

Valores y Vectores Propios

Computación Numérica de Valores Propios

Cristopher Arenas
`cristopher.arenas@usm.cl`

Universidad Técnica Federico Santa María
Computación Científica II - ILI286

v1.0

Ejercicio: Calcular los valores propios de la matriz A :

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 20 \end{bmatrix}$$

- ¿Qué se debe resolver para encontrar los valores propios de esta matriz?
- ¿Qué ocurre computacionalmente con la obtención de los valores propios de la matriz?

Ejercicio: Considere la matriz A y la siguiente recurrencia para $k = 0, 1, 2, \dots$:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \quad \mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$
$$\mathbf{x}_{k+1} = A \mathbf{x}_k$$

Calcule \mathbf{x}_1 , \mathbf{x}_2 y \mathbf{x}_3 .

¿Cuáles son los valores y vectores propios de la matriz A ?

$$\lambda_1 = 4, \mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$
$$\lambda_2 = -1, \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \end{bmatrix}$$

Los vectores $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots$, pueden ser expresados como combinación lineal de los vectores propios de A :

$$\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{2}{5} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{5} \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \frac{8}{5} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{5} \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} 7 \\ 6 \end{bmatrix} = \frac{32}{5} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{5} \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_3 = \begin{bmatrix} 25 \\ 26 \end{bmatrix} = \frac{128}{5} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{5} \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \end{bmatrix}$$

En general:

$$\mathbf{x}_k = \frac{2}{5} \cdot 4^k \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{5} \cdot (-1)^k \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \end{bmatrix}$$

Algunas preguntas:

- ¿Qué relación tiene la recurrencia anterior con Iteración de Punto Fijo?
- Para $k \gg 0$, ¿qué valor tiene \mathbf{x}_k ?
- ¿Qué relación tiene el vector de la pregunta anterior con los valores y vectores propios de la matriz A ?
- ¿Cómo se puede obtener el valor propio asociado a este vector?

Considerar una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ conocida con un vector propio asociado \mathbf{x} conocido, se tiene el problema de valores propios:

$$A \mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}$$

Una estimación del valor propio asociado se obtiene resolviendo el problema de mínimos cuadrados. Utilizando las ecuaciones normales:

$$\lambda = \frac{\mathbf{x}^T A \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$$

donde este valor de λ estimado se conoce como el **cuociente de Rayleigh**.

Power Iteration

Valor y Vector propio dominante



Valor y Vector propio dominante

Sea A una matriz cuadrada en $\mathbb{R}^{n \times n}$. Un **valor propio dominante** de A es un valor propio λ de magnitud $(|\lambda|)$ mayor a todos los otros valores propios. Si existiera, el vector propio x asociado a λ es llamado **vector propio dominante**.

- **Motivación:** multiplicación por una matriz tiende a mover vectores hacia la dirección de un vector propio dominante.
- **Power Iteration** es una iteración de punto fijo que aplica el cociente de Rayleigh a un vector normalizado.

Algoritmo 1 Power Iteration

```
1:  $\mathbf{x}_0 = \text{dato inicial}$ 
2: for  $j = 1$  to  $\infty$  do
3:    $\mathbf{u}_{j-1} = \mathbf{x}_{j-1} / \|\mathbf{x}_{j-1}\|_2$ 
4:    $\mathbf{x}_j = A \mathbf{u}_{j-1}$ 
5:    $\lambda_j = \mathbf{u}_{j-1}^T A \mathbf{u}_{j-1}$ 
6: end for
7:  $\mathbf{u}_j = \mathbf{x}_j / \|\mathbf{x}_j\|_2$ 
```

Preguntas:

- ¿Cuántos valores y vectores propios de A se están obteniendo?
- ¿Qué línea del algoritmo está obteniendo una estimación del valor propio de A ?
- ¿Qué línea del algoritmo está obteniendo una estimación del vector propio de A ?

- Power Iteration es una FPI con normalización en cada paso.
- Al igual que FPI, converge linealmente por un factor constante en cada paso de iteración.

Teorema

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ con valores propios reales $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ tal que $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|$. Asumir que los vectores propios forman una base de \mathbb{R}^n . Para *casi* todo vector inicial, Power Iteration converge linealmente al vector propio asociado a λ_1 con tasa de convergencia $S = |\lambda_2/\lambda_1| < 1$.

Demo: Sean $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$ una base de \mathbb{R}^n y $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ los valores propios de A con $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$ los vectores propios asociados a cada valor propio.

