Elements bàsics de l'àlgebra lineal

Problemes per a la ciència de dades

PID_00262428

Francesc Pozo Montero
Jordi Ripoll Missé

Universitat Oberta de Catalunya

Francesc Pozo Montero

Llicenciat en Matemàtiques per la Universitat de Barcelona (2000) i doctor en Matemàtica Aplicada per la Universitat Politècnica de Catalunya (2005). Ha estat professor associat a la Universitat Autònoma de Barcelona i professor associat, col·laborador i actualment professor agregat a la Universitat Politècnica de Catalunya. A més, és cofundador del Grup d'Innovació Matemàtica E-learning (GIMEL), responsable de diversos projectes d'innovació docent i autor de diverses publicacions. Com a membre del grup de recerca consolidat CoDAlab, centra la recerca en la teoria de control i les aplicacions en enginyeria mecànica i civil, com també en l'ús de la ciència de dades per al monitoratge de la integritat estructural i per al monitoratge de la condició, sobretot en turbines eòliques.

Jordi Ripoll Missé

Llicenciat en Matemàtiques i doctor en Ciències Matemàtiques per la Universitat de Barcelona (2005). Professor col·laborador de la Universitat Oberta de Catalunya des del 2011 i professor del Departament d'Informàtica, Matemàtica Aplicada i Estadística de la Universitat de Girona (UdG) des del 1996, on actualment és professor agregat i desenvolupa tasques de recerca en l'àmbit de la biologia matemàtica (models amb equacions en derivades parcials i dinàmica evolutiva). També ha estat professor i tutor de la UNED en dues etapes, primer al centre associat de Terrassa i actualment al de Girona. Ha participat en nombrosos projectes d'innovació docent, especialment pel que fa a l'aprenentatge de les matemàtiques en línia.

L'encàrrec i la creació d'aquest recurs d'aprenentatge UOC han estat coordinats per la professora: Cristina Cano Bastidas (2019)

Primera edició: febrer 2019

Av. Tibidabo, 39-43, 08035 Barcelona
Disseny: Manel Andreu
Realització editorial: Oberta UOC Publishing, SL

Índex

1. Problemes

Elements bàsics de l'àlgebra lineal

Temes: *espais vectorials en dimensió finita (vectors i operacions amb vectors), subespais generats. Matrius (diagonals, triangulars, quadrades, rectangulars, simètriques), operacions amb matrius.* Determinants*: càlcul i interpretació geomètrica al pla i a l'espai. Matriu inversa. Rang d'una matriu. Aplicacions lineals (entre espais vectorials). Producte escalar de dos vectors (angle entre els vectors).*

1. La teoria de matrius pot ser una eina molt útil per descriure problemes de la vida quotidiana. Vegem-ne un exemple:

Una botiga d'animals que ven peixos d'aquari inclou una garantia: cada peix que mori durant els tres primers mesos serà reemplaçat de forma gratuïta. Un cop el peix ha estat reemplaçat una vegada, ja no queda cobert per la garantia. D'altra banda, s'han recopilat les següents dades: el 3% dels peixos moren durant el primer mes, el 5% dels peixos que superen el primer mes moren durant el segon mes i, finalment, el 7% dels peixos que han complert dos mesos moren durant el tercer mes.

Nota de l'exercici 1

Aquest exercici és una simplificació dràstica d'una situació real d'una botiga que pot tenir una gran varietat d'animals i oferir garanties diverses en funció del tipus d'animal i del tipus de client. Imagineu el gran volum de dades que podríem codificar amb aquest tipus de matrius!

a) Si per simplificar suposem que els peixos sense garantia no es moren, dibuixeu el diagrama d'estats (nodes) i les probabilitats de transició entre estats (arestes). Fixeu-vos que aquest problema té cinc estats possibles: peix en el mes 1, 2 o 3 (E_1,E_2,E_3, respectivament), peix sense garantia perquè ja s'ha reposat (E_4) i peix sense garantia perquè té més de tres mesos (E_5). Per fer aquest diagrama, dibuixeu cinc rodones amb les etiquetes dels estats i, a continuació, traceu fletxes entre les rodones indicant les possibles transicions entre els estats i especificant la probabilitat corresponent.

