Tema nr. 5

Fie $p \in \mathbf{N}^*$ şi $n \in \mathbf{N}^*$ dimensiunile matricei A, $p \geq n$, ϵ - precizia calculelor, matricea $A \in \mathbf{R}^{p \times n}$.

- Pentru $p = n$, să se aproximeze valorile şi vectorii proprii ale matricei simetrice A $(A = A^T)$ folosind metoda Jacobi.

  Să se verifice că:

  $$A^{init} U \approx U\Lambda \quad , \quad U = [u^1\ u^2\ \cdots\ u^n] \quad , \quad \Lambda = \text{diag}[\lambda_1,\ \lambda_2,\ \cdots\ \lambda_n]$$

  unde λ_i sunt valorile proprii aproximative, u^i sunt vectorii proprii corespunzători iar A^{init} este o copie a matricei iniţiale.

  Verificarea $A^{init} U \approx \Lambda U$ se va face afişând norma matriceală:

  $$||A^{init} U - U\Lambda||.$$

- Să se calculeze următorul şir de matrice, $A^{(k)}$:

  $$A^{(0)} = A = L^0 (L^0)^T, A^{(1)} = (L^0)^T L^0, A^{(1)} = L^1 (L^1)^T, A^{(2)} = (L^1)^T L^1, ...$$

  $$A^{(k)} = L^k\,(L^k)^T (\text{ factorizare Cholesky a matricei } A^{(k)}) \ ,$$
  $$A^{(k+1)} = (L^k)^T\, L^k$$

  Calculele se opresc când diferenţa între două matrice consecutive este suficient de mică $(||A^{(k)} - A^{(k-1)}|| < \epsilon)$ sau când s-a depăşit un număr maxim de iteraţii prestabilit $(k > k_{max})$. Nu e nevoie sa memoraţi toate matricele din şir. Afişaţi ultima matrice calculată. Ce formă are? Ce informaţii se găsesc in această matrice? Pentru calculul descompunerii Cholesky folosiţi funcţia implementată pentru **Tema 2** sau funcţia din biblioteca numerică care calculează o descompunere LU.

- Pentru $p > n$, utilizând descompunerea după valori singulare (**S**ingular **V**alue **D**ecomposition) din biblioteca folosită la **Tema 2**, să se calculeze şi să se afişeze:

  - valorile singulare ale matricei A,
  - rangul matricei A,

– numărul de condiţionare al matricei A,

– pseudoinversa Moore-Penrose a matricei A, $A^I \in \mathbf{R}^{n\times p}$,

$$A^I = VSU^T$$

– calculaţi matricea pseudo-inversă în sensul celor mai mici pătrate:

$$A^J = (A^T * A)^{-1} * A^T$$

şi afişaţi norma:

$$\|A^I - A^J\|_1$$

Pentru rangul şi numărul de condiţionare al matricei să se folosească relaţiile descrise în acest fişier şi de asemenea funcţiile din bibliotecă, funcţii care calculează aceste valori.

Bonus 20 pt. : Pentru memorarea matricei A se va folosi un vector v de dimensiune $\frac{n(n+1)}{2}$ (se memorează doar partea inferior triunghiulară a matricei A, celelalte elemente găsindu-se din relaţia de simetrie). Algoritmul lui Jacobi se va scrie adaptat pentru acest tip de memorare a matricei A.

Vectori şi valori proprii - definiţii

Fie $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$ o matrice reală de dimensiune n. Se numeşte *valoare proprie* asociată matricei A, numărul complex $\lambda \in \mathbf{C}$, pentru care există un vector nenul $u \neq 0$ numit şi *vector propriu* asociat valorii proprii λ pentru care:

$$Au = \lambda\, u$$

Valorile proprii ale matricei A pot fi definite şi ca rădăcini ale polinomului caracteristic asociat matricei A, $p_A(\lambda)$:

$$p_A(\lambda) \ = \ \det(\lambda I - A) = 0$$

Polinomul caracteristic este un polinom de grad n, deci orice matrice de dimensiune n are n valori proprii (reale şi/sau complex conjugate).

Despre matricele simetrice se poate arăta că au toate valorile proprii reale.

