

LIONELLO PASQUINI e RAFFAELLA PAVANI

Università di L'Aquila - Politecnico di Milano

CALCOLO DEGLI AUTOVALORI DI MATRICI TRIDIAGONALI NON NORMALI

Conferenza tenuta da L. Pasquini il 29 maggio 1995

ABSTRACT. This article is about the accurate computation of the eigenvalues of nonnormal tridiagonal matrices. Results of a comparison we made between several methods and algorithms are reported, and an algorithm derived from the method presented in [15], [16] is shown to be the only one able to give accurate outputs in case of ill-conditioned eigenvalues.

1991 Mathematics Subject Classification. Primary 65F15, 65F30; Secondary 65H20.

Key words and phrases. Eigenvalues, conditioning, non normal matrices.

1. Introduzione

In questo articolo viene studiato il problema del calcolo accurato degli autovalori di matrici tridiagonali non normali. Vengono riportati i risultati di un confronto fra svariati metodi ed algoritmi e viene mostrato che, per il momento, l'unico algoritmo capace di fornire risultati accurati nel caso di autovalori malcondizionati, è quello che deriva dal metodo per la approssimazione delle soluzioni polinomiali di equazioni differenziali lineari presentato in [15], [16].

L'articolo è organizzato nel modo seguente. Le notazioni e le definizioni di base sono presentate nella Sezione 2. La Sezione 3 contiene alcuni risultati generali di decomposizione e di teoria della perturbazione degli autovalori. Casi particolari ed esempi sono esaminati nella Sezione 4. Nella Sezione 5 è trattato il caso delle matrici tridiagonali reali non normali, mentre la Sezione 6 è dedicata al caso particolare di grande interesse nelle applicazioni e di considerevole difficoltà

dal punto di vista numerico delle Matrici di Bessel Generalizzate. Nella Sezione 7 vengono esposti il metodo in [15], [16] e l'algoritmo da questo dedotto. Infine, la Sezione 8 contiene un elenco di problemi aperti.

2. Notazioni e definizioni di base

Le notazioni di base che verranno usate in questo articolo sono le seguenti:

\mathbb{C} è l'insieme dei numeri complessi

\mathbb{C}^n è lo spazio lineare complesso a n dimensioni

\mathbb{R} è l'insieme dei numeri reali

\mathbb{N} è l'insieme degli interi non negativi

\mathbb{N}^+ è l'insieme degli interi positivi

\mathbb{P} è lo spazio lineare dei polinomi

\mathbb{P}^m è lo spazio lineare dei polinomi di grado minore o uguale a m

$\mathbb{C}^{m \times n}$ è lo spazio lineare delle matrici $m \times n$ ad elementi complessi

$\mathbb{R}^{m \times n}$ è lo spazio lineare delle matrici $m \times n$ ad elementi reali

Per le matrici di $\mathbb{C}^{m \times n}$ useremo le notazioni di uso più diffuso. Indicheremo con I la matrice identità, con $|A|$ la matrice i cui elementi sono i moduli degli elementi della matrice A , con A^H la trasposta coniugata della matrice A e con $\text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_t)$, $t = \min(m, n)$, [con $\text{diag}(B_1, B_2, \dots, B_t)$], la matrice diagonale [diagonale a blocchi] di elementi diagonali d_1, d_2, \dots, d_t [i cui blocchi lungo la diagonale sono B_1, B_2, \dots, B_t , con B_i blocco $m_i \times m_i$, $i = 1 : t$, e $\sum_{i=1}^t m_i = \min(m, n)$].

Passando al caso particolare delle matrici di $\mathbb{C}^{n \times n}$, indicheremo con $\lambda_i(A)$, o, brevemente, con λ_i , quando non sorgano ambiguità, gli autovalori della matrice A e la notazione Λ_A sarà usata per indicare la matrice diagonale i cui elementi diagonali sono gli autovalori di A

$$\Lambda_A = \text{diag}(\lambda_1(A), \lambda_2(A), \dots, \lambda_n(A)) = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n).$$

Inoltre denoteremo con $k_*(A)$ il numero di condizionamento di A nella norma $\|\cdot\|_*$: $k_*(A) = \|A\|_* \|A^{-1}\|_*$.

Alcune importanti classi di matrici di $\mathbb{C}^{n \times n}$ sono definite in termini di proprietà loro e delle loro trasposte coniugate. Ecco alcuni esempi.

Definizioni.

- 2.1. $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ è detta *hermitiana* se $A^H = A$.
- 2.2. $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ è detta *anti-hermitiana* se $A^H = -A$.
- 2.3. $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ è detta *unitaria* se $A^H A = A A^H = I$.
- 2.4. $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ è detta *normale* se $A^H A = A A^H$.

Osservazione 2.1. Le matrici hermitiane, anti-hermitiane, unitarie, sono tutte matrici normali. Ulteriori informazioni riguardanti questa notevole classe di matrici possono essere trovate nella Sezione 4.

Concludiamo con la seguente definizione di autovettore sinistro, alla quale premettiamo, per completezza, quella più conosciuta di autovettore (destro).

Definizione 2.5 Sia $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ e sia λ un autovalore di A ; x è un autovettore (destro) di A corrispondente all'autovalore λ se: $x \neq 0$ e $Ax = \lambda x$.

Se λ è un autovalore di A , $\bar{\lambda}$ è un autovalore di A^H . Esiste pertanto un vettore y non nullo tale da aversi: $A^H y = \bar{\lambda} y$, o anche, come si è soliti scrivere, prendendo i trasposti coniugati dei due membri nella uguaglianza tra vettori appena scritta, $y^H A = \lambda y^H$. Questa osservazione viene formalizzata nella definizione seguente.

Definizione 2.6 Sia $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ e sia λ un autovalore di A ; y è un autovettore sinistro di A corrispondente all'autovalore λ se: $y \neq 0$ e $y A^H = \lambda y^H$.

Osservazione 2.2. Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ si è soliti parlare di matrice trasposta, simmetrica, antisimmetrica, ortogonale, in luogo, rispettivamente, di matrice trasposta coniugata, hermitiana, anti-hermitiana, unitaria. Inoltre, la notazione A^T sostituisce la notazione A^H .

3. Alcuni risultati di teoria della perturbazione

Cominciamo col riportare due fondamentali teoremi di decomposizione di matrici.

Teorema 3.1 (della *decomposizione di Jordan*). Sia $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Esiste una matrice non singolare $X \in \mathbb{C}^{n \times n}$ tale da aversi:

$$X^{-1}AX = \text{diag}(J_{11}, \dots, J_{1\mu_1}, J_{21}, \dots, J_{2\mu_2}, J_{\nu 1}, \dots, J_{\nu\mu_\nu}), \quad (3.1)$$

dove

$$J_{ij} = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_i & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_i \end{bmatrix}, \quad j = 1 : \mu_i, i = 1 : \nu, \quad (3.2)$$

è un blocco $n_{ij} \times n_{ij}$ e si ha: $\sum_{i=1}^{\nu} \sum_{j=1}^{\mu_i} n_{ij} = n$, $\lambda_i \neq \lambda_j$ se $i \neq j$. La decomposizione (3.1) non è unica ma il numero μ_i e le dimensioni n_{ij} dei blocchi J_{ij} ($j = 1 : \mu_i$) associati ad ogni singolo autovalore λ_i ($i = 1 : \nu$) sono univocamente determinati, le differenze fra le possibili decomposizioni potendo riguardare solo l'ordine dei blocchi.

Dim.: Per la dimostrazione rimandiamo a [10]. \square

I blocchi J_{ij} sono chiamati *blocchi di Jordan*. La decomposizione di Jordan è di grande importanza perché fornisce molte informazioni sulla matrice A [8] (purtroppo però, la sua struttura è di difficile determinazione dal punto di vista numerico [8], [7]). Alcune di queste informazioni sono elencate nelle osservazioni e nelle definizioni che seguono. Le definizioni torneranno molto utili (si veda il Teorema 3.3) per avere una prima stima del condizionamento degli autovalori di una matrice.

Osservazioni.

