Projekt „Uruchomienie unikatowego kierunku studiów Informatyka Stosowana odpowiedzią na zapotrzebowanie rynku pracy"
jest współfinansowany ze środków Unii Europejskiej w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego.

Metody numeryczne

materiały do wykładu

dla studentów

4. Wartości własne i wektory własne

4.1. Podstawowe definicje, własności i twierdzenia
4.2. Lokalizacja wartości własnych
4.3. Metoda potęgowa znajdowania wartości i wektorów własnych

Materiały przygotowane w ramach projektu „Uruchomienie unikatowego kierunku studiów Informatyka Stosowana odpowiedzią na zapotrzebowanie rynku pracy" ze środków Programu Operacyjnego Kapitał Ludzki współfinansowanego ze środków Europejskiego Funduszu Społecznego nr umowy UDA – POKL.04.01.01-00-011/09-

4. Wartości własne i wektory własne

Jak widzieliśmy w rozdziale 2, każdej macierzy możemy przypisać pewne liczby i wektory zwane wartościami i wektorami własnymi. Przekonaliśmy się już, jak bardzo przydają się one do tworzenia rankingów na podstawie rozmaitych kryteriów.

Nie jest to jednak jedyne zastosowanie wartości i wektorów własnych. Przede wszystkim przydają się we wszelkich zagadnieniach fizycznych: właściwie gdziekolwiek pojawiają się modele oparte na równaniach różniczkowych. Przykładem jest prosty układ mechaniczny opisujący w przybliżeniu układ wielu ciężkich płyt połączonych ze sobą relatywnie elastycznymi dźwigarami, co modeluje np. konstrukcję wieżowca lub mostu. Wychylenia płyt z położenia równowagi są opisywane układem pewnych równań różniczkowych. Ze współczynników tego układu powstaje pewna macierz symetryczna, której wartości własne są częstotliwościami drgań własnych budynku. Istotne dla inżynierów jest, by nie były one bliskie pewnej zadanej liczbie: tak zwanej częstotliwości siły wymuszającej. Gdyby tak się stało, konstrukcja wpadłaby w rezonans i w końcu się rozpadła (przykład: katastrofa mostu w Tacoma, rezonans mostu w Wołgogradzie). Zatem umiejętność szacowania wartości własnych jest w tej sytuacji kluczowa.

W wielu sytuacjach, ujemność wartości własnych gwarantuje stabilność rozwiązań modeli układów fizycznych, biologicznych, czy ekonomicznych. Tak więc umiejętność obliczania lub przynajmniej szacowania wartości własnych pozwala nam na uzyskanie informacji na temat właściwego działania urządzeń elektrycznych, możliwości koegzystencji różnych gatunków w ekosystemie bądź firm na rynku.

Innym znanym zastosowaniem jest komputerowe modelowanie i rozpoznawanie ludzkich twarzy, których poszczególne kluczowe elementy modelowane są jako wartości własne odpowiedniej macierzy.

Ważną rolę wartości własne pełnią też w badaniach statystycznych, szczególnie tzw. analizie czynnikowej.

4.1. Podstawowe definicje, własności i twierdzenia.

Niech A będzie macierzą kwadratową stopnia n, natomiast I macierzą jednostkową stopnia n.

Definicja 4.1. (Wielomian charakterystyczny)

Równaniem charakterystycznym macierzy A nazywamy równanie:

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

a lewą stronę tego równania – jej *wielomianem charakterystycznym*.

Definicja 4.2. (Wartości własne i widmo)

Wartościami własnymi macierzy A nazywamy pierwiastki jej równania charakterystycznego. Zbiór wszystkich wartości własnych nazywamy *widmem* macierzy A.

Definicja 4.3. (Wektor własny)

Wektor $w \neq 0$ jest *wektorem własnym* macierzy A jeśli dla pewnej wartości własnej λ zachodzi:

$$Aw = \lambda w,$$

albo równoważnie:

$$(A - \lambda I)w = 0.$$

Uwaga 4.1.

