Radice quadrata di matrici

Note Title 2024-04-26

$f(x) = x^{\frac{1}{2}}$ radice quadrata principale,
cioè t.c. $\operatorname{Re} f(x) > 0 \quad \forall x \in \mathbb{C}$

$f(x)$ non definita per $x \in \mathbb{R}$, $x < 0$

Due casi in cui la posizione degli autovalori causa mal condizionamento:

1) $x \approx 0$ perché $f'(x)$ è grande
2) due autovalori λ_i, λ_j vicini alla semiretta $x<0$ e da parti opposte

Vediamo subito algoritmi.

<u>Schur-Parlett</u>:

1) $A = UTU^*$
2) Calcolo le entrate diagonali di $S = f(T)$
$$s_{ii} = f(t_{ii})$$
3) Calcolo le entrate fuori dalla diagonale imponendo $ST = TS$

4) $f(A) = USU^*$

Instabilità quando $t_{ii} \approx t_{jj}$, perché dobbiamo dividere per $t_{ii} - t_{jj}$

Per la matrice quadrata, c'è un metodo di evitare queste instabilità: invece di ricavare le entrate non-diagonali da $ST = TS$, le ricaviamo da $S^2 = T$

$$S^2 = T \iff \underbrace{s_{ii}s_{ij} + s_{i,i+1}s_{i+1,j} + \dots + s_{ij}s_{jj}}_{= \sum_{k=i}^{j} s_{ik}s_{kj}} = t_{ij}$$

$$s_{ij} = \frac{t_{ij} - \sum_{k=i+1}^{j-1} s_{ik}s_{kj}}{s_{ii} + s_{jj}}$$

$s_{ii} + s_{jj} \neq 0$ perché $s_{ii} = f(t_{ii})$, $s_{jj} = f(t_{jj}) \in$ RHP.

$s_{ii} + s_{jj}$ piccolo $\iff$ la radice quadrata è mal condizionata

sqrtm fa qualcosa di simile, a blocchi.

Si riesce a dimostrare un risultato di stabilità.

<u>Teorema</u>: T upper triangular, allora la matrice $\tilde{S}$ calcolata da questo algoritmo con aritmetica di macchina soddisfa

$$\tilde{S}^2 = T + \delta_T \qquad \underbrace{|\delta_T| \leq}_{\text{elemento per elemento}} \underbrace{|S|}_{\text{matrice dei valori assoluti}}^2 \cdot O(nu)$$

$S = f(T)$

Se avessi $|T| = |S^2|$ al membro di destra, avrei stabilità all'indietro. Invece ho $|S|^2$, che è più grande:

$$|S|^2_{ij} = \sum_{k=i}^{j} |s_{ik}||s_{kj}| \geq \left|\sum_{k=i}^{j} s_{ik}s_{kj}\right| = |S^2_{ij}|$$

<u>dim</u>:

$$\tilde{s}_{ij} = \left(t_{ij} \ominus \left(\tilde{s}_{i,i+1} \odot \tilde{s}_{i+1,j} \oplus \dots \oplus \tilde{s}_{i,j-1}\tilde{s}_{j-1,j}\right)\right) \oslash \left(\tilde{s}_{ii} \oplus \tilde{s}_{jj}\right)$$

$$a \circledast b = (a \text{ op } b)(1+\delta) \qquad |\delta| \le u$$

Quindi

$$(\tilde{S}_{ii} \oplus \tilde{S}_{jj})\, \tilde{S}_{ij} = (1+\delta)\Big(t_{ij} \ominus \big((\tilde{S}_{i,i+1} \odot \tilde{S}_{i+1,j}) \oplus \dots \oplus (\tilde{S}_{i,j-1} \odot \tilde{S}_{j-1,j})\big)\Big)$$

