

Metodo di Newton per  $X^{1/2}$

$$f: \mathbb{R}^{n^2} \rightarrow \mathbb{R}^{n^2} \quad f(\text{vec } X) = \text{vec}(X^2 - A)$$

$$\boxed{X_{k+1} = X_k - H_k \quad X_k H_k + H_k X_k = X_k^2 - A} \quad (\text{TN})$$

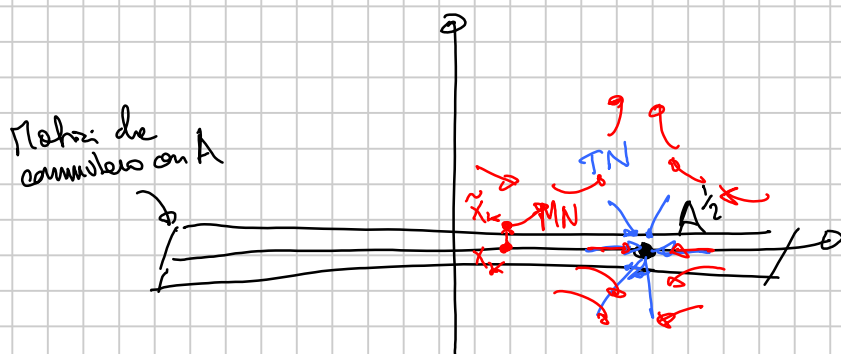
Oppure:  $H_k = (2X_k)^{-1} (X_k^2 - A)$ , e quindi

$$X_{k+1} = \frac{1}{2} (X_k + X_k^{-1} A) \quad (\text{MN})$$

In ant. esatta, se  $X_0$  e  $A$  commutano (es.  $X_0 = \alpha A, \alpha I$ )

altrò caso

Geometricamente:



Comportamento intorno al punto fisso  $X = A^{1/2}$  di  $X_{k+1} = h(X_k)$

$$h(x) = \frac{1}{2} (x + x^{-1} A)$$

$$h(x+h) = h(x) + L_{h,x}[H] + o(\|H\|^2)$$

$$\text{Jac}(h) \quad L_{h,x}[H] = \frac{1}{2} (H - X^{-1} H X^{-1} A)$$

$$\hat{L}_{h,x} = \frac{1}{2} (I \otimes I - (X^{-1} A)^T \otimes X^{-1})$$

$$\hat{L}_{h,A^{1/2}} = \frac{1}{2} (I \otimes I - (A^{1/2})^T \otimes A^{-1/2})$$

Per calcolare autovalori, fatt. Schur  $(A^{\frac{1}{2}})^T = Q_1 T_1 Q_1^*$

$$A^{-\frac{1}{2}} = Q_2 T_2 Q_2^*$$

$$L_{h, A^{\frac{1}{2}}}^1 = (Q_1 \otimes Q_2) \left( \frac{1}{2} (I \otimes I - T_1 \otimes T_2) \right) (Q_1 \otimes Q_2)^*$$

Triangolare,

Se  $\lambda_1, \dots, \lambda_n$  autoval. di  $A$ ,  $\text{diag}(T_1) = \lambda_1^{\frac{1}{2}}, \dots, \lambda_n^{\frac{1}{2}}$

$$\text{diag}(T_2) = \lambda_1^{-\frac{1}{2}}, \dots, \lambda_n^{-\frac{1}{2}}$$

$$\text{diag}\left(\frac{1}{2}(I \otimes I - T_1 \otimes T_2)\right) = \frac{1}{2}(1 - \lambda_i^{\frac{1}{2}} \lambda_j^{-\frac{1}{2}}) \text{ per } i, j = 1, \dots, n$$

Se tutti questi autoval. sono in modulo  $\leq 1$ ,  $A^{\frac{1}{2}}$  è un punto fisso stabile

$$\lambda_1 = 25 \quad \lambda_2 = 1$$

$$\frac{1}{2}(1 - \lambda_1^{\frac{1}{2}} \lambda_2^{-\frac{1}{2}}) = \frac{1}{2}(1 - 5 \cdot 1) = -2$$

