

3. Valores y Vectores Característicos

3.1. Introducción

El producto de una matriz cuadrada, \mathbf{A} , por un vector (matriz columna), \mathbf{x} , es otro vector, cuyas componentes son habitualmente no proporcionales a \mathbf{x} . Sin embargo, puede existir un vector ϕ no nulo tal que:

$$\mathbf{A} \phi = \lambda \phi \quad (3.1a)$$

Se dice entonces que ϕ es un vector característico (también llamado vector propio, eigenvector o modo) de la matriz \mathbf{A} . El correspondiente escalar λ es un valor característico (también llamado valor propio, autovalor o eigenvalor). Nótese que si un vector satisface las ecuaciones (3.1a) también un múltiplo arbitrario (un vector "paralelo") es solución. Sin embargo, se trata esencialmente de la misma solución; los vectores característicos sólo se califican como distintos si sus componentes no son proporcionales.

Por ejemplo,

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix} = 1 \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 \\ -1 \end{Bmatrix} = 3 \begin{Bmatrix} 1 \\ -1 \end{Bmatrix}$$

en este caso $\phi_1 = \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$ y $\phi_2 = \begin{Bmatrix} 1 \\ -1 \end{Bmatrix}$ son vectores característicos, a los que corresponden los valores propios 1 y 3, respectivamente. Otros vectores, no paralelos a los dos antes mencionados, no cumplen la condición (3.1a):

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 \\ 2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 3 \end{Bmatrix}$$

El vector $\begin{Bmatrix} 0 \\ 3 \end{Bmatrix}$ no puede expresarse como un múltiplo de $\begin{Bmatrix} 1 \\ 2 \end{Bmatrix}$.

El *problema clásico* de valores y vectores característicos consiste en la determinación de los vectores ϕ y los correspondientes escalares λ para los que se cumple (3.1a). Con frecuencia se presenta el *problema general*:

$$\mathbf{A} \phi = \lambda \mathbf{B} \phi \quad (3.1b)$$

En muchas aplicaciones las matrices \mathbf{A} y \mathbf{B} son simétricas y definidas positivas. En algunos casos se hacen hipótesis simplificadoras que resultan en \mathbf{B} diagonal. El problema clásico, definido en (3.1a), corresponde al caso particular $\mathbf{B} = \mathbf{I}$.

3.1.1 Conversión del Problema General a la Forma Clásica

Un problema de la forma general (3.1b) puede convertirse a otro equivalente de la forma clásica (3.1a). Así por ejemplo, si \mathbf{B} es no singular puede determinarse:

$$\mathbf{B}^{-1} \mathbf{A} \phi = \lambda \phi \quad (3.2)$$

Sin embargo, si \mathbf{A} y \mathbf{B} son simétricas (como es, por ejemplo, el caso en problemas de vibración, en los que esas matrices son respectivamente rigideces y masas) conviene más hacer la descomposición (Cholesky):

$$\mathbf{B} = \mathbf{R}^T \mathbf{R} \quad (3.3a)$$

y efectuar entonces el cambio de variables

$$\boldsymbol{\phi} = \mathbf{R}^{-1} \mathbf{z} \quad (3.3b)$$

con lo que se obtiene:

$$(\mathbf{R}^{-1})^T \mathbf{A} \mathbf{R}^{-1} \mathbf{z} = \lambda \mathbf{z} \quad (3.3c)$$

Esto es particularmente fácil si \mathbf{B} es diagonal.

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \mathbf{B}^{1/2} \mathbf{B}^{1/2} \\ \boldsymbol{\phi} &= \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{z} \\ \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{A} \mathbf{B}^{-1/2} \mathbf{z} &= \mathbf{H} \mathbf{z} = \lambda \mathbf{z} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Donde
$$h_{ij} = \frac{a_{ij}}{\sqrt{b_i b_j}}.$$

Nótese que los valores característicos son los mismos que los del problema original; los correspondientes vectores característicos se relacionan mediante (3.4b).

3.1.2 Polinomio Característico y Valores Propios

Las ecuaciones $\mathbf{A} \boldsymbol{\phi} = \lambda \mathbf{B} \boldsymbol{\phi}$ pueden también describirse como:

$$(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{B}) \boldsymbol{\phi} = \mathbf{0} \quad (3.5a)$$

que tiene soluciones no triviales sólo si la matriz $(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{B})$ es singular, es decir, si:

$$p(\lambda) = \det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{B}) = 0 \quad (3.5b)$$

$p(\lambda)$ se denomina *polinomio característico*. Siendo \mathbf{A} y \mathbf{B} matrices cuadradas de orden n , $p(\lambda)$ es un polinomio de grado n , cuyas raíces son $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. En lo que sigue se supone, sin perder generalidad, que: $|\lambda_1| \leq |\lambda_2| \leq |\lambda_3| \leq \dots \leq |\lambda_n|$

3.1.3 Independencia Lineal de los Vectores Característicos

Asociado a cada uno de los n valores característicos λ_i se tiene un vector $\boldsymbol{\phi}_i$. Si λ_i es una raíz de multiplicidad m , el correspondiente vector $\boldsymbol{\phi}_i$ puede obtenerse resolviendo el sistema de ecuaciones homogéneas: $(\mathbf{A} - \lambda_i \mathbf{B}) \boldsymbol{\phi}_i = \mathbf{0}$ suponiendo m componentes arbitrarias en $\boldsymbol{\phi}_i$.

Los vectores característicos correspondientes a valores característicos distintos son linealmente independientes. Supóngase que éste no fuera el caso, pudiéndose obtener uno de los vectores como combinación lineal de otros que sí son linealmente independientes:

$$\boldsymbol{\phi}_s = \sum_{i=1}^j c_i \boldsymbol{\phi}_i \quad (3.6a)$$

Y entonces:

$$\mathbf{A}\phi_s = \sum_{i=1}^j c_i \mathbf{A}\phi_i = \sum_{i=1}^j c_i \lambda_i \mathbf{B}\phi_i \quad (3.6b)$$

Por otro lado, por la definición del problema, (3.1b):

$$\mathbf{A}\phi_s = \lambda_s \mathbf{B}\phi_s = \sum_{i=1}^j c_i \lambda_s \mathbf{B}\phi_i \quad (3.6c)$$

Restando (3.6b) de (3.6c) se obtiene: $\sum_{i=1}^j c_i (\lambda_s - \lambda_i) \mathbf{B}\phi_i = \mathbf{0}$

Si $\lambda_s \neq \lambda_i$ debería entonces tenerse $c_i = 0$ para todo i , lo que se opone a la hipótesis.

Excepcionalmente pueden presentarse valores característicos repetidos. Aún en este caso es factible obtener vectores característicos linealmente independientes. Sin embargo, el conjunto de vectores asociados a los valores característicos repetidos define un subespacio, tal que cualquier vector del subespacio (es decir una combinación lineal de aquellos tomados como base) es también un vector característico:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\phi_i &= \lambda_i \mathbf{B}\phi_i \\ \mathbf{A}\phi_i &= \lambda_i \mathbf{B}\phi_i \\ \mathbf{A}(c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + c_3\phi_3 + \dots) &= \lambda_i \mathbf{B}(c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + c_3\phi_3 + \dots) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Teniéndose n vectores característicos linealmente independientes de dimensión n , estos constituyen una base completa. Cualquier otro vector de tal dimensión puede expresarse como combinación lineal de los vectores característicos:

$$\mathbf{v} = \alpha_1\phi_1 + \alpha_2\phi_2 + \alpha_3\phi_3 + \dots + \alpha_n\phi_n \quad (3.8)$$

Por ejemplo, con los vectores característicos antes obtenidos:

$$\begin{Bmatrix} 1 \\ 2 \end{Bmatrix} = \frac{3}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix} - \frac{1}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ -1 \end{Bmatrix}$$

3.1.4 Ortogonalidad de los Vectores Característicos

Si las matrices \mathbf{A} y \mathbf{B} son Hermitianas (o simplemente simétricas) y definidas positivas, los valores característicos de $\mathbf{A}\phi = \lambda \mathbf{B}\phi$ son todos reales y positivos. Para probar esto basta considerar:

$$\phi_s^* \mathbf{A}\phi_r = \lambda_r \phi_s^* \mathbf{B}\phi_r \quad (3.9a)$$

$$\phi_r^* \mathbf{A}\phi_s = \lambda_s \phi_r^* \mathbf{B}\phi_s \quad (3.9b)$$

El superíndice $*$ denota aquí conjugada traspuesta. La conjugada traspuesta de la segunda de estas expresiones es (recuérdese que λ_s es un escalar):

$$\phi_s^* \mathbf{A}\phi_r = \lambda_s^* \phi_s^* \mathbf{B}\phi_r \quad (3.9c)$$

y al ser \mathbf{A} y \mathbf{B} Hermitianas (es decir $\mathbf{A}^* = \mathbf{A}$ y $\mathbf{B}^* = \mathbf{B}$), restando (3.9c) de (3.9a) se obtiene:

$$(\lambda_r - \lambda_s^*) \phi_s^* \mathbf{B}\phi_r = 0 \quad (3.9d)$$

Si $r=s$, al ser \mathbf{B} una matriz definida positiva se tendría $\phi_r^* \mathbf{B}\phi_r > 0$. Por lo tanto, siendo $\lambda_r = \lambda_s$, se tendría $\lambda_r - \lambda_r^* = 0$ lo que implica que todos los λ son números reales. Si

además \mathbf{A} es definida positiva, es decir $\phi_r^* \mathbf{A} \phi_r > 0$, se concluye que los valores característicos son todos positivos.

Por otro lado, si $\lambda_r \neq \lambda_s$ se tiene que $\lambda_r - \lambda_s^* \neq 0$ y en consecuencia (3.9d) implica que:

$$\phi_s^* \mathbf{B} \phi_r = b_r \delta_{rs} \quad (\text{es decir, cero si } r \neq s) \quad (3.10a)$$

y además, observando las expresiones precedentes:

$$\phi_s^* \mathbf{A} \phi_r = a_r \delta_{rs} \quad (3.10b)$$

Las propiedades de ortogonalidad expresadas en (3.10) son la base para la descomposición modal utilizada al resolver sistemas de ecuaciones diferenciales en aplicaciones tales como el análisis sísmico lineal.

Refiriéndose nuevamente al ejemplo inicial:

$$(1 \quad 1) \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix} = 2$$

$$(1 \quad -1) \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 \\ -1 \end{Bmatrix} = 6$$

$$(1 \quad 1) \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 \\ -1 \end{Bmatrix} = 0$$

3.1.5 Normalización de los Vectores Característicos

Como se mencionó anteriormente los vectores característicos se definen por la proporción de sus elementos, pudiéndose escalar o "normalizar" en forma arbitraria. Es frecuente escalarlos de modo que:

$$\phi_s^* \mathbf{B} \phi_r = \delta_{rs} \quad (3.11a)$$

Se dice entonces que los vectores están normalizados respecto a la matriz \mathbf{B} . En tal caso se tiene también:

$$\phi_s^* \mathbf{A} \phi_r = \lambda_r \delta_{rs} \quad (3.11b)$$

3.1.6 Cociente de Rayleigh

Si se conoce un vector característico ϕ_n , el correspondiente valor λ_n puede determinarse con el cociente de Rayleigh:

$$\rho(\phi_j) = \frac{\phi_j^T \mathbf{A} \phi_j}{\phi_j^T \mathbf{B} \phi_j} \quad (3.12)$$

Esta expresión puede aplicarse también con aproximaciones a los vectores propios. Si \mathbf{x} es una aproximación a un vector característico con un error de orden ε , el cociente de Rayleigh, $\rho(\mathbf{x})$, aproxima el correspondiente valor característico con un error de orden ε^2 .

3.1.7 Teorema de Gershgorin

Supóngase que λ_i es un valor característico de la matriz \mathbf{A} y que ϕ_i es el correspondiente vector, con componentes $v_1 \ v_2 \ v_3 \ \dots$:

$$\mathbf{A} \phi_i = \lambda_i \phi_i \quad (3.13a)$$

La componente de mayor valor absoluto en ϕ_i es v_s . Dividiendo la ecuación s en (3.13a) entre $|v_s|$ e intercambiando ambos miembros:

$$\lambda_i = a_{s1} \left(\frac{v_1}{v_s} \right) + a_{s2} \left(\frac{v_2}{v_s} \right) + \dots + a_{ss} + \dots + a_{sn} \left(\frac{v_n}{v_s} \right) \quad (3.13b)$$

y por lo tanto:

$$|\lambda_i - a_{ss}| = |a_{s1}| + |a_{s2}| + \dots + 0 + \dots + |a_{sn}| \quad (3.13c)$$

En consecuencia, cada valor característico λ_i está dentro de por lo menos uno de los círculos con centro en a_{ss} y radio igual a la suma de los valores absolutos de la correspondiente fila s .

