Computació Numèrica

Part 2.2 - Valors propis i vectors propis
Valors singulars

M. Àngela Grau Gotés

Departament de Matemàtica Aplicada II
Universitat Politècnica de Catalunya · BarcelonaTech.

17 de març de 2021

Drets d'autor

"Donat el caràcter i la finalitat exclusivament docent i eminentment il·lustrativa de les explicacions a classe d'aquesta presentació, l'autor s'acull a l'article 32 de la Llei de propietat intel·lectual vigent respecte de l'ús parcial d'obres alienes com ara imatges, gràfics o altre material contingudes en les diferents diapositives"

Índex

En el camp de l'enginyeria els valors i els vectors propis tenen una relevància destacada per analitzar models amb oscilacions i resonàncies. El seu coneixement és bàsic en:

- Sistemes elèctrics de corrent alterna
- Vibració natural d'estructures
- Mecànica quàntica
- Làsers
- Resonància Magnètica Nuclear (NMR)
- Anàlisis de Components Principals
- Algoritme Pagerank

1.- Pont Tacoma Narrows 1940

2.- Enfonsament del Pont Tacoma Narrows, Washington. Video original

3.- Enfonsament del Pont Tacoma Narrows, Washington. Video

1.- The Anatomy of a Large-Scale Hypertextual Web Search Engine Autors: Sergey Brin and Lawrence Page

2.- https://sctmates.webs.ull.es/

2.- PageRank, Wikipedia

3.- La descomposición en valores singulares (SVD) y algunas de sus aplicaciones

Valors i vectors propis

Sigui $A = (a_{i\,j})_{n\times n}$ per $a_{i\,j} \in \mathbb{R} \quad {}_{1\leq i,j\leq n}$, A matriu quadrada de nombres reals; $\lambda \in \mathbb{R}$ un real i $v \in \mathbb{R}^n$ un vector.

Vector i valor propi

Si l'equació $\boldsymbol{Av = \lambda v}$ té alguna solució no trivial ($v \neq 0$) es diu que $\boldsymbol{\lambda}$ és un valor propi i $\boldsymbol{v}$ un valor propi de la matriu A.

- Espectre: $spec(A) = \{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n, \,/\, \lambda_k \text{valor propi } A\}$
- Radi espectral: $\rho(A) = \max\left(\{|\lambda_1|, \ldots, |\lambda_n|, \,/\, \lambda_k \text{valor propi } A\}\right)$
- Polinomi característic: $p(\lambda) = det(A - \lambda\, I)$.

Si $\boldsymbol{v}$ i $\boldsymbol{\lambda}$ compleixen $\boldsymbol{Av = \lambda v}$, llavors

1. $(-A)v = -\lambda v$,
2. $(A - \mu I)v = (\lambda - \mu)v$,
3. $A^{-1}v = \dfrac{1}{\lambda}v$,
4. $(A - \mu I)^{-1}v = \dfrac{1}{(\lambda - \mu)}v$,
5. El conjunt $\left\{v^{(1)}, v^{(2)}, \ldots v^{(k)}\right\}$ de vectors propis de valor propi $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_k$, tots diferents, és un conjunt de vectors linealment independent.

Dues matrius, A i B quadrades d'ordre n es diuen **semblants** si existeix una matriu S tal que $A = S^{-1}\, B\, S$. Una matriu és **diagonalitzable** si és semblant a una matriu diagonal.

Igualtat de valors propis

A i B semblants, λ i v tals que $Av = \lambda v$, llavors λ és un valor propi de B de un vector propi Sv.

Teorema de Schur

Per a qualsevol matriu quadrada A, existeix una matriu U ortogonal tal que $T = U^{-1}AU$ és triangular superior.

Els elements de la diagonal de T són els valors propis de la matriu A.

Els valors propis i els vectors propis d'una matriu $n \times n$ on $n \geq 4$ s'han de trobar numèricament enlloc de fer-ho a mà.

Els mètodes numèrics que s'utilitzen a la pràctica depenen del significat geomètric de valors propis i vectors propis. L'essència de tots aquests mètodes es recull en el mètode de les potències.

