

1.IV Aproximación numérica de valores y vectores propios.

Manuel Palacios

Departamento de Matemática Aplicada

Centro Politécnico Superior. Universidad de Zaragoza

Primavera 2007

Contents

1	Introducción	2
2	Método de la potencia	3
3	Método de la potencia inversa	5
4	Método de la potencia inversa con desplazamiento	5
5	Método de bisección o de Givens	6
6	Método de Jacobi	9
7	Método de factorización QR	11
7.1	Construcción de la matriz de Householder	11

References

- [1] Burden, R. L. and Faires, J. D.: Análisis Numérico. *Grupo Editorial Iberoamerica*, 1985.
- [2] Gasca, M.: Cálculo numérico: resolución de ecuaciones y sistemas. *Librería Central*, 1987.
- [3] Hairer, E.: Introduction à l'Analyse Numérique. *Université de Genève, Dept. de Mathématiques*, 1993.
- [4] Conde, C. y Winter, G.: Métodos y algoritmos del álgebra numérica. *Editorial Reverté*, 1990.

1 Introducción

El problema de cálculo de valores y vectores propios aparece en muchas ocasiones relacionado con problemas de vibraciones y resonancias, con los momentos principales de inercia, con el tensor de esfuerzos, etc. También en el diseño de sistemas de información. Desde un punto de vista puramente matemático este problema surge en el estudio de la convergencia de métodos iterativos, en el análisis de la estabilidad de sistemas dinámicos, en la detección del carácter stiff de PVI., etc.

El problema, en esencia, es, dada la matriz cuadrada A , encontrar escalares λ y vectores asociados (al menos uno), v , tales que

$$A v = \lambda v$$

Definición 1.1 *Los escalares λ y los vectores v se denominan, respectivamente, **valor y vector propios asociados**.*

Los valores propios son las soluciones de la **ecuación característica** $\det(A - \lambda I) = 0$ y los vectores propios asociados a cada valor propio son las soluciones del sistema homogéneo $(A - \lambda I) X = 0$

Los métodos de resolución de este problema se pueden clasificar en la forma siguiente:

- Directos: Krylov, Leverrier (determinan la ecuación característica, con un coste computacional de $\mathcal{O}(n!)$)
- Iterativos
 - método de la potencia y sus variantes
 - métodos basados en transformaciones matriciales (Givens, Jacobi)
 - métodos de factorización (método Q R y sus variantes)

2 Método de la potencia

Suponemos que la matriz A posee una base de vectores propios $\{v_1, \dots, v_n\}$ asociados a los valores propios $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, respectivamente, y, además, que λ_1 es el valor propio dominante, es decir,

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

Para cualquier vector v de \mathbb{R}^n , por ser $\{v_1, \dots, v_n\}$ una base, deben existir escalares $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ tales que

$$x = \alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_n v_n$$

Multiplicando reiteradamente por la matriz A se tiene:

$$\begin{aligned} Ax &= \sum_{j=1}^n \alpha_j A v_j = \sum_{j=1}^n \alpha_j \lambda_j v_j \\ A^2 x &= \sum_{j=1}^n \alpha_j \lambda_j A v_j = \sum_{j=1}^n \alpha_j \lambda_j^2 v_j \\ &\dots \\ A^k x &= \sum_{j=1}^n \alpha_j \lambda_j^{k-1} A v_j = \sum_{j=1}^n \alpha_j \lambda_j^k v_j \end{aligned}$$

Sacando factor común λ_1^k en cada término del segundo miembro, en la última expresión, se obtiene:

$$A^k x = \lambda_1^k \sum_{j=1}^n \alpha_j \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k v_j$$

Teniendo en cuenta que $|\lambda_1| > |\lambda_j|, j = 2, 3, \dots, n$, se tiene $\lim_k \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k = 0$ y, por lo tanto,

$$\lim_k A^k x = \lim_k \lambda_1^k \alpha_1 v_1$$

En consecuencia, esta sucesión converge a 0, si $|\lambda_1| < 1$, y diverge, en otro caso. Se puede sacar provecho de este comportamiento construyendo el siguiente algoritmo del método.

