MT404/MS993

Métodos computacionais de álgebra linear

Primeiro projeto – 2023

Domínio numérico de matrizes

Resumo

Este é o primeiro trabalho da disciplina MT404/MS993 do segundo semestre de 2023. Trata-se de um problema moderno interessante que envolve manipulações matriciais simples. Nós o exploraremos como "aquecimento" de programação para os projetos seguintes. Não será necessário implementar o algoritmo de diagonalização envolvido neste primeiro projeto.

Domínio numérico de matrizes

Dado um operador limitado T em um espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H}$, define-se seu **domínio numérico** (numerical range, field of values), ou domínio de Hausdorff, como sendo a região do plano complexo $W(T) \subset \mathbb{C}$ tal que

$$W(T) = \{z \in \mathbb{C} \,|\, z = \langle x, Tx \rangle, x \in \mathcal{H} \text{ com } \|x\| = 1\}\,. \tag{1}$$

Nosso interesse se concentrará no caso das transformações lineares definidas por matrizes complexas $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, paras as quais teremos

$$W(A) = \left\{ \frac{Z^\dagger A Z}{Z^\dagger Z} \in \mathbb{C} \,\middle|\, 0 \neq Z \in \mathbb{C}^n \right\}, \tag{2}$$

sendo $Z^\dagger = \overline{Z^t}$ o transposto conjugado matricial. Para mais detalhes sobre o domínio numérico, algumas de suas aplicações e problemas abertos, ver [1, 2]. Da definição (2), seguem, dentre outras, as seguintes propriedades elementares de $W(A)$.

P1: Continência espectral. $\Lambda(A) \subset W(A)$, sendo $\Lambda(A)$ o espectro (complexo) de A.

P2: Conjugado complexo. $W(A^\dagger) = \overline{W(A)}$.

P3: Subaditividade. $W(A+B) \subseteq W(A) + W(B)$.

P4: Translação. $W(A + z_0 I) = W(A) + z_0$ para todo $z_0 \in \mathbb{C}$.

P5: Multiplicação por um escalar. $W(z_0 A) = z_0 W(A)$ para todo $z_0 \in \mathbb{C}$. Notem que para $z_0 = e^{i\theta}$, teremos uma rotação em $\mathbb{C}$.

P6: Unitariedade. $W(UAU^\dagger) = W(A)$, para qualquer matriz unitária U.

P7: Matrizes normais. Se A é normal, $W(A)$ será o invólucro convexo dos autovalores de A. Em particular, se A é Hermitiana, $W(A) = [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}] \in \mathbb{R}$.

P8: Convexidade. $W(A)$ é convexo. (Teorema de Hausdorff-Toeplitz).

Todas estas propriedades seguem de maneira mais ou menos direta da definição (2), com exceção das propriedades P7 e P8. Esta última é consequência do teorema de Hausdorff-Toeplitz. A **primeira atividade deste projeto** é provar estas duas propriedades. No caso da P8, o teorema de Hausdorff-Toeplitz deve ser enunciado e provado para o caso de matrizes complexas $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$. A referência [2] pode ser útil neste ponto.

A **segunda tarefa** será determinar numericamente e representar graficamente $W(A)$. Para esta finalidade, seguiremos os mesmos passos de [3]. Antes de iniciarmos o problema mais geral, é interessante considerarmos como exemplo o caso de matrizes 2×2. Vamos demonstrar o seguinte resultado clássico bem conhecido.

