$

Tali vettori esistono perché $\|(A - \lambda I)^{-1}\|_2 = \max_{\|x\|_2 = 1} \|(A - \lambda I)^{-1} x\|_2$, quindi il massimo è raggiunto.

Da $(A - \lambda I)^{-1} v = w$ ricaviamo

$$(A - \lambda I) w = v$$

Ora consideriamo l'errore all'indietro per la coppia (λ, w)

$$\mathrm{BE}_2(A, \lambda, w) = \frac{\|(A - \lambda I) w\|_2}{\|w\|_2} = \frac{\|v\|_2}{1} = \|(A - \lambda I)^{-1}\|_2^{-1}$$

Ma per definizione abbiamo

$$\mathrm{BE}_2(A, \lambda) \leq \mathrm{BE}_2(A, \lambda, w)$$

poiché l'errore all'indietro per l'autovalore è il minimo su tutti i possibili autovettori. Quindi

$$\mathrm{BE}_2(A, \lambda) \leq \|(A - \lambda I)^{-1}\|_2^{-1}$$

Combinando le due disuguaglianze, otteniamo l'uguaglianza

$$\mathrm{BE}_2(A, \lambda) = \|(A - \lambda I)^{-1}\|_2^{-1}$$

□

Abbiamo enfatizzato come trasformare un problema agli autovalori in uno di ricerca delle radici di un polinomio sia generalmente una cattiva idea. L'alternativa più naturale che perseguiremo presto è costruire una sequenza di matrici

$$A_0 := A \to A_1 := F(A_0) \to \ldots \to A_{k+1} = F(A_k) \to \ldots$$

tale che tutte le matrici siano simili, $\lim_k A_k$ sia calcolabile con sufficiente accuratezza, e gli autovalori possano essere letti dal limite. Per esempio, possiamo chiedere che il limite sia triangolare superiore o diagonale. Affinché tutto questo funzioni, dobbiamo assicurarci che la trasformazione $A_{k+1} = F(A_k)$ non peggiori il numero di condizionamento degli autovalori. Non tutte le similitudini sono adatte allo scopo, ma questo è vero quando usiamo matrici unitarie o ortogonali.

Esercizio Dimostrare che se Q è unitaria, allora i numeri di condizionamento per gli autovalori di A e QAQ^* coincidono, cioè

$$\mathrm{BE}_2(A,\lambda) = \mathrm{BE}_2(QAQ^*,\lambda) \quad \text{e} \quad \mathrm{BE}_2(A,\lambda,v) = \mathrm{BE}_2(QAQ^*,\lambda,Qv)$$

Soluzione. Dimostriamo separatamente le due uguaglianze.
Per il Teorema sappiamo che per $\lambda \notin \Lambda(A)$:

$$\mathrm{BE}_2(A,\lambda) = \|(A-\lambda I)^{-1}\|_2^{-1}$$

Calcoliamo ora $\mathrm{BE}_2(QAQ^*,\lambda)$:

$$\begin{aligned}
\mathrm{BE}_2(QAQ^*,\lambda) &= \|(QAQ^*-\lambda I)^{-1}\|_2^{-1} \\
&= \|(QAQ^*-\lambda QIQ^*)^{-1}\|_2^{-1} \quad (\text{poiché } QIQ^* = I) \\
&= \|Q(A-\lambda I)^{-1}Q^*\|_2^{-1} \\
&= \|(A-\lambda I)^{-1}\|_2^{-1} \quad (\text{per l'invarianza unitaria della norma 2})
\end{aligned}$$

Quindi $\mathrm{BE}_2(A,\lambda) = \mathrm{BE}_2(QAQ^*,\lambda)$.

$$\mathrm{BE}_2(A,\lambda,v) = \frac{\|Av-\lambda v\|_2}{\|v\|_2}$$

Calcoliamo ora $\mathrm{BE}_2(QAQ^*,\lambda,Qv)$

$$\begin{aligned}
\mathrm{BE}_2(QAQ^*,\lambda,Qv) &= \frac{\|(QAQ^*)(Qv)-\lambda(Qv)\|_2}{\|Qv\|_2} = \frac{\|QA(Q^*Q)v-\lambda Qv\|_2}{\|Qv\|_2} = \frac{\|Q(Av-\lambda v)\|_2}{\|Qv\|_2} \\
&= \frac{\|Av-\lambda v\|_2}{\|v\|_2} \quad (\text{per l'invarianza unitaria della norma 2}) \\
&= \mathrm{BE}_2(A,\lambda,v)
\end{aligned}$$

□

Osservazione Questo risultato è molto importante perché giustifica l'uso di trasformazioni unitarie negli algoritmi per il calcolo degli autovalori. Le trasformazioni unitarie preservano il numero di condizionamento degli autovalori, a differenza di trasformazioni di similitudine più generali che potrebbero peggiorare la stabilità numerica.

3.2 Il metodo delle potenze

Introduciamo il primo metodo per il calcolo degli autovalori: il metodo delle potenze. Sia A una matrice qualsiasi. Consideriamo la successione di vettori definita, per qualsiasi scelta di v_0, come segue:

$$v^{(k+1)} = \frac{Av^{(k)}}{\|Av^{(k)}\|_2}, \quad k \geq 0, \quad \lambda_k = (v^{(k)})^* Av^{(k)} \quad v^{(0)} \text{ assegnato.} \tag{3.2}$$

A meno del fattore di normalizzazione, il vettore $v^{(k)}$ soddisfa $v^{(k)} = A^k v^{(0)}$.
Sotto opportune condizioni, i termini $(\lambda_k, v^{(k)})$ convergono a una coppia eigen dominante di A. Aggiungiamo l'ipotesi che A sia diagonalizzabile, con autovalori

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \ldots \geq |\lambda_n|.$$

Allora, possiamo riscrivere l'iterazione come segue

$$w^{(k)} = \gamma_k D^k w^{(0)}, \qquad D := \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{bmatrix}, \qquad \gamma_k := \frac{1}{\|VD^k w^{(0)}\|}$$

Qui stiamo diagonalizzando $A = VDV^{-1}$ e definendo $w^{(k)} = V^{-1}v^{(k)}$. Il vettore $w^{(k)}$ rappresenta le coordinate di $v^{(k)}$ nella base degli autovettori. Questo produce la seguente espressione esplicita per $w^{(k)}$:

$$w^{(k)} = \gamma_k \lambda_1^k \begin{bmatrix} w_1^{(0)} \\ \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k w_2^{(0)} \\ \vdots \\ \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1}\right)^k w_n^{(0)} \end{bmatrix}$$

In particolare

- I termini $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k$ tendono a 0 per $k \to \infty$ poiché $|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}| < 1$
- Solo la prima componente $w_1^{(k)}$ sopravvive asintoticamente

Poiché γ_k è scelto per normalizzare $v^{(k)}$, abbiamo che se $w_1^{(0)} \neq 0$ tutte le componenti in $w^{(k)}$ tendono a zero per $k \to \infty$, e $w^{(k)}$ converge a un multiplo di e_1 con velocità $(\frac{\lambda_2}{\lambda_1})^k$. Poiché $v^{(k)} = Vw^{(k)}$, concludiamo che $v^{(k)}$ converge a un autovettore relativo a λ_1, e conseguentemente $\lambda^{(k)} = (v^{(k)})^* A v^{(k)}$ converge a λ_1 con la stessa velocità lineare:

$$\lim_{k\to\infty} \lambda_k = \lim_{k\to\infty} \frac{(v^{(k)})^* A v^{(k)}}{(v^{(k)})^* v^{(k)}} = \frac{v_1^*(\overline{w}_1^{(0)} A v_1 w_1^{(0)})}{\overline{w}_1^{(0)} w_1^{(0)} v_1^* v_1} = \lambda_1$$

Si noti che la condizione $w_1^{(0)} \neq 0$ è generica, nel senso che se scegliamo $v^{(0)}$ a caso (rispetto a qualsiasi misura di probabilità assolutamente continua) allora abbiamo $w_1^{(0)} \neq 0$ con probabilità 1. In teoria, se scegliamo $v^{(0)}$ tale che $w_1^{(0)} = 0$, questa condizione dovrebbe continuare a valere durante le iterazioni. Tuttavia, lavorando in aritmetica floating point si introdurranno perturbazioni che ci riporteranno al caso generico.

3.3 Velocità di convergenza del metodo delle potenze

Analizziamo formalmente la convergenza dell'iterazione delle potenze rispetto all'autovettore dominante v_1. Si noti che, anche nel caso in cui λ_1 sia semplice, l'autovettore dominante è definito a meno di una costante; in particolare, ha poco senso misurare quantità come $\|v_1 - v^{(k)}\|$ poiché, per esempio, se $v^{(k)} \to -v_1$ non rileveremmo alcuna convergenza. Il punto chiave è quantificare quanto sono collineari i vettori v_1 e $v^{(k)}$, e questo richiede di introdurre funzioni trigonometriche di un angolo tra due vettori.

Definizione Dati $x, y \in \mathbb{C}^n$, $x \neq 0$, definiamo le proiezioni ortogonali su span(x) e sul suo complemento come

$$\Pi_x(y) = \frac{xx^*}{\|x\|_2^2} y \qquad \Pi_x^{\perp}(y) = \left(I - \frac{xx^*}{\|x\|_2^2}\right) y.$$

Inoltre definiamo il $\sin, \cos$ e $\tan$ dell'angolo tra x e y come segue

$$\sin\theta(x,y) = \frac{\|\Pi_x^{\perp}(y)\|_2}{\|y\|_2} = \frac{\min_{z\in\mathrm{span}(x)}\|y-z\|_2}{\|y\|_2},$$
$$\cos\theta(x,y) = \frac{\|\Pi_x(y)\|_2}{\|y\|_2} = \frac{|x^*y|}{\|x\|_2\|y\|_2},$$
$$\tan\theta(x,y) = \frac{\sin\theta(x,y)}{\cos\theta(x,y)} = \frac{\|\Pi_x^{\perp}(y)\|_2}{\|\Pi_x(y)\|_2}.$$

Osservazione Vale $\sin\theta(x,y)^2 + \cos\theta(x,y)^2 = 1$, $\forall x, y \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$.
Osservazione Le funzioni trigonometriche per vettori sono commutative rispetto ai due ingressi, invarianti per riscalamento, e non cambiano se applichiamo la stessa matrice unitaria a entrambi x e y. In particolare, quando analizziamo la convergenza del metodo delle potenze possiamo considerare l'iterazione semplificata $v^{(k)} = A^k v^{(0)}$ poiché il passo di normalizzazione non ha influenza sulla collinearità dell'iterata rispetto a v_1.

Prima di enunciare il risultato principale, assumiamo che A sia diagonalizzabile e che $V^{-1}AV = D := \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. Quindi, consideriamo la sequenza ausiliaria

$$y^{(0)} = V^{-1}v^{(0)}, \qquad y^{(k)} = Dy^{(k-1)} = D^k y^{(0)} \qquad \Longrightarrow \qquad y^{(k)} = V^{-1}v^{(k)}$$

e analizziamo quanto è collineare $y^{(k)}$ rispetto a $e_1 = V^{-1}v_1$, che è l'autovettore dominante per D. Partizionando a blocchi $y^{(k)}$ e D come

$$y^{(k)} = \begin{bmatrix} y_1^{(k)} \\ y_2^{(k)} \end{bmatrix}, \qquad D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \\ & D_2 \end{bmatrix}, \qquad y_1^{(k)} \in \mathbb{C}, \quad y_2^{(k)} \in \mathbb{C}^{n-1}$$

e analizziamo quanto è collineare $y^{(k)}$ rispetto a $e_1 = V^{-1}v_1$, che è l'autovettore dominante per D. Partizionando a blocchi $y^{(k)}$ e D come

$$y^{(k)} = \begin{bmatrix} y_1^{(k)} \\ y_2^{(k)} \end{bmatrix}, \qquad D = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \\ & D_2 \end{bmatrix}, \qquad y_1^{(k)} \in \mathbb{C}, \quad y_2^{(k)} \in \mathbb{C}^{n-1},$$

vediamo che

$$y^{(k)} = D^k y^{(0)} = \begin{bmatrix} \lambda_1^k y_1^{(0)} \\ D_2^k y_2^{(0)} \end{bmatrix} = \lambda_1^k \begin{bmatrix} y_1^{(0)} \\ \left(\frac{D_2}{\lambda_1}\right)^k y_2^{(0)} \end{bmatrix}.$$

Inoltre, abbiamo $\| \left(\frac{D_2}{\lambda_1}\right)^k \|_2 = \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k$ (poiché D_2 è diagonale) e

$$\Pi_{e_1}^{\perp}(y^{(k)}) = \begin{bmatrix} 0 \\ y_2^{(k)} \end{bmatrix}, \qquad \Pi_{e_1}(y^{(k)}) = \begin{bmatrix} y_1^{(k)} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Mettendo tutto insieme, abbiamo

$$\tan\theta(e_1, y^{(k)}) = \frac{\|y_2^{(k)}\|_2}{\left|y_1^{(k)}\right|} \leq \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k \frac{\|y_2^{(0)}\|_2}{\left|y_1^{(0)}\right|} = \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k \tan\theta(e_1, y^{(0)}). \tag{3.3}$$

Siamo pronti per enunciare il risultato principale sulla convergenza del metodo delle potenze.

Teorema Sia $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ diagonalizzabile con matrice di autovettori V, e autovalore dominante λ_1 tale che $|\lambda_1| > |\lambda_2|$. Se $v^{(0)} \in \mathbb{C}^n$ è tale che $u_1^* v^{(0)} \neq 0$, per un autovettore sinistro dominante u_1, allora la k-esima iterata del metodo delle potenze, partendo da $v^{(0)}$, verifica

$$\sin\theta(v_1, v^{(k)}) \leq \kappa(V) \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k \frac{\sin\theta(v_1, v^{(0)})}{\cos\theta(e_1, V^{-1}v^{(0)})}.$$

Dimostrazione. Notiamo che $u_1^* v^{(0)} \neq 0$ implica $\cos\theta(e_1, y^{(0)}) \neq 0$, quindi il membro destro di (3.3) è ben definito. Dalla disuguaglianza (3.3) abbiamo

$$\tan\theta(e_1, y^{(k)}) \leq \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k \tan\theta(e_1, y^{(0)}).$$

Osserviamo che per qualsiasi angolo θ, vale $\sin\theta \leq \tan\theta$, quindi

$$\sin\theta(e_1, y^{(k)}) \leq \tan\theta(e_1, y^{(k)}) \leq \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k \tan\theta(e_1, y^{(0)}). \tag{1}$$

Ora consideriamo $\sin\theta(v_1, v^{(k)})$. Poiché $v_1 = Ve_1$ e $v^{(k)} = Vy^{(k)}$, abbiamo:

$$\sin\theta(v_1, v^{(k)}) = \sin\theta(Ve_1, Vy^{(k)}) = \frac{\min_{z\in\mathrm{span}(y^{(k)})} \|Ve_1 - Vz\|_2}{\|Ve_1\|_2}.$$

Per qualsiasi $z \in \mathrm{span}(y^{(k)})$, possiamo maggiorare:

$$\|Ve_1 - Vz\|_2 = \|V(e_1 - z)\|_2 \leq \|V\|_2 \|e_1 - z\|_2.$$

Prendendo il minimo su $z \in \mathrm{span}(y^{(k)})$

$$\min_{z\in\mathrm{span}(y^{(k)})} \|Ve_1 - Vz\|_2 \leq \|V\|_2 \min_{z\in\mathrm{span}(y^{(k)})} \|e_1 - z\|_2 = \|V\|_2 \|\Pi^{\perp}_{y^{(k)}}(e_1)\|_2.$$

Ma $\|\Pi^{\perp}_{y^{(k)}}(e_1)\|_2 = \sin\theta(e_1, y^{(k)})\|e_1\|_2 = \sin\theta(e_1, y^{(k)})$, quindi:

$$\sin\theta(v_1, v^{(k)}) \leq \frac{\|V\|_2}{\|Ve_1\|_2} \sin\theta(e_1, y^{(k)}). \tag{2}$$

Combinando (1) e (2):

$$\sin\theta(v_1, v^{(k)}) \leq \frac{\|V\|_2}{\|Ve_1\|_2} \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k \tan\theta(e_1, y^{(0)}).$$

Osserviamo che

$$\tan\theta(e_1, y^{(0)}) = \frac{\sin\theta(e_1, y^{(0)})}{\cos\theta(e_1, y^{(0)})}.$$

Inoltre

$$\sin\theta(e_1, y^{(0)}) = \frac{\min_{z\in\mathrm{span}(y^{(0)})} \|e_1 - z\|_2}{\|e_1\|_2} = \min_{z\in\mathrm{span}(y^{(0)})} \|e_1 - z\|_2.$$

Ma

$$\min_{z\in\text{span}(y^{(0)})} \|e_1 - z\|_2 = \min_{z\in\text{span}(y^{(0)})} \|V^{-1}(Ve_1 - Vz)\|_2 \leq \|V^{-1}\|_2 \min_{z\in\text{span}(y^{(0)})} \|Ve_1 - Vz\|_2.$$

E

$$\min_{z\in\text{span}(y^{(0)})} \|Ve_1 - Vz\|_2 = \sin\theta(v_1, v^{(0)})\|Ve_1\|_2,$$

quindi

$$\sin\theta(e_1, y^{(0)}) \leq \|V^{-1}\|_2 \sin\theta(v_1, v^{(0)})\|Ve_1\|_2. \tag{3}$$

Sostituendo (3) nell'espressione precedente

$$\sin\theta(v_1, v^{(k)}) \leq \frac{\|V\|_2}{\|Ve_1\|_2} \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k \frac{\|V^{-1}\|_2 \sin\theta(v_1, v^{(0)})\|Ve_1\|_2}{\cos\theta(e_1, y^{(0)})}.$$

Semplificando $\|Ve_1\|_2$

$$\sin\theta(v_1, v^{(k)}) \leq \|V\|_2\|V^{-1}\|_2 \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k \frac{\sin\theta(v_1, v^{(0)})}{\cos\theta(e_1, y^{(0)})}.$$

Ricordando che $\kappa(V) = \|V\|_2\|V^{-1}\|_2$ e che $\cos\theta(e_1, y^{(0)}) = \cos\theta(e_1, V^{-1}v^{(0)})$, otteniamo il risultato desiderato. □

Osservazione Alcune osservazioni sulle ipotesi del teorema precedente:

- A diagonalizzabile può essere rilassata assumendo λ_1 semplice.
- Anche $|\lambda_1| > |\lambda_2|$ non può essere rimossa; si consideri per esempio il caso $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ e un vettore iniziale che non è allineato né con $v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ né con $v_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix}$.

3.4 Il caso hermitiano

Nel caso in cui A è hermitiana possiamo mostrare che l'approssimante dell'autovalore dominante calcolato dal metodo delle potenze converge con il doppio del tasso di decadimento rispetto al caso generale. è istruttivo guardare la funzione quoziente di Rayleigh $\rho_A(x) = \frac{x^*Ax}{x^*x}$ che è tale che $\rho_A(v_1) = \lambda_1$. Se guardiamo il gradiente (considerando ρ_A come una funzione su vettori reali) abbiamo

Consideriamo $\rho_A(x) = \frac{x^*Ax}{x^*x}$. Calcoliamo il gradiente rispetto a x (considerando $x \in \mathbb{R}^n$ per semplicità).

Sia $N(x) = x^*Ax$ e $D(x) = x^*x = \|x\|_2^2$. Allora

$$\nabla N(x) = (A + A^*)x, \quad \nabla D(x) = 2x$$

Usando la regola del quoziente

$$\nabla\rho_A(x) = \frac{D(x)\nabla N(x) - N(x)\nabla D(x)}{[D(x)]^2}$$

Sostituendo

$$\nabla\rho_A(x) = \frac{(x^*x)(A+A^*)x - (x^*Ax)(2x)}{(x^*x)^2}$$

$$\nabla\rho_A(x) = \frac{1}{x^*x}\left[(A+A^*)x - 2\rho_A(x)x\right]$$

In particolare, quando A è hermitiana v_1 (e qualsiasi altro autovettore) è un punto stazionario per ρ_A mentre non lo è quando $A \neq A^*$. Infatti, se $A = A^*$ e $x = v_1$ (autovettore):

$$\nabla\rho_A(v_1) = \frac{1}{v_1^*v_1}\left[2Av_1 - 2\lambda_1 v_1\right] = \frac{1}{v_1^*v_1}\left[2\lambda_1 v_1 - 2\lambda_1 v_1\right] = 0$$

Quindi, guardando lo sviluppo di Taylor di $\rho_A(x)$ abbiamo

$$|\rho_A(x) - \lambda_1| = |\rho_A(x) - \rho_A(v_1)| = \begin{cases} \mathcal{O}(\|x - v_1\|_2^2) & \text{se } A \text{ è hermitiana} \\ \mathcal{O}(\|x - v_1\|_2) & \text{altrimenti} \end{cases}.$$

Più formalmente, dimostriamo il seguente risultato.

Teorema Sia $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitiana con autovalori $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n| \geq 0, v^{(0)} \in \mathbb{C}^n$ tale che $v_1^*v^{(0)} \neq 0$. Allora, la k-esima iterata del metodo delle potenze, partendo da $v^{(0)}$, verifica

$$\tan\theta(v_1, v^{(k)}) \leq \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k \tan\theta(v_1, v^{(0)}),$$

$$|\lambda_1 - \rho_A(v^{(k)})| \leq \max_{j=1,\ldots,n} |\lambda_1 - \lambda_j| \cdot \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^{2k} [\tan\theta(v_1, v^{(0)})]^2$$

Dimostrazione. La disuguaglianza riguardante la convergenza dell'autovettore segue da (3.3) applicando una matrice unitaria di autovettori V ai vettori coinvolti nelle funzioni trigonometriche in entrambi i membri.
Per mostrare la seconda disuguaglianza assumiamo che il passo di normalizzazione nel metodo delle potenze non venga eseguito e che il vettore iniziale $v^{(0)}$ sia riscalato per ottenere $\|v^{(k)}\|_2 = 1$; si noti che, tutte queste assunzioni non causano perdita di generalità poiché il quoziente di Rayleigh è invariante per riscalamento (non nullo) dell'argomento. Sia $v^{(0)} = \sum_{j=1}^n a_j v_j$, allora abbiamo

$$v^{(k)} = A^k v^{(0)} = \sum_{j=1}^n a_j \lambda_j^k v_j$$

Calcoliamo il quoziente di Rayleigh

$$\rho_A(v^{(k)}) = (v^{(k)})^* A v^{(k)} = \frac{(v^{(k)})^* A v^{(k)}}{(v^{(k)})^* v^{(k)}}$$

Sostituendo le espressioni

$$(v^{(k)})^* A v^{(k)} = \left(\sum_{j=1}^n a_j \lambda_j^k v_j\right)^* A \left(\sum_{i=1}^n a_i \lambda_i^k v_i\right) = \sum_{j,i=1}^n a_j^* a_i \lambda_j^k \lambda_i^k v_j^* A v_i$$

Poiché $Av_i = \lambda_i v_i$ e $v_j^* v_i = \delta_{ij}$ (autovettori ortonormali per matrici hermitiane):

$$(v^{(k)})^* A v^{(k)} = \sum_{j=1}^{n} |a_j|^2 \lambda_j^{2k+1}$$

Analogamente

$$(v^{(k)})^* v^{(k)} = \sum_{j=1}^{n} |a_j|^2 \lambda_j^{2k}$$

Quindi

$$\rho_A(v^{(k)}) = \frac{\sum_{j=1}^{n} |a_j|^2 \lambda_j^{2k+1}}{\sum_{j=1}^{n} |a_j|^2 \lambda_j^{2k}}$$

In modo che

$$|\lambda_1 - \rho_A(v^{(k)})| = \left| \frac{\sum_{j=2}^{n} a_j^2 \lambda_j^{2k} (\lambda_j - \lambda_1)}{\sum_{j=1}^{n} a_j^2 \lambda_j^{2k}} \right|$$

infatti se sottraiamo λ_1 da entrambi i membri

$$\lambda_1 - \rho_A(v^{(k)}) = \lambda_1 - \frac{\sum_{j=1}^{n} a_j^2 \lambda_j^{2k+1}}{\sum_{j=1}^{n} a_j^2 \lambda_j^{2k}} = \frac{\sum_{j=1}^{n} a_j^2 \lambda_j^{2k} \lambda_1 - \sum_{j=1}^{n} a_j^2 \lambda_j^{2k+1}}{\sum_{j=1}^{n} a_j^2 \lambda_j^{2k}} = \frac{\sum_{j=1}^{n} a_j^2 \lambda_j^{2k} (\lambda_1 - \lambda_j)}{\sum_{j=1}^{n} a_j^2 \lambda_j^{2k}}$$

Ma per $j = 1$, il termine è zero ($\lambda_1 - \lambda_1 = 0$), quindi:

$$|\lambda_1 - \rho_A(v^{(k)})| = \left| \frac{\sum_{j=2}^{n} a_j^2 \lambda_j^{2k} (\lambda_1 - \lambda_j)}{\sum_{j=1}^{n} a_j^2 \lambda_j^{2k}} \right|$$

Ora maggioriamo

$$|\lambda_1 - \rho_A(v^{(k)})| \leq \frac{\sum_{j=2}^{n} |a_j|^2 |\lambda_j|^{2k} |\lambda_1 - \lambda_j|}{|a_1|^2 |\lambda_1|^{2k} + \sum_{j=2}^{n} |a_j|^2 |\lambda_j|^{2k}}$$

Poiché $|\lambda_j| \leq |\lambda_2|$ per $j \geq 2$, abbiamo

$$|\lambda_1 - \rho_A(v^{(k)})| \leq \frac{\sum_{j=2}^{n} |a_j|^2 |\lambda_2|^{2k} |\lambda_1 - \lambda_j|}{|a_1|^2 |\lambda_1|^{2k}} \leq \frac{\max_{j=1,\ldots,n} |\lambda_1 - \lambda_j|}{|a_1|^2} \sum_{j=2}^{n} |a_j|^2 \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^{2k}$$

Osserviamo che

$$\tan \theta(v_1, v^{(0)}) = \frac{\|\Pi_{v_1}^{\perp}(v^{(0)})\|_2}{\|\Pi_{v_1}(v^{(0)})\|_2} = \frac{\sqrt{\sum_{j=2}^{n} |a_j|^2}}{|a_1|}$$

Quindi

$$[\tan \theta(v_1, v^{(0)})]^2 = \frac{\sum_{j=2}^{n} |a_j|^2}{|a_1|^2}$$

Sostituendo

$$|\lambda_1 - \rho_A(v^{(k)})| \leq \max_{j=1,\ldots,n} |\lambda_1 - \lambda_j| \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^{2k} [\tan \theta(v_1, v^{(0)})]^2$$

□

3.5 Iterazione per sottospazi

Come generalizzazione naturale del metodo delle potenze, possiamo considerare l'iterazione su sottospazi invece che su vettori. Matematicamente, desideriamo selezionare un sottospazio iniziale $\mathcal{U}_0 \subseteq \mathbb{C}^n$, e poi costruire una sequenza di sottospazi come segue

$$\mathcal{U}_{k+1} := A\mathcal{U}_k = \{Ax \mid x \in \mathcal{U}_k\}.$$

Nel caso dell'iterazione vettoriale, abbiamo convergenza a un autovettore; questo può essere reinterpretato come convergenza a una base di un sottospazio unidimensionale, ponendo $\mathcal{U}_k := \text{span}(v_k)$. Per sottospazi di dimensione superiore, la convergenza a un autovettore è sostituita dalla convergenza a un sottospazio invariante. Ricordiamo che, dato un operatore lineare A, un sottospazio invariante è uno che soddisfa $A\mathcal{U} \subseteq \mathcal{U}$. Se U è una matrice le cui colonne generano $\mathcal{U}$, la proprietà di essere un sottospazio invariante di dimensione p può essere riformulata come

$$AU = UR, \qquad R \in \mathbb{C}^{p\times p}. \tag{3.4}$$

Si noti che se $Rw = \lambda w$ allora Uw è un autovettore relativo a λ per A:

$$AUw = URw = \lambda Uw \implies \lambda \in \Lambda(A).$$

Quindi, trovare un sottospazio invariante descritto come in (3.4) è utile per calcolare autovalori selezionati.

Non tutte le basi sono numericamente adatte per rappresentare sottospazi. Data una base U, abbiamo che qualsiasi vettore in $\mathcal{U}$ può essere scritto come $v = Uw$, dove w è il vettore delle coordinate nella base scelta:

$$v = w_1u^{(1)} + \ldots + w_ku^{(k)} = \begin{bmatrix} u^{(1)} & \ldots & u^{(k)} \\ & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_k \end{bmatrix}.$$

Dobbiamo assicurarci che piccole perturbazioni nei dati di input per questa rappresentazione (ad esempio, il vettore w), corrispondano a piccole variazioni nell'output (il vettore v). Una scelta naturale per raggiungere questo obiettivo è prendere U ortogonale. Ciò garantisce

$$\|U(w + \delta w) - Uw\|_2 = \|U\delta w\|_2 = \|\delta w\|_2,$$

grazie all'invarianza unitaria della norma euclidea.

Data una qualsiasi matrice base V di dimensione $n \times k$, possiamo sempre renderla ortogonale (o unitaria) calcolando una fattorizzazione QR economy-size:

$$V = QR \implies \text{colspan}(V) = \text{colspan}(Q)$$

che vale perché $\det(R) \neq 0$, poiché V ha rango massimo. La matrice Q è calcolata attraverso una sequenza di k riflettori di Householder, ciascuno dei quali annulla gli elementi sottodiagonali nella i-esima colonna. In dettaglio, iniziamo determinando un riflettore $P_1 = I - \beta_1 u_1 u_1^*$ tale che $P_1(Ve_1) = r_{11}e_1$, che produce

$$P_1V = \begin{bmatrix} r_{11} & \times & \cdots & \times \\ 0 & \times & \cdots & \times \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & \times & \cdots & \times \end{bmatrix}.$$

La matrice P_1 è una perturbazione di rango 1 della matrice identità, quindi il costo computazionale di $P_1 V$ è $\mathcal{O}(nk)$ flop (operazioni in floating point). Poi, le colonne rimanenti possono essere ridotte in forma triangolare superiore calcolando matrici simili $P_2, \ldots, P_k$, con un costo computazionale totale di $\mathcal{O}(nk^2)$ (più precisamente, quando $k = n$ solo $k-1$ riflettori sono necessari, mentre k sono necessari in tutti gli altri casi).

Ora abbiamo tutti gli strumenti per descrivere l'iterazione per sottospazi, partendo da una base generica $n \times k$ per $U^{(0)}$. Il corrispondente pseudocodice è descritto dal seguente algoritmo.