Dado que los vectores \mathbf{v}_i forman una base de \mathbb{R}^n , se puede escribir cualquier vector de \mathbb{R}^n como:

$$\mathbf{x}_0 = c_1 \mathbf{v}_1 + c_2 \mathbf{v}_2 + \dots + c_n \mathbf{v}_n$$

Asumir que $c_1 \neq 0$ y $c_2 \neq 0$. Aplicando Power Iteration:

$$\begin{aligned} A \mathbf{x}_0 &= c_1 A \mathbf{v}_1 + c_2 A \mathbf{v}_2 + \dots + c_n A \mathbf{v}_n \\ &= c_1 \lambda_1 \mathbf{v}_1 + c_2 \lambda_2 \mathbf{v}_2 + \dots + c_n \lambda_n \mathbf{v}_n \\ A^2 \mathbf{x}_0 &= c_1 \lambda_1^2 \mathbf{v}_1 + c_2 \lambda_2^2 \mathbf{v}_2 + \dots + c_n \lambda_n^2 \mathbf{v}_n \\ A^3 \mathbf{x}_0 &= c_1 \lambda_1^3 \mathbf{v}_1 + c_2 \lambda_2^3 \mathbf{v}_2 + \dots + c_n \lambda_n^3 \mathbf{v}_n \\ &\vdots \\ A^k \mathbf{x}_0 &= c_1 \lambda_1^k \mathbf{v}_1 + c_2 \lambda_2^k \mathbf{v}_2 + \dots + c_n \lambda_n^k \mathbf{v}_n \end{aligned}$$

$$A^k \mathbf{x}_0 = c_1 \lambda_1^k \mathbf{v}_1 + c_2 \lambda_2^k \mathbf{v}_2 + \dots + c_n \lambda_n^k \mathbf{v}_n$$

Al normalizar en cada iteración:

$$\frac{A^k \mathbf{x}_0}{\lambda_1^k} = c_1 \mathbf{v}_1 + c_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{v}_2 + \dots + c_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{v}_n$$

Para $k \rightarrow \infty$, $i \geq 2$, $c_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{v}_i$ converge a cero con tasa de convergencia

$$S \leq \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|.$$

Algunas Preguntas:

- ¿Qué vector propio se está obteniendo con Power Iteration?
- ¿Cómo se puede obtener otro valor y vector propio distinto del dominante?
- ¿Qué ocurre al aplicar Power Iteration sobre la matriz A^{-1} ?
- ¿Qué ocurre al aplicar Power Iteration sobre la matriz $A - s I_n$?

- Power Iteration está limitado a obtener el valor propio dominante de una matriz A .
- Usando Power Iteration sobre la inversa de A se obtiene el valor propio más pequeño.

Propiedades

Asmuir que la matriz $A \in \mathbb{R}^n$ tiene valores propios $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ tal que $|\lambda_1| > \dots > |\lambda_n|$.

- 1 Los valores propios de A^{-1} son $\lambda_1^{-1}, \dots, \lambda_n^{-1}$.
- 2 Los valores propios de $A - s I_n$ son $\lambda_1 - s, \dots, \lambda_n - s$.

En ambos casos las matrices tienen los mismos vectores propios que A .

- Utilizando estas propiedades y Power Iteration, es posible obtener un valor propio no dominante.

Algoritmo 2 Inverse Power Iteration

```
1:  $\mathbf{x}_0 = \text{dato inicial}$   
2: for  $j = 1$  to  $\infty$  do  
3:    $\mathbf{u}_{j-1} = \mathbf{x}_{j-1} / \|\mathbf{x}_{j-1}\|_2$   
4:    $\mathbf{x}_j = (A - s I_n)^{-1} \mathbf{u}_{j-1}$   
5:    $\lambda_j = \mathbf{u}_{j-1}^T \mathbf{x}_j$   
6: end for  
7:  $\mathbf{u}_j = \mathbf{x}_j / \|\mathbf{x}_j\|_2$ 
```

Para evitar el cálculo de la matriz inversa:

$$\mathbf{x}_j = (A - s I_n)^{-1} \mathbf{u}_{j-1}$$

se puede sustituir por una operación equivalente:

$$(A - s I_n) \mathbf{x}_j = \mathbf{u}_{j-1}$$

¿Cómo se puede resolver la expresión anterior?