Teorema 1 (Domínio elíptico) *O domínio numérico de uma matriz* 2×2 *complexa é a região do plano complexo delimitada por uma elipse (possivelmente degenerada) com os focos em seus autovalores.*

Provaremos este teorema de uma maneira "econômica", mas direta. Consideremos primeiro o caso particular de matrizes da forma

$$A = \begin{bmatrix} 0 & a \\ b & 0 \end{bmatrix}, \tag{3}$$

com $a, b \in \mathbb{R}$ não negativos. Pode-se admitir, sem perda de generalidade (ver propriedade P2), que $a \geq b$. Notem que um vetor $Z \in \mathbb{C}^2$ unitário ($Z^\dagger Z = 1$) arbitrário pode ser parametrizado como $Z = e^{i\psi}(\sin\theta, e^{i\phi}\cos\theta)^t$, com $\phi, \psi \in [0, 2\pi]$ e $\theta \in [0, \pi/2]$. Para matrizes do tipo (3), esta parametrização para Z implica

$$W(A) = \left\{ \frac{1}{2}\sin 2\theta\cos\theta\left(ae^{i\phi} + be^{-i\phi}\right)\right\}, \tag{4}$$

i.e., $W(A)$ é conjunto de complexos $z = x + iy$ tais que

$$x = \frac{a+b}{2}\sin 2\theta\cos\phi, \tag{5}$$

$$y = \frac{a-b}{2}\sin 2\theta\sin\phi. \tag{6}$$

O caso $a = b = 0$ é trivial, $W(A)$ será um único ponto, a origem, coincidindo com o único autovalor da matriz A nesse caso. Se $a = b$, $W(A)$ será o intervalo real $[-a, a]$, o intervalo limitado pelos dois autovalores de A (ver P7). Estes são os casos degenerados. Em geral, teremos

$$\frac{4x^2}{(a+b)^2} + \frac{4y^2}{(a-b)^2} = \sin^2 2\theta, \tag{7}$$

de onde vemos que $W(A)$ é a região (disco) elíptica cuja fronteira corresponde à elipse (7) com $\theta = \pi/4$. Das propriedades elementares das elipses, temos que os focos da elipse (7) para $\theta = \pi/4$ estão sobre a reta real nos pontos $x = \pm\sqrt{ab}$, *i.e.*, eles coincidem com os autovalores da matriz A dada por (3).

A partir deste resultado particular, podemos provar o teorema do domínio elíptico para matrizes 2×2 arbitrárias explorando algumas propriedades de $W(A)$. Primeiro, vamos relaxar a matriz A para o caso complexo, *i.e.*, vamos admitir agora $a = \rho_a e^{i\theta_a}$ e $b = \rho_b e^{i\theta_b}$. Podemos considerar a transformação unitária

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\theta_a - \theta_b}{2}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & a \\ b & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\theta_a - \theta_b}{2}} \end{bmatrix} = e^{i\frac{\theta_a + \theta_b}{2}}\begin{bmatrix} 0 & \rho_a \\ \rho_b & 0 \end{bmatrix}, \tag{8}$$

e pelas propriedades P5 e P6, vemos que $W(A)$ também será uma elipse, mas agora após uma certa rotação no plano complexo.

Para provarmos o teorema, basta agora mostrar como reduzir o caso de uma matriz 2×2 complexa genérica A ao caso que já conhecemos. A propriedade P4 nos permite considerar apenas os casos de traço nulo, pois basta fazer uma translação $A \to A - \frac{1}{2}(\operatorname{Tr} A) I$ e teremos que o domínio numérico será apenas deslocado no plano complexo. Para finalizar a análise, invocamos o resultado elementar que nos garante que uma matriz 2×2 de traço nulo é unitariamente equivalente a uma matriz de diagonal zero[1], o que nos reduz ao caso já conhecido. Para mostrar este resultado, considere a seguinte matriz unitária

$$U = \begin{bmatrix} \sin\theta & e^{i\phi}\cos\theta \\ -e^{-i\phi}\cos\theta & \sin\theta \end{bmatrix}, \tag{9}$$

com $\phi \in [0, 2\pi]$ e $\theta \in [0, \pi/2]$, e considerem o produto

$$UAU^* = U \begin{bmatrix} c & a \\ b & -c \end{bmatrix} U^*. \tag{10}$$

As componentes diagonais do produto serão

$$[UAU^*]_{11} = -[UAU^*]_{22} = \frac{1}{2}\sin 2\theta \left(ae^{i\phi} + be^{-i\phi}\right) - c\cos 2\theta. \tag{11}$$

Para que se anulem, precisamos que

$$\omega = \frac{c}{ae^{i\phi} + be^{-i\phi}} \tag{12}$$

seja um número real e que $\tan 2\theta = 2\omega$. Ocorre que sempre é possível encontrar um $\phi \in [0, 2\pi]$ tal que $\Im\omega = 0$ em (12)! Provem esta afirmação, é uma **outra atividade do projeto**! Isto encerra a prova do teorema do domínio elíptico.

