Análisis Numérico Matricial Universidad de Murcia curso 2016-2017

Unidad 4: Valores y Vectores Propios

Antonio José Pallarés Ruiz

Índice general

1.	Intr	oducción y complementos de análisis matricial.	5
	1.1.	Origen de los problemas del análisis numérico matricial	6
	1.2.	Repaso de álgebra matricial	8
		1.2.1. Sistemas de Ecuaciones	8
		1.2.2. Matrices	9
		1.2.3. Espacios vectoriales. Aplicaciones lineales	11
		1.2.4. Reducción de matrices	17
		1.2.5. Cocientes de Rayleigh. Matrices simétricas y hermitianas	19
	1.3.	Normas matriciales	21
		1.3.1. Convergencia de matrices	24
	1.4.	Análisis del error. Condicionamiento	25
		1.4.1. Condicionamiento en la búsqueda de valores y vectores propios	29
	1.5.	Actividades complementarias del capítulo	30
2.	Mét	todos Directos para Ecuaciones Lineales	31
	2.1.	Sistemas fáciles de resolver	32
		2.1.1. Sistemas diagonales	32
		2.1.2. Sistemas triangulares superiores. Método ascendente	33
		2.1.3. Sistemas triangulares inferiores. Método descendente	34
	2.2.	Factorización LU	35
		2.2.1. Algoritmos de factorización	36
		2.2.2. Complejidad de las factorizaciones LU	37
		2.2.3. Factorizaciones LDU	38
		2.2.4. Transformaciones de Gauss sin permutar filas	40
	2.3.	Sistemas con matrices especiales	42
		2.3.1. Matrices con diagonal estrictamente dominante	42
		2.3.2. Matrices definidas positivas	43
		2.3.3. Matrices simétricas definidas positivas (SPD)	45
		2.3.4. Matrices tridiagonales	47
	2.4.	Método de Gauss	49
		2.4.1. Gauss con pivote total	52

		2.5.1. Transformaciones de Householder	54
		$2.5.2.\;$ Factorización QR usando las transformaciones de Householder	57
		2.5.3. Aplicación de QR a la resolución de sistemas lineales	59
	2.6.	Problemas de mínimos cuadrados	61
		2.6.1. Modelo General de los problemas de aproximación	61
		2.6.2. Aproximación por mínimos cuadrados	63
		2.6.3. Sistemas sobredeterminados	66
		2.6.4. Métodos Numéricos	67
		2.6.5. Aplicaciones y Ejemplos	68
	2.7.	Actividades complementarias del capítulo	72
3.		codos iterativos de resolución de sistemas de ecuaciones	73
	3.1.	Métodos iterativos. Criterios de Convergencia	74
		3.1.1. Criterios de Convergencia	75
		3.1.2. Construcción de Métodos iterativos	76
	3.2.	Método de Jacobi	77
	3.3.	Método de Gauss-Seidel	79
	0.4	3.3.1. Convergencia de los Métodos de Jacobi y Gauss-Seidel	81
	3.4.	Método de Relajación	83
	3.5.	Método del gradiente conjugado	89
	3.6.	Actividades complementarias del capítulo	97
4.		pres y vectores propios	99
	4.1.	El problema de aproximar valores y vectores propios	
	4.2.	El método de la potencia	
	4.3.	El método de Jacobi	
		El método QR	
	4.5.	Actividades complementarias del capítulo	128
5.	Sist	emas de Ecuaciones no lineales.	125
	5.1.	Iteración de punto fijo	126
	5.2.	Método de Newton	130
	5.3.	Método de Broyden	134
	5.4.	Método del descenso rápido	137
	5.5.	Método de homotopía y continuación	137
	5.6.	Ejercicios	138
Bi	bliog	grafía	141

Interrogantes centrales del capítulo

- Aproximaciones de valores y vectores propios.
- El método de la potencia.
- El método de Jacobi.
- El método QR

Destrezas a adquirir en el capítulo

- Localizar aproximadamente los valores propios de una matriz a partir de sus coeficientes.
- Describir los algoritmos correspondientes a distintos métodos de aproximación de valores y vectores propios.
- Comparar la convergencia de las aproximaciones proporcionadas por cada método.
- Implementar en el ordenador los programas de los métodos de este capítulo.
- Aplicar los programas construidos de forma efectiva en la búsqueda de todos los valores y vectores propios de matrices concretas.

Desarrollo de los contenidos fundamentales

En este capítulo abordamos el problema de calcular, o más bien aproximar, los valores y vectores propios de una matriz, con especial atención al caso de las matrices simétricas.

En la primera sección indicamos brevemente los problemas de **condicionamiento** que pueden presentarse y formulamos el teorema de los círculos de Gershgorin, que proporciona una primera aproximación (bastante burda) al problema de localizar los valores propios de una matriz.

A continuación presentamos el método de la potencia, que es una manera muy sencilla de localizar el valor propio de mayor valor absoluto de una matriz (cuando exista) y el correspondiente vector propio, y vemos como el método puede explotarse (con el método de deflación de Wielandt) para calcular *todos* los valores y vectores propios de una matriz siempre que los valores propios sean todos reales y distintos dos a dos.

En la última sección presentamos el elegante método de Jacobi, que permite calcular *siempre* los valores propios y *prácticamente siempre* los vectores propios de una matriz simétrica.

Los contenidos del capítulo se han extraído principalmente de la Sección 6.1 (pp. 111–117) del libro de Ciarlet [5], las Secciones 5.1 y 5.2 (pp. 231–250) del texto de Kincaid y Cheney [9], y la Sección 8.4 (pp. 488–511) del libro de Burden y Faires [4].

4.1. El problema de aproximar valores y vectores propios.

Recordemos que si $A \in \mathcal{M}_{n \times n}(\mathbb{C})$ es una matriz con coeficientes complejos, $\lambda \in \mathbb{C}$ es un valor propio de A si existe un vector $v \in \mathbb{C}^n$ no nulo (un vector propio asociado al valor propio λ) tal que $Av = \lambda v$. Ello es equivalente a que λ sea raíz del polinomio característico $p(\lambda) = |\lambda \operatorname{Id} - A|$ de la matriz A.

En la sección 1.4.1 vimos que el problema del cálculo de los valores propios de una matriz es equivalente al del cálculo de las raíces de un polinomio. De una parte, los valores propios de una matriz son las raíces de su polinomio característico. E inversamente, las raíces del polinomio

$$p(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_{n-1} x^{n-1} + x^n$$

son los valores propios de la matriz compañera.

También vimos (Teorema 1.4.5) que cuando las matrices son diagonalizables se puede medir bien el condicionamiento del problema de encontrar los valores propios.

En particular, si A es una matriz normal o simétrica, y $\|.\|_2$ es la norma subordinada a la euclídea, existe una matriz unitaria (ortogonal) U tal que U^*AU es diagonal, y para estas matrices el número de condición es $cond_2(U)=1$ lo que garantiza el buen condicionamiento del problema de aproximar valores propios de matrices simétricas como es el caso del método de Jacobi que explicaremos en la tercera sección de este capítulo.

Ejercicio 4.1 (Véase el Teorema 2.3-2 de [5]) Prueba que si A y $B = A + \delta A$ son matrices simétricas o hermitianas con valores propios respectivos

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \ldots \leq \lambda_n$$
 y $\beta_1 \leq \beta_2 \leq \ldots \leq \beta_n$.

Entonces $\max\{|\lambda_i - \beta_i| : 1 \le i \le n\} \le ||\delta A||_2$.

Los métodos numéricos de búsqueda de valores y vectores propios se dividen en dos clases en función de que lo que se pretenda sea conseguir todos los valores propios y una base de vectores propios, o solamente un valor propio (generalmente el de mayor tamaño), como en el método de la potencia que vamos a estudiar en primer lugar.

Para calcular aproximaciones del conjunto de valores propios de una matriz A una idea explotada asiduamente es construir una sucesión de matrices P_k tal que la sucesión de matrices $P_k^{-1}AP_k$ converge hacia una matriz de valores propios conocidos, es decir, diagonal o triangular. Esta idea está en la base de algunos métodos como el de Jacobi para las matrices simétricas que también estudiaremos, o los métodos de Givens-Householder y QR para matrices arbitrarias (véase el libro de Ciarlet [5]).

Antes de pasar a analizar estos métodos enunciamos y demostramos un resultado conocido como teorema de los círculos de Gershgorin que permite localizar, de manera poco precisa, la parte del plano complejo donde estarán situados los valores propios de una cierta matriz:

Teorema 4.1.1 El conjunto de los valores propios de una matriz $A = (a_{ij}) \in \mathcal{M}_{n \times n}(\mathbb{C})$ está contenido en la unión de los discos del plano complejo

$$D_{i} = \left\{ z \in \mathbb{C} : |z - a_{ii}| \le \sum_{1 \le j \le n, j \ne i} |a_{ij}| \right\}, \ i = 1, 2, \dots n.$$

DEMOSTRACIÓN:

Ideas que intervienen

• Si λ no está contenido en los discos del enunciado entonces la matriz $A - \lambda I$ tiene diagonal estrictamente dominante y en consecuencia $A - \lambda I$ es no singular y λ no es un valor propio de A.

(Recordad que este resultado está propuesto como ejercicio adicional 6 en la hoja de ejercicios del tema 2).

Ejemplo 4.1.2 Los valores propios de la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1+i & 0 & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & 1 & \frac{1}{4} \\ 1 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

estarán en la unión de los discos de centro 1+i y radio 1/4, de centro 1 y radio 1/2, y de centro 3 y radio 2. En particular, si λ es valor propio de A entonces se tendrá $1/2 \le |\lambda| \le 5$.

Ejercicio 4.2 Prueba que los valores propios de una matriz $A=(a_{ij})\in \mathcal{M}_{n\times n}(\mathbb{C})$ están contenidos en la intersección de los conjuntos D y E del plano complejo

$$D = \bigcup_{i=1,...,n} \left\{ z \in \mathbb{C} : |z - a_{ii}| \le \sum_{1 \le j \le n, j \ne i} |a_{ij}| \right\}, \quad i = 1, 2, ... n.$$

$$E = \bigcup_{j=1,...,n} \left\{ z \in \mathbb{C} : |z - a_{jj}| \le \sum_{1 \le i \le n, j \ne i} |a_{ij}| \right\}, \quad i = 1, 2, ... n.$$

4.2. El método de la potencia

Este método permite, bajo ciertas hipótesis, aproximar el valor propio "dominante" (de mayor tamaño estrictamente) de una matriz $A \in \mathcal{M}_{n \times n}(\mathbb{R})$, si es que tal valor propio existe, con lo que en particular obtendremos el radio espectral. Nótese que en este caso el valor propio será un número real, porque el polinomio característico de la matriz real tiene coeficientes reales y si un número complejo es raíz del polinomio, es decir, un valor propio de la matriz, entonces su conjugado, que tiene el mismo módulo, también será valor propio.