3.1. Il numero degli autovalori distinti di A è dato da ν .

3.2. La molteplicità algebrica [geometrica] dell'autovalore λ_i è data da $m_i := \sum_{j=1}^{\mu_i} n_{ij}$ [è data da μ_i].

3.3. Le μ_i colonne di posti $1 + \sum_{r=1}^{i-1} \sum_{j=1}^{\mu_r} n_{rj} + \sum_{j=1}^s n_{ij}$, $s = 0 : \mu_i - 1$ ($\sum_{j=1}^0 = 0$), della matrice X forniscono una base dell'autospazio relativo all'autovalore λ_i .

Definizioni.

3.1. Chiameremo *ordine* dell'autovalore λ_i di A e lo indicheremo con p_i , l'intero positivo $p_i := \max_{j=1:\mu_i} n_{ij}$.

3.2. L'autovalore λ_i è detto *defettivo* se $p_i > 1$.

3.3. L'autovalore λ_i è detto *derogatorio* se $\mu_i > 1$.

Teorema 3.2 (della *decomposizione di Schur*). Sia $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Esiste una matrice unitaria Q tale da aversi

$$Q^H A Q = U = \Lambda_A + U^+ \tag{3.3}$$

ove U è triangolare superiore e U^+ è strettamente triangolare superiore. La matrice Q può essere scelta in modo da far apparire gli autovalori λ_i lungo la diagonale di Λ_A in un ordine comunque prefissato.

Dim.: Per la dimostrazione rimandiamo a [7], pagina 335. \square

L'ordine p di un autovalore λ (vedi Definizione 3.1) può essere considerato come un primo indice del condizionamento dell'autovalore medesimo. Infatti si può asserire che

Teorema 3.3. $O(\epsilon)$ perturbazioni nella matrice A possono indurre $O(\epsilon^{1/p})$ perturbazioni su un autovalore di ordine p .

Dim.: Per la dimostrazione rimandiamo a [22], pagine 77 e seguenti. \square

Numeri di condizionamento *globali*, ossia validi per tutti gli autovalori di una matrice, sono invece forniti dai due teoremi che seguono. Il primo è ottenuto usando la decomposizione di Schur.

Teorema 3.4. Siano $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, λ_i , $i = 1 : n$, gli autovalori di A , $\delta A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ una perturbazione di A e μ un autovalore della matrice perturbata $A + \delta A$. Considerata una decomposizione di Schur (3.3) della matrice A , si ha

$$\min_{i=1:n} |\lambda_i - \mu| \leq \max(\vartheta, \vartheta^{1/q}),$$

ove

$$\vartheta = \|\delta A\|_2 \sum_{k=0}^{q-1} \|U^+\|_2^k$$

e q è il più piccolo intero positivo tale da aversi $|U^+|^q = 0$.

Dim.: Per la dimostrazione rimandiamo a [7], pagina 343. \square

Il secondo è il ben noto

Teorema 3.5 (Bauer-Fike). Siano $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, λ_i , $i = 1 : n$, gli autovalori di A , $\delta A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ una perturbazione di A e μ un autovalore della matrice perturbata $A + \delta A$. Se $X^{-1}AX = \Lambda_A$ si ha

$$\min_{i=1:n} |\lambda_i - \mu| \leq k_p(X) \|\delta A\|_p$$

in una qualunque p -norma.

Dim.: Per la dimostrazione rimandiamo a [7], pagina 342. \square

Nel caso particolare di un autovalore semplice, si può applicare il seguente Teorema 3.6. Esso fornisce un numero *individuale* di condizionamento per ogni singolo autovalore come il Teorema 3.3 ma la informazione del Teorema 3.6, sebbene meno generale, è più fine e significativa di quella del Teorema 3.3. Al Teorema 3.6 premettiamo il

Lemma 3.1. Sia $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Se λ è un autovalore semplice di A e x e y sono rispettivamente un autovettore destro e sinistro di A corrispondenti all'autovalore λ si ha: $y^H x \neq 0$.

Dim.: Per la dimostrazione rimandiamo a [8]. \square

Teorema 3.6. Siano $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ e λ un autovalore semplice di A . Siano x e y , rispettivamente, un autovettore destro e sinistro di A corrispondenti all'autovalore λ e si abbia: $\|x\|_2 = \|y\|_2 = 1$. Siano poi $\delta A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ una perturbazione di A tale che $\|\delta A\|_2 = \epsilon$ e $\delta \lambda$ la corrispondente perturbazione di λ . Si ha:

$$|\delta \lambda| \leq \kappa(\lambda) \epsilon + O(\epsilon^2),$$

ove

$$\kappa(\lambda) = \frac{1}{|y^H x|}. \quad (3.4)$$

Dim.: Per la dimostrazione rimandiamo ai testi [8], [7] e [21]. \square

Osservazione 3.4. Si noti che, per definizione (vedi (3.4)), $\kappa(\lambda)$ sarà in ogni caso ≥ 1 .

4. Casi particolari ed esempi

Il caso delle matrici normali merita particolare attenzione. Cominciamo col riportare il

Teorema 4.1. Sia $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Le seguenti condizioni sono tra loro equivalenti

- 1) A è normale;
- 2) esiste una matrice unitaria Q tale da aversi $Q^H A Q = \Lambda_A$;
- 3) A ha n autovettori ortogonali;
- 4) se x è autovettore destro relativo all'autovalore λ , è anche autovettore sinistro relativo al medesimo autovalore λ ;
- 5) $\|A\|_F = \|\Lambda_A\|_F = \left(\sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2\right)^{1/2}$.

Dim.: Per la dimostrazione della equivalenza 1) \iff 2) rimandiamo a [7], pagina 336. La equivalenza 2) \iff 3) e la implicazione 2) \implies 4) sono di dimostrazione immediata e la 2) \iff 5) è una diretta conseguenza della invarianza della norma F rispetto a trasformazioni con matrici unitarie. Per la prova della implicazione 4) \implies 1), che completa la dimostrazione, rimandiamo a [9]. \square

Osservazione 4.1. In [9] viene riportato un lungo elenco (non esaustivo, peraltro, come affermano gli autori) di 70 condizioni equivalenti a quella di normalità. Le 2)–5) del Teorema 4.1 sono solo un sottoinsieme di quelle, ma sono le più significative per le questioni che stiamo trattando. Una ulteriore proprietà delle matrici normali è quella di avere norma 2 uguale al raggio spettrale: A normale $\implies \|A\|_2 = \|\Lambda_A\|_2 = \rho(A) = \max_{i=1:n} |\lambda_i|$.

Le proprietà caratteristiche 2) e 4) sono particolarmente interessanti. Infatti, ne derivano i due seguenti risultati.

Corollario 4.1. Siano $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, λ_i , $i = 1 : n$, gli autovalori di A , $\delta A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ una perturbazione di A e μ un autovalore della matrice perturbata $A + \delta A$. Se A è normale, si ha:

$$\min_{i=1:n} |\lambda_i - \mu| \leq \|\delta A\|_2.$$

Dim.: La dimostrazione segue facilmente dalla 2) del Teorema 4.1 e da uno, a scelta, fra i Teoremi 3.4 e 3.5, osservando, nel caso si usi il Teorema 3.5, che per una matrice unitaria Q si ha $k_2(Q) = 1$. \square

Corollario 4.2. Sia $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ e λ un autovalore semplice di A . Il numero di condizionamento individuale $\kappa(\lambda)$ definito in (3.4) è uguale a 1 se e solo se A è normale.

Dim.: La dimostrazione segue immediatamente dalla 4) del Teorema 4.1. \square

Dunque le matrici normali hanno autovalori perfettamente condizionati. Purtroppo, non è affatto detto che sia così per una matrice non normale.