Por ejemplo, considerando la matriz:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 4 \end{pmatrix}$$

que es definida positiva, puede asegurarse que sus valores característicos (que son números reales) están dentro de los intervalos (1,3) y (3,5). Efectivamente, en este caso $\lambda = 3 \pm \sqrt{2}$.

3.1.8 Formas polinómicas

Supóngase que se conocen los valores y vectores característicos de una matriz, \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} \phi = \lambda \phi \quad (3.14a)$$

¿Cuáles son los valores característicos de la matriz $\mathbf{A}^2 = \mathbf{A} \mathbf{A}$?

$$(\mathbf{A}\mathbf{A}) \phi = \mathbf{A} (\mathbf{A} \phi) = \mathbf{A} (\lambda \phi) = \lambda (\mathbf{A} \phi) = \lambda^2 \phi$$

Este resultado puede extenderse para la matriz \mathbf{A}^k (siendo k un exponente). Los vectores característicos son los mismos que los de la matriz \mathbf{A} , mientras que los correspondientes valores característicos son λ^k :

$$\mathbf{A}^k \phi = \lambda^k \phi \quad (3.14b)$$

Esto es incluso válido para exponentes negativos. Por ejemplo, multiplicando ambos miembros de (3.14a) por $\lambda^{-1} \mathbf{A}^{-1}$ se obtiene:

$$\mathbf{A}^{-1} \phi = \lambda^{-1} \phi \quad (3.14c)$$

Por otro lado, combinando linealmente expresiones de la forma (3.14b) y teniendo en cuenta que $\mathbf{A}^0 = \mathbf{I}$ (así como $\lambda^0 = 1$):

$$(c_0 \mathbf{I} + c_1 \mathbf{A} + c_2 \mathbf{A}^2 + c_3 \mathbf{A}^3 + \dots) \phi = (c_0 + c_1 \lambda + c_2 \lambda^2 + c_3 \lambda^3 + \dots) \phi \quad (3.14d)$$

Por ejemplo, si:

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

tiene valores característicos 1 y 3, la matriz:

$$\mathbf{A}^2 = \mathbf{A}\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 5 & -4 \\ -4 & 5 \end{pmatrix}$$

tiene valores característicos 1 y 9 (es decir, los cuadrados de 1 y 3). Los vectores característicos son los mismos para ambas matrices.

3.2 Métodos de Iteración con Vectores

Los métodos que se presentan en esta sección son los más eficientes cuando sólo se requieren un valor característico y su vector asociado, o en todo caso cuando el número de valores y vectores característicos por determinar es pequeño.

3.2.1 Iteración Directa

En la iteración "directa" se considera un vector inicial \mathbf{x}_0 y se obtiene una secuencia de vectores corregidos, \mathbf{x}_k , mediante:

$$\mathbf{B} \bar{\mathbf{x}}_{j+1} = \mathbf{A} \mathbf{x}_j \quad (3.15a)$$

$$\mathbf{x}_{j+1} = \frac{\bar{\mathbf{x}}_{j+1}}{r_{j+1}} \quad (3.15b)$$

donde r_{j+1} es un escalar que normaliza el vector utilizado en la iteración. Lo habitual es tomar r_{j+1} como el elemento de máximo valor absoluto en $\bar{\mathbf{x}}_{j+1}$, lo que significa escalar el vector de aproximación de modo que la mayor componente sea igual a 1..

Este proceso converge al vector característico ϕ_n , asociado al valor característico de mayor módulo, λ_n . En efecto, la aproximación inicial \mathbf{x}_0 puede escribirse como:

$$\mathbf{x}_0 = \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2 + \alpha_3 \phi_3 + \dots + \alpha_{n-1} \phi_{n-1} + \alpha_n \phi_n \quad (3.16a)$$

Recuérdese que los n vectores característicos son linealmente independientes y constituyen una base completa en el espacio de dimensión n . Entonces (suponiendo que \mathbf{B} no es singular):

$$\mathbf{A} \mathbf{x}_0 = \sum \alpha_i \mathbf{A} \phi_i = \sum \alpha_i \lambda_i \mathbf{B} \phi_i \quad (3.16b)$$

$$\bar{\mathbf{x}}_1 = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{x}_0 = (\alpha_1 \lambda_1) \phi_1 + (\alpha_2 \lambda_2) \phi_2 + \dots + (\alpha_n \lambda_n) \phi_n \quad (3.16c)$$

y por lo tanto:

$$\mathbf{x}_1 = \frac{1}{r_1} \sum_n (\alpha_i \lambda_i) \phi_i \quad (3.16d)$$

Se observa que, si las componentes de \mathbf{x}_0 eran α_i , aquellas de \mathbf{x}_1 resultan proporcionales a $\alpha_i \lambda_i$. Repitiendo pasos análogos a los indicados en (3.18), puede comprobarse que la aproximación \mathbf{x}_k puede expresarse como combinación lineal de los vectores característicos con coeficientes proporcionales a $\alpha_i \lambda_i^k$ (en este caso k es un exponente). En consecuencia, si $|\lambda_n| \geq |\lambda_{n-1}| \geq |\lambda_{n-2}| \geq \dots \geq |\lambda_1|$, las componentes según ϕ_n crecen más rápidamente que las otras y se tiene que:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}_k = \phi_n \quad (3.17a)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} r_k = \lambda_n \quad (3.17b)$$

Esto es válido aún cuando $\alpha_n = 0$ puesto que, por lo menos al tratar con grandes matrices, los errores de redondeo (debidos a la aritmética imperfecta del computador) introducen siempre una componente según ϕ_n . La convergencia es muy rápida si

$|\lambda_n| \gg |\lambda_{n-1}|$ o si \mathbf{x}_0 es aproximadamente paralelo a ϕ_n (es decir, si la componente α_n es importante en relación a las demás). En cambio, si los últimos valores característicos son similares la convergencia es en general muy lenta. Por otro lado, no se tienen dificultades para el caso (más académico que práctico) en que $\lambda_n = \lambda_{n-1}$: en tal caso el proceso converge a un vector característico que resulta ser la proyección de \mathbf{x}_0 en el subespacio definido por los vectores ϕ_n y ϕ_{n-1} .

Considérese por ejemplo el problema $\mathbf{A} \phi = \lambda \mathbf{B} \phi$ con las matrices:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 5 & -2 & 0 \\ -2 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

Aún cuando en este caso se tienen matrices simétricas, el procedimiento descrito se aplica a matrices cuadradas cualesquiera.

En este caso se obtienen:

k	\mathbf{x}_k	$\mathbf{A}\mathbf{x}_k$	$\bar{\mathbf{x}}_{k+1}$	r_{k+1}	$\rho(\mathbf{x}_{k+1})$
0	1.00000	5.00000	5.00000	5.00000	5.481481
	0.00000	-2.00000	-1.00000		
	0.00000	0.00000	0.00000		
1	1.00000	5.40000	5.40000	5.40000	5.502594
	-0.20000	-2.60000	-1.30000		
	0.00000	0.20000	0.06667		
2	1.00000	5.48148	5.48148	5.48148	5.503559
	-0.24074	-2.73457	-1.36728		
	0.01235	0.25309	0.08436		
3	1.00000	5.49887	5.49887	5.49887	5.503603
	-0.24944	-2.76370	-1.38185		
	0.01539	0.26483	0.08828		
4	1.00000	5.50259	5.50259	5.50259	5.503605
	-0.25130	-2.76994	-1.38497		
	0.01605	0.26735	0.08912		
5	1.00000	5.50339	5.50339	5.50339	5.503605
	-0.25169	-2.77128	-1.38564		
	0.01620	0.26789	0.08930		
6	1.00000	5.50356	5.50356	5.50356	5.503605
	-0.25178	-2.77156	-1.38578		
	0.01623	0.26801	0.08934		

El procedimiento converge al valor característico: $\phi_3 = \begin{Bmatrix} 1.00000 \\ -0.25180 \\ 0.01623 \end{Bmatrix}$

que corresponde al valor característico de mayor módulo, $\lambda_3 = 5.503605$.

El valor de r es aproximadamente λ_n , pero el cociente de Rayleigh, $\rho(\mathbf{x})$ proporciona siempre una aproximación mejor.

3.2.2 Iteración Inversa

El proceso de iteración directa antes descrito converge al vector característico asociado al valor característico de mayor módulo. Éste puede ser útil al considerar el condicionamiento de las matrices de coeficientes en grandes sistemas de ecuaciones, o al analizar la estabilidad numérica de ciertos métodos para integrar sistemas de ecuaciones diferenciales, pero por lo general tiene poca importancia en la respuesta del sistema estudiado. Para determinar la respuesta de un sistema se requieren más bien los valores característicos de menor módulo y sus vectores asociados.

Para determinar el vector característico asociado al valor propio de menor módulo (el modo fundamental) puede usarse una "iteración inversa":

$$\mathbf{A} \bar{\mathbf{x}}_{j+1} = \mathbf{B} \mathbf{x}_j \quad (3.18a)$$

$$\mathbf{x}_{j+1} = \frac{\bar{\mathbf{x}}_{j+1}}{r_{j+1}} \quad (3.18b)$$

En este caso si:

$$\mathbf{x}_0 = \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2 + \alpha_3 \phi_3 + \dots + \alpha_{n-1} \phi_{n-1} + \alpha_n \phi_n \quad (3.19a)$$

la aproximación \mathbf{x}_k puede expresarse como combinación lineal de los vectores característicos con coeficientes proporcionales a α_i / λ_i^k (nuevamente, k es aquí un exponente):

$$\mathbf{x}_k = \frac{\alpha_1}{\lambda_1^k} \phi_1 + \frac{\alpha_2}{\lambda_2^k} \phi_2 + \frac{\alpha_3}{\lambda_3^k} \phi_3 + \dots + \frac{\alpha_{n-1}}{\lambda_{n-1}^k} \phi_{n-1} + \frac{\alpha_n}{\lambda_n^k} \phi_n \quad (3.19b)$$

En consecuencia, si $|\lambda_1| \leq |\lambda_2| \leq |\lambda_3| \leq \dots \leq |\lambda_n|$ al emplear la iteración inversa se tiene que:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}_k = \phi_1 \quad (3.20a)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} r_k = \frac{1}{\lambda_1} \quad (3.20b)$$

Los comentarios anteriores relativos a la convergencia de la iteración directa son también válidos. En este caso la velocidad de convergencia depende de la razón λ_2 / λ_1 .

Para las matrices del caso anterior y considerando, por ejemplo, el vector inicial:

$$\mathbf{x}_0 = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{Bmatrix}$$

se obtiene el vector asociado al valor característico de menor módulo, es decir, λ_1 .

Nótese que r es ahora una aproximación de $1 / \lambda_1$, mientras que en la iteración directa lo era de λ_n . También en este caso se observa que el cociente de Rayleigh es siempre una mejor aproximación al valor característico.

k	\mathbf{x}_k	$\mathbf{B}\mathbf{x}_k$	$\bar{\mathbf{x}}_{k+1}$	r_{k+1}	$\rho(\mathbf{x}_{k+1})$
0	0.00000	0.00000	2.66667	12.66667	0.154734
	1.00000	2.00000	6.66667		
	2.00000	6.00000	12.66667		
1	0.21053	0.21053	1.42105	6.44737	0.154625
	0.52632	1.05263	3.44737		
	1.00000	3.00000	6.44737		
2	0.22041	0.22041	1.42993	6.46463	0.154624
	0.53469	1.06939	3.46463		
	1.00000	3.00000	6.46463		
3	0.22119	0.22119	1.43102	6.46696	0.154624
	0.53594	1.07187	3.46696		
	1.00000	3.00000	6.46696		
4	0.22128	0.22128	1.43116	6.46727	0.154624
	0.53610	1.07221	3.46727		
	1.00000	3.00000	6.46727		
5	0.22129	0.22129	1.43118	6.46731	0.154624
	0.53613	1.07225	3.46731		
	1.00000	3.00000	6.46731		
6	0.22129	0.22129	1.43118	6.46731	0.154624
	0.53613	1.07226	3.46731		
	1.00000	3.00000	6.46731		

En muchas aplicaciones \mathbf{B} es diagonal y \mathbf{A} no lo es, por lo que la iteración directa es más simple. Sin embargo, un paso típico de la iteración inversa requiere aproximadamente el mismo número de operaciones que un paso de iteración directa. Supóngase que se tienen matrices de orden n y que \mathbf{A} es una matriz de alta densidad (es decir, con pocos coeficientes no significativos). El número de operaciones requeridas para efectuar el producto $\mathbf{A}\mathbf{x}$ es de orden n^2 . Aquí se cuenta como una "operación" la combinación de una multiplicación o división con una suma o resta. También se ha supuesto que n es grande, por lo que n^2 es mucho mayor que n . La división de $\mathbf{A}\mathbf{x}$ entre los coeficientes (de la diagonal principal) de \mathbf{B} requiere un número de operaciones de orden n , que puede despreciarse. Es interesante observar que si previamente se realizó (una sola vez) la factorización $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$, la solución del sistema de ecuaciones $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ requiere también un número de operaciones de orden n^2 , mientras que el producto $\mathbf{B}\mathbf{x}$ demanda sólo n operaciones. Por otro lado, si la matriz \mathbf{A} es de baja densidad y tiene un ancho de semibanda promedio m , tanto un producto de la forma $\mathbf{A}\mathbf{x}$ como la solución de las ecuaciones $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ requieren aproximadamente mn operaciones.

