Actividades 7

Prácticas de Cálculo Numérico I (doble grado)

5 de abril de 2021

1. El comando `eig`

Antes de nada, recordemos que el comando nativo en `matlab/octave` para hallar valores y vectores propios es `eig`. Si ejecutamos directamente `eig(A)` o recuperamos su salida con una variable, se obtiene un vector columna cuyas coordenadas son los autovalores (repetidos con sus multiplicidades), mientras que si especificamos dos variables de salida con `[C,D]=eig(A)`, obtendremos las matrices que corresponden a la diagonalización $A = CDC^{-1}$. Por la teoría de álgebra lineal, la diagonal de D estará compuesta por los autovalores y las columnas respectivas de C por los autovectores.

En lo sucesivo usaremos como ejemplo las matrices A_1, A_2 y A_3 definidas con `matlab/octave` como:

```
% Autovalores: 4, 1\pm i, 1
A1 = [-7,6,-8,5; -16,10,-13,10; -5,2,-2,3; -8,6,-8,6];

% Autovalores: 4, 3, 2, 1
A2 = [-1,3,-5,2; -7,7,-7,4; -1,1,1,0; -2,3,-5,3];

% Autovalores: 8, 6, 4, 2
A3 = [5,0,-2,1; 0,5,-1,2; -2,-1,5,0; 1,2,0,5];
```

La ordenación de los autovalores puede no ser la indicada. Así en una máquina con `octave` el comando `eig(A2)` produjo $1, 2, 4, 3$. El comando `sort` ordena y por tanto `sort(eig(A2))` los muestra en orden creciente mientras que con `sort(eig(A2),'descend')` el orden es decreciente.

Para A_1 y A_2 es posible elegir C con elementos enteros, pero como `eig` normaliza, con este comando no nos percataremos de ello. La matriz A_3 es simétrica y por tanto diagonaliza en una base ortonormal.

Incidiendo en lo dicho antes, una forma de presentar los autovalores y autovectores de A_3 es:

```
A3 = [5,0,-2,1; 0,5,-1,2; -2,-1,5,0; 1,2,0,5];
[C,D]= eig(A3);
```

```
for k = 1:4
        disp('')
        disp(['autovalor ' num2str(k) ': ' num2str(D(k,k))])
        disp('autovector respectivo (normalizado):')
        disp(C(:,k))
end
```

Si dentro del bucle calculamos `norm(A3*C(:,k)-D(k,k)*C(:,k))`, veremos que es depreciable, lo que prueba que los vectores propios verifican la ecuación $A\vec{v} = \lambda\vec{v}$ que los definen.

Una cuestión a tener en cuenta es que, desde el punto de vista numérico, todas las matrices parecen diagonalizables sobre $\mathbb{C}$ porque cada matriz no diagonalizable está infinitamente cerca en norma de una infinidad de ellas que sí lo son. Recordando del álgebra lineal que si una matriz no es diagonalizable sobre $\mathbb{C}$ necesariamente tiene autovalores múltiples, no es de extrañar que un enemigo fundamental del cálculo numérico de autovalores y autovectores, ya sea usando `eig` o cualquier otro algoritmo, es la existencia de multiplicidades.

Por ejemplo, consideremos el sencillo código:

```
A = [10,1;0,10];
[C,D]= eig(A);
disp('autovalores')
disp(diag(D))
disp('autovectores')
disp(C)
```

La matriz no es diagonalizable y los valores propios se calculan correctamente (10 con multiplicidad dos). Se muestran dos vectores propios proporcionales y esto suena satisfactorio porque la matriz no es diagonalizable y, consecuentemente, no hay una base de autovectores. Sin embargo, al cambiar a `format long` (esto puede variar con versiones de `matlab/octave`) veremos que en realidad las columnas de C no son proporcionales. Podemos exagerar el efecto cambiando la matriz a `[10,1e-13;0,10]`. Sigue sin ser diagonalizable, pero el código produce dos autovectores claramente distintos. Para el segundo de ellos $\|A\vec{v} - 10\vec{v}\|$ se acerca al épsilon máquina y es imposible detectar que es un falso autovector.

