

CÁLCULO DE AUTOVALORES. EL MÉTODO DE LAS POTENCIAS.

ALAN REYES-FIGUEROA
MÉTODOS NUMÉRICOS II

(AULA 12) 22.AGOSTO.2023

Cálculo de Autovalores

Aunque los autovalores y autovectores tienen definiciones y caracterizaciones simples, las formas de calcularlos no son obvias. Dada una matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, quizás el primer método que uno podría pensar sería hallar las raíces del polinomio característico. Desafortunadamente, esta estrategia es mala porque la búsqueda de raíces polinomiales es un problema mal condicionado.

La mayoría de estrategias efectivas para hallar los autovalores de A se basa en explotar las siguientes ideas:

- Aprovechar propiedades de la secuencia (iteración de potencias)

$$\frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|}, \frac{A\mathbf{x}}{\|A\mathbf{x}\|}, \frac{A^2\mathbf{x}}{\|A^2\mathbf{x}\|}, \frac{A^3\mathbf{x}}{\|A^3\mathbf{x}\|}, \dots$$

- Aprovechar propiedades del cociente de RAYLEIGH.
- Aprovechar propiedades estructurales asociadas a ciertos autoespacios (KRYLOV).
- Hallar factoraciones reveladoras de A , en donde los autovalores aparecen como entradas de uno de los factores (SCHUR, HESSEMBERG, HOUSEHÖLDER, QR, ...)
- Métodos iterativos (ARNOLFI, LANCZOS, GMRES).

Teorema (Teorema espectral / Descomposición espectral)

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ una matriz simétrica (operador auto-adjunto). Entonces, A admite una descomposición de la forma

$$A = Q\Lambda Q^T,$$

donde $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ es la matriz diagonal formada por los autovalores $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ de A , y

$$Q = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_1 & \mathbf{q}_2 & \dots & \mathbf{q}_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

es una matriz ortogonal cuyas columnas son los autovectores de A , con \mathbf{u}_i el autovector correspondiente a λ_i , $i = 1, 2, \dots, d$.

En otras palabras, A es una suma de matrices de rango 1: $A = \sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{q}_i \mathbf{q}_i^T$.

Cociente de Rayleigh

Definición

Dada $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, el **cociente de Rayleigh** para $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, es el escalar

$$R(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{x}^T A \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}.$$

Si \mathbf{x} es un autovector de A , entonces $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ y el cociente de Rayleigh resulta $R(\mathbf{x}) = \lambda$, su autovalor asociado.

De manera recíproca, uno podría preguntar, dado \mathbf{x} ¿cuál es el valor escalar α que actúa más parecido a un autovalor para \mathbf{x} , en el sentido que minimiza $\|A\mathbf{x} - \alpha\mathbf{x}\|_2^2$?

$$\begin{aligned}\nabla_{\alpha} E(\mathbf{x}) &= \nabla_{\alpha} \|A\mathbf{x} - \alpha\mathbf{x}\|^2 = \nabla_{\alpha} \langle A\mathbf{x} - \alpha\mathbf{x}, A\mathbf{x} - \alpha\mathbf{x} \rangle = -2\mathbf{x}^T (A\mathbf{x} - \alpha\mathbf{x}) \\ &= -2(\mathbf{x}^T A\mathbf{x} + \alpha\mathbf{x}^T)\mathbf{x} = \mathbf{0},\end{aligned}$$

de modo que $\alpha = \frac{\mathbf{x}^T A \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = R(\mathbf{x})$.

Por otro lado, analizamos el comportamiento local de la función $R : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ cuando \mathbf{x}

Cociente de Rayleigh

está cerca de un autovector de A , resulta

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) &= \nabla_{\mathbf{x}} \frac{\mathbf{x}^T A \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = \frac{(\mathbf{x}^T \mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} (\mathbf{x}^T A \mathbf{x}) - (\mathbf{x}^T A \mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} (\mathbf{x}^T \mathbf{x})}{(\mathbf{x}^T \mathbf{x})^2} = \frac{2(\mathbf{x}^T \mathbf{x}) A \mathbf{x} - 2(\mathbf{x}^T A \mathbf{x}) \mathbf{x}}{(\mathbf{x}^T \mathbf{x})^2} \\ &= \frac{2}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} (A \mathbf{x} - R(\mathbf{x}) \mathbf{x}).\end{aligned}\tag{1}$$

De esta fórmula vemos que para \mathbf{x} autovector de A , el gradiente $\nabla_{\mathbf{x}} R(\mathbf{x})$ es el vector cero. Por el contrario, si $\nabla_{\mathbf{x}} R(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, con $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, entonces \mathbf{x} es un autovector de A y $R(\mathbf{x})$ es el autovalor asociado.

