

# NLA: Overzicht eigenwaarden berekeningen

Nithin Govindarajan

KU Leuven

August 24, 2023

## Wat wordt er behandeld?

- ▶ Elementen van Lecture 25 in Trefethen&Boyd.
- ▶ Lecture 27 in Trefethen&Boyd.
- ▶ Een selectie van oefeningen.

**Probeer het eerst zelf te oplossen!**

# Methoden om eigenwaarden te berekenen

Methoden die enkel één eigenvector en één eigenwaarde berekenen per toepassing, bijv:

- ▶ methode van machten.
- ▶ Inverse iteraties.
- ▶ Rayleigh quotiënt iteraties.

Methodes die meteen de gehele decompositie berekenen, bijv:

- ▶ **Het QR algoritme.**
- ▶ Jacobi methode.

## Rayleigh quotiënt

Gegeven een vector  $x \in \mathbb{R}^n$  en een symmetrische matrix  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , vind een  $\lambda \in \mathbb{R}$  die:

$$\min_{\lambda \in \mathbb{R}} \|Ax - \lambda x\|_2^2$$

minimaliseert.

## Rayleigh quotiënt

Gegeven een vector  $x \in \mathbb{R}^n$  en een symmetrische matrix  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ , vind een  $\lambda \in \mathbb{R}$  die:

$$\min_{\lambda \in \mathbb{R}} \|Ax - \lambda x\|_2^2$$

minimaliseert.

De oplossing van dit kleinste kwadraten probleem geeft het *Rayleigh quotiënt*:

$$r(x) = \frac{x^T A x}{x^T x}$$

## Methode van machten

Gegeven een initiële vector  $q^{(0)} \in \mathbb{R}^n$  met  $\|q^{(0)}\|_2 = 1$ , doe de volgende iteraties voor  $k = 1, 2, \dots$ :

$$w^{(k)} = Aq^{(k-1)} \quad (1)$$

$$q^{(k)} = \frac{w^{(k)}}{\|w^{(k)}\|_2} \quad (2)$$

$$\lambda^{(k)} = q^{(k)T} A q^{(k)} \quad (3)$$

*Observeer het impliciete gebruik van het Rayleigh Quotiënt...*

## Methode van machten - convergentie eigenvector

- ▶ Neem aan dat  $A$  reëel en symmetrisch is (dus de eigenwaarden en eigenvectoren zijn ook reëel).
- ▶ Laat  $\{u_k\}_{k=1}^n$  de eigenvectoren zijn van  $A$  met  $\|u_k\|_2 = 1$ .  
Neem aan dat eigenwaarden gesorteerd zijn op grootte:

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

- ▶ Druk  $q^{(0)}$  uit in termen van de eigenvectoren:

$$q^{(0)} = c_1 u_1 + c_2 u_2 + \dots + c_n u_n, \quad c_1 \neq 0$$

- ▶ Gegeven:

$$q^{(k)} = \frac{Aq^{(k-1)}}{\|Aq^{(k-1)}\|_2}$$

weten we dat  $q^{(k)}$  een positieve scalaire vermenigvuldiging is van  $A^k q^{(0)}$ .

## Methode van machten - convergentie eigenvector

- Dus schrijf:

$$\begin{aligned} q^{(k)} &= d_k A^k q^{(0)}, \quad d_k > 0 \\ &= d_k \left( c_1 \lambda_1^k u_1 + c_2 \lambda_2^k u_2 + \dots + c_n \lambda_n^k u_n \right) \\ &= d_k |c_1| |\lambda_1^k| \left( \text{sign}(c_1 \lambda_1^k) u_1 + \right. \\ &\quad \left. \underbrace{\frac{c_2}{|c_1|} \left( \frac{\lambda_2}{|\lambda_1|} \right)^k u_2 + \dots + \frac{c_n}{|c_1|} \left( \frac{\lambda_n}{|\lambda_1|} \right)^k u_n}_{\rightarrow 0 \text{ met } k \rightarrow \infty} \right) \end{aligned}$$

- methode van machten convergeert naar de *dominante* eigenvector met de grootste eigenwaarde in absolute waarde.