Podemos agora passar para o problema de matrizes de dimensão maior. É evidente que os domínios numéricos para estes casos serão regiões convexas mais complicadas, veja um exemplo na Fig. 1, que corresponde a uma matriz 10×10. Há poucas esperanças de obtermos analiticamente os domínios para dimensões mais altas, devemos apelar a aproximações numéricas. É o que faremos agora.

[1]De fato, isto é um corolário de um resultado muito mais forte: qualquer matriz complexa $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ de traço zero é unitariamente equivalente a uma matriz cuja diagonal é nula, ver [2].

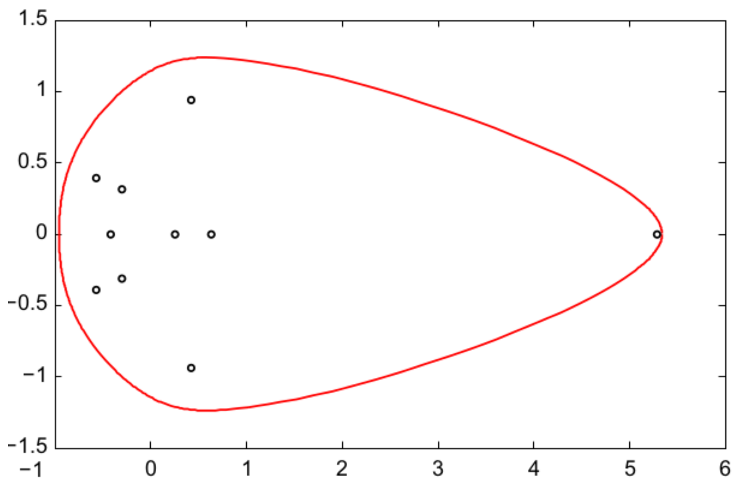

Figura 1: Domínio numérico de uma matriz arbitrária 10×10, com seus respectivos autovalores, figura retirada de [1]. Para uma coleção bonita de domínios numéricos, ver [4].

O algoritmo

Como já foi dito, seguiremos a referência [3] para propor um algoritmo para determinar numericamente o domínio numérico de uma matriz $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$. Antes de mais nada, convém lembrarmos alguns fatos. A fronteira $\partial W(A)$ de $W(A)$, que é um conjunto fechado, é uma curva suave por partes. Mais que isso, é uma curva algébrica por partes. Se em algum ponto a curva não for diferenciável, é porque esse ponto é um autovalor de A (ver P7). Sendo uma curva suave, uma estratégia razoável seria determinar essa curva em alguns pontos e uni-los com uma poligonal. Quanto mais pontos tivermos, mas precisa será a representação da curva.

O ponto fundamental de [3] é que uma matriz $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ pode ser sempre decomposta numa parte hermitiana e numa anti-hermitiana

$$A = \underbrace{\frac{1}{2}\left(A + A^\dagger\right)}_{A_H = A_H^\dagger} + \underbrace{\frac{1}{2}\left(A - A^\dagger\right)}_{A_I = -A_I^\dagger}. \tag{13}$$

Além do mais, se A_I é uma matriz anti-hermitiana, iA_I será necessariamente hermitiana. Portanto, o especto de uma matriz anti-hermitiana A_I será sempre composto por imaginários puros. Teremos

$$Z^\dagger A Z = \underbrace{Z^\dagger A_H Z}_{\text{parte real}} + \underbrace{Z^\dagger A_I Z}_{\text{parte imaginária}} \in \mathbb{C} \tag{14}$$

o que implica que podemos sempre localizar o "limite esquerdo" de $W(A)$, o qual será a reta vertical com $z = \lambda_{\max}$, o maior autovalor da matriz hermitiana A_H, ver Fig. 2. Podemos fazer melhor que isso. Seja $Z_{\max}$ o (ou um)