Geométricamente hablando, los autovectores de A son los puntos estacionarios de la función $R(\mathbf{x})$, y los autovalores de A son los valores de $R(\mathbf{x})$ en estos puntos.

Dado que $R(\mathbf{x})$ es independiente de la escala, podemos normalizar y restringir \mathbf{x} a la esfera unitaria S^{n-1} .

Cociente de Rayleigh

Asumiendo que los autovalores de A son simples, éstos se vuelven puntos estacionarios aislados sobre la esfera S^{n-1} .

Sea \mathbf{q}_j uno de los autovectores de A . Del hecho que $\nabla_{\mathbf{x}} R(\mathbf{q}_j) = \mathbf{0}$, junto con la suavidad de la función R en $\mathbb{R}^n - \{\mathbf{0}\}$, obtenemos una consecuencia importante

$$R(\mathbf{x}) - R(\mathbf{q}_j) = O(\|\mathbf{x} - \mathbf{q}_j\|^2), \quad \text{cuando } \mathbf{x} \rightarrow \mathbf{q}_j. \quad (2)$$

Por tanto, el cociente de Rayleigh es una estimación cuadráticamente precisa de un autovalor de A .

Una forma más explícita de derivar (2) es expandir \mathbf{x} como una combinación lineal de los autovectores de A . Si $\mathbf{x} = \sum_{j=1}^n b_j \mathbf{q}_j$, entonces $R(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^n b_j^2 \lambda_j / \sum_{j=1}^n b_j^2$, y $R(\mathbf{x})$ es una media ponderada de los λ_j , con pesos igual a los cuadrados de las coordenadas de \mathbf{x} (en la base de autovectores). Debido a esta cuadratura de las coordenadas, si $|b_i/b_j| \leq \varepsilon$ para todo $i \neq j$, entonces

$$R(\mathbf{x}) - R(\mathbf{q}_j) = O(\varepsilon^2).$$

Método de las Potencias

Propiedades de la iteración de potencias:

Sea $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Supondremos que A posee n autovalores, $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ con un conjunto asociado de autovectores l.i. $\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n\}$. Además, supondremos que A tiene exactamente un autovalor λ_1 , que es mayor en módulo, por lo que

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n| \geq 0.$$

Si A no tiene autovectores n independientes, el método de potencia puede seguir siendo exitoso, pero no se garantiza que lo sea.

Si $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, el hecho que $\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n\}$ es una base implica que existen constantes b_1, \dots, b_n tales que

$$\mathbf{x} = \sum_{j=1}^n b_j \mathbf{q}_j.$$

Al multiplicar esta ecuación por las potencias $A, A^2, A^3, \dots, A^k, \dots$, se obtiene

$$A\mathbf{x} = \sum_{j=1}^n b_j \lambda_j \mathbf{q}_j, \quad A^2\mathbf{x} = \sum_{j=1}^n b_j \lambda_j^2 \mathbf{q}_j, \quad \dots, \quad A^k\mathbf{x} = \sum_{j=1}^n b_j \lambda_j^k \mathbf{q}_j, \dots$$

Método de las Potencias

Factorando λ_1 en cada término de la suma, se obtiene

$$A^k \mathbf{x} = \lambda_1^k \sum_{j=1}^n b_j \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{q}_j.$$

Como $|\lambda_1| > |\lambda_j|$, para toda $j = 2, 3, \dots, n$, se tiene que $\lim_{k \rightarrow \infty} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k = 0$ y

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A^k \mathbf{x} = \lim_{k \rightarrow \infty} b_1 \lambda_1^k \mathbf{q}_1. \quad (3)$$

El límite anterior converge a 0 si $|\lambda_1| < 1$, y diverge si $|\lambda_1| > 1$, siempre y cuando, $b_1 \neq 0$. Por consiguiente, las entradas en $A^k \mathbf{x}$ aumentarán con k si $|\lambda_1| > 1$, y tienden a cero si $|\lambda_1| < 1$, resultando en desborde y subdesborde.