ALGORITMO PARA EL MÉTODO DE LA POTENCIA

Etapa inicial, $k=0$

Dado el vector arbitrario $\mathbf{x} = (x^1, \dots, x^n) = \alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_n v_n$, llamaremos

$$p_0 = \min \{j \mid \|x\|_\infty = |x^j|\}$$

$$x_0 = \frac{x}{x^{p_0}} \implies x_0^{p_0} = 1 = \|x\|_\infty$$

$$\mu_0 = x_0^{p_0} = 1$$

Etapa $k = 1$

$$y_1 = A x_0$$

$$\mu_1 = y_1^{p_0} = \frac{y_1^{p_0}}{x_0^{p_0}}$$

$$p_1 = \min \{j \mid \|y\|_\infty = |y_1^j|\}$$

$$x_1 = \frac{y_1}{y_1^{p_1}} = \frac{A x_0}{y_1^{p_1}} \implies x_1^{p_1} = 1 = \|y_1\|_\infty$$

Etapa k = 2

$$y_2 = A x_1 = \frac{1}{y_1^{p_1}} A^2 x_0$$

$$\mu_2 = y_2^{p_1} = \frac{y_2^{p_1}}{x_1^{p_1}} = \frac{\sum_{j=1}^n \alpha_j \lambda_j^2 v_j^{p_1}}{\sum_{j=1}^n \alpha_j \lambda_j v_j^{p_1}} = \lambda_1 \frac{\sum_{j=1}^n \alpha_j (\lambda_j/\lambda_1)^2 v_j^{p_1}}{\sum_{j=1}^n \alpha_j (\lambda_j/\lambda_1) v_j^{p_1}}$$

$$p_2 = \min \{j \mid \|y\|_\infty = |y_2^j|\}$$

$$x_2 = \frac{y_2}{y_2^{p_2}} = \frac{A x_1}{y_2^{p_2}} = \frac{A^2 x_0}{y_2^{p_2} y_1^{p_1}} \implies x_2^{p_2} = 1 = \|y_2\|_\infty$$

Etapa k+1

$$y_{k+1} = A x_k = \frac{1}{y_k^{p_k} \cdots y_2^{p_2} y_1^{p_1}} A^{k+1} x_0$$

$$\mu_{k+1} = y_{k+1}^{p_k} = \frac{y_{k+1}^{p_k}}{x_k^{p_k}} = \frac{\sum_{j=1}^n \alpha_j \lambda_j^{k+1} v_j^{p_k}}{\sum_{j=1}^n \alpha_j \lambda_j^k v_j^{p_k}} = \lambda_1 \frac{\sum_{j=1}^n \alpha_j (\lambda_j/\lambda_1)^{k+1} v_j^{p_k}}{\sum_{j=1}^n \alpha_j (\lambda_j/\lambda_1)^k v_j^{p_k}}$$

$$p_{k+1} = \min \{j \mid \|y\|_\infty = |y_2^j|\}$$

$$x_{k+1} = \frac{y_{k+1}}{y_{k+1}^{p_{k+1}}} = \frac{A x_k}{y_{k+1}^{p_{k+1}}} = \frac{A^{k+1} x_0}{y_{k+1}^{p_{k+1}} \cdots y_2^{p_2} y_1^{p_1}} \implies$$

$$\implies x_{k+1}^{p_{k+1}} = 1 = \|y_{k+1}\|_\infty$$

Etapa final

$$\lim \mu_k = \lambda_1, \quad \lim x_k = v_1, \quad \|v_1\|_\infty = 1$$

$$|\mu_k - \lambda_1| \approx C \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^k \implies \lim \left| \frac{\mu_{k+1} - \lambda_1}{\mu_k - \lambda_1} \right| \approx \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right| < 1$$

3 Método de la potencia inversa

Si λ es un valor propio de A y v un vector propio asociado, se cumple que

$$A v = \lambda v \iff A^{-1} v = \frac{1}{\lambda} v,$$

es decir, que $1/\lambda$ es valor propio de A^{-1} con los mismos vectores propios.

