

Aufgabe 4.11 Zu lösen sei die quadratische Gleichung

$$x^2 - 2px + q = 0 \text{ mit } p^2 - q \geq 0 \text{ und } q = 0.123451234.$$

Berechnen Sie für die Folge $p \in \{1, 10, 10^2, \dots\}$ die beiden Lösungen

$$\begin{aligned} x_1 &= \hat{x}_1 = p + \sqrt{p^2 - q}, \\ \hat{x}_2 &= p - \sqrt{p^2 - q}, \quad x_2 = q/\hat{x}_1. \end{aligned}$$

Tragen Sie die Resultate in eine Tabelle ein, und unterstreichen Sie jeweils die gültigen Ziffern.

Aufgabe 4.12 Das Prinzip zur Herleitung des Levenberg-Marquardt-Verfahrens

$$x^{k+1} = x^k + \Delta z^k, \quad k = 0, 1, \dots$$

zur Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme ist nicht affinvariant. Dieser Mangel vererbt sich natürlich auch auf das Verfahren selbst. Eine affin-invariante Modifikation lautet: Minimiere

$$\|F'(x^k)^{-1}(F(x^k) + F'(x^k)\Delta z)\|_2$$

unter der Nebenbedingung

$$\|\Delta z\|_2 \leq \delta.$$

Welches Verfahren ergibt sich hieraus?

5 Symmetrische Eigenwertprobleme

Das folgende Kapitel ist dem Studium des numerischen Eigenwertproblems der linearen Algebra gewidmet. Vorab werden wir eine Analyse der Kondition des allgemeinen Eigenwertproblems durchführen (Kapitel 5.1). Dabei wird sich zeigen, daß das Eigenwertproblem im allgemeinen nur für *normale* Matrizen *gut konditioniert* ist. Tatsächlich tritt dieser Problemtyp auch am häufigsten in den naturwissenschaftlich-technischen Anwendungen auf. Deswegen beschränken wir uns auch auf die Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren symmetrischer Matrizen (Kapitel 5.2 und 5.3). Für allgemeine Matrizen ist das Problem der Singulärwertzerlegung gut konditioniert, das wir schließlich in Kapitel 5.4 darstellen. Auch dieser Problemtyp hat enorme praktische Relevanz.

5.1 Kondition des allgemeinen Eigenwertproblems

Wir beginnen mit der Bestimmung der *Kondition* des Eigenwertproblems

$$Ax = \lambda x$$

für eine beliebige komplexe Matrix $A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$. Der Einfachheit halber setzen wir voraus, daß λ_0 ein (algebraisch) einfacher Eigenwert von A ist, d.h. eine einfache Nullstelle des charakteristischen Polynoms $\chi_A(\lambda) = \det(A - \lambda I)$. Unter diesen Voraussetzungen ist λ differenzierbar in A , wie wir im folgenden Lemma sehen werden.

Lemma 5.1 Sei $\lambda_0 \in \mathbb{C}$ einfacher Eigenwert von $A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$. Dann existiert eine stetig differenzierbare Abbildung

$$\lambda : V \subset \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{C}, \quad B \mapsto \lambda(B)$$

von einer Umgebung V von A in $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$, so daß $\lambda(A) = \lambda_0$ und $\lambda(B)$ einfacher Eigenwert von B ist für alle $B \in V$. Ist x_0 ein Eigenvektor von A zu λ_0 und y_0 ein (adjungierter) Eigenvektor von $A^* := \bar{A}^T$ zum Eigenwert $\bar{\lambda}_0$, d.h.

$$Ax_0 = \lambda_0 x_0 \quad \text{und} \quad A^* y_0 = \bar{\lambda}_0 y_0,$$

so gilt für die Ableitung von λ an der Stelle A , daß

$$\lambda'(A)C = \frac{\langle Cx_0, y_0 \rangle}{\langle x_0, y_0 \rangle} \quad \text{für alle } C \in \text{Mat}_n(\mathbf{C}). \quad (5.1)$$

Beweis. Sei $C \in \text{Mat}_n(\mathbf{C})$ eine beliebige komplexe Matrix. Da λ_0 eine einfache Nullstelle des charakteristischen Polynoms χ_A ist, gilt

$$0 \neq \chi'_A(\lambda_0) = \frac{\partial}{\partial \lambda} \chi_{A+tC}(\lambda) \Big|_{t=0}.$$

Nach dem Satz über implizite Funktionen gibt es daher eine in einer Nullumgebung $] - \varepsilon, \varepsilon[\subset \mathbf{R}$ stetig differenzierbare Abbildung

$$\lambda :] - \varepsilon, \varepsilon[\rightarrow \mathbf{C}, \quad t \mapsto \lambda(t),$$

so daß $\lambda(0) = \lambda_0$ und $\lambda(t)$ einfacher Eigenwert von $A + tC$ ist. Wiederrum aufgrund der Einfachheit von λ_0 gibt es eine stetig differenzierbare Funktion

$$x :] - \varepsilon, \varepsilon[\rightarrow \mathbf{C}^n, \quad t \mapsto x(t),$$

so daß $x(0) = x_0$ und $x(t)$ Eigenvektor von $A + tC$ zum Eigenwert $\lambda(t)$ ist ($x(t)$ läßt sich explizit mit adjungierten Determinanten berechnen, siehe Aufgabe 5.2). Differenzieren wir die Gleichung

$$(A + tC)x(t) = \lambda(t)x(t)$$

nach t an der Stelle $t = 0$, so folgt

$$Cx_0 + Ax'(0) = \lambda_0 x'(0) + \lambda'(0)x_0.$$

Multiplizieren wir nun rechts mit y_0 (im Skalarprodukt-Sinn), so erhalten wir

$$\langle Cx_0, y_0 \rangle + \langle Ax'(0), y_0 \rangle = \langle \lambda_0 x'(0), y_0 \rangle + \langle \lambda'(0)x_0, y_0 \rangle.$$

