

Numerik von Eigenwertaufgaben

Steffen Börm

Stand 21. Juli 2013

Alle Rechte beim Autor.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Beispiele	7
2.1	Schwingende Saite	7
2.2	Minipoly	10
2.3	Lineares Anfangswertproblem	12
3	Theoretische Grundlagen	15
3.1	Existenz von Eigenwerten	15
3.2	Ähnlichkeitstransformationen	18
3.3	Hilberträume	21
3.4	Invariante Unterräume	26
3.5	Selbstadjungierte und unitäre Matrizen	28
3.6	Schur-Zerlegung	29
3.7	Diagonalisierbarkeit durch unitäre Transformationen	32
3.8	Was kommt nach der Schur-Zerlegung?	36
3.9	Eigenwerte nicht-negativer Matrizen	39
4	Die Jacobi-Iteration	47
4.1	Iterierte Ähnlichkeitstransformationen	47
4.2	Zweidimensionaler Fall	48
4.3	Höherdimensionaler Fall	52
4.4	Algorithmus	53
5	Die Vektoriteration	57
5.1	Grundidee	57
5.2	Fehleranalyse	65
5.3	Inverse Iteration mit und ohne Shift	73
5.4	Inverse Iteration mit Rayleigh-Shift	79
5.5	Orthogonale Iteration	84
6	Die QR-Iteration	95
6.1	Grundidee	95
6.2	Shift-Strategien und Deflation	99
6.3	Hessenberg-Form	101
6.4	Implizite Verfahren	105

7	Verfahren für Tridiagonalmatrizen	111
7.1	Auswertung des charakteristischen Polynoms	111
7.2	Sturmsche Ketten	114
7.3	Gershgorin-Kreise	121
7.4	Trägheitssatz und Dreieckszerlegungen	124
8	Lanczos-Verfahren für schwachbesetzte Matrizen	129
8.1	Zweidimensionales Modellproblem	129
8.2	Krylow-Räume	131
8.3	Arnoldi-Basis	133
8.4	Konvergenz	137
9	Vorkonditionierte Eigenwertverfahren	145
9.1	Richardson-Iteration	145
9.2	Optimale Dämpfung	150
9.3	Vorkonditionierer	155
9.4	Erweiterungen	158
9.5	Block-Verfahren	160
10	Verwandte Fragestellungen	163
10.1	Singulärwertzerlegung	163
10.2	Verallgemeinerte Eigenwertprobleme	170
10.3	Selbstadjungierte positiv definite verallgemeinerte Eigenwertprobleme . .	174
	Index	179
	Literaturverzeichnis	181

1 Einleitung

Ein *Eigenwert* eines linearen Operators $L : V \rightarrow V$ auf einem K -Vektorraum V ist ein Element $\lambda \in K$ des zugehörigen Körpers, für das ein von null verschiedener Vektor $u \in V \setminus \{0\}$ mit

$$Lu = \lambda u \tag{1.1}$$

existiert. Diesen Vektor u nennt man einen *Eigenvektor* zu λ , das Paar (λ, u) nennt man ein *Eigenpaar* des Operators L .

Eigenwerte sind in naturwissenschaftlichen Anwendungen von Interesse, beispielsweise bei der Untersuchung des Resonanzverhaltens eines schwingenden Systems, aber auch bei der Klassifikation von Dokumenten, beispielsweise der Sortierung der Ergebnisse von Internet-Suchmaschinen, und bei der mathematischen Analyse von linearen Gleichungssystemen und linearen Anfangswertproblemen.

Obwohl die Gleichung (1.1) auf den ersten Blick einem gewöhnlichen linearen Gleichungssystem ähnelt, stellt sich bei genauerer Betrachtung heraus, dass durch den Zusammenhang zwischen λ und u ein nichtlineares System entsteht, das sich im Allgemeinen nicht mehr mit einem aus endlich vielen Rechenoperationen bestehenden Algorithmus lösen lässt.

Stattdessen kommen *iterative Verfahren* zum Einsatz, die beispielsweise eine Folge von Näherungen eines Eigenvektors oder Eigenwerts berechnen, die gegen exakte Lösungen konvergieren.

Dabei sind verschiedene Aufgabenstellung zu unterscheiden: In manchen Anwendungen ist man nur daran interessiert, einen bestimmten Eigenwert zu berechnen, beispielsweise um die niedrigste Resonanzfrequenz eines schwingungsfähigen Systems zu ermitteln. In anderen sind eine kleine Anzahl der größten oder kleinsten Eigenwerte von Interesse oder Eigenwerte, die in der Nähe eines gegebenen Punkts in der komplexen Ebene liegen. In wieder anderen ist eine vollständige Orthonormalbasis des gesamten Raums gesucht, mit deren Hilfe sich der Operator diagonalisieren lässt, um weitere Berechnungen zu vereinfachen.

Um die unterschiedlichen Anforderungen zu erfüllen werden eine Reihe von algorithmischen Ansätzen verwendet, beispielsweise lässt sich durch Potenzieren des Operators L eine Eigenvektor-Näherung bestimmen, Eigenwerte können als Minima oder Maxima geeigneter Funktionen beschrieben werden, alternativ im endlich-dimensionalen Fall auch als Nullstellen eines charakteristischen Polynoms.

Eine besondere Herausforderung stellt die Behandlung großer Matrizen dar, die beispielsweise bei der Analyse strukturmehchanischer oder elektromagnetischer Schwingungen von großer Bedeutung sind. In diesem Fall ist L ein Differentialoperator, der im Rahmen einer Diskretisierung durch eine Matrix approximiert wird, deren kleinste Eigenwerte und zugehörige Eigenvektoren gesucht werden. Die Matrix ist in der Regel

1 Einleitung

schlecht konditioniert, so dass spezialisierte Iterationsverfahren zum Einsatz kommen müssen, die mit den bereits erwähnten verwandt sind, allerdings die besondere Form der Aufgabe berücksichtigen.

Ziel dieser Vorlesung ist es, einen Überblick über die grundlegende Theorie, die wichtigsten Verfahren und deren Analyse zu geben.

Danksagung

Ich bedanke mich bei Sabrina Reif und Robin-Thomas Léger für Hinweise auf Fehler in früheren Fassungen dieses Skripts und für Verbesserungsvorschläge.

2 Beispiele

In diesem Kapitel werden drei Beispiele für Eigenwertprobleme in der Praxis gegeben. Gleichzeitig werden drei Typen von Eigenwertproblemen charakterisiert: Die Berechnung eines einzelnen Eigenwert-Eigenvektor-Paares, die Berechnung von wenigen solchen Paaren und die Berechnung aller solcher Paare, also die Schur-Zerlegung einer Matrix.

2.1 Schwingende Saite

Wir untersuchen eine horizontal gespannte Saite der Länge ℓ . Ihre vertikale Auslenkung in Abhängigkeit von Ort und Zeit wird durch eine Funktion $u \in C^2([0, \ell] \times \mathbb{R}_{\geq 0})$ modelliert. Da die Saite links und rechts eingespannt ist, gelten die Randbedingungen

$$u(0, \cdot) = 0 \quad \text{und} \quad u(\ell, \cdot) = 0. \quad (2.1)$$

Das (vereinfachte) Verhalten der Saite wird durch die *Wellengleichung*

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) = c \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) + f(x, t) \quad (2.2)$$

für alle $(x, t) \in]0, \ell[\times \mathbb{R}_{\geq 0}$ bestimmt. Hierbei bezeichnet $c \in \mathbb{R}$ einen Materialparameter, in den etwa Eigenschaften wie die Dicke der Saite, ihre Elastizität und das Maß der aufgewendeten Spannkraft eingehen. Die Funktion $f \in C([0, \ell] \times \mathbb{R}_{\geq 0})$ beschreibt die von Außen auf die Saite ausgeübte Kraft.

Wir interessieren uns für den Fall, in dem die äußere Kraft lediglich der Anregung dient und die Saite anschließend ohne weitere Beeinflussung schwingt. Wir sind also an Lösungen der Gleichung

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) = c \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) \quad (2.3)$$

interessiert. Da die auftretenden Differentialoperatoren linear sind und keine vom Ort abhängigen Koeffizienten auftreten, entscheiden wir uns für den folgenden Separationsansatz:

$$u(x, t) = u_0(x) \cos(\omega t) \quad (2.4)$$

für eine Funktion $u_0 \in C^2([0, \ell])$. Dann gilt

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) = -\omega^2 u(x, t)$$

für alle $(x, t) \in]0, \ell[\times \mathbb{R}_{\geq 0}$ und die Wellengleichung (2.3) nimmt die Form

$$c \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) = -\omega^2 u(x, t) \quad (2.5)$$

2 Beispiele

an. Mit den Abkürzungen

$$L := -c \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \text{und} \quad \lambda := \omega^2$$

und durch Elimination des Cosinus aus u erhalten wir die Gleichung

$$Lu_0 = \lambda u_0. \tag{2.6}$$

Sie besitzt offenbar immer die triviale Lösung $u_0 = 0$, die einer ruhenden Saite entspricht. Für eine schwingende Saite fordern wir deshalb $u_0 \neq 0$ und erhalten das folgende Problem:

Finde $u_0 \in C^2([0, \ell]) \setminus \{0\}$ und $\lambda \in \mathbb{R}$ derart, dass

$$Lu_0 = \lambda u_0$$

erfüllt ist.

In diesem Kontext bezeichnet man λ als *Eigenwert* und u_0 als *Eigenvektor* (beziehungsweise in diesem Fall als *Eigenfunktion*).

Da der Separationsansatz zur Elimination der Zeit aus der Gleichung (2.3) hilfreich war, liegt es nahe, ihn auch auf das Eigenwertproblem anzuwenden. Wir nehmen an, dass

$$u_0(x) = \sin(\alpha x)$$

für ein $\alpha \in \mathbb{R}$ gilt. Da diese Funktion nur dann gleich Null ist, falls $\alpha x \in \pi\mathbb{Z}$ erfüllt ist, folgt aus der Randbedingung (2.1) die Gleichung

$$\alpha\ell \in \pi\mathbb{Z}, \quad \text{also} \quad \alpha = k\pi/\ell$$

für ein $k \in \mathbb{Z}$. Der Operator L lässt sich für ein u_0 von dieser Gestalt als

$$Lu_0(x) = c\alpha^2 u_0(x)$$

schreiben, so dass aus der Gleichung (2.6) die Beziehung

$$c\alpha^2 = \lambda = \omega^2$$

folgt. Wir können also zu jedem α den entsprechenden Eigenwert λ und die korrespondierende *Eigenfrequenz* $\omega = \sqrt{\lambda}$ berechnen und erhalten das Ergebnis, dass für jedes $k \in \mathbb{N}$

$$\omega = \sqrt{c} \frac{\pi}{\ell} k$$

eine Eigenfrequenz ist, die zu einem nicht-trivialen Eigenvektor

$$u_0(x) = \sin(k\pi/\ell)$$

gehört.

Falls der Materialparameter c in der Wellengleichung nicht konstant, sondern vom Ort abhängig ist (falls sich beispielsweise die Dicke der Saite ändert), lässt sich der Separationsansatz $u_0(x) = \sin(\alpha x)$ nicht mehr anwenden.

In diesem Fall behilft man sich mit einer numerischen Approximation des Operators L , um aus der kontinuierlichen Gleichung (2.6) eine Matrixgleichung zu machen, die dann mit Standardverfahren behandelt werden kann.

Ein Ansatz für diese Approximation ist die Finite-Differenzen-Methode, die im Wesentlichen auf der Taylor-Entwicklung von u_0 basiert: Für $x \in]0, \ell[$ und $h \in \mathbb{R}$ mit $x + h, x - h \in]0, \ell[$ gibt es $\eta_+ \in]x, x + h[$ und $\eta_- \in]x - h, x[$ derart, dass

$$\begin{aligned} u_0(x + h) &= u_0(x) + hu'_0(x) + h^2u''_0(x)/2 + h^3u_0^{(3)}(x)/6 + h^4u_0^{(4)}(\eta_+)/24, \\ u_0(x - h) &= u_0(x) - hu'_0(x) + h^2u''_0(x)/2 - h^3u_0^{(3)}(x)/6 + h^4u_0^{(4)}(\eta_-)/24 \end{aligned}$$

gelten, wobei $u_0^{(3)}$ und $u_0^{(4)}$ die dritte und vierte Ableitung von u_0 bezeichnen. Durch Addition dieser Gleichungen erhalten wir

$$u_0(x + h) + u_0(x - h) = 2u_0(x) + h^2u''_0(x) + h^4(u_0^{(4)}(\eta_+) + u_0^{(4)}(\eta_-))/24$$

und können folgern, dass

$$Du_0(x, h) := (2u_0(x) - u_0(x + h) - u_0(x - h))/h^2 \quad (2.7)$$

eine Approximation für $-u''_0(x)$ ist, die die Fehlerabschätzung

$$|Du_0(x, h) + u''_0(x)| \leq h^2 \|u_0^{(4)}\|_\infty / 12 \quad (2.8)$$

erfüllt.

Um nun L zu approximieren, wählen wir eine äquidistante Partitionierung $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n < x_{n+1} = \ell$ des Intervalls $[0, \ell]$: Wir setzen $x_i = hi$ mit $h = \ell/(n + 1)$. Für jedes $i \in \{1, \dots, n\}$ ersetzen wir dann $-u''_0(x_i)$ durch

$$Du_0(x_i, h) = (2u_0(x_i) - u_0(x_{i+1}) - u_0(x_{i-1}))/h^2.$$

Indem wir die Werte von u_0 in den Punkten x_1, \dots, x_n in dem Vektor $\mathbf{u}_0 = (u_0(x_i))_{i=1}^n$ zusammenfassen, nimmt das Eigenwertproblem (2.6) die Form

$$\mathbf{A}\mathbf{u}_0 = \lambda\mathbf{u}_0 \quad (2.9)$$

mit der Tridiagonalmatrix

$$\mathbf{A} = \frac{c}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

2 Beispiele

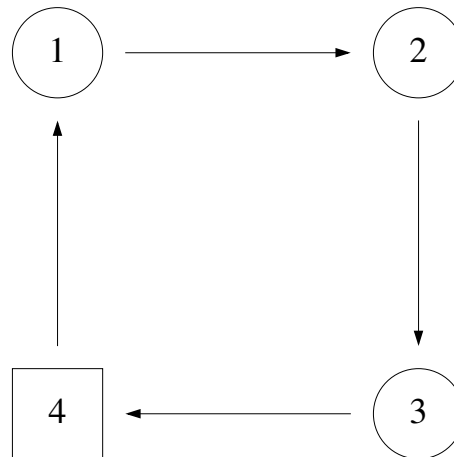
an. Damit ist das kontinuierliche Problem in ein diskretes Problem in \mathbb{R}^n überführt. Da die Genauigkeit der Approximation wesentlich von dem Diskretisierungsparameter h abhängt, der wiederum proportional zum Kehrwert der Problemdimension n ist, ist klar, dass eine hohe Genauigkeit bei der Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren auch eine hohe Dimension des Gesamtproblems erfordert.

Andererseits ist auch klar, dass beispielsweise für $u_0(x) = \sin(\alpha x)$ die für die Fehlerabschätzung (2.8) wichtige vierte Ableitung von u_0 sich wie α^4 verhalten wird. Damit der Fehler beschränkt bleibt, muss also $h^2 \approx \alpha^{-4}$ gelten, was zur Folge hat, dass Eigenvektoren zu höheren Frequenzen auch wesentlich feinere Gitterschrittweiten erfordern.

Aus diesem Grund wird man sich in der Regel nur für eine geringe Anzahl der zu den kleinsten Eigenfrequenzen gehörenden Eigenvektoren interessieren, man wird also nicht darauf abzielen, *alle* Eigenwerte und Eigenvektoren zu bestimmen, sondern nur eine sehr kleine und von n unabhängige Anzahl.

2.2 Minipoly

Als nächstes wenden wir uns einer stark reduzierten Version eines altbekannten Brettspiels zu. Das Spielfeld besteht aus vier Feldern und hat die folgende Form:



Die Spielregeln sind einfach:

- Zu Beginn steht eine Spielfigur auf einem beliebigen Feld.
- Falls die Figur auf einem der Felder 1, 2 oder 3 steht, wird ein üblicher sechsseitiger Würfel geworfen, dessen Augenzahl angibt, wieviele Schritte im Uhrzeigersinn durchzuführen sind.
- Falls die Figur auf dem „Gefängnisfeld“ 4 steht, wird wieder gewürfelt. Falls eine 6 herauskommt, kann die Figur auf Feld 1 fliehen, sonst bleibt sie im Gefängnis, also auf Feld 4.

Da die Position der Spielfigur nach einer Reihe von Schritten vom Zufall abhängt, können wir keine präzisen Vorhersagen treffen. Wir können allerdings nach der *Wahrscheinlichkeit* fragen, mit der eine Spielfigur auf einem bestimmten Feld stehen wird.

Eine ähnliche Technik wird beispielsweise bei der Bewertung von Internet-Seiten durch Suchmaschinen verwendet: Die ursprüngliche Idee der Suchmaschine Google beruhte auf dem Modell eines Anwenders, der ausgehend von einer Webseite zufällig einen der auf dieser Seite enthaltenen Verweise anklickt. Diejenigen Seiten, auf denen sich der simulierte Anwender mit hoher Wahrscheinlichkeit aufhielt, wurden als besonders attraktiv bewertet und in der Ergebnisliste der Suchmaschine als erste angegeben.

Die Folge der von einer Spielfigur eingenommenen Positionen bildet eine sogenannte *Markoff-Kette*, deren wahrscheinlichkeitstheoretische Eigenschaften durch die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den einzelnen Feldern eindeutig bestimmt ist.

So beträgt die Wahrscheinlichkeit, von Feld 1 auf Feld 1 zu wechseln, gerade $1/6$, da dazu eine 4 gewürfelt werden muss. Um von Feld 1 auf Feld 2 zu wechseln, genügen dagegen eine 1 *oder* eine 5, so dass diese Wahrscheinlichkeit $1/3$ beträgt. Wir können die Übergangswahrscheinlichkeiten in einer Matrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{4 \times 4}$ zusammenfassen, indem wir in der j -ten Spalte und i -ten Zeile eintragen, wie hoch die Wahrscheinlichkeit ist, von Feld j auf Feld i zu wechseln:

$$\mathbf{P} := \begin{pmatrix} 1/6 & 1/6 & 1/3 & 1/6 \\ 1/3 & 1/6 & 1/6 & 0 \\ 1/3 & 1/3 & 1/6 & 0 \\ 1/6 & 1/3 & 1/3 & 5/6 \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

Für den Vektor $\mathbf{e}_2 = (0, 1, 0, 0)$ gibt $\mathbf{P}\mathbf{e}_2$ an, mit welcher Wahrscheinlichkeit die Spielfigur sich auf den einzelnen Feldern befindet, wenn von Feld 2 ausgehend ein Zug durchgeführt wurde. Der Vektor $\mathbf{P}^2\mathbf{e}_2$ beschreibt die Wahrscheinlichkeitsverteilung nach 2 Zügen, der Vektor $\mathbf{P}^n\mathbf{e}_2$ die nach n Zügen. Die Matrix \mathbf{P} ordnet also der Wahrscheinlichkeitsverteilung in einem Zug die für den folgenden Zug zu.

Es stellt sich die Frage, ob ein Grenzwert existiert, ob sich also nach einer gewissen Anzahl von Spielzügen eine stabile Wahrscheinlichkeitsverteilung einstellt. Ein solches sogenanntes *invariantes Wahrscheinlichkeitsmaß* \mathbf{w} ist durch die Fixpunktgleichung

$$\mathbf{P}\mathbf{w} = \mathbf{w} \quad (2.12)$$

charakterisiert. Offensichtlich kann \mathbf{w} auch als Eigenvektor zum Eigenwert 1 aufgefasst werden, wir erhalten also wieder ein Eigenwertproblem, diesmal allerdings mit bekanntem Eigenwert und unbekanntem Eigenvektor.

Existenzsätze für Eigenwerte lassen sich auf die Matrix \mathbf{P} anwenden und führen zu dem Ergebnis, dass sie einen Eigenwert 1 besitzt, zu dem es einen Eigenvektor mit positiven Koeffizienten gibt. Mit geeigneter Skalierung kann er als das gesuchte invariante Maß interpretiert werden.

Es lassen sich außerdem Standardverfahren anwenden, um diesen Eigenvektor zu be-

2 Beispiele

rechnen: Man erhält näherungsweise

$$\mathbf{w} \approx \begin{pmatrix} 0.185 \\ 0.097 \\ 0.113 \\ 0.605 \end{pmatrix},$$

die Spielfigur wird also im Durchschnitt über 60% der Spielzüge im Gefängnis verbringen und am seltensten auf dem Feld 2 anzutreffen sein.

Das wiederholte Anwenden von \mathbf{P} auf Wahrscheinlichkeitsverteilungen lässt sich als ein Verfahren zur Bestimmung des größten Eigenwerts, in diesem Fall 1, interpretieren, so dass sich die im Rahmen der Analyse dieses Verfahrens erzielten Konvergenzaussagen direkt auf das Beispiel übertragen.

Das in diesem Kontext auftretende Eigenwertproblem kann als Spezialfall des im Falle der schwingenden Saite behandelten gesehen werden: Es wird lediglich nach *einem* Eigenvektor zu einem bestimmten Eigenwert gesucht.

2.3 Lineares Anfangswertproblem

Zum Abschluss des Beispiel-Kapitels untersuchen wir ein lineares Anfangswertproblem: Wir möchten zu einer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und einem Vektor $\mathbf{y}_0 \in \mathbb{R}^n$ eine vektorwertige Funktion $\mathbf{y} \in C^1(\mathbb{R}_{\geq 0}, \mathbb{R}^n)$ finden, die die Gleichungen

$$\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0 \quad \text{und} \quad \mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t) \tag{2.13}$$

für alle $t \in \mathbb{R}_{>0}$ erfüllt. Aus der Analysis ist bekannt, dass sich \mathbf{y} durch

$$\mathbf{y}(t) = \exp(t\mathbf{A})\mathbf{y}_0$$

ausdrücken lässt. Um nun für ein konkretes $t \in \mathbb{R}_{>0}$ den Wert $\mathbf{y}(t)$ zu bestimmen, müssen wir die Exponentialfunktion der Matrix $t\mathbf{A}$ auswerten. Per Taylor-Entwicklung um 0 erhalten wir die Beziehung

$$\exp(t\mathbf{A}) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{t^i}{i!} \mathbf{A}^i.$$

Für numerische Zwecke ist diese Formel unbrauchbar, da die Berechnung der Matrizen \mathbf{A}^i für i zwischen 0 und einer Obergrenze p immerhin $\mathcal{O}(pn^3)$ Operationen erfordert und p infolge der langsamen Konvergenz der Exponentialreihe für große Werte von t ebenfalls groß sein muss.

Das Problem lässt sich wesentlich vereinfachen, wenn man voraussetzt, dass \mathbf{y}_0 ein Eigenvektor von \mathbf{A} zum Eigenwert λ ist, denn dann gilt

$$\mathbf{A}\mathbf{y}_0 = \lambda\mathbf{y}_0, \quad \mathbf{A}^2\mathbf{y}_0 = \lambda^2\mathbf{y}_0, \quad \mathbf{A}^i\mathbf{y}_0 = \lambda^i\mathbf{y}_0,$$

also lässt sich die Exponentialfunktion wesentlich einfacher darstellen:

$$\mathbf{y}(t) = \exp(t\mathbf{A})\mathbf{y}_0 = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{t^i}{i!} \mathbf{A}^i \mathbf{y}_0 = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{t^i}{i!} \lambda^i \mathbf{y}_0 = \exp(t\lambda)\mathbf{y}_0,$$

die Auswertung von $\mathbf{y}(t)$ erfordert also nur noch die Berechnung des Werts der Exponentialfunktion für eine reelle Zahl. Diese Aufgabe lässt sich mit einem Aufwand von höchstens $\mathcal{O}(p)$ bewerkstelligen, ist also *wesentlich* günstiger als der ursprüngliche Ansatz.

In der Praxis wird der Startvektor \mathbf{y}_0 eher selten ein Eigenvektor von \mathbf{A} sein. Falls eine Basis $(\mathbf{v}_\ell)_{\ell=1}^n$ aus Eigenvektoren zu den Eigenwerten $(\lambda_\ell)_{\ell=1}^n$ von \mathbf{A} existiert, lässt sich \mathbf{y}_0 durch

$$\mathbf{y}_0 = \sum_{\ell=1}^n \alpha_\ell \mathbf{v}_\ell$$

darstellen, so dass sich

$$\mathbf{y}(t) = \exp(t\mathbf{A})\mathbf{y}_0 = \sum_{\ell=1}^n \alpha_\ell \exp(t\mathbf{A})\mathbf{v}_\ell = \sum_{\ell=1}^n \alpha_\ell \exp(t\lambda_\ell)\mathbf{v}_\ell$$

ergibt und sich somit mit einem Aufwand von $\mathcal{O}(np + n^2)$ berechnen lässt, falls die Koeffizienten α_ℓ vorliegen.

In der Regel werden die Koeffizienten nicht vorliegen, so dass sie erst berechnet werden müssen. Für eine allgemeine Basis $(\mathbf{v}_\ell)_{\ell=1}^n$ erfordert das einen Aufwand von $\mathcal{O}(n^3)$, ist also unattraktiv.

Falls die Basis $(\mathbf{v}_\ell)_{\ell=1}^n$ allerdings *orthonormal* ist, kann auch diese Hürde überwunden werden, weil dann

$$\alpha_\ell = \langle \mathbf{v}_\ell, \mathbf{y}_0 \rangle$$

gilt und sich die Koeffizienten also mit einem Aufwand von $\mathcal{O}(n^2)$ bestimmen lassen.

Für die Berechnung von $\mathbf{y}(t)$ sind wir also daran interessiert, *alle* Eigenwerte und Eigenvektoren einer Matrix \mathbf{A} zu berechnen und sicherzustellen, dass die Eigenvektoren eine orthonormale Basis bilden.

Schreibt man die Eigenvektoren $(\mathbf{v}_\ell)_{\ell=1}^n$ als Spalten einer Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, so folgt aus

$$\mathbf{A}\mathbf{Q}\mathbf{e}_i = \mathbf{A}\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{Q}\mathbf{e}_i$$

die Gleichung

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{A} \mathbf{Q} = \underbrace{\begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & \\ & \lambda_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \lambda_{n-1} & \\ & & & & \lambda_n \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{D}},$$

2 Beispiele

wir haben also eine orthonormale Matrix \mathbf{Q} gefunden, die \mathbf{A} diagonalisiert. Daraus lässt sich wiederum

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}^{TT}\mathbf{D}^T\mathbf{Q}^T = (\mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^T)^T = \mathbf{A}^T$$

ableiten, also die negative Aussage, dass \mathbf{A} symmetrisch sein muss, damit eine orthonormale Basis existiert, die diese Matrix diagonalisiert. Wir werden später nachweisen, dass diese Bedingung bereits hinreichend ist.

3 Theoretische Grundlagen

Dieses Kapitel hat zwei Ziele: Einerseits sollen die elementaren Aussagen über die Eigenwerte und Eigenvektoren quadratischer Matrizen zur Verfügung gestellt werden, andererseits werden einige grundlegende Begriffe aus der linearen Algebra rekapituliert, die für die Untersuchung der in den späteren Kapiteln eingeführten Verfahren nützlich sein werden.

3.1 Existenz von Eigenwerten

Wir arbeiten im Folgenden im Körper $\mathbb{K} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ der reellen oder komplexen Zahlen. An einigen Stellen greifen wir auf den Fundamentalsatz der Algebra zurück, so dass wir uns auf den Fall $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ beschränken müssen.

Die Dimensionen der behandelten Matrizen werden wir mit $n, m \in \mathbb{N}$ bezeichnen.

Definition 3.1 (Eigenwerte und Eigenvektoren) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Eine Zahl $\lambda \in \mathbb{K}$ heißt Eigenwert von \mathbf{A} genau dann, wenn es einen Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ gibt, der die Gleichung

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \tag{3.1}$$

erfüllt. Jeden derartigen Vektor bezeichnet man als Eigenvektor der Matrix \mathbf{A} zum Eigenwert λ .

Falls \mathbf{x} und \mathbf{y} Eigenvektoren einer Matrix \mathbf{A} zum gleichen Eigenwert λ sind, gilt dasselbe für alle von null verschiedenen Linearkombinationen der Vektoren:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{y}) = \mathbf{A}\mathbf{x} + \alpha\mathbf{A}\mathbf{y} = \lambda\mathbf{x} + \alpha\lambda\mathbf{y} = \lambda(\mathbf{x} + \alpha\mathbf{y}).$$

Insbesondere sind Eigenvektoren zu einem Eigenwert niemals eindeutig bestimmt, stattdessen definieren sie einen Teilraum.

Definition 3.2 (Eigenräume) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$, sei $\lambda \in \mathbb{K}$ ein Eigenwert von \mathbf{A} . Dann bezeichnet $\mathcal{E}_A(\lambda)$ den Raum, der von den Eigenvektoren von \mathbf{A} zu λ aufgespannt wird. Es gilt

$$\mathcal{E}_A(\lambda) := \text{Kern}(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}).$$

Der Raum $\mathcal{E}_A(\lambda)$ heißt Eigenraum von \mathbf{A} zu dem Eigenwert λ .

Lemma 3.3 (Charakterisierung der Eigenwerte) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und sei $\lambda \in \mathbb{K}$. Es sind äquivalent:

3 Theoretische Grundlagen

1. λ ist ein Eigenwert von \mathbf{A} ,
2. $\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}$ ist singulär,
3. $\det(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}) = 0$.

Beweis. $1 \Rightarrow 2$: Sei zunächst λ ein Eigenwert. Dann gilt insbesondere

$$\text{Kern}(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}) = \mathcal{E}_A(\lambda) \neq \{\mathbf{0}\},$$

also ist $\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}$ nicht injektiv und damit insbesondere singulär.

$2 \Rightarrow 1$: Sei nun $\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}$ singulär. Damit existiert insbesondere ein $\mathbf{x} \in \text{Kern}(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}) \setminus \{\mathbf{0}\}$, und es folgt $\lambda\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{x}$, wir haben also einen Eigenvektor zu λ gefunden.

$2 \Leftrightarrow 3$: Die Determinante einer Matrix verschwindet genau dann, wenn die Matrix singulär ist. ■

Mit Hilfe der dritten Eigenschaft aus Lemma 3.3 können wir die Eigenwerte einer Matrix als Nullstellen eines Polynoms charakterisieren:

Definition 3.4 (Charakteristisches Polynom) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Dann ist

$$p_A(\lambda) := \det(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})$$

ein Polynom n -ten Grades. Es heißt das charakteristische Polynom der Matrix \mathbf{A} .

Lemma 3.5 (Nullstellen von p_A) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Dann ist $\lambda \in \mathbb{K}$ genau dann eine Nullstelle von p_A , wenn λ ein Eigenwert von \mathbf{A} ist.

Beweis. Folgt direkt aus Lemma 3.3. ■

Bevor wir aus dieser Charakterisierung der Eigenwerte einen ersten Existenzsatz gewinnen können, führen wir einige hilfreiche Begriffe ein:

Definition 3.6 (Spektrum, Vielfachheiten) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Die Menge

$$\sigma(\mathbf{A}) = \{\lambda \in \mathbb{K} : \lambda\mathbf{I} - \mathbf{A} \text{ ist singulär}\}$$

heißt Spektrum von \mathbf{A} . Für jedes $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$ bezeichnen wir mit $\mu_A^a(\lambda)$ die Vielfachheit der Nullstelle λ des Polynoms p_A und mit $\mu_A^g(\lambda)$ die Dimension des Kerns von $\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}$. $\mu_A^a(\lambda)$ und $\mu_A^g(\lambda)$ heißen algebraische und geometrische Vielfachheit von λ .

Nun lässt sich für den komplexwertigen Fall eine erste Existenzaussage für Eigenwerte mit Hilfe des Fundamentalsatzes der Algebra gewinnen:

Satz 3.7 (Existenz von Eigenwerten) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Dann ist $\sigma(\mathbf{A}) \neq \emptyset$ und es gilt

$$\sum_{\lambda \in \sigma(\mathbf{A})} \mu_A^a(\lambda) = n.$$

3.1 Existenz von Eigenwerten

Beweis. Gemäß Fundamentalsatz der Algebra zerfällt p_A in Linearfaktoren, es gibt also $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbb{C}$ mit

$$p_A(\lambda) = \prod_{i=1}^n (\lambda - \lambda_i) \quad \text{für alle } \lambda \in \mathbb{C}.$$

Da jedes λ_i eine Nullstelle von p_A ist, gilt nach Lemma 3.5

$$\sigma(\mathbf{A}) = \{\lambda_i : i \in \{1, \dots, n\}\}.$$

Wegen

$$\mu_A^\alpha(\lambda_i) = \#\{j : \lambda_j = \lambda_i\}$$

folgt

$$\sum_{\lambda \in \sigma(\mathbf{A})} \mu_A^\alpha(\lambda) = \sum_{\lambda \in \sigma(\mathbf{A})} \#\{j : \lambda_j = \lambda\} = n.$$

■

Dieser Satz gilt in dieser Form nur für den komplexwertigen Fall, wie das folgende Beispiel illustriert:

Beispiel 3.8 Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$ durch

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

gegeben. Es gilt

$$p_A(\lambda) = \det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}) = \lambda^2 + 1,$$

also besitzt p_A keine reellen Nullstellen.

Fasst man \mathbf{A} als Matrix über \mathbb{C} auf, so gilt $\sigma(\mathbf{A}) = \{i, -i\}$, die Matrix besitzt also zwei rein imaginäre Eigenwerte, zu denen etwa

$$\mathbf{x}_1 := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \mathbf{x}_2 := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}$$

Eigenvektoren sind, die sogar eine Orthonormalbasis von \mathbb{C}^2 bilden.

Im dritten Beispiel aus Kapitel 2, dem linearen Anfangswertproblem, stellte sich die Frage nach der Existenz einer Basis aus Eigenvektoren einer gewissen Matrix. Da ein Eigenvektor nicht zu zwei Eigenwerten gehören kann, sind die Eigenräume zu unterschiedlichen Eigenwerten disjunkt, und es folgt, dass eine Basis aus Eigenvektoren genau dann existiert, wenn

$$\sum_{\lambda \in \sigma(A)} \mu_A^g(\lambda) = n$$

gilt. Das ist nicht immer der Fall, wie das folgende Beispiel demonstriert:

Beispiel 3.9 *Wir untersuchen die Matrix*

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Wegen

$$p_A(\lambda) = \det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}) = (\lambda - 1)^2$$

gilt $\sigma(\mathbf{A}) = \{1\}$. Um die geometrische Vielfachheit $\mu_A^g(1)$ von $\lambda = 1$ zu bestimmen, müssen wir die Dimension des Kerns von

$$\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

berechnen. Da das Bild dieser Matrix eindimensional ist, muss es ihr Kern ebenfalls sein. Demzufolge erhalten wir mit

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

zwar einen Eigenvektor, können aber keinen zweiten von ihm linear unabhängigen finden. Es gilt also $\mu_A^a(\lambda) = 2 > 1 = \mu_A^g(\lambda)$.

3.2 Ähnlichkeitstransformationen

Bei einer Diagonal- oder Dreiecksmatrix lassen sich die Eigenwerte und ihre algebraischen Vielfachheiten direkt an den Diagonalelementen ablesen, also wäre es nützlich, wenn wir allgemeine Matrizen auf diese spezielle Form bringen könnten.

Es stellt sich die Frage, wie eine Transformation aussehen muss, die mindestens die Eigenwerte unverändert lässt. Für die Klärung dieser Frage untersuchen wir eine Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit einem Eigenwert $\lambda \in \mathbb{K}$ und einem passenden Eigenvektor $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$. Nach Definition gilt

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}.$$

Für eine beliebige Matrix $\mathbf{B} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ folgt daraus

$$\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{B}\mathbf{x}.$$

Das ist leider keine Eigenwert-Gleichung mehr. Falls \mathbf{B} regulär ist, können wir allerdings einen neuen Vektor

$$\hat{\mathbf{x}} := \mathbf{B}\mathbf{x}, \quad \mathbf{x} = \mathbf{B}^{-1}\hat{\mathbf{x}} \tag{3.2}$$

definieren und erhalten

$$\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1}\hat{\mathbf{x}} = \lambda\hat{\mathbf{x}},$$

also wieder eine Eigenwert-Gleichung für die neue Matrix

$$\hat{\mathbf{A}} := \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1}.$$

Der Wechsel von \mathbf{A} zu $\hat{\mathbf{A}}$ lässt also Eigenwerte unverändert, während sich mit den Gleichungen (3.2) Eigenvektoren ineinander überführen lassen.

Definition 3.10 (Ähnliche Matrizen) Seien $\mathbf{A}, \widehat{\mathbf{A}} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Die Matrizen \mathbf{A} und $\widehat{\mathbf{A}}$ heißen ähnlich, wenn eine reguläre Matrix $\mathbf{B} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit

$$\widehat{\mathbf{A}} = \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1} \quad (3.3)$$

existiert. Den Übergang von \mathbf{A} zu $\widehat{\mathbf{A}}$ bezeichnen wir als Ähnlichkeitstransformation.

Wir haben bereits gesehen, dass bei einer Ähnlichkeitstransformation Eigenwerte unverändert bleiben. Mit Hilfe der Determinanten-Multiplikationssatzes lässt sich sogar beweisen, dass das charakteristische Polynom ebenfalls unverändert bleibt, also insbesondere auch die algebraischen Vielfachheiten:

Lemma 3.11 (Eigenwerte ähnlicher Matrizen) Seien $\mathbf{A}, \widehat{\mathbf{A}} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ ähnliche Matrizen. Dann gilt $p_{\mathbf{A}} = p_{\widehat{\mathbf{A}}}$, also folgt insbesondere $\sigma(\mathbf{A}) = \sigma(\widehat{\mathbf{A}})$ und für alle $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$ gilt $\mu_{\mathbf{A}}^a(\lambda) = \mu_{\widehat{\mathbf{A}}}^a(\lambda)$.

Beweis. Sei $\mathbf{B} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine reguläre Matrix mit $\widehat{\mathbf{A}} = \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1}$. Aus dem Determinanten-Multiplikationssatz folgt

$$\begin{aligned} p_{\mathbf{A}}(\lambda) &= \det(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}) = \det(\mathbf{I}) \det(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}) \\ &= \det(\mathbf{B}\mathbf{B}^{-1}) \det(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}) = \det(\mathbf{B}) \det(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}) \det(\mathbf{B}^{-1}) \\ &= \det(\mathbf{B}(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{B}^{-1}) = \det(\lambda\mathbf{B}\mathbf{B}^{-1} - \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1}) \\ &= \det(\lambda\mathbf{I} - \widehat{\mathbf{A}}) = p_{\widehat{\mathbf{A}}}(\lambda) \end{aligned}$$

für alle $\lambda \in \mathbb{K}$. ■

Eigenvektoren bleiben unter Ähnlichkeitstransformationen nicht unverändert, allerdings lässt sich explizit angeben, wie sie sich ändern. Insbesondere folgt, dass auch die geometrischen Vielfachheiten unverändert bleiben.

Lemma 3.12 (Eigenvektoren) Seien $\mathbf{A}, \widehat{\mathbf{A}} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ ähnliche Matrizen und sei $\mathbf{B} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine reguläre Matrix mit $\widehat{\mathbf{A}} = \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1}$. Für jeden Eigenwert $\lambda \in \sigma(\mathbf{A}) = \sigma(\widehat{\mathbf{A}})$ gilt die Gleichung

$$\mathcal{E}_{\widehat{\mathbf{A}}}(\lambda) = \mathbf{B}\mathcal{E}_{\mathbf{A}}(\lambda).$$

Insbesondere folgt $\mu_{\mathbf{A}}^g(\lambda) = \mu_{\widehat{\mathbf{A}}}^g(\lambda)$.

Beweis. Sei $\lambda \in \sigma(\mathbf{A}) = \sigma(\widehat{\mathbf{A}})$.

„ \supseteq “: Sei $x \in \mathcal{E}_{\mathbf{A}}(\lambda)$. Mit $\widehat{\mathbf{x}} := \mathbf{B}\mathbf{x}$ gilt

$$\widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{x}} = \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{B}\lambda\mathbf{x} = \lambda\widehat{\mathbf{x}},$$

also ist $\widehat{\mathbf{x}} = \mathbf{B}\mathbf{x}$ ein Eigenvektor der Matrix $\widehat{\mathbf{A}}$ zu dem Eigenwert λ und somit ein Element des Eigenraums $\mathcal{E}_{\widehat{\mathbf{A}}}(\lambda)$.

3 Theoretische Grundlagen

„ \subseteq “: Sei $\widehat{\mathbf{x}} \in \mathcal{E}_{\widehat{\mathbf{A}}}(\lambda)$. Mit $\mathbf{x} := \mathbf{B}^{-1}\widehat{\mathbf{x}}$ gilt

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{B}^{-1}\widehat{\mathbf{x}} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1}\widehat{\mathbf{x}} = \mathbf{B}^{-1}\widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{x}} = \mathbf{B}^{-1}\lambda\widehat{\mathbf{x}} = \lambda\mathbf{x},$$

also ist $\mathbf{x} = \mathbf{B}^{-1}\widehat{\mathbf{x}}$ ein Eigenvektor der Matrix \mathbf{A} zu dem Eigenwert λ und somit ein Element des Eigenraums $\mathcal{E}_A(\lambda)$. ■

Von besonderem Interesse sind Ähnlichkeitstransformationen, die eine Matrix auf Diagonalgestalt bringen, denn bei einer Diagonalmatrix lassen sich nicht nur die Eigenwerte unmittelbar ablesen, sondern wir können die durch

$$\delta_i^{(j)} := \begin{cases} 1 & \text{falls } i = j, \\ 0 & \text{ansonsten} \end{cases} \quad \text{für alle } i, j \in \{1, \dots, n\}$$

definierten *kanonischen Einheitsvektoren* $\delta^{(1)}, \dots, \delta^{(n)} \in \mathbb{K}^n$ als Eigenvektoren verwenden, die aufgrund ihrer einfachen Gestalt häufig große Vorzüge bieten.

Beispielsweise können wir kanonische Einheitsvektoren in Kombination mit einer geeignet gewählten Ähnlichkeitstransformation verwenden, um eine Beziehung zwischen der geometrischen und der algebraischen Vielfachheit eines Eigenwert zu gewinnen.

Lemma 3.13 Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$, sei $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$. Dann gilt

$$1 \leq \mu_A^g(\lambda) \leq \mu_A^a(\lambda).$$

Beweis. Die erste Ungleichung folgt direkt aus Lemma 3.3. Zum Nachweis der zweiten konstruieren wir eine geeignete Ähnlichkeitstransformation, indem wir $p := \mu_A^g(\lambda)$ linear unabhängige Eigenvektoren $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p \in \mathbb{K}^n$ von \mathbf{A} zum Eigenwert λ wählen und sie zu einer Basis $(\mathbf{x}_i)_{i=1}^p$ ergänzen. Wir bezeichnen mit $\mathbf{X} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ die reguläre Matrix, deren Spalten die Vektoren $(\mathbf{x}_i)_{i=1}^p$ sind, die also gerade

$$\mathbf{X}\delta^{(i)} = \mathbf{x}_i \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, p\}$$

erfüllt. Daraus folgt

$$\mathbf{A}\mathbf{X}\delta^{(i)} = \mathbf{A}\mathbf{x}_i = \lambda_i\mathbf{x}_i = \lambda_i\mathbf{X}\delta^{(i)} \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, p\},$$

so dass wir insbesondere

$$\mathbf{X}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{X}\delta^{(i)} = \lambda_i\delta^{(i)} \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, p\}$$

erhalten. Also verschwinden in den ersten p Spalten der Matrix $\widehat{\mathbf{A}} := \mathbf{X}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{X}$ jeweils die unteren $n - p$ Zeilen, so dass die Matrix die Form

$$\widehat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \lambda\mathbf{I} & \mathbf{R} \\ 0 & \mathbf{C} \end{pmatrix}$$

für Matrizen $\mathbf{R} \in \mathbb{K}^{p \times (n-p)}$ und $\mathbf{C} \in \mathbb{K}^{(n-p) \times (n-p)}$ aufweist. Da $\widehat{\mathbf{A}}$ und \mathbf{A} ähnlich sind, gilt nach Lemma 3.11 $p_A = p_{\widehat{\mathbf{A}}}$, also folgt für alle $\alpha \in \mathbb{K}$ die Gleichung

$$\begin{aligned} p_A(\alpha) &= p_{\widehat{\mathbf{A}}}(\alpha) = \det(\alpha\mathbf{I} - \widehat{\mathbf{A}}) \\ &= \det(\alpha\mathbf{I} - \lambda\mathbf{I}) \det(\alpha\mathbf{I} - \mathbf{C}) = (\alpha - \lambda)^p p_C(\alpha), \end{aligned}$$

und damit ist λ eine mindestens p -fache Nullstelle von p_A . ■

3.3 Hilberträume

Neben den bisher eingeführten algebraischen Techniken haben sich auch Konzepte der Analysis als sehr nützlich für die Untersuchung von Eigenwertproblemen erwiesen. Für uns sind dabei vor allem bestimmte Eigenschaften von Bedeutung, die in *Hilberträumen* gelten, also in Banach-Räumen, deren Norm von einem Skalarprodukt induziert ist.

Auf dem Raum \mathbb{K}^n verwendet man typischerweise das *euklidische Skalarprodukt*, das durch

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle := \sum_{i=1}^n \bar{x}_i y_i \quad \text{für alle } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n$$

definiert ist. Es ist eine *Sesquilinearform*, erfüllt also die Gleichungen

$$\langle \mathbf{x} + \alpha \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{z} \rangle + \bar{\alpha} \langle \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle, \quad (3.4a)$$

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} + \alpha \mathbf{z} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle + \alpha \langle \mathbf{x}, \mathbf{z} \rangle, \quad (3.4b)$$

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \overline{\langle \mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle} \quad \text{für alle } \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in \mathbb{K}^n, \alpha \in \mathbb{K}. \quad (3.4c)$$

Das euklidische Skalarprodukt induziert die *euklidische Norm*

$$\|\mathbf{x}\| := \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{1/2} \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n,$$

und aus dieser Beziehung folgt die *Cauchy-Schwarz-Ungleichung*

$$|\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle| \leq \|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\| \quad \text{für alle } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n. \quad (3.5)$$

Beide Seiten dieser Ungleichung sind genau dann gleich, wenn die Vektoren \mathbf{x} und \mathbf{y} linear abhängig sind.

Eine nützliche Beziehung zwischen der Matrix-Vektor-Multiplikation und dem Skalarprodukt können wir mit Hilfe der *adjungierten Matrix* gewinnen:

Definition 3.14 (Adjungierte Matrix) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}$. Die durch

$$b_{ij} = \bar{a}_{ji} \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, m\}, j \in \{1, \dots, n\}$$

definierte Matrix $\mathbf{B} \in \mathbb{K}^{m \times n}$ heißt *Adjungierte von \mathbf{A}* und wir mit $\mathbf{A}^* = \mathbf{B}$ bezeichnen. Im Falle $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ entspricht sie der transponierten Matrix \mathbf{A}^T , im Falle $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ der hermiteschen Matrix \mathbf{A}^H .

Bei unseren Untersuchungen spielt die Beziehung zwischen dem Skalarprodukt und der Adjungierten eine wichtige Rolle.

Lemma 3.15 (Adjungierte und Skalarprodukt) Seien eine Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}$ sowie Vektoren $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^m$ und $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^n$ gegeben. Dann gilt

$$\langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{A}^*\mathbf{y} \rangle.$$

3 Theoretische Grundlagen

Beweis. Nach Definition des Skalarprodukts und der Matrix-Vektor-Multiplikation gilt

$$\langle \mathbf{Ax}, \mathbf{y} \rangle = \sum_{i=1}^n \overline{\left(\sum_{j=1}^m a_{ij} x_j \right)} y_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \bar{a}_{ij} \bar{x}_j y_i = \sum_{j=1}^m \bar{x}_j \left(\sum_{i=1}^n \bar{a}_{ij} y_i \right) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{A}^* \mathbf{y} \rangle.$$

Das ist die gesuchte Identität. ■

Diese Gleichung lässt sich vielfältig einsetzen. Als Beispiel beweisen wir die folgende Aussage über die Adjungierte eines Produkts zweier Matrizen:

Lemma 3.16 (Adjungierte eines Produkts) *Seien $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}$ und $\mathbf{B} \in \mathbb{K}^{m \times k}$ mit $n, m, k \in \mathbb{N}$ gegeben. Dann gilt*

$$(\mathbf{AB})^* = \mathbf{B}^* \mathbf{A}^*.$$

Beweis. Nach Lemma 3.15 gelten die Gleichungen

$$\langle \mathbf{x}, (\mathbf{AB})^* \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{ABx}, \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{Bx}, \mathbf{A}^* \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{B}^* \mathbf{A}^* \mathbf{y} \rangle \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^k, \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n.$$

Daraus folgt

$$\langle \mathbf{x}, ((\mathbf{AB})^* - \mathbf{B}^* \mathbf{A}^*) \mathbf{y} \rangle = 0 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^k, \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n,$$

und indem wir $\mathbf{x} := ((\mathbf{AB})^* - \mathbf{B}^* \mathbf{A}^*) \mathbf{y}$ einsetzen erhalten wir

$$\|((\mathbf{AB})^* - \mathbf{B}^* \mathbf{A}^*) \mathbf{y}\|^2 = 0 \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n,$$

so dass sich unmittelbar die gewünschte Gleichung ergibt. ■

Bei der Analyse numerischer Näherungsverfahren stellt sich häufig die Frage danach, wie sich in den einzelnen Stufen des Algorithmus' eingeführte Approximationsfehler auf den Gesamtfehler auswirken. Deshalb müssen wir in der Lage sein, zu messen, wie sehr sich Matrizen unterscheiden. Zu diesem Zweck definieren wir die *Spektralnorm*:

Definition 3.17 (Spektralnorm) *Seien $n, m \in \mathbb{N}$. Die Spektralnorm auf $\mathbb{K}^{n \times m}$ ist durch*

$$\|\mathbf{A}\| := \max \left\{ \frac{\|\mathbf{Az}\|}{\|\mathbf{z}\|} : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \quad \text{für alle } \mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}$$

definiert.

Einige wesentliche Eigenschaften der Spektralnorm fasst das folgende Lemma zusammen.

Lemma 3.18 (Spektralnorm) Seien $n, m, k \in \mathbb{N}$. Die Spektralnorm ist verträglich mit der euklidischen Norm, es gilt nämlich

$$\|\mathbf{Az}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{z}\| \quad \text{für alle } \mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}, \mathbf{z} \in \mathbb{K}^m. \quad (3.6)$$

Die Spektralnorm ist auch submultiplikativ, erfüllt also

$$\|\mathbf{AB}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{B}\| \quad \text{für alle } \mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}, \mathbf{B} \in \mathbb{K}^{m \times k}. \quad (3.7)$$

Die Spektralnorm lässt sich alternativ durch

$$\|\mathbf{A}\| = \max \left\{ \frac{|\langle \mathbf{y}, \mathbf{Az} \rangle|}{\|\mathbf{y}\| \|\mathbf{z}\|} : \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}, \mathbf{z} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \quad \text{für alle } \mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m} \quad (3.8)$$

darstellen. Aus dieser Gleichung folgen die Beziehungen

$$\|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{A}^*\| = \|\mathbf{A}^* \mathbf{A}\|^{1/2} = \|\mathbf{A} \mathbf{A}^*\|^{1/2} \quad \text{für alle } \mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}. \quad (3.9)$$

Beweis. Seien $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}$ und $\mathbf{z} \in \mathbb{K}^m$. Falls $\mathbf{z} = \mathbf{0}$ gilt, folgt $\|\mathbf{Az}\| = 0 = \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{z}\|$ unmittelbar.

Ansonsten gilt nach Definition

$$\frac{\|\mathbf{Az}\|}{\|\mathbf{z}\|} \leq \|\mathbf{A}\|,$$

und Multiplikation mit $\|\mathbf{z}\|$ führt zu (3.6).

Indem wir (3.6) zweimal anwenden erhalten wir

$$\|\mathbf{ABz}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{Bz}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{B}\| \|\mathbf{z}\| \quad \text{für alle } \mathbf{z} \in \mathbb{K}^k,$$

so dass sich aus Definition 3.17 unmittelbar die Ungleichung (3.7) ergibt.

Sei $\mathbf{z} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\}$ gegeben. Mit der Cauchy-Schwarz-Ungleichung (3.5) erhalten wir

$$\frac{|\langle \mathbf{y}, \mathbf{Az} \rangle|}{\|\mathbf{y}\| \|\mathbf{z}\|} \leq \frac{\|\mathbf{y}\| \|\mathbf{Az}\|}{\|\mathbf{y}\| \|\mathbf{z}\|} = \frac{\|\mathbf{Az}\|}{\|\mathbf{z}\|} \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}. \quad (3.10)$$

Falls $\mathbf{y} := \mathbf{Az} \neq \mathbf{0}$ gilt, haben wir

$$\frac{|\langle \mathbf{y}, \mathbf{Az} \rangle|}{\|\mathbf{y}\| \|\mathbf{z}\|} = \frac{|\langle \mathbf{Az}, \mathbf{Az} \rangle|}{\|\mathbf{Az}\| \|\mathbf{z}\|} = \frac{\|\mathbf{Az}\|^2}{\|\mathbf{Az}\| \|\mathbf{z}\|} = \frac{\|\mathbf{Az}\|}{\|\mathbf{z}\|}$$

und gemeinsam mit (3.10) ergibt sich

$$\frac{\|\mathbf{Az}\|}{\|\mathbf{z}\|} \leq \max \left\{ \frac{|\langle \mathbf{y}, \mathbf{Az} \rangle|}{\|\mathbf{y}\| \|\mathbf{z}\|} : \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \leq \|\mathbf{A}\|.$$

Diese Abschätzung bleibt offenbar auch korrekt, falls $\mathbf{Az} = \mathbf{0}$ gilt. Indem wir zu dem Maximum über alle $\mathbf{z} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\}$ übergehen folgt (3.8).

3 Theoretische Grundlagen

Aus dieser Gleichung folgt mit Lemma 3.15 und (3.4c) direkt

$$\begin{aligned}\|\mathbf{A}\| &= \max \left\{ \frac{|\langle \mathbf{y}, \mathbf{Az} \rangle|}{\|\mathbf{y}\| \|\mathbf{z}\|} : \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}, \mathbf{z} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \\ &= \max \left\{ \frac{|\langle \mathbf{A}^* \mathbf{y}, \mathbf{z} \rangle|}{\|\mathbf{y}\| \|\mathbf{z}\|} : \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}, \mathbf{z} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \\ &= \max \left\{ \frac{|\langle \mathbf{z}, \mathbf{A}^* \mathbf{y} \rangle|}{\|\mathbf{z}\| \|\mathbf{y}\|} : \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}, \mathbf{z} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} = \|\mathbf{A}^*\|.\end{aligned}$$

Mit dieser Gleichung in Kombination mit Lemma 3.15, (3.8) sowie (3.7) erhalten wir

$$\begin{aligned}\|\mathbf{A}\|^2 &= \max \left\{ \frac{\|\mathbf{Az}\|^2}{\|\mathbf{z}\|^2} : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \\ &= \max \left\{ \frac{|\langle \mathbf{Az}, \mathbf{Az} \rangle|}{\|\mathbf{z}\|^2} : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \\ &= \max \left\{ \frac{|\langle \mathbf{z}, \mathbf{A}^* \mathbf{Az} \rangle|}{\|\mathbf{z}\|^2} : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \\ &\leq \max \left\{ \frac{|\langle \mathbf{y}, \mathbf{A}^* \mathbf{Az} \rangle|}{\|\mathbf{y}\| \|\mathbf{z}\|} : \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}, \mathbf{z} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \\ &= \|\mathbf{A}^* \mathbf{A}\| \leq \|\mathbf{A}^*\| \|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{A}\|^2.\end{aligned}$$

Indem wir dieses Resultat auf \mathbf{A}^* anstelle von \mathbf{A} anwenden folgt die letzte Gleichung. ■

In einigen der folgenden Beweise benötigen wir eine Möglichkeit, rechteckige Matrizen zu „invertieren“. Diese Pseudo-Inverse können wir mit Hilfe der Adjungierten definieren. Ein erster Schritt in dieser Richtung ist das folgende Lemma, mit dem sich die Identität von Vektoren im Bild der Matrix überprüfen lässt.

Lemma 3.19 (Bild und Kern) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}$. Dann gilt

$$\text{Bild}(\mathbf{A}) \cap \text{Kern}(\mathbf{A}^*) = \{\mathbf{0}\}. \quad (3.11)$$

Insbesondere folgt für alle $\mathbf{x} \in \text{Bild}(\mathbf{A})$ aus $\mathbf{A}^* \mathbf{x} = \mathbf{0}$ bereits $\mathbf{x} = \mathbf{0}$.

Beweis. Seien $\mathbf{x} \in \text{Bild}(\mathbf{A})$ und $\mathbf{y} \in \text{Kern}(\mathbf{A}^*)$. Dann existiert ein $\mathbf{z} \in \mathbb{K}^m$ mit $\mathbf{x} = \mathbf{Az}$, so dass wir mit Lemma 3.15 die Gleichung

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{Az}, \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{z}, \mathbf{A}^* \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{z}, \mathbf{0} \rangle = 0$$

erhalten. Mit $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ folgt $\|\mathbf{x}\| = 0$, also unsere Behauptung. ■

Aus dieser Eigenschaft folgt bereits, dass zwei Vektoren aus dem Bild einer Matrix \mathbf{A} genau dann identisch sind, falls ihre Produkte mit der Adjungierten \mathbf{A}^* identisch sind. Um auch passende Urbilder rekonstruieren zu können, benötigen wir zusätzliche Eigenschaften der Matrix.

Definition 3.20 (Positiv definit) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Die Matrix \mathbf{A} heißt positiv definit, falls

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{Ax} \rangle > 0 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\} \quad (3.12)$$

gilt. Sie heißt positiv semidefinit, falls die Ungleichung

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{Ax} \rangle \geq 0 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \quad (3.13)$$

erfüllt ist.

Eine positiv definite Matrix ist immer invertierbar, denn aus (3.12) folgt unmittelbar, dass nur der Nullvektor im Kern der Matrix liegen kann, dass \mathbf{A} also injektiv ist. Da \mathbf{A} eine quadratische Matrix ist, muss sie nach dem Dimensionssatz für lineare Abbildungen auch invertierbar sein.

Wenn wir für einen Vektor \mathbf{x} aus dem Bild einer Matrix \mathbf{A} ein Urbild rekonstruieren wollen, also einen Vektor \mathbf{y} mit $\mathbf{x} = \mathbf{Ay}$ suchen, können wir uns dem Problem nähern, indem wir beide Seiten der Gleichung mit der Adjungierten \mathbf{A}^* multiplizieren und

$$\mathbf{A}^* \mathbf{x} = \mathbf{A}^* \mathbf{Ay}$$

erhalten. Falls die Gramsche Matrix $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$ auf der rechten Seite invertierbar ist, können wir die Gleichung mit deren Inversen multiplizieren und eine explizite Formel erhalten, mit der sich \mathbf{y} aus \mathbf{x} berechnen lässt.

Lemma 3.21 (Gramsche Matrizen) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}$. Dann sind $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$ und \mathbf{AA}^* positiv semidefinite Matrizen.

\mathbf{A} ist genau dann injektiv, wenn $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$ positiv definit ist.

\mathbf{A} ist genau dann surjektiv, wenn \mathbf{AA}^* positiv definit ist.

Beweis. Mit Lemma 3.15 erhalten wir

$$\langle \mathbf{A}^* \mathbf{Ax}, \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{Ax}, \mathbf{Ax} \rangle = \|\mathbf{Ax}\|^2 \geq 0, \quad (3.14a)$$

$$\langle \mathbf{AA}^* \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{A}^* \mathbf{x}, \mathbf{A}^* \mathbf{x} \rangle = \|\mathbf{A}^* \mathbf{x}\|^2 \geq 0 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n, \quad (3.14b)$$

also sind $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$ und \mathbf{AA}^* positiv semidefinit.

Falls \mathbf{A} injektiv ist, gilt $\|\mathbf{Ax}\| > 0$ für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$, also ist nach (3.14a) die Matrix $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$ positiv definit.

Falls umgekehrt $\mathbf{A}^* \mathbf{A}$ positiv definit ist, gilt nach (3.14a) die Ungleichung $\|\mathbf{Ax}\| > 0$ für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$, also kann der Kern der Matrix \mathbf{A} nur den Nullvektor enthalten. Damit muss \mathbf{A} injektiv sein.

Falls \mathbf{A} surjektiv ist, falls wir also $\text{Bild}(\mathbf{A}) = \mathbb{K}^n$ haben, folgt aus Lemma 3.19 bereits $\text{Kern}(\mathbf{A}^*) = \{\mathbf{0}\}$, also gilt insbesondere $\|\mathbf{A}^* \mathbf{x}\| = 0$ genau dann, wenn $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ gilt. Also muss nach (3.14b) die Matrix \mathbf{AA}^* positiv definit sein.

Falls umgekehrt \mathbf{AA}^* positiv definit, also insbesondere invertierbar ist, können wir zu jedem $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$ den Vektor $\mathbf{y} := \mathbf{A}^*(\mathbf{AA}^*)^{-1} \mathbf{x}$ definieren und erhalten

$$\mathbf{Ay} = \mathbf{AA}^*(\mathbf{AA}^*)^{-1} \mathbf{x} = \mathbf{x},$$

also folgt $\mathbf{x} \in \text{Bild}(\mathbf{A})$ für beliebige $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$, so dass \mathbf{A} surjektiv sein muss. ■

3.4 Invariante Unterräume

Wie bereits gesehen, lässt sich der Raum \mathbb{K}^n im allgemeinen nicht in eine direkte Summe von Eigenräumen zerlegen. Es ist allerdings möglich, die Eigenräume durch allgemeinere Teilräume von \mathbb{K}^n zu ersetzen, die dann eine direkte Summe bilden:

Definition 3.22 (Invariante Unterräume) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Ein Teilraum $\mathcal{V} \subseteq \mathbb{K}^n$ heißt bezüglich \mathbf{A} invarianter Unterraum, falls für alle $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ die Gleichung

$$\mathbf{A}\mathbf{x} \in \mathcal{V}$$

gilt, falls also $\mathbf{A}\mathcal{V} \subseteq \mathcal{V}$ erfüllt ist.

Beispiel 3.23 Sei $p \in \mathbb{N}$ und $(\mathbf{x}_i)_{i=1}^p$ eine Familie von Eigenvektoren der Eigenwerte $(\lambda_i)_{i=1}^p$. Dann ist

$$\mathcal{V} := \text{span}\{\mathbf{x}_i : i \in \{1, \dots, p\}\}$$

ein bezüglich \mathbf{A} invarianter Unterraum.

Beweis. Offensichtlich gilt $\mathbf{A}\mathbf{x}_i = \lambda_i\mathbf{x}_i \in \mathcal{V}$ für alle $i \in \{1, \dots, p\}$, also gilt dasselbe auch für den Aufspann dieser Vektoren. ■

Beispiel 3.24 Sei $\mathbf{R} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine obere Dreiecksmatrix. Dann ist für jedes $p \in \{1, \dots, n\}$ der Raum

$$\mathcal{V} := \text{span}\{\delta^{(i)} : i \in \{1, \dots, p\}\} = \mathbb{K}^p \times \{\mathbf{0}\} \subseteq \mathbb{K}^n$$

invariant bezüglich \mathbf{R} .

Für Eigenräume gilt die Gleichung $\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ mit dem Eigenwert λ . Für invariante Unterräume wird diese Gleichung etwas verallgemeinert, indem wir den Eigenwert λ durch eine kleine quadratische Matrix ersetzen und den Eigenvektor \mathbf{x} durch eine aus mehreren Vektoren gebildete Matrix.

Lemma 3.25 Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und sei $\mathcal{V} \subseteq \mathbb{K}^n$ ein bezüglich \mathbf{A} invarianter Unterraum. Sei $\mathbf{X} \in \mathbb{K}^{n \times p}$ eine injektive Matrix, deren Spalten eine Basis von \mathcal{V} bilden, die also die Gleichung

$$\text{Bild}(\mathbf{X}) = \mathcal{V}$$

erfüllt. Dann gibt es eine Matrix $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{K}^{p \times p}$ mit

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{X}\mathbf{\Lambda}. \tag{3.15}$$

Beweis. Da \mathbf{X} injektiv ist, ist $\mathbf{X}^*\mathbf{X}$ nach Lemma 3.21 positiv definit, also insbesondere regulär, somit ist

$$\mathbf{\Lambda} := (\mathbf{X}^*\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^*\mathbf{A}\mathbf{X} \in \mathbb{K}^{p \times p}$$

wohldefiniert. Sei $\mathbf{z} \in \mathbb{K}^p$. Dann gilt

$$\mathbf{x} := \mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{z} \in \mathcal{V},$$

wegen $\mathbf{X}\mathbf{z} \in \mathcal{V}$ und da \mathcal{V} bezüglich \mathbf{A} invariant ist, und es gilt offensichtlich

$$\mathbf{y} := \mathbf{X}\mathbf{\Lambda}\mathbf{z} \in \text{Bild } \mathbf{X} = \mathcal{V}.$$

Wir multiplizieren \mathbf{x} und \mathbf{y} mit \mathbf{X}^* und erhalten

$$\mathbf{X}^*\mathbf{y} = \mathbf{X}^*\mathbf{X}\mathbf{\Lambda}\mathbf{z} = \mathbf{X}^*\mathbf{X}(\mathbf{X}^*\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^*\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{z} = \mathbf{X}^*\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{z} = \mathbf{X}^*\mathbf{x}.$$

Mit Lemma 3.19 folgt wegen $\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\} \subseteq \mathcal{V} = \text{Bild } \mathbf{X}$ die Gleichung $\mathbf{x} = \mathbf{y}$, also

$$\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{z} = \mathbf{x} = \mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{\Lambda}\mathbf{z}$$

für alle $\mathbf{z} \in \mathbb{K}^p$. ■

Bemerkung 3.26 Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Falls Matrizen $\mathbf{X} \in \mathbb{K}^{n \times p}$ und $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{K}^{p \times p}$ so gegeben sind, dass (3.15) gilt, muss $\mathcal{V} := \text{Bild}(\mathbf{X})$ bereits ein invarianter Teilraum sein: Für jedes $\mathbf{x} \in \text{Bild}(\mathbf{X})$ existiert ein Urbild $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^p$ mit $\mathbf{x} = \mathbf{X}\mathbf{y}$, so dass

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{\Lambda}\mathbf{y} \in \text{Bild}(\mathbf{X})$$

unmittelbar folgt.

Bemerkung 3.27 Seien $\mathbf{A}, \widehat{\mathbf{A}} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ ähnliche Matrizen mit $\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{B}^{-1} = \widehat{\mathbf{A}}$ für eine reguläre Matrix \mathbf{B} . Dann ist für jeden bezüglich \mathbf{A} invarianten Unterraum $\mathcal{V} \subseteq \mathbb{K}^n$ die Menge

$$\widehat{\mathcal{V}} := \mathbf{B}^{-1}\mathcal{V}$$

ein bezüglich \mathbf{B} invarianter Unterraum.

Bemerkung 3.28 Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$, und seien Matrizen $\mathbf{X} \in \mathbb{K}^{n \times p}$ und $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{K}^{p \times p}$ so gegeben sind, dass (3.15) gilt. Falls \mathbf{X} injektiv ist, ist jeder Eigenwert der Matrix $\mathbf{\Lambda}$ auch ein Eigenwert der Matrix \mathbf{A} : Für jedes $\lambda \in \sigma(\mathbf{\Lambda})$ existiert ein Eigenvektor $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^p \setminus \{\mathbf{0}\}$. Da \mathbf{X} injektiv ist, ist $\mathbf{x} := \mathbf{X}\mathbf{y}$ nicht der Nullvektor. Es folgt

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{\Lambda}\mathbf{y} = \mathbf{X}\lambda\mathbf{y} = \lambda\mathbf{x}.$$

3.5 Selbstadjungierte und unitäre Matrizen

Einen invarianten Unterraum können wir durch eine beliebige Basis darstellen. Aus der Perspektive der Numerik ist es ratsam, eine *Orthonormalbasis* zu verwenden, denn derartige Basen zeichnen sich durch eine besondere Unempfindlichkeit gegenüber Rundungsfehlern aus.

Definition 3.29 (Isometrisch und unitär) Sei $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times m}$. Falls die Gleichung

$$\mathbf{Q}^* \mathbf{Q} = \mathbf{I}$$

gilt, nennen wir \mathbf{Q} isometrisch.

Falls \mathbf{Q} isometrisch und quadratisch ist, falls also auch noch $n = m$ gilt, nennen wir \mathbf{Q} unitär.

Um die Bezeichnung „isometrische Matrix“ zu rechtfertigen müssen wir auf eine auch noch für andere Zwecke nützliche Klasse von Matrizen zurückgreifen, nämlich auf die *selbstadjungierten Matrizen*.

Definition 3.30 (Selbstadjungierte Matrix) Eine Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ heißt selbstadjungiert, falls $\mathbf{A} = \mathbf{A}^*$ gilt.

Neben vielen anderen vorteilhaften Eigenschaften bieten selbstadjungierte Matrizen den Vorteil, dass sich viele wichtige Eigenschaften bereits an dem Skalarprodukt $\langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle$ ablesen lassen. Für unseren Zweck genügt zunächst die folgende Identitätsaussage:

Lemma 3.31 (Identität selbstadjungierter Matrizen) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine selbstadjungierte Matrix. Falls

$$\langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = 0 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \quad (3.16)$$

gilt, folgt bereits $\mathbf{A} = \mathbf{0}$.

Beweis. Wir nehmen an, dass (3.16) gilt. Seien $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n$. Nach Voraussetzung folgt mit Lemma 3.15 die Gleichung

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{y}), \mathbf{x} + \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{A}\mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle + \langle \mathbf{A}\mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle \\ &= \langle \mathbf{A}\mathbf{y}, \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{y}, \mathbf{A}^* \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{y}, \mathbf{A}\mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle. \end{aligned}$$

Nun können wir $\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ setzen und erhalten $0 = 2\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|^2$, also $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$ für jeden beliebigen Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$, und damit insbesondere $\mathbf{A} = \mathbf{0}$. ■

Mit diesem Hilfsmittel können wir nun eine alternative Charakterisierung isometrischer Matrizen angeben:

Lemma 3.32 (Isometrische Matrix) Sei $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times m}$. \mathbf{Q} ist genau dann isometrisch, wenn

$$\|\mathbf{Q}\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\| \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \quad (3.17)$$

gilt, wenn die Multiplikation mit \mathbf{Q} also die Norm unverändert lässt.

Beweis. „ \Rightarrow “: Sei zunächst \mathbf{Q} isometrisch. Nach Lemma 3.15 folgt

$$\|\mathbf{Q}\mathbf{x}\|^2 = \langle \mathbf{Q}\mathbf{x}, \mathbf{Q}\mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{Q}^* \mathbf{Q}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \|\mathbf{x}\|^2 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n,$$

also gerade (3.17).

„ \Leftarrow “: Gelte nun umgekehrt (3.17). Es folgt

$$\begin{aligned} 0 &= \|\mathbf{Q}\mathbf{x}\|^2 - \|\mathbf{x}\|^2 = \langle \mathbf{Q}\mathbf{x}, \mathbf{Q}\mathbf{x} \rangle - \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{Q}^* \mathbf{Q}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle - \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \\ &= \langle (\mathbf{Q}^* \mathbf{Q} - \mathbf{I})\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n. \end{aligned}$$

Da die Matrix $\mathbf{Q}^* \mathbf{Q} - \mathbf{I}$ selbstadjungiert ist, erhalten wir mit Lemma 3.31 bereits die Gleichung $\mathbf{Q}^* \mathbf{Q} - \mathbf{I} = \mathbf{0}$, also muss \mathbf{Q} isometrisch sein. ■

In Hinblick auf die für die Behandlung von Eigenwertproblemen sehr wichtigen Ähnlichkeitstransformationen bieten unitäre Matrizen den Vorteil, dass sich ihre Inversen besonders einfach berechnen lassen.

Lemma 3.33 (Unitäre Matrix) Sei $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ unitär.

Dann gilt $\mathbf{Q}\mathbf{Q}^* = \mathbf{I}$, also ist die Adjungierte \mathbf{Q}^* die Inverse der Matrix \mathbf{Q} .

Beweis. Da die Matrix \mathbf{Q} nach (3.17) insbesondere injektiv ist, folgt mit der Dimensionsformel, dass sie als quadratische Matrix auch surjektiv sein muss, es gilt also $\text{Bild}(\mathbf{Q}) = \mathbb{K}^n$.

Sei $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$. Dank der Surjektivität gilt $\mathbf{x} \in \text{Bild}(\mathbf{Q})$, also finden wir ein Urbild $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^n$ mit $\mathbf{x} = \mathbf{Q}\mathbf{y}$. Mit Definition 3.29 erhalten wir

$$\mathbf{x} = \mathbf{Q}\mathbf{y} = \mathbf{Q}(\mathbf{Q}^* \mathbf{Q})\mathbf{y} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}^* \mathbf{Q}\mathbf{y} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}^* \mathbf{x}.$$

Da \mathbf{x} beliebig gewählt wurde, folgt daraus bereits $\mathbf{I} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}^*$. Da wegen Definition 3.29 auch $\mathbf{I} = \mathbf{Q}^* \mathbf{Q}$ gilt, muss \mathbf{Q}^* die Inverse der Matrix \mathbf{Q} sein. ■

3.6 Schur-Zerlegung

Nun können wir daran gehen, nach einer Möglichkeit zu suchen, um eine Matrix durch unitäre Ähnlichkeitstransformationen auf obere Dreiecksgestalt zu bringen.

