Determinação numérica de autovalores e autovetores: Método de Jacobi

Marina Andretta/Franklina Toledo

ICMC-USP

3 de setembro de 2012

Baseado no livro Cálculo Numérico, de Neide B. Franco.

Vamos agora nos concentrar em determinar autovalores e autovetores de matrizes simétricas.

Matrizes simétricas de ordem n têm a propriedade de possuir n autovalores reais e n autovetores linearmente independentes.

Método de Jacobi

O Método de Jacobi consiste em, dada uma matriz simétrica A, aplicar uma série de transformações similares

$$A_{k+1} = U_k^{-1} A_k U_k,$$

$k = 1, 2, ...,$ com $A_1 = A$.

As matrizes $A_1, A_2, ...$ convergem a uma matriz diagonal.

Após m passos do Método de Jacobi, temos

$$A_{m+1} = U_m^{-1} \ldots U_2^{-1} U_1^{-1} A U_1 U_2 \ldots U_m.$$

Se $A_{m+1} \approx D$, D matriz diagonal, os elementos da diagonal de A_{m+1} são aproximações para os autovalores de A, e as colunas de $V = U_1 U_2 \ldots U_m$ são aproximações para os autovetores de A.

Rotação de Jacobi

Uma matriz $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$, com elementos definidos por

$$\begin{cases} u_{pp} = u_{qq} = \cos(\varphi), \\ u_{pq} = -u_{qp} = \text{sen}(\varphi), \\ u_{ii} = 1, i \neq p, i \neq q, \\ u_{ij} = 0, \text{caso contrário}, \end{cases}$$

para p e q entre 1 e n, é chamada de matriz de rotação.

Esta nomenclatura vem do fato de que, ao calcular o produto $y = Ux$, para um vetor $x \in \mathbb{R}^n$, o vetor resultante y é o vetor x rotacionado de um ângulo φ no plano dos eixos p e q.

Rotação de Jacobi

$$\begin{pmatrix} 1 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \cos(\varphi) & 0 & \dots & 0 & \mathrm{sen}(\varphi) & \dots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & -\mathrm{sen}(\varphi) & 0 & \dots & 0 & \cos(\varphi) & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Rotação de Jacobi

Uma rotação (p, q) de Jacobi é a operação U^TAU, com U matriz de rotação.

Vamos ver como fica uma matriz A depois de aplicada uma rotação (p, q) de Jacobi.

Para isso, vejamos como exemplo o que acontece quando aplicamos uma rotação $(2, 4)$ de Jacobi em uma matriz $A \in \boldsymbol{R}^{4\times 4}$. O que acontece para (p, q) gerais e matrizes $A \in \boldsymbol{R}^{n\times n}$ é análogo.

$$U^T A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varphi) & 0 & -\text{sen}(\varphi) \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \text{sen}(\varphi) & 0 & \cos(\varphi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{33} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{43} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21}c - a_{41}s & a_{22}c - a_{42}s & a_{23}c - a_{43}s & a_{24}c - a_{44}s \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{21}s + a_{41}c & a_{22}s + a_{42}c & a_{23}s + a_{43}c & a_{24}s + a_{44}c \end{pmatrix} = A',$$

com $c = \cos(\varphi)$ e $s = \text{sen}(\varphi)$.

$$A'U = \begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & a'_{13} & a'_{14} \\ a'_{21} & a'_{22} & a'_{23} & a'_{23} \\ a'_{31} & a'_{32} & a'_{33} & a'_{33} \\ a'_{41} & a'_{42} & a'_{43} & a'_{43} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\varphi) & 0 & \operatorname{sen}(\varphi) \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\operatorname{sen}(\varphi) & 0 & \cos(\varphi) \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12}c - a'_{14}s & a'_{13} & a'_{12}s + a'_{14}c \\ a'_{21} & a'_{22}c - a'_{24}s & a'_{23} & a'_{22}s + a'_{24}c \\ a'_{31} & a'_{32}c - a'_{34}s & a'_{33} & a'_{32}s + a'_{34}c \\ a'_{41} & a'_{42}c - a'_{44}s & a'_{43} & a'_{42}s + a'_{44}c \end{pmatrix} = A'',$$

com $c = \cos(\varphi)$ e $s = \operatorname{sen}(\varphi)$.