b) Escriviu la matriu $P = (P_{ij})$ de les probabilitats de transició, és a dir, P_{ij} és la probabilitat de canviar de l'estat j a l'estat i per cada un dels cinc possibles estats del sistema. Fixeu-vos que cada columna de la matriu correspon a les probabilitats de les fletxes que surten de cada estat i la suma total ha de ser igual a 1.

c) P és una matriu diagonal? P és una matriu triangular? Calculeu el seu determinant. Existeix la matriu P^{-1}?

d) Calculeu P^2, P^3 i P^4, és a dir, el quadrat, el cub i la potència quarta de la matriu P. Què observeu? Aquestes noves matrius tenen la mateixa estructura triangular que la matriu original?

2. Si disposem de dades de n observacions d'individus amb m característiques (típicament, $n \gg m$, és a dir, moltes més observacions que característiques), podem organitzar aquesta informació en forma d'una matriu A de n files i m columnes, que en general serà rectangular.

Un dels temes importants que tractarem més endavant és la descomposició en valors singulars (SVD), una aplicació interessant i útil en la ciència de dades que es basa en l'anàlisi de la matriu $A^T \cdot A$ o la matriu $A \cdot A^T$, dues noves matrius resultants de multiplicar, per la dreta o per l'esquerra, la matriu transposada (que s'obté de canviar files per columnes) per la matriu original. Vegem-ne un parell d'exemples:

a) Considereu les matrius rectangulars següents:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 1 \\ 4 & 0 \\ -1 & 3 \end{pmatrix} \quad , \quad A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 9 & 3 \\ 0 & -7 & 1 & 4 \\ 4 & 1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

i calculeu-ne el rang (el nombre màxim de files o de columnes linealment independents).

b) Per a cada una de les matrius A de l'apartat anterior, calculeu les dues matrius $B_1 = A^T \cdot A$ i $B_2 = A \cdot A^T$. Aquestes noves matrius són simètriques? Tenen la mateixa traça (suma dels elements de la diagonal principal)? Tenen el mateix determinant? Calculeu-ne els rangs. Es compleix que coincideixen, és a dir, $\text{rang}(A) = \text{rang}(B_1) = \text{rang}(B_2)$?

3. Una de les aplicacions més directes dels determinants, íntimament relacionada amb la definició de determinant d'una matriu, és el càlcul d'àrees definides per dos vectors al pla i el càlcul de volums definits per tres vectors a l'espai. En efecte, tres vectors a l'espai tridimensional ($\mathbb{R}^3$) generen un prisma de sis cares (paral·lelepípede en què les cares són paral·lelograms paral·lels dos a dos). Per calcular el volum d'aquesta peça n'hi ha prou de calcular el determinant en valor absolut de la matriu A, formada pels tres vectors (en files o en columnes). En símbols, si tenim els vectors $\vec{u} = (u_1,u_2,u_3)$, $\vec{v} = (v_1,v_2,v_3)$ i $\vec{w} = (w_1,w_2,w_3)$, llavors el volum generat és:

$$V = |det(\vec{u},\vec{v},\vec{w})| = \begin{vmatrix} u_1 & v_2 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{vmatrix} \geq 0$$

El determinant s'ha de calcular en valor absolut, ja que, independentment de l'ordre en què agafem els vectors i el volum d'una figura, sempre serà un valor positiu. A més, podríem posar els vectors per files a la matriu, en comptes de fer-ho per columnes, ja que el determinant de la matriu transposada coincideix amb el determinant de la matriu: $\det(A^T) = \det(A)$.

a) Donats els punts a l'espai $P = (-2,6,7)$, $Q = (5,-6,8)$, $R = (8,4,-9)$ i $S = (9,5,1)$, construïu tres vectors a partir d'un dels vèrtexs (per exemple, $\overrightarrow{PQ}$, $\overrightarrow{PR}$ i $\overrightarrow{PS}$) i calculeu el volum del prisma generat.