Wir werden dabei induktiv vorgehen und zunächst versuchen, die erste Spalte der Matrix auf ein Vielfaches des ersten kanonischen Einheitsvektors abzubilden. Für derartige Aufgaben bietet die numerische lineare Algebra ein nützliches Hilfsmittel: *Householder-Spiegelungen* sind unitäre Abbildungen, die einen beliebigen Vektor in den Aufspann eines beliebigen anderen (von null verschiedenen) Vektors, beispielsweise eines kanonischen Einheitsvektors, überführen.

Erinnerung 3.34 (Householder-Spiegelung) Zu jedem Vektor $\mathbf{v} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ ist die Householder-Spiegelung

$$\mathbf{Q}_v := \mathbf{I} - 2 \frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^*}{\mathbf{v}^*\mathbf{v}}$$

eine unitäre Matrix.

Für beliebige Vektoren $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$ und $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ können wir einen Householder-Vektor $\mathbf{v} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ so finden, dass

$$\mathbf{Q}_v \mathbf{x} = \alpha \mathbf{y}$$

mit einem $\alpha \in \mathbb{K}$ gilt, dass also \mathbf{x} in den von \mathbf{y} aufgespannten Raum abgebildet wird.

Erinnerung 3.35 (QR-Zerlegung) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}$. Dann existieren eine unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und eine obere Dreiecksmatrix $\mathbf{R} \in \mathbb{K}^{n \times m}$ mit $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$.

Mit Hilfe der QR-Zerlegung können wir eine isometrische Matrix zu einer unitären Matrix ergänzen.

Lemma 3.36 (Basisergänzung) Sei $\widehat{\mathbf{Q}} \in \mathbb{K}^{n \times p}$ eine isometrische Matrix. Dann existiert eine unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit $\mathbf{Q}|_{n \times p} = \widehat{\mathbf{Q}}$.

Beweis. Nach Erinnerung 3.35 existiert eine QR-Zerlegung $\mathbf{Q}_0 \mathbf{R}_0 = \widehat{\mathbf{Q}}$ der Matrix $\widehat{\mathbf{Q}}$.

Nach Lemma 3.32 ist $\widehat{\mathbf{Q}}$ injektiv, also muss $p \leq n$ gelten. Da \mathbf{R}_0 eine obere Dreiecksmatrix mit mehr Zeilen als Spalten ist, existiert eine Matrix $\mathbf{R} \in \mathbb{K}^{p \times p}$ mit

$$\mathbf{R}_0 = \begin{pmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}.$$

Es gilt

$$\mathbf{R}^* \mathbf{R} = \mathbf{R}_0^* \mathbf{R}_0 = \mathbf{R}_0^* \mathbf{Q}_0^* \mathbf{Q}_0 \mathbf{R}_0 = \widehat{\mathbf{Q}}^* \widehat{\mathbf{Q}} = \mathbf{I},$$

also ist \mathbf{R} eine unitäre Dreiecksmatrix. Wir definieren

$$\mathbf{Q} := \mathbf{Q}_0 \begin{pmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{I} \end{pmatrix}$$

und stellen fest, dass

$$\mathbf{Q}|_{n \times p} = \mathbf{Q}_0 \begin{pmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \mathbf{Q}_0 \mathbf{R}_0 = \widehat{\mathbf{Q}}$$

gilt. Also haben wir die gewünschte Fortsetzung gefunden. ■

Tatsächlich können wir sogar beweisen, dass sich die ersten p Spalten der Matrix \mathbf{Q}_0 lediglich durch ihre Vorzeichen von den ersten Spalten der Matrix $\widehat{\mathbf{Q}}$ unterscheiden: Man kann sich überlegen, dass jede unitäre Dreiecksmatrix bereits eine Diagonalmatrix sein muss, und dieses Resultat lässt sich auf die Matrix \mathbf{R} anwenden.

Lemma 3.37 (Deflation) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$, sei $p \in \mathbb{N}$ und sei $\mathbf{X} \in \mathbb{K}^{n \times p}$ eine isometrische Matrix, die (3.15) mit einer geeigneten Matrix $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{K}^{p \times p}$ erfüllt. Dann existieren eine unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und weitere Matrizen $\mathbf{D} \in \mathbb{K}^{(n-p) \times (n-p)}$, $\mathbf{R} \in \mathbb{K}^{p \times (n-p)}$ derart, dass die Gleichung

$$\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{R} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

erfüllt ist und $\mathbf{Q}|_{n \times p} = \mathbf{X}$ gilt.

Beweis. Gemäß Lemma 3.36 können wir \mathbf{X} zu einer unitären Matrix \mathbf{Q} mit $\mathbf{Q}|_{n \times p} = \mathbf{X}$ ergänzen.

Wir zerlegen \mathbf{Q} dementsprechend in

$$\mathbf{Q} = (\mathbf{X} \quad \mathbf{Y})$$

und stellen fest, dass auch $\mathbf{Y} \in \mathbb{K}^{n \times (n-p)}$ isometrisch ist und aus

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{pmatrix} = \mathbf{I} = \mathbf{Q}^* \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{X}^* \\ \mathbf{Y}^* \end{pmatrix} (\mathbf{X} \quad \mathbf{Y}) = \begin{pmatrix} \mathbf{X}^* \mathbf{X} & \mathbf{X}^* \mathbf{Y} \\ \mathbf{Y}^* \mathbf{X} & \mathbf{Y}^* \mathbf{Y} \end{pmatrix}$$

die Identität $\mathbf{Y}^* \mathbf{X} = \mathbf{0}$ folgt.

Aus der Gleichung (3.15) erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} &= \begin{pmatrix} \mathbf{X}^* \\ \mathbf{Y}^* \end{pmatrix} \mathbf{A} (\mathbf{X} \quad \mathbf{Y}) = \begin{pmatrix} \mathbf{X}^* \mathbf{A} \mathbf{X} & \mathbf{X}^* \mathbf{A} \mathbf{Y} \\ \mathbf{Y}^* \mathbf{A} \mathbf{X} & \mathbf{Y}^* \mathbf{A} \mathbf{Y} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{X}^* \mathbf{X} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{X}^* \mathbf{A} \mathbf{Y} \\ \mathbf{Y}^* \mathbf{X} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{Y}^* \mathbf{A} \mathbf{Y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{X}^* \mathbf{A} \mathbf{Y} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Y}^* \mathbf{A} \mathbf{Y} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

also können wir den Beweis abschließen, indem wir

$$\mathbf{R} := \mathbf{X}^* \mathbf{A} \mathbf{Y}, \quad \mathbf{D} := \mathbf{Y}^* \mathbf{A} \mathbf{Y}$$

setzen. ■

Da nach Satz 3.7 eine komplexe Matrix mindestens einen Eigenwert besitzt, ist der zugehörige Eigenraum nach Beispiel 3.23 ein invarianter Unterraum, der mittels Lemma 3.37 Anlass zu einer vereinfachenden Ähnlichkeitstransformation gibt. Bei wiederholter Anwendung erhält man eine sogenannte *Schur-Zerlegung* der Matrix:

Satz 3.38 (Schur-Zerlegung) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Dann existieren eine unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ und eine obere Dreiecksmatrix $\mathbf{R} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ so, dass die Gleichung

$$\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{R} \quad (3.19)$$

erfüllt ist.

3 Theoretische Grundlagen

Beweis. Per Induktion über die Dimension n . Der Induktionsanfang $n = 1$ ist trivial.

Wir nehmen an, dass $n > 1$ gilt und die Aussage für $n - 1$ bewiesen ist. Nach Satz 3.7 besitzt \mathbf{A} mindestens einen Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$. Sei $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ ein zugehöriger Eigenvektor, den wir auf $\|\mathbf{x}\| = 1$ normieren. Indem wir \mathbf{x} als Matrix $\mathbf{X} \in \mathbb{C}^{n \times 1}$ und λ als Matrix $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{C}^{1 \times 1}$ interpretieren, können wir Lemma 3.37 anwenden, um eine unitäre Matrix $\mathbf{Q}_1 \in \mathbb{C}^{n \times n}$ und Matrizen $\mathbf{R}_1 \in \mathbb{C}^{1 \times n}$ und $\mathbf{A}_1 \in \mathbb{C}^{(n-1) \times (n-1)}$ zu erhalten, für die

$$\mathbf{Q}_1^* \mathbf{A} \mathbf{Q}_1 = \begin{pmatrix} \lambda & \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_1 \end{pmatrix}$$

gilt. Wir wenden die Induktionsvoraussetzung auf \mathbf{A}_1 an und erhalten eine orthonormale Matrix $\mathbf{Q}_2 \in \mathbb{C}^{(n-1) \times (n-1)}$ und eine obere Dreiecksmatrix $\mathbf{R}_2 \in \mathbb{C}^{(n-1) \times (n-1)}$ mit

$$\mathbf{Q}_2^* \mathbf{A}_1 \mathbf{Q}_2 = \mathbf{R}_2.$$

Nun können wir

$$\mathbf{Q} := \mathbf{Q}_1 \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R} := \begin{pmatrix} \lambda & \mathbf{R}_1 \mathbf{Q}_2 \\ \mathbf{0} & \mathbf{R}_2 \end{pmatrix}$$

definieren und erhalten

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} &= \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_2^* \end{pmatrix} \mathbf{Q}_1^* \mathbf{A} \mathbf{Q}_1 \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda & \mathbf{R}_1 \mathbf{Q}_2 \\ \mathbf{0} & \mathbf{Q}_2^* \mathbf{A}_1 \mathbf{Q}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & \mathbf{R}_1 \mathbf{Q}_2 \\ \mathbf{0} & \mathbf{R}_2 \end{pmatrix} = \mathbf{R}. \end{aligned}$$

Da \mathbf{R}_2 eine obere Dreiecksmatrix ist, muss auch \mathbf{R} eine obere Dreiecksmatrix sein, also ist der Beweis vollständig. \blacksquare

Bemerkung 3.39 *Im Beweis von Satz 3.38 können wir offenbar die Reihenfolge der Eigenwerte beliebig wählen und so beispielsweise auf der Diagonalen von \mathbf{R} jede Anordnung erreichen.*

Die Gleichung $\mathbf{Q}^ \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{R}$ ist äquivalent zu $\mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{Q} \mathbf{R}$, und indem wir diese Gleichung auf die ersten p Spalten einschränken und die Dreiecksstruktur von \mathbf{R} ausnutzen, folgt sofort, dass der Aufspann der ersten p Spalten von \mathbf{Q} jeweils ein invarianter Teilraum von \mathbf{A} sein muss.*

3.7 Diagonalisierbarkeit durch unitäre Transformationen

Die Matrix auf obere Dreiecksgestalt bringen zu können hilft uns zwar bei der Bestimmung der Eigenwerte, allerdings nur sehr bedingt bei der Untersuchung der Eigenvektoren. Insbesondere wird für viele Beweise eine *Orthonormalbasis* von Eigenvektoren benötigt, die wir Satz 3.38 nicht unmittelbar entnehmen können.

3.7 Diagonalisierbarkeit durch unitäre Transformationen

Für reelle Eigenwerte lässt sich relativ leicht klären, welche Eigenschaften eine Matrix aufweisen muss, um sich unitär diagonalisieren zu lassen: Wenn eine *reelle* Diagonalmatrix $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und einer unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit

$$\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{D}$$

existieren, folgt

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q} \mathbf{D} \mathbf{Q}^*$$

und damit bereits

$$\mathbf{A}^* = \mathbf{Q}^{**} \mathbf{D}^* \mathbf{Q}^* = \mathbf{Q} \mathbf{D} \mathbf{Q}^* = \mathbf{A},$$

also muss \mathbf{A} mindestens selbstadjungiert sein. Dank Satz 3.38 können wir feststellen, dass diese Eigenschaft auch schon ausreicht:

Folgerung 3.40 (Selbstadjungierte Matrizen) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Es existieren genau dann eine reelle Diagonalmatrix $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und eine unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ mit

$$\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{D}, \tag{3.20}$$

wenn \mathbf{A} selbstadjungiert ist.

Beweis. Die Richtung „ \Rightarrow “ haben wir oben bereits bewiesen.

Sei nun also \mathbf{A} selbstadjungiert. Nach Satz 3.38 existieren eine unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ und eine rechte obere Dreiecksmatrix $\mathbf{R} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ derart, dass

$$\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{R}$$

gilt. Indem wir zu der Adjungierten übergehen erhalten wir

$$\mathbf{R}^* = \mathbf{Q}^* \mathbf{A}^* \mathbf{Q}^{**} = \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{R}.$$

Also ist die Dreiecksmatrix \mathbf{R} selbstadjungiert. Daraus folgt $r_{ij} = \bar{r}_{ji}$ für alle $i, j \in \{1, \dots, n\}$, also muss \mathbf{R} eine Diagonalmatrix mit reellen Einträgen sein. ■

Für eine reelle Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ haben wir bisher nur bewiesen, dass sie sich mit einer *komplexen* unitären Matrix diagonalisieren lässt. Indem wir den Beweis des Satzes 3.38 in leicht modifizierter Form nachvollziehen, können wir zeigen, dass sich auch eine *reelle* unitäre Matrix finden lässt.

Satz 3.41 (Reelle Diagonalisierbarkeit) Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Eine reelle unitäre Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und eine Diagonalmatrix $D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit (3.20) existieren genau dann, wenn \mathbf{A} selbstadjungiert ist.

Beweis. „ \Rightarrow “: Es gelte (3.20). Dann folgt

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q} \mathbf{D} \mathbf{Q}^* = \mathbf{Q} \mathbf{D}^* \mathbf{Q}^* = \mathbf{A}^*,$$

3 Theoretische Grundlagen

also ist \mathbf{A} selbstadjungiert.

„ \Leftarrow “: Sei \mathbf{A} selbstadjungiert. Wie schon bei der Schur-Zerlegung gehen wir induktiv vor. Der Fall $n = 1$ ist trivial.

Gelte die Behauptung für $n - 1 \in \mathbb{N}$. Wir fassen \mathbf{A} zunächst als komplexe Matrix auf, die wegen Satz 3.7 mindestens einen Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$ besitzen muss. Sei $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ ein zugehöriger Eigenvektor mit $\|\mathbf{x}\| = 1$. Da das Skalarprodukt eine Sesquilinearform ist, gilt

$$\begin{aligned}\lambda &= \lambda \|\mathbf{x}\|^2 = \lambda \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x}, \lambda \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{x}, \mathbf{A} \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{A}^* \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \\ &= \langle \mathbf{A} \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \langle \lambda \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \bar{\lambda} \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \bar{\lambda} \|\mathbf{x}\|^2 = \bar{\lambda},\end{aligned}$$

also erhalten wir $\lambda \in \mathbb{R}$. Damit ist $\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}$ eine reelle singuläre Matrix, also muss es auch einen reellen Eigenvektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ mit $\|\mathbf{x}\| = 1$ geben.

Sei $\mathbf{Q}_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine Householder-Matrix, die \mathbf{x} unitär auf den ersten kanonischen Einheitsvektor $\delta^{(1)}$ abbildet. Dann gilt

$$\mathbf{Q}_1^* \mathbf{A} \mathbf{Q}_1 \delta^{(1)} = \mathbf{Q}_1^* \mathbf{A} \mathbf{x} = \lambda \mathbf{Q}_1^* \mathbf{x} = \lambda \delta^{(1)}.$$

Da $\mathbf{Q}_1^* \mathbf{A} \mathbf{Q}_1$ wieder eine selbstadjungierte Matrix ist, muss es die Form

$$\mathbf{Q}_1^* \mathbf{A} \mathbf{Q}_1 = \begin{pmatrix} \lambda & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \widehat{\mathbf{A}} \end{pmatrix}$$

mit einer selbstadjungierten Matrix $\widehat{\mathbf{A}} \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$ aufweisen.

Also können wir die Induktionsvoraussetzung auf $\widehat{\mathbf{A}}$ anwenden und wie im Beweis von Satz 3.38 fortfahren. \blacksquare

Definition 3.42 (Normale und selbstadjungierte Matrizen) Eine Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ heißt normal, wenn

$$\mathbf{A}^* \mathbf{A} = \mathbf{A} \mathbf{A}^*$$

gilt.

Lemma 3.43 (Metrische Äquivalenz) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine Matrix. \mathbf{A} ist genau dann normal, wenn

$$\|\mathbf{A} \mathbf{x}\| = \|\mathbf{A}^* \mathbf{x}\|$$

für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$ gilt.

Beweis. Zunächst stellen wir fest, dass für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$ die Gleichungen

$$\|\mathbf{A} \mathbf{x}\|^2 = \langle \mathbf{A} \mathbf{x}, \mathbf{A} \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{A}^* \mathbf{A} \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle, \quad \|\mathbf{A}^* \mathbf{x}\|^2 = \langle \mathbf{A}^* \mathbf{x}, \mathbf{A}^* \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{A} \mathbf{A}^* \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle$$

gelten.

\Rightarrow : Sei \mathbf{A} normal. Dann folgt aus diesen Gleichungen bereits

$$\|\mathbf{A} \mathbf{x}\|^2 = \langle \mathbf{A}^* \mathbf{A} \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{A} \mathbf{A}^* \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \|\mathbf{A}^* \mathbf{x}\|^2$$

3.7 Diagonalisierbarkeit durch unitäre Transformationen

für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$.

⇐: Gelte nun die Gleichheit der Normen. Dann folgt

$$\langle (\mathbf{A}^* \mathbf{A} - \mathbf{A} \mathbf{A}^*) \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle = \|\mathbf{A} \mathbf{x}\|^2 - \|\mathbf{A}^* \mathbf{x}\|^2 = 0$$

für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$, und da $\mathbf{A}^* \mathbf{A} - \mathbf{A} \mathbf{A}^*$ eine selbstadjungierte Matrix ist, können wir Lemma 3.31 anwenden, um zu folgern, dass sie gleich null sein muss. ■

Lemma 3.44 (Normale Dreiecksmatrizen) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine obere Dreiecksmatrix. Dann ist \mathbf{A} genau dann normal, wenn die Matrix diagonal ist.

Beweis. Übungsaufgabe. ■

Folgerung 3.45 (Komplexe Diagonalisierbarkeit) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Eine unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ und eine Diagonalmatrix $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ mit

$$\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{D} \tag{3.21}$$

existieren genau dann, wenn \mathbf{A} normal ist.

Beweis. ⇒: Setze zunächst voraus, dass \mathbf{Q}, \mathbf{D} wie in (3.21) existieren. Wegen $\mathbf{D} \mathbf{D}^* = \mathbf{D}^* \mathbf{D}$ folgt

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^* \mathbf{A} &= \mathbf{Q}^* \mathbf{D}^* \mathbf{Q} \mathbf{Q}^* \mathbf{D} \mathbf{Q} = \mathbf{Q}^* \mathbf{D}^* \mathbf{D} \mathbf{Q} \\ &= \mathbf{Q}^* \mathbf{D} \mathbf{D}^* \mathbf{Q} = \mathbf{Q}^* \mathbf{D} \mathbf{Q} \mathbf{Q}^* \mathbf{D}^* \mathbf{Q} = \mathbf{A} \mathbf{A}^*, \end{aligned}$$

also ist \mathbf{A} normal.

⇐: Für die umgekehrte Implikation seien $\mathbf{Q}, \mathbf{R} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ die Matrizen der Schur-Zerlegung (3.19). Da \mathbf{A} normal ist, gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^* \mathbf{R} &= \mathbf{Q}^* \mathbf{A}^* \mathbf{Q} \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{Q}^* \mathbf{A}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} \\ &= \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{A}^* \mathbf{Q} = \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} \mathbf{Q}^* \mathbf{A}^* \mathbf{Q} = \mathbf{R} \mathbf{R}^*, \end{aligned}$$

also ist \mathbf{R} normal. Nach Lemma 3.44 muss \mathbf{R} damit bereits eine Diagonalmatrix sein. ■

Der Name *Spektralnorm* legt nahe, dass diese Norm in enger Beziehung zu dem Spektrum stehen dürfte. Das folgende Lemma bestätigt diese Vermutung.

Lemma 3.46 (Spektralradius) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ eine Matrix. Den Betrag ihres betragsgrößten Eigenwerts

$$\varrho(\mathbf{A}) := \max\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(\mathbf{A})\}$$

nennen wir ihren Spektralradius. Falls \mathbf{A} normal ist, gilt $\varrho(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|$.

3 Theoretische Grundlagen

Beweis. Nach Folgerung 3.45 finden wir eine unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ und eine Diagonalmatrix $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ mit $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^*$.

Mit Definition 3.17 und (3.17) sowie der Substitution $\hat{\mathbf{z}} = \mathbf{Q}^*\mathbf{z}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A}\| &= \max \left\{ \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{z}\|}{\|\mathbf{z}\|} : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} = \max \left\{ \frac{\|\mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^*\mathbf{z}\|}{\|\mathbf{z}\|} : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \\ &= \max \left\{ \frac{\|\mathbf{D}\mathbf{Q}^*\mathbf{z}\|}{\|\mathbf{z}\|} : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} = \max \left\{ \frac{\|\mathbf{D}\hat{\mathbf{z}}\|}{\|\mathbf{Q}\hat{\mathbf{z}}\|} : \hat{\mathbf{z}} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \\ &= \max \left\{ \frac{\|\mathbf{D}\hat{\mathbf{z}}\|}{\|\hat{\mathbf{z}}\|} : \hat{\mathbf{z}} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} = \|\mathbf{D}\|. \end{aligned}$$

Da \mathbf{A} und \mathbf{D} ähnliche Matrizen sind, muss nach Lemma 3.11 ein $j \in \{1, \dots, n\}$ mit $d_{jj} = \varrho(\mathbf{A})$ existieren. Für jeden Vektor $\hat{\mathbf{z}} \in \mathbb{K}^n$ gilt

$$\|\mathbf{D}\hat{\mathbf{z}}\|^2 = \sum_{i=1}^n |d_{ii}|^2 |\hat{z}_i|^2 \leq \sum_{i=1}^n |d_{jj}|^2 |\hat{z}_i|^2 = \varrho(\mathbf{A})^2 \sum_{i=1}^n |\hat{z}_i|^2 = \varrho(\mathbf{A})^2 \|\hat{\mathbf{z}}\|^2.$$

Andererseits gilt auch

$$\|\mathbf{D}\delta^{(j)}\| = \|d_{jj}\delta^{(j)}\| = \varrho(\mathbf{A})\|\delta^{(j)}\|,$$

also folgt $\varrho(\mathbf{A}) = \|\mathbf{D}\|$ und der Beweis ist abgeschlossen. ■

3.8 Was kommt nach der Schur-Zerlegung?

Es stellt sich die Frage, ob sich eine Matrix über die Schur-Zerlegung hinaus durch Ähnlichkeitstransformationen weiter vereinfachen lässt. Um die „Einfachheit“ messen zu können, benötigen wir eine geeignete Norm:

Definition 3.47 (Frobenius-Norm) *Die Abbildung*

$$\|\cdot\|_F : \mathbb{K}^{n \times m} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}, \quad \mathbf{A} \mapsto \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m |a_{ij}|^2 \right)^{1/2},$$

ist eine Norm auf $\mathbb{K}^{n \times m}$ und wird als Frobenius-Norm bezeichnet.

Die für unsere Untersuchungen wesentliche Eigenschaft der Frobenius-Norm ist ihre Invarianz unter orthonormalen Transformationen:

Lemma 3.48 (Invarianz) *Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}$. Seien $\mathbf{P} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{m \times m}$ unitäre Matrizen. Dann gilt*

$$\|\mathbf{P}\mathbf{A}\|_F = \|\mathbf{A}\|_F = \|\mathbf{A}\mathbf{Q}\|_F.$$

3.8 Was kommt nach der Schur-Zerlegung?

Beweis. Für $i \in \{1, \dots, m\}$ definieren wir den Vektor \mathbf{a}_i durch

$$(\mathbf{a}_i)_j = A_{ji}, \quad \text{für alle } j \in \{1, \dots, n\},$$

er entspricht also gerade der i -ten Spalte von \mathbf{A} . Nach Definition 3.47 und weil die euklidische Norm invariant unter unitären Transformationen ist gilt

$$\|\mathbf{A}\|_F^2 = \sum_{i=1}^m \|\mathbf{a}_i\|_2^2 = \sum_{i=1}^m \|\mathbf{P}\mathbf{a}_i\|_2^2 = \|\mathbf{P}\mathbf{A}\|_F^2.$$

Wegen

$$\|\mathbf{A}\|_F^2 = \|\mathbf{A}^*\|_F^2$$

folgt aus der Orthogonalität von \mathbf{Q}^* auch

$$\|\mathbf{A}\|_F^2 = \|\mathbf{A}^*\|_F^2 = \|\mathbf{Q}^*\mathbf{A}^*\|_F^2 = \|\mathbf{A}\mathbf{Q}\|_F^2.$$

Offenbar lässt sich der Beweis auch auf rechteckige orthogonale Matrizen \mathbf{P} und \mathbf{Q}^* erweitern. ■

Als Maß für die „Diagonalität“ einer Matrix verwenden wir die Norm ihrer Außerdiagonaleinträge:

Definition 3.49 Für $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ definieren wir

$$\text{off}(\mathbf{A}) := \left(\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^n |A_{ij}|^2 \right)^{1/2} = \|\mathbf{A} - \text{diag}(A_{11}, \dots, A_{nn})\|_F.$$

Jetzt lässt sich zeigen, dass diese Größe für jede Schur-Zerlegung einer festen Matrix dieselbe ist, sich also eine Matrix mit orthonormalen Transformationen nicht beliebig weit einer Diagonalmatrix annähern lässt:

Satz 3.50 (Invariante) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Wir bezeichnen die Nullstellen des charakteristischen Polynoms p_A mit $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbb{C}$, so dass

$$p_A(\lambda) = \prod_{i=1}^n (\lambda - \lambda_i)$$

gilt. Auf dieser Grundlage definieren wir

$$\Delta^2(\mathbf{A}) := \|\mathbf{A}\|_F^2 - \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2.$$

Für alle unitären Matrizen $\mathbf{Q} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ und für alle oberen Dreiecksmatrizen $\mathbf{R} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ mit

$$\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{R}$$

3 Theoretische Grundlagen

gilt dann die Gleichung

$$\text{off}^2(\mathbf{R}) = \Delta^2(\mathbf{A}).$$

Jede unitäre Ähnlichkeitstransformation auf obere Dreiecksgestalt wird also denselben Außerdiagonalanteil haben, insofern ist eine beliebige Schur-Zerlegung in dieser Hinsicht schon optimal.

Beweis. Sei $\mathbf{D} = \text{diag}(R_{11}, \dots, R_{nn})$. Dann gilt

$$p_D(\lambda) = \det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{D}) = \det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{R}) = p_R(\lambda) = p_A(\lambda),$$

also gibt es zu jedem μ -fachen Eigenwert von \mathbf{A} einen μ -fachen Eigenwert von \mathbf{D} , und da die Eigenwerte von \mathbf{D} durch die Diagonalelemente gegeben sind, muss

$$\|\mathbf{D}\|_F^2 = \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2$$

gelten. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \text{off}^2(\mathbf{R}) &= \|\mathbf{R} - \text{diag}(R_{11}, \dots, R_{nn})\|_F^2 = \|\mathbf{R} - \mathbf{D}\|_F^2 = \|\mathbf{R}\|_F^2 - \|\mathbf{D}\|_F^2 \\ &= \|\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q}\|_F^2 - \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 = \|\mathbf{A}\|_F^2 - \sum_{i=1}^n |\lambda_i|^2 = \Delta^2(\mathbf{A}), \end{aligned}$$

also die gesuchte Identität. ■

Da wir bereits wissen, dass nur bei normalen Matrizen eine unitäre Transformation auf Diagonalgestalt möglich ist, können wir die Größe $\Delta^2(\mathbf{A})$ als Maß dafür ansehen, wie „unnormal“ eine Matrix \mathbf{A} ist: Für normale Matrizen verschwindet sie, für alle anderen muss sie größer als null sein.

Lässt man statt der orthonormalen Transformationen allgemeinere Ähnlichkeitstransformationen zu, kann man die Schur-Zerlegung zur *Jordan-Normalform* verfeinern:

Satz 3.51 (Jordan-Normalform) Sei $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Dann existieren eine reguläre Matrix $\mathbf{X} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ sowie $q \in \mathbb{N}$, $(m_i)_{i=1}^q$ in \mathbb{N} und $(\lambda_i)_{i=1}^q$ in \mathbb{C} mit

$$\mathbf{X}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{X} = \text{diag}(\mathbf{J}_1, \dots, \mathbf{J}_q),$$

wobei der Jordan-Block $\mathbf{J}_i \in \mathbb{C}^{m_i \times m_i}$ die Gestalt

$$\mathbf{J}_i = \begin{pmatrix} \lambda_i & 1 & & & \\ & \lambda_i & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda_i & 1 \\ & & & & \lambda_i \end{pmatrix}$$

besitzt, m_i die algebraische Vielfachheit von λ_i ist und $n = m_1 + m_2 + \dots + m_q$ gilt.

Beweis. Die entscheidende Vorstufe findet sich als Theorem 7.1.6 in Golub/VanLoan, „Matrix Computations“, Johns Hopkins University Press 1996. Dort gibt es auch eine Referenz auf den vollständigen Beweis. ■

Bei der Jordan-Normalform ist allerdings zu beachten, dass nicht-unitäre Ähnlichkeitstransformationen numerisch nicht ungefährlich sind, wie das folgende Beispiel zeigt:

Beispiel 3.52 *Wir betrachten die Matrix*

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

aus Beispiel 3.9. Wenn wir das untere Diagonalelement mit $\epsilon \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ stören, erhalten wir

$$\mathbf{A}_\epsilon = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 + \epsilon \end{pmatrix},$$

und diese Matrix besitzt das charakteristische Polynom

$$p_{A_\epsilon}(\lambda) = (1 - \lambda)(1 + \epsilon - \lambda),$$

also zwei verschiedene Eigenwerte. Da zu jedem Eigenwert mindestens ein Eigenvektor gehören muss und wir in einem zweidimensionalen Raum arbeiten, muss eine Basis aus Eigenvektoren existieren. Beispielsweise können wir

$$\mathbf{X}_\epsilon := \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}_\epsilon^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1/\epsilon \\ 0 & 1/\epsilon \end{pmatrix}$$

verwenden und erhalten die Gleichung

$$\mathbf{X}_\epsilon^{-1} \mathbf{A}_\epsilon \mathbf{X}_\epsilon = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 + \epsilon \end{pmatrix}.$$

Also ist \mathbf{A}_ϵ für jedes $\epsilon \neq 0$ diagonalisierbar.

Vom numerischen Standpunkt aus gesehen ist diese Diagonalisierbarkeit allerdings fragwürdig, da die Kondition beispielsweise in der Zeilensummennorm durch

$$\kappa_\infty(\mathbf{X}_\epsilon) = \|\mathbf{X}_\epsilon\|_\infty \|\mathbf{X}_\epsilon^{-1}\|_\infty = 2 \left(1 + \frac{1}{\epsilon}\right) = 2 + \frac{2}{\epsilon}$$

gegeben ist und deshalb für kleiner werdendes ϵ schnell gegen unendlich strebt.

3.9 Eigenwerte nicht-negativer Matrizen

Die Matrix (2.11) des „Minipoly“-Beispiels weist die Besonderheit auf, ausschließlich nicht-negative Einträge zu besitzen. Da wir den Eigenvektor zu dem maximalen Eigenwert 1 als invariantes Wahrscheinlichkeitsmaß interpretieren wollen, sind wir daran interessiert, einen Vektor zu erhalten, der keine negativen Einträge enthält.

Derartige Aufgabenstellungen lassen sich mit einer von Oskar Perron [2] und Georg Frobenius [1] entwickelten Methode untersuchen, die naheliegenderweise in der Literatur als *Perron-Frobenius-Theorie* bezeichnet wird.

3 Theoretische Grundlagen

Definition 3.53 (Nicht-negative Matrizen und Vektoren) Seien $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Wir definieren

$$\begin{aligned}\mathbf{A} \geq 0 &: \iff \forall i, j \in \{1, \dots, n\} : a_{ij} \geq 0, \\ \mathbf{A} > 0 &: \iff \forall i, j \in \{1, \dots, n\} : a_{ij} > 0, \\ \mathbf{x} \geq 0 &: \iff \forall i \in \{1, \dots, n\} : x_i \geq 0, \\ \mathbf{x} > 0 &: \iff \forall i \in \{1, \dots, n\} : x_i > 0.\end{aligned}$$

Mit $K := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{x} \geq 0\}$ bezeichnen wir den Kegel der nicht-negativen Vektoren.

Wir gehen im Folgenden davon aus, dass eine Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $\mathbf{A} \geq 0$ gegeben ist.

Für unsere Untersuchung verwenden wir einen auf Helmut Wieland [3] zurückgehenden Ansatz, der auf der Abbildung

$$r : K \setminus \{\mathbf{0}\} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}, \quad \mathbf{x} \mapsto \min \left\{ \frac{(\mathbf{Ax})_i}{x_i} : i \in \{1, \dots, n\}, x_i \neq 0 \right\} \quad (3.22)$$

beruht. Für einen gegebenen Vektor $\mathbf{x} \in K$ gilt dann

$$r(\mathbf{x})x_i \leq (\mathbf{Ax})_i \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, n\},$$

wobei für den Fall $x_i = 0$ die Nicht-Negativität und für den Fall $x_i \neq 0$ die Definition der Abbildung r herangezogen wird. Diese Eigenschaft können wir kompakt als

$$\mathbf{Ax} - r(\mathbf{x})\mathbf{x} \geq 0 \quad (3.23)$$

schreiben. Wenn \mathbf{x} ein Eigenvektor wäre, würde in dieser Formel Gleichheit gelten, also bietet es sich an, nach Vektoren zu suchen, für die die linke Seite möglichst klein, also $r(\mathbf{x})$ möglichst groß wird.

Lemma 3.54 (Extremalvektoren) Es gibt mindestens einen Vektor $\mathbf{x}^* \in K \setminus \{\mathbf{0}\}$, für den

$$r(\mathbf{x}) \leq r(\mathbf{x}^*) \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in K \setminus \{\mathbf{0}\} \quad (3.24)$$

gilt, für den also r sein Maximum annimmt.

Beweis. Sei $\mathbf{x} \in K \setminus \{\mathbf{0}\}$, und sei $\mathbf{e} \in K$ derjenige Vektor, dessen Einträge alle gleich eins sind. Aus (3.23) folgt

$$\langle \mathbf{e}, \mathbf{Ax} \rangle_2 - r(\mathbf{x})\langle \mathbf{e}, \mathbf{x} \rangle_2 = \sum_{i=1}^n (\mathbf{Ax})_i - r(\mathbf{x})x_i \geq 0,$$

also insbesondere auch

$$r(\mathbf{x}) \leq \frac{\langle \mathbf{e}, \mathbf{Ax} \rangle_2}{\langle \mathbf{e}, \mathbf{x} \rangle_2}.$$

3.9 Eigenwerte nicht-negativer Matrizen

Wenn wir mit α den größten Eintrag des Vektors $\mathbf{A}^* \mathbf{e}$ bezeichnen, gilt

$$\langle \mathbf{e}, \mathbf{A}\mathbf{x} \rangle_2 = \langle \mathbf{A}^* \mathbf{e}, \mathbf{x} \rangle_2 = \sum_{i=1}^n (\mathbf{A}^* \mathbf{e})_i x_i \leq \sum_{i=1}^n \alpha x_i = \alpha \langle \mathbf{e}, \mathbf{x} \rangle_2,$$

also erhalten wir

$$r(\mathbf{x}) \leq \frac{\langle \mathbf{e}, \mathbf{A}\mathbf{x} \rangle_2}{\langle \mathbf{e}, \mathbf{x} \rangle_2} \leq \frac{\alpha \langle \mathbf{e}, \mathbf{x} \rangle_2}{\langle \mathbf{e}, \mathbf{x} \rangle_2} = \alpha,$$

so dass der Wertebereich der Abbildung r in $[0, \alpha]$ enthalten sein muss. Demzufolge ist das Supremum

$$\varrho := \sup \{r(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in K_{\geq} \setminus \{\mathbf{0}\}\}$$

wohldefiniert und nicht-negativ.

Nach Definition des Supremums finden wir eine Folge von Vektoren $(\mathbf{x}^{(m)})_{m=1}^{\infty}$ in $K \setminus \{\mathbf{0}\}$ derart, dass

$$r(\mathbf{x}^{(m)}) \geq \varrho - 1/m \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}$$

gilt. Ein Blick auf die Definition (3.22) zeigt

$$r(\alpha \mathbf{x}) = r(\mathbf{x}) \quad \text{für alle } \alpha \in \mathbb{R}_{>0}, \mathbf{x} \in K \setminus \{\mathbf{0}\},$$

die Skalierung der Vektoren spielt also keine Rolle, so dass wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit davon ausgehen können, dass

$$\langle \mathbf{e}, \mathbf{x}^{(m)} \rangle_2 = 1 \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}$$

gilt. Die Menge

$$T := \{\mathbf{x} \in K : \langle \mathbf{e}, \mathbf{x} \rangle_2 = 1\}$$

ist abgeschlossen und beschränkt, also nach dem Satz von Heine-Borel auch kompakt. Die Elemente der Folge $(\mathbf{x}^{(m)})_{m=1}^{\infty}$ liegen in dieser Menge, also muss die Folge mindestens einen Häufungspunkt $\mathbf{x}^* \in T$ besitzen.

Wenn r stetig wäre, könnten wir unmittelbar schließen, dass $r(\mathbf{x}^*) = \varrho$ gelten muss. Leider ist r „nicht ganz“ stetig, da sich die Menge, über die in (3.22) das Minimum gebildet wird, abhängig von den Nulleinträgen des Vektors \mathbf{x} ändert.

Deshalb müssen wir die gewünschte Gleichung etwas ausführlicher nachprüfen. Dazu wählen wir ein beliebiges $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$ und setzen

$$\delta_1 := \min\{x_i^* : x_i^* \neq 0\}.$$

Wegen $\mathbf{x}^* \in K \setminus \{\mathbf{0}\}$ dürfen wir $\delta_1 > 0$ festhalten.

Aufgrund der Stetigkeit der Funktionen

$$\mathbf{x} \mapsto \frac{(\mathbf{A}\mathbf{x})_i}{x_i} \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, n\}, x_i^* \neq 0$$

3 Theoretische Grundlagen

in der Nähe des Vektors \mathbf{x}^* können wir ein $\delta_2 > 0$ so finden, dass

$$\frac{(\mathbf{A}\mathbf{x})_i}{x_i} \geq \frac{(\mathbf{A}\mathbf{x}^*)_i}{x_i} - \epsilon/2 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in K \text{ mit } \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|_2 \leq \delta_2$$

$$\text{und alle } i \in \{1, \dots, n\} \text{ mit } x_i^* \neq 0$$

erfüllt ist. Wir setzen $\delta := \min\{\delta_1, \delta_2\}$.

Da \mathbf{x}^* ein Häufungspunkt ist, finden wir ein $m \in \mathbb{N}$ derart, dass

$$\|\mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{x}^*\|_2 < \delta, \quad r(\mathbf{x}^{(m)}) \geq \varrho - \epsilon/2$$

gelten. Daraus folgt insbesondere

$$x_i^{(m)} = x_i^* + x_i^{(m)} - x_i^* \geq x_i^* - |x_i^{(m)} - x_i^*|$$

$$> x_i^* - \delta \geq 0 \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, n\} \text{ mit } x_i^* \neq 0,$$

so dass wir

$$\{i \in \{1, \dots, n\} : x_i^* \neq 0\} \subseteq \{i \in \{1, \dots, n\} : x_i^{(m)} \neq 0\}$$

erhalten. Daraus folgt insbesondere

$$r(\mathbf{x}^*) = \min \left\{ \frac{(\mathbf{A}\mathbf{x}^*)_i}{x_i^*} : i \in \{1, \dots, n\}, x_i^* \neq 0 \right\}$$

$$\geq \min \left\{ \frac{(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(m)})_i}{x_i^{(m)}} : i \in \{1, \dots, n\}, x_i^{(m)} \neq 0 \right\}$$

$$\geq \min \left\{ \frac{(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(m)})_i}{x_i^{(m)}} - \epsilon/2 : i \in \{1, \dots, n\}, x_i^{(m)} \neq 0 \right\}$$

$$= r(\mathbf{x}^{(m)}) - \epsilon/2 \geq \varrho - \epsilon.$$

Da ϵ beliebig gewählt wurde, haben wir $r(\mathbf{x}^*) = \varrho$ bewiesen. \blacksquare

Wir sind daran interessiert, Eigenvektoren zu finden, bei denen alle Komponenten positiv sind. Leider ist das nicht bei allen nicht-negativen Matrizen möglich, beispielsweise verschwindet bei allen Eigenvektoren der Matrix

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

die zweite Komponente. Um diesen Fall auszuschließen, müssen wir eine zusätzliche Bedingung an die Matrix \mathbf{A} stellen.

Definition 3.55 (Reduzible und irreduzible Matrizen) Eine Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ nennen wir *reduzibel*, falls ein $k \in \{1, \dots, n-1\}$, eine Permutationsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und Matrizen $\mathbf{A}_{11} \in \mathbb{K}^{k \times k}$, $\mathbf{A}_{12} \in \mathbb{K}^{k \times (n-k)}$ und $\mathbf{A}_{22} \in \mathbb{K}^{(n-k) \times (n-k)}$ so existieren, dass

$$\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ & \mathbf{A}_{22} \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

gilt. Falls eine Matrix nicht reduzibel ist, nennen wir sie *irreduzibel*.

3.9 Eigenwerte nicht-negativer Matrizen

Irreduzible Matrizen sind also gerade diejenigen, die sich nicht durch das Umsortieren von Indizes auf Block-Dreiecksform bringen lassen.

Lemma 3.56 (Irreduzible Matrix) Falls $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ irreduzibel ist und $\mathbf{A} \geq 0$ gilt, existiert für jeden Vektor $\mathbf{x} \in K \setminus \{\mathbf{0}\}$ ein $m \in \mathbb{N}_0$ mit

$$(\mathbf{A} + \mathbf{I})^m \mathbf{x} > \mathbf{0}.$$

Beweis. Sei $\mathbf{x} \in K \setminus \{\mathbf{0}\}$ gegeben. Wir definieren

$$\mathbf{x}^{(m)} := (\mathbf{A} + \mathbf{I})^m \mathbf{x} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.$$

Mit $\mathbf{A} \geq 0$ folgt daraus unmittelbar

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(m)} + \mathbf{x}^{(m)} \geq \mathbf{x}^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.$$

In dem Vektor $\mathbf{x}^{(m+1)}$ können also höchstens diejenigen Koeffizienten gleich null sein, die auch in $\mathbf{x}^{(m)}$ bereits gleich null waren. Da $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ gilt, kann insbesondere keiner der Vektoren $\mathbf{x}^{(m)}$ der Nullvektor sein.

Wären für ein $m \in \mathbb{N}_0$ dieselben Koeffizienten in $\mathbf{x}^{(m)}$ und $\mathbf{x}^{(m+1)}$ gleich null, könnten wir diese Koeffizienten mit einer Permutationsmatrix \mathbf{P} in die letzten $n-k$ Komponenten umsordern und so

$$\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m)} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{x}}^{(m)} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}\mathbf{x}^{(m+1)} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{x}}^{(m+1)} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

mit $\widehat{\mathbf{x}}^{(m)}, \widehat{\mathbf{x}}^{(m+1)} \in \mathbb{R}^k$, $k \in \{1, \dots, n-1\}$ sowie $\widehat{\mathbf{x}}^{(m)} > \mathbf{0}$ und $\widehat{\mathbf{x}}^{(m+1)} > \mathbf{0}$ zu erhalten.

Wir zerlegen die permutierte Matrix in der Form

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{pmatrix} := \mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-1}, \quad \mathbf{A}_{11} \in \mathbb{R}^{k \times k}, \quad \mathbf{A}_{22} \in \mathbb{R}^{(n-k) \times (n-k)}$$

und erhalten

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{x}}^{(m+1)} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} &= \mathbf{P}\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{P}(\mathbf{x}^{(m)} + \mathbf{A}\mathbf{x}^{(m)}) = \mathbf{P}\mathbf{x}^{(m)} + \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{pmatrix} \mathbf{P}\mathbf{x}^{(m)} \\ &= \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{x}}^{(m)} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{x}}^{(m)} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{x}}^{(m)} + \mathbf{A}_{11}\widehat{\mathbf{x}}^{(m)} \\ \mathbf{A}_{21}\widehat{\mathbf{x}}^{(m)} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

folgen. Dank $\widehat{\mathbf{x}}^{(m)} > \mathbf{0}$ und $\mathbf{A}_{21} \geq 0$ müsste dann bereits $\mathbf{A}_{21} = \mathbf{0}$ gelten, also wäre (3.26) erfüllt, im Widerspruch zur Voraussetzung.

Damit kann für jedes $m \in \mathbb{N}$ der Vektor $\mathbf{x}^{(m+1)}$ nicht dieselben Nulleinträge wie $\mathbf{x}^{(m)}$ enthalten. Wir haben bereits gesehen, dass er auch nicht weitere Nulleinträge enthalten kann, also muss die Zahl der Nulleinträge sinken. Da $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ höchstens $n-1$ Nulleinträge aufweisen kann, muss deshalb $\mathbf{x}^{(m)} > \mathbf{0}$ spätestens für $m = n-1$ gelten. ■

3 Theoretische Grundlagen

Bemerkung 3.57 (Irreduzible Matrix) *Ein Blick auf den vorangehenden Beweis zeigt, dass $(\mathbf{I} + \mathbf{A})^{n-1}\mathbf{x} > 0$ für alle Vektoren $\mathbf{x} \in K \setminus \{\mathbf{0}\}$ gilt. Indem wir für \mathbf{x} die kanonischen Einheitsvektoren einsetzen folgt, dass jede Spalte der Matrix $(\mathbf{I} + \mathbf{A})^{n-1}$ in jeder Komponente echt größer als Null ist, also haben wir sogar $(\mathbf{I} + \mathbf{A})^{n-1} > 0$ erhalten.*

Falls \mathbf{A} irreduzibel ist, können wir wie bereits angedeutet folgern, dass ein Vektor $\mathbf{x}^* \in K \setminus \{\mathbf{0}\}$ mit der in (3.24) gegebenen Extremaleigenschaft ein Eigenvektor sein muss.

Lemma 3.58 (Eigenvektor) *Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ irreduzibel mit $\mathbf{A} \geq 0$. Sei $\mathbf{x}^* \in K \setminus \{\mathbf{0}\}$ ein Vektor mit der Eigenschaft (3.24) und sei $\varrho := r(\mathbf{x}^*)$. Dann gelten $\mathbf{x}^* > 0$ und*

$$\mathbf{A}\mathbf{x}^* = \varrho\mathbf{x}^*,$$

\mathbf{x}^* ist also ein Eigenvektor zu dem Eigenwert ϱ .

Beweis. Aufgrund der Ungleichung (3.23) gilt

$$\mathbf{y} := \mathbf{A}\mathbf{x}^* - \varrho\mathbf{x}^* \geq 0.$$

Wir müssen nachweisen, dass $\mathbf{y} = \mathbf{0}$ gilt.

Dazu verwenden wir einen Widerspruchsbeweis: Wir nehmen $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$ an. Nach Lemma 3.56 existiert dann ein $m \in \mathbb{N}_0$ so, dass

$$(\mathbf{I} + \mathbf{A})^m \mathbf{y} > 0$$

erfüllt ist. Für den Vektor

$$\mathbf{z} := (\mathbf{I} + \mathbf{A})^m \mathbf{x}^*$$

folgt daraus

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{z} - \varrho\mathbf{z} &= \mathbf{A}(\mathbf{I} + \mathbf{A})^m \mathbf{x}^* - \varrho(\mathbf{I} + \mathbf{A})^m \mathbf{x}^* \\ &= (\mathbf{I} + \mathbf{A})(\mathbf{I} + \mathbf{A})^{m-1} \mathbf{x}^* - (\varrho + 1)(\mathbf{I} + \mathbf{A})^{m-1} \mathbf{x}^* \\ &= (\mathbf{I} + \mathbf{A})^{m-1} (\mathbf{I} + \mathbf{A}) \mathbf{x}^* - (\varrho + 1)(\mathbf{I} + \mathbf{A})^{m-1} \mathbf{x}^* \\ &= (\mathbf{I} + \mathbf{A})^{m-1} (\mathbf{A}\mathbf{x}^* - \varrho\mathbf{x}^*) = (\mathbf{I} + \mathbf{A})^{m-1} \mathbf{y} > 0. \end{aligned}$$

Da $\varrho \geq r(\mathbf{z})$ nach (3.24) gilt, erhalten wir insbesondere

$$\mathbf{A}\mathbf{z} - r(\mathbf{z})\mathbf{z} \geq \mathbf{A}\mathbf{z} - \varrho\mathbf{z} > 0.$$

Nach Definition des Minimums (3.22) muss aber ein $i \in \{1, \dots, n\}$ mit $z_i \neq 0$ und

$$r(\mathbf{z}) = \frac{(\mathbf{A}\mathbf{z})_i}{z_i}, \quad r(\mathbf{z})z_i = (\mathbf{A}\mathbf{z})_i, \quad (\mathbf{A}\mathbf{z} - r(\mathbf{z})\mathbf{z})_i = 0$$

existieren, im Widerspruch zu der obigen Ungleichung.

Also muss $\mathbf{y} = \mathbf{0}$ gelten, somit ist \mathbf{x}^* ein Eigenvektor zu dem Eigenwert ϱ . ■

3.9 Eigenwerte nicht-negativer Matrizen

In Kombination mit Lemma 3.54 folgt also, dass eine nicht-negative irreduzible Matrix mindestens einen Eigenvektor zu dem Eigenwert ϱ besitzt und dass die Koeffizienten dieses Eigenvektors alle echt positiv sind.

Der Eigenwert ϱ lässt sich sogar als im Betrag maximaler Eigenwert der gesamten Matrix \mathbf{A} identifizieren:

Lemma 3.59 (Maximaler Eigenwert) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine irreduzible Matrix mit $\mathbf{A} \geq 0$. Sei ϱ wie in Lemma 3.58 definiert, und sei $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ ein beliebiger Eigenvektor der Matrix \mathbf{A} zu dem Eigenwert $\lambda \in \mathbb{K}$. Dann gilt $|\lambda| \leq \varrho$.

Beweis. Wir definieren den Vektor $\mathbf{y} \in K \setminus \{\mathbf{0}\}$ durch

$$y_i := |x_i| \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, n\}$$

und folgern mit der Dreiecksungleichung

$$|\lambda|y_i = |\lambda x_i| = |(\mathbf{Ax})_i| = \left| \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j \right| \leq \sum_{j=1}^n a_{ij}|x_j| = (\mathbf{Ay})_i \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, n\}.$$

Für jedes $i \in \{1, \dots, n\}$ mit $y_i \neq 0$ folgt daraus

$$|\lambda| \leq \frac{(\mathbf{Ay})_i}{y_i},$$

also nach (3.22) insbesondere

$$|\lambda| \leq r(\mathbf{y}) \leq \varrho,$$

und damit ist die gewünschte Aussage bewiesen. \blacksquare

Wir können die Ergebnisse dieses Abschnitts in dem folgenden Satz zusammenfassen:

Satz 3.60 (Perron-Frobenius) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ irreduzibel mit $\mathbf{A} \geq 0$. Der Spektralradius der Matrix ist durch

$$\varrho(\mathbf{A}) := \max\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(\mathbf{A})\}$$

gegeben. Er ist ein Eigenwert der Matrix \mathbf{A} , zu dem ein Eigenvektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ mit $\mathbf{x} > 0$ existiert.

Beweis. Sei $\mathbf{x}^* \in K \setminus \{\mathbf{0}\}$ der nach Lemma 3.54 existierende Vektor mit der Eigenschaft (3.24). Nach Lemma 3.58 ist er ein Eigenvektor zu dem Eigenwert $\varrho = r(\mathbf{x}^*)$ und erfüllt $\mathbf{x}^* > 0$. Nach Lemma 3.59 muss auch $\varrho = \varrho(\mathbf{A})$ gelten. \blacksquare

Bemerkung 3.61 (Einfacher Eigenwert) Es lässt sich beweisen, dass $\varrho(\mathbf{A})$ unter den im vorangehenden Satz gegebenen Bedingungen sogar ein einfacher Eigenwert der Matrix \mathbf{A} ist. Der betreffende Beweis ist in [3, Beweis von I.f-g] zu finden.

4 Die Jacobi-Iteration

In diesem Kapitel soll eines der einfachsten Iterationsverfahren zur Bestimmung der Schur-Zerlegung einer selbstadjungierte Matrix eingeführt werden: Die Jacobi-Iteration.

4.1 Iterierte Ähnlichkeitstransformationen

Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine selbstadjungierte Matrix. Unser Ziel ist die Bestimmung der Schur-Zerlegung

$$\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{D}$$

für unitäre Matrizen \mathbf{Q} und eine Diagonalmatrix \mathbf{D} .

Wenn es möglich wäre, eine derartige Zerlegung in endlich vielen Rechenschritten für eine beliebige Dimension n zu berechnen, könnte man auch sämtliche Nullstellen von Polynomen beliebig hoher Ordnung mit endlich vielen Schritten berechnen. Da bekannt ist, dass diese Aufgabe nicht lösbar ist, dürfen wir auch nicht darauf hoffen, die Schur-Zerlegung mit endlich vielen Rechenoperationen bestimmen zu können.

Stattdessen müssen wir auf Näherungsverfahren zurückgreifen. Unser Ziel ist es, die Matrix \mathbf{A} mit Hilfe einer unitären Ähnlichkeitstransformation auf Diagonalgestalt zu bringen. Die Diagonalgestalt ist durch $\text{off}(\mathbf{D}) = 0$ charakterisiert, also ist die Idee nahe liegend, nach Verfahren zu suchen, die diese Größe reduzieren: Wir beginnen mit $\mathbf{A}^{(0)} := \mathbf{A}$ und bestimmen zu jedem $m \in \mathbb{N}_0$ ein unitäres $\mathbf{Q}^{(m)}$, das $\text{off}((\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A}^{(m)} \mathbf{Q}^{(m)})$ verkleinert und setzen dann

$$\mathbf{A}^{(m+1)} := (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A}^{(m)} \mathbf{Q}^{(m)}.$$

Wir brechen ab, sobald $\text{off}(\mathbf{A}^{(m+1)})$ klein genug ist und verwenden

$$\tilde{\mathbf{Q}} := \mathbf{Q}^{(0)} \mathbf{Q}^{(1)} \dots \mathbf{Q}^{(m)}, \quad \tilde{\mathbf{D}} := \mathbf{A}^{(m+1)} = \tilde{\mathbf{Q}}^* \mathbf{A} \tilde{\mathbf{Q}}$$

als Approximationen von \mathbf{Q} und \mathbf{D} .

Da jeder einzelne Schritt des Verfahrens eine unitäre Ähnlichkeitstransformation ist, muss $\tilde{\mathbf{Q}}$ ebenfalls unitär sein, und an der Größe $\text{off}(\tilde{\mathbf{D}})$ lässt sich direkt ablesen, wie nahe wir einer durch $\text{off}(\mathbf{D}) = 0$ charakterisierten exakten Schur-Zerlegung gekommen sind.

Ein Schritt des Verfahrens, also die Berechnung von $\mathbf{A}^{(m+1)} = (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A}^{(m)} \mathbf{Q}^{(m)}$, kann in zwei Teilschritte zerlegt werden:

$$\mathbf{B}^{(m)} := (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A}^{(m)}, \quad \mathbf{A}^{(m+1)} := \mathbf{B}^{(m)} \mathbf{Q}^{(m)} = ((\mathbf{Q}^{(m)})^* (\mathbf{B}^{(m)})^*)^*.$$

Der erste Schritt entspricht der Anwendung von $(\mathbf{Q}^{(m)})^*$ auf jede Spalte von $\mathbf{A}^{(m)}$, der zweite der Anwendung derselben Matrix auf jede Zeile von $\mathbf{B}^{(m)}$. Sofern sich also die Multiplikation mit $(\mathbf{Q}^{(m)})^*$ effizient gestalten lässt, kann auch die Iteration effizient durchgeführt werden.

4.2 Zweidimensionaler Fall

Wie bei vielen anderen numerischen Verfahren empfiehlt es sich, die Strategie zur Lösung eines großen und komplizierten Problems auf eine Folge kleinerer und einfacherer Probleme zurückzuführen.

Wir untersuchen deshalb zunächst den Fall einer zweidimensionalen selbstadjungierten Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ \bar{b} & d \end{pmatrix}$$

mit $a, d \in \mathbb{R}$ und $b \in \mathbb{K}$. Die Eigenwerte dieser Matrix können wir mit Hilfe des charakteristischen Polynoms einfach bestimmen: Für jeden Eigenwert $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$ muss

$$\begin{aligned} 0 &= \det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}) = \det \begin{pmatrix} \lambda - a & -b \\ -\bar{b} & \lambda - d \end{pmatrix} = (\lambda - a)(\lambda - d) - |b|^2 \\ &= \lambda^2 - (a + d)\lambda + ad - |b|^2 = \lambda^2 - (a + d)\lambda + \frac{(a + d)^2}{4} - \frac{(a + d)^2}{4} - \frac{4ad}{4} - |b|^2 \\ &= \left(\lambda - \frac{a + d}{2} \right)^2 - \frac{(a - d)^2 + 4|b|^2}{4} \end{aligned}$$

gelten, also folgt

$$\lambda = \frac{a + d}{2} + \sigma \frac{\sqrt{(a - d)^2 + 4|b|^2}}{2} \quad \text{für ein } \sigma \in \{-1, 1\}.$$

Der Fall $b = 0$, also $|b| = 0$, interessiert uns nicht, denn in diesem Fall ist \mathbf{A} bereits diagonal. Im Falle $b \neq 0$ können wir

$$\tau := \frac{a - d}{2|b|}$$

definieren und erhalten wegen $4\tau^2|b|^2 = (a - d)^2$ die Gleichung

$$\lambda = \frac{a + d}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2 + 1}.$$

Nun kennen wir die Eigenwerte, also müssen wir als nächstes die Eigenvektoren bestimmen. Da wir wissen, dass die Eigenvektoren nur bis auf ein skalares Vielfaches bestimmt sind, verwenden wir den Ansatz

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} c \\ tc \end{pmatrix}$$

für $t, c \in \mathbb{K}$ mit $c \neq 0$. Der Eigenvektor \mathbf{x} zum Eigenwert

$$\lambda = \frac{a + d}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2 + 1}$$

ergibt sich als Lösung der definierenden Gleichung

$$\mathbf{0} = (\lambda_1 \mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{x}^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{d-a}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2 + 1} & -b \\ -\bar{b} & \frac{a-d}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2 + 1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ tc \end{pmatrix}$$

Aus der ersten Zeile dieser Gleichung folgt

$$btc = \left(\frac{d-a}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} \right) c, \quad t = \frac{d-a}{2b} + \sigma \frac{|b|}{b} \sqrt{\tau^2+1}, \quad (4.1)$$

und dank

$$\begin{aligned} \left(\frac{a-d}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} \right) t &= \left(\frac{a-d}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} \right) \left(\frac{d-a}{2b} + \sigma \frac{|b|}{b} \sqrt{\tau^2+1} \right) \\ &= \frac{1}{b} \left(-\frac{d-a}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} \right) \left(\frac{d-a}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} \right) \\ &= \frac{1}{b} \left(|b|^2(\tau^2+1) - \frac{(d-a)^2}{4} \right) \\ &= \frac{1}{b} \left(|b|^2 + |b|^2 \frac{(a-d)^2}{4|b|^2} - \frac{(d-a)^2}{4} \right) = \frac{|b|^2}{b} = \bar{b} \end{aligned} \quad (4.2)$$

erhalten wir in der zweiten Zeile

$$-\bar{b}c + \left(\frac{a-d}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} \right) tc = -\bar{b}c + \bar{b}c = 0,$$

also ist \mathbf{x} für das in (4.1) definierte t tatsächlich ein Eigenvektor. Da wir an einem normierten Eigenvektor interessiert sind, also $\|\mathbf{x}\|_2 = 1$ gelten soll, müssen wir c so bestimmen, dass

$$1 = |c|^2 + |t|^2|c|^2 = |c|^2(1 + |t|^2)$$

erfüllt ist, somit können wir c als

$$c = \frac{1}{\sqrt{1 + |t|^2}}$$

wählen. Zur Abkürzung der Notation verwenden wir

$$s := tc, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}.$$

Die Bestimmung des zweiten Eigenvektors gestaltet sich wesentlich einfacher: Da \mathbf{A} selbstadjungiert ist, müssen Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten senkrecht aufeinander stehen, und im zweidimensionalen Raum ist es leicht, einen auf $\mathbf{x}^{(1)}$ senkrecht stehenden Vektor zu berechnen. Eine naheliegende Wahl ist

$$\mathbf{x}^\perp = \begin{pmatrix} -\bar{s} \\ \bar{c} \end{pmatrix},$$

und da dieser Vektor ebenfalls normiert ist, muss die gesuchte orthogonale Transformation \mathbf{Q} durch

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} c & -\bar{s} \\ s & \bar{c} \end{pmatrix}$$

gegeben sein. Wir fassen unsere Ergebnisse wie folgt zusammen:

4 Die Jacobi-Iteration

Lemma 4.1 (Zweidimensionale Schur-Zerlegung) Für eine beliebige selbstadjungierte Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ \bar{b} & d \end{pmatrix}$$

mit $a, d \in \mathbb{R}$ und $b \in \mathbb{K} \setminus \{0\}$ setzen wir

$$\tau := \frac{a-d}{2|b|},$$

wählen ein Vorzeichen $\sigma \in \{-1, 1\}$ und verwenden

$$t := \frac{d-a}{2b} + \frac{\sigma|b|}{b} \sqrt{\tau^2 + 1}, \quad c := \frac{1}{\sqrt{1+|t|^2}}, \quad s := tc \quad (4.3)$$

zur Definition von

$$\mathbf{Q} := \begin{pmatrix} c & -\bar{s} \\ s & \bar{c} \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Dann gilt

$$\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \frac{a+d}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} & 0 \\ 0 & \frac{a+d}{2} - \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} \end{pmatrix},$$

wir haben also eine explizite Formel für die Schur-Zerlegung gefunden.

Beweis. Die Eigenwerte kürzen wir mit

$$\lambda_1 := \frac{a+d}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1}, \quad \lambda_2 := \frac{a+d}{2} - \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} \quad (4.5)$$

ab und berechnen zunächst

$$\mathbf{A} \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} a & b \\ \bar{b} & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & -\bar{s} \\ s & \bar{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ac + bs & -a\bar{s} + b\bar{c} \\ \bar{b}c + ds & -\bar{b}\bar{s} + d\bar{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (a+bt)c & (b-a\bar{t})\bar{c} \\ (\bar{b}+dt)c & (d-\bar{b}\bar{t})\bar{c} \end{pmatrix}.$$

Um diesen Ausdruck zu vereinfachen verwenden wir (4.2) und die Definitionen, um

$$\begin{aligned} a + bt &= a + \frac{d-a}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} = \lambda_1, \\ \bar{b} + dt &= \left(\frac{a-d}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} \right) t + dt = \lambda_1 t, \\ b - a\bar{t} &= \overline{\left(\frac{a-d}{2} + \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} \right) \bar{t}} - a\bar{t} = -\lambda_2 \bar{t}, \\ d - \bar{b}\bar{t} &= d - \frac{d-a}{2} - \sigma|b|\sqrt{\tau^2+1} = \lambda_2 \end{aligned}$$

zu erhalten und so zu

$$\mathbf{A} \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} (a+bt)c & (b-a\bar{t})\bar{c} \\ (\bar{b}+dt)c & (d-\bar{b}\bar{t})\bar{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 c & -\lambda_2 \bar{s} \\ \lambda_1 s & \lambda_2 \bar{c} \end{pmatrix}$$

zu erhalten. Multiplikation mit \mathbf{Q}^* ergibt

$$\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \bar{c} & \bar{s} \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 c & -\lambda_2 \bar{s} \\ \lambda_1 s & \lambda_2 \bar{c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1(|c|^2 + |s|^2) & \lambda_2(-\bar{c}\bar{s} + \bar{s}\bar{c}) \\ \lambda_1(-sc + cs) & \lambda_2(|s|^2 + |c|^2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 \end{pmatrix},$$

so dass die gewünschte Aussage bewiesen ist. \blacksquare

Falls \mathbf{A} schon „fast“ diagonal ist, könnte es passieren, dass durch die Transformation \mathbf{Q} die Diagonalelemente den Platz tauschen. Das würde zu unerwünschten Problemen bei der Untersuchung der Konvergenz des Verfahrens führen und sollte deshalb vermieden werden. Glücklicherweise lässt sich dieser Effekt vermeiden, indem das Vorzeichen σ geschickt gewählt wird.

Lemma 4.2 *Seien $\mathbf{A}, \mathbf{Q}, \tau, t, c$ und s wie in Lemma 4.1 gegeben. Dann gilt*

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q}\|_F^2 = \frac{2}{c^2} |b|^2.$$

Beweis. Wir kürzen die Eigenwerte wie in (4.5) ab und erhalten

$$\begin{aligned} |a - \lambda_1|^2 &= \left| a - \frac{a+d}{2} - \sigma |b| \sqrt{\tau^2 + 1} \right|^2 = \left| \frac{a-d}{2} - \sigma |b| \sqrt{\tau^2 + 1} \right|^2 \\ &= \frac{(a-d)^2}{4} + |b|^2(\tau^2 + 1) - 2\sigma |b| \frac{a-d}{2} \sqrt{\tau^2 + 1} \\ &= |b|^2 \left(\frac{(a-d)^2}{4|b|^2} + (\tau^2 + 1) - 2\sigma \frac{a-d}{2|b|} \sqrt{\tau^2 + 1} \right) \\ &= |b|^2 \left(\frac{(d-a)^2}{4|b|^2} + (\tau^2 + 1) + 2\sigma \frac{d-a}{2|b|} \sqrt{\tau^2 + 1} \right) \\ &= |b|^2 \left(\frac{(d-a)^2}{4b\bar{b}} + \left(\sigma^2 \frac{|b|^2}{b\bar{b}} \right) (\tau^2 + 1) + 2 \frac{d-a}{2\bar{b}} \sigma \frac{|b|}{b} \sqrt{\tau^2 + 1} \right) \\ &= |b|^2 \left(\frac{d-a}{2b} + \sigma \frac{|b|}{b} \sqrt{\tau^2 + 1} \right) \overline{\left(\frac{d-a}{2b} + \sigma \frac{|b|}{b} \sqrt{\tau^2 + 1} \right)} = |b|^2 |t|^2. \end{aligned}$$

Für den zweiten Diagonaleintrag ergibt sich

$$|d - \lambda_2|^2 = \left| d - \frac{a+d}{2} + \sigma |b| \sqrt{\tau^2 + 1} \right|^2 = \left| -\frac{a-d}{2} + \sigma |b| \sqrt{\tau^2 + 1} \right|^2 = |a - \lambda_1|^2$$

und da die beiden Außerdiagonaleinträge von $\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q}$ verschwinden, erhalten wir

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q}\|_F^2 = 2|b|^2 |t|^2 + 2|b|^2 = 2|b|^2 (|t|^2 + 1) = \frac{2|b|^2}{c^2},$$

also die gewünschte Gleichung. \blacksquare

Wenn wir sicher stellen wollen, dass die Matrix so wenig wie möglich verändert wird, müssen wir also darauf achten, dass c möglichst groß ist, also $|t|$ möglichst klein, also sollte das Vorzeichen σ gerade dem Vorzeichen von τ entsprechen.

4.3 Höherdimensionaler Fall

Sei $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine selbstadjungierte Matrix. Zwei Indizes $i, j \in \{1, \dots, n\}$ mit $i < j$ legen einen Außerdiagonaleintrag a_{ij} in \mathbf{A} fest. Gesucht ist eine orthonormale Ähnlichkeitstransformation $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$, die a_{ij} zu 0 macht, die also für $\mathbf{B} := \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q}$ die Gleichung $b_{ij} = 0$ erfüllt.

Wenn $n = 2$ gelten würde, ließe sich \mathbf{Q} mit Lemma 4.1 bestimmen. Es stellt sich also die Frage, ob sich das n -dimensionale Problem auf das zweidimensionale reduzieren läßt. Dazu setzen wir

$$\widehat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ a_{ji} & a_{jj} \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

und wählen

$$\widehat{\mathbf{Q}} = \begin{pmatrix} c & -\bar{s} \\ s & \bar{c} \end{pmatrix}$$

gemäß Lemma 4.1. Wir definieren $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$, indem wir $\widehat{\mathbf{Q}}$ auf den Unterraum $\mathcal{E}_{ij} := \text{span}\{\mathbf{e}^{(i)}, \mathbf{e}^{(j)}\}$ anwenden und seinen Senkrechttraum $\mathcal{E}_{ij}^\perp := \{\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n : x_i = x_j = 0\}$ unverändert lassen.

Definition 4.3 Seien $i, j \in \{1, \dots, n\}$ mit $i < j$, sei $\widehat{\mathbf{A}}$ gemäß (4.6) definiert. Aus Lemma 4.1 erhalten wir eine Matrix $\widehat{\mathbf{Q}} \in \mathbb{K}^{2 \times 2}$. Sei $\mathbf{P}_{i,j} := (\mathbf{e}_i \ \mathbf{e}_j) \in \mathbb{K}^{n \times 2}$. Die durch

$$\mathbf{Q} := (\mathbf{I} - \mathbf{P}_{i,j} \mathbf{P}_{i,j}^*) + \mathbf{P}_{i,j} \widehat{\mathbf{Q}} \mathbf{P}_{i,j}^* \quad (4.7)$$

beziehungsweise in „Pünktchennotation“ durch

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & c & \cdots & -\bar{s} & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & s & \cdots & \bar{c} & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

definierte Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ ist eine orthonormale Matrix, nämlich eine Rotation, und wird als Givens-Rotation zu der Matrix \mathbf{A} und dem Indexpaar (i, j) bezeichnet.

Seien $i, j \in \{1, \dots, n\}$ mit $i < j$. Sei \mathbf{Q} die Givens-Rotation zu der Matrix \mathbf{A} und dem Indexpaar (i, j) . Sei $\mathbf{B} := \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q}$. Dann gilt

$$\begin{pmatrix} b_{ii} & b_{ij} \\ b_{ji} & b_{jj} \end{pmatrix} = \mathbf{P}_{i,j}^* \mathbf{B} \mathbf{P}_{i,j} = \mathbf{P}_{i,j}^* \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} \mathbf{P}_{i,j} = \widehat{\mathbf{Q}}^* \mathbf{P}_{i,j}^* \mathbf{A} \mathbf{P}_{i,j} \widehat{\mathbf{Q}} = \widehat{\mathbf{Q}}^* \widehat{\mathbf{A}} \widehat{\mathbf{Q}} = \widehat{\mathbf{B}}.$$

Da $\widehat{\mathbf{B}}$ diagonal ist, folgt $b_{ij} = b_{ji} = 0$, also lassen sich mit Hilfe von Givens-Rotationen gezielt einzelne Außerdiagonaleinträge durch orthonormale Ähnlichkeitstransformationen eliminieren.