Supondremos en todo lo que sigue que los valores propios están ordenados según su módulo:

$$\rho = |\lambda_1| = \max\{|\lambda_1| \ge |\lambda_2| \ge \dots \ge |\lambda_n|\}.$$

El *método de la potencia* también se conoce como el método del cociente de Rayleigh y consiste en lo siguiente:

- (I) se parte de una matriz A y dos vectores x_0 e y;
- (II) se construye un sucesión de vectores x_k y una sucesión de cocientes r_k como

(III) entonces, bajo ciertas hipótesis, la sucesión r_k converge hacia λ_1 y los vectores normalizados $x_k/\|x_k\|$ convergen a un vector propio de valor propio λ_1 .

Veamos cuáles son esas hipótesis:

En primer lugar es necesario elegir x_0 e y de forma que, si v_1, v_2, \ldots, v_n es una base (en el espacio vectorial \mathbb{C}^n sobre el cuerpo de los complejos \mathbb{C}) de vectores propios asociados a los valores propios $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$, entonces x_0 no sea combinación lineal de los vectores v_2, \ldots, v_n . Es decir, las componentes de x_0 e y en la dirección de v_1 sean no nulas. También suponemos $\langle v_1, y \rangle \neq 0$ y $\langle x_k, y \rangle \neq 0$ para cada k.

Finalmente hay que suponer que $|\lambda_1| > |\lambda_2|$ lo que excluye la posibilidad de que este valor propio dominante λ_1 sea una raíz múltiple o compleja del polinomio característico.

Si se cumplen las hipótesis, lo que normalmente, en la práctica, seremos incapaces de verificar (ése es el principal problema del método de la potencia), entonces se demuestra que:

Teorema 4.2.1 Sea A una matriz con valores propios

$$\sigma(A) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$$

dispuestos de forma que

$$|\lambda_1| \ge |\lambda_2| \ge \cdots \ge |\lambda_n|,$$

y con una base ortogonal de vectores propios

$$\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$$

 $(Av_i = \lambda_i v_i)$. Dados x_0 e y definimos las sucesiones

(I)
$$x_{k+1} = Ax_k$$

(II)
$$r_k = \frac{\langle x_{k+1}, y \rangle}{\langle x_k, y \rangle}$$
 supuesto que $\langle x_k, y \rangle \neq 0$.

 $Si |\lambda_1| > |\lambda_2| \ y \langle x_0, v_1 \rangle \neq 0$, la sucesión r_k converge hacia λ_1 .

DEMOSTRACIÓN:

Ideas que intervienen

■ Si $\phi(x) = \langle x, y \rangle$, basta escribir r_k en la forma $\lambda_1 \frac{\phi(\alpha_1 v_1 + \varepsilon_{k+1})}{\phi(\alpha_1 v_1 + \varepsilon_k)}$ para una sucesión vectorial (ε_k) convergente a cero.

Reescribamos $\phi(x) = \phi_y(x) = \langle x, y \rangle$ y pongamos x_0 como combinación lineal de los elementos de la base,

$$x_0 = \alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \dots + \alpha_n v_n.$$

Observemos que $\alpha_1 \neq 0$ porque x_0 no es combinación lineal de $\{v_2, ..., v_n\}$. Notemos que, por la forma en que está definida la sucesión x_k , se tiene $x_k = A^k x_0$, donde A^k es el resultado de multiplicar la matriz A por sí misma k veces. Como los vectores v_j son vectores propios de A, también lo serán para cada A^k con valores propios λ_j^k , y así

$$x_k = \alpha_1 \lambda_1^k v_1 + \alpha_2 \lambda_2^k v_2 + \dots + \alpha_n \lambda_n^k v_n = \lambda_1^k \left(\alpha_1 v_1 + \sum_{j=2}^n \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k \alpha_j v_j \right) =: \lambda_1^k (\alpha_1 v_1 + \varepsilon_k),$$

con $\varepsilon_k \to 0$ porque λ_1 es el valor propio dominante y los cocientes $(\lambda_j/\lambda_1)^k$ tienden a cero.

Por ser ϕ lineal (y por tanto continua), y ocurrir que $\alpha_1 \neq 0$ y $\phi(v_1) \neq 0$ por las hipótesis establecidas al principio, podemos tomar límites en la expresión

$$r_k = \frac{\phi(x_{k+1})}{\phi(x_k)} = \lambda_1 \frac{\phi(\alpha_1 v_1 + \varepsilon_{k+1})}{\phi(\alpha_1 v_1 + \varepsilon_k)} = \lambda_1 \frac{\alpha_1 \phi(v_1) + \phi(\varepsilon_{k+1})}{\alpha_1 \phi(v_1) + \phi(\varepsilon_k)}$$

y concluir $\lim_{k\to\infty} r_k = \lambda_1$.

Ejemplo 4.2.2 Considérese la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 \\ 4 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

En este caso es muy sencillo calcular directamente las tres raíces $\lambda_1=3,\ \lambda_2=1$ y $\lambda_3=-1$ del polinomio característico. En particular, 3 será el valor propio dominante. Si partimos de $x_0=(1,0,0)$, las primeras iteradas son los vectores

$$x_1 = (1, 2, 4),$$

$$x_2 = (5, 4, 8),$$

$$x_3 = (13, 14, 28),$$

$$x_4 = (41, 40, 80),$$

$$x_5 = (121, 122, 244).$$

Si tomamos y = (1, 0, 0), los correspondientes productos escalares serán

$$\langle x_0, y \rangle = 1,$$

$$\langle x_1, y \rangle = 1,$$

$$\langle x_2, y \rangle = 5,$$

$$\langle x_3, y \rangle = 13,$$

$$\langle x_4, y \rangle = 41,$$

$$\langle x_5, y \rangle = 121,$$

que proporcionan los cocientes

$$r_1 = 1,$$

 $r_2 = 5$
 $r_3 = 2.6,$
 $r_4 = 3.15384615,$
 $r_5 = 2.95121951.$

Como vemos, bastan cinco iteraciones para aproximar el valor propio dominante con un error inferior a 0.05.

En el ejemplo anterior la lista de vectores x_k sugiere que (1,1,2) es un vector propio de valor propio 3, y en efecto así ocurre. Sin embargo no podemos decir que los vectores x_k convergen a (1,1,2): sus módulos crecen hacia infinito.

Observación 4.2.3 En general los vectores $x_k = \lambda_1^k(\alpha_1 v_1 + \varepsilon_k)$ no pueden converger a ningún vector propio porque o bien convergen a cero si $|\lambda_1| < 1$, o bien divergen a ∞ si $|\lambda_1| > 1$. Sin embargo la sucesión

$$y_k := \frac{x_k}{\|x_k\|} = \frac{\lambda_1^k (\alpha_1 v_1 + \varepsilon_k)}{|\lambda_1|^k \|\alpha_1 v_1 + \varepsilon_k\|}$$

converge al vector propio $\alpha_1 v_1/\|\alpha_1 v_1\|$ si $\lambda_1 > 0$ y alternativamente (en términos pares e impares) a los vectores propios $\pm \alpha_1 v_1/\|\alpha_1 v_1\|$ si $\lambda_1 < 0$.

A la hora de escribir el algoritmo es importante evitar calcular y_k obteniendo primero el correspondiente vector x_k y dividiendo luego por su norma, pues como ha quedado dicho los vectores x_k pueden diverger a infinito y los errores se dispararían. En lugar de eso se calcula la sucesión (y_k) por recurrencia. Partiendo de $y_0 = x_0/||x_0||$, y supuesto y_k conocido, se tendrá que

$$y_{k+1} = \frac{x_{k+1}}{\|x_{k+1}\|} = \frac{A(x_k)}{\|x_{k+1}\|} = \frac{\|x_k\|}{\|x_{k+1}\|} A(y_k).$$

Tomando normas,

$$1 = ||y_{k+1}|| = \frac{||x_k||}{||x_{k+1}||} ||A(y_k)||,$$

es decir,

$$y_{k+1} = \frac{A(y_k)}{\|A(y_k)\|}.$$

Por tanto la sucesión (y_{k+1}) puede calcularse manejando siempre vectores uniformemente acotados por la norma de la matriz A, con lo que los errores estarán bajo control.

Por otra parte los cocientes r_k también pueden calcularse de forma estable a partir de y_k y $A(y_k)$:

$$r_{k} = \frac{\langle x_{k+1}, y \rangle}{\langle x_{k}, y \rangle} = \frac{\|x_{k+1}\| \langle y_{k+1}, y \rangle}{\|x_{k}\| \langle y_{k}, y \rangle} = \frac{\|x_{k+1}\| \|A(y_{k})\| \langle A(y_{k}), y \rangle}{\|x_{k}\| \langle y_{k}, y \rangle} = \frac{\langle A(y_{k}), y \rangle}{\langle y_{k}, y \rangle}$$

```
Algoritmo 4.1
                    Valor propio dominante (método de la potencia)
      Datos de entrada:
      A[n][n] (matriz cuyo valor propio dominante queremos obtener);
      tol (precisión para la condición de parada);
      nmax (número máximo de iteraciones);
      x0 (vector inicial no nulo );
      y (vector para los productos);
      prod1 y prod2 (variables reales para guardar productos escalares)
      Variables:
      Yini; // vector para almacenar y_k
      Yfin; // vector para almacenar sucesivamente A(y_k) e y_{k+1}
      rini; // real para almacenar r_k
      rfin; // real para almacenar r_{k+1}
      Fujo del programa:
      // Inicialización de las variables.
      rini = 0;
      Yini = x0/||x0||;
      prod1 = \langle \mathsf{Yini}, y \rangle;
      // Vamos a hacer las etapas m = 1, 2, ..., nmax.
   for(m=1;m<=nmax;m++){
           if(|prod1| = 0){
                Parada: el método de la potencia no es aplicable
                }
           Yfin = A \cdot Yini;
           if(Yfin = 0){
                Parada: el método de la potencia no es aplicable
                }
           prod2 = \langle \mathsf{Yfin}, y \rangle;
           rfin = prod2/prod1;
           Yfin = Yfin/||Yfin||;
           if(|rfin-rini| < tol)
                Parada: rfin aproxima al valor propio dominante y Yfin al vector propio
           rini = rfin; Yini = Yfin; prod1 = prod2;
      Parada: no hay convergencia en nmax iteraciones
      Datos de salida: Valor propio dominante de la matriz A y correspondiente vector propio,
```

o mensaje de error si la iteración no converge.