Mètode de les potències

Teorema (MP)

A matriu quadrada de nombres reals d'ordre n tal que

1. $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$
2. Existeixen n vectors propis linealment independents, $\left\{ v^{(1)}, v^{(2)}, \ldots, v^{(n)} \right\}$.
3. Per $x^{(0)} = a_1 v^{(1)} + a_2 v^{(2)} + \cdots + a_n v^{(n)}$ amb $a_1 \neq 0$

Llavors el mètode iteratiu $\boldsymbol{x^{(k)} = A\, x^{(k-1)}}$ és convergent i

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = \lim_{k\to\infty} A^k\, x^{(0)} = \lim_{k\to\infty} \lambda_1^k a_1 v^{(1)}\,.$$

El mètode iteratiu convergeix al valor propi de mòdul màxim

Fent ús de propietats citades anteriorment, podem establir els casos:

- **MP inversa (MPI)**

  Mètode de la potència per obtenir λ^{-1}, el valor propi de mòdul mínim: $A\,x^{(k)} = x^{(k-1)}$

- **MP inversa (MPD)**

  Mètode de la potència per obtenir $\lambda - \mu$, el valor propi de més llunyà a λ: $x^{(k)} = (A - \mu\,I)x^{(k-1)}$

- **MP inversa (MPI)**

  Mètode de la potència per obtenir $(\lambda - \mu)^{-1}$, el valor propi de més proper a λ: $(A - \mu\,I)\,x^{(k)} = x^{(k-1)}$

Calculeu, amb quatre xifres significatives, el valor propi dominant de la matriu:

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

$$x^0_{max} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad x^0_{min} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Exemple resolt

Vegeu el document . . . de MATLAB® del campus

Valor propi de mòdul màxim

Algorisme

1.- $x_0 = (\ , \ , \dots , \ )^t$

2.- $x^k = Ax^{(k-1)}$

3.- $m_k = \|x^k\|_\infty$ $\leftarrow$ sempre positiu !!

4.- $x^k = \dfrac{1}{m_{k+1}} x^k$

5.- **criteri de parada** $\|x^k - x^{(k-1)}\|_\infty < \epsilon$

6.- **residual** $\|Ax^k - m_k x^{(k)}\|_\infty < \epsilon$

L'aproximació del valor propi és m_k i la del vector propi és x^k.
Aquest algorisme només proporciona valors propis positius, cal modificar per tots els casos.

Mètode de Wielandt

Mètode deflacció de Wielandt

Sigui λ_1 un valor propi de la matriu A de dimensió n i x_1 un vector propi associat tal que la seva primera component és igual a 1. Considerem la matriu següent:

$$B = A - x_1 a_1,$$

on a_1 denota la primera fila de la matriu A. Aquesta nova matriu té tota la primera fila igual a zero. Si λ_2 i x_2 són, respectivament, valor i vector propis d'A amb la primera component de x_2 igual a 1, podem escriure

$$B(x_1 - x_2) = \lambda_1 x_1 - \lambda_2 x_2 - \lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_1 = \lambda_2(x_1 - x_2).$$

Veure bibliografia, Grau - Noguera

Quocient de Rayleigh

Quocient de Rayleigh

Aproximació valor propi

La convergència del mètode de la potència depèn de la magnitud del quocient $\theta = |\lambda_2|/|\lambda_1|$. Si $\theta \approx 1$ calen més iteracions per a una exactitud fixada.

Per a matrius simètriques, s'aconsella la successió per a l'aproximació del valor propi:

$$r_k = \frac{x_k^t \cdot A \cdot x_k}{x_k^t \cdot x_k}.$$

La convergència de r_k cap a $|\lambda_1|$ és de l'ordre de $\left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|}\right)^2$.

Es pot aplicar per qualsevol tipus de matriu, però no es manté l'ordre de convergència.

El sistema $x \cdot \lambda = A \cdot x$ és sobredeterminat, r_k és la solució de les equacions normals.