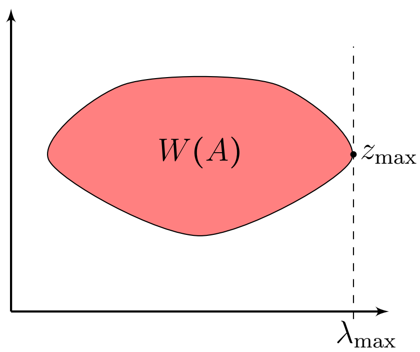

Figura 2: Esquema para localizar o ponto $z_{\max}$, o "limite esquerdo" de $W(A)$, a partir do maior autovalor da matriz hermitiana A_H.

autovetor (unitário) de A_H associado ao autovalor $z = \lambda_{\max}$. O ponto

$$z_{\max} = Z^t_{\max} A Z_{\max} \in \mathbb{C} \tag{15}$$

é o ponto de tangência da reta vertical com $W(A)$, isto decorre diretamente das propriedades P3 e P7.

A ideia agora é "percorrer" a fronteira de $W(A)$, coletar diferentes pontos e uni-los com uma poligonal. Quanto mais pontos tivermos, melhor será a aproximação. Como percorremos a fronteira? Usando as rotações da propriedade P5! Por exemplo, se considerarmos a matriz $A = e^{-i\phi_0} A$ e repetirmos as operações que levaram a construção da Fig. 2, vamos encontra o limite esquerdo do domínio $e^{-i\phi_0} W(A)$, que nada mais é que o domínio original girado de ϕ_0 no sentido horário. Teremos descoberto, na prática, um outro ponto que está também na fronteira, mas deslocado no sentido anti-horário em relação ao ponto $z = \lambda_{\max}$ original de A. Varrendo todo o intervalo $[0, 2\pi]$, varreremos toda a fronteira de $W(A)$. Podemos resumir estes passos no Algoritmo 1. A saída deste algoritmo será uma lista de pontos $z_k \in \partial W(A)$, e poderemos aproximar a fronteira $\partial W(A)$ por uma poligonal.

Algoritmo 1: Domínio numérico de uma matriz

Entrada: Matriz $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, número de pontos na fronteira $N > 0$.
Saída: Lista de pontos $z_k \in \partial W(A)$, $k = 0, \ldots, N-1$.
início
  para $k = 0, \ldots, N-1$ **faça**
    $\phi = \frac{2k\pi}{N-1}$;
    $A_H = \frac{1}{2}\left(e^{-i\phi}A + e^{i\phi}A^{\dagger}\right)$;
    determine $(\lambda_{\max}, Z_{\max})$ de A_H ;
    $z_k = Z^t_{\max} A Z_{\max}$;
  fim
fim

Este algoritmo pode ser melhorado de inúmeras maneiras. Espera-se que vocês explorem estas possibilidades. Por exemplo, da Fig. 2, é evidente que podemos também obter os limites da direita, superior e inferior de $W(A)$. Levando-se isto em conta, podemos diminuir o número de passos para determinar N pontos de $\partial W(A)$. Enfim, há vários pontos que podem ser explorados neste problema.

Referências

[1] M. Benzi, *Some Uses of the Field of Values in Numerical Analysis*, Boll. Union. Mat. Ital. **14**, 159-177 (2020).

[2] R. Horn, C. Johnson, *Topics in Matrix Analysis*, Cambridge University Press, (1991)

[3] C. Johnson, *Numerical determination of the field of values of a complex matrix*, SIAM J. Num. Analysis, **15**, 595 (1978).

[4] `https://nhigham.com/2023/07/11/what-is-the-numerical-range-of-a-matrix/`