Puede probarse además que la velocidad de la convergencia depende del tamaño del cociente. En concreto y para una constante C se cumple

$$|r_k - \lambda_1| \le C \left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|}\right)^k$$

(ver [9, pp. 236–237]). Cuando $|\lambda_2|$ está próximo a $|\lambda_1|$ la convergencia es muy lenta. En este caso se puede acelerar la convergencia haciendo la sucesión t_k del método de la Δ^2 de Aitken. La velocidad de convergencia de esta sucesión t_k depende el cociente $\frac{|\lambda_3|}{|\lambda_1|}$. Si $|\lambda_3|$ está muy próximo a $|\lambda_2|$ no se gana prácticamente nada en velocidad; en este caso se puede volver a acelerar aplicando el método de Aitken a t_k . La velocidad de convergencia de esta nueva sucesión dependerá del cociente $\frac{|\lambda_4|}{|\lambda_1|}$. Se podría proseguir con estas aceleraciones, aunque desde el punto de vista de la programación del algoritmo no es aconsejable por el riesgo de hacer demasiadas iteraciones.

En el algoritmo 4.1 describimos el método sin incluir la aceleración de Aitken: el lector puede añadirla al algoritmo si así lo desea.

Métodos de la potencia inversa y la potencia inversa con desplazamiento

Es sencillo diseñar diversas variantes del método de la potencia que permitan obtener información sobre otros valores propios de A. Por ejemplo, si A es invertible, entonces λ es valor propio de A si y sólo si λ^{-1} lo es de A^{-1} con el mismo vector propio:

$$Au = \lambda u \Leftrightarrow \lambda^{-1}u = A^{-1}u.$$

En consecuencia, para aproximar el valor propio de módulo minimo bastaría aplicar el método de la potencia a A^{-1} y calcular el inverso de su valor propio dominante. Nótese que en este caso, en lugar de calcular la inversa de A previamente para luego ir generando la sucesión $x_{k+1} = A^{-1}x_k$, es más eficiente resolver el sistema $Ax_{k+1} = x_k$ (guardando las operaciones realizadas sobre la matriz A para no repetirlas en cada iteración). A este método se le denomina el minimo de la potencia inversa.

Análogamente, los valores propios de la matriz $A - \mu$ Id son los números de la forma $\lambda - \mu$, con λ los valores propios de A, con lo que los métodos de la potencia y de la potencia inversa aplicados a esta matriz (a estos métodos se les llama métodos de la potencia y la potencia inversa con desplazamiento) nos darían, respectivamente, el valor propio más alejado y más cercano a μ . En particular, si tenemos una idea aproximada de donde puede estar situado un cierto valor propio, el método de la potencia inversa con desplazamiento permitirá calcularlo con bastante rapidez.

Ejercicio 4.3 Realiza las tres primeras iteraciones del método de la potencia y del método de la potencia inversa para las matrices

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}_{\substack{x_0^t = (1, -1, 2)}} B = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}_{\substack{x_0 = (1, -2, 0, 3)}}$$

Indicación: para el método de la potencia inversa utiliza la factorización LU de A para resolver las ecuaciones $Ay_{k+1} = y_k$.

Ejercicio 4.4 Determina el número de operaciones implicadas en la ejecución de k pasos del método de la potencia.

Ejercicio 4.5 Diseña una variante del método de la potencia aplicado a una matriz A de dimensión n para calcular λ_1 , sabiendo su valores propios verifican

$$\lambda_1 = -\lambda_2 > |\lambda_3| \ge |\lambda_4| \ge \dots \ge |\lambda_n|.$$

Deflación de Wienlandt (Fuera de programa)

El método de deflación de Wielandt enfoca la cuestión de encontrar todo el espectro de una manera más ambiciosa. La idea es partir del método de la potencia para obtener el valor propio dominante λ_1 y un vector propio asociado, y a partir de ellos generar una matriz $(n-1)\times(n-1)$ que tenga como valores propios $\lambda_2,\ldots\lambda_n$ y dar una fórmula que permita calcular los vectores propios de la matriz original a partir de los de la nueva. Aplicando el método de la potencia a la nueva matriz, podremos obtener λ_2 y su correspondiente vector propio. Repitiendo el proceso, podremos obtener todos los valores y vectores propios de la matriz original. En cierto sentido, como vemos, el proceso recuerda al de la resolución de una ecuación polinómica: una vez que encontramos una raíz del polinomio, lo factorizamos (deflacionamos) y el problema queda reducido a encontrar las raíces de un polinomio un grado menor. Naturalmente el proceso sólo puede llegar a buen puerto si todos los valores propios son reales y distintos (lo que no podemos saber a priori). Nótese que en este caso cada subespacio propio tiene dimensión uno así que, salvo multiplicación por constantes, existen n vectores propios.

Dicho sea de paso, estos vectores propios formarán una base. En efecto, si v_1, \ldots, v_n son vectores propios de valores propios $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, con $\lambda_i \neq \lambda_j$ si $i \neq j$, entonces los vectores v_1, \ldots, v_n son linealmente independientes. Esto es fácil de demostrar por inducción sobre n. La afirmación es obvia si n = 1. Supongámosla cierta para n - 1 y supongamos que $\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \ldots + \alpha_n v_n = 0$. Entonces, por un lado, multiplicando por λ_1 ,

$$\alpha_1 \lambda_1 v_1 + \alpha_2 \lambda_1 v_2 + \ldots + \alpha_n \lambda_1 v_n = 0,$$

y por otro, multiplicando por A,

$$\alpha_1 \lambda_1 v_1 + \alpha_2 \lambda_2 v_2 + \ldots + \alpha_n \lambda_n v_n = 0.$$

Restando ambas igualdades

$$\alpha_2(\lambda_2 - \lambda_1)v_2 + \dots + \alpha_n(\lambda_n - \lambda_1)v_n = 0,$$

y como los números $\lambda_j - \lambda_1$ son distintos de cero, la hipótesis de inducción implica $\alpha_2 = \cdots = \alpha_n = 0$, con lo que $\alpha_1 v_1 = 0$ y también $\alpha_1 = 0$. Hemos probado que los vectores v_1, \ldots, v_n son linealmente independientes.

Nótese que el mismo argumento demuestra que si un valor propio λ_1 es distinto del resto y v_2, \ldots, v_n es una familia linealmente independiente de vectores propios de valores propios $\lambda_2, \ldots, \lambda_n$, entonces cada vector propio v_1 de λ_1 forma, junto con v_2, \ldots, v_n , una base.

El método de deflación de Wielandt se basa en el siguiente resultado:

Teorema 4.2.4 Supongamos que λ_1 es un valor propio de A con vector propio v_1 y x es un vector tal que $x^tv_1 = 1$. Entonces 0 es valor propio de

$$B = A - \lambda_1 v_1 x^t \tag{4.1}$$

con vector propio v_1 . Si además $w_2 \ldots, w_n$ son vectores propios de B de valores propios $\lambda_2, \ldots, \lambda_n$ $y \ 0 \neq \lambda_j \neq \lambda_i$ para cada $j \neq 1$, entonces los vectores

$$v_j = (\lambda_j - \lambda_1)w_j + \lambda_1(x^t w_j)v_1 \tag{4.2}$$

son vectores propios de A con valores propios λ_j , $j=2,\ldots,n$.

DEMOSTRACIÓN:

Ideas que intervienen

- Dados los vectores $v = (v_1, ..., v_n)$ y $x = (x_1, ..., x_n)$, vx^t es la matriz $n \times n$ que tiene como coeficiente ij el producto v_ix_j .
- Por la asociatividad del producto de matrices, si w es otro vector, entonces el resultado de multiplicar la matriz vx^t por w es el de multiplicar el vector v por el producto escalar x^tw .

Por ser λ_1 valor propio de vector propio v_1 , por la propiedad asociativa del producto de matrices y usando la hipótesis $x^t v_1 = 1$,

$$Bv_1 = Av_1 - \lambda_1(v_1x^t)v_1 = \lambda_1v_1 - \lambda_1v_1(x^tv_1) = \lambda_1v_1 - \lambda_1v_1 = 0.$$

Demostramos a continuación que los vectores v_j son vectores propios de A de valor propio $\lambda_j, j=2,\ldots,n$.

Notemos para empezar que los vectores v_j son no nulos porque $\lambda_j \neq 0$ para cada $j \neq 1$, cada par de vectores w_j, v_1 es linealmente independiente y $\lambda_j - \lambda_1 \neq 0$. Además,

$$Av_{j} = (A - \lambda_{1}v_{1}x^{t} + \lambda_{1}v_{1}x^{t})v_{j}$$

$$= Bv_{j} + \lambda_{1}(v_{1}x^{t})v_{j}$$

$$= B[(\lambda_{j} - \lambda_{1})w_{j} + \lambda_{1}(x^{t}w_{j})v_{1}]$$

$$+ \lambda_{1}(v_{1}x^{t})[(\lambda_{j} - \lambda_{1})w_{j} + \lambda_{1}(x^{t}w_{j})v_{1}]$$

$$= \lambda_{j}(\lambda_{j} - \lambda_{1})w_{j}$$

$$+ \lambda_{1}(\lambda_{j} - \lambda_{1})(v_{1}x^{t})w_{j} + \lambda_{1}(x^{t}w_{j})\lambda_{1}(v_{1}x^{t})v_{1}$$

$$= \lambda_{j}(\lambda_{j} - \lambda_{1})w_{j}$$

$$+ \lambda_{1}(\lambda_{j} - \lambda_{1})(x^{t}w_{j})v_{1} + \lambda_{1}\lambda_{1}(x^{t}w_{j})v_{1}$$

$$= \lambda_{j}(\lambda_{j} - \lambda_{1})w_{j}$$

$$+ \lambda_{j}\lambda_{1}(x^{t}w_{j})v_{1}$$

$$= \lambda_{j}v_{j};$$

en la tercera igualdad hemos usado que w_j es vector propio de B de valor propio λ_j y que $Bv_1=0$.

En el método de deflación de Wielandt el vector x se elige de acuerdo con la fórmula

$$x = \frac{1}{\lambda_1 v_{1,k}} (a_{k1}, a_{k2}, ..., a_{kn})^t$$
(4.3)

donde $v_{1,k}$ es una componente no nula del vector v_1 (suele elegirse la de mayor valor absoluto para minimizar los errores de cálculo) y $(a_{k1}, a_{k2}, \ldots, a_{kn})$ es la fila k-ésima de la matriz A. En efecto, obsérvese que $(a_{k1}, a_{k2}, \ldots, a_{kn})^t v_1$ es la componente k-ésima del vector $Av_1 = \lambda_1 v_1$,

$$(a_{k1}, a_{k2}, \dots, a_{kn})^t v_1 = \lambda_1 v_{1,k}$$

y por tanto $x^t v_1 = 1$.