Es bleibt die Frage, ob die Ähnlichkeitstransformation mit \mathbf{Q} tatsächlich den Außerdiagonalanteil von \mathbf{B} gegenüber \mathbf{A} reduziert hat. Diese Frage beantwortet das folgende Lemma:

Lemma 4.4 Sei \mathbf{Q} wie in (4.7) für $i, j \in \{1, \dots, n\}$ mit $i < j$ definiert. Dann gilt für die Matrix $\mathbf{B} := \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q}$ die Gleichung

$$\text{off}^2(\mathbf{B}) = \text{off}^2(\mathbf{A}) - 2|a_{ij}|^2.$$

Beweis. Wir wenden Lemma 3.48 auf die Matrizen $\widehat{\mathbf{A}}$ und $\widehat{\mathbf{B}}$ an und erhalten

$$|a_{ii}|^2 + 2|a_{ij}|^2 + |a_{jj}|^2 = \|\widehat{\mathbf{A}}\|_F^2 = \|\widehat{\mathbf{Q}}^* \widehat{\mathbf{A}} \widehat{\mathbf{Q}}\|_F^2 = \|\widehat{\mathbf{B}}\|_F^2 = |b_{ii}|^2 + |b_{jj}|^2.$$

Die einzigen Diagonalelemente, in denen sich \mathbf{B} von \mathbf{A} unterscheidet, sind b_{ii} und b_{jj} , so dass sich für die Norm die Außerdiagonalelemente die Gleichung

$$\begin{aligned} \text{off}^2(\mathbf{B}) &= \|\mathbf{B}\|_F^2 - \sum_{k=1}^n |b_{kk}|^2 = \|\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q}\|_F^2 - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i, k \neq j}}^n |b_{kk}|^2 - |b_{ii}|^2 - |b_{jj}|^2 \\ &= \|\mathbf{A}\|_F^2 - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i, k \neq j}}^n |a_{kk}|^2 - |a_{ii}|^2 - |a_{jj}|^2 - 2|a_{ij}|^2 \\ &= \|\mathbf{A}\|_F^2 - \sum_{k=1}^n |a_{kk}|^2 - 2|a_{ij}|^2 = \text{off}^2(\mathbf{A}) - 2|a_{ij}|^2 \end{aligned}$$

ergibt. Also bewirkt die Ähnlichkeitstransformation von \mathbf{A} mit \mathbf{Q} dieselbe Reduktion der Außerdiagonalelemente wie die von $\widehat{\mathbf{A}}$ mit $\widehat{\mathbf{Q}}$. ■

4.4 Algorithmus

Seien $i, j \in \{1, \dots, n\}$ mit $i < j$ gegeben. Wir berechnen $c, s \in \mathbb{K}$ entsprechend Lemma 4.1 und sind daran interessiert, die in Definition 4.3 gegebene Transformation \mathbf{Q} möglichst effizient anzuwenden. Zunächst betrachten wir dazu die Matrix $\mathbf{M} = \mathbf{A} \mathbf{Q}$, deren Einträge durch

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & ca_{1i} + sa_{1j} & \cdots & -\bar{s}a_{1i} + \bar{c}a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & ca_{ii} + sa_{ij} & \cdots & -\bar{s}a_{ii} + \bar{c}a_{ij} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{j1} & \cdots & ca_{ji} + sa_{jj} & \cdots & -\bar{s}a_{ji} + \bar{c}a_{jj} & \cdots & a_{jn} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & ca_{ni} + sa_{nj} & \cdots & -\bar{s}a_{ni} + \bar{c}a_{nj} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

4 Die Jacobi-Iteration

gegeben sind: Nur die i -te und j -te Spalte wurden verändert, ein Algorithmus könnte diesen Schritt also in $6n$ Operationen durchführen.

Die Matrix $\mathbf{B} = \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{Q}^* \mathbf{M}$ ist entsprechend durch

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} m_{11} & \cdots & m_{1i} & \cdots & m_{1j} & \cdots & m_{1n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \bar{c}m_{i1} + \bar{s}m_{j1} & \cdots & \bar{c}m_{ii} + \bar{s}m_{ji} & \cdots & \bar{c}m_{ij} + \bar{s}m_{jj} & \cdots & \bar{c}m_{in} + \bar{s}m_{jn} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ -sm_{i1} + cm_{j1} & \cdots & -sm_{ii} + cm_{ji} & \cdots & -sm_{ij} + cm_{jj} & \cdots & -sm_{in} + cm_{jn} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ m_{n1} & \cdots & m_{ni} & \cdots & m_{nj} & \cdots & m_{nn} \end{pmatrix}$$

beschrieben: Hier wurden nur die i -te und die j -te Zeile verändert, also kann auch dieser Schritt in $6n$ Operationen durchgeführt werden. Wir erhalten den folgenden Algorithmus:

Algorithmus 4.5 (Jacobi-Iteration) *Der folgende Algorithmus überschreibt \mathbf{A} mit einer zu \mathbf{A} ähnlichen „bis auf ϵ diagonalen“ Matrix und speichert die korrespondierende Ähnlichkeitstransformation in der Matrix $\tilde{\mathbf{Q}}$:*

```

 $\tilde{\mathbf{Q}} \leftarrow \mathbf{I};$ 
 $\alpha \leftarrow \text{off}(\mathbf{A})^2;$ 
while  $\alpha > \epsilon^2$  do begin
  Wähle  $i, j \in \{1, \dots, n\}$  mit  $i < j$ ;
   $\tau \leftarrow \frac{a_{ii} - a_{jj}}{2|a_{ij}|}; \quad t \leftarrow \frac{a_{jj} - a_{ii}}{2a_{ij}} + \sigma \frac{|a_{ij}|}{a_{ij}} \sqrt{\tau^2 + 1};$ 
   $c \leftarrow 1/\sqrt{1 + |t|^2}; \quad s \leftarrow tc;$ 
  for  $k = 1$  to  $n$  do begin      { Berechne  $\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{A} \mathbf{Q}$  und  $\tilde{\mathbf{Q}} \leftarrow \tilde{\mathbf{Q}} \mathbf{Q}$  }
     $h \leftarrow a_{ki}; \quad a_{ki} \leftarrow hc + a_{kj}s; \quad a_{kj} \leftarrow -h\bar{s} + a_{kj}\bar{c};$ 
     $h \leftarrow \tilde{q}_{ki}; \quad q_{ki} \leftarrow hc + \tilde{q}_{kj}s; \quad q_{kj} \leftarrow -h\bar{s} + \tilde{q}_{kj}\bar{c}$ 
  end;
  for  $k = 1$  to  $n$  do begin      { Berechne  $\mathbf{A} \leftarrow \mathbf{Q}^* \mathbf{A}$  }
     $h \leftarrow a_{ik}; \quad a_{ik} \leftarrow \bar{c}h + \bar{s}a_{jk}; \quad a_{jk} \leftarrow -sh + ca_{jk}$ 
  end;
   $\alpha \leftarrow \alpha - 2|a_{ij}|^2$ 
end

```

Falls wir in diesem Algorithmus das Paar $1 \leq i < j \leq n$ so wählen, dass $|a_{ij}|$ den maximalen Wert annimmt, können wir eine einfache Konvergenzaussage herleiten:

Satz 4.6 (Konvergenz) *Falls wir $i, j \in \{1, \dots, n\}$ mit $i < j$ so wählen, dass*

$$|a_{k\ell}| \leq |a_{ij}| \quad \text{für alle } k, \ell \in \{1, \dots, n\} \text{ mit } k < \ell \quad (4.9)$$

erfüllt ist, erfüllt die Matrix \mathbf{B} aus Lemma 4.4 die Abschätzung

$$\text{off}^2(\mathbf{B}) \leq \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right) \text{off}^2(\mathbf{A}),$$

also konvergiert der Algorithmus mit mindestens linearer Geschwindigkeit.

Beweis. Seien $i, j \in \{1, \dots, n\}$ mit $i < j$ so gewählt, dass (4.9) gilt. Dann folgt

$$\text{off}^2(\mathbf{A}) = \sum_{\substack{k, \ell=1 \\ k \neq \ell}}^n |a_{k\ell}|^2 = 2 \sum_{\substack{k, \ell=1 \\ k < \ell}}^n |a_{k\ell}|^2 \leq 2 \sum_{\substack{k, \ell=1 \\ k < \ell}}^n |a_{ij}|^2 = 2 \frac{n(n-1)}{2} |a_{ij}|^2 = n(n-1) |a_{ij}|^2.$$

und damit nach Lemma 4.4

$$\text{off}^2(\mathbf{B}) = \text{off}^2(\mathbf{A}) - 2|a_{ij}|^2 \leq \text{off}^2(\mathbf{A}) - \frac{2}{n(n-1)} \text{off}^2(\mathbf{A}) = \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right) \text{off}^2(\mathbf{A}).$$

Das ist die gesuchte Abschätzung. \blacksquare

Lemma 4.1 legt die Rotation \mathbf{Q} nur bis auf das Vorzeichen $\sigma \in \{1, -1\}$ fest. Es stellt sich die Frage, ob eine geschickte Wahl des Vorzeichens Vorteile für das Verfahren bietet. Das folgende Lemma deutet ein mögliches Auswahlkriterium an:

Lemma 4.7 Sei $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ wie in Gleichung (4.8) definiert, sei $\mathbf{B} = \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q}$. Dann gilt

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|_F^2 = 4(1-c) \sum_{k \neq i, j} (|a_{ki}|^2 + |a_{kj}|^2) + \frac{2}{c^2} |a_{ij}|^2.$$

Beweis. Sei $\mathbf{M} := \mathbf{A} \mathbf{Q}$. Sei $k \in \{1, \dots, n\}$. Dann gilt

$$\begin{aligned} |m_{ki} - a_{ki}|^2 &= (m_{ki} - a_{ki})(\bar{m}_{ki} - \bar{a}_{ki}) = |m_{ki}|^2 + |a_{ki}|^2 - m_{ki} \bar{a}_{ki} - a_{ki} \bar{m}_{ki} \\ &= |m_{ki}|^2 + |a_{ki}|^2 - 2 \operatorname{Re}(m_{ki} \bar{a}_{ki}) \\ &= |m_{ki}|^2 + |a_{ki}|^2 - 2 \operatorname{Re}((a_{ki}c + a_{kj}s) \bar{a}_{ki}), \\ |m_{kj} - a_{kj}|^2 &= |m_{kj}|^2 + |a_{kj}|^2 - 2 \operatorname{Re}(a_{kj} \bar{m}_{kj}) \\ &= |m_{kj}|^2 + |a_{kj}|^2 - 2 \operatorname{Re}(a_{kj}(-\bar{a}_{ki}s + \bar{a}_{kj}c)) \end{aligned}$$

und durch Addition beider Gleichungen erhalten wir

$$|m_{ki} - a_{ki}|^2 + |m_{kj} - a_{kj}|^2 = |m_{ki}|^2 + |m_{kj}|^2 + |a_{ki}|^2 + |a_{kj}|^2 - 2(|a_{ki}|^2 + |a_{kj}|^2) \operatorname{Re} c.$$

Da die Transformation mit $\widehat{\mathbf{Q}}$ unitär ist, muss $|m_{ki}|^2 + |m_{kj}|^2 = |a_{ki}|^2 + |a_{kj}|^2$ gelten und wir erhalten

$$|m_{ki} - a_{ki}|^2 + |m_{kj} - a_{kj}|^2 = 2(1 - \operatorname{Re} c)(|a_{ki}|^2 + |a_{kj}|^2).$$

Indem wir dieselbe Argumentation auf $\mathbf{B} = \mathbf{Q}^* \mathbf{M}$ anwenden, erhalten wir

$$|b_{ik} - m_{ik}|^2 + |b_{jk} - m_{jk}|^2 = 2(1 - \operatorname{Re} c)(|m_{ik}|^2 + |m_{jk}|^2).$$

Da die Spaltentransformation nur die Spalten i, j betrifft und die Zeilentransformation nur die Zeilen i, j verändert, folgt

$$|b_{ki} - a_{ki}|^2 + |b_{kj} - a_{kj}|^2 = 2(1 - \operatorname{Re} c)(|a_{ki}|^2 + |a_{kj}|^2) \quad \text{für alle } k \notin \{i, j\},$$

4 Die Jacobi-Iteration

$$|b_{ik} - a_{ik}|^2 + |b_{jk} - a_{jk}|^2 = 2(1 - \operatorname{Re} c)(|a_{ki}|^2 + |a_{kj}|^2) \quad \text{für alle } k \notin \{i, j\},$$

wobei im letzten Schritt ausgenutzt wurde, dass \mathbf{A} selbstadjungiert ist. Da c in unserem Fall immer reell und positiv ist, erhalten wir den ersten Summanden unserer Gleichung.

Es fehlt nur noch die Betrachtung der Elemente a_{ii} , a_{ij} , a_{ji} und a_{jj} . Dazu greifen wir auf Lemma 4.2 zurück und erhalten

$$|a_{ii} - b_{ii}|^2 + |a_{ij} - b_{ij}|^2 + |a_{ji} - b_{ji}|^2 + |a_{jj} - b_{jj}|^2 = \frac{2}{c^2}|a_{ij}|^2,$$

und der Beweis ist vollständig. ■

Wir können Sprünge in der Folge der Iterierten vermeiden, indem wir dafür sorgen, dass c möglichst große Werte annimmt. Nach Konstruktion ist das gerade dann der Fall, wenn $|t|$ möglichst klein ist, wenn also das Vorzeichen von $a_{ii} - a_{jj}$ dem von $\sigma|a_{ij}|\sqrt{\tau^2 + 1}$ entspricht. Oder kürzer: Wir müssen σ negativ wählen, falls $\tau < 0$ gilt, und ansonsten positiv. Beispielsweise wird auf diese Weise verhindert, dass bei bereits kleinen Außerdiagonaleinträgen die Diagonaleinträge die Plätze tauschen und so zwar $\operatorname{off}(\mathbf{B})^2$ konvergiert, nicht aber die Folge der Matrizen selbst.

Bemerkung 4.8 (Quadratische Konvergenz) *Wählt man die Vorzeichen wie oben erläutert, so kann man unter einigen zusätzlichen Voraussetzungen nachweisen, dass das Jacobi-Verfahren lokal quadratisch konvergiert.*

Bemerkung 4.9 (Parallelisierung) *Falls zwei Indexpaare (i, j) und $(i', j)'$ die Bedingung $\{i, j\} \cap \{i', j'\} = \emptyset$ erfüllen, können die Berechnung der Zeilen zu beiden Rotationen parallel erfolgen: Die Rotation zu (i, j) betrifft nur die i -te und die j -te Zeile, während die Rotation zu $(i', j)'$ nur die i' -te und die j' -te Zeile betrifft. Entsprechend können wir auch mit den Spaltenrotationen verfahren.*

5 Die Vektoriteration

Die im letzten Kapitel vorgestellte Jacobi-Iteration berechnet im Falle einer symmetrischen Matrix sämtliche Eigenwerte und Eigenvektoren. Es gibt viele Fälle, in denen man lediglich an einen Teil des Spektrums und den zugehörigen Eigenvektoren interessiert ist, beispielsweise bei der Bestimmung von Eigenschwingungen oder eines invarianten Wahrscheinlichkeitsmaßes.

Zur Lösung derartiger Aufgaben werden sehr oft Verfahren auf der Basis der sogenannten *Vektoriteration* (engl. „power iteration“, weil Potenzen der Matrix eine entscheidende Rolle spielen) verwendet. Einigen dieser Methoden ist dieses Kapitel gewidmet.

5.1 Grundidee

Wir erinnern uns an das zweite Beispiel aus Kapitel 2, in dem die Aufgabe darin bestand, eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $\mathbf{y} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^4 \setminus \{0\}$ zu finden, die stabil bleibt, sich also bei der „Durchführung eines Spielzugs“ nicht ändert. Ein derartiger Vektor ist durch die Gleichung

$$\mathbf{M}\mathbf{y} = \mathbf{y} \tag{5.1}$$

beschrieben. Ein Ansatz zur Bestimmung eines derartigen Vektors besteht darin, zu untersuchen, unter welchen Bedingungen die Folge $(\mathbf{M}^m \mathbf{z})_{m \in \mathbb{N}}$ für eine Startverteilung $\mathbf{z} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^4$ konvergiert.

Falls wir annehmen, dass die Folge gegen einen Vektor $\mathbf{z}^* \in \mathbb{R}^4$ konvergiert, finden wir zu jedem $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$ ein $n_0 \in \mathbb{N}$ mit

$$\|\mathbf{M}^m \mathbf{z} - \mathbf{z}^*\| < \epsilon \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_{\geq n_0},$$

so dass wir

$$\begin{aligned} \|\mathbf{M}\mathbf{z}^* - \mathbf{z}^*\| &= \|\mathbf{M}\mathbf{z}^* - \mathbf{M}^{m+1}\mathbf{z} + \mathbf{M}^{m+1}\mathbf{z} - \mathbf{z}^*\| \leq \|\mathbf{M}(\mathbf{z}^* - \mathbf{M}^m \mathbf{z})\| + \|\mathbf{M}^{m+1}\mathbf{z} - \mathbf{z}^*\| \\ &\leq \|\mathbf{M}\| \|\mathbf{z}^* - \mathbf{M}^m \mathbf{z}\| + \|\mathbf{M}^{m+1}\mathbf{z} - \mathbf{z}^*\| < (\|\mathbf{M}\| + 1)\epsilon \end{aligned}$$

für alle $m \in \mathbb{N}_{\geq n_0}$ erhalten. Da diese Abschätzung für beliebige $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$ gilt, folgt

$$\mathbf{M}\mathbf{z}^* = \mathbf{z}^*,$$

also ist der Grenzwert der Folge, sofern er existiert, auch Lösung der Gleichung (5.1).

Unsere Aufgabe besteht also darin, für eine Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und einen Startvektor $\mathbf{z}^{(0)}$ die Folge $(\mathbf{A}^m \mathbf{z}^{(0)})_{m \in \mathbb{N}_0}$ zu untersuchen.

Dazu untersuchen wir zunächst eine Diagonalmatrix $\mathbf{D} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbb{K}$. Damit die Iteration konvergiert, muss ein Eigenwert vom Betrag her größer als alle anderen sein:

5 Die Vektoriteration

Definition 5.1 (Dominanter Eigenwert) Ein Eigenwert $\lambda_* \in \sigma(\mathbf{A})$ heißt dominant, falls

$$|\lambda_*| > |\lambda| \quad \text{für alle } \lambda \in \sigma(\mathbf{A}) \setminus \{\lambda_*\}$$

gilt, falls der Betrag von λ_* also echt größer als die Beträge aller anderen Eigenwerte der Matrix \mathbf{A} ist.

Für unsere Untersuchung nehmen wir an, dass λ_1 ein dominanter und einfacher Eigenwert von \mathbf{D} ist. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir dann davon ausgehen, dass alle Eigenwerte so angeordnet sind, dass

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

gilt. Wir untersuchen die durch

$$\mathbf{z}^{(m)} := \mathbf{D}^m \mathbf{z}^{(0)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}$$

definierte Folge $(\mathbf{z}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}_0}$. Da \mathbf{D} eine Diagonalmatrix ist, gilt

$$z_i^{(m)} = \lambda_i^m z_i^{(0)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0, i \in \{1, \dots, n\}.$$

Wir haben angenommen, dass λ_1 dominant ist, also wird $z_1^{(m)}$ schneller als alle anderen Komponenten wachsen und sich somit durchsetzen. Diese Beobachtung können wir sogar quantifizieren: Da der erste kanonische Einheitsvektor $\mathbf{e}^{(1)}$ ein Eigenvektor zum Eigenwert λ_1 ist, lässt sich beschreiben, wie schnell die Folge der $\mathbf{z}^{(m)}$ gegen ein Vielfaches dieses Eigenvektors konvergiert.

Lemma 5.2 (Konvergenz für diagonale Matrizen) Es gilt

$$\|\lambda_1^{-m} \mathbf{z}^{(m)} - z_1^{(0)} \mathbf{e}^{(1)}\|_2 \leq \left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|} \right)^m \|\mathbf{z}^{(0)} - z_1^{(0)} \mathbf{e}^{(1)}\|_2 \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.$$

Beweis. Indem wir die Definition der euklidischen Norm ausnutzen erhalten wir

$$\begin{aligned} \|\lambda_1^{-m} \mathbf{z}^{(m)} - z_1^{(0)} \mathbf{e}^{(1)}\|_2 &= \left\| \begin{pmatrix} (\lambda_1/\lambda_1)^m z_1^{(0)} \\ (\lambda_2/\lambda_1)^m z_2^{(0)} \\ \vdots \\ (\lambda_n/\lambda_1)^m z_n^{(0)} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} z_1^{(0)} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \right\|_2 \\ &= \left\| \begin{pmatrix} 0 \\ (\lambda_2/\lambda_1)^m z_2^{(0)} \\ \vdots \\ (\lambda_n/\lambda_1)^m z_n^{(0)} \end{pmatrix} \right\|_2 \leq \left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|} \right)^m \|\mathbf{z}^{(0)} - z_1^{(0)} \mathbf{e}^{(1)}\|_2, \end{aligned}$$

also die gewünschte lineare Konvergenz der Folge. ■

Für die Praxis ist ein Verfahren, das sich nur auf Diagonalmatrizen anwenden lässt, natürlich uninteressant. Wenden wir uns also dem allgemeinen Fall zu: Für einen Startvektor $\mathbf{z}^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ und die allgemeine Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ definieren wir die Folge der Iterierten durch

$$\mathbf{z}^{(m)} := \mathbf{A}^m \mathbf{z}^{(0)} = \mathbf{A} \mathbf{z}^{(m-1)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}. \quad (5.2)$$

Wir setzen voraus, dass \mathbf{A} diagonalisierbar und λ_1 ein einfacher dominanter Eigenwert ist, dass also eine reguläre Matrix $\mathbf{T} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit

$$\mathbf{T}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{T} = \mathbf{D} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$$

und der bereits bekannten Anordnung

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

existiert. Dann ist $\mathbf{x}^{(1)} := \mathbf{T} \mathbf{e}^{(1)}$ ein Eigenvektor zu dem Eigenwert λ_1 .

Um Lemma 5.2 für diesen allgemeineren Fall formulieren zu können, benötigen wir eine Abschätzung für den Einfluss der Transformationsmatrizen \mathbf{T} und \mathbf{T}^{-1} , der sich besonders einfach in der Spektralnorm messen lässt:

Satz 5.3 (Konvergenz) *Sei $(\mathbf{z}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}_0}$ die Folge der durch (5.2) definierten Vektoren. Es gibt ein $\gamma \in \mathbb{K}$ so, dass*

$$\|\lambda_1^{-m} \mathbf{z}^{(m)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2 \leq \left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \|\mathbf{z}^{(0)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2 \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

gilt. Dieses γ ist gerade die erste Komponente von $\mathbf{T}^{-1} \mathbf{z}^{(0)}$.

Beweis. Wir definieren

$$\widehat{\mathbf{z}}^{(m)} := \mathbf{T}^{-1} \mathbf{z}^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

und stellen fest, dass

$$\widehat{\mathbf{z}}^{(m)} = \mathbf{T}^{-1} \mathbf{z}^{(m)} = \mathbf{T}^{-1} \mathbf{A}^m \mathbf{z}^{(0)} = \mathbf{T}^{-1} \mathbf{A}^m \mathbf{T} \widehat{\mathbf{z}}^{(0)} = (\mathbf{T}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{T})^m \widehat{\mathbf{z}}^{(0)} = \mathbf{D}^m \widehat{\mathbf{z}}^{(0)}$$

für alle $m \in \mathbb{N}_0$ gilt. Wir setzen $\gamma := \widehat{z}_1^{(0)}$ und wenden Lemma 5.2 an, um

$$\|\lambda_1^{-m} \widehat{\mathbf{z}}^{(m)} - \gamma \mathbf{e}^{(1)}\|_2 \leq \left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|} \right)^m \|\widehat{\mathbf{z}}^{(0)} - \gamma \mathbf{e}^{(1)}\|_2 \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

zu erhalten. Daraus folgt mit der Submultiplikativität der Spektralnorm

$$\begin{aligned} \|\lambda_1^{-m} \mathbf{z}^{(m)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2 &= \|\lambda_1^{-m} \mathbf{T} \widehat{\mathbf{z}}^{(m)} - \gamma \mathbf{T} \mathbf{e}^{(1)}\|_2 = \|\mathbf{T} (\lambda_1^{-m} \widehat{\mathbf{z}}^{(m)} - \gamma \mathbf{e}^{(1)})\|_2 \\ &\leq \|\mathbf{T}\|_2 \|\lambda_1^{-m} \widehat{\mathbf{z}}^{(m)} - \gamma \mathbf{e}^{(1)}\|_2 \leq \left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2 \|\widehat{\mathbf{z}}^{(0)} - \gamma \mathbf{e}^{(1)}\|_2 \end{aligned} \quad (5.3)$$

5 Die Vektoriteration

$$\begin{aligned}
 &= \left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1} \mathbf{z}^{(0)} - \gamma \mathbf{T}^{-1} \mathbf{x}^{(1)}\|_2 \\
 &\leq \left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1} (\mathbf{z}^{(0)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)})\|_2 \\
 &\leq \left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \|\mathbf{z}^{(0)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2,
 \end{aligned}$$

und das ist gerade die gesuchte Abschätzung. \blacksquare

Im allgemeinen Fall kennen wir λ_1 nicht, können also nicht mit λ_1^{-m} multiplizieren, um die Konvergenz der Folge gegen einen Grenzwert sicherzustellen. Wir können allerdings dafür sorgen, dass die Folge gegen den *Eigenraum* konvergiert. Eine derartige Konvergenz lässt sich einfach über den *Winkel* zwischen den von dem Iterationsvektor und dem Eigenvektor aufgespannten eindimensionalen Teilräumen beschreiben.

Um zu einer für unsere Zwecke brauchbaren Definition des Winkels zu gelangen, greifen wir auf das Skalarprodukt zurück: Wie wir aus der Schule wissen gilt für den Cosinus des Winkels zwischen zwei Vektoren $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ die Gleichung

$$\cos \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2}{\|\mathbf{x}\|_2 \|\mathbf{y}\|_2}.$$

Das Quadrat des Sinus zwischen den Vektoren können wir mit Hilfe der Gleichung $\sin^2 \alpha + \cos^2 \alpha = 1$ durch

$$\sin^2 \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 1 - \cos^2 \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\|\mathbf{x}\|_2^2 \|\mathbf{y}\|_2^2 - \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2 \|\mathbf{y}\|_2^2}$$

ausdrücken. Unser Ziel ist es, die Definition so zu verändern, dass sie ohne das Skalarprodukt auskommt, denn für das Skalarprodukt bietet uns Satz 5.3 keine Informationen. Dazu formen wir den Bruch zunächst elementar um:

$$\begin{aligned}
 \sin^2 \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \frac{\|\mathbf{x}\|_2^2 \|\mathbf{y}\|_2^2 - \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2 \|\mathbf{y}\|_2^2} = \frac{\|\mathbf{x}\|_2^2 \|\mathbf{y}\|_2^4 - 2\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2^2 \|\mathbf{y}\|_2^2 + \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2^2 \|\mathbf{y}\|_2^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2 \|\mathbf{y}\|_2^4} \\
 &= \frac{\|\|\mathbf{y}\|_2^2 \mathbf{x} - \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2 \mathbf{y}\|_2^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2 \|\mathbf{y}\|_2^4} = \frac{\|\mathbf{x} - \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} \mathbf{y}\|_2^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2}.
 \end{aligned}$$

Um das Skalarprodukt aus dem Zähler zu eliminieren, können wir den Zähler als Minimum einer geeigneten Funktion identifizieren. Diese Funktion ist

$$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}, \quad \gamma \mapsto \|\mathbf{x} - \gamma \mathbf{y}\|_2^2 = \|\mathbf{x}\|_2^2 - 2\gamma \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2 + \gamma^2 \|\mathbf{y}\|_2^2.$$

Indem wir sie differenzieren erhalten wir

$$f'(\gamma) = 2\gamma \|\mathbf{y}\|_2^2 - 2\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2$$

und folgern, dass f sein Minimum für

$$\gamma_{\min} := \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2}{\|\mathbf{y}\|_2^2}$$

annimmt. Daraus ergibt sich schließlich die gewünschte Formel

$$\sin^2 \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\|\mathbf{x} - \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} \mathbf{y}\|_2^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2} = \frac{\|\mathbf{x} - \gamma_{\min} \mathbf{y}\|_2^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2} = \min \left\{ \frac{\|\mathbf{x} - \gamma \mathbf{y}\|_2^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2} : \gamma \in \mathbb{R} \right\}.$$

Der Sinus des Winkels zwischen \mathbf{x} und \mathbf{y} beschreibt also gerade, wie gut sich \mathbf{x} durch skalare Vielfache von \mathbf{y} approximieren lässt. Diese Darstellung können wir direkt auf den komplexwertigen Fall übertragen und erhalten die folgende allgemeine Definition:

Definition 5.4 (Winkel) Seien $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$. Wir definieren den Winkel zwischen \mathbf{x} und dem von \mathbf{y} aufgespannten eindimensionalen Unterraum durch

$$\sin \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \min \left\{ \frac{\|\mathbf{x} - \gamma \mathbf{y}\|}{\|\mathbf{x}\|} : \gamma \in \mathbb{K} \right\}.$$

Nun können wir uns wieder der Untersuchung der Konvergenz der Folge $(\mathbf{z}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}_0}$ zuwenden. Falls wir voraussetzen, dass $\gamma \neq 0$ gilt, folgt aus (5.3) die Abschätzung

$$\begin{aligned} \sin \angle(\mathbf{z}^{(m)}, \mathbf{x}^{(1)}) &\leq \frac{\|\mathbf{z}^{(m)} - \lambda_1^m \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2}{\|\mathbf{z}^{(m)}\|_2} = \frac{\|\lambda_1^{-m} \mathbf{z}^{(m)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2}{\|\lambda_1^{-m} \mathbf{z}^{(m)}\|_2} \\ &\leq \left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2 \frac{\|\widehat{\mathbf{z}}^{(0)} - \gamma \mathbf{e}^{(1)}\|_2}{\|\lambda_1^{-m} \mathbf{z}^{(m)}\|_2}. \end{aligned}$$

Zur Abschätzung des Nenners verwenden wir wieder die Submultiplikativität der Spektralnorm:

$$\|\lambda_1^{-m} \mathbf{z}^{(m)}\|_2 = \frac{\|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \|\lambda_1^{-m} \mathbf{z}^{(m)}\|_2}{\|\mathbf{T}^{-1}\|_2} \geq \frac{\|\mathbf{T}^{-1}(\lambda_1^{-m} \mathbf{z}^{(m)})\|_2}{\|\mathbf{T}^{-1}\|_2} = \frac{\|\lambda_1^{-m} \widehat{\mathbf{z}}^{(m)}\|_2}{\|\mathbf{T}^{-1}\|_2} \geq \frac{|\widehat{z}_1^{(0)}|}{\|\mathbf{T}^{-1}\|_2},$$

also erhalten wir schließlich

$$\sin \angle(\mathbf{z}^{(m)}, \mathbf{x}^{(1)}) \leq \left(\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \frac{\|\widehat{\mathbf{z}}^{(0)} - \widehat{z}_1^{(0)} \mathbf{e}^{(1)}\|_2}{|\widehat{z}_1^{(0)}|},$$

der Sinus des Winkels zwischen den Iterierten $\mathbf{z}^{(m)}$ und dem Eigenvektor $\mathbf{x}^{(1)}$ wird demnach wie $(|\lambda_2|/|\lambda_1|)^m$ konvergieren. Falls diese Größe klein genug ist, gilt diese Aussage auch für den Winkel selbst.

In der Praxis kann die Bestimmung der Iterierten $\mathbf{z}^{(m)}$ zu einem Über- oder Unterlauf führen, falls $|\lambda_1| \neq 1$ gilt: Im Fall $|\lambda_1| > 1$ beispielsweise wird sich $\mathbf{z}^{(m)}$ gemäß unserer Theorie wie $\lambda_1^m \gamma \mathbf{x}^{(1)}$ verhalten, also im Zuge der Iteration exponentiell wachsen. Um zu verhindern, dass die Vektoren dabei den Bereich der Maschinenzahlen zu verlassen, empfiehlt es sich, eine Normierung einzuführen, also die Vektoren im Zuge des Verfahrens so zu skalieren, dass Über- und Unterläufe ausgeschlossen werden.

Da gemäß Definition 5.4 auch

$$\sin \angle(\beta \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min \left\{ \frac{\|\beta \mathbf{x} - \gamma \mathbf{y}\|}{\|\beta \mathbf{x}\|} : \gamma \in \mathbb{K} \right\} = \min \left\{ \frac{\|\beta \mathbf{x} - \beta \gamma' \mathbf{y}\|}{\|\beta \mathbf{x}\|} : \gamma' \in \mathbb{K} \right\}$$

5 Die Vektoriteration

$$= \min \left\{ \frac{\|\mathbf{x} - \gamma' \mathbf{y}\|}{\|\mathbf{x}\|} : \gamma' \in \mathbb{K} \right\} = \sin \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

für alle $\beta \in \mathbb{K} \setminus \{0\}$ gilt, beeinflusst eine beliebige Skalierung die Konvergenz der Vektoren nicht im Geringsten. Häufig wählt man die Skalierung so, dass die Iterierten Einheitsvektoren bezüglich einer geeigneten Norm sind. Der korrespondierende Algorithmus nimmt dann die folgende Form an:

Algorithmus 5.5 (Vektoriteration) Seien $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und $\mathbf{z}^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ wie in Satz 5.3 gegeben und gelte $\gamma \neq 0$. Dann berechnet der folgende Algorithmus die Folge $(\mathbf{z}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}}$, die gegen ein Vielfaches des ersten Eigenvektors $\mathbf{x}^{(1)} = \mathbf{T}\mathbf{e}^{(1)}$ konvergiert:

```

m ← 0
z(m) ← z(m) / ||z(m)||
while „Fehler zu groß“ do begin
  w(m+1) ← A z(m)
  z(m+1) ← w(m+1) / ||w(m+1)||
  m ← m + 1
end

```

Selbstverständlich können wir den Algorithmus nicht unendlich lange arbeiten lassen, sondern wir müssen den Fehler der Approximation des Eigenvektors einschätzen und die Iteration abbrechen, sobald der Fehler klein genug geworden ist. Da uns im Allgemeinen weder der Eigenvektor $\mathbf{x}^{(1)}$ noch der Eigenwert λ_1 zur Verfügung stehen, müssen wir beides auf Grundlage verfügbarer Daten approximieren.

Definition 5.6 (Rayleigh-Quotient) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine Matrix. Die Funktion

$$\Lambda_A : \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\} \rightarrow \mathbb{K}, \quad \mathbf{y} \mapsto \frac{\langle \mathbf{y}, \mathbf{A}\mathbf{y} \rangle_2}{\langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle_2},$$

nennen wir die Rayleigh-Quotienten-Funktion zu \mathbf{A} , für einen Vektor $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ nennen wir den Funktionswert $\Lambda_A(\mathbf{y})$ den Rayleigh-Quotienten zu \mathbf{A} und \mathbf{y} .

Der Rayleigh-Quotient leistet gute Dienste dabei, einem Eigenvektor einen Eigenwert zuzuordnen:

Lemma 5.7 (Eigenwert) Sei $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ ein Eigenvektor der Matrix \mathbf{A} zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{K}$. Dann gilt $\Lambda_A(\mathbf{x}) = \lambda$.

Beweis. Da das Skalarprodukt sesquilinear ist, ist es insbesondere linear im zweiten Argument, und wir erhalten

$$\Lambda_A(\mathbf{x}) = \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{A}\mathbf{x} \rangle_2}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2} = \frac{\langle \mathbf{x}, \lambda \mathbf{x} \rangle_2}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2} = \lambda \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2} = \lambda.$$

Das ist die gesuchte Gleichung. ■

Eine einfache Strategie zur Schätzung des Fehlers der Vektoriteration besteht nun darin, in jedem Schritt des Verfahrens den Rayleigh-Quotienten $\lambda_m := \Lambda_A(\mathbf{z}^{(m)})$ der aktuellen Iterierten $\mathbf{z}^{(m)}$ zu bestimmen und den Fehler gegenüber der exakten Eigenwertgleichung $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0}$ zu bestimmen, also

$$\epsilon_m := \|\mathbf{A}\mathbf{z}^{(m)} - \lambda_m\mathbf{z}^{(m)}\| = \|\mathbf{w}^{(m+1)} - \langle \mathbf{z}^{(m)}, \mathbf{w}^{(m+1)} \rangle \mathbf{z}^{(m)}\| \quad (5.4)$$

als Maß des Fehlers zu verwenden. Der für die Auswertung der Norm erforderliche Vektor $\mathbf{A}\mathbf{z}^{(m)}$ stimmt gerade mit dem in Algorithmus 5.5 berechneten Vektor $\mathbf{w}^{(m+1)}$ überein, erfordert also keine zusätzliche Matrix-Vektor-Multiplikation.

Offenbar gilt für einen exakten Eigenvektor $\epsilon_m = 0$, und auch bei genäherten Eigenvektoren erhalten wir noch eine gute Schätzung für den Eigenwert:

Lemma 5.8 (Eigenwert-Approximation) *Sei $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ eine Näherung eines Eigenvektors $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ der Matrix \mathbf{A} zum Eigenwert λ . Dann gilt*

$$|\Lambda_A(\mathbf{y}) - \lambda| \leq \|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}\|_2 \sin \angle(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \leq \|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}\|_2 \frac{\|\mathbf{y} - \alpha\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{y}\|_2} \quad \text{für alle } \alpha \in \mathbb{K}.$$

Falls \mathbf{A} eine normale Matrix ist, gilt sogar

$$|\Lambda_A(\mathbf{y}) - \lambda| \leq \|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}\|_2 \sin^2 \angle(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \leq \|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}\|_2 \left(\frac{\|\mathbf{y} - \alpha\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{y}\|_2} \right)^2 \quad \text{für alle } \alpha \in \mathbb{K}.$$

Beweis. Sei $\alpha \in \mathbb{K}$. Nach Definition gilt $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0}$, also folgt die Abschätzung

$$\begin{aligned} |\Lambda_A(\mathbf{y}) - \lambda| &= \left| \frac{\langle \mathbf{y}, \mathbf{A}\mathbf{y} \rangle_2}{\langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle_2} - \frac{\langle \mathbf{y}, \lambda\mathbf{y} \rangle_2}{\langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle_2} \right| = \left| \frac{\langle \mathbf{y}, (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{y} \rangle_2}{\langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle_2} \right| = \left| \frac{\langle \mathbf{y}, (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})(\mathbf{y} - \alpha\mathbf{x}) \rangle_2}{\langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle_2} \right| \\ &\leq \frac{\|\mathbf{y}\|_2 \|(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})(\mathbf{y} - \alpha\mathbf{x})\|_2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} \leq \frac{\|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}\|_2 \|\mathbf{y} - \alpha\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{y}\|_2} \end{aligned}$$

Da wir diese Ungleichung für jedes $\alpha \in \mathbb{K}$ bewiesen haben, folgt aus Definition 5.4 die erste Aussage. Sei nun \mathbf{A} eine normale Matrix. Nach Lemma 3.43 gilt

$$\|(\mathbf{A}^* - \bar{\lambda}\mathbf{I})\mathbf{x}\|_2 = \|(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})^*\mathbf{x}\|_2 = \|(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{x}\|_2 = 0,$$

also insbesondere auch $(\mathbf{A}^* - \bar{\lambda}\mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0}$, \mathbf{x} ist also ein Eigenvektor von \mathbf{A}^* zum Eigenwert $\bar{\lambda}$. Mit Hilfe dieser Gleichung können wir unsere Abschätzung verbessern:

$$\begin{aligned} |\Lambda_A(\mathbf{y}) - \lambda| &= \left| \frac{\langle \mathbf{y}, (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})(\mathbf{y} - \alpha\mathbf{x}) \rangle_2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} \right| = \left| \frac{\langle (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})^*\mathbf{y}, \mathbf{y} - \alpha\mathbf{x} \rangle_2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} \right| \\ &= \left| \frac{\langle (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})^*(\mathbf{y} - \alpha\mathbf{x}), \mathbf{y} - \alpha\mathbf{x} \rangle_2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} \right| = \left| \frac{\langle \mathbf{y} - \alpha\mathbf{x}, (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})(\mathbf{y} - \alpha\mathbf{x}) \rangle_2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} \right| \\ &\leq \frac{\|\mathbf{y} - \alpha\mathbf{x}\|_2 \|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}\|_2 \|\mathbf{y} - \alpha\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} = \|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}\|_2 \left(\frac{\|\mathbf{y} - \alpha\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{y}\|_2} \right)^2, \end{aligned}$$

5 Die Vektoriteration

und da auch diese Abschätzung für beliebiges $\alpha \in \mathbb{K}$ gezeigt wurde, folgt die zweite Fehlerabschätzung. ■

Es ist bemerkenswert, dass bei normalen Matrizen der mit Hilfe des Rayleigh-Quotienten berechnete Eigenwert wesentlich schneller als der Eigenvektor konvergieren kann. Falls wir also nur an einer Approximation des Eigenwerts interessiert sind, kann eine wesentlich geringere Anzahl von Iterationen bereits eine gute Genauigkeit erreichen.

Wir können die in (5.4) gegebene Größe für die Konstruktion eines Abbruchkriteriums der Vektoriteration verwenden. Um sicherzustellen, dass das Kriterium unabhängig von der Skalierung der Matrix \mathbf{A} arbeitet, vergleichen wir ϵ_m mit $\epsilon|\lambda|$ für eine gegebene Fehlerschranke $\epsilon > 0$.

Algorithmus 5.9 (Vektoriteration mit Abbruchkriterium) Seien $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und $\mathbf{z} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ wie in Satz 5.3 gegeben und gelte $\gamma \neq 0$. Sei $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$. Dann berechnet der folgende Algorithmus eine Näherung λ des Eigenwerts λ_1 und eine Näherung \mathbf{z} eines zugehörigen Eigenvektors:

```

 $\mathbf{z} \leftarrow \mathbf{z}/\|\mathbf{z}\|$ 
 $\mathbf{a} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{z}$ 
 $\lambda \leftarrow \langle \mathbf{z}, \mathbf{a} \rangle$ 
while  $\|\mathbf{a} - \lambda\mathbf{z}\| > \epsilon|\lambda|$  do begin
     $\mathbf{z} \leftarrow \mathbf{a}/\|\mathbf{a}\|$ 
     $\mathbf{a} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{z}$ 
     $\lambda \leftarrow \langle \mathbf{z}, \mathbf{a} \rangle$ 
end
```

Die Näherungen erfüllen die Abschätzung $\|\mathbf{A}\mathbf{z} - \lambda\mathbf{z}\| \leq \epsilon|\lambda|$.

Bemerkung 5.10 (Implementierung) Für den Algorithmus 5.5 ist es lediglich erforderlich, dass sich die Matrix \mathbf{A} mit einem Vektor multiplizieren lässt. Diese Eigenschaft ist sehr wichtig, da es sehr viele Fälle gibt, in denen das Auswerten einer Matrix relativ kostengünstig durchzuführen ist, etwa bei Matrizen mit vielen Nulleinträgen (z.B. Bandmatrizen wie die Tridiagonalmatrix aus Beispiel 2.1) oder bei Matrizen, die implizit als Lösungsoperator eines linearen Gleichungssystems gegeben sind.

Bemerkung 5.11 (Iteration im Teilraum) Falls die Eigenvektoren $(\mathbf{x}^{(j)})_{j=1}^m$ paarweise orthogonal zueinander sind, lässt sich nach Bestimmung von $\mathbf{x}^{(1)}$ der nächste Eigenvektor $\mathbf{x}^{(2)}$ berechnen, falls der zweite Eigenwert „dominanter als die anderen Eigenwerte“ ist, also $|\lambda_2| > |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|$ gilt, indem man eine neue Folge $(\mathbf{z}^{(m)})_{m=0}^\infty$ berechnet und neben der Normierung auch dafür sorgt, dass $\langle \mathbf{z}^{(m)}, \mathbf{x}^{(1)} \rangle_2 = 0$ gilt, dass also die gesamte Iteration im orthogonalen Komplement des ersten Eigenvektors abläuft.

Bei einer normalen Matrix sollte es dazu ausreichen, die Bedingung für den Startvektor sicher zu stellen, da sie sich dann auf alle folgenden Iterierten überträgt. In der Praxis werden Rundungsfehler dazu führen, dass die Orthogonalität nicht erhalten bleibt, hier wird man also von Zeit zu Zeit „reorthogonalisieren“ müssen.

Die Orthogonalität auf dem von $\mathbf{x}^{(1)}$ aufgespannten Teilraum lässt sich einfach mit Hilfe der Gram-Schmidt-Orthogonalisierung erreichen: Falls $\tilde{\mathbf{z}}^{(m)}$ eine Iterierte ist, lässt sich durch

$$\mathbf{z}^{(m)} := \tilde{\mathbf{z}}^{(m)} - \frac{\langle \tilde{\mathbf{z}}^{(m)}, \mathbf{x}^{(1)} \rangle}{\|\mathbf{x}^{(1)}\|^2} \mathbf{x}^{(1)}$$

ein auf $\mathbf{x}^{(1)}$ senkrecht stehender Vektor konstruieren.

Dieser Ansatz lässt sich verallgemeinern, um auch mehrere der größten Eigenwerte auszublenden und so im Prinzip eine Basis aus Eigenvektoren zu bestimmen. Dabei wird die Orthogonalisierung allerdings zunehmend aufwendig.

5.2 Fehleranalyse

Der Algorithmus 5.9 endet, sobald die Norm des *Residuums*

$$\mathbf{r}_A(\mathbf{z}) := \Lambda_A(\mathbf{z})\mathbf{z} - \mathbf{A}\mathbf{z}$$

den Wert $\epsilon|\lambda|$ unterschreitet. Es stellt sich die Frage, ob diese Eigenschaft bereits bedeutet, dass wir gute Näherungen des Eigenwerts und des Eigenvektors berechnet haben.

Wir beschränken uns bei der Untersuchung auf den Fall einer selbstadjungierten Matrix $\mathbf{A} = \mathbf{A}^* \in \mathbb{K}^{n \times n}$.

Bei der Analyse des Fehlers verwenden wir ein allgemeines Prinzip, das auch in anderen Gebieten der numerischen Mathematik von Bedeutung ist: Die Idee der *Rückwärtsanalyse* beruht darauf, zu einer Näherungslösung eines Problems ein zweites Problem zu konstruieren, das durch die Näherungslösung exakt gelöst wird. Falls Aussagen darüber zur Verfügung stehen, wie sich die Lösungen eines Problems unter Störungen der Problemstellung verändern, kann man dann Rückschlüsse auf die Genauigkeit der Näherungslösung ziehen.

In unserem Fall suchen wir einen Eigenvektor \mathbf{x} , also eine Lösung der Gleichung

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}.$$

Uns steht ein genäherter Eigenvektor $\tilde{\mathbf{x}}$ zur Verfügung, zu dem $\tilde{\lambda} = \Lambda_A(\tilde{\mathbf{x}})$ eine Näherung des Eigenwerts darstellt. Wir suchen eine Matrix $\tilde{\mathbf{A}}$ derart, dass

$$\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\lambda}\tilde{\mathbf{x}}$$

gilt. Wenn wir das Residuum mit

$$\mathbf{r} := \Lambda_A(\tilde{\mathbf{x}})\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\lambda}\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}$$

bezeichnen, erhalten wir wegen

$$\langle \mathbf{r}, \tilde{\mathbf{x}} \rangle = \overline{\Lambda_A(\tilde{\mathbf{x}})} \langle \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}} \rangle - \langle \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}} \rangle = \frac{\langle \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}} \rangle}{\langle \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}} \rangle} \langle \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}} \rangle - \langle \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}} \rangle = 0$$

5 Die Vektoriteration

für die Matrix

$$\tilde{\mathbf{A}} := \mathbf{A} + \frac{\tilde{\mathbf{x}}\mathbf{r}^*}{\|\tilde{\mathbf{x}}\|^2} + \frac{\mathbf{r}\tilde{\mathbf{x}}^*}{\|\tilde{\mathbf{x}}\|^2}$$

die Gleichung

$$\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} + \tilde{\mathbf{x}} \frac{\langle \mathbf{r}, \tilde{\mathbf{x}} \rangle}{\|\tilde{\mathbf{x}}\|^2} + \mathbf{r} \frac{\langle \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}} \rangle}{\|\tilde{\mathbf{x}}\|^2} = \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} + \mathbf{r} = \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} + \tilde{\lambda}\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\lambda}\tilde{\mathbf{x}},$$

also erfüllt $\tilde{\mathbf{A}}$ unsere Anforderungen.

Die Spektralnorm der Störung lässt sich besonders elegant darstellen:

Lemma 5.12 (Rang-2-Matrix) Seien $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{K}^n$ mit $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = 0$ gegeben. Sei $\mathbf{E} := \mathbf{a}\mathbf{b}^* + \mathbf{b}\mathbf{a}^*$. Dann gilt $\|\mathbf{E}\| = \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\|$.

Beweis. Wir untersuchen zunächst den Sonderfall $\|\mathbf{a}\| = 1 = \|\mathbf{b}\|$.

Sei $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$. Wir zerlegen den Vektor in Anteile aus dem Aufspann der Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} sowie einen Rest, der senkrecht auf beiden steht:

$$\alpha := \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle, \quad \beta := \langle \mathbf{b}, \mathbf{x} \rangle, \quad \mathbf{x}_0 := \mathbf{x} - \alpha\mathbf{a} - \beta\mathbf{b}.$$

Dann erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{a}, \mathbf{x}_0 \rangle &= \langle \mathbf{a}, \mathbf{x} \rangle - \alpha \langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle - \beta \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \alpha - \alpha = 0, \\ \langle \mathbf{b}, \mathbf{x}_0 \rangle &= \langle \mathbf{b}, \mathbf{x} \rangle - \alpha \langle \mathbf{b}, \mathbf{a} \rangle - \beta \langle \mathbf{b}, \mathbf{b} \rangle = \beta - \beta = 0, \\ \mathbf{E}\mathbf{x}_0 &= \mathbf{a}\langle \mathbf{b}, \mathbf{x}_0 \rangle + \mathbf{b}\langle \mathbf{a}, \mathbf{x}_0 \rangle = 0, \end{aligned}$$

also liegt \mathbf{x}_0 im Kern der Matrix \mathbf{E} . Es folgt

$$\mathbf{E}\mathbf{x} = \mathbf{E}(\mathbf{x}_0 + \alpha\mathbf{a} + \beta\mathbf{b}) = \alpha\mathbf{a}\langle \mathbf{b}, \mathbf{a} \rangle + \alpha\mathbf{b}\langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle + \beta\mathbf{a}\langle \mathbf{b}, \mathbf{b} \rangle + \beta\mathbf{b}\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle = \alpha\mathbf{b} + \beta\mathbf{a},$$

und infolge der Orthogonalität der Vektoren \mathbf{x}_0 , \mathbf{a} und \mathbf{b} ergibt sich

$$\begin{aligned} \|\mathbf{E}\mathbf{x}\|^2 &= \|\alpha\mathbf{b} + \beta\mathbf{a}\|^2 = |\alpha|^2\|\mathbf{b}\|^2 + |\beta|^2\|\mathbf{a}\|^2 = |\alpha|^2 + |\beta|^2 \leq \|\mathbf{x}_0\|^2 + |\alpha|^2 + |\beta|^2 \\ &= \|\mathbf{x}_0\|^2 + \|\alpha\mathbf{a}\|^2 + \|\beta\mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{x}_0 + \alpha\mathbf{a} + \beta\mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{x}\|^2, \end{aligned}$$

also $\|\mathbf{E}\| \leq 1 = \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\|$ nach Definition der Spektralnorm. Wegen

$$\|\mathbf{E}\mathbf{a}\| = \|\mathbf{b}\langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle + \mathbf{a}\langle \mathbf{b}, \mathbf{a} \rangle\| = \|\mathbf{b}\| = 1$$

muss auch $\|\mathbf{E}\| \geq 1$ gelten, so dass wir $\|\mathbf{E}\| = 1$ bewiesen haben.

Widmen wir uns nun dem allgemeinen Fall. Sollte $\mathbf{a} = \mathbf{0}$ oder $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ gelten, so folgen $\mathbf{E} = \mathbf{0}$ und damit die Behauptung.

Anderenfalls setzen wir $\hat{\mathbf{a}} := \mathbf{a}/\|\mathbf{a}\|$ und $\hat{\mathbf{b}} := \mathbf{b}/\|\mathbf{b}\|$ und wenden den bereits bewiesenen Sonderfall auf $\hat{\mathbf{E}} := \hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{b}}^* + \hat{\mathbf{b}}\hat{\mathbf{a}}^*$ an, um $\|\hat{\mathbf{E}}\| = 1$ zu erhalten. Mit $\|\mathbf{E}\| = \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\| \|\hat{\mathbf{E}}\|$ folgt die Behauptung. ■

Die Anwendung dieses Lemmas auf unseren Fall führt zu

$$\|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\| = \frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\tilde{\mathbf{x}}\|}, \quad (5.5)$$

die Störung der Matrix ist also unmittelbar proportional zu der relativen Größe des Residuums, die wir in unserem Algorithmus explizit berechnen können.

Unser Ziel ist es, aus dieser Abschätzung Rückschlüsse auf die Genauigkeit der Approximation des Eigenwerts und des Eigenvektors zu gewinnen. Als Hilfsmittel verwenden wir die folgende sehr vereinfachte Fassung des *Courant-Fischer-Weyl-Minimax-Prinzips*:

Satz 5.13 (Courant-Minimierung) *Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungiert. Dann sind nach Folgerung 3.40 alle Eigenwerte der Matrix reell. Wir bezeichnen mit $\lambda_{\min} \in \sigma(\mathbf{A})$ den minimalen Eigenwert. Dann gilt*

$$\lambda_{\min} = \min\{\langle \mathbf{z}, \mathbf{A}\mathbf{z} \rangle : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^n, \|\mathbf{z}\| = 1\},$$

der minimale Eigenwert ist also gerade das Minimum des Rayleigh-Quotienten.

Jeder Vektor $\mathbf{z} \in \mathbb{K}^n$ mit $\|\mathbf{z}\| = 1$ und $\lambda_{\min} = \langle \mathbf{z}, \mathbf{A}\mathbf{z} \rangle$ ist ein Eigenvektor der Matrix \mathbf{A} zu dem Eigenwert λ_{\min} .

Beweis. Nach Folgerung 3.40 finden wir eine unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und eine reelle Diagonalmatrix $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^*.$$

Für einen beliebigen Vektor $\mathbf{z} \in \mathbb{K}^n$ und $\hat{\mathbf{z}} := \mathbf{Q}^*\mathbf{z}$ gilt

$$\langle \mathbf{z}, \mathbf{A}\mathbf{z} \rangle = \langle \mathbf{z}, \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^*\mathbf{z} \rangle = \langle \mathbf{Q}^*\mathbf{z}, \mathbf{D}\mathbf{Q}^*\mathbf{z} \rangle = \langle \hat{\mathbf{z}}, \mathbf{D}\hat{\mathbf{z}} \rangle = \sum_{i=1}^n d_{ii}|\hat{z}_i|^2.$$

Mit Lemma 3.32 folgt

$$\begin{aligned} \min\{\langle \mathbf{z}, \mathbf{A}\mathbf{z} \rangle : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^n, \|\mathbf{z}\| = 1\} &= \min\{\langle \hat{\mathbf{z}}, \mathbf{D}\hat{\mathbf{z}} \rangle : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^n, \|\mathbf{z}\| = 1, \hat{\mathbf{z}} = \mathbf{Q}^*\mathbf{z}\} \\ &= \min\{\langle \hat{\mathbf{z}}, \mathbf{D}\hat{\mathbf{z}} \rangle : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^n, \hat{\mathbf{z}} = \mathbf{Q}^*\mathbf{z}, \|\hat{\mathbf{z}}\| = 1\} \\ &= \min\{\langle \hat{\mathbf{z}}, \mathbf{D}\hat{\mathbf{z}} \rangle : \hat{\mathbf{z}} \in \mathbb{K}^n, \|\hat{\mathbf{z}}\| = 1\} \\ &= \min\left\{\sum_{i=1}^n d_{ii}|\hat{z}_i|^2 : \hat{\mathbf{z}} \in \mathbb{K}^n, \|\hat{\mathbf{z}}\| = 1\right\}. \end{aligned}$$

Da \mathbf{A} und \mathbf{D} ähnlich sind, ist λ_{\min} auch der minimale Eigenwert der Matrix \mathbf{D} . Aufgrund derer Diagonalgestalt finden wir $j \in \{1, \dots, n\}$ mit

$$\lambda_{\min} = d_{jj} \leq d_{ii} \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, n\}.$$

Damit folgt einerseits

$$\min\{\langle \mathbf{z}, \mathbf{A}\mathbf{z} \rangle : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^n, \|\mathbf{z}\| = 1\} = \min\left\{\sum_{i=1}^n d_{ii}|\hat{z}_i|^2 : \hat{\mathbf{z}} \in \mathbb{K}^n, \|\hat{\mathbf{z}}\| = 1\right\}$$

5 Die Vektoriteration

$$\begin{aligned} &\geq \min \left\{ \sum_{j=1}^n \lambda_{\min} |\hat{z}_j|^2 : \hat{\mathbf{z}} \in \mathbb{K}^n, \|\hat{\mathbf{z}}\| = 1 \right\} \\ &= \lambda_{\min} \min \left\{ \sum_{j=1}^n |\hat{z}_j|^2 : \hat{\mathbf{z}} \in \mathbb{K}^n, \|\hat{\mathbf{z}}\| = 1 \right\} = \lambda_{\min} \end{aligned}$$

und andererseits für den j -ten kanonischen Einheitsvektor

$$\begin{aligned} \min \{ \langle \mathbf{z}, \mathbf{A}\mathbf{z} \rangle : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^n, \|\mathbf{z}\| = 1 \} &= \min \left\{ \sum_{i=1}^n d_{ii} |\hat{z}_i|^2 : \hat{\mathbf{z}} \in \mathbb{K}^n, \|\hat{\mathbf{z}}\| = 1 \right\} \\ &\leq \sum_{i=1}^n d_{ii} |\delta_i^{(j)}|^2 = d_{jj} = \lambda_{\min}. \end{aligned}$$

Damit ist die gewünschte Gleichung bewiesen.

Sei nun $\mathbf{z} \in \mathbb{K}^n$ mit $\|\mathbf{z}\| = 1$ und $\lambda_{\min} = \langle \mathbf{z}, \mathbf{A}\mathbf{z} \rangle$ gegeben, und sei $\hat{\mathbf{z}} := \mathbf{Q}^* \mathbf{z}$. Nach Voraussetzung gilt

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \mathbf{z}, \mathbf{A}\mathbf{z} \rangle - \lambda_{\min} \|\mathbf{z}\|^2 = \langle \hat{\mathbf{z}}, \mathbf{D}\hat{\mathbf{z}} \rangle - \lambda_{\min} \|\hat{\mathbf{z}}\|^2 \\ &= \sum_{i=1}^n d_{ii} |\hat{z}_i|^2 - \lambda_{\min} \sum_{i=1}^n |\hat{z}_i|^2 = \sum_{i=1}^n (d_{ii} - \lambda_{\min}) |\hat{z}_i|^2. \end{aligned}$$

Da keiner der Summanden negativ sein kann, müssen sie alle gleich null sein. Insbesondere muss aus $d_{ii} \neq \lambda_{\min}$ bereits $\hat{z}_i = 0$ für alle $i \in \{1, \dots, n\}$ folgen. Damit ist $\hat{\mathbf{z}}$ ein Eigenvektor der Matrix \mathbf{D} zu dem Eigenwert λ_{\min} , also ist auch \mathbf{z} ein Eigenvektor der Matrix \mathbf{A} zu demselben Eigenwert. ■

Neben seiner Bedeutung für den folgenden Störungssatz kann das Courant-Minimierungsprinzip auch als Ausgangspunkt bei der Konstruktion eines numerischen Näherungsverfahrens dienen: Statt unmittelbar nach einem Eigenvektor zu suchen, können wir uns auch um ein Minimum des Rayleigh-Quotienten bemühen. Mit diesem Ansatz werden wir uns später eingehender befassen.

Zunächst formulieren wir allerdings den *Bauer-Fike-Störungssatz* für selbstadjungierte Matrizen, mit dessen Hilfe wir eine Aussage über die Konvergenz der Eigenwerte gewinnen können.

Satz 5.14 (Bauer-Fike) *Seien $\mathbf{A}, \tilde{\mathbf{A}} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungierte Matrizen und sei $\tilde{\lambda} \in \sigma(\tilde{\mathbf{A}})$. Dann existiert ein Eigenwert $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$ mit*

$$|\lambda - \tilde{\lambda}| \leq \|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\|.$$

Beweis. Wir wählen ein $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$ mit minimalem Abstand zu $\tilde{\lambda}$, es soll also

$$|\lambda - \tilde{\lambda}| \leq |\mu - \tilde{\lambda}| \quad \text{für alle } \mu \in \sigma(\mathbf{A})$$

gelten. Mit Folgerung 3.40 finden wir eine unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und eine reelle Diagonalmatrix $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^*$. Es folgt

$$(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})^2 = (\mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^* - \tilde{\lambda}\mathbf{Q}\mathbf{Q}^*)^2 = \mathbf{Q}(\mathbf{D} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})^2\mathbf{Q}^*,$$

und da die Eigenwerte der Matrix \mathbf{A} die Diagonalelemente der Matrix \mathbf{D} sind, muss $(\lambda - \tilde{\lambda})^2$ der kleinste Eigenwert der Matrix $(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})^2$ sein.

Sei $\tilde{\mathbf{x}} \in \mathbb{K}^n$ ein Eigenvektor der Matrix $\tilde{\mathbf{A}}$ zu dem Eigenwert $\tilde{\lambda}$ mit $\|\tilde{\mathbf{x}}\| = 1$. Dann gilt nach Satz 5.13 und (3.6) die Abschätzung

$$\begin{aligned} (\lambda - \tilde{\lambda})^2 &= \min\{\langle (\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})^2\mathbf{z}, \mathbf{z} \rangle : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^n, \|\mathbf{z}\| = 1\} \\ &\leq \langle (\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})^2\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{x}} \rangle = \langle (\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})\tilde{\mathbf{x}}, (\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})\tilde{\mathbf{x}} \rangle \\ &= \langle (\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}})\tilde{\mathbf{x}}, (\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}})\tilde{\mathbf{x}} \rangle = \|(\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}})\tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq \|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\|^2\|\tilde{\mathbf{x}}\|^2 = \|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\|^2, \end{aligned}$$

und das ist unsere Behauptung. \blacksquare

Indem wir diese Abschätzung mit (5.5) kombinieren, erhalten wir für ein $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$ schon die Ungleichung

$$|\lambda - \tilde{\lambda}| \leq \|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\| = \frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\tilde{\mathbf{x}}\|},$$

können also die Genauigkeit des genäherten Eigenwerts durch die praktisch berechenbaren Größen $\|\mathbf{r}\|$ und $\|\tilde{\mathbf{x}}\|$ beschreiben.

Natürlich sind wir auch daran interessiert, Aussagen über die Qualität der Approximation des Eigenvektors zu gewinnen. Diese Aufgabe erweist sich als schwieriger:

Beispiel 5.15 (Keine Konvergenz) *Wir untersuchen die Matrizen*

$$\mathbf{A} := \begin{pmatrix} 1 + 2\epsilon & \\ & 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{A}} := \begin{pmatrix} 1 & \epsilon \\ \epsilon & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + \epsilon & \\ & 1 - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Für $\epsilon \rightarrow 0$ konvergieren beide gegen die Einheitsmatrix, also insbesondere auch gegen einander, wir können die Differenz mit Lemma 3.46 sogar explizit berechnen, indem wir die Nullstellen des charakteristischen Polynoms bestimmen:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\| &= \left\| \begin{pmatrix} 2\epsilon & -\epsilon \\ -\epsilon & 0 \end{pmatrix} \right\| = \max\{|\lambda| : (\lambda - 2\epsilon)\lambda - \epsilon^2 = 0\} \\ &= \max\{(\sqrt{2} - 1)\epsilon, (\sqrt{2} + 1)\epsilon\} = (\sqrt{2} + 1)\epsilon. \end{aligned}$$

Der Winkel zwischen den kanonischen Einheitsvektoren, die die Eigenvektoren der Matrix \mathbf{A} sind, und den Eigenvektoren der Matrix $\tilde{\mathbf{A}}$ dagegen ist durch

$$\cos \angle(\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}}) = \frac{\left| \left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\rangle \right|}{\sqrt{2}} = 1/\sqrt{2}$$

gegeben, beträgt also unabhängig von ϵ immer $\pi/4$. Die Eigenvektoren der Matrizen konvergieren demzufolge nicht gegeneinander.

5 Die Vektoriteration

Für $\epsilon = 0$ sind in unserem Beispiel *alle* von null verschiedenen Vektoren Eigenvektoren, so dass die Eigenschaft, Eigenvektor zu sein, keine Aussagen über einen Vektor mehr zulässt. Diesen Sonderfall können wir ausschließen, indem wir messen, wie nahe die Eigenwerte beieinander liegen, um so eine „Durchmischung der Eigenräume“ zu vermeiden.

Definition 5.16 (Spektrallücke) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine normale Matrix. Für alle $\lambda \in \mathbb{K}$ definieren wir die Spektrallücke zu λ in Bezug auf \mathbf{A} durch

$$\gamma_A(\lambda) := \inf\{|\mu - \lambda| : \mu \in \sigma(\mathbf{A}) \setminus \{\lambda\}\},$$

also gerade als den Abstand von λ zu dem nächstgelegenen Eigenwert. Wie üblich setzen wir $\inf \emptyset = \infty$ und verwenden in den folgenden Argumenten die Konvention $1/\infty = 0$.

Ausgehend von einer Abschätzung für $\|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\|$ ist es relativ leicht, Aussagen im Bildbereich der Matrizen zu formulieren. Da wir daran interessiert sind, eine Aussage im Definitionsbereich, nämlich über die Störung der Eigenvektoren, zu erhalten, brauchen wir eine Möglichkeit, aus ersterem letztere zu gewinnen. Falls λ ein Eigenwert der Matrix \mathbf{A} ist, kann $\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}$ nicht injektiv sein, also müssen wir Vektoren aus dem Kern gesondert berücksichtigen.

Lemma 5.17 (Urbild-Abschätzung) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine selbstadjungierte Matrix. Dann existiert eine Matrix $\mathbf{\Pi} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ derart, dass

$$\|\mathbf{z} - \mathbf{\Pi}\mathbf{z}\| \leq \frac{1}{\gamma_A(0)} \|\mathbf{A}\mathbf{z}\| \quad \text{für alle } \mathbf{z} \in \mathbb{K}^n \quad (5.6)$$

und $\mathbf{A}\mathbf{\Pi} = \mathbf{0}$ gelten. Letztere Gleichung bedeutet, dass das Bild der Matrix $\mathbf{\Pi}$ im Kern der Matrix \mathbf{A} enthalten ist.

Beweis. Da \mathbf{A} selbstadjungiert ist, finden wir nach Folgerung 3.40 beziehungsweise Satz 3.41 eine unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und eine Diagonalmatrix $\mathbf{D} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^*.$$

Falls $\gamma_A(0) = \infty$ gilt, folgt $\gamma_D(0) = \infty$, also $\mathbf{D} = \mathbf{0}$ und damit $\mathbf{A} = \mathbf{0}$. In diesem Fall setzen wir $\mathbf{\Pi} = \mathbf{I}$ und sind fertig.

Anderenfalls definieren wir eine Diagonalmatrix $\hat{\mathbf{\Pi}} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ durch

$$\hat{\pi}_{ij} := \begin{cases} 1 & \text{falls } i = j \text{ und } d_{ii} = 0, \\ 0 & \text{ansonsten} \end{cases} \quad \text{für alle } i, j \in \{1, \dots, n\}$$

und setzen $\mathbf{\Pi} := \mathbf{Q}\hat{\mathbf{\Pi}}\mathbf{Q}^*$. Aus der Definition folgt $\mathbf{D}\hat{\mathbf{\Pi}} = \mathbf{0}$, so dass sich

$$\mathbf{A}\mathbf{\Pi} = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^*\mathbf{Q}\hat{\mathbf{\Pi}}\mathbf{Q}^* = \mathbf{Q}\mathbf{D}\hat{\mathbf{\Pi}}\mathbf{Q}^* = \mathbf{Q}\mathbf{0}\mathbf{Q}^* = \mathbf{0}$$

ergibt. Also ist das Bild der Matrix $\mathbf{\Pi}$ im Kern der Matrix \mathbf{A} enthalten.

Sei $\mathbf{z} \in \mathbb{K}^n$. Wir definieren $\widehat{\mathbf{z}} := \mathbf{Q}^* \mathbf{z}$ und halten fest, dass nach Lemma 3.32 die Gleichung

$$\|\mathbf{A}\mathbf{z}\| = \|\mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^* \mathbf{z}\| = \|\mathbf{D}\widehat{\mathbf{z}}\|$$

gilt. Die Norm können wir einfach berechnen und erhalten

$$\begin{aligned} \|\mathbf{D}\widehat{\mathbf{z}}\|^2 &= \sum_{i=1}^n |d_{ii}|^2 |\widehat{z}_i|^2 = \sum_{\substack{i=1 \\ d_{ii} \neq 0}}^n |d_{ii}|^2 |\widehat{z}_i|^2 \geq \sum_{\substack{i=1 \\ d_{ii} \neq 0}}^n \gamma_A(0)^2 |\widehat{z}_i|^2 \\ &= \gamma_A(0)^2 \sum_{i=1}^n (1 - \widehat{\pi}_{ii})^2 |\widehat{z}_i|^2 = \gamma_A(0)^2 \|(\mathbf{I} - \widehat{\mathbf{\Pi}})\widehat{\mathbf{z}}\|^2. \end{aligned}$$

Insgesamt ergibt sich

$$\gamma_A(0) \|\mathbf{z} - \mathbf{\Pi}\mathbf{z}\| = \gamma_A(0) \|\mathbf{Q}^*(\mathbf{z} - \mathbf{\Pi}\mathbf{z})\| = \gamma_A(0) \|\widehat{\mathbf{z}} - \widehat{\mathbf{\Pi}}\widehat{\mathbf{z}}\| \leq \|\mathbf{D}\widehat{\mathbf{z}}\| = \|\mathbf{A}\mathbf{z}\|,$$

und die Division durch $\gamma_A(0) > 0$ führt zu der gewünschten Abschätzung. \blacksquare

Bemerkung 5.18 (Projektion) Die in Lemma 5.17 definierte Matrix $\mathbf{\Pi}$ ist eine orthogonale Projektion, erfüllt also $\mathbf{\Pi}^2 = \mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}^*$.

Aus (5.6) folgt, dass für jedes $\mathbf{z} \in \text{Kern}(\mathbf{A})$ die rechte Seite gleich null ist, also auch die linke, so dass $\mathbf{\Pi}\mathbf{z} = \mathbf{z}$ folgt. Damit ist das Bild der Matrix $\mathbf{\Pi}$ nicht nur im Kern der Matrix enthalten, sondern es ist bereits der gesamte Kern.

Damit ist $\mathbf{\Pi}$ eine orthogonale Projektion auf den Kern der Matrix \mathbf{A} . Für jede Matrix \mathbf{A} gibt es nur eine solche Projektion, und sie ordnet jedem Vektor \mathbf{z} denjenigen Vektor $\mathbf{\Pi}\mathbf{z}$ aus dem Kern zu, der ihm in der euklidischen Norm am nächsten kommt.

Satz 5.19 (Gestörtes Eigenwertproblem) Seien $\mathbf{A}, \widetilde{\mathbf{A}} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungierte Matrizen, sei $\tilde{\lambda} \in \sigma(\widetilde{\mathbf{A}})$ ein Eigenwert der Matrix $\widetilde{\mathbf{A}}$ und $\widetilde{\mathbf{x}} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ ein zugehöriger Eigenvektor.

Dann existieren ein Eigenwert $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$ und ein Vektor $\mathbf{x} \in \mathcal{E}_A(\lambda)$ aus dem zugehörigen Eigenraum der Matrix \mathbf{A} mit

$$|\lambda - \tilde{\lambda}| \leq \|\mathbf{A} - \widetilde{\mathbf{A}}\|, \quad \|\mathbf{x} - \widetilde{\mathbf{x}}\| \leq \frac{2}{\gamma_A(\lambda)} \|\mathbf{A} - \widetilde{\mathbf{A}}\| \|\widetilde{\mathbf{x}}\|.$$

Beweis. Mit dem Satz 5.14 finden wir einen Eigenwert $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$ mit

$$|\lambda - \tilde{\lambda}| \leq \|\mathbf{A} - \widetilde{\mathbf{A}}\|.$$

Mit der Dreiecksungleichung, $\tilde{\lambda}\widetilde{\mathbf{x}} = \widetilde{\mathbf{A}}\widetilde{\mathbf{x}}$ und (3.6) erhalten wir

$$\begin{aligned} \|(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})\widetilde{\mathbf{x}}\| &= \|(\tilde{\lambda}\mathbf{I} - \widetilde{\mathbf{A}})\widetilde{\mathbf{x}} - (\mathbf{A} - \widetilde{\mathbf{A}})\widetilde{\mathbf{x}} + (\lambda - \tilde{\lambda})\widetilde{\mathbf{x}}\| \\ &\leq \|(\tilde{\lambda}\mathbf{I} - \widetilde{\mathbf{A}})\widetilde{\mathbf{x}}\| + \|(\mathbf{A} - \widetilde{\mathbf{A}})\widetilde{\mathbf{x}}\| + |\lambda - \tilde{\lambda}| \|\widetilde{\mathbf{x}}\| \\ &\leq \|\mathbf{A} - \widetilde{\mathbf{A}}\| \|\widetilde{\mathbf{x}}\| + \|\mathbf{A} - \widetilde{\mathbf{A}}\| \|\widetilde{\mathbf{x}}\| = 2\|\mathbf{A} - \widetilde{\mathbf{A}}\| \|\widetilde{\mathbf{x}}\|. \end{aligned}$$

5 Die Vektoriteration

Wir wenden Lemma 5.17 auf $\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}$ an und erhalten mit $\gamma_{\lambda\mathbf{I}-\mathbf{A}}(0) = \gamma_A(\lambda)$ die Abschätzung

$$\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{\Pi}\tilde{\mathbf{x}}\| \leq \frac{1}{\gamma_A(\lambda)} \|(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})\tilde{\mathbf{x}}\| \leq \frac{2}{\gamma_A(\lambda)} \|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\| \|\tilde{\mathbf{x}}\|.$$

Das Bild der in Lemma 5.17 definierten Matrix $\mathbf{\Pi}$ liegt im Kern der Matrix $\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}$, also gerade im Eigenraum $\mathcal{E}_A(\lambda)$. Demnach erhalten wir mit $\mathbf{x} := \mathbf{\Pi}\tilde{\mathbf{x}}$ die gewünschte Abschätzung. ■

Indem wir diesen Satz auf die im Rahmen der Rückwärtsanalyse konstruierte Matrix $\tilde{\mathbf{A}}$ anwenden und das Abbruchkriterium der in Algorithmus 5.9 gegebenen Vektoriteration einsetzen, erhalten wir die folgende Aussage über das von ihr berechnete Ergebnis:

Folgerung 5.20 (Ergebnis der Vektoriteration) Sei $\tilde{\mathbf{x}} \in \mathbb{K}^n$ ein Vektor, der

$$\|\tilde{\mathbf{x}}\| = 1, \quad \|\mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\lambda}\tilde{\mathbf{x}}\| \leq \epsilon|\tilde{\lambda}|$$

mit $\tilde{\lambda} := \Lambda_A(\tilde{\mathbf{x}}) = \langle \tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}} \rangle$ erfüllt.