Para cuidar esta posibilidad, escalamos las potencias de $A^k \mathbf{x}$ en una forma apropiada para garantizar que la cota en (3) es finita y distinta de cero.

El escalamiento comienza al tomar \mathbf{x} como un vector unitario $\mathbf{x}^{(0)}$, y consideramos

$$\mathbf{x}^{(k)} = \frac{A^k \mathbf{x}^{(0)}}{\|A^k \mathbf{x}^{(0)}\|}, \quad = 1, 2, \dots \quad (4)$$

Método de las Potencias

Entonces

$$\begin{aligned}\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^{(k)} &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\lambda_1^k b_1 \mathbf{q}_1 + \lambda_1^k \sum_{j=2}^n \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1}\right)^k b_j \mathbf{q}_j}{\|\lambda_1^k b_1 \mathbf{q}_1 + \lambda_1^k \sum_{j=2}^n \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1}\right)^k b_j \mathbf{q}_j\|} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\lambda_1^k b_1 \mathbf{q}_1}{\|\lambda_1^k b_1 \mathbf{q}_1\|} \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\lambda_1^k b_1 \mathbf{q}_1}{\lambda_1^k |b_1| \|\mathbf{q}_1\|} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{b_1 \mathbf{q}_1}{|b_1|} = \pm \mathbf{q}_1.\end{aligned}$$

Teorema

Suponga que $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n| \geq 0$ y que $\mathbf{q}_1^T \mathbf{x}^{(0)} \neq 0$. Entonces, la convergencia en las iteraciones (4) es geométrica. En particular

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - (\pm \mathbf{q}_1)\| = O\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right) \quad \text{y} \quad \|\lambda^{(k)} - \lambda_1\| = O\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^{2k}\right),$$

cuando $k \rightarrow \infty$. El signo \pm significa que en cada paso k , una u otra elección de se debe tomar el signo, y luego se mantiene el límite indicado.

Prueba: La primera ecuación se deriva de (3). La segunda se deduce de esto y (2). Si $\lambda_1 > 0$, los signos \pm son todos $+$ o todos $-$, mientras que si $\lambda_1 < 0$, se alternan. \square

Método de las Potencias

Algoritmo: (Iteración de las potencias)

Inputs: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Outputs: λ_1 el mayor autovalor de A en módulo, y \mathbf{q}_1 un autovector unitario asociado.

Initialize $\mathbf{v}^{(0)}$ some vector with $\|\mathbf{v}^{(0)}\| = 1$.

for $k = 1, 2, \dots$:

$$\mathbf{w} = A\mathbf{v}^{(k-1)},$$

$$\mathbf{v}^{(k)} = \mathbf{w} / \|\mathbf{w}\|,$$

$$\lambda^{(k)} = \mathbf{v}^{(k)T} A \mathbf{v}^{(k)} = R(\mathbf{v}^{(k)}), \text{ (cociente de Rayleigh).}$$

Comentarios: La iteración de potencias tiene un uso limitado, por varias razones.

- Primero, se puede encontrar sólo el autovector correspondiente al mayor autovalor.
- Segundo, la convergencia es lineal, reduciendo el error sólo en un factor constante $|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}|$ en cada iteración.
- Finalmente, la calidad de este factor depende de tener un mayor autovalor λ_1 significativamente mayor que los demás. Si λ_2 tiene una magnitud cercana a λ_1 , la convergencia será muy lenta.

Deflación

La iteración de las potencias produce un sólo autovalor y autovector: el mayor autovalor λ_1 , y su autovector asociado \mathbf{q}_1 .

Pregunta: ¿Cómo hacer para calcular todos los autovalores y autovectores de A ?

Para ello, usamos los **métodos de deflación**. Recordemos que si A es diagonalizable, y admite una base de autovectores $\{\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n\}$, entonces podemos escribir (Teorema Espectral)

$$A = \sum_{j=1}^n \lambda_j \mathbf{q}_j \mathbf{q}_j^T.$$

Si a la matriz A le restamos la componente “generada” por el autovector \mathbf{q}_1 , nos queda

$$A^{(2)} = A - \lambda_1 \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_1^T = \sum_{j=2}^n \lambda_j \mathbf{q}_j \mathbf{q}_j^T = \begin{pmatrix} 0 & * & \dots & * \\ * & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & a_{n2}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}.$$

Esto “desaparece” la información en la componente \mathbf{q}_1 . Aplicamos el método a $A^{(2)}$.

