

Propriedades da Decomposição em Valores Singulares e Implementação via Método de Lanczos

Estudante: Giovanna Castello de Andrade

Orientadora: Sandra Augusta Santos

26 de novembro de 2018

1 Introdução

Considerando o grande volume de dados armazenados na atualidade e o alto custo computacional para trabalhar com matrizes de grande porte, é extremamente importante a obtenção de métodos numéricos eficientes para tratá-las. Este trabalho visa estudar o caso específico no qual há interesse na obtenção dos autovalores desta matriz e de sua decomposição em valores singulares, ambas com diversas aplicações em problemas reais.

Em muitos contextos, a análise dos autovalores extremos de uma matriz é suficiente para a discussão do problema em questão. Portanto, quando trabalhamos com matrizes de dimensão grande, é interessante a obtenção de um método que permita a aproximação barata e eficiente apenas dos autovalores extremos da matriz. Para o caso específico onde a matriz é simétrica, o método de Lanczos cumpre este papel.

A decomposição em valores singulares, conhecida como SVD, do inglês *Singular Value Decomposition*, é também uma ferramenta essencial para a análise de matrizes e pode ser obtida através da decomposição espectral de matrizes associadas. Da mesma forma, informações a respeito dos maiores valores singulares às vezes são suficientes para a análise do problema.

Este trabalho consiste em um estudo a respeito do método de Lanczos, das propriedades da decomposição em valores singulares e da possibilidade de implementação de um algoritmo para obter os maiores valores singulares de uma matriz via método de Lanczos. Foram utilizadas para a pesquisa diferentes referências bibliográficas na área e reunidas informações importantes para a análise.

2 Propriedades Auxiliares de Matrizes Simétricas

Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz quadrada de ordem n , dizemos que λ_i é um autovalor de A se existe $v_i \in \mathbb{R}^n$ tal que

$$Av_i = \lambda_i v_i,$$

neste caso v_i é dito autovetor de A associado a λ_i e (λ_i, v_i) é dito autopar de A .

Para o caso específico em que A é uma matriz simétrica, ou seja, $A^t = A$, seguem alguns resultados importantes, que serão utilizados posteriormente.

Teorema 1. [8, Corolário 6.4.3] *Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz simétrica, então todos seus autovalores são reais. Além disso, autovetores associados a autovalores distintos são ortogonais.*

Definição 1. [8, Definição 6.2.2] *Sejam $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$, dizemos que B é similar ou semelhante à matriz A se existe uma matriz P invertível tal que*

$$B = P^{-1}AP.$$

Teorema 2. [8, Teorema 6.2.1] *Sejam $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ matrizes semelhantes, os autovalores de A e B são iguais.*

Teorema 3. [2, Secção 8.3.1] *Se A é uma matriz simétrica, então existe uma matriz Q ortogonal, tal que*

$$Q^t A Q = T,$$

em que T é tridiagonal.

Definição 2. [6, pág. 646] *Sejam $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ uma matriz e $0 \neq v \in \mathbb{C}^n$, então:*

1. $\{v, Av, A^2v, \dots, A^{j-1}v\}$ é chamada **sequência de Krylov**.
2. $\mathcal{K}(A, v, j) = \text{span}\{v, Av, A^2v, \dots, A^{j-1}v\}$ é chamado de **subespaço de Krylov de dimensão j** .
3. $K(A, v, j) = [v | Av | A^2v | \dots | A^{j-1}v] \in \mathbb{R}^{n \times j}$ é chamada de **matriz de Krylov**.

Teorema 4. [2, Teorema 8.3.1] *Se $Q^t A Q = T$ é a decomposição tridiagonal de uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, então, se $K(A, q_1, n)$ é a matriz de Krylov, temos que $Q^t = K(A, q_1, n) = R$ é triangular superior, ou seja, a matriz Q da decomposição tridiagonal de A coincide com a matriz Q da fatoração QR de $K(A, q_1, n)$.*

3 O método de Lanczos

O método de Lanczos é um método iterativo que tem como objetivo aproximar os autovalores extremos de uma matriz simétrica. Baseado em produtos matriz-vetor, o método se fundamenta na geração de uma sequência de matrizes tridiagonais $\{T_k\} \subset \mathbb{R}^{k \times k}$ cujos autovalores extremos aproximam, cada vez melhor, à medida que k cresce, os originais.

Este método é particularmente interessante quando a matriz tem dimensão grande, já que, ao invés de trabalhar diretamente com esta matriz (o que teria alto custo computacional), buscaremos uma matriz de dimensão menor cujos autovalores aproximem suficientemente bem os autovalores extremos da matriz original.

O Método de Lanczos pode ser apresentado de diferentes formas. Em [2], Golub e Van Loan o motivam através do quociente de Rayleigh. Já em [10] e [11], o método é apresentado como o caso simétrico do Método de Arnoldi. Neste trabalho seguiremos o raciocínio de [2] e iniciaremos, portanto, definindo e estudando algumas propriedades do quociente de Rayleigh.

Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz arbitrária, vamos supor que $q \in \mathbb{R}^n$ é uma aproximação para um autovetor dessa matriz. Se q for de fato autovetor, sabemos que existe um único ρ tal que

$$Aq = \rho q,$$

ou seja, ρ é autovalor associado a q . Por outro lado, se q não é autovetor, a equação anterior não é satisfeita e $Aq - \rho q \neq 0$. Assim, podemos definir o resíduo $\|r\|_2 = \|Aq - \rho q\|_2$, cuja minimização nos fornece uma aproximação para o autovalor ρ .

Teorema 5 (Quociente de Rayleigh). [11, Teorema 5.3.24] *Sejam $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $q \in \mathbb{R}^n$, o único número que minimiza o resíduo $\|Aq - \rho q\|_2$ é dado por*

$$\rho_A(q) = \frac{q^t A q}{q^t q},$$

e é denominado quociente de Rayleigh. Em particular, se q é autovetor de A , então ρ é autovalor associado a q .

Vamos agora considerar $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz simétrica. Então, pelo Teorema 1, sabemos que seus autovalores λ_i são reais e podemos supor

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n.$$

Neste caso, vale o Teorema de Courant-Fischer, a seguir, que estabelece λ_1 e λ_n como limitantes inferiores e superiores do quociente de Rayleigh para a matriz A , respectivamente.

Teorema 6 (Teorema de Courant-Fischer). [2, Teorema 8.1.2] *Se $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é uma matriz simétrica, então*

$$\lambda_1 = \max\{\rho_A(x) : x \neq 0\}$$

e

$$\lambda_n = \min\{\rho_A(x) : x \neq 0\}.$$

Com isto em mente, vamos tomar uma sequência $\{q_k\} \subset \mathbb{R}^n$ de vetores ortonormais e $\{Q_k\} \subset \mathbb{R}^{n \times k}$ de matrizes cujas colunas são formadas pelos k primeiros vetores da sequência $\{q_k\}$, ou seja, $Q_k = [q_1 | q_2 | \dots | q_k]$. Assim, para cada valor de k , a matriz Q_k é tal que $Q_k^t Q_k = I$ e o produto $Q_k^t A Q_k$ nos fornece uma matriz de dimensão $k \times k$.