Algoritmo 2 Inverse Power Iteration

```
1:  $\mathbf{x}_0 = \text{dato inicial}$   
2: for  $j = 1$  to  $\infty$  do  
3:    $\mathbf{u}_{j-1} = \mathbf{x}_{j-1} / \|\mathbf{x}_{j-1}\|_2$   
4:   Resolver  $(A - s I_n) \mathbf{x}_j = \mathbf{u}_{j-1}$   
5:    $\lambda_j = \mathbf{u}_{j-1}^T A \mathbf{u}_{j-1}$   
6: end for  
7:  $\mathbf{u}_j = \mathbf{x}_j / \|\mathbf{x}_j\|_2$ 
```

Este algoritmo obtiene el valor propio $\tilde{\lambda}$ y el vector propio $\tilde{\mathbf{v}}$.

- ¿Es $\tilde{\lambda}$ un valor propio de A ?
- ¿Es $\tilde{\mathbf{v}}$ un vector propio de A ?

Para obtener un valor propio de A se sabe que:

$$\tilde{\lambda} = (\lambda_i - s)^{-1}$$

donde λ_i es un valor propio de A . Luego:

$$\tilde{\lambda} = (\lambda_i - s)^{-1}$$

$$\tilde{\lambda}^{-1} = \lambda_i - s$$

$$\lambda_i = \tilde{\lambda}^{-1} + s$$

donde λ_i es el valor propio de A más cercano a S .

Algoritmo 3 Rayleigh Quotient Iteration

```
1:  $\mathbf{x}_0 = \text{dato inicial}$ 
2: for  $j = 1$  to  $\infty$  do
3:    $\mathbf{u}_{j-1} = \mathbf{x}_{j-1} / \|\mathbf{x}_{j-1}\|_2$ 
4:    $\lambda_{j-1} = \mathbf{u}_{j-1}^T A \mathbf{u}_{j-1}$ 
5:   Resolver  $(A - \lambda_{j-1} I_n) \mathbf{x}_j = \mathbf{u}_{j-1}$ 
6: end for
7:  $\mathbf{u}_j = \mathbf{x}_j / \|\mathbf{x}_j\|_2$ 
```

- RQI es un Inverse Power Iteration con un shift distinto en cada iteración.
- Para valores propios no repetidos, converge cuadráticamente.
- Para valores propios no repetidos, este algoritmo converge cúbicamente si la matriz es simétrica .
- ¿Qué ocurre si la matriz $(A - \lambda_{j-1} I_n)$ de la línea 5 es singular?
- ¿Qué valor propio encuentra RQI?

- PI encuentra el valor propio dominante de una matriz A .
- IPI encuentra el valor propio más cercano a un shift s de una matriz A .
- RQI encuentra un valor propio de A dependiendo del vector inicial \mathbf{x}_0 .
- ¿Cómo se puede encontrar más de un valor propio a la vez?

Considerar n vectores ortogonales: $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$. Aplicando Power Iteration sobre cada vector se esperaría que:

- 1 Todos converjan al valor propio dominante.
- 2 Se pierda la ortogonalidad.

Para evitar estos inconvenientes, se reortogonalizarán los vectores después en cada iteración. ¿Cómo se puede ortogonalizar un conjunto de vectores?

Algoritmo 4 Normalized Simultaneous Iteration

```
1:  $\bar{Q}_0 = I_n$ 
2: for  $j = 0$  to  $\infty$  do
3:    $\bar{Q}_{j+1} R_{j+1} = \text{qr}(A \bar{Q}_j)$ 
4: end for
5:  $\Lambda = \text{diag}(\bar{Q}^T A \bar{Q})$ 
```

- La línea 3 calcula la factorización QR en cada iteración.
- La diagonal de la matriz R posee una estimación de todos los valores propios.
- La matriz \bar{Q} tiene una estimación de todos los vectores propios.

¿Por qué se encuentran todos los valores propios de la matriz A ?

Para $j \rightarrow \infty$, $\bar{Q} = \bar{Q}_j = \bar{Q}_{j+1}$. Entonces:

$$\bar{Q} R = A \bar{Q}$$

$$R = \bar{Q}^T A \bar{Q}$$

Las matrices R y A son similares, por lo tanto tienen los mismos valores propios.

- Realiza los mismos cálculos que NSI, pero con distinta notación.
- Considerar \bar{Q} y R matrices de Normalized Simultaneous Iteration. Considerar Q y R' matrices de Unshifted QR.
- Sea $Q_0 = I_n$ al igual que NSI. Luego, se tiene una secuencia de matrices A_j :

$$\begin{aligned}A_0 &= A Q_0 = Q_1 R'_1 \\A_1 &= R'_1 Q_1 = Q_2 R'_2 \\&\vdots \\A_j &= R'_j Q_j\end{aligned}$$

- Las matrices A_j forman una secuencia de transformaciones similares:

$$\begin{aligned}A_{j-1} &= Q_j R'_j \\&= Q_j R'_j Q_j Q_j^T \\&= Q_j A_j Q_j^T\end{aligned}$$