Dann existieren ein Eigenwert $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$ der Matrix \mathbf{A} und ein Vektor $\mathbf{x} \in \mathcal{E}_A(\lambda)$ aus dem zugehörigen Eigenraum mit

$$\frac{|\lambda - \tilde{\lambda}|}{|\tilde{\lambda}|} \leq \epsilon, \quad |\lambda - \tilde{\lambda}| \leq \frac{\|\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}\| |\tilde{\lambda}|^2}{\gamma_A(\lambda)^2} \epsilon^2, \quad \|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\| \leq \frac{2|\tilde{\lambda}|}{\gamma_A(\lambda)} \epsilon.$$

Beweis. Wir bezeichnen das Residuum wieder mit

$$\mathbf{r} := \tilde{\lambda}\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}$$

und setzen

$$\tilde{\mathbf{A}} := \mathbf{A} + \frac{\tilde{\mathbf{x}}\mathbf{r}^*}{\|\tilde{\mathbf{x}}\|^2} + \frac{\mathbf{r}\tilde{\mathbf{x}}^*}{\|\tilde{\mathbf{x}}\|^2} = \mathbf{A} + \tilde{\mathbf{x}}\mathbf{r}^* + \mathbf{r}\tilde{\mathbf{x}}^*.$$

Nach Lemma 5.12 und Voraussetzung gilt

$$\|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\| = \|\tilde{\mathbf{x}}\mathbf{r}^* + \mathbf{r}\tilde{\mathbf{x}}^*\| = \|\tilde{\mathbf{x}}\| \|\mathbf{r}\| = \|\mathbf{r}\| \leq \epsilon|\tilde{\lambda}|.$$

Mit Satz 5.19 finden wir $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$ und $\mathbf{x} \in \mathcal{E}_A(\lambda)$ mit

$$|\lambda - \tilde{\lambda}| \leq \epsilon|\tilde{\lambda}|, \quad \|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\| \leq \frac{2}{\gamma_A(\lambda)} \epsilon|\tilde{\lambda}|.$$

Mit Lemma 5.8 folgt wegen $\|\tilde{\mathbf{x}}\| = 1$ auch

$$|\lambda - \tilde{\lambda}| = |\Lambda_A(\tilde{\mathbf{x}}) - \lambda| \leq \|\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}\| \|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\|^2 \leq \frac{\|\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}\| |\tilde{\lambda}|^2}{\gamma_A(\lambda)^2} \epsilon^2,$$

also die noch fehlende Abschätzung. ■

Bemerkung 5.21 (Relativer Fehler) Wir können aus den Ergebnissen der vorangehenden Folgerung auch Abschätzungen des relativen Fehlers gewinnen, falls wir $\epsilon < 1$ voraussetzen: Für den Eigenwert gilt

$$\frac{|\lambda - \tilde{\lambda}|}{|\lambda|} = \frac{|\lambda - \tilde{\lambda}|}{|\tilde{\lambda} + \lambda - \tilde{\lambda}|} \leq \frac{|\lambda - \tilde{\lambda}|}{|\tilde{\lambda}| - |\lambda - \tilde{\lambda}|} = \frac{|\lambda - \tilde{\lambda}|/|\tilde{\lambda}|}{1 - |\lambda - \tilde{\lambda}|/|\tilde{\lambda}|} \leq \frac{\epsilon}{1 - \epsilon},$$

für den Eigenvektor erhalten wir

$$\|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\| \leq \frac{2|\tilde{\lambda}|}{\gamma_A(\lambda)} \epsilon \leq \frac{2(|\lambda| + |\tilde{\lambda} - \lambda|)}{\gamma_A(\lambda)} \epsilon = \frac{2|\lambda|}{\gamma_A(\lambda)} \left(1 + \frac{|\tilde{\lambda} - \lambda|}{|\lambda|}\right) \epsilon \leq \frac{2|\lambda|}{\gamma_A(\lambda)} \left(1 + \frac{\epsilon}{1 - \epsilon}\right) \epsilon.$$

Bei dieser Abschätzung ist von besonderem Interesse, dass die relative Spektrallücke $\gamma_A(\lambda)/|\lambda|$ ausreicht.

Die Aussage über den Fehler des Eigenvektors können wir auch mit Hilfe des Winkels formulieren: Falls ϵ klein genug ist, folgt aus $\|\tilde{\mathbf{x}}\| = 1$ bereits $\|\mathbf{x}\| > 0$, so dass wir mit Definition 5.4 unmittelbar abschätzen, um

$$\sin \angle(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{x}) \leq \frac{\|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\|}{\|\tilde{\mathbf{x}}\|} = \|\tilde{\mathbf{x}} - \mathbf{x}\| \leq \frac{2|\lambda|}{\gamma_A(\lambda)} \left(1 + \frac{\epsilon}{1 - \epsilon}\right) \epsilon$$

zu erhalten. Dieses Resultat können wir natürlich auch wieder in Lemma 5.8 einsetzen, um eine verbesserte Aussage über den Fehler des Eigenwerts zu erhalten.

5.3 Inverse Iteration mit und ohne Shift

Im Beispiel 2.1 ist die Anwendung der Vektoriteration in der Form des Algorithmus 5.5 nicht sinnvoll, da die Eigenvektoren zu den größten Eigenwerten gerade diejenigen sind, die wegen des Diskretisierungsfehlers besonders wenig mit den Eigenvektoren des kontinuierlichen Problems zu tun haben.

Interessanter sind in diesem Fall die Eigenvektoren zu den *kleinsten* Eigenwerten, da diese Vektoren in der Regel relativ gut approximiert werden und auch für ingenieurtechnische Anwendungen von weitaus größerem Interesse sind, schließlich will man häufig die *niedrigste* Frequenz kennen, bei der es zu Oszillationen kommen kann.

Falls die Matrix \mathbf{A} regulär und λ einer ihrer Eigenwerte mit Eigenvektor $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ ist, gilt

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}, \quad \mathbf{x} = \lambda\mathbf{A}^{-1}\mathbf{x}, \quad \frac{1}{\lambda}\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{x},$$

also ist der Kehrwert jedes Eigenwerts von \mathbf{A} auch ein Eigenwert von \mathbf{A}^{-1} . Da die Inverse von \mathbf{A}^{-1} wieder \mathbf{A} ist, folgt, dass das Spektrum von \mathbf{A}^{-1} nur aus den Kehrwerten der Eigenwerte von \mathbf{A} besteht.

Insbesondere ist der Kehrwert des betragskleinsten Eigenwerts von \mathbf{A} gerade der betragsgrößte Eigenwert von \mathbf{A}^{-1} . Falls wir an dem betragskleinsten Eigenwert interessiert sind, liegt es also nahe, den Algorithmus 5.5 auf die inverse Matrix \mathbf{A}^{-1} anzuwenden.

5 Die Vektoriteration

Wir definieren also die m -te Iterierte unseres neuen Verfahrens durch

$$\mathbf{z}^{(m)} := \mathbf{A}^{-m} \mathbf{z}^{(0)} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{z}^{(m-1)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}. \quad (5.7)$$

Da es aus der Anwendung der Vektoriteration auf die Inverse entsteht, trägt dieses Iterationsverfahren den Namen *inverse Iteration*.

Für die Konvergenzuntersuchung müssen wir die Voraussetzungen so wählen, dass sich Satz 5.3 auf \mathbf{A}^{-1} statt \mathbf{A} anwenden lässt.

Wir setzen wieder voraus, dass \mathbf{A} diagonalisierbar ist, dass also eine reguläre Matrix $\mathbf{T} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit

$$\mathbf{T}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{T} = \mathbf{D} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$$

existiert und dass $1/\lambda_1$ ein dominanter Eigenwert von \mathbf{A}^{-1} ist, dass also

$$|\lambda_1| < |\lambda_2| \leq \dots \leq |\lambda_n|$$

gilt, denn daraus folgt

$$\left| \frac{1}{\lambda_1} \right| > \left| \frac{1}{\lambda_2} \right| \geq \dots \geq \left| \frac{1}{\lambda_n} \right|.$$

Mit $\mathbf{x}^{(1)} := \mathbf{T} \mathbf{e}^{(1)}$ bezeichnen wir wieder einen Eigenvektor, der zu dem Eigenwert λ_1 der Matrix \mathbf{A} gehört.

Satz 5.22 (Konvergenz) Sei $(\mathbf{z}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}_0}$ die Folge der durch (5.7) definierten Vektoren. Es gibt ein $\gamma \in \mathbb{K}$ so, dass

$$\|\lambda_1^m \mathbf{z}^{(m)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2 \leq \left(\frac{|\lambda_1|}{|\lambda_2|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \|\mathbf{z}^{(0)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2 \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

gilt. Dieses γ ist gerade die erste Komponente von $\mathbf{T}^{-1} \mathbf{z}^{(0)}$.

Beweis. Wir setzen $\widehat{\mathbf{A}} := \mathbf{A}^{-1}$. Es gilt

$$\mathbf{T}^{-1} \widehat{\mathbf{A}} \mathbf{T} = \mathbf{T}^{-1} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{T} = \mathbf{T}^{-1} (\mathbf{T} \mathbf{D} \mathbf{T}^{-1})^{-1} \mathbf{T} = \mathbf{T}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{T}^{-1} \mathbf{T} = \mathbf{D}^{-1},$$

also ist insbesondere $\widehat{\mathbf{A}}$ diagonalisierbar mit derselben Transformation \mathbf{T} . Die Eigenwerte von $\widehat{\mathbf{A}}$ sind offenbar gerade die Diagonalelemente von

$$\mathbf{D}^{-1} = \text{diag}(1/\lambda_1, \dots, 1/\lambda_n),$$

und nach Voraussetzung ist $1/\lambda_1$ ein dominanter Eigenwert.

Nun können wir Satz 5.3 anwenden und erhalten die Abschätzung

$$\left\| \left(\frac{1}{\lambda_1} \right)^{-m} \mathbf{z}^{(m)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)} \right\|_2 \leq \left(\frac{|1/\lambda_2|}{|1/\lambda_1|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \|\mathbf{z}^{(0)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2$$

für alle $m \in \mathbb{N}$. Um die gesuchte Abschätzung zu erhalten, müssen wir nur noch die Kehrwerte geeignet umrechnen. ■

Bemerkung 5.23 Mit der inversen Iteration lässt sich der Eigenvektor zum kleinsten Eigenwert der Matrix aus Beispiel 2.1 berechnen. Da der kontinuierliche Operator die Eigenwerte

$$\lambda_k = c \frac{\pi^2}{\ell^2} k^2$$

besitzt und die Eigenwerte der diskreten Matrix gegen diese Werte konvergieren, wird die Konvergenzgeschwindigkeit der inversen Iteration gegen

$$\frac{|\lambda_1|}{|\lambda_2|} = 1/4$$

streben, also unabhängig von der Auflösung der Diskretisierung sein.

Während bei der Jacobi-Iteration die Konvergenzgeschwindigkeit potentiell von der Dimension der Matrix abhängt, ist sie also bei der inversen Iteration davon unabhängig. Das ist insbesondere bei hohen Auflösungen ein sehr großer Vorteil.

An diesem Beispiel zeigt sich auch die Wichtigkeit einer dem Problem angemessenen Implementierung des Verfahrens: Falls man bei der Lösung des tridiagonalen Gleichungssystems die Bandstruktur (etwa mit Hilfe einer LU-Zerlegung) ausnutzt, benötigt der gesamte Schleifenrumpf lediglich $\mathcal{O}(n)$ Operationen, so dass sich mit fast linearem Aufwand der gesuchte Eigenvektor bestimmen lässt.

Würde man stattdessen \mathbf{A}^{-1} explizit berechnen, wäre dafür im Allgemeinen ein Aufwand von $\mathcal{O}(n^3)$ Operationen erforderlich, während die Multiplikation mit \mathbf{A}^{-1} in jedem Schritt der inversen Iteration einen Aufwand von $\mathcal{O}(n^2)$ nach sich ziehen würde.

Wie wir gesehen haben steht uns \mathbf{A}^{-1} in der Praxis oft nicht zur Verfügung, oder der Aufwand für die Berechnung der Inversen ist inakzeptabel, deshalb empfiehlt es sich, den Schritt

$$\mathbf{w}^{(m+1)} := \mathbf{A}^{-1} \mathbf{z}^{(m)}$$

des Originalverfahrens durch das Lösen des Gleichungssystems

$$\mathbf{A} \mathbf{w}^{(m+1)} = \mathbf{z}^{(m)}$$

zu ersetzen, das sich in vielen praktischen Anwendungen mit Hilfe einer Faktorisierung oder eines iterativen Lösungsverfahrens effizient durchführen lässt.

Algorithmus 5.24 (Inverse Iteration) Seien $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und $\mathbf{z}^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ wie in Satz 5.22 gegeben und gelte $\gamma \neq 0$. Dann berechnet der folgende Algorithmus die normierte Folge $(\mathbf{z}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}}$, die gegen ein Vielfaches des ersten Eigenvektors konvergiert:

```

m ← 0
z(m) ← z(m) / ||z(m)||
while „Fehler zu groß“ do begin
  Löse A w(m+1) = z(m)
  z(m+1) ← w(m+1) / ||w(m+1)||
  m ← m + 1
end

```

5 Die Vektoriteration

Auch dieser Algorithmus lässt sich wieder mit dem Rayleigh-Quotienten kombinieren, um eine Approximation des betragskleinsten Eigenwerts und damit auch eine Schätzung des Iterationsfehlers zu gewinnen. Wir können den im Zuge der Iteration ohnehin berechneten Vektor $\mathbf{w}^{(m+1)}$ verwenden, um $\lambda_m := \Lambda_{\mathbf{A}^{-1}}(\mathbf{z}^{(m)})$ effizient zu berechnen und

$$\epsilon_m := \|\mathbf{A}^{-1}\mathbf{z}^{(m)} - \lambda_m\mathbf{z}^{(m)}\| = \|\mathbf{w}^{(m+1)} - \langle \mathbf{z}^{(m)}, \mathbf{w}^{(m+1)} \rangle \mathbf{z}^{(m)}\|$$

als Maß des Fehlers benutzen. Dabei sollte man natürlich nicht vergessen, dass λ_m nun gegen den *Kehrwert* des kleinsten Eigenwerts konvergieren wird, nicht mehr gegen den Eigenwert selbst.

Bei der Betrachtung der inversen Iteration stellen sich zwei Fragen:

1. Die Forderung nach der Regularität von \mathbf{A} ist im Kontext von Eigenwertverfahren unerwartet, schließlich kam sie bei keiner der bisherigen theoretischen Aussagen vor und schränkt die Anwendbarkeit der inversen Iteration ein. Lässt sie sich vermeiden?
2. Mit der Vektoriteration und der inversen Iteration stehen Verfahren zur Bestimmung der größten und kleinsten Eigenwerte zur Verfügung. Lassen sich auch „mittlere“ Eigenwerte berechnen?

Beide Fragen lassen sich positiv beantworten, wenn man von der Inversen \mathbf{A}^{-1} von \mathbf{A} zu der einer um einen gewissen Betrag $\mu \in \mathbb{K}$ „verschobenen“ Matrix übergeht, also \mathbf{A}^{-1} durch $(\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})^{-1}$ ersetzt.

Falls $\mu \notin \sigma(\mathbf{A})$ gilt, folgt für $\lambda \in \mathbb{K}, x \in \mathbb{K}^n \setminus \{0\}$ die Äquivalenz

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \iff (\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})^{-1}\mathbf{x} = \frac{1}{\lambda - \mu}\mathbf{x},$$

so dass alle Eigenvektoren von \mathbf{A} auch Eigenvektoren von $(\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})^{-1}$ sind. Man kann einfach nachweisen, dass jeder Eigenwert der letzteren Matrix sich als $1/(\lambda - \mu)$ mit einem $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$ darstellen lässt, wir gewinnen oder verlieren also keine Eigenwerte, ähnlich wie bei der inversen Iteration.

Die Konvergenz der inversen Iteration hängt von dem Verhältnis des vom Betrag her kleinsten zum vom Betrag her zweitkleinsten Eigenwerts ab. Verwendet man die Matrix $(\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})^{-1}$ anstelle der Matrix \mathbf{A}^{-1} , so ist der vom Betrag her größte Eigenwert derjenige, der dem Wert μ am nächsten liegt. Durch die Wahl des sogenannten *Shift-Parameters* μ lässt sich also festlegen, welche Eigenwerte und Eigenvektoren berechnet werden sollen.

Für die *inverse Iteration mit Shift* μ definieren wir die Folge $(\mathbf{z}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}_0}$ der Iterierten durch

$$\mathbf{z}^{(m)} := (\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})^{-m}\mathbf{z}^{(0)} = (\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})^{-1}\mathbf{z}^{(m-1)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}. \quad (5.8)$$

Auch in diesem Fall lässt sich Satz 5.3 anwenden, um eine Konvergenzaussage zu erhalten. Sei $\mu \in \mathbb{K} \setminus \sigma(\mathbf{A})$. Natürlich muss \mathbf{A} wieder diagonalisierbar sein, es soll also eine reguläre Matrix $\mathbf{T} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit

$$\mathbf{T}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{T} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$$

existieren, bei der die Eigenwerte diesmal nach ihrem Abstand zu μ aufsteigend sortiert sein sollen, es soll also

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

gelten, denn das impliziert

$$\left| \frac{1}{\lambda_1 - \mu} \right| > \left| \frac{1}{\lambda_2 - \mu} \right| \geq \dots \geq \left| \frac{1}{\lambda_n - \mu} \right|.$$

Mit $\mathbf{x}^{(1)}$ bezeichnen wir einen Eigenvektor, der zu dem Eigenwert λ_1 der Matrix \mathbf{A} gehört. Dann erhalten wir die folgende Konvergenzaussage:

Satz 5.25 (Konvergenz) Sei $(\mathbf{z}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}_0}$ die Folge der durch (5.8) definierten Vektoren. Es gibt ein $\gamma \in \mathbb{K}$ so, dass

$$\|(\lambda_1 - \mu)^m \mathbf{z}^{(m)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2 \leq \left(\frac{|\lambda_1 - \mu|}{|\lambda_2 - \mu|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \|\mathbf{z}^{(0)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2 \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

gilt. Dieses γ ist gerade die erste Komponente von $\mathbf{T}^{-1} \mathbf{z}^{(0)}$.

Beweis. Wir setzen $\hat{\mathbf{A}} := (\mathbf{A} - \mu \mathbf{I})^{-1}$. Es gilt

$$\mathbf{T}^{-1} \hat{\mathbf{A}} \mathbf{T} = \mathbf{T}^{-1} (\mathbf{A} - \mu \mathbf{I})^{-1} \mathbf{T} = (\mathbf{D} - \mu \mathbf{I})^{-1} = \text{diag} \left(\frac{1}{\lambda_1 - \mu}, \dots, \frac{1}{\lambda_n - \mu} \right),$$

also ist $\hat{\mathbf{A}}$ diagonalisierbar und $1/|\lambda_1 - \mu|$ ist ein dominanter Eigenwert. Wir können Satz 5.3 anwenden, um die gesuchte Abschätzung zu erhalten. ■

Die Folge der normierten Iterierten lässt sich einfach mit Hilfe des folgenden Algorithmus berechnen:

Algorithmus 5.26 (Inverse Iteration mit Shift) Seien $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und $\mathbf{z}^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ wie in Satz 5.25 gegeben und gelte $\gamma \neq 0$. Dann berechnet der folgende Algorithmus die normierte Folge $(\mathbf{z}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}}$, die gegen ein Vielfaches des ersten Eigenvektors konvergiert:

```

m ← 0
z(0) ← z(0) / ||z(0)||
while „Fehler zu groß“ do begin
  Löse (A - μI)w(m+1) = z(m)
  z(m+1) ← w(m+1) / ||w(m+1)||
  m ← m + 1
end

```

Der Shift-Parameter ermöglicht es uns nicht nur, beliebige Eigenwerte zu approximieren, er kann bei geschickter Wahl auch zu einer erheblichen Beschleunigung der Konvergenz führen, wie die folgenden Beispiele zeigen:

Beispiel 5.27 (Trennung von Eigenwerten) Wir untersuchen die Matrix

$$\mathbf{A}_\epsilon := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 + \epsilon \end{pmatrix}$$

für $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$. Offenbar gilt $\sigma(\mathbf{A}_\epsilon) = \{1, 1 + \epsilon\}$. Wendet man die inverse Iteration auf diese Matrix und einen Startvektor aus $(\mathbb{R} \setminus \{0\}) \times (\mathbb{R} \setminus \{0\})$ an, so konvergiert sie gemäß Satz 5.22 mit einer Geschwindigkeit von $1/(1 + \epsilon)$. Falls ϵ klein ist, ist die Konvergenz also sehr langsam.

Wendet man die inverse Iteration mit einem Shift von $\mu = 1 + \epsilon/3$ auf die Matrix und den Startvektor an, so konvergiert sie mit einer Geschwindigkeit von

$$\left| \frac{1 - \mu}{1 + \epsilon - \mu} \right| = \left| \frac{-\epsilon/3}{2\epsilon/3} \right| = 1/2.$$

Durch geschickte Wahl des Shift-Parameters lässt sich also auch bei nahe beieinander liegenden (auch als „schlecht separiert“ bezeichneten) Eigenwerten eine gute Konvergenzrate erzielen.

Betrachten wir als nächstes die Matrix

$$\mathbf{B} := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ihr charakteristisches Polynom ist $p_B(\lambda) = \lambda^2 + 1$, also folgt $\sigma(\mathbf{B}) = \{i, -i\}$. Wegen $|i| = |-i| = 1$ ist nicht zu erwarten, dass die Vektoriteration oder die inverse Iteration bei dieser Matrix konvergieren. Selbst in diesem Fall lässt sich durch Verwendung eines Shift-Wertes von $\mu = i/3$ noch die gute Konvergenzrate von $1/2$ erzielen:

$$\left| \frac{i - \mu}{-i - \mu} \right| = \left| \frac{2i/3}{-4i/3} \right| = 1/2.$$

Zum Abschluß dieses Abschnittes sollen noch einmal die Vor- und Nachteile der einzelnen vorgestellten Verfahren zusammengefasst werden:

1. Die *Vektoriteration* erfordert keine Inversion der Matrix \mathbf{A} und konvergiert unter den in Satz 5.3 angegebenen Bedingungen gegen einen Eigenvektor zum betragsgrößten Eigenwert. Die Konvergenz ist linear und hängt vom Verhältnis zwischen den Eigenwerten mit größtem und zweitgrößtem Betrag ab.
2. Die *inverse Iteration* erfordert das wiederholte Lösen eines Gleichungssystems (potentiell zeitaufwendig) und konvergiert unter den in Satz 5.22 angegebenen Bedingungen gegen einen Eigenvektor zum betragskleinsten Eigenwert. Die Konvergenz ist linear und hängt vom Verhältnis zwischen den Eigenwerten mit kleinstem und zweitkleinstem Betrag ab.
3. Die *inverse Iteration mit Shift* erfordert das wiederholte Lösen eines Gleichungssystems und konvergiert gegen den Eigenvektor, dessen Eigenwert dem Shift am nächsten liegt. Die Konvergenz ist linear und hängt vom Verhältnis der Abstände der Eigenwerte zu μ ab.

5.4 Inverse Iteration mit Rayleigh-Shift

Die geschickte Wahl des Shift-Parameters μ ist offensichtlich von großer Bedeutung für die Geschwindigkeit des Verfahrens. Da die Konvergenz desto besser wird, je näher μ an dem gesuchten Eigenwert liegt (beziehungsweise desto weiter es von allen anderen entfernt ist), sind wir daran interessiert, μ als Approximation des uns interessierenden Eigenwerts zu wählen. Lemma 5.8 legt die Idee nahe, zur Berechnung von μ den Rayleigh-Quotienten zu verwenden.

Wenn wir davon ausgehen, dass $\mathbf{z}^{(0)}$ bereits eine relativ gute Approximation eines Eigenvektors $\mathbf{x}^{(1)}$ zum Eigenwert λ_1 ist, wird nach Lemma 5.8 die Zahl $\mu_0 := \Lambda_A(\mathbf{z}^{(0)})$ eine gute Approximation von λ_1 sein. Wenn wir nun μ_0 als Shift verwenden und

$$\mathbf{z}^{(1)} := (\mathbf{A} - \mu_0 \mathbf{I})^{-1} \mathbf{z}^{(0)}$$

berechnen, erhalten wir nach Satz 5.25 eine Abschätzung der Form

$$\|(\lambda_1 - \mu_0)\mathbf{z}^{(1)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2 \leq \frac{|\lambda_1 - \mu_0|}{|\lambda_2 - \mu_0|} \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \|\mathbf{z}^{(0)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2,$$

wobei die Eigenwerte wieder in der Form

$$|\lambda_1 - \mu_0| < |\lambda_2 - \mu_0| \leq \dots \leq |\lambda_n - \mu_0|$$

angeordnet sind und

$$\mathbf{T}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{T} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \quad (5.9)$$

gelten soll. Aus Lemma 5.8 erhalten wir eine Abschätzung für $|\lambda_1 - \mu_0|$, so dass wir

$$\|(\lambda_1 - \mu_0)\mathbf{z}^{(1)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2 \leq \frac{\|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\|_2}{|\lambda_2 - \mu_0|} \frac{\|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2}{\|\mathbf{z}^{(0)}\|_2} \|\mathbf{z}^{(0)} - \gamma \mathbf{x}^{(1)}\|_2^2$$

bewiesen haben. Diese Formel suggeriert, dass der Fehler der neuen Iterierten $\mathbf{z}^{(1)}$ sich wie das Quadrat des Fehlers der alten Iterierten $\mathbf{z}^{(0)}$ verhält, dass wir also auf *quadratische Konvergenz* hoffen dürfen. Das würde bedeuten, dass das Verfahren sehr schnell konvergiert, sobald $\mathbf{z}^{(0)}$ dem gesuchten Eigenraum hinreichend nahe ist.

Ausgehend von $\mathbf{z}^{(1)}$ können wir dann einen neuen Shift-Parameter $\mu_1 := \Lambda_A(\mathbf{z}^{(1)})$ bestimmen und den Vorgang wiederholen, um eine weitere Näherung $\mathbf{z}^{(2)}$ zu gewinnen. Da die Berechnung des Rayleigh-Quotienten nichtlinear ist, wird die so definierte *inverse Iteration mit Rayleigh-Shift*, anders als die Vektoriteration oder die konventionelle inverse Iteration, ein nichtlineares Verfahren zur Approximation des Eigenvektors sein.

Algorithmus 5.28 (Inverse Iteration mit Rayleigh-Shift) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit (5.9) gegeben, und sei $\mathbf{z}^{(0)}$ eine hinreichend gute Approximation des Eigenvektors $\mathbf{x}^{(1)} := \mathbf{T} \mathbf{e}^{(1)}$. Dann berechnet der folgende Algorithmus die Folge $(\mathbf{z}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}}$, die gegen ein Vielfaches dieses Vektors konvergiert:

5 Die Vektoriteration

```

m ← 0
z(m) ← z(m) / ||z(m)||2
while „Fehler zu groß“ do begin
    μm ← ⟨z(m), Az(m)⟩2
    Löse (A - μmI)w(m+1) = z(m)
    z(m+1) ← w(m+1) / ||w(m+1)||2
    m ← m + 1
end

```

Auf den ersten Blick ist die inverse Iteration mit Rayleigh-Shift nicht viel aufwendiger als die inverse Iteration mit konstantem Shift. In praktischen Implementierungen ist das leider häufig nicht der Fall:

Bemerkung 5.29 (Rechenaufwand) *In der Praxis werden die Gleichungssysteme*

$$(\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})\mathbf{w}^{(m+1)} = \mathbf{z}^{(m)}, \quad (\mathbf{A} - \mu_m\mathbf{I})\mathbf{w}^{(m+1)} = \mathbf{z}^{(m)},$$

die bei der inversen Iteration mit konstantem bzw. mit Rayleigh-Shift auftreten, häufig mit Hilfe einer Faktorisierung gelöst, etwa mit einer LR-Faktorisierung mit Pivotsuche.

Im Falle eines konstanten Shift-Parameters kann die Berechnung der Faktorisierung vor dem Eintritt in die zentrale Schleife der inversen Iteration stattfinden, so dass ein Iterationsschritt lediglich das Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen in die bereits berechneten Faktoren erfordert.

Für den Rayleigh-Shift dagegen ändert sich die Matrix potentiell in jedem Schritt, so dass für jede Iterierte die Faktorisierung erneut berechnet werden muss. Deshalb kann die inverse Iteration mit Rayleigh-Shift unter Umständen wesentlich aufwendiger als die Variante mit konstantem Shift werden.

Ein einfacher Ausweg besteht darin, den Shift-Parameter nicht in jedem Schritt zu aktualisieren, sondern in größeren Abständen, um die Anzahl der Faktorisierungen zu reduzieren. Dann verliert man zwar potentiell die quadratische Konvergenz, gewinnt aber ein schnelleres Verfahren.

Das quadratische Konvergenzverhalten lässt sich relativ einfach nachweisen, wenn wir die Winkel zwischen den Iterierten und dem Eigenvektor als Hilfsmittel verwenden. Um die Transformationen \mathbf{T} und \mathbf{T}^{-1} einfach handhaben zu können verwenden wir das folgende Lemma:

Lemma 5.30 (Transformierte Winkel) *Seien $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ gegeben, und seien $\hat{\mathbf{x}} := \mathbf{T}^{-1}\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ sowie $\hat{\mathbf{y}} := \mathbf{T}^{-1}\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$ definiert. Dann gelten die Abschätzungen*

$$\sin \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \sin \angle(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}), \quad \sin \angle(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}) \leq \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \sin \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}).$$

Beweis. Wir verwenden die Definition des Winkels sowie die Submultiplikativität der Spektralnorm:

$$\sin \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min_{\alpha \in \mathbb{K}} \frac{\|\mathbf{x} - \alpha\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2} = \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \min_{\alpha \in \mathbb{K}} \frac{\|\mathbf{T}(\hat{\mathbf{x}} - \alpha\hat{\mathbf{y}})\|_2}{\|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \|\mathbf{x}\|_2}$$

$$\begin{aligned}
 &\leq \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \min_{\alpha \in \mathbb{K}} \frac{\|\widehat{\mathbf{x}} - \alpha \widehat{\mathbf{y}}\|_2}{\|\widehat{\mathbf{x}}\|_2} = \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \sin \angle(\widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{y}}), \\
 \sin \angle(\widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{y}}) &= \min_{\alpha \in \mathbb{K}} \frac{\|\widehat{\mathbf{x}} - \alpha \widehat{\mathbf{y}}\|_2}{\|\widehat{\mathbf{x}}\|_2} = \|\mathbf{T}\|_2 \min_{\alpha \in \mathbb{K}} \frac{\|\mathbf{T}^{-1}(\mathbf{x} - \alpha \mathbf{y})\|_2}{\|\mathbf{T}\|_2 \|\widehat{\mathbf{x}}\|_2} \\
 &\leq \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \min_{\alpha \in \mathbb{K}} \frac{\|\mathbf{x} - \alpha \mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2} = \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \sin \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}).
 \end{aligned}$$

■

Mit Hilfe dieser Abschätzungen können wir nun die gewünschten Konvergenzaussagen formulieren. Zunächst sind wir an einer allgemeinen Abschätzung für m Iterationsschritte interessiert:

Lemma 5.31 (Konvergenz des Winkels) Sei $\delta \in [0, 1)$. Sei $\mathbf{z}^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ mit

$$\sin \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}) \leq \frac{\delta}{\|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2}$$

gegeben. Für die in (5.8) definierten Vektoren gilt dann

$$\sin \angle(\mathbf{z}^{(m)}, \mathbf{x}^{(1)}) \leq \left(\frac{|\lambda_1 - \mu|}{|\lambda_2 - \mu|} \right)^m \frac{\|\mathbf{T}\|_2^2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2^2}{\sqrt{1 - \delta^2}} \sin \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}.$$

Beweis. Wir rechnen zunächst mit den transformierten Größen

$$\widehat{\mathbf{z}}^{(m)} := \mathbf{T}^{-1} \mathbf{z}^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N},$$

denn dann ist $\mathbf{e}^{(1)} = \mathbf{T}^{-1} \mathbf{x}^{(1)}$ der gesuchte Eigenvektor und wir können Winkel zwischen beliebigen Vektoren $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^n$ und $\mathbf{e}^{(1)}$ einfach durch

$$\sin \angle(\mathbf{y}, \mathbf{e}^{(1)}) = \frac{\sqrt{\sum_{i=2}^n |y_i|^2}}{\|\mathbf{y}\|_2}$$

ausdrücken. Insbesondere erhalten wir für den Startvektor $\mathbf{z}^{(0)}$ die Gleichung

$$\|\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}\|_2^2 = |\widehat{z}_1^{(0)}|^2 + \sum_{i=2}^n |\widehat{z}_i^{(0)}|^2 = |\widehat{z}_1^{(0)}|^2 + \sin^2 \angle(\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}, \mathbf{e}^{(1)}) \|\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}\|_2^2,$$

aus der wiederum

$$(1 - \sin^2 \angle(\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}, \mathbf{e}^{(1)})) \|\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}\|_2^2 = |\widehat{z}_1^{(0)}|^2$$

folgt. Sei $m \in \mathbb{N}$. Nach Definition gilt

$$\widehat{\mathbf{z}}^{(m)} = (\mathbf{D} - \mu \mathbf{I})^{-m} \widehat{\mathbf{z}}^{(0)} = \begin{pmatrix} (\lambda_1 - \mu_0)^{-m} \widehat{z}_1^{(0)} \\ \vdots \\ (\lambda_n - \mu_0)^{-m} \widehat{z}_n^{(0)} \end{pmatrix}$$

5 Die Vektoriteration

und damit insbesondere

$$\begin{aligned}
\sin \angle(\widehat{\mathbf{z}}^{(m)}, \mathbf{e}^{(1)}) &= \sqrt{\frac{\sum_{i=2}^n |\lambda_i - \mu_0|^{-2m} |\hat{z}_i^{(0)}|^2}{\sum_{i=1}^n |\lambda_i - \mu_0|^{-2m} |\hat{z}_i^{(0)}|^2}} \leq \sqrt{\frac{|\lambda_2 - \mu_0|^{-2m} \sum_{i=2}^n |\hat{z}_i^{(0)}|^2}{|\lambda_1 - \mu_0|^{-2m} |\hat{z}_1^{(0)}|^2}} \\
&= \left(\frac{|\lambda_1 - \mu_0|}{|\lambda_2 - \mu_0|} \right)^m \sqrt{\frac{\sum_{i=2}^n |\hat{z}_i^{(0)}|^2}{|\hat{z}_1^{(0)}|^2}} \\
&= \left(\frac{|\lambda_1 - \mu_0|}{|\lambda_2 - \mu_0|} \right)^m \frac{1}{\sqrt{1 - \sin^2 \angle(\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}, \mathbf{e}^{(1)})}} \frac{\sqrt{\sum_{i=2}^n |\hat{z}_i^{(0)}|^2}}{\|\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}\|_2} \\
&= \left(\frac{|\lambda_1 - \mu_0|}{|\lambda_2 - \mu_0|} \right)^m \frac{\sin \angle(\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}, \mathbf{e}^{(1)})}{\sqrt{1 - \sin^2 \angle(\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}, \mathbf{e}^{(1)})}}. \tag{5.10}
\end{aligned}$$

Wir wenden Lemma 5.30 an, um die Abschätzung

$$\sin \angle(\mathbf{z}^{(m)}, \mathbf{x}^{(1)}) \leq \left(\frac{|\lambda_1 - \mu_0|}{|\lambda_2 - \mu_0|} \right)^m \frac{\|\mathbf{T}\|_2^2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2^2}{\sqrt{1 - \|\mathbf{T}\|_2^2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2^2} \sin^2 \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)})} \sin \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)})$$

zu erhalten. Nach Voraussetzung gilt

$$\sqrt{1 - \|\mathbf{T}\|_2^2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2^2} \sin^2 \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}) \geq \sqrt{1 - \delta^2},$$

und wir haben die gewünschte Abschätzung bewiesen. \blacksquare

Indem wir die üblichen Rechenregeln für trigonometrische Funktionen auf die Abschätzung (5.10) anwenden, erhalten wir

$$\frac{\sin \angle(\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}, \mathbf{e}^{(1)})}{\sqrt{1 - \sin^2 \angle(\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}, \mathbf{e}^{(1)})}} = \frac{\sin \angle(\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}, \mathbf{e}^{(1)})}{\cos \angle(\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}, \mathbf{e}^{(1)})} = \tan \angle(\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}, \mathbf{e}^{(1)}),$$

die Konstante in der Konvergenzaussage ist also gerade der Tangens des Winkels zwischen dem Startvektor $\widehat{\mathbf{z}}^{(0)}$ und dem Eigenvektor $\mathbf{e}^{(1)}$.

Indem wir dieses Lemma auf $m = 1$ und das mit Hilfe des Rayleigh-Quotienten bestimmte μ_0 anwenden, erhalten wir die gesuchte quadratische Konvergenzaussage:

Satz 5.32 (Quadratische Konvergenz) Sei $\delta \in [0, 1)$. Sei $\mathbf{z}^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ mit

$$\sin \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}) \leq \delta \min \left\{ \frac{1}{\|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2}, \frac{|\lambda_2 - \lambda_1|}{\|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\|_2} \right\}$$

gegeben, und sei $\mu := \Lambda_A(\mathbf{z}^{(0)})$. Für den Vektor $\mathbf{z}^{(1)} := (\mathbf{A} - \mu \mathbf{I})^{-1} \mathbf{z}^{(0)}$ gilt dann

$$\sin \angle(\mathbf{z}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}) \leq \frac{\|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\|_2 \|\mathbf{T}\|_2^2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2^2}{|\lambda_2 - \lambda_1| (1 - \delta) \sqrt{1 - \delta^2}} \sin^2 \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}).$$

Beweis. Den größten Teil der Arbeit haben wir bereits in Lemma 5.31 geleistet, so dass es ausreicht, aus Lemma 5.8 die Abschätzung

$$\begin{aligned} \frac{|\lambda_1 - \mu|}{|\lambda_2 - \mu|} &= \frac{|\lambda_1 - \Lambda_A(\mathbf{z}^{(0)})|}{|\lambda_2 - \lambda_1 + \lambda_1 - \Lambda_A(\mathbf{z}^{(0)})|} \leq \frac{|\lambda_1 - \Lambda_A(\mathbf{z}^{(0)})|}{|\lambda_2 - \lambda_1| - |\lambda_1 - \Lambda_A(\mathbf{z}^{(0)})|} \\ &\leq \frac{\|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\|_2 \sin \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)})}{|\lambda_2 - \lambda_1| - \|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\|_2 \sin \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)})} \leq \frac{\|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\|_2}{(1 - \delta)|\lambda_2 - \lambda_1|} \sin \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}) \end{aligned}$$

zu gewinnen und sie in die Abschätzung von Lemma 5.31 einzusetzen. \blacksquare

Wir haben bereits gesehen, dass der Rayleigh-Quotient bei normalen Matrizen sogar quadratisch konvergiert. Diese Aussage lässt sich ausnutzen, um für die inverse Iteration mit Rayleigh-Shift *kubische* Konvergenz zu beweisen:

Satz 5.33 (Kubische Konvergenz) Sei \mathbf{A} normal. Sei $\delta \in [0, 1)$. Sei $\mathbf{z}^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ mit

$$\sin^2 \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}) \leq \delta \min \left\{ 1, \frac{|\lambda_2 - \lambda_1|}{\|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\|_2} \right\}$$

gegeben, und sei $\mu := \Lambda_A(\mathbf{z}^{(0)})$. Für den Vektor $\mathbf{z}^{(1)} := (\mathbf{A} - \mu \mathbf{I})^{-1} \mathbf{z}^{(0)}$ gilt dann

$$\sin \angle(\mathbf{z}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}) \leq \frac{\|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\|_2}{|\lambda_2 - \lambda_1|(1 - \delta)\sqrt{1 - \delta^2}} \sin^3 \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}).$$

Beweis. Da \mathbf{A} normal ist, können wir nach Folgerung 3.45 die Transformation \mathbf{T} unitär wählen, so dass $\|\mathbf{T}\|_2 = 1 = \|\mathbf{T}^{-1}\|_2$ gilt. Wie im Beweis von Satz 5.32 erhalten wir mit Hilfe von Lemma 5.8 die Abschätzung

$$\begin{aligned} \frac{|\lambda_1 - \mu|}{|\lambda_2 - \mu|} &\leq \frac{|\lambda_1 - \lambda_A(\mathbf{z}^{(0)})|}{|\lambda_2 - \lambda_1| - |\lambda_1 - \lambda_A(\mathbf{z}^{(0)})|} \\ &\leq \frac{\|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\|_2 \sin^2 \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)})}{|\lambda_2 - \lambda_1| - \|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\|_2 \sin^2 \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)})} \leq \frac{\|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\|_2}{(1 - \delta)|\lambda_2 - \lambda_1|} \sin^2 \angle(\mathbf{z}^{(0)}, \mathbf{x}^{(1)}) \end{aligned}$$

und wenden Lemma 5.31 an, um die Abschätzung zu beweisen. \blacksquare

In der Praxis dürfte es sinnvoll sein, die inverse Iteration mit konstantem Shift zu verwenden, um eine erste Näherung des Eigenvektors zu gewinnen, die genau genug ist, um dann unter Einsatz des Rayleigh-Shifts in wenigen Schritten eine hohe Genauigkeit zu erreichen. Das so zusammengesetzte Verfahren würde von der Iteration mit konstantem Shift die globale Konvergenz und den geringen Rechenaufwand pro Schritt erben und von der Iteration mit Rayleigh-Shift die schnelle lokale Konvergenz und deshalb hohe Genauigkeit.

5.5 Orthogonale Iteration

Die Vektoriteration und die von ihr abgeleiteten Verfahren dienen der Berechnung eines Eigenvektors zu einem bestimmten Eigenwert, der in geeigneter Weise dominant sein muss: Bei der einfachen Vektoriteration mussten wir voraussetzen, dass $|\lambda_1|$ echt größer als die Beträge aller anderen Eigenwerte sein muss. Insbesondere mussten wir dabei mehrfache Eigenwerte ausschließen, denn im Falle $|\lambda_1| = |\lambda_2|$ würde unser Konvergenzsatz 5.3 keine brauchbare Fehlerabschätzung mehr zur Verfügung stellen. Falls immerhin noch $\lambda_1 \neq \lambda_2$ gilt, können wir dieses Problem mit einem geeigneten Shift-Parameter beheben, im Falle $\lambda_1 = \lambda_2$ dagegen, also bei einem doppelten Eigenwert, erhalten wir mit der bisherigen Theorie keine Konvergenzaussage.

Wenn eine Diagonalmatrix $\mathbf{D} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ mit

$$|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|$$

näher untersuchen, stellen wir fest, dass in den Vektoren

$$\mathbf{z}^{(m)} := \frac{1}{|\lambda_1|^m} \mathbf{D}^m \mathbf{z}^{(0)} \quad \text{für } m \in \mathbb{N}_0$$

immer noch alle Komponenten außer den *ersten beiden* gegen null konvergieren. Die Vektoren werden also zwar nicht gegen einen Vektor des Eigenwerts λ_1 konvergieren, aber immer noch gegen einen Vektor aus dem von Eigenvektoren zu λ_1 und λ_2 aufgespannten *invarianten Teilraum*.

Konvergenzaussagen wie Satz 5.3 basieren darauf, dass die Iterierte $\mathbf{z}^{(m)}$ mit einem geeigneten Vielfachen des Eigenvektors $\mathbf{x}^{(1)}$ verglichen wird. Wenn wir die Konvergenz gegen einen Teilraum untersuchen wollen, liegt es also nahe $\mathbf{z}^{(m)}$ mit einem Vektor aus dem Teilraum zu vergleichen, der ihm möglichst nahe liegt.

Ein einfacher Zugang besteht darin, die Approximation einer Iterierten durch eine Matrix \mathbf{P} zu beschreiben, deren Bild der gewünschte Teilraum ist. Dann vergleichen wir die Iterierte $\mathbf{z}^{(m)}$ mit dem Element $\mathbf{P}\mathbf{z}^{(m)}$ des Teilraums, und falls die Differenz klein ist, liegt $\mathbf{z}^{(m)}$ „fast“ im Teilraum. Besonders günstig ist es, wenn \mathbf{P} eine Projektion auf den Teilraum ist, also $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$ gilt.

Lemma 5.34 (Konvergenz für diagonale Matrizen) Sei $\mathbf{D} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ gegeben und gelte

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_k| > |\lambda_{k+1}| \geq \dots \geq |\lambda_n| \quad (5.11)$$

für ein $k \in \{1, \dots, n-1\}$. Dann existiert eine Projektion $\mathbf{P} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit $\text{Bild } \mathbf{P} = \text{span}\{\mathbf{e}^{(1)}, \dots, \mathbf{e}^{(k)}\}$ derart, dass für alle $\mathbf{z}^{(0)} \in \mathbb{K}^n$ mit $\mathbf{P}\mathbf{z}^{(0)} \neq \mathbf{0}$ und für die Iterierten

$$\mathbf{z}^{(m)} := \mathbf{D}^m \mathbf{z}^{(0)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}.$$

die Abschätzung

$$\frac{\|\mathbf{z}^{(m)} - \mathbf{P}\mathbf{z}^{(m)}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{z}^{(m)}\|_2} \leq \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|} \right)^m \frac{\|\mathbf{z}^{(0)} - \mathbf{P}\mathbf{z}^{(0)}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{z}^{(0)}\|_2} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

gilt, dass also der Winkel zwischen den Iterierten und dem Aufspann der ersten k Eigenvektoren gegen null konvergiert.

Beweis. Sei $\mathbf{I}_k \in \mathbb{K}^{k \times k}$ die Identität auf \mathbb{K}^k , und sei

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_k & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \in \mathbb{K}^{n \times n}$$

ihre Fortsetzung durch null. Dann gilt

$$\mathbf{P}\mathbf{z}^{(m)} = \begin{pmatrix} \lambda_1^m z_1^{(0)} \\ \dots \\ \lambda_k^m z_k^{(0)} \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}^{(m)} - \mathbf{P}\mathbf{z}^{(m)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 0 \\ \lambda_{k+1}^m z_{k+1}^{(0)} \\ \dots \\ \lambda_n^m z_n^{(0)} \end{pmatrix} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.$$

Für die Normen erhalten wir

$$\begin{aligned} \|\mathbf{z}^{(m)} - \mathbf{P}\mathbf{z}^{(m)}\|_2^2 &= \sum_{i=k+1}^n |\lambda_i^m z_i^{(0)}|^2 \leq |\lambda_{k+1}|^{2m} \sum_{i=k+1}^n |z_i^{(0)}|^2 \leq |\lambda_{k+1}|^{2m} \|\mathbf{z}^{(0)} - \mathbf{P}\mathbf{z}^{(0)}\|_2^2, \\ \|\mathbf{P}\mathbf{z}^{(m)}\|_2^2 &= \sum_{i=1}^k |\lambda_i^m z_i^{(0)}|^2 \geq |\lambda_k|^{2m} \sum_{i=1}^k |z_i^{(0)}|^2 = |\lambda_k|^{2m} \|\mathbf{P}\mathbf{z}^{(0)}\|_2^2, \end{aligned}$$

also folgt

$$\frac{\|\mathbf{z}^{(m)} - \mathbf{P}\mathbf{z}^{(m)}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{z}^{(m)}\|_2} \leq \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|} \right)^m \frac{\|\mathbf{z}^{(0)} - \mathbf{P}\mathbf{z}^{(0)}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{z}^{(0)}\|_2} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0,$$

und das ist die zu zeigende Abschätzung. ■

Falls nicht zufällig $\lambda_1 = \dots = \lambda_k$ gilt, erhalten wir also in diesem Fall *keine* Konvergenz gegen einen Eigenraum, sondern lediglich gegen einen invarianten Unterraum.

Unser Ziel ist es nun, wenigstens diesen Unterraum vollständig zu beschreiben, indem wir eine Basis konstruieren. Die Idee ist einfach: Wenn die Vektoriteration zu *einem* Startvektor gegen *einen* Vektor aus dem Unterraum konvergiert, dann wird die Vektoriteration zu *k* Startvektoren gegen *k* Vektoren aus dem Unterraum konvergieren, und falls wir sicherstellen können, dass diese Vektoren linear unabhängig sind, erhalten wir eine Basis.

Zur Abkürzung der Notation fassen wir die Vektoren in einer Matrix zusammen: Die *k* Spalten einer Matrix $\mathbf{Z}^{(m)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ interpretieren wir als die Iterierten von *k* simultan ausgeführten Vektoriterationen mit den *k* Spalten der Matrix $\mathbf{Z}^{(0)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ als Startvektoren. Die Iterierten sind dann durch

$$\mathbf{Z}^{(m)} := \mathbf{D}^m \mathbf{Z}^{(0)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}$$

definiert. Es stellt sich die Frage, unter welchen Bedingungen wir darauf hoffen dürfen, dass die Spalten von $\mathbf{Z}^{(m)}$ linear unabhängig sind. Offenbar müssen dafür zumindest die

5 Die Vektoriteration

Spalten von $\mathbf{Z}^{(0)}$ linear unabhängig sein, die Matrix muss also vollen Rang besitzen. Das reicht allerdings noch nicht: Falls eine Linearkombination der Spalten im Kern von \mathbf{D}^m liegen sollte, würde $\mathbf{Z}^{(m)}$ trotzdem keinen vollen Rang besitzen.

Dieser Fall lässt sich einfach ausschließen, indem wir die in Lemma 5.34 eingeführte Projektion \mathbf{P} auf den Unterraum verwenden: Statt zu fordern, dass $\mathbf{Z}^{(0)}$ vollen Rang hat, fordern wir, dass $\mathbf{PZ}^{(0)}$ vollen Rang hat. Diese Voraussetzung ist ausreichend:

Lemma 5.35 (Basis) *Seien $\mathbf{D}, \mathbf{P}, \lambda_1, \dots, \lambda_n$ wie in Lemma 5.34 gegeben. Sei $\mathbf{Z}^{(0)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ so gegeben, dass $\mathbf{PZ}^{(0)}$ vollen Rang hat.*

Dann haben auch die durch

$$\mathbf{Z}^{(m)} := \mathbf{D}^m \mathbf{Z}^{(0)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}$$

definierten Matrizen vollen Rang.

Beweis. Sei $m \in \mathbb{N}_0$. Wir beweisen die Behauptung, indem wir nachweisen, dass auch $\mathbf{PZ}^{(m)}$ vollen Rang hat. Dazu führen wir

$$\widehat{\mathbf{D}} := \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_k \end{pmatrix}, \quad \widehat{\mathbf{Z}}^{(m)} := \begin{pmatrix} z_{11}^{(m)} & \cdots & z_{1k}^{(m)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ z_{k1}^{(m)} & \cdots & z_{kk}^{(m)} \end{pmatrix}$$

ein und können $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$ sowie $\mathbf{PD} = \mathbf{DP}$ ausnutzen, um

$$\mathbf{PZ}^{(m)} = \mathbf{PD}^m \mathbf{Z}^{(0)} = \mathbf{P}^2 \mathbf{D}^m \mathbf{Z}^{(0)} = \mathbf{PD}^m \mathbf{PZ}^{(0)} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{D}}^m & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{Z}}^{(0)} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{D}}^m \widehat{\mathbf{Z}}^{(0)} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

zu erhalten. Nach Voraussetzung hat $\mathbf{PZ}^{(0)}$ vollen Rang, also muss $\widehat{\mathbf{Z}}^{(0)}$ regulär sein. Aus (5.11) folgt, dass $\widehat{\mathbf{D}}$ regulär ist, also muss auch $\widehat{\mathbf{D}}^m$ regulär sein, und somit auch $\widehat{\mathbf{D}}^m \widehat{\mathbf{Z}}^{(0)}$. Damit ist bewiesen, dass $\mathbf{PZ}^{(m)}$ vollen Rang hat, und da \mathbf{P} eine quadratische Matrix ist, muss auch $\mathbf{Z}^{(m)}$ vollen Rang haben. ■

Indem wir Lemma 5.34 und Lemma 5.35 kombinieren, können wir folgern, dass die Matrizen $\mathbf{Z}^{(m)}$ gegen Basen des für uns interessanten invarianten Unterraums konvergieren werden.

Dieses Konvergenzverhalten können wir auch quantifizieren: Nach Lemma 3.25 bilden die Spalten einer Matrix $\mathbf{V} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ genau dann eine Basis eines invarianten Unterraums, wenn es eine Matrix $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{K}^{k \times k}$ gibt, mit der $\mathbf{DV} = \mathbf{V}\mathbf{\Lambda}$ gilt. Wenn $\mathbf{Z}^{(m)}$ „fast“ eine solche Basis ist, sollte eine Eigenschaft der Form

$$\|\mathbf{DZ}^{(m)} - \mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{\Lambda}\|_2 \leq \epsilon$$

für ein geeignetes $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$ gelten. Wenn wir die Skalierung der Matrix $\mathbf{Z}^{(m)}$ geeignet berücksichtigen, erhalten wir das folgende Resultat:

Lemma 5.36 (Konvergenz gegen Teilraum) Seien $\mathbf{D}, \mathbf{P}, \lambda_1, \dots, \lambda_n$ wie in Lemma 5.34 gegeben. Sei $\mathbf{Z}^{(0)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ so gegeben, dass $\mathbf{PZ}^{(0)}$ vollen Rang hat.

Dann gibt es eine Matrix $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{K}^{k \times k}$ so, dass für alle $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^k \setminus \{\mathbf{0}\}$ und alle $m \in \mathbb{N}$ die Abschätzungen

$$\begin{aligned} \frac{\|(\mathbf{DZ}^{(m)} - \mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{PZ}^{(m)}\mathbf{y}\|_2} &\leq \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|}\right)^m \frac{\|(\mathbf{DZ}^{(0)} - \mathbf{Z}^{(0)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{PZ}^{(0)}\mathbf{y}\|_2}, \\ \frac{\|(\mathbf{DZ}^{(m)} - \mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{y}\|_2} &\leq \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|}\right)^m \frac{\|(\mathbf{DZ}^{(0)} - \mathbf{Z}^{(0)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{PZ}^{(0)}\mathbf{y}\|_2} \end{aligned}$$

erfüllt sind.

Beweis. Wir definieren Hilfsmatrizen

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{Z}} &:= \begin{pmatrix} z_{11}^{(0)} & \cdots & z_{1k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ z_{k1}^{(0)} & \cdots & z_{kk}^{(0)} \end{pmatrix}, & \widehat{\mathbf{Y}} &:= \begin{pmatrix} z_{k+1,1}^{(0)} & \cdots & z_{k+1,k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ z_{n,1}^{(0)} & \cdots & z_{n,k}^{(0)} \end{pmatrix}, \\ \widehat{\mathbf{D}} &:= \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_k \end{pmatrix}, & \widehat{\mathbf{C}} &:= \begin{pmatrix} \lambda_{k+1} & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und erhalten

$$\mathbf{Z}^{(0)} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{Z}} \\ \widehat{\mathbf{Y}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{PZ}^{(0)} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{Z}} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{D}} & \\ & \widehat{\mathbf{C}} \end{pmatrix}.$$

Nach Voraussetzung hat $\mathbf{PZ}^{(0)}$ vollen Rang, also muss $\widehat{\mathbf{Z}} \in \mathbb{K}^{k \times k}$ regulär sein. Wir definieren

$$\mathbf{\Lambda} := \widehat{\mathbf{Z}}^{-1}\widehat{\mathbf{D}}\widehat{\mathbf{Z}}$$

und erhalten

$$\widehat{\mathbf{Z}}\mathbf{\Lambda} = \widehat{\mathbf{Z}}\widehat{\mathbf{Z}}^{-1}\widehat{\mathbf{D}}\widehat{\mathbf{Z}} = \widehat{\mathbf{D}}\widehat{\mathbf{Z}}.$$

Nun können wir die Terme unserer Abschätzung untersuchen. Sei $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^k \setminus \{\mathbf{0}\}$ und $m \in \mathbb{N}$. Es gilt

$$\begin{aligned} \|(\mathbf{DZ}^{(m)} - \mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2 &= \|\mathbf{D}^{m+1}\mathbf{Z}^{(0)}\mathbf{y} - \mathbf{D}^m\mathbf{Z}^{(0)}\mathbf{\Lambda}\mathbf{y}\|_2 \\ &= \left\| \begin{pmatrix} (\widehat{\mathbf{D}}^{m+1}\widehat{\mathbf{Z}} - \widehat{\mathbf{D}}^m\widehat{\mathbf{Z}}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y} \\ (\widehat{\mathbf{C}}^{m+1}\widehat{\mathbf{Y}} - \widehat{\mathbf{C}}^m\widehat{\mathbf{Y}}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y} \end{pmatrix} \right\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} (\widehat{\mathbf{D}}^{m+1}\widehat{\mathbf{Z}} - \widehat{\mathbf{D}}^{m+1}\widehat{\mathbf{Z}})\mathbf{y} \\ (\widehat{\mathbf{C}}^{m+1}\widehat{\mathbf{Y}} - \widehat{\mathbf{C}}^m\widehat{\mathbf{Y}}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y} \end{pmatrix} \right\|_2 \\ &= \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \widehat{\mathbf{C}}^m(\widehat{\mathbf{C}}\widehat{\mathbf{Y}} - \widehat{\mathbf{Y}}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y} \end{pmatrix} \right\|_2 \leq |\lambda_{k+1}|^m \|(\widehat{\mathbf{C}}\widehat{\mathbf{Y}} - \widehat{\mathbf{Y}}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2 \\ &\leq |\lambda_{k+1}|^m \left\| \begin{pmatrix} (\widehat{\mathbf{D}}\widehat{\mathbf{Z}} - \widehat{\mathbf{Z}}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y} \\ (\widehat{\mathbf{C}}\widehat{\mathbf{Y}} - \widehat{\mathbf{Y}}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y} \end{pmatrix} \right\|_2 = |\lambda_{k+1}|^m \|(\mathbf{DZ}^{(0)} - \mathbf{Z}^{(0)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2, \end{aligned}$$

5 Die Vektoriteration

und wir erhalten außerdem

$$\begin{aligned}\|\mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{y}\|_2 &= \left\| \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{D}}^m \widehat{\mathbf{Z}}\mathbf{y} \\ \widehat{\mathbf{C}}^m \widehat{\mathbf{Y}}\mathbf{y} \end{pmatrix} \right\|_2 \geq \left\| \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{D}}^m \widehat{\mathbf{Z}}\mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right\|_2 = \|\mathbf{P}\mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{y}\|_2, \\ \|\mathbf{P}\mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{y}\|_2 &= \left\| \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{D}}^m \widehat{\mathbf{Z}}\mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right\|_2 \geq |\lambda_k|^m \left\| \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{Z}}\mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right\|_2 = |\lambda_k|^m \|\mathbf{P}\mathbf{Z}^{(0)}\mathbf{y}\|_2.\end{aligned}$$

Einsetzen dieser Ungleichungen in den zu untersuchenden Bruch führt zu der gewünschten Abschätzung. \blacksquare

Wie üblich können wir diese Konvergenzaussage auf den Fall diagonalisierbarer Matrizen übertragen, indem wir davon ausgehen, dass

$$\mathbf{T}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{T} = \mathbf{D} \quad (5.12)$$

für eine reguläre Matrix $\mathbf{T} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ gilt. An die Stelle der Einheitsvektoren treten dann die Vektoren

$$\mathbf{x}^{(k)} := \mathbf{T}\mathbf{e}^{(k)} \quad \text{für alle } k \in \{1, \dots, n\},$$

also die Spalten der Transformation \mathbf{T} . Hierbei bezeichnet $\mathbf{e}^{(k)}$ den k -ten kanonischen Einheitsvektor, also den Vektor, der in der k -ten Komponente gleich eins und in allen anderen Komponenten gleich null ist.

Satz 5.37 (Konvergenz) *Es gelte (5.12) mit $\mathbf{D} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ und*

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_k| > |\lambda_{k+1}| \geq \dots \geq |\lambda_n|$$

für ein $k \in \{1, \dots, n-1\}$. Dann existiert eine Projektion $\mathbf{P} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit $\text{Bild}(\mathbf{P}) = \text{span}\{\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(k)}\}$ derart, dass für alle $\mathbf{Z}^{(0)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ mit $\text{rank}(\mathbf{P}\mathbf{Z}^{(0)}) = k$ die Iterierten

$$\mathbf{Z}^{(m)} := \mathbf{A}^m \mathbf{Z}^{(0)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

ebenfalls vollen Rang haben. Außerdem existiert ein $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{K}^{k \times k}$ derart, dass die Abschätzungen

$$\frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Z}^{(m)} - \mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{y}\|_2} \leq \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2^2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2^2 \frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Z}^{(0)} - \mathbf{Z}^{(0)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{Z}^{(0)}\mathbf{y}\|_2}, \quad (5.13a)$$

$$\frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Z}^{(m)} - \mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{y}\|_2} \leq \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2^2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2^2 \frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Z}^{(0)} - \mathbf{Z}^{(0)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{Z}^{(0)}\mathbf{y}\|_2} \quad (5.13b)$$

für alle $m \in \mathbb{N}$ und alle $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^k \setminus \{\mathbf{0}\}$ gelten.

Beweis. Sei $\widehat{\mathbf{P}} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ die Projektion aus Lemma 5.34. Durch Rücktransformation erhalten wir eine Projektion

$$\mathbf{P} := \mathbf{T}\widehat{\mathbf{P}}\mathbf{T}^{-1}.$$

Sei $\mathbf{Z}^{(0)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ eine Matrix mit

$$\text{rank}(\mathbf{PZ}^{(0)}) = k.$$

Wie schon im Beweis von Satz 5.3 definieren wir durch

$$\widehat{\mathbf{Z}}^{(m)} := \mathbf{T}^{-1}\mathbf{Z}^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

die transformierte Folge der Iterierten, für die wegen

$$\widehat{\mathbf{P}}\widehat{\mathbf{Z}}^{(0)} = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{P}\mathbf{T}\widehat{\mathbf{Z}}^{(0)} = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{PZ}^{(0)}$$

und der Gleichung

$$\widehat{\mathbf{Z}}^{(m)} = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{Z}^{(m)} = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{A}^m\mathbf{Z}^{(0)} = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{A}^m\mathbf{T}\widehat{\mathbf{Z}}^{(0)} = \mathbf{D}^m\widehat{\mathbf{Z}}^{(0)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

die Voraussetzungen von Lemma 5.36 erfüllt sind. Also existiert ein $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{K}^{k \times k}$ derart, dass die Abschätzungen

$$\begin{aligned} \frac{\|(\mathbf{D}\widehat{\mathbf{Z}}^{(m)} - \widehat{\mathbf{Z}}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2}{\|\widehat{\mathbf{P}}\widehat{\mathbf{Z}}^{(m)}\mathbf{y}\|_2} &\leq \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|}\right)^m \frac{\|(\mathbf{D}\widehat{\mathbf{Z}}^{(0)} - \widehat{\mathbf{Z}}^{(0)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2}{\|\widehat{\mathbf{P}}\widehat{\mathbf{Z}}^{(0)}\mathbf{y}\|_2}, \\ \frac{\|(\mathbf{D}\widehat{\mathbf{Z}}^{(m)} - \widehat{\mathbf{Z}}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2}{\|\widehat{\mathbf{Z}}^{(m)}\mathbf{y}\|_2} &\leq \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|}\right)^m \frac{\|(\mathbf{D}\widehat{\mathbf{Z}}^{(0)} - \widehat{\mathbf{Z}}^{(0)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2}{\|\widehat{\mathbf{P}}\widehat{\mathbf{Z}}^{(0)}\mathbf{y}\|_2} \end{aligned}$$

für alle $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^k \setminus \{\mathbf{0}\}$ und alle $m \in \mathbb{N}$ gelten. Für den Abschluss des Beweises verwenden wir wieder die Submultiplikativität der Spektralnorm: Es gilt

$$\begin{aligned} \|(\mathbf{D}\widehat{\mathbf{Z}}^{(m)} - \widehat{\mathbf{Z}}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2 &= \|(\mathbf{T}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{T}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{Z}^{(m)} - \mathbf{T}^{-1}\mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2 \\ &= \|\mathbf{T}^{-1}(\mathbf{AZ}^{(m)} - \mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2 \\ &\leq \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \|(\mathbf{AZ}^{(m)} - \mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2, \\ \|(\mathbf{D}\widehat{\mathbf{Z}}^{(m)} - \widehat{\mathbf{Z}}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2 &= \|\mathbf{T}\|_2^{-1} \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}(\mathbf{AZ}^{(m)} - \mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2 \\ &\geq \|\mathbf{T}\|_2^{-1} \|\mathbf{T}\mathbf{T}^{-1}(\mathbf{AZ}^{(m)} - \mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2 \\ &= \|\mathbf{T}\|_2^{-1} \|(\mathbf{AZ}^{(m)} - \mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{\Lambda})\mathbf{y}\|_2, \\ \|\widehat{\mathbf{P}}\widehat{\mathbf{Z}}^{(m)}\mathbf{y}\|_2 &= \|\mathbf{T}^{-1}\mathbf{P}\mathbf{T}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{y}\|_2 \leq \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \|\mathbf{PZ}^{(m)}\mathbf{y}\|_2, \\ \|\widehat{\mathbf{P}}\widehat{\mathbf{Z}}^{(m)}\mathbf{y}\|_2 &= \|\mathbf{T}\|_2^{-1} \|\mathbf{T}\|_2 \|\mathbf{T}^{-1}\mathbf{PZ}^{(m)}\mathbf{y}\|_2 \geq \|\mathbf{T}\|_2^{-1} \|\mathbf{PZ}^{(m)}\mathbf{y}\|_2, \\ \|\widehat{\mathbf{Z}}^{(m)}\mathbf{y}\|_2 &= \|\mathbf{T}^{-1}\mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{y}\|_2 \leq \|\mathbf{T}^{-1}\|_2 \|\mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{y}\|_2, \end{aligned}$$

und durch Einsetzen in die Abschätzungen aus Lemma 5.36 folgt die Behauptung. \blacksquare

Wie schon im Falle der konventionellen Vektoriteration kann auch bei dieser Iteration das Problem auftreten, dass es durch die wiederholte Multiplikation mit \mathbf{A} zu Über- oder Unterläufen kommt. Sehr viel schlimmer ist allerdings, dass in der Regel alle Spalten der

5 Die Vektoriteration

Matrizen $\mathbf{Z}^{(m)}$ gegen Vielfache des Eigenvektors eines dominanten Eigenwerts konvergieren werden, so dass sie zwar theoretisch linear unabhängig bleiben, in der numerischen Praxis aber fast linear abhängig werden können.

Beide Probleme lassen sich wieder durch eine geschickte Normierung beheben: Da wir nur an dem invarianten Unterraum, also dem Bild von $\mathbf{Z}^{(m)}$, interessiert sind, können wir die Matrix fast beliebig skalieren und Linearkombinationen ihrer Spalten bilden, ohne diesen Unterraum zu verändern. Insbesondere können wir mit Hilfe der Gram-Schmidt-Orthonormalisierung dafür sorgen, dass die von den Spalten beschriebene Basis orthonormal ist, und damit insbesondere aus linear unabhängigen Einheitsvektoren besteht.

Da die Gram-Schmidt-Orthonormalisierung numerisch instabil sein kann, verwenden wir stattdessen allerdings die übliche QR-Zerlegung: Zu jeder Matrix $\mathbf{Z}^{(m)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ existieren eine unitäre Matrix $\widehat{\mathbf{Q}}^{(m)} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und eine obere Dreiecksmatrix $\widehat{\mathbf{R}}^{(m)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ so, dass

$$\mathbf{Z}^{(m)} = \widehat{\mathbf{Q}}^{(m)} \widehat{\mathbf{R}}^{(m)}$$

gilt. Wenn wir die ersten k Zeilen von $\widehat{\mathbf{R}}^{(m)}$ mit $\mathbf{R}^{(m)}$ sowie die ersten k Spalten von $\widehat{\mathbf{Q}}^{(m)}$ mit $\mathbf{Q}^{(m)}$ sowie die restlichen Spalten mit $\widetilde{\mathbf{Q}}^{(m)}$ bezeichnen, erhalten wir

$$\mathbf{Z}^{(m)} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}^{(m)} & \widetilde{\mathbf{Q}}^{(m)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{R}^{(m)} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{R}^{(m)},$$

da $\widehat{\mathbf{R}}^{(m)}$ eine obere Dreiecksmatrix ist. Wir können also zu jedem $\mathbf{Z}^{(m)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ eine orthogonale Matrix $\mathbf{Q}^{(m)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ und eine obere Dreiecksmatrix $\mathbf{R}^{(m)} \in \mathbb{K}^{k \times k}$ mit

$$\mathbf{Z}^{(m)} = \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{R}^{(m)} \tag{5.14}$$

konstruieren. Die Spalten von $\mathbf{Q}^{(m)}$ beschreiben dann die gesuchte Orthonormalbasis. Für derartige Matrizen vereinfacht sich die Aussage von Satz 5.37 wesentlich:

Folgerung 5.38 (Orthogonale Iteration) *Unter den Voraussetzungen von Satz 5.37 und mit (5.14) finden wir eine Familie $(\widetilde{\mathbf{\Lambda}}^{(m)})_{m=0}^{\infty}$ in $\mathbb{K}^{k \times k}$ so, dass*

$$\|\mathbf{A}\mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)}\widetilde{\mathbf{\Lambda}}^{(m)}\|_2 \leq \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|} \right)^m \|\mathbf{T}\|_2^2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2^2 \sup \left\{ \frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Q}^{(0)} - \mathbf{Q}^{(0)}\widetilde{\mathbf{\Lambda}}^{(0)})\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{Q}^{(0)}\mathbf{y}\|_2} : \mathbf{y} \in \mathbb{K}^k \setminus \{\mathbf{0}\} \right\}. \tag{5.15}$$

für alle $m \in \mathbb{N}_0$ gilt.

Beweis. Sei $\mathbf{Z}^{(0)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ mit $\text{rank}(\mathbf{P}\mathbf{Z}^{(0)}) = k$ gegeben. Da $\mathbf{Z}^{(m)}$ nach Satz 5.37 für alle $m \in \mathbb{N}_0$ vollen Rang hat, müssen nach (5.14) auch die Matrizen $\mathbf{R}^{(m)}$ vollen Rang haben, also regulär sein. Damit ist

$$\widetilde{\mathbf{\Lambda}}^{(m)} := \mathbf{R}^{(m)} \mathbf{\Lambda} (\mathbf{R}^{(m)})^{-1} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

mit der Matrix \mathbf{A} aus demselben Satz wohldefiniert.

Seien nun $m \in \mathbb{N}$ und ein Vektor $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^k \setminus \{\mathbf{0}\}$ fixiert. Wir definieren

$$\tilde{\mathbf{y}} := (\mathbf{R}^{(m)})^{-1}\mathbf{y}, \quad \mathbf{z} := \mathbf{R}^{(0)}\tilde{\mathbf{y}},$$

und erhalten mit (5.13b) und (5.14) die Abschätzung

$$\begin{aligned} \frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)}\tilde{\mathbf{A}}^{(m)})\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{Q}^{(m)}\mathbf{y}\|_2} &= \frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Q}^{(m)}\mathbf{R}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)}\mathbf{R}^{(m)}\mathbf{A})(\mathbf{R}^{(m)})^{-1}\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{Q}^{(m)}\mathbf{R}^{(m)}(\mathbf{R}^{(m)})^{-1}\mathbf{y}\|_2} \\ &= \frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Z}^{(m)} - \mathbf{Z}^{(m)}\mathbf{A})\tilde{\mathbf{y}}\|_2}{\|\mathbf{Z}^{(m)}\tilde{\mathbf{y}}\|_2} \\ &\leq \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|}\right)^m \|\mathbf{T}\|_2^2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2^2 \frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Z}^{(0)} - \mathbf{Z}^{(0)}\mathbf{A})\tilde{\mathbf{y}}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{Z}^{(0)}\tilde{\mathbf{y}}\|_2} \\ &= \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|}\right)^m \|\mathbf{T}\|_2^2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2^2 \\ &\quad \frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Z}^{(0)}(\mathbf{R}^{(0)})^{-1} - \mathbf{Z}^{(0)}(\mathbf{R}^{(0)})^{-1}\tilde{\mathbf{A}}^{(0)})\mathbf{z}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{Z}^{(0)}(\mathbf{R}^{(0)})^{-1}\mathbf{z}\|_2} \\ &= \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|}\right)^m \|\mathbf{T}\|_2^2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2^2 \frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Q}^{(0)} - \mathbf{Q}^{(0)}\tilde{\mathbf{A}}^{(0)})\mathbf{z}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{Q}^{(0)}\mathbf{z}\|_2}. \end{aligned}$$

Da $\mathbf{Q}^{(m)}$ orthogonal ist, gilt insbesondere $\|\mathbf{Q}^{(m)}\mathbf{y}\|_2 = \|\mathbf{y}\|_2$, so dass aus unserer Abschätzung bereits

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A}\mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)}\tilde{\mathbf{A}}^{(m)}\|_2 &= \sup \left\{ \frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)}\tilde{\mathbf{A}}^{(m)})\mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{y}\|_2} : \mathbf{y} \in \mathbb{K}^k \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \\ &\leq \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|}\right)^m \|\mathbf{T}\|_2^2 \|\mathbf{T}^{-1}\|_2^2 \\ &\quad \sup \left\{ \frac{\|(\mathbf{A}\mathbf{Q}^{(0)} - \mathbf{Q}^{(0)}\tilde{\mathbf{A}}^{(0)})\mathbf{z}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{Q}^{(0)}\mathbf{z}\|_2} : \mathbf{z} \in \mathbb{K}^k \setminus \{\mathbf{z}\} \right\} \end{aligned}$$

folgt und der Beweis vollständig ist. \blacksquare

Für die Praxis ist es nicht sinnvoll, die Matrizen $\mathbf{Z}^{(m)}$ zu berechnen, da sie aus den erwähnten Gründen zunehmend schlecht konditioniert sein werden. Stattdessen wollen wir möglichst direkt mit den orthogonalen Matrizen $\mathbf{Q}^{(m)}$ arbeiten, bei denen diese Gefahr nicht besteht.