Da $\langle \lambda'(0)x_0, y_0 \rangle = \lambda'(0)\langle x_0, y_0 \rangle$ und

$$\langle Ax'(0), y_0 \rangle = \langle x'(0), A^*y_0 \rangle = \lambda_0 \langle x'(0), y_0 \rangle = \langle \lambda_0 x'(0), y_0 \rangle,$$

folgt somit

$$\lambda'(0) = \frac{\langle Cx_0, y_0 \rangle}{\langle x_0, y_0 \rangle}.$$

Damit haben wir die Ableitung von λ in Richtung der Matrix C berechnet. Aus der stetigen Differenzierbarkeit der Richtungsableitungen folgt die Differenzierbarkeit von λ nach A und

$$\lambda'(A)C = \lambda'(0) = \frac{\langle Cx_0, y_0 \rangle}{\langle x_0, y_0 \rangle}$$

5.1 Kondition des allgemeinen Eigenwertproblems

131

für alle $C \in \text{Mat}_n(\mathbf{C})$. □

Zur Berechnung der Kondition des Eigenwertproblems (λ, A) müssen wir nun die Norm der Ableitung $\lambda'(A)$ als lineare Abbildung

$$\lambda'(A) : \text{Mat}_n(\mathbf{C}) \rightarrow \mathbf{C}, \quad C \mapsto \frac{\langle Cx, y \rangle}{\langle x, y \rangle},$$

berechnen, wobei x ein Eigenvektor zum einfachen Eigenwert λ_0 von A und y ein adjungierter Eigenvektor zum Eigenwert $\bar{\lambda}_0$ von A^* ist. Wir wählen dazu auf $\text{Mat}_n(\mathbf{C})$ die 2-Norm (Matrixnorm!) und auf \mathbf{C} den Betrag. Für jede Matrix $C \in \text{Mat}_n(\mathbf{C})$ gilt (Cauchy-Schwarzsche Ungleichung)

$$|\langle Cx, y \rangle| \leq \|Cx\| \|y\| \leq \|C\| \|x\| \|y\|,$$

wobei für $C = yx^*$, $x^* := \bar{x}^T$, gerade Gleichheit gilt. Daher folgt wegen $\|yx^*\| = \|x\| \|y\|$, daß

$$\|\lambda'(A)\| = \sup_{C \neq 0} \frac{|\langle Cx, y \rangle / \langle x, y \rangle|}{\|C\|} = \frac{\|x\| \|y\|}{|\cos(\angle(x, y))|} = 1,$$

wobei $\angle(x, y)$ der Winkel zwischen dem Eigenvektor x und dem adjungierten Eigenvektor y ist. Für *normale* Matrizen A , $A^*A = AA^*$, ist jeder Eigenvektor x auch adjungierter Eigenvektor, d.h. $A^*x = \bar{\lambda}_0 x$, und daher $\|\lambda'(A)\| = 1$. Wir können nun unsere Ergebnisse wie folgt zusammenfassen.

Satz 5.2 Die absolute Kondition der Bestimmung eines einfachen Eigenwertes λ_0 einer Matrix $A \in \text{Mat}_n(\mathbf{C})$ bezüglich der 2-Norm ist

$$k_{\text{abs}} = \|\lambda'(A)\| = \frac{\|x\| \|y\|}{|\langle x, y \rangle|} = \frac{1}{|\cos(\angle(x, y))|}$$

und die relative Kondition

$$k_{\text{rel}} = \frac{\|A\|}{|\lambda_0|} \|\lambda'(A)\| = \frac{\|A\|}{|\lambda_0 \cos(\angle(x, y))|},$$

wobei x ein Eigenvektor von A zum Eigenwert λ_0 , d.h. $Ax = \lambda_0 x$, und y ein adjungierter Eigenvektor, d.h. $A^*y = \bar{\lambda}_0 y$. Insbesondere ist das Eigenwertproblem für normale Matrizen gut konditioniert mit $k_{\text{abs}} = 1$.

Beispiel 5.3 Falls A nicht symmetrisch ist, ist das Eigenwertproblem im allgemeinen nicht mehr gut konditioniert. Als Beispiel betrachten wir die Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \tilde{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \delta & 0 \end{pmatrix},$$

mit den Eigenwerten $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ bzw. $\tilde{\lambda}_{1,2} = \pm\sqrt{\delta}$. Für die Kondition des Eigenwertproblems (A, λ_1) ergibt sich

$$\kappa_{\text{abs}}^{\tilde{\lambda}} \geq \frac{|\tilde{\lambda}_1 - \lambda_1|}{\|\tilde{A} - A\|_2} = \frac{\sqrt{\delta}}{\delta} = \frac{1}{\sqrt{\delta}} \rightarrow \infty \text{ für } \delta \rightarrow 0.$$

Die Bestimmung des Eigenwertes $\lambda = 0$ von A ist daher (bzgl. des absoluten Fehlers) ein schlecht gestelltes Problem.

Für das gut konditionierte reell-symmetrische Eigenwertproblem könnte man zunächst daran denken, das charakteristische Polynom aufzustellen und anschließend seine Nullstellen zu bestimmen. Leider „verschwindet“ die Information der Eigenwerte, falls man das charakteristische Polynom in Koefizientendarstellung behandelt. Nach Kapitel 2.2 ist also das umgekehrte Problem schlecht konditioniert.

Beispiel 5.4 Von WILKINSON [76] wurde das Polynom

$$P(\lambda) = (\lambda - 1) \cdots (\lambda - 20) \in \mathbf{P}_{20}$$

als warnendes Beispiel angegeben. Multiplizieren wir diese Wurzeldarstellung aus, so ergeben sich Koeffizienten in der Größenordnung zwischen 1 (Koeffizient von λ^{20}) und 10^{20} (der konstante Term ist z.B. 20!). Wir stören nun den Koeffizienten (in der Größenordnung 10^3) von λ^{19} um den sehr kleinen Wert $\varepsilon := 2^{-23} \approx 10^{-7}$. In Tabelle 5.1 haben wir die exakten Nullstellen des gestörten Polynoms

$$\tilde{P}(\lambda) = P(\lambda) - \varepsilon\lambda^{19}$$

eingetragen. Trotz der extrem kleinen Störung sind die Fehler beachtlich. Insbesondere sind fünf Nullstellenpaare komplex.