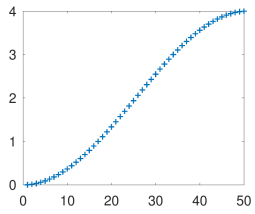
ACTIVIDAD 7.1.1. *Considera la matriz $N \times N$ que tiene $a_{i\,i} = 2$, $a_{ij} = 1$ si $|i - j| = 1$ y el resto de sus elementos nulos. Escribe un programa que dibuje sus autovalores en orden creciente.*

Si te sorprende la regularidad del resultado en la actividad anterior cuando N crece, la explicación más directa se basa en una fórmula exacta [KST99] para los valores propios que corresponde a una discretización de $4\,\mathrm{sen}^2\,x$ en cierto intervalo.

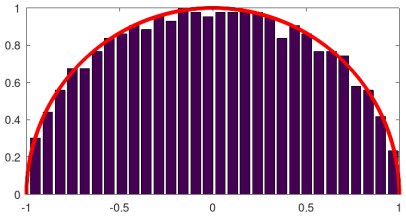
Mucho más sorprendente es que hay aparezca un patrón en la distribución de los autovalores de matrices aleatorias. Sin entrar en detalles sobre los comandos (consúltese la ayuda de `matlab/octave` si es necesario), el siguiente código comprueba que para las matrices aleatorias simétricas el histograma de los autovalores convenientemente normalizado, se aproxima a un semicírculo.

```
% Matriz simétrica aleatoria
A = 2*rand(1000)-ones(1000);
A = A'+A;

% Normalización: máx |\lambda|=1
A = A/max(abs(eig(A)));

% Calcula el histograma de los autovalores
[nn,xx] = hist(eig(A),30);

figure(1)
% Normaliza en el dibujo la altura a 1
h = bar(xx,nn/max(nn));
hold on
% Semicircunferencia
t = linspace(0,pi,150);
plot( cos(t),sin(t),'r', 'LineWidth',6 )
axis('equal')
hold off
```

La *ley del semicírculo de Wigner* afirma que esto es un hecho general siempre que los elementos de la matriz simétrica respondan a variables aleatorias independientes, de media cero y varianza acotada.



Actividad para $N = 60$



Ley del semicírculo de Wigner

Sustituyendo la segunda línea del último programa por `A = randn(1000)` obtenemos resultados similares, ya que `randn` genera matrices cuyos elementos siguen una distribución normal estándar, la cual tiene media cero y varianza 1.

2. El método de la potencia

Aunque disponemos del comando `eig`, este es un curso para matemáticos y nuestro objetivo será entender algunos métodos para el cálculo, aunque sea parcial, de autovectores y autovalores de una matriz cuadrada.

Uno de los métodos más sencillos para calcular un autovalor y un autovector de una matriz cuadrada A es la iteración $\vec{x}_{n+1} = A\vec{x}_n$, lo que se llama *método de la potencia* porque $\vec{x}_n = A^n\vec{x}_0$. Habitualmente se normalizan los $\vec{x}_n$ para evitar divergencias. Si A tiene un solo *autovalor dominante* λ_1, es decir, es simple y $|\lambda_1| > |\lambda_j|$ para $j \neq 1$, para casi cualquier elección de $\vec{x}_0$, $\vec{x}_n$ se acerca paulatinamente a un autovector correspondiente al autovalor λ_1 y, consecuentemente, λ_1 se aproxima por el llamado *cociente de Rayleigh* $\langle A\vec{x}_n, \vec{x}_n\rangle / \|\vec{x}_n\|^2$, donde el denominador es 1 si hemos normalizado. Por ejemplo, $-A_1$ tiene autovalor dominante -4 que podemos aproximar, junto con su autovector con el código:

```
A1 = [-7,6,-8,5; -16,10,-13,10; -5,2,-2,3; -8,6,-8,6];
A = -A1;
N = 8;
v = rand(size(A,1),1);
v = v/norm(v);

for k = 1:N
        vn = A*v;
        v = vn/norm(vn);
end

disp('Aproximación del autovector:')
disp(v)

disp('Aproximación del autovalor:')
disp(v'*A*v)
```

