Tarea 5-Métodos numéricos

1st Daniel Vallejo Aldana
Maestría en Ciencias de la Computación
Centro de Investigación en Matemáticas
daniel.vallejo@cimat.mx

***Resumen*—En el presente trabajo se implementan y analizan dos métodos utilizados para encontrar valores y vectores propios de una matriz simétrica A. Estos métodos corresponden al método de la potencia y al método de la potencia inversa. Así mismo se abordarán extensiones de dichos métodos de tal forma que sea posible calcular los M valores propios más grandes y más pequeños usando el método de la potencia y de la potencia inversa respecivamente.**

***Index Terms*—Método de la potencia, Método de la potencia Inversa, Valores propios, Vectores propios**

I. Introducción

Encontrar los valores propios así como los vectores propios de una matriz A puede resultar benéfico para realizar cálculos de matrices posteriores, dichos cálculos engloban el elevar una matriz a una cierta potencia o realizar una reducción de dimensión de un espacio vectorial a otro [1].

En el presente trabajo abordaremos dos métodos para calcular valores y vectores propios de una matriz A, el primero de ellos es el método de la potencia, el cual encuentra el valor propio más grande de la matriz en valor absoluto. Análogamente, tenemos el método de la potencia inversa que encuentra el valor propio cuya magnitud en valor absoluto es menor a los demás valores propios. Así mismo consideraremos extensiones de dichos métodos tal que podamos calcular M valores propios más grandes y más pequeños respectivamente mediante métodos de deflación [1] que se describrán en secciones posteriores.

II. Método/Algoritmo

II-A. Método de la potencia

Comenzaremos la deducción del método de la potencia enunciando varios teoremas y definiciones que nos ayudarán a justificar el funcionamiento y la convergencia del método de la potencia.

Definición 1. Sea A una matriz de $n \times n$ con $a_{i,j} \in \mathbb{R}$, decimos que A es diagonalizable si existe una matriz P invertible y D una matriz diagonal tales que $A = PDP^{-1}$

Teorema 1. Sea A una matriz de $n \times n$ simétrica, entonces existe una base de $\mathbb{R}^n$ de vectores propios ortonormales $\{\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n\}$ de A

Con base en lo enunciado en el teorema 1 así como en la definición 1, consideremos una matriz simétrica A de $n \times n$ cuyos elementos $a_{i,j} \in \mathbb{R}$. Consideremos $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$ los valores propios de A asociados a los vectores propios $\{\mathbf{v}_i\}_{i=1}^n$ tales que

$$|\lambda_1| > \ldots > |\lambda_n|$$

Así mismo consideremos un vector $\mathbf{x}_0$ tal que

$$\mathbf{x}_0 = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \mathbf{v}_i \tag{1}$$

Como todos los $\mathbf{v}_i$ son vectores propios de A, asociados a un valor propio λ_i, podemos notar que por la definición de diagonalización se cumple

$$A^k \mathbf{v}_i = \lambda_i^k \mathbf{v}_i$$

Multiplicando ambos lados de la ecuación (1) por A^k obtenemos

$$\begin{aligned} A^k \mathbf{x}_0 &= \sum_{i=1}^{n} \lambda^k \mathbf{v}_i \\ &= \lambda_1^k \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k \mathbf{v}_i \end{aligned}$$

Por lo que al tender k a infinito podemos ver que $\lim_{k\to\infty} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k = 0$ para $i \neq 1$ y 1 para $i = 1$, de lo anterior podemos encontrar el eigenvalor más grande. Para esto en cada iteración podemos encontrar dicho valor λ_1 usando el coeficiente de Rayleigh. Consideremos $\mathbf{v}^{k+1} = A\mathbf{v}^k$ dos vectores separados por una sola iteración del método de la potencia, entonces

$$\lambda_1 \approx \frac{\mathbf{v}^{k+1} A \mathbf{v}^k}{\|\mathbf{v}^{k+1}\|}$$

No obstante, al calcular vectores propios ortonormales tenemos que $\left\|v^{k+1}\right\| = 1$. De esta forma encontramos el valor propio más grande. Para el algoritmo del método de la potencia necesitamos la función auxiliar de normalizar la cual pondremos a continuación

Una vez que tenemos el método de normalización procedemos con el método de la potencia