La ventaja de escoger x de esta manera radica en que la matriz $B = A - \lambda_1 v_1 x^t$ tiene ceros en la fila k-ésima, dado que la componente c_{kj} de la matriz $\lambda_1 v_1 x^t$ es el número

$$\lambda_1 v_{1,k} x_j = \lambda_1 v_{1,k} \frac{1}{\lambda_1 v_{1,k}} a_{kj} = a_{kj}.$$

Ello significa que **si** w **es vector propio de** B **de valor propio** $\lambda \neq 0$, **entonces** $w_k = 0$. Más aún, si A' es la matriz $(n-1) \times (n-1)$ que resulta de eliminar la fila y columna k-ésimas de B y v' es un vector propio de A' de valor propio λ , entonces el vector w que resulta de añadir a v' un cero en el lugar k-ésimo es un vector propio de B de valor propio λ . En resumen, el algoritmo tiene las siguientes fases:

- (1) Se obtiene el valor propio dominante λ_1 de A por el método de la potencia y su vector propio asociado.
- (II) Se identifica la coordenada k-ésima de v_1 de mayor valor absoluto y se construye el vector x de acuerdo con la fórmula (4.3).
- (III) Se construye la matriz B según la formula (4.1) y, tras quitarle la fila y columna k-ésimas, la matriz $A' \in \mathcal{M}_{(n-1)\times(n-1)}(\mathbb{R})$.
- (IV) A partir de los valores propios $\lambda_2, \ldots, \lambda_n$ de A' y la correspondiente base de vectores propios v'_2, \ldots, v'_n , construimos vectores propios w_2, \ldots, w_n para B añadiendo ceros en el lugar k-ésimo.
- (V) Finalmente, a partir de la fórmula (4.2) generamos los vectores propios v_2, \ldots, v_n de A que junto a v_1 completarán la base de vectores propios buscada.

Notemos que se trata de un algoritmo recursivo: la parte clave del es el punto 4, donde el algoritmo se llama a sí mismo, de modo que la dimensión de la matriz se va reduciendo hasta que se llega a una matriz de dimensión uno, que tiene trivialmente como valor propio su única componente y como vector propio la unidad. Tal y como lo hemos escrito a continuación, se ha determinado que cada vez que llame al método de la potencia fije los vectores iniciales x_0 e y al azar.

Valores y vectores propios (método de deflación de Wielandt) Algoritmo 4.2 Datos de entrada: A[n][n] (matriz cuyos valores propios queremos obtener); tol (precisión para la condición de parada); nmax (número máximo de iteraciones); Variables: Sol[n][n+1]; // matriz para devolver los resultados B[n-1][n-1]; // matriz deflacionada Soldefl[n-1][n]; // matriz con los valores y vectores propios de B vectvaldom; // vector para guardar el vector y valor propio dominantes de Au, lambda // vector y real para guardar el contenido de vectvaldom v, y, x, w; // vectores auxiliares max, lambdadefl; // reales auxiliares k; // entero auxiliar Fujo del programa: // El caso n=1 es trivial. $if(n = 1){$ Sol = (1, A[0][0]);Parada: caso trivial // Si n>1 calculamos los valores y vectores propios recursivamente. // Elegimos al azar v e y para el método de la potencia. for(i=0;i<n;i++){ v[i] = Math.random();y[i] = Math.random();

Algoritmo 4.2 Valores y vect. propios (cont. mét. de deflación de Wielandt)

```
// Aplicamos el método de la potencia para obtener el valor propio dominante.
vectvaldom = potencia(A, tol, nmax, v, y);
  for(i=0;i<n;i++){
     u[i] = \mathsf{vectvaldom}[i];
lambda = vectvaldom[n];
// Elegimos la componente más grande u[k] del vector propio u.
aux = 0;
k=0;
  for(i=0;i<n;i++){
     if(|u[i]|>|aux|){
        aux = u[i];
        k = i;
// Calculamos la matriz deflacionada B \equiv A' a partir de k.
x = A[k][]/(\mathsf{lambda} * \mathsf{aux});
B \leftarrow A - \mathsf{lambda}\,u\,x^T;
// Calculamos los valores y vectores propios de B.
Soldefl = deflacionWielandt(B, tol, nmax);
if(|Soldefl[n-2][n-1]-lambda|< tol){</pre>
  Parada: valor propio múltiple
  \} // Obtenemos los valores y vectores propios de A.
  for(i=0;i< n-1;i++){
     for(j=0;j<k;j++){</pre>
        w[j] = \mathsf{Soldefl}[i][j];
     w[k] = 0;
     for(j=k+1; j< n; j++){
        w[j] = \mathsf{Soldefl}[i][j-1];
     lambdadefl = Soldefl[i][n-1];
     w = (\mathsf{lambdadefl} - \mathsf{lambda}) * w + \mathsf{lambda}(x^t w) u;
     for(j=0;j<n;j++){
        \mathsf{Sol}[i][j] = w[j]/\|w\|;
     Sol[i][n] = lambdadefl;
Sol[n-1][] = vectvaldom;
```

Datos de salida: Valores y vectores propios de la matriz A y correspondiente vector propio, o mensaje de error si el método no funciona.

Ejemplo 4.2.5 A continuación ilustramos el método de deflación de Wielandt aplicándolo al cálculo de los valores y vectores propios de la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & 2 \\ -2 & 5 & 0 & 1 \\ 3 & -1 & 1 & -3/2 \\ 0 & 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}.$$

Necesitamos para empezar el valor propio dominante λ_1 y el correspondiente vector propio asociado. Para ello usaríamos el método de la potencia, que nos proporcionaría $\lambda_1 = 8$ y $v_1 = (1,0,0,2)$. (Por supuesto, en la práctica el método de la potencia no proporcionará el valor exacto 8, sino una —muy buena— aproximación, y lo mismo ocurrirá con v_1 , que además aparecerá dividido por su norma.) Por tanto $k_1 = 4$, de donde

$$x = 1/(\lambda_1 v_{1,4})(a_{41}, a_{42}, a_{43}, a_{44}) = (1/(8 \cdot 2))(0, 0, 0, 8) = (0, 0, 0, 1/2).$$

A continuación calculamos

Suprimiendo la cuarta fila y columna de B ($k_1=4$) llegamos a

$$A' = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -2 & 5 & 0 \\ 3 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

De nuevo, supongamos que tras aplicar el método de la potencia obtenemos el valor propio dominante $\lambda_2=6$ de A' y un vector propio asociado, digamos $v_2'=(1,-2,1)$. En este caso $k_2=2$, con lo que

$$x' = 1/(\lambda_2 v'_{2,2})(a'_{21}, a'_{22}, a'_{23}) = (1/(6(-2)))(-2, 5, 0) = (1/6, -5/12, 0).$$

Ahora

$$B' = A' - \lambda_2(v_2'(x')^t)$$

$$= \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -2 & 5 & 0 \\ 3 & -1 & 1 \end{pmatrix} - 6 \begin{pmatrix} 1/6 & -5/12 & 0 \\ -1/3 & 5/6 & 0 \\ 1/6 & -5/12 & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -2 & 5 & 0 \\ 3 & -1 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & -5/2 & 0 \\ -2 & 5 & 0 \\ 1 & -5/2 & 0 \end{pmatrix}$$

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

A partir la matriz B', suprimiendo la segunda fila y columna $(k_2 = 2)$, obtenemos

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

A esta matriz le aplicaríamos de nuevo el método de la potencia (por supuesto para una matriz 2×2 siempre podemos hacer los cálculos a mano, pero adoptamos el "punto de vista" de la máquina, que no distingue entre matrices grandes y pequeñas) y obtendríamos su valor propio dominante, $\lambda_3 = 3$, y el correspondiente vector propio asociado, $v_3'' = (1,1)$. En este caso tomamos $k_3 = 1$, de donde

$$x'' = 1/(\lambda_3 v_{3,1}'')(a_{11}'', a_{12}'') = (1/(3 \cdot 1))(3, 0) = (1, 0).$$

Ahora

$$B'' = A'' - \lambda_3 (v_3''(x'')^t)$$

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

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

Tras suprimir la primera fila y columna $(k_3 = 1)$ llegamos a A''' = (1), que tiene trivialmente como vector propio $\lambda_4 = 1$ y como vector propio asociado $v_4''' = (1)$.

Ya sabemos que los cuatro valores propios de A son $\lambda_1 = 8$, $\lambda_2 = 6$, $\lambda_3 = 3$, $\lambda_4 = 1$ y que el vector propio asociado a λ_1 es $v_1 = (1, 0, 0, 2)$. Para calcular los otros tres tenemos que deshacer el camino andado. Para empezar generamos

$$w_4'' = (0,1)$$

añadiendo un cero en la primera componente a v_4''' (recuerda que $k_3=1$) y, a partir de él, el vector

$$v_4'' = (\lambda_4 - \lambda_3)w_4'' + \lambda_3((x'')^t w_4'')v_3''$$

= -2(0,1) + 3(0)(1,1)
= (0,-2).

Así pues, a los valores propios de A'', $\lambda_3 = 3$ y $\lambda_4 = 1$, corresponden los vectores propios $v_3'' = (1, 1)$, que obtuvimos con el método de la potencia, y $v_4'' = (0, -2)$.

A continuación construimos

$$w_3' = (1, 0, 1)$$

y

$$w_4' = (0, 0, -2)$$

a partir de los vectores v_3'' y v_4'' añadiendo un cero en la segunda componente (recuerda que $k_2 = 2$). En este punto calculamos

$$v_3' = (\lambda_3 - \lambda_2)w_3' + \lambda_2((x')^t w_3')v_2'$$

$$= (-3)(1,0,1) + 6(1/6)(1,-2,1)$$

$$= (-3,0,-3) + (1,-2,1)$$

$$= (-2,-2,-2),$$

y

$$v_4' = (\lambda_4 - \lambda_2)w_4' + \lambda_2((x')^t w_4')v_2'$$

= (-5)(0,0,-2) + 6(0)(1,-2,1)
= (0,0,10),

que son vectores propios de valores propios $\lambda_3 = 3$ y $\lambda_4 = 1$ para A', a los que tenemos que añadir $v_2' = (1, -2, 1)$, que era el vector inicial de valor propio $\lambda_2 = 6$ que proporcionaba el método de la potencia.