Método de las Potencias

Existen muchos métodos de deflación (e.g. el de WIELANDT). Presentamos uno más simple, como sigue.

Algoritmo: (Método de las potencias)

Inputs: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Outputs: $\Lambda, Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, tales que $A = Q\Lambda Q^T$ es una descomposición espectral de A .

For $i = 1, 2, \dots, n$:

 Initialize $\mathbf{q}_i^{(0)}$ some vector with $\|\mathbf{q}_i^{(0)}\| = 1$.

 for $k = 1, 2, \dots$:

$$\mathbf{w} = A\mathbf{q}_i^{(k-1)},$$

$$\mathbf{q}_i^{(k)} = \mathbf{w} / \|\mathbf{w}\|,$$

$$\lambda_i^{(k)} = \mathbf{q}_i^{(k)T} A \mathbf{q}_i^{(k)} = R(\mathbf{q}_i^{(k)}),$$

$$\Lambda[i, i] = \lambda_i,$$

$$Q[:, i] = \mathbf{q}_i,$$

$$A = A - \lambda_i \mathbf{q}_i \mathbf{q}_i^T. \text{ (Deflación)}$$

Aceleración de la Convergencia

Otra variante, esta vez para acelerar la convergencia lineal de los autovalores.

Algoritmo: (Método de las potencias, acelerado)

Inputs: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Outputs: λ_1 el mayor autovalor de A en módulo, y \mathbf{q}_1 un autovector unitario asociado.

Initialize $\mathbf{v}^{(0)}$ some vector with $\|\mathbf{v}^{(0)}\| = 1$.

Initialize $\mu_0 = 0, \mu_1 = 0$.

for $k = 1, 2, \dots$:

$$\mathbf{w} = A\mathbf{v}^{(k-1)},$$

$$\mathbf{v}^{(k)} = \mathbf{w} / \|\mathbf{w}\|,$$

$$\mu = \mathbf{v}^{(k)T} A \mathbf{v}^{(k)},$$

$$\lambda^{(k)} = \mu_0 - \frac{(\mu_1 - \mu_0)^2}{\mu - 2\mu_1 + \mu_0},$$

$$\mu_0 = \mu_1,$$

$$\mu_1 = \mu,$$

Método de las Potencias Inversas

El **método de potencia inversa** es una modificación del método de las potencias, el cual da una convergencia más rápida. Se usa para determinar el autovalor de A que está más cerca de un valor específico s .

Suponga que la matriz A tiene autovalores $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, con autovectores l.i. $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n$. Los autovalores de $(A - sI)^{-1}$, con $s \neq \lambda_i$, son

$$\frac{1}{\lambda_1 - s}, \frac{1}{\lambda_2 - s}, \dots, \frac{1}{\lambda_n - s},$$

y los mismos autovectores $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n$. Si aplicamos el método de las potencias a $(A - sI)^{-1}$, dicha iteración $\lambda^{(k)}$ converge a

$$\frac{1}{\lambda_i - s}, \quad \text{donde} \quad \frac{1}{|\lambda_i - s|} = \max_{1 \leq j \leq n} \frac{1}{|\lambda_j - s|},$$

y esto ocurre precisamente cuando λ_i es el autovalor de A más cercano a s , y $\lambda_i \approx s + \frac{1}{\lambda^{(k)}}$.

En este caso, la selección de s determina la convergencia, siempre y cuando $\frac{1}{\lambda_i - s}$ sea un

Método de las Potencias Inversas

único autovalor dominante de $(A - sI)^{-1}$ (a pesar de que puede ser un autovalor múltiple). Mientras s está más cerca de un autovalor λ_j , más rápida será la convergencia ya que la convergencia es de orden

$$O\left(\left|\frac{(\lambda - s)^{-1}}{(\lambda^{(k)} - s)^{-1}}\right|^k\right) = O\left(\left|\frac{\lambda^{(k)} - s}{\lambda - s}\right|^k\right),$$

donde λ representa el autovalor de A que es el segundo más cercano a s .

A esta estrategia también se le conoce como **método de las potencias con shift**, o simplemente, aplicar un *shift*.