1: **procedure** IterazioneSottospazi($A, U^{(0)}$)
2: **for** $k = 0, 1, \ldots$ **do**
3: $W^{(k+1)} \leftarrow AU^{(k)}$
4: $U^{(k+1)} R^{(k+1)} \leftarrow W^{(k+1)}$ ▷ Fattorizzazione QR
5: $Y^{(k+1)} \leftarrow (U^{(k+1)})^* A U^{(k+1)}$
6: **end for**
7: **end procedure**

Quest'ultimo introduce la quantità $Y^{(k+1)} = (U^{(k+1)})^* A U^{(k+1)}$, che assume il ruolo del termine $(v^{(k)})^* A v^{(k)}$ che avevamo nel metodo delle potenze. Si osservi che se $U^{(k)}$ è una base per un sottospazio invariante, questo implica

$$AU^{(k)} = U^{(k)} Y^{(k)} \implies \Lambda(Y^{(k)}) \subseteq \Lambda(A),$$

con $U^{(k)} w$ che sono gli autovettori, se $Y^{(k)} w = \lambda w$. Quindi, quando A è grande, possiamo usare gli autovalori della matrice (piccola) $Y^{(k)}$ come approssimazione dei suoi autovalori (più grandi). Anche le approssimazioni agli autovettori sono così ottenute.

Un teorema di convergenza per l'iterazione per sottospazi richiederebbe l'angolo tra sottospazi,uno strumento che non abbiamo ancora introdotto. Quindi, ci limiteremo a comprendere la convergenza degli autovalori di $Y^{(k)}$ verso quelli di A, che dipende da λ_{p+1}/λ_p.

Teorema Sia A una matrice $n \times n$ diagonalizzabile, con $V^{-1} A V = D$, e $D = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. Sia $U^{(0)} \in \mathbb{C}^{n \times p}$ una matrice con colonne ortogonali. Se gli autovalori, ordinati per magnitudine, soddisfano

$$|\lambda_1| \geq \cdots \geq |\lambda_p| > |\lambda_{p+1}| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$$

e $V^{-1} U^{(0)}$ ha un minore invertibile nelle prime p righe, allora l'iterazione per sottospazi definita nell'Algoritmo produce una sequenza di matrici $Y^{(k)}$ il cui spettro converge a $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_p\}$ con velocità $(\lambda_{p+1}/\lambda_p)^k$.

Dimostrazione. La definizione di iterazione per sottospazi implica che l'iterata $U^{(k)}$ è una base ortogonale di $A^k U^{(0)}$. Se quest'ultima è una matrice a rango pieno, questo determina completamente lo spazio colonna di $U^{(k)}$.

Possiamo scrivere $A^k U^{(0)}$ sfruttando la diagonalizzazione di A, usando l'ipotesi sull'invertibilità della sottomatrice $p \times p$ in alto di $V^{-1} U^{(0)}$:

$$U^k = A^k U^{(0)} = V D^k V^{-1} U^{(0)} =: V D^k \begin{bmatrix} X_0 \\ X_1 \end{bmatrix}, \quad \det X_0 \neq 0.$$

Si noti che questo implica che $A^k U^{(0)}$ ha rango pieno per ogni k. Partizionando D come $D_1 \oplus D_2$, con D_1 contenente gli autovalori $\lambda_1, \ldots, \lambda_p$, otteniamo che

$$\text{colspan}(U^{(k)}) = \text{colspan}\left(V \begin{bmatrix} D_1^k X_0 \\ D_2^k X_1 \end{bmatrix}\right) = \text{colspan}\left(V \begin{bmatrix} I_p \\ D_2^k X_1 X_0^{-1} D_1^{-k} \end{bmatrix}\right),$$

dove abbiamo usato che $\text{colspan}(AB) = \text{colspan}(A)$ per qualsiasi matrice invertibile B. Studiamo $\|D_2^k X_1 X_0^{-1} D_1^{-k}\|$:

- D_2 contiene gli autovalori $\lambda_{p+1}, \ldots, \lambda_n$ con $|\lambda_i| < |\lambda_p|$
- D_1 contiene gli autovalori $\lambda_1, \ldots, \lambda_p$ con $|\lambda_i| \geq |\lambda_p|$
- Quindi: $\|D_2^k\|_2 \sim |\lambda_{p+1}|^k$ e $\|D_1^{-k}\|_2 \sim |\lambda_p|^{-k}$
- Il prodotto ha norma: $\|D_2^k X_1 X_0^{-1} D_1^{-k}\|_2 \leq \|D_2^k\|_2 \|X_1 X_0^{-1}\|_2 \|D_1^{-k}\|_2 \sim \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_{p+1}}{\lambda_p}\right|^k\right)$

Poiché $\left|\frac{\lambda_{p+1}}{\lambda_p}\right| < 1$ per ipotesi, $\|D_2^k X_1 X_0^{-1} D_1^{-k}\|$ converge a zero con velocità $(\lambda_{p+1}/\lambda_p)^k$. Dunque si ha intuitivamente che

$$\text{colspan}(U^{(k)}) \to \text{colspan}\left(V \begin{bmatrix} I_p \\ 0 \end{bmatrix}\right),$$

che sono gli autovettori relativi a $\lambda_1, \ldots, \lambda_p$. Formalizzare questa affermazione richiederebbe angoli tra sottospazi; ora dimostriamo l'affermazione sugli autovalori di $Y^{(k)}$.

Sia v_j l'autovettore per λ_j in A. Allora, definendo $w_j^{(k)} := (U^{(k)})^* v_j$ abbiamo:

$$Y^{(k)} w_j^{(k)} = (U^{(k)})^* A U^{(k)} (U^{(k)})^* v_j = (U^{(k)})^* A [U^{(k)} (U^{(k)})^*] v_j$$

Ora aggiungiamo e sottraiamo $(U^{(k)})^* A v_j$

$$\begin{aligned} &= (U^{(k)})^* A v_j - (U^{(k)})^* A v_j + (U^{(k)})^* A [U^{(k)} (U^{(k)})^*] v_j \\ &= (U^{(k)})^* (\lambda_j v_j) - (U^{(k)})^* A [v_j - U^{(k)} (U^{(k)})^* v_j] \\ &= \lambda_j (U^{(k)})^* v_j - (U^{(k)})^* A (I - U^{(k)} (U^{(k)})^*) v_j \end{aligned}$$

Quindi otteniamo

$$Y^{(k)} w_j^{(k)} = \lambda_j w_j^{(k)} - (U^{(k)})^* A (I - U^{(k)} (U^{(k)})^*) v_j.$$

Osservazioni

- Il termine $U^{(k)} (U^{(k)})^*$ è il proiettore ortogonale sullo spazio colonna di $U^{(k)}$
- $I - U^{(k)} (U^{(k)})^*$ è il proiettore ortogonale sul complemento ortogonale
- Il termine $(I - U^{(k)} (U^{(k)})^*) v_j$ rappresenta la componente di v_j ortogonale a $U^{(k)}$
- Quando $U^{(k)}$ si avvicina allo spazio degli autovettori, questo termine tende a zero

Prendendo le norme spettrali, possiamo maggiorare il residuo per la coppia eigen $\lambda_j, w_j^{(k)}$ come segue:

$$\|Y^{(k)}w_j^{(k)} - \lambda_j w_j^{(k)}\|_2 \leq \|A\|_2\|(I - U^{(k)}(U^{(k)})^*)v_j\|_2 = \|A\|_2 \min_{z\in\text{colspan } U^{(k)}} \|v_j - z\|_2,$$

dove nell'ultimo passaggio abbiamo usato la caratterizzazione della proiezione ortogonale come minimizzazione della norma euclidea della differenza. Possiamo fare una scelta esplicita per z, ponendo

$$z = V \begin{bmatrix} I_p \\ D_2^k X_1 X_0^{-1} D_1^{-k} \end{bmatrix} e_j \implies z - v_j = V \begin{bmatrix} 0_p \\ D_2^k X_1 X_0^{-1} D_1^{-k} \end{bmatrix} e_j.$$

Prendendo le norme, si ottiene la maggiorazione

$$\|Y^{(k)}w_j^{(k)} - \lambda_j w_j^{(k)}\|_2 \leq \|A\|_2\|V\|_2\|X_1X_0^{-1}\|_2\|D_2^k\|_2\|D_1^{-k}\|_2 \sim \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_{p+1}}{\lambda_p}\right|^k\right).$$

Quindi, λ_j è un autovalore approssimato di $Y^{(k)}$ con errore all'indietro maggiorato come sopra, grazie ad un precedente Teorema. La conclusione segue per un argomento di continuità dello spettro, combinato con il fatto che $Y^{(k)}$ è diagonalizzabile per k sufficientemente grande, e quindi la dipendenza è almeno di classe C^1. □

3.6 Iterazione simultanea

Un vantaggio chiave dell'iterazione per sottospazi è che, mentre si esegue l'algoritmo con sottospazi di dimensione p, si stanno in realtà eseguendo simultaneamente tutte le iterazioni per $p' = 1, \ldots, p$.

Si noti che, se W è una matrice alta e stretta, la sua fattorizzazione QR in forma economica contiene incorporate tutte le fattorizzazioni QR in forma economica per W' che includono le prime p' colonne di W:

$$W = QR \implies W \begin{bmatrix} I_{p'} \\ 0 \end{bmatrix} = QR \begin{bmatrix} I_{p'} \\ 0 \end{bmatrix} = \left(Q \begin{bmatrix} I_{p'} \\ 0 \end{bmatrix}\right)\left(\begin{bmatrix} I_{p'} & 0 \end{bmatrix} R \begin{bmatrix} I_{p'} \\ 0 \end{bmatrix}\right).$$

Quindi, se restringiamo le matrici $U^{(k)}$ e $Y^{(k)}$ generate dall'iterazione per sottospazi considerando solo le prime p' colonne di $U^{(k)}$ e il minore principale $p' \times p'$ di $Y^{(k)}$, otteniamo l'iterazione per sottospazi di dimensione p' iniziata dalle prime p' colonne di $U^{(0)}$.

Una conseguenza immediata di questa osservazione è il seguente risultato.

Teorema Sia A una matrice diagonalizzabile con autovalori ordinati come $|\lambda_1| > \ldots > |\lambda_n|$, e si considerino le matrici $U^{(k)}$ generate dall'iterazione per sottospazi iniziata da $U^{(0)} = I_n$. Allora, se i minori principali $p \times p$ della matrice inversa degli autovettori V^{-1} sono tutti invertibili, la sequenza $Y^{(k)}$ converge, a meno di scalatura per matrici unitarie diagonali, a una forma di Schur di A.

Dimostrazione. È sufficiente combinare tutte le osservazioni che abbiamo fatto finora. L'ipotesi su V^{-1} garantisce la convergenza di tutte le iterazioni simultanee per sottospazi per $p = 1, \ldots, n$. Di conseguenza, le matrici unitarie $U^{(k)}$ convergono a una base ortogonale generata dagli autovettori relativi a $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, il che a sua volta implica la convergenza di $Y^{(k)}$ a una forma di Schur.

La base degli autovettori è determinata in modo unico a meno di un fattore di scala delle colonne per un numero complesso di modulo 1, da cui segue la tesi. □

Esercizio Si mostri che le assunzioni del Teorema falliscono per matrici reali con autovalori complessi, ma nondimeno la dimostrazione può essere modificata per garantire la convergenza alla forma di Schur reale, con blocchi 2×2 sulla diagonale.

Soluzione. Per matrici reali con autovalori complessi, le assunzioni del Teorema falliscono perché:

- Gli autovalori complessi occorrono in coppie coniugate $\lambda, \bar{\lambda}$ con $|\lambda| = |\bar{\lambda}|$
- La condizione di ordinamento $|\lambda_1| > \ldots > |\lambda_n|$ non può essere soddisfatta per coppie complesse coniugate
- La matrice degli autovettori V contiene elementi complessi, quindi V^{-1} non è reale

Tuttavia, la dimostrazione può essere modificata come segue:

- Invece di convergere a singoli autovettori complessi, l'algoritmo converge ai sottospazi invarianti 2-dimensionali generati dalle parti reale e immaginaria delle coppie di autovettori complessi coniugati
- La matrice $Y^{(k)}$ converge a una *forma di Schur reale* con blocchi 1×1 per autovalori reali e blocchi 2×2 per coppie di autovalori complessi coniugati
- Ogni blocco 2×2 sulla diagonale rappresenta una coppia coniugata di autovalori complessi
- La velocità di convergenza per autovalori complessi è determinata dal rapporto $|\lambda_{p+1}|/|\lambda_p|$, dove le coppie complesse sono trattate come aventi lo stesso modulo

□

3.7 L'iterazione QR

Riformuliamo ora l'iterazione simultanea per sottospazi in un modo che sarà molto più adatto al calcolo efficiente. Da un lato, l'iterazione simultanea per sottospazi fornisce un'approssimazione della forma di Schur, come originariamente desiderato. Dall'altro lato, lo fa a un costo elevato: la velocità di convergenza è lenta (governata dal rapporto minimo tra due autovalori consecutivi) e il costo per iterazione è cubico.

Ricordiamo che il nostro obiettivo è progettare un'iterazione matriciale che produca una sequenza di matrici che sono simili, attraverso matrici unitarie o ortogonali. Infatti, l'iterazione simultanea iniziata con $U^{(0)} = I_n$ costruisce tale sequenza

$$Y^{(k+1)} = (U^{(k+1)})^* A U^{(k+1)} = (U^{(k+1)})^* U^{(k)} \underbrace{(U^{(k)})^* A U^{(k)}}_{Y^{(k)}} (U^{(k)})^* U^{(k+1)} = (Z^{(k)})^* Y^{(k)} Z^{(k)},$$

dove abbiamo posto $Z^{(k)} := (U^{(k)})^* U^{(k+1)}$. Inoltre, guardando alla linea 4 dell'Algoritmo di iterazione dei sottospazi, vediamo che

$$Z^{(k)} R^{(k+1)} = Y^{(k)},$$

significa che $Z^{(k)}$ è il fattore Q di una fattorizzazione QR della matrice $Y^{(k)}$. Infine, si osservi che per ottenere il coniugato di una matrice quadrata rispetto al suo fattore Q è sufficiente calcolare il

prodotto RQ della sua fattorizzazione QR; nel nostro contesto questo si legge come

$$Y^{(k+1)} = (Z^{(k)})^* Y^{(k)} Z^{(k)} = R^{(k+1)} Z^{(k)}.$$

Pertanto, se troviamo un modo per costruire le matrici $Z^{(k)}$ direttamente, possiamo riformulare l'iterazione in un modo più conveniente. Per raggiungere questo obiettivo, dobbiamo prima ricordare alcuni fatti rilevanti riguardanti la fattorizzazione QR di una matrice A.

Teorema Sia $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ una matrice a rango pieno con $m \geq n$, e $Q_1 R_1 = Q_2 R_2 = A$ due fattorizzazioni QR in forma economica. Allora, esiste una matrice diagonale unitaria D tale che $Q_1 = Q_2 D$.

Dimostrazione. Poiché R_1 e R_2 devono essere matrici $n \times n$ invertibili, possiamo riorganizzare le due fattorizzazioni scrivendo:

$$D := Q_2^* Q_1 = R_2 R_1^{-1}$$

Dall'equazione sopra concludiamo che D è triangolare superiore. Inoltre, usando che lo spazio colonna di Q_1 è incluso in quello di Q_2 (e viceversa), abbiamo anche che D è una matrice quadrata unitaria (o ortogonale). Una matrice unitaria triangolare superiore deve essere diagonale con elementi diagonali di modulo 1. Per concludere usiamo che lo spazio colonna di Q_1 è incluso in quello di Q_2 per ottenere:

$$Q_1 = Q_2 Q_2^* Q_1 = Q_2 D.$$

□

Le osservazioni che abbiamo usato per definire $Z^{(k)}$ permettono di costruire l'iterazione QR, descritta nell'Algoritmo che segue:

```
1: procedure QR(A)
2:     Y^(0) ← A
3:     for k = 0, 1, ... do
4:         Z^(k), R^(k) ← QR(Y^(k))          ▷ Fattorizzazione QR
5:         Y^(k+1) ← R^(k) Z^(k)
6:     end for
7: end procedure
```

Tale algoritmo è lontano dall'essere pratico per le seguenti ragioni:

- La convergenza dipende dal fatto che gli autovalori abbiano moduli diversi, e può essere molto lenta per autovalori raggruppati.
- Ogni iterazione ha un costo cubico (sia le fattorizzazioni QR che la moltiplicazione matrice-matrice contribuiscono a questo), e anche nello scenario ottimistico in cui sono sufficienti $O(n)$ iterazioni, questo produrrebbe comunque un algoritmo $O(n^4)$.
- Diverse ipotesi che abbiamo fatto spesso non sono soddisfatte. Ad esempio, tutte le matrici reali con autovalori complessi coniugati hanno autovalori con $|\lambda_p| = |\lambda_{p+1}|$.

La prossima sezione sarà dedicata a modificare l'algoritmo per renderlo pratico.

3.8 Shifting e deflation

Consideriamo il seguente problema modello: abbiamo una matrice A con autovalori che soddisfano le seguenti disuguaglianze:

$$|\lambda_1| \geq \ldots \geq |\lambda_{n-1}| > |\lambda_n|, \qquad \frac{|\lambda_n|}{|\lambda_{n-1}|} = \epsilon \ll 1.$$

Alla luce dell'analisi precedente, ci aspettiamo che dopo k iterazioni del metodo QR otteniamo una matrice $Y^{(k)}$ della forma

$$Y^{(k)} = \left[\begin{array}{c|c} \hat{Y}^{(k)} & w^{(k)} \\ \hline 0 & \lambda_n^{(k)} \end{array}\right] \qquad \begin{cases} |\lambda_n^{(k)} - \lambda_n| \sim \mathcal{O}(\epsilon^k) \\ \|w^{(k)}\| \sim \mathcal{O}(\epsilon^k) \end{cases}.$$

Se ϵ è sufficientemente piccolo, dopo poche iterazioni avremo che $\|w^{(k)}\|$ sarà dell'ordine della precisione di macchina, e quindi possiamo considerare la matrice leggermente perturbata

$$Y^{(k)} + \delta Y^{(k)} = \left[\begin{array}{c|c} \hat{Y}^{(k)} & 0 \\ \hline 0 & \lambda_n^{(k)} \end{array}\right],$$

che ha esattamente $\lambda_n^{(k)}$ come autovalore. Poiché questa matrice è unitariamente simile a A, questo corrisponde all'iterazione QR esatta con la matrice $A+\delta A$ con $\delta A = U^{(k)}\delta Y^{(k)}(U^{(k)})^*$, che ha norma spettrale uguale a $\|w^{(k)}\|$. Quindi, possiamo decidere che $\lambda_n^{(k)}$ è un autovalore approssimato di A con un piccolo errore all'indietro, e continuare l'iterazione sulla matrice più piccola $(n-1)\times(n-1)$ $\hat{Y}^{(k)}$. Questa procedura è chiamata *deflation*.

In generale, non c'è motivo di assumere che λ_n sia molto più piccolo del resto dello spettro, e quindi di essere in questa situazione favorevole. Si scopre che possiamo sempre modificare leggermente il problema agli autovalori per farlo accadere.

Supponiamo di avere un certo shift $\sigma \in \mathbb{C}$ tale che $\sigma \approx \lambda_n$; allora, la matrice shiftata $A - \sigma I$ ha $\lambda_n - \sigma$ come autovalore di modulo più piccolo (se assumiamo che σ sia più vicino a λ_n che a qualsiasi altro autovalore). Applicando un passo dell'iterazione QR alla matrice shiftata si otterrà

$$\begin{aligned} Y_\sigma^{(0)} &= A - \sigma I \\ Z_\sigma^{(0)} R_\sigma^{(0)} &= Y_\sigma^{(0)} \\ Y_\sigma^{(1)} &= (Z_\sigma^{(0)})^* Y_\sigma^{(0)} Z_\sigma^{(0)} = (Z_\sigma^{(0)})^* A Z_\sigma^{(0)} - \sigma I, \end{aligned}$$

dove abbiamo denotato con $Y_\sigma^{(k)}$ l'iterazione ottenuta partendo da $A - \sigma I$. Questa osservazione può essere generalizzata a un numero arbitrario di passi attraverso il seguente risultato.

Lemma Sia $Y_\sigma^{(k)}$ la sequenza di matrici generata dall'iterazione QR iniziata con $A - \sigma I$. Allora, se denotiamo con $Z_\sigma^{(k)}$ la matrice ortogonale della fattorizzazione QR al passo k,

$$(Z_\sigma^{(0)} \ldots Z_\sigma^{(k-1)})^* A (Z_\sigma^{(0)} \ldots Z_\sigma^{(k-1)}) = Y_\sigma^{(k)} + \sigma I, \qquad \forall k \geq 0.$$

Dimostrazione. La definizione dell'iterazione QR fornisce

$$(Z_\sigma^{(0)} \ldots Z_\sigma^{(k-1)})^* (A - \sigma I)(Z_\sigma^{(0)} \ldots Z_\sigma^{(k-1)}) = Y_\sigma^{(k)}.$$

La tesi segue spostando σI al membro destro, e ricordando che le matrici $Z^{(i)}$ sono unitarie. □

Concludiamo che, se abbiamo a disposizione una buona approssimazione $\sigma \approx \lambda_n$, possiamo far convergere l'iterazione QR (shiftata) in pochi passi a una forma dove λ_n può essere "deflazionato".

3.9 Riduzione di Hessenberg

Un'osservazione chiave per ridurre il costo dell'iterazione è preprocessare la matrice per renderla "il più triangolare superiore possibile". Chiaramente, il passo dell'algoritmo deve lavorare con matrici unitarie ed essere una similitudine.

Definizione Una matrice H è in *forma di Hessenberg* se ha elementi nulli sotto la prima sottodiagonale, cioè se $H_{ij} = 0$ per tutti $i > j + 1$.

La riduzione della matrice alla forma di Hessenberg può essere calcolata con $O(n^3)$ flop usando riflettori di Householder.

Lemma Sia A una qualsiasi matrice complessa $n \times n$, con $n \geq 2$. Allora, esistono una matrice di Hessenberg superiore H e $n-2$ riflettori di Householder P_j per $j = 1, \ldots, n-2$, tali che

$$P_{n-2} \ldots P_1 A P_1^* \ldots P_{n-2}^* = H.$$

Le matrici H e $P := P_{n-2} \ldots P_1$ possono essere calcolate da A con $O(n^3)$ flop.

Dimostrazione. La dimostrazione presenta un algoritmo per calcolare H e P_j con la complessità asintotica richiesta. Una dimostrazione più formale può essere ottenuta usando l'induzione. Sia $\hat{P}_1$ un riflettore di Householder $(n-1) \times (n-1)$ tale che

$$\hat{P}_1 A_{2:n,1} = \begin{bmatrix} x \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix},$$

dove x è usato per denotare un elemento generico non nullo. Allora, se definiamo $P_1 := I_1 \oplus \hat{P}_1$ che denota la matrice blocco diagonale ottenuta ponendo lo scalare 1, cioè l'identità 1×1, sopra a sinistra e $\hat{P}_1$ in basso a destra, la matrice $P_1 A P_1^*$ ha il seguente schema di sparsità:

$$A^{(1)} := P_1 A P_1^* = \begin{bmatrix} x & x & x & \ldots & x \\ x & x & x & \ldots & x \\ 0 & x & x & \ldots & x \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & x & x & \ldots & x \end{bmatrix},$$

e può essere calcolata in $O(n^2)$ flop sfruttando la struttura del riflettore di Householder. Seguendo la stessa idea, P_2 può essere definita per avere

$$P_2 = I_2 \oplus \hat{P}_2, \quad \hat{P}_2 A^{(1)}_{3:n,2} = \begin{bmatrix} x \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Calcolare $P_2 A^{(1)} P_2^*$ metterà la seconda colonna in "forma di Hessenberg", e non deteriorerà la struttura della prima colonna, grazie alla presenza di I_2 in alto. Continuando il processo si ottiene la matrice di Hessenberg superiore richiesta $H = A^{(n-2)}$. □

Preprocessare la matrice A per essere in forma di Hessenberg superiore porta due vantaggi chiave all'iterazione QR:

- Per una matrice di Hessenberg superiore, la fattorizzazione QR $Z^{(k)} R^{(k)} = Y^{(k)}$ e l'iterata successiva $Y^{(k+1)} := R^{(k)} Z^{(k)}$ possono essere calcolate con $O(n^2)$ flop.

- La struttura di Hessenberg è preservata dalle iterazioni QR, e quindi il beneficio di cui sopra non è limitato al primo passo.

Introduciamo ora le *rotazioni di Givens*, che sono matrici unitarie con un obiettivo simile ai riflettori di Householder, ma che agiscono elemento per elemento, rendendo più facile preservare la sparsità.

Definizione Una rotazione di Givens che agisce sulle righe (k, l) è una matrice della forma G tale che, per alcuni $c, s \in \mathbb{C}$ con $|c|^2 + |s|^2 = 1$,

$$G = \begin{bmatrix} I_{k_1} & & & \\ & c & s & \\ & & I_{k_2} & \\ & -\bar{s} & \bar{c} & \\ & & & I_{k_3} \end{bmatrix},$$

e tale che gli elementi $c, s, -\bar{s}, \bar{c}$ si trovino sulle righe e colonne k o l. Queste trasformazioni sono unitarie con $\det(G) = 1$.

La proprietà $|c|^2 + |s|^2$ permette di interpretare c e s come coseni e seni (complessi), e questa è la ragione per chiamare queste trasformazioni "rotazioni". Spesso, considereremo $l = k + 1$, che permette di cercare la forma semplificata

$$G = I_{k_1} \oplus \hat{G} \oplus I_{k_2}, \qquad \hat{G} := \begin{bmatrix} c & s \\ -\bar{s} & \bar{c} \end{bmatrix}.$$

Usiamo ora le rotazioni di Givens per calcolare una fattorizzazione QR di una matrice di Hessenberg superiore in tempo quadratico.

Lemma Sia H una matrice di Hessenberg superiore $n \times n$. Allora, esistono $n-1$ rotazioni di Givens $G_1, \ldots, G_{n-1}$ con G_i che agisce sulle righe i e $i+1$, tali che

$$H = G_1^* \ldots G_{n-1}^* R = QR,$$

con R triangolare superiore. Le matrici Q e R possono essere calcolate con $\mathcal{O}(n^2)$ flop.

Dimostrazione. Dimostriamo il risultato per induzione, mostrando che la costruzione richiede al più $8n^2$ operazioni in aritmetica floating point. Il risultato è banalmente vero per $n = 1$, poiché H è già triangolare superiore, e possiamo semplicemente porre $Q = 1$ come prodotto vuoto di 0 rotazioni.

Assumiamo che il risultato sia vero per $n-1$, e consideriamo una rotazione G_1 che opera sulle righe 1 e 2 tale che:

$$G_1 \begin{bmatrix} H_{11} \\ H_{21} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Abbiamo allora

$$G_1 H = \left[\begin{array}{c|ccc} \times & \times & \dots & \times \\ \hline & & \hat{H} & \end{array}\right],$$

con $\hat{H}$ una matrice di Hessenberg superiore $(n-1) \times (n-1)$. Per induzione, abbiamo $\hat{H} = \hat{G}_1^* \dots \hat{G}_{n-2}^* \hat{R}$, e ponendo $G_i := 1 \oplus \hat{G}_{i-1}$ per $i = 2, \dots, n-1$, otteniamo

$$H = G_1^* G_2^* \dots G_{n-1}^* \underbrace{\left[\begin{array}{c|ccc} \times & \times & \dots & \times \\ \hline & & \hat{R} & \end{array}\right]}_{=:R} = G_1^* G_2^* \dots G_{n-1}^* R = QR.$$

Un calcolo diretto mostra che moltiplicare una rotazione per una matrice richiede $4n$ operazioni in floating point, ottenere R e Q da $\hat{R}$ e $\hat{Q} := \hat{G}_1^* \dots \hat{G}_{n-2}^*$ richiede 2 prodotti per G_1. In aggiunta, abbiamo 4 operazioni in virgola mobile in più per trovare G_1 e calcolare $G_1 H e_1$, che produce il costo totale

$$8n + 4 + 8(n-1)^2 = 8n^2 - 8n + 12 \sim \mathcal{O}(n^2)$$

□

3.10 Calcolo di autovettori e sottospazi invarianti

L'iterazione QR discussa nelle sezioni precedenti permette di costruire una sequenza di matrici simili $Y^{(k)}$ che, sotto opportune ipotesi, convergono a una forma di Schur di $Y^{(0)} = A$. La forma di Schur finale T è sufficiente per determinare gli autovalori (dobbiamo solo leggere gli elementi diagonali) e nel caso di autovalori multipli anche i corrispondenti blocchi di Jordan.

Il recupero degli autovettori è più complesso e viene eseguito in due passi:

- Prima determiniamo gli autovettori w della matrice triangolare superiore T, corrispondenti agli autovalori $\lambda_i := T_{ii}$ per $i = 1, \dots, n$.
- Poi recuperiamo gli autovettori del problema originale usando la relazione $Q^* A Q = T$ e ponendo $v = Qw$.

Se $Tw = \lambda w$ allora $AQ = QT$ implica $Av = AQw = QTw = \lambda Qw = \lambda v$, e quindi il secondo passo caratterizza completamente gli autovettori di A a partire da quelli di T.

Per calcolare gli autovettori della matrice triangolare superiore, facciamo l'ipotesi che λ_i sia semplice, e ci basiamo sulla seguente osservazione:

$$T - \lambda_i I = \left[\begin{array}{c|c|c} T_1 & x & \\ \hline & 0 & \\ \hline & & T_2 \end{array}\right]$$

con T_1 non singolare e triangolare superiore. Dobbiamo determinare un vettore nel nucleo destro della matrice sopra, che può essere fatto imponendo

$$(T - \lambda_i I)w = 0 \qquad w = \begin{bmatrix} y \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

dove w è partizionato per corrispondere alla struttura a blocchi identificata in T. Allora, risolviamo l'equazione ponendo $T_1 y = -x$. Quindi, y (e di conseguenza w) è determinato risolvendo un sistema lineare triangolare superiore, che costa al più $\mathcal{O}(n^2)$ flop. Questo deve essere ripetuto per tutti gli autovalori, producendo un costo totale di $\mathcal{O}(n^3)$.

Una tecnica simile può essere usata per trovare basi ortogonali per sottospazi invarianti corrispondenti a un sottoinsieme $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_k\} \subseteq \Lambda(A)$ di tutti gli autovalori di A. Supponiamo di essere particolarmente fortunati, e che la forma di Schur calcolata dall'iterazione QR soddisfi

$$Q^* A Q = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ 0 & T_{22} \end{bmatrix}, \qquad T_{11} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_k \end{bmatrix}$$

con T_{22} contenente tutti gli altri autovalori. Allora, il sottospazio invariante in considerazione è generato dalle prime k colonne di Q, che formano una base ortogonale per esso. Il nostro problema è facilmente risolto.