De um modo geral, para uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e U matriz de rotação com ângulo φ no plano dos eixos p e q, o produto $U^T A$ gera uma matriz A' definida por

$$\left\{ \begin{array}{lcll} a'_{pj} & = & a_{pj}\cos(\varphi) - a_{qj}\text{sen}(\varphi), & 1 \leq j \leq n, \\ a'_{qj} & = & a_{pj}\text{sen}(\varphi) + a_{qj}\cos(\varphi), & 1 \leq j \leq n, \\ a'_{ij} & = & a_{ij}, \qquad\qquad i \neq p, i \neq q, & 1 \leq j \leq n. \end{array} \right. \tag{1}$$

O produto $A'U$ gera uma matriz A'' definida por

$$\left\{ \begin{array}{lcll} a''_{ip} & = & a'_{ip}\cos(\varphi) - a'_{iq}\text{sen}(\varphi), & 1 \leq i \leq n, \\ a''_{iq} & = & a'_{ip}\text{sen}(\varphi) + a'_{iq}\cos(\varphi), & 1 \leq i \leq n, \\ a''_{ij} & = & a'_{ij}, \qquad\qquad j \neq p, j \neq q, & 1 \leq i \leq n. \end{array} \right. \tag{2}$$

Rotação de Jacobi

Assim, comparando as matrizes A e A'', apenas os elementos das linhas e colunas p e q são modificados. E A'' continua sendo simétrica.

Vejamos agora como escrever a mudança dos elementos a''_{pp}, a''_{qq} e a''_{pq}.

$$a''_{pp} = a'_{pp}\cos(\varphi) - a'_{pq}\mathrm{sen}(\varphi) =$$

$$(a_{pp}\cos(\varphi) - a_{pq}\mathrm{sen}(\varphi))\cos(\varphi) - (a_{pq}\cos(\varphi) - a_{qq}\mathrm{sen}(\varphi))\mathrm{sen}(\varphi).$$

Ou seja,

$$a''_{pp} = a_{pp}\cos^2(\varphi) - 2a_{pq}\mathrm{sen}(\varphi)\cos(\varphi) + a_{qq}\mathrm{sen}^2(\varphi). \tag{3}$$

$$a''_{qq} = a'_{qp}\text{sen}(\varphi) + a'_{qq}\cos(\varphi) =$$

$$(a_{pp}\text{sen}(\varphi) + a_{qp}\cos(\varphi))\text{sen}(\varphi) + (a_{pq}\text{sen}(\varphi) - a_{qq}\cos(\varphi))\cos(\varphi).$$

Ou seja,

$$a''_{qq} = a_{pp}\text{sen}^2(\varphi) + 2a_{pq}\text{sen}(\varphi)\cos(\varphi) + a_{qq}\cos^2(\varphi). \tag{4}$$

Rotação de Jacobi

$$a''_{pq} = a'_{pp}\text{sen}(\varphi) + a'_{pq}\cos(\varphi) =$$

$$(a_{pp}\cos(\varphi) - a_{pq}\text{sen}(\varphi))\text{sen}(\varphi) + (a_{pq}\cos(\varphi) - a_{qq}\text{sen}(\varphi))\cos(\varphi).$$

Ou seja,

$$a''_{pq} = a''_{qp} = (a_{pp} - a_{qq})\text{sen}(\varphi)\cos(\varphi) + a_{pq}(\cos^2(\varphi) - \text{sen}^2(\varphi)). \tag{5}$$

Portanto, para aplicar rotações (p, q) de Jacobi, em vez de calcular o produto $U^T AU$, usamos as fórmulas (1), (2), (3), (4) e (5).

Vejamos agora um exemplo numérico de como calcular uma rotação de Jacobi.

Rotação de Jacobi - exemplo

Considere a matriz

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

Vamos fazer uma rotação de $\varphi = \pi/2$ em torno do elemento $(p, q) = (1, 3)$.

Temos que $\cos(\pi/2) = 0$ e $\mathrm{sen}(\pi/2) = 1$.

