METODE NUMERICE: Laborator #7
Calculul valorilor proprii si vectorilor proprii prin metodele puterii. Metoda Householder

Titulari curs: *Florin Pop, George-Pantelimon Popescu*

Responsabil Laborator: **Alexandru Țifrea**

Obiective Laborator

În urma parcurgerii acestui laborator studentul va fi capabil să:

- Utilizeze metoda puterii directe și metoda puterii inverse pentru a determina valorile și vectorii proprii ai unei matrice;
- Aplice metoda Householder pentru a determina vectorii și valorile proprii ale unei matrice;
- Aplice proprietățile valorilor și vectorilor proprii în rezolvarea unor probleme cu matrice

Noțiuni teoretice

Definiții

Definiția 1: Fie $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$. Un număr $\lambda \in \mathbb{C}$ se numește **valoare proprie** a matricei A dacă există un vector nenul $x \in \mathbb{C}^n$, numit **vector propriu** asociat valorii proprii $\lambda \in \mathbb{C}$, astfel încât $Ax = \lambda x$ (ecuația caracteristică).

Observații:
1) $Ax = \lambda x$ - acest sistem liniar și omogen admite soluții nenule dacă și numai dacă $p(\lambda) = det(\lambda I_n - A) = 0$.
2) Polinomul monic $p(\lambda)$ de gradul n se numește **polinom caracteristic** al matricei A. Valorile proprii ale unei matrice sunt zerourile polinomului caracteristic.
3) Numărul real $\rho(A) = \max\limits_{\lambda_i \in \lambda(A)} (|\lambda_i|)$ se numește **raza spectrală** a matricei A.

Definiția 2: Se numește **spectrul** (de valori proprii al) matricei A mulțimea $\lambda(A) = \{\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n\}$.

Proprietăți ale valorilor proprii

Au loc urmatoarele proprietati:

P1) Valorile proprii ale unei matrice satisfac relațiile $\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i = \sum\limits_{i=1}^{n} A(i,i) = tr(A) \\ \prod\limits_{i=1}^{n} \lambda_i = det(A) \end{cases}$

P2) Dacă există $T \in \mathbb{C}^{n\times n}$ astfel încât $B = TAT^{-1}$ atunci $\lambda(A) = \lambda(B)$. Transformarea de asemănare conservă spectrul de valori proprii al matricei.

Observații:

- Două matrice A și B sunt asemenea dacă există o matrice nesingulară $T \in \mathbb{C}^{n\times n}$ astfel încât $B = TAT^{-1}$.
- Pentru orice matrice $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ (în particular $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$) există o matrice unitară $Q \in \mathbb{C}^{n\times n}$ astfel încât matricea unitar asemenea cu A: $S = Q^T AQ \in \mathbb{C}^{n\times n}$ este superior triunghiulară.
- În cazul real, pentru orice matrice $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ există o matrice ortogonală $Q \in \mathbb{C}^{n\times n}$ astfel încât matricea ortogonal asemenea cu A: $S = Q^T AQ \in \mathbb{R}^{n\times n}$ are o structură cvasi-superior triunghiulară:

$$S = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & ... & S_{1q} \\ 0 & S_{22} & ... & S_{2q} \\ ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & ... & S_{qq} \end{bmatrix}$$

unde blocurile diagonale $s_{ii}, i = 1 : q$ sunt matrice 1×1 sau 2×2, cele de dimensiune 2×2 având valorile proprii complexe. Matricea S poartă numele de *forma Schur reală a matricei A*.

Determinarea vectorilor și valorilor proprii

Mediul de programare OCTAVE furnizează o funcție de calcul a valorilor și vectorilor proprii pentru o matrice A arbitrară. Un exemplu de utilizare:

```
[V, lambda] = eig(A);
```

Metoda puterii directe

Fie matricea $A \in R^{n\times n}$ având spectrul de valori proprii $\lambda(A) = \{\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n\}$ şi fie $X = \{x_1, x_2, ..., x_n\}$ un set de vectori proprii, de normă euclidiană unitară, ai matricei A.