Altro metodo: Iterazione di Denman-Beavers (DB)

Ricordiamo che  $\text{sign}\left(\begin{bmatrix} 0 & A \\ I & 0 \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} 0 & A^{\frac{1}{2}} \\ A^{-\frac{1}{2}} & 0 \end{bmatrix}$

$X_0 = A, Y_0 = I$  Iterazione Newton per il segno:

$$\begin{bmatrix} 0 & X_k \\ Y_k & 0 \end{bmatrix} \mapsto \frac{1}{2} \left( \begin{bmatrix} 0 & X_k \\ Y_k & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & Y_k^{-1} \\ X_k^{-1} & 0 \end{bmatrix} \right)$$

cioè  $\begin{cases} X_{k+1} = \frac{1}{2}(X_k + Y_k^{-1}) \\ Y_{k+1} = \frac{1}{2}(Y_k + X_k^{-1}) \end{cases} \quad X_0 = A, Y_0 = I \quad (\text{DB})$

Per convergenza della fn. segno,  $X_k \rightarrow A^{\frac{1}{2}}, Y_k \rightarrow A^{-\frac{1}{2}}$

(se  $\begin{bmatrix} 0 & A \\ I & 0 \end{bmatrix}$  non ha autoval. sull'asse immaginario)  
autovalori:  $\pm \sqrt{\lambda}$  per  $\lambda \in \Lambda(A)$

ad  $\bar{0}$  asintoticam. stabile

teo:  $(A^{1/2}, A^{-1/2})$  è un pto fisso stabile per  $(DB)$

dim:

$$h: \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(X + Y^{-1}) \\ \frac{1}{2}(Y + X^{-1}) \end{bmatrix}$$

$$h \left( \begin{bmatrix} X+E \\ Y+F \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(X+E + (Y+F)^{-1}) \\ \frac{1}{2}((Y+F) + (X+E)^{-1}) \end{bmatrix} = h \left( \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} \right) + \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{1}{2}E - Y^{-1}FY^{-1} \\ \frac{1}{2}F - X^{-1}EX^{-1} \end{bmatrix}}_{L_{h, \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix}}} + O\left(\frac{\|E\|}{\|A\|}\right)^2$$

$$L_{h, \begin{bmatrix} A^{1/2} \\ A^{-1/2} \end{bmatrix}} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(E - A^{1/2}FA^{1/2}) \\ \frac{1}{2}(F - A^{-1/2}EA^{-1/2}) \end{bmatrix}$$

Questa mappa è <sup>(porri)</sup> idempotente:  $L_{h, \begin{bmatrix} A^{1/2} \\ A^{-1/2} \end{bmatrix}} \left( L_{h, \begin{bmatrix} A^{1/2} \\ A^{-1/2} \end{bmatrix}} \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix}$

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2}(E - A^{1/2}FA^{1/2}) \right) - \frac{1}{2}A^{1/2} \left( \frac{1}{2}(F - A^{-1/2}EA^{-1/2}) \right) A^{1/2} = \frac{1}{4}E - \frac{1}{4}A^{1/2}FA^{1/2} - \frac{1}{4}A^{1/2}FA^{1/2} + \frac{1}{4}E \\ \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2}(F - A^{-1/2}EA^{-1/2}) \right) - \frac{1}{2}A^{-1/2} \left( \frac{1}{2}(E - A^{1/2}FA^{1/2}) \right) A^{-1/2} = \frac{1}{4}F - \frac{1}{4}A^{-1/2}EA^{-1/2} + \frac{1}{4}A^{-1/2}EA^{-1/2} + \frac{1}{4}F \end{cases}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{2}E \\ \frac{1}{2}F \end{bmatrix}$$

Quindi, vettORIZZATA, è una matrice  $M \in \mathbb{C}^{2n^2 \times 2n^2}$  tale che  $M^2 = \frac{1}{2}I$