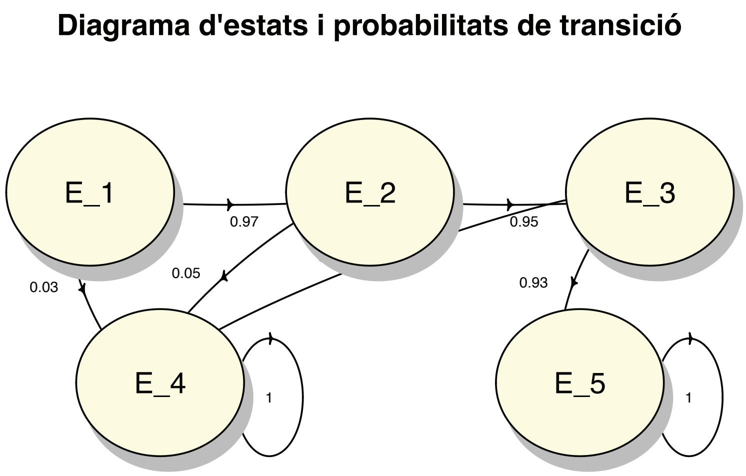
b) Considereu ara el tetraedre (piràmide de base triangular, és a dir, un poliedre de quatre cares triangulars) format pels quatre punts P,Q,R i S de l'exercici anterior. Tenint en compte que el volum d'un tetraedre és una sisena part del volum del prisma que el conté, calculeu el volum del tetraedre $PQRS$.

c) Considereu dos tetraedres a l'espai tridimensional. Els vèrtexs del primer tetraedre són $P = (0,3,8)$, $Q = (2,17,8)$, $R = (-1,6,9)$ i $S = (-2,6,7)$, i els vèrtexs del segon, P, $Q' = (2,-19,8)$, R i S. Comproveu que tenen el mateix volum. Per què? Quin és aquest volum? Expliqueu els resultats obtinguts.

2. Solucions

1. Problema amb cinc estats possibles.

a) Diagrama d'estats i les probabilitats de transició entre els cinc estats possibles: peix en el mes 1, 2 o 3 (E_1,E_2,E_3, respectivament), peix sense garantia perquè ja s'ha reposat (E_4) i peix sense garantia perquè té més de tres mesos (E_5):



b) La matriu P de les probabilitats de transició és:

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{ccccc} E_1 & E_2 & E_3 & E_4 & E_5 \end{array} \\ \begin{array}{c} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \\ E_4 \\ E_5 \end{array} & \begin{pmatrix} 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0 & 0 \\ 0.97 & 0.00 & 0.00 & 0 & 0 \\ 0.00 & 0.95 & 0.00 & 0 & 0 \\ 0.03 & 0.05 & 0.07 & 1 & 0 \\ 0.00 & 0.00 & 0.93 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

Fixeu-vos que cada columna de P són les possibilitats que pot tenir cada un dels estats. Per exemple, el primer estat, E_1, té dues transicions cap a E_2 i E_4 amb les probabilitats 97% i 3%, respectivament, etc.

c) La matriu P no és diagonal, però és una matriu triangular. El seu determinant val 0, ja que en aquest cas és el producte de la diagonal principal. En conseqüència, no existeix la matriu inversa.