Esempio 4.1 [21], [22]. La matrice

$$A = \begin{bmatrix} 10 & 10 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 9 & 10 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 8 & 10 & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 2 & 10 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

è diagonalizzabile ma non è normale. Infatti, se lo fosse, essendo triangolare superiore, dovrebbe essere diagonale. La sopra-diagonale formata dai 10 rappresenta quindi, in qualche modo, una misura della sua non normalità. La Tavole 4.1, 4.2, 4.3 e 4.4 riportano i risultati (arrotondati per esigenze di spazio) che si ottengono calcolando con MATLAB 4.2 per WINDOWS i numeri di condizionamento (3.4) degli autovalori di A (Tavola 4.1) e poi - con la funzione MATLAB EIG,

che implementa l'algoritmo QR - gli autovalori delle matrici che si ottengono da A perturbando l'elemento $a_{10,1}$ e ponendolo uguale a 10^{-6} (Tavola 4.2) e uguale a 10^{-5} (Tavole 4.3 e 4.4).

λ_i	10 e 1	9 e 2	8 e 3	7 e 4	6 e 5
$k(\lambda_i)$	4.53×10^3	3.612×10^4	1.3264×10^5	2.9308×10^5	4.2810×10^5

Tavola 4.1

λ_i	10 e 1	9 e 2	8 e 3	7 e 4	6 e 5
$\lambda_i + \delta\lambda_i$	10.0027	8.9740	8.0909	6.6614	6.4192
	0.9973	2.0260	2.9091	4.3386	4.5808
$ \delta\lambda_i $	0.0027	0.0260	0.0909	0.3386	0.4192
$k(\lambda_i) \times 10^{-6}$	0.0045	0.0361	0.1326	0.2931	0.4281

Tavola 4.2

λ_i	10 e 1	8 e 9	6 e 7	4 e 5	2 e 3
$\lambda_i + \delta\lambda_i$	10.0256	8.6804±	6.6427±	4.3573±	2.3196±
	0.9744	<i>i</i> 0.2886	<i>i</i> 0.9764	<i>i</i> 0.9764	<i>i</i> 0.2886

Tavola 4.3

λ_i	10 e 1	9 e 2	8 e 3	7 e 4	6 e 5
$ \delta\lambda_i $	0.0256	0.4306	0.7391	1.0397	1.1689
$k(\lambda_i) \times 10^{-5}$	0.0453	0.3612	1.3264	2.9308	4.2810

Tavola 4.4

Si osservano fenomeni tipici delle matrici non normali: gli autovalori sono diversamente condizionati ed alcuni evidenziano il medesimo tipo di sensibilità alle perturbazioni sui dati (nel caso in esame, 10 e 1, 9 e

2, 8 e 3, 7 e 4, 6 e 5 hanno gli stessi numeri di condizionamento individuali e subiscono perturbazioni della medesima intensità); i numeri di condizionamento (3.4) si dimostrano indici molto efficaci della sensibilità dei singoli autovalori (le Tavole 4.2 e 4.4 mostrano che i prodotti dei $\kappa(\lambda_i)$ per le norme 10^{-6} e 10^{-5} delle matrici perturbazione considerate sono approssimazioni sorprendentemente buone delle variazioni $|\delta\lambda_i|$); infine, altro fenomeno tipico nel caso di matrici reali, per perturbazioni di una certa intensità coppie di autovalori reali collidono e poi si sdoppiano in coppie complesse coniugate (vedi Tavole 4.2 e 4.3) o viceversa (vedi Tavole 4.3 e 4.2).

La non normalità della matrice può dunque essere un ostacolo serio per il calcolo accurato degli autovalori e questo ostacolo, pur essendo l'unico praticamente rimasto da superare, dato il notevole grado di stabilità raggiunto oggi dagli algoritmi specializzati (si pensi ad esempio al QR), può risultare insormontabile quando non si possa lavorare con una precisione di macchina adeguata. D'altra parte, è anche vero che non sempre una matrice non normale ha autovalori malcondizionati. Sarebbe dunque fortemente auspicabile la individuazione di un criterio per riconoscere *a priori* il tipo di condizionamento degli autovalori di una matrice non normale.

Purtroppo, i numeri di condizionamento (3.4) possono essere calcolati solo *a posteriori*, perché richiedono che siano già stati calcolati l'autovalore interessato ed i relativi autovettori destro e sinistro, e non sempre, ovviamente, questi possono essere ottenuti così facilmente come nell'Esempio 4.1. Inoltre i loro valori non saranno affidabili quando gli autovalori ed autovettori interessati siano affetti da rilevanti errori di calcolo, e cioè, data la già rilevata stabilità degli algoritmi oggi disponibili, quando gli autovalori e/o gli autovettori interessati siano mal-condizionati. E ciò vuol dire che saranno tanto meno affidabili quanto più sarebbe necessario che lo fossero.

Una soluzione a questi problemi, suggerita dalle considerazioni fatte finora (si vedano, in particolare, il Teorema 3.4 ed il Corollario 4.1), è stata ricercata nel *misurare* in qualche modo *la deviazione dalla normalità* della matrice in esame. Sono state proposte in letteratura più

di una dozzina di misure di deviazione dalla normalità [3]. Qui ne riportiamo una tra le più note ed usate. È dovuta ad Henrici ed è stata poi ripresa in [19] e consiste in sostanza nel misurare la matrice U^+ di una delle decomposizioni (3.3) della matrice A considerata.

Definizione 4.1 [11]. Si definisce deviazione dalla normalità di $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ la quantità

$$\Delta(A) := \|U^+\|_F = (\|A\|_F^2 - \|\Lambda_A\|_F^2)^{1/2}, \quad (4.1)$$

ove U^+ è una qualsiasi delle matrici strettamente triangolari superiori che figurano in una qualunque delle decomposizioni di Schur (3.3) di A .

L'ultimo membro in (4.1) mostra chiaramente che $\Delta(A)$ è indipendente dalla particolare decomposizione (3.3) usata o, ciò che è lo stesso, dalla particolare U^+ considerata. La stima di $\Delta(A)$ riportata nel teorema che segue è dovuta ad Henrici ed è molto usata nelle applicazioni.

Teorema 4.2 [11]. Per una qualsiasi matrice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ si ha :

$$\Delta(A) \leq \left(\frac{n^3 - n}{12}\right)^{1/4} \left(\|A^H A - A A^H\|_F\right)^{1/2} \quad (4.2)$$

ed esistono matrici $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ per le quali nella (4.2) vale il segno di uguaglianza.

Dim.: Per la dimostrazione rimandiamo a [11]. \square

Concludiamo la sezione con l'Esempio 4.2. Esso riguarda il diverso tipo di condizionamento che ha un autovalore multiplo a seconda che questo sia defettivo (vedi Definizione 3.2) oppure no. La parte dell'esempio che riguarda la matrice identità è dovuta a Wilkinson [23].

Esempio 4.2. Consideriamo le matrici

$$A_1 := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad A_2 := \begin{bmatrix} 5/2 & -1/2 \\ 9/2 & -1/2 \end{bmatrix}.$$

La seconda è simile alla matrice

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

e pertanto l'autovalore 1 è in entrambi i casi di molteplicità algebrica 2, ma è derogatorio e non defettivo, e pertanto di ordine $p = 1$, per la matrice A_1 e defettivo (e non derogatorio), e pertanto di ordine $p = 2$, per la matrice A_2 (vedi Definizioni 3.1-3.3). Si può anche notare che A_1 è normale, A_2 no. Se ora assoggettiamo entrambe le matrici alla medesima perturbazione

$$\delta A := \begin{bmatrix} \epsilon_1 & \epsilon_3 \\ \epsilon_4 & \epsilon_2 \end{bmatrix}, \quad |\epsilon_i| \leq \epsilon, \quad i = 1 : 4,$$

le due matrici perturbate $A_1 + \delta A$ e $A_2 + \delta A$ hanno, rispettivamente, polinomi caratteristici

$$p_1(\lambda) := \lambda^2 - (2 + \epsilon_1 + \epsilon_2)\lambda + (1 + \epsilon_1)(1 + \epsilon_2) - \epsilon_3\epsilon_4,$$

$$p_2(\lambda) := \lambda^2 - (2 + \epsilon_1 + \epsilon_2)\lambda + (5/2 + \epsilon_1)(\epsilon_2 - 1/2) - (\epsilon_3 - 1/2)(9/2 + \epsilon_4),$$

ed autovalori

$$\lambda_{1,2}^{(1)} := \frac{(2 + \epsilon_1 + \epsilon_2) \pm \sqrt{\Delta_1}}{2}, \quad \lambda_{1,2}^{(2)} := \frac{(2 + \epsilon_1 + \epsilon_2) \pm \sqrt{\Delta_2}}{2}$$

ove:

$$\Delta_1 := (2 + \epsilon_1 + \epsilon_2)^2 - 4[(1 + \epsilon_1)(1 + \epsilon_2) - \epsilon_3\epsilon_4] = (\epsilon_1 - \epsilon_2)^2 + 4\epsilon_3\epsilon_4,$$

$$\begin{aligned} \Delta_2 &:= (2 + \epsilon_1 + \epsilon_2)^2 - 4[(5/2 + \epsilon_1)(\epsilon_2 - 1/2) - (\epsilon_3 - 1/2)(9/2 + \epsilon_4)] \\ &= 6\epsilon_1 - 6\epsilon_2 + 18\epsilon_3 - 2\epsilon_4 + \epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 - 2\epsilon_1\epsilon_2 + 4\epsilon_3\epsilon_4. \end{aligned}$$