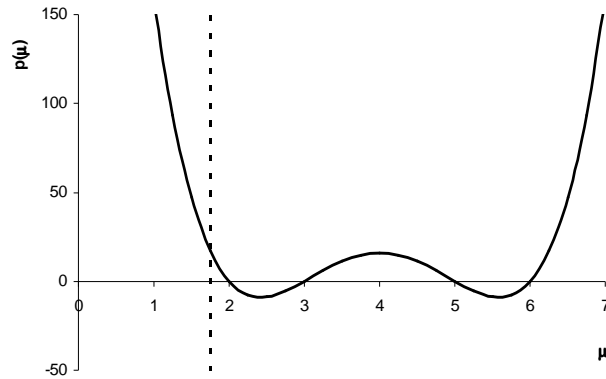
3.2.3 Traslación

La velocidad de convergencia de la iteración inversa depende de las razones $1/\lambda_i$. Si $\lambda_2 \approx \lambda_1$ la convergencia es lenta; siendo en cambio muy rápida si $\lambda_1 \ll \lambda_2$. La convergencia puede acelerarse mediante una "traslación" $\mu \approx \lambda_1$:

$$\mathbf{A} \boldsymbol{\phi} = \lambda \mathbf{B} \boldsymbol{\phi} \quad (3.21a)$$

$$(\mathbf{A} - \mu \mathbf{B}) \boldsymbol{\phi} = (\lambda - \mu) \mathbf{B} \boldsymbol{\phi} \quad (3.21b)$$

Nótese que el nuevo sistema (3.21b) tiene los mismos vectores característicos que el sistema original (3.21a) y valores característicos $\lambda_i - \mu$. Desde el punto de vista del polinomio característico, se ha trasladado el origen:



Si $\mu \approx \lambda_1$ puede lograrse que: $|\lambda_1 - \mu| \gg |\lambda_2 - \mu|$ y por tanto: $\left| \frac{1}{\lambda_1 - \mu} \right| \ll \left| \frac{1}{\lambda_2 - \mu} \right|$, con lo que la convergencia mejora en forma apreciable.

Para el ejemplo anterior, efectuando una traslación $\mu = 0.154$ se tiene:

$$\mathbf{A} - 0.154 \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 4.846 & -2 & 0 \\ -2 & 2.692 & -1 \\ 0 & -1 & 0.538 \end{pmatrix}$$

y por iteración inversa:

k	\mathbf{x}_k	\mathbf{Bx}_k	$\bar{\mathbf{x}}_{k+1}$	r_{k+1}	$\rho(\mathbf{x}_{k+1})$
0	0.00000	0.00000	692.29	3129.01	
	1.00000	2.00000	1677.41		
	2.00000	6.00000	3129.01		0.000624
1	0.22125	0.22125	354.79	1603.26	
	0.53608	1.07216	859.55		
	1.00000	3.00000	1603.26		0.000624
2	0.22130	0.22130	354.80	1603.29	
	0.53613	1.07226	859.57		
	1.00000	3.00000	1603.29		0.000624

Se obtienen: $\lambda_1 = 0.154 + 0.000624 = 0.154624$ y $\boldsymbol{\phi}_1 = \begin{Bmatrix} 0.22129 \\ 0.53613 \\ 1.00000 \end{Bmatrix}$.

El siguiente algoritmo usa el cociente de Rayleigh para efectuar la traslación. Iniciando el proceso con $\mathbf{y}_0 = \mathbf{Bx}_0$ y $\mu_0 = 0$:

$$(\mathbf{A} - \mu_k \mathbf{B}) \bar{\mathbf{x}}_{k+1} = \mathbf{y}_k$$

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{y}}_{k+1} &= \mathbf{B} \bar{\mathbf{x}}_{k+1} \\ \mu_{k+1} &= \mu_k + \frac{\bar{\mathbf{x}}_{k+1}^T \mathbf{y}_k}{\bar{\mathbf{x}}_{k+1}^T \bar{\mathbf{y}}_{k+1}} \\ \mathbf{y}_{k+1} &= \left(\bar{\mathbf{x}}_{k+1}^T \bar{\mathbf{y}}_{k+1} \right)^{-\frac{1}{2}} \bar{\mathbf{y}}_{k+1}\end{aligned}\tag{3.22}$$

En relación con las expresiones precedentes:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{y}_k = \mathbf{B} \phi_1 \tag{3.23a}$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mu_k = \lambda_1 \tag{3.23b}$$

La convergencia es cúbica.

3.2.4 Determinación de Otros Vectores Característicos

En los párrafos precedentes se ha visto cómo mediante iteración directa o inversa pueden obtenerse ϕ_n o ϕ_1 respectivamente. Podría determinarse un valor característico intermedio y su vector asociado por iteración inversa con una traslación adecuada; sin embargo, esto requeriría un procedimiento previo para definir la traslación.

En lo que sigue se describe la determinación de sucesivos vectores característicos aprovechando las condiciones de ortogonalidad para el caso en que las matrices \mathbf{A} y \mathbf{B} son simétricas. La idea básica consiste en iterar con vectores ortogonales a los previamente obtenidos. Desafortunadamente, el proceso acumula los errores de los vectores previos y cada nuevo vector se determina siempre con menos precisión que el anterior. En la práctica se observa que se pierde una cifra significativa por cada nuevo vector; por tanto, no es factible determinar por este método más de unos 10 vectores característicos. En algunas aplicaciones esto puede no ser suficiente.

A partir de un vector arbitrario:

$$\mathbf{v} = \alpha_1 \phi_1 + \alpha_2 \phi_2 + \alpha_3 \phi_3 + \dots + \alpha_n \phi_n \tag{3.24a}$$

puede obtenerse un vector ortogonal a los vectores característicos ya conocidos haciendo uso de las relaciones de ortogonalidad:

$$\begin{aligned}\phi_i^T \mathbf{B} \mathbf{v} &= \alpha_1 \phi_i^T \mathbf{B} \phi_1 + \alpha_2 \phi_i^T \mathbf{B} \phi_2 + \dots + \alpha_n \phi_i^T \mathbf{B} \phi_n \\ \phi_i^T \mathbf{B} \mathbf{v} &= \alpha_i \phi_i^T \mathbf{B} \phi_i\end{aligned}\tag{3.24b}$$

es decir:

$$\alpha_i = (\phi_i^T \mathbf{B} \mathbf{v}) / (\phi_i^T \mathbf{B} \phi_i) \tag{3.24c}$$

Luego es suficiente restar de \mathbf{v} los $\alpha_i \phi_i$ para obtener un vector que (salvo por la imprecisión en la aritmética no tiene componentes según los vectores característicos previamente hallados.

Para el ejemplo antes tratado, suponiendo que se haya obtenido el primer vector característico:

$$\phi_1 = \begin{Bmatrix} 0.221295029 \\ 0.536128843 \\ 1.000000000 \end{Bmatrix}$$

y considerando $\mathbf{v} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix}$ se obtiene $\alpha_1 = 0.295889928$, de donde:

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{v} - \alpha_1 \phi_1 = \begin{Bmatrix} -0.06548 \\ 0.84136 \\ -0.29589 \end{Bmatrix}$$

es un vector ortogonal a ϕ_1 . Si se hace una iteración inversa con \mathbf{x}_0 se obtiene (suponiendo que se operara con una aritmética infinitamente precisa) el vector característico ϕ_2 :

k	\mathbf{x}_k	$\mathbf{B}\mathbf{x}_k$	$\bar{\mathbf{x}}_{k+1}$	r_{k+1}	$\rho(\mathbf{x}_{k+1})$
0	-0.06548	-0.06548	0.24319	0.64072	1.20534
	0.84136	1.68272	0.64072		
	-0.29589	-0.88767	-0.24696		
1	0.37956	0.37956	0.40775	0.82960	1.17649
	1.00000	2.00000	0.82960		
	-0.38544	-1.15631	-0.32671		
2	0.49150	0.49150	0.43668	0.84594	1.17517
	1.00000	2.00000	0.84594		
	-0.39382	-1.18147	-0.33553		
3	0.51620	0.51620	0.44210	0.84715	1.17504
	1.00000	2.00000	0.84715		
	-0.39663	-1.18990	-0.34275		
4	0.52187	0.52187	0.43603	0.82913	1.17113
	1.00000	2.00000	0.82913		
	-0.40460	-1.21379	-0.38466		

Es importante hacer notar que, como consecuencia de los errores de redondeo se introducen en las aproximaciones \mathbf{x}_j componentes según los vectores característicos originalmente eliminados.. En los resultados precedentes se tienen las siguientes componentes según ϕ_1 :

k	α_1
0	-1.565×10^{-6}
1	-1.580×10^{-5}
2	-0.000123
3	-0.000941
4	-0.007188
5	-0.056063

Como estas componentes tienden a crecer más rápidamente que la propia solución, es necesario eliminarlas cada 4 ó 5 pasos, utilizando el mismo proceso inicial:

$$\mathbf{x}_j = \mathbf{v} - \sum_{i=1}^{j-1} \alpha_i \phi_i \quad (3.25)$$

Para el caso del ejemplo:

$$\mathbf{x}_0 = \begin{Bmatrix} 0.52588 \\ 1.00000 \\ -0.46393 \end{Bmatrix} - (-0.056093) \begin{Bmatrix} 0.221295029 \\ 0.536128843 \\ 1.000000000 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0.53829 \\ 1.03006 \\ -0.40787 \end{Bmatrix}$$

y luego de escalar este vector:

k	\mathbf{x}_k	$\mathbf{B}\mathbf{x}_k$	$\bar{\mathbf{x}}_{k+1}$	r_{k+1}	$\rho(\mathbf{x}_{k+1})$
5	0.52258	0.52258	0.44489	0.85094	1.17511
	1.00000	2.00000	0.85094		
	-0.39597	-1.18790	-0.33696		
6	0.52282	0.52282	0.44496	0.85098	1.17511
	1.00000	2.00000	0.85098		
	-0.39599	-1.18796	-0.33698		
7	0.52288				
	1.00000				
	-0.39599				

se obtienen: $\lambda_2 = \frac{1}{0.85098} = 1.17511$ y $\phi_2 = \begin{Bmatrix} 0.52288 \\ 1.00000 \\ -0.39599 \end{Bmatrix}$

3.2.5 Deflación

Otra alternativa es hacer una *deflación*, obteniendo un nuevo sistema $\tilde{\mathbf{A}}\phi = \lambda\tilde{\mathbf{B}}\phi$, de orden menor, con los mismos valores característicos del problema original, excepto los previamente determinados. En lo que sigue se aplica esta idea a un problema de la forma clásica $\mathbf{H}\phi = \lambda\phi$.

Considérese una matriz ortogonal, \mathbf{P} , cuya última columna es igual al vector característico ϕ_1 previamente determinado:

$$\mathbf{P} = (\mathbf{p}_1 \quad \mathbf{p}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{p}_{n-1} \quad | \quad \phi_1) \quad (3.26)$$

Al hacer el cambio de variable $\phi = \mathbf{P}\mathbf{z}$ se obtiene $\mathbf{H}\mathbf{P}\mathbf{z} = \lambda\mathbf{P}\mathbf{z}$ y premultiplicando por \mathbf{P}^T : $(\mathbf{P}^T\mathbf{H}\mathbf{P})\mathbf{z} = \lambda\mathbf{z}$. Sin embargo, al ser la última columna de \mathbf{P} igual a ϕ_1 y suponiendo que ese vector haya sido normalizado de modo que $\phi_1^T\phi_1 = 1$ se tiene:

$$\mathbf{P}^T\mathbf{H}\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{H}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \lambda_1 \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

Esta matriz tiene los mismos valores característicos que la matriz original, \mathbf{H} . Lo mismo se puede decir de $\tilde{\mathbf{H}}$, excepto por λ_1 .

Hay múltiples posibilidades para formar \mathbf{P} . En el proceso propuesto por Rutishauser se hacen las operaciones equivalentes a trabajar con $\mathbf{P} = \mathbf{J}_1\mathbf{J}_2\cdots\mathbf{J}_{n-1}$, donde:

$$\mathbf{J}_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & c_k & s_k & & \\ & & -s_k & c_k & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \text{fila } k \\ \text{fila } k+1 \\ \text{columna } k \\ \text{columna } k+1 \end{matrix} \quad (3.28a)$$

Nótese que $\mathbf{P}^T \mathbf{H} \mathbf{P} = \mathbf{J}_{n-1}^T \cdots \mathbf{J}_2^T (\mathbf{J}_1^T \mathbf{H} \mathbf{J}_1) \mathbf{J}_2 \cdots \mathbf{J}_{n-1}$, pudiéndose evaluar fácilmente los sucesivos productos, ya que en cada caso sólo se alteran dos filas y dos columnas.

