

Computació Numèrica

Tema 2

Valors propis i vectors propis. Valors singulars

M. Àngela Grau Gotés

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

14 de març de 2023

“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”



© 2023 by M. Àngela Grau Gotés.

Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional.

1 Valors Propis

- Mètode de les potències
- Mètode deflacció de Wielandt
- Quocient de Rayleigh
- Mètode QR

2 Valors singulars

3 Guia estudi

- Referències

En el camp de l'enginyeria els valors i els vectors propis tenen una relevància destacada per analitzar models amb oscil·lacions 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 descomposició en valors singulars (SVD) y algunas de sus aplicaciones

Valors i vectors propis

Valors espectrals

Definicions

Sigui $A = (a_{ij})_{n \times n}$ per $a_{ij} \in \mathbb{R} \quad 1 \leq i, j \leq n$, 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 $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ té alguna solució no trivial ($v \neq 0$) es diu que λ és un valor propi i \mathbf{v} un valor propi de la matriu A .

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

Valors espectrals

Propietats

Si \mathbf{v} i λ compleixen $\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$, llavors

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

Valors espectrals

Matrius semblants

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 .

Valors espectrals

Càlcul amb ordinador

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

Mètode de la potència

Vector propi i valor propi de mòdul màxim

Teorema (MP)

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

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

Lavors el mètode iteratiu $x^{(k)} = A x^{(k-1)}$ és convergent i

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

El mètode iteratiu convergeix al valor propi de mòdul màxim

Mètode de la potència

Vector propi i valor propi de mòdul mínim, ...

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

- **MP amb desplaçament (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 amb desplaçament (MPDI)**

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

Mètode de les potències

Joc de proves

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

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

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

Exemple resolt

Vegeu el document ... de MATLAB® del campus

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

Mètode QR

Introducció

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'anomenat 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 quadrada admet descomposició QR: existeixen matrius **Q** i **R** tals que $A = QR$, amb **Q** ortogonal ($Q^{-1} = Q^t$) i **R** triangular superior.

Mètode QR

Mètode QR de Francis (1961)

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 passos 2 i 3 fins que ...
- 5 La diagonal de H convergeix als valors propis.

Demostració.

La transformació $A \rightarrow H$ és una transformació de similaritat via matrius ortogonals.

La transformació $H_{i+1} \rightarrow H_i$ 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

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

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, \dots, m de la manera següent:

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

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

Exemple resolt

Vegeu el document ... de MATLAB® del campus

Valors singulars

Valors Singulars

Definició

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

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

Ordenats usualment,

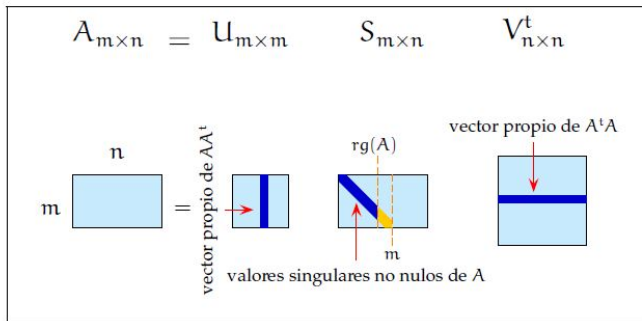
$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n$$

Descomposició en Valors Singulars

Teorema

Per a qualsevol matriu A d'ordre $m \times n$, existeixen matrius ortogonals U d'ordre $m \times m$ i V d'ordre $n \times n$ i una matriu diagonal Σ d'ordre $m \times n$ tals que

$$A = U\Sigma V^t.$$



Descomposició en Valors Singulars

Valors singulars de A i rang A

$$A = USV^t = [U_r, U_{m-r}] \begin{bmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} [V_r, V_{n-r}]^t$$

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

En el passat, la manera convencional de determinar el rang d'una matriu A era convertir A en una forma triangular superior ... Però en els càlculs de coma flotant pot ser que no sigui tan fàcil decidir si algun nombre és efectivament zero o no. En altres paraules, sense mirar explícitament els valors singulars sembla que no hi ha cap manera satisfactòria d'assignar el rang a A .¹

¹Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix, G. Golub, W. Kahan. J. SIAM Num. Anal. (1965).

Descomposició en Valors Singulars

Valors singulars de A i rang A

El càlcul de la svd permet escriure la matriu A com suma de r matrius de rang 1:

$$A = \sigma_1 u_1 v_1^t + \sigma_2 u_2 v_2^t + \cdots + \sigma_r u_r v_r^t,$$

on u_1, \dots, u_r i v_1, \dots, v_r són les r primeres columnes de les matrius U i V .

Els r (amb $r \leq m, n$) elements diagonals no nuls de Σ_r són els valors singulars de A . Si hi ha r valors singulars (no nuls) llavors \mathbf{r} és el **rang de A** . Es suposa que els r valors singulars de A en la diagonal de Σ_r apareixen en ordre descendent.

Descomposició en Valors Singulars

Algorisme

L'algorisme de Golub i Reinsch (1970) per al càlcul de valors singulars no calcula en cap moment la matriu $A^t A$, 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.

Descomposició en Valors Singulars

Teorema d'aproximació

El càlcul de la **SVD** permet escriure la matriu A com suma de r matrius de rang 1: $A = \sum_r u_1 v_1^t + \sigma_2 u_2 v_2^t + \cdots + \sigma_r u_r v_r^t$, on u_1, \dots, u_r i v_1, \dots, v_r són les r primeres columnes de les matrius U i V . Veure²

Teorema

La millor aproximació de A (en norma espectral) per matrius de mida $m \times n$ i rang $\leq k < r$ és la matriu

$$A_k = \sigma_1 u_1 v_1^t + \sigma_2 u_2 v_2^t + \cdots + \sigma_k u_k v_k^t,$$

obtinguda prenent només els k valors singulars més grans.

Amb norma espectral es verifica

$$\|A\|_2 = \sigma_1, \quad \text{i} \quad \|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}.$$

²Matrix Computations, G. Golub, C. Van Loan, Johns Hopkins Uni. Press, (1996).

Matriu Pseudoinversa

Pseudoinversa de Moore-Penrose

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

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

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

Valors singulars de A i matriu A^+

$$A = USV^t = [U_r, U_{m-r}] \begin{bmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} [V_r, V_{n-r}]^t \implies A^+ = V_r \Sigma_r^{-1} U_r^t$$

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

Sistemes lineals sobredeterminats

Matriu Pseudoinversa

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 $\text{rank}(A) = n$

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 $Ax = b$ 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 $y = a_0 + a_1x$. Determineu a_0 i a_1 , doneu l'equació de la funció obtinguda i calculeu el vector residu en la solució.
- 2 $y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4$. 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 $y = ax^\alpha$. 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?

Guia estudi






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