d) Les potències de la matriu P són, també, matrius triangulars. A continuació teniu el codi R per calcular-les:

```
> Etiquetes <- c("E_1", "E_2", "E_3", "E_4", "E_5")
> MatriuP <- matrix(c(0,0.97,0,0.03,0,0,0,0.95,0.05,0,0,0,0,0.07,0.93,
+             0,0,0,1,0,0,0,0,0,1), 5,5, dimnames = list(Etiquetes, Etiquetes))
> det(MatriuP)  # determinant de la matriu P

[1] 0

> library(expm)
> # Potències de la matriu de transició
> MatriuP

     E_1  E_2  E_3 E_4 E_5
E_1 0.00 0.00 0.00   0   0
E_2 0.97 0.00 0.00   0   0
E_3 0.00 0.95 0.00   0   0
E_4 0.03 0.05 0.07   1   0
E_5 0.00 0.00 0.93   0   1

> MatriuP %^% 2 # quadrat

       E_1    E_2  E_3 E_4 E_5
E_1 0.0000 0.0000 0.00   0   0
E_2 0.0000 0.0000 0.00   0   0
E_3 0.9215 0.0000 0.00   0   0
E_4 0.0785 0.1165 0.07   1   0
E_5 0.0000 0.8835 0.93   0   1

> MatriuP %^% 3 # cub

         E_1    E_2  E_3 E_4 E_5
E_1 0.000000 0.0000 0.00   0   0
E_2 0.000000 0.0000 0.00   0   0
E_3 0.000000 0.0000 0.00   0   0
E_4 0.143005 0.1165 0.07   1   0
E_5 0.856995 0.8835 0.93   0   1

> MatriuP %^% 4 # potència quarta
```

```
          E_1    E_2   E_3 E_4 E_5
E_1 0.000000 0.0000 0.00   0   0
E_2 0.000000 0.0000 0.00   0   0
E_3 0.000000 0.0000 0.00   0   0
E_4 0.143005 0.1165 0.07   1   0
E_5 0.856995 0.8835 0.93   0   1
```

La matriu d'aquest problema correspon a una *cadena de Markov* (model matricial lineal), un tema que tractarem més endavant. De tota manera, podeu veure a continuació les instruccions bàsiques amb R per definir-la i visualitzar-la:

```
> # install.packages("markovchain")
> library(markovchain)
> # Creem un nou objecte que és una cadena de Markov (per columnes)
> CM_botiga <- new("markovchain", states = Etiquetes, byrow = F,
+                  transitionMatrix = MatriuP, name = "Botiga d'animals")
> # install.packages("diagram")
> library(diagram)
> # Dibuix del diagrama d'estats i probabilitats de transició
> plotmat(MatriuP, pos = c(3,2), lwd = 1, box.lwd = 1,cex.txt = 0.5,
+         box.size = 0.1, box.type = "circle", box.prop = 0.5,
+         box.col = " light yellow", arr.length=.1, arr.width=.1,
+         self.cex = .4, self.shifty = -.01, self.shiftx = .13,
+         main = "Diagrama d'estats i probabilitats de transició")
```

2. A partir de la matriu rectangular de les dades A, construïm dues noves matrius simètriques, $B_1 = A^T \cdot A$ i $B_2 = A \cdot A^T$, i calculem els rangs, les traces i els determinants.
Primer exemple ($n = 4 \times m = 2$). Codi R de resolució:

```
> Etiqueta_fila <- c(" ind 1", " ind 2", " ind 3", " ind 4")
> Etiqueta_col <- c(" car 1", " car 2")
> A <- matrix(c(1,3,4,-1,2,1,0,3), 4,2,
+             dimnames = list(Etiqueta_fila, Etiqueta_col))
> A  # matriu de les dades
```

```
      car 1 car 2
ind 1     1     2
ind 2     3     1
ind 3     4     0
ind 4    -1     3
```

```
> rangA <- rankMatrix(A)[1]
> rangA
```

```
[1] 2
```

```
> B1 <- t(A) %*% A; B2 <- A %*% t(A);
> B1
```

```
      car 1 car 2
car 1    27     2
car 2     2    14

> B2

      ind 1 ind 2 ind 3 ind 4
ind 1     5     5     4     5
ind 2     5    10    12     0
ind 3     4    12    16    -4
ind 4     5     0    -4    10

> # Sí, són matrius simètriques
>
> tr1 <- sum(diag(B1)); tr2 <- sum(diag(B2));
> tr1; tr2

[1] 41

[1] 41

> # les traces de les matrius coincideixen
>
> rangB1 <- rankMatrix(B1)[1]; rangB2 <- rankMatrix(B2)[1]
> rangA; rangB1; rangB2

[1] 2

[1] 2

[1] 2

> # Sí, els rangs coincideixen
>
> (det(B1)); (det(B2))

[1] 374

[1] 0

> # Els determinants són diferents
```