5.2 Vektoriteration

Die Eigenwerte einer Matrix $A \in \text{Mat}_n(\mathbf{R})$ als Nullstellen des charakteristischen Polynoms $\chi_A(\lambda) = \det(A - \lambda V)$ zu berechnen, mag allenfalls für $n = 2$ ein gangbarer Weg sein. Statt dessen werden wir hier vielmehr direkte Methoden entwickeln, die Eigenwerte und Eigenvektoren zu bestimmen. Die einfachste direkte Möglichkeit ist die sogenannte *Vektoriteration*, die wir in ihren beiden Spielarten, der *direkten* und der *inversen* Vektoriteration, im folgenden besprechen wollen.

Tabelle 5.1: Exakte Nullstellen des Polynoms $\tilde{P}(\lambda)$ für $\varepsilon := 2^{-23}$.

1.000 000 000	10.095 266 145 ± 0.643 500 904i
2.000 000 000	11.793 633 881 ± 1.652 329 728i
3.000 000 000	13.992 358 137 ± 2.518 830 070i
4.000 000 000	16.730 737 466 ± 2.812 624 894i
4.999 999 928	19.502 439 400 ± 1.940 330 347i
6.000 006 944	
6.999 697 234	
8.007 267 603	
8.917 250 249	
20.846 908 101	

Die von VON MISES eingeführte *direkte Vektoriteration* (engl.: *power method*) basiert auf folgender Idee: Wir iterieren die durch die Matrix $A \in \text{Mat}_n(\mathbf{R})$ gegebene Abbildung und definieren eine Folge $\{x_k\}_{k=0,1,\dots}$ für einen beliebigen Startwert $x_0 \in \mathbf{R}^n$ durch

$$x_{k+1} := Ax_k \text{ für } k = 0, 1, \dots \quad (5.2)$$

Ist ein einfacher Eigenwert λ von A betragsmäßig echt größer als alle anderen Eigenwerte von A , so können wir vermuten, daß sich λ bei der Iteration (5.2) gegenüber allen anderen Eigenwerten „durchsetzt“ und x_k gegen einen Eigenvektor von A zum Eigenwert λ konvergiert. Diese Vermutung bestätigt der folgende Satz. Der Einfachheit halber beschränken wir uns dabei auf symmetrische Matrizen, für die das Eigenwertproblem nach Satz 5.2 gut konditioniert ist.

Satz 5.5 Sei λ_1 ein einfacher Eigenwert der symmetrischen Matrix $A \in \text{Mat}_n(\mathbf{R})$ und betragsmäßig echt größer als alle anderen Eigenwerte von A , d.h.

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

Sei ferner $x_0 \in \mathbf{R}^n$ ein Vektor, der nicht senkrecht auf dem Eigenraum von λ_1 steht. Dann konvergiert die Folge $y_k := x_k / \|x_k\|$ mit $x_{k+1} = Ax_k$ gegen einen normierten Eigenvektor von A zum Eigenwert λ_1 .

Beweis. Sei η_1, \dots, η_n eine Orthonormalbasis von Eigenvektoren von A mit $A\eta_i = \lambda_i\eta_i$. Dann gilt $x_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i\eta_i$ mit $\alpha_1 = \langle x_0, \eta_1 \rangle \neq 0$. Folglich ist

$$x_k = A^k x_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^k \eta_i = \alpha_1 \lambda_1^k \left(\eta_1 + \underbrace{\sum_{i=2}^n \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k}_{=: z_k} \eta_i \right).$$

Da $|\lambda_i| < |\lambda_1|$ für alle $i = 2, \dots, n$, gilt $\lim_{k \rightarrow \infty} z_k = \eta_1$ und daher

$$y_k = \frac{x_k}{\|x_k\|} = \frac{z_k}{\|z_k\|} \rightarrow \pm \eta_1 \quad \text{für } k \rightarrow \infty.$$

□

Die direkte Vektoriteration hat jedoch mehrere Nachteile. Zum einen erhalten wir nur den Eigenvektor zum betragsgrößten Eigenwert λ_1 von A . Zum anderen hängt die Konvergenzgeschwindigkeit von dem Quotienten $|\lambda_2/\lambda_1|$ ab. Liegen die Eigenwerte λ_1 und λ_2 betragsmäßig dicht zusammen, so konvergiert also die direkte Vektoriteration nur sehr langsam.

Die oben beschriebenen Nachteile der direkten Vektoriteration werden bei der von WIRLANDT (1945) entwickelten *inversen Vektoriteration* vermieden. Angenommen, wir hätten einen Schätzwert $\bar{\lambda} \approx \lambda_i$ eines beliebigen Eigenwertes λ_i der Matrix A zur Verfügung, so daß

$$|\bar{\lambda} - \lambda_j| < |\bar{\lambda} - \lambda_i| \quad \text{für alle } j \neq i. \quad (5.3)$$

Dann ist $(\bar{\lambda} - \lambda_i)^{-1}$ der betragsgrößte Eigenwert der Matrix $(A - \bar{\lambda}I)^{-1}$. Konsequenterweise konstruiert man deshalb die Vektoriteration für diese Matrix. Diese Idee liefert die Iterationsvorschrift

$$(A - \bar{\lambda}I)x_{k+1} = x_k \quad \text{für } k = 0, 1, \dots \quad (5.4)$$

Sie heißt *inverse Vektoriteration* (engl.: *inverse power method*). Man beachte, daß bei jedem Iterationsschritt das lineare Gleichungssystem (5.4) gelöst werden muß, jedoch nur für verschiedene rechte Seiten x_k . Die Matrix $A - \bar{\lambda}I$ muß daher nur einmal (z.B. mit der Gaußschen Dreieckszerlegung) zerlegt werden. Nach Satz 5.5 konvergiert die Folge $y_k := x_k/\|x_k\|$ unter der Voraussetzung (5.3) für $k \rightarrow \infty$ gegen einen normierten Eigenvektor von A zum Eigenwert λ_i , falls nicht gerade der Startvektor x_0 senkrecht auf dem Eigenvektor η_i zum Eigenwert λ_i steht. Der *Konvergenzfaktor* ist dabei

$$\max_{j \neq i} \left| \frac{\lambda_j - \bar{\lambda}}{\lambda_j - \lambda_i} \right| < 1.$$

5.2 Vektoriteration

Ist $\bar{\lambda}$ eine besonders gute Schätzung von λ_i , so gilt

$$\left| \frac{\lambda_j - \bar{\lambda}}{\lambda_j - \lambda_i} \right| \ll 1 \quad \text{für alle } j \neq i,$$

das Verfahren konvergiert in diesem Fall sehr rasch. Durch geeignete Wahl von $\bar{\lambda}$ kann man also mit dieser Methode und einem nahezu beliebigen Startvektor x_0 einzelne Eigenwerte und Eigenvektoren herausgreifen.