Ya casi hemos terminado. Generamos

$$w_2 = (1, -2, 1, 0)$$

 $w_3 = (-2, -2, -2, 0)$

y

$$w_4 = (0, 0, 10, 0)$$

a partir de los vectores v'_2 , v'_3 y v'_4 añadiendo un cero en la cuarta componente (recuerda que $k_1 = 4$). (Nótese que podemos tomar, si así lo deseamos, los vectores más sencillos (1, 1, 1, 0) y (0, 0, 1, 0) en lugar de w_3 y w_4 , pues son igualmente vectores propios de B). Finalmente

$$v_2 = (\lambda_2 - \lambda_1)w_2 + \lambda_1(x^t w_2)v_1$$

$$= (-2)(1, -2, 1, 0) + 8(0)(1, 0, 0, 2)$$

$$= (-2, 4, -2, 0),$$

$$v_3 = (\lambda_3 - \lambda_1)w_3 + \lambda_1(x^t w_3)v_1$$

$$= (-5)(-2, -2, -2, 0) + 8(0)(1, 0, 0, 2)$$

$$= (10, 10, 10, 0),$$

y

$$v_4 = (\lambda_3 - \lambda_1)w_4 + \lambda_1(x^t w_4)v_1$$

= (-7)(0,0,10,0) + 8(0)(1,0,0,2)
= (0,0,-70,0),

junto a $v_1 = (1, 0, 0, 2)$, completan la base de vectores propios de A que buscábamos. Naturalmente, en lugar de v_2 , v_3 y v_4 podemos usar respectivamente los vectores propios más sencillos (1, -2, 1, 0), (1, 1, 1, 0) y (0, 0, 1, 0).

Ejercicio 4.6 Utiliza el método de deflación de Wielandt para encontrar todos los valores propios y una base de vectores propios de la matriz

$$A'' = \begin{pmatrix} 6 & -11 & 6 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

4.3. El método de Jacobi

Este método se emplea cuando buscamos todos los valores propios y una base de vectores propios de una matriz simétrica real.

Recordemos que las matrices simétricas son diagonalizables: existe una matriz ortogonal Ω (es decir, una matriz cuya traspuesta coincide con su inversa) tal que

$$\Omega^t A \Omega = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$$

es diagonal con los valores propios de A en la diagonal. En particular todos los valores propios de A son reales (aunque pueden repetirse) y los vectores columna de la matriz Ω forman una base ortonormal de vectores propios, siendo el vector de la columna i el vector propio asociado al valor propio λ_i .

Pensando en el caso sencillo n=2, dada una matríz simétrica A, existe un cambio de base ortonormal $O=(v_1,v_2)$ tal que la transformación lineal definida por A en esta nueva base se representa por la matriz diagonal O^tAO . Pero en dimensión 2, un cambio de base ortonormal se puede interpretar como un giro. Así, encontrar el problema de encontrar los valores y vectores propios de una matriz se puede traducir en el problema de encontrar un giro que proporcione una base de vectores propios.

El método de Jacobi consiste en ir construyendo una sucesión de matrices ortogonales "elementales" (giros en un determinado plano) $(O_k)_{k=1}^{\infty}$ de manera que la sucesión de matrices:

$$A_0 = A, \quad A_k = O_k^t A_{k-1} O_k = (O_1 \cdots O_k)^t A(O_1 \cdots O_k) \quad (k \ge 1)$$

converja hacia una matriz diagonal formada por los valores propios. Así, la esperanza será que la sucesión de matrices ortogonales $\Omega_0 = \operatorname{Id} y \ \Omega_k = \Omega_{k-1}O_k = O_1 \cdots O_k$ converja hacia una matriz ortogonal cuyas columnas formen una base ortogonal de vectores propios.

La idea de la construcción es la de ir anulando en cada paso k dos elementos de la matriz A_k que estén fuera de la diagonal y en posiciones simétricas (los correspondientes a ciertos coeficientes pq y qp). Para ello se utilizan rotaciones en el plano determinado por los vectores

p-ésimo y q-ésimo de la base canónica de \mathbb{R}^n descritas por las matrices ortogonales:

Lema 4.3.1 Sean p y q enteros $1 \le p < q \le n$ y θ un número real a los cuales asociamos la matriz ortogonal O descrita más arriba.

(i) Si $A = (a_{ij})$ es una matriz $n \times n$ simétrica, entonces la matriz

$$B = O^t A O = (b_{ij})$$

también es simétrica y cumple

$$\sum_{i,j=1}^{n} b_{ij}^2 = \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}^2.$$

(ii) Si $a_{pq} \neq 0$, existe un único valor de $\theta \in (-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}] \setminus \{0\}$ tal que $b_{pq} = 0$. El número θ está determinado por la ecuación

$$\cot 2\theta = \frac{a_{qq} - a_{pp}}{2a_{pq}}.$$

Para este valor de θ se cumple

$$\sum_{i=1}^{n} b_{ii}^2 = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}^2 + 2a_{pq}^2.$$

DEMOSTRACIÓN:

Ideas que intervienen

■ La norma euclídea en el espacio de las matrices

$$||A||_E = \left(\sum_{i,j=1}^n a_{ij}^2\right)^{1/2}$$

es invariante por cambios de base ortogonales ya que puede expresarse en términos de la traza matricial tr(A * A) que es invariante por cambios de base.

Si se multiplica una matriz A por la derecha por otra que tiene como vectores columna, salvo los de las columna p y q, los vectores de la base canónica, entonces la matriz producto tiene los mismos vectores columna que A excepto los correspondientes a las columnas p y q.

Y análogamente, si se multiplica por la izquierda por una matriz que tiene tiene como vectores fila, salvo los de las filas p y q, los vectores de la base canónica, entonces la matriz producto tiene los mismos vectores fila que A excepto los correspondientes a las filas p y q.

(i) Como A es simétrica,

$$B^{t} = (O^{t}AO)^{t} = O^{t}A^{t}(O^{t})^{t} = O^{t}AO = B,$$

así que B es simétrica también.

Por otra parte, recordemos que la traza tr $C = \sum_{i=1}^{n} c_{ii}$ de una matriz $C = (c_{ij})$ se conserva por cambios de base, es decir, si P es invertible entonces $\operatorname{tr}(P^{-1}CP) = \operatorname{tr} C$. En particular, si recordamos que $O^t = O^{-1}$, tendremos

$$\sum_{i,j=1}^{n} b_{ij}^{2} = \operatorname{tr}(B^{t}B) = \operatorname{tr}(BB) = \operatorname{tr}(O^{t}AOO^{t}AO)$$
$$= \operatorname{tr}(O^{-1}AAO) = \operatorname{tr}(AA) = \operatorname{tr}(A^{t}A)$$
$$= \sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}^{2}.$$

(ii) Por la estructura de la matriz O, si C es una matriz cualquiera el resultado del producto CO es una matriz con los mismos vectores columna que C excepto que los vectores columna p-ésimo y q-ésimo de C, v_p y v_q , son reemplazados respectivamente por $\cos\theta v_p - \sin\theta v_q$ y $\sin\theta v_p + \cos\theta v_q$. Análogamente, el producto O^tC tiene los mismos vectores fila que C excepto que los vectores fila p-ésimo y q-ésimo de C, w_p y w_q , son reemplazados respectivamente por $\cos\theta w_p - \sin\theta w_q$ y $\sin\theta w_p + \cos\theta w_q$.

Así pues, B y A tienen los mismos coeficientes salvo los de las filas y las columnas p y q. Más aún, los coeficientes de los lugares pp, pq, qp y qq están conectados por la igualdad

$$\begin{pmatrix} b_{pp} & b_{pq} \\ b_{qp} & b_{qq} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{pp} & a_{pq} \\ a_{qp} & a_{qq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix},$$

y razonando como en (i) obtenemos $a_{pp}^2+a_{qq}^2+2a_{pq}^2=b_{pp}^2+b_{qq}^2+2b_{pq}^2$ independientemente de lo que valga θ .

Haciendo operaciones y usando las conocidas fórmulas trigonométricas $\cos 2\theta = \cos^2 \theta - \sin^2 \theta$ y $\sin 2\theta = 2 \sin \theta \cos \theta$, obtenemos

$$b_{pq} = b_{qp} = a_{pq}\cos 2\theta + \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2}\sin 2\theta.$$

Por tanto, si elegimos θ como en el enunciado de (ii) se tendrá que $b_{pq} = b_{qp} = 0$ y en consecuencia, dado que los coeficientes en las diagonales principales de A y B son los mismos excepto los correspondientes a los lugares pp y qq, obtenemos

$$\sum_{i=1}^{n} b_{ii}^2 = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}^2 + 2a_{pq}^2.$$

Enfatizamos que la aplicación $\theta \mapsto \cot 2\theta$ lleva biyectivamente $\left(-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}\right] \setminus \{0\}$ a \mathbb{R} así que θ está bien definido y es único.

Antes de pasar a describir el algoritmo y estudiar los resultados de convergencia es conveniente hacer las siguientes observaciones:

(I) Si vemos $\mathcal{M}_{n\times n}(\mathbb{R})$ como el espacio euclídeo \mathbb{R}^{n^2} y en él usamos la norma euclídea $\|\cdot\|_{\mathrm{E}}$ habitual, es decir,

$$||A||_{\mathcal{E}} = \left(\sum_{i,j=1}^{n} a_{ij}^2\right)^{1/2}$$

el Lema 4.3.1(i) nos dice que la transformación $B = O^t AO$ deja invariante a la norma. El Lema 4.3.1(ii), por su parte, muestra que la suma de los cuadrados de la diagonal de B aumenta al tiempo que los coeficientes b_{pq} y b_{qp} se anulan.

- (II) Esta transformación sólo afecta a las filas p y q, y las columnas p y q. De forma más precisa:
 - $b_{pi} = b_{ip} = a_{ip}\cos\theta a_{iq}\sin\theta$ si $i \neq p$ e $i \neq q$;
 - $b_{qi} = b_{iq} = a_{ip} \operatorname{sen} \theta + a_{iq} \cos \theta$ si $i \neq p$ e $i \neq q$;
 - $b_{pp} = a_{pp}\cos^2\theta + a_{qq}\sin^2\theta a_{pq}\sin 2\theta;$
 - $b_{qq} = a_{pp} \operatorname{sen}^2 \theta + a_{qq} \cos^2 \theta + a_{pq} \operatorname{sen} 2\theta;$
 - $b_{pq} = b_{qp} = a_{pq} \cos 2\theta + \frac{a_{pp} a_{qq}}{2} \sin 2\theta = 0;$
 - $b_{ij} = a_{ij}$ en el resto de los casos.

Las relaciones entre las fórmulas trigonométricas permiten describir los coeficientes de B a partir de los A sin necesidad de calcular explícitamente θ .