Wir verwenden (5.14), um

$$\mathbf{Z}^{(m+1)} = \mathbf{A}^{m+1}\mathbf{Z}^{(0)} = \mathbf{A}\mathbf{A}^m\mathbf{Z}^{(0)} = \mathbf{A}\mathbf{Z}^{(m)} = \mathbf{A}\mathbf{Q}^{(m)}\mathbf{R}^{(m)} \quad (5.16)$$

zu erhalten. Nun berechnen wir die infolge der Orthogonalität von $\mathbf{Q}^{(m)}$ hoffentlich gut konditionierte Matrix

$$\mathbf{W}^{(m+1)} := \mathbf{A}\mathbf{Q}^{(m)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$$

5 Die Vektoriteration

und bestimmen ihre QR-Faktorisierung

$$\mathbf{W}^{(m+1)} = \mathbf{Q}^{(m+1)} \tilde{\mathbf{R}}^{(m+1)}$$

mit einer geeigneten orthogonalen Matrix $\mathbf{Q}^{(m+1)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ sowie einer oberen Dreiecksmatrix $\tilde{\mathbf{R}}^{(m+1)} \in \mathbb{K}^{k \times k}$. Wir setzen diese Zerlegung in die Gleichung (5.16) ein, um

$$\mathbf{Z}^{(m+1)} = \mathbf{W}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m)} = \mathbf{Q}^{(m+1)} \tilde{\mathbf{R}}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m)}$$

zu erhalten, und da $\tilde{\mathbf{R}}^{(m+1)}$ und $\mathbf{R}^{(m)}$ obere Dreiecksmatrizen sind, muss auch

$$\mathbf{R}^{(m+1)} := \tilde{\mathbf{R}}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m)}$$

eine obere Dreiecksmatrix sein. Wir können also eine Zerlegung der gewünschten Form (5.14) berechnen, indem wir die Matrix \mathbf{A} mit der *orthogonalen* — und deshalb gut konditionierten — Matrix $\mathbf{Q}^{(m)}$ multiplizieren und eine QR-Zerlegung des Ergebnisses berechnen.

Die resultierende Verallgemeinerung der Vektoriteration bezeichnet man als *orthogonale Iteration*:

Algorithmus 5.39 (Orthogonale Iteration) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und $\mathbf{Z}^{(0)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ so gegeben, dass die Voraussetzungen von Satz 5.37 erfüllt sind. Dann berechnet der folgende Algorithmus die Folge $(\mathbf{Q}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}}$ aus (5.14). Die Spalten dieser Matrizen konvergieren gegen eine orthonormale Basis des invarianten Unterraums $\text{span}\{\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(k)}\}$.

```

m ← 0
Berechne die Zerlegung  $\mathbf{Q}^{(0)} \mathbf{R}^{(0)} = \mathbf{Z}^{(0)}$ 
while „Fehler zu groß“ do begin
  Berechne  $\mathbf{W}^{(m+1)} \leftarrow \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)}$ 
  Berechne die QR-Zerlegung  $\mathbf{Q}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m+1)} = \mathbf{W}^{(m+1)}$ 
  m ← m + 1
end

```

Selbstverständlich müssen wir uns auch bei der orthogonalen Iteration Gedanken über ein geeignetes Abbruchkriterium machen. Wenn wir die Matrix $\tilde{\mathbf{\Lambda}}^{(m)}$ aus Folgerung 5.38 zur Verfügung hätten, könnten wir relativ einfach nachprüfen, ob

$$\|\mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)} \tilde{\mathbf{\Lambda}}^{(m)}\|_2$$

hinreichend klein ist, um eine gute Approximation des invarianten Unterraums sicherzustellen. Leider bietet uns die Folgerung nur eine Existenzaussage, so dass wir auf eine Approximation von $\mathbf{\Lambda}^{(m)}$ zurückgreifen müssen: Wenn $\mathbf{Q}^{(m)}$ eine exakte Basis eines invarianten Unterraums wäre, würde

$$\mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)} \tilde{\mathbf{\Lambda}}^{(m)} = \mathbf{0}$$

gelten. Indem wir diese Gleichung mit $(\mathbf{Q}^{(m)})^*$ multiplizieren und ausnutzen, dass $\mathbf{Q}^{(m)}$ orthogonal ist, würden wir dann

$$(\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \tilde{\mathbf{\Lambda}}^{(m)} = \mathbf{0}$$

erhalten. Also dürfen wir hoffen, dass

$$\mathbf{\Lambda}^{(m)} := (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} \quad (5.17)$$

eine gute Approximation von $\tilde{\mathbf{\Lambda}}^{(m)}$ sein wird. In der Tat ist $\mathbf{\Lambda}^{(m)}$ sogar eine bessere Wahl als $\tilde{\mathbf{\Lambda}}^{(m)}$:

Lemma 5.40 *Es gilt*

$$\|(\mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{\Lambda}) \mathbf{y}\|_2^2 = \|(\mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{\Lambda}^{(m)}) \mathbf{y}\|_2^2 + \|(\mathbf{\Lambda}^{(m)} - \mathbf{\Lambda}) \mathbf{y}\|_2^2$$

für alle $m \in \mathbb{N}$ und $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^k$ und beliebige Matrizen $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{K}^{k \times k}$.

Insbesondere minimiert die Wahl $\mathbf{\Lambda} = \mathbf{\Lambda}^{(m)}$ die rechte Seite der Gleichung.

Beweis. Seien $m \in \mathbb{N}$, $\mathbf{y} \in \mathbb{K}^k$ und $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{K}^{k \times k}$ gegeben. Dann folgt

$$\begin{aligned} \|(\mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{\Lambda}) \mathbf{y}\|_2^2 &= \|(\mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{\Lambda}^{(m)}) \mathbf{y} + \mathbf{Q}^{(m)} (\mathbf{\Lambda}^{(m)} - \mathbf{\Lambda}) \mathbf{y}\|_2^2 \\ &= \|(\mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{\Lambda}^{(m)}) \mathbf{y}\|_2^2 + \|\mathbf{Q}^{(m)} (\mathbf{\Lambda}^{(m)} - \mathbf{\Lambda}) \mathbf{y}\|_2^2 \\ &\quad + 2 \operatorname{Re} \langle (\mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{\Lambda}^{(m)}) \mathbf{y}, \mathbf{Q}^{(m)} (\mathbf{\Lambda}^{(m)} - \mathbf{\Lambda}) \mathbf{y} \rangle_2^2 \\ &= \|(\mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{\Lambda}^{(m)}) \mathbf{y}\|_2^2 + \|\mathbf{Q}^{(m)} (\mathbf{\Lambda}^{(m)} - \mathbf{\Lambda}) \mathbf{y}\|_2^2 \\ &\quad + 2 \operatorname{Re} \langle (\mathbf{Q}^{(m)})^* (\mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{\Lambda}^{(m)}) \mathbf{y}, (\mathbf{\Lambda}^{(m)} - \mathbf{\Lambda}) \mathbf{y} \rangle_2^2 \\ &= \|(\mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{\Lambda}^{(m)}) \mathbf{y}\|_2^2 + \|\mathbf{Q}^{(m)} (\mathbf{\Lambda}^{(m)} - \mathbf{\Lambda}) \mathbf{y}\|_2^2 \\ &\quad + 2 \operatorname{Re} \langle \mathbf{\Lambda}^{(m)} - \mathbf{\Lambda}, (\mathbf{\Lambda}^{(m)} - \mathbf{\Lambda}) \mathbf{y} \mathbf{y}^* \rangle_2^2 \\ &= \|(\mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} - \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{\Lambda}^{(m)}) \mathbf{y}\|_2^2 + \|(\mathbf{\Lambda}^{(m)} - \mathbf{\Lambda}) \mathbf{y}\|_2^2, \end{aligned}$$

und das ist die gewünschte Darstellung des Fehlers. ■

Die Fehlerabschätzung aus Folgerung 5.38 gilt also auch, wenn wir auf der linken Seite $\tilde{\mathbf{\Lambda}}^{(m)}$ durch $\mathbf{\Lambda}^{(m)}$ ersetzen, und letztere Matrix können wir mit (5.17) beziehungsweise etwas effizienter mit

$$\mathbf{\Lambda}^{(m)} = (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{W}^{(m+1)}$$

konkret berechnen, um den Approximationsfehler zu bestimmen.

Bemerkung 5.41 (Orthogonale inverse Iteration) *Selbstverständlich können wir auch die inverse Iteration mit und ohne Shift in ähnlicher Weise modifizieren, um Näherungen invarianter Unterräume zu berechnen. Es können sogar unterschiedliche Shift-Parameter für die einzelnen Spalten von $\mathbf{Q}^{(m)}$ verwendet werden, um gezielt die Konvergenz zu beschleunigen.*

6 Die QR-Iteration

Wir wenden uns zunächst wieder der Frage zu, wie sich *alle* Eigenvektoren einer gegebenen Matrix bestimmen lassen. Für selbstadjungierte Matrizen haben wir mit der Jacobi-Iteration bereits ein erstes Verfahren zur Lösung dieser Aufgabe kennengelernt, allerdings zeigt sich, dass diese Iteration den Nachteil hat, dass bei bereits „fast“ diagonalen Matrizen, etwa Tridiagonalmatrizen, diese Struktur wieder zunichte gemacht wird.

In diesem Kapitel entwickeln wir einen alternativen Algorithmus, der diesen Nachteil nicht aufweist. Obwohl wir ihn nur für den Fall reeller symmetrischer Matrizen diskutieren, lässt er sich auch zur Bestimmung der Schur-Zerlegung komplexwertiger Matrizen einsetzen.

6.1 Grundidee

Am Beispiel der orthogonalen Iteration haben wir gesehen, dass sich mehrere Eigenvektoren simultan berechnen lassen. Also liegt es nahe, die Iteration so zu erweitern, dass *alle* Eigenvektoren berechnet werden, indem man sie mit einer vollständigen Basis startet, also beispielsweise mit $\mathbf{Q}^{(0)} = \mathbf{I}$ und $k = n$.

Wir erhalten damit das folgende Verfahren:

```

 $\mathbf{Q}^{(0)} \leftarrow \mathbf{I}$ 
 $m \leftarrow 0$ 
repeat
   $\mathbf{W}^{(m+1)} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{Q}^{(m)}$ 
  Berechne die QR-Zerlegung  $\mathbf{Q}^{(m+1)}\mathbf{R}^{(m+1)} = \mathbf{W}^{(m+1)}$ 
   $m \leftarrow m + 1$ 
until „genau genug“

```

Bisher haben wir bei der Untersuchung der orthogonalen Iteration nicht ausgenutzt, dass die Matrizen $\mathbf{R}^{(m)}$ obere Dreiecksmatrizen sind. Diese Eigenschaft hat nützliche Konsequenzen, denen wir uns jetzt widmen werden.

Wir wählen ein $k \in \{1, \dots, n-1\}$ und zerlegen die im Rahmen der orthogonalen Iteration auftretenden Matrizen in der Form

$$\mathbf{Q}^{(m)} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_k^{(m)} & \mathbf{Q}_*^{(m)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q}_k^{(m)} \in \mathbb{K}^{n \times k},$$

$$\mathbf{R}^{(m)} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{kk}^{(m)} & \mathbf{R}_{k*}^{(m)} \\ & \mathbf{R}_{**}^{(m)} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_{kk}^{(m)} \in \mathbb{K}^{k \times k} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.$$

6 Die QR-Iteration

Aus den definierenden Gleichungen der Iteration folgt dann

$$\begin{aligned}
& \left(\mathbf{Q}_k^{(m+1)} \mathbf{R}_{kk}^{(m+1)} \quad \mathbf{Q}_k^{(m+1)} \mathbf{R}_{k*}^{(m+1)} + \mathbf{Q}_*^{(m+1)} \mathbf{R}_{**}^{(m+1)} \right) \\
&= \left(\mathbf{Q}_k^{(m+1)} \quad \mathbf{Q}_*^{(m+1)} \right) \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{kk}^{(m+1)} & \mathbf{R}_{k*}^{(m+1)} \\ & \mathbf{R}_{**}^{(m+1)} \end{pmatrix} = \mathbf{Q}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m+1)} \\
&= \mathbf{W}^{(m+1)} = \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_k^{(m)} & \mathbf{Q}_*^{(m)} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)} & \mathbf{A} \mathbf{Q}_*^{(m)} \end{pmatrix} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0,
\end{aligned}$$

also insbesondere

$$\mathbf{Q}_k^{(m+1)} \mathbf{R}_{kk}^{(m+1)} = \mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.$$

Die ersten k Spalten $\mathbf{Q}_k^{(m)}$ der Matrizen $\mathbf{Q}^{(m)}$ können also auch als Ergebnis einer orthogonalen Iteration mit der Anfangsmatrix $\mathbf{Q}_k^{(0)}$ interpretiert werden. Also lassen sich unsere Konvergenzresultate auch auf diese Teilmatrizen anwenden.

Falls insbesondere

$$|\lambda_1| \leq |\lambda_2| \leq \dots \leq |\lambda_k| < |\lambda_{k+1}| \leq \dots \leq |\lambda_n|$$

gilt, können wir Folgerung 5.38 verwenden, um eine Abschätzung der Form

$$\|\mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)} - \mathbf{Q}_k^{(m)} \mathbf{\Lambda}_{kk}^{(m)}\|_2 \leq C \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|} \right)^m \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N} \quad (6.1)$$

zu erhalten, indem wir entsprechend Lemma 5.40 die Matrix

$$\mathbf{\Lambda}_{kk}^{(m)} := (\mathbf{Q}_k^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)}$$

einsetzen. Um diese Abschätzung auszunutzen untersuchen wir, wie sich die Matrix \mathbf{A} in der durch $\mathbf{Q}^{(m)}$ gegebenen Basis darstellt, wir sind also an den Matrizen

$$\mathbf{A}^{(m)} := (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0 \quad (6.2)$$

interessiert. Aus der Blockdarstellung der Matrizen $\mathbf{Q}^{(m)}$ folgt

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}^{(m)} &= (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} = \begin{pmatrix} (\mathbf{Q}_k^{(m)})^* \\ (\mathbf{Q}_*^{(m)})^* \end{pmatrix} \mathbf{A} \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_k^{(m)} & \mathbf{Q}_*^{(m)} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} (\mathbf{Q}_k^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)} & (\mathbf{Q}_k^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}_*^{(m)} \\ (\mathbf{Q}_*^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)} & (\mathbf{Q}_*^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}_*^{(m)} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

Wir interessieren uns für den linken unteren Block dieser Matrix und möchten beweisen, dass er gegen null konvergiert. Aus (6.1) folgt $\mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)} \approx \mathbf{Q}_k^{(m)} \mathbf{\Lambda}_{kk}^{(m)}$, also

$$(\mathbf{Q}_*^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)} \approx (\mathbf{Q}_*^{(m)})^* \mathbf{Q}_k^{(m)} \mathbf{\Lambda}_{kk}^{(m)}.$$

Da die Spalten der Matrix $\mathbf{Q}^{(m)}$ eine Orthonormalbasis sind, müssen sie senkrecht aufeinander stehen. Konkret können wir nachrechnen, dass

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} (\mathbf{Q}_k^{(m)})^* \mathbf{Q}_k^{(m)} & (\mathbf{Q}_k^{(m)})^* \mathbf{Q}_*^{(m)} \\ (\mathbf{Q}_*^{(m)})^* \mathbf{Q}_k^{(m)} & (\mathbf{Q}_*^{(m)})^* \mathbf{Q}_*^{(m)} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} (\mathbf{Q}_k^{(m)})^* \\ (\mathbf{Q}_*^{(m)})^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_k^{(m)} & \mathbf{Q}_*^{(m)} \end{pmatrix} \\ &= (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{Q}^{(m)} = \mathbf{I} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & \\ & \mathbf{I} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

gilt, also insbesondere $(\mathbf{Q}_*^{(m)})^* \mathbf{Q}_k^{(m)} = \mathbf{0}$. Wegen $(\mathbf{Q}_k^{(m)})^* \mathbf{Q}_k^{(m)} = \mathbf{I}$ und $(\mathbf{Q}_*^{(m)})^* \mathbf{Q}_*^{(m)} = \mathbf{I}$ sind die Matrizen $\mathbf{Q}_k^{(m)}$ und $\mathbf{Q}_*^{(m)}$ außerdem isometrisch. Für den rechten unteren Block der Matrix $\mathbf{A}^{(m)}$ erhalten wir mit (6.1) und Lemma 3.18 die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|(\mathbf{Q}_*^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)}\| &= \|(\mathbf{Q}_*^{(m)})^* \mathbf{Q}_k^{(m)} \Lambda_{kk}^{(m)} + (\mathbf{Q}_*^{(m)})^* (\mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)} - \mathbf{Q}_k^{(m)} \Lambda_{kk}^{(m)})\| \\ &= \|(\mathbf{Q}_*^{(m)})^* (\mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)} - \mathbf{Q}_k^{(m)} \Lambda_{kk}^{(m)})\| \\ &\leq \|(\mathbf{Q}_*^{(m)})^*\| \|\mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)} - \mathbf{Q}_k^{(m)} \Lambda_{kk}^{(m)}\| \\ &= \|\mathbf{Q}_*^{(m)}\| \|\mathbf{A} \mathbf{Q}_k^{(m)} - \mathbf{Q}_k^{(m)} \Lambda_{kk}^{(m)}\| \\ &\leq C \left(\frac{|\lambda_{k+1}|}{|\lambda_k|} \right)^m \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0. \end{aligned}$$

Die Matrizen $\mathbf{A}^{(m)}$ werden sich also einer oberen Block-Dreiecksform annähern.

Falls wir dieses Argument auf alle $k \in \{1, \dots, n-1\}$ anwenden können, falls also

$$|\lambda_1| < |\lambda_2| < \dots < |\lambda_{n-1}| < |\lambda_n|$$

gilt, erhalten wir sogar, dass die Matrix gegen obere Dreiecksgestalt konvergiert, dass wir uns also iterativ der Schur-Zerlegung (vgl. Satz 3.38) nähern.

In diesem Fall bietet uns die orthogonale Iteration, angewendet auf eine vollständige Basis, eine Möglichkeit, die Schur-Zerlegung zu approximieren. Da $\mathbf{Q}^{(m)}$ in diesem Fall immer eine vollständige Basis ist, ist $\mathbf{A}^{(m)}$ das Ergebnis einer unitären Ähnlichkeitstransformation der Ausgangsmatrix \mathbf{A} , wir berechnen also eine Folge unitär ähnlicher Matrizen, die gegen eine obere Dreiecksmatrix konvergieren.

Wir würden diese Matrizen gerne berechnen, ohne die vollen orthogonalen Basen $\mathbf{Q}^{(m)}$ mitführen zu müssen, denn es gibt beispielsweise Anwendungen, bei denen wir nur an den Eigenwerten, aber nicht an den Eigenvektoren interessiert sind. Nach Konstruktion haben wir

$$\mathbf{Q}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m+1)} = \mathbf{W}^{(m+1)} = \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)},$$

$$\mathbf{Q}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m+1)} (\mathbf{Q}^{(m)})^* = \mathbf{A}, \quad (6.3)$$

$$(\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{Q}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m+1)} = (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} = \mathbf{A}^{(m)}. \quad (6.4)$$

Aus (6.3) erhalten wir die Darstellung

$$\mathbf{A}^{(m+1)} = (\mathbf{Q}^{(m+1)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m+1)} = (\mathbf{Q}^{(m+1)})^* \mathbf{Q}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m+1)} (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{Q}^{(m+1)}$$

6 Die QR-Iteration

$$= \mathbf{R}^{(m+1)}(\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{Q}^{(m+1)}.$$

Das Produkt

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} := (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{Q}^{(m+1)} \quad (6.5)$$

tritt auch in (6.4) auf, wir erhalten also die Gleichungen

$$\mathbf{A}^{(m)} = \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m+1)}, \quad \mathbf{A}^{(m+1)} = \mathbf{R}^{(m+1)} \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)}. \quad (6.6)$$

Die erste dieser Gleichungen entspricht einer QR-Zerlegung der Matrix $\mathbf{A}^{(m)}$, die wir auch ohne die Ausgangsmatrix \mathbf{A} und die Matrix $\mathbf{Q}^{(m)}$ konstruieren können. Um unser Ziel zu erreichen, müssen wir also nur nachweisen, dass eine derartige QR-Zerlegung mit der für die orthogonale Iteration benötigten Zerlegung korrespondiert. Seien also nun $\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)}$ und $\mathbf{R}^{(m+1)}$ durch (6.6) definiert. In Anlehnung an (6.5) definieren wir dann die Matrix $\mathbf{Q}^{(m+1)}$ durch die Gleichung

$$\mathbf{Q}^{(m+1)} := \mathbf{Q}^{(m)} \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} \quad (6.7)$$

und erhalten

$$\mathbf{Q}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m+1)} = \mathbf{Q}^{(m)} \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m+1)} = \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{A}^{(m)} = \mathbf{Q}^{(m)} (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} = \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)},$$

also die definierende Gleichung der orthogonalen Iteration. Damit haben wir unser Ziel erreicht: Wir können die orthogonale Iteration durchführen, ohne auf die Matrizen \mathbf{A} und $\mathbf{Q}^{(m)}$ zurückzugreifen.

Dieser Zugang ähnelt wegen

$$\mathbf{A}^{(m+1)} = \mathbf{R}^{(m+1)} \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} = (\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)})^* \mathbf{A}^{(m)} \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)}$$

dem bereits bei der Jacobi-Iteration verwendeten Ansatz: Alle Iterierten sind unitär ähnlich, und wir versuchen, die unitären Transformationen so zu wählen, dass sie gegen die obere Dreiecksgestalt konvergieren.

Algorithmus 6.1 (QR-Iteration) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Der folgende Algorithmus berechnet die Folge $(\mathbf{A}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}}$ aus (6.2).

```

 $\mathbf{A}^{(0)} \leftarrow \mathbf{A}$ 
 $m \leftarrow 0$ 
repeat
  Bestimme die QR-Zerlegung  $\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m+1)} = \mathbf{A}^{(m)}$ 
   $\mathbf{A}^{(m+1)} \leftarrow \mathbf{R}^{(m+1)} \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)}$ 
   $m \leftarrow m + 1$ 
until „genau genug“

```

Bemerkung 6.2 Nach der durch Gleichung (6.2) gegebenen Definition sind alle Matrizen $\mathbf{A}^{(m)}$ unitär ähnlich zu \mathbf{A} , besitzen also dieselben Eigenwerte.

Die in (6.2) verwendete Transformation $\mathbf{Q}^{(m)}$ kann mit Hilfe der Gleichung (6.7) während der Durchführung der QR-Iteration berechnet werden, falls wir nicht nur an den Eigenwerten, sondern auch an den Eigenvektoren von \mathbf{A} interessiert sind.

6.2 Shift-Strategien und Deflation

Zur Verbesserung der Konvergenzgeschwindigkeit der Vektoriteration haben wir in Kapitel 5 die inverse Iteration mit Shift verwendet: Statt mit der Matrix \mathbf{A} haben wir mit der Matrix $(\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})^{-1}$ gearbeitet, die dieselben Eigenvektoren wie \mathbf{A} besitzt, deren Eigenwerte aber durch

$$\lambda \in \sigma(\mathbf{A}) \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{1}{\lambda - \mu} \in \sigma((\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})^{-1})$$

gegeben sind, so dass wir durch Wahl des Shift-Parameters μ in der Nähe eines Eigenwerts für schnelle Konvergenz sorgen können. Dieser Ansatz lässt sich verfeinern, indem μ mit Hilfe des Rayleigh-Quotienten automatisch gewählt wird, und in diesem Fall konvergiert die entsprechende Iteration quadratisch, für normale Matrizen sogar kubisch.

Der Einsatz eines Shift-Parameters ist also von großem Vorteil zur Beschleunigung des Verfahrens. Leider macht er es bei der inversen Iteration auch erforderlich, mit der Inversen von $\mathbf{A} - \mu\mathbf{I}$ zu arbeiten, die uns bei der QR-Iteration nicht ohne weiteres zur Verfügung steht.

Ein genauerer Blick auf die die Konvergenz des Verfahrens beschreibende Abschätzung (6.1) legt nahe, dass wir auch eine andere Shift-Strategie verwenden können: Wenn μ hinreichend nahe an einem α -fachen Eigenwert von \mathbf{A} liegt, können wir die Eigenwerte der Matrix $\mathbf{A} - \mu\mathbf{I}$ in die Reihenfolge

$$|\lambda_1 - \mu| \geq \dots \geq |\lambda_{n-\alpha} - \mu| > |\lambda_{n-\alpha+1} - \mu| = \dots = |\lambda_n - \mu|$$

mit $\lambda_{n-\alpha+1} = \dots = \lambda_n$ bringen. Angewendet auf diese Matrix sollte also der linke untere Matrixblock mit α Zeilen und $n - \alpha$ Spalten gegen null konvergieren, und der Iterationsfehler sollte sich durch

$$\left(\frac{|\lambda_n - \mu|}{|\lambda_{n-\alpha} - \mu|} \right)^m$$

abschätzen lassen. Insbesondere sollte die Konvergenz um so schneller werden, je geringer der Abstand zwischen μ und dem Eigenwert $\lambda_{n-\alpha+1} = \lambda_n$ ist.

Eine Verschiebung des Spektrums von \mathbf{A} kann also auch dann von Vorteil sein, wenn wir nicht die inverse Iteration verwenden. Da bei diesem Ansatz keine Berechnung der Inversen erforderlich ist, können wir den Shift-Parameter praktisch ohne zusätzlichen Rechenaufwand in jedem Schritt anpassen und so beispielsweise die Rayleigh-Quotienten-Strategie verwenden.

Für unsere Variante der QR-Iteration wollen wir weiterhin möglichst mit den Matrizen $\mathbf{A}^{(m)}$ statt $\mathbf{A}^{(m)} - \mu\mathbf{I}$ arbeiten. Dieses Ziel können wir erreichen, indem wir (6.6) durch

$$\mathbf{A}^{(m)} - \mu\mathbf{I} = \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)}\mathbf{R}^{(m+1)}, \quad \mathbf{A}^{(m+1)} = \mathbf{R}^{(m+1)}\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} + \mu\mathbf{I} \quad (6.8)$$

ersetzen, denn dann gilt weiterhin

$$\mathbf{A}^{(m+1)} = \mathbf{R}^{(m+1)}\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} + \mu\mathbf{I}$$

6 Die QR-Iteration

$$\begin{aligned}
&= (\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)})^* (\mathbf{A}^{(m)} - \mu \mathbf{I}) \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} + \mu (\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)})^* \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} \\
&= (\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)})^* (\mathbf{A} - \mu \mathbf{I} + \mu \mathbf{I}) \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} = (\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)})^* \mathbf{A}^{(m)} \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)},
\end{aligned}$$

wir berechnen also wie gehabt eine Ähnlichkeitstransformation von $\mathbf{A}^{(m)}$, geändert hat sich nur die Wahl der unitären Transformation $\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)}$.

Es stellt sich die Frage nach der geeigneten Wahl des Shift-Parameters μ . Da wir hoffen, dass alle Außerdiagonalelemente der n -ten Zeile der Matrix $\mathbf{A}^{(m)}$ gegen null konvergieren, können wir annehmen, dass das letzte Diagonalelement $a_{nn}^{(m)}$ gegen einen Eigenwert konvergieren wird. Unter diesen Annahmen ist also $\mu = a_{nn}^{(m)}$ eine gute Wahl für den Shift-Parameter.

Diese Wahl lässt sich auch begründen, indem wir auf den Rayleigh-Quotienten zurückgreifen, der sich bereits bei der inversen Iteration als nützlich erwiesen hat: Wir bezeichnen den n -ten kanonischen Einheitsvektor mit $\mathbf{e}^{(n)} \in \mathbb{K}^n$ und die letzte Spalte von $\mathbf{Q}^{(m)}$ mit $\mathbf{q}^{(m)} = \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{e}^{(n)} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ und stellen fest, dass

$$\begin{aligned}
\mu = a_{nn}^{(m)} &= \frac{\langle \mathbf{e}^{(n)}, \mathbf{A}^{(m)} \mathbf{e}^{(n)} \rangle_2}{\langle \mathbf{e}^{(n)}, \mathbf{e}^{(n)} \rangle_2} = \frac{\langle \mathbf{e}^{(n)}, (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{e}^{(n)} \rangle_2}{\langle \mathbf{e}^{(n)}, (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{e}^{(n)} \rangle_2} \\
&= \frac{\langle \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{e}^{(n)}, \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{e}^{(n)} \rangle_2}{\langle \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{e}^{(n)}, \mathbf{Q}^{(m)} \mathbf{e}^{(n)} \rangle_2} = \frac{\langle \mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{A} \mathbf{q}^{(m)} \rangle_2}{\langle \mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{q}^{(m)} \rangle_2} = \Lambda_A(\mathbf{q}^{(m)})
\end{aligned}$$

gilt. Damit entspricht unsere Wahl des Shift-Parameters gerade der Verwendung des Rayleigh-Quotienten, und analog zu Satz 5.32 lässt sich zeigen, dass $\mathbf{q}^{(m)}$ quadratisch gegen einen Eigenraum der adjungierten Matrix \mathbf{A}^* konvergieren wird. Für eine normale Matrix können wir entsprechend Satz 5.33 sogar kubische Konvergenz nachweisen.

Mit Hilfe dieser Modifikation können wir also darauf hoffen, dass die Matrizen $\mathbf{A}^{(m)}$ schnell gegen die Form

$$\begin{pmatrix} \widetilde{\mathbf{A}} & \mathbf{C} \\ & \lambda \end{pmatrix}$$

konvergieren werden, dass also

$$\mathbf{A} \approx \mathbf{Q}^{(m)} \begin{pmatrix} \widetilde{\mathbf{A}} & \mathbf{C} \\ & \lambda \end{pmatrix} (\mathbf{Q}^{(m)})^*$$

für ein relativ kleines m gelten wird. Sobald die Einträge im linken unteren Block klein genug sind, können wir uns darauf konzentrieren, nur noch den linken oberen Block $\widetilde{\mathbf{A}}$ auf obere Dreiecksgestalt zu bringen. Falls wir nämlich eine näherungsweise Schur-Zerlegung

$$\widetilde{\mathbf{A}} \approx \widetilde{\mathbf{Q}} \widetilde{\mathbf{R}} \widetilde{\mathbf{Q}}^*$$

gefunden haben, ist durch

$$\mathbf{Q}^{(m)} \begin{pmatrix} \widetilde{\mathbf{Q}} & \\ & \mathbf{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widetilde{\mathbf{R}} & \widetilde{\mathbf{Q}}^* \mathbf{C} \\ & \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widetilde{\mathbf{Q}}^* & \\ & \mathbf{1} \end{pmatrix} (\mathbf{Q}^{(m)})^* \approx \mathbf{Q}^{(m)} \begin{pmatrix} \widetilde{\mathbf{A}} & \mathbf{C} \\ & \lambda \end{pmatrix} (\mathbf{Q}^{(m)})^* \approx \mathbf{A}$$

eine näherungsweise Schur-Zerlegung der Gesamtmatrix \mathbf{A} gegeben. Indem wir das Konvergenzverhalten der Blöcke unterhalb der Diagonalen kontrollieren, können wir also

bereits konvergierte Teile der Matrix abspalten und so die Problemdimension nach und nach reduzieren.

Dieser Ansatz, also das Entfernen bereits konvergierter Diagonalblöcke aus dem Verfahren, trägt den Namen *Deflation* und sorgt einerseits für eine Reduktion des Rechenaufwands, während andererseits auch dafür gesorgt wird, dass bereits konvergierte Eigenwerte nicht mehr weiter als Shift-Parameter verwendet werden.

In der Praxis zeigt sich, dass mit Rayleigh-Shift in der Regel bereits nach sehr wenigen Schritten ein Eigenwert hinreichend gut approximiert ist, um die Deflation anwenden zu können. Insgesamt werden bei diesem Ansatz dann nur $\sim n$ Iterationen benötigt, um die Matrix auf obere Dreiecksgestalt zu bringen.

6.3 Hessenberg-Form

Bisher haben wir uns auf die Konvergenzrate der QR-Iteration konzentriert und den Aufwand für die Durchführung eines QR-Schrittes vernachlässigt. Dieser Aufwand ist sehr hoch: Die Berechnung einer QR-Zerlegung erfordert in der Regel $\sim n^3$ Operationen, und die Berechnung des Produkts $\mathbf{R}^{(m+1)}\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)}$ hat einen ähnlich hohen Rechenaufwand. Wenn wir davon ausgehen, dass wir $\sim n$ Iterationen benötigen, um die Matrix auf obere Dreiecksgestalt zu bringen, würde unser Algorithmus $\sim n^4$ Operationen benötigen und wäre damit sehr aufwendig.

Unser Ziel ist es nun, die QR-Iteration zu beschleunigen. Dazu soll die Matrix so transformiert werden, daß sich ein QR-Schritt mit $\sim n^2$ oder im symmetrischen Fall sogar $\sim n$ Operationen durchführen lässt. Der Schlüssel zu dieser erheblichen Effizienzsteigerung ist eine Verallgemeinerung der oberen Dreiecksgestalt:

Definition 6.3 (Hessenberg-Form) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Falls

$$a_{ij} = 0 \quad \text{für alle } i, j \in \{1, \dots, n\} \text{ mit } i > j + 1$$

gilt, bezeichnet man \mathbf{A} als Matrix in (oberer) Hessenberg-Form.

Jede obere Dreiecksmatrix ist auch eine Hessenberg-Matrix, aber bei einer Hessenberg-Matrix sind auch noch Einträge in der unteren Nebendiagonalen der Matrix erlaubt: Typisch ist eine Struktur der Form

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix}. \quad (6.9)$$

Diese Struktur bietet den Vorteil, dass sich die QR-Zerlegung einer Hessenberg-Matrix besonders einfach berechnen lässt: Wir wählen eine Givens-Rotation $\mathbf{G}_1 \in \mathbb{K}^{n \times n}$, die den

6 Die QR-Iteration

Eintrag a_{21} eliminiert, indem die erste und zweite Zeile miteinander kombiniert werden, beispielsweise als

$$\mathbf{G}_1 = \begin{pmatrix} \bar{c} & \bar{s} & & & \\ -s & c & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad c = \frac{a_{11}}{r}, \quad s = \frac{a_{21}}{r}, \quad r = \sqrt{|a_{11}|^2 + |a_{21}|^2}.$$

Entsprechend wählen wir weitere Rotationen $\mathbf{G}_2, \dots, \mathbf{G}_{n-1} \in \mathbb{K}^{n \times n}$, die der Reihe nach die Einträge $a_{32}, \dots, a_{n,n-1}$ eliminieren und so die Matrix \mathbf{A} in obere Dreiecksform überführen: Es gilt dann

$$\mathbf{G}_{n-1} \dots \mathbf{G}_1 \mathbf{A} = \mathbf{R}, \quad \mathbf{A} = \mathbf{G}_1^* \dots \mathbf{G}_{n-1}^* \mathbf{R},$$

also haben wir die QR-Zerlegung in $\sim n^2$ Operationen berechnet, und der Faktor \mathbf{Q} ist durch

$$\mathbf{Q} = \mathbf{G}_1^* \dots \mathbf{G}_{n-1}^* \quad (6.10)$$

gegeben. Für die zweite Hälfte des QR-Schritts müssen wir nun

$$\mathbf{RQ} = (\mathbf{Q}^* \mathbf{R}^*)^* = (\mathbf{G}_{n-1} \dots \mathbf{G}_1 \mathbf{R}^*)^*$$

berechnen. Das entspricht gerade der Anwendung der Givens-Rotationen auf die Spalten der Matrix \mathbf{R} , die Reihenfolge der Rotationen ist dieselbe wie bei der Berechnung der Zerlegung. Damit benötigt auch diese Berechnung $\sim n^2$ Operationen, so dass sich ein Schritt der QR-Iteration für eine Hessenberg-Matrix in $\sim n^2$ Operationen durchführen lässt.

Man kann sich leicht überlegen, dass \mathbf{RQ} bei der beschriebenen Vorgehensweise wieder eine Matrix in Hessenberg-Form sein wird. Diese Eigenschaft ist von entscheidender Bedeutung: Sofern die Ausgangsmatrix $\mathbf{A}^{(0)}$ in Hessenberg-Form vorliegt, werden alle gemäß der oben beschriebenen Vorgehensweise berechneten Matrizen $\mathbf{A}^{(m)}$ der QR-Iteration ebenfalls in Hessenberg-Form sein, so dass jeder Iterationsschritt nur $\sim n^2$ Operationen erfordert. Das ist wesentlich effizienter als die $\sim n^3$ Operationen, die ohne Ausnutzung der Hessenberg-Form erforderlich wären.

Unser Ziel sollte es nun also sein, die erste Iterierte $\mathbf{A}^{(0)}$ möglichst in Hessenberg-Form zu überführen, indem wir die Basis $\mathbf{Q}^{(0)}$ geschickter als bisher wählen. Auch dieses Ziel lässt sich mit Hilfe geeigneter Givens-Rotationen erreichen: Um eine beliebige Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

in eine Hessenberg-Form zu überführen, müssen wir eine unitäre Ähnlichkeitstransformation finden, die die Elemente $a_{31}, \dots, a_{n1}, a_{42}, \dots, a_{n2}, \dots$ eliminiert. Falls wir, wie zuvor

beschrieben, das Element a_{31} durch Kombination der ersten und dritten Zeile eliminieren würden, müssten wir, da wir jetzt eine Ähnlichkeitstransformation benötigen, auch die erste und dritte Spalte kombinieren, und dadurch könnte der Eintrag a_{31} wieder einen anderen Wert als null erhalten.

Also kombinieren wir die *zweite* mit der dritten Zeile, um a_{31} zu eliminieren. Die korrespondierende Transformation der Spalten beeinflusst dann nur die zweite und dritte Spalte, so dass die in a_{31} eingeführte Null erhalten bleibt:

$$\mathbf{G}_{31} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \bar{c} & \bar{s} & & & \\ & -s & c & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad c = \frac{a_{21}}{r}, \quad s = \frac{a_{31}}{r}, \quad r = \sqrt{|a_{21}|^2 + |a_{31}|^2}.$$

Entsprechend lassen sich auch die weiteren Einträge eliminieren, bis die Hessenberg-Gestalt erreicht ist.

Algorithmus 6.4 Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Der folgende Algorithmus überschreibt \mathbf{A} mit einer Matrix $\mathbf{A}^{(0)}$ in Hessenberg-Form, die die Gleichung $\mathbf{A}^{(0)} = (\mathbf{Q}^{(0)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(0)}$ erfüllt.

```

 $\mathbf{Q}^{(0)} \leftarrow \mathbf{I}$ 
for  $j = 1$  to  $n - 2$  do
  for  $i = j + 1$  to  $n - 1$  do begin
     $\gamma \leftarrow \sqrt{|a_{ij}|^2 + |a_{i+1,j}|^2}$ ;  $c \leftarrow a_{ij}/\gamma$ ;  $s \leftarrow a_{i+1,j}/\gamma$ 
    for  $k = j$  to  $n$  do begin
       $h \leftarrow a_{ik}$ ;  $a_{ik} \leftarrow \bar{c}h + \bar{s}a_{i+1,k}$ ;  $a_{i+1,k} \leftarrow -sh + ca_{i+1,k}$ 
    end
    for  $k = 1$  to  $n$  do begin
       $h \leftarrow a_{ki}$ ;  $a_{ki} \leftarrow \bar{c}h + \bar{s}a_{k,i+1}$ ;  $a_{k,i+1} \leftarrow -sh + ca_{k,i+1}$ 
       $h \leftarrow q_{ki}^{(0)}$ ;  $q_{ki}^{(0)} \leftarrow \bar{c}h + \bar{s}q_{k,i+1}^{(0)}$ ;  $q_{k,i+1}^{(0)} \leftarrow -sh + cq_{k,i+1}^{(0)}$ 
    end
  end
end

```

Mit diesem Algorithmus können wir eine beliebige Matrix in $\sim n^3$ Operationen in Hessenberg-Form überführen, so dass sich dann die weiteren Schritte der QR-Iteration effizient durchführen lassen.

Falls zusätzliche Informationen über die Struktur von \mathbf{A} vorliegen, können wir sie ausnutzen, um den Algorithmus effizienter zu gestalten: Bei Bandmatrizen der Bandbreite k etwa genügen $\sim n^2k$ Operationen für die Transformation. Besonders günstig ist die Transformation auf Hessenberg-Form, falls \mathbf{A} selbstadjungiert ist:

Bemerkung 6.5 Falls \mathbf{A} selbstadjungiert ist, muss auch $\mathbf{A}^{(0)}$ selbstadjungiert sein. Damit folgt aus $a_{ij}^{(0)} = 0$ auch $a_{ji}^{(0)} = 0$ für alle $1 < j + 1 < i < n$, die Matrix $\mathbf{A}^{(0)}$ ist also tridiagonal. Man kann sich einfach überlegen, dass der beschriebene QR-Schritt für eine

6 Die QR-Iteration

tridiagonale Matrix sogar nur $\sim n$ Operationen erfordert, die Iteration wird also im Fall selbstadjungierter Matrizen noch wesentlich effizienter als im allgemeinen Fall sein.

Da eine Hessenberg-Matrix schon „fast“ die obere Dreiecksgestalt besitzt, können wir besonders einfach feststellen, wann eine Teilmatrix unterhalb der Diagonalen konvergiert ist und wir die Dimension reduzieren können:

Bemerkung 6.6 Sobald $|a_{i+1,i}|$ für ein $i \in \{1, \dots, n-1\}$ hinreichend klein geworden ist, können wir per Deflation zu einer kleineren Teilmatrix übergehen. In der Praxis verwendet man skalierungsinvariante Kriterien der Form

$$|a_{i+1,i}| \leq \epsilon(|a_{ii}| + |a_{i+1,i+1}|)$$

mit einer Fehlerschranke $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$, um zu erkennen, wann eine Teilmatrix unterhalb der Diagonalen konvergiert ist.

Die Hessenberg-Form bietet uns auch die Möglichkeit, den Shift-Parameter geschickter als bisher zu wählen: Die Idee des *Wilkinson-Shifts* besteht darin, nicht nur den rechten unteren Diagonaleintrag, also das Gegenstück des Rayleigh-Quotienten, zu verwenden, sondern stattdessen die Eigenwerte des rechten unteren 2×2 -Diagonalblocks zu benutzen.

Im symmetrischen Fall besitzt $\mathbf{A}^{(m)}$ Tridiagonalgestalt, und der Wilkinson-Shift-Parameter ergibt sich aus der Untersuchung der Eigenwerte der 2×2 -Matrix

$$\mathbf{S} := \begin{pmatrix} a_{n-1,n-1}^{(m)} & a_{n-1,n}^{(m)} \\ \bar{a}_{n-1,n}^{(m)} & a_{nn}^{(m)} \end{pmatrix}.$$

Sie sind Nullstellen des charakteristischen Polynoms

$$\begin{aligned} p_S(\lambda) &= \det(\lambda \mathbf{I} - \mathbf{S}) = \det \begin{pmatrix} \lambda - a_{n-1,n-1}^{(m)} & -a_{n-1,n}^{(m)} \\ -\bar{a}_{n-1,n}^{(m)} & \lambda - a_{nn}^{(m)} \end{pmatrix} \\ &= (\lambda - a_{n-1,n-1}^{(m)})(\lambda - a_{nn}^{(m)}) - |a_{n-1,n}^{(m)}|^2. \end{aligned}$$

Indem wir Mittelwert und halbe Differenz der Diagonalelemente mit

$$m := \frac{a_{n-1,n-1}^{(m)} + a_{nn}^{(m)}}{2}, \quad d := \frac{a_{n-1,n-1}^{(m)} - a_{nn}^{(m)}}{2}$$

bezeichnen, erhalten wir die Darstellung

$$p_S(\lambda) = (\lambda - m - d)(\lambda - m + d) - |a_{n-1,n}^{(m)}|^2 = (\lambda - m)^2 - d^2 - |a_{n-1,n}^{(m)}|^2,$$

so dass die Nullstellen, und damit die Eigenwerte, durch

$$(\lambda - m)^2 = d^2 + |a_{n-1,n}^{(m)}|^2, \quad \lambda = m \pm \sqrt{d^2 + |a_{n-1,n}^{(m)}|^2}$$

gegeben sind. Da wir darauf hoffen, dass das letzte Diagonalelement $a_{nn}^{(m)}$ gegen einen Eigenwert konvergiert, bietet es sich an, diejenige Nullstelle von p_S als Shift-Parameter μ zu wählen, die dem derzeitigen Wert von $a_{nn}^{(m)}$ am nächsten liegt. Für $d < 0$ ist $a_{nn}^{(m)}$ größer als der Mittelwert m , anderenfalls kleiner oder gleich, so dass wir die Formel

$$\mu = \begin{cases} m - \sqrt{d^2 + |a_{n-1,n}^{(m)}|^2} & \text{falls } d > 0, \\ m + \sqrt{d^2 + |a_{n-1,n}^{(m)}|^2} & \text{ansonsten} \end{cases} \quad (6.11)$$

erhalten. Indem wir dieses μ als Shift-Parameter in der QR-Iteration verwenden, ergibt sich die *QR-Iteration mit Wilkinson-Shift*, bei der wir auf bessere Konvergenz als bei der Verwendung des einfachen Rayleigh-Quotienten $\mu = a_{nn}^{(m)}$ hoffen dürfen.

Auch im Falle nicht selbstadjungierter Matrizen lassen sich verfeinerte Shift-Strategien entwickeln, allerdings muss hier berücksichtigt werden, dass komplexe Shift-Parameter auftreten können. Insbesondere bei der Behandlung einer nichtsymmetrischen reellen Matrix wäre man daran interessiert, mit einem komplexen Shift zu rechnen, ohne komplexe Zahlen verwenden zu müssen. Indem man geschickt einen QR-Schritt mit einem komplexen Shift μ und einen QR-Schritt mit dem komplex konjugierten Shift $\bar{\mu}$ kombiniert, lässt sich dieses Ziel erreichen.

Bemerkung 6.7 (Eigenvektoren) *Wir können den Rechenaufwand der QR-Iteration deutlich reduzieren, indem wir auf die Akkumulation der Transformationsmatrizen $\mathbf{Q}^{(m)}$ verzichten: Für Hessenberg-Matrizen reduziert sich so der Aufwand eines QR-Schritts von $\mathcal{O}(n^3)$ auf $\mathcal{O}(n^2)$, für tridiagonale Matrizen sogar auf $\mathcal{O}(n)$.*

Um die Eigenvektoren zu rekonstruieren bietet sich die Verwendung einer inversen Iteration an: Da alle Eigenwerte bekannt sind, können wir sehr gute Shift-Parameter wählen und also auf sehr schnelle Konvergenz hoffen.

Dabei ist es eine gute Idee, die inverse Iteration für die Hessenberg-Matrix $\mathbf{A}^{(0)}$ statt für \mathbf{A} durchzuführen, denn wir haben bereits gesehen, dass sich eine QR-Zerlegung einer Hessenberg-Matrix mit geringem Aufwand konstruieren lässt, so dass auch das für die inverse Iteration erforderliche Lösen des linearen Gleichungssystems

$$(\mathbf{A}^{(0)} - \mu\mathbf{I})\mathbf{w}^{(m+1)} = \mathbf{z}^{(m)}$$

effizient möglich ist.

6.4 Implizite Verfahren

Bisher haben wir einen QR-Schritt explizit durchgeführt: Erst wird die QR-Zerlegung $\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)}\mathbf{R}^{(m+1)} = \mathbf{A}^{(m)}$ berechnet, dann wird daraus $\mathbf{A}^{(m+1)} = \mathbf{R}^{(m+1)}\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)}$ konstruiert. Bei dieser Vorgehensweise müssen wir sämtliche Givens-Rotationen während der Zerlegung speichern, um sie anschließend bei der Multiplikation verwenden zu können.

Wesentlich eleganter wäre es, wenn wir $\mathbf{A}^{(m+1)}$ direkt aus $\mathbf{A}^{(m)}$ berechnen könnten, wenn wir also eine Möglichkeit hätten, die Zerlegung und Multiplikation *implizit* durchzuführen. Das Speichern der Givens-Rotationen wäre dann überflüssig.

6 Die QR-Iteration

Diese Möglichkeit besteht, wenn wir mit Hessenberg-Matrizen arbeiten: Im QR-Schritt verwenden wir unitäre Ähnlichkeitstransformationen, die Hessenberg-Matrizen wieder in Hessenberg-Matrizen überführen. Derartige Transformationen unterliegen Gesetzmäßigkeiten, die sich praktisch ausnutzen lassen.

Bemerkung 6.8 Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ in Hessenberg-Form. Die Matrix ist genau dann irreduzibel (siehe Definition 3.55), falls

$$a_{i+1,i} \neq 0 \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, n-1\}$$

gilt.

Mit Hilfe der bereits beschriebenen Deflation können wir dafür sorgen, dass wir die QR-Schritte nur für irreduzible Hessenberg-Matrizen durchführen müssen. Für derartige Matrizen gilt die Aussage:

Satz 6.9 (Transformation von Hessenberg-Matrizen) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine irreduzible Hessenberg-Matrix, sei $\mathbf{B} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine zweite Hessenberg-Matrix, und sei $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine unitäre Matrix, die

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}^* \mathbf{B} \mathbf{Q}, \quad |q_{11}| = 1 \quad (6.12)$$

erfüllt. Dann ist \mathbf{Q} eine Diagonalmatrix.

Beweis. Durch Induktion über $n \in \mathbb{N}$. Für $n = 1$ ist die Behauptung trivial.

Sei nun $n \in \mathbb{N}$ so gewählt, dass die Behauptung gilt. Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{(n+1) \times (n+1)}$ eine irreduzible Hessenberg-Matrix, sei $\mathbf{B} \in \mathbb{K}^{(n+1) \times (n+1)}$ eine zweite Hessenberg-Matrix, und sei $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{(n+1) \times (n+1)}$ eine unitäre Matrix, die (6.12) erfüllt.

Wir bezeichnen wieder mit $\mathbf{e}^i \in \mathbb{K}^{n+1}$ den i -ten kanonischen Einheitsvektor, und wir setzen $\mathbf{q}^{(i)} := \mathbf{Q} \mathbf{e}^{(i)} \in \mathbb{K}^{n+1}$. Wegen

$$1 = \|\mathbf{q}^{(1)}\|_2^2 = \sum_{j=1}^{n+1} |q_j^{(1)}|^2 = \sum_{j=1}^{n+1} |q_{j1}|^2 = 1 + \sum_{j=2}^{n+1} |q_{j1}|^2$$

muss $\mathbf{q}^{(1)} = \alpha \mathbf{e}^{(1)}$ mit $\alpha \in \mathbb{K}$ und $|\alpha| = 1$ gelten.

Für alle $i \in \{2, \dots, n+1\}$ folgt daraus bereits

$$q_{1i} = \langle \mathbf{e}^{(1)}, \mathbf{q}^{(i)} \rangle_2 = \alpha \langle \mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{q}^{(i)} \rangle_2 = 0,$$

da die Matrix \mathbf{Q} unitär ist und ihre Spalten deshalb eine Orthogonalbasis bilden.

Also besitzt \mathbf{Q} die Gestalt

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \alpha & & \\ & \hat{\mathbf{Q}} & \\ & & \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{Q}} := \begin{pmatrix} q_{22} & \cdots & q_{2,n+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{n+1,2} & \cdots & q_{n+1,n+1} \end{pmatrix}.$$

Damit folgt aus $\mathbf{A} = \mathbf{Q}^* \mathbf{B} \mathbf{Q}$ die Gleichung

$$\widehat{\mathbf{A}} = \widehat{\mathbf{Q}}^* \widehat{\mathbf{B}} \widehat{\mathbf{Q}}, \quad \widehat{\mathbf{A}} := \begin{pmatrix} a_{22} & \cdots & a_{2,n+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n+1,2} & \cdots & a_{n+1,n+1} \end{pmatrix}, \quad \widehat{\mathbf{B}} := \begin{pmatrix} b_{22} & \cdots & b_{2,n+1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n+1,2} & \cdots & b_{n+1,n+1} \end{pmatrix}$$

mit der irreduziblen Hessenberg-Matrix $\widehat{\mathbf{A}} \in \mathbb{K}^{n \times n}$, der Hessenberg-Matrix $\widehat{\mathbf{B}} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und der unitären Matrix $\widehat{\mathbf{Q}} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Um die Induktionsvoraussetzung anwenden zu können, müssen wir nur noch nachweisen, dass $|\hat{q}_{11}| = |q_{22}| = 1$ gilt.

Nach Voraussetzung gilt

$$\mathbf{Q} \mathbf{A} = \mathbf{B} \mathbf{Q},$$

und durch Einsetzen von $\mathbf{e}^{(1)}$ folgt

$$\begin{aligned} a_{11} \mathbf{q}^{(1)} + a_{21} \mathbf{q}^{(2)} &= \mathbf{Q}(a_{11} \mathbf{e}^{(1)} + a_{21} \mathbf{e}^{(2)}) = \mathbf{Q} \mathbf{A} \mathbf{e}^{(1)} \\ &= \mathbf{B} \mathbf{Q} \mathbf{e}^{(1)} = \mathbf{B} \mathbf{q}^{(1)} = \alpha \mathbf{B} \mathbf{e}^{(1)} = \alpha b_{11} \mathbf{e}^{(1)} + \alpha b_{21} \mathbf{e}^{(2)}. \end{aligned}$$

Durch Subtraktion von $a_{11} \mathbf{q}^{(1)} = \alpha a_{11} \mathbf{e}^{(1)}$ auf beiden Seiten erhalten wir

$$a_{21} \mathbf{q}^{(2)} = \alpha (b_{11} - a_{11}) \mathbf{e}^{(1)} + \alpha b_{21} \mathbf{e}^{(2)}.$$

Wir haben bereits gesehen, dass $q_1^{(2)} = q_{12} = 0$ gilt, also bleibt nur

$$a_{21} \mathbf{q}^{(2)} = \alpha b_{21} \mathbf{e}^{(2)},$$

übrig, und da $a_{21} \neq 0$ nach Voraussetzung gilt, haben wir

$$\mathbf{q}^{(2)} = \alpha \frac{b_{21}}{a_{21}} \mathbf{e}^{(2)}$$

bewiesen. Da \mathbf{Q} unitär ist, muss $\mathbf{q}^{(2)}$ normiert sein, also gilt

$$\begin{aligned} |q_{22}|^2 &= |\langle \mathbf{e}^{(2)}, \mathbf{q}^{(2)} \rangle_2|^2 = \left| \alpha \frac{b_{21}}{a_{21}} \langle \mathbf{e}^{(2)}, \mathbf{e}^{(2)} \rangle_2 \right|^2 = \left| \alpha \frac{b_{21}}{a_{21}} \right|^2 \\ &= \left\langle \alpha \frac{b_{21}}{a_{21}} \mathbf{e}^{(2)}, \alpha \frac{b_{21}}{a_{21}} \mathbf{e}^{(2)} \right\rangle = \langle \mathbf{q}^{(2)}, \mathbf{q}^{(2)} \rangle_2 = \|\mathbf{q}^{(2)}\|_2^2 = 1. \end{aligned}$$

Damit folgt aus der Induktionsvoraussetzung, dass die Matrix $\widehat{\mathbf{Q}}$ eine Diagonalmatrix ist, und damit auch die Matrix \mathbf{Q} . ■

Tatsächlich lässt sich der Beweis auch auf den nicht vollständig irreduziblen Fall anwenden, um ein für unsere Zwecke völlig ausreichendes Teilresultat zu erzielen:

Bemerkung 6.10 (Nicht-irreduzibler Fall) Falls \mathbf{A} in Satz 6.9 nicht irreduzibel ist, sondern lediglich

$$a_{i+1,i} \neq 0 \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, k\}$$

6 Die QR-Iteration

mit einem $k < n$ erfüllt, können wir die Induktion nach k Schritten abbrechen und erhalten immer noch

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{D} & \\ & \widehat{\mathbf{Q}} \end{pmatrix}$$

mit einer unitären Diagonalmatrix $\mathbf{D} \in \mathbb{K}^{k \times k}$ und einer nicht weiter zu untersuchenden unitären Matrix $\widehat{\mathbf{Q}} \in \mathbb{K}^{(n-k) \times (n-k)}$.

Der bisherige QR-Schritt beruhte darauf, die QR-Zerlegung $\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} \mathbf{R}^{(m+1)} = \mathbf{A}^{(m)}$ zu berechnen und dann

$$\mathbf{A}^{(m+1)} = \mathbf{R}^{(m+1)} \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} = (\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)})^* \mathbf{A}^{(m)} \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)}$$

zu konstruieren. Praktisch haben wir $\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)}$ als Folge von $n - 1$ Givens-Rotationen dargestellt (siehe (6.10)), also als

$$\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} = \mathbf{G}_1^* \mathbf{G}_2^* \dots \mathbf{G}_{n-1}^*,$$

bei denen \mathbf{G}_i^* jeweils nur auf die i -te und die $(i + 1)$ -te Komponente eines Vektors wirkten. Man kann sich leicht überlegen, dass daraus folgt, dass die erste Spalte der Transformation $\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)}$ ausschließlich von \mathbf{G}_1 abhängt, aber von keiner der anderen Transformationen.

Falls wir also eine zweite unitäre Transformation

$$\widetilde{\mathbf{Q}}^{(m+1)} = \mathbf{G}_1^* \widetilde{\mathbf{G}}_2^* \dots \widetilde{\mathbf{G}}_{n-1}^*$$

aus Givens-Rotationen $\widetilde{\mathbf{G}}_i^*$ konstruieren, die auch jeweils nur die i -te und die $(i + 1)$ -te Zeile beeinflussen, müssen beide dieselbe erste Spalte besitzen.

Wir setzen $\mathbf{P} := (\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)})^* \widetilde{\mathbf{Q}}^{(m+1)}$. Als Produkt unitärer Matrizen ist \mathbf{P} ebenfalls unitär, und infolge der Identität der ersten Spalten folgt $p_{11} = 1$.

Falls $\mathbf{A}^{(m+1)}$ irreduzibel ist und falls wir $\widetilde{\mathbf{G}}_2^*, \dots, \widetilde{\mathbf{G}}_{n-1}^*$ so gewählt haben, dass

$$\widetilde{\mathbf{A}}^{(m+1)} := (\widetilde{\mathbf{Q}}^{(m+1)})^* \mathbf{A}^{(m)} \widetilde{\mathbf{Q}}^{(m+1)}$$

wieder eine Hessenberg-Matrix ist, erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{(m+1)} &= (\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)})^* \mathbf{A}^{(m)} \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} \\ &= (\widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)})^* \widetilde{\mathbf{Q}}^{(m+1)} \mathbf{A}^{(m+1)} (\widetilde{\mathbf{Q}}^{(m+1)})^* \widehat{\mathbf{Q}}^{(m+1)} = \mathbf{P} \widetilde{\mathbf{A}}^{(m+1)} \mathbf{P}^*, \end{aligned}$$

also können wir Satz 6.9 anwenden, um zu folgern, dass sich $\mathbf{A}^{(m+1)}$ und $\widetilde{\mathbf{A}}^{(m+1)}$ nur durch eine orthogonale Diagonalskalierung unterscheiden. Derartige Skalierungen sind für die Konvergenz der QR-Iteration ohne Belang, wir können also $\widetilde{\mathbf{A}}^{(m+1)}$ anstelle von $\mathbf{A}^{(m+1)}$ verwenden. Falls $\mathbf{A}^{(m+1)}$ nicht irreduzibel sein sollte, folgt aus Bemerkung 6.10, dass wir auf einen Teil der Matrix eine nicht näher festgelegte unitäre Transformation angewendet haben. Da in diesem Fall aber ohnehin als nächstes eine Deflation durchgeführt und diese Teilmatrix separat weiter behandelt würde, schadet diese überflüssige Transformation nicht.

Der Vorteil dieses Zugangs besteht darin, dass wir $\tilde{\mathbf{A}}^{(m+1)}$ direkt aus $\mathbf{A}^{(m)}$ konstruieren können: Zunächst wählen wir die Givens-Rotation \mathbf{G}_1 so, dass das Nebendiagonalelement $a_{21}^{(m)}$ der geschifteten Matrix $\mathbf{A}^{(m)} - \mu\mathbf{I}$ eliminiert wird:

$$\mathbf{G}_1 = \begin{pmatrix} \bar{c} & \bar{s} & & & \\ -s & c & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad c = \frac{a_{11}^{(m)} - \mu}{r}, \quad s = \frac{a_{21}^{(m)}}{r}, \quad r = \sqrt{|a_{11}^{(m)} - \mu|^2 + |a_{21}^{(m)}|^2}.$$

Die durch \mathbf{G}_1 definierte unitäre Ähnlichkeitstransformation wenden wir auf $\mathbf{A}^{(m)}$ an, um die Matrix

$$\mathbf{B} := \mathbf{G}_1 \mathbf{A}^{(m)} \mathbf{G}_1^* = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & \dots & b_{1,n-1} & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & \dots & b_{2,n-1} & b_{2n} \\ \mathbf{b}_{31} & b_{32} & b_{33} & \dots & b_{3,n-1} & b_{3n} \\ & & b_{43} & \dots & b_{4,n-1} & b_{4n} \\ & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & b_{n,n-1} & b_{nn} \end{pmatrix}$$

zu erhalten. Da bei der Spaltentransformation (also der Multiplikation mit \mathbf{G}_1^* von rechts) die erste und zweite Spalte kombiniert werden, wird im Allgemeinen $b_{31} \neq 0$ gelten, die Matrix \mathbf{B} ist also keine Hessenberg-Matrix mehr.

Da wir Satz 6.9 nur auf Hessenberg-Matrizen anwenden können, müssen wir also nun die Matrix \mathbf{B} unitär so transformieren, dass sie wieder die Hessenberg-Gestalt annimmt. Also eliminieren wir b_{31} mit Hilfe einer Givens-Rotation, die die zweite und dritte Zeile kombiniert:

$$\tilde{\mathbf{G}}_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \bar{c} & \bar{s} & & \\ & -s & c & & \\ & & & 1 & \\ & & & & \ddots \\ & & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad c = \frac{b_{21}}{r}, \quad s = \frac{b_{31}}{r}, \quad r = \sqrt{|b_{21}|^2 + |b_{31}|^2}.$$

Die Ähnlichkeitstransformation mit $\tilde{\mathbf{G}}_2$ führt zwar dazu, dass der Eintrag b_{31} eliminiert wird, allerdings sorgt auch hier die Transformation der Spalten dafür, dass ein neuer Eintrag außerhalb der Hessenberg-Gestalt entsteht, denn da b_{43} in der Regel von null verschieden ist, entsteht so ein Eintrag in der vierten Zeile der zweiten Spalte, und die

6 Die QR-Iteration

resultierende Matrix hat die Form

$$\mathbf{C} := \tilde{\mathbf{G}}_2 \mathbf{B} \tilde{\mathbf{G}}_2^* = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & \dots & c_{1,n-1} & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & \dots & c_{2,n-1} & c_{2n} \\ & c_{32} & c_{33} & c_{34} & \dots & c_{3,n-1} & c_{3n} \\ & \mathbf{c}_{42} & c_{43} & c_{44} & \dots & c_{4,n-1} & c_{4n} \\ & & & c_{54} & \dots & c_{5,n-1} & c_{5n} \\ & & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & & c_{n,n-1} & c_{nn} \end{pmatrix}.$$

Das aus der Hessenberg-Form herausfallende Element c_{42} können wir wiederum mit einer Givens-Rotation $\tilde{\mathbf{G}}_3$ eliminieren, die die dritte und vierte Zeile kombiniert und zu einem neuen Element in der fünften Zeile der dritten Spalte führt. Mit jeder Givens-Rotation verschiebt sich also das störende Element weiter nach rechts unten, bis es mit einer letzten Rotation $\tilde{\mathbf{G}}_{n-1}$ endgültig eliminiert werden kann und die Matrix

$$\tilde{\mathbf{A}}^{(m+1)} = \tilde{\mathbf{G}}_{n-1} \dots \tilde{\mathbf{G}}_2 \mathbf{G}_1 \mathbf{A}^{(m)} \mathbf{G}_1^* \tilde{\mathbf{G}}_2^* \dots \tilde{\mathbf{G}}_{n-1}^*$$

wieder Hessenberg-Form hat. Gemäß Satz 6.9 unterscheidet sich diese Matrix von $\mathbf{A}^{(m+1)}$ nur durch eine unitäre Diagonalskalierung, also können wir fortfahren, als wäre sie die neue Iterierte.

Algorithmus 6.11 Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine irreduzible Hessenberg-Matrix. Der folgende Algorithmus überschreibt \mathbf{A} mit einer Matrix, die im Wesentlichen (siehe Bemerkung 6.10) mit der nächsten Iterierten der QR-Iteration mit Shift übereinstimmt.

```

r ← √(|a11 - μ|2 + |a21|2);  c ← (a11 - μ)/r;  s ← a21/r
a11 ← r;  a21 ← 0
for j = 2 to n do begin
    h ← a1j;  a1j ← c̄h + s̄a2j;  a2j ← -sh + ca2j
end
h ← a11;  a11 ← c̄h + s̄a12;  a12 ← -sh + ca12
a21 ← s̄a22;  a22 ← ca22
for i = 2 to n - 1 do begin
    γ ← s̄ai+1,i;  ai+1,i ← cai+1,i
    if |γ| ≤ ε(|ai,i-1| + |ai+1,i|) then break
    r ← √(|ai,i-1|2 + |γ|2);  c ← ai,i-1/r;  s ← γ/r
    ai,i-1 ← r
    for j = i to n do begin
        h ← aij;  aij ← c̄h + s̄ai+1,j;  ai+1,j ← -sh + cai+1,j
    end
    for k = 1 to i do begin
        h ← aki;  aki ← c̄h + s̄ak,i+1;  ak,i+1 ← -sh + cak,i+1
    end
end
end

```

7 Verfahren für Tridiagonalmatrizen

Im vorigen Kapitel haben wir gesehen, dass sich eine beliebige selbstadjungierte Matrix mit Hilfe von Householder-Spiegelungen in eine Tridiagonalmatrix überführen lässt. Für Tridiagonalmatrizen lassen sich nicht nur die verschiedenen Varianten der QR-Iteration effizient durchführen, es existieren auch eine Reihe weiterer Verfahren, die die Tridiagonalgestalt ausnutzen können.

Ein Beispiel sind Bisektionsverfahren, mit deren Hilfe sich nach Nullstellen des charakteristischen Polynoms p_A suchen lässt. Nach Lemma 3.5 sind diese Nullstellen gerade die Eigenwerte der Matrix \mathbf{A} . Ein besonderer Vorteil dieser Verfahren besteht darin, dass wir mit ihrer Hilfe nicht nur nach dem kleinsten oder größten Eigenwert suchen können, sondern auch nach dem k -ten, wobei $k \in \{1, \dots, n\}$ gelten muss.

7.1 Auswertung des charakteristischen Polynoms

Wir fixieren eine selbstadjungierte Tridiagonalmatrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \bar{\beta}_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_1 & \bar{\beta}_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1} & \bar{\beta}_{n-1} \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}. \quad (7.1)$$

Für ein $i \in \{1, \dots, n\}$ und ein $x \in \mathbb{R}$ bezeichnen wir die Determinante der i -ten Hauptuntermatrix von $x\mathbf{I} - \mathbf{A}$ mit

$$p_i(x) := \det \begin{pmatrix} x - \alpha_1 & \bar{\beta}_1 & & & \\ \beta_1 & x - \alpha_2 & \bar{\beta}_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{i-2} & x - \alpha_{i-1} & \bar{\beta}_{i-1} \\ & & & \beta_{i-1} & x - \alpha_i \end{pmatrix}.$$

Offenbar ist p_n gerade das charakteristische Polynom p_A . Für $i > 2$ erhalten wir durch Entwicklung nach der letzten Spalte und anschließend der letzten Zeile den Zusammen-

7 Verfahren für Tridiagonalmatrizen

hang

$$\begin{aligned}
 p_i(x) &:= \det \left(\begin{array}{cccc|c}
 x - \alpha_1 & \bar{\beta}_1 & & & \\
 \beta_1 & x - \alpha_2 & \bar{\beta}_2 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & \beta_{i-3} & x - \alpha_{i-2} & \bar{\beta}_{i-2} \\
 & & & \beta_{i-2} & x - \alpha_{i-1} & \bar{\beta}_{i-1} \\
 & & & & \beta_{i-1} & x - \alpha_i
 \end{array} \right) \\
 &= (x - \alpha_i) \det \left(\begin{array}{cccc|c}
 x - \alpha_1 & \bar{\beta}_1 & & & \\
 \bar{\beta}_1 & x - \alpha_2 & \bar{\beta}_2 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & \beta_{i-3} & x - \alpha_{i-2} & \bar{\beta}_{i-2} \\
 & & & \beta_{i-2} & x - \alpha_{i-1}
 \end{array} \right) \\
 &\quad - \bar{\beta}_{i-1} \det \left(\begin{array}{cccc|c}
 x - \alpha_1 & \bar{\beta}_1 & & & \\
 \beta_1 & x - \alpha_2 & \bar{\beta}_2 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & \beta_{i-3} & x - \alpha_{i-2} & \bar{\beta}_{i-2} \\
 & & & & \beta_{i-1}
 \end{array} \right) \\
 &= (x - \alpha_i) \det \left(\begin{array}{cccc|c}
 x - \alpha_1 & \bar{\beta}_1 & & & \\
 \beta_1 & x - \alpha_2 & \bar{\beta}_2 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & \beta_{i-2} & x - \alpha_{i-2} & \bar{\beta}_{i-2} \\
 & & & \beta_{i-2} & x - \alpha_{i-1}
 \end{array} \right) \\
 &\quad - |\beta_{i-1}|^2 \det \left(\begin{array}{cccc|c}
 x - \alpha_1 & \bar{\beta}_1 & & & \\
 \beta_1 & x - \alpha_2 & \bar{\beta}_2 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & \beta_{i-3} & x - \alpha_{i-3} & \bar{\beta}_{i-3} \\
 & & & \beta_{i-3} & x - \alpha_{i-2}
 \end{array} \right) \\
 &= (x - \alpha_i)p_{i-1}(x) - |\beta_{i-1}|^2 p_{i-2}(x).
 \end{aligned}$$

Wenn wir zur Vereinfachung $p_0 = 1$ einführen, erhalten wir die Rekursionsformel

$$p_i(x) = \begin{cases} 1 & \text{falls } i = 0, \\
 x - \alpha_1 & \text{falls } i = 1, \\
 (x - \alpha_i)p_{i-1}(x) - |\beta_{i-1}|^2 p_{i-2}(x) & \text{ansonsten} \end{cases} \quad \text{für alle } i \in \mathbb{N}_0, x \in \mathbb{R}, \quad (7.2)$$

aus der sich der folgende Algorithmus zur Auswertung des Tupels $(p_n(x), \dots, p_0(x))$ ergibt:

Algorithmus 7.1 (Auswertung von p_i) *Der folgende Algorithmus berechnet das Tupel $\mathbf{p} = (p_0(x), \dots, p_n(x))$ für ein beliebiges $x \in \mathbb{R}$:*

7.1 Auswertung des charakteristischen Polynoms

```
p0 ← 1; p1 ← x - α1
for i = 2 to n do
  pi ← (x - αi)pi-1 - |βi-1|2pi-2
```

Insbesondere lässt sich mit Hilfe von Algorithmus 7.1 das charakteristische Polynom $p_A = p_n$ in $\mathcal{O}(n)$ Operationen auswerten, und nebenbei werden die charakteristischen Polynome aller Hauptuntermatrizen berechnet, die sich für bestimmte Algorithmen als sehr nützlich erweisen können.

Da Eigenwerte von \mathbf{A} Nullstellen des charakteristischen Polynoms p_A sind, das wir mit Algorithmus 7.1 elegant und effizient auswerten können, bietet es sich an, Standardverfahren zur Nullstellenberechnung auf p_A anzuwenden.