Rotação de Jacobi - exemplo

Usando a fórmula (3), temos que

$$a''_{11} = a_{11}\cos^2(\pi/2) - 2a_{13}\text{sen}(\pi/2)\cos(\pi/2) + a_{33}\text{sen}^2(\pi/2) =$$

$$2 \times 0 - 2 \times 3 \times 1 \times 0 + 3 \times 1 = 3.$$

Usando a fórmula (4), temos que

$$a''_{33} = a_{11}\text{sen}^2(\pi/2) + 2a_{13}\text{sen}(\pi/2)\cos(\pi/2) + a_{33}\cos^2(\pi/2).$$

$$2 \times 1 + 2 \times 3 \times 1 \times 0 + 3 \times 0 = 2.$$

Rotação de Jacobi - exemplo

Usando a fórmula (5), temos que

$$a''_{13} = a''_{31} = (a_{11} - a_{33})\text{sen}(\pi/2)\cos(\pi/2) + a_{13}(\cos^2(\pi/2) - \text{sen}^2(\pi/2)).$$

$$(2-3) \times 1 \times 0 + 3 \times (0-1) = -3.$$

Usando as fórmulas (1) e (2), temos

$$a''_{12} = a''_{12} = a'_{12} = a_{12}\cos(\varphi) - a_{32}\text{sen}(\varphi) = 1 \times 0 - (-1) \times 1 = 1,$$

$$a''_{14} = a''_{14} = a'_{14} = a_{14}\cos(\varphi) - a_{34}\text{sen}(\varphi) = 1 \times 0 - 0 \times 1 = 0,$$

$$a''_{32} = a''_{32} = a'_{32} = a_{12}\text{sen}(\varphi) + a_{32}\cos(\varphi) = 1 \times 1 + (-1) \times 0 = 1,$$

$$a''_{34} = a''_{34} = a'_{34} = a_{14}\text{sen}(\varphi) + a_{34}\cos(\varphi) = 1 \times 1 + 0 \times 0 = 1.$$

Assim, a matriz resultante A'' é dada por

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

Como mencionamos no início, o Método de Jacobi determina autovalores e autovetores de uma matriz simétrica através de sucessivas rotações

$$A_1 = A \rightarrow A_2 = U_1^T A_1 U_1 \rightarrow A_3 = U_2^T A_2 U_2 \rightarrow \ldots \rightarrow A_{k+1} = U_k^T A_k U_k \approx D,$$

com U_i, $i = 1, 2, \ldots, k$ matrizes de rotação e D matriz diagonal.

Método de Jacobi

Para calcular a matriz A_{k+1}, escolhemos o maior elemento em módulo dentre os elementos fora da diagonal de A_k, que chamamos de a_{pq}.

Fazemos, então, uma rotação para zerar o elemento a_{pq}.

Este processo é repetido até que uma matriz A_{k+1} seja (quase) diagonal. Quando isto acontece, os elementos da diagonal de A_{k+1} são aproximações dos autovalores de A e as colunas de $V = U_1 U_2 \dots U_k$ são aproximações dos autovetores de A.

Vejamos agora como definir a matriz U_k de modo que o elemento a''_{pq} seja zerado. Supomos que $a_{pq} \neq 0$, já que, se isso não acontecesse, nada precisaria ser feito.

Usando a expressão (5), queremos que

$$a''_{pq} = (a_{pp} - a_{qq})\text{sen}(\varphi)\cos(\varphi) + a_{pq}(\cos^2(\varphi) - \text{sen}^2(\varphi)) = 0.$$