Bemerkung 5.6 Man beachte, daß die Matrix $A - \bar{\lambda}I$ für "gut gewähltes" $\bar{\lambda} \approx \lambda_i$ fast singular ist. Im vorliegenden Fall entstehen daraus jedoch keine numerischen Schwierigkeiten, da nur die *Richtung* des Eigenvektors gesucht ist, deren Berechnung gut konditioniert ist (vgl. Beispiel 2.32).

Beispiel 5.7 Betrachten wir als Beispiel die 2×2 -Matrix

$$A := \begin{pmatrix} -1 & 3 \\ -2 & 4 \end{pmatrix}.$$

Sie hat die Eigenwerte $\lambda_1 = 1$ und $\lambda_2 = 2$. Gehen wir aus von einer Approximation $\bar{\lambda} = 1 - \epsilon$ von λ_1 mit $0 < \epsilon \ll 1$, so ist die Matrix

$$A - \bar{\lambda}I = \begin{pmatrix} -2 + \epsilon & 3 \\ -2 & 3 + \epsilon \end{pmatrix}$$

fast singular und

$$(A - \bar{\lambda}I)^{-1} = \frac{1}{\epsilon^2 + \epsilon} \begin{pmatrix} 3 + \epsilon & -3 \\ 2 & -2 + \epsilon \end{pmatrix}.$$

Da sich der Faktor $1/(\epsilon^2 + \epsilon)$ bei der Normierung herauskürzt, ist die Berechnung der Richtung einer Lösung x von $(A - \bar{\lambda}I)x = b$ gut konditioniert. Dies läßt sich auch an der relativen komponentenweisen Kondition

$$\kappa_{\text{rel}} = \frac{\|(A - \bar{\lambda}I)^{-1}\|_b \|b\|_\infty}{\|x\|_\infty}$$

bezüglich Störungen der rechten Seite ablesen. Für $b := (1, 0)^T$ ergibt sich z.B.

$$x = (A - \bar{\lambda}I)^{-1}b = [(A - \bar{\lambda}I)^{-1}]_1 |b| = \frac{1}{\epsilon(\epsilon + 1)} \begin{pmatrix} 3 + \epsilon \\ 2 \end{pmatrix}$$

und daher $\kappa_C((A - \bar{\lambda}I)^{-1}, b) = 1$.

Tatsächlich wird in Programmen bei einer (echt) singulären Matrix $A - \bar{\lambda}I$ ein Pivotelement $\epsilon = 0$ durch die relative Maschinengenauigkeit ϵ_{ps} ersetzt und mit der nun fast singulären Matrix die inverse Vektoriteration durchgeführt.

5.3 QR-Algorithmus für symmetrische Eigenwertprobleme

Wie in Kapitel 5.1 dargestellt, ist das Eigenwertproblem für symmetrische Matrizen gut konditioniert. In diesem Abschnitt interessieren wir uns für die Frage, wie wir effektiv *sämtliche* Eigenwerte einer reellen symmetrischen Matrix $A \in \text{Mat}_n(\mathbf{R})$ gleichzeitig berechnen können. Wir wissen, daß A nur reelle Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbf{R}$ besitzt und eine Orthonormalbasis $\eta_1, \dots, \eta_n \in \mathbf{R}^n$ aus Eigenvektoren $A\eta_i = \lambda_i \eta_i$ existiert, d.h.

$$Q^T A Q = \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \text{ mit } Q = [\eta_1, \dots, \eta_n] \in \mathbf{O}(n). \quad (5.5)$$

Die erste Idee, die einem in den Sinn kommen könnte, wäre, Q direkt in endlich vielen Schritten zu bestimmen. Da die Eigenwerte die Wurzeln des charakteristischen Polynoms sind, hätte man damit auch ein endliches Verfahren zur Bestimmung der Nullstellen von Polynomen beliebigen Grades (im Fall symmetrischer Matrizen nur mit reellen Wurzeln) gefunden. Dem steht der *Satz von Abel* entgegen: Er besagt, daß es ein solches Verfahren (basierend auf den Operationen $+$, $-$, \cdot , $/$ und Wurzelziehen) nicht gibt.

Die zweite Idee, die von (5.5) nahegelegt wird, ist, A durch eine Ähnlichkeitstransformation (Konjugation), z. B. mit orthogonalen Matrizen, der Diagonalgestalt näherzubringen, da die Eigenwerte invariant unter Ähnlichkeitstransformationen sind. Versucht man, eine symmetrische Matrix A durch Konjugation mit Householder-Matrizen auf Diagonalgestalt zu bringen, so erweist sich dies schnell als unmöglich.

$$\begin{bmatrix} * & \dots & * \\ \vdots & & \vdots \\ * & \dots & * \end{bmatrix} \xrightarrow{Q_1} \begin{bmatrix} * & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \vdots & \vdots & \vdots \\ * & \dots & * & * \end{bmatrix} \xrightarrow{Q_1^T} \begin{bmatrix} * & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ * & \dots & * & * \\ * & \dots & * & * \end{bmatrix}$$

Was die Multiplikation mit der Householder-Transformation von links schafft hat, wird bei der Multiplikation von rechts wieder zerstört. Anders sieht es aus, wenn wir A nur auf *Tridiagonalgestalt* bringen wollen. Hier stören sich die Householder-Transformationen von links und rechts wechsel-

5.3 QR-Algorithmus für symmetrische Eigenwertprobleme

seitig nicht.

$$\begin{bmatrix} * & \dots & * \\ \vdots & & \vdots \\ * & \dots & * \end{bmatrix} \xrightarrow{P_1} \begin{bmatrix} * & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \vdots & \vdots & \vdots \\ * & \dots & * & * \end{bmatrix} \xrightarrow{P_1^T} \begin{bmatrix} * & * & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ * & * & \dots & \dots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ * & \dots & * & \dots & * \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

Diese Einsicht formulieren wir als Lemma.