Los coeficientes c_k y s_k se determinan a partir de las componentes $x_1 x_2 x_3 \cdots$ del vector característico previamente hallado, ϕ_1 . Definiendo:

$$q_k^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + \cdots + x_k^2 \quad (3.28b)$$

se tiene:

$$\begin{aligned} s_k &= \frac{q_k}{q_{k+1}} \\ c_k &= \frac{x_{k+1}}{q_{k+1}} \end{aligned} \quad (3.28c)$$

Para el ejemplo considerado anteriormente, sería necesario primero convertir el problema a la forma clásica. Al ser \mathbf{B} diagonal:

$$\mathbf{H} = \mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{A} \mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 5 & -1.414214 & 0 \\ -1.414214 & 1.5 & -0.408248 \\ 0 & -0.408248 & 0.333333 \end{pmatrix}$$

Y para $\mathbf{H}\phi = \lambda\phi$ pueden obtenerse (por iteración inversa):

Para $\mathbf{H}\phi = \lambda\phi$ pueden obtenerse (por iteración inversa):

$$\phi_1 = \begin{Bmatrix} 0.11625 \\ 0.39827 \\ 0.90987 \end{Bmatrix}$$

Luego:

$$\begin{aligned} q_1 &= 0.11625 & s_1 &= 0.28019 & c_1 &= 0.95994 \\ q_2 &= 0.41489 & s_2 &= 0.41489 & c_2 &= 0.90987 \\ q_3 &= 1.00000 \end{aligned}$$

Con el propósito de observar que, efectivamente, la última columna de \mathbf{P} es igual a ϕ_1 se está evaluando aquí la referida matriz:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0.95994 & 0.28019 & 0 \\ -0.28019 & 0.95994 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.90987 & -0.41489 \\ 0 & 0.414898 & 0.90987 \end{pmatrix}$$

es decir:

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0.95994 & 0.25494 & 0.11625 \\ -0.28019 & 0.87342 & 0.39827 \\ 0 & -0.41489 & 0.90987 \end{pmatrix}$$

de donde:

$$\mathbf{P}^T \mathbf{H} \mathbf{P} = \begin{pmatrix} 5.48594 & -0.27561 & 0 \\ -0.27561 & 1.19271 & 0 \\ 0 & 0 & 0.15462 \end{pmatrix}$$

Nótese el λ_1 en la esquina inferior derecha. Los valores característicos de $\tilde{\mathbf{H}} = \begin{pmatrix} 5.48594 & -0.27561 \\ -0.27561 & 1.19271 \end{pmatrix}$ son $\lambda_2 = 1.1751$ y $\lambda_3 = 5.5036$, es decir, iguales a los restantes valores característicos del problema original. Los correspondientes vectores resultan:

$$\mathbf{z}_2 = \begin{Bmatrix} 0.0638 \\ 0.9980 \end{Bmatrix} \text{ y } \mathbf{z}_3 = \begin{Bmatrix} 0.9980 \\ -0.0638 \end{Bmatrix}$$

de donde:

$$\phi_k = \mathbf{B}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{P} \begin{Bmatrix} \mathbf{z}_k \\ 0 \end{Bmatrix}$$

El factor $\mathbf{B}^{-\frac{1}{2}}$ se requiere para obtener los vectores del problema general en su forma original.

3.3 Métodos de Transformación

Los métodos de este grupo son eficientes sólo si se requieren todos o una alta proporción de los valores y vectores característicos. La idea básica de estos procesos consiste en hacer un cambio de variables:

$$\phi = \mathbf{P} \mathbf{z} \tag{3.29a}$$

para transformar $\mathbf{A} \phi = \lambda \mathbf{B} \phi$ en:

$$(\mathbf{P}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{P}) \mathbf{z} = \lambda (\mathbf{P}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{P}) \mathbf{z} \tag{3.29b}$$

Este sistema tiene los mismos valores característicos que el sistema original y vectores propios relacionados por (3.29a). Si las transformaciones son tales que las nuevas matrices tienen valores y vectores característicos fáciles de determinar, se ha resuelto indirectamente el problema original.

3.3.1 Método de Jacobi

El método de Jacobi (1846) puede considerarse como prototipo de los métodos de transformación. En este procedimiento se transforma el problema original a uno de la forma:

$$\begin{pmatrix} a_1 & & & \\ & a_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_n \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{Bmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} b_1 & & & \\ & b_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & b_n \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{Bmatrix} \tag{3.30}$$

que tiene como vectores característicos las columnas de la matriz identidad y como valores característicos los $\lambda_i = a_i/b_i$. Los valores característicos del sistema original son los mismos. \mathbf{P} es en este caso una matriz ortogonal:

$$\mathbf{P}^{-1} = \mathbf{P}^T \quad (3.31)$$

cuyas columnas son la propia solución buscada. Ésta se determina mediante un proceso iterativo que se describe a continuación.

En la forma que aquí se presenta, este método se aplica a problemas de la forma clásica, $\mathbf{A} \boldsymbol{\phi} = \lambda \boldsymbol{\phi}$, siendo \mathbf{A} una matriz simétrica (real). Más adelante se consideran las modificaciones requeridas para problemas de la forma general.

Empezando con $\mathbf{A}^{(0)} = \mathbf{A}$ y llamando $\boldsymbol{\phi}^{(0)}$ a los vectores característicos del problema original, el paso k del proceso se define como:

$$\boldsymbol{\phi}^{(k)} = \mathbf{P}_k \boldsymbol{\phi}^{(k+1)} \quad (3.32a)$$

$$\mathbf{A}^{(k)} (\mathbf{P}_k \boldsymbol{\phi}^{(k+1)}) = \lambda (\mathbf{P}_k \boldsymbol{\phi}^{(k+1)})$$

y si \mathbf{P} es una matriz ortogonal, premultiplicando por \mathbf{P}^T se obtiene:

$$(\mathbf{P}_k^T \mathbf{A}^{(k)} \mathbf{P}_k) \boldsymbol{\phi}^{(k+1)} = \lambda \boldsymbol{\phi}^{(k+1)}$$

Lo que equivale a considerar un problema similar al original:

$$\mathbf{A}^{(k+1)} \boldsymbol{\phi}^{(k+1)} = \lambda \boldsymbol{\phi}^{(k+1)} \quad (3.32b)$$

Siendo:

$$\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{P}_k^T \mathbf{A}^{(k)} \mathbf{P}_k \quad (3.32c)$$

Nótese que se mantiene la simetría de la matriz. Los valores característicos de esta nueva matriz son los mismos de la matriz original; los correspondientes vectores se relacionan por expresiones de la forma (3.32a).

En el método de Jacobi las matrices \mathbf{P}_k corresponden a una rotación plana:

$$\mathbf{P}_k = \begin{pmatrix} & \text{col } i & \text{col } j & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ \text{fila } i & & \cos \theta_k & -\text{sen } \theta_k & & \\ \text{fila } j & & \text{sen } \theta_k & \cos \theta_k & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} \quad (3.33)$$

El objetivo de un paso es hacer cero un coeficiente $a_{ij} = a_{ji}$. Puede verificarse fácilmente que:

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ji}^{(k+1)} = (a_{ij}^{(k)} - a_{ii}^{(k)}) \cos \theta_k \text{sen } \theta_k + a_{ij}^{(k)} (\cos^2 \theta_k - \text{sen}^2 \theta_k) = 0 \quad (3.34a)$$

y por tanto:

$$\text{tg } 2\theta_k = \frac{2 a_{ij}^{(k)}}{a_{ii}^{(k)} - a_{jj}^{(k)}} \quad 0 \leq \theta_k \leq \frac{\pi}{4} \quad (3.34b)$$

Sólo los elementos de dos filas y de dos columnas (i, j) se alteran en cada paso.

Además, como se mantiene la simetría de la matriz \mathbf{A} sólo deben calcularse los

coeficientes de la submatriz triangular superior (o inferior) de $\mathbf{A}^{(k+1)}$. Con la notación $c = \cos \theta_k$; $s = \sin \theta_k$:

$$\begin{aligned} a_{ii}^{(k+1)} &= a_{ii}^{(k)} c^2 + 2a_{ij}^{(k)} cs + a_{jj}^{(k)} s^2 \\ a_{jj}^{(k+1)} &= a_{jj}^{(k)} s^2 - 2a_{ij}^{(k)} cs + a_{ii}^{(k)} c^2 \end{aligned} \quad (3.35a)$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ji}^{(k+1)} = (a_{ij}^{(k)} - a_{ii}^{(k)})cs + a_{ij}^{(k)}(c^2 - s^2) = 0$$

$$a_{ir}^{(k+1)} = a_{ri}^{(k+1)} = a_{ir}^{(k)}c + a_{jr}^{(k)}s \quad (3.35b)$$

$$a_{jr}^{(k+1)} = a_{rj}^{(k+1)} = -a_{ir}^{(k)}s + a_{jr}^{(k)}c$$

En un cierto paso se hacen cero los elementos a_{ij} y a_{ji} . Sin embargo, las sucesivas rotaciones reintroducen valores significativos en estas posiciones, por lo que es necesario repetir el proceso en varios "ciclos" para todos los elementos de fuera de la diagonal principal. El proceso es convergente. Si en un ciclo dado los cocientes

$$\gamma_{ij} = \frac{[a_{ij}^{(k)}]^2}{a_{ii}^{(k)} a_{jj}^{(k)}} \quad (3.36)$$

son de orden ϵ , éstos se reducen a orden ϵ^2 en el siguiente ciclo.

El número de ciclos completos necesarios para que la matriz \mathbf{A} sea suficientemente aproximada a una matriz diagonal depende del orden de la matriz. Para matrices de orden 50 ó 60 pueden ser necesarios 8 a 10 ciclos. Cada ciclo demanda $O(2n^3)$ operaciones.

Desde un punto de vista teórico sería más eficiente hacer cero los elementos a_{ij} en orden decreciente de los γ_{ij} , definidos por (3.36), pero las comparaciones necesarias son relativamente lentas. Por eso se prefiere seguir un orden fijo en la selección de los elementos y efectuar las rotaciones sólo si γ_{ij} es mayor que una tolerancia, variable en función del número de ciclo, m (por ejemplo 10^{-2m}). La convergencia del proceso se puede verificar con una medida similar.

Para determinar los vectores característicos es suficiente efectuar el producto de las matrices \mathbf{P}_k ya que:

$$\phi^{(k)} = \mathbf{P}_k \phi^{(k+1)} \quad (3.37a)$$

y por lo tanto:

$$\phi = \phi^{(0)} = \mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_3 \dots \mathbf{P}_m \quad (3.37b)$$

Para ilustrar el método de Jacobi considérese el problema $\mathbf{A} \phi = \lambda \phi$ con:

$$\mathbf{A}^{(0)} = \begin{pmatrix} 2 & -3 & 1 & 0 \\ -3 & 6 & -3 & 1 \\ 1 & -3 & 6 & -3 \\ 0 & 1 & -3 & 4 \end{pmatrix}$$

En el primer paso se hacen cero los coeficientes a_{12} y a_{21} . En las expresiones precedentes:

$$a_{11}^{(0)} = 2 \quad a_{22}^{(0)} = 6 \quad a_{12}^{(0)} = a_{21}^{(0)} = -3$$

$$\operatorname{tg}(2\theta) = \frac{2(-3)}{2-6} = 1.5 \Rightarrow \cos \theta = 0.881675 \quad \operatorname{sen} \theta = 0.471858$$

$$\mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} 0.881675 & -0.471858 & 0 & 0 \\ 0.471858 & 0.881675 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{P}_1^T \mathbf{A}^{(0)} \mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} 0.394449 & 0 & -0.533899 & 0.471858 \\ 0 & 7.60555 & -3.11688 & 0.881675 \\ -0.533899 & -3.11688 & 6 & -3 \\ 0.471858 & 0.881675 & -3 & 4 \end{pmatrix}$$

Luego se hacen cero los coeficientes a_{31} :

$$a_{11}^{(1)} = 0.394449 \quad a_{33}^{(1)} = 6 \quad a_{13}^{(1)} = a_{31}^{(1)} = -0.533899$$

$$\cos \theta = 0.995574 \quad \operatorname{sen} \theta = 0.093978$$

$$\mathbf{P}_2 = \begin{pmatrix} 0.995574 & 0 & -0.0939783 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0.0939783 & 0 & 0.995574 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{P}_2^T \mathbf{A}^{(1)} \mathbf{P}_2 = \begin{pmatrix} 0.344051 & -0.292919 & 0 & 0.187835 \\ -0.292919 & 7.60555 & -3.10309 & 0.881675 \\ 0 & -3.10309 & 6.0504 & -3.03107 \\ 0.187835 & 0.881675 & -3.03107 & 4 \end{pmatrix}$$