Metoda lui Jacobi pentru aproximarea valorilor proprii ale matricelor simetrice

Pentru a aproxima valorile proprii ale unei matrice se foloseşte relaţia de asemănare. Două matrici A şi B se numesc *asemenea* ($A \sim B$) dacă există o matrice nesingulară P astfel încât $A = PBP^{-1}$ ($\longleftrightarrow B = P^{-1}AP$). Se observă că dacă $A \sim B$ atunci şi $B \sim A$. Relaţia de asemănare se foloseşte în algoritmii de aproximare a valorilor proprii deoarece matricele asemenea au acealaşi polinom caracteristic ($p_A(\lambda) \equiv p_B(\lambda)$) şi în consecinţă au aceleaşi valori proprii.

Fie $A \in \mathbf{R}^{n\times n}$ o matrice simetrică ($A = A^T$) . Se ştie că matricele simetrice au toate valorile proprii reale.

Ideea algoritmului lui Jacobi este de a construi un şir de matrice simetrice, asemenea cu matricea iniţială , şir care converge la o matrice diagonală. Matricea diagonală limită va fi asemenea cu matricea iniţială A şi prin urmare pe diagonala acestei matrice limită vom găsi valorile proprii căutate.

Construcţia şirului de matrice

O matrice de rotaţie $R_{pq}(\theta) = R_{pq} = (r_{ij})_{i,j=1,n}$ are urmatoarea formă :

$$R_{pq}(\theta) = R_{pq} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & c & \cdots & s & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & -s & \cdots & c & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

$$r_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{pentru } i=j, \quad i \neq p \text{ şi } i \neq q \\ c & \text{pentru } i=j, \quad i=p \text{ sau } i=q \\ s & \text{pentru } i=p,\ j=q \\ -s & \text{pentru } i=q,\ j=p \\ 0 & \text{pentru restul indicilor } i,j \end{cases}$$

unde $p, q \in \{1, \ldots, n\}$ sunt indici iar c şi s sunt două numere reale care satisfac relaţia $c^2 + s^2 = 1$ (c şi s pot fi alese astfel încât $c = \cos\theta, s = \sin\theta$).

Şirul de matrice $\{A^{(k)}\} \subseteq \mathbf{R}^{n\times n}$ se construieşte stfel:

$$A^{(0)} = A \quad , \quad A^{(k+1)} = R_{pq}(\theta) A^{(k)} R_{pq}^T(\theta)$$

unde $R_{pq}(\theta)$ sunt matrice de rotaţie.

- **indicii** (p, q) sunt aleşi ca fiind indicii celui mai mare element nediagonal din matrice luat în valoare absolută:

$$\begin{aligned} |a_{pq}^{(k)}| &= \max\{|a_{ij}^{(k)}|;\ i = 1,\dots,n\ ,\ j = 1,\dots,n\,,\ i \neq j\} = (A = A^T) = \\ &= \max\{|a_{ij}^{(k)}|;\ i = 2,\dots,n\ ,\ j = 1,\dots,i-1\} \end{aligned} \tag{1}$$

  (datorită simetriei matricelor din şir, se poate căuta elementul $a_{pq}^{(k)}$ de mai sus doar în partea strict inferior triunghiulară a matricei $A^{(k)}$)

- **unghiul** θ **(**$c = \cos\theta,\ s = \sin\theta,\ t = \mathrm{tg}\theta$**)** este ales astfel ca elementele (p, q) şi (q, p) ale matricei $A^{(k+1)}$ să fie zero, i.e.,

$$a_{pq}^{(k+1)} = a_{qp}^{(k+1)} = 0.$$

Schema algoritmului

$k = 0;\ U = I_n;$
calculează indicii p şi q (vezi (1)) ;
calculează unghiul θ, adică c, s şi t;
while ($A \neq$ matrice diagonală şi $k \leq k_{max}$)
{
$A = R_{pq}(\theta)\, A\, R^T_{pq}(\theta)$;
(a se vedea formulele (5) de mai jos)
$U = U\, R^T_{pq}(\theta)$;
(a se vedea formulele (7) de mai jos)
calculează indicii p şi q (vezi (1));
calculează unghiul θ, adică c, s şi t ;
(a se vedea formulele (3) şi (4) de mai jos)
$k = k + 1;$
}