Tuttavia, non c'è una ragione particolare per cui questo dovrebbe accadere: l'iterazione QR può calcolare gli autovalori in qualsiasi ordine, e abbiamo poco controllo sul processo. Se gli autovalori finiscono nella posizione "sbagliata", possiamo semplicemente riordinarli, per spingere quelli di interesse in cima alla matrice. Il problema può essere ridotto al caso 2×2 che è risolto dal seguente Lemma.

Lemma Sia T una matrice triangolare superiore con due autovalori distinti $t_{11} = \lambda_1 \neq \lambda_2 = t_{22}$; sia G una rotazione di Givens tale che, per qualche $\alpha \in \mathbb{C}$,

$$G \begin{bmatrix} t_{12} \\ \lambda_2 - \lambda_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \end{bmatrix}$$

Allora, la matrice GTG^* è triangolare superiore con autovalori elencati nell'ordine opposto.

Dimostrazione. Si noti che, per costruzione, abbiamo

$$G(T - \lambda_1 I)G^* = G \begin{bmatrix} 0 & t_{12} \\ 0 & \lambda_2 - \lambda_1 \end{bmatrix} G^* = \begin{bmatrix} 0 & \alpha \\ 0 & 0 \end{bmatrix} G^* = \begin{bmatrix} \times & \times \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

dove come al solito abbiamo usato $\times$ per denotare lo schema di sparsità nella matrice. Applicando la stessa trasformazione a T si ottiene

$$GTG^* = \begin{bmatrix} \times & \times \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \lambda_1 I = \begin{bmatrix} \lambda_2 & \times \\ 0 & \lambda_1 \end{bmatrix},$$

dove l'elemento in posizione $(1, 1)$ è determinato essere esattamente λ_2 perché gli autovalori di T non cambiano per similitudine. □

Il Lemma può essere impiegato per scambiare due autovalori λ_i, λ_{i+1} di una matrice triangolare superiore $n \times n$ più grande considerando una rotazione su due righe consecutive. Usando il fatto che le trasposizioni generano tutte le permutazioni, concludiamo che qualsiasi permutazione degli autovalori è possibile, ed è facilmente ottenuta mediante ripetute applicazioni del Lemma.

3.11 Double shifting e la forma di Schur reale

Se la matrice A è reale, calcolare la forma di Schur con shift complessi può essere indesiderabile, a causa del costo aggiuntivo dell'aritmetica complessa. Chiaramente, non c'è speranza di trovare la forma di Schur con aritmetica reale se la matrice ha autovalori complessi. Possiamo tuttavia limitare la nostra attenzione alla forma di Schur reale:

Definizione Una matrice T è in *forma di Schur reale* se è a blocchi triangolare superiore con blocchi diagonali T_{ii} tali che o T_{ii} è una matrice reale 1×1, o una matrice 2×2 della forma

$$T_{ii} = \begin{bmatrix} a & b \\ -b & a \end{bmatrix}$$

che ha $a \pm ib$ come autovalori.

Anche se una matrice in forma di Schur reale non è in senso stretto triangolare superiore, i suoi autovalori sono immediatamente leggibili dai blocchi diagonali senza alcun calcolo. Inoltre, gli argomenti usati per trovare gli autovettori e i sottospazi invarianti dalla forma di Schur possono essere facilmente adattati.

La struttura reale può essere mantenuta durante tutte le iterazioni con il seguente trucco; se uno shift σ è determinato (per esempio dalla strategia di shifting di Wilkinson), procediamo come segue:

- *Se* $\sigma \in \mathbb{R}$, procediamo con l'iterazione QR standard.
- *Se* $\sigma \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, consideriamo il polinomio a coefficienti reali

  $$p(z) = (z - \sigma)(z - \overline{\sigma})$$

  e calcoliamo $p(Y^{(k)})e_1$.

Nel secondo caso, consideriamo le due rotazioni necessarie per trasformare $p(Y^{(k)})e_1$ in un multiplo di e_1, e applichiamo queste rotazioni a $Y^{(k)}$. La struttura di Hessenberg superiore può essere ripristinata usando una tecnica nota come *bulge-chasing*.

Un'iterazione di questa forma costa circa il doppio di un'iterazione con shift singolo. Tuttavia, la convergenza può essere collegata all'iterazione per sottospazi applicata a $p(Y^{(k)})$, e quindi possiamo aspettarci che gli autovalori vicini a σ e $\overline{\sigma}$ siano ben approssimati insieme.

4 Problemi agli autovalori simmetrici e SVD

I problemi agli autovalori simmetrici sono intrinsecamente più facili di quelli non simmetrici, e permettono di dimostrare risultati e caratterizzazioni molto più forti. In questa sezione, discutiamo l'iterazione QR tridiagonale e lo schema divide-et-impera.

Vedremo poi che c'è una stretta relazione tra il problema agli autovalori simmetrico e la decomposizione ai valori singolari (SVD), una fattorizzazione potente sia teorica che algoritmica.

4.1 Iterazione QR tridiagonale

Se applichiamo l'iterazione QR a una matrice simmetrica, alcune osservazioni possono essere fatte, che sono riassunte dal seguente Lemma.

Lemma Sia $A = A^*$ una matrice simmetrica o hermitiana, e $Y^{(k)}$ le iterate QR applicate dopo la riduzione di Hessenberg $Y^{(0)} = Q^*AQ$. Allora, tutte le matrici $Y^{(k)}$ sono tridiagonali.

Dimostrazione. Si noti che $Y^{(k)}$ sono unitariamente simili a A, quindi esiste Q_k ortogonale (o unitaria) tale che $Q_k^*AQ_k = Y^{(k)}$. Quindi, $Y^{(k)} = (Y^{(k)})^*$ sono tutte simmetriche (o hermitiane). Tutte le $Y^{(k)}$ sono matrici di Hessenberg e quest'ultime hanno solo una sottodiagonale diversa da zero. La simmetria implica che tutte le $Y^{(k)}$ hanno solo una superdiagonale non nulla, e sono quindi tridiagonali. □

Ridurre una matrice simmetrica A alla forma tridiagonale non è più economico che ridurre una matrice generale alla forma di Hessenberg superiore, dobbiamo ancora applicare le rotazioni sulla matrice completa, per un costo totale di $\mathcal{O}(n^3)$ flop. Se A è tridiagonale, tuttavia, questa struttura è facilmente sfruttata nell'iterazione QR se sono desiderati solo gli autovalori. Infatti, calcolare $Y^{(k+1)}$ da $Y^{(k)}$ richiede i seguenti passi:

- *Trovare uno shift appropriato* σ (costo: $\mathcal{O}(1)$ flop).
- *Determinare una rotazione tale che* $Y^{(k)}e_1 - \sigma e_1$ *sia un multiplo di* e_1 (costo: $\mathcal{O}(1)$ flop).
- *Applicare le rotazioni alla matrice fino al fondo* (costo: applicare $\mathcal{O}(n)$ rotazioni).

L'ultimo punto è la parte costosa, e nel caso non strutturato ogni rotazione costa $\mathcal{O}(n)$ flop. Nel caso tridiagonale, la struttura tridiagonale-più-bulge è preservata durante tutto il processo di inseguimento, e quindi una rotazione può essere applicata a costo $\mathcal{O}(1)$. Riassumendo, possiamo eseguire l'iterazione QR tridiagonale con $\mathcal{O}(n)$ flop per iterazione, per un costo totale di $\mathcal{O}(n^2)$ flop.

Remark Calcolare l'autovettore nel caso tridiagonale è molto più costoso: le rotazioni devono essere applicate alle matrici Q che rappresentano il cambio di base, e questo richiede $O(n)$ flop per iterazione. Il costo totale del metodo è ancora $O(n^3)$ flop.

4.2 Teorema di Courant-Fischer

Come abbiamo visto analizzando il metodo delle potenze, nel caso hermitiano c'è una relazione tra autovalori, autovettori e il quoziente di Rayleigh. Qui forniamo un potente strumento teorico, noto come *teorema min-max di Courant-Fischer*, che caratterizza gli autovalori come valori ottimali del quoziente di Rayleigh su sottospazi.

Teorema (Courant-Fischer) Sia $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ una matrice hermitiana con autovalori $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$. Allora

$$\max_{\substack{U\subset\mathbb{C}^n \\ \dim(U)=k}} \min_{\substack{x\in U \\ x\neq 0}} \frac{x^*Ax}{x^*x} = \lambda_k,$$

$$\min_{\substack{U\subset\mathbb{C}^n \\ \dim(U)=k}} \max_{\substack{x\in U \\ x\neq 0}} \frac{x^*Ax}{x^*x} = \lambda_{n-k+1},$$

per $k = 1, 2, \ldots, n$.

Dimostrazione. Dimostriamo solo la parte max-min poiché la min-max è completamente analoga. Siano $v_1, \ldots, v_n$ una base ortonormale di $\mathbb{C}^n$ composta da autovettori di A e sia $S := \text{colspan}(v_k, \ldots, v_n)$. Allora, per ogni $U \subset \mathbb{C}^n$ di dimensione k abbiamo che $S \cap U \neq \{0\}$; più specificamente, esiste $x \in S \cap U$, tale che $x = \sum_{j=k}^n c_j v_j$ e $x \neq 0$. Questo implica

$$\frac{x^*Ax}{x^*x} = \frac{\sum_{j=k}^n |c_j|^2 \lambda_j}{\sum_{j=k}^n |c_j|^2} \leq \lambda_k.$$

Questo prova che, per ogni U, il minimo del quoziente di Rayleigh è minore o uguale a λ_k, il che implica che il massimo su tutti i possibili U del minimo quoziente di Rayleigh è anche limitato superiormente da λ_k. Per ottenere la tesi, è sufficiente mostrare che per almeno una scelta di U, il valore λ_k corrisponde al minimo del quoziente di Rayleigh. Questo accade quando si considera $U = \text{colspan}(v_1, \ldots, v_k)$. □

Corollario Sia $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ una matrice hermitiana con autovalori $\alpha_1 \geq \cdots \geq \alpha_n$, $Q \in \mathbb{C}^{n\times(n-1)}$ tale che $Q^*Q = I_{n-1}$, e $B = Q^*AQ \in \mathbb{C}^{(n-1)\times(n-1)}$ con autovalori $\beta_1 \geq \cdots \geq \beta_{n-1}$. Allora

$$\alpha_1 \geq \beta_1 \geq \alpha_2 \geq \beta_2 \geq \cdots \geq \beta_{n-1} \geq \alpha_n,$$

e diciamo che gli autovalori di A sono interlacciati con quelli di B (*interlacing property*).

Dimostrazione. Alla luce del Teorema precedente abbiamo

$$\beta_k = \max_{\substack{U\subset\mathbb{C}^{n-1} \\ \dim(U)=k}} \min_{\substack{x\in U \\ x\neq 0}} \frac{x^*Bx}{x^*x} = \min_{\substack{x\in\tilde{U} \\ x\neq 0}} \frac{x^*Q^*AQx}{x^*Q^*Qx},$$

dove $\tilde{U}$ è un sottospazio k-dimensionale di $\mathbb{C}^{n-1}$ dove il massimo è raggiunto. Sia

$$\widehat{U} = Q\tilde{U} = \{y \in \mathbb{C}^n : y = Qx, \text{ per qualche } x \in \tilde{U}\},$$

allora $\dim(\widehat{U}) = k$ e

$$\beta_k = \min_{\substack{x\in\tilde{U} \\ x\neq 0}} \frac{x^*Q^*AQx}{x^*Q^*Qx} = \min_{\substack{y\in\widehat{U} \\ y\neq 0}} \frac{y^*Ay}{y^*y} \leq \max_{\substack{\widehat{U}\subset\mathbb{C}^n \\ \dim(\widehat{U})=k}} \min_{\substack{y\in\widehat{U} \\ y\neq 0}} \frac{y^*Ay}{y^*y} = \alpha_k.$$

La disuguaglianza $\beta_{k-1} \geq \alpha_k$ è ottenuta applicando lo stesso argomento alle matrici $-A$ e $-B$. □

Corollario Sia $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ una matrice hermitiana con autovalori $\alpha_1 \geq \cdots \geq \alpha_n$ e sia $B \in \mathbb{C}^{m\times m}$ una sottomatrice principale di A, per $m \leq n$, con autovalori $\beta_1 \geq \cdots \geq \beta_m$. Allora

$$\alpha_j \geq \beta_j \geq \alpha_{j+(n-m)},$$

per $j = 1, \ldots, m$.

Dimostrazione. Dimostriamo per induzione su $n - m$.

Caso base: $n - m = 1$ (cioè $m = n - 1$).
In questo caso, B è una sottomatrice principale $(n-1) \times (n-1)$ di A. Possiamo scrivere A come:

$$A = \begin{bmatrix} B & c \\ c^* & a \end{bmatrix},$$

dove $c \in \mathbb{C}^{n-1}$ e $a \in \mathbb{R}$. Per il Corollario precedente, gli autovalori di A e B sono interlacciati:

$$\alpha_1 \geq \beta_1 \geq \alpha_2 \geq \beta_2 \geq \cdots \geq \beta_{n-1} \geq \alpha_n.$$

Da questa catena di disuguaglianze, per $j = 1, \ldots, n-1$ abbiamo:

- $\alpha_j \geq \beta_j$ (dalla disuguaglianza sinistra)
- $\beta_j \geq \alpha_{j+1} = \alpha_{j+(n-(n-1))}$ (dalla disuguaglianza destra)

Quindi il caso base è verificato.

Passo induttivo: Supponiamo che il risultato sia vero per tutte le sottomatrici principali di dimensione $m + 1$ di una matrice hermitiana di dimensione n, e dimostriamolo per sottomatrici di dimensione m.

Sia B una sottomatrice principale $m \times m$ di A. Possiamo considerare una sottomatrice principale C di dimensione $(m+1) \times (m+1)$ che contiene B come sottomatrice principale. Più precisamente, possiamo scrivere:

$$C = \begin{bmatrix} B & d \\ d^* & c \end{bmatrix},$$

dove $d \in \mathbb{C}^m$ e $c \in \mathbb{R}$.

Siano $\gamma_1 \geq \cdots \geq \gamma_{m+1}$ gli autovalori di C. Per l'ipotesi induttiva (applicata a C come sottomatrice principale di A), abbiamo:

$$\alpha_j \geq \gamma_j \geq \alpha_{j+(n-(m+1))} \quad \text{per } j = 1, \ldots, m+1.$$

Ora, applicando il caso base a C e alla sua sottomatrice principale B, otteniamo l'interlacciamento:

$$\gamma_1 \geq \beta_1 \geq \gamma_2 \geq \beta_2 \geq \cdots \geq \beta_m \geq \gamma_{m+1}.$$

Combinando le due catene di disuguaglianze:

- Per la disuguaglianza sinistra: $\alpha_j \geq \gamma_j \geq \beta_j$
- Per la disuguaglianza destra: $\beta_j \geq \gamma_{j+1} \geq \alpha_{(j+1)+(n-(m+1))} = \alpha_{j+(n-m)}$

Quindi abbiamo dimostrato che:

$$\alpha_j \geq \beta_j \geq \alpha_{j+(n-m)} \quad \text{per } j = 1, \ldots, m.$$

□

Corollario Siano A, B, C matrici hermitiane con autovalori ordinati $\alpha_j, \beta_j, \gamma_j$ e tali che $A = B + C$. Allora vale

$$\beta_j + \gamma_{n-j+i} \leq \alpha_i \leq \beta_k + \gamma_{i-k+1},$$

per $1 \leq k \leq i \leq j \leq n$.

4.3 Decomposizione ai Valori Singolari

Introduciamo ora un'importante fattorizzazione per una matrice rettangolare generica A, che è chiamata *decomposizione ai valori singolari (SVD)*. L'idea dietro questa fattorizzazione è decomporre qualsiasi operatore lineare come il prodotto di tre matrici, qui riportate per il caso $m \geq n$:

$$A = U\Sigma V^*, \quad \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_n \\ & 0 & \end{bmatrix}$$

Le matrici U, V sono unitarie, Σ è reale e diagonale, e $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_n \geq 0$. Qui con "diagonale" intendiamo che Σ può essere rettangolare, ma ha elementi non nulli solo sulle entrate diagonali Σ_{ii}. Il caso riportato sopra è per $m \geq n$, ma la definizione analoga può essere data per $n \geq m$.

Geometricamente, possiamo interpretare questa fattorizzazione come la decomposizione dell'azione di A in un'isometria, seguita da un ridimensionamento (non negativo) degli assi, e poi ancora da un'isometria. La fattorizzazione può essere usata per fornire diverse soluzioni esplicite a problemi computazionali.
Dimostriamo ora che la decomposizione ai valori singolari esiste per qualsiasi matrice.

Teorema Sia $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ con $m \geq n$. Allora, esistono due matrici unitarie quadrate U, V di dimensione $m \times m$ e $n \times n$, rispettivamente, e una matrice $m \times n$ Σ con diagonale non negativa con elementi decrescenti e zero altrove, tali che $A = U\Sigma V^*$. Se A è reale, U e V possono essere scelte reali anch'esse.

Dimostrazione. Dimostriamo questo risultato per induzione su n; sia $n = 1$, e m arbitrario. Allora, A è un vettore colonna e possiamo porre

$$U = \begin{bmatrix} \frac{1}{\|A\|_2} A & B \end{bmatrix}, \qquad \Sigma = \begin{bmatrix} \|A\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad V = \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix}$$

dove $B \in \mathbb{C}^{m \times (m-1)}$ è un completamento di $\frac{1}{\|A\|_2} A$ a una base ortonormale di $\mathbb{C}^m$. Per verifica diretta, abbiamo $A = U\Sigma V^*$, e le tre matrici soddisfano tutti i requisiti per essere una SVD di A.

Assumiamo ora che il risultato sia valido per $n-1$ (e m arbitrario). Allora, per definizione di norma spettrale esiste un vettore v_1 di norma unitaria tale che

$$w = Av_1, \qquad \|w\|_2 = \|A\|_2.$$

Se $A = 0$ la SVD è ottenuta in modo banale, quindi possiamo assumere che $\|w\|_2 \neq 0$ e definire le matrici $\hat{U}, \hat{V}$ come segue

$$\hat{U} := \begin{bmatrix} \frac{w}{\|w\|_2} & w_2 & \cdots & w_m \end{bmatrix}, \quad \hat{V} := \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_n \end{bmatrix},$$

dove $w_2, \ldots, w_m$ e $v_2, \ldots, v_n$ sono scelti come qualsiasi completamento unitario della prima colonna. Affermiamo ora che la matrice $\hat{U}^* A \hat{V}$ ha la seguente forma:

$$\hat{U}^* A \hat{V} = \begin{bmatrix} \|A\|_2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & \hat{A} & \\ 0 & & & \end{bmatrix}.$$

Il fatto che l'elemento in posizione $(1,1)$ sia uguale a $\|A\|_2$ può essere verificato direttamente

$$(\hat{U}^* A \hat{V})_{11} = (\hat{U} e_1)^T A (\hat{V} e_1) = \frac{1}{\|w\|_2} w^* A v_1 = \frac{w^* w}{\|w\|_2} = \|w\|_2 = \|A\|_2. \tag{4.3}$$

Se qualsiasi altro elemento nella prima colonna o riga fosse diverso da zero, allora la matrice A avrebbe una colonna o riga con norma euclidea strettamente maggiore di $\|A\|_2$, che è una contraddizione. Quindi, la struttura di sparsità in (4.3) è una conseguenza immediata di $(\hat{U}^* A \hat{V})_{11} = \|A\|_2$.

Possiamo ora usare l'ipotesi induttiva per ottenere una SVD di $\hat{A} = \tilde{U} \tilde{\Sigma} \tilde{V}^*$ e scrivere la seguente decomposizione per A

$$A = \hat{U} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{U} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|A\|_2 & 0 \\ 0 & \tilde{\Sigma} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{V}^* \end{bmatrix} \hat{V}^*.$$

Chiamando le matrici unitarie date dal prodotto delle prime due matrici e delle ultime due rispettivamente U e V, e ponendo $\sigma_1 := \|A\|_2$ e $\sigma_i := \tilde{\sigma}_{i-1}$ per $i > 1$, questa è una SVD della matrice A. L'unico fatto rimanente da verificare è che i valori singolari sono in ordine decrescente, cioè $\tilde{\sigma}_1 \leq \|A\|_2$. A questo scopo, possiamo notare che per una matrice diagonale, la norma è il massimo dei moduli degli elementi diagonali, il che a sua volta implica $\max\{\|A\|_2, \tilde{\sigma}_1\} = \|A\|_2$ e quindi $\tilde{\sigma}_1 \leq \|A\|_2$. □

Una SVD di A non è necessariamente unica. Osserviamo che, data qualsiasi matrice diagonale unitaria D, possiamo scalare diagonalmente U e V per ottenere $A = U\Sigma V^* = UD\Sigma D^* V^*$. Poiché $UD \neq U$ (a meno che $D = I$), abbiamo un numero infinito di diverse decomposizioni ai valori singolari.

4.3.1 Proprietà della SVD

Presentiamo ora alcune proprietà essenziali della decomposizione ai valori singolari.

Lemma Sia $A = U\Sigma V^*$ una SVD di $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ con $m \geq n$. Allora,

(i) La matrice simmetrica definita positiva A^*A è diagonalizzata da V: $V^*A^*AV = \Sigma^*\Sigma = D$, e ha σ_i^2 come autovalori per $i = 1, \ldots, n$.

(ii) La matrice simmetrica definita positiva AA^* è diagonalizzata da U: $U^*AA^*U = \Sigma\Sigma^* = D$, e ha $m - n$ autovalori zero, e gli altri uguali a σ_i^2.

(iii) La seguente matrice simmetrica M ha $\pm\sigma_i$ e $m - n$ zeri come autovalori:

$$M = \begin{bmatrix} 0 & A^* \\ A & 0 \end{bmatrix} \implies \Lambda(M) = \{\pm\sigma_i \mid \sigma_i \text{ valore singolare di } A\}.$$

Dimostrazione. La dimostrazione di (i) e (ii) è ottenuta mediante un calcolo diretto. Per quanto riguarda M, facciamo la seguente osservazione

$$\begin{bmatrix} V^* & 0 \\ 0 & U^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & A^* \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V & 0 \\ 0 & U \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & V^*A^*U \\ U^*AV & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \Sigma^* \\ \Sigma & 0 \end{bmatrix} =: M_\Sigma.$$

Poiché M e M_Σ sono simili, hanno gli stessi autovalori, dunque mostriamo che gli autovalori di M_Σ sono $\pm\sigma_i$ e gli $m - n$ zeri. Consideriamo la permutazione π di $\{1, \ldots, m + n\}$ tale che

$$\pi(i) = \begin{cases} \frac{i+1}{2} & i \equiv 1 \pmod 2 \text{ e } i \leq 2n \\ \frac{i}{2} + n & i \equiv 0 \pmod 2 \text{ e } i \leq 2n \\ i & 2n < i \leq m + n \end{cases}.$$

Se Π è la matrice di permutazione associata a π, calcolando $\Pi^* M_\Sigma \Pi$ si ottiene una matrice a blocchi diagonali della seguente forma:

$$\Pi^* M_\Sigma \Pi = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \Sigma_n & \\ & & & 0_{m-n} \end{bmatrix}, \quad \Sigma_i := \begin{bmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{bmatrix}.$$

Gli autovalori delle matrici 2×2 Σ_i sono esattamente $\pm\sigma_i$, quindi si ha la tesi. □

Osservazione Dalla definizione della SVD deriva immediatamente l'invarianza dei valori singolari sotto trasformazioni unitarie: $\sigma_i(A) = \sigma_i(QA) = \sigma_i(AZ)$ per qualsiasi scelta di Q, Z unitarie o ortogonali nel caso reale.

Lemma Sia A una matrice $m \times n$, con $m \geq n$ e SVD $A = U\Sigma V^*$. Allora, valgono le seguenti identità

$$\|A\|_2 = \sigma_1(A), \quad \|A\|_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \ldots + \sigma_n^2}.$$

Dimostrazione. La tesi segue notando che, essendo la norma spettrale e di Frobenius invarianti sotto trasformazioni unitarie, abbiamo

$$\|A\|_{2/F} = \|U\Sigma V^*\|_{2/F} = \|\Sigma\|_{2/F},$$

e per la definizione delle norme spettrale e di Frobenius. □

Esercizio Si mostri che, se una norma matriciale $\|\cdot\|$ è invariante sotto trasformazioni unitarie, allora può essere scritta nella forma $\|A\| = f(\sigma_1(A), \ldots, \sigma_n(A))$ per qualche f.

Soluzione. Sia $\|\cdot\|$ una norma matriciale invariante sotto trasformazioni unitarie, cioè tale che $\|QA\| = \|A\|$ e $\|AZ\| = \|A\|$ per tutte le matrici unitarie Q e Z di dimensioni appropriate.

Data qualsiasi matrice $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, consideriamo la sua SVD: $A = U\Sigma V^*$, dove U e V sono unitarie e Σ è la matrice dei valori singolari.
Per l'invarianza della norma sotto trasformazioni unitarie, abbiamo:

$$\|A\| = \|U\Sigma V^*\| = \|\Sigma\|.$$

Ora, consideriamo due permutazioni qualsiasi Π e Π' delle righe e colonne di Σ. Poiché le matrici di permutazione sono unitarie, abbiamo

$$\|\Pi\Sigma\Pi'\| = \|\Sigma\|.$$

Questo implica che la norma dipende solo dai valori singolari $\sigma_1, \ldots, \sigma_n$, ma non dal loro ordine o dalla struttura esatta di Σ. In altre parole, esiste una funzione $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ tale che

$$\|A\| = f(\sigma_1(A), \ldots, \sigma_n(A)),$$

e questa funzione deve essere simmetrica nelle sue variabili (invariante per permutazioni degli argomenti) a causa dell'invarianza sotto permutazioni spiegata sopra. □

4.3.2 Il teorema di Eckart-Young-Mirsky

La decomposizione ai valori singolari fornisce una risposta esplicita e costruttiva al problema dell'approssimazione di rango basso di trovare B di rango al più k che minimizzi $\|A - B\|$, rispetto alla norma spettrale o di Frobenius.

Questo ha applicazioni nella compressione dei dati (una matrice di rango basso è molto più economica da memorizzare di una piena), nell'analisi dei dati e molto altro.

Teorema [Eckart-Young-Mirsky] Sia $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, e $A = U\Sigma V^*$ la sua SVD. Sia A_k definita come segue

$$A_k := U\Sigma_k V^*, \quad \Sigma_k := \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_k & \end{bmatrix}$$

dove Σ_k è uguale a Σ con $\sigma_{k+1}, \ldots, \sigma_{\min\{m,n\}}$ posti a zero. Allora, valgono le seguenti:

(i) La matrice A_k soddisfa $\sigma_{k+1} = \|A - A_k\|_2 \leq \|A - B\|_2$ per qualsiasi matrice B con rango minore o uguale a k.

(ii) La matrice A_k soddisfa

$$\sqrt{\sigma_{k+1}^2 + \cdots + \sigma_{\min\{m,n\}}^2} = \|A - A_k\|_F \leq \|A - B\|_F$$

per qualsiasi matrice B con rango minore o uguale a k.

Per dimostrare questo risultato, procediamo come segue

- Dimostriamo l'affermazione (i) per $\|\cdot\|_2$;
- la usiamo per mostrare un Lemma ausiliario sui valori singolari di $A_1 + A_2$, la somma di due matrici arbitrarie;
- usiamo il Lemma per dimostrare il risultato per (ii).

Dimostrazione del Teorema per $\|\cdot\|_2$. Prima verifichiamo che $\|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$. Per semplicità, assumiamo che $m \geq n$, l'altro caso può essere ottenuto trasponendo A. Usando la SVD, otteniamo

$$A - A_k = U(\Sigma - \Sigma_k)V^* = U \begin{bmatrix} 0 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 0 & & & \\ & & & \sigma_{k+1} & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \sigma_n \end{bmatrix} V^*.$$

Prendendo le norme si ottiene $\|A - A_k\|_2 = \|\Sigma - \Sigma_k\|_2 = \sigma_{k+1}$, dove abbiamo usato l'invarianza della norma spettrale sotto trasformazioni unitarie, e che la norma 2 di una matrice diagonale è il massimo dei moduli degli elementi diagonali.

Per concludere dobbiamo verificare che, per qualsiasi matrice B di rango al più k, $\|A-B\|_2 \geq \sigma_{k+1}$. Scegliamo un vettore v di norma unitaria dal sottospazio $\mathrm{Ker}(B) \cap \mathrm{colspan}\{v_1, \ldots, v_{k+1}\}$ dove $v_j := Ve_j$ sono le colonne di V. Poiché $\mathrm{Ker}(B)$ ha dimensione almeno $n-k$, l'intersezione dei sottospazi ha dimensione almeno 1. Possiamo scrivere tale vettore v in coordinate rispetto alle colonne di V:

$$v = \sum_{j=1}^{k+1} \alpha_j v_j = V\alpha, \qquad \alpha := \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{k+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad \sum_{j=1}^{k+1} |\alpha_j|^2 = 1.$$

Questo produce un'espressione esplicita per $(A-B)v$, della forma

$$(A-B)v = Av = U\Sigma V^* v = U\Sigma\alpha = U \begin{bmatrix} \sigma_1\alpha_1 \\ \vdots \\ \sigma_{k+1}\alpha_{k+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

La norma euclidea di $(A-B)v$ può essere limitata inferiormente come segue

$$\|(A-B)v\|_2^2 = \sum_{j=1}^{k+1} \sigma_j^2 |\alpha_j|^2 \geq \sigma_{k+1}^2 \sum_{j=1}^{k+1} |\alpha_j|^2 = \sigma_{k+1}^2.$$

Poiché $\|A-B\|_2 \geq \|(A-B)v\|_2$ per qualsiasi $\|v\|_2 = 1$, questo prova l'affermazione. □

lemma [Weyl] Siano A_1, A_2 due matrici di dimensioni compatibili, e $A = A_1 + A_2$. Allora, per qualsiasi $i, j \geq 0$,

$$\sigma_{i+j+1}(A) \leq \sigma_{i+1}(A_1) + \sigma_{j+1}(A_2),$$

dove poniamo $\sigma_k(A) = 0$ per qualsiasi k maggiore della dimensione più piccola di A.