Liczba wartości własnych (liczonych z krotnościami) jest równa n.

Uwaga 4.2.

Jako, że wartości własne są pierwiastkami równania charakterystycznego, wektory własne otrzymujemy przez rozwiązanie układu równań z osobliwą macierzą główną. Dlatego dla każdej wartości własnej otrzymujemy nieskończenie wiele wektorów własnych. W zastosowaniach najciekawszy jest przypadek, gdy każda z wartości własnych jest pojedynczym pierwiastkiem równania charakterystycznego. Wtedy, każdej wartości własnej przypisać można, z dokładnością do przemnożenia przez niezerową liczbę, dokładnie jeden wektor własny.

Przykład 4.1.

Obliczyć wartości własne i przyporządkowane im wektory własne dla macierzy:

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

Uwaga 4.3.

Wartości własne powstają z rozwiązania pewnego równania wielomianowego stopnia n. Jak wiadomo, takie równania nie zawsze posiadają n pierwiastków rzeczywistych, ale zawsze mają n pierwiastków zespolonych (licząc z krotnościami). Dlatego wartości własne rozważamy jako liczby zespolone. Co więcej, wektory własne przyporządkowane nierzeczywistej wartości własnej składają się również z elementów nierzeczywistych. Czasem jednak można zagwarantować rzeczywistość wartości własnych (co jest bardzo przydatne: liczb zespolonych np. nie da się rozsądnie uporządkować pod względem wielkości).

Twierdzenie 4.1.

Jeżeli A jest macierzą symetryczną rzeczywistą, to wszystkie jej wartości i wektory własne są rzeczywiste. Dodatkowo wektory własne odpowiadające różnym wartościom własnym są prostopadłe (tj. ich iloczyn skalarny jest równy 0).

Twierdzenie 4.2. (Frobeniusa-Perrona)

Jeżeli A jest macierzą rzeczywistą, której wszystkie elementy są dodatnie, to największa co do modułu wartość własna tej macierzy ma następujące własności:

- jest rzeczywista,
- jest pojedynczym pierwiastkiem równania charakterystycznego,
- odpowiadający jej wektor własny można wybrać tak, by wszystkie jego składowe były dodatnie.

Dodatkowo, jeśli suma elementów każdej z kolumn macierzy A wynosi 1, to $\lambda = 1$ jest największą co do modułu wartością własną tej macierzy.

Uwaga 4.4.

Uogólnione macierze Google spełniają założenia twierdzenia 4.2. Efektem tego jest twierdzenie 2.1, które umożliwia zastosowanie algorytmu PageRank. Założenie o wszystkich elementach dodatnich nie jest warunkiem koniecznym: np. dla uproszczonych macierzy Google (i wszystkich tzw. macierzy nieredukowalnych) teza twierdzenia Frobeniusa-Perrona też zachodzi.

Przedstawiona wcześniej metoda obliczania wartości i wektorów własnych jest bardzo skuteczna z matematycznego punktu widzenia, jednak w zastosowaniach, szczególnie dla dużych macierzy, nie jest zadowalająca. Powodem jest jej powolność: wymaga policzenia wyznacznika z parametrem (co samo w sobie jest czasochłonne), a następnie rozwiązania równania wielomianowego, co bywa niemożliwe, o czym można się przekonać czytając rozdział 5. Dlatego konieczne jest użycie innych metod szacowania lub przybliżonego obliczania wartości i wektorów własnych. Zanim do nich przejdziemy, poznamy jedno przydatne twierdzenie, natychmiast wynikające ze wzorów Viete'a.

Twierdzenie 4.3.