$\Rightarrow$  autovalori sono  $\pm \sqrt{\frac{1}{2}}$   $\Rightarrow$  stabile

---

$f(A)$  per matrici grandi e sparse

$f(A)$  densa, solitamente, quindi spesso si vuole calcolare  $f(A)b$  per un certo vettore  $b$

## Tecniche principali

1) approssimo  $f$  con un polinomio che lo approssima bene in una regione che contiene  $\Lambda(A)$

es: se so che  $A$  è simmetrica con autovalori in  $[a, b]$  (che sono, ad es. con  $|\lambda| \leq \|A\|$ ), allora mi basta un polinomio tale che  $\max_{x \in [a, b]} |f(x) - p(x)| < \epsilon$ , che esiste (Stone-W.)

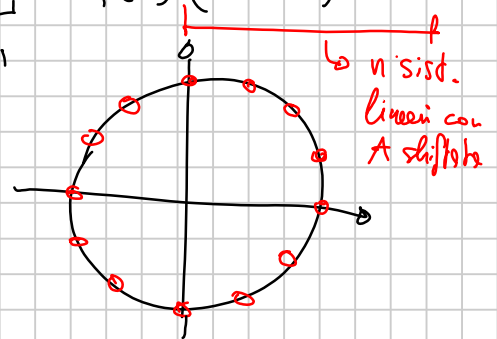
e calcolo  $p(A)b$  con  $(\deg p)$  prodotti mat-vec

Variante: invece di  $p$ , uso una funzione razionale  $\frac{p(x)}{q(x)}$ , e in questo caso mi servono anche soluzioni di sistemi lineari (per esempio, se scrivo  $r(x) = \sum_{i=1}^d \frac{w_i}{x - p_i}$  (fretti semplici),

allora per calcolare  $r(A)b = \sum_{i=1}^d w_i (A - p_i I)^{-1} b$  mi servono d soluz. di sistem. lineari

2) Integrali di Cauchy:

$$f(A)b = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(z)(zI - A)^{-1} b dz \approx \sum_{k=1}^n w_k f(z_k) (z_k I - A)^{-1} b$$



3) metodi ad-hoc per funzioni specifiche; ad es.,

$$\exp(A)b \text{ è } v(1), \text{ dove } v \text{ soddisfa } \begin{cases} \dot{v} = Av \\ v(0) = b \end{cases}$$

e posso applicare un metodo di soluzione numerico di ODE

ad es.

$$\begin{cases} v_{k+1} = v_k + h A v_k \\ v_0 = b \end{cases} \Rightarrow v_n = (I + hA)^n b$$


---

#### 4) Arnoldi!

Def: dati  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ,  $b \in \mathbb{C}^n$ , spazio di Krylov di indice  $n$  è

$$K_n(A, b) = \text{span} \{ b, Ab, A^2b, \dots, A^{n-1}b \}$$

$$= \left\{ v \in \mathbb{C}^n : v = \alpha_0 b + \alpha_1 Ab + \dots + \alpha_{n-1} A^{n-1}b = p(A)b \right\}$$

$p$  polinomio di grado  $\leq n-1$

Facciamo il prodotto matrice-vettore, riesco a rappresentare l'azione dell'operatore lineare  $A$  su  $K_n(A, b)$

$$A \underbrace{[b | Ab | \dots | A^{n-1}b]}_V = \underbrace{[Ab | A^2b | \dots | A^n b]}_W = \underbrace{[b | Ab | \dots | A^{n-1}b]}_V \cdot \begin{bmatrix} \alpha_{00} & \dots & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \alpha_{n-1, n-1} \end{bmatrix}$$

matrice che rappresenta  $A$  con basi  $V$  in partenza e  $W$  in arrivo sul sottosp.  $\text{Im } V = K_n(A, b)$