Dimostrazione del Lemma di Weyl. Grazie al Teorema sappiamo che esistono due matrici $A_{i,1}$ e $A_{j,2}$ di rango rispettivamente al più i e j , che rappresentano l'SVD troncata all'ordine i per A_1 e all'ordine j per A_2 e tali che

$$\|A_1 - A_{i,1}\|_2 = \sigma_{i+1}(A_1), \qquad \|A_2 - A_{j,2}\|_2 = \sigma_{j+1}(A_2).$$

Se poniamo $B := A_{i,1} + A_{j,2}$ abbiamo che $\mathrm{rank}(B) \leq i + j$, e quindi, ancora in virtù del Teorema,

$$\begin{aligned} \sigma_{i+j+1}(A) &\leq \|A - B\|_2 = \|A_1 - A_{i,1} + A_2 - A_{j,2}\|_2 \\ &\leq \|A_1 - A_{i,1}\|_2 + \|A_2 - A_{j,2}\|_2 = \sigma_{i+1}(A_1) + \sigma_{j+1}(A_2). \end{aligned}$$

□

Dimostrazione del Teorema per $\|\cdot\|_F$. Per dimostrare la seconda parte del teorema iniziamo verificando $\|A - A_k\|_F^2 = \sigma_{k+1}^2 + \ldots + \sigma_n^2$. Questo segue dallo stesso argomento usato per la norma spettrale, ricordando che il quadrato della norma di Frobenius è la somma dei quadrati degli elementi in una matrice.

Prendiamo ora B come qualsiasi matrice di rango al più k, e affermiamo che

$$\|A - B\|_F^2 \geq \|A - A_k\|_F^2 = \sigma_{k+1}^2 + \ldots + \sigma_n^2.$$

Notiamo che possiamo scrivere

$$\|A - B\|_F^2 = \sum_{l=1}^{n} \sigma_l(A - B)^2$$

Decomponendo $A = (A - B) + B$ e usando il Lemma di Weyl con $i = l - 1$ e $j = k$ otteniamo

$$\sigma_{l+k}^2(A) \leq \sigma_l^2(A - B) + 2\sigma_l(A - B)\sigma_{k+1}(B) + \sigma_{k+1}^2(B) = \sigma_l^2(A - B).$$

Usando questa disuguaglianza nell'identità precedente si ottiene

$$\|A - B\|_F^2 = \sum_{l=1}^{n} \sigma_l^2(A - B) \geq \sum_{l=1}^{n-k} \sigma_{l+k}^2(A).$$

□

4.3.3 Calcolo della SVD

Finora, non abbiamo discusso come una SVD di una matrice generica A dovrebbe essere calcolata in pratica, abbiamo solo dimostrato la sua esistenza e unicità.

Gli algoritmi per la SVD possono essere ottenuti cercando di riformulare il calcolo a un problema agli autovalori simmetrico. Facciamo ora l'ipotesi che $m = n$, anche se non è difficile adattare tutti i risultati che vedremo con un appropriato riempimento di zeri.

Il primo passo è trovare matrici ortogonali Q, Z tali che

$$QAZ^* = B = \begin{bmatrix} \times & \times & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \times \\ & & & \times \end{bmatrix}$$

dove B è una matrice bidiagonale superiore.
Questo è facilmente ottenuto adattando la costruzione già vista per la forma di Hessenberg superiore, sfruttando i gradi di libertà avendo due diverse matrici unitarie Q, Z, invece di imporre $Q = Z$. Il costo di questa riduzione è $\mathcal{O}(n^3)$ flop per una matrice $n \times n$.

Calcolare la SVD di B è equivalente a calcolare la SVD di A. Infatti, se $B = U\Sigma V^*$ allora possiamo recuperare una SVD di A mediante:

$$A = QBZ^* = QU\Sigma V^* Z^* = (QU)\Sigma(ZV)^*.$$

Grazie a questa osservazione, assumeremo ora che A sia bidiagonale dall'inizio.
Ricordiamo che la SVD è collegata con i problemi agli autovalori per AA^* e A^*A, che sono entrambe matrici tridiagonali. Quindi, possiamo usare l'iterazione QR per trovare una delle

$$U^*AA^*U = \Sigma^2, \qquad V^*A^*AV = \Sigma^2.$$

Ognuna di queste scelte produce una sequenza di matrici tridiagonali T_ℓ che converge a Σ^2. Tuttavia, calcolare il quadrato dei valori singolari è inconveniente dal punto di vista numerico, perché renderà i piccoli valori singolari ancora più piccoli, il che amplifica il loro errore relativo. Pertanto, se dopo ℓ passi di iterazione QR abbiamo $Q_\ell^*AA^*Q_\ell = T_\ell$, selezioniamo una matrice unitaria Z_ℓ tale che

$$Q_\ell^*AZ_\ell Z_\ell^*A^*Q_\ell = T_\ell,$$

imponendo che $Q_\ell^*AZ_\ell$ sia bidiagonale superiore. Tale Z_ℓ può essere facilmente calcolata direttamente nella procedura, considerando $B_\ell := Q_\ell^*AZ_\ell$ invece di T_ℓ. È poi facile verificare che dobbiamo avere $Q_\ell^*AZ_\ell \to \Sigma$, e quindi $Q_\ell \to U$ e $Z_\ell \to V$. Questa idea è equivalente ad approssimare i fattori della fattorizzazione di Cholesky di $T_\ell = LL^T$ (L qui è triangolare inferiore o superiore), che esiste per tutte le matrici simmetriche definite positive, e permette di evitare il problema dell'elevamento al quadrato dei valori singolari.

Essenzialmente tutti gli algoritmi per problemi agli autovalori simmetrici (e non solo l'iterazione QR tridiagonale) possono essere adattati per calcolare la SVD, ma noi non li discutiamo ulteriormente.

5 PageRank

Quando utilizziamo un motore di ricerca tipo Google per avere informazioni su un certo argomento ci viene fornita in risposta una lista numerosa di pagine, generalmente migliaia o centinaia di migliaia, che contengono le parole chiave che abbiamo richiesto. Queste pagine vengono ordinate in base alla loro importanza in modo che nei primi posti troviamo quelle che sono certamente più significative e in fondo alla lista si trovano quelle pagine che non hanno una grande rilevanza. In questo modo il motore di ricerca ci permette di evitare di passare in rassegna tutte le migliaia di pagine, impresa che sarebbe umanamente impossibile.

Ma come viene stabilito se una pagina è più importante di un'altra? Con quale criterio vengono ordinate le pagine senza dover entrare dentro il loro contenuto?

Nei motori di ricerca di molti anni fa l'importanza veniva calcolata in base al numero di volte con cui la parola cercata compariva nei documenti presenti nella pagina. Per cui in testa alla lista venivano messi i documenti che contenevano il numero più alto di occorrenze della parola cercata e in fondo alla lista i documenti che contenevano una volta sola la parola chiave. Questo criterio sembrava rispondere pienamente alle esigenze di allora. Questo metodo si rivelò però inefficiente e vulnerabile. Sono stati Sergey Brin e Larry Page, fondatori di Google, a rivoluzionare il modo di attribuire un rango alle pagine del Web indipendentemente dal loro contenuto. La loro idea si basa su un modello matematico particolare e utilizza la teoria di Perron-Frobenius delle matrici non negative. Questa teoria risale ai primi del 1900 quando il mondo di internet non veniva nemmeno immaginato dai più brillanti scrittori di fantascienza. Naturalmente sia Oskar Perron che Georg Frobenius, matematici tedeschi, quando hanno inventato il teorema che va sotto il loro nome non pensavano lontanamente alle applicazioni che esso avrebbe avuto in futuro. La consistenza del modello e l'esistenza e unicità della soluzione è infatti garantita dal teorema di Perron-Frobenius.

Il problema del calcolo della soluzione è un aspetto non trascurabile della questione. La soluzione infatti può essere vista come l'autovettore dominante di una matrice di N righe e di N colonne dove N è uguale al numero di pagine esistenti sul Web. Attualmente il valore di N è di circa 10 miliardi. Se usassimo i metodi standard per risolvere questo problema, pur usando i più veloci computer disponibili attualmente, dovremmo aspettare milioni di anni prima di conoscere la soluzione. Il metodo di calcolo dell'importanza delle pagine web che viene attualmente usato si basa su un adattamento del metodo delle potenze che viene chiamato algoritmo di PageRank.

Assumiamo di avere N pagine in rete e numeriamole con gli interi da 1 a N. Per descrivere il World-Wide Web è utile usare un grafo orientato in cui i nodi rappresentano le pagine presenti sul Web e gli archi orientati descrivono le connessioni di tali pagine. Più precisamente un arco collega il nodo i col nodo j se la pagina i contiene un link alla pagina j.

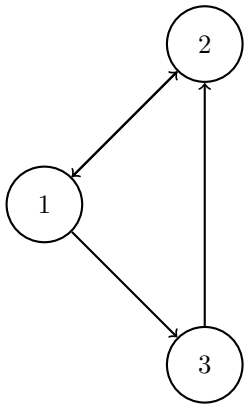


Figura 1: Grafo associato ad un Web costituito da 3 pagine

Ad esempio se il nostro WWW fosse fatto da 3 pagine in cui la pagina 1 punta alla 2 e alla 3, la pagina 2 punta alla 1 e la 3 punta alla 2, allora il grafo sarebbe quello dato in figura 1.

Un grafo orientato può essere univocamente descritto da una matrice di *adiacenza* $H = (h_{i,j})$ di dimensione $N \times N$ in cui $h_{i,j} = 1$ se c'è un arco orientato che collega il nodo i col nodo j (se la pagina i contiene un link alla pagina j) mentre $h_{i,j} = 0$ altrimenti.

La matrice di adiacenza associata al grafo di sopra è

$$H = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

Alcuni possibili criteri per definire l'importanza di una pagina:

1. una pagina è più importante se ha un numero maggiore di link ad altre pagine;
2. una pagina è importante se riceve un numero maggiore di link da altre pagine.

Si vede subito che il criterio 1 non è valido. Se così fosse, basterebbe riempire la propria pagina di un numero arbitrariamente grande di link ad altre pagine per renderla più importante.

Anche il secondo criterio, sebbene più sensato, non è immune da truffa. Non è infatti complicato costruire un numero arbitrario di pagine fittizie che contengono un link alla propria pagina per poterla rendere più importante. Inoltre in un modello sensato non dovrebbe dare troppa importanza essere puntati da tante pagine di livello trascurabile mentre sarebbe più rilevante essere puntati da (poche) pagine di importanza elevata.

Un criterio più corretto che cattura queste ultime considerazioni è il seguente:
Una pagina i che punta altre pagine, ad esempio $j_1, j_2, \ldots, j_k$, distribuisce la sua importanza in parti uguali alle pagine $j_1, j_2, \ldots, j_k$, e quindi dà $1/k$ della sua importanza alle pagine che punta.
In questo modello, se denotiamo con $d_i = \sum_{j=1}^{N} h_{ij}$, supponendo $d_i \neq 0$ per $i = 1, \ldots, N$, e se indichiamo con w_j l'importanza della pagina j, vale allora

$$w_j = \sum_{i=1}^{N} w_i \frac{h_{ij}}{d_i}, \quad j = 1, \ldots, N.$$

nel caso dell'esempio si ha

$$w_1 = w_2 \qquad w_2 = \frac{1}{2} w_1 + w_3 \qquad w_3 = \frac{1}{2} w_1$$

Si osserva che questo non è altro che un problema di autovalori e autovettori formulato nel seguente modo. Posto $e = (1, 1, \ldots, 1)^T$, $d = (d_i) = He$, e $D = \mathrm{diag}(d)$ si ha

$$w^T M = w^T, \quad M = D^{-1} H$$

dove $w^T = (w_1, \ldots, w_N)$.

5.1 Problemi nella formulazione

Elenchiamo alcuni problemi che si incontrano in questa formulazione.

1. Cosa succede se $d_i = 0$ per qualche i? Questo succede nei casi in cui ci sono pagine che non puntano a nulla. Il problema non è insolito, infatti ci possono essere pagine che non hanno link a nulla. I nodi che hanno questa caratteristica sono chiamati *dangling nodes*.
2. Esiste sempre una soluzione?
3. La soluzione è unica (a meno di multipli scalari)?
4. La soluzione è positiva?
5. Come si può calcolare?

Si osserva che i dangling nodes sono individuati per il fatto che essi corrispondono alle righe di H con tutti gli elementi nulli. Per poter trattare il caso in cui esistano dei dangling nodes si introduce una leggera modifica al modello. Più precisamente si sostituisce la matrice iniziale di adiacenza H con una nuova matrice $\widehat{H}$ che coincide con H dappertutto eccetto che nelle righe tutte nulle in cui gli elementi di $\widehat{H}$ vengono posti tutti uguali a 1. Dal punto di vista modellistico è come assumere che un documento che nel modello originale non cita nessun altro documento nel web, nel nuovo modello modificato va a citare tutti i documenti presenti. Quindi distribuisce $1/N$ della sua importanza uniformemente a tutti.

La matrice $\hat{H}$ viene quindi scritta come

$$\hat{H} = H + ue^T \tag{2}$$

dove u è il vettore con componente 1 in corrispondenza dei dangling nodes e con componente zero altrove.

In seguito denoteremo con M la matrice

$$M = \hat{D}^{-1}\hat{H}, \quad \hat{D} = \mathrm{diag}(\hat{d}), \quad \hat{d} = \hat{H}e. \tag{3}$$

Possiamo dare subito risposta affermativa alla domanda 2 osservando che $Me = e$ e quindi 1 è autovalore, quindi w è un qualsiasi autovettore sinistro corrispondente all'autovalore 1.

Per rispondere alle altre domande dobbiamo riportare alcuni risultati classici della teoria di Perron-Frobenius delle matrici non negative.

5.2 Teorema di Perron-Frobenius

Riportiamo il teorema di Perron-Frobenius:

Teorema (Perron-Frobenius) Sia A una matrice $n \times n$ di elementi non negativi. Allora esiste un autovalore λ di A tale che $\lambda = \rho(A) \geq 0$. Esistono un autovettore destro x e sinistro y corrispondenti a λ con componenti non negative. Se inoltre A è irriducibile allora λ è semplice e gli autovettori x e y hanno componenti positive. Se infine A ha elementi positivi allora λ è l'unico autovalore di modulo massimo.

Si osserva che in base al teorema di Perron-Frobenius ogni soluzione ha sempre componenti non negative come è giusto che sia. Però la sola condizione di nonnegatività non garantisce l'unicità della soluzione (a meno di multipli scalari). Mentre con la condizione di irriducibilità la soluzione è unica.

È facile costruire reti di pagine interconnesse che hanno una matrice di adiacenza riducibile. Quindi il modello così come è stato introdotto non è ancora adeguato.

Si osserva ancora che nel caso di matrici irriducibili e non negative possono esistere altri autovalori che hanno lo stesso modulo del raggio spettrale. Questo crea dei seri problemi dal punto di vista algoritmico.

Esempio: La matrice

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

ha autovalori $1, i, -1, -i$.

Il teorema di Perron-Frobenius esclude però che esistano blocchi di Jordan, relativi al raggio spettrale, di dimensione maggiore di 1.

5.3 Modello di PageRank modificato

Per far fronte ai problemi discussi, il modello del PageRank descritto nella precedente sezione viene così modificato. La matrice M viene sostituita con la matrice

$$A = \gamma M + (1-\gamma)ev^T, \quad 0 < \gamma < 1, \tag{4}$$

dove v è un arbitrario vettore a componenti non negative tale che $v^T e = 1$ e γ è un parametro, di solito si sceglie $\gamma = 0.85$. In questo modo la matrice A ha elementi positivi. La soluzione quindi esiste, è unica (a meno di multipli) e $\rho(A)$ è l'unico autovalore di modulo 1.

Dal punto di vista modellistico è come se l'importanza di una pagina fosse ripartita in due parti: una frazione γ viene distribuita in base ai link come nel modello originale, la frazione complementare $1-\gamma$ viene distribuita a tutte le altre pagine secondo un criterio dato dal vettore v. Se ad esempio $v = (1/n)e$ allora la distribuzione è fatta in modo uniforme a tutte le pagine del Web.

6 Problemi ai minimi quadrati

Ogni volta che una matrice A è quadrata e invertibile, la risoluzione di un sistema lineare $Ax = b$ può essere affrontata con strumenti standard come la decomposizione LU o la fattorizzazione QR. È noto che il numero di condizionamento di questo problema è $\|A\|\|A^{-1}\|$, e per la norma spettrale può essere collegato agli autovalori da $\sigma_1(A)/\sigma_n(A)$.

Ci concentriamo ora sul problema più generale di calcolare la soluzione di $Ax = b$ quando:

- A è rettangolare, con più righe che colonne (sistema *sovradeterminato*)
- A è rettangolare, con più colonne che righe (sistema *sottodeterminato*)

Entrambi i casi possono essere efficacemente analizzati e risolti utilizzando la SVD. Si noti che possono essere notevolmente diversi: nel primo caso potrebbe non esistere una soluzione, mentre nel secondo potremmo trovarci con molte soluzioni diverse e abbiamo bisogno di un modo per selezionare quella "giusta".

In tutti i casi sopra menzionati, in cui la soluzione del sistema lineare potrebbe non esistere, ha senso trasformare il problema nella ricerca di un minimo per

$$\Phi(x) := \|Ax - b\|_2^2.$$

Quando ci saranno più minimizzatori, aggiungeremo dei vincoli per selezionare quelli desiderati (ad esempio, scegliendo quello che minimizza anche $\|x\|_2$)

6.1 Equazioni normali per problemi ai minimi quadrati sovradeterminati e di rango pieno

Facciamo ora l'ipotesi che A sia $m \times n$ con $m \geq n$, e di rango pieno. Riscriviamo $\Phi(x)$ in un modo che sia più adatto per calcolarne le derivate. Nel caso reale abbiamo

$$\Phi(x) = (Ax - b)^T(Ax - b)$$

Sviluppiamo $\Phi(x + \delta x)$ con δx perturbazione:

$$\Phi(x + \delta x) = [A(x + \delta x) - b]^T[A(x + \delta x) - b] = (Ax - b + A\delta x)^T(Ax - b + A\delta x)$$

Espandendo il prodotto:

$$(Ax - b)^T(Ax - b) + (Ax - b)^T A\delta x + (A\delta x)^T(Ax - b) + (A\delta x)^T A\delta x$$

Osserviamo che il secondo e terzo termine sono uguali poiché:

$$(A\delta x)^T(Ax - b) = [(A\delta x)^T(Ax - b)]^T = (Ax - b)^T A\delta x$$

Quindi

$$\Phi(x + \delta x) = \Phi(x) + 2(Ax - b)^T A\delta x + \|A\delta x\|_2^2$$

Dallo sviluppo di Taylor

$$\Phi(x + \delta x) = \Phi(x) + \nabla\Phi(x)^T\delta x + o(\|\delta x\|)$$

Confrontando i termini lineari

$$2(Ax - b)^T A\delta x = [2A^T(Ax - b)]^T\delta x$$

Si identifica

$$\nabla\Phi(x) = 2A^T(Ax - b) = 2(A^T Ax - A^T b)$$

Il termine quadratico

$$\|A\delta x\|_2^2 = \delta x^T A^T A\delta x$$

si conclude che l'hessiano è

$$\nabla^2\Phi(x) = 2A^T A$$

Dunque il minimo si trova risolvendo

$$\nabla\Phi(x) = 0 \iff A^T Ax = A^T b$$

Se A è di rango pieno, allora $A^T A$ è definita positiva e quindi $\Phi(x)$ è convessa, e ha un unico minimo. I sistemi lineari con $A^T A$ che emergono da queste considerazioni prendono il nome di *equazioni normali*.

Non abbiamo ancora definito precisamente quale dovrebbe essere il numero di condizionamento di un problema ai minimi quadrati, ma vale la pena notare che il numero di condizionamento di A^*A è dato da $\sigma_1^2(A)/\sigma_n^2(A)$. Infatti, usando $A = U\Sigma V^*$

$$\kappa_2(A^T A) = \|A^T A\|_2\|(A^T A)^{-1}\|_2 = \|V\Sigma^*\Sigma V^*\|_2\|V(\Sigma^*\Sigma)^{-1}V^T\|_2 = \frac{\sigma_1^2(A)}{\sigma_n^2(A)}.$$

Se applichiamo le equazioni normali nel caso particolare di una matrice quadrata e invertibile A, notiamo già che stiamo risolvendo un problema numericamente più difficile di quanto dovrebbe essere: ci aspetteremmo un numero di condizionamento di $\sigma_1(A)/\sigma_n(A)$, e invece ci troviamo di fronte al suo quadrato. Questa situazione può essere evitata facendo affidamento su diversi metodi risolutivi.

6.1.1 Risoluzione di problemi ai minimi quadrati mediante QR e SVD

Consideriamo un problema ai minimi quadrati sovradeterminato e di rango pieno della forma $\min \|Ax - b\|_2^2$. Se b non appartiene allo spazio colonna di A, non possiamo sperare di ottenere una soluzione esatta $Ax = b$. Per descrivere le possibili situazioni, introduciamo la definizione di angolo tra un vettore e un sottospazio.

Definizione Sia $\mathcal{U} \subseteq \mathbb{R}^n$ un sottospazio, e v un qualsiasi vettore non nullo in $\mathbb{R}^n$. Allora, il coseno e il seno dell'*angolo* $\theta(\mathcal{U}, v)$ tra v e $\mathcal{U}$ sono definiti da

$$\cos\theta(\mathcal{U}, v) := \frac{\|\Pi_{\mathcal{U}} v\|_2}{\|v\|_2}, \qquad \sin\theta(\mathcal{U}, v) := \frac{\|\Pi_{\mathcal{U}^\perp} v\|_2}{\|v\|_2}.$$

dove $\Pi_{\mathcal{U}}$ e $\Pi_{\mathcal{U}^\perp}$ denotano le proiezioni ortogonali su $\mathcal{U}$ e $\mathcal{U}^\perp$, rispettivamente. Con un leggero abuso di definizione, scriviamo $\theta(A, v)$ per denotare $\theta(\text{colspan}(A), v)$.

Osservazione questa definizione coincide con quella per il coseno dell'angolo tra due vettori v e w considerando $\mathcal{U} = \text{span}(w)$, e questo rende la notazione $\theta(w, v)$ definita sopra compatibile con la definizione precedente.

Lemma Sia $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ con $m \geq n$ una matrice di rango pieno, e $A = QR$ la sua fattorizzazione QR economy-size. Allora, la soluzione del problema ai minimi quadrati $\min_x \|Ax - b\|_2^2$ è data da $x = R^{-1}Q^T b$, e il residuo è uguale a $\|(I - QQ^T)b\|_2$.

Dimostrazione. Se $A = QR$ è una fattorizzazione QR economy-size di A, possiamo scrivere

$$Ax - b = QRx - b = Q(Rx - Q^T b) - (I - QQ^T)b,$$

dove abbiamo usato $I = QQ^T + (I - QQ^T)$. Prendendo le norme otteniamo

$$\|Ax - b\|_2^2 = \|Rx - Q^T b\|_2^2 + \|(I - QQ^T)b\|_2^2,$$

dove abbiamo sfruttato l'identità $\|v+w\|_2^2 = \|v\|_2^2 + \|w\|_2^2$ quando $v \perp w$. Chiaramente, il termine a destra è indipendente da x, e quindi il residuo del sistema ai minimi quadrati soddisfa $\|Ax - b\|_2 \geq \|(I - QQ^T)b\|_2$ indipendentemente dalla scelta di x. D'altra parte, possiamo rendere nulla la norma del primo termine scegliendo $x = R^{-1}Q^T b$, poiché R è invertibile grazie all'ipotesi di rango pieno per A. □

Questo lemma fornisce una caratterizzazione teorica della soluzione e del residuo, ma fornisce anche un algoritmo per calcolarla. Possiamo notare che questo algoritmo richiede di risolvere un sistema lineare con R, mentre per le equazioni normali dovevamo risolverne uno con $A^T A$. Se $A = U\Sigma V^T$, possiamo scrivere una decomposizione ai valori singolari per R come segue:

$$R = Q^T A = Q^T U \Sigma V^T \implies \frac{\sigma_1(R)}{\sigma_n(R)} = \frac{\sigma_1(A)}{\sigma_n(A)}.$$

In particolare, il numero di condizionamento del sistema lineare in esame è la radice quadrata di quello di $A^T A$. Potremmo chiederci se questo sia veramente il numero di condizionamento del problema sottostante, o se possiamo ancora migliorare la situazione. Il prossimo lemma mostra che ciò che stiamo facendo è già ottimale.

Lemma Sia $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ una matrice di rango pieno, e $b, \delta b \in \mathbb{R}^m$. Allora, se x è la soluzione del problema ai minimi quadrati $\min_x \|Ax-b\|_2$ e $x+\delta x$ quella di $\min_x \|A(x+\delta x)-b-\delta b\|_2$, abbiamo

$$\frac{\|\delta x\|_2}{\|x\|_2} \leq \frac{\sigma_1(A)}{\sigma_n(A)} \frac{\|\delta b\|_2}{\|b\|_2} \frac{1}{\cos(\theta(A,b))}.$$

Dimostrazione. Grazie al Lemma precedente possiamo scrivere esplicitamente le soluzioni del problema ai minimi quadrati usando la fattorizzazione QR di $A = QR$:

$$x = R^{-1}Q^T b \quad x + \delta x = R^{-1}Q^T(b + \delta b).$$

Sottraendo questi due termini si ottiene $\delta x = R^{-1}Q^T\delta b$, che fornisce la limitazione superiore

$$\|\delta x\|_2 \leq \|R^{-1}\|_2 \|Q^T\delta b\|_2 \leq \frac{1}{\sigma_n(A)}\|\delta b\|_2,$$

dove abbiamo usato $\sigma_n(A) = \sigma_n(R)$ e il fatto che per una matrice quadrata $n\times n$ M vale $\|M^{-1}\|_2 = 1/\sigma_n(M)$. Possiamo usare ancora una volta la decomposizione ai valori singolari di R per scrivere una limitazione inferiore per $\|x\|_2$ come segue:

$$\|x\|_2 \geq \sigma_n(R^{-1})\|Q^T b\|_2 = \frac{1}{\sigma_1(R)}\|b\|_2 \cos(\theta(A,b)).$$

Combinando le due disuguaglianze si ottiene la tesi. □

La fattorizzazione QR è un metodo efficace per risolvere il problema ai minimi quadrati. Ricordiamo che la fattorizzazione QR di A può essere calcolata attraverso una sequenza di riflettori di Householder, ottenendo una sequenza di riduzioni parziali

$$P_k \dots P_1 A = \begin{bmatrix} R_k & X_k \\ & Y_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times & \dots & \times & \times & \dots & \times \\ & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & \times & \vdots & & \vdots \\ & & & \times & \dots & \times \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & \times & \dots & \times \end{bmatrix},$$

dove $R_k \in \mathbb{R}^{k\times k}, X_k \in \mathbb{R}^{k\times(n-k)}, Y_k \in \mathbb{R}^{(m-k)\times(n-k)}$. L'applicazione di ciascuno di questi riflettori P_j a A costa $\mathcal{O}(m(n-k))$ flops. Quindi, il costo per trovare la matrice R nella fattorizzazione QR è di $\mathcal{O}(mn^2)$ flops, poiché sono richiesti n riflettori. La matrice Q alta e stretta può essere calcolata allo stesso costo, ma questo non è strettamente necessario per risolvere un problema ai minimi quadrati.

Infatti, poiché $Q^* = \begin{bmatrix} I_n & 0 \end{bmatrix} P_n \dots P_1$, abbiamo solo bisogno di calcolare

$$x = R^{-1}Q^* b = R^{-1}(\begin{bmatrix} I_n & 0 \end{bmatrix} P_n \dots P_1 b).$$

Quindi, possiamo applicare i riflettori a b mentre li calcoliamo e li applichiamo a A e alle sue riduzioni parziali, ed estrarre le sue prime n righe prima di risolvere il sistema lineare con R.

6.2 Sistemi sottodeterminati e non full rank

Consideriamo ora il caso in cui A possa non essere di rango pieno, o il sistema lineare sia sottodeterminato (cioè $n > m$). In questi casi, possono esserci multiple soluzioni al problema di minimo $\|Ax - b\|_2$ e per avere un problema ben definito dobbiamo scegliere quale selezionare.

Sia $\mathcal{S}(A, b)$ l'insieme dei minimizzatori per il problema ai minimi quadrati:

$$\mathcal{S}(A, b) := \{x \in \mathbb{R}^n \mid \forall y \in \mathbb{R}^n \ \|Ax - b\|_2 \leq \|Ay - b\|_2.\} \tag{5.1}$$

Allora, definiamo la soluzione a norma minima di $\|Ax-b\|_2$ come $x = \arg\min_{x \in \mathcal{S}(A,b)} \|x\|_2$. Potrebbe non essere immediatamente chiaro che questo x sia ben definito (cioè che esista un unico punto di minimo). Questo è tuttavia vero, e lo caratterizzeremo con l'introduzione della pseudoinversa di Moore-Penrose.

Definizione Sia $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ con SVD $A = U\Sigma V^*$. Allora, la pseudoinversa di Moore-Penrose di A è la matrice $n \times m$

$$A^\dagger := V\Sigma^\dagger U^*, \qquad \Sigma^\dagger = \operatorname{diag}(\sigma_1^\dagger, \ldots, \sigma_{\min\{m,n\}}^\dagger) \in \mathbb{R}^{n \times m}$$

dove $\sigma_j^\dagger = 1/\sigma_j$ se $\sigma_j \neq 0$ o 0 altrimenti.

Se A è una matrice quadrata invertibile, allora la pseudoinversa è esattamente l'inversa standard, e abbiamo $A^\dagger = A^{-1}$.

Esercizio Dimostrare che se A è $m \times n$ con $m \geq n$ e di rango pieno, allora $A^\dagger = (A^*A)^{-1}A^*$. Se invece $n \geq m$, e A è di rango pieno, allora $A^\dagger = A(AA^*)^{-1}$.

Dimostrazione. Consideriamo prima il caso $m \geq n$ con A di rango pieno. La SVD di A è $A = U\Sigma V^*$ con $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ e U, V matrici ortogonali. Allora:

$$A^\dagger = V\Sigma^\dagger U^* = V(\Sigma^*\Sigma)^{-1}\Sigma^* U^*$$

Ma $\Sigma^*\Sigma$ è una matrice diagonale $n \times n$ con elementi σ_i^2, quindi:

$$A^\dagger = V(\Sigma^*\Sigma)^{-1}\Sigma^* U^* = V(\Sigma^*\Sigma)^{-1}V^*V\Sigma^* U^* = (V\Sigma^*\Sigma V^*)^{-1}V\Sigma^* U^* = (A^*A)^{-1}A^*$$

Per il caso $n \geq m$ con A di rango pieno, procediamo analogamente:

$$A^\dagger = V\Sigma^\dagger U^* = V\Sigma^*(\Sigma\Sigma^*)^{-1}U^* = U\Sigma V^* V(\Sigma\Sigma^*)^{-1}U^* = A(AA^*)^{-1}$$

□

Esercizio Dimostrare che $(A^T)^\dagger = (A^\dagger)^T$.

