Numerical Computation of Eigenvalues

Theorerical Background

(S)cientific (C)omputing (T)eam II-2014
ILI-286 DI-UTFSM Chile

August 26, 2014

Table of contents

Valores Propios

Definición

Definición

Sea A una matriz cuadrada en $\mathbb{R}^{n\times n}$.
Diremos que $\lambda \in \mathbb{C}$ y $\vec{v} \in \mathbb{C}^{n\times 1}$ son valor y vector propios si:

$$A\vec{v} = \lambda\vec{v} \text{ y } \vec{v} \neq \vec{0}$$

¿Cómo podemos organizar todos los valores propios?

Sea A una matriz cuadrada en $\mathbb{R}^{n\times n}$. Diremos que $\lambda_i \in \mathbb{C}$ y $\vec{v}_i \in \mathbb{C}^{n\times 1}$ son el i-ésimo valor y vector propio. Si ahora los sumamos todos y los ordenamos considerando que el sub índice i corresponde a la i-ésima columna, obtenemos (Hint: $A\vec{v}_i = \lambda_i\vec{v}_i = \vec{v}_i\lambda_i$):

Valores Propios

Representación Matricial

¿Cómo podemos organizar todos los valores propios?

Sea A una matriz cuadrada en $\mathbb{R}^{n\times n}$. Diremos que $\lambda_i \in \mathbb{C}$ y $\vec{v}_i \in \mathbb{C}^{n\times 1}$ son el i-ésimo valor y vector propio. Si ahora los sumamos todos y los ordenamos considerando que el sub índice i corresponde a la i-ésima columna, obtenemos (Hint: $A\vec{v}_i = \lambda_i \vec{v}_i = \vec{v}_i \lambda_i$):

$$A \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \dots & v_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \dots & v_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ & & & \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{bmatrix}$$

$$A\,V = V\,\Lambda$$

Valores Propios

Representación Matricial

Cómo podemos organizar todos los valores propios?

Sea A una matriz cuadrada en $\mathbb{R}^{n \times n}$. Diremos que $\lambda_i \in \mathbb{C}$ y $\vec{v}_i \in \mathbb{C}^{n \times 1}$ son el i-ésimo valor y vector propio. Si ahora los sumamos todos y los ordenamos considerando que el sub índice i corresponde a la i-ésima columna, obtenemos (Hint: $A\vec{v}_i = \lambda_i \vec{v}_i = \vec{v}_i \lambda_i$):

$$A\,V = V\,\Lambda$$

Si V^{-1} existe, se tiene:

$$A = V\,\Lambda\,V^{-1}$$

Valores Propios

Potencias de A

Dado $A = V\Lambda V^{-1}$,¿Qué podemos decir de A^n?

$$A^n = (V\Lambda V^{-1})^n$$
$$= V\Lambda V^{-1} V\Lambda V^{-1} \ldots V\Lambda V^{-1}$$

¿Podemos simplificar algo?

$$A^n = V\Lambda^n V^{-1}$$

¡Excelente!

Valores Propios

Otra definición

Un valor propio dominante...

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

Valores Propios

Primer Algoritmo

Un valor propio dominante...se encuentra así

Algorithm 1 Power Iteration

$\vec{x}_0$=Dato inicial
for $j = 0$ to ∞ **do**
    $\vec{u}_{j-1} = \vec{x}_{j-1} / \|\vec{x}_{j-1}\|_2$
    $\vec{x}_j = A\,\vec{u}_{j-1}$
    $\lambda_j = \vec{u}_{j-1}^T A\,\vec{u}_{j-1}$
end for
$\vec{u}_j = \vec{x}_j / \|\vec{x}_j\|_2$