Nótese que se tienen nuevamente valores significativos en las posiciones 12 y 21. Por otro lado:

$$\mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 = \begin{pmatrix} 0.877773 & -0.471858 & -0.0828582 & 0 \\ 0.469770 & 0.881675 & -0.0443444 & 0 \\ 0.0939783 & 0 & 0.995574 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Procediendo en forma similar:

$$a_{22}^{(2)} = 7.60555 \quad a_{33}^{(2)} = 6.0504 \quad a_{23}^{(2)} = a_{32}^{(2)} = -3.10309$$

$$\cos \theta = 0.788374 \quad \operatorname{sen} \theta = 0.615196$$

$$\mathbf{A}^{(3)} = \mathbf{P}_3^T \mathbf{A}^{(2)} \mathbf{P}_3 = \begin{pmatrix} 0.344051 & -0.23093 & -0.180203 & 0.187835 \\ -0.23093 & 10.027 & 0 & 2.55979 \\ -0.180203 & 0 & 3.62895 & -1.84721 \\ 0.187835 & 2.55979 & -1.84721 & 4 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2\mathbf{P}_3 = \begin{pmatrix} 0.877773 & -0.321026 & -0.355609 & 0 \\ 0.46977 & 0.72237 & 0.507443 & 0 \\ 0.0939783 & -0.612474 & 0.784885 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$a_{11}^{(3)} = 0.344051 \quad a_{44}^{(3)} = 4 \quad a_{14}^{(3)} = a_{41}^{(3)} = 0.187835$$

$$\cos \theta = 0.99869 \quad \text{sen } \theta = 0.0511758$$

$$\mathbf{A}^{(4)} = \mathbf{P}_4^T \mathbf{A}^{(3)} \mathbf{P}_4 = \begin{pmatrix} 0.334426 & -0.361627 & -0.0854342 & 0 \\ -0.361627 & 10.027 & 0 & 2.54462 \\ -0.0854342 & 0 & 3.62895 & -1.85401 \\ 0 & 2.54462 & -1.85401 & 4.00963 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2\mathbf{P}_3\mathbf{P}_4 = \begin{pmatrix} 0.876622 & -0.321026 & -0.355609 & 0.0449207 \\ 0.469154 & 0.722370 & 0.507443 & 0.0240408 \\ 0.0938551 & -0.612474 & 0.784885 & 0.00480941 \\ -0.0511758 & 0 & 0 & 0.99869 \end{pmatrix}$$

$$a_{22}^{(4)} = 10.027 \quad a_{44}^{(4)} = 4.00963 \quad a_{24}^{(4)} = a_{42}^{(4)} = 2.54462$$

$$\cos \theta = 0.939025 \quad \text{sen } \theta = -0.343849$$

$$\mathbf{A}^{(5)} = \mathbf{P}_5^T \mathbf{A}^{(4)} \mathbf{P}_5 = \begin{pmatrix} 0.334426 & -0.339576 & -0.0854342 & 0.124345 \\ -0.339576 & 10.9588 & -0.6375 & 0 \\ -0.0854342 & -0.6375 & 3.62895 & -1.74096 \\ 0.124345 & 0 & -1.74096 & 3.07785 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2\mathbf{P}_3\mathbf{P}_4\mathbf{P}_5 = \begin{pmatrix} 0.876622 & -0.286006 & -0.355609 & 0.152566 \\ 0.469154 & 0.686590 & 0.507443 & -0.225811 \\ 0.0938551 & -0.573474 & 0.784885 & 0.215115 \\ -0.0511758 & 0.343398 & 0 & 0.937795 \end{pmatrix}$$

$$a_{33}^{(5)} = 3.62895 \quad a_{44}^{(5)} = 3.07785 \quad a_{34}^{(5)} = a_{43}^{(5)} = -1.74096$$

$$\cos \theta = 0.760371 \quad \text{sen } \theta = 0.649489$$

$$\mathbf{A}^{(6)} = \mathbf{P}_6^T \mathbf{A}^{(5)} \mathbf{P}_6 = \begin{pmatrix} 0.334426 & -0.339576 & -0.145722 & 0.0390598 \\ -0.339576 & 10.9588 & -0.484737 & -0.414049 \\ -0.145722 & -0.484737 & 5.11603 & 0 \\ 0.0390598 & -0.414049 & 0 & 1.59076 \end{pmatrix}$$

$$\Phi \approx \mathbf{P}_1\mathbf{P}_2\mathbf{P}_3\mathbf{P}_4\mathbf{P}_5\mathbf{P}_6 = \begin{pmatrix} 0.876622 & -0.286006 & -0.369485 & -0.114957 \\ 0.469154 & 0.686590 & 0.532507 & 0.157878 \\ 0.0938551 & -0.573474 & 0.457089 & 0.673341 \\ -0.0511758 & 0.343398 & -0.609087 & 0.713072 \end{pmatrix}$$

con lo que termina un primer "ciclo". Análogamente, al terminar el segundo ciclo:

$$\mathbf{A}^{(12)} = \begin{pmatrix} 0.317649 & -0.007656 & -0.0006033 & -0.0003418 \\ -0.007656 & 11.0268 & 0.0015155 & 0.0000149 \\ -0.0006033 & 0.0015155 & 5.08272 & 0 \\ -0.0003418 & 0.0000149 & 0 & 1.57279 \end{pmatrix}$$

$$\Phi \approx \mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 \cdots \mathbf{P}_{12} = \begin{pmatrix} 0.856314 & -0.275908 & -0.421440 & -0.11397 \\ 0.505117 & 0.619208 & 0.566580 & 0.201062 \\ 0.0771368 & -0.640155 & 0.399623 & 0.651578 \\ -0.0750522 & 0.361467 & -0.584532 & 0.722518 \end{pmatrix}$$

y al finalizar el tercer ciclo:

$$\mathbf{A}^{(18)} = \begin{pmatrix} 0.317644 & & & \\ & 11.0269 & & \\ & & 5.08272 & \\ & & & 1.57279 \end{pmatrix}$$

No se muestran los coeficientes con valor absoluto menor que 10^{-6} . Los coeficientes de la diagonal de $\mathbf{A}^{(18)}$ son (aproximaciones a) los valores característicos de la matriz \mathbf{A} . Nótese que no se obtienen en orden ascendente o descendente. Las columnas del producto $\mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 \cdots \mathbf{P}_{18}$ son los correspondientes vectores, que se obtienen normalizados: $\Phi^T \Phi = \mathbf{I}$. Esto se comprueba fácilmente, ya que las matrices \mathbf{P}_k son todas ortogonales.

$$\Phi \approx \mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 \cdots \mathbf{P}_{18} = \begin{pmatrix} 0.856032 & -0.276628 & -0.421478 & -0.114202 \\ 0.505686 & 0.618991 & 0.566358 & 0.200923 \\ 0.076907 & -0.640107 & 0.399777 & 0.651558 \\ -0.074671 & 0.361373 & -0.584614 & 0.722537 \end{pmatrix}$$

3.3.2 Caso de Matrices Hermitianas.

El método de Jacobi puede también emplearse para hallar los valores y vectores característicos de una matriz Hermitiana, \mathbf{H} , cuyos coeficientes (en general complejos) tienen simetría conjugada. En este caso se hacen productos de la forma:

$$\mathbf{H}^{(k+1)} = \mathbf{U}_k^* \mathbf{H}^{(k)} \mathbf{U}_k \quad (3.38)$$

en los que \mathbf{U}_k es una matriz unitaria, es decir, tal que $\mathbf{U}_k^{-1} = \mathbf{U}_k^*$ (el superíndice * denota en este caso la conjugada traspuesta). Para hacer cero el coeficiente h_{ij} se utiliza:

$$\mathbf{U}_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \cos \phi & -e^{i\theta} \sin \phi & & \\ & & e^{i\theta} \sin \phi & \cos \phi & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \text{col } i \\ \text{col } j \\ \text{fila } i \\ \text{fila } j \end{matrix} \quad (3.39)$$

Suponiendo que:

$$\begin{aligned}
c_1 &= a_{jj}^{(k)} b_{ij}^{(k)} - b_{jj}^{(k)} a_{ij}^{(k)} \\
c_2 &= a_{ii}^{(k)} b_{ij}^{(k)} - b_{ii}^{(k)} a_{ij}^{(k)} \\
c_3 &= \frac{1}{2} (a_{ii}^{(k)} b_{jj}^{(k)} - b_{ii}^{(k)} a_{jj}^{(k)})
\end{aligned} \tag{3.45a}$$

$$d = c_3 + (\text{signo } c_3) \sqrt{c_3^2 + c_1 c_2}$$

se obtienen:

$$\gamma_k = -\frac{c_2}{d} \quad \alpha_k = \frac{c_1}{d} \tag{3.45b}$$

El radical en la expresión de d es siempre positivo si \mathbf{B} es una matriz definida positiva. Puede observarse que si \mathbf{B} fuera la matriz identidad se obtendrían: $\alpha_k = -\gamma_k = -tg \theta$.

Los comentarios precedentes relativos a la convergencia son también aquí aplicables. El número de operaciones en cada ciclo es de $O(3n^3)$.

El siguiente ejemplo ilustra los aspectos nuevos introducidos en esta sección. Se pretende determinar los valores y vectores característicos del sistema: $\mathbf{A} \phi = \lambda \mathbf{B} \phi$, donde:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Para estas pequeñas matrices con un paso es suficiente:

$$i=1, j=2$$

$$a_{11} = 1 \quad a_{22} = 1 \quad a_{12} = a_{21} = -1$$

$$b_{11} = 2 \quad b_{22} = 2 \quad b_{12} = b_{21} = 1$$

$$c_1 = 3 \quad c_2 = 3 \quad c_3 = 0$$

$$d=3 \quad \alpha = -\gamma_k = 1$$

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{P}_1^T \mathbf{A}^{(0)} \mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{B}^{(1)} = \mathbf{P}_1^T \mathbf{B}^{(0)} \mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 6 \end{pmatrix}$$

de donde:

$$\lambda_2 = 4/2 = 2$$

$$\lambda_1 = 0/6 = 0$$

$$\Phi = \mathbf{P}_1 \text{diag} (b_i^{-1/2}) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 1/\sqrt{6} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.7071 & 0.4082 \\ -0.7071 & 0.4082 \end{pmatrix}$$

La post multiplicación de \mathbf{P}_1 sólo es necesaria para escalar los vectores de modo que $\phi_i^T \mathbf{B} \phi_j = \delta_{ij}$. Al igual que en el procedimiento clásico los valores característicos (y los correspondientes vectores) no quedan necesariamente ordenados.

3.3.4 El Método QR

Este proceso se aplica al problema clásico $\mathbf{A} \phi = \lambda \phi$, donde \mathbf{A} no requiere ser simétrica, pudiendo tener valores característicos cero (o incluso negativos). En el caso

más general, para una matriz \mathbf{A} cualquiera, el método QR es poco eficiente, ya que requiere $O(\frac{4}{3}n^3)$ operaciones por paso. Sin embargo, sólo se requieren $O(4n^2)$ operaciones por paso si \mathbf{A} es de la forma Hessemberg:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} & a_{45} & \\ 0 & 0 & 0 & a_{54} & a_{55} & \\ \dots & & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

es decir si es casi triangular superior, excepto por una codiagonal inferior. Para el caso particular en que la matriz \mathbf{A} es además simétrica (y por lo tanto tridiagonal):

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ b_1 & a_2 & b_2 & & \\ & b_2 & a_3 & b_3 & \\ & & b_3 & a_4 & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

el método QR es aún más eficiente, requiriendo tan solo $O(12n)$ por paso.

En todo caso es siempre posible efectuar la transformación a la forma Hessemberg (tridiagonal si \mathbf{A} y \mathbf{B} son simétricas), requiriéndose un total de $O(\frac{5}{3}n^3)$ operaciones (una sola vez).

Debe anotarse además que, a diferencia del método de Jacobi, el método QR mantiene la posible configuración banda de la matriz y permite efectuar traslaciones (análogas a las de una iteración inversa), tanto para acelerar la convergencia como para mejorar la precisión en los valores característicos de interés. El objetivo del proceso conocido como QR es la determinación de los valores característicos; conocidos estos, los correspondientes vectores pueden obtenerse por iteración inversa con traslación.