Lemma 5.8 Sei $A \in \text{Mat}_n(\mathbf{R})$ symmetrisch. Dann existiert eine orthogonale Matrix $P \in \mathbf{O}(n)$, welche das Produkt von $n-2$ Householder-Reflexionen ist, so daß $P A P^T$ Tridiagonalgestalt hat.

Beweis. Wir iterieren den in (5.6) gezeigten Prozeß und erhalten so Householder-Reflexionen P_1, \dots, P_{n-2} , so daß

$$\underbrace{P_{n-2} \dots P_1}_P A \underbrace{P_1^T \dots P_{n-2}^T}_{P^T} = \begin{bmatrix} * & & * \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ * & \dots & * \end{bmatrix} = P \begin{bmatrix} * & & * \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ * & \dots & * \end{bmatrix}$$

□

Damit haben wir unser Ausgangsproblem transformiert auf die Frage nach den Eigenwerten einer symmetrischen Tridiagonalmatrix. Wir benötigen also nur noch einen Algorithmus für diesen Spezialfall. Die Idee des folgenden Algorithmus geht auf Rutishauser zurück. Er hat zunächst ausprobiert, was passiert, wenn man die Faktoren der LR -Zerlegung einer Matrix $A = LR$ vertauscht, $A' = RL$, und diesen Prozeß von Zerlegen und Vertauschen iteriert. Dabei zeigte sich, daß in vielen Fällen die Folge der so konstruierten Matrizen gegen die Diagonalmatrix A der Eigenwerte konvergiert. Bei dem auf FRANCIS (1959) [27] und KUBRANOVSKAJA (1961) [46] zurückgehenden QR -Algorithmus verwendet man statt einer LR -Zerlegung eine QR -Zerlegung. Diese existiert immer (keine Permutation nötig) und ist vor allen Dingen inhärent stabil, wie wir in Kapitel 3.2 gesehen haben. Wir definieren daher

eine Folge $\{A_k\}_{k=1,2,\dots}$ von Matrizen durch

$$\begin{aligned} \text{a) } A_1 &= A \\ \text{b) } A_k &= Q_k R_k, \quad QR\text{-Zerlegung} \\ \text{c) } A_{k+1} &= R_k Q_k. \end{aligned} \tag{5.7}$$

Lemma 5.9 Die Matrizen A_k haben folgende Eigenschaften:

- i) Die Matrizen A_k sind alle kongjugiert zu A .
- ii) Ist A symmetrisch, so auch alle A_k .
- iii) Ist A symmetrisch und tridiagonal, so auch alle A_k .

Beweis. Zu i) Sei $A = QR$ und $A' = RQ$. Dann gilt

$$QA'Q^T = QRQ^T = QR = A.$$

Zu ii) Die Transformationen der Form $A \mapsto B^T A B$, $B \in GL(n)$, sind die Basiswechsel für Bilinearformen und erhalten somit die Symmetrie. Insbesondere gilt dies für orthogonale Ähnlichkeitstransformationen. Dies folgt auch direkt aus

$$(A')^T = (A)^T Q^T Q = Q^T R^T R Q = Q^T A Q = A'.$$

Zu iii) Sei A symmetrisch und tridiagonal. Wir realisieren Q mit $n-1$ Givens-Rotationen $\Omega_{12}, \dots, \Omega_{n-1,n}$, so daß $Q^T = \Omega_{n-1,n} \cdots \Omega_{12}$ (\otimes zu eliminieren, \oplus neu erzeugtes (fill in-) Element).

$$A \rightarrow \begin{bmatrix} * & * & & & \\ \otimes & * & * & & \\ & \otimes & * & * & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \otimes & * & * \\ & & & & \otimes & * \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} * & * & \oplus & & & \\ & * & * & \oplus & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \oplus \\ & & & & \ddots & * \\ & & & & & * \end{bmatrix} \rightarrow R = Q^T A$$

$$R \rightarrow A' = RQ = Q^T A Q$$

$$\begin{bmatrix} * & * & \oplus & & & \\ & * & * & \oplus & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \oplus & * & * \\ & & & & \oplus & * \\ & & & & & * \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} * & * & * & \oplus & & \\ & * & * & * & \oplus & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \oplus \\ & & & & \ddots & * \\ & & & & & * \end{bmatrix}$$

Nach ii) wissen wir, daß A' wieder symmetrisch sein muß und daher alle \oplus -Einträge verschwinden. Also ist A' wieder tridiagonal. \square

Die Konvergenzeigenschaft zeigen wir nur für den einfachen Fall, daß die Beträge der Eigenwerte von A paarweise verschieden sind.

Satz 5.10 Sei $A \in \text{Mat}_n(\mathbf{R})$ symmetrisch mit den Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, so daß

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n| > 0 \tag{5.8}$$

und A_k, Q_k, R_k wie in (5.7) definiert. Dann gilt mit $A_k = (a_{ij}^{(k)})$

- a) $\lim_{k \rightarrow \infty} Q_k = I$
- b) $\lim_{k \rightarrow \infty} R_k = A$
- c) $a_{i,j}^{(k)} = O\left(\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_j}\right|^k\right)$ für $i > j$.

Beweis. Der hier gegebene Beweis geht auf WILKINSON [75] zurück. Wir zeigen zunächst, daß

$$A^k = \underbrace{Q_1 \cdots Q_k}_{=: P_k} \underbrace{R_k \cdots R_1}_{=: U_k} \quad \text{für } k = 1, 2, \dots$$

Für $k = 1$ ist die Behauptung klar, da $A = A_1 = Q_1 R_1$. Andererseits folgt aus der Konstruktion der A_k , daß

$$A_{k+1} = Q_{k+1} R_{k+1} = Q_k^T \cdots Q_1^T A Q_1 \cdots Q_k = P_k^{-1} A P_k$$

und daher der Induktionsschritt

$$A^{k+1} = A A^k = A P_k U_k = P_k Q_{k+1} R_{k+1} U_k = P_{k+1} U_{k+1}$$

Da $P_k \in O(n)$ orthogonal und U_k obere Dreiecksmatrix, können wir die QR-Zerlegung $A^k = P_k U_k$ von A^k durch die QR-Zerlegung der A_1, \dots, A_k ausdrücken, Ferner gilt

$$A^k = Q \Lambda^k Q^T, \quad \Lambda^k = \text{diag}(\lambda_1^k, \dots, \lambda_n^k).$$

Wir nehmen nun der Einfachheit halber an, Q hätte eine LR-Zerlegung

$$Q = LR,$$

wobei L unipotente untere und R obere Dreiecksmatrix ist. Dies können wir immer erreichen, indem wir A mit einer geeigneten Permutation konjugieren.