Definiremos agora m_k e M_k como o menor e o maior autovalor da matriz $Q_k^t A Q_k$, respectivamente. Assim, pelos Teoremas de Courant-Fischer (Teorema 6) e do quociente

de Rayleigh (Teo. 5), conseguimos relacionar tais seqüências com os autovalores extremos de A :

$$M_k = \lambda_1(Q_k^t A Q_k) = \max_{x \neq 0} \frac{x^t (Q_k^t A Q_k) x}{x^t x} = \max_{x \neq 0} \frac{(Q_k x)^t A (Q_k x)}{(Q_k x)^t (Q_k x)} = \rho_A(Q_k x) \leq \lambda_1(A) \quad (1)$$

e

$$m_k = \lambda_n(Q_k^t A Q_k) = \min_{x \neq 0} \frac{x^t (Q_k^t A Q_k) x}{x^t x} = \min_{x \neq 0} \frac{(Q_k x)^t A (Q_k x)}{(Q_k x)^t (Q_k x)} = \rho_A(Q_k x) \geq \lambda_n(A). \quad (2)$$

Para $k = n$, temos que a matriz $Q_n^t A Q_n$ é semelhante à A e, portanto, pelo Teorema 2, seus autovalores são iguais, ou seja, $M_n = \lambda_1(A)$ e $m_n = \lambda_n(A)$. Veremos que as seqüências $\{m_k\}$ e $\{M_k\}$ construídas desta forma convergem para λ_1 e λ_n à medida que k se aproxima de n . Não é interessante, no entanto, o caso $k = n$, já que estaríamos trabalhando com uma matriz de dimensão tão grande quanto a original. Assim, surge o desafio de garantir que nossas aproximações M_k e m_k são boas o suficiente para k significativamente menor que n , de modo que tenhamos um método vantajoso para a obtenção de autovalores extremos de uma matriz de dimensão grande.

Neste contexto, o Método de Lanczos busca esta garantia através de uma boa escolha dos vetores q_k e, por consequência, das matrizes Q_k . Seguindo o mesmo raciocínio que descrito anteriormente, temos que:

1. a seqüência $\{q_k\}$ será escolhida de modo que $\{q_1, q_2, \dots, q_k\}$ seja uma base ortogonal para o Subespaço de Krylov de dimensão k ;
2. a matriz Q_k será tal que $Q_k^t A Q_k$ é uma matriz tridiagonal T_k , ou seja, usaremos decomposições tridiagonais parciais de A .

A motivação para o uso dos subespaços de Krylov é também descrita em [2] e se dá quando olhamos para o quociente de Rayleigh como uma função $\rho_A(q)$, suave para $q \neq 0$, cujo máximo ocorre para $q = v_1$, com $\rho(v_1) = \lambda_1$ e cujo mínimo ocorre para $q = v_n$, com $\rho(v_n) = \lambda_n$. Ou seja, sabemos que para estes pontos o gradiente de $\rho_A(q)$, expresso por

$$\nabla \rho_A(q) = \frac{2(Aq - \rho(q)q)}{q^t q}, \quad (3)$$

deve ser nulo.

Para cada uma das nossas aproximações m_k e M_k , temos $m_k = \rho_A(u_k)$ e $M_k = \rho_A(w_k)$. Além disso, $u_k, w_k \in \text{span}\{q_1, \dots, q_k\}$, já que, pelas relações (1) e (2), vemos que u_k e w_k são obtidos através do produto $Q_k x$ para vetores x convenientes, ou seja, de combinações lineares das colunas de Q_k .

Se $\nabla \rho_A(w_k) = 0$, então (M_k, w_k) é autopar de A . Caso contrário, $\nabla \rho_A(w_k)$ representa a direção de maior crescimento da função. Como queremos que a convergência seja rápida, é interessante que esta direção esteja no nosso próximo subespaço de trabalho, ou seja, que tomemos q_{k+1} de forma que

$$\nabla \rho_A(w_k) \in \text{span}\{q_1, q_2, \dots, q_k, q_{k+1}\}. \quad (4)$$

Assim, conseguimos garantir que $M_{k+1} \geq M_k$ e, então,

$$M_1 \leq M_2 \dots \leq M_n = \lambda_1. \quad (5)$$

Da mesma forma, se $\nabla \rho_A(u_k) = 0$, então (m_k, u_k) é autopar de A e, $\nabla \rho_A(u_k) = 0$. Caso contrário, este gradiente representa também a direção de maior crescimento, sendo que neste caso estamos interessados no sentido $-\nabla \rho(u_k)$, ou seja, de maior decrescimento. Assim, tomando q_{k+1} tal que

$$\nabla \rho(u_k) \in \text{span}\{q_1, q_2, \dots, q_k, q_{k+1}\}, \quad (6)$$

conseguimos garantir que $m_{k+1} \leq m_k$ e, então,

$$m_1 \geq m_2 \dots \geq m_n = \lambda_n. \quad (7)$$

Pela equação (3) vemos que para qualquer $x \in \mathbb{R}^n$, $\nabla \rho_A(x) \in \text{span}\{x, Ax\}$. Assim, como u_k, w_k já pertencem a $\text{span}\{q_1, \dots, q_k\}$, para acrescentar as condições (4) e (6), basta tomarmos vetores q_k tais que

$$\text{span}\{q_1, q_2, \dots, q_k\} = \text{span}\{q_1, Aq_1, \dots, A^{k-1}q_1\}, \quad (8)$$

ou seja, vetores ortogonais que gerem o subespaço de Krylov de dimensão k .

Por um lado, sabemos que este espaço pode ser gerado pelas colunas da matriz de Krylov $K(A, q_1, k)$, por outro, elas não são ortogonais. Assim, uma forma de obter um conjunto ortogonal base para este mesmo subespaço é através da fatoração QR reduzida de $K(A, q_1, k)$. Pelo resultado a seguir, a matriz Q terá espaço coluna igual a $K(A, q_1, k)$.

Teorema 7. [2, Teoremas 5.2.1 e 5.2.2] *Qualquer matriz $B \in \mathbb{R}^{m \times n}$ cujas colunas são linearmente independentes pode ser fatorada na forma QR , onde $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ é uma matriz ortogonal e $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é uma matriz triangular superior. Além disso, as n primeiras colunas de Q formam uma base ortonormal para o subespaço gerado pelas colunas de B .*

Lembramos agora que, além da condição descrita pela equação (8), nosso objetivo é construir Q_k de forma que $Q_k^t A Q_k$ seja tridiagonal. Felizmente, existe uma relação de igualdade entre a matriz Q_k obtida da fatoração QR de $K(A, q_1, k)$ e da tridiagonalização de A , descrita no Teorema 4. Dessa forma, temos que a matriz $T_k = Q_k^t A Q_k$ assim obtida é tridiagonal e, para cada valor de k , seus autovalores fornecem aproximações para os autovalores de A , sendo chamados de *Valores de Ritz* ou “*Estimativas de Lanczos*”. Além disso, pelo mesmo raciocínio das relações (1) e (2), temos que, se x é autovetor de T_k , os vetores $Q_k x$ fornecem aproximações para os autovetores de A . Os vetores $Q_k x$ são chamados de *Vetores de Ritz*.