Dimostrazione. Sia $A = U\Sigma V^T$ la SVD di A. Allora $A^T = V\Sigma^T U^T$ è la SVD di A^T. La pseudoinversa di A^T è:

$$(A^T)^\dagger = U(\Sigma^T)^\dagger V^T = U\Sigma^\dagger V^T$$

D'altra parte, la trasposta della pseudoinversa di A è:

$$(A^\dagger)^T = (V\Sigma^\dagger U^T)^T = U(\Sigma^\dagger)^T V^T = U\Sigma^\dagger V^T$$

Quindi $(A^T)^\dagger = (A^\dagger)^T$. □

Teorema Sia $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, e $\mathcal{S}(A,b)$ l'insieme delle soluzioni ai minimi quadrati di $\min \|Ax-b\|_2$. Allora il vettore $x := A^\dagger b$ soddisfa $x = \arg\min_{x\in\mathcal{S}(A,b)} \|x\|_2$.

Dimostrazione. Sia k il numero di valori singolari di A diversi da zero. Dunque, il rango di A è k. Possiamo scrivere la SVD di A in blocchi come segue:

$$A = \begin{bmatrix} U_1 & U_2 \end{bmatrix} \left[\begin{array}{c|c} \Sigma_1 & 0_{k,n-k} \\ \hline 0_{m-k,k} & 0_{m-k,n-k} \end{array}\right] \begin{bmatrix} V_1 & V_2 \end{bmatrix}^*$$

Possiamo scrivere il residuo $r := Ax - b$ come segue:

$$Ax - b = U(\Sigma y - U^* b), \qquad y := V^* x = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}, \qquad U^* b =: \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}.$$

Usando l'invarianza della norma euclidea sotto trasformazioni unitarie otteniamo

$$\|Ax-b\|_2^2 = \left\| \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0_{k,n-k} \\ 0_{m-k,k} & 0_{m-k,n-k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \right\|_2^2 = \left\| \begin{bmatrix} \Sigma_1 y_1 \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \right\|_2^2.$$

Tutti i minimizzatori in $\mathcal{S}(A,b)$ si ottengono ponendo $y_1 = \Sigma_1^{-1} b_1$, e scegliendo y_2 arbitrariamente. Quindi, poiché $y = V^* x$ abbiamo

$$\|x\|_2^2 = \|y\|_2^2 = \|y_1\|_2^2 + \|y_2\|_2^2,$$

e quindi abbiamo un'unica soluzione a norma minima ottenuta scegliendo $y_2 = 0$. Dobbiamo ora verificare che questa soluzione sia esattamente $A^\dagger b$:

$$A^\dagger b = V \begin{bmatrix} \Sigma_1^{-1} & 0_{k,m-k} \\ 0_{n-k,k} & 0_{n-k,m-k} \end{bmatrix} U^* b = V \begin{bmatrix} \Sigma_1^{-1} b_1 \\ 0 \end{bmatrix} = V \begin{bmatrix} y_1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

□

La notazione $x = A^\dagger b$ è un modo pratico per scrivere "la soluzione ai minimi quadrati di $Ax = b$", indipendentemente dalle dimensioni o dal rango di A.

7 Metodi di Krylov per sistemi lineari

Ci concentriamo ora sul problema di risolvere un sistema lineare $Ax = b$, assumendo che A sia molto grande. Sappiamo già che se A è "piccola", diciamo di dimensione al massimo 1000×1000, allora la decomposizione LU con pivoting, la fattorizzazione di Cholesky o la fattorizzazione QR sono tutte scelte valide per risolvere tale problema.

Tuttavia, incontreremo spesso problemi in cui siamo in grado di calcolare efficientemente $v \mapsto Av$, ma non siamo in grado di memorizzare esplicitamente tutti gli elementi di A e dunque conoscerne a fondo la struttura. L'esempio più rilevante è quando A è sparsa, cioè solo $\mathcal{O}(1)$ elementi per riga sono diversi da zero.

Ha dunque senso chiedersi se l'informazione ottenuta eseguendo prodotti matrice-vettore è sufficiente per risolvere un sistema lineare.
Si scopre che la risposta è spesso sì, e lo strumento naturale per rispondere a questa domanda sono i sottospazi di Krylov.

7.1 Introduzione ai sottospazi di Krylov

Un'osservazione immediata è che, combinando al più $\ell - 1$ prodotti di A per un vettore, possiamo costruire tutti i vettori della forma $p(A)b$ dove $p(z)$ è un polinomio di grado al più $\ell - 1$.

Lemma Sia A una qualsiasi matrice quadrata invertibile $n \times n$. Allora, esiste un polinomio $p(z)$ di grado al più $n - 1$ tale che, per ogni $b \in \mathbb{C}^n$, $x = A^{-1}b = p(A)b$.

Dimostrazione. Il risultato è una conseguenza del teorema di Hamilton-Cayley, che ci dice che se $q(z) := \det(zI - A)$ allora $q(A) = 0$. D'altra parte, abbiamo $q(0) = \det(A)$, quindi possiamo riformulare questa affermazione come segue:

$$0 = q(A)b = \det(A)b + \sum_{j=1}^{n} q_j A^j b \implies b = \frac{-1}{\det A} \sum_{j=1}^{n} q_j A^j b.$$

Moltiplicando l'identità sopra a sinistra per A^{-1} si ottiene la tesi:

$$x = A^{-1}b = \left[\frac{-1}{\det A} \sum_{j=0}^{n-1} q_{j+1} A^j \right] b =: p(A)b.$$

□

Tale Lemma ci dà buone e cattive notizie allo stesso tempo:

- La soluzione del sistema lineare $Ax = b$ può essere rappresentata come un polinomio in A moltiplicato per b: c'è speranza di estrarre tutte le informazioni richieste dai prodotti matrice-vettore.
- Il grado di tale polinomio può essere alto, al punto da rendere tale metodo non pratico.

L'idea alla base dei sottospazi di Krylov è che, anche se l'esatto $p(z)$ può essere un polinomio di alto grado, cosa che in generale è, potremmo essere in grado di trovare un'approssimazione di grado inferiore che fornisca una buona approssimazione $x \approx p_\ell(A)b$.

Definizione Il *sottospazio di Krylov di ordine* ℓ associato a A e b è il sottospazio

$$\mathcal{K}_\ell(A, b) := \text{span}(b, Ab, \ldots, A^{\ell-1}b).$$

7.2 L'iterazione di Arnoldi

Ogni volta che lavoriamo con sottospazi, lo facciamo costruendo basi appropriate. Il sottospazio di Krylov $\mathcal{K}_\ell(A, b)$ è definito come lo spazio colonna dei vettori $A^j b$ per $j = 0, \ldots, \ell - 1$. Questi vettori, tuttavia, formano una base terribile dal punto di vista computazionale in quanto i vettori tendono rapidamente ad allinearsi con la direzione dell'autovettore dominante, diventando quasi linearmente dipendenti. Questo fenomeno, analogo a quanto accade nel metodo delle potenze, produce una matrice malcondizionata, rendendo instabili i successivi processi di ortogonalizzazione e portando a gravi perdite di precisione numerica.

Esercizio Mostrare che se A è diagonale allora la matrice di base

$$M = \begin{bmatrix} b & Ab & \dots & A^{\ell-1}b \end{bmatrix}$$

è una matrice di Vandermonde scalata con gli autovalori di A come nodi. Mostrare che per ogni matrice normale $A = QDQ^*$ la matrice risultante M è data da Q volte una matrice di Vandermonde scalata.

Dimostrazione. Sia $A = \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ una matrice diagonale. Allora per ogni j abbiamo:

$$A^j b = \begin{bmatrix} \lambda_1^j b_1 \\ \lambda_2^j b_2 \\ \vdots \\ \lambda_n^j b_n \end{bmatrix}$$

Quindi la matrice M può essere scritta come:

$$M = \begin{bmatrix} b_1 & \lambda_1 b_1 & \cdots & \lambda_1^{\ell-1} b_1 \\ b_2 & \lambda_2 b_2 & \cdots & \lambda_2^{\ell-1} b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_n & \lambda_n b_n & \cdots & \lambda_n^{\ell-1} b_n \end{bmatrix} = \operatorname{diag}(b_1, \dots, b_n) \cdot V$$

dove V è la matrice di Vandermonde:

$$V = \begin{bmatrix} 1 & \lambda_1 & \cdots & \lambda_1^{\ell-1} \\ 1 & \lambda_2 & \cdots & \lambda_2^{\ell-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \lambda_n & \cdots & \lambda_n^{\ell-1} \end{bmatrix}$$

Per una matrice normale $A = QDQ^*$ con D diagonale, abbiamo:

$$A^j b = QD^j Q^* b$$

Quindi

$$M = \begin{bmatrix} QD^0Q^*b & QD^1Q^*b & \cdots & QD^{\ell-1}Q^*b \end{bmatrix} = Q \begin{bmatrix} D^0 c & D^1 c & \cdots & D^{\ell-1} c \end{bmatrix}$$

dove $c = Q^*b$. La matrice $\begin{bmatrix} D^0 c & D^1 c & \cdots & D^{\ell-1} c \end{bmatrix}$ è una matrice di Vandermonde scalata come nel caso diagonale. □

Dobbiamo modificare la procedura di prendere prodotti matrice-vettore con A per ottenere una base ortogonale direttamente, facendo la riortogonalizzazione durante tutta la procedura. L'algoritmo risultante è chiamato *iterazione di Arnoldi*, e può essere descritto come segue:

- Scegliamo un vettore iniziale $v_1 := b/\|b\|_2$
- Per $j = 1, 2, \ldots$ calcoliamo l'azione di A su v_j, ponendo $w_{j+1} := Av_j$
- Il vettore w_{j+1} è ortogonalizzato rispetto agli elementi di base precedenti, e poi normalizzato:

$$v_{j+1} := \frac{w_{j+1} - \sum_{i \leq j} (v_i^* w_{j+1}) v_i}{\|w_{j+1} - \sum_{i \leq j} (v_i^* w_{j+1}) v_i\|_2}$$

Questa procedura restituisce, per ogni ℓ, una base ortogonale per $\mathcal{K}_\ell(A, b)$, a meno che b non appartenga a un sottospazio invariante e quindi la norma al denominatore si annulli. Questa possibilità è chiamata *breakdown*, e sarà ulteriormente analizzata in seguito.

Notiamo che, definendo $h_{ij} := v_i^* w_{j+1} = v_i^* A v_j$, otteniamo che la matrice V_ℓ con $v_1, \ldots, v_\ell$ come colonne soddisfa la seguente relazione:

$$AV_\ell = V_\ell H_\ell + h_{\ell+1,\ell} v_{\ell+1} e_\ell^* \qquad H_\ell := \begin{bmatrix} h_{11} & \ldots & \ldots & h_{1,\ell} \\ h_{21} & h_{22} & & \vdots \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & h_{\ell,\ell-1} & h_{\ell,\ell} \end{bmatrix}.$$

La matrice H_ℓ è in forma di Hessenberg superiore, poiché Av_j è una combinazione lineare delle prime $j+1$ colonne di V_ℓ, per ogni $\ell > j$. Questa relazione è nota come *relazione di Arnoldi*.

Notiamo che, aggiungendo un'altra riga a H_ℓ e rendendola rettangolare, possiamo riscrivere la relazione di Arnoldi nella forma più compatta:

$$AV_\ell = V_{\ell+1} \hat{H}_\ell, \qquad \hat{H}_\ell := \begin{bmatrix} H_\ell \\ h_{\ell+1,\ell} e_\ell^* \end{bmatrix}.$$

Sceglieremo la forma più conveniente della relazione a seconda del contesto.

7.3 Il metodo dell'ortogonalizzazione completa (FOM)

Possiamo ora formulare il *full-orthogonal method (FOM)*, che costruisce una soluzione approssimata per il sistema lineare $Ax = b$ imponendo che la soluzione appartenga a $\mathcal{K}_\ell(A, b)$ e che il residuo $r_\ell^{\text{FOM}} := b - Ax_\ell^{\text{FOM}}$ sia ortogonale a $\mathcal{K}_\ell(A, b)$. Chiameremo questa soluzione la soluzione FOM di ordine ℓ per $Ax = b$, e possiamo scriverla come $x_\ell^{\text{FOM}} := V_\ell y_\ell^{\text{FOM}}$.

Teorema Si assuma che $\mathcal{K}_\ell(A, b)$ abbia dimensione ℓ e che H_ℓ sia invertibile. Allora, la soluzione FOM del sistema lineare $Ax = b$ ottenuta imponendo che $r_\ell^{\text{FOM}} \perp \mathcal{K}_\ell(A, b)$ esiste, è unica, ed è data da

$$x_\ell^{\text{FOM}} := V_\ell y_\ell^{\text{FOM}}, \qquad y_\ell^{\text{FOM}} := \|b\|_2 \cdot H_\ell^{-1} e_1.$$

Dimostrazione. Osserviamo che stiamo implicitamente assumendo che il metodo di Arnoldi non abbia fatto breakdown.
Cerchiamo $x_\ell^{\text{FOM}} \in \mathcal{K}_\ell(A, b)$, quindi possiamo scriverlo come:

$$x_\ell^{\text{FOM}} = V_\ell y_\ell^{\text{FOM}} \quad \text{per qualche } y_\ell^{\text{FOM}} \in \mathbb{C}^\ell$$

La condizione di ortogonalità del residuo richiede:

$$r_\ell^{\text{FOM}} \perp \mathcal{K}_\ell(A, b) \iff V_\ell^* r_\ell^{\text{FOM}} = 0$$

Sostituendo l'espressione del residuo

$$V_\ell^*(b - Ax_\ell^{\text{FOM}}) = 0 \iff V_\ell^* A x_\ell^{\text{FOM}} = V_\ell^* b$$

Sostituendo $x_\ell^{\text{FOM}} = V_\ell y_\ell^{\text{FOM}}$

$$V_\ell^* A V_\ell y_\ell^{\text{FOM}} = V_\ell^* b$$

Dalla relazione di Arnoldi

$$AV_\ell = V_\ell H_\ell + h_{\ell+1,\ell} v_{\ell+1} e_\ell^*$$

Moltiplicando a sinistra per V_ℓ^*:

$$V_\ell^* A V_\ell = V_\ell^* V_\ell H_\ell + h_{\ell+1,\ell} V_\ell^* v_{\ell+1} e_\ell^*$$

Poiché V_ℓ ha colonne ortonormali, $V_\ell^* V_\ell = I_\ell$. Inoltre, $v_{\ell+1}$ è ortogonale a tutte le colonne di V_ℓ, quindi $V_\ell^* v_{\ell+1} = 0$. Dunque:

$$V_\ell^* A V_\ell = H_\ell$$

Ricordando che $v_1 = b/\|b\|_2$ e che $V_\ell = [v_1, v_2, \ldots, v_\ell]$:

$$V_\ell^* b = V_\ell^*(\|b\|_2 v_1) = \|b\|_2 V_\ell^* v_1 = \|b\|_2 e_1$$

e sostituendo nel sistema

$$H_\ell y_\ell^{\text{FOM}} = \|b\|_2 e_1$$

Per l'ipotesi di invertibilità di H_ℓ, otteniamo

$$y_\ell^{\text{FOM}} = \|b\|_2 H_\ell^{-1} e_1$$

e quindi

$$x_\ell^{\text{FOM}} = V_\ell y_\ell^{\text{FOM}} = \|b\|_2 V_\ell H_\ell^{-1} e_1$$

□

La soluzione FOM del sistema lineare è ottenuta risolvendo un sistema lineare molto più piccolo con $H_\ell = V_\ell^* A V_\ell$. Quindi, è molto efficiente calcolare x_ℓ una volta che il sottospazio di Krylov è stato costruito usando l'iterazione di Arnoldi.

Ci si potrebbe chiedere se l'ipotesi di invertibilità di H_ℓ sia effettivamente necessaria, o possa essere automaticamente derivata dall'invertibilità di A. Si scopre che nel caso generale non possiamo evitare di fare questa ipotesi, mentre sotto condizioni particolari questo può essere automaticamente derivato, come mostrano i prossimi esercizi.

Esercizio Trovare un esempio di una matrice invertibile A per cui la soluzione FOM non è definita (cioè H_ℓ non è invertibile) per almeno qualche ℓ.

Soluzione Consideriamo la matrice

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

che è chiaramente invertibile.

Scegliamo $b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$. Costruiamo il sottospazio di Krylov di ordine 1:

$$\mathcal{K}_1(A, b) = \text{span}\{b\} = \text{span}\left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \right\}$$

Applichiamo l'iterazione di Arnoldi:

- $v_1 = b/\|b\|_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ - $w_2 = Av_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ - $h_{11} = v_1^* w_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 0$

- $h_{21} = \|w_2 - h_{11} v_1\|_2 = \| \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \|_2 = 1$ - $v_2 = \frac{w_2 - h_{11} v_1}{h_{21}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$

La matrice di Hessenberg risulta:

$$H_1 = [h_{11}] = [0]$$

che è singolare. Quindi per $\ell = 1$ la soluzione FOM non è definita.

Esercizio Mostrare che quando A è simmetrica (o hermitiana) e definita positiva, allora le soluzioni FOM per ogni $\ell \geq 1$ sono ben definite per il sistema lineare $Ax = b$.

Soluzione Sia A una matrice hermitiana e definita positiva. Dobbiamo mostrare che $H_\ell = V_\ell^* A V_\ell$ è invertibile per ogni $\ell \geq 1$.

Consideriamo un vettore arbitrario $y \in \mathbb{C}^\ell$ con $y \neq 0$. Allora:

$$y^* H_\ell y = y^* V_\ell^* A V_\ell y = (V_\ell y)^* A (V_\ell y)$$

Poiché V_ℓ ha colonne ortonormali e $y \neq 0$, abbiamo che $z = V_\ell y \neq 0$. Inoltre, $z \in \mathcal{K}_\ell(A, b)$.

Essendo A definita positiva:

$$y^* H_\ell y = z^* A z > 0 \quad \text{per ogni } y \neq 0$$

Questo dimostra che H_ℓ è definita positiva, e quindi invertibile, per ogni $\ell \geq 1$.

Teorema Sia $x_\ell^{\text{FOM}} = V_\ell y_\ell^{\text{FOM}}$ la soluzione FOM per $Ax = b$ dopo ℓ passi di Arnoldi senza breakdown e con H_ℓ invertibile. Allora, il residuo $r_\ell^{\text{FOM}} = b - A x_\ell^{\text{FOM}}$ soddisfa

$$\|r_\ell^{\text{FOM}}\|_2 = |h_{\ell+1,\ell}| \cdot |e_\ell^T y_\ell^{\text{FOM}}|$$

Dimostrazione. Per definizione del metodo FOM, il residuo soddisfa:

$$r_\ell^{\text{FOM}} \perp \mathcal{K}_\ell(A, b)$$

Inoltre, dalla relazione di Arnoldi sappiamo che:

$$r_\ell^{\text{FOM}} \in \mathcal{K}_{\ell+1}(A, b)$$

poiché $b \in \mathcal{K}_{\ell+1}(A, b)$ e $Ax_\ell^{\text{FOM}} \in \mathcal{K}_{\ell+1}(A, b)$.

Quindi il residuo appartiene all'intersezione:

$$r_\ell^{\text{FOM}} \in \mathcal{K}_{\ell+1}(A, b) \cap \mathcal{K}_\ell(A, b)^\perp$$

Poiché $\{v_1, \ldots, v_{\ell+1}\}$ è una base ortonormale di $\mathcal{K}_{\ell+1}(A, b)$ e $r_\ell^{\text{FOM}} \perp \text{span}\{v_1, \ldots, v_\ell\}$, il residuo deve essere parallelo a $v_{\ell+1}$:

$$r_\ell^{\text{FOM}} = \alpha v_{\ell+1} \quad \text{per qualche } \alpha \in \mathbb{C}$$

Calcoliamo il prodotto scalare con $v_{\ell+1}$:

$$v_{\ell+1}^* r_\ell^{\text{FOM}} = v_{\ell+1}^*(b - Ax_\ell^{\text{FOM}})$$

Osserviamo che $v_{\ell+1}^* b = 0$ perché $b = \|b\|_2 v_1$ e $v_{\ell+1} \perp v_1$ per $\ell \geq 1$. Dunque

$$v_{\ell+1}^* r_\ell^{\text{FOM}} = -v_{\ell+1}^* Ax_\ell^{\text{FOM}}$$

Ma anche

$$v_{\ell+1}^* r_\ell^{\text{FOM}} = v_{\ell+1}^*(\alpha v_{\ell+1}) = \alpha$$

quindi

$$\alpha = -v_{\ell+1}^* Ax_\ell^{\text{FOM}}$$

Sostituendo $x_\ell^{\text{FOM}} = V_\ell y_\ell^{\text{FOM}}$:

$$\alpha = -v_{\ell+1}^* AV_\ell y_\ell^{\text{FOM}}$$

Dalla relazione di Arnoldi

$$AV_\ell = V_\ell H_\ell + h_{\ell+1,\ell} v_{\ell+1} e_\ell^T$$

Moltiplicando a sinistra per $v_{\ell+1}^*$

$$v_{\ell+1}^* AV_\ell = v_{\ell+1}^* V_\ell H_\ell + h_{\ell+1,\ell} v_{\ell+1}^* v_{\ell+1} e_\ell^T$$

Poiché $v_{\ell+1} \perp V_\ell$, abbiamo $v_{\ell+1}^* V_\ell = 0$, e $v_{\ell+1}^* v_{\ell+1} = 1$. Quindi

$$v_{\ell+1}^* AV_\ell = h_{\ell+1,\ell} e_\ell^T$$

Sostituendo nell'espressione di α:

$$\alpha = -h_{\ell+1,\ell} e_\ell^T y_\ell^{\text{FOM}}$$

Quindi

$$r_\ell^{\text{FOM}} = -h_{\ell+1,\ell}(e_\ell^T y_\ell^{\text{FOM}}) v_{\ell+1}$$

Prendendo le norme

$$\|r_\ell^{\text{FOM}}\|_2 = |h_{\ell+1,\ell}| \cdot |e_\ell^T y_\ell^{\text{FOM}}|$$

□

7.4 GMRES

Il fatto che il residuo FOM non decresca in modo monotono e che le soluzioni possano non esistere per qualche ℓ può essere problematico. Possiamo facilmente risolvere questo problema modificando leggermente la nostra richiesta, imponendo che la soluzione approssimata ℓ-esima x_ℓ minimizzi la norma del residuo $\|Ax_\ell - b\|_2$. Questa scelta produce il cosiddetto metodo GMRES (Generalized Minimal Residual). Possiamo caratterizzare la soluzione come segue.

Teorema Siano V_ℓ, H_ℓ le matrici ottenute dopo ℓ passi di Arnoldi senza breakdown. Allora la soluzione approssimata $x_\ell^{\text{GMRES}} \in \mathcal{K}_\ell(A,b)$ che minimizza la norma del residuo $\|Ax_\ell^{\text{GMRES}} - b\|_2$ su $\mathcal{K}_\ell(A,b)$ è data da:

$$x_\ell^{\text{GMRES}} = V_\ell y_\ell^{\text{GMRES}}, \qquad y_\ell^{\text{GMRES}} = \|b\|_2 \begin{bmatrix} H_\ell \\ h_{\ell+1,\ell} e_\ell^T \end{bmatrix}^\dagger e_1,$$

dove † denota la pseudoinversa di Moore-Penrose.

Dimostrazione. Se x_ℓ appartiene a $\mathcal{K}_\ell(A,b)$, allora possiamo scriverla come:

$$x_\ell = V_\ell y_\ell \quad \text{per qualche } y_\ell \in \mathbb{C}^\ell$$

Il residuo corrispondente è:

$$r_\ell = Ax_\ell - b = AV_\ell y_\ell - b$$

Osserviamo che $b = \|b\|_2 v_1 = \|b\|_2 V_{\ell+1} e_1$ e $AV_\ell y_\ell \in \mathcal{K}_{\ell+1}(A,b)$

Quindi il residuo appartiene a $\mathcal{K}_{\ell+1}(A,b)$ e possiamo proiettarlo su questa base:

$$r_\ell = V_{\ell+1} V_{\ell+1}^* r_\ell$$

Sostituendo l'espressione del residuo:

$$r_\ell = V_{\ell+1} V_{\ell+1}^* (AV_\ell y_\ell - b) = V_{\ell+1}(V_{\ell+1}^* AV_\ell y_\ell - V_{\ell+1}^* b)$$

Ma $V_{\ell+1}^* b = \|b\|_2 V_{\ell+1}^* v_1 = \|b\|_2 e_1$, quindi:

$$r_\ell = V_{\ell+1}(V_{\ell+1}^* AV_\ell y_\ell - \|b\|_2 e_1)$$

Dalla relazione di Arnoldi

$$AV_\ell = V_{\ell+1}\hat{H}_\ell \quad \text{dove } \hat{H}_\ell = \begin{bmatrix} H_\ell \\ h_{\ell+1,\ell} e_\ell^T \end{bmatrix}$$

Moltiplicando a sinistra per $V_{\ell+1}^*$

$$V_{\ell+1}^* AV_\ell = V_{\ell+1}^* V_{\ell+1} \hat{H}_\ell = \hat{H}_\ell$$

Poiché le colonne di $V_{\ell+1}$ sono ortonormali, abbiamo

$$\|r_\ell\|_2 = \|V_{\ell+1}(\hat{H}_\ell y_\ell - \|b\|_2 e_1)\|_2 = \|\hat{H}_\ell y_\ell - \|b\|_2 e_1\|_2$$

Per minimizzare $\|r_\ell\|_2$, dobbiamo quindi risolvere il problema ai minimi quadrati

$$\min_{y_\ell \in \mathbb{C}^\ell} \|\hat{H}_\ell y_\ell - \|b\|_2 e_1\|_2$$

La soluzione di questo problema è data dalla pseudoinversa di Moore-Penrose

$$y_\ell^{\text{GMRES}} = \|b\|_2 \hat{H}_\ell^\dagger e_1 \quad \Rightarrow \quad x_\ell^{\text{GMRES}} = V_\ell y_\ell^{\text{GMRES}} = \|b\|_2 V_\ell \hat{H}_\ell^\dagger e_1$$

□

In GMRES, il residuo del sistema lineare è immediatamente disponibile mediante

$$\|r_\ell^{\text{GMRES}}\|_2 = \|Ax_\ell^{\text{GMRES}} - b\|_2 = \left\| \begin{bmatrix} H_\ell \\ h_{\ell+1,\ell} e_\ell^T \end{bmatrix} y_\ell^{\text{GMRES}} - \|b\|_2 e_1 \right\|_2 .$$

7.5 Risoluzione del problema ai minimi quadrati in GMRES

GMRES risolve un problema ai minimi quadrati della seguente forma ad ogni passo

$$\min_{y_\ell \in \mathbb{C}^\ell} \left\| \begin{bmatrix} h_{11} & \dots & h_{1\ell} \\ h_{21} & \dots & h_{2\ell} \\ & \ddots & \vdots \\ & & h_{\ell+1,\ell} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [y_\ell]_1 \\ \vdots \\ [y_\ell]_\ell \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \|b\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \right\|_2$$

Denotando con $\hat{H}_\ell$ la matrice di Hessenberg superiore rettangolare di dimensione $(\ell+1) \times \ell$ sopra, questo può essere risolto calcolando una fattorizzazione QR $\hat{H}_\ell = QR$, e ottenendo il sistema lineare equivalente

$$\min_{y_\ell \in \mathbb{C}^\ell} \left\| \begin{bmatrix} r_{11} & \dots & r_{1\ell} \\ & \ddots & \vdots \\ & & r_{\ell,\ell} \\ & & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [y_\ell]_1 \\ \vdots \\ [y_\ell]_\ell \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \vdots \\ \gamma_{\ell+1} \end{bmatrix} \right\|_2, \qquad \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ \vdots \\ \gamma_{\ell+1} \end{bmatrix} = Q^* \begin{bmatrix} \|b\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

La soluzione e il residuo del passo GMRES sono quindi disponibili come

$$y_\ell = \begin{bmatrix} r_{11} & \dots & r_{1\ell} \\ & \ddots & \vdots \\ & & r_{\ell,\ell} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \vdots \\ \gamma_\ell \end{bmatrix}, \qquad \|r_\ell^{\text{GMRES}}\|_2 = \|\hat{H}_\ell y_\ell - \|b\|_2 e_1\|_2 = |\gamma_{\ell+1}|$$

Genericamente, una fattorizzazione QR di una matrice $(\ell+1) \times \ell$ richiede $\mathcal{O}(\ell^3)$ flops. Questo sarebbe un costo trascurabile nel primo passo di GMRES, quando $\ell \ll n$. Tuttavia, quando la dimensione del sottospazio di Krylov cresce, può diventare rilevante. Quindi, facciamo le seguenti osservazioni:

- La matrice $\hat{H}_\ell$ è di Hessenberg superiore, e quindi relativamente vicina a una matrice triangolare superiore; questo ci permette di calcolare una fattorizzazione QR usando rotazioni di Givens a un costo quadratico (abbiamo usato lo stesso trucco nell'iterazione QR per gli autovalori).

- Le due matrici $\hat{H}_\ell$ e $\hat{H}_{\ell+1}$ sono abbastanza vicine: se conosciamo la fattorizzazione QR di $\hat{H}_\ell$ possiamo ottenere quella di $\hat{H}_{\ell+1}$ a un costo ancora minore.

Abbiamo dimostrato il primo punto trattando la forma di Hessenberg superiore nell'iterazione QR in un lemma precedente. Nella notazione corrente, esso implica l'esistenza di una fattorizzazione

$$G_1 \dots G_\ell \begin{bmatrix} r_{11} & \dots & r_{1\ell} \\ & \ddots & \vdots \\ & & r_{\ell\ell} \\ 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} = \hat{H}_\ell, \qquad G_i = I_{i-1} \oplus \begin{bmatrix} c_i & -\overline{s_i} \\ s_i & \overline{c_i} \end{bmatrix} \oplus I_{\ell-i}.$$

Questa fattorizzazione ci permette di riscrivere il problema ai minimi quadrati, che deve essere risolto in ogni iterazione di GMRES, in modo più esplicito:

$$\min_{y_\ell \in \mathbb{C}^\ell} \left\| \begin{bmatrix} R_\ell \\ 0_{1\times\ell} \end{bmatrix} y_\ell - \|b\|_2 G_\ell^* \dots G_1^* e_1 \right\|_2 = \min_{y_\ell \in \mathbb{C}^\ell} \left\| \begin{bmatrix} R_\ell \\ 0_{1\times\ell} \end{bmatrix} y_\ell - \|b\|_2 \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 s_1 \\ c_3 s_2 s_1 \\ \dots \\ c_\ell s_{\ell-1} \dots s_1 \\ s_\ell s_{\ell-1} \dots s_1 \end{bmatrix} \right\|_2$$

7.6 Convergenza

GMRES produce una sequenza di residui decrescenti (in norma), che è già una proprietà notevole. Tuttavia, se la convergenza a zero è lenta, potremmo aver bisogno di un grande numero di iterazioni per trovare effettivamente una soluzione approssimata di $Ax = b$.