Potencia inversa = met. potencia para A^{-1}

$$y_{k+1} = A^{-1} x_k \iff A y_{k+1} = x_k$$

Proporciona el valor propio de módulo más pequeño y un vector propio asociado.

4 Método de la potencia inversa con desplazamiento

Observemos que

$$(A - qI) v = A v - q v = (\lambda - q) v, \quad (A - qI)^{-1} v = \frac{1}{\lambda - q} v$$

El método de la potencia inversa aplicado a la matriz $(A - qI)$ proporciona una aproximación al valor propio de módulo más pequeño de dicha matriz, es decir, el valor propio más cercano a q , y un vector propio asociado a él.

5 Método de bisección o de Givens

La matriz A debe ser tridiagonal y simétrica, por ejemplo,

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & \dots & & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & b_{n-2} & a_n & b_{n-1} & \\ & & & b_{n-1} & a_n & \end{bmatrix}$$

Se trata de construir una sucesión (finita) de polinomios en la forma iterativa siguiente:

$$\begin{aligned} p_0(\lambda) &= 1, & p_1(\lambda) &= a_1 - \lambda \\ p_k(\lambda) &= (a_k - \lambda)p_{k-1}(\lambda) - b_k^2 p_{k-2}(\lambda) & (1) \\ n &= 2, 3, \dots, n \end{aligned}$$

Estos polinomios (sucesión de Sturm), en el caso de que todos los b_k sean no nulos, tienen las siguientes propiedades (cf. Conde-Winter, pag. 594):

Teorema 5.1 $p_k(\lambda) = \text{Det}(A_{kk} - \lambda I)$, siendo A_{kk} la submatriz de A constituida por las primeras k filas y columnas.

Teorema 5.2 Se verifica:

- Si $p_k(\alpha) = 0 \implies p_{k-1}(\alpha)p_{k+1}(\alpha) < 0$, $k = 1, 2, \dots, n$
- $\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} p_k(\lambda) = +\infty$, $k = 1, 2, \dots, n$
- los ceros de $p_k(\lambda)$ son simples y separan a los de $p_{k+1}(\lambda)$

Teorema 5.3 El número $\sigma(\alpha)$ de alternancias de signo de la sucesión $\{p_0(\alpha), p_1(\alpha), \dots, p_n(\alpha)\}$ es igual al número de valores propios menores que α .

Téngase en cuenta que, por ser A simétrica real, todos sus valores propios son reales.

En consecuencia, se puede construir el siguiente **algoritmo de bisección** o de Givens:

- 1.- Elegir α_1 y α_2 de forma que $\sigma(\alpha_1) = 0$ y $\sigma(\alpha_2) = n$
- 2.- Subdividir el intervalo $[\alpha_1, \alpha_2]$ en otros dos, $[\alpha_1, \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2}]$ y $[\frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2}, \alpha_2]$, reiteradamente hasta que en cada nuevo subintervalo sólo haya un valor propio.
- 3.- Continuar la subdivisión hasta que los dos extremos del intervalo estén a distancia menor que una tolerancia prefijada.

Ejemplo 5.4 Sea la matriz

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & \\ -1 & 2 & -1 & \\ & -1 & 2 & -1 \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

La sucesión de polinomios de Sturm es:

$$p_0(\lambda) = 1, \quad p_1(\lambda) = 2 - \lambda$$

$$p_2(\lambda) = (2 - \lambda)p_1(\lambda) + p_0(\lambda)$$

$$p_3(\lambda) = (2 - \lambda)p_2(\lambda) + p_1(\lambda)$$

$$p_4(\lambda) = (2 - \lambda)p_3(\lambda) + p_2(\lambda)$$

Obsérvese que la evaluación de estos polinomios puede realizarse mediante un algoritmo similar al de Hörner.