Si perviene così ad espressioni e stime delle perturbazioni subite dall'autovalore 1 che sono in perfetto accordo con i Teoremi 3.3 e 3.5. Nel primo caso si ha infatti:

$$|\delta\lambda^{(1)}| := |1 - \lambda_{1,2}^{(1)}| = \left| \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \sqrt{\frac{\Delta_1}{4}} \right|$$

e poiché i termini di primo grado nelle perturbazioni ϵ_i si elidono nel calcolo di Δ_1 , abbiamo:

$$|\delta\lambda^{(1)}| = \left| \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \sqrt{\frac{(\epsilon_1 - \epsilon_2)^2}{4} + \epsilon_3\epsilon_4} \right| \leq (1 + \sqrt{2})\epsilon.$$

I termini di primo grado nelle perturbazioni ϵ_i non scompaiono invece nel calcolo di Δ_2 . Così, nel secondo caso si ha:

$$\begin{aligned} |\delta\lambda^{(2)}| &:= \left| 1 - \lambda_{1,2}^{(2)} \right| = \left| \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \sqrt{\frac{\Delta_2}{4}} \right| = \\ &= \left| \frac{\epsilon_1 + \epsilon_2}{2} \pm \sqrt{\frac{3\epsilon_1 - 3\epsilon_2 + 9\epsilon_3 - \epsilon_4}{2} + \frac{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2 - 2\epsilon_1\epsilon_2 + 4\epsilon_3\epsilon_4}{4}} \right| \leq \epsilon + \sqrt{8\epsilon + 2\epsilon^2}. \end{aligned}$$

La perturbazione subita dall'autovalore della matrice A_1 è dunque un $O(\epsilon)$ quali che siano gli ϵ_i ma quella subita dall'autovalore della matrice A_2 è, in generale, un $O(\epsilon^{1/2})$.

Osservazione 4.2. $O(\epsilon)$ perturbazioni generiche dei coefficienti di un polinomio inducono $O(\epsilon^{1/m})$ perturbazioni su uno zero di molteplicità m (vedi ad esempio [1]). La procedura *indiretta*, una volta molto seguita, di dedurre dagli elementi della matrice i coefficienti del polinomio caratteristico per calcolarne poi gli zeri ed ottenere così gli autovalori, è dunque da sconsigliare per gli autovalori derogatori ($m > p$, vedi Definizione 3.1). Infatti, gli errori introdotti nel calcolo dei coefficienti del polinomio caratteristico sono da ritenere del tutto casuali. Di conseguenza, un errore finale $O(\epsilon^{1/m})$, $\epsilon \approx \epsilon$, è quanto di meglio si possa prevedere, seguendo la procedura descritta sopra, per un autovalore λ di molteplicità algebrica m , e, nel caso λ sia derogatorio, si potrà avere un errore finale $O(\epsilon^{1/p})$ su λ solo se l'algoritmo che conduce ai coefficienti del polinomio caratteristico sarà stato eseguito con una precisione di macchina convenientemente maggiore di quella con la quale sono noti gli elementi della matrice. Al contrario, un errore finale $O(\epsilon^{1/p})$ su λ potrà essere previsto usando procedure *dirette* (che lavorano cioè direttamente sulla matrice senza passare per il polinomio caratteristico), ad esempio se $p = 1$ e la matrice è normale. Queste osservazioni hanno soprattutto interesse in quanto sono indicative, per ragioni di continuità, di quello che può accadere in casi *prossimi* a quelli in esse considerati (autovalori distinti e m autovalori molto vicini tra loro).

5. Matrici tridiagonali reali

D'ora in poi ci limiteremo a trattare il caso di matrici del tipo:

$$T_n = \begin{bmatrix} \delta_1 & \sigma_1 & & & & & \\ \tau_1 & \delta_2 & \sigma_2 & & & & \\ & \tau_2 & \delta_3 & \sigma_3 & & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & \tau_{n-2} & \delta_{n-1} & \sigma_{n-1} \\ & & & & & \tau_{n-1} & \delta_n \end{bmatrix}, \quad (5.1)$$

e, a meno che non vengano esplicitamente assunte ipotesi meno restrittive, supporremo sempre, d'ora in poi, che gli elementi di (5.1) soddisfino le condizioni

$$\begin{aligned} \sigma_h, \delta_h, \tau_h &\in \mathbb{R} \text{ per ogni } h, \\ \pi_h &\neq 0, \quad h = 1 : n - 1, \end{aligned} \quad (5.2)$$

ove:

$$\pi_h := \sigma_h \tau_h, \quad h = 1 : n - 1. \quad (5.3)$$

Osservazione 5.1. È noto che i determinanti, i valori in un assegnato punto dei polinomi caratteristici e le componenti degli autovettori, destri e sinistri, di matrici del tipo (5.1) sono soluzioni di equazioni alle differenze lineari ed omogenee del secondo ordine.

Osservazione 5.2. Consideriamo la famiglia $\mathcal{F}(\delta, \pi)$ di matrici costituita dalla totalità delle matrici che si ottengono dalla (5.1) modificando gli elementi σ_h e τ_h , ma lasciando inalterati gli elementi δ_h ed i prodotti π_h . Usando, ad esempio, le equazioni alle differenze di cui alla Osservazione 5.1, è facile riconoscere che le matrici di $\mathcal{F}(\delta, \pi)$ hanno tutte gli stessi autovalori ma non gli stessi autovettori. Pertanto (vedi ad esempio Teoremi 3.5 e 3.6), il condizionamento degli autovalori può dipendere in modo rilevante dalla particolare matrice di $\mathcal{F}(\delta, \pi)$ considerata.

Di solito, applicando a (5.1) la procedura di bilanciamento proposta in [14] si perviene ad una matrice di $\mathcal{F}(\delta, \pi)$ che è, tra quelle della

famiglia, una di quelle che hanno gli autovalori meglio condizionati, se non proprio quella, da questo punto di vista, migliore in assoluto. Naturalmente, e ne vedremo un esempio tra poco, non è detto che questo garantisca autovalori sufficientemente ben condizionati. La procedura di bilanciamento in [14] è automaticamente applicata da alcune delle più recenti routines per il calcolo degli autovalori. Un esempio in tal senso è costituito dalla function `EIG` del MATLAB per WINDOWS.

Le matrici del tipo (5.1) sono molto frequenti nelle applicazioni e di conseguenza molto trattate in letteratura. Esempi sono riportati più avanti. Un aspetto che le rende molto interessanti da un punto di vista numerico è evidenziato dal teorema che segue e dal suo corollario, che sono stabiliti in ipotesi meno restrittive di quelle in (5.2).

Teorema 5.1. La matrice T_n in (5.1) sia, in generale, ad elementi complessi: $T_n \in \mathbb{C}^{n \times n}$, ed inoltre si abbia

$$\sigma_h \neq 0, \quad h = 1 : n - 1. \quad (5.4)$$

[oppure: ed inoltre si abbia

$$\tau_h \neq 0, \quad h = 1 : n - 1.] \quad (5.5)$$

In queste ipotesi, nessuno degli autovalori di T_n è derogatorio.