Normalmente queremos establecer un criterio de parada para saber si se ha conseguido cierta tolerancia en el error relativo estimando autovalores o autovectores, antes de haber gastado todas las iteraciones máximas disponibles. Para los primeros, una posibilidad es cambiar el bucle por:

```
tol = 0.01
fl = false;
for k = 1:N
        vn = A*v;
        vn = vn/norm(vn);
        la = v'*A*v;
        lan = vn'*A*vn;
        v = vn;
        if abs(la/lan-1) < tol
                fl = true;
                break
        end
end


if fl
        disp(['Se ha alcanzado la tolerancia exigida con N
            ↪ = ' num2str(k)])
else
        disp('No se ha alcanzado la tolerancia exigida')
end
```

Si queremos usar un criterio similar con los vectores propios hay que tener cuidado porque aunque informalmente decimos que $\vec{x}_n$ "converge" al

autovector, los autovectores solo están definidos salvo multiplicar por constantes. Si por ejemplo λ_1 es negativo, $\vec{x}_n$ cambiará alternativamente de sentido y algo más complicado ocurre para autovalores complejos. Una solución es normalizar poniendo una de las coordenadas iguales a 1, típicamente la mayor en valor absoluto.

ACTIVIDAD 7.2.1. *Siguiendo la idea anterior, trata de hacer un criterio de parada que tome en cuenta el error relativo de los autovectores. Seguramente necesites usar el comando* `max` *en la forma* `[m,j] = max(abs(...))`.

La rapidez de convergencia depende de lo grande que sea el cociente $|\lambda_1|/|\lambda_2|$ donde λ_2 es el *autovalor subdominante*, el siguiente en tamaño del módulo, que podría ser múltiple. Cuanto más cercano sea a uno este cociente, peor para la convergencia. Esto lleva a una situación curiosa. Matemáticamente tiene la misma complicación hallar los autovalores y autovectores de A que los de $A - \mu I$, pero numéricamente los cocientes $|\lambda_1|/|\lambda_2|$ pueden ser bien distintos. Por ejemplo, para A_2 es $4/3$ y para $A_2 - 2I$ es 2. Por tanto, es más conveniente aplicar el algoritmo a $A_2 - 2I$. Comprobémoslo:

```
A2 = [-1,3,-5,2; -7,7,-7,4; -1,1,1,0; -2,3,-5,3];
A = A2;
N = 10;
n = size(A,1)
v1 = rand(n,1);
v1 = v1/norm(v1);
v2 = v1;

for k = 1:N
        vn1 = A*v1;
        vn2 = (A-2*eye(n))*v2;
        v1 = vn1/norm(vn1);
        v2 = vn2/norm(vn2);
        disp([num2str(k) ': aprox 1 -> '
              ↪ num2str(v1'*A*v1,'%.6f') ' aprox 2 -> '
              ↪ num2str(v2'*A*v2,'%.6f')])
end
```

3. Localización de autovalores

Según lo que acabamos de ver, sabremos acerca de la velocidad de convergencia con una idea previa de la localización de los autovalores. Los *círculos de Gershgorin* dan una información burda que se vuelve muy precisa para pequeñas perturbaciones de matrices diagonales.

El resultado básico es que los autovalores de una matriz A están, en el plano complejo, dentro de la unión de los círculos (de Gershgorin) definidos por $|z - a_{ii}| \leq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$ y que si la unión de m de estos círculos no se solapa con los otros, entonces dicha unión contiene exactamente m

autovalores [QS07, §6.3].

El siguiente código dibuja los círculos de Gershgorin para una matriz aleatoria con a_{11} mucho mayor que el resto de los elementos, con ello λ_1 estará en el círculo aislado a la derecha y λ_2 en la unión de los otros.

```
1  N = 5;
2  A = rand(N,N);
3  A(1,1) = A(1,1) + 2*N;
4
5  n = size(A,1);
6
7  t = linspace(0,2*pi,100);
8  figure(1)
9  for k = 1:n
10          r = sum( abs(A(k,:)) ) - abs(A(k,k));
11          plot( real(A(k,k))+ r*cos(t), imag(A(k,k))+
                ↪ r*sin(t) )
12          hold on
13 end
14 axis('equal')
15 hold off
```

Usar `real`, `imag` en la línea 11 permite que el programa funcione para matrices complejas.