Valores Propios

Convergencia de Power Iteration

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

Valores Propios

Demostración

Sea $\vec{v}_1, \vec{v}_2 \ldots, \vec{v}_n$ una base de $\mathbb{R}^n$ y $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ los valores propios de A con $\vec{v}_1, \vec{v}_2 \ldots, \vec{v}_n$ los vectores propios asociados a cada valor propio. Dado que $\vec{v}_i$ forman una base de $\mathbb{R}^n$, podemos escribir cualquier vector en $\mathbb{R}^n$ como:
$\vec{x}_0 = \sum_{i=1}^{n} c_i \vec{v}_i = V\,\vec{c}$.
Además considere que $c_1 \neq 0$ y $c_2 \neq 0$. Aplicando el Power Iteration y recordando que $A\,V = V\,\Lambda$ obtenemos:

$$
\begin{aligned}
\vec{x}_0 &= V\vec{c} \\
A\,\vec{x}_0 &= A\,V\vec{c} = V\,\Lambda\,\vec{c} \\
A^2\,\vec{x}_0 &= AV\,\Lambda\,\vec{c} = V\,\Lambda^2\,\vec{c} \\
&\vdots \\
A^k\,\vec{x}_0 &= V\,\Lambda^k\,\vec{c}
\end{aligned}
$$

Valores Propios

Demostración - Continuación

Si normalizamos en cada iteración obtenemos:

$$\frac{A^k\,\vec{x}_0}{\lambda_1^k} = \frac{V\,\Lambda^k\,\vec{c}}{\lambda_1^k}$$
$$= \sum_{i=1}^{n} c_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k \vec{v}_i$$

Donde obtenemos $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k \to 0$ como $k \to \infty$ para $i \geq 2$.

Valores Propios

¿Y de que sirve esto?

Conclusión Power Iteration

- Ahora tenemos un algoritmo para encontrar *el* valor propio dominante.
- ¿Y si quiero encontrar otro?
- Este algoritmo no sirve. O si...
- Pensemos....
- Aplicaciones: "PCA, Page-Rank, Graph Theory, Google, Facebook, Netflix, ..."

Valores Propios

¡Otra definición!

Más propiedades de valores propios

Th: Sea $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ los valores propios de A.

(a) Los valores propios de la matriz inversa A^{-1} son $\lambda_1^{-1}, \ldots, \lambda_n^{-1}$, asumiendo que A^{-1} existe.

(b) Los valores propios de la matriz $A - s\,I$ son: $\lambda_1 - s, \ldots, \lambda_n - s$.

En ambos casos los vectores son los mismo. La demostración de estas propiedades se vieron anteriormente.

Valores Propios

Flashback

¿Y que ocurre si utilizamos el Power Iteration con la matriz inversa?

- ¿Se puede?
- No creo....
- Veamos.

Valores Propios

Utilizando A^{-1} donde aparece A y considerando $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots > |\lambda_n|$

1: $\vec{x}_0$=Dato inicial
2: **for** $j = 0$ to ∞ **do**
3: $\quad \vec{u}_{j-1} = \vec{x}_{j-1} / \|\vec{x}_{j-1}\|_2$
4: $\quad \vec{x}_j = A^{-1}\,\vec{u}_{j-1}$
5: $\quad \lambda_j = \vec{u}_{j-1}^T\,A^{-1}\,\vec{u}_{j-1}$
6: **end for**
7: $\vec{u}_j = \vec{x}_j / \|\vec{x}_j\|_2$

Obviando los pasos, podemos concluir que obtenemos λ_n^{-1} y $\vec{v}_n$. Una susbtitución interesante es reemplazar la linea 5 por $\lambda_j = \vec{u}_{j-1}^T\,\vec{x}_j$

Valores Propios

¡Aprovechando el momentum!