# Methode van machten - convergentie eigenvector

## Theorem

*Neem aan dat  $A$  reëel en symmetrisch is. De iteraties  $q^{(k)} \in \mathbb{R}^n$  convergeren naar de eigenvector  $u_1$  voor snelheid:*

$$\left\| q^{(k)} - (\pm u_1) \right\|_2 = O \left( \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^k \right)$$

*Hierboven heeft  $\pm$  de betekenis de bovengrens geldt voor  $+u_1$  of  $-u_1$ . De teken kan mogelijk veranderen als een functie van  $k$ .*

## Methode van machten - convergentie eigenvector

### Proof.

Een schets van het bewijs: herschrijf de vergelijking van een paar slides terug naar:

$$q^{(k)} - \text{sign}(c_1 \lambda_1^k) u_1 = \left( d_k |c_1| |\lambda_1^k| - 1 \right) \text{sign}(c_1 \lambda_1^k) u_1 + \\ d_k |c_1| |\lambda_1^k| \left( \frac{c_2}{|c_1|} \left( \frac{\lambda_2}{|\lambda_1|} \right)^k u_2 + \dots + \frac{c_n}{|c_1|} \left( \frac{\lambda_n}{|\lambda_1|} \right)^k u_n \right).$$

Neem de norm aan beide kanten en pas de driehoeksongelijkheid toe. Toon aan dat elke term  $O\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right)$  is. □

## Oefening 1

Gegeven eenheidsvector  $\eta \in \mathbb{R}^n$ , geldt er voor reële, symmetrische matixen het volgende voor een voldoende kleine  $t > 0$ :

$$r(x + t\eta) = r(x) + 2t \frac{\eta^T (Ax - r(x)x)}{x^T x} + O\left(\|t\eta\|^2\right)$$

Als  $x \in \mathbb{R}^n$  een eigenvector is, wat kan er gezegd worden over de tweede term in het geval van reële, symmetrische matrices?

## Oefening 1 - antwoord

We hebben  $Ax = r(x)x$  dus:

$$\frac{\eta^T (Ax - r(x)x)}{x^T x} = 0$$

ongeacht onze keuze voor  $\eta \in \mathbb{C}^n$ .

# Methode van machten - convergentie eigenwaarde

## Theorem

*Neem aan dat  $A$  reël en symmetrisch is. De iteraties  $\lambda^{(k)}$  in de methode van machten convergeren naar de eigenwaarde  $\lambda_1$  met snelheid:*

$$\left| \lambda^{(k)} - \lambda_1 \right| = O \left( \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^{2k} \right)$$

## Proof.

Volgt uit het antwoord in oefening 2.



## Inverse iteraties

Gegeven een initiële vector  $q^{(0)} \in \mathbb{R}^n$  met  $\|q^{(0)}\|_2 = 1$  en een “schatting”  $\mu \in \mathbb{R}$  van een eigenwaarde, doe de volgende iteraties voor  $k = 1, 2, \dots$ :

$$\begin{aligned}(A - \mu I)w^{(k)} &= q^{(k-1)} \\ q^{(k)} &= \frac{w^{(k)}}{\|w^{(k)}\|_2} \\ \lambda^{(k)} &= q^{(k)T} A q^{(k)}\end{aligned}$$

## Inverse iteraties

Gegeven een initiële vector  $q^{(0)} \in \mathbb{R}^n$  met  $\|q^{(0)}\|_2 = 1$  en een “schatting”  $\mu \in \mathbb{R}$  van een eigenwaarde, doe de volgende iteraties voor  $k = 1, 2, \dots$ :

$$w^{(k)} = (A - \mu I)^{-1} q^{(k-1)}$$

$$q^{(k)} = \frac{w^{(k)}}{\|w^{(k)}\|_2}$$

$$\lambda^{(k)} = q^{(k)T} A q^{(k)}$$

## Inverse iteraties - toelichting

- ▶ In principe, berekenen we de dominante eigenvector en eigenwaarde van  $(A - \mu I)^{-1}$ .
- ▶  $(A - \mu I)^{-1}$  heeft dezelfde eigenvectors als  $A$ , maar de eigenwaarden zijn anders:

$$(A - \mu I)^{-1} = V \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda_1 - \mu} & & \\ & \ddots & \\ & & \frac{1}{\lambda_n - \mu} \end{bmatrix} V^{-1}$$

- ▶ Stel dat:

$$|\lambda_1 - \mu| < |\lambda_2 - \mu| \leq \dots \leq |\lambda_n - \mu|,$$

Dan is  $(\lambda_1 - \mu)^{-1}$  de grootste eigenwaarde van  $(A - \mu I)^{-1}$ .