Tomando $\alpha_1 = 0$ y $\alpha_2 = 5$, resulta: $\sigma(\alpha_1) = 0$ y $\sigma(\alpha_1) = 4$, ya que

$$\{p_0(\alpha_1), p_1(\alpha_1), p_2(\alpha_1), p_3(\alpha_1), p_4(\alpha_1)\} = \{1, 2, 3, 4, 5\}$$

$$\{p_0(\alpha_2), p_1(\alpha_2), p_2(\alpha_2), p_3(\alpha_2), p_4(\alpha_2)\} = \{1, -3, 8, -21, 55\}$$

por lo que todos los valores propios están entre 0 y 5. Subdividiendo resulta:

$$\begin{aligned} \{p_0(5/2), p_1(5/2), p_2(5/2), p_3(5/2), p_4(5/2)\} = \\ \{(1, -1/2, -3/4, 7/8, 5/16)\} \end{aligned}$$

Luego en $[0, 5/2]$ hay dos valores propios y en $[5/2, 5]$ hay otros dos valores propios.

Subdividiendo otra vez:

$$\begin{aligned} \{p_0(5/4), p_1(5/4), p_2(5/4), p_3(5/4), p_4(5/4)\} = \\ \{(1, 3/4, -7/16, -69/64, -95/256)\} \end{aligned}$$

Luego en $[0, 5/4]$ hay un valor propio y en $[5/4, 5/2]$ hay otro valor propio.

Subdividiendo el primer intervalo otra vez:

$$\begin{aligned} \{p_0(5/8), p_1(5/8), p_2(5/8), p_3(5/8), p_4(5/8)\} = \\ \{1, 11/8, 57/64, -77/512, -4495/4096\} \end{aligned}$$

Luego en $[0, 5/8]$ hay un valor propio

Subdividiendo el intervalo otra vez:

$$\{p_0(5/16), p_1(5/16), p_2(5/16), p_3(5/16), p_4(5/16)\} = \\ \{1, 2716, 473/256, 5859/4096, 37105/65536\}$$

Luego en $[5/16, 5/8]$ hay un valor propio.

Después de 18 sucesivas subdivisiones se obtiene una aproximación del valor propio $\lambda_1 \in [0.3819656, 0.3819668]$. ■

Como se observa, este método es muy lentamente convergente.

Para determinar los restantes valores propios se procede en la misma forma con los subintervalos adecuados que se han obtenido en el camino.

6 Método de Jacobi

También en esta ocasión se considera una matriz A real y simétrica. Como es conocido estas matrices son diagonalizables mediante congruencia ortogonal, por lo que los valores y vectores propios de la matriz A y su congruente ortogonal diagonal son los mismos.

Recuérdese que dos matrices A y B son congruentes ortogonales si existe una matriz ortogonal Q tal que

$$B = Q^T A Q$$

En particular, si $Q = Q(p, q, \theta)$ es una matriz de rotación de Givens, se tiene que

$$\begin{aligned} b_{ij} &= a_{ij}, & \text{si } i \neq p, q, \text{ and } j \neq p, q \\ b_{pi} &= b_{ip} = c a_{ip} - s a_{iq}, & \text{si } i \neq p, q \\ b_{qi} &= b_{iq} = c a_{iq} - s a_{ip}, & \text{si } i \neq p, q \\ b_{pp} &= c^2 a_{pp} - 2 c s a_{pq} + s^2 a_{qq}, \\ b_{pq} &= b_{qp} = c^2 a_{pq} + c s (a_{pp} - a_{qq}) - s^2 a_{pq}, \\ b_{qq} &= c^2 a_{qq} - 2 c s a_{pq} + s^2 a_{pp} \end{aligned}$$

Obsérvese que solamente se modifican las filas p y q .