Utilizando $A - s\,I$ donde aparece A y considerando $|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| > \cdots > |\lambda_n|$

1: $\vec{x}_0$=Dato inicial
2: **for** $j = 0$ to ∞ **do**
3: $\quad \vec{u}_{j-1} = \vec{x}_{j-1}/\|\vec{x}_{j-1}\|_2$
4: $\quad \vec{x}_j = (A - s\,I)^{-1}\,\vec{u}_{j-1}$
5: $\quad \lambda_j = \vec{u}_{j-1}^{T}\,\vec{x}_j$
6: **end for**
7: $\vec{u}_j = \vec{x}_j/\|\vec{x}_j\|_2$

Obviando los pasos, podemos concluir que obtenemos $\tilde{\lambda}$ y $\tilde{\vec{v}}$.

Valores Propios

¿Qué es $\tilde{\lambda}$? No entiendo...

- Anteriormente dijimos que la aplicación del algoritmo Power Iteration a la matriz A encontraba el valor propio dominante λ_1 de esta.
- OK, ya se eso.
- ¿Que ocurre si aplicamos el Power Iteration a la matriz A^{-1}?
- Encontramos λ_n^{-1} dado que λ_n^{-1} es el *valor propio dominante* de A^{-1}. :-)
- ¿Y?
- mmmm, pensemos.
- Si aplicamos el algoritmo Power Iteration a $(A - s\,I)^{-1}$ encontramos ... ¡El valor propio dominante de $(A - s\,I)^{-1}$!

Valores Propios

¿Qué es $\tilde{\lambda}^{-1}$? No entiendo...

- Si aplicamos el algoritmo Power Iteration a $(A - s\,I)^{-1}$ encontramos ... ¡El valor propio dominante de $(A - s\,I)^{-1}$!
- OK, entonces $\tilde{\lambda}$ es el valor propio dominante de $(A - s\,I)^{-1}$.
- ¿Es $\tilde{\lambda}$ un valor propio de A?
- No
- Pff, ¿Y de que me sirve?
- ¡De mucho! Con $\tilde{\lambda}$ podemos encontrar un valor propio diferente al valor propio dominante o el de menor magnitud (en el caso de usar A^{-1}).
- ¿Cómo?
- $\tilde{\lambda} = (\lambda_i - s)^{-1}$. Simplificando: $\lambda_i = \tilde{\lambda}^{-1} + s$.

Valores Propios

Segundo Algoritmo

Un valor propio *no* dominante...se encuentra así

Algorithm 2 Inverse Power Iteration

$\vec{x}_0$=Dato inicial
for $j = 0$ to ∞ **do**
  $\vec{u}_{j-1} = \vec{x}_{j-1} / \|\vec{x}_{j-1}\|_2$
  $\vec{x}_j = (A - s\, I)^{-1}\, \vec{u}_{j-1}$
  $\lambda_j = \vec{u}_{j-1}^T\, \vec{x}_j$
end for
$\vec{u}_j = \vec{x}_j / \|\vec{x}_j\|_2$

Este algoritmo encuentra $\lambda_i = \tilde{\lambda}^{-1} + s$. Donde λ_i es el valor propio más cercano a s.

Valores Propios

Tercer Algoritmo

Otro algoritmo — Rayleigh Quotient Iteration

Algorithm 3 Rayleigh Quotient Iteration

1: $\vec{x}_0$=Dato inicial
2: **for** $j = 1$ to ∞ **do**
3: $\quad \vec{u}_{j-1} = \vec{x}_{j-1}/\|\vec{x}_{j-1}\|_2$
4: $\quad \lambda_{j-1} = \vec{u}_{j-1}^T\, A\, \vec{u}_{j-1}$
5: $\quad$ Solve $(A - \lambda_{j-1}\, I)\, \vec{x}_j = \vec{u}_{j-1}$
6: **end for**
7: $\vec{u}_j = \vec{x}_j/\|\vec{x}_j\|_2$

(Para valores propios no repetidos) Este algoritmo encuentra el valor propio dominante λ_i y converge cuadráticamente. ¡Si la matriz es simétrica converge cúbicamente!.

Valores Propios

Uff, hemos visto muchas cosas...