Aplicaciones:

- Hallar el autovalor más cercano a cierto valor s .
- Hallar el menor autovalor de A , o el de menor módulo.

Método de las Potencias Inversas

Algoritmo: (Iteración inversa)

Inputs: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $s \in \mathbb{R}$.

Outputs: λ_1 el mayor autovalor de A más cercano a s , y \mathbf{q}_1 su autovector unitario asociado.

Initialize $\mathbf{v}^{(0)}$ some vector with $\|\mathbf{v}^{(0)}\| = 1$.

for $k = 1, 2, \dots$:

 Solve $(A - sI)\mathbf{w} = \mathbf{v}^{(k-1)}$,

$\mathbf{v}^{(k)} = \mathbf{w} / \|\mathbf{w}\|$,

$\lambda^{(k)} = \mathbf{v}^{(k)T} A \mathbf{v}^{(k)} = R(\mathbf{v}^{(k)})$, (cociente de Rayleigh).

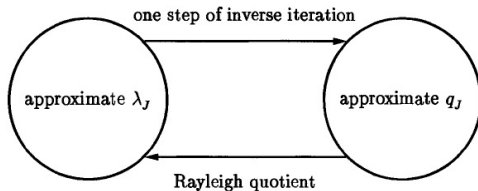
Obs!: ¿Qué pasa si λ es un autovalor de A , de modo que $A - sI$ es singular? Y si es casi un valor propio, de modo que $A - sI$ está mal condicionada, que no se puede esperar una solución precisa de $(A - sI)\mathbf{w} = \mathbf{v}^{(k-1)}$?

Estas aparentes limitantes de la iteración inversa no causan ningún problema en absoluto.

Sin embargo, la convergencia sigue siendo lineal.

Iteración de Rayleigh

Hasta ahora hemos presentado un método para obtener una estimación de un autovalor a partir de una estimación del autovector (el cociente de Rayleigh), y otro método para obtener una estimación de un autovector a partir de una estimación del autovalor (iteración inversa). La posibilidad de combinar estas ideas lleva a otro método.



La figura está sobre simplificada: para obtener una aproximación de \mathbf{q}_j a partir de una λ_j aproximada, mediante un paso de iteración inversa, también se necesita una aproximación preliminar de \mathbf{q}_j . La idea es utilizar estimaciones de autovalores que mejoran continuamente para aumentar la tasa de convergencia de la iteración inversa en cada paso. Este algoritmo es llamado la **iteración del cociente de Rayleigh**.

Iteración de Rayleigh

Algoritmo: (Iteración del cociente de Rayleigh)

Inputs: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Outputs: λ_1 el mayor autovalor de A en módulo, y \mathbf{q}_1 un autovector unitario asociado.

Initialize $\mathbf{v}^{(0)}$ some vector with $\|\mathbf{v}^{(0)}\| = 1$,

Initialize $\lambda^{(0)} = \mathbf{v}^{(0)T} A \mathbf{v}^{(0)}$.

for $k = 1, 2, \dots$:

 Solve $(A - \lambda^{(k-1)})\mathbf{w} = \mathbf{v}^{(k-1)}$,

$\mathbf{v}^{(k)} = \mathbf{w} / \|\mathbf{w}\|$,

$\lambda^{(k)} = \mathbf{v}^{(k)T} A \mathbf{v}^{(k)} = R(\mathbf{v}^{(k)})$.

La convergencia de este algoritmos es de orden cúbico: en cada iteración, el número de dígitos de precisión de triplica.

Iteración de Rayleigh

Teorema

La iteración del cociente de Rayleigh converge a un autovalor / autovector de A para todos, excepto un conjunto de medida cero, de vectores iniciales $\mathbf{v}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$. Cuando converge, la convergencia es eventualmente cúbica, en el sentido de que si λ_j es un autovalor de A y $\mathbf{v}^{(0)}$ es suficientemente cercano al autovector propio \mathbf{q}_j , entonces

$$\|\mathbf{v}^{(k+1)} - (\pm \mathbf{q}_j)\| = O(\|\mathbf{v}^{(k)} - (\pm \mathbf{q}_j)\|^3),$$

y

$$\|\lambda^{(k+1)} - \lambda_j\| = O(\|\lambda^{(k)} - \lambda_j\|^3),$$

cuando $k \rightarrow \infty$. Los signos \pm no son necesariamente los mismos en los dos lados de la ecuación.