Jeżeli $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ są wartości własnymi macierzy A, a przez $tr\,A$ oznaczymy ślad macierzy A (czyli sumę elementów znajdujących się na jej przekątnej), to zachodzą następujące równości:

$$tr\,A = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n,$$

$$\det A = \lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \ldots \cdot \lambda_n.$$

4.2. Lokalizacja wartości własnych

W niektórych wspomnianych wcześniej praktycznych zastosowaniach nie jest istotna dokładna wartość wartości własnych. Wystarczy zagwarantować np. odpowiednią odległość wartości własnych od zadanej liczby (zagadnienie drgań własnych) lub odpowiedni znak części rzeczywistej wartości własnych (zagadnienie stabilności stanu równowagi). Dlatego zamiast żmudnych obliczeń może się przydać umiejętność szybkiego oszacowania i lokalizacji wartości własnych na płaszczyźnie zespolonej.

Przypomnijmy, że dla liczby zespolonej $z = a + bi \in \mathbb{C}$, normą lub modułem tej liczby nazywamy:

$$|z| = \sqrt{a^2 + b^2}.$$

Z kolei kulą (domkniętą) o środku w punkcie x i promieniu r nazywamy zbiór:

$$K(x, r) = \{z \in \mathbb{C} \colon |z - x| \le r\}.$$

Twierdzenie 4.4.

Jeżeli A jest macierzą rzeczywistą symetryczną, to każda jej wartość własna λ spełnia nierówność:

$$|\lambda| \leq \sqrt{tr\ A^2}.$$

Przykład 4.2.

Wartości własne poniższej macierzy:

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

są częstotliwościami drgań własnych pewnego budynku. Częstotliwość siły wymuszającej wynosi 6. By budynek nie wpadał w rezonans i nie groził zawaleniem, moduł różnicy dowolnej częstotliwości drgań własnych i częstotliwości siły wymuszającej musi być równy co najmniej 1. Za pomocą lokalizacji wartości własnych udowodnić, że rezonans się nie pojawi.

Twierdzenie 4.5. (o kołach Gerszgorina)

Niech $A = \left[a_{ij}\right]_{i=1..n, j=1..n}$. Niech $r_i = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{n} |a_{ik}|$. Wtedy wszystkie wartości własne macierzy A leżą w obszarze:

$$D = \bigcup_{i=1}^{n} K(a_{ii}, r_i),$$

a w każdej kuli składającej się na ten obszar znajduje się co najmniej jedna wartość własna.

Przykład 4.3.

Pewien układ elektryczny działa stabilnie, jeżeli wszystkie wartości własne poniższej macierzy:

$$A = \begin{bmatrix} -6 & 1 & -1 \\ 0 & -2 & 1 \\ -2 & 2 & -3 \end{bmatrix}$$

mają część rzeczywistą mniejszą od zera. Czy za pomocą kół Gerszgorina da się udowodnić stabilność lub brak stabilności tego układu?

4.3. Metoda potęgowa znajdowania wartości i wektorów własnych

Ze względu na wagę zastosowań istnieje wiele procedur przybliżonego obliczania wartości i wektorów własnych. Przedstawiona tu metoda nie jest ani najszybsza, ani najpopularniejsza. Jednakże ma też swoje zalety: po pierwsze jest jedną z najprostszych metod, po drugie daje pewne pojęcie o konstrukcji bardziej zaawansowanych algorytmów, a po trzecie jest dość skuteczna, jeśli potrzebujemy wyznaczyć tylko jedną, dominującą wartość własną i jej wektor własny. To zaś jest wystarczające w niektórych zastosowaniach, takich jak tworzenie rankingów, co widzieliśmy na podstawie algorytmu Google PageRank.

Definicja 4.4.

Jeżeli $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ są wartości własnymi macierzy A, uporządkowanymi wg. modułów tj.:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|,$$

to λ_1 nazywamy *dominującą* wartością własną macierzy A.

Uwaga 4.5.