Damit gilt

$$A^k = Q \Lambda^k L R = Q (\Lambda^k L \Lambda^{-k}) (\Lambda^k R). \tag{5.9}$$

Für die unipotente untere Dreiecksmatrix $\Lambda^k L \Lambda^{-k}$ gilt

$$(\Lambda^k L \Lambda^{-k})_{ij} = l_{ij} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_j} \right)^k.$$

Insbesondere verschwinden alle Nicht-Diagonalelemente für $k \rightarrow \infty$, d.h.

$$\Lambda^k L \Lambda^{-k} = I + E_k \quad \text{mit} \quad E_k \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad k \rightarrow \infty.$$

Eingesetzt in (5.9) folgt

$$A^k = Q(I + E_k) \Lambda^k R.$$

Nun wenden wir auch auf $I + E_k$ (formal) eine QR-Zerlegung

$$I + E_k = \tilde{Q}_k \tilde{R}_k$$

an, wobei alle Diagonalelemente von \tilde{R}_k positiv seien. Dann folgt aus der Eindeutigkeit der QR-Zerlegung und $\lim_{k \rightarrow \infty} E_k = 0$, daß

$$\tilde{Q}_k, \tilde{R}_k \rightarrow I \quad \text{für} \quad k \rightarrow \infty.$$

Damit haben wir eine zweite QR-Zerlegung von A^k hergeleitet, da

$$A^k = (Q \tilde{Q}_k) (\tilde{R}_k \Lambda^k R).$$

Bis auf die Vorzeichen in der Diagonale gilt daher

$$P_k = Q \tilde{Q}_k, \quad U_k = \tilde{R}_k \Lambda^k R,$$

und es folgt für $k \rightarrow \infty$, daß

$$\begin{aligned} Q_k &= P_{k-1}^T P_k = \tilde{Q}_{k-1}^T Q^T Q \tilde{Q}_k = \tilde{Q}_{k-1}^T \tilde{Q}_k \rightarrow I \\ R_k &= U_k U_{k-1}^{-1} = \tilde{R}_k \Lambda^k R R^{-1} \Lambda^{-(k-1)} \tilde{R}_{k-1}^{-1} = \tilde{R}_k \Lambda \tilde{R}_{k-1}^{-1} \rightarrow \Lambda \end{aligned}$$

und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A_k = \lim_{k \rightarrow \infty} Q_k R_k = \lim_{k \rightarrow \infty} R_k = \Lambda.$$

□

Bemerkung 5.11 Eine genauere Analyse zeigt, daß das Verfahren auch für mehrfache Eigenwerte $\lambda_i = \dots = \lambda_j$ konvergiert. Falls hingegen $\lambda_i = -\lambda_{i+1}$, so konvergiert das Verfahren nicht. Es bleiben 2×2 -Blöcke stehen.

Liegen zwei Eigenwerte λ_i, λ_{i+1} betragsmäßig dicht beieinander, so konvergiert das Verfahren nur sehr langsam. Dies kann mit Hilfe der sogenannten *Shift-Strategien* verbessert werden. Im Prinzip versucht man, die beiden Eigenwerte dichter an den Nullpunkt zu schieben und so den Quotienten $|\lambda_{i+1}/\lambda_i|$ zu verkleinern. Dazu verwendet man für jeden Iterationsschritt k einen *Shift-Parameter* σ_k und definiert die Folge $\{A_k\}$ durch

- a) $A_1 = A$
- b) $A_k - \sigma_k I = Q_k R_k, \quad \text{QR-Zerlegung}$
- c) $A_{k+1} = R_k Q_k + \sigma_k I.$

Es folgt wie oben

$$1) \quad A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k \sim A_k$$

$$2) \quad (A - \sigma_k I) \dots (A - \sigma_1 I) = Q_1 \dots Q_k R_k \dots R_1.$$

Die Folge $\{A_k\}$ konvergiert gegen Λ mit der Geschwindigkeit

$$a_{i,j}^{(k)} = O \left(\left| \frac{\lambda_i - \sigma_1}{\lambda_j - \sigma_1} \right| \dots \left| \frac{\lambda_i - \sigma_{k-1}}{\lambda_j - \sigma_{k-1}} \right| \right) \quad \text{für} \quad i > j.$$

Wir haben ein solches Konvergenzverhalten bereits bei der inversen Vektoriteration in Kapitel 5.2 kennengelernt. Die σ_k sollten möglichst nahe an den Eigenwerten λ_i, λ_{i+1} liegen, um die Konvergenzbeschleunigung zu erreichen.

Wilkinson hat folgende Shift-Strategie vorgeschlagen: Wir gehen aus von einer symmetrischen Tridiagonalmatrix A . Falls dann das untere Ende der Tridiagonalmatrix A_k von der Form

$$\begin{pmatrix} \ddots & & & \\ & d_{n-1}^{(k)} & & \\ & & e_n^{(k)} & \\ & & & d_n^{(k)} \\ & & & & e_n^{(k)} \end{pmatrix}$$

ist, so hat die 2×2 -Eckmatrix zwei Eigenwerte, von denen wir denjenigen als σ_k wählen, der näher an $d_n^{(k)}$ liegt. Besser als diese expliziten Shiftstrategien sind, insbesondere für schlecht skalierte Matrizen, die *impliziten Shift-Verfahren*, für die wir wieder auf [35] bzw. [65] verweisen. Mit diesen Techniken benötigt man schließlich $O(n)$ Operationen pro zu berechnendem Eigenwert, also $O(n^2)$ für sämtliche Eigenwerte.