Se espando la definizione delle op. di macchina e raggruppo i termini a seconda di quanti δ contengono, ottengo

$$t_{ij} - \tilde{S}_{ii}\tilde{S}_{ij} - \tilde{S}_{i,i+1}\tilde{S}_{i+1,j} - \dots - \tilde{S}_{i,j-1}\tilde{S}_{j-1,j} - \tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{jj}$$

$$= (\text{termini con uno o più delta})$$

$$|(T - \tilde{S}^2)_{ij}| \le \underbrace{\left(|t_{ij}| + |\tilde{S}_{ii}\tilde{S}_{ij}| + |\tilde{S}_{i,i+1}\tilde{S}_{i+1,j}| + \dots + |\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{jj}|\right)}_{=(|T| + |\tilde{S}|^2)_{ij}} u + O(u^2)$$

Notiamo che $|T| = |S^2| \le |S|^2$ elemento per elemento, quindi possiamo rimpiazzare $|T| + |\tilde{S}|^2$ con $|S|^2 + |\tilde{S}|^2$

S e $\tilde{S}$ differiscono per $O(u)$, quindi posso rimpiazzare $|\tilde{S}|^2$ con $|S|^2$ commettendo un errore dello stesso ordine di grandezza dell'$O(u^2)$ in fondo.

Dettagli maggiori su [Higham]. Idea: visto che le operazioni fatte derivano dall'imporre $S^2 = T$, otteniamo $T - S^2 = O(u)$.

Altro algoritmo. Idea: radice quadrata di matrice e segno di matrice sono collegate

Teo: sia A senza autovalori immaginari puri, allora

$$\mathrm{sign}(A) = A \cdot \left((A^2)^{\frac{1}{2}} \right)^{-1} = A \cdot (A^2)^{-\frac{1}{2}}$$

Dim: basta verificare la stessa relazione sui complessi:

$$\mathrm{sign}(z) = z \cdot (z^2)^{-\frac{1}{2}}$$

Difatti abbiamo visto che identità scalari fatte con somme, prodotti, composizioni implicano le stesse identità tra funzioni di matrici.

$(z^2)^{\frac{1}{2}} = \pm z$, e prendiamo il segno $+$ se $z \in RHP$ e $-$ altrimenti.

Quindi $\dfrac{z}{(z^2)^{\frac{1}{2}}} = \pm 1$ a seconda del semipiano. $\square$

Teo: se $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ tali che AB non ha autoval. reali negativi, allora

$$\mathrm{sign}\begin{bmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & C \\ C^{-1} & 0 \end{bmatrix}, \text{ con } C = A(BA)^{-\frac{1}{2}}.$$

In particolare, se $A = I$, abbiamo

$$\mathrm{sign}\begin{bmatrix} 0 & I \\ B & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & B^{-\frac{1}{2}} \\ B^{\frac{1}{2}} & 0 \end{bmatrix}.$$

Dim: usiamo il risultato precedente:

$$\mathrm{sign}\begin{bmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{bmatrix} \cdot \left(\begin{bmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{bmatrix}^2 \right)^{-\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} AB & 0 \\ 0 & BA \end{bmatrix} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (AB)^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & (BA)^{-\frac{1}{2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \boxed{A(BA)^{-\frac{1}{2}}} = C \\ \underbrace{\boxed{B(AB)^{-\frac{1}{2}}}}_{= D} & 0 \end{bmatrix}$$

Per concludere, devo mostrare che $D = B(AB)^{-\frac{1}{2}} = C^{-1}$.

Uso il fatto che

$$I_{2n} = \left(\operatorname{sign}\begin{bmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{bmatrix}\right)^2 = \begin{bmatrix} 0 & C \\ D & 0 \end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix} CD & 0 \\ 0 & DC \end{bmatrix}.$$

⚠ Lezione lunedì 29/4 eliminata (sospensione didattica).

Segno $\to$ metodo di Newton su $x^2 - 1 = 0$

radice quadrata $\to$ metodo di Newton su $X^2 - A = 0$

Come è fatto il metodo di Newton multivariato su

$g(X) = 0 \qquad g(X) = X^2 - A$

Calcoliamo innanzitutto la derivata di Fréchet

$$L_{g,X}[E] = XE + EX.$$

Metodo di Newton: $\quad X_{k+1} = X_k - \left(L_{g,X_k}\right)^{-1} \cdot g(X_k)$

cioè

$$X_{k+1} = X_k - E, \qquad \text{dove } E \text{ risolve } L_{g,X}[E] = g(X_k)$$

$$\text{cioè} \quad X_k E + E X_k = X_k^2 - A$$

Ad ogni passo, dobbiamo risolvere un'equazione di Sylvester.
Funziona, ma è un po' troppo costoso.