Como

$$\text{sen}(\varphi)\cos(\varphi) = \frac{1}{2}\text{sen}(2\varphi),$$

$$\cos^2(\varphi) - \text{sen}^2(\varphi) = \cos(2\varphi),$$

temos que

$$a_{pp} - a_{qq} = -\frac{a_{pq}\cos(2\varphi)}{\frac{1}{2}\text{sen}(2\varphi)} = -2a_{pq}\text{cotg}(2\varphi) \Rightarrow$$

$$\text{cotg}(2\varphi) = \frac{a_{qq} - a_{pp}}{2a_{pq}} = \phi.$$

Método de Jacobi

Temos ainda que

$$\text{cotg}(2\varphi) = \frac{\cos(2\varphi)}{\text{sen}(2\varphi)} = \frac{\cos^2(\varphi) - \text{sen}^2(\varphi)}{2\text{sen}(\varphi)\cos(\varphi)} =$$

$$\frac{\frac{\cos^2(\varphi) - \text{sen}^2(\varphi)}{\cos^2(\varphi)}}{\frac{2\text{sen}(\varphi)\cos(\varphi)}{\cos^2(\varphi)}} = \frac{1 - \text{tg}^2(\varphi)}{2\text{tg}(\varphi)}.$$

Denote $t = \text{tg}(\varphi)$. Como $\text{cotg}(2\varphi) = \phi$, temos que

$$\phi = \frac{1 - t^2}{2t} \Rightarrow 1 - t^2 = 2t\phi \Rightarrow$$

$$t^2 + 2t\phi - 1 = 0 \Rightarrow t = \frac{-2\phi \pm \sqrt{4\phi^2 + 4}}{2} = -\phi \pm \sqrt{\phi^2 + 1}.$$

Multiplicando o numerador e denominador de t por $\phi \pm \sqrt{\phi^2 + 1}$, temos

$$t = \frac{1}{\phi \pm \sqrt{\phi^2 + 1}}.$$

Computacionalmente, adotamos

$$t = \begin{cases} \frac{1}{\phi + sinal(\phi)\sqrt{\phi^2+1}}, & \phi \neq 0, \\ 1, & \phi = 0. \end{cases}$$

Note que escolhemos o sinal positivo ou negativo de modo a obter o denominador de maior módulo. Assim, sempre teremos $|t| \leq 1$.

Vamos agora escrever $\operatorname{sen}(\varphi)$ e $\cos(\varphi)$ em função de t.

Observe que

$$\sec^2(\varphi) = 1 + \operatorname{tg}^2(\varphi) \Rightarrow \frac{1}{\cos^2(\varphi)} = 1 + \operatorname{tg}^2(\varphi) \Rightarrow \cos^2(\varphi) = \frac{1}{1 + \operatorname{tg}^2(\varphi)}.$$

Então

$$\cos(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} \quad \text{e} \quad \operatorname{sen}(\varphi) = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}.$$

Método de Jacobi: dados uma matriz simétrica $A \in \boldsymbol{R}^{n \times n}$, uma tolerância ϵ e um número máximo de iterações $MAXIT$, devolve D uma matriz quase diagonal com aproximações dos autovalores da matriz A na diagonal, ou emite uma mensagem de erro.

Passo 1: Faça $k \leftarrow 1$.

Passo 2: Enquanto $(k \leq MAXIT)$, execute os passos 3 a 10:

Passo 3: Calcule p, q, $1 \leq p, q \leq n$, índices tais que $|a_{pq}| = \max_{i \neq j}\{|a_{ij}|\}$.

Passo 4: Se $|a_{pq}| \leq \epsilon$, então devolva A e pare.

Passo 5: Faça $\phi \leftarrow \frac{a_{qq} - a_{pp}}{2a_{pq}}$.

Algoritmo

Passo 6: Faça $t \leftarrow \begin{cases} \frac{1}{\phi + sinal(\phi)\sqrt{\phi^2+1}}, & \phi \neq 0, \\ 1, & \phi = 0. \end{cases}$

Passo 7: Faça $\cos(\varphi) \leftarrow \frac{1}{\sqrt{1+t^2}}$.

Passo 8: Faça $\text{sen}(\varphi) \leftarrow \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}$.

Passo 9: Defina A'' usando as expressões (1), (2), (3), (4) e (5).

Passo 10: Faça $A \leftarrow A''$ e $k \leftarrow k+1$.

Passo 11: Escreva "número máximo de iterações atingido" e pare.

Algoritmo

Note que o algoritmo, como está definido, não calcula os autovetores de A. Para que os autovetores sejam calculados, basta que sejam feitas as seguintes modificações:

- No Passo 1 deve ser criada uma matriz $V \leftarrow I$.
- No Passo 9 deve ser formada a matriz U e, depois, deve-se calcular $V \leftarrow VU$.