Considerando $\mathbf{A}^{(0)} = \mathbf{A}$, el paso básico del método QR consiste en hacer la descomposición:

$$\mathbf{A}^{(k)} = \mathbf{Q}_k \mathbf{R}_k \quad (3.48a)$$

donde \mathbf{Q}_k es una matriz ortogonal (es decir, $\mathbf{Q}_k^T \mathbf{Q}_k = \mathbf{I}$) y \mathbf{R}_k es una matriz triangular superior. Luego se efectúa el producto en orden cambiado:

$$\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{R}_k \mathbf{Q}_k \quad (3.48b)$$

Obsérvese que premultiplicando (3.48a) por \mathbf{Q}_k^T se obtiene:

$$\mathbf{Q}_k^T \mathbf{A}^{(k)} = \mathbf{R}_k \quad (3.48c)$$

y por lo tanto:

$$\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{R}_k \mathbf{Q}_k = \mathbf{Q}_k^T \mathbf{A}^{(k)} \mathbf{Q}_k \quad (3.48d)$$

Nótese que si $\mathbf{A}^{(k)}$ es simétrica $\mathbf{A}^{(k+1)}$ también resulta simétrica. La expresión (3.48d) indica además que $\mathbf{A}^{(k+1)}$ es "similar" a $\mathbf{A}^{(k)}$: sus valores característicos son los mismos, los correspondientes vectores se relacionan por una transformación lineal:

$$\mathbf{A}^{(k)} \boldsymbol{\phi}^{(k)} = \lambda \boldsymbol{\phi}^{(k)} \quad (3.49a)$$

al efectuar el cambio de variables:

$$\boldsymbol{\phi}^{(k)} = \mathbf{Q}_k \boldsymbol{\phi}^{(k+1)} \quad (3.49b)$$

se obtiene:

$$\mathbf{A}^{(k)} \mathbf{Q}_k \boldsymbol{\phi}^{(k+1)} = \lambda \mathbf{Q}_k \boldsymbol{\phi}^{(k+1)} \quad (3.49c)$$

$$\left(\mathbf{Q}_k^T \mathbf{A}^{(k)} \mathbf{Q}_k \right) \boldsymbol{\phi}^{(k+1)} = \lambda \boldsymbol{\phi}^{(k+1)} \quad (3.49d)$$

Ambas matrices tienen los mismos valores característicos (que en consecuencia son los de la matriz original) y vectores característicos relacionados por (3.49b).

A medida que k crece $\mathbf{A}^{(k)}$ converge a una matriz triangular superior (cuyos valores característicos son los elementos de la diagonal principal); para el caso simétrico $\mathbf{A}^{(k)}$ converge a una matriz diagonal. Los valores característicos se obtienen en orden descendente; así la aproximación al valor característico de menor módulo se obtiene en la posición nn de la matriz.

La convergencia del proceso es análoga a la de la iteración inversa. Cuando en pasos sucesivos se obtienen valores similares en el extremo inferior de la diagonal principal, puede afirmarse que se tiene una aproximación al primer valor característico. La convergencia puede acelerarse efectuando traslaciones:

$$\mu_k = a_{nn}^{(k)} \quad (3.50a)$$

$$\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{R}_k \mathbf{Q}_k - \mu_k \mathbf{I} \quad (3.50b)$$

Nótese que los valores característicos de esta nueva matriz son iguales a los de la matriz original menos la translación. Cuando se logra que $a_{nn}^{(k)} = 0$ puede hacerse una translación:

$$\mu_k = a_{n-1,n-1}^{(k)} \quad (3.50c)$$

para mejorar la convergencia al segundo valor característico y análogamente se procede para los otros valores requeridos. Por regla general se requieren sólo 2 pasos por cada valor característico adicional. Al finalizar el proceso debe agregarse a los valores $\hat{\lambda}$ obtenidos la suma de las traslaciones μ_k efectuadas.

Los vectores característicos podrían obtenerse con el producto:

$$\boldsymbol{\phi}^{(0)} = \mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_2 \mathbf{Q}_3 \dots \quad (3.51)$$

pero este proceso es poco eficiente, siendo más conveniente obtener estos vectores por iteraciones inversas con traslaciones iguales a los valores característicos ya determinados. Esto permite también mejorar la precisión en los $\hat{\lambda}$.

La determinación de \mathbf{Q} y \mathbf{R} en un paso puede hacerse en diversas formas. El proceso más eficiente consiste en transformar \mathbf{A} en una matriz triangular superior utilizando matrices de rotación plana (como en el método de Jacobi):

$$a_{22}^{(0)} = 3.130494 \quad a_{32}^{(0)} = 1 \quad d = 3.286335$$

$$\cos \theta = 0.952579 \quad \text{sen } \theta = 0.304290$$

$$\mathbf{P}_{32} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & .952579 & -.304290 \\ 0 & .304290 & .952579 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{R}_1 = \mathbf{P}_{32}^T \mathbf{P}_{21}^T \mathbf{A}^{(0)} = \begin{pmatrix} 2.236068 & 2.683281 & 0.447214 \\ 0 & 3.286332 & 1.460532 \\ 0 & 0 & 1.632993 \end{pmatrix}$$

Y se completa el primer paso efectuando el producto:

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{R}_1 \mathbf{Q}_1 = \mathbf{R}_1 \mathbf{P}_{21} \mathbf{P}_{32} = \begin{pmatrix} 3.200000 & 1.469694 & 0 \\ 1.469694 & 3.244444 & .496904 \\ 0 & .496904 & 1.555556 \end{pmatrix}$$

Análogamente, en el segundo paso:

$$\mathbf{P}_{21} = \begin{pmatrix} .908739 & -.417365 & 0 \\ .417365 & .908739 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{P}_{32} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & .978097 & -.208150 \\ 0 & .208150 & .978097 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{R}_2 = \mathbf{P}_{32}^T \mathbf{P}_{21}^T \mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} 3.521363 & 2.689686 & \dots \\ 0 & 2.387242 & .765454 \\ 0 & 0 & 1.427490 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{R}_2 \mathbf{Q}_2 = \mathbf{R}_2 \mathbf{P}_{21} \mathbf{P}_{32} = \begin{pmatrix} 4.322580 & .996351 & 0 \\ .996351 & 2.281193 & .297132 \\ 0 & .297132 & 1.396226 \end{pmatrix}$$

Y en el tercer paso:

$$\mathbf{P}_{21} = \begin{pmatrix} .974449 & -.224610 & 0 \\ .224610 & .974449 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{P}_{32} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & .989134 & -.147017 \\ 0 & .147017 & .989134 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{R}_3 = \mathbf{P}_{32}^T \mathbf{P}_{21}^T \mathbf{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} 4.435924 & 1.483271 & .066739 \\ 0 & 2.021076 & .491663 \\ 0 & 0 & 1.33850 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(3)} = \mathbf{R}_3 \mathbf{Q}_3 = \mathbf{R}_3 \mathbf{P}_{21} \mathbf{P}_{32} = \begin{pmatrix} 4.655737 & .453953 & 0 \\ .453953 & 2.020318 & .196780 \\ 0 & .196780 & 1.323944 \end{pmatrix}$$

Suponiendo que el coeficiente $a_{33}^{(3)} = 1.323944$ sea una buena aproximación al primer valor característico, se efectúa una traslación:

$$\mathbf{A}^{(3)} - 1.323944 \mathbf{I} = \begin{pmatrix} 3.331794 & .453953 & 0 \\ .453953 & .696375 & .196780 \\ 0 & .196780 & 0 \end{pmatrix}$$

obteniéndose en el cuarto paso:

$$\mathbf{A}^{(4)} = \begin{pmatrix} 3.405209 & .088938 & 0 \\ .088938 & .678541 & -.017396 \\ 0 & -.017396 & -.055581 \end{pmatrix}$$

Se hace entonces una nueva traslación:

$$\mu_4 = -.055581 \Rightarrow \mu = \sum \mu_k = 1.268362$$

obteniéndose:

$$\mathbf{A}^{(5)} = \begin{pmatrix} 3.463559 & .018800 & 0 \\ .018800 & .731767 & .000010 \\ 0 & .000010 & -.000413 \end{pmatrix}$$

y nuevamente:

$$\mu_5 = -.000413 \Rightarrow \mu = \sum \mu_k = 1.267949$$

obteniéndose:

$$\mathbf{A}^{(6)} = \begin{pmatrix} 3.464096 & .003973 & 0 \\ .003973 & .732056 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Se observa ahora que el coeficiente a_{33} es menor que 10^{-6} , lo que implica que λ_1 es aproximadamente igual a la suma de las traslaciones previamente realizadas. Conviene luego hacer una traslación igual al resultado obtenido para a_{22} a fin de mejorar la precisión para el segundo valor característico:

$$\mu_6 = .732051 \Rightarrow \mu = \sum \mu_k = 2$$

$$\mathbf{A}^{(6)} - 0.732051 \mathbf{I} = \begin{pmatrix} 2.732050 & .003973 & 0 \\ .003973 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -.732051 \end{pmatrix}$$

Y puede trabajarse con la submatriz de un orden menor:

$$\overline{\mathbf{A}}^{(6)} = \begin{pmatrix} 2.732050 & .003973 \\ .003973 & 0 \end{pmatrix}$$

$$a_{11}^{(6)} = 2.732050 \quad a_{21}^{(6)} = 0.003973 \quad d = 2.732051$$

$$\cos \theta = 1 \quad \text{sen } \theta = 0.000307$$

$$\mathbf{P}_{21} = \mathbf{Q}_7 = \begin{pmatrix} 1.000000 & -.000307 \\ .000307 & 1.000000 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{R}_7 = \mathbf{P}_{21}^T \bar{\mathbf{A}}^{(6)} = \begin{pmatrix} 2.732051 & .000840 \\ 0 & -.000001 \end{pmatrix}$$

$$\bar{\mathbf{A}}^{(7)} = \begin{pmatrix} 2.73205 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Los coeficientes indicados como 0 son menores que 10^{-6} . Los valores característicos de esta matriz son 0 y 2.732051. Para obtener aquellos de la matriz original deben sumarse las traslaciones:

$$\lambda_1 = -0.732051 + 2 = 1.267949$$

$$\lambda_2 = 0 + 2 = 2$$

$$\lambda_3 = 2.732051 + 2 = 4.732051$$

3.3.5. Transformación a la Forma Hessemberg

Si el método QR se aplicara a una matriz cualquiera sería en general poco eficiente, puesto que requiere $O\left(\frac{4}{3}n^3\right)$ operaciones por paso. Para reducir el número de operaciones a $O(4n^2)$ por paso debe previamente transformarse la matriz a la forma "Hessemberg" (es decir, una matriz que es casi triangular superior, teniendo además coeficientes significativos en la primera codiagonal inferior):

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & h_{14} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & h_{24} & \cdots & h_{2n} \\ 0 & h_{32} & h_{33} & h_{34} & \cdots & h_{3n} \\ 0 & 0 & h_{43} & h_{44} & \cdots & h_{4n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{n,n-1} & h_{nn} \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

Si la matriz original fuera simétrica, la transformación a la forma Hessemberg, que puede hacerse conservando la simetría, produce una matriz tridiagonal. En tal caso el QR requiere apenas $12n$ operaciones por paso. Cabe anotar que la forma Hessemberg (tridiagonal para el caso simétrico) no se pierde en los sucesivos pasos del método QR.

La transformación a la forma Hessemberg sólo requiere hacerse una vez. Por lo tanto las $O\left(\frac{5}{3}n^3\right)$ que se gastan en la transformación están plenamente justificadas.

Entre los procedimientos que se encuentran en la literatura para efectuar la transformación, se propone el cambio de variables $\phi = \mathbf{B}\bar{\phi}$, con lo que el problema original $\mathbf{A}\phi = \lambda\phi$ se reescribiría como $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{B}\bar{\phi} = \lambda\bar{\phi}$ o bien $\mathbf{H}\bar{\phi} = \lambda\bar{\phi}$. En este caso $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{H}$ o, lo que es lo mismo, $\mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{B}\mathbf{H}$. En el proceso original de Hessemberg se usa una matriz \mathbf{B} de la forma:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_{32} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_{42} & b_{43} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & & & \\ 0 & b_{n2} & b_{n3} & b_{n4} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \quad (3.55a)$$

con coeficientes arbitrarios en la primera columna (que por simplicidad se ha escrito como la primera columna de la matriz identidad). Los coeficientes de las sucesivas filas de \mathbf{H} y columnas de \mathbf{B} pueden entonces obtenerse con las expresiones:

$$h_{ir} = a_{ir} + \sum_{k=r+1}^n a_{ik} b_{kr} - \sum_{k=1}^r b_{ik} h_{kr} \quad i = 1, 2, \dots, r+1 \quad (3.55b)$$

$$b_{i,r+1} = \frac{1}{h_{r+1,r}} \left(a_{ir} + \sum_{k=r+1}^n a_{ik} b_{kr} - \sum_{k=1}^r b_{ik} h_{kr} \right) \quad i = r+2, \dots, n \quad (3.55c)$$

Este procedimiento podría fallar si en algún paso $h_{r+1,r} = 0$. El proceso podría recomenzarse con una primera columna de \mathbf{B} diferente, lo que en general evitaría el error, aunque esto no puede garantizarse. Por otro lado, el procedimiento antes expuesto no mantiene la posible simetría de la matriz \mathbf{A} .