Eines der einfachsten und trotzdem zuverlässigsten Verfahren ist die Bisektion, bei der eine Folge von Intervallen berechnet wird, die jeweils mindestens eine Nullstelle enthalten: Wir beginnen mit einem Intervall $[a, b]$ und fordern, dass $p_A(a)$ und $p_A(b)$ unterschiedliche Vorzeichen besitzen. Dann muss nach Mittelwertsatz in $[a, b]$ eine Nullstelle von p_A enthalten sein. Wir unterteilen $[a, b]$ in zwei Teilintervall $[a, c]$ und $[c, b]$ mit $c = (b + a)/2$ und fahren mit demjenigen Intervall fort, für das die Vorzeichenbedingung immer noch erfüllt ist.

Algorithmus 7.2 (Bisektion) Seien $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$ und $p_A(a)p_A(b) < 0$ gegeben. Dann approximiert der folgende Algorithmus einen Eigenwert von \mathbf{A} im Intervall $[a, b]$:

```
pa ← pA(a); pb ← pA(b)
while |b - a| > ε do begin
  c ← (b + a)/2
  pc ← pA(c)
  if papc < 0 then begin
    b ← c; pb ← pc
  end else begin
    a ← c; pa ← pc
  end
end
end
```

Dieser Algorithmus benötigt pro Iterationsschritt nur eine Auswertung des Polynoms p_A , die sich, wie wir bereits gesehen haben, in $\mathcal{O}(n)$ Operationen durchführen lässt. Da sich mit jedem Schritt das Intervall halbiert, können wir in $\mathcal{O}(\log_2(1/\epsilon))$ Iterationen eine Genauigkeit von $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$ erreichen.

Ein Vorteil dieses Algorithmus besteht darin, dass wir das zu untersuchende Intervall explizit vorgeben können und dass er sehr stabil arbeitet. Ein Nachteil besteht darin, dass nicht klar ist, wie man ein Startintervall $[x_0, y_0]$ finden kann, das die benötigte Vorzeichenbedingung erfüllt.

7 Verfahren für Tridiagonalmatrizen

Durch Differenzieren der Rekursionsformel für p_A können wir die Rekursionsformel

$$p'_i(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } i = 0, \\ 1 & \text{falls } i = 1, \\ p_{i-1}(x) + (x - \alpha_i)p'_{i-1}(x) & \text{ansonsten} \\ - |\beta_{i-1}|^2 p'_{i-2}(x) & \end{cases} \quad \text{für alle } i \in \mathbb{N}_0, x \in \mathbb{R} \quad (7.3)$$

gewinnen, mit der sich die erste Ableitung von p_A ebenfalls effizient berechnen lässt, so dass wir statt der Bisektion auch auf das Newton-Verfahren zurückgreifen können. Zwar kann das Newton-Verfahren wesentlich schneller als das Bisektionsverfahren konvergieren, aber das passiert in der Regel nur, wenn ein guter Startwert vorliegt. Auch bei diesem Zugang stellt sich also die Frage nach geeigneten Startwerten.

7.2 Sturmsche Ketten

Wir sind daran interessiert, das einfache Bisektionsverfahren so zu modifizieren, dass wir nicht mehr auf eine Vorzeichenbedingung angewiesen sind, sondern eine Voraussetzung finden, die einfacher zu erfüllen ist.

Dazu gehen wir zunächst davon aus, dass alle Nullstellen von p_A einfach sind und wir sie deshalb in die Reihenfolge

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n$$

bringen können. Nach dem Satz von Rolle liegt zwischen zwei dieser Nullstellen jeweils mindestens eine Nullstelle der Ableitung p'_A des charakteristischen Polynoms, wir können also für jedes $i \in \{1, \dots, n-1\}$ ein $\lambda_i^{(1)} \in (\lambda_i, \lambda_{i+1})$ mit $p'_A(\lambda_i^{(1)}) = 0$ finden. Wir erhalten

$$\lambda_1 < \lambda_1^{(1)} < \lambda_2 < \lambda_2^{(1)} < \lambda_3 < \dots < \lambda_{n-1} < \lambda_{n-1}^{(1)} < \lambda_n.$$

Da p'_A nur noch ein Polynom der Ordnung $n-1$ ist, kann es keine weiteren Nullstellen außer $\lambda_1^{(1)}, \dots, \lambda_{n-1}^{(1)}$ besitzen.

In ähnlicher Weise können wir beweisen, dass die Nullstellen der $(i+1)$ -ten Ableitung von p_A gerade die der i -ten Ableitung trennen, solange $i < n$ gilt.

Falls ξ eine einfache Nullstelle von p_A ist, können wir ein $\epsilon > 0$ so finden, dass p'_A in $[\xi - \epsilon, \xi + \epsilon]$ keine Nullstelle aufweist. Mit dem Mittelwertsatz der Differentialrechnung erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{p_A(\xi + \epsilon) - p_A(\xi)}{\epsilon} &= p'_A(\eta_+), & \frac{p_A(\xi) - p_A(\xi - \epsilon)}{\epsilon} &= p'_A(\eta_-), \\ p_A(\xi + \epsilon) &= p_A(\xi) + \epsilon p'_A(\eta_+), & p_A(\xi - \epsilon) &= p_A(\xi) - \epsilon p'_A(\eta_-), \end{aligned}$$

so dass sich

$$\begin{aligned} p_A(\xi + \epsilon)p_A(\xi - \epsilon) &= p_A(\xi)^2 + \epsilon p_A(\xi)(p'_A(\eta_+) - p'_A(\eta_-)) - \epsilon^2 p'_A(\eta_+)p'_A(\eta_-) \\ &= -\epsilon^2 p'_A(\eta_+)p'_A(\eta_-) < 0 \end{aligned}$$

ergibt, weil ξ eine Nullstelle des Polynoms p_A ist und $p'_A(\eta_+)$ und $p'_A(\eta_-)$ dasselbe Vorzeichen besitzen. An jeder einfachen Nullstelle wechselt p_A also das Vorzeichen. Wenn wir Nullstellen zählen wollen, bietet es sich demnach an, nach Vorzeichenwechseln zu suchen.

Es lässt sich leicht nachprüfen, dass der führende Koeffizient des charakteristischen Polynoms gerade 1 ist, so dass

$$\lim_{x \rightarrow \infty} p_A^{(m)}(x) = \infty \quad \text{für alle } m \in \{0, \dots, n-1\}$$

gilt. Wir haben bereits gesehen, dass die Nullstellen der Ableitung $p_A^{(m+1)}$ zwischen denen der Funktion $p_A^{(m)}$ liegen, also muss insbesondere

$$p_A^{(m)}(x) > 0 \quad \text{für alle } x > \lambda, \quad m \in \{0, \dots, n\}$$

gelten. Für hinreichend großes x sind also die Vorzeichen aller Ableitungen des Polynoms p_A identisch.

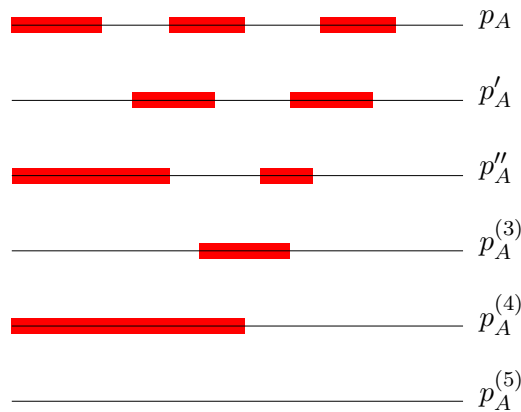


Abbildung 7.1: Vorzeichen eines charakteristischen Polynoms und seiner Ableitungen im Fall $n = 5$. Rot markiert Bereiche, in denen das Vorzeichen negativ ist.

In Abbildung 7.1 sind die Vorzeichen eines charakteristischen Polynoms und seiner Ableitungen für den Fall $n = 5$ dargestellt. Die Bereiche, in denen die einzelnen Funktionen negativ sind, sind rot markiert. Für unsere Zwecke von Bedeutung ist die Beobachtung, dass in jedem Punkt x die Anzahl der Vorzeichenwechsel *zwischen den Ableitungen* $p_A(x), p'_A(x), p''_A(x), \dots, p_A^{(n)}(x)$ gerade die Anzahl der Nullstellen größer als x angibt.

Diese Eigenschaft verdanken wir der Tatsache, dass zwischen zwei einfachen Nullstellen unserer Polynome jeweils genau eine einfache Nullstelle seiner Ableitung liegt, so dass „rechts“ von einem Vorzeichenwechsel von $p_A^{(m)}$ immer die Vorzeichen von $p_A^{(m)}$ und $p_A^{(m+1)}$ übereinstimmen. Falls $p_A^{(m)}$ sein Vorzeichen wechselt, erhöht sich dadurch die Anzahl der Vorzeichenwechsel zwischen den Ableitungen um eins.

7 Verfahren für Tridiagonalmatrizen

Die Ableitungen des charakteristischen Polynoms können wir zwar im Prinzip berechnen, sehr viel eleganter ist es allerdings, festzustellen, dass die bei seiner Auswertung berechneten Hilfspolynome p_m die Rolle der Ableitungen $p_A^{(n-m)}$ übernehmen können. Dadurch können wir die Vorzeichenwechsel mit sehr geringem zusätzlichem Aufwand zählen.

Die für uns interessanten Eigenschaften eines Tupels von Funktionen fasst die folgende Definition zusammen:

Definition 7.3 (Sturmsche Kette) Ein Tupel (p_0, p_1, \dots, p_n) von reellen Polynomen heißt Sturmsche Kette, wenn

1. p_n nur einfache Nullstellen besitzt,
2. $p_{n-1}(\xi)p_n'(\xi) > 0$ für alle reellen Nullstellen ξ von p_n erfüllt ist,
3. $p_{i+1}(\xi)p_{i-1}(\xi) < 0$ für $i \in \{1, \dots, n-1\}$ und reelle Nullstellen ξ von p_i gilt sowie
4. p_0 keine Nullstelle besitzt.

Wir haben bereits gesehen, dass die erste Bedingung sicher stellt, dass zwischen zwei Nullstellen von p_n jeweils genau eine Nullstelle von p_n' liegt. Die zweite Bedingung sorgt dafür, dass sich das Vorzeichen des Polynoms p_{n-1} wie das der Ableitung p_n verhält. Die dritte Bedingung ist dafür verantwortlich, dass bei Nullstellen von Funktionen außer p_n die Anzahl der Vorzeichenwechsel gleich bleibt. Mit der vierten Bedingung wird schließlich p_0 als „Referenzvorzeichen“ etabliert.

Nun stehen wir vor der Aufgabe, nachzuweisen, dass die durch die Rekursionsformel (7.2) definierten Polynome eine Sturmsche Kette bilden.

Lemma 7.4 (Sturmsche Kette) Falls \mathbf{A} irreduzibel ist, falls also $\beta_i \neq 0$ für alle $i \in \{1, \dots, n-1\}$ gilt, bilden die durch (7.2) definierten Polynome p_0, \dots, p_n eine Sturmsche Kette.

Beweis. Der Beweis beruht darauf, Eigenvektoren zu den Eigenwerten der Matrix \mathbf{A} zu konstruieren. Für ein $x \in \mathbb{R}$ suchen wir einen Vektor $\mathbf{e}(x) \in \mathbb{K}^n$, der „möglichst nahe“ am Kern von $x\mathbf{I} - \mathbf{A}$ liegt: Die ersten $n-1$ Komponenten von $(x\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{e}(x)$ sollen verschwinden.

Damit $\mathbf{e}(x)$ nicht der Nullvektor wird, setzen wir $e_1(x) = 1$. Durch Einsetzen in die erste Zeile der Matrix erhalten wir nun

$$(x - \alpha_1)e_1(x) + \bar{\beta}_1 e_2(x) = 0,$$

$$e_2(x) = -\frac{x - \alpha_1}{\bar{\beta}_1} e_1(x) = -\frac{p_1(x)}{\bar{\beta}_1}$$

während Einsetzen in die i -te Zeile für $i \in \{2, \dots, n-1\}$ die Gleichung

$$(\beta_{i-1}e_{i-1}(x) + (x - \alpha_i)e_i(x) + \bar{\beta}_i e_{i+1}(x)) = 0,$$

$$e_{i+1}(x) = -\frac{(x - \alpha_i)e_i(x) + \beta_{i-1}e_{i-1}(x)}{\bar{\beta}_i}$$

für $i \in \{1, \dots, n-1\}$ ergibt. Im Zähler dieses Terms erkennen wir Teile der Rekursionsformel (7.2) wieder und versuchen den Ansatz

$$e_i(x) = (-1)^{i-1} \frac{p_{i-1}(x)}{\bar{\beta}_1 \dots \bar{\beta}_{i-1}} \quad \text{für } i \in \{2, \dots, n\}$$

zu verwenden, bei dem unsere Gleichung die Form

$$\begin{aligned} e_{i+1}(x) &= -\frac{(x - \alpha_i)(-1)^{i-1}p_{i-1}(x)/(\bar{\beta}_1 \dots \bar{\beta}_{i-1}) + \beta_{i-1}(-1)^{i-2}p_{i-2}(x)/(\bar{\beta}_1 \dots \bar{\beta}_{i-2})}{\bar{\beta}_i} \\ &= (-1)^i \frac{(x - \alpha_i)p_{i-1}(x) - |\beta_{i-1}|^2 p_{i-2}(x)}{\bar{\beta}_1 \dots \bar{\beta}_i} = (-1)^i \frac{p_i(x)}{\bar{\beta}_1 \dots \bar{\beta}_i} \end{aligned}$$

annimmt. Mit einer einfachen Induktion folgt, dass der durch

$$e_i(x) = \begin{cases} 1 & \text{falls } i = 1, \\ (-1)^{i-1} \frac{p_{i-1}(x)}{\bar{\beta}_1 \dots \bar{\beta}_{i-1}} & \text{ansonsten} \end{cases} \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, n\}$$

definierte Vektor die gewünschten Gleichungen erfüllt.

Für die n -te Zeile schließlich erhalten wir

$$\begin{aligned} \beta_{n-1}e_{n-1}(x) + (x - \alpha_n)e_n(x) &= \beta_{n-1}(-1)^{n-2} \frac{p_{n-2}(x)}{\bar{\beta}_1 \dots \bar{\beta}_{n-2}} + (x - \alpha_n)(-1)^{n-1} \frac{p_{n-1}(x)}{\bar{\beta}_1 \dots \bar{\beta}_{n-1}} \\ &= (-1)^{n-1} \frac{(x - \alpha_n)p_{n-1}(x) - |\beta_{n-1}|^2 p_{n-2}(x)}{\bar{\beta}_1 \dots \bar{\beta}_{n-1}} \\ &= (-1)^{n-1} \frac{p_n(x)}{\bar{\beta}_1 \dots \bar{\beta}_{n-1}} =: \gamma(x). \end{aligned}$$

Falls $p_n(x) = 0$ gilt, folgt also die Gleichung $(x\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{e}(x) = \mathbf{0}$, somit ist $\mathbf{e}(x)$ dann ein Eigenvektor der Matrix \mathbf{A} zu dem Eigenwert x . Im allgemeinen Fall haben wir

$$(x\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{e}(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \gamma(x) \end{pmatrix} \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R} \quad (7.4)$$

bewiesen. Indem wir diese Funktion nach x differenzieren, erhalten wir

$$\mathbf{e}(x) + (x\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{e}'(x) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \gamma'(x) \end{pmatrix} \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}. \quad (7.5)$$

7 Verfahren für Tridiagonalmatrizen

Sei nun $\xi \in \mathbb{R}$ eine Nullstelle des Polynoms p_n , also auch des Polynoms γ . Indem wir (7.5) mit $\mathbf{e}(\xi)$ multiplizieren erhalten wir wegen $(x\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{e}(x) = \mathbf{0}$ und da \mathbf{A} selbstadjungiert ist die Gleichung

$$\begin{aligned} 0 < \|\mathbf{e}(\xi)\|_2^2 &= \|\mathbf{e}(\xi)\|_2^2 + \langle \mathbf{e}'(\xi), (\xi\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{e}(\xi) \rangle_2 = \langle \mathbf{e}(\xi), \mathbf{e}(\xi) \rangle_2 + \langle (\xi\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{e}'(\xi), \mathbf{e}(\xi) \rangle_2 \\ &= \langle \mathbf{e}(\xi) + (\xi\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{e}'(\xi), \mathbf{e}(\xi) \rangle_2 = \gamma'(\xi)e_n(\xi) = \frac{p'_n(\xi)p_{n-1}(\xi)}{|\beta_1|^2 \dots |\beta_{n-1}|^2}, \end{aligned}$$

also insbesondere die zweite Voraussetzung der Definition 7.3.

Damit kann $p'_n(\xi)$ in den Nullstellen des Polynoms p_n nicht gleich null sein, also müssen alle Nullstellen dieses Polynoms einfach sein. Damit gilt auch die erste Voraussetzung der Definition.

Zum Nachweis der dritten Voraussetzung setzen wir die Rekursionsformel (7.2) ein. Sei $i \in \{1, \dots, n-1\}$, und sei $\xi \in \mathbb{R}$ eine Nullstelle von p_i . Dann folgt aus (7.2) die Gleichung

$$p_{i+1}(\xi) = -|\beta_i|^2 p_{i-1}(\xi),$$

also insbesondere $p_{i+1}(\xi)p_{i-1}(\xi) \leq 0$. Falls nun $p_{i+1}(\xi) = 0$ gelten würde, könnten wir die Rekursionsformel zu

$$p_{i-1}(x) = \frac{1}{|\beta_i|^2} ((\xi - \alpha_{i+1})p_i(\xi) - p_{i+1}(\xi)) = 0$$

umformen und induktiv fortfahren, um zu dem Widerspruch $0 = p_{i+1}(\xi) = p_i(\xi) = \dots = p_0(\xi) \neq 0$ zu gelangen. Also muss $p_{i+1}(\xi) \neq 0$ gelten, und damit $p_{i+1}(\xi)p_{i-1}(\xi) < 0$. ■

Aus diesem Lemma lassen sich bereits erste nützliche Aussagen über selbstadjungierte Tridiagonalmatrizen gewinnen.

Folgerung 7.5 (Einfache Eigenwerte) *Eine irreduzible selbstadjungierte Tridiagonalmatrix besitzt nur einfache Eigenwerte.*

Beweis. Mit Lemma 7.4 folgt die Aussage unmittelbar aus der ersten Bedingung in Definition 7.3. ■

Folgerung 7.6 (Trennungseigenschaft) *Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine irreduzible selbstadjungierte Tridiagonalmatrix. Seien $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n$ ihre Eigenwerte und $\lambda'_1 < \lambda'_2 < \dots < \lambda'_{n-1}$ die Eigenwerte ihrer $(n-1)$ -ten Hauptuntermatrix \mathbf{A}_{n-1} . Dann gilt*

$$\lambda_1 < \lambda'_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_{n-1} < \lambda'_{n-1} < \lambda_n.$$

Beweis. Sei $i \in \{1, \dots, n-1\}$. Nach der zweiten Bedingung der Definition 7.3 können $p'_A(\lambda_i)$ und $p'_A(\lambda_{i+1})$ nicht gleich null sein, λ_i und λ_{i+1} sind also einfache Nullstellen des Polynoms p_A .

Nach unserer Vorbetrachtung besitzt p'_A dann genau eine einfache Nullstelle in $(\lambda_i, \lambda_{i+1})$, demnach müssen sich die Vorzeichen von $p'_A(\lambda_i)$ und $p'_A(\lambda_{i+1})$ unterscheiden.

Nach der zweiten Bedingung der Definition 7.3 besitzt p_{n-1} in λ_i und λ_{i+1} dieselben unterschiedlichen Vorzeichen wie p'_A , also muss auch p_{n-1} mindestens eine Nullstelle λ'_i in $(\lambda_i, \lambda_{i+1})$ besitzen.

Damit haben wir $n - 1$ Nullstellen von p_{n-1} gefunden, und da p_{n-1} nicht das Nullpolynom ist, können nach dem Identitätssatz für Polynome keine weiteren Nullstellen existieren. ■

Die für uns entscheidende Eigenschaft der Sturmschen Kette besteht darin, dass ihre Vorzeichenwechsel eine Beziehung zu der Anzahl der Nullstellen besitzen, so dass wir Aussagen darüber treffen können, wieviele Nullstellen in einem Intervall liegen, ohne sie explizit berechnen zu müssen.

Satz 7.7 (Nullstellenzähler) Sei (p_0, p_1, \dots, p_n) eine Sturmsche Kette. Wir definieren für alle $x \in \mathbb{R}$

$$W_x := \{i \in \{0, \dots, n-1\} : p_i(x)p_{i+1}(x) < 0 \text{ oder } p_i(x) = 0\}$$

und die Funktion

$$w : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{N}_0, \quad x \mapsto |W_x|,$$

die x die Mächtigkeit von W_x zuordnet. Seien $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$ gegeben. Dann besitzt p_n genau $w(b) - w(a)$ Nullstellen im Intervall $[a, b)$.

Beweis. Offensichtlich ändert sich w nur, wenn eines der Polynome $(p_i)_{i=0}^n$ sein Vorzeichen ändert, also eine Nullstelle passiert. Wir definieren für alle $x \in \mathbb{R}$

$$N_x := \{i \in \{0, \dots, n\} : p_i(x) = 0\}.$$

Infolge der vierten Bedingung von Definition 7.3 gilt $0 \notin N_x$ für alle $x \in \mathbb{R}$. Wir werden nun nachweisen, dass sich die Mächtigkeit von W_x genau dann um eins erhöht, wenn x eine Nullstelle von p_n passiert.

Sei $\xi \in \mathbb{R}$ mit $N_\xi \neq \emptyset$. Da nicht-konstante Polynome nur endlich viele Nullstellen besitzen können, können sich die Nullstellen nicht häufen, also muss ein $\epsilon \in \mathbb{R}_{>0}$ so existieren, dass $N_x = \emptyset$ für alle $x \in [\xi - \epsilon, \xi + \epsilon] \setminus \{\xi\}$ gilt.

Sei $i \in N_\xi$. Falls $i < n$ gilt, folgt aus Bedingung 3 von Definition 7.3, dass $p_{i-1}(\xi)p_{i+1}(\xi) < 0$ gilt, also insbesondere $i - 1 \notin N_\xi$ und $i + 1 \notin N_\xi$. Nach Wahl von ϵ besitzen dann p_{i-1} und p_{i+1} keine Nullstellen in $[\xi - \epsilon, \xi + \epsilon]$, so dass wir

$$p_{i-1}(x)p_{i+1}(x) < 0 \quad \text{für alle } x \in [\xi - \epsilon, \xi + \epsilon]$$

erhalten. Sei $x \in [\xi - \epsilon, \xi + \epsilon]$.

Falls $p_{i-1}(x)p_i(x) < 0$ gilt, folgt $p_{i+1}(x)p_i(x) > 0$, also $|W_x \cap \{i-1, i\}| = |\{i-1\}| = 1$. Falls $p_{i-1}(x)p_i(x) > 0$ gilt, folgt $p_{i+1}(x)p_i(x) < 0$, also $|W_x \cap \{i-1, i\}| = |\{i\}| = 1$. Falls schließlich $p_{i-1}(x)p_i(x) = 0$ gilt, folgt $p_i(x) = 0$, also $|W_x \cap \{i-1, i\}| = |\{i-1\}| = 1$. Also ändern Nullstellen von p_i für $i > 0$ nichts an der Mächtigkeit der Menge W_x .

Falls $i = n$ gilt, ergibt sich aus der zweiten Bedingung von Definition 7.3, dass $p_{n-1}(\xi)p'_n(\xi) < 0$ gelten muss, also insbesondere $p_{n-1}(\xi) \neq 0$ und damit $n - 1 \notin N_\xi$. Da

7 Verfahren für Tridiagonalmatrizen

auch $p'_n(\xi) \neq 0$ gilt, können wir ein $\delta \in (0, \epsilon]$ so wählen, dass p'_n in $[\xi - \delta, \xi + \delta]$ keine Nullstellen besitzt. Dann folgt

$$p_{n-1}(\xi)p'_n(y) < 0 \quad \text{für alle } y \in [\xi - \delta, \xi + \delta].$$

Mit dem Hauptsatz der Integral- und Differentialrechnung erhalten wir

$$p_{n-1}(\xi)p_n(x) = \int_{\xi}^x p_{n-1}(\xi)p'_n(y) dy < 0 \quad \text{für alle } x \in (\xi, \xi + \delta),$$

$$p_{n-1}(\xi)p_n(x) = - \int_x^{\xi} p_{n-1}(\xi)p'_n(y) dy > 0 \quad \text{für alle } x \in [\xi - \delta, \xi),$$

und da p_{n-1} nach Definition keine Nullstellen in $[\xi - \delta, \xi + \delta]$ besitzen kann, folgt per Stetigkeit schließlich

$$p_{n-1}(x)p_n(x) < 0 \implies W_x \cap \{n-1, n\} = \{n-1\} \quad \text{für alle } x \in (\xi, \xi + \delta),$$

$$p_{n-1}(x)p_n(x) > 0 \implies W_x \cap \{n-1, n\} = \emptyset \quad \text{für alle } x \in [\xi - \delta, \xi).$$

Also erhöhen Nullstellen von p_n die Mächtigkeit der Menge W_x gerade um eins. ■

Der Satz 7.7 enthält lediglich eine Aussage über die Differenzen $w(b) - w(a)$ der Funktion w . Das folgende Lemma bestimmt w näher:

Lemma 7.8 *Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine irreduzible selbstadjungierte Tridiagonalmatrix, sei λ_1 ihr kleinster Eigenwert und λ_n ihr größter. Für alle $x \in \mathbb{R}_{\leq \lambda_1}$ gilt $w(x) = 0$, und für alle $x \in \mathbb{R}_{> \lambda_n}$ gilt $w(x) = n$.*

Beweis. Nach Konstruktion des Polynoms p_i hat sein führender Koeffizient das Vorzeichen $(-1)^i$. Für $x \rightarrow -\infty$ muss also $p_i(x) \rightarrow \infty$ gelten, somit existiert ein $x_- \in \mathbb{R}$ mit

$$p_i(x) > 0$$

für alle $i \in \{0, \dots, n\}$ und alle $x \in \mathbb{R}_{\leq x_-}$. Es folgt $w(x_-) = 0$. Da w seinen Wert nur bei Nullstellen von p_n ändert und nicht negativ sein kann, folgt der erste Teil der Behauptung. Da p_n genau n einfache Nullstellen besitzt, folgt die zweite Aussage direkt aus Satz 7.7. ■

Auf dieser Grundlage können wir einen Algorithmus konstruieren, der einen beliebigen Eigenwert bestimmt:

Algorithmus 7.9 *Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine irreduzible selbstadjungierte Tridiagonalmatrix, seien $\lambda_1 < \dots < \lambda_n$ ihre Eigenwerte. Sei $k \in \{1, \dots, n\}$, und seien Intervallgrenzen $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$, $w(a) < k$ und $w(b) \geq k$ gegeben. Dann bestimmt der folgende Algorithmus eine Approximation von λ_k :*


```

while |b - a| > ε do begin
  c ← (b + a)/2
  if w(c) ≥ k then
    b ← c
  else
    a ← c
end

```

Auch dieser Bisektionsalgorithmus halbiert den Fehler in jedem Schritt und benötigt dank Algorithmus 7.1 nur $\mathcal{O}(n)$ Operationen dafür. Allerdings ist auch er auf geeignete Startwerte angewiesen und nur auf selbstadjungierte irreduzible Tridiagonalmatrizen anwendbar.

7.3 Gershgorin-Kreise

Ein Problem bei den beschriebenen Bisektionsverfahren besteht darin, dass geeignete Startwerte gegeben sein müssen. Wir werden jetzt eine Methode einführen, mit der sich eine Abschätzung für die Lage des Spektrums und damit auch eine Konstruktion für ein das gesamte Spektrum einschließendes Intervall gewinnen lässt.

Lemma 7.10 (Von Neumannsche Reihe) *Sei $\|\cdot\|$ eine Norm auf \mathbb{K}^n . Wir bezeichnen die von ihr induzierte Operatornorm auf $\mathbb{K}^{n \times n}$ ebenfalls mit $\|\cdot\|$. Sei $\mathbf{X} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit $\|\mathbf{X}\| < 1$ gegeben. Dann ist $\mathbf{I} - \mathbf{X}$ regulär und es gelten*

$$(\mathbf{I} - \mathbf{X})^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{X}^k, \quad \|(\mathbf{I} - \mathbf{X})^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|\mathbf{X}\|}.$$

Beweis. Da $\|\mathbf{X}\| < 1$ gilt, kann 1 kein Eigenwert von \mathbf{X} sein. Also ist 0 kein Eigenwert von $\mathbf{I} - \mathbf{X}$, und damit ist diese Matrix regulär.

Ausgangspunkt unserer Betrachtung ist die Gleichung

$$(\mathbf{I} - \mathbf{X}) \sum_{k=0}^m \mathbf{X}^k = \sum_{k=0}^m \mathbf{X}^k - \sum_{k=0}^m \mathbf{X}^{k+1} = \mathbf{I} - \mathbf{X}^{m+1} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}.$$

Durch Multiplikation mit $(\mathbf{I} - \mathbf{X})^{-1}$ erhalten wir

$$\sum_{k=0}^m \mathbf{X}^k = (\mathbf{I} - \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{X}^{m+1}) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}.$$

Wegen der Submultiplikativität der induzierten Norm folgt aus $\|\mathbf{X}\| < 1$ die Gleichung

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \|\mathbf{X}^{m+1}\| \leq \lim_{m \rightarrow \infty} \|\mathbf{X}\|^{m+1} = 0,$$

und durch Einsetzen in die vorangehende Gleichung erhalten wir so

$$\sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{X}^k = (\mathbf{I} - \mathbf{X})^{-1}.$$

7 Verfahren für Tridiagonalmatrizen

Für die Norm ergibt sich mit der geometrischen Summenformel

$$\|(\mathbf{I} - \mathbf{X})^{-1}\| = \left\| \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{X}^k \right\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \|\mathbf{X}\|^k = \frac{1}{1 - \|\mathbf{X}\|},$$

also die gewünschte Abschätzung. ■

Indem wir dieses Lemma auf eine geeignete Norm anwenden, können wir Aussagen über die Lage der Eigenwerte einer beliebigen Matrix gewinnen. Die geeignete Norm ist dabei die von der Maximumnorm

$$\|\mathbf{x}\|_{\infty} := \max\{|x_i| : i \in \{1, \dots, n\}\} \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$$

induzierte Zeilensummennorm.

Lemma 7.11 (Zeilensummennorm) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Für die von der Maximumnorm induzierte Matrixnorm

$$\|\mathbf{A}\|_{\infty} = \sup \left\{ \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_{\infty}}{\|\mathbf{x}\|_{\infty}} : \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\} \right\}$$

ist gegeben durch das Maximum der Zeilensummen

$$\|\mathbf{A}\|_{\infty} = \max \left\{ \sum_{j=1}^n |a_{ij}| : i \in \{1, \dots, n\} \right\}.$$

Beweis. Wir setzen

$$z := \max \left\{ \sum_{j=1}^n |a_{ij}| : i \in \{1, \dots, n\} \right\}$$

und beweisen $\|\mathbf{A}\|_{\infty} \leq z$ und $\|\mathbf{A}\|_{\infty} \geq z$.

Für den ersten Schritt wählen wir einen Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$. Mit der Dreiecksungleichung erhalten wir

$$\left| \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right| \leq \sum_{j=1}^n |a_{ij}| |x_j| \leq \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \|\mathbf{x}\|_{\infty} \leq z \|\mathbf{x}\|_{\infty}$$

für jedes $i \in \{1, \dots, n\}$, also nach Definition $\|\mathbf{A}\|_{\infty} \leq z$.

Für den zweiten Schritt fixieren wir ein $i \in \{1, \dots, n\}$ mit

$$z = \sum_{j=1}^n |a_{ij}|.$$

Jeder Zahl können wir durch

$$\operatorname{sgn}(z) := \begin{cases} z/|z| & \text{falls } z \neq 0, \\ 1 & \text{ansonsten} \end{cases} \quad \text{für alle } z \in \mathbb{K}$$

ein Vorzeichen zuordnen, das $z = |z| \operatorname{sgn}(z)$ erfüllt. Wir definieren einen Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$ durch

$$x_j := \frac{1}{\operatorname{sgn}(a_{ij})} \quad \text{für alle } j \in \{1, \dots, n\}$$

und erhalten

$$z = \sum_{j=1}^n |a_{ij}| = \sum_{j=1}^n \frac{|a_{ij}| \operatorname{sgn}(a_{ij})}{\operatorname{sgn}(a_{ij})} = \sum_{j=1}^n \frac{a_{ij}}{\operatorname{sgn}(a_{ij})} = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j,$$

also insbesondere $\|\mathbf{Ax}\|_\infty \geq z$ und wegen $\|\mathbf{x}\|_\infty = 1$ damit auch $\|\mathbf{A}\|_\infty \geq z$. ■

Satz 7.12 (Gershgorin-Kreise) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Definiere die Kreisscheiben

$$D_i := \left\{ z \in \mathbb{K} : |z - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^n |a_{ij}| \right\} \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, n\}.$$

Dann gilt

$$\sigma(\mathbf{A}) \subseteq \bigcup_{i=1}^n D_i,$$

das Spektrum ist also in der Vereinigung aller Kreisscheiben enthalten.

Beweis. Sei $\lambda \in \sigma(\mathbf{A})$. Falls $\lambda = a_{ii}$ für ein $i \in \{1, \dots, n\}$ gilt, folgt sofort $\lambda \in D_i$.

Gelte also nun $\lambda \neq a_{ii}$ für alle $i \in \{1, \dots, n\}$. Sei $\mathbf{D} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ die Diagonalmatrix, deren Diagonale mit der Diagonalen von \mathbf{A} übereinstimmt. Sei $\mathbf{F} := \mathbf{A} - \mathbf{D}$. Nach Voraussetzung ist $\mathbf{D} - \lambda \mathbf{I}$ regulär und $\mathbf{D} - \lambda \mathbf{I} + \mathbf{F} = \mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}$ singular. Also ist auch

$$(\mathbf{D} - \lambda \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = (\mathbf{D} - \lambda \mathbf{I})^{-1}(\mathbf{D} - \lambda \mathbf{I} + \mathbf{F}) = \mathbf{I} + (\mathbf{D} - \lambda \mathbf{I})^{-1}\mathbf{F}$$

singular. Daraus folgt mit Lemma 7.10 bereits

$$\|(\mathbf{D} - \lambda \mathbf{I})^{-1}\mathbf{F}\| \geq 1$$

für jede beliebige induzierte Norm. Wir verwenden die Maximumnorm und erhalten dank Lemma 7.11 damit

$$1 \leq \|(\mathbf{D} - \lambda \mathbf{I})^{-1}\mathbf{F}\|_\infty = \max \left\{ \sum_{j=1}^n \frac{|f_{ij}|}{|d_{ii} - \lambda|} : i \in \{1, \dots, n\} \right\},$$

also gibt es ein $i \in \{1, \dots, n\}$ mit

$$1 \leq \sum_{j=1}^n \frac{|f_{ij}|}{|d_{ii} - \lambda|},$$

7 Verfahren für Tridiagonalmatrizen

und wir erhalten

$$|a_{ii} - \lambda| = |d_{ii} - \lambda| \leq \sum_{j=1}^n |f_{ij}| = \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^n |a_{ij}|$$

und damit auch $\lambda \in D_i$, also die Behauptung. ■

Im von uns untersuchten Fall selbstadjungierter Tridiagonalmatrizen \mathbf{A} sind die sogenannten *Gershgorin-Kreise* D_i besonders einfach zu bestimmen: Wenn wir $\beta_0 = \beta_n = 0$ setzen, erhalten wir

$$D_i = \{z \in \mathbb{C} : |z - \alpha_i| \leq |\beta_{i-1}| + |\beta_i|\}.$$

Da \mathbf{A} selbstadjungiert ist, ist das Spektrum reell, es gilt also

$$\sigma(\mathbf{A}) \subseteq \bigcup_{i=1}^n [\alpha_i - (|\beta_{i-1}| + |\beta_i|), \alpha_i + (|\beta_{i-1}| + |\beta_i|)],$$

so dass wir folgern können, dass das Spektrum in dem Intervall $[a, b]$ mit

$$\begin{aligned} a &:= \min\{\alpha_i - |\beta_{i-1}| - |\beta_i| : i \in \{1, \dots, n\}\}, \\ b &:= \max\{\alpha_i + |\beta_{i-1}| + |\beta_i| : i \in \{1, \dots, n\}\} \end{aligned}$$

enthalten ist. Dieses Intervall erfüllt also die Voraussetzungen von Algorithmus 7.9 für jedes $k \in \{1, \dots, n\}$, so dass wir gezielt jeden beliebigen Eigenwert berechnen können.

7.4 Trägheitssatz und Dreieckszerlegungen

Der Einsatz der Sturmschen Ketten kann zu Schwierigkeiten führen, falls Rundungsfehler die Vorzeichen der einzelnen Polynome verfälschen. Es gibt allerdings alternative Möglichkeiten, um festzustellen, wie viele Eigenwerte kleiner oder größer als eine gegebene Zahl sind: Wir untersuchen, wieviele negative und positive Eigenwerte die „spektral verschobene“ Matrix $\mathbf{A} - \mu\mathbf{I}$ besitzt. Die Anzahl der Eigenwerte, die echt kleiner als μ sind, ist gerade die Anzahl der negativen Eigenwerte der Matrix $\mathbf{A} - \mu\mathbf{I}$.

Die Anzahl der negativen Eigenwerte lässt sich bestimmen, ohne sie explizit zu berechnen, indem wir geeignete Transformationen auf die Matrix anwenden, die wesentlich einfacher handzuhaben sind als die bisher verwendeten Ähnlichkeitstransformationen.

Definition 7.13 (Kongruenztransformation) Sei $\mathbf{T} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine reguläre Matrix. Die Abbildung

$$\mathbb{K}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{K}^{n \times n}, \quad \mathbf{A} \mapsto \mathbf{T}^* \mathbf{A} \mathbf{T},$$

nennen wir die zu \mathbf{T} gehörende Kongruenztransformation.

Für unitäre Matrizen \mathbf{T} ist die Kongruenztransformation auch eine Ähnlichkeitstransformation, im allgemeinen Fall gilt das allerdings nicht. Trotzdem können Kongruenztransformationen sehr nützlich sein: Der *Trägheitssatz von Sylvester* besagt, dass die Anzahl der positiven und negativen Eigenwerte unter Kongruenztransformationen unverändert bleibt.

Satz 7.14 (Trägheitssatz) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine selbstadjungierte Matrix. Sei $\mathbf{T} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine reguläre Matrix und

$$\widehat{\mathbf{A}} := \mathbf{T}^* \mathbf{A} \mathbf{T}.$$

Dann besitzen \mathbf{A} und $\widehat{\mathbf{A}}$ jeweils gleich viele echt positive und echt negative Eigenwerte.

Beweis. Nach Satz 3.41 existieren unitäre Matrizen $\mathbf{Q}, \widehat{\mathbf{Q}} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und reelle Diagonalmatrizen $\mathbf{D}, \widehat{\mathbf{D}} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \mathbf{Q} \mathbf{D} \mathbf{Q}^*, & \mathbf{D} &= \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}, & \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n, \\ \widehat{\mathbf{A}} &= \widehat{\mathbf{Q}} \widehat{\mathbf{D}} \widehat{\mathbf{Q}}^*, & \widehat{\mathbf{D}} &= \begin{pmatrix} \hat{\lambda}_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \hat{\lambda}_n \end{pmatrix}, & \hat{\lambda}_1 \geq \hat{\lambda}_2 \geq \dots \geq \hat{\lambda}_n. \end{aligned}$$

Wir bezeichnen mit $p, \hat{p} \in \{0, \dots, n\}$ die Anzahl der echt positiven Eigenwerte der Matrizen \mathbf{A} und $\widehat{\mathbf{A}}$, es sollen also

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p > 0 \geq \lambda_{p+1}, \quad \hat{\lambda}_1 \geq \hat{\lambda}_2 \geq \dots \geq \hat{\lambda}_{\hat{p}} > 0 \geq \hat{\lambda}_{\hat{p}+1}$$

gelten. Unsere Aufgabe ist es, nachzuweisen, dass $p = \hat{p}$ gilt.

Dazu definieren wir die Spaltenvektoren $\mathbf{q}^{(j)}, \widehat{\mathbf{q}}^{(j)} \in \mathbb{K}^n$ der Matrizen \mathbf{Q} und $\widehat{\mathbf{Q}}$ durch

$$q_i^{(j)} := q_{ij}, \quad \hat{q}_i^{(j)} := \hat{q}_{ij} \quad \text{für alle } i, j \in \{1, \dots, n\}.$$

Die von den Eigenvektoren zu echt positiven Eigenwerten aufgespannten Vektorräume bezeichnen wir mit

$$\mathcal{P} := \text{span}\{\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(p)}\}, \quad \widehat{\mathcal{P}} := \text{span}\{\widehat{\mathbf{q}}^{(1)}, \dots, \widehat{\mathbf{q}}^{(\hat{p})}\}.$$

Wenn wir zeigen können, dass beide Räume dieselbe Dimension besitzen, sind wir fertig.

Als Hilfsmittel führen wir die Räume

$$\mathcal{N} := \text{span}\{\mathbf{q}^{(p+1)}, \dots, \mathbf{q}^{(n)}\}, \quad \widehat{\mathcal{N}} := \text{span}\{\widehat{\mathbf{q}}^{(\hat{p}+1)}, \dots, \widehat{\mathbf{q}}^{(n)}\}$$

zu den nicht-positiven Eigenwerten ein und untersuchen die Abbildungen

$$\begin{aligned} f : \mathbb{K}^n &\rightarrow \mathbb{R}, & \mathbf{x} &\mapsto \langle \mathbf{x}, \mathbf{A} \mathbf{x} \rangle, \\ \hat{f} : \mathbb{K}^n &\rightarrow \mathbb{R}, & \widehat{\mathbf{x}} &\mapsto \langle \widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{A}} \widehat{\mathbf{x}} \rangle. \end{aligned}$$

7 Verfahren für Tridiagonalmatrizen

Für einen Vektor $\mathbf{x} \in \mathcal{P} \setminus \{\mathbf{0}\}$ finden wir Koeffizienten $\alpha_1, \dots, \alpha_j \in \mathbb{K}$ mit

$$\mathbf{x} = \sum_{j=1}^p \alpha_j \mathbf{q}^{(j)}$$

und erhalten

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^p \bar{\alpha}_i \alpha_j \langle \mathbf{q}^{(i)}, \mathbf{A} \mathbf{q}^{(j)} \rangle = \sum_{i=1}^p |\alpha_i|^2 \langle \mathbf{q}^{(i)}, \lambda_i \mathbf{q}^{(i)} \rangle = \sum_{i=1}^p |\alpha_i|^2 \lambda_i > 0.$$

Für \hat{f} und $\hat{\mathcal{N}}$ erhalten wir ein entsprechendes Resultat und dürfen

$$f(\mathbf{x}) > 0, \quad \hat{f}(\hat{\mathbf{x}}) \leq 0 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathcal{P} \setminus \{\mathbf{0}\}, \quad \hat{\mathbf{x}} \in \hat{\mathcal{N}} \setminus \{\mathbf{0}\}$$

festhalten. Sei nun $\hat{\mathbf{x}} \in \hat{\mathcal{N}} \setminus \{\mathbf{0}\}$ gegeben. Wir stellen fest, dass

$$0 \geq \hat{f}(\hat{\mathbf{x}}) = \langle \hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{x}} \rangle = \langle \hat{\mathbf{x}}, \mathbf{T}^* \mathbf{A} \mathbf{T} \hat{\mathbf{x}} \rangle = \langle \mathbf{T} \hat{\mathbf{x}}, \mathbf{A} \mathbf{T} \hat{\mathbf{x}} \rangle = f(\mathbf{T} \hat{\mathbf{x}})$$

gilt. Also folgt

$$f(\mathbf{x}) \leq 0 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbf{T} \hat{\mathcal{N}} \setminus \{\mathbf{0}\},$$

also kann der Schnitt der Teilräume \mathcal{P} und $\mathbf{T} \hat{\mathcal{N}}$ nur den Nullvektor enthalten.

Daraus folgt

$$n \geq \dim(\mathcal{P}) + \dim(\mathbf{T} \hat{\mathcal{N}}) = \dim(\mathcal{P}) + \dim(\hat{\mathcal{N}}) = p + n - \hat{p},$$

also $0 \geq p - \hat{p}$ und damit $\hat{p} \geq p$.

Indem wir entsprechend mit den Räumen $\hat{\mathcal{P}}$ und \mathcal{N} verfahren, folgt auch $p \geq \hat{p}$, so dass $p = \hat{p}$ bewiesen ist.

Wir können dieselbe Argumentation auf die Matrizen $-\mathbf{A}$ und $-\hat{\mathbf{A}}$ anwenden, um zu zeigen, dass auch die Anzahl der echt negativen Eigenwerte identisch ist. ■

Unser Ziel ist es, die Anzahl der negativen Eigenwerte der Matrix $\mathbf{A} - \mu \mathbf{I}$ zu berechnen. Dank des Trägheitssatzes 7.14 ändert sich diese Anzahl nicht, wenn wir Kongruenztransformationen auf die Matrix anwenden, also bietet es sich an, nach Kongruenztransformationen zu suchen, die die Matrix in eine Form bringen, an der wir die Anzahl der negativen Eigenwerte unmittelbar ablesen können. Ideal geeignet wäre eine Diagonalmatrix, wir suchen also eine reguläre Matrix $\mathbf{T} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ derart, dass $\mathbf{T}^*(\mathbf{A} - \mu \mathbf{I})\mathbf{T}$ eine Diagonalmatrix ist, denn dann stehen die Eigenwerte auf der Diagonalen.

Diese Aufgabe lässt sich lösen, indem wir \mathbf{T} als Dreiecksmatrix wählen und eine verallgemeinerte Form der *Cholesky-Zerlegung* berechnen. Zur Abkürzung setzen wir $\mathbf{B} := \mathbf{A} - \mu \mathbf{I}$ und suchen nach einer normierten unteren Dreiecksmatrix $\mathbf{L} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und einer reellen Diagonalmatrix $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit

$$\mathbf{B} = \mathbf{L} \mathbf{D} \mathbf{L}^* \quad \iff \quad \mathbf{L}^{-1}(\mathbf{A} - \mu \mathbf{I}) \mathbf{L}^{-*} = \mathbf{D}.$$

Wir zerlegen die auftretenden Matrizen in Teilmatrizen:

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \begin{pmatrix} b_{11} & \mathbf{B}_{1*} \\ \mathbf{B}_{*1} & \mathbf{B}_{**} \end{pmatrix} && \text{mit } \mathbf{B}_{1*} \in \mathbb{K}^{1 \times (n-1)}, \mathbf{B}_{**} \in \mathbb{K}^{(n-1) \times (n-1)}, \\ \mathbf{L} &= \begin{pmatrix} 1 & \\ \mathbf{L}_{*1} & \mathbf{L}_{**} \end{pmatrix} && \text{mit } \mathbf{L}_{*1} \in \mathbb{K}^{1 \times (n-1)}, \mathbf{L}_{**} \in \mathbb{K}^{(n-1) \times (n-1)}, \\ \mathbf{D} &= \begin{pmatrix} d_1 & \\ & \mathbf{D}_{**} \end{pmatrix} && \text{mit } \mathbf{D}_{**} \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}. \end{aligned}$$

Durch Einsetzen in die definierende Gleichung erhalten wir

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} b_{11} & \mathbf{B}_{1*} \\ \mathbf{B}_{*1} & \mathbf{B}_{**} \end{pmatrix} &= \mathbf{B} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^* = \begin{pmatrix} 1 & \\ \mathbf{L}_{*1} & \mathbf{L}_{**} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & \\ & \mathbf{D}_{**} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{L}_{*1}^* \\ & \mathbf{L}_{**}^* \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} d_1 & \\ \mathbf{L}_{*1}d_1 & \mathbf{L}_{**}\mathbf{D}_{**} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{L}_{*1}^* \\ & \mathbf{L}_{**}^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 & & & \\ & d_1\mathbf{L}_{*1}^* & & \\ & \mathbf{L}_{*1}d_1 & & \\ & & \mathbf{L}_{*1}d_1\mathbf{L}_{*1}^* + \mathbf{L}_{**}\mathbf{D}_{**}\mathbf{L}_{**}^* & \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Aus $\mathbf{B}^* = \mathbf{B}$ folgt $\mathbf{B}_{1*} = \mathbf{B}_{*1}^*$, so dass lediglich die folgenden drei Gleichungen zu erfüllen sind:

$$\begin{aligned} b_{11} &= d_1, \\ \mathbf{B}_{*1} &= \mathbf{L}_{*1}d_1, \\ \mathbf{B}_{**} &= \mathbf{L}_{*1}d_1\mathbf{L}_{*1}^* + \mathbf{L}_{**}\mathbf{D}_{**}\mathbf{L}_{**}^*. \end{aligned}$$

Falls $b_{11} \neq 0$ gilt, können wir sie umformen und finden

$$\begin{aligned} d_1 &= b_{11}, \\ \mathbf{L}_{*1} &= \mathbf{B}_{*1}/d_1, \\ \mathbf{L}_{**}\mathbf{D}_{**}\mathbf{L}_{**}^* &= \widehat{\mathbf{B}} := \mathbf{B}_{**} - \mathbf{L}_{*1}d_1\mathbf{L}_{*1}^*. \end{aligned}$$

Die letzte Gleichung ist von der Form des ursprünglichen Problems, so dass wir sie per Induktion behandeln können.

In unserem Fall ist \mathbf{B} eine Tridiagonalmatrix der Form

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} \alpha_1 - \mu & \bar{\beta}_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 - \mu & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n - \mu \end{pmatrix},$$

so dass die Gleichungen

$$\mathbf{L}_{*1} = \begin{pmatrix} \beta_1/(\alpha_1 - \mu) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \widehat{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} \alpha_2 - \mu - \frac{|\beta_1|^2}{(\alpha_1 - \mu)^2} & \bar{\beta}_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_3 - \mu & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n - \mu \end{pmatrix}$$

gelten und sich demnach der Induktionsschritt mit wenigen Rechenoperationen vollziehen lässt.

8 Lanczos-Verfahren für schwachbesetzte Matrizen

In der Praxis treten sehr häufig Matrizen auf, die besondere Eigenschaften aufweisen, die zur Beschleunigung bestimmter Operationen ausgenutzt werden können: Die Matrix-Vektor-Multiplikation mit einer Tridiagonalmatrix der Dimension n oder ihre QR-Zerlegung lassen sich mit einem Aufwand von $O(n)$ Operationen durchführen. Ein Gleichungssystem mit einer Hessenberg-Matrix lässt sich mit einem Aufwand von $O(n^2)$ Operationen lösen, während bei einem allgemeinen System $O(n^3)$ Operationen erforderlich sind.

Wir werden uns in diesem Kapitel auf eine relativ allgemeine Klasse von Matrizen konzentrieren, nämlich auf solche, die nur eine von n unabhängige Anzahl von nicht verschwindenden Elementen pro Zeile und Spalte aufweisen. Derartige Matrizen treten typischerweise bei der Diskretisierung partieller Differentialgleichungen auf.

8.1 Zweidimensionales Modellproblem

Wir untersuchen als Modellproblem die numerische Approximation des Poisson-Eigenwertproblems

$$-\Delta u(x, y) = \lambda u(x, y)$$

mit $(x, y) \in]0, 1[^2$, der Randbedingung

$$u(0, \cdot) = u(1, \cdot) = u(\cdot, 0) = u(\cdot, 1) = 0$$

und dem Laplace-Operator

$$\Delta u(x, y) := \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, y) + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x, y). \quad (8.1)$$

Zur Diskretisierung wählen wir ein $N \in \mathbb{N}$ und setzen

$$h := \frac{1}{N+1}, \quad \mathcal{I} := \{1, \dots, N\}^2, \quad \Omega_h := \{(hi, hj) : (i, j) \in \mathcal{I}\}.$$

Analog zum Beispiel in Abschnitt 2.1 approximieren wir die Differentialquotienten in (8.1) durch Differenzenquotienten:

$$-\Delta u(x, y) \approx h^{-2} (4u(x, y) - u(x-h, y) - u(x+h, y) - u(x, y-h) - u(x, y+h)).$$

Wie im eindimensionalen Fall schränken wir den Definitionsbereich auf Ω_h ein und erhalten ein lineares Gleichungssystem im Raum $\mathbb{R}^{\mathcal{I}}$: Wir ersetzen den Differentialoperator

$-\Delta$ durch eine Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{\mathcal{I} \times \mathcal{I}}$ und die Funktion u durch einen Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{\mathcal{I}}$, die durch

$$a_{ij} := \begin{cases} 4h^{-2} & \text{falls } i_x = j_x \text{ und } i_y = j_y \\ -h^{-2} & \text{falls } |i_x - i_y| + |j_x - j_y| = 1, \\ 0 & \text{ansonsten} \end{cases}$$

$$x_j := u(hj_x, hj_y) \quad \text{für alle } i = (i_x, i_y) \in \mathcal{I}, j = (j_x, j_y) \in \mathcal{I}$$

definiert sind und erhalten das Gleichungssystem

$$\mathbf{A}\mathbf{x} \approx \lambda\mathbf{x}.$$

Wie im eindimensionalen Fall ist die Matrix \mathbf{A} symmetrisch und positiv definit, und auch in diesem Fall sind wir an ihren kleinsten Eigenwerten interessiert. Unsere Aufgabe besteht also darin, ein n -dimensionales Eigenwertproblem zu lösen, wobei $n = N^2 \approx h^{-2}$ gilt und sich beweisen lässt, dass die Eigenwerte und Eigenvektoren des diskreten Systems mit einem Fehler proportional zu h^2 gegen die des ursprünglichen kontinuierlichen Problems konvergieren. Um eine brauchbare Genauigkeit zu erreichen, müssen wir also darauf vorbereitet sein, sehr große Eigenwertprobleme zu behandeln.

Während allerdings im eindimensionalen Fall eine Tridiagonalmatrix entstand, lässt sich im zweidimensionalen Fall keine Anordnung der Indexmenge \mathcal{I} finden, die aus \mathbf{A} eine Bandmatrix mit von N unabhängiger Bandbreite macht: Man kann beweisen, dass die Bandbreite immer mindestens $N/2$ betragen muss. In der Praxis verwendet man sehr häufig eine Anordnung von \mathcal{I} , bei der die Matrix \mathbf{A} die Block-Tridiagonaldarstellung

$$\mathbf{A} = h^{-2} \begin{pmatrix} \mathbf{T} & -\mathbf{I} & & & \\ -\mathbf{I} & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & -\mathbf{I} & \\ & & & -\mathbf{I} & \mathbf{T} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & -1 & \\ & & & -1 & 4 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N},$$

besitzt, die eine Bandbreite von N aufweist.

Eine Besonderheit von Tridiagonalmatrizen weist allerdings auch die Matrix \mathbf{A} unabhängig von der Anordnung der Indizes auf: Da pro Zeile dieser Matrizen lediglich höchstens fünf von null verschiedene Einträge auftreten, lässt sich das Matrix-Vektor-Produkt $\mathbf{y} := \mathbf{A}\mathbf{x}$ für $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{\mathcal{I}}$ in $\mathcal{O}(n)$ Operationen auswerten. Matrizen mit dieser Eigenschaft werden als *schwachbesetzt* bezeichnet.

Theoretisch können wir alle bereits diskutierten Verfahren auf die Matrix \mathbf{A} anwenden, praktisch stoßen wir dabei allerdings auf Schwierigkeiten: Sobald wir Linearkombinationen von Zeilen oder Spalten berechnen, werden dadurch in der Regel neue von null verschiedene Einträge in der Matrix verursacht. Das bedeutet, dass der Speicherbedarf und der Rechenaufwand sehr stark zunehmen, für hohe Problemdimensionen ist dieser Ansatz nicht mehr sinnvoll durchführbar.

Günstig dagegen wäre die Vektoriteration, da sie lediglich Matrix-Vektor-Multiplikationen erfordert, die sich wie gesagt sehr effizient durchführen lassen. Dieser Ansatz lässt sich ausbauen, um mehrere der größten und kleinsten Eigenwerte mit den entsprechenden Eigenvektoren zu berechnen.

8.2 Krylow-Räume

Bei allgemeinen Matrizen können wir den Rechenaufwand wesentlich reduzieren, indem wir sie mit Hilfe orthonormalen Transformationen auf Hessenberg-Gestalt bringen. Falls es uns gelingt, dasselbe für schwachbesetzte Matrizen zu bewerkstelligen, könnten wir im symmetrischen Fall einfach Standardverfahren wie die QR-Iteration oder die Bisektion mit einer Sturmschen Kette auf die resultierende Tridiagonalmatrix anwenden und so ein effizienteres Verfahren erhalten.

Bei einer vollständigen Tridiagonalisierung würde der Aufwand trotzdem mindestens $\mathcal{O}(n^2)$ betragen, weil die orthonormalen Matrizen $\mathcal{O}(n^2)$ Einträge aufweisen. Deshalb bestimmen wir ein Tupel von orthonormalen Matrizen $(\mathbf{Q}^{(k)})_{k=1}^n$ mit $\mathbf{Q}^{(k)} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ derart, dass die für unsere Anwendungen interessanten größten und kleinsten Eigenwerte der transformierten Matrizen $(\mathbf{Q}^{(k)})^* \mathbf{A} \mathbf{Q}^{(k)}$ möglichst schnell gegen die größten und kleinsten Eigenwerte von \mathbf{A} konvergieren.

Sei im folgenden $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine selbstadjungierte Matrix mit den Eigenwerten $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$. Wir untersuchen den Rayleigh-Quotienten Λ_A :

Lemma 8.1 *Der Rayleigh-Quotient*

$$\Lambda_A : \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\} \rightarrow \mathbb{R}, \quad \mathbf{x} \mapsto \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{A} \mathbf{x} \rangle_2}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2}$$

ist von unten und oben beschränkt, es gilt nämlich

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \min\{\Lambda_A(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}\}, \\ \lambda_n &= \max\{\Lambda_A(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}\}. \end{aligned}$$

Beweis. Seien $\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(n)} \in \mathbb{K}^n$ Eigenvektoren zu den Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, die eine orthonormale Basis von \mathbb{K}^n bilden. Für ein beliebiges $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ gilt dann

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{x}^{(i)}, \quad \alpha_i := \langle \mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x} \rangle_2$$

und durch Einsetzen in den Rayleigh-Quotienten erhalten wir

$$\Lambda_A(\mathbf{x}) = \frac{\sum_{i=1}^n \lambda_i |\alpha_i|^2}{\sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2}, \quad \lambda_1 = \frac{\sum_{i=1}^n \lambda_1 |\alpha_i|^2}{\sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2} \leq \Lambda_A(\mathbf{x}) \leq \frac{\sum_{i=1}^n \lambda_n |\alpha_i|^2}{\sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2} = \lambda_n,$$

und mit $\Lambda_A(\mathbf{x}^{(1)}) = \lambda_1$ sowie $\Lambda_A(\mathbf{x}^{(n)}) = \lambda_n$ folgt die gewünschte Aussage. ■

In ähnlicher Weise lassen sich auch andere Eigenwerte mit Hilfe geeigneter Minima und Maxima des Rayleigh-Quotienten charakterisieren.

Eine gute Strategie zur Approximation der Eigenwerte könnte also darin bestehen, den Rayleigh-Quotienten zu minimieren oder zu maximieren. Für derartige Aufgaben

8 Lanczos-Verfahren für schwachbesetzte Matrizen

ist das *Gradientenverfahren* geeignet: Der Gradient einer Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ in einem Punkt \mathbf{x} ist der Vektor $\nabla f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^n$, für den

$$Df(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} = \langle \nabla f(\mathbf{x}), \mathbf{y} \rangle_2 \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$$

gilt, mit dem sich also alle Richtungsableitungen von f durch ein Skalarprodukt beschreiben lassen. Es lässt sich nachweisen, dass die Steigung der Funktion f im Punkt \mathbf{x} in Richtung des Gradienten am stärksten ist.

Die Idee des Gradientenverfahrens besteht nun darin, eine Folge von Iterierten so zu bestimmen, dass sich die neue Iterierte \mathbf{x}' ergibt, indem zu der alten Iterierten \mathbf{x} ein geeignetes Vielfaches des Gradienten $\nabla f(\mathbf{x})$ hinzuaddiert wird, denn diese Richtung ist zumindest lokal am vielversprechendsten.

Wir werden nun in ähnlicher Weise versuchen, den Rayleigh-Quotienten zu maximieren beziehungsweise zu minimieren. Dazu benötigen wir seinen Gradienten:

Lemma 8.2 (Gradient) *Es gilt*

$$\nabla \Lambda_A(\mathbf{x}) = \frac{2}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2} (\mathbf{A}\mathbf{x} - \Lambda_A(\mathbf{x})\mathbf{x}) \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}.$$

Insbesondere ist der Gradient $\nabla \Lambda_A(\mathbf{x})$ genau dann gleich null, wenn \mathbf{x} ein Eigenvektor von \mathbf{A} ist.

Beweis. Wir führen die Hilfsfunktionen

$$f(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{A}\mathbf{x} \rangle_2, \quad g(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$$

ein und erhalten mit Hilfe der Produktregel die Gleichungen

$$\begin{aligned} Df(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} &= \langle \mathbf{y}, \mathbf{A}\mathbf{x} \rangle_2 + \langle \mathbf{x}, \mathbf{A}\mathbf{y} \rangle_2 = \langle \mathbf{y}, \mathbf{A}\mathbf{x} \rangle_2 + \langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2 = 2\langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2, \\ Dg(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} &= 2\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2 \quad \text{für alle } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n. \end{aligned}$$

Aus $\Lambda_A(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})/g(\mathbf{x})$ und der Quotientenregel folgt

$$\begin{aligned} D\Lambda_A(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} &= \frac{g(\mathbf{x})Df(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} - f(\mathbf{x})Dg(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{y}}{g^2(\mathbf{x})} = \frac{2\langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2} - \frac{f(\mathbf{x})}{g(\mathbf{x})} \frac{2\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2} \\ &= \frac{2}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2} \langle \mathbf{A}\mathbf{x} - \Lambda_A(\mathbf{x})\mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2 \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\} \end{aligned}$$

und damit die gesuchte Gleichung. ■

Wir beginnen mit der Suche nach einem Minimum mit einem Startvektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. Um die nächste Iterierte zu berechnen, bestimmen wir den Gradienten des Rayleigh-Quotienten Λ_A in \mathbf{x} und setzen

$$\mathbf{x}' := \mathbf{x} + \alpha \nabla \Lambda_A(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - \frac{2\alpha \Lambda_A(\mathbf{x})}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2} \mathbf{x} + \frac{2\alpha}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2} \mathbf{A}\mathbf{x} = \beta \mathbf{x} + \gamma \mathbf{A}\mathbf{x}$$

für einen geeigneten Skalierungsfaktor α . Die nächste Iterierte liegt also im Aufspann von \mathbf{x} und \mathbf{Ax} . Wir können induktiv fortfahren, um zu zeigen, dass die m -te Iterierte im Aufspann von $\mathbf{x}, \mathbf{Ax}, \dots, \mathbf{A}^m \mathbf{x}$ liegt.

Die derart durch das wiederholte Multiplizieren eines Startvektors mit der Matrix \mathbf{A} definierten Räume sind für uns von besonderem Interesse.

Definition 8.3 (Krylow-Raum) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$, $\mathbf{q}^{(1)} \in \mathbb{K}^n$ und $m \in \mathbb{N}_0$. Der Raum

$$\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m) := \text{span}\{\mathbf{A}^i \mathbf{q}^{(1)} : i \in \{0, \dots, m\}\}$$

wird als m -ter Krylow-Raum zu der Matrix \mathbf{A} und dem Startvektor $\mathbf{q}^{(1)}$ bezeichnet.

Offenbar gilt immer $\dim \mathcal{K} \leq m + 1$. Die Dimension kann allerdings deutlich kleiner sein: Falls $\mathbf{q}^{(1)}$ beispielsweise ein Eigenvektor von \mathbf{A} ist, ist $\mathbf{A}\mathbf{q}^{(1)}$ ein Vielfaches von $\mathbf{q}^{(1)}$, also gilt $\dim \mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m) = 1$ für alle $m \in \mathbb{N}_0$. Falls $\mathbf{q}^{(1)}$ in einem ℓ -dimensionalen invarianten Unterraum der Matrix \mathbf{A} enthalten ist, muss auch jeder Krylow-Raum $\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m)$ in diesem Unterraum enthalten sein, also folgt $\dim \mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m) \leq \ell$ für alle $m \in \mathbb{N}_0$.

8.3 Arnoldi-Basis

Der Vorteil der Krylow-Räume besteht darin, dass sie sich relativ einfach mit Hilfe von Matrix-Vektor-Multiplikationen konstruieren lassen, außerdem eignen sie sich, wie bereits gesehen, um den Rayleigh-Quotienten zu minimieren beziehungsweise zu maximieren und so Approximationen des kleinsten beziehungsweise größten Eigenwertes zu erhalten.

Allerdings ist dafür die kanonische Basis $\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{A}\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{A}^m \mathbf{q}^{(1)}$ in der Regel nicht gut geeignet: Für große Werte von m ist zu befürchten, dass die Basisvektoren, wie schon bei der Vektoriteration gesehen, gegen einen Eigenraum konvergieren und damit „numerisch linear abhängig“ werden können. Die Lösung besteht, wie schon bei der orthogonalen Iteration, darin, zu einer orthonormalen Basis zu wechseln.

Da sich der Krylow-Raum $\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m - 1)$ von dem Raum $\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m)$ nur durch den Vektor $\mathbf{A}^m \mathbf{q}^{(1)}$ unterscheidet, bietet es sich an, auch orthonormale Basen zu verwenden, die sich lediglich durch einen Vektor unterscheiden. Wir suchen also eine orthonormale Basis $\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{q}^{(2)}, \dots$ derart, dass

$$\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m - 1) = \text{span}\{\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(m)}\} \quad \text{für alle } m \in \{1, \dots, m_0\} \quad (8.2)$$

gilt, wobei

$$m_0 := \min\{m \in \mathbb{N} : \mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m) = \mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m - 1)\}$$

die maximale Dimension angibt, die ein mit dem Startvektor $\mathbf{q}^{(1)}$ konstruierter Krylow-Raum erreichen kann. Wie wir bereits gesehen haben entspricht m_0 gerade der Dimension des kleinsten invarianten Unterraums, der $\mathbf{q}^{(1)}$ enthält.

Aus den Gleichungen (8.2) können wir direkt eine induktive Konstruktion für die Vektoren $\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(m_0)}$ gewinnen: Wir gehen davon aus, dass ein $m \in \{1, \dots, m_0 - 1\}$

8 Lanczos-Verfahren für schwachbesetzte Matrizen

so gegeben ist, dass $\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(m)}$ eine Basis des Krylow-Raums $\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m-1)$ ist. Damit ist

$$\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{A}^m \mathbf{q}^{(1)}$$

eine Basis von $\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m)$. Da wir damit rechnen müssen, dass $\mathbf{A}^m \mathbf{q}^{(1)}$ gegen einen Eigenraum konvergiert und damit die Basis „numerisch linear abhängig“ wird, soll nun $\mathbf{A}^m \mathbf{q}^{(1)}$ durch einen numerisch stabileren Vektor ersetzt werden: Wegen

$$\mathbf{A}^{m-1} \mathbf{q}^{(1)} \in \mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m-1) = \text{span}\{\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(m)}\}$$

existieren $\alpha_1, \dots, \alpha_m \in \mathbb{K}$ mit

$$\mathbf{A}^{m-1} \mathbf{q}^{(1)} = \alpha_1 \mathbf{q}^{(1)} + \dots + \alpha_m \mathbf{q}^{(m)},$$

also folgt

$$\mathbf{A}^m \mathbf{q}^{(1)} = \alpha_1 \mathbf{A} \mathbf{q}^{(1)} + \dots + \alpha_m \mathbf{A} \mathbf{q}^{(m)}.$$

Nach Definition gilt

$$\alpha_1 \mathbf{A} \mathbf{q}^{(1)} + \dots + \alpha_{m-1} \mathbf{A} \mathbf{q}^{(m-1)} \in \mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m-1),$$

also ist auch $\mathbf{A} \mathbf{q}^{(m)}$ ein Vektor, der in $\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m)$, aber nicht in $\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m-1)$ liegt. Dieser Vektor lässt sich numerisch stabiler konstruieren, und

$$\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{A} \mathbf{q}^{(m)}$$

ist eine Basis des Raums $\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m)$. Per Gram-Schmidt-Orthonormalisierung konstruieren wir nun aus $\mathbf{A} \mathbf{q}^{(m)}$ den gewünschten Vektor $\mathbf{q}^{(m+1)}$.

Definition 8.4 (Arnoldi-Basis) Sei $\mathbf{q}^{(1)} \in \mathbb{K}^n$ mit $\|\mathbf{q}^{(1)}\|_2 = 1$ gegeben. Die Arnoldi-Basis $\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(m_0)}$ ist durch

$$\begin{aligned} \mathbf{p}^{(m+1)} &:= \mathbf{A} \mathbf{q}^{(m)} - \sum_{i=1}^m \langle \mathbf{q}^{(i)}, \mathbf{A} \mathbf{q}^{(m)} \rangle_2 \mathbf{q}^{(i)} && \text{für alle } m \in \{1, \dots, m_0\}, \\ \mathbf{q}^{(m+1)} &:= \frac{\mathbf{p}^{(m+1)}}{\|\mathbf{p}^{(m+1)}\|_2} && \text{für alle } m \in \{1, \dots, m_0 - 1\} \end{aligned}$$

definiert. Nach Definition von m_0 gelten $\mathbf{p}^{(m)} \neq \mathbf{0}$ für alle $m \in \{2, \dots, m_0\}$ sowie $\mathbf{p}^{(m_0+1)} = \mathbf{0}$, also ist die Arnoldi-Basis wohldefiniert.

Nach Konstruktion ist die Basis auch orthonormal und besitzt die Eigenschaft (8.2).

Wir sind daran interessiert, die kleinsten und größten Eigenwerte zu approximieren. Der kleinste Eigenwert λ_1 ist gerade das Minimum des Rayleigh-Quotienten Λ_A auf dem Raum $\mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$, und indem wir diesen Raum durch die Teilräume

$$\mathcal{Q}^{(m)} := \text{span}\{\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(m)}\} \quad \text{für alle } m \in \{1, \dots, m_0\}$$

ersetzen, können wir Approximationen

$$\lambda_1^{(m)} := \min\{\Lambda_A(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathcal{Q}^{(m)} \setminus \{\mathbf{0}\}\} \quad \text{für alle } m \in \{1, \dots, m_0\}$$

konstruieren. Das Minimum können wir berechnen, indem wir die Basisvektoren zu Matrizen

$$\mathbf{Q}^{(m)} := (\mathbf{q}^{(1)} \quad \dots \quad \mathbf{q}^{(m)}) \quad \text{für alle } m \in \{1, \dots, m_0\}$$

zusammenfassen und feststellen, dass

$$\begin{aligned} \lambda_1^{(m)} &= \min\{\Lambda_A(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathcal{Q}^{(m)} \setminus \{\mathbf{0}\}\} = \min\{\Lambda_A(\mathbf{Q}^{(m)}\widehat{\mathbf{x}}) : \widehat{\mathbf{x}} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\}\} \\ &= \min\left\{ \frac{\langle \mathbf{Q}^{(m)}\widehat{\mathbf{x}}, \mathbf{A}\mathbf{Q}^{(m)}\widehat{\mathbf{x}} \rangle_2}{\langle \mathbf{Q}^{(m)}\widehat{\mathbf{x}}, \mathbf{Q}^{(m)}\widehat{\mathbf{x}} \rangle_2} : \widehat{\mathbf{x}} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \\ &= \min\left\{ \frac{\langle \widehat{\mathbf{x}}, (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A}\mathbf{Q}^{(m)}\widehat{\mathbf{x}} \rangle_2}{\langle (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{Q}^{(m)}\widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle_2} : \widehat{\mathbf{x}} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\} \right\} \\ &= \min\{\Lambda_{(\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A}\mathbf{Q}^{(m)}}(\widehat{\mathbf{x}}) : \widehat{\mathbf{x}} \in \mathbb{K}^m \setminus \{\mathbf{0}\}\} \end{aligned}$$

gilt, nach Lemma 8.1 sind also die Werte $\lambda_1^{(m)}$ gerade die kleinsten Eigenwerte der Matrizen

$$\widehat{\mathbf{A}}^{(m)} := (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A}\mathbf{Q}^{(m)} \in \mathbb{K}^{m \times m} \quad \text{für alle } m \in \{1, \dots, m_0\}, \quad (8.3)$$

können also durch Lösen eines m -dimensionalen Eigenwertproblems berechnet werden. Für $m \ll n$ lässt sich diese Berechnung wesentlich effizienter durchführen als für die ursprüngliche Matrix \mathbf{A} . Durch die folgende Beobachtung wird die Berechnung sogar noch weiter vereinfacht:

Lemma 8.5 (Hessenberg-Form) *Für jedes $m \in \{1, \dots, m_0\}$ besitzt die Matrix $\widehat{\mathbf{A}}^{(m)}$ Hessenberg-Gestalt.*

Beweis. Sei $j \in \{1, \dots, m_0 - 1\}$. Nach Konstruktion gilt

$$\mathbf{q}^{(j)} \in \mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, j-1), \quad \mathbf{A}\mathbf{q}^{(j)} \in \mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, j) = \text{span}\{\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(j+1)}\}.$$

Da $\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(m_0)}$ eine orthonormale Basis ist, muss also

$$\widehat{a}_{ij}^{(m)} = \langle \mathbf{q}^{(i)}, \mathbf{A}\mathbf{q}^{(j)} \rangle_2 = 0 \quad \text{für alle } i \in \{j+2, \dots, m_0\}$$

gelten. Somit ist $\widehat{\mathbf{A}}^{(m)}$ eine obere Hessenberg-Matrix. ■

Für eine praktische Konstruktion der Arnoldi-Basis wäre es von Vorteil, wenn wir auch die Dimension m_0 des kleinsten $\mathbf{q}^{(1)}$ enthaltenden invarianten Unterraums berechnen könnten. Nach Definition 8.4 gilt $\mathbf{p}^{(m_0)} = \mathbf{0}$, also können wir diesen Vektor verwenden, um m_0 zu ermitteln. In der numerischen Praxis dürfen wir nicht auf einen exakten

8 Lanczos-Verfahren für schwachbesetzte Matrizen

Nullvektor hoffen, stattdessen müssen wir prüfen, ob eine vorgegebene Fehlerschranke unterschritten wurde. Hier bietet sich ein Kriterium der Form

$$\|\mathbf{p}^{(m+1)}\|_2 \leq \epsilon_{\text{ir}} \|\mathbf{A}\mathbf{q}^{(m)}\|_2$$

mit einem $\epsilon_{\text{ir}} \in \mathbb{R}_{>0}$ an, denn diese Bedingung wird genau dann erfüllt, wenn der „größte Teil“ des Vektors $\mathbf{A}\mathbf{q}^{(m)}$ bereits in $\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m-1)$ enthalten ist und deshalb bei der Orthonormalisierung entfernt wurde.