Finalmente, de $Q^t A Q = T$, com T tridiagonal, e assumindo que $Q Q^t = I_n$, segue que $AQ = QT$ e obtemos a seguinte relação de recorrência:

$$Aq_k = \beta_{k-1}q_{k-1} + \alpha_k q_k + \beta_k q_{k+1}, \quad (9)$$

em que α e β são as entradas da matriz tridiagonal, esquematizada abaixo.

$$T_k = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \beta_{k-1} \\ 0 & \cdots & 0 & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{bmatrix}, Q_k = \begin{bmatrix} | & | & | & | \\ q_1 & q_2 & \cdots & q_k \\ | & | & | & | \end{bmatrix}.$$

Pela ortogonalidade dos vetores,

$$\alpha_k = q_k^t A q_k.$$

Além disso, isolando o vetor q_{k+1} na equação (9), obtemos:

$$q_{k+1} = \frac{r_k}{\beta_k},$$

em que

$$r_k = (A - I\alpha_k)q_k - \beta_{k-1}q_{k-1}.$$

Assim, podemos escrever o seguinte pseudocódigo para o método de Lanczos:

Algoritmo 1. Método de Lanczos [2, Algoritmo 10.1.1]

Sejam $\epsilon > 0$, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $q_1 \in \mathbb{R}^n$ um vetor arbitrário unitário. Defina $\beta_0 = 1, q_0 = 0, r_0 = q_1$ e $k = 0$.

Enquanto $k = 0$ ou $\beta_k \geq \epsilon$, faça:

1. $q_{k+1} = r_k / \beta_k$
2. $k = k + 1$
3. $\alpha_k = q_k^t A q_k$
4. $r_k = (A - \alpha_k I)q_k - \beta_{k-1}q_{k-1}$
5. $\beta_k = \|r_k\|_2$

Fim do enquanto.

Calcular os valores e vetores de Ritz desejados.

A presença de erros de arredondamento tem um efeito significativo na convergência do método de Lanczos, uma vez que provocam a perda de ortogonalidade do conjunto $\{q_1, q_2, \dots, q_k\}$. Por conta disso, de acordo com [2], durante a década de 50 e 60 o método foi considerado numericamente instável e pouco utilizado. Em 1971, no entanto, Paige [7], em sua tese de doutorado, retomou a força do método em resolver problemas de autovalores de matrizes grandes e esparsas.

Apesar da construção do método de Lanczos ser feita de forma que os vetores $\{q_k\}$ sejam ortogonais, de acordo com [10], o fato da fórmula de recorrência para q_{k+1} depender

explicitamente apenas dos dois vetores anteriores faz com que, na prática, a ortogonalidade seja perdida à medida que k cresce.

Uma das principais formas que estes erros se manifestam é no surgimento dos “autovalores fantasma”, que são autovalores que aparecem na matriz T_k com multiplicidade maior do que originalmente tinham em A . De acordo com [2], o surgimento deste fenômeno ocorre quando há perda de ortogonalidade com relação a um vetor de Ritz que já convergiu. Quando isso ocorre, o algoritmo começa a buscar novamente por aquele autovalor e, assim, surge uma multiplicidade inexistente na matriz original. Alguns resultados experimentais que ilustram melhor este problema serão apresentados na próxima seção. Na prática, sabemos que uma forma de minimizar estes erros é através da reortogonalização total ou seletiva dos vetores.

O algoritmo de Lanczos com reortogonalização total consiste em, a cada iteração, garantir que o vetor q_{k+1} é ortogonal aos anteriores através do processo de Gram-Schmidt. Já o algoritmo com reortogonalização seletiva, decorre também de [7] e consiste em ortogonalizar o vetor q_{k+1} em relação apenas aos vetores de Ritz que já convergiram. Implementamos algoritmos sem reortogonalização e com reortogonalização completa, cujo pseudocódigo é apresentado abaixo. A única diferença como relação ao Algoritmo 1 esta no acréscimo do passo 3.

Algoritmo 2. Método de Lanczos com Reortogonalização Completa [2, Algoritmo 10.3.4]

Sejam $\epsilon > 0$, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $q_1 \in \mathbb{R}^n$ um vetor arbitrário unitário. Defina $\beta_0 = 1, q_0 = 0, r_0 = q_1$ e $k = 0$.

Enquanto $k = 0$ ou $\beta_k \geq \epsilon$, faça:

1. $q_{k+1} = r_k / \beta_k$
2. $k = k + 1$
3. $\alpha_k = q_k^t A q_k$
4. $r_k = (A - \alpha_k I) q_k - \beta_{k-1} q_{k-1}$
5. Para $i = 0, 1, 2, \dots, k-1$, repetir: $r_k = r_k - q_i (q_i^t r_k)$
6. $\beta_k = \|r_k\|_2$

Fim do enquanto.

Calcular os valores e vetores de Ritz desejados.

Uma análise precisa da perda de ortogonalidade e dos efeitos provocados nas aproximações dos valores de Ritz para os autovalores de A pode ser obtida no trabalho de Paige [7].

3.1 Implementação do Método de Lanczos

Para avaliar a convergência do Método de Lanczos, os Algoritmos 1 e 2 foram implementados em MATLAB e foram realizados testes em matrizes com diferentes espectros e dimensões.

Como forma de melhor visualizar as etapas, todos os testes foram inicialmente feitos para matrizes de dimensão $n = 20$. Além disso, o único critério de parada estabelecido para estes testes foi $\beta_k < \epsilon$, ou seja, β_k próximo de zero. A intenção era que, caso o método não fosse interrompido, ao final das n iterações obteríamos uma matriz T_k de dimensão n , similar à original. Assim, poderíamos computar os autovalores de ambas e comparar os resultados obtidos.

Destacamos, no entanto, que o objetivo do método é garantir uma boa aproximação para os autovalores extremos de matrizes de dimensão grande, em contextos nos quais não há interesse em conhecer todo o espectro. Sendo assim, na prática não é interessante que sejam executadas n iterações e esta estratégia foi adotada apenas como forma de teste.

Para avaliar o comportamento do método em matrizes com diferentes espectros, inicialmente foram geradas matrizes simétricas com entradas aleatórias através das funções `rand` e `randn` do MATLAB, que geram números em distribuição uniforme e normal, respectivamente. No entanto, ao aplicar o método em matrizes deste tipo notamos que um dos autovalores sempre se apresentava significativamente deslocado dos demais, que se mantinham concentrados em um intervalo. Este fenômeno foi apresentado e explicado em [1] e [4].