Propiedad 6.1 Si

$$Nd(A) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij}^2$$

y

$$Nd(B) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n b_{ij}^2,$$

se verifica:

$$Nd(B) = Nd(A) + 2 b_{pq}^2 - 2 a_{pq}^2$$

En consecuencia, el método de Jacobi consiste en realizar transformaciones de Givens (rotaciones en el plano (i, j)), definidas por matrices ortogonales (de Givens), de forma que se vayan anulando sucesivamente los elementos que no están en la diagonal (elementos b_{pq}). Finalmente, los vectores propios serán las columnas del producto $Q_1 Q_2 \dots Q_k$ de todas las matrices de Givens que hayan sido utilizadas en el orden adecuado.

Concretamente, siguiendo el método clásico, se elige la matriz de Givens Q_k de forma que se anule el elemento i, j de módulo mayor de la matriz $A^{(k)}$, es decir, que resulte nulo el elemento $a_{ij}^{(k)}$ de la matriz

$$A^{(k)} = Q_k^T A^{(k-1)} Q_k, \quad A^{(0)} = A,$$

Para ello es preciso tomar

$$Q_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \cdot & & & & \\ & & c & s & & \\ & & & \cdot & & \\ & & -s & c & & \\ & & & & \cdot & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

siendo:

a) Si $a_{ii} \neq a_{jj}$:

$$\begin{aligned} \beta &= |a_{ii} - a_{jj}|, & \gamma &= 2 a_{ij} \operatorname{sign}(a_{ii} - a_{jj}) \\ c &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\beta}{\sqrt{\gamma^2 + \beta^2}} \right)}, & s &= \frac{\gamma}{2 c \sqrt{\gamma^2 + \beta^2}} \end{aligned} \quad (2)$$

b) Si $a_{ii} = a_{jj}$:

$$c = s = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad (3)$$

Como criterio de parada suele tomarse el siguiente:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}^{(k)}| < Tol \quad (4)$$

(cf. Press et al.: Numerical recipes, pg. 360)

7 Método de factorización QR

En primer consideraremos el caso en que la matriz A es simétrica.

En esta situación, el método de factorización QR consiste en transformar sucesivamente la matriz A en otra congruente ortogonal que sea cada vez más próxima a una diagonal aprovechando la factorización QR de las sucesivas matrices. Para ello, en un primer paso, se realiza la mencionada factorización

$$A = Q_1 R_1$$

En segundo paso, se construye la matriz

$$A_1 = R_1 Q_1 = Q_1^T A Q_1,$$

Y así sucesivamente.

Para obtener dicha factorización, en primer lugar, se transforma la matriz A en otra congruente ortogonal que tenga la forma de Hessenberg, mediante multiplicación a izquierda y derecha por matrices de Householder y, a continuación, se realizan $n - 1$ rotaciones de Givens para transformarla en una triangular superior.

El algoritmo se detiene cuando el elemento $(A_k)_{nn-1}$ es suficientemente pequeño; entonces el elemento $(A_k)_{nn}$ es un valor propio de A .

7.1 Construcción de la matriz de Householder

Hay que buscar una matriz de Householder $H = I - 2\omega\omega^T$, $\|\omega\| = 1$ tal que la primera columna de la matriz $A_1 = H A H$ sea de la forma

$$A_1^1 = (a_{11}, \alpha, 0, \dots, 0)^T,$$

Para ello, es suficiente elegir (cf. [1], pag. 523)

$$\alpha = -\text{sign}(a_{21}) (\sum_{j=2}^n a_{j1}^2)^{1/2}$$

$$r = (\frac{1}{2} \alpha (\alpha - a_{21}))^{1/2}$$

$$\omega_1 = 0, \quad \omega_2 = \frac{a_{21} - \alpha}{2r}, \quad \omega_k = \frac{a_{k1}}{2r}, \quad k = 3, 4, \dots, n$$

En sucesivos pasos, se construirán matrices de Householder que vayan transformando en ceros todos los elementos por debajo de la primera paralela a la diagonal de la segunda, tercera, etc. columnas, de forma que la matriz final tenga la forma de Hessenberg.