- Se puede relacionar la notación de NSI con Unshifted QR de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}\bar{Q}_j &= Q_1 Q_2 \dots Q_j \\R_j &= R'_j\end{aligned}$$

Algoritmo 5 Unshifted QR

```
1:  $\bar{Q}_0 = I_n$ 
2:  $R'_0 = A$ 
3:  $\bar{Q} = Q_0$ 
4: for  $j = 0$  to  $\infty$  do
5:    $Q_{j+1} R'_{j+1} = \text{qr}(R'_j Q_j)$ 
6:    $\bar{Q} = \bar{Q} Q_{j+1}$ 
7: end for
8:  $\Lambda = \text{diag}(R' Q)$ 
```

Teorema

Asumir que A es una matriz de $n \times n$ simétrica, con valores propios $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ tales que $|\lambda_1| > \dots > |\lambda_n|$. Unshifted QR converge linealmente a los valores propios y vectores propios de A . Cuando $j \rightarrow \infty$:

- $A_j = R'_j Q_j$ converge a una matriz diagonal que contiene los valores propios en la diagonal principal.
- $\bar{Q} = Q_1 \dots Q_j$ converge a una matriz ortogonal, cuyas columnas son los vectores propios.

- Los **Ritz Values** son una estimación de los valores propios.
- Se obtienen a partir de la matriz \tilde{H}_k de iteración de Arnoldi (o GMRes), al quitarle la última fila.
- Se utiliza el subespacio de Krylov:

Subespacio de Krylov

Sea \mathcal{K}_k el subespacio de Krylov, definido por:

$$\mathcal{K}_k(A, \mathbf{v}) = \text{span}\{\mathbf{v}, A\mathbf{v}, A^2\mathbf{v}, \dots, A^{k-1}\mathbf{v}\}$$

Algoritmo 6 Iteración de Arnoldi

Input: \mathbf{b} , un vector inicial cualquiera

```
1:  $\mathbf{q}_1 = \mathbf{b} / \|\mathbf{b}\|_2$ 
2: for  $k = 1, 2, \dots$  do
3:    $\mathbf{y} = A \mathbf{q}_k$ 
4:   for  $j = 1, 2, \dots, k$  do
5:      $h_{jk} = \mathbf{q}_j^T \mathbf{y}$ 
6:      $\mathbf{y} = \mathbf{y} - h_{jk} \mathbf{q}_j$ 
7:   end for
8:    $h_{k+1,k} = \|\mathbf{y}\|_2$ 
9:    $\mathbf{q}_{k+1} = \mathbf{y} / h_{k+1,k}$ 
10: end for
```

Usando Gram-Schmidt modificado, en la k -ésima iteración se tienen vectores \mathbf{q}_k tales que:

$$A \mathbf{q}_i = \sum_{j=1}^i h_{ji} \mathbf{q}_j + h_{i+1,i} \mathbf{q}_{i+1}$$

para $0 < i \leq k$. Considerando todos los vectores \mathbf{q}_k juntos:

$$A Q_k = Q_{k+1} \tilde{H}_k$$

$$A Q_k = Q_k H_k + h_{k+1,k} \mathbf{q}_{k+1} e_k^T$$

donde H_k es la matriz de Hessenberg.

- ¿Qué ocurre si $h_{k+1,k}$ es muy pequeño?

Considerar la k -ésima iteración de Arnoldi, donde:

$$A Q_k = Q_k H_k + h_{k+1,k} \mathbf{q}_{k+1} e_k^*$$

Suponer que $h_{k+1,k} \approx 0$, luego:

$$A Q_k = Q_k H_k$$

De la iteración de Arnoldi se cumple también que:

$$A Q_k = Q_{k+1} \tilde{H}_k$$

Igualando ambas ecuaciones, se obtiene una expresión para H_k que no depende explícitamente de la matriz A :

$$\begin{aligned} Q_k H_k &= Q_{k+1} \tilde{H}_k \\ H_k &= Q_k^* Q_{k+1} \tilde{H}_k \end{aligned}$$

Los Ritz Values pueden obtenerse calculando los valores propios a la matriz H_k .

Algunas preguntas:

- ¿Cómo pueden obtenerse los Ritz Values a partir de la matriz H_k ?
- ¿Qué ocurre si $h_{k+1,k}$ no es pequeño?
- ¿Cuándo es conveniente obtener los Ritz Values?



Numerical Analysis, Timothy Sauer, Second Edition, Pearson, 2012.
Chapter 12: Eigenvalues and Singular Values.