Se X_k, E commutassero, allora avrei che

$$2EX_k = X_k^2 - A \quad \Longleftrightarrow \quad E = \frac{1}{2} X_k^{-1}\left(X_k^2 - A\right).$$

Teo: se X_0 e A commutano $(X_0 A = A X_0)$, allora ad ogni passo

(1) X_k e A commutano, e

(2) posso prendere $E = \frac{1}{2} X_k^{-1}\left(X_k^2 - A\right)$.

Dim: ci basta vedere cosa succede al primo passo.

$E_0 = \frac{1}{2} X_0^{-1}(X_0^2 - A)$ commuta con A, perché è ottenuta con somme, prodotti, inversioni di matrici che commutano con A. Per lo stesso motivo, commuta con X_0. Allora

$$X_0 E_0 + E_0 X_0 = 2 X_0 E_0 = X_0^2 - A. \quad \checkmark$$

$X_1 = X_0 - E$ allora commuta con X_0 e con A $\checkmark$

I passi successivi sono analoghi. □

Exact Newton	Modified Newton
X_0 dato	X_0 dato (che commuta con A)
E_k sol. di $E_k X_k + X_k E_k = X_k^2 - A$	$X_{k+1} = X_k - \frac{1}{2} X_k^{-1}(X_k^2 - A)$
$X_{k+1} = X_k - E_k$	

In aritmetica esatta, questi due metodi generano la stessa successione.

Se svolgiamo il conto, MN diventa

$$X_{k+1} = X_k - \frac{1}{2} X_k + \frac{1}{2} X_k^{-1} A = \frac{1}{2}\left(X_k + X_k^{-1} A\right).$$

Teo: Supponiamo che A non abbia autovalori reali negativi o nulli!
Allora l'iterazione di Newton (esatta o modificata) converge alla radice quadrata principale se $X_0 = \alpha I$ o se $X_0 = \alpha A$, con $\alpha > 0$.

Dim: Moltiplichiamo MN per $A^{-\frac{1}{2}}$, e usiamo commutatività:

$$A^{-\frac{1}{2}} X_{k+1} = \frac{1}{2}\left(A^{-\frac{1}{2}} X_k + A^{-\frac{1}{2}} X_k^{-1} A\right) = \frac{1}{2}\left(A^{-\frac{1}{2}} X_k + X_k^{-1} A^{\frac{1}{2}}\right)$$
$$= \frac{1}{2}\left(A^{-\frac{1}{2}} X_k + \left(A^{-\frac{1}{2}} X_k\right)^{-1}\right)$$

A meno di un cambio di variabile, questa è l'iterat. di Newton per il segno: definiamo $Z_k := A^{-\frac{1}{2}} X_k$, allora gli Z_k soddisfano

$$Z_{k+1} = \frac{1}{2}\left(Z_k + Z_k^{-1}\right)$$

Abbiamo già studiato questa iterazione, e sappiamo che

$$\lim_{k\to\infty} Z_k = \operatorname{sign}(Z_0) = \operatorname{sign}\begin{cases} A^{-\frac{1}{2}}\alpha I \\ A^{-\frac{1}{2}}\alpha A = \alpha A^{\frac{1}{2}} \end{cases} = I$$

perché $A^{\frac{1}{2}}$ (e quindi $\alpha A^{\frac{1}{2}}$, $\alpha A^{-\frac{1}{2}}$) ha autovalori nel RHP.

Quindi $I = \lim Z_k = \lim A^{-\frac{1}{2}} X_k$, quindi $X_k \to A^{\frac{1}{2}}$. $\square$

Esperimenti su Matlab: nella pratica,

EN funziona bene, ma MN ha instabilità numerica:

$X_k A - A X_k$ diventa sempre più grande, e la successione generata non va a convergere esattamente a $A^{\frac{1}{2}}$. (né a coincidere con quella di EN).

Prossima lezione: 6 maggio.