La finalul acestui algoritm vom avea în matricea $A = A^{final}$ o matrice (aproximativ) diagonală, valorile de pe diagonală fiind aproximări ale valorilor proprii, iar coloanele matricei U (matrice ortogonală) sunt aproximări ale vectorilor proprii corespunzători.

$$A^{final} = U^T A^{init} U$$

Pasul k al algoritmului

La acest pas se construieşte matricea B pornind de la matricea A astfel:

$$B = R_{pq}(\theta)\ A\ R^T_{pq}(\theta)$$

şi matricea V pornind de la matricea U:

$$V = U\ R^T_{pq}(\theta).$$

Trecerea de la matricea A la matricea B se face după următoarele formule:

$$\left\{\begin{array}{lcl} b_{pj} & = & b_{jp} = c\ a_{pj} + s\ a_{qj}\ ,\ j = 1, 2, \ldots, n, \quad j \neq p,\ j \neq q \\ b_{qj} & = & b_{jq} = -s\ a_{pj} + c\ a_{qj}\ ,\ j = 1, 2 \ldots, n, \quad j \neq p,\ j \neq q \\ b_{pp} & = & c^2\, a_{pp} + s^2\, a_{qq} + 2\, c\, s\, a_{pq} \\ b_{qq} & = & s^2\, a_{pp} + c^2\, a_{qq} - 2\, c\, s\, a_{pq} \\ b_{pq} & = & b_{qp} = (c^2 - s^2)\, a_{pq} + c\, s\, (a_{qq} - a_{pp}) \\ b_{ij} & = & a_{ij} \quad \text{în rest} \end{array}\right. \tag{2}$$

Pentru a deduce unghiul θ se impune condiţia $b_{pq} = b_{qp} = 0$, adică :

$$(c^2 - s^2)a_{pq} + c\,s\,(a_{qq} - a_{pp}) = 0$$

de unde rezultă :

$$\alpha = \mathrm{cotg}(2\theta) = \frac{(a_{pp} - a_{qq})}{2a_{pq}}$$

Dacă notăm cu $t = \mathrm{tg}\theta$ avem:

$$\mathrm{cotg}(2\theta) = \frac{(1 - t^2)}{2t}$$

rezultă că t satisface ecuaţia:

$$t^2 + 2\alpha\,t - 1 = 0$$

deci

$$t = -\alpha + (\alpha^2 + 1)^{1/2} \text{ sau } t = -\alpha - (\alpha^2 + 1)^{1/2}.$$

Dintre cele două valori de mai sus ale lui t se alege rădăcina de modul minim ($\theta \in [0, \pi/4]$):

$$t = -\alpha + \mathrm{semn}(\alpha)\sqrt{\alpha^2 + 1} = \begin{cases} -\alpha + \sqrt{\alpha^2 + 1} & \text{dacă } \alpha \geq 0 \\ \\ -\alpha - \sqrt{\alpha^2 + 1} & \text{dacă } \alpha < 0 \end{cases} \tag{3}$$

$$\mathrm{semn}(\alpha) = \begin{cases} 1 & \text{dacă } \alpha \geq 0 \\ -1 & \text{dacă } \alpha < 0 \end{cases}$$

Avem:

$$c = \frac{1}{\sqrt{1 + t^2}} \quad , \quad s = \frac{t}{\sqrt{1 + t^2}} \tag{4}$$

Cazul $a_{pq} = 0$

Ţinând cont că a_{pq} este cel mai mare element nediagonal în valoare absolută, cazul $a_{pq} = 0$ înseamnă că matricea A la care s-a ajuns, este matrice diagonală, algoritmul oprindu-se în această situaţie - pe diagonala matricei A se găsesc aproximările valorilor proprii căutate. Prin urmare testul:

$$A \neq \text{ matrice diagonală}$$

din schema algoritmlui de mai sus se poate înlocui cu testul:

$$|a_{pq}| > \epsilon$$

unde ϵ este precizia calculelor.
Se observă că:

$$\begin{aligned} b_{pp} - a_{pp} &= s^2(a_{qq} - a_{pp}) + 2c\ s\ a_{pq} = 2s\ (c - \alpha\ s)a_{pq} = \\ &= 2s\ [c - (c^2 - s^2)s/(2c\ s)]a_{pq} = t\ a_{pq} \end{aligned}$$