Neben den Eigenwerten interessieren wir uns auch für die *Eigenvektoren*, die sich wie folgt berechnen lassen: Ist $Q \in \mathbf{O}(n)$ eine orthogonale Matrix, so daß

$$A \approx Q^T \Lambda Q, \quad \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n),$$

so approximieren die Spalten von Q die Eigenvektoren von A , d.h.

$$Q \approx [\eta_1, \dots, \eta_n].$$

Zusammen erhalten wir den folgenden Algorithmus zur Bestimmung sämtlicher Eigenwerte und Eigenvektoren einer symmetrischen Matrix.

Algorithmus 5.12 QR-Algorithmus.

- a) Reduziere das Problem auf Tridiagonalgestalt

$$A \rightarrow A_1 = PAP^T, \quad A_1 \text{ symmetrisch und tridiagonal, } P \in \mathbf{O}(n)$$

- b) Approximiere die Eigenwerte mit dem QR-Algorithmus mit Givens-Rotationen angewandt auf A_1

$$\Omega A_1 \Omega^T \approx \Lambda, \quad \Omega \text{ Produkt aller Givens-Rotationen } \Omega_{ij}^{(k)}.$$

- c) Die Spalten von ΩP approximieren die Eigenvektoren von A

$$\Omega P \approx [\eta_1, \dots, \eta_n].$$

Der Aufwand beträgt

- a) $\frac{4}{3}n^3$ Multiplikationen für die Transformation auf Tridiagonalgestalt,

- b) $O(n^2)$ Multiplikationen für den QR-Algorithmus.

Für große n überwiegt daher der Aufwand für die Reduktion auf Tridiagonalgestalt.

Bemerkung 5.13 Für nicht symmetrische Matrizen führt man zunächst eine orthogonale Konjugation auf *Hessenberggestalt* durch. Anschließend wird mit dem QR-Algorithmus iterativ auf die *Schursche Normalform* (komplexe obere Dreiecksmatrix) hingearbeitet. Näheres dazu findet man in dem Buch von WILKINSON und REINSCHE [77].

5.4 Singulärwertzerlegung

Ein sehr nützliches Mittel zur Analyse von Matrizen stellt die sogenannte *Singulärwertzerlegung* einer Matrix $A \in \text{Mat}_{m,n}(\mathbf{R})$ dar. Wir zeigen zunächst die Existenz einer solchen Zerlegung und listen einige Eigenschaften auf. Anschließend werden wir uns ansehen, wie sich die Singulärwerte durch eine Variante des oben beschriebenen QR-Algorithmus berechnen lassen.

Satz 5.14 Sei $A \in \text{Mat}_{m,n}(\mathbf{R})$ eine beliebige reelle Matrix. Dann gibt es orthogonale Matrizen $U \in \mathbf{O}(m)$ und $V \in \mathbf{O}(n)$, so daß

$$U^T AV = \Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p) \in \text{Mat}_{m,n}(\mathbf{R}),$$

wobei $p = \min(m, n)$ und $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_p \geq 0$.

Beweis. Es genügt zu zeigen, daß es $U \in \mathbf{O}(m)$ und $V \in \mathbf{O}(n)$ gibt, so daß

$$U^T AV = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}.$$

Die Behauptung folgt dann durch Induktion. Sei

$\sigma := \|A\|_2 = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$. Da das Maximum angenommen wird, gibt es $v \in \mathbf{R}^n$, $u \in \mathbf{R}^m$, so daß

$$Av = \sigma u \quad \text{und} \quad \|u\|_2 = \|v\|_2 = 1.$$

Wir können $\{v\}$ zu einer Orthonormalbasis $\{v = V_1, \dots, V_n\}$ des \mathbf{R}^n und $\{u\}$ zu einer Orthonormalbasis $\{u = U_1, \dots, U_m\}$ des \mathbf{R}^m erweitern. Dann sind

$$V := [V_1, \dots, V_n] \quad \text{und} \quad U := [U_1, \dots, U_m]$$

orthogonale Matrizen, $V \in \mathbf{O}(n)$, $U \in \mathbf{O}(m)$, und $U^T AV$ von der Form

$$A_1 := U^T AV = \begin{pmatrix} \sigma & w^T \\ 0 & B \end{pmatrix}$$

mit $w \in \mathbf{R}^{n-1}$. Da

$$\left\| A_1 \begin{pmatrix} \sigma \\ w \end{pmatrix} \right\|_2^2 \geq (\sigma^2 + \|w\|_2^2)^2 \quad \text{und} \quad \left\| \begin{pmatrix} \sigma \\ w \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \sigma^2 + \|w\|_2^2,$$

gilt $\sigma^2 = \|A\|_2^2 = \|A_1\|_2^2 \geq \sigma^2 + \|w\|_2^2$ und daher $w = 0$, also

$$U^T AV = \begin{pmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & B \end{pmatrix}.$$

Definition 5.15 Die Zerlegung $U^T A V = \Sigma$ heißt *Singularwertzerlegung* von A , die σ_i sind die *Singularwerte* von A .

Mit der Singulärwertzerlegung stehen uns die wichtigsten Informationen über eine Matrix zur Verfügung. Die folgenden Eigenschaften lassen sich leicht aus Satz 5.14 ableiten.

Folgerung 5.16 Sei $U^T A V = \Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p)$ die Singularwertzerlegung von A mit den Singularwerten $\sigma_1, \dots, \sigma_p$, wobei $p = \min(m, n)$. Dann gilt:

1. Sind U_i und V_i die Spalten von U bzw. V , so ist

$$A V_i = \sigma_i U_i \quad \text{und} \quad A^T U_i = \sigma_i V_i \quad \text{für } i = 1, \dots, p.$$

2. Falls $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \dots = \sigma_p = 0$, so gilt $\text{Rang } A = r$,

$$\ker A = \text{span}\{V_{r+1}, \dots, V_n\} \quad \text{und} \quad \text{im } A = \text{span}\{U_1, \dots, U_r\}.$$

3. Die Euklidische Norm von A ist der größte Singularwert, d.h.

$$\|A\|_2 = \sigma_1.$$

4. Für die Frobenius-Norm von $\|A\|_F = (\sum_{i=1}^n \|A_i\|_2^2)^{1/2}$ gilt

$$\|A\|_F^2 = \sigma_1^2 + \dots + \sigma_p^2.$$

5. Die Kondition von A bzgl. der Euklidischen Norm ist der Quotient von größtem und kleinstem Singularwert, d.h.

$$\kappa_2(A) = \sigma_1 / \sigma_p.$$

6. Die Quadrate $\sigma_1^2, \dots, \sigma_p^2$ der Singularwerte sind Eigenwerte von $A^T A$ und $A A^T$ zu den Eigenvektoren V_1, \dots, V_p bzw. U_1, \dots, U_p .