Questa sezione è dedicata a caratterizzare la velocità di convergenza, in termini di limitazione della norma dei residui $r_\ell^{\text{GMRES}} = b - Ax_\ell^{\text{GMRES}}$. Collegheremo la velocità di convergenza ad alcune proprietà spettrali di A, e questo ci guiderà nella trasformazione del problema per accelerare la convergenza.

Teorema Sia x_ℓ^{GMRES} la sequenza generata da GMRES per il sistema lineare $Ax = b$, senza breakdown. Allora, r_ℓ^{GMRES} soddisfa

$$\|r_\ell^{\text{GMRES}}\|_2 = \|b - Ax_\ell^{\text{GMRES}}\|_2 = \min_{\substack{p(x)\in\mathcal{P}_\ell \\ p(0)=1}} \|p(A)b\|_2,$$

dove $\mathcal{P}_\ell$ è l'insieme dei polinomi di grado al più ℓ.

Dimostrazione. Ricordiamo che x_ℓ^{GMRES} è scelto per minimizzare i residui $\|b - Ax\|_2$ tra tutti gli $x \in \mathcal{K}_\ell(A, b)$ e, per definizione di sottospazio di Krylov, possiamo scrivere $x_\ell^{\text{GMRES}} = q(A)b$ con $q(x)$ polinomio di grado al più $\ell - 1$. Otteniamo quindi

$$r_\ell^{\text{GMRES}} = b - Ax_\ell^{\text{GMRES}} = b - Aq(A)b = (I - Aq(A))b = p(A)b,$$

dove $p(x) = 1 - xq(x)$, un polinomio generico di grado ℓ con $p(0) = 1$. La tesi segue dalla proprietà di minimizzazione di GMRES. □

Un'espressione della forma $p(A)b$ può essere collegata, per matrici normali, al valore di $p(x)$ sullo spettro di A. Lo stesso vale per matrici diagonalizzabili, sebbene una costante $\kappa_2(V)$ appaia nella limitazione.

Corollario Sia A diagonalizzabile con matrice di autovettori V; allora, GMRES produce una sequenza di residui $\{r_\ell^{\text{GMRES}}\}_{\ell \geq 1}$ che soddisfa

$$\|r_\ell^{\text{GMRES}}\|_2 \leq \kappa_2(V) \cdot \min_{\substack{p(x) \in \mathcal{P}_\ell \\ p(0)=1}} \max_{\lambda \in \Lambda(A)} |p(\lambda)| \cdot \|b\|_2.$$

Dimostrazione. La dimostrazione segue diagonalizzando A, mostrando che $p(A)b = Vp(D)V^{-1}b$, poi usando il Teorema precedente e calcolando la norma spettrale.

Sia $A = VDV^{-1}$ la diagonalizzazione di A, dove D è la matrice diagonale degli autovalori. Allora per qualsiasi polinomio p di grado ℓ con $p(0) = 1$

$$p(A)b = Vp(D)V^{-1}b$$

Prendendo le norme

$$\|p(A)b\|_2 \leq \|V\|_2 \|p(D)\|_2 \|V^{-1}\|_2 \|b\|_2 = \kappa_2(V) \|p(D)\|_2 \|b\|_2$$

Ma $\|p(D)\|_2 = \max_{\lambda \in \Lambda(A)} |p(\lambda)|$, quindi

$$\|p(A)b\|_2 \leq \kappa_2(V) \cdot \max_{\lambda \in \Lambda(A)} |p(\lambda)| \cdot \|b\|_2$$

Per il Teorema precedente, GMRES sceglie il polinomio p che minimizza $\|p(A)b\|_2$, quindi

$$\|r_\ell^{\text{GMRES}}\|_2 \leq \kappa_2(V) \cdot \min_{\substack{p(x) \in \mathcal{P}_\ell \\ p(0)=1}} \max_{\lambda \in \Lambda(A)} |p(\lambda)| \cdot \|b\|_2$$

□

Questi risultati mostrano che la situazione ottimale per la convergenza di GMRES è avere (almeno per matrici normali) gli autovalori ammassati attorno a $\lambda = 1$ (o qualsiasi altro valore non nullo, poiché il problema è invariante per scala). Questo chiaramente non è sempre il caso, ed è la ragione per cui sono state sviluppate tecniche di precondizionamento per modificare i sistemi lineari per ricadere in questo caso.

7.7 Insiemi spettrali

Limitare la grandezza di $\|p(A)b\|_2$ quando A è una matrice non normale può essere impegnativo: il risultato del Corollario precedente può essere piuttosto lasco quando il numero di condizionamento $\kappa_2(V) \gg 1$.

In questo caso particolare, una soluzione è introdurre insiemi più grandi dello spettro dove misurare l'effetto del polinomio. Questa idea porta alla definizione di insiemi K-spettrali.

Definizione Un insieme $\mathcal{S}$ è un insieme K-spettrale per una matrice A e una data norma $\|\cdot\|$ se, per ogni funzione analitica $f(z)$ su $\mathcal{S}$, vale

$$\|f(A)\| \leq K \cdot \max_{z \in \mathcal{S}} |f(z)|$$

Facciamo alcuni esempi:

- Se A è normale, allora lo spettro di A è un insieme 1-spettrale per la norma spettrale.

- Se A è diagonalizzabile, allora lo spettro è un insieme $\kappa_2(V)$-spettrale, ancora per la norma spettrale.

Trovare insiemi spettrali più generali che funzionino bene con matrici non normali non è un compito facile. Riportiamo il seguente teorema, la cui dimostrazione richiede strumenti avanzati ed è quindi omessa da queste note.

Teorema Crouzeix-Palencia Sia A una matrice, e $\mathcal{W}(A)$ il suo campo dei valori, definito come

$$\mathcal{W}(A) := \{x^* A x \mid \|x\|_2 = 1\}.$$

Allora, $\mathcal{W}(A)$ è un insieme $(1+\sqrt{2})$-spettrale per A con la norma spettrale.

L'osservazione chiave è che ora la costante non dipende dalla matrice in considerazione, mentre l'insieme sì. Chiaramente, questo risultato può essere usato per limitare la grandezza di $\|p(A)b\|_2$ su esempi specifici.

Ci sono alcune limitazioni a questo approccio:

1. Calcolare esplicitamente $\mathcal{W}(A)$ non è un compito facile. Alcune proprietà possono essere dimostrate (l'insieme è convesso e contiene lo spettro), ma l'insieme è difficile da trattare sia teoricamente che numericamente.

2. Non c'è garanzia che $0 \notin \mathcal{W}(A)$ anche quando A è invertibile. Ogni volta che questo accade, tutti i limiti superiori per $\|p(A)b\|_2$ saranno uguali a 1, e quindi sono inutili per comprendere la convergenza di GMRES.

7.8 Precondizionamento per GMRES

I risultati precedenti sulla convergenza di GMRES ci dicono che, quando lo spettro di A ha autovalori che non sono ammassati lontano da 0, possiamo aspettarci una convergenza lenta. L'idea del precondizionamento è risolvere questo problema modificando il problema originale usando i gradi di libertà che abbiamo a nostra disposizione. Infatti, nota che per qualsiasi matrice invertibile M_1, M_2 abbiamo

$$Ax = b \iff M_1^{-1} A M_2^{-1} M_2 x = M_1^{-1} b,$$

e ponendo $y := M_2 x$ possiamo risolvere il sistema lineare $\tilde{A} y = \tilde{b}$ con $\tilde{A} := M_1^{-1} A M_2^{-1}$ e $\tilde{b} = M_1^{-1} b$, e solo allora recuperare $x = M_2^{-1} y$. Se scegliamo M_1 e M_2 saggiamente possiamo ottenere un problema con proprietà di convergenza molto migliori di quello originale.

Osserviamo che non è necessario calcolare esplicitamente $M_1^{-1} A M_2^{-1}$, ma invece implementare efficientemente l'azione di questa matrice su un vettore

$$v \mapsto M_1^{-1} A M_2^{-1} v = M_1^{-1}(A(M_2^{-1} v)).$$

Con un ordinamento intelligente delle operazioni aritmetiche, questo è equivalente a una moltiplicazione di matrice con A, e due sistemi lineari con M_1 e M_2. Per riassumere, il nostro obiettivo è selezionare M_1, M_2 in modo che:

- $M_1^{-1}AM_2^{-1}$ abbia buone proprietà di convergenza con GMRES; in pratica, questo spesso significa che la matrice precondizionata è ben condizionata, o una perturbazione di rango basso di una matrice ben condizionata.

- I sistemi lineari con M_1 e M_2 possano essere risolti efficientemente.

Un precondizionatore ben scelto farà convergere GMRES in meno iterazioni, ma a un costo più alto per iterazione. Trovare il giusto equilibrio è critico per un'implementazione efficiente.

Spesso, M_1 è chiamato *precondizionatore sinistro*, mentre M_2 è chiamato *precondizionatore destro*. Semplificheremo ora la notazione assumendo che $M_1 = M$ e $M_2 = I$ (cioè, applichiamo solo il precondizionatore sinistro). La maggior parte delle considerazioni che faremo sarà facile da trasferire all'altro caso. Nota che usare un precondizionatore destro non cambia il residuo, mentre usare un precondizionatore sinistro non richiede di recuperare la soluzione alla fine.

7.8.1 Precondizionatori diagonali e metodi di splitting

Il precondizionatore più semplice si ottiene prendendo $M = D$, dove D è la diagonale di A. Questa scelta è a volte chiamata *precondizionatore di Jacobi*, e ha un collegamento con i metodi di splitting. Ricordiamo brevemente che, data una partizione additiva $A = M - N$ con $\det M \neq 0$, abbiamo

$$Ax = b \iff Mx = Nx + b \iff x = M^{-1}Nx + M^{-1}b \iff x = Px + q,$$

dove $P = M^{-1}N$ e $q = M^{-1}b$. Questo suggerisce di impostare l'iterazione di punto fisso $x^{(k+1)} = Px^{(k)} + q$, che dà i cosiddetti *metodi di splitting*, ed è globalmente convergente ogni volta che $\rho(P) < 1$. In questo contesto, il metodo di Jacobi è ottenuto scegliendo M come la diagonale di A, e Gauss-Seidel prendendo M come la parte triangolare inferiore.

Tutte le scelte che forniscono uno splitting convergente (cioè, per cui $\rho(P) < 1$) funzionano come un buon precondizionatore, come mostra il risultato successivo.

Lemma Sia $A = M - N$ uno splitting additivo di A con $\det M \neq 0$ e $\rho(M^{-1}N) = \rho < 1$. Allora, $M^{-1}A$ ha autovalori in $B(1, \rho)$ e il metodo GMRES per $Ax = b$ precondizionato con M soddisfa $\|r_\ell\| \lesssim \mathcal{O}(\rho^\ell)$.

Dimostrazione. Scriviamo

$$M^{-1}A = M^{-1}(M - N) = I - M^{-1}N.$$

Quindi, $M^{-1}A$ ha $1 - \lambda$ come autovalori, dove $\lambda \in \Lambda(M^{-1}N) \subseteq B(0, \rho)$. □

In pratica, il precondizionatore può essere migliore di quanto previsto dal Lemma, poiché GMRES può "deflazionare" alcuni autovalori dopo pochi passi. Quindi, se lo spettro di $M^{-1}A$ ha alcuni autovalori della forma $1 - \lambda$ con $|\lambda| \approx \rho$, e il resto molto più vicini a 1, possiamo aspettarci un'accelerazione della velocità di convergenza dopo pochi passi. Questo fenomeno è noto come *convergenza superlineare* dei metodi di Krylov, e non si trova mai nelle iterazioni di punto fisso.

7.8.2 Inverso approssimato sparso

Il precondizionatore idealmente dovrebbe approssimare $M^{-1} \approx A^{-1}$ il meglio possibile mentre è ancora facile da applicare. Una classe di scelte efficaci per matrici sparse A è cercare di trovare M tale che

$$M = \arg \min_{M^{-1} \in \mathcal{S}} \|I - AM^{-1}\|_F,$$

dove $\mathcal{S}$ è la classe di matrici con una struttura specifica. Una scelta comune è prendere $\mathcal{S}$ come l'insieme di matrici con la stessa struttura di sparsità di A. La scelta della norma di Frobenius qui non è casuale, poiché abbiamo

$$\|I - AM^{-1}\|_F^2 = \sum_{j=1}^{n} \|e_j - AM^{-1}e_j\|_2^2.$$

Quindi, possiamo determinare le colonne di M^{-1} indipendentemente risolvendo un problema ai minimi quadrati vincolato. In particolare, fissiamo l'indice j, e denotiamo gli insiemi di indici R_j e C_j come le righe che sono non nulle in Ae_j e le righe che possono essere non nulle in $M^{-1}e_j$, rispettivamente. Allora, $M^{-1}e_j$ può essere determinato risolvendo il problema ai minimi quadrati

$$\min \|A(R_j, C_j)w_j - e_j(R_j)\|_2,$$

e poi ponendo $M^{-1}e_j$ uguale a w_j nelle righe C_j, e zero altrove. In pratica, questo è un problema ai minimi quadrati molto piccolo, che è economico da risolvere.

7.8.3 Fattorizzazioni incomplete

Consideriamo ora un modo alternativo per costruire precondizionatori. Partiamo dalla seguente osservazione: se una matrice A è sparsa, la sua fattorizzazione LU spesso non eredita la sparsità; questo è però vero per matrici a banda.

Quando la fattorizzazione LU di A è sparsa, è spesso il metodo migliore per risolvere il sistema lineare; se non lo è, possiamo ancora provare a imporre la sparsità sui fattori L, U ignorando alcune entrate durante la riduzione, e questa procedura può essere usata per costruire una fattorizzazione LU che è facile da invertire, e a volte un buon precondizionatore.

Per discutere questa questione, dobbiamo introdurre una classe speciale di matrici che funzionano bene con la fattorizzazione LU: le M-matrici.

Definizione Una matrice $A = (a_{ij})$ è detta M-matrice se sono soddisfatte le seguenti proprietà:

1. (i) $a_{ij} \leq 0$ se $i \neq j$: le entrate extra-diagonali sono non positive
2. (ii) A è invertibile e $A^{-1} \geq 0$: l'inversa di A è non negativo elemento per elemento.

Le M-matrici possono essere definite in vari modi equivalenti; dimostriamo ora alcune proprietà che sfrutteremo in seguito.

Lemma Sia A una M-matrice, allora le entrate diagonali di A sono strettamente positive.

Dimostrazione. Sia $C = (c_{ij}) = A^{-1}$, allora, dalla relazione $CA = I$ otteniamo

$$(CA)_{ii} = \sum_{j=1}^{n} c_{ij}a_{ji} = 1 \iff a_{ii}c_{ii} = 1 - \sum_{j=1, j\neq i}^{n} c_{ij}a_{ji}$$

Il termine a destra è maggiore o uguale a 1, e quindi è strettamente positivo; poiché C è non negativo, segue che sia c_{ii} che a_{ii} sono strettamente positivi. □

Lemma Sia A una matrice con entrate diagonali strettamente positive, e non-diagonali non positive. Sia D la matrice diagonale contenente le entrate diagonali di A, e $B = I - D^{-1}A$. Allora, $\rho(B) < 1$ se e solo se A è invertibile e $A^{-1} \geq 0$.

Dimostrazione. Supponiamo che $\rho(B) < 1$. Allora $I - B$ è invertibile e possiamo scrivere

$$A = D - (D - A) = D(I - (I - D^{-1}A)) = D(I - B),$$

e vediamo che A è anche invertibile, e $A^{-1} = (I - B)^{-1}D^{-1}$. Poiché $\rho(B) < 1$, otteniamo

$$A^{-1} = \sum_{i\geq 0} B^i D^{-1} \geq 0.$$

Questo dimostra la prima parte dell'enunciato. Per vedere il viceversa, usiamo il teorema di Perron-Frobenius per trovare un autovettore non negativo di B tale che $Bv = \rho(B)v$. Usando la fattorizzazione $A = D(I - B)$, abbiamo che poiché A è invertibile, $I - B$ è anche invertibile, e possiamo scrivere

$$0 \leq A^{-1}Dv = (I - B)^{-1}v = \frac{1}{1 - \rho(B)}v.$$

Questo può valere solo se $\rho(B) < 1$, il che conclude la dimostrazione. □

Siamo ora pronti a dimostrare il primo risultato che mostra la potenza delle M-matrici: quando eseguiamo il primo passo dell'eliminazione di Gauss su una M-matrice, la parte rimanente è ancora una M-matrice.

Teorema Sia A una M-matrice, e L_1^{-1} la matrice triangolare inferiore ottenuta al primo passo dell'eliminazione di Gauss, cioè

$$L_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -\frac{a_{n1}}{a_{11}} & & & 1 \end{bmatrix}, \qquad L_1^{-1}A = A_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & & & \\ \vdots & & \hat{A}_1 & \\ 0 & & & \end{bmatrix}$$

Allora L_1^{-1} è ben definita e sia A_1 che $\hat{A}_1$ sono ancora M-matrici.

Dimostrazione. Notiamo che $a_{11} > 0$, quindi L_1^{-1} è ben definita. Tutte le entrate non diagonali in A_1 nella prima colonna sono non positive (sono tutte zero), e lo stesso vale per quelle nella prima riga (provengono da A, che è una M-matrice). Le entrate rimanenti possono essere scritte come

$$(L_1^{-1}A)_{ij} = a_{ij} - \frac{a_{i1}a_{1j}}{a_{11}}, \qquad i, j \geq 2.$$

Quindi, per tutti $i \neq j$ abbiamo $(L_1^{-1}A)_{ij} \leq 0$ perché $\frac{a_{i1}a_{1j}}{a_{11}} \geq 0$. Per dimostrare che A_1 è una M-matrice, è sufficiente dimostrare che $A_1^{-1} \geq 0$. Lo realizziamo verificando che $A_1^{-1}e_j \geq 0$ per tutti j. Quando $j = 1$, abbiamo $A_1^{-1}e_1 = a_{11}^{-1}e_1$, e la relazione è soddisfatta. Se $j > 1$ otteniamo

$$A_1^{-1}e_j = A^{-1}L_1e_j = A^{-1}e_j \geq 0,$$

dove abbiamo usato che $L_1e_j = e_j$ per tutti $j \geq 2$. Poiché l'inverso di A_1 contiene $\hat{A}_1^{-1}$ come sottoblocco, sia $\hat{A}_1$ che $\hat{A}_1^{-1}$ sono M-matrici. □

Corollario Se A è una M-matrice allora ammette un'unica decomposizione LU senza pivoting. Inoltre, la matrice U è anch'essa una M-matrice.

Dimostriamo ora il seguente lemma, che sarà utile per passare da fattorizzazioni LU esatte a fattorizzazioni incomplete.

Lemma Sia $A \leq B$ tale che B è non positiva in tutte le entrate non diagonali, e A è una M-matrice. Allora, B è una M-matrice.

Dimostrazione. Notiamo che B ha il pattern di segno corretto per essere una M-matrice: le entrate extra-diagonali sono non positive, e quelle diagonali sono strettamente positive poiché sono maggiori o uguali a quelle di A.

Denotiamo con D_A e D_B le matrici diagonali con la diagonale di A e B. Per dimostrare che B è una matrice M, mostriamo che $I - D_B^{-1}B$ ha raggio spettrale minore di 1.

Notiamo che abbiamo $D_A - A \geq D_B - B \geq 0$, e moltiplicando a sinistra per D_A^{-1} otteniamo

$$I - D_A^{-1}A \geq D_A^{-1}(D_B - B) \geq D_B^{-1}(D_B - B) = I - D_B^{-1}B \geq 0.$$

Poiché le matrici sopra sono non negative, anche le loro potenze sono non negative, e otteniamo che per tutti gli interi positivi k

$$\|(I - D_B^{-1}B)^k\|_\infty \leq \|(I - D_A^{-1}A)^k\|_\infty.$$

Quindi, in virtù di $\rho(M) = \lim_{k\to\infty} \|M^k\|_\infty^{\frac{1}{k}}$, otteniamo $\rho(I - D_B^{-1}B) \leq \rho(I - D_A^{-1}A) < 1$. □

Siamo ora quasi pronti per il passo successivo: dimostriamo che se invece di calcolare la fattorizzazione LU con l'eliminazione di Gauss standard si tralasciano alcune nuove entrate non nulle, la matrice risultante sarà ancora una M-matrice. Questo fatto implica che l'eliminazione di Gauss (incompleta) può essere continuata senza breakdown. Più formalmente, abbiamo quanto segue.

Lemma Sia A una M-matrice e L_1^{-1} la matrice ottenuta al primo passo dell'eliminazione di Gauss, e tale che

$$L_1^{-1}A = A_1 = \widetilde{A}_1 - R_1,$$

dove R_1 è una qualsiasi matrice con entrate non nulle solo per indici (i,j) tali che $(A_1)_{ij} \neq 0$ e $a_{ij} = 0$, e quelle entrate soddisfano $(R_1)_{ij} = -(A_1)_{ij}$. Allora, $\widetilde{A}_1$ è una M-matrice.

Dimostrazione. Da considerazioni precedenti e dal Teorema, sappiamo che A_1 è una M-matrice. Tutte le entrate di R_1 sono extra-diagonali e l'opposto delle corrispondenti entrate di A_1. Poiché quest'ultima è una M-matrice, ciò implica che $R_1 \geq 0$. Quindi, abbiamo che le diagonali di A_1 e $\widetilde{A}_1$ coincidono, e sono entrambe positive, e $A_1 \leq \widetilde{A}_1$. In virtù del Lemma concludiamo. □

Il risultato sopra mostra cosa succede quando si esegue il primo passo della fattorizzazione LU incompleta. Otteniamo una nuova matrice $\widetilde{A}_1$ per la quale vale la seguente relazione:

$$L_1\widetilde{A}_1 = A + L_1R_1.$$

Grazie alla struttura di zeri in L_1 e R_1, otteniamo che

$$L_1R_1 = \left[\begin{array}{c|ccc} 1 & & & \\ \hline \times & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \times & & & 1 \end{array}\right] \left[\begin{array}{c|ccc} & & & \\ \hline & \times & \cdots & \times \\ & \vdots & & \vdots \\ & \times & \cdots & \times \end{array}\right] = R_1.$$

Pertanto, abbiamo la fattorizzazione parziale $L_1\widetilde{A}_1 = A + R_1$, dove R_1 è non negativa, e $\widetilde{A}_1$ è una M-matrice. Iterando la riduzione su $\widetilde{A}_1$ si ottiene una fattorizzazione incompleta della forma

$$LU = A + R_1 + \ldots + R_{n-1} = A + R,$$

dove $R = R_1 + \ldots + R_{n-1} \geq 0$, e $U^{-1}L^{-1} \geq 0$, poiché U è una M-matrice, e tutte le L_i^{-1} sono non negative. Possiamo riassumere questi risultati nel seguente teorema.

Teorema Sia A una M-matrice, e L, U ottenute da una fattorizzazione LU incompleta con qualsiasi pattern di non zeri che includa le entrate diagonali. Allora, la fattorizzazione soddisfa

$$A = LU - R, \qquad R \geq 0$$

dove LU è invertibile e ha inversa non negativo.

Notiamo che in particolare, il risultato sopra fornisce uno splitting per A della forma $A = M - N$, con $M^{-1}, N \geq 0$. Tale splitting è chiamato *splitting regolare* e se A è una M-matrice è sempre convergente, come mostrato nel seguente risultato.

Teorema Sia A una M-matrice e sia $A = M - N$ uno splitting tale che $M^{-1}, N \geq 0$. Allora, il raggio spettrale di $M^{-1}N$ soddisfa $\rho(M^{-1}N) < 1$.

Dimostrazione. Chiaramente, $M^{-1}N \geq 0$, e possiamo trovare un autovettore non negativo tale che $M^{-1}Nv = \rho(M^{-1}N)v$. Ora, in virtù della non negatività di A^{-1} e N, abbiamo

$$0 \leq A^{-1}Nv = (M-N)^{-1}Nv = (I - M^{-1}N)^{-1}M^{-1}Nv = \frac{\rho(M^{-1}N)}{1-\rho(M^{-1}N)}v.$$

Poiché v è non negativo e diverso da zero, questo può valere solo se $\rho(M^{-1}N) < 1$. □

In virtù del Lemma questo fornisce una convergenza per GMRES almeno alla velocità $\mathcal{O}(\rho^\ell)$, dove $\rho = \rho(M^{-1}N) < 1$. In pratica, questo precondizionatore può spesso essere efficace, specialmente se permettiamo di aumentare il numero di elementi non nulli man mano che procediamo. Le seguenti due strategie sono spesso considerate:
- ILU(k): Se $k = 0$, permettiamo solo elementi non nulli in corrispondenza degli elementi non nulli di A; se $k = 1$, sono permessi solo questi e quelli generati da un elemento che era non nullo in A. Per k più grandi, permettiamo agli elementi di generare k generazioni di elementi non nulli.
- ILUT(τ): permettiamo elementi non nulli solo se hanno modulo maggiore di una soglia fissa τ.

7.9 Problemi di saddle point e precondizionatori

Consideriamo ora una classe di precondizionatori utile per i cosiddetti *problemi di saddle point*, che spesso sorgono nelle applicazioni. Questo corrisponde a sistemi lineari a valori reali della forma

$$S = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ d \end{bmatrix}, \qquad A \text{ simmetrica definita positiva, } B \text{ di full row-rank.}$$

Osserviamo che questa struttura può essere resa più generale (per esempio eliminando il requisito che A sia simmetrica, e permettendo blocchi extra-diagonali diversi $B_1 \neq B_2^T$ o un blocco non nullo in posizione $(2,2)$). Per semplicità, ci atterremo a questa situazione in queste note.
Iniziamo facendo due esempi dove questa struttura appare.

7.9.1 Ottimizzazione vincolata

Consideriamo i problemi di ottimizzazione ai minimi quadrati per minimizzare $\Phi(x) = \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2$, soggetto a p vincoli lineari della forma $Bx = d$. notiamo che $\nabla\Phi(x) = A^T(Ax-b) \quad \nabla^2\Phi(x) = A^TA$. Poiché il numero di vincoli è tipicamente molto più piccolo del numero di gradi di libertà, la matrice B è $p \times n$ e spesso ha poche righe e un grande numero di colonne. Scrivendo la Lagrangiana per questo problema di ottimizzazione si ottiene

$$\mathcal{L}(x,\lambda) := \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2 + \lambda^T(Bx-d), \qquad \lambda := \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_p \end{bmatrix}$$

Prendendo le derivate rispetto alle variabili x e λ si ottiene

$$\nabla_x\mathcal{L}(x,\lambda) = A^T(Ax-b) + B^T\lambda, \qquad \nabla_\lambda\mathcal{L}(x,\lambda) = Bx - d.$$

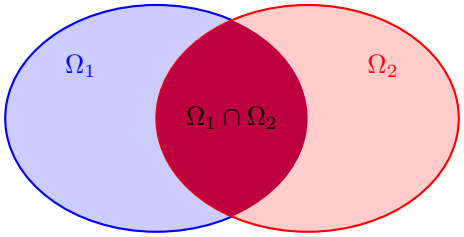
Per trovare il punto stazionario, che è anche un minimo grazie alla convessità di $\Phi(x)$, imponiamo che entrambi i gradienti si annullino, il che produce un sistema lineare con la struttura a blocchi cercata:

$$\begin{bmatrix} A^TA & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^Tb \\ d \end{bmatrix}.$$

7.9.2 Decomposizione di dominio

Quando si ha a che fare con equazioni alle derivate parziali su un dominio Ω, è spesso desiderabile suddividere il dominio in partizioni più piccole, e cercare di relazionare la soluzione sui domini più piccoli con quello più grande. Questo può essere fatto, per esempio, per trattare geometrie complicate, o per ridurre la dimensione del problema e recuperare la soluzione scambiando ripetutamente condizioni al contorno. Questa tecnica è chiamata *decomposizione di dominio*.

Consideriamo, come nella figura seguente, il caso con solo due domini Ω_1, Ω_2:



Se discretizziamo la PDE per differenze finite su una griglia di punti, possiamo ordinare i punti in tre blocchi:

- I punti che appartengono a $\Omega_1 \setminus \Omega_2$;

- I punti che appartengono a $\Omega_2 \setminus \Omega_1$;

- I punti nell'intersezione $\Omega_1 \cap \Omega_2$;

Se facciamo questa scelta e assumiamo di avere a che fare con un operatore differenziale simmetrico e definito (come il Laplaciano), il sistema lineare risultante su $\Omega_1 \cup \Omega_2$ ha la seguente struttura:

$$\begin{bmatrix} A_1 & & B_{12}^T \\ & A_2 & B_{21}^T \\ B_{12} & B_{21} & A_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_{12} \end{bmatrix}.$$

Qui, A_i sono le discretizzazioni dell'operatore sui tre sottoinsiemi, e B_{ij} contengono i termini di accoppiamento che "scambiano" le condizioni al contorno. Chiaramente, questo sistema lineare è ancora in forma saddle point.

7.9.3 Progettazione di un precondizionatore

Essendo A definita positiva, possiamo mostrare che il sistema di saddle point è indefinito. Infatti, possiamo fattorizzarlo per blocchi di Cholesky come segue:

$$S = \begin{bmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ BA^{-1} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & -BA^{-1}B^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & A^{-1}B^T \\ 0 & I \end{bmatrix}$$

Poiché la congruenza preserva la segnatura di una matrice, abbiamo che S ha n autovalori positivi e p autovalori negativi. Quindi, è generalmente indefinito e difficile da trattare (capiremo meglio questo quando considereremo i risolutori di Krylov per sistemi simmetrici).

È naturale chiedere che il precondizionatore per S condivida la stessa struttura a blocchi, e non mescoli i blocchi di righe e colonne; quindi, cerchiamo un precondizionatore della forma

$$M = \begin{bmatrix} M_x & \\ & M_y \end{bmatrix}.$$

Una scelta naturale, date le osservazioni precedenti sullo spettro di S, è prendere il seguente precondizionatore diagonale a blocchi

$$M = \begin{bmatrix} A & \\ & BA^{-1}B^T \end{bmatrix}.$$

Questo è infatti un precondizionatore molto buono, come mostrato dal seguente risultato.