La fel se deduce că :

$$b_{qq} - a_{qq} = -t\ a_{pq}$$

La pasul k operaţia $A = R_{pq}(\theta)\, A\, R_{pq}^T(\theta)$ se poate face fără a recurge la matricea auxiliară B astfel:

$$\begin{aligned} a_{pj} &= c\ a_{pj} + s\ a_{qj}\ , \quad j = 1, 2, \ldots, n\, ,\ j \neq p\, ,\ j \neq q, \\ a_{qj} &= a_{jq} = -s\ a_{jp} + c\ a_{qj}\ , \quad j = 1, 2 \ldots, n\, ,\ j \neq p\, , j \neq q, \\ a_{jp} &= a_{pj}\ , \quad j = 1, 2 \ldots, n\, ,\ j \neq p\, , j \neq q, \\ a_{pp} &= a_{pp} + t\ a_{pq} \\ a_{qq} &= a_{qq} - t\ a_{pq} \\ a_{pq} &= a_{qp} = 0 \end{aligned} \tag{5}$$

Trecerea de la matricea U la matricea V se face schimbând doar coloanele p şi q astfel:

$$\begin{cases} v_{ip} = c\ u_{ip} + s\ u_{iq}\ ,\ i = 1, 2, \ldots, n, \\ v_{iq} = -s\ u_{ip} + c\ u_{iq}\ ,\ i = 1, 2 \ldots, n. \end{cases} \tag{6}$$

Operaţia se poate face direct în matricea U, fără a recurge la matricea V:

$$\begin{cases} u_{ip} &= c\ u_{ip} + s\ u_{iq}\ ,\ \ i = 1, 2, \ldots, n, \\ u_{iq} &= -s\ u_{ip}^{veche} + c\ u_{iq}\ ,\ \ i = 1, 2 \ldots, n. \end{cases} \tag{7}$$

Observaţie: Matricea A fiind simetrică se poate memora într-un vector v de dimensiune $\dfrac{n(n+1)}{2}$. În acest fel se memorează doar partea inferior triunghiulară a matricei. Vectorul v va conţine elementele:

$$v : a_{11}, a_{21}, a_{22}, \ldots, a_{r1}, a_{r2}, \ldots, a_{rr}, \ldots, a_{n1}, a_{n2}, \ldots, a_{nn}$$

$$v_1 = a_{11}, v_2 = a_{21}, \cdots, v_{\frac{n(n+1}{2}} = a_{nn}$$

restul elementelor din matricea A se regăsesc din relaţia de simetrie:

$$a_{ij} = a_{ji}$$

Problema ce trebuie rezolvată pentru a uşura scrierea algoritmului lui Jacobi pentru valori proprii , cu memorare vectorială este următoarea:

Pentru orice indici $i, j \in \{1, 2, \ldots, n\}$ daţi (indici ai elementelor din matricea A) să se găsească indicele $k(i, j) \in \{1, 2, \ldots, \frac{n(n+1)}{2}\}$ (indice pentru elemnte din vectorul v) astfel ca:

$$a_{ij} = v_{k(i,j)} \qquad (a[i][j] = v[k(i, j)])$$

Descompunerea după valori singulare

(**S**ingular **V**alue **D**ecomposition)

Fie $A \in \mathbf{R}^{p \times n}$. Se numeşte decompunere după valori singulare a matricei:

$$A = USV^T \quad , \quad U \in \mathbf{R}^{p \times p} \; , \; S \in \mathbf{R}^{p \times n} \; , \; V \in \mathbf{R}^{n \times n}$$

cu $U = [u_1 \; u_2 \; ... \; u_p]$ (vectorii u_i sunt coloanele matricei U) şi $V = [v_1 \; v_2 \; ... \; v_n]$ matrice ortogonale iar S matrice de forma:

$$\text{pentru } p \leq n \qquad S = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_p & \cdots & 0 \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{p \times n}$$

$$\text{pentru } p > n \qquad S = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{p \times n}$$

unde numerele nenegative $\sigma_i \geq 0, \forall i$ sunt valorile singulare ale matricei A.