En efecto, sea

$$x = \frac{a_{qq} - a_{pp}}{2a_{pq}} \left(= \cot 2\theta \right) \tag{4.4}$$

y escribamos $t = \tan \theta$. Entonces

$$x = \cot 2\theta = \frac{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta}{2 \sin \theta \cos \theta} = \frac{1 - \tan^2 \theta}{2 \tan \theta} = \frac{1 - t^2}{2t},$$

y de aquí $t^2 + 2xt - 1 = 0$. Despejando t en función de x obtenemos $t = -x \pm \sqrt{x^2 + 1}$, y con el dato adicional de que $|t| \le 1$ (porque $|\theta| \le \pi/4$) podemos precisar más:

$$t = \begin{cases} -x + \sqrt{x^2 + 1} & \text{si } x \ge 0, \\ -x - \sqrt{x^2 + 1} & \text{si } x < 0. \end{cases}$$
 (4.5)

De nuevo recordando que $|\theta| \le \pi/4$ (con lo que $\cos \theta > 0$) y usando que $\tan^2 \theta + 1 = 1/\cos^2 \theta$, para $c = \cos \theta$ y $s = \sin \theta$, obtenemos

$$c = \frac{1}{\sqrt{t^2 + 1}} \tag{4.6}$$

У

$$s = \frac{t}{\sqrt{t^2 + 1}} \tag{4.7}$$

Ahora podemos encontrar expresiones muy convenientes para b_{pp} y b_{qq} :

$$b_{pp} = c^{2}a_{pp} + s^{2}a_{qq} - 2sca_{pq}$$

$$= a_{pp} + s^{2}(a_{qq} - a_{pp}) - 2sca_{pq}$$

$$= a_{pp} + \frac{t^{2}}{t^{2} + 1}x2a_{pq} - \frac{2t}{t^{2} + 1}a_{pq}$$

$$= a_{pp} + \frac{t(1 - t^{2})}{t^{2} + 1}a_{pq} - \frac{2t}{t^{2} + 1}a_{pq}$$

$$= a_{pp} - ta_{pq};$$

$$b_{pp} = a_{pp} - ta_{pq}$$
 y análogamente, $b_{qq} = a_{qq} + ta_{pq}$

Ya estamos en condiciones de describir el método de Jacobi

- (I) Partiendo de $A_0 = A$ y $\Omega_0 = \text{Id}$ se van construyendo una sucesión de matrices $A_k = O_k^t A_{k-1} O_k$ mediante cambios de base dados por rotaciones y las correspondientes matrices $\Omega_k = \Omega_{k-1} O_k$ de cambio de base, con lo que $A_k = \Omega_k^t A \Omega_k$.
- (II) Seguiremos el llamado criterio de Jacobi clásico: Supuesta construida $A_k = (a_{ij})$, se elige el término a_{pq} con p < q para anular con una rotación tomando el de mayor tamaño,

$$a_{pq} = \max\{|a_{ij}| : i < j\};$$

obsérvese que si $a_{pq} = 0$ entonces la matriz es diagonal y tras un número finito de pasos hemos obtenido la matriz Ω_k ortogonal cuyos vectores columna son la base de vectores propios buscada (con los correspondientes valores propios los términos en la diagonal de A_k).

- (III) Se definen x, t, c y s con arreglo a las fórmulas (4.4)-(4.7) y se calculan los coeficientes la matriz $A_{k+1} = (b_{ij})$ de acuerdo con las fórmulas
 - $b_{pi} = b_{ip} = ca_{ip} sa_{iq}$ si $i \neq p$ e $i \neq q$,
 - $b_{qi} = b_{iq} = sa_{ip} + ca_{iq} \quad \text{si } i \neq p \text{ e } i \neq q,$
 - $\bullet b_{pp} = a_{pp} ta_{pq},$
 - $b_{qq} = a_{qq} + ta_{pq},$
 - $b_{pq} = b_{qp} = 0,$
 - $b_{ij} = a_{ij}$ en el resto de los casos.
- (IV) Se calculan los coeficientes de la matriz $\Omega_{k+1} = (\omega_{ij})$ a partir de los coeficientes de $\Omega_k = (o_{ij})$ de acuerdo con las fórmulas
 - $\bullet \omega_{ip} = co_{ip} so_{iq},$
 - $\bullet \omega_{iq} = so_{ip} + co_{iq},$
 - $\omega_{ij} = o_{ij}$ si $j \neq p, q$.
- (v) Como las sumas de los cuadrados de los coeficientes de las matrices A_k son siempre las mismas pero las sumas de los cuadrados de sus coeficientes diagonales son estrictamente

crecientes, esperamos que la sucesión (A_k) converja a una matriz diagonal en la que encontraremos todos los valores propios de A, y que la sucesión de los productos de rotaciones Ω_k converja hacia una matriz ortogonal Ω cuyas columnas determinan una base de vectores propios de A.

Ejemplo 4.3.2 Aplicamos el primer paso del algoritmo de Jacobi a la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 3 & 4 \\ -1 & 4 & 0 & -1 \\ 3 & 0 & 0 & -3 \\ 4 & -1 & -3 & 1 \end{pmatrix}.$$

En este caso p = 1 y q = 4, con $a_{14} = 4$. Entonces

$$x = \frac{a_{44} - a_{11}}{2a_{14}} = \frac{1 - 1}{8} = 0,$$

$$t = -x + \sqrt{x^2 + 1} = 1,$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{t^2 + 1}} = \frac{\sqrt{2}}{2},$$

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

Por tanto, si $A_1 = (b_{ij})$, tendremos que

$$b_{11} = a_{11} - ta_{14} = 1 - 4 = -3,$$

$$b_{12} = b_{21} = ca_{21} - sa_{24} = \frac{\sqrt{2}}{2}(-1) - \frac{\sqrt{2}}{2}(-1) = 0,$$

$$b_{13} = b_{31} = ca_{31} - sa_{34} = \frac{\sqrt{2}}{2}(3) - \frac{\sqrt{2}}{2}(-3) = 3\sqrt{2},$$

$$b_{14} = b_{41} = 0,$$

$$\begin{array}{rcl} b_{22} & = & a_{22} = 4, \\ b_{23} = b_{32} & = & a_{32} = 0, \\ b_{24} = b_{42} & = & sa_{21} + ca_{24} = \frac{\sqrt{2}}{2}(-1) + \frac{\sqrt{2}}{2}(-1) = -\sqrt{2}, \end{array}$$

$$b_{33} = a_{33} = 0,$$

 $b_{34} = b_{43} = sa_{31} + ca_{34} = \frac{\sqrt{2}}{2}(3) + \frac{\sqrt{2}}{2}(-3) = 0,$

$$b_{44} = a_{44} + ta_{14} = 1 + 4 = 5.$$

Así pues,

$$A_1 = \begin{pmatrix} -3 & 0 & 3\sqrt{2} & 0\\ 0 & 4 & 0 & -\sqrt{2}\\ 3\sqrt{2} & 0 & 0 & 0\\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & 5 \end{pmatrix}.$$

Finalmente, en esta primera etapa la matriz Ω_1 es la propia matriz O_1 , es decir,

$$\Omega_1 = \begin{pmatrix} c & 0 & 0 & s \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -s & 0 & 0 & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 & 0 & 0 & \sqrt{2}/2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{2}/2 & 0 & 0 & \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}.$$

A la hora de escribir un algoritmo con este método usaremos como condición de parada que los coeficientes de A_k fuera de la diagonal son suficientemente pequeños o bien que se realice un número excesivo de iteraciones. En el primer caso tendremos aproximados los valores propios y una base de vectores propios, mientras que en el segundo habremos parado para evitar entrar en un bucle infinito. De hecho probaremos enseguida que la sucesión (A_k) siempre converge a una matriz diagonal con los valores propios de A pero puede ocurrir (si existen valores propios repetidos) que las matrices (Ω_k) no converjan. Por ello, en el caso en que al detener el proceso veamos que aparecen valores propios repetidos (esto es, si sus aproximaciones son suficientemente parecidas) lanzaremos un mensaje de advertencia (que no de error) pues los vectores de Ω_k en el momento de la parada no tienen por qué aproximar a los vectores propios buscados (aunque en todo caso proporcionarán una base ortonomal).

Vale la pena subrayar que para la matriz del ejemplo anterior, el algoritmo proporciona en tan sólo 4 iteraciones, con la máxima precisión de la máquina los cuatro valores propios $\lambda_1=-6,\ \lambda_2=\lambda_3=3$ y $\lambda_4=6$ y la base ortonormal de vectores propios $v_1=\frac{1}{\sqrt{3}}(1,0,-1,-1),\ v_2=\frac{1}{\sqrt{6}}(1,2,0,1),\ v_3=\frac{1}{\sqrt{6}}(1,0,2,-1),\ y\ v_4=\frac{1}{\sqrt{3}}(1,-1,0,1).$

```
Algoritmo 4.3
                   Valores y vectores propios (método de Jacobi)
      Datos de entrada:
      A[n][n] (matriz simétrica cuyos valores propios queremos obtener);
      tol (precisión para la condición de parada);
      nmax (número máximo de iteraciones);
      Variables:
      O[n][n]; // matriz auxiliar donde se guardan los vectores propios aproximados
      B[n][n]; // matriz auxiliar donde se guardan los valores propios aproximados
      Sol[n][n+1]; // matriz para devolver los resultados
      p; q; x; t; c; s; aux; // variables auxiliares
      Fujo del programa:
      B=A;
      O = Id; // se inicializa O a la identidad
      // Vamos a hacer las etapas k = 1, 2, ..., nmax.
   for(k=1;k\leq nmax;k++){
        aux = 0;
        // Elección del coeficiente más grande.
        for(i=0;i<n;i++){
           for(j=i+1;j<n;j++){
                  if(|B_{ij}| > aux){
                       p = i;
                       q = j;
                       \mathsf{aux} = |B_{ij}|;
                  }
             }
```

Algoritmo 4.3 Valores y vectores propios (método de Jacobi), continuación $\verb|if(aux < tol){|} \{$ for(i=0;i<n;i++){ for(j=i+1;j<n;j++){ $if(|B_{ii}-B_{jj}| < tol)$ Advertencia: posible error en los vectores propios } for(i=0;i<n;i++){ for(j=0;j<n;j++){ $Sol_{ij} = O_{ji}$; // se escriben los vectores propios solución $\mathsf{Sol}_{in} = B_{ii}; \ //$ se escriben los valores propios solución Parada: los vectores y valores propios buscados están en Sol // Cálculo de los coeficientes modificados de B. $x = (B_{qq} - B_{pp})/(2 * B_{pq});$ $if(x \ge 0)$ { $t = -x + \sqrt{1 + x * x};$ else{ $t = -x - \sqrt{1 + x * x};$ $c = 1/\sqrt{1+t*t};$ $s = t/\sqrt{1+t*t};$ for(i=0;i<n;i++){ $aux = O_{ip}$; $O_{ip} = c * \mathsf{aux} - s * O_{iq};$ $O_{iq} = s * \mathsf{aux} + c * O_{iq};$ $B_{pp} = B_{pp} - t * B_{pq};$ $B_{qq} = B_{qq} + t * B_{pq};$ $B_{pq} = B_{qp} = 0;$ for(i=0;i<n;i++){ if $(i \neq p, q)$ { $aux = B_{ip}$; $B_{pi} = B_{ip} = c * \mathsf{aux} - s * B_{iq};$ $B_{qi} = B_{iq} = s * \mathsf{aux} + c * B_{iq};$

Parada: no hay convergencia en nmax iteraciones

Datos de salida: Valores y vectores propios de la matriz A, mensaje de error si la iteración no converge, mensaje de advertencia si se repiten valores propios.