Algorithm 1 NormalizaVector

Require: $\mathbf{v}$
Ensure: $\mathbf{v}$ normalizado

```
max = v_1
for i in 2 to n do
    if |v_i| > |max| then
        max = v_i
    end if
end for
return v/max
```

Algorithm 2 Power-Method

Require: A, $\mathbf{v}_0$, TOL, $maxiter$
Ensure: $\lambda_1, \mathbf{v}_1$

```
k = 1
NormalizaVector(v_0)
while k ≤ maxiter & ||v_1 − v_0|| > TOL do
    v_1 = A v_0
    λ ≈ v_1^t A v_0
    NormalizaVector(v_1)
    if ||v_1 − v_0|| < TOL then
        return λ, v_1
    end if
    v_0 = v_1
    k = k + 1
end while
```

II-A1. Método de la potencia para calcular los M vectores propios más grandes: Podemos generalizar el método de la potencia de tal forma que podamos usarlo para calcular los M valores propios más grandes con sus correspondientes vectores propios. Consideremos un conjunto de vectores iniciales $\{\mathbf{x}_0^i\}_{i=1}^M$, donde $\mathbf{x}_0^i$ corresponde al vector inicial para calcular el i-ésimo valor propio más grande. Por el teorema 1, queremos que la colección $\{\mathbf{x}_0^i\}_{i=1}^M$ de vectores sean ortonormales, por lo anterior procedemos a hacer un proceso análogo al método de Gram-Schmidt en donde a nuestro $\mathbf{x}_0^i$ se le restan las contribuciones de los $i-1$ vectores propios anteriores. Para ilustrar lo anterior tenemos las siguientes ecuaciones

$$\mathbf{x}_0^0 = \mathbf{x}_0^0 \tag{2}$$

$$\mathbf{x}_0^1 = \mathbf{x}_0^1 - \frac{<\mathbf{v}_1, \mathbf{x}_0^1>}{\|\mathbf{v}_1\|^2}\mathbf{v}_1 \tag{3}$$

$$\vdots \tag{4}$$

$$\mathbf{x}_0^i = \mathbf{x}_0^i - \sum_{k=0}^{i-1} \frac{<\mathbf{v}_k, \mathbf{x}_0^i>}{\|\mathbf{v}_k\|^2}\mathbf{v}_k \tag{5}$$

$$\vdots \tag{6}$$

$$\mathbf{x}_0^M = \mathbf{x}_0^M - \sum_{k=0}^{M-1} \frac{<\mathbf{v}_k, \mathbf{x}_0^M>}{\|\mathbf{v}_k\|^2}\mathbf{v}_k \tag{7}$$

Utilizando lo anterior en cada iteración podemos obtener los M valores propios más grandes usando el método de la potencia. El algoritmo para calcular el n-ésimo valor propio más grande con $n \geq 2$ se da a continuación.

Algorithm 3 Power-Method-i

Require: A, $\mathbf{x}_0^i$, $maxiter$, TOL, i, M con M la matriz que contiene los $i-1$ vectores propios anteriores
Ensure: λ_i, v_i

```
k=1
NormalizaVector(x_0^i)
while k ≤ maxiter & ||x_1^i − x_0^i|| > TOL do
    aux=0
    for k in 1 to i − 1 do
        aux=aux+ (<v_k, x_0^i> / ||v_k||^2) v_k
    end for
    x_0^i = x_0^i − aux
    x_1^i = A x_0^i
    λ ≈ x_1^i A x_0^i
    NormalizaVector(x_1^i)
    if ||x_1^i − x_0^i|| < TOL then
        return λ, x_1^i
    end if
    x_0^i = x_1^i
    k = k + 1
end while
```

En particular, consideramos como nuestra colección $\{\mathbf{x}_0^i\}_{i=1}^M$ las últimas M columnas de la matriz A.

II-B. Método de la potencia inversa

Consideremos A una matriz invertible de $n \times n$ tal que $a_{i,j} \in \mathbb{R}$, entonces si $\{\lambda_i\}_{i\in I}$ son los valores propios de A, tenemos que la colección $\{\frac{1}{\lambda_i}\}_{i\in I}$ son los valores propios de A^{-1}, por lo anterior podemos observar que aplicando el método de la potencia sobre la inversa de la matriz A nos da el valor propio más chico en valor absoluto λ_n asociado al vector propio al que llamaremos $\mathbf{v}_n$. No obstante, calcular la inversa de la matriz A resulta computacionalmente costoso por lo que en lugar de eso hay que resolver el sistema

$$A\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_0$$

En particular para este trabajo consideramos $A = LU$ y resolvemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$L\mathbf{y} = \mathbf{v}_0$$
$$U\mathbf{v}_1 = \mathbf{y}$$