Como forma de contornar este problema, as matrizes passaram a ser geradas de uma forma alternativa, tal que a aleatoriedade recaísse diretamente nos autovalores e não nos elementos da matriz. Para isso, foi utilizada a seguinte estratégia:

1. Escolha de n autovalores $\lambda_i, i = 1, \dots, n$.
2. Construção de uma matriz diagonal $D = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$
3. Construção de uma matriz ortogonal Q através do processo de reflexão de Householder, ou seja,

$$Q = I - 2uu^t,$$

em que u é um vetor unitário arbitrário.

4. Obtenção da matriz A simétrica através de

$$A = Q^t D Q.$$

Como Q é uma matriz ortogonal, temos que a matriz A obtida é similar a D e, portanto, os autovalores de A são exatamente os valores escolhidos.

Usando esta estratégia, os primeiros testes foram realizados em matrizes cujos espectros eram formado por n autovalores distintos, gerados aleatoriamente através da função `rand`.

Quando o método de Lanczos sem reortogonalização (Algoritmo 1) foi aplicado em uma matriz A assim gerada, notamos que, ao final das 20 iterações, o método foi capaz de identificar todos os autovalores da matriz, ou seja, todos os valores de Ritz convergiram para os autovalores de A . Isto pode ser observado na Figura 1, em que as linhas tracejadas

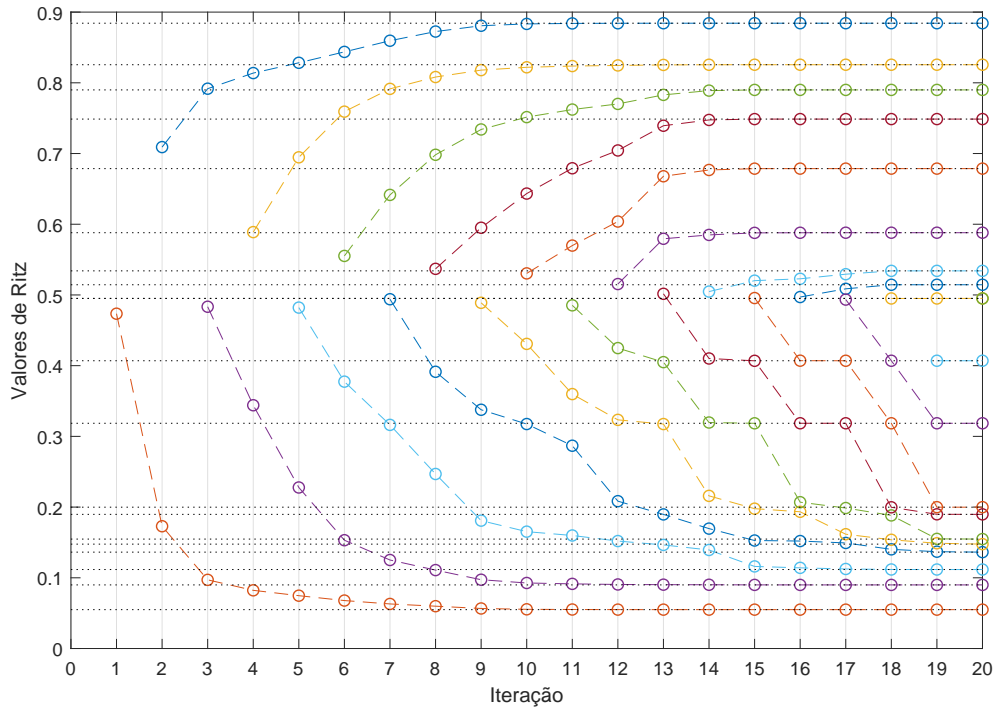


Figura 1: Valores de Ritz obtidos a cada iteração quando o método de Lanczos foi aplicado em uma matriz com autovalores distintos, gerados de forma aleatória.

pretas horizontais correspondem aos autovalores da matriz original A (obtidos através da função `eig` do MATLAB) e para cada iteração k são plotados os k autovalores da matriz T_k , ou seja, os valores de Ritz. Para cada incremento em k , a dimensão da matriz T_k aumenta em um e, portanto, seu número de autovalores também. Desta forma, para cada iteração, uma aproximação para um novo autovalor de A passa a existir e é aprimorada nas próximas iterações. Assim, as curvas tracejadas coloridas foram geradas para acompanharmos visualmente esse comportamento, ainda que elas não tenham um significado preciso.

Com auxílio do gráfico, observamos que as aproximações para os autovalores extremos da matriz são as primeiras a serem obtidas e também a se tornarem precisas. Isto vai de acordo com o objetivo principal do método, que é justamente a aproximação de autovalores extremos de matrizes. A Figura 2 apresenta um gráfico em escala logarítmica do erro obtido, em cada iteração, das aproximações dos dois maiores e menores autovalores da matriz.

Como próxima etapa, foram realizados testes em matrizes cujos autovalores possuem multiplicidade. Para isso, foram avaliados quatro casos: matrizes com multiplicidade nos autovalores extremos superior e inferior; matrizes com multiplicidade apenas nos autovalores superiores; matrizes com multiplicidade apenas nos autovalores inferiores e matrizes com multiplicidade no interior do espectro. Em todos estes casos, observou-se que o algoritmo de Lanczos sem reortogonalização foi capaz de identificar todos os autovalores, no entanto, no geral perdeu-se informação a respeito da multiplicidade de cada um, mesmo após n iterações. Observou-se que autovalores múltiplos de A apareceram com multiplicidade reduzida em T_n , enquanto autovalores simples de A apareceram com multiplicidade em T_n , ou seja, houve o surgimento de “autovalores fantasmas”.

Observou-se, no entanto, que os “autovalores fantasmas” no geral começam a aparecer apenas após a obtenção de uma aproximação para todos os autovalores distintos, ou seja,

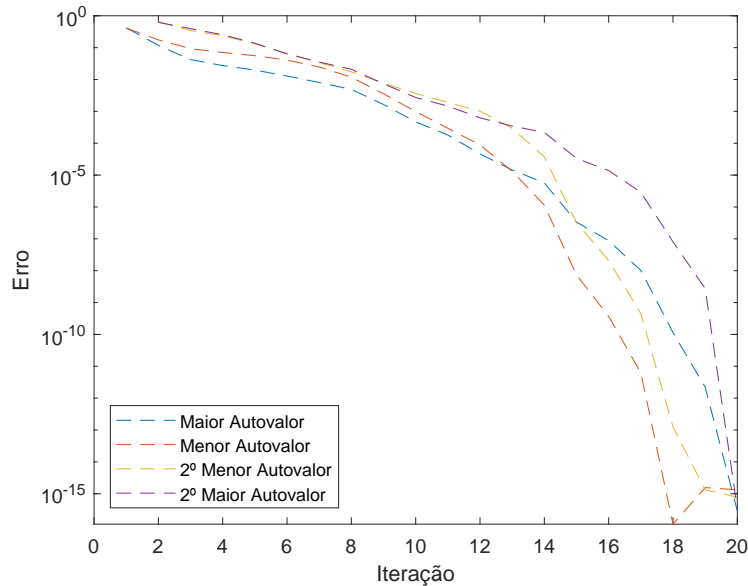


Figura 2: Erro obtido, a cada iteração, dos Valores de Ritz que aproximam os dois autovalores extremos superiores e inferiores, quando o método de Lanczos foi aplicado em uma matriz com autovalores distintos, gerados de forma aleatória.

sem considerar a multiplicidade. Além disso, na iteração seguinte em que isto ocorre, no geral há uma queda do valor de β . Desta forma, dependendo do valor de ϵ considerado, o algoritmo é interrompido nesta iteração. Assim, obtemos aproximações para todos os autovalores, porém, sem considerar a multiplicidade.