El siguiente teorema garantiza la convergencia del método de Jacobi clásico. La clave de su prueba esta en este lema de topología:

Lema 4.3.3 Si (x_k) es una sucesión acotada en un espacio vectorial normado de dimensión finita X sobre \mathbb{R} tal que

- (I) (x_k) posee una cantidad finita de puntos de acumulación y
- (II) $\lim_{k\to\infty} ||x_{k+1} x_k|| = 0$,

entonces (x_k) es una sucesión convergente.

DEMOSTRACIÓN:

Ideas que intervienen

- Para los puntos de acumulación a_i de la sucesión (x_k) encontramos pequeñas bolas centradas en a_i y separadas a una distancia positiva unas de otras.
- Usando que los conjuntos acotados en espacios de dimensión finita son relativamente compactos, toda subsucesión de x_k tiene un punto de acumulación a partir de un cierto índice todos los términos de la sucesión están en la unión finita de las bolas anteriores.
- Usamos la hipótesis $\lim_{k\to\infty} ||x_{k+1} x_k|| = 0$ para concluir que, de hecho, los términos de sucesión están todos en la misma bola.

Sean a_i , $1 \le i \le M$, los puntos de acumulación de la sucesión (x_k) .

Elijamos

$$\varepsilon = \frac{1}{3} \min_{k \neq j} \|a_k - a_j\| > 0.$$

Entonces, por la desigualdad triangular de la norma, las bolas $B(a_k, \varepsilon) = \{x : ||x - a_k|| < \varepsilon\}$ son disjuntas dos a dos,

$$B(a_k,\varepsilon) \bigcap B(a_j,\varepsilon) = \emptyset$$
, Si $k \neq j$.

Para ese $\varepsilon > 0$, existe un natural $l(\varepsilon)$ tal que si $k \geq l(\varepsilon)$ entonces

$$x_k \in \bigcup_{i=1}^M B(a_i, \varepsilon).$$

La razón es que, en caso contrario, podríamos extraer una subsucesión (x_{k_m}) de (x_k) con la propiedad de que

$$x_{k_m} \notin \bigcup_{i=1}^M B(a_i, \varepsilon)$$

para cada m. Pero sabemos que la subsucesión (x_{k_m}) , posee algún punto de acumulación. Este punto de acumulación, que también lo es de (x_k) , no puede estar en ninguna de las bolas $B(a_i, \varepsilon)$, en contradicción con el hecho de que los puntos a_i son los únicos puntos de acumulación de (x_k) .

Usemos ahora la segunda hipótesis, lím $_{k\to\infty}\|x_k-x_{k+1}\|=0$, y elijamos $l_0>l(\varepsilon)$ tal que para cada $k\ge l_0$

$$||x_{k+1} - x_k|| < \varepsilon.$$

Sea i_0 tal que $x_{l_0} \in B(a_{i_0}, \varepsilon)$. Como $||x_{l_0} - a_{i_0}|| < \varepsilon$ y $||x_{l_0+1} - x_{l_0}|| < \varepsilon$, obtenemos $||x_{l_0+1} - a_{i_0}|| < 2\varepsilon$ por la desigualdad triangular y por tanto, gracias de nuevo a la desigualdad triangular y a la definición de ε , $||x_{l_0+1} - a_i|| > \varepsilon$ para cada $i \neq i_0$. Esto significa que x_{l_0+1} no puede pertenecer a ninguna de las bolas $B(a_i, \varepsilon)$ excepto tal vez a la bola $B(a_{i_0}, \varepsilon)$. Como de hecho x_{l_0+1} ha de estar en alguna de las bolas, la conclusión es que $x_{l_0+1} \in B(a_{i_0}, \varepsilon)$. Reiterando el razonamiento, concluimos que $x_k \in B(a_{i_0}, \varepsilon)$ y $x_k \notin B(a_i, \varepsilon)$ si $i \neq i_0$ para cada $k \geq l_0$.

Vemos, pues, que ninguno de los puntos a_i , $i \neq i_0$, puede ser punto de acumulación de (x_k) , es decir, a_{i_0} es el único punto de acumulación de (x_k) . Esto equivale a decir que $\lim_{k\to\infty} x_k = a_{i_0}$.

Teorema 4.3.4 (convergencia del método de Jacobi clásico) La sucesión (A_k) de matrices obtenidas por el método de Jacobi clásico para una matriz simétrica A es convergente hacia una matriz diagonal,

$$diag(\lambda_{\sigma(1)},\ldots,\lambda_{\sigma(n)}),$$

en la que aparecen los valores propios $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ de A convenientemente permutados. Si suponemos además que los valores propios de la matriz A son distintos entre sí, la sucesión de matrices (Ω_k) definida por

$$\Omega_k = O_1 O_2 \cdots O_k$$

converge hacia una matriz ortogonal cuyas columnas determinan una base de vectores propios de A con valores propios los correspondientes en la anterior matriz diagonal.

DEMOSTRACIÓN:

Demostramos la primera parte del teorema. Para ello seguiremos el siguiente esquema: *Ideas que intervienen*

- Si $A_k = (a_{ij}^k) = D_k + B_k$, con $D_k = \operatorname{diag}(a_{11}^k, \dots, a_{nn}^k)$, probamos que $\lim_{k \to \infty} B_k = 0$.
- Demostramos que (D_k) tiene a lo sumo un número finito de puntos de acumulación, cada uno de ellos de la forma diag $(\lambda_{\sigma(1)}, \ldots, \lambda_{\sigma(n)})$ para una cierta permutación σ de los índices $\{1, 2, \ldots, n\}$.
- Probamos que $\lim_{k\to\infty} D_{k+1} D_k = 0$.
- Comprobamos que la sucesión (D_k) está acotada.
- Aplicamos el Lema 4.3.3.
- (i) Consideremos los números

$$\varepsilon_k = \sum_{i \neq j} |a_{ij}^k|^2 = ||B_k||_{\mathcal{E}}^2, \quad k \ge 0.$$

Como ε_k es la suma de los cuadrados de los coeficientes de la matriz A_k fuera de la diagonal principal, sabemos (Lema 4.3.1) que si que p < q son los índices elegidos para generar A_{k+1} a partir de A_k con el método de Jacobi, entonces

$$\varepsilon_{k+1} = \varepsilon_k - 2|a_{pq}^k|^2.$$

Por otro lado, y dado que $|a_{pq}| = \max_{i \neq j} |a_{ij}|$, resulta

$$\varepsilon_k \le n(n-1)|a_{pq}^k|^2$$

(pues el número de coeficientes fuera de la diagonal principal es n(n-1)). Combinando ambas relaciones obtenemos

$$\varepsilon_{k+1} \le \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right)\varepsilon_k,$$

de donde se deduce $\lim_{k\to\infty} \varepsilon_k = 0$ y por tanto $\lim_{k\to\infty} B_k = 0$.

(ii) Supongamos que una cierta subsucesión (D_{k_m}) de (D_k) converge a una cierta matriz D. Entonces la matriz D será diagonal. Por otro lado, como $B_k \to 0$ por (i) también será cierto $B_{k_m} \to 0$, así que (A_{k_m}) converge también a D. Por continuidad tenemos que, para cada número $\lambda \in \mathbb{R}$ fijado,

$$\lim_{m \to \infty} \det(\lambda \operatorname{Id} - A_{k_m}) = \det(\lambda \operatorname{Id} - D).$$

Como las matrices A_k y A son semejantes los polinomios característicos de A_k y de A son constantes y coinciden con el de D. Como la matriz D es diagonal, los elementos de su diagonal serán los valores propios de A, con las mismas multiplicidades, adecuadamente permutados. Hemos probado que (D_k) tiene a lo sumo un número finito de puntos de acumulación, cada uno de ellos de la forma $\operatorname{diag}(\lambda_{\sigma(1)},\ldots,\lambda_{\sigma(n)})$ para una cierta permutación σ de los índices $\{1,2,\ldots,n\}$.

(iii) Recordemos que

$$a_{ii}^{k+1} - a_{ii}^k = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq p, q, \\ -\tan \theta_k a_{pq}^k & \text{si } i = p, \\ \tan \theta_k a_{pq}^k & \text{si } i = q, \end{cases}$$

donde $\theta_k \in (-\pi/4,0) \cup (0,\pi/4]$. Como $|\tan \theta_k| \le 1$ y $|a_{pq}^k| \le ||B_k||_{\mathcal{E}}$ para cada k, y además se tiene $\lim_{k\to\infty} B_k = 0$ por (i), concluimos que $\lim_{k\to\infty} (D_{k+1} - D_k) = 0$.

(iv) Observemos que

$$||D_k||_{\mathcal{E}} \le ||A_k||_{\mathcal{E}} = ||A||_{\mathcal{E}}$$

por el Lema 4.3.1(i). Por tanto la sucesión (D_k) está acotada.

Ya estamos listos para probar la primera parte del Teorema 4.3.4. De acuerdo con el Lema 4.3.3 y (ii), (iii) y (iv), la sucesión (D_k) converge a una matriz diagonal diag $(\lambda_{\sigma(1)}, \ldots, \lambda_{\sigma(n)})$. Por (i), la sucesión (A_k) converge a la misma matriz.

Probamos ahora la segunda parte del teorema conforme al siguiente esquema: Ideas que intervienen

- Demostramos que la sucesión (Ω_k) sólo tiene un número finito de puntos de acumulación, que son necesariamente de la forma $(\pm p_{\sigma(1)}, \pm p_{\sigma(2)}, \ldots, \pm p_{\sigma(n)})$, siendo p_1, p_2, \ldots, p_n una base ortonormal de vectores propios de valores propios correspondientes $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$.
- Probamos que $\lim_{k\to\infty} (\Omega_{k+1} \Omega_k) = 0$.
- Se demuestra que las matrices ortogonales están acotadas para la norma $\|\cdot\|_E$.
- Se concluye la prueba usando el Lemma 4.3.3.
- (i) Sea Ω un punto de acumulación de la sucesión (Ω_k) y sea (Ω_{k_m}) una subsucesión de (Ω_k) convergente a Ω . Entonces la sucesión de las matrices traspuestas $(\Omega_{k_m}^t)$ convergerá a Ω^t . Como $\Omega_k^t \Omega_k = \text{Id}$ para cada k y el producto de las sucesiones $(\Omega_{k_m}^t)$ y (Ω_{k_m}) converge por continuidad a $\Omega^t \Omega$, concluimos que $\Omega^t \Omega = \text{Id}$, es decir, la matriz Ω es ortogonal.