Dim.: La presenza di un autovalore derogatorio comporterebbe l'esistenza di autospazio di dimensione maggiore di 1 (vedi Definizione 3.3). Considerata allora la matrice $T_{n\lambda} = T_n - \lambda I$, $\lambda \in \mathbb{C}$, il teorema sarà dimostrato se proveremo che, nelle ipotesi fatte, si ha: $\dim \ker(T_{n\lambda}) = 1$, o, equivalentemente: $\text{rank}(T_{n\lambda}) = n - 1$. Ma queste affermazioni sono una semplice conseguenza della (5.4) [della (5.5)]. Infatti la matrice di $\mathbb{C}^{(n-1) \times (n-1)}$ formata con le prime $n - 1$ righe e con le ultime $n - 1$ colonne [con le ultime $n - 1$ righe e con le prime $n - 1$ colonne] di $T_{n\lambda}$ è evidentemente non singolare se sussiste la condizione (5.4) [se sussiste la condizione (5.5)]. Questo conclude la dimostrazione. \square

Corollario 5.1. Nelle ipotesi del Teorema 5.1, se esistono autovalori multipli di T_n , questi sono solamente defettivi.

Il Teorema ed il Corollario 5.1 lasciano intendere che il trattamento numerico degli autovalori di matrici del tipo (5.1) può comportare notevoli difficoltà. Essi dicono infatti che eventuali autovalori multipli sarebbero, nel caso di quelle matrici, defettivi e non derogatori e cioè del tipo più sensibile a perturbazioni sugli elementi della matrice stessa, nel senso che la loro sensibilità alle perturbazioni sui dati sarebbe dello stesso ordine di quella che avrebbero se fossero calcolati come zeri del polinomio caratteristico (vedi Teorema 3.3, Esempio 4.2 e Osservazione 4.2). E, anche se si può obiettare che nella pratica si avrà sempre a che fare con matrici con autovalori semplici, è pure vero, purtroppo, che difficoltà considerevoli saranno sicuramente da mettere nel conto, per ragioni di continuità, anche quando matrici con autovalori semplici sono non normali e "molto vicine" (perché la differenza è piccola in norma o/e in rango, ecc.) a matrici con autovalori multipli defettivi. Situazioni di questo tipo si verificano, ad esempio, come vedremo nella Sezione 6, con le matrici di Bessel generalizzate (vedi Sezioni 5.1 e 5.2).

Per studiare il problema, abbiamo preso in considerazione alcune famiglie di matrici del tipo (5.1). Si tratta delle famiglie definite nelle Sezioni 5.1-5.6.

Per quanto detto nella Osservazione 5.2, le definiamo riportando solamente gli elementi diagonali δ_h ed i prodotti π_h . In realtà, spesso abbiamo applicato routines o functions di libreria e non sappiamo quale scelta dei fattori σ_h e τ_h nei prodotti π_h sia stata effettivamente fatta.

5.1. Matrici di Bessel

Sono definite assumendo (cfr. (5.1) e (5.3))

$$\begin{aligned} \delta_1 &:= -1, & \delta_h &:= 0, & h &= 2 : n, \\ & & & & & n \in \mathbb{N}^+. \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\pi_h = -1/(4h^2 - 1), \quad h = 1 : n - 1;$$

Il problema del calcolo accurato degli autovalori di queste matrici è trattato in dettaglio in [16].

5.2. Matrici di Bessel generalizzate

Sono definite assumendo (cfr. (5.1) e (5.3))

$$\begin{aligned} \delta_1 &:= -\frac{b}{a}, & \pi_1 &:= -\frac{b^2}{a^2(a+1)}, \\ \delta_h &:= \frac{b(2-a)}{(2h+a-2)(2h+a-4)}, & h &= 2:n, & n &\in \mathbb{N}^+, & (5.7) \\ \pi_h &:= -\frac{b^2h(h+a-2)}{(2h+a-1)(2h+a-2)^2(2h+a-3)}, & h &= 2:n-1, \end{aligned}$$

ove $a, a \in \mathbb{C}$, $-a \notin \mathbb{N}$, e $b, b \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, sono parametri.

Il polinomio caratteristico delle matrici (5.1), (5.3), (5.7) è l'unica soluzione polinomiale monica dell'equazione differenziale

$$z^2 u'' + (az + b)u' - n(n + a - 1)u = 0, \quad (5.8)$$

e differisce per una costante moltiplicativa dal *polinomio di Bessel generalizzato* $u_n^{(a,b)}$ di grado n , che è invece, per definizione [13], la soluzione polinomiale u della (5.8) determinata dalla condizione $u(0) = 1$. Il caso particolare $a = b = 2$ è quello considerato nella Sezione 5.1 ed i polinomi $u_n^{(2,2)}$ sono i *polinomi di Bessel (ordinari o classici)*. L'importanza delle matrici di Bessel generalizzate deriva dal grande interesse che hanno sempre avuto in letteratura, anche per alcune loro applicazioni, gli zeri dei polinomi di Bessel generalizzati, la loro localizzazione e le loro proprietà asintotiche. Una estesa bibliografia al riguardo si può trovare in [17], insieme ad una dettagliata discussione del problema del calcolo degli autovalori delle matrici (5.1), (5.3), (5.7). Nella Sezione 6 verrà riportata una breve sintesi di questa discussione e di quella in [16].

5.3. Matrici di Ikebe

Sono definite assumendo (cfr. (5.1) e (5.3))

$$\begin{aligned} \delta_1 &:= -1, & \delta_h &:= 0, & h &= 2:n, \\ & & & & n &\in \mathbb{N}^+. & (5.9) \\ \pi_h &:= -1/(h(h+1)), & h &= 1:n-1, \end{aligned}$$

Sono state introdotte e studiate in [12].

5.4. Matrici di Fibonacci

Sono definite assumendo (cfr. (5.1) e (5.3))

$$\begin{aligned} \delta_1 &:= -1, & \delta_h &:= 0, & h &= 2 : n, \\ & & & & & n \in \mathbb{N}^+. \end{aligned} \tag{5.10}$$

$$\pi_h := -1, \quad h = 1 : n - 1,$$

Gli autovalori delle matrici (5.1), (5.3), (5.10) sono gli zeri dei polinomi di Fibonacci [18].

5.5. Matrici di Gautschi

Sono definite assumendo (cfr. (5.1) e (5.3))

$$\begin{aligned} \delta_h &:= \theta_h - \theta_{h-1}, & h &= 1 : n, \\ & & & n \in \mathbb{N}^+, \end{aligned} \tag{5.11}$$

$$\pi_h := -\theta_h^2, \quad h = 1 : n - 1,$$

ove

$$\theta_h = \frac{2}{2h - 1} \left[\frac{\Gamma((h + 1)/2)}{\Gamma(h/2)} \right]^2. \tag{5.12}$$

Sono state introdotte in [5] per il calcolo degli zeri dei polinomi ortogonali nel semicerchio presentati in [6] ed ulteriormente studiati in [5], [4].

5.6. Matrici di Bessel rovesciate

Si ottengono dalle matrici di Bessel (5.1), (5.3), (5.6) considerando i prodotti π_h in ordine inverso

$$\begin{aligned} \delta_1 &:= -1, & \delta_h &:= 0, & h &= 2 : n, \\ & & & & & n \in \mathbb{N}^+. \end{aligned} \tag{5.13}$$

$$\pi_h = -1/(4(n - h)^2 - 1), \quad h = 1 : n - 1;$$

6. Matrici di Bessel generalizzate

I problemi che si possono presentare nel calcolo degli autovalori di matrici tridiagonali non normali possono essere brevemente, ma abbastanza significativamente, illustrati con le Figure 6.1 e 6.2 e con la

Tavola 6.1. Per una discussione più approfondita rimandiamo a [16] e [17]. La Figura e la Tavola 6.1 sono relative al caso delle matrici di Bessel (5.1), (5.3), (5.6) e la Figura 6.2 è invece relativa al caso delle matrici di Bessel generalizzate (5.1), (5.3), (5.7).