Actividad 7.3.1. *Añade alguna línea la código para que muestre también las posiciones reales de los autovalores. Intenta extremar la brevedad. Se puede hacer con una sola línea.*

En física se presenta la situación en la que uno conoce un autovalor simple λ de una matriz hermítica A y su autovector normalizado $\vec{v}$ y quiere estimar sus análogos λ' y $\vec{v}'$ para $A' = A+P$ donde P es una matriz hermítica pequeña. La teoría de perturbación dice que las fórmulas relevantes son

$$\lambda' \approx \lambda + \vec{v}^\dagger P \vec{v} \qquad \vec{v}' \approx \vec{v} + \sum_{\mu \neq \lambda} \frac{\vec{v}_\mu^\dagger P \vec{v}}{\lambda - \mu} \vec{v}_\mu$$

donde μ recorre los autovalores de A distintos de λ y $\vec{v}_\mu$ los correspondientes autovectores normalizados. Al igual que en otras ocasiones, la notación $\vec{v}^\dagger$ significa la matriz traspuesta conjugada de la que corresponde al vector columna $\vec{v}_\mu$. Estas fórmulas permiten encontrar un buen punto de partida para el método de la potencia o la extensión que veremos a continuación.

Actividad 7.3.2. *Comprueba que la primera de las fórmulas anteriores da buenas aproximaciones para los autovalores de* `A3+ep*(R+R')` *con* `R = rand(4)` *y* `ep` *pequeño, considerada como una perturbación de* `A3`.

4. El método de la potencia inversa

Si aplicamos el método de la potencia a A^{-1} el autovalor de menor valor absoluto pasa a ser el dominante. En general, aplicando el método a $(A-\mu I)^{-1}$ con μ cercano a λ_j (supuesto autovalor simple), conseguiremos que λ_j sea dominante y podremos aplicar el método de la potencia. Esta es la forma más básica del *método de la potencia inversa* y funciona tanto para autovalores reales como complejos, como se puede apreciar en el siguiente ejemplo:

```
A1 = [-7,6,-8,5; -16,10,-13,10; -5,2,-2,3; -8,6,-8,6];
A = A1;
N = 8;
n = size(A,1);
v = rand(n,1);
v = v/norm(v);

la0 = 0.8+0.8*i;
Ai = inv(A-la0*eye(size(A,1)));

for k = 1:N
        vn = Ai*v;
        v = vn/norm(vn);
end

disp('Aproximación del autovector:')
disp(v)

disp('Aproximación del autovalor:')
disp(v'*A*v)
```

Como `Ai` no varía, para un número grande de iteraciones, nos conviene calcular la inversa una sola vez, aunque esto sea costoso. También podríamos ir actualizando el valor de μ con las aproximaciones del autovalor para conseguir una convergencia más rápida. En ese caso, el cálculo de la inversa es menos ventajoso que la resolución del sistema en cada iteración. El siguiente código, que alguno diría que corresponde al algoritmo llamado *iteración del cociente de Rayleigh* (véase también la variante [PTVF92, (11.7.10)]), ilustra la situación:

```
A1 = [-7,6,-8,5; -16,10,-13,10; -5,2,-2,3; -8,6,-8,6];
A = A1;
N = 5;
n = size(A,1);
v = rand(n,1);
v = v/norm(v);

la = 0.8+0.8*i;

for k = 1:N
        vn = (A-la*eye(n))\v;
        v = vn/norm(vn);
        la = v'*A*v;
end

disp('Aproximación del autovector:')
```

```
17  disp(v)
18
19  disp('Aproximación del autovalor:')
20  disp(v'*A*v)
```

La convergencia es mucho más rápida que en el caso anterior, pero a cambio hay que pagar con resolver un sistema en cada iteración.

ACTIVIDAD 7.4.1. *Escribe un programa que compare el error en la aproximación del autovalor en las dos formas del algoritmo para este ejemplo.*

El método de la potencia inversa pone de relieve el interés tener estimaciones previas de la localización de los autovalores. Si λ es un autovalor simple de A separado del resto y μ es una buena aproximación suya, entonces $(A-\mu I)^{-1}$ tendrá a $(\lambda-\mu)^{-1}$ como valor propio y su valor absoluto será muy grande, lo que permite que la convergencia sea rápida.