Dato un vettore  $v \in \text{Im } V = K_n(A, b)$ , posso calcolarmi i coefficienti:

$$\begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{n-1} \end{bmatrix} = \boxed{V^+} v \quad \text{e poi calcolarmi } Av \text{ come}$$

$$Av = A(\alpha_0 b + \alpha_1 Ab + \dots + \alpha_{n-1} A^{n-1}b) = \alpha_0 Ab + \dots + \alpha_{n-1} A^n b.$$

*molto mal condizionato*

---

Arnoldi: algoritmo per calcolare (iterativamente) basi ortonormali:

di:  $K_1(A, b) = \text{span}(b)$ ,  $K_2(A, b) = \text{span}(b, Ab)$ ,  $K_3(A, b) = \text{span}(b, Ab, A^2b)$

e così via.

Primo passo:  $v_1 = \frac{b}{\|b\|}$  è una base o.n. di  $\text{span}(b)$

Passo  $j \rightarrow j+1$ : se lo calcolato  $(v_1, v_2, \dots, v_j)$  base o.n. di  $K_j(A, b)$ ,

calcolo  $v_{j+1}$  tale che  $(v_1, v_2, \dots, v_{j+1})$  è base o.n. di  $K_{j+1}(A, b)$

Per farlo, parto da  $v_j$ , costruisco  $w = Av_j$ , e lo ortogonalizzo rispetto a tutti quelli precedenti:

$$w = Av_j, \quad w \leftarrow w - v_1(v_1^* w)$$

$$w \leftarrow w - v_2(v_2^* w)$$

$\vdots$

$$w \leftarrow w - v_j(v_j^* w)$$

$$v_j \in K_j(A, b) \Rightarrow Av_j = w_{\text{finale}} \in K_{j+1}(A, b)$$

$$v_j = \alpha_0 b + \dots + \alpha_{j-1} A^{j-1} b \Rightarrow Av_j = \alpha_0 Ab + \dots + \alpha_{j-1} A^j b$$

Alla fine del processo,  $w_{\text{finale}}$  è ortogonale a  $v_1, v_2, \dots, v_j$

$\Rightarrow v_{j+1} = \frac{w_{\text{finale}}}{\|w_{\text{finale}}\|}$  è tale che  $(v_1, v_2, \dots, v_j, v_{j+1})$  sono  $j+1$  vettori

ortonormali in  $K_{j+1}(A, b) \Rightarrow$  sono una base ortonormale

Perché parto da  $Av_j$  e non da  $Av_1, Av_2, \dots$  o un altro elemento di  $K_j(A, b)$ ? Perché in questo modo posso garantire

che  $\|w_{\text{finale}}\| \neq 0$

Lemma: supponi che  $v_j$  abbia rango pieno (cioè che  $b, Ab, \dots, A^{j-1}b$  sono lin. indipendenti). Allora l'ultimo vettore costruito da GS

$v_j$ , appartiene a  $K_j(A, b) \setminus K_{j-1}(A, b)$ .

Dim:  $j=1$ :  $v_1 = \frac{b}{\|b\|} \in \text{span}(b)$  ma non  $\in \text{span}(\emptyset) = \{0\}$

$j \rightarrow j+1$   $v_j \in K_j(A, b) \setminus K_{j-1}(A, b)$  vuol dire che

$$v_j = \alpha_0 b + \alpha_1 A b + \dots + \alpha_{j-1} A^{j-1} b \quad \text{ha } \alpha_{j-1} \neq 0$$

$v_j = p(A)b$  per un  $p$  di grado esattamente  $j-1$ .

Allora,  $w = Av_j = \alpha_0 A b + \dots + \alpha_{j-1} A^j b = q(A)b$  di grado esattamente  $j$

$$\Rightarrow w \in K_{j+1}(A, b) \setminus K_j(A, b)$$

Quando ortogonalizzate,

$$w \leftarrow w - v_i (v_i^* w),$$

sotttraiete  $v_i \in K_j(A, b)$ , quindi il risultato starà sempre

in  $K_{j+1}(A, b) \setminus K_j(A, b)$ , e in particolare

$$w_{\text{finale}} \neq 0.$$