Rangul matricei A este numărul de valori singulare strict pozitive:

$$\text{rang } (A) = \text{ numărul de valori singulare } \sigma_i > 0.$$

Numărul de condiţionare al matricei A este raportul dintre cea mai mare valoare singulară şi cea mai mică valoare singulară strict pozitivă.

$$k_2(A) = \frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}} \quad ,$$

$$\sigma_{\max} = \max\{\sigma_i ; \sigma_i \text{ valoare singulară}\} \; ,$$

$$\sigma_{\min} = \min\{\sigma_i ; \sigma_i > 0 \text{ valoare singulară}\}$$

Pseudoinversa Moore-Penrose a matricei A se calculează folosind formula:

$$A^I = VS^IU^T.$$

Matricea S^I se calculează folosind formula descrisă mai jos. Presupunem că am calculat pentru matricea $A \in \mathbf{R}^{p\times n}$ descompunerea după valori singulare. Fie $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r > 0$ valorile singulare strict pozitive ale matricei A, $r = \mathrm{rang}(A)$.

Matricea $S^I \in \mathbf{R}^{n\times p}$ se defineşte astfel:

$$S^I = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2} & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{1}{\sigma_r} & \cdots & 0 \\ & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^{n\times p}.$$

Vectorul $x^I = VS^IU^Tb$ poate fi considerat soluţia sistemului $Ax = b$ chiar şi când $p \neq n$ iar sistemul nu are soluţie clasică. Când $p = n$ şi matricea A este nesingulară vectorul x^I coincide cu soluţia clasică a sistemului $Ax = b$.

Exemple

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \text{ are valorile proprii } \lambda_1 = -1\,,\ \lambda_2 = 0\,,\ \lambda_3 = 2$$

$$\lambda_1 = -1,\ u^1 = \begin{pmatrix} a \\ a \\ -a \end{pmatrix}\ a \in \mathbf{R}\ a \neq 0\ ,\quad \lambda_2 = 0,\ u^2 = \begin{pmatrix} b \\ -b \\ 0 \end{pmatrix}\ b \in \mathbf{R}\ b \neq 0$$

$$\lambda_3 = 2 \quad u^3 = \begin{pmatrix} c \\ c \\ 2c \end{pmatrix}\ c \in \mathbf{R}\ c \neq 0$$

$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \end{pmatrix}$ are valorile proprii $\lambda_1 = 0\,,\ \lambda_2 = 2(1-\sqrt{2})\,,\ \lambda_3 = 2(1+\sqrt{2})$

$2(1-\sqrt{2}) \approx -0.828427,\ 2(1+\sqrt{2}) \approx 4.828437$

$$\lambda_1 = 0 \quad u^1 = \begin{pmatrix} a \\ -a \\ 0 \end{pmatrix} \ a \in \mathbf{R}\ a \neq 0$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ are valorile proprii } \lambda_1 = \lambda_2 = 0\,,\ \lambda_3 = \lambda_4 = 2$$

$$\lambda_{1,2} = 0 \quad u^{1,2} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ -a \\ -b \end{pmatrix} \ a, b \in \mathbf{R} \quad , \quad \lambda_{3,4} = 2 \quad u^{3,4} = \begin{pmatrix} c \\ d \\ c \\ d \end{pmatrix} \ c, d \in \mathbf{R}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 4 & 5 & 6 \\ 4 & 5 & 6 & 7 \end{pmatrix} \text{ are valorile proprii } \lambda_1 = \lambda_2 = 0\,,\ \lambda_{3,4} = 2(4 \pm \sqrt{21})$$

$2(4+\sqrt{21}) \approx 17.165151\ ,\ 2(4-\sqrt{21}) \approx -1.165151$

$$\lambda_{1,2} = 0 \quad u^{1,2} = \begin{pmatrix} a \\ b \\ -3a-2b \\ 2a+b \end{pmatrix} \ a, b \in \mathbf{R}$$