Mètode QR

El mètode de la potència i el mètode de la potència inversa només proporcionen una parella valor propi - vector propi; tots dos mètodes es poden modificar per donar totes les parelles valor i vector propi d'una matriu.
Hi ha, però mètodes per obtenir tots els valors propis en un sol algorisme. Un d'ells és l'anomentat mètode **QR**. Aquest és la base de tot el programari modern, inclòs MATLAB® , de càlcul de valors propis.

Factorització QR

El mètode **QR** es fonamenta en el fet que qualsevulla matriu quadradra admet descompossició QR : existeixen matrius **Q** i **R** tals que $A = QR$, amb Q ortogonal ($Q^{-1} = Q^t$) i R triangular superior.

El mètode consisteix en:

1. Transformem la matriu A en una matriu H Hessenberg superior fent ús de transformacions de Householder.
   Iniciem el mètode fent $H_1 = H$
2. Obtenim la factorització QR de la matriu H, $H_1 = Q_1\, R_1$
3. Multiquem Q i R en ordre invers per obtenir una nova H, $H_2 = R_1\, Q_1$
4. Repetim els pasos 2 i 3 fins que …
5. La diagonal de H convergeix als valors propis.

Demostració.

La transformació $A \to H$ és una transformació de similaritat via matrius ortogonals.
La transformació $H_{i+1} \to H_i$ és una transformació de similaritat, verifica

$$H_{i+1} = R_i\, Q_i = Q_i^{-1}\, Q_i R_i\, Q_i = Q_i^t H_i Q_i$$

Llavors la diagonal de H convergeix als valors propis de la matriu A. □

Transformacions de Householder

Per $v \in \mathbb{R}^n$ definim la transformació associada a v per

$$H = \begin{cases} I, & v = 0, \\ I - \dfrac{2}{v^t v} v v^t, & v \neq 0. \end{cases}$$

Propietats

1. H és simètrica, ortogonal i $H^2 = I$.
2. Si $x \perp v, \Rightarrow Hx = x$.
3. Si $x \parallel v, \Rightarrow Hx = -x \;\; Hv = -v$.
4. Si $||x|| = ||v||, v = x - y \, , \Rightarrow Hx = y$.

Factorització QR

Per A és una matriu $m \times n$, les matrius ortogonals Q_k modifiquen les files $k, \cdots, m$ de la manera següent:

$$\underset{A}{\begin{bmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{bmatrix}} \xrightarrow{Q_1} \underset{Q_1 A}{\begin{bmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \end{bmatrix}} \xrightarrow{Q_2} \underset{Q_2 Q_1 A}{\begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix}} \xrightarrow{Q_3} \underset{Q_3 Q_2 Q_1 A}{\begin{bmatrix} x & x & x \\ 0 & x & x \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}$$

De $Q_n Q_{n-1} \cdots Q_1 A = R$, construïm

$$A = \underbrace{Q_1^t \dots Q_{n-1}^t Q_n^t}_{Q} R = QR$$

Són una successió de simetries per transformar les columnes de la matriu A a una forma triangular superior

Valors singulars

Valors Singulars

Sigui A és una matriu $m \times n$, la matriu $A^t A$ és quadrada $n \times n$ simètrica i definida positiva, els seus n valors propis, λ_i, són reals i no negatius.

S'anomenen **valors singulars** de la matriu A les n arrels quadrades (pos.) dels valors propis no negatius de $A^t\, A$.