También puede hacerse la transformación a la forma Hessemberg por rotaciones planas (método de Givens) o reflexiones (Householder). El método de Householder utiliza matrices ortogonales y simétricas, de la forma:

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - 2 \mathbf{w} \mathbf{w}^T \quad (3.56)$$

donde \mathbf{w} es un vector unitario: $\mathbf{w}^T \mathbf{w} = 1$. Es fácil probar que $\mathbf{P} = \mathbf{P}^T = \mathbf{P}^{-1}$.

La matriz \mathbf{P} refleja al espacio en el "plano" que pasa por el origen y es ortogonal a \mathbf{w} . Considérese un vector cualquiera $\mathbf{v} = \alpha_0 \mathbf{w} + \alpha_1 \mathbf{u}$ donde $\mathbf{u}^T \mathbf{w} = 0$. Entonces, $\mathbf{P} \mathbf{v} = (\mathbf{I} - 2 \mathbf{w} \mathbf{w}^T)(\alpha_0 \mathbf{w} + \alpha_1 \mathbf{u}) = -\alpha_0 \mathbf{w} + \alpha_1 \mathbf{u}$. Nótese que la componente según \mathbf{w} ha cambiado de signo, es decir, el vector \mathbf{v} ha sido reflejado en el plano ortogonal a \mathbf{w} .

La transformación de \mathbf{A} en \mathbf{H} mediante el método de Householder requiere $n-2$ pasos (n es aquí el orden del sistema) de la forma:

$$\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{P}_k \mathbf{A}^{(k)} \mathbf{P}_k \quad (3.57a)$$

donde:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_k &= \mathbf{I} - \theta_k \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^T \\ \theta_k &= \frac{2}{\mathbf{w}_k^T \mathbf{w}_k} \\ \mathbf{w}_k &= \mathbf{v}_k + \text{signo}(a_{k+1,k}^{(k)}) |\mathbf{v}_k| \mathbf{e}_{k+1} \end{aligned} \quad (3.57b)$$

siendo:

$$\mathbf{v}_k = \begin{Bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ a_{k+1,k}^{(k)} \\ a_{k+2,k}^{(k)} \\ \vdots \\ a_{nk}^{(k)} \end{Bmatrix} \quad \text{una matriz que contiene los coeficientes de la columna } k \text{ de } \mathbf{A}^{(k)} \text{ que están por debajo de la diagonal principal, y}$$

$$\mathbf{e}_{k+1} = \begin{Bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{Bmatrix} \quad \text{la columna } k+1 \text{ de la matriz identidad (de orden } n \text{).}$$

Para que el proceso sea más eficiente, debe observarse que al premultiplicar \mathbf{A} , cuyas columnas son $\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2 \mathbf{a}_3 \dots$, por la matriz \mathbf{P} , cada columna se modifica en forma independiente. Las columnas de $\overline{\mathbf{A}} = \mathbf{P}\mathbf{A}$ resultan:

$$\overline{\mathbf{a}}_j = (\mathbf{I} - \theta_k \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^T) \mathbf{a}_j = \mathbf{a}_j - \theta_k (\mathbf{w}_k^T \mathbf{a}_j) \mathbf{w}_k \quad (3.58a)$$

Igualmente, al postmultiplicar $\overline{\mathbf{A}}$ por \mathbf{P} las filas se modifican en forma independiente. Llamando ahora $\overline{\mathbf{a}}_i$ a la fila i de la matriz $\overline{\mathbf{A}} = \mathbf{P}\mathbf{A}$, la correspondiente fila de $\overline{\overline{\mathbf{A}}} = \overline{\mathbf{A}}\mathbf{P}$ resulta:

$$\overline{\overline{\mathbf{a}}}_i = \overline{\mathbf{a}}_i (\mathbf{I} - \theta_k \mathbf{w}_k \mathbf{w}_k^T) = \overline{\mathbf{a}}_i - \theta_k (\overline{\mathbf{a}}_i \mathbf{w}_k) \mathbf{w}_k^T \quad (3.58b)$$

Por ejemplo, considérese la matriz:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & 3 & 2 & 1 \\ 3 & 4 & 3 & 2 \\ 2 & 3 & 4 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} = \mathbf{A}^{(1)}$$

Transformación de la primera columna a la forma Hessemberg:

$$\mathbf{v}_1 = \begin{Bmatrix} 0 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad |\mathbf{v}_1| = 3.74166$$

$$\mathbf{w}_1 = \mathbf{v}_1 + |\mathbf{v}_1| \mathbf{e}_2 = \begin{Bmatrix} 0 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{Bmatrix} + 3.74166 \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 6.74166 \\ 2 \\ 1 \end{Bmatrix} \quad \theta_1 = 0.03964$$

$$\theta_1 \mathbf{w}_1^T \mathbf{A}^{(1)} = (1.00000 \quad 1.38619 \quad 1.23786 \quad 0.93096)$$

$$\mathbf{P}_1 \mathbf{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} 4.00000 & 3 & 2 & 1 \\ -3.74166 & -5.34522 & -5.34522 & -4.27618 \\ 0 & 0.22762 & 1.52428 & 1.13809 \\ 0 & 0.61381 & 1.76214 & 3.06904 \end{pmatrix}$$

$$\theta_1 \mathbf{P}_1 \mathbf{A}^{(1)} \mathbf{w}_1 = \begin{pmatrix} 1.00000 \\ -2.02190 \\ 0.22681 \\ 0.42543 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{P}_1 \mathbf{A}^{(1)} \mathbf{P}_1 = \begin{pmatrix} 4.00000 & -3.74166 & 0 & 0 \\ -3.74166 & 8.28571 & -1.30143 & -2.25428 \\ 0 & -1.30143 & 1.07067 & 0.91128 \\ 0 & -2.25428 & 0.91128 & 2.64362 \end{pmatrix}$$

Transformación de la segunda columna a la forma Hessemberg:

$$\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1.30143 \\ -2.25428 \end{pmatrix} \quad |\mathbf{v}_2| = 2.60298$$

$$\mathbf{w}_2 = \mathbf{v}_2 + |\mathbf{v}_2| \mathbf{e}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1.30143 \\ -2.25428 \end{pmatrix} - 2.60298 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -3.90441 \\ -2.25428 \end{pmatrix} \quad \theta_2 = 0.09840$$

$$\theta_2 \mathbf{w}_2^T \mathbf{A}^{(2)} = (0 \quad 1.00000 \quad -0.61346 \quad -0.93647)$$

$$\mathbf{P}_2 \mathbf{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} 4.00000 & -3.74166 & 0 & 0 \\ -3.74166 & 8.28571 & -1.30143 & -2.25428 \\ 0 & 2.60298 & -1.32452 & -2.74510 \\ 0 & 0 & -0.47162 & 0.53254 \end{pmatrix}$$

$$\theta_2 \mathbf{P}_2 \mathbf{A}^{(2)} \mathbf{w}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1.11774 \\ 0.06306 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{A}^{(3)} = \mathbf{P}_2 \mathbf{A}^{(2)} \mathbf{P}_2 = \begin{pmatrix} 4.00000 & -3.74166 & 0 & 0 \\ -3.74166 & 8.28571 & 2.60298 & 0 \\ 0 & 2.60298 & 3.03959 & -0.22540 \\ 0 & 0 & -0.22540 & 0.67470 \end{pmatrix}$$

3.4 Métodos Mixtos

Los dos procesos que se describen en lo que sigue son adecuados para sistemas de orden grande en el caso en que se requieran muchos vectores característicos.

3.4.1 Iteración con la Determinante de $(\mathbf{A} - \mu \mathbf{B})$

Los valores propios de $\mathbf{A}\phi = \lambda \mathbf{B}\phi$ son los ceros del polinomio característico $p(\lambda) = \det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{B}) = 0$. Por ejemplo, si:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 8 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 8 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Las raíces del polinomio:

$$p(\lambda) = \det \begin{pmatrix} 4-\lambda & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 8-2\lambda & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 8-2\lambda & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 4-\lambda \end{pmatrix} \\ = 4\lambda^4 - 64\lambda^3 + 364\lambda^2 - 864\lambda + 720 = 0$$

son los valores característicos. La determinación de los coeficientes del polinomio característico es factible (utilizando, por ejemplo, el método de Hessemberg). Una vez obtenidos los coeficientes del polinomio característico, se requiere determinar los valores de λ para los que $p(\lambda) = 0$. Sin embargo, éste es frecuentemente un problema mal condicionado: pequeños errores en los coeficientes causan grandes errores en las raíces. Por ello, los métodos en los que se hace una determinación explícita del polinomio característico sólo son adecuados para pequeñas matrices.

Para matrices de orden elevado, pero con un ancho de banda comparativamente pequeño, pueden determinarse los valores característicos por iteración, evaluando la determinante de $\mathbf{A} - \mu_k \mathbf{B}$ para una secuencia de valores μ_k que se corrigen con procesos tales como el método de la secante. Así, dadas las aproximaciones μ_{k-1} y μ_k a una raíz y habiéndose calculado $p(\mu_{k-1}) = |\mathbf{A} - \mu_{k-1} \mathbf{B}|$ y $p(\mu_k) = |\mathbf{A} - \mu_k \mathbf{B}|$ se obtiene una mejor aproximación, μ_{k+1} , mediante:

$$\mu_{k+1} = \mu_k - \eta \left(\frac{\mu_k - \mu_{k-1}}{p(\mu_k) - p(\mu_{k-1})} \right) p(\mu_k) \quad 1 \leq \eta \leq 2 \quad (3.59)$$

La evaluación de $p(\mu)$ no requiere tener el polinomio $p(\lambda)$ en forma explícita.

Si $\mathbf{A} - \mu \mathbf{B}$ se descompone en el producto de una matriz triangular inferior, \mathbf{L} , con unos en la diagonal principal, por una matriz triangular superior, \mathbf{U} , se tiene que:

$$p(\mu) = \det(\mathbf{A} - \mu \mathbf{B}) = \det(\mathbf{L}\mathbf{U}) = \det(\mathbf{L}) \det(\mathbf{U}) \quad (3.60a)$$

donde:

$$\det(\mathbf{L}) = l_{11} l_{22} l_{33} l_{44} \cdots = 1 \\ \det(\mathbf{U}) = u_{11} u_{22} u_{33} u_{44} \cdots \quad (3.60b)$$

y por lo tanto: $p(\mu) = u_{11} u_{22} u_{33} u_{44} \cdots u_{nn}$

La descomposición de $\mathbf{A} - \mu\mathbf{B}$ en factores triangulares \mathbf{LU} requiere pocas operaciones si el ancho de banda es pequeño.

Particularmente importante es el caso en el que las matrices \mathbf{A} y \mathbf{B} son simétricas y definidas positivas (todos los valores característicos son reales y positivos). En tal caso puede aplicarse la propiedad de Sturm: el número de coeficientes negativos en la diagonal principal de \mathbf{U} al hacer la descomposición $\mathbf{A} - \mu\mathbf{B} = \mathbf{LU}$ es igual al número de valores característicos menores que μ_k . Esta propiedad, combinada con la iteración (3.59) u otra similar, permite obtener una primera aproximación a una raíz. Sin embargo, el proceso debe combinarse con iteraciones inversas usando el cociente de Rayleigh para refinar los valores obtenidos.

Para las matrices \mathbf{A} y \mathbf{B} antes indicadas, con $\mu = 1.5$:

$$\mathbf{A} - 1.5\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 2.5 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 5 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 5 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2.5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ .800 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & .588 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & .523 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2.5 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3.4 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3.824 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 1.454 \end{pmatrix}$$

$$p(1.5) = 2.5 \cdot 3.4 \cdot 3.824 \cdot 1.454 = 47.25$$

Análogamente se obtienen:

	μ_k	$p(\mu_k)$	Número de coeficientes negativos en la diagonal principal de \mathbf{U}
	1.5	47.25	0
λ_1	2.0	0	0
	2.5	-8.75	1
λ_2	3.0	0	1
	3.5	11.25	2
	4.0	16.00	2
	4.5	11.25	2
λ_3	5.0	0	2
	5.5	-8.75	3
λ_4	6.0	0	3
	6.5	47.25	4

3.4.2 Iteración en Subespacio

El método tratado en la sección precedente es eficiente cuando las matrices tienen ancho de banda relativamente pequeño. Cuando el ancho de banda es grande es más adecuado un proceso de *iteración en subespacio*, como se describe en este acápite. Este método tiene por objeto determinar en forma simultánea los p vectores característicos asociados a los valores característicos de menor módulo. La idea básica es que es mucho más fácil iterar para obtener un subespacio que contenga a estos vectores que iterar para obtener cada uno de ellos por separado.