Presupunem că $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq ... \geq |\lambda_n|$.

Dacă $y \in \mathbb{C}^n$ este un vector de normă euclidiană unitară având o componentă nenulă pe direcţia vectorului propriu $x_1 \in X$, definim şirul vectorial $\left(y^{(k)}\right)_{k\in\mathbb{N}}$ şi şirul numeric $\left(\lambda^{(k)}\right)_{k\in\mathbb{N}}$ prin relaţiile:

1. $y^{(0)} = y$
2. Pentru $k = 1, 2, ...$
3. $\quad z \leftarrow A \cdot y^{(k-1)}$
4. $\quad y^{(k)} \leftarrow \frac{z}{\|z\|_2}$
5. $\quad \lambda^{(k)} \leftarrow (y^{(k)})^T A y^{(k)}$

Observație: Metoda puterii directe converge oricum am alege y inițial care să verifice condiția menționată.

Metoda puterii inverse

Metoda puterii inverse de determinare iterativă a unui vector propriu se bazează pe relaţia conform căreia matricea $B = (A - \mu I)^{-1}$ va avea o valoare proprie net dominantă dacă, "deplasarea" μ este o aproximaţie, chiar şi grosieră, a unei valori proprii distincte a matricei A. Metoda puterii inverse, este, în fapt metoda puterii aplicată matricei B de mai sus şi se defineşte astfel:

1. $y^{(0)} = y$
2. Pentru $k = 1, 2, ...$
3. Se rezolvă sistemul liniar $(A - \mu I)z = y^{(k-1)}$
4. $y^{(k)} \leftarrow \frac{z}{\|z\|_2}$
5. $\lambda^{(k)} \leftarrow (y^{(k)})^T A y^{(k)}$
5. $\mu = \lambda^{(k)}$

Conform celor arătate la metoda puterii, şirul $\left(y^{(k)}\right)_{k \in \mathbb{N}}$ este convergent către vectorul propriu al matricei A asociat valorii proprii celei mai apropiate de deplasarea μ. Pentru a obține un algoritm care converge mai rapid, deplasarea μ este modificată de la o iteraţie la alta utilizând aproximaţia curentă $\mu = \lambda^{(k)}$ a unei valori proprii a matricei A. Această variantă, cunoscută sub denumirea de iterarea câtului Rayleigh, este definită de vectorul iniţial de normă unitară y, deplasarea iniţială $\mu = \mu_0 = y^T A y$ şi procedura în care μ se înlocuieşte cu $\mu = \lambda^{(k)}$

Metoda deflației

Deflația este aplicabilă doar în cazul **matricelor simetrice cu elemente reale**. Cu ajutorul metodei puterii se poate găsi valoarea proprie dominantă și vectorul propriu corespunzător. Pentru a afla restul de perechi proprii vom folosi următoarea construcție:

- Inițial avem o matrice A cu vectorii proprii $x_1, x_2, ..., x_n$ și valorile proprii $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$ dintre care pe λ_1 și x_1 îi calculăm cu metoda puterii.
- Construim matricea $B = (I_n - x_1 y^T)A$, cu y ales astfel încât $x_1 y^T = 1$. Această matrice va avea valorile proprii $\{0, \lambda_2, \lambda_3, ..., \lambda_n\}$ și vectorii proprii $\{x_1, z_2, z_3, ..., z_n\}$, unde $z_i = x_i - x_1 y^T x_i$, $\forall i = \overline{2:n}$.
- Dacă din matricea B scoatem prima linie și prima coloană, își păstrează perechile proprii mai puțin prima. Pe această matrice putem aplica același procedeu.

Metoda Householder

În esență, metoda propune o procedură de construcţie iterativă a unui şir de matrice ortogonal asemenea cu matricea iniţială şi rapid convergent către forma Schur reală. Dacă prin metodele puterii se obțineau aproximări ale valorilor și vectorilor proprii, prin metoda Householder se urmărește obținerea formei Schur reale, care conține valorile proprii **exacte**. Toate versiunile algoritmului QR sunt organizate în două etape:

1. etapa directă, de reducere a matricei date la forma superior Hessenberg prin transformări ortogonale de asemănare;
2. etapa iterativă, de construcţie recurentă a unui şir de matrice convergent către forma Schur reală.