Recordemos que por la primera parte del teorema las matrices $A_k = \Omega_k^t A \Omega_k$ convergen a una matriz diagonal diag $(\lambda_{\sigma(1)}, \dots, \lambda_{\sigma(n)})$. Tomando límites en la subsucesión $(\Omega_{k_m}^t A \Omega_{k_m})$ llegamos a que

$$\Omega^t A \Omega = \operatorname{diag}(\lambda_{\sigma(1)}, \dots, \lambda_{\sigma(n)}).$$

La igualdad implica que los vectores columna de Ω forman una base ortonormal de vectores propios con valores propios respectivos los números $\lambda_{\sigma(i)}$. Como por hipótesis todos los valores propios son distintos, cada subespacio propio tiene dimensión 1 y para cada valor propio λ existen exactamente dos vectores propios (uno opuesto del otro) de norma 1. Hemos probado que Ω es de la forma $(\pm p_{\sigma(1)}, \pm p_{\sigma(2)}, \ldots, \pm p_{\sigma(n)})$.

(ii) Recordemos que los ángulos θ_k son tales que $|\theta_k| \leq \pi/4$ y satisfacen la igualdad

$$\tan 2\theta_k = \frac{2a_{pq}^k}{a_{qq}^k - a_{pp}^k}$$

para cada k. Enfatizamos que los índices p y q dependen de k, pero para simplificar la notación no hacemos explícita esta dependencia. Como los coeficientes a_{ii}^k de la diagonal principal de las matrices A_k convergen a los valores propios $\lambda_{\sigma(i)}$ y dichos valores propios son distintos dos a dos, existirá un número l suficientemente alto tal que si $k \geq l$ entonces

$$\min_{i \neq j} |a_{ii}^k - a_{jj}^k| \ge \frac{1}{2} \min_{i \neq j} |\lambda_i - \lambda_j| =: M > 0;$$

en particular, $|a_{qq}^k - a_{pp}^k| \ge M$ para cada $k \ge l$. Como todos los coeficientes fuera de la diagonal principal de A_k tienden a cero, la sucesión (a_{pq}^k) tiende a cero (aunque los índices p y q vayan variando con k). Así pues, $(\tan 2\theta_k)$ tiende a cero e igualmente (θ_k) tiende a cero. En resumen, hemos probado que

$$\lim_{k\to\infty} O_k = \mathrm{Id}.$$

Dado que $\Omega_{k+1} - \Omega_k = \Omega_k(O_{k+1} - \mathrm{Id})$, se deduce

$$\lim_{k \to \infty} (\Omega_{k+1} - \Omega_k) = 0.$$

(iii) En el Capítulo 3 (Teorema 3.3.1) se vio que la norma $\|\cdot\|_2$ de todas las matrices ortogonales es 1. Como en $\mathcal{M}_{n\times n}(\mathbb{R})$ (que puede verse como el espacio euclídeo \mathbb{R}^{n^2}) todas las normas son equivalentes, existe en particular una cierta constante $\beta > 0$ tal que $\|B\|_{\mathcal{E}} \leq \beta \|B\|_2$ para cada $B \in \mathcal{M}_{n\times n}(\mathbb{R})$. De esto se deduce que $\|O\|_{\mathcal{E}} \leq \beta$ para cada matriz ortogonal O.

Finalmente, la segunda parte del Teorema 4.3.4 se deduce del Lema 4.3.3 y (i), (ii) y (iii). □

Ejercicio 4.7 Realiza las tres primeras etapas del método de Jacobi para las matrices simétricas del ejercicio 4.3

Ejercicio 4.8 Al aplicar el método de Jacobi para calcular los valores propios de una matriz simétrica A obtenemos en el paso k la matriz $A_k = O_k^t A_{k-1} =_k$,

$$A_k = \begin{pmatrix} 2 & \frac{\sqrt{3}-1}{2} & \frac{\sqrt{3}+1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}-1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}+1}{2} & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Sabiendo que ninguno de los coeficentes de A_{k-1} es negativo y que O_k tiene la forma

$$O_k = \begin{pmatrix} ? & ? & ? \\ ? & \frac{\sqrt{3}}{2} & ? \\ ? & ? & ? \end{pmatrix},$$

calcula las matrices A_{k-1} y O_k . Ejercicio propuesto en el tercer parcial del curso 2006/2007.

Ejercicio 4.9 Al aplicar el método de Jacobi de busqueda de valores y vectores própios a una matriz singular simétrica obtenemos en el último paso la matriz

$$A_n = O_n^t A_{n-1} O_n = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

La última rotación de Jacobi O_n tiene por primera fila el vector $(\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{-\sqrt{2}}{2}, 0)$. Encuentra las matrices A_{n-1} y O_n .

4.4. El método QR

Para matrices arbitrarias, el método QR sigue una estrategia parecida al de Jacobi en el sentido de ir haciendo transformaciones de la forma $A(k) = \Omega_k^{-1} A \Omega_k$ cuyas diagonales van a aproximar al espectro de A.

La idea: En cada iteración se utiliza la factorización QR y se construye A(k) de forma que bajo ciertas condiciones se tiene que el límite de las componentes de la diagonal de A(k) convergen hacia los valores propios de A, las componentes bajo la diagonal de A(k) tienden a 0, mientras que no se puede afirmar nada de las componentes que están sobre la diagonal.

Descripción del método.

- (I) Se parte de una matriz cuadrada $A=A_1$, se hace la factorización QR, $A_1=Q_1R_1$, y se define $A_2=R_1Q_1$.
- (II) Supuesta definida $A_k = R_{k-1}Q_{k-1}$ con $A_{k-1} = Q_{k-1}R_{k-1}$ $(k \ge 2)$, se hace la factorización QR, $A_k = Q_k R_k$, y se define $A_{k+1} = R_k Q_k$. Se tendrá:

$$A_{k+1} = Q_k^* A_k Q_k = (Q_1 ... Q_k)^* A(Q_1 ... Q_k).$$

Bajo ciertas condiciones (véase por ejemplo [5, Th. 6.3-1, y pág. 129-130]) se tiene que las matrices A_k se aproximan a matrices triangulares. Así, si se toma como condición de parada el que la suma de los módulos de los coeficientes de A_k que están bajo la diagonal sea suficientemente pequeña, la diagonal $diag(A_k) = \{\lambda_1, ... \lambda_n\}$ tendremos una aproximación simultánea de todos los valores propios de A.

Si los valores propios son distintos dos a dos, $A_k = (a(k)_{i,j})$ contiene información suficiente para aproximar una base de vectores propios:

- (I) Se construye una base de vectores propios $q(j)=(q_i(j))^t$ de A_k haciendo
 - $q_1(1) = 1$ y $q_1(j) = 0$ para j = 2, ..., n
 - $q_i(i+1) = 0 = q_i(i+2) = \dots = q_i(n) \text{ si } i \ge 2$
 - $q_i(i) = 1 \text{ si } i \geq 2$
 - $q_i(j) = -\frac{a(k)_{j,j+1}q_i(j+1)+...+a(k)_{j,i}q_i(i)}{a(k)_{j,j}-a(k)_{i,i}}$ si $1 \le j < i$
- (II) Se transforman en una base de vectores propios de A con el cambio de base ortogonal que proporciona el método, poniendo $v(j) = (Q_1...Q_k)q_i(j)$

Ejercicio 4.10 Escribe los algoritmos que utilizando como datos de entrada

- A, una matriz cuadrada.
- tol, una tolerancia para la condición de parada.
- nmax, el número máximo de iteraciones en las que esperar la convergencia.

y que devuelva

- Una lista doble en cuya primera fila aparezcan las aproximaciones a los valores propios, y en el resto de filas aproximaciones a una base de vectores propios.
- Una lista doble con una sola fila en la que aparezcan aproximaciones a los valores propios en el caso de que no se puedan aproximar los vectores propios.
- Un mensaje de error cuando no hay convergencia.

4.5. Actividades complementarias del capítulo

Ejercicio 4.11 Comprueba que los valores propios de la matriz $n \times n$

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

 $\begin{array}{l} \mathrm{son}\; \lambda_j = 1 - \mathrm{cos}\left(\frac{j\pi}{n+1}\right)j = 1,...,n\; \mathrm{y}\; \mathrm{que}\; \mathrm{los}\; \mathrm{vectores}\; \mathrm{propios}\; \mathrm{asociados}\; \mathrm{a}\; \mathrm{cada}\; \lambda_j \; \mathrm{son}\; \mathrm{m\'ultiplos}\; \\ \mathrm{de}\; \mathrm{los}\; \mathrm{vectores}\; v_j = \left(\mathrm{sen}\left(\frac{ij\pi}{n+1}\right)\right)_{i=1,...,n}. \end{array}$

Todo el material que a continuación se detalla está disponible en el Aula Virtual:

- Hoja de problemas núm. 4.
- Práctica 6.

Bibliografía

- [1] A. Delshams A. Aubanell, A. Benseny, *Útiles básicos de cálculo numérico*, Ed. Labor Univ. Aut. de Barcelona, Barcelona, 1993.
- [2] G. Allaire and S.M. Kaber, *Numerical linear algebra*, TAM 55, Springer,, New York, etc., 2008.
- [3] C. Brézinski, Introducton á la pratique du calcul numérique, Dunod Université, Paris, 1988.
- [4] R.L. Burden and J.D. Faires, Análisis numérico, 7^a edición, Thomson-Learning, Mexico, 2002.
- [5] P.G. Ciarlet, Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation, Masson, Paris, 1990.
- [6] P.M. Cohn, Algebra, vol. 1 y 2, Ed. Hohn Wiley and Sons, London, 1974.
- [7] G. Hammerlin and K.H. Hoffmann, *Numerical mathematics*, Springer-Verlag, New York, 1991.
- [8] J.Stoer and R. Burlisch, *Introduction to numerical analysis*, Springer Verlag, New York, 1980.
- [9] D. Kincaid and W. Cheney, *Análisis numérico*, Ed. Addison-Wesley Iberoamericana, Reading, USA, 1994.
- [10] J. R. Shewchuk, An introduction to the conjugate gradient method without the agonizing pain, Tech. report, Carnegie Mellon University, USA,https://www.cs.cmu.edu/quake-papers/painless-conjugate-gradient.pdf, 1994.