Se trabaja con una colección de q vectores linealmente independientes ($q > p$). Los q vectores iniciales definen un subespacio que no necesariamente contiene a los p

vectores de interés. Si esos p vectores característicos si estuvieran contenidos en el subespacio, sería suficiente proyectar $\mathbf{A}\boldsymbol{\phi} = \lambda\mathbf{B}\boldsymbol{\phi}$ para obtener el sistema $\overline{\mathbf{A}}\mathbf{z} = \lambda\overline{\mathbf{B}}\mathbf{z}$, de orden $q \ll n$, que sería fácil de resolver por métodos de transformación. Los valores característicos del problema proyectado serían los mismos del problema original, mientras que sus vectores característicos, \mathbf{z} , corresponderían a las proyecciones de los vectores $\boldsymbol{\phi}$ en el subespacio. No siendo éste el caso, se hacen iteraciones inversas para mejorar los q vectores con los que se trabaja, de modo que el subespacio por ellos definido sea más y más "paralelo" a los p vectores propios de interés.

En lo que sigue, se supone que \mathbf{A} y \mathbf{B} son matrices simétricas. Siendo \mathbf{X}_k los q vectores de aproximación, en cada ciclo del proceso se realizan los pasos siguientes:

a. Iteración inversa:

$$\overline{\mathbf{A}}\overline{\mathbf{X}}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{X}_k$$

La matriz \mathbf{A} debe factorizarse antes de iniciar las iteraciones. Los vectores $\overline{\mathbf{X}}_{k+1}$ son más "paralelos" a los primeros p vectores característicos.

b. Proyección de \mathbf{A} y \mathbf{B} en el subespacio definido por los vectores $\overline{\mathbf{X}}_{k+1}$:

$$\mathbf{A}^{(k+1)} = \overline{\mathbf{X}}_{k+1}^T \mathbf{A} \overline{\mathbf{X}}_{k+1}$$

$$\mathbf{B}^{(k+1)} = \overline{\mathbf{X}}_{k+1}^T \mathbf{B} \overline{\mathbf{X}}_{k+1}$$

Las matrices $\mathbf{A}^{(k+1)}$ y $\mathbf{B}^{(k+1)}$ son cuadradas, simétricas, de orden q .

c. Solución del problema de valores y vectores característicos proyectado:

$$\mathbf{A}^{(k+1)} \mathbf{Q}_{k+1} = \mathbf{B}^{(k+1)} \mathbf{Q}_{k+1} \boldsymbol{\Lambda}_{k+1}$$

$\boldsymbol{\Lambda}_{k+1}$ es una matriz diagonal, cuyos coeficientes son los valores característicos del problema proyectado. Si los $\overline{\mathbf{X}}_{k+1}$ definen un subespacio que contiene a los p primeros vectores propios, los p menores valores en $\boldsymbol{\Lambda}_{k+1}$ son parte de la solución buscada.

d. Determinación de nuevos vectores:

$$\mathbf{X}_{k+1} = \overline{\mathbf{X}}_{k+1} \mathbf{Q}_{k+1}$$

Como consecuencia de los pasos c y d:

$$\mathbf{X}_{k+1}^T \mathbf{A} \mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{Q}_{k+1}^T (\overline{\mathbf{X}}_{k+1}^T \mathbf{A} \overline{\mathbf{X}}_{k+1}) \mathbf{Q}_{k+1} = \mathbf{Q}_{k+1}^T \mathbf{A}^{(k+1)} \mathbf{Q}_{k+1} = \boldsymbol{\Lambda}_q$$

$$\mathbf{X}_{k+1}^T \mathbf{B} \mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{Q}_{k+1}^T (\overline{\mathbf{X}}_{k+1}^T \mathbf{B} \overline{\mathbf{X}}_{k+1}) \mathbf{Q}_{k+1} = \mathbf{Q}_{k+1}^T \mathbf{B}^{(k+1)} \mathbf{Q}_{k+1} = \mathbf{I}_q$$

es decir, los vectores \mathbf{X}_{k+1} satisfacen las condiciones de ortogonalidad, lo que asegura que la iteración inversa no produce q vectores todos iguales a $\boldsymbol{\phi}_1$.

Si en las \mathbf{X}_0 hay componentes según todos los p vectores característicos de interés:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \boldsymbol{\Lambda}_k = \text{diag} (\lambda_1 \quad \lambda_2 \quad \cdots \quad \lambda_p \quad \cdots)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{X}_k = \text{diag} (\boldsymbol{\phi}_1 \quad \boldsymbol{\phi}_2 \quad \cdots \quad \boldsymbol{\phi}_p \quad \cdots)$$

Habiéndose obtenido en dos ciclos sucesivos los estimados $\lambda_p^{(k)}$ y $\lambda_p^{(k+1)}$ para el mayor de los valores característicos requeridos, el cociente $|\lambda_p^{(k+1)} - \lambda_p^{(k)}| / \lambda_p^{(k+1)}$ da una

medida adecuada del error relativo y es útil para verificar la convergencia. Adicionalmente, debe comprobarse que los valores y vectores obtenidos corresponden a los p menores valores característicos. Para ello puede usarse la propiedad de Sturm, factorizando $\mathbf{A} - \mu\mathbf{B}$ en \mathbf{LU} con valores de μ ligeramente mayores a los λ calculados.

Si \mathbf{A} y \mathbf{B} son simétricas, de orden n , ancho de semibanda m , y \mathbf{A} es definida positiva, el número de operaciones iniciales requeridas es de $O\left(\frac{1}{2}nm^2\right)$, esencialmente para la factorización de \mathbf{A} . En cada ciclo de la iteración, considerando $q \ll n$, deben hacerse $O(nq(4m+2q+3))$ operaciones. Esto puede reducirse a $O(nq(2m+2q+3))$ cuando \mathbf{B} es diagonal. Para el procedimiento como se ha descrito en los párrafos precedentes, se trabaja con $q = \min(2p, p+8)$. Habitualmente unos 10 ciclos de iteración son suficientes para obtener 6 cifras significativas correctas en los p valores y vectores característicos. Las operaciones finales requieren $O\left(\frac{1}{2}nm^2p\right)$ operaciones adicionales.

Aproximación Inicial

Para iniciar el proceso se requieren q vectores linealmente independientes, agrupados en \mathbf{X}_0 . Si \mathbf{A} y \mathbf{B} fueran diagonales, los vectores característicos serían las columnas \mathbf{e}_k de la matriz identidad. Aún cuando \mathbf{A} y \mathbf{B} no sean diagonales, éste puede ser un buen criterio para construir la aproximación inicial \mathbf{X}_0 . En particular, deberían escogerse las columnas cuyo índice k corresponde a los máximos b_{kk}/a_{kk} . Con el propósito de introducir componentes según todos los vectores característicos, se acostumbra además considerar dos columnas con componentes arbitrarios (que podrían ser todos iguales a 1, o iguales a los b_{kk}/a_{kk}).

En algunas aplicaciones es fácil obtener una buena aproximación al primer vector característico, por ejemplo, como solución de un sistema de ecuaciones de la forma $\mathbf{A}\mathbf{x}_1 = \mathbf{b}$. Las sucesivas columnas \mathbf{x}_k para una excelente aproximación inicial pueden entonces obtenerse como vectores de Ritz, mediante un proceso recursivo que combina pasos de iteración inversa con ortogonalización:

$$\mathbf{A}\mathbf{y}_k = \mathbf{B}\mathbf{x}_{k-1}$$

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{y}_k - \sum_{j=1}^{k-1} \left(\frac{\mathbf{y}_k^T \mathbf{B} \mathbf{x}_j}{\mathbf{x}_j^T \mathbf{B} \mathbf{x}_j} \right) \mathbf{x}_j$$

Determinación de Grupos de Vectores Característicos Haciendo Traslaciones

Si se requieren muchos vectores característicos, el procedimiento estándar de iteración en subespacio puede hacerse más eficiente utilizando sucesivas traslaciones en combinación con procedimientos de eliminación de las componentes según los vectores ya conocidos.

En este caso se trabaja con subespacios de dimensión q , con el propósito de determinar grupos de $p \approx q/2$ vectores. Habitualmente $q = \max(4, \sqrt{m})$, siendo m el ancho (promedio) de semibanda. Para cada grupo de vectores, se realizan cálculos iniciales que incluyen:

- a. Determinación de la traslación (el proceso se inicia con $\mu = 0$)

$$\mu = 0.1\lambda_n + 0.9\tilde{\lambda}_{n+1}$$

λ_n es el último valor característico para el que se ha logrado convergencia;

$\tilde{\lambda}_{n+1}$ es la aproximación al siguiente valor característico.

b. Factorización: $\mathbf{A} - \mu\mathbf{B} = \mathbf{L}\mathbf{U}$

c. Determinación de q vectores de aproximación inicial, \mathbf{X}_0 .

La iteración incluye los pasos siguientes:

a. Eliminación de las componentes de \mathbf{X}_k según los vectores característicos previamente determinados (ver acápite 3.2.4).

b. Iteración inversa:

$$\mathbf{Y}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{X}_k$$

$$\mathbf{L}\mathbf{U}\mathbf{Z}_{k+1} = \mathbf{Y}_{k+1}$$

c. Proyección de $\mathbf{A} - \mu\mathbf{B}$ y \mathbf{B} en el subespacio definido por los vectores \mathbf{Y}_{k+1} :

$$\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{Z}_{k+1}^T \mathbf{Y}_{k+1}$$

$$\mathbf{B}^{(k+1)} = \mathbf{Z}_{k+1}^T \mathbf{B}\mathbf{Z}_{k+1}$$

Las matrices $\mathbf{A}^{(k+1)}$ y $\mathbf{B}^{(k+1)}$ son cuadradas, simétricas, de orden q .

d. Solución del problema de valores y vectores característicos proyectado:

$$\left(\mathbf{A}^{(k+1)} + \mu\mathbf{B}^{(k+1)}\right)\mathbf{Q}_{k+1} = \mathbf{B}^{(k+1)}\mathbf{Q}_{k+1}\mathbf{\Lambda}_{k+1}$$

e. Determinación de nuevos vectores:

$$\mathbf{X}_{k+1} = \mathbf{Z}_{k+1}\mathbf{Q}_{k+1}$$

f. Verificación de la convergencia

Como en el procedimiento estándar, debe verificarse que se tienen los valores característicos correctos utilizando la propiedad de Sturm.

Ejemplo simple

Supóngase que se requieren dos vectores característicos de $\mathbf{A}\phi = \lambda\mathbf{B}\phi$, siendo:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 1 & & \\ & & 0 & \\ & & & 2 \end{pmatrix}$$

En este caso particular la iteración inversa produce en un solo paso el subespacio que incluye a los dos primeros vectores característicos, ya que dos de los valores característicos son infinitos. Para hacer más eficiente el proceso debe factorizarse primero la matriz \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -0.5 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -.6667 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -0.75 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1.5 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1.3333 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1.25 \end{pmatrix} = \mathbf{LU}$$

Con la aproximación inicial: $\mathbf{X}_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Se obtiene por iteración inversa:

$$\mathbf{B}\mathbf{X}_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{LU}\bar{\mathbf{X}}_1 = \mathbf{B}\mathbf{X}_0 \quad \bar{\mathbf{X}}_1 = \begin{pmatrix} 0.4 & 0.6 \\ 0.8 & 1.2 \\ 1.2 & 0.8 \\ 1.6 & 0.4 \end{pmatrix}$$

Proyectando las matrices \mathbf{A} y \mathbf{B} en el subespacio definido por los vectores $\bar{\mathbf{X}}_1$:

$$\mathbf{A}^{(1)} = \bar{\mathbf{X}}_1^T \mathbf{A} \bar{\mathbf{X}}_1 = \begin{pmatrix} 3.2 & 0.8 \\ 0.8 & 1.2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B}^{(1)} = \bar{\mathbf{X}}_1^T \mathbf{B} \bar{\mathbf{X}}_1 = \begin{pmatrix} 5.76 & 2.24 \\ 2.24 & 1.76 \end{pmatrix}$$

se resuelve el problema proyectado (método de Jacobi generalizado):

$$\begin{aligned} c_1 &= 1.28 & d &= -2.56 \\ c_2 &= 2.56 & \Rightarrow \alpha &= -0.50 \\ c_3 &= -0.64 & \gamma &= 1.00 \end{aligned}$$

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ \gamma & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -0.5 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{P}^T \mathbf{A} \mathbf{P} = \begin{pmatrix} 6.00 & 0 \\ 0 & 1.20 \end{pmatrix} \quad \mathbf{P}^T \mathbf{B} \mathbf{P} = \begin{pmatrix} 12 & 0 \\ 0 & 0.96 \end{pmatrix}$$

de donde:

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} a_{11}/b_{11} & 0 \\ 0 & a_{22}/b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.50 & 0 \\ 0 & 1.25 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0.288675 & -0.510310 \\ 0.288675 & 1.020621 \end{pmatrix}$$

y finalmente se expresan los vectores en el sistema de referencia original:

$$\mathbf{X}_1 = \bar{\mathbf{X}}_1 \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0.288675 & 0.408248 \\ 0.577350 & 0.816497 \\ 0.577350 & 0.204124 \\ 0.577350 & -0.408248 \end{pmatrix} = (\boldsymbol{\phi}_1 \quad \boldsymbol{\phi}_2)$$