5. El algoritmo QR (teórico)

Según la teoría, partiendo de $A_0 = A$ real con autovalores reales simples, la iteración $A_{n+1} = R_n Q_n$ donde Q_n y R_n son los factores en la descomposición QR de A_n, converge a una matriz triangular superior T igual a cambiar A a cierta base ortonormal, cuya diagonal son los autovalores de A. Si además A es simétrica, T será diagonal. Esta es la teoría bajo el algoritmo QR, pero como cada paso requiere del orden de n^3 operaciones, es bastante poco eficiente para matrices medianamente grandes. Por otro lado, resulta ridículamente simple de programar en `matlab/octave`:

```
1  A2 = [-1,3,-5,2; -7,7,-7,4; -1,1,1,0; -2,3,-5,3];
2  A = A2;
3  N = 15;
4  n = size(A,1);
5  %Q = eye(n);
6
7  for k = 1:N
8          [Qp,R] = qr(A);
9          A =  R*Qp;
10 %        Q = Q*Qp;
11 end
12
13 disp('Aproximación de los autovalores')
14 disp(diag(A))
```

El método se puede adaptar con pocos cambios al caso de autovalores complejos [SB93, 6.6.4.15], pero no lo veremos aquí. Esencialmente lo que ocurre es que aparece un valor $T_{i\,i+1} \neq 0$ por cada pareja de autovalores conjugados.

Si quitamos el comentario en las las líneas 5 y 10, en Q tendremos una matriz unitaria tal que $Q^\dagger A_2 Q$ es aproximadamente triangular superior T, cuyos autovectores son fáciles de hallar y hallaríamos una aproximación de los autovectores de A_2 premultiplicando los de T por Q.

ACTIVIDAD 7.5.1. *Escribe una función* `eigt` *tal que* `[C,D] = eigt(R)` *funcione como* `eig` *para una matriz triangular superior* `R` *con todos los elementos de su diagonal distintos.*

Sin entrar en detalles, la forma de volver eficiente el algoritmo es reducir primero A a una matriz de Hessenberg superior con un cambio de base unitario. Estas matrices son las que tienen $a_{ij} = 0$ para $i > j + 1$. La particularidad de ellas es que la descomposición QR se puede hacer de forma mucho más económica. Así que el esquema sería:

```
1  A2 = [-1,3,-5,2; -7,7,-7,4; -1,1,1,0; -2,3,-5,3];
2  A = A2;
3  N = 10;
4  n = size(A,1);
5
6  [P,A] = hess(A);
7  %Q = P;
8
9  for k = 1:N
10         [Qp,R] = qr(A);
11         A = R*Qp;
12 %        Q = Q*Qp;
13 end
14
15 disp('Aproximación de los autovalores')
16 disp(diag(A))
```

El comando `hess` de la línea 6 halla P unitaria con $P^\dagger AP$ de Hessenberg que se vuelve a almacenar en A.

ACTIVIDAD 7.5.2. *Compara el tiempo de ejecución de los programas anteriores con muchas iteraciones sobre matrices aleatorias simétricas* 100×100 *para estudiar si* `matlab/octave` *está realmente aprovechando la mayor eficiencia de la descomposición* QR *con las matrices de Hessenberg.*

Por supuesto, el procedimiento descrito solo tiene sentido si hay una manera eficiente de hallar una matriz de Hessenberg que sea igual a la de una matriz dada tras un cambio de base, preservando de esta forma los valores propios. Esto se reduce a una variante de la reducción de Gauss en la que se opera simultáneamente en filas y columnas [PTVF92, §11.5].

Referencias

[KST99] D. Kulkarni, D. Schmidt, and S.-K. Tsui. Eigenvalues of tridiagonal pseudo-Toeplitz matrices. *Linear Algebra Appl.*, 297(1-3):63–

80, 1999.

[PTVF92] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical recipes in C*. Cambridge University Press, Cambridge, second edition, 1992. The art of scientific computing.

[QS07] A. Quarteroni and F. Saleri. *Cálculo Científico con MATLAB y Octave*. Springer, Milan, 2007.

[SB93] J. Stoer and R. Bulirsch. *Introduction to numerical analysis*, volume 12 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer-Verlag, New York, second edition, 1993. Translated from the German by R. Bartels, W. Gautschi and C. Witzgall.