De esa forma tenemos la actualización para el nuevo vector candidato $\mathbf{v}^{k+1}$, el valor de λ es calculado usando el coeficiente de Rayleigh como en el método de la potencia dado de la forma

$$\lambda \approx \frac{\mathbf{v}^{k+1}A\mathbf{v}^k}{\|\mathbf{v}^k\|}$$

En el caso del método de la potencia normalizamos el vector por el elemento con el valor más pequeño en valor absoluto. El pseudocódigo para el método de la potencia inversa se muestra a continuación

Algorithm 4 InversePower-Method

Require: L,U,A, $\mathbf{v}_0$, $maxiter$, TOL
Ensure: λ_n,$\mathbf{v}_n$ valor propio más pequeño y vector propio asociado
  $k = 1$
  $NormalizaVector(\mathbf{v}_0)$
  while $k \leq maxiter$ & $\|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0\| > TOL$ **do**
    $\mathbf{v}_{tmp} = L\mathbf{v}_0$
    $\mathbf{v}_1 = U\mathbf{v}_{tmp}$
    $NormalizaVector(\mathbf{v}_1)$
    $\lambda \approx \mathbf{v}_1^t A\mathbf{v}_0$
    if $\|\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0\| < TOL$ **then**
      return λ, $\mathbf{v}_1$
    end if
    $\mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_1$
    $k = k + 1$
  end while

II-B1. Método de la potencia inversa para los M valores más pequeños: El método de la potencia inversa puede generalizarse para encontrar los M valores propios más pequeños con sus correspondientes vectores propios asociados, para esto consideramos nuevamente una colección de vectores iniciales $\{\mathbf{x}_0^i\}_{i=1}^M$ utilizando las ecuaciones (2)-(7) al remover las contribuciones de los $i-1$ vectores propios previamente calculados. El pseudocódigo del método de la potencia inversa para el i-ésimo valor más chico es el siguiente.

Algorithm 5 InversePower-Method-i

Require: A, $\mathbf{x}_0^i$, $maxiter$, TOL, i, M con M la matriz que contiene los $i-1$ vectores propios anteriores
Ensure: λ_i, v_i
  k=1
  $NormalizaVector(\mathbf{x}_0^i)$
  while $k \leq maxiter$ & $\|\mathbf{x}_1^i - \mathbf{x}_0^i\| > TOL$ **do**
    aux=0
    for k in 1 to $i-1$ **do**
      aux=aux+$\frac{<\mathbf{v}_k, \mathbf{x}_0^i>}{\|\mathbf{v}_k\|^2}\mathbf{v}_k$
    end for
    $\mathbf{x}_0^i = \mathbf{x}_0^i - \mathbf{aux}$
    $\mathbf{x}_{tmp}^i = L\mathbf{x}_0^i$
    $\mathbf{x}_1^i = U\mathbf{x}_{tmp}^i$
    $\lambda \approx \mathbf{x}_1^i A\mathbf{x}_0^i$
    $NormalizaVector(\mathbf{x}_1^i)$
    if $\|\mathbf{x}_1^i - \mathbf{x}_0^i\| < TOL$ **then**
      return λ, $\mathbf{x}_1^i$
    end if
    $\mathbf{x}_0^i = \mathbf{x}_1^i$
    $k = k + 1$
  end while

III. RESULTADOS

Para los experimentos realizados en este trabajo consideramos matrices de la forma

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

Los primeros resultados se realizaron con una matriz de 8×8 para poder corroborar que los vectores y valores propios fueran correctos mediante `WolframAlpha`

Para corroborar que nuestros vectores propios son correctos, utilizaremos la definición de vector propio y reportaremos el error $\|A\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x}\|$ ya que esto nos da más información respecto a si nuestra aproximación es correcta o incorrecta. En las Figuras 1 y 2 podemos observar las salidas del método de la potencia y de la potencia inversa para $M = 3$ valores propios más grandes y más pequeños respectivamente.