Como T_n é similar à A , o surgimento dos “autovalores fantasmas” não era esperado e, como apresentado na seção anterior, ele é atribuído pela literatura à perda de ortogonalidade dos vetores de Lanczos q_k . Assim, é esperado que este problema seja solucionado com a aplicação do método de Lanczos com reortogonalização completa.

Apesar de, na prática, o fenômeno ter sido observado em matrizes que possuem autovalores com multiplicidade, em [10, Página 290], os autores apresentam um exemplo de matriz de dimensão $n = 203$ para a qual todos os autovalores são distintos e mesmo assim ocorre o surgimento dos “autovalores fantasmas”.

Como o comportamento dos valores de Ritz nos quatro casos considerados foi muito similar, discutiremos em detalhes um exemplo apenas do caso em que a multiplicidade ocorre no interior do espectro. Para isso, foi construída uma matriz A de forma que dois autovalores não extremos de seu espectro (0.6476 e 0.6135) possuíssem multiplicidade 5.

Quando consideramos $\epsilon = 10^{-7}$, o método foi interrompido após 12 iterações, o que coincide com o número de autovalores distintos. Já quando o valor de ϵ foi alterado para 10^{-9} , o método não foi interrompido e a partir da 13ª iteração observamos o surgimento de “autovalores fantasmas”. Na Figura 3 são apresentados os valores de Ritz obtidos a cada iteração do método e podemos visualizar que valores que já haviam convergido antes da 12ª iteração passam a ser deslocados para autovalores já aproximados e que não possuem multiplicidade na matriz original.

Ao aplicar o método de Lanczos com reortogonalização completa na mesma matriz, obtivemos o gráfico apresentado na Figura 4. Como esperado, o problema dos surgimento dos “autovalores fantasmas” foi reduzido significativamente e os deslocamentos observados

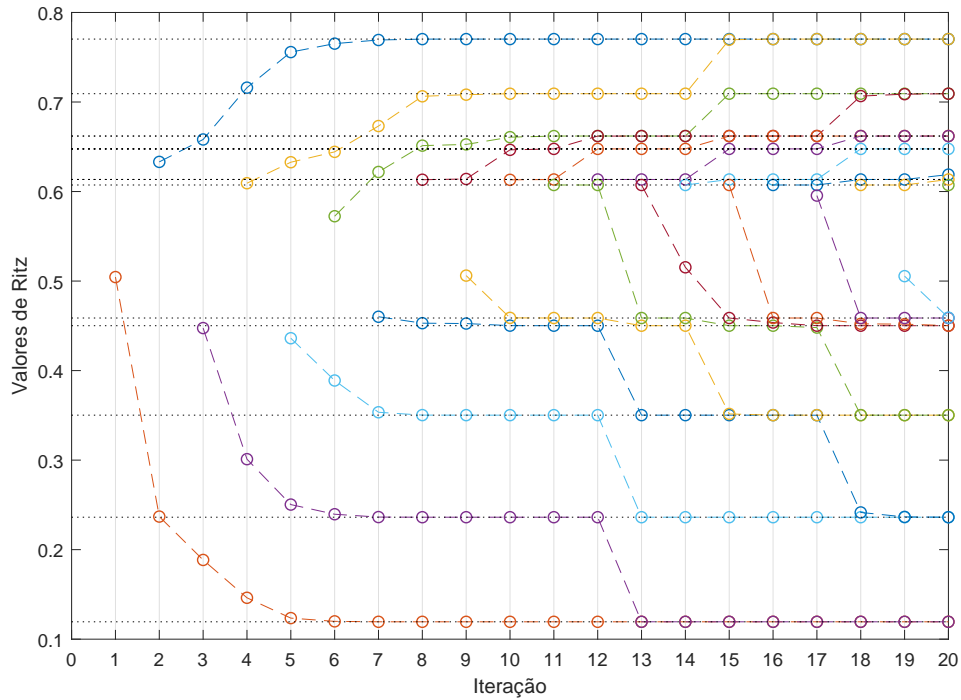


Figura 3: Valores de Ritz obtidos a cada iteração quando o método de Lanczos sem reortogonalização foi aplicado com $\epsilon = 10^{-9}$ em uma matriz com autovalores 0.6476 e 0.6135 com multiplicidade 5.

na Figura 3 agora se restringem à região em que de fato ocorre a multiplicidade.

Tendo em vista o objetivo de aplicar o método em matrizes de dimensão grande, foi também implementado um código que, dados uma precisão ϵ e o número de autovalores superiores e inferiores desejados, gera uma sequência de matrizes com dimensões em progressão geométrica de razão dois (dimensão inicial n_0) e retorna, para cada uma delas, o número de iterações que foi necessário para que os autovalores desejados fossem encontrados. A Figura 5 apresenta os resultados obtidos quando o código foi executado com $\epsilon = 10^{-5}$ e dimensão $n_0 = 25$ para determinar os dois autovalores superiores e inferiores de cada uma. Notamos que, para uma matriz de dimensão 12800, apenas 291 iterações foram necessárias, o que significa que os autovalores da matriz puderam ser aproximados pelos autovalores de uma matriz tridiagonal de dimensão aproximadamente 44 vezes menor que a original.

4 Decomposição em Valores Singulares

A decomposição em valores singulares é uma ferramenta importante da álgebra linear. Entre suas diversas aplicações teóricas e práticas, destacamos o tratamento e análise de matrizes de dados, em especial, de matrizes de grande porte.