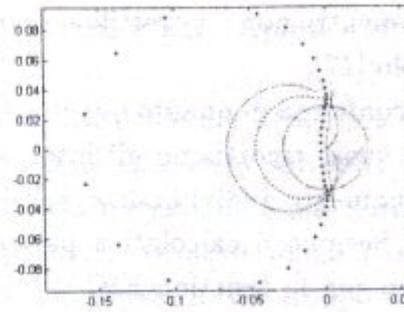
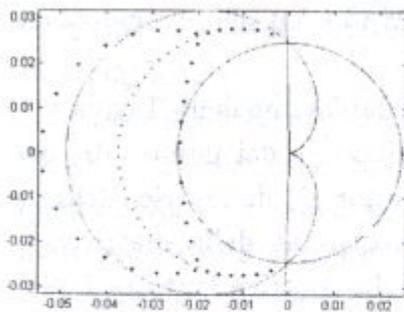


Figura 6.1. $n = 40; a = b = 2.$ Figura 6.2. $n = 40; a = -8.5, b = 2.$

Nel caso delle matrici di Bessel (5.1), (5.3), (5.6), abbiamo fatto la scelta

$$\sigma_h = -\tau_h = -(-\pi_h)^{1/2} = -1/(4h^2 - 1)^{1/2}. \tag{6.1}$$

Si possono dare diverse motivazioni per questa scelta. Ne riportiamo due. 1) La matrice T_n che ne risulta può essere rappresentata nella forma: $T_n = S_n - e_1 e_1^T$, ove S_n è antisimmetrica. La (6.1) conduce dunque ad una matrice che differisce da una matrice normale (vedi le Osservazioni 2.2 e 2.1) per una matrice di rango minimo, la matrice $e_1 e_1^T$, che ha rango 1. 2) La matrice T_n che ne risulta viene lasciata invariata dalla procedura di bilanciamento in [14] (vedi Osservazione 5.2).

La Figura 6.1 mostra, sovrapposti in una unica figura MATLAB, gli autovalori della matrice (5.1), (5.3), (5.6), (6.1) di ordine $n = 40$, calcolati con la function EIG del MATLAB, che implementa il classico algoritmo QR (punti grossi), e quelli corretti (punti piccoli). Mentre alcuni degli autovalori forniti dalla function EIG si sovrappongono a quelli esatti, altri sono sensibilmente diversi e dalla figura risulta evidente che molti di loro non hanno neppure una cifra significativa corretta. La figura riporta anche la regione del piano complesso alla

quale devono appartenere [20], [2] gli autovalori della matrice trattata. La regione è l'intersezione dell'insieme cardioidale aperto, del settore angolare aperto e del complementare del cerchio chiuso disegnati in figura ed è evidente che alcuni degli autovalori ottenuti con la EIG non le appartengono.

Il fenomeno appena descritto diventa sempre più evidente al crescere di n , mentre non è avvertibile in un figura MATLAB se n è abbastanza piccolo [17].

Una conferma di quanto appena detto si ha dall'esame della Tavola 6.1, nella quale riportiamo gli intervalli di oscillazione dei numeri di condizionamento individuali $\kappa(\lambda_i)$ degli autovalori λ_i di matrici definite nella Sezione 5 calcolati a partire dall'autosistema della matrice ottenuto con la function EIG del MATLAB. La matrice trattata è pertanto quella scelta, tra quelle definite nella Sezione indicata nella prima e quarta colonna della tavola, dalla procedura di bilanciamento in [14]. Nel caso della matrici di Bessel della Sezione 5.1, poiché l'impiego dei numeri di condizionamento $\kappa(\lambda_i)$ trova giustificazione teorica fintanto che i risultati, a partire dai quali sono calcolati, hanno una qualche attendibilità (vedi Sezione 4), abbiamo scelto valori di n abbastanza piccoli da garantire una accuratezza accettabile su tutti gli autovalori.

matrice	n	oscillazione $\kappa(\lambda_i)$	matrice	n	oscillazione $\kappa(\lambda_i)$
5.1	20	$2.8e + 2 \rightarrow 6.2e + 9$	5.4	40	$1.001 \rightarrow 4.3$
	24	$5.0e + 2 \rightarrow 1.0e + 12$	5.6	30	$1.0000 \rightarrow 1.0006$
5.3	40	$2.5 \rightarrow 59.5$	40	1.0000	$\rightarrow 1.0003$
5.5	40	$1.003 \rightarrow 4.4$	50	1.0000	$\rightarrow 1.0002$

Tavola 6.1

È da notare la rapidità dell'aumento dell'ordine di grandezza dei $\kappa(\lambda_i)$ al crescere di n nel caso delle matrici di Bessel (già per $n = 26$, non tutti gli autovalori calcolati con la EIG si sovrapporranno in una figura MATLAB ai valori corretti) e l'ottimo condizionamento degli autovalori delle matrici di Gautschi, Fibonacci e, soprattutto, di quelle di Bessel

rovesciate. Si noti che queste hanno gli stessi elementi di quelle di Bessel, ma soltanto disposti in ordine diverso!

Quanto appena detto richiama l'attenzione sulla opportunità di costruire un criterio per riconoscere dinamicamente (ossia durante l'esecuzione dell'algoritmo di calcolo), o, meglio ancora, a priori, il grado di condizionamento degli autovalori che si desidera approssimare e lascia intendere che la costruzione di simili criteri è una impresa tutt'altro che semplice.

Come già osservato nella Sezione 4, il calcolo dei $\kappa(\lambda_i)$ non è utilizzabile in questo senso. Un altro possibile approccio potrebbe essere quello della stima mediante la (4.2) della deviazione dalla normalità della matrice da trattare. Questo approccio, se desse buoni risultati, condurrebbe ad una stima globale *si, ma a priori*. Purtroppo, la Tavola 6.2 mostra che per le particolari matrici che stiamo considerando neppure questa procedura porta a risultati accettabili. Le famiglie di matrici esaminate nella tavola sono quelle considerate nella Tavola 6.1 e la scelta della matrice nelle famiglie è stata fatta, per ogni n , prendendo la matrice prescelta in [5] per la famiglia delle matrici di Gautschi, ed assumendo

$$\sigma_h = -\tau_h = -(-\pi_h)^{1/2}, \quad h = 1 : n - 1, \quad (6.2)$$

come nella (6.1), negli altri casi.

Le motivazioni a favore della scelta (6.2) sono le medesime di quelle che si possono addurre a favore della scelta (6.1) (infatti le matrici alle quali applichiamo la scelta hanno le medesime caratteristiche). Inoltre, adottando la scelta (6.2), si perviene, nel caso delle famiglie definite nelle Sezioni 5.1, 5.3, 5.4 e 5.6, a matrici T_n per le quali, con calcoli standard, si riconosce che:

$$\|T_n^H T_n - T_n T_n^H\|_F = \sqrt{8 |\pi_1|}$$

e dunque

$$\Delta(T_n) \leq \left(\frac{n^3 - n}{12}\right)^{1/4} (\|T_n^H T_n - T_n T_n^H\|_F)^{1/2} = \left(\frac{2(n^3 - n)}{3} |\pi_1|\right)^{1/4}. \quad (6.3)$$

(Queste due relazioni già fanno comprendere che la stima (4.2) non porterà ad un buon risultato.) La tavola riporta i valori della espressione centrale in (6.3). Nel caso delle matrici di Gautschi il valore è calcolato con la function appropriata del MATLAB; negli altri, con l'ultima espressione in (6.3).

n	5.1	5.3	5.4	5.5	5.6
5	2.2724	2.5149	2.9907	2.0721	1.0615
15	5.2274	5.7850	6.8796	4.7666	1.3005
30	8.7987	9.7373	11.5797	8.0231	1.5206
50	12.9087	14.2858	16.9887	11.7708	1.7162

Tavola 6.2

Concludendo: non possiamo considerare quest'approccio proponibile per lo studio del malcondizionamento degli autovalori di matrici tridiagonali, a meno di non apportare opportune modifiche alla misura della deviazione dalla normalità proposta da Henrici.