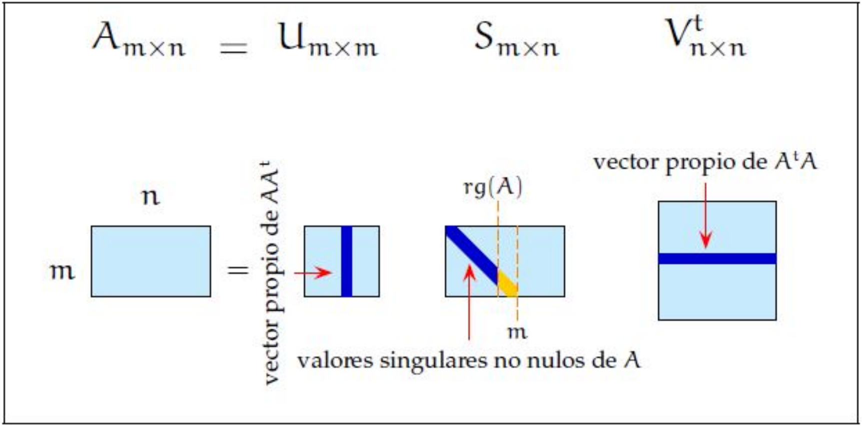
Valors singulars de A

$$\sigma_i = +\sqrt{\lambda_i}\,, \quad i = 1, \ldots, n$$

Ordenats usualment,

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n$$

Descomposició en Valors Singulars



L'algorisme de Golub i Reinsch (1970) per al càlcul de valors singulars no calcula en cap moment la matriu A^tA, sino que treballa directament sobre la matriu A.

Bàsicament, consisteix en dos grans passos: primer es transforma la matriu inicial en una de més senzilla i després s'aplica una variant del mètode QR per obtenir una successió de matrius convergent a una matriu diagonal que conté els valors singulars.

Sigui A una matriu $m \times n$, la pseudoinversa de Moore-Penrose, A^+ és la única matriu $n \times m$ tal que

$$A\,A^+\,A = A\,, \quad A^+\,A\,A^+ = A^+.$$

La matriu A^+ es pot calcular a partir de la descompossició en valors singulars de la matriu A.

Valors singulars de A i matriu A^+

$$A = USV^t = [U_1, U_2] \left[\begin{array}{cc} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{array} \right] [V_1, V_2]^t \Longrightarrow A^+ = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^t$$

La matriu Σ_1 és diagonal amb els valors singulars no nuls.

Sistemes lineals sobredeterminats

Sigui A una matriu $m \times n$, $m \geq n$, b un vector de m components, x el vector de n d'incògnites. La matriu de coeficients del sistema d'equacions normals, $A^t A$ és no singular si i només si $rank(A) = n$

Teorema (Equacions normals)

Si x és la solució dels sistema d'equacions normals, $A'(b - Ax) = 0$, llavors

$$||r(x)||_2 \leq ||r(y)||_2.$$

Teorema (Pinversa)

La solució de residu mínim de $A\,x = b$ és $x = A^+ b$.

Exemple

X	0.25	0.50	0.75	1.00	1.25	1.50	1.75
Y	0.40	0.50	0.90	1.28	1.60	1.66	2.02

Empreu una tècnica de mínims quadrats per ajustar la taula de dades a funcions del tipus:

1. $y = a_0 + a_1 x$. Determineu a_0 i a_1, doneu l'equació de la funció obtinguda i calculeu el vector residu en la solució.
2. $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4$. Determineu a_0, a_1, a_2, a_3 i a_4, doneu l'equació de la funció obtinguda i calculeu el vector residu en la solució.
3. $y = a x^{\alpha}$. Determineu a i α, doneu l'equació de la funció obtinguda i calculeu el vector residu en la solució.
4. Quin dels tipus sembla el més adient. Per què?

Valors propis. Valors singulars

Guia estudi

Guia estudi tema

Llibre Càlcul numèric: teoria i pràctica

- Conceptes i exercicis resolts: capítol 7, pàgines 250-297.
- Problemes proposats: 1, 2, 3, 4, 5, 6, i 8.
- Pràctiques resoltes : de la pàgina 298-304.
- Pràctiques proposades: pàgines 305-309.

Llibre Cálculo Científico con MATLAB y Octave

- Conceptes i exercicis resolts: capítol 6, pàgines 173-190.
- Problemes i pràctiques proposades: del 6.1 al 6.10

Referències

- Llibre de consulta - Accès UPCommons,
  Càlcul numèric: teoria i pràctica
- Llibre de consulta - Accès UPCommons,
  Cálculo numérico
- Numerical Computing with MATLAB,
  Libro de texto de Cleve Moler
- Eigenvalues and Singular Values,
  Chapter 10
- Least Squares,
  Chapter 5