O problema de computar a SVD de uma matriz retangular A pode ser reduzido ao problema de computar a decomposição em autovalores de uma matriz simétrica. Sendo assim, estudaremos esta relação e posteriormente recorreremos ao método de Lanczos para solução do problema. A partir daqui, consideraremos matrizes retangulares $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ com

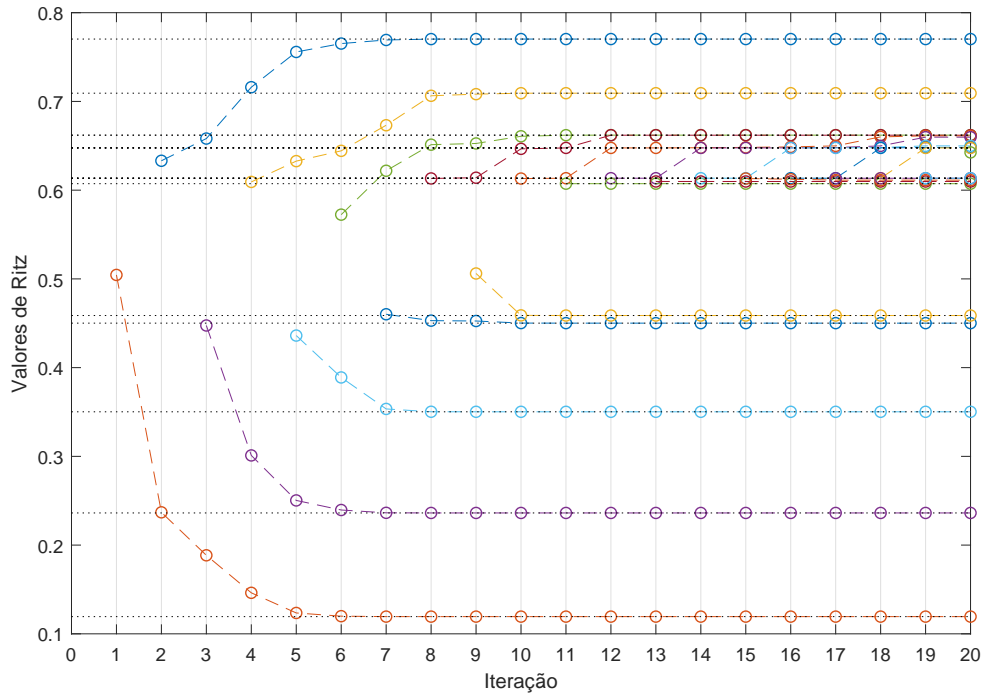


Figura 4: Valores de Ritz obtidos a cada iteração quando o método de Lanczos com re-ortogonalização completa foi aplicado com $\epsilon = 10^{-12}$ em uma matriz com autovalores 0.6476 e 0.6135 com multiplicidade 5.

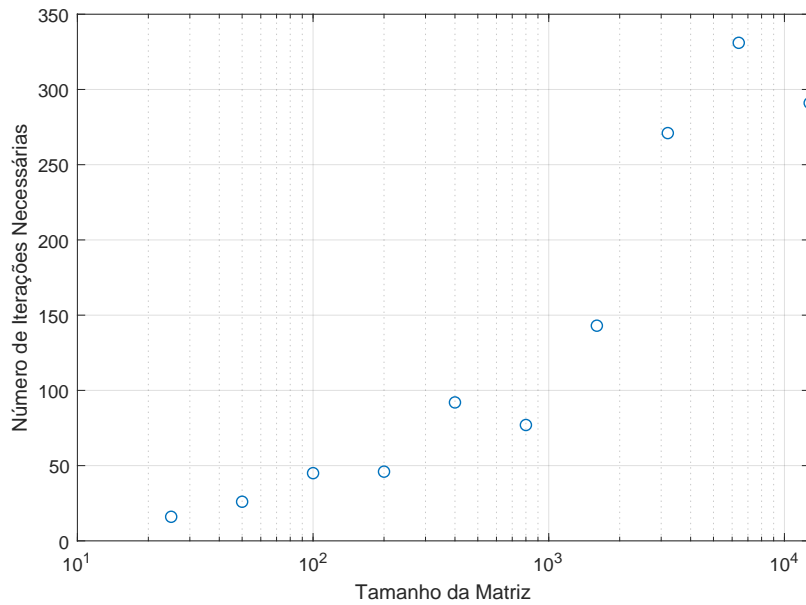


Figura 5: Número de iterações necessárias para os dois autovalores superiores e inferiores convergirem com precisão de $\epsilon = 10^{-5}$ em função do tamanho da matriz.

$m > n$.

Teorema 8 (Decomposição em Valores Singulares). [11, Teorema 4.1.1] Seja $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ uma matriz arbitrária com posto r , a decomposição em valores singulares de A é a fatoração

$$A = U\Sigma V^t, \quad (10)$$

em que $U = [u_1, u_2, \dots, u_m] \in \mathbb{R}^{m \times m}$ é ortogonal, $V = [v_1, v_2, \dots, v_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ é ortogonal, e $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ é diagonal, da forma

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & & & & \\ & \sigma_2 & & & & & \\ & & \dots & & & & \\ & & & \sigma_r & & & \\ & & & & 0 & & \\ & & & & & \dots & \\ & & & & & & 0 \end{bmatrix},$$

com $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$. Além disso, os vetores u_i são chamados de vetores singulares à esquerda, os vetores v_i são chamados de vetores singulares à direita e os escalares σ_i são chamados de valores singulares de A .

Uma primeira forma de relacionar a SVD de A a um problema de autovalores é através da matriz $A^t A$, chamada de *matriz de covariância*, como apresentado no teorema a seguir.

Teorema 9. [10, Teorema 5.4] Seja $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, os valores singulares não nulos de A coincidem com a raiz quadrada dos autovalores não nulos da matriz simétrica $A^t A$. Assim, se $A = U\Sigma V^t$ é a SVD de A , então

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

é a decomposição espectral de $A^t A$.

Esta estratégia, no entanto, não é estável e é pouco utilizada. Ao invés disso, vamos considerar a matriz

$$H = \begin{bmatrix} 0 & A^t \\ A & 0 \end{bmatrix},$$

e o seguinte problema em blocos associado a ela:

$$\begin{bmatrix} 0 & A^t \\ A & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V & V \\ U & -U \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V & V \\ U & -U \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & -\Sigma \end{bmatrix}.$$

Esta equação corresponde à decomposição espectral de H e a partir dela concluímos que os valores singulares de A correspondem ao módulo dos autovalores de H . Segundo [10] esta estratégia é mais estável que a anterior e a maioria dos algoritmos padrões utilizados para

cálculo da SVD são baseados nela, porém com adaptações para que não haja necessidade de construir H explicitamente. É o caso do método das duas fases, proposto por G. Golub e W. Kahan em [3] e que consiste em uma primeira etapa, finita, que reduz a matriz A para a forma bidiagonal B e uma segunda etapa, infinita, que diagonaliza B . Esta primeira etapa é feita de forma que A e B possuem os mesmos valores singulares e é essencial para tornar o processo rápido.