Para tornar esta modificação do Passo 9 computacionalmente mais eficiente, pode-se deduzir expressões que correspondem à transformação VU e, então, usar estas expressões para modificar V. Isso faz com que sejam feitos menos cálculos e, ainda, torna dispensável a alocação e definição da matriz U.

Exemplo

Vamos usar o Método de Jacobi para determinar os autovalores da matriz

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 0 \\ 2 & 5 & 3 \\ 0 & 3 & 6 \end{pmatrix}.$$

O maior elemento em módulo, fora da diagonal de $A_1 = A$, é $a_{23} = a_{32} = 3$.

Assim,

$$\phi = \frac{a_{33} - a_{22}}{2a_{23}} = \frac{6-5}{6} = 0.1667.$$

Exemplo

Usando o valor de ϕ, calculamos $t = \text{tg}(\varphi) = 0.8471$, $c = \cos(\varphi) = 0.7630$ e $s = \text{sen}(\varphi) = 0.6464$.

Com isso, definimos

$$U_1 = \begin{pmatrix} 1.0000 & 0.0000 & 0.0000 \\ 0.0000 & 0.7630 & 0.6464 \\ 0.0000 & -0.6464 & 0.7630 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$A_2 = U_1^T A_1 U_1 = \begin{pmatrix} 4.0000 & 1.5260 & 1.2928 \\ 1.5260 & 2.4586 & 0.0000 \\ 1.2928 & 0.0000 & 8.5414 \end{pmatrix}.$$

Exemplo

O maior elemento em módulo, fora da diagonal de A_2, é $a_{12} = a_{21} = 1.5260$.

Assim, $\phi = -0.5050$, $t = -0.6153$, $c = 0.8517$ e $s = -0.5240$.

$$U_2 = \begin{pmatrix} 0.8517 & -0.5240 & 0.0000 \\ 0.5240 & 0.8517 & 0.0000 \\ 0.0000 & 0.0000 & 1.0000 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$A_3 = U_2^T A_2 U_2 = \begin{pmatrix} 4.9387 & 0.0000 & 1.1011 \\ 0.0000 & 1.5197 & -0.6774 \\ 1.1011 & -0.6774 & 8.5414 \end{pmatrix}.$$

Exemplo

O maior elemento em módulo, fora da diagonal de A_3, é $a_{13} = a_{31} = 1.1011$.

Assim, $\phi = 1.6360$, $t = 0.2814$, $c = 0.9626$ e $s = 0.2709$.

$$U_3 = \begin{pmatrix} 0.9626 & 0.0000 & 0.2709 \\ 0.0000 & 1.0000 & 0.0000 \\ -0.2709 & 0.0000 & 0.9626 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$A_4 = U_3^T A_3 U_3 = \begin{pmatrix} 4.6611 & 0.1239 & 0.0000 \\ 0.1239 & 1.5197 & -0.6520 \\ 0.0000 & -0.6520 & 8.8536 \end{pmatrix}.$$

O maior elemento em módulo, fora da diagonal de A_4, é $a_{23} = a_{32} = -0.6520$.

Assim, $\phi = -5.6266$, $t = -0.0882$, $c = 0.9961$ e $s = -0.0879$.

$$U_4 = \begin{pmatrix} 1.0000 & 0.0000 & 0.0000 \\ 0.0000 & 0.9961 & -0.0879 \\ 0.0000 & 0.0879 & 0.9961 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$A_5 = U_4^T A_4 U_4 = \begin{pmatrix} 4.6228 & 0.1827 & -0.0161 \\ 0.1827 & 1.4621 & 0.0000 \\ -0.0161 & 0.0000 & 8.9081 \end{pmatrix}.$$

Exemplo

Observe que, à medida que k aumenta, os elementos fora da diagonal de A_k tendem a zero.

Assim, os elementos da diagonal de A_k convergem para os autovalores de A, que são 1.45163, 4.63951 e 8.90885.

Se estivermos interessados nos autovetores de A, basta calcular o produto $U_1 U_2 \ldots U_k$.