Oczywiście, nie każda macierz posiada dominującą wartość własną, jednak jeśli wybralibyśmy macierz losowo ze zbioru wszystkich macierzy kwadratowych, to prawdopodobieństwo wylosowania macierzy bez dominującej wartości własnej jest zerowe. Dlatego w zastosowaniach założenie o istnieniu dominującej wartości własnej nie stwarza żadnych problemów.

Teraz możemy przedstawić tzw. *metodę potęgową* wyznaczania dominującej wartości własnej λ_1 macierzy A i jej wektora własnego $w^{(1)}$. Metoda ta działa, o ile wszystkie wartości własne są rzeczywiste (czyli np. dla macierzy symetrycznych bądź macierzy o wszystkich elementach nieujemnych).

Wybieramy dowolny niezerowy wektor $y^{(0)}$ i tworzymy ciąg wektorów:

$$y^{(m)} = Ay^{(m-1)}, \quad (m = 1,2, \dots). \tag{4.1}$$

Można wykazać, że dla każdej współrzędnej i zachodzi wtedy:

$$\lim_{m\to\infty} \frac{y_i^{(m+1)}}{y_i^{(m)}} = \lambda_1, \tag{4.2}$$

a zatem można zapisać, że dla odpowiednio dużych m i dowolnego i:

$$\frac{y_i^{(m+1)}}{y_i^{(m)}} \approx \lambda_1.$$

W szczególności, by przyspieszyć zbieżność metody, zamiast wybierać współrzędną można wybrać średnią arytmetyczną ilorazów odpowiednich współrzędnych (skoro każdy iloraz dąży do pewnej granicy, to i ich średnia arytmetyczna również musi zmierzać do tej samej granicy):

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \frac{y_i^{(m+1)}}{y_i^{(m)}} \approx \lambda_1. \tag{4.3}$$

Jeśli nasze obliczenia zatrzymamy na $y_i^{(m+1)}$, to dobre przybliżenie wektora własnego wartości własnej λ_1 otrzymamy przyjmując:

$$w^{(1)} \approx y^{(m)}.$$

Uwaga 4.6.

Teoretycznie może się zdarzyć, że wektor $y^{(0)}$ zostanie wybrany tak niefortunnie, że granica we wzorze (4.2) nie będzie istniała; prawdopodobieństwo takiej sytuacji jest jednak zerowe. Wówczas należy wybrać jako $y^{(0)}$ inny, również niezerowy wektor i powtórzyć obliczenia.

Uwaga 4.7.

Przedstawiona powyżej procedura działa również, gdy λ_1 jest wielokrotnym pierwiastkiem wielomianu charakterystycznego.

Przykład 4.4.

Za pomocą metody potęgowej, przyjmując $m = 5$, obliczyć przybliżenie dominującej wartości własnej i przyporządkowanego jej wektora własnego poniższej macierzy:

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Za pomocą metody potęgowej możemy również oszacować pozostałe wartości własne macierzy A. Jednakże wyniki tych obliczeń będą coraz mniej dokładne z każdą kolejną obliczaną wartością. Na przykład, jeśli założymy $|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$, to drugą co do wielkości modułu wartość własną wyznaczymy posługując się przybliżonym wzorem:

$$\lambda_2 \approx \frac{y_i^{(k+1)} - \lambda_1 y_i^{(k)}}{y_i^{(k)} - \lambda_1 y_i^{(k-1)}}, \tag{4.4}$$

gdzie $k < m$. Podobnie jak w przypadku największej wartości własnej, w praktyce iloraz po prawej stronie zastępujemy średnią arytmetyczną tych ilorazów.

Wektor własny dla wartości własnej λ_2 dany jest wzorem:

$$w^{(2)} \approx y^{(k+1)} - \lambda_1 y^{(k)}.$$

Kolejne wartości własne można obliczyć korzystając z analogicznych wzorów.

Przykład 4.5.

Za pomocą metody potęgowej, obliczyć przybliżenia wszystkich wartości własnych macierzy:

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$