Tabla de valores propios y vectores propios		
Valor proio	$\lVert\lambda_{real} - \lambda_{app}\rVert$	$\lVert A\mathbf{v}_i - \lambda\mathbf{v}_i\rVert$
Valores más grandes		
-3.87939	0	0
-3.53209	0	$3{,}20475 \times 10^{-31}$
-3	0	$5{,}54668 \times 10^{-32}$
Valores más chicos		
-0.120615	0	$1{,}01352e^{-32}$
-0.467911	0	$8{,}01187e^{-32}$
-1	0	$1{,}27725e^{-31}$

Cuadro I

SALIDA DE LOS 3 VALORES PROPIOS Y VECTORES MÁS GRANDES Y PEQUEÑOS USANDO LOS MÉTODOS IMPLEMENTADOS DE LA POTENCIA Y DE LA POTENCIA INVERSA RESPECTIVAMENTE

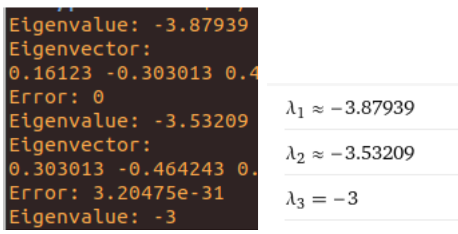

Figura 1. Comparación de la salida implementada vs la salida en `Wolframalpha` para los valores más grandes

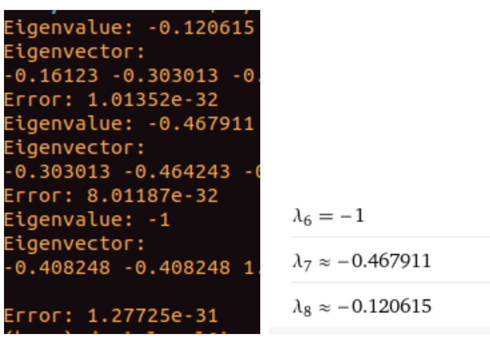

Figura 2. Salida del método de la potencia inversa implementado vs la salida calculada en `Wolframalpha`

Posteriormente, se procedió a encontrar los valores propios de una matriz similar a la anteriormente usada pero de dimensión $N = 1000$, en este caso reportamos el valor propio más grande y más pequeño tal como se pide en las instrucciones de la tarea.

Resultados para $N = 1000$			
λ_{max}	$\lVert A\mathbf{v}_1 - \lambda_1\mathbf{v}_1\rVert$	λ_{min}	$\lVert A\mathbf{v}_n - \lambda_n\mathbf{v}_n\rVert$
-3.997	$5{,}96268e^{-06}$	$-9{,}84989e^{-06}$	$3{,}15942e^{-32}$
-3.99608	$1{,}42589e^{-05}$	$-8{,}86484e^{-05}$	$3{,}15942e^{-32}$
-3.99579	$1{,}88996e^{-05}$	$-3{,}93994e^{-05}$	$2{,}45e^{-32}$

Cuadro II

SALIDAS DEL MÉTODO DE LA POTENCIA Y DE LA POTENCIA INVERSA PARA LA MATRIZ DADA CON 1000 NODOS, DEL LADO IZQUIERDO TENEMOS LOS 3 MAYORES VALORES PROPIOS Y DEL LADO DERECHO LOS TRES MENORES VALORES PROPIOS, ASÍ COMO EL ERROR DE SU VALOR PROPIO

En este caso el método de la potencia inversa encontró un valor propio muy cercano a 0.

Respondiendo a la pregunta de como se usarían lo valores y vectores propios para aproximar A, notemos que de acuerdo al teorema 1 y a la definición 1 si consideramos P, constituida por los vectores propios y D cuyos elementos de la diagonal son valores propios entonces $A = P^{-1}DP$

IV. CONCLUSIONES

De acuerdo a lo observado en el presente trabajo podemos concluir que el método de la potencia así como el de la potencia inversa regresan aproximaciones certeras de los verdaderos valores propios y vectores propios de una matriz simétrica A, así mismo es posible observar que el método de la potencia es significativamente más rápido que el de la potencia inversa al no tener que resolver sistemas de ecuaciones. Por resultados experimentales, podemos ver que la factorización LU de la matriz A acarreo menos error numérico que otras factorizaciones, por lo que dicha factorización es útil para resolver el sistema de ecuaciones en el método de la potencia inversa.

REFERENCIAS

[1] Richard L Burden, J Douglas Faires, and Annette M Burden. *Numerical analysis*. Cengage learning, 2015.