# Inverse iteraties - convergentie snelheid

## Theorem

*Neem aan dat  $A$  reëel en symmetrisch is. De iteraties  $q^{(k)} \in R^n$  convergeren naar de eigenvector  $u_1$  met snelheid:*

$$\left\| q^{(k)} - (\pm u_1) \right\|_2 = O \left( \left| \frac{\lambda_1 - \mu}{\lambda_2 - \mu} \right|^k \right)$$

*De iteraties  $\lambda^{(k)}$  convergeren naar  $\lambda_1$  met snelheid:*

$$\left| \lambda^{(k)} - \lambda_1 \right| = O \left( \left| \frac{\lambda_1 - \mu}{\lambda_2 - \mu} \right|^{2k} \right)$$

**Huiswerk.** Overtuig jezelf dat dit klopt.

## Een verbetering van inverse iteraties

- ▶ Bij een goede gok voor  $\mu \in \mathbb{R}$  is meestal:

$$|\lambda_1 - \mu| \ll |\lambda_2 - \mu|.$$

Dit maakt inverse iteraties potentieel vele malen beter dan de methode van machten.

- ▶ Maar let op, bij inverse iteraties wordt er bij de derde stap (3) een nieuwe schatting berekend van de eigenwaarde.
- ▶ Waarom koppelen we die nieuwe schatting niet terug naar de eerste stap (1)?

## Rayleigh quotiënt iteraties

Gegeven een initiële vector  $q^{(0)} \in \mathbb{R}^n$  met  $\|q^{(0)}\| = 1$  en een “schatting”  $\lambda^{(0)} \in \mathbb{R}$  waarbij:

$$|\lambda_1 - \lambda^{(0)}| < |\lambda_2 - \lambda^{(0)}| \leq \dots \leq |\lambda_n - \lambda^{(0)}|,$$

doe de volgende iteraties voor  $k = 1, 2, \dots$ :

$$\begin{aligned}(A - \lambda^{(k-1)}I)w^{(k)} &= q^{(k-1)} \\ q^{(k)} &= \frac{w^{(k)}}{\|w^{(k)}\|} \\ \lambda^{(k)} &= q^{(k)T} A q^{(k)}\end{aligned}$$

# Rayleigh quotiënt iteraties - convergentiesnelheid

## Theorem

*Neem aan dat  $A$  reëel en symmetrisch is. Voor een voldoende goede schatting  $q^{(0)}$  op de eigenvector  $u_1$ , convergeren de iteraties  $q^{(k)} \in \mathbb{R}^n$  met snelheid:*

$$\left\| q^{(k)} - (\pm u_1) \right\|_2 = O \left( \left\| q^{(k-1)} - (\pm u_1) \right\|_2^3 \right)$$

*De iteraties  $\lambda^{(k)}$  convergeren naar  $\lambda_1$  met snelheid:*

$$\left| \lambda^{(k)} - \lambda_1 \right| = O \left( \left| \lambda^{(k-1)} - \lambda_1 \right|^3 \right)$$

## Het QR algoritme - oplossing huiswerk

```
import numpy as np
from scipy.linalg import qr

D = np.diag([2.1, 1, 4.5 , 3.0, -5.0])
V = np.random.rand(5,5)
A = V @ D @ np.linalg.inv(V)

Ak = np.copy(A)
for i in range(200):
    Q,R = qr(Ak)
    Ak = R @ Q

print("After 200 iterations")
np.set_printoptions(suppress=True,linewidth=np.nan)
print(Ak)
```

# Het QR algoritme - oplossing huiswerk

De iteratie:

$$A^{(k+1)} = R^{(k)}Q^{(k)}, \quad A^{(k)} = Q^{(k)}R^{(k)}$$

lijkt te convergeren naar de  $T$  in de Schur decompositie.

*Volgende les meer hierover!*