Risultati del tutto analoghi a quelli descritti sopra con riferimento alle matrici (5.1), (5.3), (5.6), (6.1) si hanno, come del resto prevedibile, anche se la condizione (6.1) viene abbandonata e si testano altre matrici della famiglia (5.1), (5.3), (5.6) [16] e, più in generale ancora, anche nel caso delle matrici di Bessel generalizzate (5.1), (5.3), (5.7). Anzi, in questo ultimo caso, per alcuni valori dei parametri a e b il tipico fenomeno di mal-condizionamento degli autovalori descritto sopra si accentua e diventa osservabile per valori anche molto piccoli di n [17]. Un esempio in questo senso è dato dalla Figura 6.2 e dal confronto fra questa e la Figura 6.1.

7. Un algoritmo alternativo

Come già ricordato, la localizzazione ed il comportamento asintotico degli zeri dei polinomi generalizzati di Bessel $u_n^{(a,b)}$ sono sempre stati oggetto di interesse in letteratura, anche per le loro applicazioni. Il fatto

che un metodo standard come quello della loro ricerca come autovalori di matrici di Jacobi associate ed un algoritmo prestigioso come il QR, sorprendentemente, non consentano di calcolarli in modo soddisfacente, pone naturalmente il problema della costruzione di un metodo e di un algoritmo alternativi ed efficienti.

D'altra parte, la problematica sollevata da questo caso specifico richiama la attenzione anche su questioni di carattere generale come quella della costruzione di un algoritmo ad hoc per il calcolo accurato di autovalori mal-condizionati.

La cosa non è però delle più semplici, nemmeno se ci si limita a considerare, come faremo in questa sezione, il problema particolare del calcolo approssimato degli zeri di $u_n^{(a,b)}$. Probabilmente, un modo efficace di porre questo problema è quello di formularlo articolandolo nei punti che seguono.

i) Il problema computazionale *base* è

$$n, a, b \rightarrow \boxed{\text{PCB}} \rightarrow \vec{\lambda} \quad (7.1)$$

dove $\vec{\lambda}$ denota il vettore degli zeri di $u_n^{(a,b)}$ o, ciò che è lo stesso, degli autovalori di (5.1), (5.3), (5.7).

ii) Quanto osservato finora può essere interpretato anche dicendo che, fra i moltissimi algoritmi subordinati dal problema computazionale (7.1), quello sinteticamente rappresentato dalle

$$n, a, b \rightarrow (5.7) \rightarrow (5.3) \rightarrow (5.1) \rightarrow \text{function EIG} \rightarrow \vec{\lambda}$$

è fortemente instabile e la causa (o la causa principale) della sua instabilità va attribuita al notevole mal-condizionamento del problema computazionale intermedio che ha per dati gli elementi delle matrici (5.1), (5.3), (5.7) e per risultato il vettore $\vec{\lambda}$.

iii) Sarà possibile ottenere da calcolo valori sufficientemente accurati di $\vec{\lambda}$ solo se il problema computazionale (7.1) è sufficientemente ben-condizionato e se tra gli algoritmi da esso indotti ce ne sono di sufficientemente stabili.

Una larga sperimentazione ed un accurato confronto effettuati in [17] mostrano che il QR è, fra tutti gli algoritmi noti ed applicabili al problema, quello che fornisce le migliori prestazioni. Gli altri algoritmi non sono in grado di competere col QR in termini di accuratezza ed in aggiunta a quelli già noti presentano tutti ulteriori inconvenienti specifici (rimandiamo a [17] per un resoconto più dettagliato).

Ma la cosa che più interessa è che in [17] viene anche presentato un nuovo algoritmo che è l'unico, al momento, in grado di fornire valori notevolmente accurati di $\vec{\lambda}$. L'algoritmo è dedotto da un metodo, introdotto in [15] e poi ulteriormente studiato in [16].

Il metodo approssima le soluzioni polinomiali di equazioni differenziali del tipo

$$Lu = 0, \quad L := \sum_{i=0}^2 a_{2-i} d^{2-i} / dz^{2-i}, \quad a_j \in \mathbb{P} \quad (j = 0, 1, 2), \quad (7.2)$$

trovandone tutti gli zeri contemporaneamente. Questo è ottenuto mediante una opportuna equazione non lineare in \mathbb{C}^n , ove n denota il grado delle soluzioni polinomiali da approssimare, che viene associata alla equazione differenziale (7.2) e costruita in modo che, sotto ipotesi genericamente soddisfatte sui coefficienti a_j in (7.2), le coordinate delle radici dell'equazione non lineare in \mathbb{C}^n sono gli zeri delle soluzioni polinomiali della equazione differenziale (7.2), e viceversa. L'equazione non lineare è definita nel modo seguente

$$\begin{aligned} F_n(\mathbf{z}) &= 0, \quad \mathbf{z} = (z_1, z_2, \dots, z_n) \in A \subset \mathbb{C}^n, \\ A &:= \{ \mathbf{z} \in \mathbb{C}^n : i \neq j \Rightarrow z_i \neq z_j; a_2(z_i) \neq 0, i = 1, 2, \dots, n \}, \\ F_n : A \subset \mathbb{C}^n &\rightarrow \mathbb{C}^n, \quad F_n(\mathbf{z}) := (F_{n1}(\mathbf{z}), F_{n2}(\mathbf{z}), \dots, F_{nn}(\mathbf{z})), \\ F_{ni}(\mathbf{z}) &:= R(z_i) - \sum_{j=1, n; j \neq i} 1 / (z_i - z_j), \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ R &:= -a_1 / (2a_2). \end{aligned} \quad (7.3)$$

Rimandiamo ai lavori citati sopra per maggiori dettagli su: I) proprietà delle soluzioni di (7.2) [15]; II) proprietà degli zeri delle soluzioni non banali di (7.2) [15]; III) condizioni per l'esistenza di soluzioni polinomiali non banali di (7.2) [15]; IV) una discussione generale delle

proprietà del metodo [15], [16]; V) lo studio di $\dim(\ker(L) \cap \mathbb{P})$ e di $\dim(\ker(L) \cap \mathbb{P}^m)$, $m \in \mathbb{N}$ [15]; VI) condizioni per la non singolarità delle radici della equazione (7.3) [16].

Qui ci limitiamo a riportare molto sinteticamente nel teorema che segue i risultati che derivano dalla teoria generale quando la si applica al caso particolare della equazione differenziale (5.8).

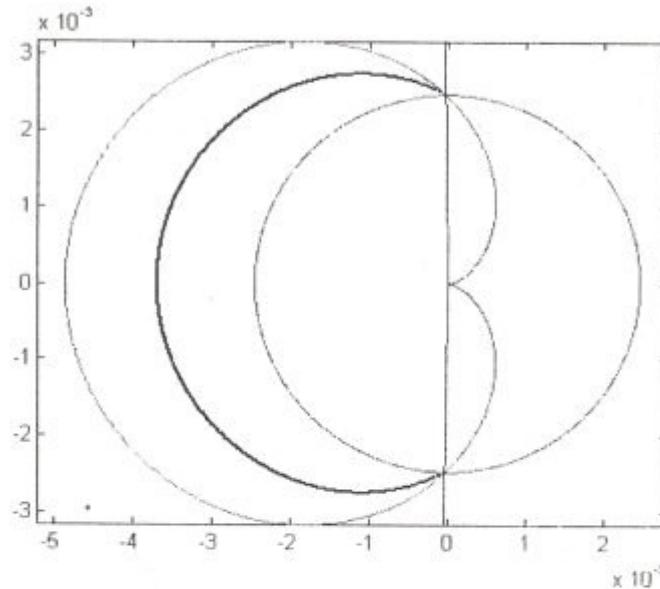


Figura 7.1. $n = 400$; $a = 12$, $b = 2$.