Segon exemple ($n = 3 \times m = 4$). Codi R de resolució:

```
> Etiqueta_fila <- c(" ind 1", " ind 2", " ind 3")
> Etiqueta_col <- c(" car 1", " car 2"," car 3", " car 4")
> A <- matrix(c(3,0,4,2,-7,1,9,1,-1,3,4,2), 3,4,
+             dimnames = list(Etiqueta_fila, Etiqueta_col))
> A  # matriu de les dades

      car 1 car 2 car 3 car 4
ind 1     3     2     9     3
ind 2     0    -7     1     4
ind 3     4     1    -1     2
```

```
> rangA <- rankMatrix(A)[1]
> rangA

[1] 3

> B1 <- t(A) %*% A; B2 <- A %*% t(A);
> B1

      car 1 car 2 car 3 car 4
car 1    25    10    23    17
car 2    10    54    10   -20
car 3    23    10    83    29
car 4    17   -20    29    29

> B2

      ind 1 ind 2 ind 3
ind 1   103     7    11
ind 2     7    66     0
ind 3    11     0    22

> # Sí, són matrius simètriques
>
> tr1 <- sum(diag(B1)); tr2 <- sum(diag(B2));
> tr1; tr2

[1] 191

[1] 191

> # les traces de les matrius coincideixen
>
> rangB1 <- rankMatrix(B1)[1]; rangB2 <- rankMatrix(B2)[1]
> rangA; rangB1; rangB2

[1] 3

[1] 3

[1] 3

> # Sí, els rangs coincideixen
>
> (det(B1)); (det(B2))

[1] -1.71605e-10

[1] 140492

> # Els determinants són diferents
```

3. Per calcular el volum construïm els tres vectors incidents a un mateix vèrtex (per exemple, $\overrightarrow{PQ}$, $\overrightarrow{PR}$ i $\overrightarrow{PS}$) i generem una matriu quadrada de dimensió 3. Finalment, només hem de calcular-ne el determinant o una sisena part, si es tracta d'un tetraedre. Codi R de resolució:

```
> P <- c(-2,6,7); Q <- c(5,-6,8); R <- c(8,4,-9); S <- c(9,5,1)
> PQ <- Q-P; PR <- R-P; PS <- S-P; A <- matrix(c(PQ,PR,PS),3,3);
> A;

     [,1] [,2] [,3]
[1,]    7   10   11
[2,]  -12   -2   -1
[3,]    1  -16   -6

> (V_prisma <- abs(det(A)));

[1] 1376

> (V_tetraedre <- abs(det(A))/6);

[1] 229.3333

> P <- c(0,3,8); Q <- c(2,17,8); R <- c(-1,6,9); S <- c(-2,6,7)
> QQ <- c(2,-19,8);
> PQ <- Q-P; PR <- R-P; PS <- S-P; A <- matrix(c(PQ,PR,PS),3,3);
> A;

     [,1] [,2] [,3]
[1,]    2   -1   -2
[2,]   14    3    3
[3,]    0    1   -1

> (V_tetraedre <- abs(det(A))/6);

[1] 9

> PQQ <- QQ-P; PR <- R-P; PS <- S-P; A <- matrix(c(PQQ,PR,PS),3,3);
> A;

     [,1] [,2] [,3]
[1,]    2   -1   -2
[2,]  -22    3    3
[3,]    0    1   -1

> (V_tetraedre <- abs(det(A))/6); # mateix volum

[1] 9
```

A causa del valor absolut, hi ha dos tetraedres simètrics que tenen el mateix volum.