

**Esercizi per il corso di Data Science - Laurea in Scienza dei Materiali**

PROF. D. DI SANTE, DR. A. CONSIGLIO  
SEMESTRE INVERNALE 2024/2025

1° Foglio, Algebra Lineare  
25/09/2024

**Esercizio 1 - Algebra delle matrici**

(a) Iniziamo con il definire al calcolatore due matrici  $2 \times 2$   $A$  e  $B$ :

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 5 & 7 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 6 & 8 \end{bmatrix}.$$

Si determini la somma e la differenza delle due matrici ( $A + B$  e  $A - B$ ).

(b) Successivamente, si proceda con la moltiplicazione tra le due matrici, verificando se commutano o meno.

(c) Calcolare, se possibile, la divisione tra le due matrici ( $A/B$  e  $B/A$ ).

(d) Consideriamo un'altra coppia di matrici  $2 \times 2$   $A$  e  $B$ :

$$A = \begin{bmatrix} 101 & -90 \\ 110 & -98 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

In particolare, vogliamo considerare la somma:

$$A(\epsilon) = A + \epsilon B = \begin{bmatrix} 101 - \epsilon & -90 - \epsilon \\ 110 & -98 \end{bmatrix}.$$

Si calcoli l'evoluzione dello spettro degli autovalori di  $A(\epsilon)$  in funzione di  $\epsilon$ , considerando anche il caso  $\epsilon = 0$ . Coloro che sono interessati, possono dare uno sguardo al *teorema di Bauer-Fike*.

(e) Si calcolino gli autovalori complessi e gli autovettori della matrice:

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Successivamente si calcoli la matrice esponenziale  $e^{At}$ , dove  $t$  è un parametro reale nell'intervallo  $[0, 5]$ . Si ricordi che questa operazione è legata al calcolo di autovalori e autovettori, sia destri che sinistri. Si grafichino gli andamenti degli elementi di matrice in funzione di  $t$ .

(f) Chiamiamo  $\lambda$  gli autovalori, generalmente complessi, di un insieme di matrici reali random di dimensione  $n \times n$ , i cui elementi di matrice sono indipendenti e presi da una distribuzione Gaussiana standard (media nulla).

Verificare numericamente che, per piccoli valori di  $n$ , la distribuzione degli autovalori  $\lambda/\sqrt{n}$  è concentrata principalmente lungo l'asse dei numeri reali.

Verificare successivamente che, quando  $n$  diventa molto grande (idealmente  $n \rightarrow \infty$ ), si ha che  $\lambda/\sqrt{n}$  è distribuito uniformemente sul disco unitario nel piano complesso. Questo

comporterà una graduale scomparsa della concentrazione di autovalori lungo l'asse  $x$ , fino a raggiungere una condizione di uniformità.

Si realizzi anche un grafico che mostri l'evoluzione del modulo dell'autovalore avente norma maggiore, in funzione della dimensione  $n$  della matrice. Inoltre, si realizzi un grafico che mostri l'andamento della media degli autovalori maggiori di 1, in funzione di  $n$ .

Volendo evitare di riscaldare gli autovalori, quale proprietà della distribuzione Gaussiana dovrebbe essere modificata?

Coloro che sono interessati, possono dare uno sguardo alla *legge circolare di Girko*.

(g) Sia definita la matrice simmetrica  $I$  che rappresenta il tensore di inerzia di una collezione di masse  $m_i$ , con posizioni  $(x_i, y_i, z_i)$ , relativamente al loro centro di massa:

$$I = \begin{bmatrix} I_{xx} & I_{xy} & I_{xz} \\ I_{yx} & I_{yy} & I_{yz} \\ I_{zx} & I_{zy} & I_{zz} \end{bmatrix}$$

In particolare:

$$\begin{aligned} I_{xx} &= \sum_i m_i (y_i^2 + z_i^2), & I_{yy} &= \sum_i m_i (x_i^2 + z_i^2), & I_{zz} &= \sum_i m_i (x_i^2 + y_i^2), \\ I_{xy} &= - \sum_i m_i x_i y_i, & I_{yz} &= - \sum_i m_i y_i z_i, & I_{xz} &= - \sum_i m_i x_i z_i \end{aligned}$$

Sappiamo dall'algebra lineare che esiste una trasformazione del sistema di coordinate tale per cui questa matrice è diagonale: gli assi del sistema trasformato si chiamano *assi principali* e gli elementi diagonali della matrice di inerzia ( $I_a \leq I_b \leq I_c$ ) sono i *momenti principali di inerzia*.

Si scriva un codice in Python per determinare i momenti principali di inerzia di un certo numero di molecole, definite in una banca dati (dataset.xyz) che può essere scaricata da Virtuale. La banca dati può essere letta attraverso il pacchetto ASE (<https://wiki.fysik.dtu.dk/ase/>), da installare se non presente con il comando "pip install ase"):

```
from ase import Atoms
from ase.io import write, read
```

```
DataSet = read("dataset.xyz", index=':')
```

```
masses = [atom.get_masses() for atom in DataSet]
```

```
positions = [atom.get_positions() for atom in DataSet]
```

Gli atomi di ogni molecola vengono definiti per righe attraverso 3 coordinate cartesiane e la corrispondente massa atomica dell'elemento.

Per visualizzare le strutture molecolari, è possibile usare il programma Ovito (<https://www.ovito.org>), scaricabile gratuitamente, e leggere la banca dati.

Attenzione: per prima cosa, si calcoli il centro di massa di ogni molecola.

## Esercizio 2 - Decomposizione SVD

(a) Si costruisca in Python la SVD per le seguenti matrici:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} 7 & 1 \\ 0 & 0 \\ 5 & 5 \end{bmatrix}$$

(b) Si utilizzi la SVD per fattorizzare la matrice

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

(c) In questo esercizio vogliamo fattorizzare una matrice che generalizza quella considerata nel precedente punto (b). In particolare, si consideri una perturbazione  $\epsilon$  su un elemento di matrice di  $A$ :

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \\ \epsilon & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Per esempio, sia  $\epsilon = 0.00001$ . Come cambiano gli autovalori e i valori singolari associati ad  $A$ , rispetto al caso considerato prima ( $\epsilon = 0$ )? Si commentino eventuali stabilità e instabilità dei risultati.

(d) Siano dati la matrice  $A$  e il vettore  $\mathbf{b}$ , come definiti qui di seguito:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}$$

Si usi la SVD per verificare se  $\mathbf{b} = \hat{\mathbf{b}} + \mathbf{z}$ , dove  $\hat{\mathbf{b}}$  appartiene allo spazio colonna di  $A$  ( $\hat{\mathbf{b}} \in \text{Col}(A)$ ) e  $\mathbf{z}$  appartiene allo spazio nullo di  $A^T$  ( $\mathbf{z} \in \text{Null}(A^T)$ ).