Teorema 7.1. Sia

$$a_2(z) = z^2, \quad a_1(z) = az + b,$$

in (7.2). Inoltre, sia $J_n(z)$ la matrice Jacobiana della funzione F_n in (7.3) calcolata in $z \in A$. Ciò premesso, $\vec{\lambda}_n^{(a,b)} = (\lambda_{n1}^{(a,b)}, \lambda_{n2}^{(a,b)}, \dots, \lambda_{nn}^{(a,b)}) \in A$ è una radice della equazione (7.3) se e solo se $\lambda_{n1}^{(a,b)}, \lambda_{n2}^{(a,b)}, \dots, \lambda_{nn}^{(a,b)}$ sono gli zeri di $u_n^{(a,b)}$. Inoltre risulta

$$\det J_n(\vec{\lambda}_n^{(a,b)}) \neq 0 \tag{7.4}$$

per ogni radice $\vec{\lambda}_n^{(a,b)}$ della equazione (7.3).

La semplicità della definizione della funzione F_n in (7.3), la conseguente semplicità della definizione della matrice $J_n(\mathbf{z})$ e, soprattutto, la (7.4) ci hanno indotto ad imperniare l'algoritmo sulla applicazione del metodo di Newton alla equazione non lineare (7.3).

In [17] viene provato che l'algoritmo che così si ottiene gode di *ottime proprietà di stabilità* e, con l'ausilio della equazione non lineare associata (7.3), che *il problema computazionale (7.1) è sempre ben condizionato*.

Il nuovo algoritmo si presenta dunque con credenziali molto buone e le prestazioni che esso fornisce confermano pienamente queste previsioni di carattere teorico. Non possiamo che rimandare ancora a [17] per ulteriori notizie e per i dettagli. Ci limitiamo qui ad illustrare le buone proprietà dell'algoritmo con l'esempio delle Figure 6.1, 6.2 e 7.1. In tutte e tre le figure i valori corretti (nei limiti della precisione di macchina del MATLAB) degli zeri/autovalori sono stati ottenuti proprio con l'algoritmo in questione. Nell'ultima figura, gli autovalori calcolati col QR non sono stati riportati perché l'insieme da essi costituito è così ampio da non poter essere rappresentabile in una figura MATLAB insieme alla regione di inclusione ed agli zeri/autovalori corretti in modo che questi siano distinguibili.

Osservazione 7.1. In [17] si possono anche trovare una interessante sperimentazione relativa al caso $a, b \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ ed alcune congetture che ne derivano. Il loro interesse sta nel fatto che il caso $a, b \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ è trattato in letteratura meno dettagliatamente del caso $a, b \in \mathbb{R}$.

8. Problemi aperti

Come già osservato, gli inconvenienti che si presentano nel calcolo degli autovalori delle matrici (5.1), (5.3), (5.7) sollevano problemi di interesse generale che vogliamo studiare. Li elenchiamo qui di seguito.

- Individuare criteri per stimare a priori o durante l'esecuzione della procedura di approssimazione il numero di condizionamento individuale degli autovalori da calcolare.

- Costruire un metodo ed un algoritmo generali, ossia applicabili ad una qualsiasi matrice [ad una qualsiasi matrice tridiagonale], che consenta il calcolo con accuratezza prefissata di tutti gli autovalori o di una parte degli autovalori della matrice.

Il metodo in [15], [16] non ha questi requisiti perché, pur essendo applicabile in situazioni largamente trattate in letteratura, richiede la conoscenza dell'equazione differenziale del tipo (7.2) soddisfatta dal polinomio caratteristico ed informazioni sugli autovalori sufficienti a costruire una adeguata approssimazione iniziale per il metodo di Newton.

- Individuazione degli strumenti di software/hardware adeguati (dovrà quasi certamente fornire la possibilità di variare dinamicamente la precisione di macchina).
- Affrontare gli stessi problemi, ma con riferimento all'autosistema completo.

Bibliografia

- [1] BEVILACQUA, R., BINI, D., CAPOVANI, M. and MENCHI, O., *Metodi numerici*, Zanichelli, Bologna, 1992.
- [2] DE BRUIN, M.G., SAFF, E.B. and VARGA, R.S., *On the zeros of the generalized Bessel polynomials: I & II*, *Nederl. Akad. Wetensch. Proc. Ser. A*, **84 (1)** 1981. Pubblicato anche come *Indag. Math.*, **43 (1)** 1981.
- [3] ELSNER, L. and PAARDEKOOPEL, M.H.C., *On measures of nonnormality of matrices*, *Lin. Alg. and Its Applic.*, **92** (1987), 107–124.
- [4] GAUTSCHI, W., *On the zeros of polynomials orthogonal on the semicircle*, *SIAM J. Math. Anal.*, **20** (1989), 738–743.
- [5] GAUTSCHI, W., LANDAU, H.J. and MILOVANOVIĆ, G.V., *Polynomials orthogonal on the semicircle, II*, *Constr. Approx.*, **3** (1987), 389–404.

- [6] GAUTSCHI, W. and MILOVANOVIĆ, G.V., *Polynomials orthogonal on the semicircle*, J. Approx. Theory, **46** (1986), 230–250.
- [7] GOLUB, G.H. and VAN LOAN, C.F., *Matrix Computations*, The Johns Hopkins University Press, Baltimore and London, second edition, 1989.
- [8] GOLUB, G.H. and WILKINSON, J.H., *Ill-conditioned eigensystems and the computation of the Jordan canonical form*, SIAM Review, **18** (1976), 578–619.
- [9] GRONE, R., JOHNSON, C.R., SA, E.M. and WOLKOWICZ, H., *Normal matrices*, Lin. Alg. and Its Applic., **87** (1987), 213–225.
- [10] HALMOS, P.R., *Finite-dimensional vector spaces*, Van Nostrand, New York, 1958.
- [11] HENRICI, P., *Bounds for iterates, inverses, spectral variation and field of values of non-normal matrices*, Numer. Math., **4** (1962), 24–40.
- [12] IKEBE, Y. et al., *The eigenvalue problem for infinite compact complex symmetric matrices with application to the numerical computation of complex zeros of $J_0(z) - iJ_1(z)$ and of Bessel functions $J_m(z)$ of any real order m* , Lin. Alg. and Its Applic., **194** (1993), 35–70.
- [13] KRALL, H.L. and FRINK, O., *A new class of orthogonal polynomials: the Bessel polynomials*, Trans. Amer. Math. Soc., **65** (1949), 100–115.
- [14] PARLETT, B.N. and REINSCH, C., *Balancing a matrix for calculation of eigenvalues and eigenvectors*, Numer. Math., **13** (1969), 292–304. Vedi anche HACLA, 315–326.
- [15] PASQUINI, L., *Polynomial solutions to second order linear homogeneous ordinary differential equations. Properties and approximation*, Calcolo, **26** (1989), 167–183.

- [16] PASQUINI, L., *On the computation of the zeros of the Bessel polynomials*, in R. V. M. Zahar, editor, *Approximation and Computation*, in International Series of Numerical Mathematics, n. 119, Birkhauser Verlag, Basel–Boston–Berlin, 1994, 511–534.
- [17] PASQUINI, L., *Accurate computation of the zeros of the generalized Bessel polynomials*, preprint, 1996.
- [18] RICCI, P.E., *Generalized Lucas and Fibonacci polynomials*, preprint.
- [19] RUHE, A., *On the closeness of eigenvalues and singular values for almost normal matrices*, *Lin. Alg. and Its Applic.*, **11** (1975), 87–94.
- [20] SAFF, E.B. and VARGA, R.S., *Zero-free parabolic regions for sequences of polynomials*, *SIAM J. Math. Anal.*, **7** (1976), 344–357.
- [21] WATKINS, D.S., *Fundamentals of matrix computation*, J. Wiley & Sons, New York, 1991.
- [22] WILKINSON, J.H., *The algebraic eigenvalue problem*, Clarendon Press, Oxford, England, 1965.
- [23] WILKINSON, J.H., *The perfidious polynomial*, in G.H. Golub, editor, *Studies in Numerical Analysis*, in *Studies in Mathematics*, n. 24, The Mathematical Association of America, 1984, 1–28.

RENDICONTI

DEL

SEMINARIO MATEMATICO E FISICO DI MILANO

SOTTO GLI AUSPICI DELL'UNIVERSITÀ E DEL POLITECNICO
Vol. LXV (1995)



Due Erre Grafica - Milano
1997