- **Algoritmul QR cu deplasare explicită cu paşi simpli**
  Considerăm matricea H ca fiind o matrice superior Hessenberg. Atunci algoritmul se scrie astfel:
  1. $H_0 = H$
  2. Pentru $k = 0, 1, 2, ...$

4. $H_k - \mu_k I_n = Q_k R_k$
5. $H_{k+1} = Q_k R_k + \mu_k I_n$

Pentru o alegere convenabilă a lui μ_k se poate demonstra că metoda converge rapid către forma Schur reală a matricei H. De aceea, la fiecare pas facem atribuirea: $\mu_k = h_{nn}^{(k)}$. Astfel, algoritmul va fi următorul:

1. $\mu = h_{nn}$
2. $H = H - \mu I_n$
3. Pentru $j = 1 : (n-1)$
4. Se determină rotaţia plană $P_{j,j+1}$ astfel încât $(P_{j,j+1}^T H)_{j+1,j} == 0$
5. $H = P_{j,j+1}^T H$
6. Pentru $j = 1 : (n-1)$
7. $H = HP_{j,j+1}$
8. $H = H + \mu I_n$

- **Algoritmul QR cu deplasare explicită cu paşi dubli**
  Pentru depăşirea dificultăţilor legate de absenţa convergenţei şirului QR creat de utilizarea paşilor simpli atunci când matricea are valori proprii complexe se adoptă aşa numita strategie a paşilor dubli QR care comprimă într-o singură iteraţie doi paşi simpli QR succesivi. Algoritmul propriu-zis este următorul:

1. Pentru $k = 1, 2, ...$
2. $s = h_{n-1,n-1} + h_{n,n}$
3. $p = h_{n-1,n-1}h_{nn} - h_{n,n-1}h_{n-1,n}$
4. Se calculează $M = H^2 - sH + pI_n$
5. Se factorizează $M = QR$
6. $H = Q^T HQ$

Problema 1

Implementaţi în OCTAVE metoda puterii directe şi metoda puterii inverse.

Problema 2

Fie matricea 3-diagonală: $A = \begin{bmatrix} a_1 & c_1 & ... & ... & ... \\ b_2 & a_2 & c_2 & ... & ... \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ ... & ... & b_{n-1} & a_{n-1} & c_{n-1} \\ ... & ... & ... & b_n & a_n \end{bmatrix}$. Se construieşte şirul de polinoame:
$p_0(\lambda) = 1$, $p_1(\lambda) = \lambda - a_1$, ..., $p_n(\lambda) = (\lambda - a_n)p_{n-1}(\lambda) - b_n c_{n-1} p_{n-2}(\lambda)$

a) Arătaţi că $p_n(\lambda)$ este polinomul caracteristic al matricei A.
b) Scrieţi o funcţie Matlab care calculează valorile proprii şi vectorii proprii ai matricei A.

Problema 3

Să se demonstreze pentru $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$:
a) $\sigma(A^{-1}) = \left\{\frac{1}{\lambda_1}, \frac{1}{\lambda_2}, ..., \frac{1}{\lambda_n}\right\}$;
b) $\sigma(A - \mu I_n) = \{\lambda_i - \mu\}, \forall \mu \in \mathbb{R}$;
c) $\sigma(A^k) = \left\{\lambda_i^k\right\}, \forall k \in \mathbb{N}$;
d) $\sigma((A - \mu I_n)^{-1}) = \left\{\frac{1}{\lambda_i - \mu}\right\}, \forall \mu \in \mathbb{R}$;

Problema 4

Calculaţi valorile proprii şi vectorii proprii ai unui reflector Householder.
Indicație: $G^T u = e_1$. G - este un reflector. Coloanele lui G sunt vectori proprii.