Teorema Sia M come sopra e S il sistema di saddle point. Allora lo spettro del sistema precondizionato a sinistra $M^{-1}S$ è uguale a

$$\Lambda(M^{-1}S) = \left\{ 1, \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2} \right\}.$$

Dimostrazione. Poiché M è invertibile, abbiamo

$$\det(\lambda I - M^{-1}S) = \det(\lambda M - S) \det(M^{-1}).$$

Quindi, possiamo identificare gli autovalori di $M^{-1}S$ semplicemente guardando i punti λ dove $\lambda M - S$ è singolare. Per trovare gli autovalori, imponiamo che $Sv = \lambda Mv$, dove v è un vettore a blocchi non nullo, che produce

$$\begin{bmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} A & \\ & BA^{-1}B^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \iff \begin{bmatrix} (1-\lambda)A & B^T \\ B & -\lambda BA^{-1}B^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = 0$$

Se $\lambda = 1$, allora il blocco in alto a sinistra è zero, e la matrice ha rango al più $2p$; quindi, abbiamo l'autovalore 1 con molteplicità almeno $n - p$. Se $\lambda \neq 1$, il blocco in alto a sinistra è invertibile e possiamo usarlo per eliminare il blocco B sotto, che ci dà

$$L_\lambda(S - \lambda M) = \begin{bmatrix} I & 0 \\ -BA^{-1} & (1-\lambda)I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (1-\lambda)A & B^T \\ B & -\lambda BA^{-1}B^T \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} (1-\lambda)A & B^T \\ 0 & -(1-\lambda)\lambda BA^{-1}B^T - BA^{-1}B^T \end{bmatrix}.$$

Poiché L_λ è invertibile per $\lambda \neq 1$, abbiamo

$$(S - \lambda M)v = 0 \iff L_\lambda(S - \lambda M)v = 0 \iff (\lambda^2 - \lambda - 1)BA^{-1}B^T y = 0.$$

Poiché $BA^{-1}B^T$ è di rango pieno, questo implica $\lambda^2 - \lambda - 1 = 0$, e quindi $\lambda = \frac{1\pm\sqrt{5}}{2}$. □

Poiché lo spettro della matrice precondizionata è composto da soli tre autovalori, abbiamo il seguente risultato.

Corollario Il metodo GMRES applicato al problema di saddle point

$$\begin{bmatrix} A & B^T \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ d \end{bmatrix}$$

e precondizionato con il precondizionatore diagonale a blocchi del Teorema precedente converge in al più 3 passi.

Dimostrazione. È sufficiente considerare $p(\lambda) = (\lambda - 1)(\lambda^2 - \lambda - 1)$, che si annulla valutato in $M^{-1}S$. Infatti, M è simmetrica definita positiva e quindi può essere fattorizzata come $M = LL^T$ e dunque abbiamo

$$L^T M^{-1} S L^{-T} = L^T (L^{-T} L^{-1} S) L^{-T} = L^{-1} S L^{-T};$$

quindi, $M^{-1}S$ è simile a $L^{-1}SL^{-T}$, che ha autovalori reali e semisemplici (essendo congruente con S). Poiché i suoi autovalori sono 1 e $\frac{1\pm\sqrt{5}}{2}$, il polinomio minimo di $M^{-1}S$ divide $p(\lambda)$. □

Sfortunatamente, questo precondizionatore non è veramente pratico: calcolare il blocco $BA^{-1}B^T$ richiede anche più sforzo che risolvere il sistema lineare con l'eliminazione di Gauss a blocchi. Per risolvere un sistema lineare con M, il blocco M_y deve essere noto esplicitamente, quindi questo è solitamente inevitabile. Tuttavia, questo può servire come punto di partenza per progettare precondizionatori che sono più economici da applicare, e tuttavia mantengono buone proprietà di convergenza.

7.10 Problemi simmetrici: Lanczos e il gradiente coniugato

Nel caso simmetrico reale, quando $A = A^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$, la procedura di Arnoldi si semplifica notevolmente. I metodi GMRES e FOM assumono di solito nomi specifici, rispettivamente, MINRES e Gradiente Coniugato (CG).

7.10.1 Iterazione di Lanczos e MINRES

Riscrivendo l'iterazione di Arnoldi quando $A = A^T$ si osserva che $H_\ell = H_\ell^T$, e quindi essa è sia superiore che inferiore di Hessenberg. In altre parole, H_ℓ è *tridagonale*. Per questo motivo, denotiamo la matrice con T_ℓ, e la relazione di Arnoldi (che prende il nome di relazione di Lanczos) assume la forma

$$AV_\ell = V_\ell T_\ell + \beta_\ell v_{\ell+1} e_\ell^T, \qquad T_\ell = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{\ell-1} \\ & & \beta_{\ell-1} & \alpha_\ell \end{bmatrix}.$$

Poiché la parte triangolare superiore di T_ℓ è in gran parte nulla, la maggior parte dei prodotti scalari necessari per proseguire l'iterazione di Arnoldi sono zero. Ciò significa che Av_ℓ è già ortogonale a $v_1, \ldots, v_{\ell-2}$ per costruzione, senza la necessità di una procedura di riortogonalizzazione completa.

Usando questa osservazione, possiamo riformulare l'iterazione come segue:

$$v_1 = b/\beta_0, \quad \beta_0 = \|b\|_2, \quad \beta_\ell v_{\ell+1} = Av_\ell - \alpha_\ell v_\ell - \beta_{\ell-1} v_{\ell-1}.$$

Osserviamo che:

- Dopo ℓ passi, il termine $\beta_{\ell-1}$ è noto dai calcoli precedenti. Per rendere ben definito il primo passo, poniamo $v_0 = 0$.
- α_ℓ è calcolato come $\alpha_\ell = v_\ell^T A v_\ell$, o alternativamente come $\alpha_\ell = v_\ell^T (Av_\ell - \beta_{\ell-1} v_{\ell-1})$. Le due forme sono equivalenti perché $v_\ell^T v_{\ell-1} = 0$, ma la seconda può essere preferita per ragioni di stabilità.
- β_ℓ è determinato calcolando $\beta_\ell := \|Av_\ell - \alpha_\ell v_\ell - \beta_{\ell-1} v_{\ell-1}\|_2$.

Una volta noto T_ℓ è possibile procedere risolvendo il sistema lineare proiettando e minimizzando il residuo, come nel caso GMRES. Questo dà il metodo MINRES. Il costo è ridotto grazie alla struttura speciale di T_ℓ, e questo è il metodo da preferire per problemi simmetrici ma indefiniti.

Tuttavia, quando A è simmetrica e definita positiva (SPD), la stessa proprietà vale per T_ℓ, e questo garantisce l'applicabilità del metodo FOM, che in questo contesto è chiamato Gradiente Coniugato (CG). Risulta che questo metodo è particolarmente interessante nel caso SPD, e merita di essere analizzato in dettaglio.

7.10.2 Il metodo del Gradiente Coniugato

D'ora in avanti, assumiamo che A sia SPD. Ricordiamo che FOM calcola ad ogni passo la soluzione del sistema lineare $T_\ell y_\ell = \|b\|_2 e_1$, e poi questa è usata per definire il vettore soluzione $x_\ell := V_\ell y_\ell$.

Poiché A è SPD, lo stesso vale per T_ℓ per ogni ℓ, grazie al teorema di Courant-Fischer. Infatti gli autovalori di T_ℓ sono contenuti in $[\lambda_{\min}(A), \lambda_{\max}(A)]$. Utilizzando queste osservazioni abbiamo la seguente espressione esplicita per il vettore soluzione al passo ℓ:

$$x_\ell = V_\ell T_\ell^{-1} \begin{bmatrix} \|b\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Mostriamo ora come possiamo riformulare la soluzione collegando x_ℓ e $x_{\ell-1}$. Questo trasformerà il metodo CG in un metodo che, ad ogni passo, aggiorna direttamente il vettore soluzione corrente.

Consideriamo una fattorizzazione LU $T_\ell = L_\ell U_\ell$ senza pivoting. Questa esiste e può essere calcolata stabilmente grazie al fatto che T_ℓ è SPD. Allora

$$T_\ell = L_\ell U_\ell = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ \lambda_1 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_{\ell-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta_1 & \beta_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_{\ell-1} \\ & & & \eta_\ell \end{bmatrix}$$

dove i β_i sono esattamente gli elementi della sopradiagonale e della sottodiagonale di T_ℓ. Leggendo la relazione matriciale sopra abbiamo

$$\lambda_j = \beta_j/\eta_j, \qquad \eta_{j+1} = \alpha_{j+1} - \lambda_j \beta_j, \qquad \eta_1 = \alpha_1.$$

Quindi, la fattorizzazione LU può essere calcolata durante l'iterazione di Lanczos usando queste relazioni di ricorrenza, invece di ricalcolarla da zero ad ogni passo. Osserviamo che x_ℓ può essere riscritto in una forma diversa come

$$x_\ell = \|b\|_2 \frac{V_\ell U_\ell^{-1} L_\ell^{-1} e_1}{\eta_\ell} = \begin{bmatrix} p_1 & \dots & p_\ell \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_\ell \end{bmatrix}.$$

Le colonne di P_ℓ sono ben definite perché U_ℓ e quindi anche U_ℓ^{-1} sono triangolari superiori. Questo ci permette di scrivere x_ℓ come un aggiornamento di $x_{\ell-1}$ come

$$x_\ell = x_{\ell-1} + z_\ell p_\ell$$

Dalla relazione $P_\ell U_\ell = V_\ell$ possiamo derivare l'identità

$$\eta_\ell p_\ell = v_\ell - \beta_{\ell-1} p_{\ell-1}.$$

Vogliamo ora sfruttare la scrittura precedente per aggiornare il vettore soluzione x_ℓ ad ogni passo. Per raggiungere questo obiettivo, abbiamo bisogno di relazioni per ottenere z_ℓ e p_ℓ dalle iterazioni

precedenti. Raggiungeremo questo scopo caratterizzando appropriatamente alcune proprietà di ortogonalità di v_ℓ e p_ℓ. Per i primi vettori, sappiamo già che sono ortogonali rispetto al prodotto scalare canonico. I secondi soddisfano una proprietà di ortogonalità garantita dal seguente risultato.

Teorema I vettori $p_1, \ldots, p_\ell$ sono A-ortogonali, e quindi $P_\ell^T A P_\ell$ è una matrice diagonale

Dimostrazione. Notiamo che possiamo riscrivere $P_\ell^T A P_\ell$ come segue

$$P_\ell^T A P_\ell = U_\ell^{-T} V_\ell^T A V_\ell U_\ell^{-1} = U_\ell^{-T} T_\ell U_\ell^{-1} = U_\ell^{-T} L_\ell.$$

La matrice sopra è triangolare inferiore e, allo stesso tempo, simmetrica, e quindi è diagonale. □

Riassumiamo le informazioni sul metodo CG:

- I residui r_ℓ sono ortogonali (il metodo è l'equivalente simmetrico di FOM).
- I vettori p_ℓ sono A-ortogonali, grazie al Teorema precedente.

Descriviamo ora una sequenza di passi che ci permette di derivare x_ℓ.
Usiamo la notazione $r_\ell = b - Ax_\ell$ per il residuo, poiché questa scelta del segno è la più conveniente. Abbiamo

$$x_\ell = x_{\ell-1} + z_\ell p_\ell \implies r_\ell = r_{\ell-1} - z_\ell A p_\ell$$

Imponendo la condizione di ortogonalità $r_\ell^T r_{\ell-1} = 0$ otteniamo

$$z_\ell = \frac{r_{\ell-1}^T r_{\ell-1}}{r_{\ell-1}^T A p_\ell}$$

che ci permette di calcolare x_ℓ e r_ℓ da $r_{\ell-1}$. La definizione di p_ℓ implica che v_ℓ sia una combinazione lineare di p_ℓ e $p_{\ell-1}$, e quindi lo stesso vale per $r_{\ell-1}$ (grazie alle proprietà di FOM). Fino a un appropriato riscalamento dei vettori p_j, otteniamo

$$p_\ell = r_{\ell-1} + \xi_{\ell-1} p_{\ell-1}$$

e possiamo riscrivere la relazione per z_ℓ come segue

$$z_\ell = \frac{r_{\ell-1}^T r_{\ell-1}}{p_\ell^T A p_\ell}$$

dove abbiamo sfruttato l'A-ortogonalità dei p_j. Notiamo che, formalmente, questa è solo una versione riscalata della relazione precedente, con z_j diversi. Dobbiamo ora determinare i vettori p_ℓ, trovando ξ_ℓ. A questo scopo, usiamo ancora una volta l'equazione precedente per $\ell + 1$, imponendo l'A-ortogonalità con p_ℓ, che fornisce

$$\xi_\ell = -\frac{p_\ell^T A r_\ell}{p_\ell^T A p_\ell} = \frac{1}{z_\ell} \frac{r_\ell^T r_\ell}{p_\ell^T A p_\ell} = \frac{r_\ell^T r_\ell}{r_{\ell-1}^T r_{\ell-1}},$$

dove abbiamo usato la definizione di z_ℓ e la relazione $A p_\ell = \frac{r_{\ell-1} - r_\ell}{z_\ell}$. Combinando queste relazioni, otteniamo la formulazione classica del gradiente coniugato, riportata nell'Algoritmo seguente. Questa è estremamente semplice da implementare e ha eccellenti proprietà numeriche.

$x_0 \leftarrow 0$
$r_0 \leftarrow b$, $p_1 \leftarrow b/\|b\|_2$
for $\ell = 1, \ldots, k$ **do**
    $z_\ell \leftarrow \frac{r_{\ell-1}^T r_{\ell-1}}{p_\ell^T A p_\ell}$
    $x_\ell \leftarrow x_{\ell-1} + z_\ell p_\ell$
    $r_\ell \leftarrow r_{\ell-1} - z_\ell A p_\ell$
    $\xi_\ell \leftarrow \frac{r_\ell^T r_\ell}{r_{\ell-1}^T r_{\ell-1}}$
    $p_{\ell+1} \leftarrow r_\ell + \xi_\ell p_\ell$
    if $\|r_\ell\|_2 \leq \epsilon$ **then**
        return x_ℓ
    end if
end for
return x_k

7.11 CG come metodo di ottimizzazione

Il metodo del gradiente coniugato può essere interpretato come un metodo di ottimizzazione applicato alla funzione obiettivo quadratica

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

Se A è definita positiva, allora la funzione $\Phi(x)$ è convessa e ha un unico minimo globale, che corrisponde al punto critico dove il gradiente $\nabla\Phi(x) = x^T A - b^T$ si annulla, ovvero la soluzione del sistema lineare.

Poiché A è SPD, possiamo definire una norma indotta dal prodotto scalare associato a A: $\|x\|_A := \sqrt{x^T A x}$. L'iterazione del gradiente coniugato ha la proprietà di minimizzare l'errore rispetto a questa norma ad ogni passo.

Teorema La soluzione approssimata x_ℓ data dal metodo del gradiente coniugato al passo ℓ minimizza l'errore rispetto alla norma $\|\cdot\|_A$ su $K_\ell(A, b)$, cioè

$$x_\ell = \arg \min_{\tilde{x} \in \mathcal{K}_\ell(A,b)} \|\tilde{x} - x\|_A.$$

Dimostrazione. Affinché questa condizione sia verificata, è sufficiente verificare che il gradiente di $\Psi(\tilde{x}) = (\tilde{x} - x)^T A (\tilde{x} - x)$ sia ortogonale allo spazio di ricerca $\mathcal{K}_\ell(A, b)$, dove x è la soluzione esatta del sistema lineare. Possiamo scrivere

$$\nabla\Psi(\tilde{x}) = 2(\tilde{x} - x)^T A = 2(\tilde{x}^T A - b^T),$$

che è ortogonale a $\mathcal{K}_\ell(A, b)$ se e solo se $\tilde{x} = x_\ell$, grazie alla proprietà di ortogonalità del residuo del CG. □

Il risultato precedente ci permette di enunciare un teorema in termini dell'errore, e rispetto a $\|\cdot\|_A$. Possiamo ancora ottenere una caratterizzazione del residuo, ma rispetto a $\|\cdot\|_{A^{-1}}$

Teorema La soluzione x_ℓ data dal passo ℓ del CG soddisfa

$$\|x - x_\ell\|_A = \|b - Ax_\ell\|_{A^{-1}} = \min_{\substack{p \in P_\ell \\ p(0)=1}} \|p(A)b\|_{A^{-1}}.$$

Dimostrazione. Notiamo che la norma A dell'errore al passo ℓ può essere scritta come segue

$$\|x - x_\ell\|_A^2 = (A^{-1}b - q(A)b)^T A(A^{-1}b - q(A)b) = b^T(I - Aq(A))A^{-1}(I - Aq(A))b = \|p(A)b\|_{A^{-1}}^2$$

dove abbiamo usato $x_\ell = q(A)b$ e $p(x) = 1 - xq(x)$. Concludiamo che CG minimizza la norma $\|\cdot\|_{A^{-1}}$ del residuo rispetto a tutti i polinomi di grado ℓ con termine costante uguale a 1. Si verifica facilmente che vale

$$\|Ax_\ell - b\|_{A^{-1}} = \|x_\ell - x\|_A$$

che dà anche la seconda parte della tesi. □

La derivazione del CG può essere presentata in modo diverso costruendo un metodo di discesa del gradiente che ottimizza $\Phi(x)$, e poi imponendo l'A-ortogonalità delle direzioni di discesa p_ℓ. Questa è stata la derivazione storica del metodo, e la ragione per cui chiamiamo p_ℓ direzioni di discesa e z_ℓ lunghezza del passo. Tuttavia, la presentazione come metodo di Krylov permette dimostrazioni di convergenza molto più facili.

Osservazione È utile sottolineare ancora una volta il vantaggio nell'ambito simmetrico: la soluzione del sistema lineare non richiede di memorizzare l'intera base V_ℓ, grazie alla relazione di ricorrenza corta. Questo può fare un'enorme differenza per problemi di grandi dimensioni, per evitare problemi di memoria. Problemi non simmetrici di dimensioni simili possono essere gestiti solo con tecniche di restart quando si usa GMRES, il che può degradare la convergenza del metodo.

7.12 Caratterizzazione della convergenza

Comprendere la convergenza di GMRES in modo esplicito non è banale, in particolare per matrici lontane dall'essere normali. Per il metodo del gradiente coniugato possiamo esplicitamente stabilire un legame tra la velocità di convergenza e il numero di condizionamento di A. Riportiamo il seguente risultato senza dimostrazione.

Teorema Sia A una matrice SPD reale, e x_ℓ la sequenza di soluzioni approssimate costruita da CG per $Ax = b$. Allora vale

$$\|x - x_\ell\|_A \leq 2\left(\frac{\sqrt{\kappa_2(A)} - 1}{\sqrt{\kappa_2(A)} + 1}\right)^\ell \|x\|_A$$

7.13 Precondizionamento nel caso simmetrico

Analogamente a GMRES, il precondizionamento è spesso essenziale per rendere CG pratico. Se il problema originale ha un numero di condizionamento elevato, allora l'iterazione standard è destinata a convergere lentamente. Tuttavia, anche supponendo che sia disponibile un buon precondizionatore M tale che $M^{-1}A \approx I$, non può essere applicato così com'è, poiché porterebbe alla perdita della struttura simmetrica.

Facciamo ora l'ipotesi ragionevole che il precondizionatore scelto M sia simmetrico e definito positivo. Allora, possiamo trovare una matrice L tale che $M = LL^T$, che è la sua fattorizzazione di Cholesky.

Invece di applicare M come precondizionatore sinistro o destro, possiamo usare il suo fattore di Cholesky per suddividerlo in modo simmetrico, e considerare il sistema lineare equivalente

$$Ax = b \iff L^{-1}AL^{-T}L^T x = L^{-1}b.$$

La matrice $L^{-1}AL^{-T}$ è la matrice precondizionata, ed è ancora simmetrica e definita positiva. Se $M^{-1}A \approx I$, lo stesso vale per $L^{-1}AL^{-T}$.

In linea di principio, questo approccio funziona esattamente come il precondizionamento standard per GMRES. Tuttavia, facciamo la seguente osservazione. Anche se $M^{-1}A$ non è simmetrica, è autoaggiunta rispetto a un prodotto scalare non standard, quello indotto da M. Infatti, abbiamo per ogni coppia di vettori v, w

$$\langle M^{-1}Aw, v\rangle_M = w^T(M^{-1}A)^T Mv = w^T AM^{-T}Mv = w^T Av = w^T MM^{-1}Av = \langle w, M^{-1}Av\rangle_M.$$

Useremo ora questa idea per evitare di coinvolgere esplicitamente il fattore di Cholesky —che sarebbe spesso costoso da calcolare— e finire per lavorare solo con la matrice M.

Riscriviamo ora il CG per la matrice $L^{-1}AL^{-T}$, con vettore iniziale $L^{-1}b$. Abbiamo i seguenti aggiornamenti, secondo l'Algoritmo precedente

$$\begin{aligned}
z_\ell &\leftarrow (r_{\ell-1}^T r_{\ell-1})/(p_\ell^T L^{-1}AL^{-T}p_\ell)\\
x_\ell &\leftarrow x_{\ell-1} + z_\ell p_\ell\\
r_\ell &\leftarrow r_{\ell-1} - z_\ell L^{-1}AL^{-T}p_\ell\\
\xi_\ell &\leftarrow (r_\ell^T r_\ell)/(r_{\ell-1}^T r_{\ell-1})\\
p_{\ell+1} &\leftarrow r_\ell + \xi_\ell p_\ell
\end{aligned}$$

Questo metodo modificato non calcolerebbe la soluzione x, ma invece $L^T x$. Quindi, è ragionevole premoltiplicare gli x_ℓ per L^{-T}, per assicurarsi che il limite finale sia la soluzione cercata. Ponendo $\tilde{x}_\ell := L^{-T}x_\ell$, $\tilde{p}_\ell := L^{-T}p_\ell$, otteniamo

$$\begin{aligned}
z_\ell &\leftarrow (r_{\ell-1}^T r_{\ell-1})/(\tilde{p}_\ell^T A\tilde{p}_\ell)\\
\tilde{x}_\ell &\leftarrow \tilde{x}_{\ell-1} + z_\ell \tilde{p}_\ell\\
r_\ell &\leftarrow r_{\ell-1} - z_\ell L^{-1}A\tilde{p}_\ell\\
\xi_\ell &\leftarrow (r_\ell^T r_\ell)/(r_{\ell-1}^T r_{\ell-1})\\
\tilde{p}_{\ell+1} &\leftarrow L^{-T}r_\ell + \xi_\ell \tilde{p}_\ell
\end{aligned}$$

Abbiamo ancora due apparizioni di L, che possiamo rimuovere definendo un residuo precondizionato $\tilde{r}_\ell := L^{-T} r_\ell$, che infine dà equazioni che coinvolgono solo A e M:

$$\begin{aligned}
z_\ell &\leftarrow (\tilde{r}_{\ell-1}^T M \tilde{r}_{\ell-1})/(\tilde{p}_\ell^T A \tilde{p}_\ell) \\
\tilde{x}_\ell &\leftarrow \tilde{x}_{\ell-1} + z_\ell \tilde{p}_\ell \\
\tilde{r}_\ell &\leftarrow \tilde{r}_{\ell-1} - z_\ell M^{-1} A \tilde{p}_\ell \\
\xi_\ell &\leftarrow (\tilde{r}_\ell^T M \tilde{r}_\ell)/(\tilde{r}_{\ell-1}^T M \tilde{r}_{\ell-1}) \\
\tilde{p}_{\ell+1} &\leftarrow \tilde{r}_\ell + \xi_\ell \tilde{p}_\ell
\end{aligned}$$

Questa idea può essere usata con alcune varianti per implementare il CG precondizionato senza la necessità di determinare esplicitamente L. L'iterazione può infatti essere interpretata come un'iterazione CG con un prodotto scalare non standard, quello indotto da M.

7.14 Calcolo di autovalori e autovettori con Arnoldi

I metodi di Krylov considerati nelle sezioni precedenti permettono di risolvere sistemi lineari di larga scala; tuttavia, possono essere adattati al calcolo di autovalori selezionati per matrici di grandi dimensioni.

Chiaramente, ogni volta che A è grande, non c'è speranza di calcolare tutti gli autovalori a basso costo (in generale). Come nell'ambito della soluzione di un sistema lineare, assumiamo di conoscere A implicitamente mediante la sua azione come prodotto matrice-vettore. Allora, possiamo considerare il seguente prototipo di algoritmo:

- Per ℓ crescenti, eseguiamo l'iterazione di Arnoldi e costruiamo una sequenza di matrici di Hessenberg superiori $H_1, H_2, \ldots, H_\ell$.
- Per ognuna di queste, calcoliamo autovalori e autovettori.

Gli autovalori di H_ℓ sono chiamati *valori di Ritz*, e gli autovettori *vettori di Ritz*. Affermiamo che tali autovalori sono approssimazioni di (alcuni) autovalori della matrice grande A. Infatti, risulta che H_ℓ risolve un problema di minimizzazione che assomiglia a quello per GMRES o CG.

Prima di dare il risultato formale dimostriamo il seguente Lemma.

Lemma Sia $q(z)$ un qualsiasi polinomio di grado $k \leq \ell$ e $AV_\ell = V_\ell H_\ell + h_{\ell+1,\ell} v_{\ell+1} e_\ell^T$ la relazione di Arnoldi senza breakdown con vettore iniziale b. Allora, abbiamo

$$q(A)b = \begin{cases} V_\ell q(H_\ell) e_1 \|b\|_2 & \text{se } k < \ell \\ V_\ell q(H_\ell) e_1 \|b\|_2 + q_\ell h_{\ell+1,\ell} v_{\ell+1} e_\ell^T H_\ell^{\ell-1} e_1 \|b\|_2 & \text{se } k = \ell. \end{cases}$$

Dimostrazione. Usando la linearità di $q(z)$ come somma di monomi, possiamo ridurre l'enunciato a dimostrare che, per ogni $k < \ell$, vale la seguente identità:

$$A^k b = V_\ell H_\ell^k e_1 \|b\|_2.$$

Usando ripetutamente la relazione di Arnoldi su $A^k b = A^k V_\ell e_1 \|b\|_2$ otteniamo

$$
\begin{aligned}
A^k b = A^k V_\ell e_1 \|b\|_2 &= \left(A^{k-1} V_\ell H_\ell + h_{\ell+1,\ell} A^{k-1} v_{\ell+1} e_\ell^T\right) e_1 \|b\|_2 \\
&= \left(A^{k-2} V_\ell H_\ell^2 + h_{\ell+1,\ell} A^{k-2} v_{\ell+1} e_\ell^T H_\ell + h_{\ell+1,\ell} A^{k-1} v_{\ell+1} e_\ell^T\right) e_1 \|b\|_2 \\
&\vdots \\
&= \left(V_\ell H_\ell^k + h_{\ell+1,\ell} \sum_{i=0}^{k-1} A^i v_{\ell+1} e_\ell^T H_\ell^{k-i-1}\right) e_1 \|b\|_2.
\end{aligned}
$$

Ora notiamo che $e_\ell^T H_\ell^{k-i-1}$ ha al massimo le ultime $k-i$ entrate diverse da zero, e poiché abbiamo assunto che $k < \ell$, questo implica che $e_\ell^T H_\ell^{k-i-1} e_1 = 0$ per tutti $i = 0, \ldots, k-1$.

Quindi, il risultato segue espandendo l'ultima uguaglianza. □

Teorema Sia H_ℓ la matrice di Hessenberg superiore dal processo di Arnoldi per A senza breakdown, partendo da un vettore iniziale b. Allora, il polinomio caratteristico $p(\lambda) = \det(\lambda I - H_\ell)$ soddisfa il seguente problema di minimizzazione:

$$
\min_{\substack{p \in \mathcal{P}_\ell \\ p_\ell = 1}} \|p(A)b\|_2.
$$

Dimostrazione. Il problema di minimizzazione può essere riscritto in forma di minimi quadrati vincolati

$$
\min_{\substack{p \in \mathcal{P}_\ell \\ p_\ell = 1}} \|p(A)b\|_2 = \min_{y \in \mathbb{R}^\ell} \|A^\ell b - V_\ell y\|_2.
$$

Nell'identità sopra, stiamo usando che $p(A)b$ ha la forma $A^\ell b + q(A)b$ dove $q(x)$ è un qualsiasi polinomio di grado al massimo $\ell - 1$, e le due caratterizzazioni equivalenti affinché un vettore appartenga a un sottospazio di Krylov:

$$
v \in \mathcal{K}_\ell(A, b) \iff v = V_\ell y \text{ per qualche } y \iff v = q(A)b \text{ per qualche } q(x) \text{ con grado al max } \ell - 1.
$$

Quindi, la condizione di ottimalità può essere imposta richiedendo l'ortogonalità $p(A)b \perp \mathcal{K}_\ell(A, b)$. Poiché $p(A)b \in \mathcal{K}_{\ell+1}(A, b)$, possiamo riscrivere questa condizione come segue, per $j = 1, \ldots, \ell$

$$
v_j^* p(A)b = 0 \iff v_j^* V_\ell p(H_\ell) e_1 \|b\|_2 = 0,
$$

dove abbiamo usato il Lemma precedente e il fatto che $v_j^* v_{\ell+1} = 0$.

Poiché $v_j^* V_\ell = e_j^*$, otteniamo

$$
p(A)b \perp \mathcal{K}_\ell(A, b) \iff e_j^* p(H_\ell) e_1 = 0, \qquad j = 1, \ldots, \ell.
$$

Grazie al teorema di Hamilton-Cayley, se $p(z)$ è il polinomio caratteristico di H_ℓ, allora $p(H_\ell) = 0$, il che permette di concludere. □

Il Teorema precedente fornisce alcune informazioni sugli autovalori approssimati calcolati dall'iterazione di Arnoldi. I valori di Ritz definiscono implicitamente il polinomio caratteristico di H_ℓ, che approssima quello di A nel senso di Hamilton-Cayley: anche se non è possibile avere $p(A) \equiv 0$ (a causa del grado inferiore), cerchiamo almeno di renderlo il più piccolo possibile.

Facciamo allora alcune osservazioni:

- I valori di Ritz sono invarianti per traslazioni e scalatura, nel senso che il processo applicato a $\mu A + \eta I$ produce valori di Ritz scalati e traslati con gli stessi fattori.
- È ragionevole supporre che gli autovalori più grandi (in modulo) siano approssimati bene: i loro fattori lineari nei polinomi caratteristici sono quelli che contribuiscono di più a rendere piccolo $p(A)$.
- Se b vive in un sottospazio invariante, solo lo spettro di A ristretto a quel sottospazio invariante può essere determinato attraverso questo metodo.

La costruzione permette anche di approssimare autovalori in regioni particolari dello spettro, ad esempio vicino a un certo punto σ, sostituendo A con $(A-\sigma I)^{-1}$; queste due matrici hanno gli stessi autovettori, e la seconda ha autovalori della forma $(\lambda_i - \sigma)^{-1}$. Questi sono grandi se e solo se λ_i è vicino a σ. Questa idea è nota come *Iterazione di Arnoldi Inversa*, o *Arnoldi con shift-and-invert*.