Algorithmus 8.6 (Arnoldi-Basis) Seien $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und $\mathbf{q}^{(1)} \in \mathbb{K}^n$ mit $\|\mathbf{q}^{(1)}\|_2 = 1$ gegeben. Der folgende Algorithmus berechnet die Arnoldi-Basis $\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(m_0)}$ und die gemäß (8.3) definierten Matrizen $\widehat{\mathbf{A}}^{(m)}$. Der Algorithmus endet mit $m = m_0$.

```

m ← 1
p ← Aq(m);   γ ← ||p||2
â11 ← ⟨q(1), p⟩2;   p ← p - â11q(1)
â21 ← ||p||2
while âm+1,m ≥ εirγ do begin
    q(m+1) ← p/âm+1,m
    m ← m + 1
    p ← Aq(m);   γ ← ||p||2
    for i = 1 to m do begin
        âim ← ⟨q(i), p⟩2;   p ← p - âimq(i)
    end
    âm+1,m ← ||p||2
end

```

Falls \mathbf{A} selbstadjungiert ist, gilt dasselbe nach Konstruktion auch für $\widehat{\mathbf{A}}^{(m)}$, und da diese Matrix auch eine Hessenberg-Matrix ist, muss sie dann sogar tridiagonal sein, so dass sich der Rechenaufwand für die Orthonormalisierung und die Bestimmung von $\lambda_1^{(m)}$ noch weiter reduzieren lässt: Es gilt

$$\hat{a}_{im} = \overline{\hat{a}_{mi}} = 0 \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, m-2\},$$

so dass wir die meisten der für die Orthogonalisierung erforderlichen Skalarprodukte einsparen können. Wenn wir die Tridiagonalmatrix $\widehat{\mathbf{A}}$ in der bereits aus Kapitel 7 bekannten Form

$$\widehat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \bar{\beta}_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \bar{\beta}_{m-1} \\ & & & \beta_{m-1} & \alpha_m \end{pmatrix}$$

darstellen, ergibt sich

$$\hat{a}_{m-1,m} = \overline{\hat{a}_{m,m-1}} = \bar{\beta}_{m-1},$$

so dass ein weiteres Skalarprodukt entfällt. Der resultierende sehr effiziente *Lanczos-Algorithmus* nimmt damit die folgende Form an:

Algorithmus 8.7 (Lanczos-Algorithmus) Seien $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungiert und $\mathbf{q}^{(1)} \in \mathbb{K}^n$ mit $\|\mathbf{q}^{(1)}\|_2 = 1$ gegeben. Der folgende Algorithmus berechnet die Arnoldi-Basis $\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(m_0)}$ und die Matrizen $\widehat{\mathbf{A}}^{(m)}$. Der Algorithmus endet mit $m = m_0$.

```

 $m \leftarrow 1;$ 
 $\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{q}^{(m)}; \quad \gamma \leftarrow \|\mathbf{p}\|_2;$ 
 $\alpha_1 \leftarrow \langle \mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{p} \rangle_2; \quad \mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p} - \alpha_1 \mathbf{q}^{(1)};$ 
 $\beta_1 \leftarrow \|\mathbf{p}\|_2;$ 
while  $\beta_m \geq \epsilon_{ir} \gamma$  do begin
   $\mathbf{q}^{(m+1)} \leftarrow \mathbf{p} / \beta_m;$ 
   $m \leftarrow m + 1;$ 
   $\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{q}^{(m)}; \quad \gamma \leftarrow \|\mathbf{p}\|_2;$ 
   $\alpha_m \leftarrow \langle \mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p} \rangle_2; \quad \mathbf{p} \leftarrow \mathbf{p} - \bar{\beta}_{m-1} \mathbf{q}^{(m-1)} - \alpha_m \mathbf{q}^{(m)};$ 
   $\beta_m \leftarrow \|\mathbf{p}\|_2$ 
end

```

Da der Algorithmus abbricht, sobald $\beta_m = 0$ gilt, berechnet er nicht nur eine selbstadjungierte Tridiagonalmatrix, sondern sogar eine *irreduzible* selbstadjungierte Tridiagonalmatrix. Deshalb lässt sich die Theorie aus Kapitel 7 anwenden, um beispielsweise die Eigenwerte mit Hilfe Sturmscher Ketten zu berechnen.

Es muss leider darauf hingewiesen werden, dass in der Praxis Rundungsfehler häufig zu einem Verlust der Orthogonalität der mit dem Lanczos-Verfahren berechneten Basis führen. Dadurch kann es beispielsweise passieren, dass $\widehat{\mathbf{A}}^{(m)}$ bestimmte Eigenwerte mehrfach aufweist, die in \mathbf{A} nur einfach auftreten.

8.4 Konvergenz

Offensichtlich gilt

$$\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m) = \{p(\mathbf{A})\mathbf{q}^{(1)} : p \in \Pi_m\},$$

wobei Π_m den Raum der Polynome vom Grad $\leq m$ bezeichnet.

Bei der folgenden Untersuchung beschränken wir uns auf den Fall selbstadjungierter Matrizen, setzen also $\mathbf{A}^* = \mathbf{A}$ voraus. Mit Folgerung 3.40 finden wir eine unitäre Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und eine reelle Diagonalmatrix

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$$

derart, dass

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^*$$

gilt. Daraus folgt

$$p(\mathbf{A}) = \mathbf{Q}p(\mathbf{D})\mathbf{Q}^* \quad \text{für alle } p \in \Pi_m, \quad m \in \mathbb{N}_0, \quad (8.4)$$

und mit Hilfe dieser Gleichung können wir die Elemente des Krylow-Raums analysieren. Falls beispielsweise alle Eigenwerte verschieden sind, können wir für $j \in \{1, \dots, n\}$ das j -te Lagrange-Polynom

$$\ell_j(x) := \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \frac{x - \lambda_i}{\lambda_j - \lambda_i}$$

untersuchen. Mit $\hat{\mathbf{q}}^{(1)} := \mathbf{Q}^*\mathbf{q}^{(1)}$ und $\mathbf{x}^{(i)} := \mathbf{Q}\delta^{(i)}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \ell_j(\mathbf{A})\mathbf{q}^{(1)} &= \mathbf{Q}\ell_j(\mathbf{D})\mathbf{Q}^*\mathbf{q}^{(1)} = \mathbf{Q}\ell_j(\mathbf{D})\hat{\mathbf{q}}^{(1)} = \mathbf{Q}\ell_j(\mathbf{D})\sum_{i=1}^n \delta^{(i)}\hat{q}_i^{(1)} \\ &= \mathbf{Q}\sum_{i=1}^n \delta^{(i)}\ell_j(\lambda_i)\hat{q}_i^{(1)} = \sum_{i=1}^n \mathbf{x}^{(i)}\ell_j(\lambda_i)\hat{q}_i^{(1)} = \mathbf{x}^{(j)}\hat{q}_j^{(1)}, \end{aligned}$$

haben also im Fall $\hat{q}_j^{(1)} \neq 0$ einen Eigenvektor zu dem Eigenwert λ_j gefunden.

Allerdings gilt $\ell_j \in \Pi_n$, so dass wir den Krylow-Raum

$$\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m_0 - 1) \supseteq \mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, n)$$

maximaler Ordnung verwenden müssten, um in dieser Weise Eigenvektoren zu konstruieren. Der dazu erforderliche Aufwand ist in der Regel zu hoch.

Deshalb interessieren wir uns eher für Polynome, die die Lagrange-Polynome in geeigneter Weise *approximieren*, um aus ihnen Approximationen der Eigenvektoren zu konstruieren.

Lemma 8.8 (Eigenvektor-Approximation) Sei $\mathbf{q}^{(1)} \in \mathbb{K}^n$ mit $\|\mathbf{q}^{(1)}\| = 1$ gegeben und sei $\mathbf{e}^{(1)} := \mathbf{Q}\delta^{(1)}$. Sei $p \in \Pi_m$ ein Polynom mit

$$p(\lambda_1) = 1, \quad |p(x)| \leq \epsilon \quad \text{für alle } x \in \{\lambda_2, \dots, \lambda_n\}.$$

Dann gilt

$$\tan \angle(p(\mathbf{A})\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}) \leq \epsilon \tan \angle(\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}).$$

Beweis. Mit (8.4) und $\hat{\mathbf{q}}^{(1)} := \mathbf{Q}^*\mathbf{q}^{(1)}$ folgt

$$\begin{aligned} \tan^2 \angle(p(\mathbf{A})\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}) &= \tan^2 \angle(\mathbf{Q}p(\mathbf{D})\mathbf{Q}^*\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{Q}\delta^{(1)}) \\ &= \tan^2 \angle(p(\mathbf{D})\hat{\mathbf{q}}^{(1)}, \delta^{(1)}) = \frac{\sum_{i=2}^n |p(\lambda_i)|^2 |\hat{q}_i^{(1)}|^2}{|p(\lambda_1)|^2 |\hat{q}_1^{(1)}|^2} \\ &\leq \frac{\epsilon^2 \sum_{i=2}^n |\hat{q}_i^{(1)}|^2}{|\hat{q}_1^{(1)}|^2} = \epsilon^2 \tan^2 \angle(\hat{\mathbf{q}}^{(1)}, \delta^{(1)}) \end{aligned}$$

$$= \epsilon^2 \tan^2 \angle(\mathbf{Q}\hat{\mathbf{q}}^{(1)}, \mathbf{Q}\delta^{(1)}) = \epsilon^2 \tan^2 \angle(\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}).$$

Das ist die gewünschte Abschätzung. ■

Um ein effizientes Verfahren zu erhalten, sollten wir darauf achten, dass die Ordnung von p nicht zu hoch wird. Zur Konstruktion derartiger Polynome sind die *Tschebyscheff-Polynome* besonders gut geeignet:

Definition 8.9 (Tshebyscheff-Polynome) *Wir definieren durch*

$$\begin{aligned} c_0 &: \mathbb{K} \rightarrow \mathbb{K}, & x &\mapsto 1, \\ c_1 &: \mathbb{K} \rightarrow \mathbb{K}, & x &\mapsto x, \\ c_{m+2} &: \mathbb{K} \rightarrow \mathbb{K}, & x &\mapsto 2xc_{m+1}(x) - c_m(x), \end{aligned}$$

für alle $m \in \mathbb{N}_0$ die Folge der Tschebyscheff-Polynome.

Aus dieser Darstellung lässt sich direkt ableiten, dass $c_m \in \Pi_m$ gilt, und die Rekurrenzrelation kann sich bei der Implementierung als nützlich erweisen. Für die theoretische Untersuchung sind alternative Darstellungen der Tschebyscheff-Polynome nützlicher:

Lemma 8.10 (Alternative Darstellungen) *Für alle $x \in [-1, 1]$ und alle $m \in \mathbb{N}_0$ gilt*

$$c_m(x) = \cos(m \arccos x).$$

Für alle $x \in \mathbb{R}$ und alle $m \in \mathbb{N}_0$ gilt

$$c_m(x) = \frac{1}{2} \left(\left(x + \sqrt{x^2 - 1} \right)^m + \left(x + \sqrt{x^2 - 1} \right)^{-m} \right),$$

wobei im Falle $x \in (-1, 1)$ die komplexe Wurzelfunktion so gewählt werden muss, dass $\sqrt{-1} = i$ gilt.

Beweis. Die erste Aussage erhalten wir, indem wir mit Hilfe des Additionstheorems

$$\cos(x + y) = \cos(x) \cos(y) - \sin(x) \sin(y)$$

die Gleichung

$$2x \cos((k + 1) \arccos x) = \cos(k \arccos x) + \cos((k + 2) \arccos x)$$

nachweisen und daraus per Induktion die gewünschte Gleichung folgern.

Zum Nachweis der zweiten Aussage nutzen wir aus, dass es wegen des Identitätssatzes für holomorphe Funktionen ausreicht, die Gleichung für $x \in [-1, 1]$ nachzuweisen. Diesen Nachweis führen wir, indem wir ausgehend von der ersten Gleichung die Darstellung

$$\cos(k\xi) = \operatorname{Re}(e^{ik\xi}) = \frac{1}{2}(e^{i\xi k} + e^{-i\xi k}) = \frac{1}{2} \left((e^{i\xi})^k + (e^{i\xi})^{-k} \right)$$

mit $\xi = \arccos x$ verwenden und anschließend

$$e^{i\xi} = \cos(\xi) + i \sin(\xi) = \cos(\xi) + i \sqrt{1 - \cos^2(\xi)} = \cos(\xi) + \sqrt{\cos^2(\xi) - 1}$$

einsetzen. ■

Lemma 8.11 (Optimalität) Sei $x_0 \in \mathbb{R} \setminus [-1, 1]$. Unter allen Polynomen $p \in \Pi_m$ mit $p(x_0) = c_m(x_0)$ besitzt c_m die kleinste Maximumnorm auf dem Intervall $[-1, 1]$.

Beweis. Die Maximumnorm von c_m auf dem Intervall $[-1, 1]$ beträgt wegen $c_m(x) = \cos(m \arccos x)$ gerade eins. Falls also ein Polynom p existiert, dessen Maximumnorm nicht größer als eins ist, muss $|p(x_\nu)| \leq 1 = |c_m(x_\nu)|$ in den Punkten

$$x_\nu = \cos(\pi\nu/m) \quad \text{für alle } \nu \in \{0, \dots, m\}$$

gelten. Da c_m zwischen zwei dieser Punkte sein Vorzeichen wechselt, muss auch $c_m - p$ sein Vorzeichen wechseln. Daraus folgert man mit Hilfe des Mittelwertsatzes, dass $c_m - p$ auf jedem Intervall $[x_\nu, x_{\nu+1}]$ mindestens eine Nullstelle besitzen muss, also insgesamt mindestens m auf dem Intervall $[-1, 1]$. Da x_0 außerhalb dieses Intervalls liegt und $c_m(x_0) - p(x_0) = 0$ gilt, besitzt $c_m - p$ mindestens $m + 1$ Nullstellen. Aus dem Identitätssatz für Polynome folgt $c_m = p$. ■

Um eine Approximation des kleinsten Eigenwerts λ_1 zu erhalten, benötigen wir ein Polynom niedriger Ordnung, das auf dem Intervall $[\lambda_2, \lambda_n]$ möglichst kleine Werte annimmt. Die Tschebyscheff-Polynome sind auf $[-1, 1]$ in der oben präzisierten Weise minimal, also bietet es sich an, sie so zu transformieren, dass diese Minimalität sich auf $[\lambda_2, \lambda_n]$ überträgt.

Die Abbildung

$$\Phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \quad x \mapsto \frac{\lambda_n - x}{\lambda_n - \lambda_2} + \frac{x - \lambda_2}{\lambda_n - \lambda_2}(-1) = \frac{\lambda_n + \lambda_2 - 2x}{\lambda_n - \lambda_2}$$

erfüllt $\Phi(\lambda_2) = 1$ und $\Phi(\lambda_n) = -1$ sowie

$$x_0 := \Phi(\lambda_1) = \frac{\lambda_n + \lambda_2 - 2\lambda_1}{\lambda_n - \lambda_2} = \frac{\lambda_n - \lambda_2 + 2(\lambda_2 - \lambda_1)}{\lambda_n - \lambda_2} = 1 + 2 \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_n - \lambda_2} > 1. \quad (8.5)$$

Mit Hilfe dieser Transformation können wir nun das für die Berechnung der Eigenvektoren benötigte p_ϵ optimal wählen: Zu einer gegebenen Dimension $m \in \mathbb{N}$ setzen wir

$$p_m(x) := \frac{1}{c_m(x_0)} c_m(\Phi(x)) \quad (8.6)$$

und erhalten

$$p_m(\lambda_1) = \frac{1}{c_m(x_0)} c_m(\Phi(\lambda_1)) = 1, \quad |p_m(x)| \leq \frac{1}{c_m(x_0)} \quad \text{für alle } x \in [\lambda_2, \lambda_n].$$

Um konkret angeben zu können, wie gut die durch p_m induzierte Approximation des Eigenvektors ist, benötigen wir eine Abschätzung für $1/c_m(x_0)$:

Lemma 8.12 (Konvergenzrate) Wir definieren

$$\kappa := \frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} > 1, \quad \varrho := \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \quad (8.7)$$

und erhalten

$$\frac{1}{|c_m(x_0)|} = \frac{2\varrho^m}{1 + \varrho^{2m}} \leq 2\varrho^m \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.$$

Beweis. Da wir die Tschebyscheff-Polynome in der zweiten Darstellung aus Lemma 8.10 verwenden wollen, müssen wir $x_0 + \sqrt{x_0^2 - 1}$ geeignet darstellen. Wir beginnen mit

$$\begin{aligned} x_0^2 - 1 &= \left(1 + 2 \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_n - \lambda_2}\right)^2 - 1 = 1 + 4 \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_n - \lambda_2} + 4 \frac{(\lambda_2 - \lambda_1)^2}{(\lambda_n - \lambda_2)^2} - 1 \\ &= 4 \frac{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_n - \lambda_2) + (\lambda_2 - \lambda_1)^2}{(\lambda_n - \lambda_2)^2} = 4 \frac{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_n - \lambda_1)}{(\lambda_n - \lambda_2)^2}. \end{aligned}$$

Aus dieser Gleichung und (8.5) ergibt sich

$$\begin{aligned} x_0 + \sqrt{x_0^2 - 1} &= \frac{(\lambda_n - \lambda_2) + 2(\lambda_2 - \lambda_1) + 2\sqrt{\lambda_2 - \lambda_1}\sqrt{\lambda_n - \lambda_1}}{\lambda_n - \lambda_2} \\ &= \frac{(\lambda_2 - \lambda_1) + (\lambda_n - \lambda_1) + 2\sqrt{\lambda_2 - \lambda_1}\sqrt{\lambda_n - \lambda_1}}{\lambda_n - \lambda_2} \\ &= \frac{(\sqrt{\lambda_2 - \lambda_1} + \sqrt{\lambda_n - \lambda_1})^2}{\lambda_n - \lambda_2} = \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_n - \lambda_2} \left(1 + \sqrt{\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1}}\right)^2 \\ &= \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{(\lambda_n - \lambda_1) - (\lambda_2 - \lambda_1)} (1 + \sqrt{\kappa})^2 = \left(\frac{\lambda_n - \lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} - 1\right)^{-1} (1 + \sqrt{\kappa})^2 \\ &= \frac{1}{\kappa - 1} (1 + \sqrt{\kappa})^2 = \frac{(\sqrt{\kappa} + 1)^2}{(\sqrt{\kappa} + 1)(\sqrt{\kappa} - 1)} = \frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1} = 1/\varrho. \end{aligned}$$

Einsetzen in die zweite Darstellung in Lemma 8.10 ergibt

$$c_m(x_0) = \frac{1}{2}((1/\varrho)^m + (1/\varrho)^{-m}) = \frac{1}{2}(\varrho^{-m} + \varrho^m) = \frac{1 + \varrho^{2m}}{2\varrho^m}$$

und damit

$$\frac{1}{c_m(x_0)} = \frac{2\varrho^m}{\varrho^{2m} + 1}. \quad \blacksquare$$

Die für uns wichtigsten Eigenschaften des durch (8.6) gegebenen transformierten Tschebyscheff-Polynoms fassen wir in folgendem Lemma zusammen:

Lemma 8.13 (Transformiertes Polynom) *Sei $m \in \mathbb{N}_0$, und seien $\lambda_1 < \lambda_2 \leq \lambda_n$ gegeben. Dann existiert ein Polynom $p_m \in \Pi_m$ mit*

$$p_m(\lambda_1) = 1, \quad \max\{|p_m(x)| : x \in [\lambda_2, \lambda_n]\} \leq \frac{2\varrho^m}{1 + \varrho^{2m}}$$

mit ϱ aus (8.7).

Beweis. Wir definieren p_m durch (8.6) und wenden Lemma 8.12 an. Da c_m auf $[-1, 1]$ nur Werte zwischen -1 und 1 annehmen kann, kann p_m auf $[\lambda_2, \lambda_n]$ nur Werte zwischen $-1/c_m(x_0)$ und $1/c_m(x_0)$ annehmen. \blacksquare

Aus diesem Lemma folgt unmittelbar die folgende Konvergenzaussage für den Eigenvektor $\mathbf{x}^{(1)}$:

Folgerung 8.14 (Eigenvektor-Approximation) *Es gilt*

$$\tan \angle(p_m(\mathbf{A})\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}) \leq \frac{2\rho^m}{1 + \rho^{2m}} \tan \angle(\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.$$

Beweis. Wir kombinieren Lemma 8.8 mit Lemma 8.13. ■

Die Größe κ beschreibt, wie groß der Abstand zwischen λ_1 und λ_2 im Vergleich zum „Durchmesser“ $\lambda_n - \lambda_1$ des gesamten Spektrums ist. Je kleiner dieser Abstand wird, desto größer wird κ und desto näher rückt die „Konvergenzrate“ ρ an eins heran. Wie schon bei der Vektoriteration ist es also auch hier von Vorteil, wenn die Eigenwerte, die wir berechnen wollen, einen möglichst großen Abstand zum Rest des Spektrums aufweisen.

Man beachte, dass Folgerung 8.14 nur eine Existenzaussage bietet: Wir wissen, dass mit $p_m(\mathbf{A})\mathbf{q}^{(1)}$ ein Vektor in dem Krylow-Raum $\mathcal{K}(\mathbf{A}, \mathbf{q}^{(1)}, m)$ existiert, der $\mathbf{e}^{(1)}$ approximiert, aber wir können ihn nicht berechnen, weil wir die exakten Werte von λ_1, λ_2 und λ_n nicht kennen, die für die Konstruktion von p_m erforderlich wären.

Bei Eigenwerten dagegen können wir einen direkten Bezug zwischen den berechenbaren Näherungswerten $\lambda_1^{(m)}$ und dem Eigenwert λ_1 herstellen:

Satz 8.15 *Sei $\mathbf{A} = \mathbf{A}^* \in \mathbb{K}^{n \times n}$. Seien $\lambda_1 < \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ die Eigenwerte von \mathbf{A} und sei $\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(n)}$ eine korrespondierende orthonormale Eigenvektorbasis. Sei $m \in \{1, \dots, m_0\}$ und sei $\lambda_1^{(m)}$ der kleinste Eigenwert von $\widehat{\mathbf{A}}^{(m)}$. Dann gilt*

$$\lambda_1 \leq \lambda_1^{(m)} \leq \lambda_1 + (\lambda_n - \lambda_1) \left(\frac{2\rho^{m-1}}{1 + \rho^{2(m-1)}} \right)^2 \tan^2 \angle(\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}).$$

für die Konstante ρ aus (8.7).

Beweis. Die linke Abschätzung folgt direkt aus

$$\lambda_1^{(m)} = \min_{\widehat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^k \setminus \{\mathbf{0}\}} \Lambda_{\widehat{\mathbf{A}}^{(m)}}(\widehat{\mathbf{x}}) = \min_{\mathbf{x} \in \text{Bild } \mathbf{Q}^{(m)} \setminus \{\mathbf{0}\}} \Lambda_A(\mathbf{x}) \geq \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}} \Lambda_A(\mathbf{x}) = \lambda_1.$$

Für die rechte Abschätzung kombinieren wir Folgerung 8.14 mit Lemma 5.8. Wir setzen $\mathbf{y} := p_{m-1}(\mathbf{A})\mathbf{q}^{(1)}$ und erhalten

$$\begin{aligned} \lambda_1^{(m)} - \lambda_1 &\leq \Lambda_A(\mathbf{y}) - \lambda_1 = |\Lambda_A(\mathbf{y}) - \lambda_1| \leq \|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\| \sin^2(\mathbf{y}, \mathbf{x}^{(1)}) \\ &\leq \|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\| \tan^2(p_{m-1}(\mathbf{A})\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}) \\ &\leq \|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\| \left(\frac{2\rho^{m-1}}{1 + \rho^{2(m-1)}} \right)^2 \tan^2 \angle(\mathbf{q}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}). \end{aligned}$$

Es bleibt nur noch die Norm der Matrix $\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}$ abzuschätzen:

$$\|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\| = \|\mathbf{QDQ}^* - \lambda_1 \mathbf{QQ}^*\| = \|\mathbf{Q}(\mathbf{D} - \lambda_1 \mathbf{I})\mathbf{Q}^*\| = \|\mathbf{D} - \lambda_1 \mathbf{I}\|.$$

Mit der Abschätzung

$$\|(\mathbf{D} - \lambda_1 \mathbf{I})\mathbf{z}\|^2 = \sum_{i=1}^n (\lambda_i - \lambda_1)^2 |z_i|^2 \leq \sum_{i=1}^n (\lambda_n - \lambda_1)^2 |z_i|^2 = (\lambda_n - \lambda_1)^2 \|\mathbf{z}\|^2$$

folgt $\|\mathbf{A} - \lambda_1 \mathbf{I}\| = \|\mathbf{D} - \lambda_1 \mathbf{I}\| \leq \lambda_n - \lambda_1$, also die Behauptung. \blacksquare

Bemerkung 8.16 (Mehrfache Eigenwerte) Die Voraussetzung $\lambda_1 < \lambda_2$ ist in diesem Fall nicht entscheidend, sie dient lediglich der Vereinfachung des Beweises. Falls $\lambda_1 = \dots = \lambda_k < \lambda_{k+1}$ gelten sollte, können wir den Beweis wie gehabt durchführen und müssen lediglich das Polynom p_m so wählen, dass es auf $[\lambda_{k+1}, \lambda_n]$ kleine Werte annimmt. Außerdem müssen wir den Tangens des Winkels zwischen $\mathbf{q}^{(1)}$ und $\mathbf{x}^{(1)}$ durch den Tangens des Winkels zwischen $\mathbf{q}^{(1)}$ und dem von $\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(k)}$ aufgespannten Eigenraum zum Eigenwert λ_1 ersetzen.

Die Fehlerabschätzung gilt dann mit λ_{k+1} anstelle von λ_2 , entscheidend ist also der Abstand zwischen $\lambda_1 = \dots = \lambda_k$ und dem Rest des Spektrums.

Bemerkung 8.17 (Modellproblem) Im Fall des zweidimensionalen Modellproblems sind wir vor allem daran interessiert, mit kleinen Gitterschrittweiten $h \in \mathbb{R}_{>0}$ zu arbeiten. Für kleines h stellt man fest, dass $\lambda_n \approx ch^{-2}$ für eine Konstante $c \in \mathbb{R}_{>0}$ gilt, der größte Eigenwert wird also sehr groß werden. Damit folgt auch $\kappa \approx ch^{-2}$, und wir erhalten

$$\varrho = \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} = 1 - \frac{2}{\sqrt{\kappa} + 1} \approx 1 - \frac{2}{\sqrt{ch^{-2}} + 1} \approx 1 - \frac{2}{\sqrt{c}} h,$$

die Konvergenzgeschwindigkeit unseres Verfahrens wird also für zunehmend feine Gitter zunehmend langsamer werden.

9 Vorkonditionierte Eigenwertverfahren

Die Konvergenz des Lanczos-Verfahrens hängt von dem Verhältnis zwischen dem größten und dem kleinsten Eigenwert der Matrix \mathbf{A} ab, also von ihrer Konditionszahl. Gerade bei Eigenwertproblemen, die im Kontext partieller Differentialgleichungen auftreten, wird diese Konditionszahl sehr hoch sein, so dass wir mit einer relativ langsamen Konvergenz rechnen müssen. Deshalb interessiert man sich für Verfahren, die weniger empfindlich auf die Konditionszahl reagieren. Die Idee besteht darin, einen *Vorkonditionierer* zu verwenden, also eine Matrix \mathbf{B} , die so gewählt ist, dass einerseits die Konditionszahl der Matrix \mathbf{BA} günstiger als die der ursprünglichen Matrix ist und sich andererseits Matrix-Vektor-Multiplikationen mit der Matrix \mathbf{B} effizient durchführen lassen. Mit Hilfe der so entstehenden *vorkonditionierten Eigenwertverfahren* lassen sich auch sehr große Eigenwertprobleme effizient behandeln.

9.1 Richardson-Iteration

Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ wieder eine selbstadjungierte Matrix, es gelte also $\mathbf{A} = \mathbf{A}^*$. Nach Folgerung 3.45 finden wir eine orthogonale Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und eine Diagonalmatrix

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix},$$

mit

$$\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{D},$$

und da \mathbf{A} selbstadjungiert ist, sind alle Eigenwerte reell. Offenbar lässt sich leicht sicherstellen, dass sie aufsteigend sortiert sind, dass also

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$$

gilt. Wir interessieren uns für den kleinsten Eigenwert λ_1 der Matrix.

Eines der einfachsten iterativen Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme der Form

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{9.1}$$

mit vorgegebener rechter Seite \mathbf{b} ist die *Richardson-Iteration*

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} - \theta(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{b}) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0,$$

9 Vorkonditionierte Eigenwertverfahren

die ausgehend von einem Startvektor $\mathbf{x}^{(0)}$ eine Folge von Näherungslösungen berechnet. Dabei ist die korrekte Wahl des *Dämpfungsparameters* $\theta \in \mathbb{R}_{>0}$ entscheidend für das Konvergenzverhalten.

Wir sind allerdings nicht daran interessiert, lineare Gleichungssysteme zu lösen, sondern daran, den kleinsten Eigenwert und einen passenden Eigenvektor zu berechnen. Zu diesem Zweck ersetzen wir (9.1) durch die Eigenwertgleichung

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda_1\mathbf{x},$$

die sich in die Form eines linearen Gleichungssystems

$$(\mathbf{A} - \lambda_1\mathbf{I})\mathbf{x} = \mathbf{0}$$

mit der rechten Seite $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ bringen lässt. Wenn wir annehmen, dass uns eine Näherung $\mu \in \mathbb{R}$ des Eigenwerts λ_1 zur Verfügung steht, können wir das Richardson-Verfahren anwenden und erhalten die Iterationsvorschrift

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} - \theta(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(m)} - \mu\mathbf{x}^{(m)}) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0. \quad (9.2)$$

Für die Analyse dieser Iteration empfiehlt es sich, die Matrix \mathbf{A} zu diagonalisieren. Nach Folgerung 3.45 finden wir eine orthogonale Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und eine Diagonalmatrix

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{pmatrix},$$

die die Gleichung

$$\mathbf{Q}^*\mathbf{A}\mathbf{Q} = \mathbf{D}$$

erfüllen. Da \mathbf{A} selbstadjungiert ist, müssen alle Eigenwerte reell sein, und wir dürfen davon ausgehen, dass sie aufsteigend sortiert sind, dass also

$$\lambda_1 \leq \lambda_n \leq \dots \leq \lambda_n$$

gilt. Wir führen die transformierten Vektoren

$$\widehat{\mathbf{x}}^{(m)} := \mathbf{Q}^*\mathbf{x}^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

ein und erhalten mit $\mathbf{x}^{(m)} = \mathbf{Q}\widehat{\mathbf{x}}^{(m)}$ aus (9.2) die Gleichung

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{x}}^{(m+1)} &= \mathbf{Q}^*\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{Q}^*\mathbf{x}^{(m)} - \theta(\mathbf{Q}^*\mathbf{A}\mathbf{x}^{(m)} - \mu\mathbf{Q}^*\mathbf{x}^{(m)}) \\ &= \widehat{\mathbf{x}}^{(m)} - \theta(\mathbf{Q}^*\mathbf{A}\mathbf{Q}\widehat{\mathbf{x}}^{(m)} - \mu\widehat{\mathbf{x}}^{(m)}) \\ &= \widehat{\mathbf{x}}^{(m)} - \theta(\mathbf{D}\widehat{\mathbf{x}}^{(m)} - \mu\widehat{\mathbf{x}}^{(m)}) \\ &= (\mathbf{I} - \theta(\mathbf{D} - \mu\mathbf{I}))\widehat{\mathbf{x}}^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0. \end{aligned}$$

Für die einzelnen Komponenten des Vektors $\widehat{\mathbf{x}}^{(m)}$ folgt daraus

$$\widehat{x}_i^{(m)} = (1 - \theta(\lambda_i - \mu))^m \widehat{x}_i^{(0)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0, i \in \{1, \dots, n\}. \quad (9.3)$$

Bei der Untersuchung dieses Ausdrucks sind zwei Fälle zu unterscheiden: Für $i \in \{1, \dots, n\}$ mit $\lambda_i \leq \mu$ erhalten wir

$$1 - \theta(\lambda_i - \mu) = 1 + \theta(\mu - \lambda_i) \geq 1, \quad (9.4)$$

diese Komponenten des Iterationsvektors werden also wachsen. Am stärksten wächst dabei die erste Komponente, da λ_1 der kleinste Eigenwert ist.

Für $i \in \{1, \dots, n\}$ mit $\lambda_i > \mu$ dagegen ergibt sich

$$1 + \theta\mu - \theta\lambda_i = 1 - \theta(\lambda_i - \mu) < 1.$$

Falls wir

$$\mu < \lambda_n, \quad \theta < \frac{2}{\lambda_n - \mu} \quad (9.5)$$

sicherstellen können, folgt

$$-1 < 1 - \theta(\lambda_n - \mu) \leq 1 - \theta(\lambda_i - \mu) < 1,$$

also wird diese Komponente des Iterationsvektors fallen.

Falls wir die beiden Bedingungen (9.5) sicherstellen können, werden demnach alle Komponenten zu großen Eigenwerten gegen null konvergieren, die Richardson-Iteration wird also einen Vektor aus dem zu den kleinen Eigenwerten gehörenden invarianten Unterraum berechnen. Die erste der beiden Bedingungen lässt sich einfach erfüllen, indem wir den Rayleigh-Quotienten (vgl. Definition 5.6) verwenden: Für jeden beliebigen Vektor $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ erfüllt

$$\mu := \Lambda_A(\mathbf{x}) = \frac{\langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2}{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2}$$

nach Lemma 8.1 die Ungleichungen

$$\lambda_1 \leq \mu \leq \lambda_n, \quad (9.6)$$

und falls $x_i \neq 0$ für ein beliebiges $i \in \{1, \dots, n\}$ mit $\lambda_i < \lambda_n$ gilt, folgt auch $\mu < \lambda_n$.

Offenbar kann die Rayleigh-Iteration nur gegen einen gewünschten Eigenvektor konvergieren, falls der Startvektor $\mathbf{x}^{(0)}$ Anteile dieses Eigenvektors enthält, und in diesem Fall muss $\Lambda_A(\mathbf{x}^{(0)}) < \lambda_n$ gelten.

Falls wir μ über den Rayleigh-Quotienten berechnen, folgt aus (9.6), dass wir die zweite der Bedingungen (9.5) erfüllen können, indem wir grob durch

$$\frac{2}{\lambda_n - \mu} \geq \frac{2}{\lambda_n - \lambda_1}$$

abschätzen und

$$\theta < \frac{2}{\lambda_n - \lambda_1}$$

fordern. Da häufig wenigstens grobe Schranken für das Spektrum einer zu untersuchenden Matrix berechnet werden können, beispielsweise mit Hilfe der Gershgorin-Kreise (vgl. Satz 7.12), ist es möglich, in dieser Weise die Konvergenz der Richardson-Iteration zu garantieren.

Aus der Gleichung (9.3) können wir eine einfache Konvergenzaussage gewinnen:

9 Vorkonditionierte Eigenwertverfahren

Satz 9.1 (Konvergenz) Sei $k \in \mathbb{N}$ und $\theta \in \mathbb{R}_{>0}$ so gewählt, dass

$$\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_k \leq \mu < \lambda_{k+1} \leq \dots \leq \lambda_n$$

gilt. Sei

$$\mathbf{P} := \mathbf{Q}\hat{\mathbf{P}}\mathbf{Q}^*, \quad \hat{\mathbf{P}} := \begin{pmatrix} \mathbf{I}_k & \\ & \mathbf{0} \end{pmatrix} \in \mathbb{K}^{n \times n}.$$

Dann gelten

$$\begin{aligned} \|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(m+1)}\|_2 &\leq \varrho \|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(m)}\|_2, \\ \|\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m+1)}\|_2 &\geq \|\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m)}\|_2 \end{aligned} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

mit der durch

$$\varrho := \max\{1 - \theta(\lambda_{k+1} - \mu), \theta(\lambda_n - \mu) - 1\}$$

gegebenen Konvergenzrate. Die optimale Konvergenzrate

$$\varrho_{\text{opt}} = \frac{(\lambda_n - \mu) - (\lambda_{k+1} - \mu)}{(\lambda_n - \mu) + (\lambda_{k+1} - \mu)} < 1$$

wird für den Parameter

$$\theta_{\text{opt}} = \frac{2}{(\lambda_n - \mu) + (\lambda_{k+1} - \mu)}$$

angenommen, liegt aber für alle $\theta \in (0, \theta_{\text{opt}}]$ unter eins.

Beweis. Infolge der Anordnung der Eigenwerte erhalten wir

$$1 - \theta(\lambda_n - \mu) \leq 1 - \theta(\lambda_i - \mu) \leq 1 - \theta(\lambda_{k+1} - \mu) \quad \text{für alle } i \in \{k+1, \dots, n\}.$$

Damit kann insbesondere

$$|1 - \theta(\lambda_n - \mu)| \geq |1 - \theta(\lambda_{k+1} - \mu)|$$

nur dann gelten, wenn $1 - \theta(\lambda_n - \mu)$ negativ ist und

$$\theta(\lambda_n - \mu) - 1 \geq 1 - \theta(\lambda_{k+1} - \mu)$$

erfüllt. Also folgt

$$|1 - \theta(\lambda_i - \mu)| \leq \max\{1 - \theta(\lambda_{k+1} - \mu), \theta(\lambda_n - \mu) - 1\} = \varrho \quad \text{für alle } i \in \{k+1, \dots, n\}.$$

Mit (9.4) erhalten wir

$$|1 - \theta(\lambda_i \mu)| \geq 1 \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, k\}.$$

Dank (9.3) folgen daraus

$$\begin{aligned}\|(\mathbf{I} - \widehat{\mathbf{P}})\widehat{\mathbf{x}}^{(m+1)}\|_2^2 &= \sum_{i=k+1}^n |\widehat{x}_i^{(m+1)}|^2 \leq \sum_{i=k+1}^n \varrho^2 |\widehat{x}_i^{(m)}|^2 = \varrho^2 \|(\mathbf{I} - \widehat{\mathbf{P}})\widehat{\mathbf{x}}^{(m)}\|_2^2, \\ \|\widehat{\mathbf{P}}\widehat{\mathbf{x}}^{(m+1)}\|_2^2 &= \sum_{i=1}^k |\widehat{x}_i^{(m+1)}|^2 \geq \sum_{i=1}^k |\widehat{x}_i^{(m)}|^2 = \|\widehat{\mathbf{P}}\widehat{\mathbf{x}}^{(m)}\|_2^2\end{aligned}$$

für alle $m \in \mathbb{N}_0$. Durch Rücktransformation ergibt sich das gewünschte Ergebnis

$$\begin{aligned}\|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(m+1)}\|_2 &= \|(\mathbf{I} - \widehat{\mathbf{P}})\widehat{\mathbf{x}}^{(m+1)}\|_2 \leq \varrho \|(\mathbf{I} - \widehat{\mathbf{P}})\widehat{\mathbf{x}}^{(m)}\|_2 = \varrho \|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(m)}\|_2, \\ \|\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m+1)}\|_2 &= \|\widehat{\mathbf{P}}\widehat{\mathbf{x}}^{(m+1)}\|_2 \geq \|\widehat{\mathbf{P}}\widehat{\mathbf{x}}^{(m)}\|_2 = \|\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m)}\|_2 \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.\end{aligned}$$

Für die Bestimmung des optimalen Dämpfungsparameters θ gehen wir davon aus, dass ϱ als Maximum einer monoton fallenden und einer monoton wachsenden Funktion nur dann minimal sein kann, wenn

$$1 - \theta(\lambda_{k+1} - \mu) = \theta(\lambda_n - \mu) - 1$$

gilt, und diese Gleichung ist äquivalent mit

$$2 = \theta((\lambda_{k+1} - \mu) + (\lambda_n - \mu)).$$

Daraus ergibt sich die Formel für θ_{opt} . Durch Einsetzen in die Definition der Konvergenzrate ϱ erhalten wir

$$\begin{aligned}\varrho_{\text{opt}} &= 1 - \theta_{\text{opt}}(\lambda_{k+1} - \mu) = 1 - \frac{2(\lambda_{k+1} - \mu)}{(\lambda_n - \mu) + (\lambda_{k+1} - \mu)} \\ &= \frac{(\lambda_n - \mu) + (\lambda_{k+1} - \mu) - 2(\lambda_{k+1} - \mu)}{(\lambda_n - \mu) + (\lambda_{k+1} - \mu)} = \frac{(\lambda_n - \mu) - (\lambda_{k+1} - \mu)}{(\lambda_n - \mu) + (\lambda_{k+1} - \mu)},\end{aligned}$$

und wegen $\mu < \lambda_{k+1}$ folgt $\varrho_{\text{opt}} < 1$. Für ein beliebiges $\theta \in (0, \theta_{\text{opt}}]$ erhalten wir

$$1 > 1 - \theta(\lambda_{k+1} - \mu) \geq 1 - \theta_{\text{opt}}(\lambda_{k+1} - \mu) = \theta_{\text{opt}}(\lambda_n - \mu) - 1 \geq \theta(\lambda_n - \mu) - 1,$$

also insbesondere $\varrho < 1$. ■

Die Konvergenzaussage lässt sich kürzer fassen, indem wir den Winkel zwischen einem Vektor und einem Teilraum definieren. Wir orientieren uns an Definition 5.4 und setzen

$$\sin \angle(\mathbf{x}, \mathcal{V}) := \min \left\{ \frac{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2} : \mathbf{y} \in \mathcal{V} \right\}$$

für beliebige Vektoren $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ und Teilräume $\mathcal{V} \subseteq \mathbb{K}^n$. Entsprechend erhalten wir

$$\cos \angle(\mathbf{x}, \mathcal{V}) := \sqrt{1 - \sin^2 \angle(\mathbf{x}, \mathcal{V})}, \quad \tan \angle(\mathbf{x}, \mathcal{V}) := \frac{\sin \angle(\mathbf{x}, \mathcal{V})}{\cos \angle(\mathbf{x}, \mathcal{V})}$$

und können damit die folgende Abschätzung formulieren:

Folgerung 9.2 (Konvergenz) Seien k , θ und ϱ wie in Satz 9.1 gegeben. Sei \mathcal{E}_k der von den Eigenvektoren zu den Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ aufgespannte Teilraum.

Falls $\tan \angle(\mathbf{x}^{(0)}, \mathcal{E}_k) < \infty$ gilt, falls also der Startvektor Komponenten in \mathcal{E}_k aufweist, folgt

$$\tan \angle(\mathbf{x}^{(m)}, \mathcal{E}_k) \leq \varrho^m \tan \angle(\mathbf{x}^{(0)}, \mathcal{E}_k) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.$$

Beweis. Sei $m \in \mathbb{N}_0$. Da \mathbf{P} die orthogonale Projektion auf \mathcal{E}_k ist, folgt mit dem Satz von Pythagoras

$$\|\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2 = \|\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m)} + (\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2 = \|\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2 + \|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2, \quad (9.7)$$

und da $\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m)}$ die bestmögliche Approximation des Vektors $\mathbf{x}^{(m)}$ in \mathcal{E}_k ist, finden wir

$$\begin{aligned} \sin^2 \angle(\mathbf{x}^{(m)}, \mathcal{E}_k) &= \min \left\{ \frac{\|\mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{y}\|_2^2}{\|\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2} : \mathbf{y} \in \mathcal{E}_k \right\} = \frac{\|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2}{\|\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2}, \\ \cos^2 \angle(\mathbf{x}^{(m)}, \mathcal{E}_k) &= 1 - \sin^2 \angle(\mathbf{x}^{(m)}, \mathcal{E}_k) = \frac{\|\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2 - \|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2}{\|\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2} = \frac{\|\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2}{\|\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2}, \\ \tan^2 \angle(\mathbf{x}^{(m)}, \mathcal{E}_k) &= \frac{\sin^2 \angle(\mathbf{x}^{(m)}, \mathcal{E}_k)}{\cos^2 \angle(\mathbf{x}^{(m)}, \mathcal{E}_k)} = \frac{\|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2}{\|\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m)}\|_2^2}. \end{aligned} \quad (9.8)$$

Aus Satz 9.1 folgt

$$\frac{\|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(m+1)}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m+1)}\|_2} \leq \varrho \frac{\|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(m)}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m)}\|_2} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0,$$

und mit einer einfachen Induktion folgt daraus

$$\frac{\|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(m)}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{x}^{(m)}\|_2} \leq \varrho^m \frac{\|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{x}^{(0)}\|_2}{\|\mathbf{P}\mathbf{x}^{(0)}\|_2} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.$$

Indem wir (9.8) anwenden erhalten wir das gewünschte Ergebnis. ■

9.2 Optimale Dämpfung

Es wäre von Vorteil, wenn wir den Dämpfungsparameter θ der Richardson-Iteration in optimaler Weise durch einen geeigneten Algorithmus wählen lassen könnten.

Gemäß (9.2) ist die neue Iterierte $\mathbf{x}^{(m+1)}$ eine Linearkombination zwischen der alten Iterierten $\mathbf{x}^{(m)}$ und dem *Residuum*

$$\mathbf{r}^{(m)} := \mu \mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(m)},$$

also stellt sich die Frage, wie wir diese Linearkombination wählen sollen, um dem gesuchten Eigenvektor möglichst nahe zu kommen.

Bei der Beantwortung dieser Frage können wir uns wieder von Lemma 8.1 leiten lassen: Der gewünschte Eigenwert λ_1 ist das Minimum des Rayleigh-Quotienten, also bietet es sich an,

$$\mathbf{x}^{(m+1)} \in \text{span}\{\mathbf{x}^{(m)}, \mathbf{r}^{(m)}\}$$

so zu wählen, dass

$$\Lambda_A(\mathbf{x}^{(m+1)}) \leq \Lambda_A(\mathbf{z}) \quad \text{für alle } \mathbf{z} \in \text{span}\{\mathbf{x}^{(m)}, \mathbf{r}^{(m)}\} \quad (9.9)$$

gilt. Indem wir $\mathbf{x}^{(m)}$ und $\mathbf{r}^{(m)}$ als Spalten der Matrix

$$\mathbf{V}^{(m)} := (\mathbf{x}^{(m)} \quad \mathbf{r}^{(m)})$$

verwenden und die nächste Iterierte durch

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{V}^{(m)} \mathbf{y}^{(m+1)}$$

ausdrücken, folgt

$$\lambda_A(\mathbf{V}^{(m)} \mathbf{y}^{(m+1)}) = \frac{\langle \mathbf{A} \mathbf{V}^{(m)} \mathbf{y}^{(m+1)}, \mathbf{V}^{(m)} \mathbf{y}^{(m+1)} \rangle_2}{\langle \mathbf{V}^{(m)} \mathbf{y}^{(m+1)}, \mathbf{V}^{(m)} \mathbf{y}^{(m+1)} \rangle_2} = \frac{\langle (\mathbf{V}^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{V}^{(m)} \mathbf{y}^{(m+1)}, \mathbf{y}^{(m+1)} \rangle_2}{\langle (\mathbf{V}^{(m)})^* \mathbf{V}^{(m)} \mathbf{y}^{(m+1)}, \mathbf{y}^{(m+1)} \rangle_2},$$

wir können also die Minimierung des Rayleigh-Quotienten des ursprünglichen Problems auf die Minimierung eines sehr ähnlichen Quotienten

$$\frac{\langle \mathbf{B}^{(m)} \mathbf{y}^{(m+1)}, \mathbf{y}^{(m+1)} \rangle_2}{\langle \mathbf{G}^{(m)} \mathbf{y}^{(m+1)}, \mathbf{y}^{(m+1)} \rangle_2}$$

mit zweidimensionalen Matrizen

$$\mathbf{B}^{(m)} := (\mathbf{V}^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{V}^{(m)}, \quad \mathbf{G}^{(m)} := (\mathbf{V}^{(m)})^* \mathbf{V}^{(m)}$$

zurückführen. Stünde im Nenner lediglich das Skalarprodukt des Vektors $\mathbf{y}^{(m+1)}$ mit sich selbst, wüssten wir nach Lemma 8.1, dass das Minimum des Rayleigh-Quotienten gerade der kleinste Eigenwert der Matrix $\mathbf{B}^{(m)}$ wäre, wir müssten also lediglich ein zweidimensionales Eigenwertproblem lösen.

Offenbar tritt diese vorteilhafte Situation nach Lemma 3.31 genau dann ein, wenn $(\mathbf{V}^{(m)})^* \mathbf{V}^{(m)} = \mathbf{I}$ gilt, wenn also $\mathbf{V}^{(m)}$ orthogonal ist. Da wir lediglich an dem Bild dieser Matrix interessiert sind, bietet es sich an, sie zu orthogonalisieren. Im einfachsten Fall könnten wir beispielsweise die *Gramsche Matrix* $\mathbf{G}^{(m)}$ berechnen und ihre Cholesky-Zerlegung

$$\mathbf{L} \mathbf{L}^* = \mathbf{G}^{(m)}$$

verwenden, um mit

$$\widehat{\mathbf{V}}^{(m)} := \mathbf{V}^{(m)} (\mathbf{L}^*)^{-1}$$

eine orthogonale Basis zu erhalten:

$$(\widehat{\mathbf{V}}^{(m)})^* \widehat{\mathbf{V}}^{(m)} = \mathbf{L}^{-1} (\mathbf{V}^{(m)})^* \mathbf{V}^{(m)} (\mathbf{L}^*)^{-1} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{G}^{(m)} (\mathbf{L}^*)^{-1} = \mathbf{I}.$$

9 Vorkonditionierte Eigenwertverfahren

Allerdings ist damit zu rechnen, dass im Laufe der Iteration $\mathbf{x}^{(m)}$ dem gesuchten Eigenvektor relativ nahe kommen wird, so dass $\mathbf{r}^{(m)}$ im Verhältnis sehr klein zu werden droht. Damit wäre die Gramsche Matrix $\mathbf{G}^{(m)}$ schlecht konditioniert und die Berechnung der Cholesky-Zerlegung deshalb potentiell ungenau.

Eine bessere Alternative besteht darin, die numerisch sehr stabilen *Householder-Spiegelungen* zu verwenden. Dabei handelt es sich um Matrizen der Form

$$\mathbf{Q}_v := \mathbf{I} - 2 \frac{\mathbf{v}\mathbf{v}^*}{\mathbf{v}^*\mathbf{v}},$$

bei denen sich der Vektor $\mathbf{v} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ gerade so wählen lässt, dass ein beliebiger gegebener Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$ auf ein Vielfaches des ersten kanonischen Einheitsvektors $\mathbf{e}^{(1)}$ abgebildet wird: Man kann leicht nachrechnen, dass für

$$\mathbf{v} = \mathbf{x} + \operatorname{sgn}(x_1) \|\mathbf{x}\|_2 \mathbf{e}^{(1)}$$

gerade

$$\mathbf{Q}_v \mathbf{x} = -\operatorname{sgn}(x_1) \|\mathbf{x}\|_2$$

gilt. Indem wir Householder-Spiegelungen auf die Matrix $\mathbf{V}^{(m)}$ anwenden, können wir sie auf obere Dreiecksgestalt bringen:

$$\mathbf{Q}_2 \mathbf{Q}_1 \mathbf{V}^{(m)} = \mathbf{R}.$$

Dabei eliminiert \mathbf{Q}_1 in der ersten Spalte der Matrix alle Einträge unterhalb der Diagonalen, \mathbf{Q}_2 bewirkt dasselbe für die zweite Spalte des Ergebnisses. Da \mathbf{R} eine obere Dreiecksmatrix mit lediglich zwei Spalten ist, existiert eine Matrix $\widehat{\mathbf{R}} \in \mathbb{K}^{2 \times 2}$ mit

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{R}} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_2 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \widehat{\mathbf{R}},$$

und wir erhalten

$$\mathbf{Q}_2 \mathbf{Q}_1 \mathbf{V}^{(m)} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_2 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \widehat{\mathbf{R}}.$$

Da die Householder-Spiegelungen selbstadjungiert und damit selbstinvers sind, folgt

$$\mathbf{V}^{(m)} = \mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{I}_2 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \widehat{\mathbf{R}}.$$

Damit haben wir eine QR-Zerlegung der Matrix $\mathbf{V}^{(m)}$ gefunden:

$$\mathbf{V}^{(m)} = \mathbf{Q}^{(m)} \widehat{\mathbf{R}}, \quad \mathbf{Q}^{(m)} = \mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_2 \begin{pmatrix} \mathbf{I}_2 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}.$$

Im Unterschied zu konventionellen QR-Zerlegungen ist $\mathbf{Q}^{(m)}$ nicht quadratisch, sondern hat die Dimensionen der ursprünglichen Matrix $\mathbf{V}^{(m)}$. Nach Konstruktion enthält das Bild der orthogonalen Matrix $\mathbf{Q}^{(m)}$ das der Matrix $\mathbf{V}^{(m)}$, für injektives $\mathbf{V}^{(m)}$ stimmen beide sogar überein.

Indem wir $\mathbf{V}^{(m)}$ in dieser Weise orthogonalisieren und das zweidimensionale Eigenwertproblem für die Berechnung der nächsten Iterierten verwenden, erhalten wir den folgenden Algorithmus:

Algorithmus 9.3 (Gradientenverfahren) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungiert. Der folgende Algorithmus berechnet eine Folge $(\mathbf{x}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}_0}$, die unter geeigneten Bedingungen gegen einen Eigenvektor zu dem kleinsten Eigenwert von \mathbf{A} konvergiert.

```

 $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} / \|\mathbf{x}\|_2;$ 
 $\lambda \leftarrow \langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2;$ 
 $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x};$ 
while  $\|\mathbf{r}\|_2$  zu groß do begin
   $\mathbf{V} \leftarrow (\mathbf{x} \ \mathbf{r}) \in \mathbb{K}^{n \times 2};$ 
  Berechne eine QR-Zerlegung  $\mathbf{QR} = \mathbf{V}$  mit  $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times 2};$ 
   $\mathbf{C} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{Q};$ 
   $\mathbf{B} \leftarrow \mathbf{Q}^*\mathbf{C}; \quad \{ = \mathbf{Q}^*\mathbf{A}\mathbf{Q} \}$ 
  Finde einen normierten Eigenvektor  $\mathbf{y}$  für den minimalen Eigenwert  $\lambda$ 
  der Matrix  $\mathbf{B};$ 
   $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{Q}\mathbf{y};$ 
   $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{C}\mathbf{y} - \lambda\mathbf{x} \quad \{ = \mathbf{A}\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x} \}$ 
end

```

Die Bezeichnung „Gradientenverfahren“ ist dadurch motiviert, dass wegen Lemma 8.2

$$\text{span}\{\mathbf{x}^{(m)}, \mathbf{r}^{(m)}\} = \text{span}\{\mathbf{x}^{(m)}, \nabla \Lambda_A(\mathbf{x}^{(m)})\}$$

gilt, wir verbessern unsere Lösung also gerade in Richtung des Gradienten des Rayleigh-Quotienten. Da unser Algorithmus dabei die bestmögliche Schrittweite verwendet, entspricht er dem konventionellen Gradientenverfahren für die Minimierung des Rayleigh-Quotienten, allerdings mit der Besonderheit, dass die Iterationsvektoren in jedem Schritt normiert werden. Da der Rayleigh-Quotient invariant unter Skalierung des Arguments ist, ändert sich dadurch das Konvergenzverhalten nicht.

Anders als im Fall der Richardson-Iteration aktualisieren wir im Gradientenverfahren den Shift-Parameter μ in jedem Schritt. Da wir Konvergenz gegen den kleinsten Eigenwert λ_1 erwarten, bietet es sich an, eher die im Fall der Vektoriteration (vgl. Kapitel 5) verwendeten Argumente zu verwenden: Unser Ziel ist es, den Tangens der Winkels zwischen den Iterationsvektoren $\mathbf{x}^{(m)}$ und dem Eigenvektor $\mathbf{e}^{(1)}$ zu reduzieren.

Satz 9.4 (Konvergenz) Gelte $\mu < \lambda_n$ und $\lambda_1 < \lambda_2$. Mit

$$\varrho := \frac{\lambda_n - \lambda_2}{\lambda_n - \lambda_1} = 1 - \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{\lambda_n - \lambda_1} < 1$$

erhalten wir die Abschätzung

$$\tan \angle(\mathbf{x}^{(m+1)}, \mathbf{e}^{(1)}) \leq \varrho \tan \angle(\mathbf{x}^{(m)}, \mathbf{e}^{(1)}) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0,$$

das Gradientenverfahren konvergiert also gegen einen Eigenvektor zu dem kleinsten Eigenwert λ_1 .

9 Vorkonditionierte Eigenwertverfahren

Beweis. Da das Gradientenverfahren nach Konstruktion den bestmöglichen Dämpfungsparameter wählt, genügt es, eine Abschätzung für einen beliebigen solchen Parameter zu zeigen.

Indem wir wieder den Startvektor in der Eigenvektorbasis

$$\mathbf{x}^{(m)} = \sum_{\ell=1}^n \alpha_{\ell} \mathbf{e}^{(\ell)} \quad (9.10)$$

darstellen, erhalten wir

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} - \theta(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(m)} - \mu\mathbf{x}^{(m)}) = \sum_{\ell=1}^n (1 - \theta(\lambda_{\ell} - \mu)) \alpha_{\ell} \mathbf{e}^{(\ell)}. \quad (9.11)$$

Um zumindest den zu dem größten Eigenwert gehörenden Anteil zu eliminieren, bietet es sich an, θ so zu wählen, dass

$$1 - \theta(\lambda_n - \mu) = 0$$

gilt, also setzen wir

$$\theta := \frac{1}{\lambda_n - \mu}.$$

Es folgt

$$\begin{aligned} (1 - \theta(\lambda_{\ell} - \mu)) &= 1 - \frac{\lambda_{\ell} - \mu}{\lambda_n - \mu} \\ &= \frac{(\lambda_n - \mu) - (\lambda_{\ell} - \mu)}{\lambda_n - \mu} = \frac{\lambda_n - \lambda_{\ell}}{\lambda_n - \mu} \quad \text{für alle } \ell \in \{1, \dots, n\}. \end{aligned}$$

Wegen $\mu < \lambda_n$ und $\lambda_{\ell} \leq \lambda_n$ sind diese Größen nicht-negativ. Da wir anstreben, dass sich der zu λ_1 gehörende Anteil durchsetzt, sind wir an dem Quotienten

$$\frac{1 - \theta(\lambda_{\ell} - \mu)}{1 - \theta(\lambda_1 - \mu)} = \frac{\lambda_n - \lambda_{\ell}}{\lambda_n - \lambda_1} \leq \frac{\lambda_n - \lambda_2}{\lambda_n - \lambda_1} = \varrho \quad \text{für alle } \ell \in \{2, \dots, n\}$$

interessiert. Aufgrund der Voraussetzung $\lambda_1 < \lambda_2$ gilt $\varrho < 1$.

Die bestmögliche Approximation der Vektoren $\mathbf{x}^{(m)}$ und $\mathbf{x}^{(m+1)}$ im Aufspann des Eigenvektors $\mathbf{e}^{(1)}$ ist wegen (9.10) und (9.11) durch

$$\mathbf{y}^{(m)} := \alpha_1 \mathbf{e}^{(1)}, \quad \mathbf{y}^{(m+1)} := (1 - \theta(\lambda_1 - \mu)) \alpha_1 \mathbf{e}^{(1)}$$

gegeben, so dass wir für den Tangens die Abschätzung

$$\begin{aligned} \tan^2 \angle(\mathbf{x}^{(m+1)}, \mathbf{e}^{(1)}) &= \frac{\|\mathbf{x}^{(m+1)} - \mathbf{y}\|_2^2}{\|\mathbf{y}\|_2^2} = \frac{\sum_{\ell=2}^n (1 - \theta(\lambda_{\ell} - \mu))^2 |\alpha_{\ell}|^2}{(1 - \theta(\lambda_1 - \mu))^2 |\alpha_1|^2} \\ &\leq \frac{\varrho^2 \sum_{\ell=2}^n |\alpha_{\ell}|^2}{|\alpha_1|^2} = \varrho^2 \frac{\|\mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{y}^{(m)}\|_2^2}{\|\mathbf{y}^{(m)}\|_2^2} = \varrho^2 \tan^2 \angle(\mathbf{x}^{(m)}, \mathbf{e}^{(1)}) \end{aligned}$$

erhalten. Also konvergiert das Gradientenverfahren. ■

Bemerkung 9.5 (Mehrfacher Eigenwert) Falls $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_k < \lambda_{k+1}$ gilt, erhalten wir ein leicht modifiziertes Konvergenzresultat: Aus der Darstellung

$$\mathbf{x}^{(0)} = \sum_{\ell=1}^n \alpha_\ell \mathbf{e}^{(\ell)}$$

des Startvektors können wir einen Vektor

$$\mathbf{e} := \sum_{\ell=1}^k \alpha_\ell \mathbf{e}^{(\ell)}$$

konstruieren. Falls $\mathbf{e} \neq \mathbf{0}$ gilt, ist \mathbf{e} ein Eigenvektor zu dem mehrfachen Eigenwert $\lambda_1 = \dots = \lambda_k$, und wir können wir in Satz 9.4 vorgehen, um

$$\tan \angle(\mathbf{x}^{(m+1)}, \mathbf{e}) \leq \varrho \tan \angle(\mathbf{x}^{(m)}, \mathbf{e}) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

mit der Konvergenzrate

$$\varrho := \frac{\lambda_n - \lambda_{k+1}}{\lambda_n - \lambda_1} = 1 - \frac{\lambda_{k+1} - \lambda_1}{\lambda_n - \lambda_1} < 1$$

zu beweisen. Auch in diesem Fall konvergieren die Iterierten also gegen einen Eigenvektor zu dem kleinsten Eigenwert.

In vielen Anwendungen ist λ_n sehr viel größer als λ_1 , so dass die Konvergenzrate ϱ des Gradientenverfahrens relativ nahe bei eins liegen wird und deshalb sehr viele Iterationsschritte durchgeführt werden müssen, um eine hinreichend gute Näherung eines Eigenvektors zu erhalten.

9.3 Vorkonditionierer

Unser Ziel besteht nun darin, die Geschwindigkeit des Gradientenverfahrens zu verbessern. Dazu gehen wir zu einer modifizierten Iteration über, bei der das Residuum

$$\mathbf{r}^{(m)} = \mu \mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{A} \mathbf{x}^{(m)}$$

durch ein *vorkonditioniertes Residuum*

$$\mathbf{q}^{(m)} = \mathbf{N} \mathbf{r}^{(m)} = \mathbf{N}(\mu \mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{A} \mathbf{x}^{(m)})$$

ersetzt wird. Dabei wird die Matrix $\mathbf{N} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ als *Vorkonditionierer* bezeichnet. Ihre Aufgabe besteht darin, dafür zu sorgen, dass $\mathbf{q}^{(m)}$ sich besser für die Approximation eines Eigenvektors eignet.

Wir können sowohl $\mathbf{q}^{(m)}$ mit einem festen Dämpfungsparameter θ multiplizieren und zu $\mathbf{x}^{(m)}$ hinzuaddieren oder in der im vorigen Abschnitt diskutierten Weise den optimalen Dämpfungsparameter bestimmen, indem wir den Rayleigh-Quotienten in dem von $\mathbf{x}^{(m)}$ und $\mathbf{q}^{(m)}$ aufgespannten Teilraum minimieren. Das so entstehende *vorkonditionierte Gradientenverfahren* (auch bekannt als PINVIT, *preconditioned inverse iteration*) nimmt dann die folgende Gestalt an:

9 Vorkonditionierte Eigenwertverfahren

Algorithmus 9.6 (Vorkonditioniertes Gradientenverfahren) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine selbstadjungierte Matrix, und sei $\mathbf{N} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungiert und positiv definit. Der folgende Algorithmus berechnet eine Folge $(\mathbf{x}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}_0}$, die unter geeigneten Bedingungen gegen einen Eigenvektor konvergiert.

```

 $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} / \|\mathbf{x}\|_2;$ 
 $\lambda \leftarrow \langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2;$ 
 $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x};$ 
 $\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{N}\mathbf{r};$ 
while  $\|\mathbf{r}\|_2$  zu groß do begin
   $\mathbf{V} \leftarrow (\mathbf{x} \ \mathbf{p}) \in \mathbb{K}^{n \times 2};$ 
  Berechne eine QR-Zerlegung  $\mathbf{QR} = \mathbf{V}$  mit  $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times 2};$ 
   $\mathbf{C} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{Q};$ 
   $\mathbf{B} \leftarrow \mathbf{Q}^*\mathbf{C}; \quad \{ = \mathbf{Q}^*\mathbf{A}\mathbf{Q} \}$ 
  Finde einen normierten Eigenvektor  $\mathbf{y}$  für den minimalen Eigenwert  $\lambda$ 
  der Matrix  $\mathbf{B};$ 
   $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{Q}\mathbf{y};$ 
   $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{C}\mathbf{y} - \lambda\mathbf{x} \quad \{ = \mathbf{A}\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x} \}$ 
   $\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{N}\mathbf{r};$ 
end

```

Auch dieses Verfahren hat den großen Vorteil, dass in jedem Schritt nur zwei Multiplikationen mit der Matrix \mathbf{A} und sogar nur eine mit der Matrix \mathbf{N} benötigt werden, so dass man es auch in Situationen anwenden kann, in denen diese Matrizen nicht explizit im Speicher vorliegen. Beispielsweise wird bei manchen Diskretisierungen die Matrix \mathbf{A} nicht gespeichert, weil sich Speicherplatz sparen lässt, indem man ihre Koeffizienten nach Bedarf aus der Beschreibung der zugrundeliegenden Geometrie rekonstruiert.

In der Praxis wird \mathbf{N} häufig so gewählt, dass es eine Näherung der Inversen \mathbf{A}^{-1} ist, die sich effizient berechnen lässt.

Zur Motivation untersuchen wir das vorkonditionierte Richardson-Verfahren

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} - \theta \mathbf{N}(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(m)} - \mu \mathbf{x}^{(m)}) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0,$$

zunächst mit $\mathbf{N} = \mathbf{A}^{-1}$, $\theta = 1$ und $\mu > 0$. Wir zerlegen $\mathbf{x}^{(m)}$ wieder in Eigenvektoranteile

$$\mathbf{x}^{(m)} = \sum_{\ell=1}^n \alpha_\ell \mathbf{e}^{(\ell)}$$

und berechnen

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(m+1)} &= \mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(m)} - \mu \mathbf{x}^{(m)}) = \sum_{\ell=1}^n (1 - (\lambda_\ell - \mu)/\lambda_\ell) \alpha_\ell \mathbf{e}^{(\ell)} \\ &= \sum_{\ell=1}^n (1 - (1 - \mu/\lambda_\ell)) \alpha_\ell \mathbf{e}^{(\ell)} = \sum_{\ell=1}^n (\mu/\lambda_\ell) \alpha_\ell \mathbf{e}^{(\ell)}. \end{aligned}$$

Für die Konvergenz des Verfahrens gibt den Ausschlag, wie sich der Faktor für $\ell = 1$ zu denen für $\ell > 1$ verhält. Da

$$\mu/\lambda_2 \geq \mu/\lambda_3 \geq \dots \geq \mu/\lambda_n$$

gilt, genügt es, die obere Schranke

$$\varrho := \frac{\mu/\lambda_2}{\mu/\lambda_1} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} < 1$$

der Konvergenzrate zu untersuchen. Sie entspricht der Schranke, die wir für die inverse Iteration erhalten haben und ist insbesondere von λ_n vollständig unabhängig. Damit haben wir zwar unser Ziel einer deutlichen Verbesserung der Konvergenzrate erreicht, allerdings dafür den hohen Preis bezahlt, in jedem Schritt des Verfahrens ein Gleichungssystem *exakt* lösen zu müssen.

Wesentlich attraktiver wäre es, \mathbf{N} lediglich als eine Näherung der Inversen wählen zu können, die sich effizient berechnen lässt.

Leider würden die zur Zeit bekannten Beweise für die zentralen Konvergenzaussagen den Rahmen dieser Vorlesung sprengen, deshalb wird hier nur ein Ergebnis von K. Neymeyr¹ ohne Beweis angegeben.

Die entscheidende Voraussetzung an den Vorkonditionierer hat die Form

$$(1 - \gamma)\langle \mathbf{N}^{-1}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2 \leq \langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2 \leq (1 + \gamma)\langle \mathbf{N}^{-1}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad (9.12)$$

mit einer Konstanten $\gamma \in [0, 1)$. Gemäß Lemma 3.31 entspricht $\gamma = 0$ gerade dem Fall $\mathbf{N}^{-1} = \mathbf{A}$, den wir soeben untersucht haben. Falls $\lambda_k \leq \Lambda_A(\mathbf{x}^{(m)}) < \lambda_{k+1}$ für ein $k \in \{1, \dots, n-1\}$ gilt, folgt entweder

$$\Lambda_A(\mathbf{x}^{(m+1)}) \leq \lambda_k$$

oder

$$\frac{\Lambda_A(\mathbf{x}^{(m+1)}) - \lambda_k}{\lambda_{k+1} - \Lambda_A(\mathbf{x}^{(m+1)})} \leq \varrho^2 \frac{\Lambda_A(\mathbf{x}^{(m)}) - \lambda_k}{\lambda_{k+1} - \Lambda_A(\mathbf{x}^{(m)})} \quad (9.13)$$

mit dem durch

$$\varrho := \frac{\kappa + \gamma(2 - \kappa)}{(2 - \kappa) + \gamma\kappa} < 1, \quad \kappa := \frac{\lambda_k(\lambda_n - \lambda_{k+1})}{\lambda_{k+1}(\lambda_n - \lambda_k)} < 1$$

gegebenen Konvergenzfaktor. Die Abschätzung (9.13) ist *scharf*, es gibt also einen Vektor $\mathbf{x}^{(m)}$, für den beide Seiten gleich sind.

Im Gegensatz zu den bisher behandelten Abschätzungen bezieht sich die Aussage nicht direkt auf die Konvergenz des Iterationsvektors, sondern lediglich auf die des Rayleigh-Quotienten.