Esta equação corresponde à decomposição espectral de H e a partir dela concluímos que os valores singulares de A correspondem ao módulo dos autovalores de H . Segundo [10] esta estratégia é mais estável que a anterior, apesar de envolver a necessidade de construir matrizes de dimensão $(m + n) \times (m + n)$, o que é inviável, principalmente considerando problemas de grande porte. É a partir desta ideia que G. Golub e W. Kahan propõem em [3] o método das duas fases, que consiste em realizar uma primeira etapa, finita, que reduz a matriz A para a forma bidiagonal B e uma segunda etapa, infinita, que diagonaliza B . Esta estratégia é interessante pois a matriz bidiagonal obtida é quadrada e, desta forma, quando utilizamos a estrutura em blocos, obtemos uma matriz simétrica. Assim, o método de Lanczos pode ser utilizado para obter a decomposição espectral desta matriz e, assim, obtemos os valores singulares de A .

Em [10], os autores propõem a bidiagonalização da matriz por três formas diferentes: bidiagonalização de Golub-Kahan (método de um passo), bidiagonalização de Lawson-Hanson-Chan (método de dois passos) e o método dos três passos, que funciona como uma mistura dos dois primeiros.

A bidiagonalização de Golub-Kahan consiste na aplicação de uma série de refletores de Householder à esquerda e à direita da matriz, de forma alternada, como ilustrado na Figura 6. Os refletores U_i^t , denotados por U_i^* na figura, aplicados à esquerda, produzem zeros nas colunas de A , e os refletores V_i aplicados à direita, produzem zeros nas linhas de A . Desta forma, o custo total deste processo pode ser expresso pelo custo de duas fatorações QR, ou seja, se

$$\text{Custo da Fatoração QR: } \sim 2mn^2 - \frac{2}{3}n^3, \quad (11)$$

temos que

$$\text{Custo da Bidiagonalização de Golub-Kahan: } \sim 4mn^2 - \frac{4}{3}n^3. \quad (12)$$

Por outro lado, a bidiagonalização de Lawson-Hanson-Chan consiste em obter primeiramente a fatoração QR de A e então aplicar o método de Golub-Kahan na matriz $R = Q^t A$, como ilustrado na Figura 7. Desta forma, o custo total possui uma parcela referente ao custo da fatoração QR de $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, dado pela relação (11), e outra parcela devido à bidiagonalização de Golub-Kahan de $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$, dado pela relação (12) com $m = n$, ou seja, $\frac{8}{3}n^3$. Dessa forma,

$$\text{Custo da Bidiagonalização de Lawson-Hanson-Chan: } \sim 2mn^2 + 2n^3. \quad (13)$$

Comparando as relações (12) e (13) através de uma inequação, concluímos que o método de Lawson-Hanson-Chan é vantajoso quando $m > \frac{5}{3}n$. Este resultado pode ser visualizado na Figura 9, que compara o custo dos três métodos de bidiagonalização.

$$\begin{array}{ccc}
\begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \end{bmatrix} & \xrightarrow{U_1^*} & \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \end{bmatrix} & \xrightarrow{\cdot V_1} & \begin{bmatrix} \times & \times & 0 & 0 \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \end{bmatrix} \\
A & & U_1^*A & & U_1^*AV_1 \\
\\
& & \xrightarrow{U_2^*} & & \xrightarrow{\cdot V_2} \\
& & \begin{bmatrix} \times & \times & & & \\ & \times & \times & \times & \\ & 0 & \times & \times & \\ & 0 & \times & \times & \\ & 0 & \times & \times & \\ & 0 & \times & \times & \end{bmatrix} & & \begin{bmatrix} \times & \times & & & \\ & \times & \times & 0 & \\ & & \times & \times & \\ & & & \times & \times \\ & & & & \times & \times \\ & & & & & \times & \times \end{bmatrix} \\
& & U_2^*U_1^*AV_1 & & U_2^*U_1^*AV_1V_2
\end{array}$$

Figura 6: Aplicação de refletores de Householder na Bidiagonalização de Golub-Kahan [10, Página 247].

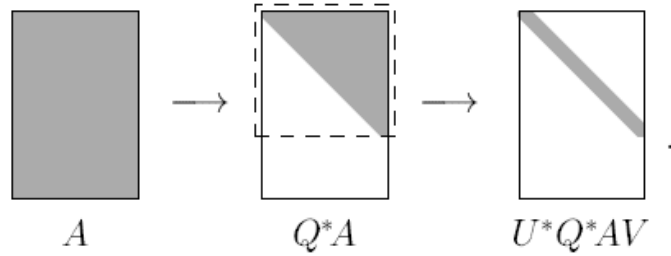


Figura 7: Bidiagonalização de Lawson-Hanson-Chan [10, Página 248].

Por último, o método dos três passos propõe que a bidiagonalização seja iniciada através do método de Golub-Kahan e que em algum passo k ela seja interrompida para execução da fatoração QR da submatriz corrente. Depois disso, o método de Golub-Kahan deve ser retomado na matriz R , triangular superior, resultante da fatoração. Este processo é ilustrado na Figura 8.

Para determinar o passo k em que a fatoração QR deve ser executada, escreveremos uma função $C(k)$ que representa o custo total do processo e avaliaremos qual o valor de k que minimiza tal função. Este custo pode ser expresso por uma uma bidiagonalização parcial de A , que corresponde à execução de k iterações de duas fatorações QR e uma bidiagonalização de Lawson-Hanson-Chan da matriz $(m - k) \times (n - k)$ resultante.

Assim, seja $4mnk - 4mk^2 - 4nk^2 + \frac{4}{3}k^3$ o custo de k iterações de uma fatoração QR, temos que

$$C(k) = 8mnk - 8mk^2 - 8nk^2 + \frac{8}{3}k^3 + 2(m - k)(n - k)^2 + \frac{2}{3}(n - k)^3, \quad (14)$$

em que $0 \leq k \leq n$. Além disso, temos que o caso $k = 0$ recai no método de Lawson-Hanson-

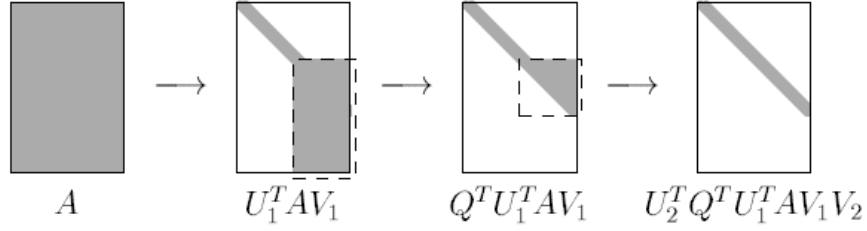


Figura 8: Método dos Três Passos para bidiagonalização [10, Página 248].

Chan e o caso $k = n$ recai no método de Golub-Kahan.

Para buscar o ponto mínimo da função, observamos que $C'(k) = 4(n-k)(m+k-2n) = 0$ se e somente se $k = n$ ou $k = 2n - m$. Assim, avaliando a função em seus pontos críticos e extremos do intervalo, temos que:

$$C(0) = 2mn^2 + 2n^3 \quad (15)$$

$$C(n) = 4mn^2 - \frac{4}{3}n^3 \quad (16)$$

$$C(2m - n) = 4mn^2 - \frac{4}{3}n^3 - \frac{2}{3}(m - n)^3 \quad (17)$$

Como esperado, o custo associado a $k = 0$ é igual ao da bidiagonalização de Lawson-Hanson-Chan e o custo associado a $k = n$ é igual ao da bidiagonalização de Golub-Kahan.

