Tema nr. 5

Fie $p \in \mathbf{N}^*$ și $n \in \mathbf{N}^*$ dimensiunile matricei $A, p \geq n, \epsilon$ - 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:

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

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

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

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

Afișați valorile și vectorii proprii calculați cu biblioteca folosită la **Tema** 2 (valoare proprie se traduce prin *eigenvalue* în engleză).

Fie $\lambda_1^J, \lambda_2^J, ..., \lambda_n^J$ valorile proprii calculate cu metoda Jacobi și $\lambda_1^b, \lambda_2^b, ..., \lambda_n^b$ valorile proprii calculate cu funcția din bibliotecă, pentru aceeași matrice simetrică A. Să se calculeze și să se afișeze următoarea sumă:

$$\sum_{i=1}^{n} \min\{|\lambda_i^J - \lambda_k^b|; k = 1, \dots, n\}.$$

- Pentru p > n, utilizând descompunerea după valori singulare (**S**ingular **V**alue **D**ecomposition) din biblioteca folosită la **Tema 2**, să se calculeze și să se afișeze:
 - valorile singulare ale matricei A,
 - rangul matricei A,
 - numărul de condiționare al matricei A,
 - pseudoinversa Moore-Penrose a matrice
i $A,\,A^I\in\mathbf{R}^{n\times p},$

$$A^I = VSU^T$$

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

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

și afișați norma:

$$||A^{I} - A^{J}||_{1}$$

Pentru rangul și numărul de condiționare al matricei să se folosească relațiile descrise în acest fișier și de asemenea funcțiile din bibliotecă, funcții care calculează aceste valori.

Bonus 10 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 relația de simetrie). Algoritmul lui Jacobi se va scrie adaptat pentru acest tip de memorare a matricei A. Puteți scrie algoritmul lui Jacobi doar cu acest tip de memorare rară și veți obține punctajul complet + bonusul.

Vectori și valori proprii - definiții

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

$$Au = \lambda u$$

Valorile proprii ale matricei A pot fi definite și 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 folosește relația de asemănare. Două matrici A și 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 și $B \sim A$. Relația de asemănare se folosește în algoritmii de aproximare a valorilor proprii deoarece matricele asemenea au acealași polinom caracteristic $(p_A(\lambda) \equiv p_B(\lambda))$ și în consecință au aceleași valori proprii.

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

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

Construcția șirului de matrice

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

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

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

unde $p,q \in \{1,\ldots,n\}$ sunt indici iar c și s sunt două numere reale care satisfac relația $c^2 + s^2 = 1$ (c și s pot fi alese astfel încât $c = \cos \theta, s = \sin \theta$). Şirul de matrice $\{A^{(k)}\} \subseteq \mathbf{R}^{n \times n}$ se construiește stfel:

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

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

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

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

(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 ($c = \cos \theta$, $s = \sin \theta$, $t = \operatorname{tg}\theta$) 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 și q (vezi (1)); calculează unghiul \theta, adică c, s și t; while (A \neq \text{matrice diagonală} \quad \text{și} \quad k \leq k_{max}) { A = R_{pq}(\theta) A R_{pq}^T(\theta); (a se vedea formulele (5) de mai jos) U = U R_{pq}^T(\theta); (a se vedea formulele (7) de mai jos) calculează indicii p și q (vezi (1)); calculează unghiul \theta, adică c, s și t; (a se vedea formulele (3) și (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:

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

și matricea V pornind de la matricea U:

$$V = U R_{pq}^T(\theta).$$

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

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

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

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

de unde rezultă:

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

Dacă notăm cu $t = tg\theta$ avem:

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

rezultă că t satisface ecuația:

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

deci

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

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

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

$$\operatorname{semn}(\alpha) = \begin{cases} 1 & \operatorname{dac\check{a}} \alpha \ge 0 \\ -1 & \operatorname{dac\check{a}} \alpha < 0 \end{cases}$$

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

$$(4)$$

Avem:

Cazul
$$a_{pq} = 0 \ (|a_{pq}| \le \epsilon)$$

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 situație - pe diagonala matricei A se găsesc aproximările valorilor proprii căutate. Prin urmare testul:

$$A \neq$$
 matrice diagonală

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

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

unde ϵ este precizia calculelor.

Se observă că:

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

= $2s \ [c - (c^2 - s^2)s/(2c \ s)]a_{pq} = t \ a_{pq}$

La fel se deduce că:

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

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

$$a_{pj} = c \, a_{pj} + s \, a_{qj} \,, \quad j = 1, 2, \dots, n \,, \ j \neq p \,, \ j \neq q \,,$$

$$a_{qj} = a_{jq} = -s \, a_{jp} + c \, a_{qj} \,, \quad j = 1, 2 \dots, n \,, \ j \neq p \,, j \neq q \,,$$

$$a_{jp} = a_{pj} \,, \quad j = 1, 2 \dots, n \,, \ j \neq p \,, j \neq q \,,$$

$$a_{pp} = a_{pp} + t \, a_{pq} \,,$$

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

$$a_{pq} = a_{qp} = 0 \,,$$

$$(5)$$

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

$$\begin{cases} v_{ip} = c u_{ip} + s u_{iq}, & i = 1, 2, \dots, n, \\ v_{iq} = -s u_{ip} + c u_{iq}, & i = 1, 2, \dots, n. \end{cases}$$
 (6)

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Descompunerea după valori singulare

(Singular Value Decomposition)

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

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

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

pentru
$$p \le n$$

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

pentru
$$p > n$$

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

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:

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

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

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

 $\sigma_{\max} = \max\{\sigma_i; \sigma_i \text{ valoare singular} \check{\mathbf{a}}\} ,$

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

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 $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r > 0$ valorile singulare strict pozitive ale matricei A, r = rang(A).

Matricea $S^I \in \mathbf{R}^{n \times p}$ se definește 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 soluția sistemului Ax = b chiar și când $p \neq n$ iar sistemul nu are soluție clasică. Când p = n și matricea A este nesingulară vectorul x^I coincide cu soluția clasică a sistemului Ax = b.

Exemple

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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