¹K. Neymeyr, *A geometric convergence theory for the preconditioned steepest descent iteration*, Universität Rostock (2010)

9.4 Erweiterungen

Das Gradientenverfahren für lineare Gleichungssysteme

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

kann als Minimierungsverfahren für das quadratische Funktional

$$f : \mathbb{K}^n \rightarrow \mathbb{R}, \quad \mathbf{x} \mapsto \frac{1}{2} \langle \mathbf{Ax}, \mathbf{x} \rangle_2 - \operatorname{Re} \langle \mathbf{b}, \mathbf{x} \rangle_2,$$

interpretiert werden: Es gilt

$$f(\mathbf{x}) \text{ minimal} \quad \iff \quad \mathbf{Ax} = \mathbf{b},$$

und für $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ gilt gerade

$$\nabla f(\mathbf{x}) = \mathbf{Ax} - \mathbf{b},$$

so dass das Residuum gerade dem negativen Gradienten entspricht. Aus der Form des Funktionals folgt, dass auch für Teilräume eine Minimalitätseigenschaft gilt: Für jeden Teilraum $\mathcal{V} \subseteq \mathbb{K}^n$ und jedes $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n$ gilt

$$f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x} + \mathbf{y}) \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \mathcal{V}$$

genau dann, wenn

$$\langle \mathbf{b} - \mathbf{Ax}, \mathbf{y} \rangle_2 = 0 \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \mathcal{V}$$

gilt, \mathbf{x} lässt sich also durch Addition eines Vektors aus \mathcal{V} genau dann nicht mehr verbessern, wenn das Residuum senkrecht auf \mathcal{V} steht. Diese Beobachtung nutzt das *Verfahrens der konjugierten Gradienten*, kurz das *cg-Verfahren*: Statt zu $\mathbf{x}^{(m)}$ in Richtung des Residuums $\mathbf{r}^{(m)}$ zu verändern, um $\mathbf{x}^{(m+1)}$ zu erhalten, konstruieren wir aus dem Residuum (bzw. dem Gradienten) eine andere Richtung, die die Optimalität bezüglich der vorangehenden Richtungen erhält. Aus $\mathbf{A} = \mathbf{A}^*$ lässt sich mit etwas Aufwand schließen, dass die nächste Iterierte als Lösung des folgenden Minimierungsproblems berechnet werden kann:

Finde $\mathbf{x}^{(m+1)} \in \operatorname{span}\{\mathbf{x}^{(m-1)}, \mathbf{x}^{(m)}, \mathbf{Ax}^{(m)} - \mathbf{b}\}$ mit

$$f(\mathbf{x}^{(m+1)}) \leq f(\mathbf{y}) \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \operatorname{span}\{\mathbf{x}^{(m-1)}, \mathbf{x}^{(m)}, \mathbf{Ax}^{(m)} - \mathbf{b}\}.$$

Dieser Ansatz lässt sich offensichtlich auf unsere Aufgabenstellung, nämlich die Minimierung des Rayleigh-Quotienten, übertragen: Wir berechnen die nächste Näherung des Eigenvektors als Lösung des folgenden Minimierungsproblems:

Finde $\mathbf{x}^{(m+1)} \in \operatorname{span}\{\mathbf{x}^{(m-1)}, \mathbf{x}^{(m)}, \mathbf{Ax}^{(m)} - \lambda \mathbf{x}^{(m)}\}$ mit

$$\Lambda_A(\mathbf{x}^{(m+1)}) \leq \Lambda_A(\mathbf{y}) \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \operatorname{span}\{\mathbf{x}^{(m-1)}, \mathbf{x}^{(m)}, \mathbf{Ax}^{(m)} - \lambda \mathbf{x}^{(m)}\}.$$

Da der Rayleigh-Quotient kein quadratisches Funktional ist, vererbt sich die Optimalität einer Näherung bezüglich eines Teilraums leider nicht auf im folgenden Schritt berechnete Näherungen. Trotzdem wird die Näherung im Vergleich zum Gradientenverfahren besser sein, da das Minimum in einem größeren Raum gesucht wird. Deshalb spricht man nur von einem *lokal* optimalen cg-Verfahren (LOPCG, *locally optimal preconditioned cg*).

Algorithmus 9.7 (Lokal optimales vorkonditioniertes cg-Verfahren) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine selbstadjungierte Matrix, und sei $\mathbf{N} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungiert und positiv definit. Der folgende Algorithmus berechnet eine Folge $(\mathbf{x}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}_0}$, die unter geeigneten Bedingungen gegen einen Eigenvektor konvergiert.

```

 $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} / \|\mathbf{x}\|_2;$ 
 $\lambda \leftarrow \langle \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2;$ 
 $m \leftarrow 0;$ 
 $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x};$ 
 $\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{N}\mathbf{r};$ 
while  $\|\mathbf{r}\|_2$  zu groß do begin
  if  $m = 0$  then
     $\mathbf{V} \leftarrow (\mathbf{x} \ \mathbf{p}) \in \mathbb{K}^{n \times 2}$ 
  else
     $\mathbf{V} \leftarrow (\mathbf{z} \ \mathbf{x} \ \mathbf{p}) \in \mathbb{K}^{n \times 3};$ 
    Berechne eine QR-Zerlegung  $\mathbf{Q}\mathbf{R} = \mathbf{V};$ 
     $\mathbf{C} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{Q};$ 
     $\mathbf{B} \leftarrow \mathbf{Q}^*\mathbf{C}; \quad \{ = \mathbf{Q}^*\mathbf{A}\mathbf{Q} \}$ 
    Finde einen normierten Eigenvektor  $\mathbf{y}$  für den minimalen Eigenwert  $\lambda$ 
      der Matrix  $\mathbf{B};$ 
     $\mathbf{z} \leftarrow \mathbf{x};$ 
     $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{Q}\mathbf{y};$ 
     $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{C}\mathbf{y} - \lambda\mathbf{x} \quad \{ = \mathbf{A}\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x} \}$ 
     $\mathbf{p} \leftarrow \mathbf{N}\mathbf{r};$ 
     $m \leftarrow m + 1$ 
end

```

Ein *global* optimales Verfahren haben wir bereits kennen gelernt: Der Lanczos-Algorithmus 8.7 berechnet das Minimum jeweils im Raum *aller* bisher aufgetretenen Residuen, benötigt allerdings für die Darstellung der Arnoldi-Basis auch sehr viel mehr Speicher als das lokal optimale Verfahren.

Bemerkung 9.8 (Geschachtelte Iteration) Im Vergleich zu den quadratisch oder kubisch konvergenten Rayleigh- und QR-Iterationen scheinen die in diesem Kapitel vorgestellten lediglich linear konvergenten Verfahren auf den ersten Blick wenig attraktiv zu sein. Auf den zweiten Blick zeigt sich allerdings, dass sie auch wesentlich besser für große Matrizen geeignet sind, da sie ohne die Berechnung der exakten Inversen (wie bei der Rayleigh-Iteration) oder vollständiger orthonormaler Basen (wie bei der QR-Iteration) auskommen.

In der Praxis entstehen die Matrizen \mathbf{A} , deren kleinsten Eigenwert wir berechnen wollen, durch die Diskretisierung einer Differentialgleichung. In diesem Fall lässt sich die relativ langsame Konvergenz ausgleichen, indem geeignete Startvektoren berechnet werden: Die Differentialgleichung wird mit unterschiedlichen Genauigkeiten diskretisiert, so dass eine Hierarchie von Matrizen entsteht. Die Matrizen niedriger Genauigkeit sind klein und lassen sich deshalb schnell bearbeiten, eventuell sogar mit einer QR-Iteration. Die so berechneten Näherungen der Eigenvektoren werden dann als Startvektoren für zunehmend genauere Diskretisierungen verwendet, bis die gewünschte Genauigkeit erreicht ist. In dieser Weise genügen für jede Diskretisierung wenige Iterationsschritte, und der Gesamtaufwand bleibt beherrschbar.

9.5 Block-Verfahren

Bisher haben wir uns lediglich mit der Frage nach der Berechnung eines Eigenvektors für den kleinsten Eigenwert beschäftigt. Ähnlich wie im Fall der orthogonalen Iteration (vgl. Abschnitt 5.5) können wir den einzelnen Iterationsvektor durch eine Basis solcher Vektoren ersetzen und in dieser Weise versuchen, eine Anzahl der kleinsten Eigenwerte zu ermitteln.

Wir führen wieder mehrere Iterationen simultan durch und fassen die dabei entstehenden Vektoren zu Matrizen $\mathbf{X}^{(m)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ zusammen. Statt zu verlangen, dass die Iterationsvektoren Einheitsvektoren sind, fordern wir wieder, dass $\mathbf{X}^{(m)}$ eine orthogonale Matrix ist. Im Fall $k = 1$ sind beide Eigenschaften äquivalent, im Fall $k > 1$ stellt die zweite Eigenschaft sicher, dass nicht alle Spalten der Matrix gegen denselben Eigenraum konvergieren.

Wir hoffen, dass die ℓ -ten Spalten der Matrizen $\mathbf{X}^{(m)}$ gegen den Eigenraum des ℓ -ten Eigenwerts konvergieren werden. Falls die Eigenwerte unterschiedlich sind, sollten wir bei der Berechnung des Residuums also unterschiedliche Eigenwerte einsetzen. Da wir in diesem Abschnitt häufig mit einzelnen Spalten bestimmter Matrizen arbeiten müssen, führen wir die Notation ein, dass $\mathbf{M}_\ell = \mathbf{M}\mathbf{e}^{(\ell)}$ gerade die ℓ -te Spalte einer Matrix \mathbf{M} bezeichnet.

Die Rayleigh-Quotienten zu den Spalten der Matrix $\mathbf{X}^{(m)}$ sind dann durch

$$\lambda_\ell^{(m)} := \langle \mathbf{A}\mathbf{X}_\ell^{(m)}, \mathbf{X}_\ell^{(m)} \rangle_2 \quad \text{für alle } \ell \in \{1, \dots, k\}$$

gegeben, da die Spalten nach Voraussetzung normiert sind. Die korrespondierenden Residuen fassen wir zu einer Matrix $\mathbf{R}^{(m)} \in \mathbb{K}^{n \times k}$ zusammen, die durch

$$\mathbf{R}_\ell^{(m)} := \mathbf{A}\mathbf{X}_\ell^{(m)} - \lambda_\ell^{(m)}\mathbf{X}_\ell^{(m)} \quad \text{für alle } \ell \in \{1, \dots, k\}$$

definiert ist. Das vorkonditionierte Residuum ergibt sich dann als

$$\mathbf{P}_\ell^{(m)} := \mathbf{N}\mathbf{R}^{(m)}.$$

Wir konstruieren eine Block-Variante des vorkonditionierten Gradientenverfahrens (vgl. Algorithmus 9.6), bei der wir die verbesserten Näherungen der Eigenvektoren nicht nur

in den von $\mathbf{X}_\ell^{(m)}$ und $\mathbf{P}_\ell^{(m)}$ aufgespannten zweidimensionalen Teilräumen suchen, sondern im gesamten Bild der Matrizen $\mathbf{X}^{(m)}$ und $\mathbf{P}^{(m)}$, also in einem Teilraum, der höchstens $2k$ -dimensional sein kann. Da wir nur an der Berechnung weniger Eigenwerte interessiert sind, können wir davon ausgehen, dass das Eigenwertproblem in diesem Teilraum effizient lösbar ist. Damit erhalten wir den folgenden Algorithmus:

Algorithmus 9.9 (Block-Gradientenverfahren) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine selbstadjungierte Matrix, und sei $\mathbf{N} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungiert und positiv definit. Der folgende Algorithmus berechnet eine Folge von Matrizen $(\mathbf{X}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}_0}$, deren Spalten unter geeigneten Bedingungen gegen Eigenvektoren zu den kleinsten Eigenwerten konvergieren.

```

for  $\ell \in \{1, \dots, k\}$  do begin
   $\lambda_\ell \leftarrow \langle \mathbf{A}\mathbf{X}_\ell, \mathbf{X}_\ell \rangle_2$ ;
   $\mathbf{R}_\ell \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{X}_\ell - \lambda_\ell \mathbf{X}_\ell$ ;
end;
 $\mathbf{P} \leftarrow \mathbf{N}\mathbf{R}$ ;
while  $\|\mathbf{R}\|_2$  zu groß do begin
   $\mathbf{V} \leftarrow (\mathbf{X} \ \mathbf{P}) \in \mathbb{K}^{n \times (2k)}$ ;
  Berechne eine QR-Zerlegung  $\mathbf{Q}\mathbf{R} = \mathbf{V}$  mit  $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times (2k)}$ ;
   $\mathbf{C} \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{Q}$ ;
   $\mathbf{B} \leftarrow \mathbf{Q}^*\mathbf{C}$ ;    {  $= \mathbf{Q}^*\mathbf{A}\mathbf{Q}$  }
  Finde eine orthogonale Matrix  $\mathbf{Y} \in \mathbb{K}^{(2k) \times k}$ , deren Spalten Eigenvektoren
    zu den  $k$  kleinsten Eigenwerten  $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_k$  der Matrix  $\mathbf{B}$  enthält;
   $\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{Q}\mathbf{Y}$ ;
  for  $\ell \in \{1, \dots, k\}$  do
     $\mathbf{R}_\ell \leftarrow \mathbf{A}\mathbf{X}_\ell - \lambda_\ell \mathbf{X}_\ell$ ;
   $\mathbf{P} \leftarrow \mathbf{N}\mathbf{R}$ ;
end

```

Das Block-Gradientenverfahren bietet dieselben Vorteile wie die anderen bisher besprochenen Blockverfahren: Es lassen sich mehrere Eigenvektoren simultan berechnen, so dass sich beispielsweise zu mehrfachen Eigenwerten die vollständigen Eigenräume konstruieren lassen. Für das Konvergenzverhalten ist nicht mehr das Verhältnis des ersten und zweiten Eigenwerts relevant, sondern das des k -ten und des $(k+1)$ -ten. Unter geeigneten Bedingungen lässt sich sogar zeigen, dass für die Konvergenz der ℓ -ten Spalte lediglich das Verhältnis des ℓ -ten und des $(k+1)$ -ten Eigenwerts von Bedeutung ist, so dass das Blockverfahren auch dann von Vorteil sein kann, wenn lediglich eine Näherung des ersten Eigenwerts gesucht ist.

Bemerkung 9.10 (Residuum) Im Vergleich mit der orthogonalen Iteration stellt sich die Frage, ob unsere Berechnung des Residuums angemessen ist: Wir berechnen

$$\mathbf{R}^{(m)} = \mathbf{A}\mathbf{X}^{(m)} - \mathbf{X}^{(m)}\mathbf{D}^{(m)}, \quad \mathbf{D}^{(m)} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_k \end{pmatrix},$$

9 Vorkonditionierte Eigenwertverfahren

während wir bei der orthogonalen Iteration und der QR-Iteration statt der Diagonalmatrix $\mathbf{D}^{(m)}$ die Matrix

$$\mathbf{\Lambda}^{(m)} := (\mathbf{X}^{(m)})^* \mathbf{A} \mathbf{X}^{(m)}$$

verwendet haben, die auch die Interaktion zwischen verschiedenen Spalten der Matrix $\mathbf{X}^{(m)}$ erfasst. Mit Hilfe dieser Matrix ließe sich ein modifiziertes Residuum der Form

$$\mathbf{R}^{(m)} = \mathbf{A} \mathbf{X}^{(m)} - \mathbf{X}^{(m)} \mathbf{\Lambda}^{(m)}$$

berechnen. Der Unterschied zwischen beiden Zugängen besteht darin, dass der zweite Ansatz schon dann kleine Residuen ermittelt, wenn die Spalten der Matrix $\mathbf{X}^{(m)}$ lediglich einen invarianten Unterraum approximieren, während der ursprüngliche Ansatz nur dann zu kleinen Residuen fehlt, wenn die Spalten der Matrix Eigenvektoren sind.

Selbstverständlich können wir wie im vorigen Abschnitt auch eine Blockvariante des lokal optimalen cg-Verfahrens konstruieren: Wir nehmen $\mathbf{X}^{(m-1)}$ hinzu und erhalten so das lokal optimale vorkonditionierte Block-cg-Verfahren (LOBPCG, locally optimal block preconditioned cg):

Algorithmus 9.11 (Block-cg-Verfahren) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine selbstadjungierte Matrix, und sei $\mathbf{N} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungiert und positiv definit. Der folgende Algorithmus berechnet eine Folge von Matrizen $(\mathbf{X}^{(m)})_{m \in \mathbb{N}_0}$, deren Spalten unter geeigneten Bedingungen gegen Eigenvektoren zu den kleinsten Eigenwerten konvergieren.

```

for  $\ell \in \{1, \dots, k\}$  do begin
     $\lambda_\ell \leftarrow \langle \mathbf{A} \mathbf{X}_\ell, \mathbf{X}_\ell \rangle_2$ ;
     $\mathbf{R}_\ell \leftarrow \mathbf{A} \mathbf{X}_\ell - \lambda_\ell \mathbf{X}_\ell$ ;
end;
 $m \leftarrow 0$ ;
 $\mathbf{P} \leftarrow \mathbf{N} \mathbf{R}$ ;
while  $\|\mathbf{R}\|_2$  zu groß do begin
    if  $m = 0$  then
         $\mathbf{V} \leftarrow (\mathbf{X} \ \mathbf{P}) \in \mathbb{K}^{n \times (2k)}$ 
    else
         $\mathbf{V} \leftarrow (\mathbf{Z} \ \mathbf{X} \ \mathbf{P}) \in \mathbb{K}^{n \times (3k)}$ ;
    Berechne eine QR-Zerlegung  $\mathbf{Q} \mathbf{R} = \mathbf{V}$ ;
     $\mathbf{C} \leftarrow \mathbf{A} \mathbf{Q}$ ;
     $\mathbf{B} \leftarrow \mathbf{Q}^* \mathbf{C}$ ;     $\{ = \mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} \}$ 
    Finde eine orthogonale Matrix  $\mathbf{Y}$ , deren Spalten Eigenvektoren
        zu den  $k$  kleinsten Eigenwerten  $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_k$  der Matrix  $\mathbf{B}$  enthält;
     $\mathbf{Z} \leftarrow \mathbf{X}$ ;
     $\mathbf{X} \leftarrow \mathbf{Q} \mathbf{Y}$ ;
    for  $\ell \in \{1, \dots, k\}$  do
         $\mathbf{R}_\ell \leftarrow \mathbf{A} \mathbf{X}_\ell - \lambda_\ell \mathbf{X}_\ell$ ;
     $\mathbf{P} \leftarrow \mathbf{N} \mathbf{R}$ ;
     $m \leftarrow m + 1$ 
end
end
```

10 Verwandte Fragestellungen

Bisher haben wir uns ausschließlich mit der Frage nach der Berechnung einzelner, mehrerer oder aller Eigenwerte und eventuell der zugehörigen Eigenvektoren befasst. In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit Problemen, die eng mit Eigenwertproblemen verwandt sind, aber modifizierte Lösungsverfahren erfordern.

10.1 Singulärwertzerlegung

Bei der Behandlung linearer Ausgleichsprobleme sucht man für eine gegebene Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}$ und einen gegebenen Vektor $\mathbf{b} \in \mathbb{K}^n$ nach einem Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^m$, der

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 \leq \|\mathbf{Ay} - \mathbf{b}\|_2 \quad \text{für alle } \mathbf{y} \in \mathbb{K}^m \quad (10.1)$$

erfüllt, für den also \mathbf{Ax} dem Vektor \mathbf{b} so nahe wie möglich kommt. Falls \mathbf{A} injektiv ist, lässt sich die Aufgabe einfach per QR-Zerlegung lösen. Interessanter ist der Fall, dass \mathbf{A} nicht injektiv ist. Wenn wir mit Maschinenzahlen rechnen, kann es auch passieren, dass die Matrix „fast“ nicht injektiv ist, dass also Winkel zwischen den von den Spalten der Matrix aufgespannten Räumen sehr klein werden.

In diesem Fall ist es hilfreich, die Matrix auf Diagonalform zu bringen, denn dann lässt sich leicht entscheiden, welche Spalten in ihrem Kern liegen und welche einen Beitrag zu ihrem Bild leisten. Da \mathbf{A} im Allgemeinen nicht quadratisch ist, stehen uns keine Eigenwerte und Eigenvektoren zur Verfügung. Allerdings sind wir im Rahmen dieser Anwendung auch nicht auf Ähnlichkeitstransformationen beschränkt, sondern können \mathbf{A} von links und rechts mit *unterschiedlichen* Matrizen multiplizieren. Damit die Normen in (10.1) erhalten bleiben, empfiehlt es sich, nur orthogonale Transformationen zuzulassen. So erhalten wir die Definition der *Singulärwertzerlegung*:

Definition 10.1 (Singulärwertzerlegung) Seien $n, m \in \mathbb{N}$, und sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times m}$. Seien unitäre Matrizen $\mathbf{U} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und $\mathbf{V} \in \mathbb{K}^{m \times m}$ sowie eine Diagonalmatrix

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_k \end{pmatrix} \in \mathbb{K}^{n \times m}$$

mit $k := \min\{n, m\}$ und nicht-negativen reellen Zahlen $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_k$ gegeben. Falls

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^*$$

gilt, nennen wir $(\mathbf{U}, \mathbf{V}, \mathbf{\Sigma})$ eine Singulärwertzerlegung der Matrix \mathbf{A} .

Die Zahlen $\sigma_1, \dots, \sigma_k \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ heißen die Singulärwerte von \mathbf{A} , die Spalten von \mathbf{U} und \mathbf{V} heißen die linken und rechten Singulärvektoren.

In diesem Kontext ist die Diagonalmatrix Σ so zu interpretieren, dass sie mit Nullzeilen oder Nullspalten aufgefüllt wird, um die korrekten Dimensionen anzunehmen. Unsere Aufgabe besteht darin, zu einer beliebigen gegebenen Matrix die Singulärwertzerlegung zu berechnen.

Ein erster Algorithmus lässt sich relativ einfach konstruieren, indem wir annehmen, dass uns die Zerlegung $\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^*$ bereits zur Verfügung steht. Dann folgt

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^* = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^*\mathbf{V}\Sigma^*\mathbf{U}^* = \mathbf{U}\Sigma\Sigma^*\mathbf{U}^*,$$

und $\Sigma\Sigma^*$ ist eine positiv semidefinite Diagonalmatrix. Also sind die linken Singulärvektoren gerade die Eigenvektoren der positiv semidefiniten und selbstadjungierten Gramschen Matrix $\mathbf{A}\mathbf{A}^*$, während die Singulärwerte die Wurzeln der Eigenwerte dieser Matrix sind. Mit den bereits behandelten Verfahren können wir sowohl Eigenwerte als auch Eigenvektoren berechnen und damit zwei der drei Faktoren der Singulärwertzerlegung berechnen. Die noch fehlenden rechten Singulärwerte können dann mit Hilfe eines linearen Gleichungssystems rekonstruiert werden.

Entsprechend erhalten wir auch

$$\mathbf{A}^*\mathbf{A} = \mathbf{V}\Sigma^*\mathbf{U}^*\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^* = \mathbf{V}\Sigma^*\Sigma\mathbf{V}^*,$$

können also die Berechnung der Singulärwerte und der rechten Singulärvektoren auf die Untersuchung eines selbstadjungierten Eigenwertproblems zurückführen.

Beide Ansätze funktionieren nicht gut, wenn \mathbf{A} schlecht konditioniert ist, wenn also die Winkel zwischen Zeilen oder Spalten der Matrix gering sind. Trotz ihrer Einfachheit sind sie deshalb im Allgemeinen wenig attraktiv.

Iteration mit faktorierter Matrix

Wir können sie allerdings *implizit* benutzen: Wenn wir beispielsweise einen Schritt der QR-Iteration für die Gramsche Matrix $\mathbf{A}\mathbf{A}^*$ durchführen, multiplizieren wir die Matrix von links und rechts mit einer orthogonalen Matrix \mathbf{Q} und erhalten

$$\mathbf{Q}^*\mathbf{A}\mathbf{A}^*\mathbf{Q} = (\mathbf{Q}^*\mathbf{A})(\mathbf{Q}^*\mathbf{A})^*.$$

Falls wir die Matrix \mathbf{Q} berechnen können, ohne die Gramsche Matrix $\mathbf{A}\mathbf{A}^*$ explizit aufzustellen, könnten wir auch $\mathbf{A}^{(1)} := \mathbf{Q}^*\mathbf{A}$ berechnen und wären damit zu einer faktorisierten Darstellung $\mathbf{A}^{(1)}(\mathbf{A}^{(1)})^*$ des Ergebnisses des QR-Schritts gelangt. An der Darstellung ändert sich nichts, wenn wir \mathbf{A} auch von rechts mit einer unitären Matrix \mathbf{P} multiplizieren, weil sich dann \mathbf{P} und \mathbf{P}^* gegenseitig aufheben würden. Der resultierende Algorithmus hätte also die folgende Form:

```

 $\mathbf{A}^{(0)} \leftarrow \mathbf{A};$ 
 $m \leftarrow 0;$ 
while nicht fertig do begin
  Finde unitäre Transformationen  $\mathbf{Q}^{(m)}$  und  $\mathbf{P}^{(m)}$ ;
   $\mathbf{A}^{(m+1)} \leftarrow (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A}^{(m)} \mathbf{P}^{(m)}$ 
end
```

Wie bereits erwähnt erhalten wir dann

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^{(m+1)}(\mathbf{A}^{(m+1)})^* &= (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A}^{(m)} \mathbf{P}^{(m)} (\mathbf{P}^{(m)})^* (\mathbf{A}^{(m)})^* \mathbf{Q}^{(m)} \\ &= (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{A}^{(m)} (\mathbf{A}^{(m)})^* \mathbf{Q}^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0, \end{aligned}$$

wir wenden also weiterhin unitäre Ähnlichkeitstransformationen auf die Gramschen Matrizen $\mathbf{A}^{(m)}(\mathbf{A}^{(m)})^*$ an, ohne diese Matrizen jemals aufzustellen.

Reduktion auf quadratische Matrizen

Im Interesse eines effizienten Verfahrens bietet es sich, wie schon im Fall der QR-Iteration, an, die Matrizen zunächst in eine handliche Form zu bringen. In einem ersten Schritt reduzieren wir \mathbf{A} auf eine quadratische Matrix: Falls $n > m$ gilt, berechnen wir die QR-Zerlegung

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

mit einer unitären Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und einer rechten oberen Dreiecksmatrix $\mathbf{R} \in \mathbb{K}^{m \times m}$, die insbesondere quadratisch ist.

Falls wir eine Singulärwertzerlegung

$$\mathbf{R} = \widehat{\mathbf{U}} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^*$$

dieser quadratischen Matrix berechnen können, lässt sich mit

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{U}} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^* \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \mathbf{Q} \underbrace{\begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{U}} & \\ & \mathbf{I}_{n-m} \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{U}} \begin{pmatrix} \mathbf{\Sigma} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \mathbf{V}^* = \mathbf{U} \begin{pmatrix} \mathbf{\Sigma} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \mathbf{V}^*$$

für

$$\mathbf{U} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{U}} & \\ & \mathbf{I}_{n-m} \end{pmatrix}$$

eine Singulärwertzerlegung der Gesamtmatrix rekonstruieren.

Entsprechend können wir für $n < m$ eine QR-Zerlegung der adjungierten Matrix

$$\mathbf{A}^* = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

mit einer unitären Matrix $\mathbf{Q} \in \mathbb{K}^{m \times m}$ und einer rechten oberen Dreiecksmatrix $\mathbf{R} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ verwenden. Aus einer Singulärwertzerlegung

$$\mathbf{R} = \widehat{\mathbf{V}} \mathbf{\Sigma} \mathbf{U}^*$$

der Dreiecksmatrix erhalten wir dann

$$\mathbf{A} = (\mathbf{R}^* \ \mathbf{0}) \mathbf{Q}^* = (\mathbf{U} \mathbf{\Sigma}^* \widehat{\mathbf{V}}^* \ \mathbf{0}) \mathbf{Q}^* = \mathbf{U} (\mathbf{\Sigma} \ \mathbf{0}) \underbrace{\begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{V}}^* & \\ & \mathbf{I}_{m-n} \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{V}^*} \mathbf{Q}^* = \mathbf{U} (\mathbf{\Sigma} \ \mathbf{0}) \mathbf{V}^*,$$

also eine Singulärwertzerlegung der ursprünglichen Matrix.

Reduktion auf Bidiagonalgestalt

Die QR-Iteration für selbstadjungierte Matrizen lässt sich wesentlich beschleunigen, indem man die Matrix in einem ersten Schritt auf Tridiagonalgestalt bringt, denn dadurch lassen sich die einzelnen QR-Schritte sehr effizient durchführen. Da die Gramsche Matrix $\mathbf{A}\mathbf{A}^*$ selbstadjungiert ist, bietet es sich an, nach einem ähnlichen Zugang zu suchen.

Der Schlüssel ist die *Golub-Kahan-Bidiagonalisierung*¹, mit der sich eine beliebige quadratische Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ sogar auf Bidiagonalgestalt bringen lässt: Wir können eine Zerlegung der Form

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix} \mathbf{P}^*$$

mit unitären Matrizen $\mathbf{Q}, \mathbf{P} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ konstruieren. Daraus folgt

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{A}^* &= \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\alpha}_1 & \bar{\beta}_1 & & & \\ & \bar{\alpha}_2 & \ddots & & \\ & & \ddots & \bar{\beta}_{n-1} & \\ & & & & \bar{\alpha}_n \end{pmatrix} \mathbf{Q}^* \\ &= \mathbf{Q} \begin{pmatrix} |\alpha_1|^2 & \alpha_1 \bar{\beta}_1 & & & \\ \beta_1 \bar{\alpha}_1 & |\alpha_2|^2 + |\beta_1|^2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & & \beta_{n-1} \bar{\alpha}_{n-1} & |\alpha_n|^2 + |\beta_{n-1}|^2 \end{pmatrix} \mathbf{Q}^*, \end{aligned}$$

die Gramsche Matrix wird also auf Tridiagonalgestalt transformiert.

Die Transformation auf Bidiagonalgestalt ist relativ einfach: In einem ersten Schritt wird eine Householder-Spiegelung $\mathbf{P}_1 \in \mathbb{K}^{n \times n}$ bestimmt, die die erste Zeile der Matrix auf ein Vielfaches $\alpha_1 \mathbf{e}^{(1)}$ des ersten kanonischen Einheitsvektors $\mathbf{e}^{(1)} \in \mathbb{K}^n$ abbildet. Wir erhalten

$$\mathbf{A}\mathbf{P}_1^* = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & \\ a'_{21} & a'_{22} & \cdots & a'_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a'_{n1} & a'_{n2} & \cdots & a'_{nn} \end{pmatrix}.$$

In einem zweiten Schritt bestimmen wir eine Householder-Spiegelung $\widehat{\mathbf{Q}}_1 \in \mathbb{K}^{(n-1) \times (n-1)}$, die die unteren $n - 1$ Einträge der ersten Spalte auf ein Vielfaches $\beta_1 \mathbf{e}^{(1)}$ des ersten

¹G. Golub und W. Kahan, *Calculating the singular values and pseudo-inverse of a matrix*, J. SIAM Num. Anal. B 2(2), 205–224 (1965)

kanonischen Eigenvektors $\mathbf{e}^{(1)} \in \mathbb{K}^{(n-1)}$ abbildet und erhalten

$$\mathbf{Q}_1 \mathbf{A} \mathbf{P}_1^* = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \widehat{\mathbf{Q}}_1 & & \\ & & & \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{Q}_1} \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & \\ a'_{21} & a'_{22} & \dots & a'_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a'_{n1} & a'_{n2} & \dots & a'_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & \\ \beta_1 & a''_{22} & \dots & a''_{2n} \\ & \vdots & \ddots & \vdots \\ & a''_{n2} & \dots & a''_{nn} \end{pmatrix}.$$

Damit sind die erste Zeile und die erste Spalte der Matrix schon in der gewünschten Form. Für die restlichen Zeilen und Spalten können wir die Prozedur wiederholen, bis nur noch eine Bidiagonalmatrix übrig bleibt.

Algorithmus 10.2 (Bidiagonalisierung) Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine Matrix. Der folgende Algorithmus multipliziert sie von links und rechts mit (unterschiedlichen) Householder-Spiegelungen, um sie auf Bidiagonalgestalt zu bringen. Die Diagonale wird in α gespeichert, die untere Nebendiagonale in β .

```

for k = 1 to n - 2 do begin
   $\gamma \leftarrow 0;$       { Zeile k reduzieren }
  for j  $\in \{k, \dots, n\}$  do  $\gamma \leftarrow \gamma + |a_{kj}|^2;$ 
   $\nu \leftarrow \sqrt{\gamma};$ 
   $\delta \leftarrow (|a_{kk}| + \nu)\nu;$ 
   $\alpha_k \leftarrow -\text{sgn}(a_{kk})\nu;$ 
   $a_{kk} \leftarrow a_{kk} - \alpha_k;$ 
  for i  $\in \{k + 1, \dots, n\}$  do begin
     $\gamma \leftarrow 0;$ 
    for j  $\in \{k, \dots, n\}$  do  $\gamma \leftarrow \gamma + \bar{a}_{kj}a_{ij};$ 
     $\gamma \leftarrow \gamma/\delta;$ 
    for j  $\in \{k, \dots, n\}$  do  $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - \gamma a_{kj}$ 
  end;
   $\gamma \leftarrow 0;$       { Spalte k reduzieren }
  for j  $\in \{k + 1, \dots, n\}$  do  $\gamma \leftarrow \gamma + |a_{jk}|^2;$ 
   $\nu \leftarrow \sqrt{\gamma};$ 
   $\delta \leftarrow (|a_{k+1,k}| + \nu)\nu;$ 
   $\beta_k \leftarrow -\text{sgn}(a_{k+1,k})\nu;$ 
   $a_{k+1,k} \leftarrow a_{k+1,k} - \alpha_k;$ 
  for j  $\in \{k + 1, \dots, n\}$  do begin
     $\gamma \leftarrow 0;$ 
    for i  $\in \{k + 1, \dots, n\}$  do  $\gamma \leftarrow \gamma + \bar{a}_{ik}a_{ij};$ 
     $\gamma \leftarrow \gamma/\delta;$ 
    for i  $\in \{k + 1, \dots, n\}$  do  $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - \gamma a_{ik}$ 
  end
end
end

```

Implizite QR-Iteration

Wie wir gesehen haben, genügt es, die Singulärwertzerlegung einer Bidiagonalmatrix der Form

$$\mathbf{B}^{(0)} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

berechnen zu können. Dazu führen wir *implizit* die QR-Iteration mit Shift für die Gramsche Matrix

$$\mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{B}^{(0)})^* = \begin{pmatrix} |\alpha_1|^2 & \alpha_1\bar{\beta}_1 & & & \\ \beta_1\bar{\alpha}_1 & |\alpha_2|^2 + |\beta_1|^2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & & \beta_{n-1}\bar{\alpha}_{n-1} & |\alpha_n|^2 + |\beta_{n-1}|^2 \end{pmatrix}$$

durch: Wir bestimmen den Wilkinson-Shift-Parameter μ wie in (6.11) und verwenden die implizite Form der QR-Iteration, indem wir eine Givens-Rotation bestimmen, die

$$\begin{pmatrix} \bar{c}_1 & \bar{s}_1 \\ -s_1 & c_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\alpha_1|^2 - \mu \\ \beta_1\bar{\alpha}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa \\ 0 \end{pmatrix}$$

für ein $\gamma \in \mathbb{K}$ erfüllt. Da wir nur implizit mit der Matrix $\mathbf{B}^{(0)}(\mathbf{B}^{(0)})^*$ arbeiten, entspricht die Ähnlichkeitstransformation mit der Givens-Rotation der Multiplikation von $\mathbf{B}^{(0)}$ mit der Rotation von links, wir erhalten

$$\begin{pmatrix} \bar{c}_1 & \bar{s}_1 & & & \\ -s_1 & c_1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1^{(1)} & \gamma_1 & & & \\ \beta_1^{(1)} & \alpha_2^{(1)} & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}.$$

Der durch die Givens-Rotation entstandene Eintrag γ_1 stört die bidiagonale Struktur der Matrix und sollte deshalb eliminiert werden. Wir multiplizieren dazu mit einer Givens-Rotation von *rechts*, die

$$\begin{pmatrix} \alpha_1^{(1)} & \gamma_1 \\ \alpha_2^{(1)} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2 & -\bar{s}_2 \\ s_2 & \bar{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_2^{(2)} & 0 \\ \alpha_1^{(2)} & \gamma_2 \end{pmatrix}$$

erfüllt und erhalten

$$\begin{pmatrix} \alpha_1^{(1)} & \gamma_1 & & & \\ \beta_1^{(1)} & \alpha_2^{(1)} & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2 & -\bar{s}_2 & & & \\ s_2 & \bar{c}_2 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_2^{(2)} & & & & \\ \beta_1^{(2)} & \alpha_2^{(2)} & & & \\ \gamma_2 & \beta_2^{(2)} & \alpha_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}.$$

Jetzt stört der Eintrag γ_2 die gewünschte Struktur, den wir eliminieren, indem wir von links mit einer weiteren Givens-Rotation multiplizieren. Bei dieser Operation wird allerdings ein neuer Eintrag γ_3 in der dritten Spalte der zweiten Zeile entstehen, den wir mit einer Multiplikation von rechts eliminieren, so dass ein Eintrag γ_4 in der zweiten Spalte der vierten Zeile entsteht. In dieser Weise können wir die störenden Einträge schließlich „nach unten aus der Matrix herausschieben“, so dass wir wieder eine Bidiagonalmatrix $\mathbf{B}^{(1)}$ erhalten.

Das Produkt $\mathbf{B}^{(1)}(\mathbf{B}^{(1)})^*$ ist eine Tridiagonalmatrix, die aus einer unitären Ähnlichkeitstransformation hervorgegangen ist, deren erste Spalte gerade durch die erste Givens-Rotation definiert ist. Indem wir sicherstellen, dass alle auftretenden Matrizen irreduzibel sind, lässt sich mit Hilfe des Satzes 6.9 folgern, dass diese Tridiagonalmatrix bis auf Vorzeichen der Tridiagonalmatrix entspricht, die aus einem mit μ geshifteten QR-Schritt entstanden wäre. Die Schlussweise entspricht dabei der, die auch im Fall der impliziten QR-Iteration (vgl. Abschnitt 6.4) zum Einsatz kommt.

In dieser Weise können wir eine Folge von Bidiagonalmatrizen $\mathbf{B}^{(2)}, \mathbf{B}^{(3)}, \dots$ konstruieren, die einer Folge von Tridiagonalmatrizen entsprechen, die aus der QR-Iteration hervorgehen. Die QR-Iteration konvergiert bei einer selbstadjungierten Matrix gegen eine Diagonalmatrix, also müssen die Nebendiagonaleinträge in

$$\mathbf{B}^{(m)}(\mathbf{B}^{(m)})^* = \begin{pmatrix} |\alpha_1|^2 & \alpha_1\bar{\beta}_1 & & & \\ \beta_1\bar{\alpha}_1 & |\alpha_2|^2 + |\beta_1|^2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \alpha_{n-1}\bar{\beta}_{n-1} \\ & & & \beta_{n-1}\bar{\alpha}_{n-1} & |\alpha_n|^2 + |\beta_{n-1}|^2 \end{pmatrix}$$

gegen null gehen, also jeweils entweder β_k oder α_k . Falls β_k der Null sehr nahe kommt, bringt das die Matrix $\mathbf{B}^{(m)}$ der Diagonalform näher, also unserem Ziel.

Falls α_k sehr klein wird, können wir diese Eigenschaft ausnutzen, um eine Null auf der Nebendiagonalen zu erhalten. Angenommen, α_1 ist gleich null. Dann wählen wir eine Givens-Rotation, die

$$\begin{pmatrix} \beta_1 & \alpha_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 & -\bar{s}_1 \\ s_1 & \bar{c}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \alpha_2^{(1)} \end{pmatrix}$$

erfüllt und wenden sie von rechts auf die ersten beiden Spalten an. Da $\alpha_1 = 0$ nach Voraussetzung gilt, entsteht in der ersten Zeile kein störender Eintrag, allerdings in der dritten:

$$\begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 & -\bar{s}_1 & & & & \\ s_1 & \bar{c}_1 & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & 1 & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ 0 & \alpha_2^{(1)} & & & & \\ \delta_1 & \beta_2^{(1)} & \alpha_3 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \beta_{n-1} & \alpha_n & \end{pmatrix}.$$

Den störenden Eintrag δ_1 können wir eliminieren, indem wir eine Givens-Rotation auf die erste und dritte Spalte anwenden. Allerdings entsteht dadurch in der ersten Spalte

der vierten Zeile ein Eintrag δ_2 , den wir entsprechend behandeln können, bis er „nach unten aus der Matrix herausfällt“. Mit dieser Prozedur haben wir wieder eine Bidiagonalmatrix erhalten, aber eine Null auf der Nebendiagonalen gewonnen. Nullen auf der Nebendiagonalen können wir, wie schon im Fall der QR-Iteration, für eine Deflation nutzen und so das Verfahren beschleunigen. Sobald $\mathbf{B}^{(m)}$ der Diagonalgestalt hinreichend nahe gekommen ist, haben wir die Matrix $\mathbf{\Sigma}$ berechnet. Die Matrizen \mathbf{U} und \mathbf{V} können durch Aufmultiplizieren der einzelnen Givens-Rotationen konstruiert werden.

10.2 Verallgemeinerte Eigenwertprobleme

Für zwei Matrizen $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ können wir uns die Frage stellen, ob Zahlen $\lambda \in \mathbb{K}$ und Vektoren $\mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ existieren, die die Gleichung

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{B}\mathbf{x} \quad (10.2)$$

erfüllen. Diese Aufgabe bezeichnet man als *verallgemeinertes Eigenwertproblem*. Falls \mathbf{B} invertierbar ist, können wir durch Multiplikation mit \mathbf{B}^{-1} zu dem gewöhnlichen Eigenwertproblem

$$\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \quad (10.3)$$

übergehen und die bereits diskutierten Verfahren einsetzen.

Von Interesse sind deshalb zwei Typen verallgemeinerter Eigenwertprobleme: Einerseits diejenigen, bei denen \mathbf{B} nicht invertierbar ist, und andererseits diejenigen, bei denen \mathbf{A} selbstadjungiert ist und diese nützliche Eigenschaft erhalten bleiben sollte. Diesem zweiten Fall widmen wir uns in einem separaten Abschnitt.

Wir untersuchen zunächst den Fall, dass \mathbf{B} nicht invertierbar oder sehr schlecht konditioniert ist. In diesem Fall ist man daran interessiert, eine *verallgemeinerte Schur-Zerlegung* zu berechnen, nämlich unitäre Matrizen $\mathbf{Q}, \mathbf{P} \in \mathbb{K}^{n \times n}$, für die die Matrizen

$$\widehat{\mathbf{A}} := \mathbf{Q}\mathbf{A}\mathbf{P}^*, \quad \widehat{\mathbf{B}} := \mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{P}^*$$

obere Dreiecksmatrizen sind. An den Diagonalelementen der beiden transformierten Matrizen lassen sich dann die verallgemeinerten Eigenwerte direkt ablesen, durch Rückwärtseinsetzen in $\widehat{\mathbf{A}} - \lambda\widehat{\mathbf{B}}$ können wir auch Eigenvektoren bestimmen.

Bei der Berechnung der verallgemeinerten Schur-Zerlegung können wir uns an der Vorgehensweise für die gewöhnliche Schur-Zerlegung orientieren: Mit Hilfe geeigneter unitärer Matrizen \mathbf{Q} und \mathbf{P} können wir das Eigenwertproblem auf die Form

$$\widehat{\mathbf{A}}\mathbf{x} = \lambda\widehat{\mathbf{B}}\mathbf{x}, \quad \widehat{\mathbf{A}} = \mathbf{Q}\mathbf{A}\mathbf{P}^*, \quad \widehat{\mathbf{B}} = \mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{P}^*$$

bringen, bei der $\widehat{\mathbf{B}}$ bereits eine rechte obere Dreiecksmatrix ist, $\widehat{\mathbf{A}}$ allerdings nur eine Hessenberg-Matrix.

Implizite Iteration für reguläres B

Die Dreiecksstruktur der Matrix $\widehat{\mathbf{B}}$ lässt sich ausnutzen, um ähnlich wie im Fall der Berechnung der Singulärwertzerlegung vorzugehen: Falls $\widehat{\mathbf{B}}$ regulär ist, könnte man *implizit* das Gegenstück der Formulierung (10.3) behandeln, also die Schur-Zerlegung der Matrix $\mathbf{H}^{(0)} = \widehat{\mathbf{B}}^{-1}\widehat{\mathbf{A}}$ berechnen, indem man die in der QR-Iteration auftretenden Transformationen $\mathbf{Q}^{(0)}, \mathbf{Q}^{(1)}, \dots$ anwendet:

$$\mathbf{H}^{(0)} := \widehat{\mathbf{B}}^{-1}\widehat{\mathbf{A}}, \quad \mathbf{H}^{(m+1)} := (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{H}^{(m)} \mathbf{Q}^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.$$

Da $\widehat{\mathbf{B}}$ schlecht konditioniert sein kann, wollen wir die Multiplikation mit $\widehat{\mathbf{B}}^{-1}$ vermeiden. Wie bei der Singulärwertzerlegung definieren wir

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{A}}^{(0)} &:= \widehat{\mathbf{A}}, & \widehat{\mathbf{A}}^{(m+1)} &:= (\mathbf{P}^{(m)})^* \widehat{\mathbf{A}}^{(m)} \mathbf{Q}^{(m)}, \\ \widehat{\mathbf{B}}^{(0)} &:= \widehat{\mathbf{B}}, & \widehat{\mathbf{B}}^{(m+1)} &:= (\mathbf{P}^{(m)})^* \widehat{\mathbf{B}}^{(m)} \mathbf{Q}^{(m)} \end{aligned} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

mit später noch genauer zu spezifizierenden unitären Matrizen $\mathbf{P}^{(m)}$ und erhalten wegen

$$\mathbf{H}^{(0)} = (\widehat{\mathbf{B}}^{(0)})^{-1} \widehat{\mathbf{A}}^{(0)}$$

und

$$\begin{aligned} \mathbf{H}^{(m+1)} &= (\mathbf{Q}^{(m)})^* \mathbf{H}^{(m)} \mathbf{Q}^{(m)} = (\mathbf{Q}^{(m)})^* (\widehat{\mathbf{B}}^{(m)})^{-1} \widehat{\mathbf{A}}^{(m)} \mathbf{Q}^{(m)} \\ &= (\mathbf{Q}^{(m)})^* (\widehat{\mathbf{B}}^{(m)})^{-1} \mathbf{P}^{(m)} (\mathbf{P}^{(m)})^* \widehat{\mathbf{A}}^{(m)} \mathbf{Q}^{(m)} \\ &= ((\mathbf{P}^{(m)})^* \widehat{\mathbf{B}} \mathbf{Q}^{(m)})^{-1} ((\mathbf{P}^{(m)})^* \widehat{\mathbf{A}} \mathbf{Q}^{(m)}) = (\widehat{\mathbf{B}}^{(m+1)})^{-1} \widehat{\mathbf{A}}^{(m+1)} \end{aligned} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

mit einer einfachen Induktion die faktorisierte Darstellung

$$\mathbf{H}^{(m)} = (\widehat{\mathbf{B}}^{(m)})^{-1} \widehat{\mathbf{A}}^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0. \quad (10.4)$$

Wir können also die Matrizen $\mathbf{H}^{(m)}$ während der gesamten Iteration in Produktform darstellen und müssen insbesondere niemals die vollständige Inverse der Matrizen $\widehat{\mathbf{B}}^{(m)}$ berechnen. Allerdings müssen wir darauf achten, dass während der Iteration weder die Dreiecksform der Matrizen $\widehat{\mathbf{B}}^{(m)}$ noch die Hessenberg-Form der Matrizen $\widehat{\mathbf{A}}^{(m)}$ verloren geht. Dazu greifen wir wieder auf Satz 6.9 zurück: Wir führen die erste Givens-Rotation der QR-Zerlegung der Matrix $\mathbf{H}^{(m)} - \mu \mathbf{I}$ mit einem geeigneten Shift-Parameter μ durch und sorgen anschließend mit weiteren Givens-Rotationen dafür, dass die Matrizen wieder die vorgesehene Form haben. Mit Satz 6.9 folgt dann, dass sich das Resultat allenfalls im Vorzeichen von dem der ursprünglichen QR-Iteration unterscheidet. Wir stellen die ursprünglichen Matrizen in der Form

$$\widehat{\mathbf{A}}^{(m)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \widehat{\mathbf{B}}^{(m)} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & \dots & b_{1n} \\ & b_{22} & b_{23} & \dots & b_{2n} \\ & & b_{33} & \dots & b_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & b_{nn} \end{pmatrix}$$

dar. Die erste Givens-Rotation bei der Berechnung der QR-Zerlegung von $\mathbf{H}^{(m)}$ wirkt auf die ersten beiden Spalten der Matrizen, die die Form

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ \gamma_1 & a_{32}^{(1)} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_{11}^{(1)} & b_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & b_{1n} \\ \delta_1 & b_{22}^{(1)} & b_{23} & \cdots & b_{2n} \\ & & b_{33} & \cdots & b_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & b_{nn} \end{pmatrix}$$

annehmen. Indem wir eine passende Givens-Rotation auf die beiden ersten Zeilen anwenden, können wir δ_1 eliminieren:

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(2)} \\ a_{21}^{(2)} & a_{22}^{(2)} & a_{23} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \gamma_1 & a_{32}^{(1)} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_{11}^{(2)} & b_{12}^{(2)} & \cdots & \cdots & b_{1n}^{(2)} \\ & b_{22}^{(2)} & b_{23} & \cdots & b_{2n}^{(2)} \\ & & b_{33} & \cdots & b_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & b_{nn} \end{pmatrix}.$$

Den Eintrag γ_1 eliminieren wir mit einer Givens-Rotation, die auf die zweite und dritte Zeile wirkt, so dass sich

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(2)} \\ a_{21}^{(3)} & a_{22}^{(3)} & a_{23}^{(3)} & \cdots & a_{2n}^{(3)} \\ & a_{32}^{(3)} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_{11}^{(2)} & b_{12}^{(2)} & \cdots & \cdots & b_{1n}^{(2)} \\ & b_{22}^{(3)} & b_{23}^{(3)} & \cdots & b_{2n}^{(3)} \\ & \delta_2 & b_{33} & \cdots & b_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & b_{nn} \end{pmatrix}$$

ergibt. Wir beseitigen δ_2 mit einer Givens-Rotation, die auf die zweite und dritte Spalte wirkt und zu einem Eintrag γ_2 in der zweiten Spalte der vierten Zeile der linken Matrix führt. Diesen Eintrag eliminieren wir mit einer Givens-Rotation, die auf die dritte und vierte Zeile wirkt und einen Eintrag δ_3 in die dritte Spalte der vierten Zeile der rechten Matrix erzeugt. Indem wir entsprechend fortfahren, können wir die störenden Einträge wieder „nach rechts unten aus den Matrizen heraus schieben“ und so die ursprüngliche Struktur der Matrizen wiederherstellen. Damit sind $\widehat{\mathbf{A}}^{(m+1)}$ und $\widehat{\mathbf{B}}^{(m+1)}$ gefunden. Da auf die erste Spalte der Matrizen lediglich die Givens-Rotation des ersten Schritts der QR-Zerlegung wirkt, lässt sich Satz 6.9 anwenden und folgern, dass die so berechneten Matrizen denen entsprechen, die im Rahmen der konventionellen QR-Iteration entstehen würden. Demzufolge ist zu erwarten, dass die Matrizen $\mathbf{H}^{(m)}$ gegen obere Dreiecksform konvergieren werden, dass also die unteren Nebendiagonaleinträge gegen Null streben werden. Falls $h_{k+1,k}^{(m)} = 0$ gilt, folgt aus (10.4)

$$0 = h_{k+1,k}^{(m)} = a_{k+1,k}^{(m)} / b_{k+1,k+1}^{(m)},$$

also muss $a_{k+1,k}^{(m)} = 0$ gelten, wir hätten in diesem Fall also auch einen Nebendiagonaleintrag der Matrix $\widehat{\mathbf{A}}^{(m)}$ eliminiert und damit einen Schritt in Richtung der gewünschten Dreiecksmatrix vollzogen.

Deflation

Falls $\hat{a}_{k+1,k}^{(m)} = 0$ für ein $k \in \{1, \dots, n-1\}$ gelten sollte, können wir wie üblich eine Deflation durchführen und die Iteration mit kleineren Teilmatrizen fortführen.

Die Deflation kann uns aber auch dabei helfen, den Fall einer nicht invertierbaren Matrix \mathbf{B} zu behandeln: Falls \mathbf{B} nicht invertierbar ist, kann die Dreiecksmatrix $\widehat{\mathbf{B}}$ ebenfalls nicht invertierbar sein. Bei einer Dreiecksmatrix ist das genau dann der Fall, wenn ein Diagonaleintrag gleich null ist, wir können diese Situation also sehr einfach erkennen.

Falls beispielsweise $\hat{b}_{11}^{(m)} = 0$ gilt, sind wir in der Situation

$$\widehat{\mathbf{A}}^{(m)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \widehat{\mathbf{B}}^{(m)} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & b_{12} & \dots & \dots & b_{1n} \\ & b_{22} & b_{23} & \dots & b_{2n} \\ & & b_{33} & \dots & b_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & b_{nn} \end{pmatrix}$$

und können eine Givens-Rotation auf die ersten beiden Zeilen anwenden, um den Eintrag a_{21} zu eliminieren. Wir erhalten

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & \dots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ & a_{32}^{(1)} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \mathbf{0} & b_{12}^{(1)} & \dots & \dots & b_{1n} \\ & b_{22}^{(1)} & b_{23} & \dots & b_{2n} \\ & & b_{33} & \dots & b_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & b_{nn} \end{pmatrix}$$

Nun ist ein Nebendiagonalelement in der linken Matrix gleich null, so dass wir per Deflation zu den Teilmatrizen

$$\begin{pmatrix} a_{22}^{(1)} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ a_{32}^{(1)} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_{22}^{(1)} & b_{23} & \dots & b_{2n} \\ b_{33} & \dots & b_{3n} \\ & \ddots & \vdots \\ & & b_{nn} \end{pmatrix}$$

übergehen können. Nicht invertierbare Matrizen können wir also nicht nur einfach bei unseren Berechnungen berücksichtigen, sie führen sogar dazu, dass wir besonders früh mit einer Deflation die Problemgröße reduzieren können.

Der aus den impliziten QR-Schritten und der Deflation entstehende Algorithmus ist unter dem Namen *QZ-Iteration* bekannt. Da ausschließlich unitäre Transformationen zum Einsatz kommen, ist er in der Praxis relativ unanfällig für Rundungsfehler und somit auch für eher schlecht konditionierte Eigenwertprobleme anwendbar.

10.3 Selbstadjungierte positiv definite verallgemeinerte Eigenwertprobleme

Wir wenden uns einem wichtigen Spezialfall unter den verallgemeinerten Eigenwertproblemen zu: Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungiert, und sei $\mathbf{B} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungiert und positiv definit, es gelte also

$$0 < \langle \mathbf{B}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n \setminus \{\mathbf{0}\}.$$

Wir suchen nach Lösungen $\lambda, \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ des verallgemeinerten Eigenwertproblems

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{B}\mathbf{x}.$$

Unser Ziel besteht darin, dieses verallgemeinerte Eigenwertproblem auf ein gewöhnliches Eigenwertproblem zurückzuführen, ohne dabei die Selbstadjungiertheit der Matrix \mathbf{A} zu verlieren. Das Hilfsmittel der Wahl ist die *Cholesky-Zerlegung*

$$\mathbf{B} = \mathbf{L}\mathbf{L}^*$$

der Matrix \mathbf{B} , die für selbstadjungiert positive Matrizen immer existiert und sich in der Praxis auch häufig stabil berechnen lässt. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{x} &= \lambda\mathbf{B}\mathbf{x}, \\ \mathbf{A}\mathbf{x} &= \lambda\mathbf{L}\mathbf{L}^*\mathbf{x}, \\ \mathbf{L}\mathbf{L}^{-1}\mathbf{A}(\mathbf{L}^*)^{-1}\mathbf{L}^*\mathbf{x} &= \lambda\mathbf{L}\mathbf{L}^*\mathbf{x}, \end{aligned}$$

und durch Multiplikation mit \mathbf{L}^{-1} von links folgt

$$\mathbf{L}^{-1}\mathbf{A}(\mathbf{L}^*)^{-1}(\mathbf{L}^*\mathbf{x}) = \lambda\mathbf{L}^*\mathbf{x}.$$

Wir führen die Hilfsgrößen

$$\hat{\mathbf{x}} := \mathbf{L}^*\mathbf{x}, \quad \hat{\mathbf{A}} := \mathbf{L}^{-1}\mathbf{A}(\mathbf{L}^*)^{-1}$$

ein und erhalten das gewöhnliche Eigenwertproblem

$$\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{x}} = \lambda\hat{\mathbf{x}}. \quad (10.5)$$

Offenbar ist die Matrix $\hat{\mathbf{A}}$ selbstadjungiert, es ist uns also gelungen, diese wichtige Eigenschaft zu erhalten.

Damit ist das Problem (10.5) unseren sämtlichen bisher untersuchten Verfahren zugänglich. Beispielsweise folgt aus Folgerung 3.45, dass eine unitäre Matrix $\hat{\mathbf{Q}} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und eine reelle Diagonalmatrix $\hat{\mathbf{D}} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit

$$\hat{\mathbf{Q}}\hat{\mathbf{D}}\hat{\mathbf{Q}}^* = \hat{\mathbf{A}}$$

existieren. Indem wir die Transformation rückgängig machen, erhalten wir

$$\mathbf{Q} := (\mathbf{L}^*)^{-1}\hat{\mathbf{Q}}$$

und stellen fest, dass

$$\begin{aligned}\mathbf{Q}^* \mathbf{A} \mathbf{Q} &= \widehat{\mathbf{Q}}^* \mathbf{L}^{-1} \mathbf{A} (\mathbf{L}^*)^{-1} \widehat{\mathbf{Q}} = \widehat{\mathbf{Q}}^* \widehat{\mathbf{A}} \widehat{\mathbf{Q}} = \mathbf{D}, \\ \mathbf{Q}^* \mathbf{B} \mathbf{Q} &= \widehat{\mathbf{Q}}^* \mathbf{L}^{-1} \mathbf{L} \mathbf{L}^* (\mathbf{L}^*)^{-1} \widehat{\mathbf{Q}} = \widehat{\mathbf{Q}}^* \widehat{\mathbf{Q}} = \mathbf{I}\end{aligned}$$

gelten, dass also die Matrix \mathbf{Q} sowohl \mathbf{A} als auch \mathbf{B} auf Diagonalform transformiert.

Die Eigenwerte $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$ des transformierten Problems (und damit auch der verallgemeinerten Eigenwertprobleme) lassen sich mit Hilfe des Rayleigh-Quotienten charakterisieren, der sich in der Form

$$\Lambda_{\widehat{\mathbf{A}}}(\widehat{\mathbf{x}}) = \frac{\langle \widehat{\mathbf{A}} \widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle_2}{\langle \widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle_2} = \frac{\langle \mathbf{L}^{-1} \mathbf{A} (\mathbf{L}^*)^{-1} \mathbf{L}^* \mathbf{x}, \mathbf{L}^* \mathbf{x} \rangle_2}{\langle \mathbf{L}^* \mathbf{x}, \mathbf{L}^* \mathbf{x} \rangle_2} = \frac{\langle \mathbf{A} \mathbf{x}, (\mathbf{L}^*)^{-1} \mathbf{L}^* \mathbf{x} \rangle_2}{\langle \mathbf{L} \mathbf{L}^* \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2} = \frac{\langle \mathbf{A} \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2}{\langle \mathbf{B} \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2}$$

darstellen lässt. Diese Eigenschaft ist vor allem für große verallgemeinerte Eigenwertproblem wichtig, da es mit ihrer Hilfe häufig möglich ist, auf die zeitaufwendige Berechnung der transformierten Matrix $\widehat{\mathbf{A}}$ zu verzichten und direkt mit \mathbf{A} und \mathbf{B} zu arbeiten.

Mit kleinen Modifikationen lassen sich auch andere Verfahren durchführen, ohne explizit mit $\widehat{\mathbf{A}}$ arbeiten zu müssen. Ein Beispiel ist der Lanczos-Algorithmus 8.7, der sich elegant formulieren lässt, wenn man das euklidische Skalarprodukt durch das zu der Matrix \mathbf{B} gehörende *Energie-Skalarprodukt* ersetzt, das durch

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_B := \langle \mathbf{B} \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2 \quad \text{für alle } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{K}^n$$

definiert ist. Es induziert die *Energienorm*

$$\|\mathbf{x}\|_B := \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_B} \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n.$$

Wir bezeichnen mit

$$\widehat{\mathbf{p}}^{(m)} := \mathbf{L}^* \mathbf{p}^{(m)}, \quad \widehat{\mathbf{q}}^{(m)} := \mathbf{L}^* \mathbf{q}^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}$$

die transformierten Vektoren und untersuchen die im Rahmen des Algorithmus 8.7 auftretenden Gleichungen. Die Berechnung von

$$\begin{aligned}\gamma &= \|\widehat{\mathbf{p}}^{(m)}\|_2 = \sqrt{\langle \widehat{\mathbf{p}}^{(m)}, \widehat{\mathbf{p}}^{(m)} \rangle_2} = \sqrt{\langle \mathbf{L}^* \mathbf{p}^{(m)}, \mathbf{L}^* \mathbf{p}^{(m)} \rangle_2} \\ &= \sqrt{\langle \mathbf{L} \mathbf{L}^* \mathbf{p}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m)} \rangle_2} = \sqrt{\langle \mathbf{B} \mathbf{p}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m)} \rangle_2} = \|\mathbf{p}^{(m)}\|_B\end{aligned}$$

lässt sich auf die Energienorm zurückführen, und ebenso die von

$$\beta_m = \langle \widehat{\mathbf{q}}^{(m)}, \widehat{\mathbf{p}}^{(m)} \rangle_2 = \langle \mathbf{L}^* \mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{L}^* \mathbf{p}^{(m)} \rangle_2 = \langle \mathbf{L} \mathbf{L}^* \mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m)} \rangle_2 = \langle \mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p}^{(m)} \rangle_B$$

auf das Energie-Skalarprodukt. Für die Berechnung von $\widehat{\mathbf{p}}^{(m)}$ erhalten wir

$$\widehat{\mathbf{p}}^{(m)} = \widehat{\mathbf{A}} \widehat{\mathbf{q}}^{(m)} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{A} (\mathbf{L}^*)^{-1} \mathbf{L}^* \mathbf{q}^{(m)} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{q}^{(m)},$$

so dass sich

$$\mathbf{p}^{(m)} = (\mathbf{L}^*)^{-1} \widehat{\mathbf{p}}^{(m)} = (\mathbf{L}^*)^{-1} \mathbf{L}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{q}^{(m)} = (\mathbf{L} \mathbf{L}^*)^{-1} \mathbf{A} \mathbf{q}^{(m)} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{q}^{(m)}$$

ergibt. Anders als im Fall des ursprünglichen Lanczos-Algorithmus müssen wir also für das verallgemeinerte Eigenwertproblem dazu in der Lage sein, Gleichungssysteme der Form

$$\mathbf{B}\mathbf{p}^{(m)} = \mathbf{A}\mathbf{q}^{(m)}$$

effizient zu lösen. Der resultierende verallgemeinerte Lanczos-Algorithmus nimmt mit diesen Modifikationen die folgende Form an:

Algorithmus 10.3 (Verallgemeinerter Lanczos-Algorithmus) *Seien $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungiert, sei $\mathbf{B} \in \mathbb{K}^{n \times n}$ selbstadjungiert und positiv definit, und sei ein Startvektor $\mathbf{q}^{(1)} \in \mathbb{K}^n$ mit $\|\mathbf{q}^{(1)}\|_B = 1$ gegeben. Der folgende Algorithmus berechnet die bezüglich des zu \mathbf{B} gehörenden Energieskalarprodukts orthonormale Arnoldi-Basis $\mathbf{q}^{(1)}, \dots, \mathbf{q}^{(m_0)}$ und die Matrizen $\widehat{\mathbf{A}}^{(m)}$. Der Algorithmus endet mit $m = m_0$.*

```

m ← 1;
a ← Aq(m);
Löse Bp = a;
γ ← √⟨a, p⟩2;
α1 ← ⟨q(1), a⟩2;   p ← p - α1q(1);
β1 ← √⟨a, p⟩2;
while βm ≥ εirγ do begin
    q(m+1) ← p/βm;
    m ← m + 1;
    a ← Aq(m);
    Löse Bp = a;
    γ ← √⟨a, p⟩2;
    αm ← ⟨q(m), a⟩2;   p ← p - β̄m-1q(m-1) - αmq(m);
    βm ← √⟨a, p⟩2
end

```

Im Algorithmus wird bei der Berechnung von β_m ein kleiner Trick verwendet: Streng genommen müssten wir

$$\langle \mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle_B = \langle \mathbf{B}\mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle_2$$

berechnen und würden deshalb $\mathbf{B}\mathbf{p}$ benötigen, also eine Multiplikation mit der Matrix \mathbf{B} . Glücklicherweise steht \mathbf{p} an dieser Stelle des Algorithmus nach Konstruktion senkrecht (bezüglich des Energie-Skalarprodukts) auf $\mathbf{q}^{(m-1)}$ und $\mathbf{q}^{(m)}$, erfüllt also

$$\langle \mathbf{B}\mathbf{q}^{(m-1)}, \mathbf{p} \rangle_2 = \langle \mathbf{q}^{(m-1)}, \mathbf{p} \rangle_B = 0, \quad \langle \mathbf{B}\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p} \rangle_2 = \langle \mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p} \rangle_B = 0,$$

so dass wir

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{a}, \mathbf{p} \rangle_2 &= \langle \mathbf{A}\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p} \rangle_2 = \langle \mathbf{B}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{q}^{(m)}, \mathbf{p} \rangle_2 \\ &= \langle \mathbf{B}(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{q}^{(m)} - \bar{\beta}_{m-1}\mathbf{q}^{(m-1)} - \alpha_m\mathbf{q}^{(m)}), \mathbf{p} \rangle_2 = \langle \mathbf{B}\mathbf{p}, \mathbf{p} \rangle_2 \end{aligned}$$

10.3 Selbstadjungierte positiv definite verallgemeinerte Eigenwertprobleme

erhalten und so die zusätzliche Multiplikation vermeiden können. Der verallgemeinerte Lanczos-Algorithmus berechnet eine Tridiagonalmatrix, deren Eigenwerte die der Matrix $\widehat{\mathbf{A}}$ approximieren, und damit auch die des verallgemeinerten Eigenwertproblems.

Im Fall der vorkonditionierten Eigenwertverfahren ist die Situation etwas besser, da sich die Inverse der Matrix \mathbf{B} in der Matrix des Vorkonditionierers unterbringen lässt: Wenn $\widehat{\mathbf{N}}$ ein Vorkonditionierer für die Matrix $\widehat{\mathbf{A}}$ ist, nimmt die Richardson-Iteration die Form

$$\widehat{\mathbf{x}}^{(m+1)} = \widehat{\mathbf{x}}^{(m)} - \theta \widehat{\mathbf{N}}(\widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{x}}^{(m)} - \mu\widehat{\mathbf{x}}^{(m)}) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

an. Indem wir wie zuvor

$$\widehat{\mathbf{x}}^{(m)} = \mathbf{L}^* \mathbf{x}^{(m)}, \quad \mathbf{x}^{(m)} = (\mathbf{L}^*)^{-1} \widehat{\mathbf{x}}^{(m)} \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0$$

einsetzen, erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{(m+1)} &= (\mathbf{L}^*)^{-1} \widehat{\mathbf{x}}^{(m)} - \theta (\mathbf{L}^*)^{-1} \widehat{\mathbf{N}} (\mathbf{L}^{-1} \mathbf{A} (\mathbf{L}^*)^{-1} \widehat{\mathbf{x}}^{(m)} - \mu \widehat{\mathbf{x}}^{(m)}) \\ &= (\mathbf{L}^*)^{-1} \widehat{\mathbf{x}}^{(m)} - \theta (\mathbf{L}^*)^{-1} \widehat{\mathbf{N}} \mathbf{L}^{-1} (\mathbf{A} (\mathbf{L}^*)^{-1} \widehat{\mathbf{x}}^{(m)} - \mu \mathbf{L} \widehat{\mathbf{x}}^{(m)}) \\ &= \mathbf{x}^{(m)} - \theta (\mathbf{L}^*)^{-1} \widehat{\mathbf{N}} \mathbf{L}^{-1} (\mathbf{A} \mathbf{x}^{(m)} - \mu \mathbf{B} \mathbf{x}^{(m)}) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0. \end{aligned}$$

Wir definieren

$$\mathbf{N} := (\mathbf{L}^*)^{-1} \widehat{\mathbf{N}} \mathbf{L}^{-1}, \quad \widehat{\mathbf{N}} = \mathbf{L}^* \mathbf{N} \mathbf{L}$$

und erhalten

$$\mathbf{x}^{(m+1)} = \mathbf{x}^{(m)} - \theta \mathbf{N} (\mathbf{A} \mathbf{x}^{(m)} - \mu \mathbf{B} \mathbf{x}^{(m)}) \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}_0.$$

Für die Untersuchung der Konvergenz ist wichtig, dass

$$\widehat{\mathbf{N}}^{-1} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{N}^{-1} (\mathbf{L}^*)^{-1}, \quad \widehat{\mathbf{A}} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{A} (\mathbf{L}^*)^{-1}$$

gelten, so dass wir die Gleichungen

$$\begin{aligned} \langle \widehat{\mathbf{N}}^{-1} \widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle_2 &= \langle \mathbf{L}^{-1} \mathbf{N}^{-1} (\mathbf{L}^*)^{-1} \mathbf{L}^* \mathbf{x}, \mathbf{L}^* \mathbf{x} \rangle_2 = \langle \mathbf{N}^{-1} \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2, \\ \langle \widehat{\mathbf{A}} \widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle_2 &= \langle \mathbf{L}^{-1} \mathbf{A} (\mathbf{L}^*)^{-1} \mathbf{L}^* \mathbf{x}, \mathbf{L}^* \mathbf{x} \rangle_2 = \langle \mathbf{A} \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_2 \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n, \widehat{\mathbf{x}} = \mathbf{L}^* \mathbf{x} \end{aligned}$$

erhalten. Damit gilt die für die Konvergenz des vorkonditionierten Verfahrens wichtige Bedingung (9.12) genau dann, wenn

$$(1 - \gamma) \langle \widehat{\mathbf{N}}^{-1} \widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle_2 \leq \langle \widehat{\mathbf{A}} \widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle_2 \leq (1 + \gamma) \langle \widehat{\mathbf{N}}^{-1} \widehat{\mathbf{x}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle_2 \quad \text{für alle } \widehat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n$$

erfüllt ist. Falls $\widehat{\mathbf{N}}$ also ein guter Vorkonditionierer für $\widehat{\mathbf{A}}$ ist, ist \mathbf{N} auch ein guter Vorkonditionierer für \mathbf{A} .

Index

- Adjungierte, 21
- Ähnliche Matrizen, 19
- Ähnlichkeitstransformation, 19
- Arnoldi-Basis, 134
 - Algorithmus, 136
- Bauer-Fike-Störungssatz, 68
- Bidiagonalisierung, 167
- Bisektion
 - Algorithmus, 113
- Block-Gradientenverfahren, 161
- Cauchy-Schwarz-Ungleichung, 21
- Charakteristisches Polynom, 16
 - Algorithmus, 112
- Courant-Fischer-Weyl-Prinzip, 67
- Deflation, 101
- Diagonalisierbarkeit
 - komplex, 35
 - reell, 33
- Eigenraum, 15
- Eigenvektor, 15
- Eigenwert, 15
 - dominant, 58
- Frobenius-Norm, 36
- Gershgorin-Kreise, 123
- gestörte Matrix
 - Eigenwerte, 68
- Givens-Rotation, 52
- Gradientenverfahren, 153
 - Block-Variante, 161
 - vorkonditioniert, 156
- Gramsche Matrix, 25
- Hessenberg-Form, 101
 - Algorithmus, 103
- Hessenbergmatrix, 101
 - irreduzibel, 106
- Householder-Spiegelung, 30
- invarianter Unterraum, 26
- Inverse Iteration, 75
 - mit Rayleigh-Shift, 79
 - mit Shift, 77
- Isometrische Matrix, 28
- Jacobi-Iteration, 54
- Jordan-Normalform, 38
- kanonische Einheitsvektoren, 20
- Kongruenztransformation, 124
- Krylow-Raum, 133
- Lanczos-Algorithmus, 137
 - für verallgemeinerte Eigenwertprobleme, 176
- LOBPCG, 162
- Lokal optimales vorkonditioniertes Block-cg-Verfahren, 162
- Lokal optimales vorkonditioniertes cg-Verfahren, 159
- LOPCG, 159
- Matrix
 - Hessenberg, 101
 - irreduzibel, 42
 - isometrisch, 28
 - reduzibel, 42
 - selbstadjungiert, 28
 - unitär, 28
- Metrische Äquivalenz, 34
- Minimierung des Rayleigh-Quotienten, 67

INDEX

Norm

 euklidisch, 21

Normale Matrix, 34

Orthogonale Iteration, 92

Perron-Frobenius-Theorie, 39

PINVIT, 156

positiv definit, 25

positiv semidefinit, 25

QR-Iteration, 98

QR-Zerlegung, 30

QZ-Iteration, 173

Rayleigh-Quotient, 62

Residuum, 65

Schur-Zerlegung, 31

Schwachbesetzte Matrix, 130

Selbstadjungierte Matrix, 28, 34

Shift, 76

Singulärwertzerlegung, 163

Skalarprodukt

 euklidisch, 21

Spektrallücke, 70

Spektralnorm, 22

Spektralradius, 35

Spektrum, 16

Sturmsche Kette, 116

 Algorithmus, 120

Tschebyscheff-Polynom, 139

Unitäre Matrix, 28

Vektoriteration, 62

 mit Abbruchkriterium, 64

Vielfachheit, 16

Vorkonditioniertes Gradientenverfahren,
 156

Wilkinson-Shift, 104

Winkel, 61

Zeilensummennorm, 122

Literaturverzeichnis

- [1] G. Frobenius. Ueber Matrizen aus nicht negativen Elementen. *Sitzungsber. Königl. Preuss. Akad. Wiss.*, pages 456–477, 1921.
- [2] O. Perron. Zur Theorie der Matrices. *Mathematische Annalen*, 64(2):248–263, 1907.
- [3] H. Wielandt. Unzerlegbare, nicht negative Matrizen. *Mathematische Zeitschrift*, 52:642–648, 1950.