Conclusiones

- Power Iteration: Valor propio dominante
- Inverse Power Iteration: Valor propio más cercano a s.
- Rayleigh Quotient Iteration: Depende de la condición inicial y converge cuadráticamente.
- Rayleigh Quotient Iteration: (Precaución linea 5) ¡Resolver $(A - \lambda_{j-1}\, I)\, \vec{x}_j = \vec{u}_{j-1}$ únicamente si la matriz no es singular!
- ¿Qué hago si la matriz $(A - \lambda_{j-1}\, I)$ es singular?
- Detener el algoritmo, ¡ya se convergió! :-)
- Esto es como jugar con fuego ... ¡pero sin quemarse!

Valores Propios

Sigamos...

¿Recuerda?

Si A tiene valor propio λ y vector propio $\vec{v}$
entonces $B = Q^{-1}AQ$, tiene valor propio λ y vector propio $Q^{-1}\vec{v}$.

En este caso se dice que A es *una matriz similar* a B.

Theorem

Matrices Similares tienen los mismos valores propios.

Otra Demostración:

$$\begin{aligned}
\det(B - \lambda I) &= \det(Q^{-1}AQ - \lambda I) \\
&= \det(Q^{-1}AQ - \lambda Q^{-1}IQ) \\
&= \det(Q^{-1}(A - \lambda I)Q) = \det(Q^{-1})\det(A - \lambda I)\det(Q) \\
&= \det(A - \lambda I)
\end{aligned}$$

Valores Propios

Algoritmos matriciales para encontrar todos los valores propios al mismo tiempo

Normalized Simultaneous Iteration

1: $\bar{Q}_0 = I$
2: **for** $j = 0$ to ∞ **do**
3: $\quad A\,\bar{Q}_j = \bar{Q}_{j+1} R_{j+1}$
4: **end for**
5: $\Lambda = \bar{Q}^T A\,\bar{Q}$

Valores Propios

Algoritmos matriciales para encontrar todos los valores propios al mismo tiempo

Unshifted QR algorithm

1: $Q_0 = I$
2: $R_0 = A$
3: $\bar{Q} = Q_0$
4: **for** $j = 0$ to ∞ **do**
5: $\quad Q_{j+1}\, R_{j+1} = qr(R_j\, Q_j)$
6: $\quad \bar{Q} = \bar{Q}\, Q_j$
7: **end for**
8: $\Lambda = \mathrm{diag}(R\, Q)$

Recuerde que $A = Q\, R \Rightarrow Q^T A\, Q = R\, Q$, i.e. A es similar a $R\, Q$.
¡En este caso tenemos una secuencia de transformaciones similares!

Valores Propios

Por último, Ritz values...

¿Qué son los Ritz values?

- Son una *estimación* de los valores propios.
- ¿Cómo se obtienen?
- Se obtienen de la matriz H_n de la iteración de Arnoldi en GMRes.
- ¿Qué es H_n? En GMRes se construye $\tilde{H}_n$.
- $H_n = Q_n^* Q_{n+1} \tilde{H}_n$, i.e. removiendo la última fila de $\tilde{H}_n$.
- Ahora tengo una matriz más pequeña, ¿Cómo la uso?
- Se obtienen los valores propios de esta (¡Estos son los Ritz Values!) a través de los métodos ya discutidos :-)
- ¿Puedo hacer shifts y el resto de cosas que aprendí? ¡Sí!

Valores Propios

¿Algo más?

- Sí
- ¿Que cosa?
- Les sugiero encarecidamente que busquen en el libro un ejemplo de cada método y lo hagan a mano en lo posible.
- OK, ¿Algo más?
- Sí
- Uff, ¿No será mucho?
- No. Implementen todos los métodos y traigan sus códigos a clases en su computador personal.
- OK, that's easy.
- Excellent. Now, we will do our presentations and videos in English. It is good for all of us! Good job.