8 Risolutori diretti sparsi per sistemi lineari simmetrici definiti positivi

Nel contesto della risoluzione di sistemi lineari con metodi iterativi basati sui sottospazi di Krylov, abbiamo visto che è cruciale avere sotto controllo il condizionamento del problema o avere a disposizione un buon precondizionatore. Tuttavia, il precondizionamento spesso richiede intuizioni aggiuntive sul problema in esame.

D'altra parte, molti sistemi lineari mal condizionati provenienti dalla discretizzazione di PDE sono altamente sparsi, cioè la matrice dei coefficienti ha solo $\mathcal{O}(n)$ elementi non nulli. Come vedremo in questa sezione, la sparsità può talvolta essere sfruttata per progettare metodi diretti efficienti. I cosiddetti *risolutori diretti sparsi* sono basati su opportune modifiche della fattorizzazione LU/Cholesky, cercando di minimizzare la quantità di memoria e operazioni richieste. Tali metodi basati sulla fattorizzazione sono possibili solo per una matrice sparsa A data esplicitamente e il loro successo dipende in modo complicato dal pattern di sparsità. Tuttavia, questi metodi possono essere molto efficaci e rappresentano i metodi di scelta per trattare discretizzazioni per differenze finite (FD) e elementi finiti (FE) di PDE 2D. In queste note ci limitiamo al caso in cui A è simmetrica definita positiva; questa ipotesi semplifica la discussione ed evita la necessità di pivoting per garantire la stabilità numerica. Il caso generale è al di là dello scopo di questo corso poiché è più complicato.

8.1 Fattorizzazione di Cholesky per matrici definite positive

Iniziamo dimostrando che ogni matrice simmetrica definita positiva ammette un analogo simmetrico della decomposizione LU, noto come decomposizione di Cholesky.

Lemma $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ è simmetrica definita positiva se e solo se esiste una matrice triangolare inferiore invertibile $L \in \mathbb{R}^{n\times n}$ tale che $A = LL^T$.

Dimostrazione. Se $A = LL^T$ allora A è chiaramente simmetrica e per ogni $x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ abbiamo

$$x^T Ax = x^T LL^T x = \|L^T x\|_2^2 > 0.$$

Per l'altra implicazione, procediamo per induzione su n. Per $n = 1$, A è un numero reale positivo e la tesi segue scegliendo L come la sua radice quadrata. Per $n > 1$, osserviamo che la matrice simmetrica definita positiva A può essere fattorizzata come

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_1^T \\ a_1 & A_{22} \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \sqrt{a_{11}} & \\ \frac{a_1}{\sqrt{a_{11}}} & I_{n-1} \end{bmatrix}}_{L_1} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & A_{22} - \frac{a_1 a_1^T}{a_{11}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{a_{11}} & \frac{a_1^T}{\sqrt{a_{11}}} \\ 0 & I_{n-1} \end{bmatrix} \tag{8.1}$$

dove $A_{22} - \frac{a_1 a_1^T}{a_{11}} \in \mathbb{R}^{(n-1)\times(n-1)}$ è ancora simmetrica e definita positiva poiché può essere vista come una sottomatrice principale di $L_1^{-1} A L_1^{-T}$, che è simmetrica e definita positiva. Usando il passo induttivo, possiamo affermare che $A_{22} - \frac{a_1 a_1^T}{a_{11}} = L_2 L_2^T$ per una certa matrice triangolare inferiore L_2. Quindi, concludiamo scrivendo

$$A = L_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & L_2 L_2^T \end{bmatrix} L_1^T = L_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & L_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & L_2^T \end{bmatrix} L_1^T$$

e ponendo $L = L_1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & L_2 \end{bmatrix}$ □

Definizione La matrice L e il prodotto LL^T del Lemma sono detti rispettivamente *fattore di Cholesky* e *fattorizzazione di Cholesky* di A.

Ripetendo iterativamente il passo principale nella dimostrazione del Lemma, cioè l'equazione (8.1), si arriva all'Algoritmo per il calcolo della fattorizzazione di Cholesky. La funzione Matlab che implementa questo algoritmo (e alcune procedure ottimizzate quando si fornisce una matrice sparsa in input) è `chol`. Tentare di calcolare la fattorizzazione di Cholesky risulta anche essere il modo migliore per verificare se una data matrice simmetrica è definita positiva; in caso di un argomento non definito positivo si incontra un elemento diagonale negativo durante il processo.

```
1: procedure CHOL(A)
2:     for i = 1, ..., n do
3:         l_ii = √a_ii
4:         if i < n then
5:             l_{i+1:n,i} = a_{i+1:n,i} / l_ii
6:             a_{i+1:n,i+1:n} ← a_{i+1:n,i+1:n} − l_{i+1:n,i} l_{i+1:n,i}^T
7:         end if
8:     end for
9:     return L = (l_ij)
10: end procedure
```

8.2 Sparsità e fattorizzazione di Cholesky

Una domanda naturale è se una matrice sparsa simmetrica definita positiva A abbia un fattore di Cholesky L sparso. In generale, il fattore di Cholesky non erediterà il pattern di sparsità della matrice A. L'ordinamento della matrice può avere un impatto tremendo sulla sparsità del suo fattore di Cholesky. Questo effetto è ben catturato dal cosiddetto *envelope* della matrice A.

Definizione Sia $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, chiamiamo *envelope* di A il sottoinsieme di indici di posizioni definito come

$$\text{env}(A) = \{(i,j) : \ J_i(A) \le j \le i\}, \qquad J_i(A) := \min\{j : \ a_{ij} \neq 0\}.$$

Teorema Sia $A = LL^T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ una matrice simmetrica definita positiva, allora

$$(i,j) \notin \text{env}(A) \quad \Rightarrow \quad l_{ij} = 0.$$

Dimostrazione. Procediamo per induzione su n. Per $n = 1$ l'affermazione è banalmente vera. Per $n > 1$, guardando l'Algoritmo vediamo che $l_{.,1}$ ha gli stessi elementi non nulli di $a_{.,1}$. Inoltre, osserviamo che

$$a_{h1} = 0 \quad \Rightarrow \quad J_h(A_{22} - \frac{a_1 a_1^T}{a_{11}}) = J_h(A_{22}).$$

Usando il passo induttivo abbiamo che

$$L = \begin{bmatrix} \sqrt{a_{11}} & \\ \frac{a_1}{\sqrt{a_{11}}} & L_2 \end{bmatrix}, \qquad L_2 L_2^T = A_{22} - \frac{a_1 a_1^T}{a_{11}},$$

dove $J_h(L_2) \ge J_h(A_{22})$, per tutti gli h tali che $a_{h,1} = 0$. Quest'ultimo implica $\text{env}(L) \subseteq \text{env}(A)$ che è equivalente all'affermazione. □

8.3 Fill-in e concetti base dalla teoria dei grafi

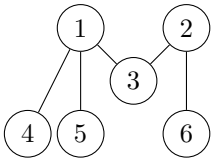
Data una fattorizzazione di Cholesky $A = LL^T$, gli indici (i,j) che soddisfano $l_{ij} \neq 0$ ma $a_{ij} = 0$ sono chiamati fill-in. Dal Teorema sappiamo già che il fill-in può avvenire solo all'interno dell'*envelope* di A. A livello di matrice, un riordinamento che preserva la simmetria delle colonne e righe di A corrisponde a $P^T AP$ con una matrice di permutazione P. È concettualmente più semplice esprimere un tale riordinamento e il suo effetto sul pattern di sparsità in termini del grafo associato. Data una matrice simmetrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, definiamo un grafo non orientato $G = (V, E)$ con vertici $V = \{v_1, \ldots, v_n\}$ e

$$(v_i, v_j) \in E \quad \Leftrightarrow \quad a_{ij} \neq 0.$$

Allora $P^T AP$ corrisponde semplicemente a una rinumerazione dei vertici. Studieremo ora l'effetto dell'Algoritmo sui grafi associati alle matrici generate durante la fattorizzazione.

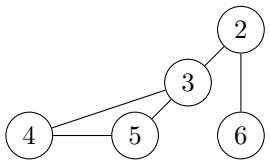
Esempio Sia $A \in \mathbb{R}^{6\times 6}$ con il seguente pattern di sparsità:

$$\begin{bmatrix} \times & 0 & \times & \times & \times & 0 \\ 0 & \times & \times & 0 & 0 & \times \\ \times & \times & \times & 0 & 0 & 0 \\ \times & 0 & 0 & \times & 0 & 0 \\ \times & 0 & 0 & 0 & \times & 0 \\ 0 & \times & 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix}$$



In termini di grafo, il primo passo dell'Algoritmo corrisponde a introdurre archi tra vertici che sono indirettamente connessi da un percorso di lunghezza 2 attraverso v_1. Successivamente, tutti gli archi attaccati a v_1 e il vertice v_1 stesso sono eliminati:

$$\begin{bmatrix} \times & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \times & \times & 0 & 0 & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times & 0 \\ 0 & 0 & \times & \times & \times & 0 \\ 0 & 0 & \times & \times & \times & 0 \\ 0 & \times & 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix}$$



La costruzione nell'esempio sopra può essere facilmente generalizzata. Sia $G^{(1)}$ il grafo associato a A. Più in generale, sia $G^{(k)}$ il grafo associato alla sottomatrice $A^{(k)}_{k:n,k:n}$ prima che il k-esimo passo dell'Algoritmo sia eseguito. Allora $G^{(k+1)}$ è ottenuto da $G^{(k)}$ introducendo archi tra vertici che sono indirettamente connessi da un percorso di lunghezza 2 attraverso v_k, e poi eliminando v_k insieme ai suoi archi attaccati. Il requisito di memoria per memorizzare il fattore di Cholesky L è quindi dato da

$$n + \sum_{k=1}^{n-1} \deg_{G^{(k)}}(v_k),$$

dove il grado deg di un vertice è definito come il numero di archi attaccati.

8.4 Strategie di ordinamento

Gli algoritmi per fattorizzare una matrice sparsa tipicamente consistono di due fasi. Nella prima fase, il pattern di sparsità di A è analizzato e un opportuno riordinamento mirato a un fill-in ridotto è calcolato (questo è spesso riferito come *fase simbolica*). La seconda fase consiste di un'implementazione sofisticata dell'Algoritmo di questo capitolo, limitando la sua memorizzazione e i calcoli al pattern di sparsità predetto di L. Nel seguito, discutiamo tre strategie piuttosto diverse per la prima fase: Reverse Cuthill-McKee, grado minimo approssimato, e dissociazione annidata.

8.4.1 Reverse Cuthill-McKee

Il Cuthill-McKee (CM) e il Reverse Cuthill-McKee (RCM) mirano a minimizzare la banda di una matrice sparsa in modo euristico. Per raggiungere questo obiettivo, viene prodotto un ordinamento in cui vertici vicini ottengono posizioni vicine.

8.4.2 Approximate Minimum Degree

Mentre RCM è economico e ancora piuttosto popolare, il riordinamento ottenuto è generalmente lontano dall'essere ottimale. Un problema con RCM è che mira a minimizzare la banda, mentre l'obiettivo finale è minimizzare il fill-in e non la banda. Entrambi i problemi di minimizzazione sono NP-hard. L'Algoritmo è piuttosto costoso, in particolare a causa della necessità di valutare i gradi di tutti i vertici in $G^{(k)}$. È stata sviluppata un'alternativa più economica e quasi altrettanto efficace, chiamata *Approximate Minimum Degree* (AMD). È disponibile nel comando Matlab `symamd`.

8.4.3 Nested Dissection

Un separatore di grafo S per un grafo non orientato G partiziona l'insieme dei vertici V in tre insiemi disgiunti

$$V = V_1 \cup V_2 \cup S,$$

tali che non esistono archi che colleghino vertici in V_1 con vertici in V_2. Se usiamo una numerazione tale per cui i vertici in V_1 appaiono per primi, poi i vertici in V_2, e infine i vertici in S, questo significa che la matrice assume la forma

$$A = \begin{bmatrix} A_{V_1,V_1} & 0 & A_{V_1,S} \\ 0 & A_{V_2,V_2} & A_{V_2,S} \\ A_{S,V_1} & A_{S,V_2} & A_{S,S} \end{bmatrix}$$

Per il Teorema precedente, il fattore di Cholesky erediterà il blocco extra-diagonale nullo. La cardinalità del separatore S dovrebbe essere piccola e preferibilmente le cardinalità di V_1 e V_2 dovrebbero essere bilanciate. Applicando ricorsivamente la rappresentazione sopra si ottiene un ulteriore Algoritmo, che seleziona un separatore "buono". Questo è relativamente facile per problemi dove la geometria sottostante è nota, per esempio nelle discretizzazioni EF di EDP in 2D o 3D.

9 Funzioni di Matrici

Insieme ai sistemi lineari e ai problemi agli autovalori, la valutazione di funzioni di matrici è un argomento sempre presente nell'algebra lineare numerica. In effetti, molte applicazioni riguardano il problema di valutare una funzione di matrice o una funzione di matrice moltiplicata per un vettore. Per esempio, la soluzione di un sistema di equazioni differenziali lineari a coefficienti costanti della forma

$$\begin{cases} \dot{u}(t) = Au(t) \\ u(0) = u_0 \in \mathbb{R}^n \end{cases}, \qquad A \in \mathbb{R}^{n\times n},$$

è data in termini dell'esponenziale di matrice come $u(t) = e^{tA}u_0$. Altri esempi di funzioni di interesse sono

$$-\log(A) \quad -\sqrt{A} \quad -A^\alpha \ \alpha \in (0,1) \quad -\operatorname{sign}(A)$$

Questa sezione intende essere una breve escursione intorno alle definizioni rigorose di funzioni di matrici e ai metodi per il loro calcolo.

9.1 Definizioni equivalenti di $f(A)$

Data una matrice quadrata $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ e una funzione scalare $f : \Omega \to \mathbb{C}$ con $\Omega \subseteq \mathbb{C}$, la funzione di matrice $f(A)$ è ancora una matrice $n \times n$. Quando $f \equiv p$ risulta essere un polinomio

$$p(z) = p_0 + p_1 z + \cdots + p_m z^m$$

possiamo definire la funzione di matrice $p(A)$ semplicemente sostituendo z con A:

$$p(A) = p_0 I + p_1 A + \cdots + p_m A^m,$$

dove la potenza A^j indica la moltiplicazione di A per se stessa j volte. Possiamo estendere questa definizione a funzioni analitiche su tutto $\mathbb{C}$, sostituendo A nella loro espansione in serie:

$$f(z) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j z^j \quad \Rightarrow \quad f(A) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j A^j.$$

Tuttavia, desideriamo una definizione che non richieda analiticità sull'intero piano complesso e che fornisca anche un'idea su come calcolare o approssimare $f(A)$. Inoltre, vorremmo preservare due proprietà che valgono nel caso polinomiale:

(i) Gli autovalori di $f(A)$ sono $f(\lambda_j)$ (dove λ_j sono gli autovalori di A)

(ii) Gli autovettori di $f(A)$ coincidono con quelli di A.

Alla luce delle proprietà desiderate, nel seguito assumeremo sempre che f sia analitica su Ω e che $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ contenga gli autovalori di A. Si noti che, quando A è diagonalizzabile, le proprietà (i) e (ii) determinano già l'espressione di $f(A)$; infatti, se $A = VDV^{-1}$ con $D = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$, allora $f(A)$ è necessariamente data da

$$f(A) = Vf(D)V^{-1} \qquad f(D) = \begin{bmatrix} f(\lambda_1) & & \\ & \ddots & \\ & & f(\lambda_n) \end{bmatrix} \tag{9.1}$$

Nel caso non diagonalizzabile, le cose sono leggermente più complicate ed è istruttivo osservare il comportamento delle funzioni più semplici, cioè le potenze z^j, applicate alla matrice non diagonalizzabile più semplice, cioè il blocco di Jordan. Calcoli diretti mostrano che

$$A = \begin{bmatrix} \lambda & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda & 1 \\ & & & \lambda \end{bmatrix}, \quad A^2 = \begin{bmatrix} \lambda^2 & 2\lambda & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & \ddots & 2\lambda \\ & & & & \lambda^2 \end{bmatrix}, \quad A^3 = \begin{bmatrix} \lambda^3 & 3\lambda^2 & 3\lambda & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 & \\ & & & \ddots & \ddots & 3\lambda \\ & & & & \ddots & 3\lambda^2 \\ & & & & & \lambda^3 \end{bmatrix}$$

e questo suggerisce la seguente definizione.

Definizione (Forma canonica di Jordan) Sia $A = VJV^{-1}$, con $J = \mathrm{diag}(J_1, \ldots, J_s)$ la forma canonica di Jordan di $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$. Allora si definisce $f(A) := Vf(J)V^{-1}$ dove

$$f(J) = \begin{bmatrix} f(J_1) & & \\ & \ddots & \\ & & f(J_s) \end{bmatrix}$$

e se J_i è un blocco di Jordan $h \times h$ associato all'autovalore λ, allora

$$f(J_i) := \begin{bmatrix} f(\lambda) & f'(\lambda) & \cdots & \frac{f^{(h-1)}(\lambda)}{(h-1)!} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & f'(\lambda) \\ & & & f(\lambda) \end{bmatrix}.$$

Osserviamo che la definizione sopra si basa unicamente sulla valutazione della funzione f e di alcune sue derivate negli autovalori di A; più precisamente, due funzioni che coincidono sugli autovalori di A, fino al numero opportuno di derivate, producono la stessa funzione di matrice, quando applicate a A. Ciò ispira una definizione alternativa basata sull'approssimazione polinomiale di Hermite della funzione f.

Definizione (Interpolante di Hermite). Sia $\mathrm{ind}_{\lambda_i}(A)$ la dimensione del più grande blocco di Jordan associato all'autovalore λ_i della matrice A. Allora, definiamo $f(A) = q(A)$ dove $q(z)$ è il polinomio di Hermite di $f(z)$ che verifica

$$\frac{d^j q}{dz^j}(\lambda_i) = \frac{d^j f}{dz^j}(\lambda_i), \quad j = 0, \ldots, \mathrm{ind}_{\lambda_i}(A),$$

per ogni autovalore λ_i di A.

Osservazione Si noti che, nella definizione sopra, il polinomio cambia ogni volta che cambia la matrice argomento A. In particolare, non stiamo affermando che la funzione di matrice associata a f sia un polinomio di matrice.

Esercizio Sfruttando il fatto che $f(A)$ coincide con la valutazione di un certo polinomio di matrice in A, dimostrare che per ogni matrice invertibile $S \in \mathbb{C}^{n\times n}$ si ha $S^{-1}f(A)S = f(S^{-1}AS)$.

Soluzione Per definizione, $f(A) = q(A)$ dove q è il polinomio di Hermite che interpola f e le sue derivate sugli autovalori di A. Poiché q è un polinomio, possiamo scrivere $q(z) = \sum_{k=0}^{m} a_k z^k$ per opportuni coefficienti $a_k \in \mathbb{C}$. Quindi

$$S^{-1}f(A)S = S^{-1}q(A)S = S^{-1}\left(\sum_{k=0}^{m} a_k A^k\right) S = \sum_{k=0}^{m} a_k S^{-1}A^k S.$$

Osserviamo che $S^{-1}A^kS = (S^{-1}AS)^k$ per ogni $k \geq 0$. Pertanto:

$$S^{-1}f(A)S = \sum_{k=0}^{m} a_k (S^{-1}AS)^k = q(S^{-1}AS).$$

Ora, il polinomio q interpola f (e le sue derivate) sugli autovalori di A. Poiché la trasformazione di similitudine $S^{-1}AS$ ha gli stessi autovalori di A (con le stesse molteplicità e dimensioni dei blocchi di Jordan), il polinomio q è anche il polinomio di Hermite che interpola f sugli autovalori di $S^{-1}AS$. Quindi, per definizione, $f(S^{-1}AS) = q(S^{-1}AS)$. Concludiamo che

$$S^{-1}f(A)S = q(S^{-1}AS) = f(S^{-1}AS).$$

Infine, una terza definizione è basata sulla formula integrale di Cauchy per funzioni olomorfe in un certo dominio di $\mathbb{C}$.

Definizione (Integrale di contorno). Sia Γ una curva chiusa (possibilmente composta da più componenti connesse) contenuta in Ω e che racchiuda gli autovalori di A. Allora

$$f(A) := \frac{1}{2\pi i}\int_{\Gamma} f(z)(zI - A)^{-1}\, dz$$

dove l'integrale è applicato componente per componente alla matrice argomento.

Osservazione La definizione basata sulla formula integrale di Cauchy è talvolta combinata con una formula di quadratura per l'integrale, per fornire un'approssimazione di $f(A)$.

Osservazione Le tre definizioni (forma canonica di Jordan, interpolante di Hermite e integrale di contorno) sono equivalenti e coincidono con l'espansione in serie di potenze della matrice quando $f(z)$ ha un'unica espansione su tutto Ω (ad esempio, questo accade nel caso $f(z) = e^z$).

Esercizio Dimostrare le seguenti proprietà relative all'esponenziale di matrice:

(i) $\frac{\partial e^{tA}}{\partial t} = Ae^{tA}$.

(ii) Se due matrici $n \times n$ A, B verificano $AB = BA$, allora $e^{A+B} = e^A \cdot e^B = e^B \cdot e^A$.

(iii) e^A è sempre invertibile e $(e^A)^{-1} = e^{-A}$.

Soluzione

(i) Per definizione, $e^{tA} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(tA)^k}{k!}$. Derivando termine a termine rispetto a t (operazione lecita per la convergenza uniforme della serie per t in intervalli compatti), otteniamo:

$$\frac{\partial e^{tA}}{\partial t} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{kt^{k-1}A^k}{k!} = A\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(tA)^{k-1}}{(k-1)!} = A\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(tA)^j}{j!} = Ae^{tA}.$$

(ii) Se A e B commutano, possiamo applicare la formula binomiale per le potenze di $(A+B)$:

$$(A+B)^n = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} A^k B^{n-k}.$$

Allora

$$e^{A+B} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(A+B)^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} A^k B^{n-k}.$$

Scambiando l'ordine delle somme e ponendo $j = n-k$:

$$e^{A+B} = \sum_{k=0}^{\infty}\sum_{j=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!}\frac{B^j}{j!} = \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!}\right)\left(\sum_{j=0}^{\infty} \frac{B^j}{j!}\right) = e^A e^B.$$

La commutatività del prodotto segue dalla commutatività di A e B, quindi $e^A e^B = e^B e^A$.

(iii) Ponendo $t = 1$ nella proprietà (ii) e scegliendo $B = -A$ (che commuta certamente con A), otteniamo:

$$e^A e^{-A} = e^{A+(-A)} = e^0 = I.$$

Analogamente, $e^{-A}e^A = I$. Quindi e^A è invertibile e il suo inverso è e^{-A}.

9.2 L'algoritmo di Schur-Parlett per il calcolo di $f(A)$

A prima vista, il modo più naturale per calcolare $f(A)$ sembrerebbe consistere nel diagonalizzare A e usare la (9.1). Tuttavia, questo porta a una perdita di accuratezza se la matrice V non è particolarmente ben condizionata. A meno che A non sia hermitiana (o più in generale una matrice normale), gli approcci basati sulla diagonalizzazione dovrebbero essere evitati. Per una generica funzione di matrice $f(A)$, il comando Matlab `funm` si basa sul calcolo della forma di Schur

$$A = QTQ^*,$$

con T triangolare superiore e Q unitaria, e sullo sfruttare la relazione $f(A) = Qf(T)Q^*$. In questo modo, il problema iniziale si riduce a valutare $F = f(T)$, cioè la funzione di matrice di una matrice triangolare superiore. Dalla definizione di funzioni di matrice, è chiaro che anche F è triangolare superiore e i suoi elementi diagonali sono dati da

$$F_{11} = f(T_{11}), \quad F_{22} = f(T_{22}), \quad \ldots \quad F_{nn} = f(T_{nn}).$$

Gli elementi nella parte strettamente triangolare superiore sono determinati dal fatto che F e T devono commutare, cioè $FT = TF$. Ad esempio, nel caso 2×2

$$T = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ & T_{22} \end{bmatrix}, \qquad F = \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} \\ & F_{22} \end{bmatrix},$$

osservando l'elemento $(1, 2)$ delle matrici FT e TF si ottiene la relazione

$$T_{11}F_{12} + T_{12}F_{22} = F_{11}T_{12} + F_{12}T_{22} \quad \Rightarrow \quad F_{12} = T_{12}\frac{F_{11} - F_{22}}{T_{11} - T_{22}}.$$

Nel caso generale, risolvendo questa relazione colonna per colonna si ottiene un Algoritmo, che richiede che gli elementi diagonali (cioè gli autovalori) di T siano tutti distinti. Se questa condizione non è soddisfatta o se alcuni elementi diagonali sono vicini tra loro (in un certo senso), dovrebbe essere usata una variante a blocchi dell'algoritmo. Tuttavia, essa è raramente utilizzata in pratica. Per quasi tutte le funzioni di interesse pratico, i metodi specializzati sono la scelta preferita. Ad esempio, i comandi Matlab `expm` e `logm` sono basati su una classe di metodi totalmente diversa, il cosiddetto *algoritmo di scaling and squaring*; si rimanda al libro di Higham per i dettagli.

9.3 Il metodo di Arnoldi per il calcolo di $f(A)b$

L'inversa di una matrice, cioè A^{-1}, può essere vista come la funzione di matrice corrispondente a $f(z) = z^{-1}$. Con questa prospettiva, possiamo considerare il calcolo di una quantità della forma $f(A)b$, per un vettore b, come una generalizzazione della risoluzione di un sistema quadrato di equazioni lineari. Allora, è abbastanza naturale estendere FOM per approssimare $f(A)b$. Supponiamo

---

1: **procedure** SchurParlett(A)
2: Compute the Schur form $A = QTQ^*$
3: **for** $i = 1, \ldots, n$ **do**
4: $F_{ii} \leftarrow f(T_{ii})$
5: **end for**
6: **for** $j = 2, \ldots, n$ **do**
7: **for** $i = j - 1, j - 2, \ldots, 1$ **do**
8: $F_{ij} \leftarrow T_{ij}\dfrac{F_{ii} - F_{jj}}{T_{ii} - T_{jj}} + \displaystyle\sum_{k=i+1}^{j-1} (F_{ik}T_{kj} - T_{ik}F_{kj})$
9: **end for**
10: **end for**
11: **return** QFQ^*
12: **end procedure**

---

di aver eseguito ℓ passi del metodo di Arnoldi per generare una base ortonormale per $\mathcal{K}_\ell(A, b)$. Questo produce la decomposizione di Arnoldi

$$AV_\ell = V_\ell H_\ell + h_{\ell+1,\ell} v_{\ell+1} e_\ell^*.$$

Allora l'approssimazione considerata dal metodo di Arnoldi per $f(A)b$ (l'estensione di FOM per sistemi lineari) è

$$f_\ell := \|b\|_2 V_\ell f(H_\ell) e_1 \approx f(A)b.$$

Quest'ultima richiede la valutazione della funzione di matrice $f(H_\ell)$ di dimensione $\ell \times \ell$, che può essere affrontata con un Algoritmo a costo $\mathcal{O}(\ell^3)$ nel caso tipico, cioè quando la valutazione della funzione scalare f non è il costo dominante. Analogamente a FOM, possiamo collegare la convergenza del metodo alla migliore approssimazione polinomiale della funzione $f(z)$ su insiemi spettrali per A. In particolare, nel caso hermitiano abbiamo il seguente risultato.

Teorema Sia $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ una matrice hermitiana con autovalori contenuti nell'intervallo $[\alpha, \beta] \subset \mathbb{R}$ e sia $f : \Omega \to \mathbb{C}$ analitica con $[\alpha, \beta] \subset \Omega$. Allora

$$\|f(A)b - f_\ell\|_2 \leq 2\|b\|_2 \min_{p(z)\in\mathcal{P}_{\ell-1}} \max_{z\in[\alpha,\beta]} |f(z) - p(z)|.$$

Dimostrazione. Poiché V_ℓ è una base ortogonale per $\{p(A)b : \deg(p) \leq \ell - 1\}$, abbiamo che

$$V_\ell V_\ell^* b = b, \qquad V_\ell V_\ell^* p(A)b = p(A)b$$

per ogni polinomio $p(z)$ di grado al massimo $\ell - 1$. Allora, in vista del Lemma 6.11.1, $p(A)b = \|b\|_2 V_\ell p(H_\ell)e_1$, e quindi l'approssimazione restituita dopo ℓ passi del metodo di Arnoldi è esatta se $f(z)$ è un polinomio di grado al massimo $\ell - 1$. Pertanto, per ogni polinomio $p(z)$ di grado al massimo $\ell - 1$

$$\begin{aligned}
\|f(A)b - f_\ell\|_2 &= \|f(A)b - p(A)b + \|b\|_2 V_\ell p(H_\ell)e_1 - f_\ell\|_2 \\
&\leq \|f(A)b - p(A)b\|_2 + \|b\|_2 \|p(H_\ell)e_1 - f(H_\ell)e_1\|_2 \\
&\leq \|b\|_2 \left(\|f(A) - p(A)\|_2 + \|p(H_\ell) - f(H_\ell)\|_2\right) \\
&= \|b\|_2 \left(\max_{z\in\Lambda(A)} |f(z) - p(z)| + \max_{z\in\Lambda(H_\ell)} |f(z) - p(z)| \right) \\
&\leq 2\|b\|_2 \max_{z\in[\alpha,\beta]} |f(z) - p(z)|,
\end{aligned}$$

dove, nell'ultima disuguaglianza, abbiamo usato che sia $\Lambda(H_\ell)$ che $\Lambda(A)$ sono contenuti in $[\alpha, \beta]$. Prendendo il minimo su p si ottiene la tesi.

□

Un limite per una matrice generale A può essere ricavato combinando l'argomento usato per la dimostrazione del Teorema con il risultato di Crouzeix-Palencia.

Corollario Sia $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ e sia $f : \Omega \to \mathbb{C}$ analitica con $\mathcal{W}(A) \subset \Omega$. Allora

$$\|f(A)b - f_\ell\|_2 \leq 2(1 + \sqrt{2})\|b\|_2 \min_{p(z)\in\mathcal{P}_{\ell-1}} \max_{z\in\mathcal{W}(A)} |f(z) - p(z)|.$$

Dimostrazione. La dimostrazione è analoga a quella del Teorema precedente, a parte l'uso del limite di Crouzeix-Palencia e la proprietà del campo numerico $\mathcal{W}(H_\ell) = \mathcal{W}(V_\ell^* A V_\ell) \subseteq \mathcal{W}(A)$. □