Comparando (17) e (16), temos que (17) é sempre menor, já que $m > n$. Isto significa que o método dos 3 passos é sempre melhor que o método de Golub-Kahan, como de fato pode ser observado na Figura 9.

Já quando comparamos (17) e (15) temos que

$$2mn^2 + 2n^3 > 4mn^2 - \frac{4}{3}n^3 - \frac{2}{3}(m - n)^3 \Leftrightarrow (m - 2n)^2(m + n) > 0,$$

que é sempre satisfeita e, portanto, o método dos três passos é sempre melhor que Lawson-Hanson-Chan. A igualdade é satisfeita para $2n = m$, o que também pode ser visualizado na Figura 9.

Concluimos assim que, desde que a escolha $k = 2n - m$ possa ser feita, ou seja, $2n > m$, ela fornece o menor custo. Caso contrário, $k = 0$ deve ser escolhido. Assim,

Custo da Bidiagonalização pelo Método dos Três Passos:

$$\sim 4mn^2 - \frac{4}{3}n^3 - \frac{2}{3}(m - n)^3, \text{ se } 2n > m, \quad (18)$$

e

$$\sim 2mn^2 + 2n^3, \text{ se } 2n \leq m. \quad (19)$$

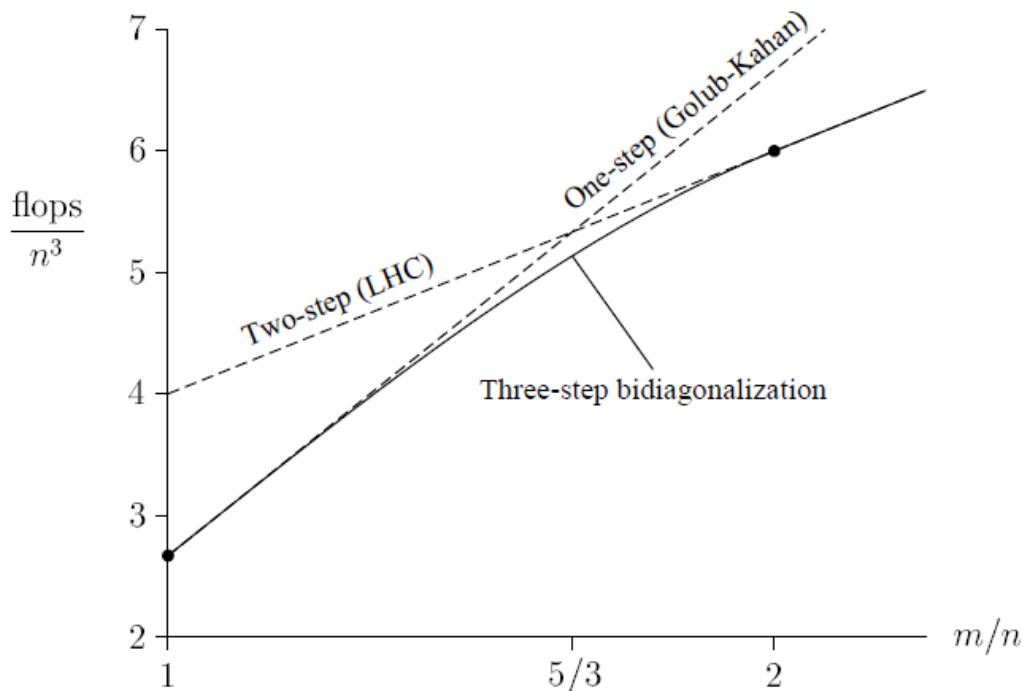


Figura 9: Custos associados aos processos de bidiagonalização pelo método de Golub-Kahan, Lawson-Hanson-Chan e método dos três passos, em função da relação entre as dimensões m e n da matriz A . [10, Página 249]

5 Conclusão

Verificamos que o método de Lanczos é uma ferramenta eficiente para a determinação de autovalores extremos de matrizes de grande porte e que, apesar de ser instável frente a erros de arredondamento, este problema pode ser contornado através da reortogonalização.

Além disso, concluímos que um método eficiente para obtenção da decomposição em valores singulares de uma matriz é através de sua bidiagonalização e posterior decomposição espectral, que pode ser obtida através do método de Lanczos. Em especial, isto é vantajoso quando tratamos de matrizes de grande porte, com interesse apenas nos maiores valores singulares. Analisando os três métodos apresentados para a bidiagonalização da matriz, o método dos três passos foi o que apresentou menor custo.

O conteúdo deste trabalho compõe a parte inicial do projeto de iniciação científica “Decomposição em Valores Singulares e Técnicas de Compressão de Dados”. Até o momento, além da elaboração deste conteúdo, o trabalho proporcionou um primeiro contato a fundo com o MATLAB e com o LaTeX. As próximas etapas serão a implementação de fato da decomposição em valores singulares via método de Lanczos e o estudo da técnica de Análise de Componentes Principais. Por fim, estes estudos serão combinados para abordar o problema de compressão de imagens.

Referências

- [1] Z. Füredi, J. Kolmós (1980) *The Eigenvalues of Random Symmetric Matrices*. Mathematical Institute of The Hungarian Academy of Sciences. Budapest, Hungary.
- [2] G. Golub, C. F. Van Loan (2013). *Matrix Computations*, 4th ed. Baltimore: The Johns Hopkins University Press.
- [3] G. Golub, W. Kahan (1965). *Calculating the Singular Values and Pseudo-Inverse of a Matrix* Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics: Series B, Numerical Analysis, Volume 2, Issue 2, 205-224.
- [4] F. Juhász (1978) *On the Spectrum of a Random Graph* Colloquia Mathematica Societatis János Bolyai. 25. Algebraic Methods in Graph Teory, Szeged (Hungary).
- [5] R. M. Larsen (2000) *Computing the SVD for large and sparse matrices*, Lawrence Berkely Lab.
- [6] C. D. Meyer (2000). *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*, Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [7] C.C. Paige (1971) *The Computation of Eigenvalues and Eigenvectors of Very Large Sparse Matrices*, PhD thesis, University of London.
- [8] P. Pulino (2012) *Álgebra Linear e suas Aplicações: Notas de Aula* IMECC, UNICAMP, Homepage: www.ime.unicamp.br/~pulino/ALESA/.
- [9] G. W. Stewart (2001). *Matrix Algorithms Volume II: Eigensystems*, Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [10] L. N. Trefethen, D. Bau, III (1997). *Numerical Linear Algebra*, Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics.
- [11] D. S. Watkins (2002). *Fundamentals of Matrix Computations*, 2ed., New Jersey: John Wiley & Sons.