Aufgrund der Invarianz der Euklidischen Norm $\|\cdot\|_2$ unter den orthogonalen Transformationen U und V erhalten wir aus der Singulärwertzerlegung von A auch eine weitere Darstellung der Pseudoinversen A^+ von A .

Folgerung 5.17 Sei $U^T A V = \Sigma$ die Singularwertzerlegung einer Matrix $A \in \text{Mat}_{m,n}(\mathbf{R})$ mit $p = \text{Rang } A$ und

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p, 0, \dots, 0).$$

Dann ist die Pseudoinverse $A^+ \in \text{Mat}_{n,m}(\mathbf{R})$ gerade

$$A^+ = V \Sigma^+ U^T \quad \text{mit} \quad \Sigma^+ = \text{diag}(\sigma_1^{-1}, \dots, \sigma_p^{-1}, 0, \dots, 0).$$

Beweis. Wir müssen nachweisen, daß die rechte Seite $B := V \Sigma^+ U^T$ die Penrose-Axiome erfüllt. Trivialerweise ist die Pseudoinverse der Diagonalmatrix Σ gerade Σ^+ . Daraus folgen sofort auch die Moore-Penrose-Axiome für B , da $V^T V = I$ und $U^T U = I$. \square

Wir gehen nun über zu der Frage der *numerischen Berechnung* der Singulärwerte. Nach Folgerung 5.16 sind die Singulärwerte σ_i einer Matrix $A \in \text{Mat}_n(\mathbf{R})$ die Wurzeln der Eigenwerte von $A^T A$,

$$\sigma_i(A) = \sqrt{\lambda_i(A^T A)}. \quad (5.10)$$

Das Eigenwertproblem der symmetrischen Matrix $A^T A$, und damit auch die Bestimmung der Singulärwerte von A , ist gut konditioniert. Mit (5.10) böte sich eine Berechnungsmethode für die $\sigma_i(A)$ an. Dieser Umweg ist jedoch ungeeignet, wie sich an folgendem Beispiel leicht nachvollziehen läßt:

Beispiel 5.18 Wir rechnen mit einer Genauigkeit von vier Ziffern (gerundet).

$$A = A^T = \begin{pmatrix} 1.005 & 0.995 \\ 0.995 & 1.005 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \lambda_1(A) = 2, \quad \sigma_2 = \lambda_2(A) = 0.01.$$

Über den Zugang mit $A^T A$ erhalten wir

$$\mathfrak{H}(A^T A) = \begin{pmatrix} 2.000 & 2.000 \\ 2.000 & 2.000 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1^2 = 4, \quad \sigma_2^2 = 0.$$

Ebenso wie bei der linearen Ausgleichsrechnung (Kapitel 3) suchen wir daher auch hier ein Verfahren, welches nur auf der Matrix A operiert. Dazu untersuchen wir zunächst, unter welchen Operationen die Singulärwerte invariant bleiben.

Lemma 5.19 Sei $A \in \text{Mat}_{m,n}(\mathbf{R})$, und seien $P \in \mathbf{O}(m)$, $Q \in \mathbf{O}(n)$ orthogonale Matrizen. Dann haben A und $B := PAQ$ die gleichen Singulärwerte.

Beweis. Einfache Übung. \square

Wir dürfen also die Matrix A von links und rechts mit beliebigen orthogonalen Matrizen multiplizieren, ohne die Singulärwerte zu verändern. Für die Anwendung des QR -Algorithmus ist es wünschenswert, die Matrix A so zu transformieren, daß $A^T A$ tridiagonal ist. Dies erreichen wir am einfachsten, indem wir A auf *Bidiagonalgestalt* bringen. Das folgende Lemma zeigt, daß dieses Ziel mit Hilfe von Householder-Transformationen von rechts und links erreichbar ist.

Lemma 5.20 Für jede Matrix $A \in \text{Mat}_{m,n}(\mathbf{R})$ mit $m \geq n$ (o.B.d.A) existieren orthogonale Matrizen $P \in \mathbf{O}(m)$ und $Q \in \mathbf{O}(n)$, so daß

$$PAQ = \begin{bmatrix} * & * & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & * \\ \hline 0 & \cdots & \cdots & 0 & \\ \vdots & & & \vdots & \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B \\ 0 \end{bmatrix}$$

wobei B eine (quadratische) Bidiagonalmatrix ist.

Beweis. Wir veranschaulichen die Konstruktion von P und Q mit Householder-Matrizen:

$$\begin{bmatrix} * & \cdots & \cdots & * \\ \vdots & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ * & \cdots & \cdots & * \end{bmatrix} \xrightarrow{P_1} \begin{bmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{bmatrix} \xrightarrow{Q_1} \begin{bmatrix} * & * & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & * & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * & \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{P_2} \begin{bmatrix} * & * & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \end{bmatrix} \xrightarrow{P_{n-1}} \begin{bmatrix} * & * & & & \\ & * & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & * \end{bmatrix}$$

Damit gilt dann

$$\begin{pmatrix} B \\ 0 \end{pmatrix} = \underbrace{P_{n-1} \cdots P_1}_=: P A \underbrace{Q_1 \cdots Q_{n-2}}_=: Q$$

□

Zur Herleitung eines effektiven Algorithmus untersuchen wir nun den QR-Algorithmus für die Tridiagonalmatrix $B^T B$. Ziel ist, eine vereinfachte Version zu finden, die ausschließlich auf B operiert. Führen wir den ersten Givens-Eliminationsschritt des QR-Algorithmus auf $A = B^T B$ aus,

$$A \longrightarrow \Omega_{12} B^T B \Omega_{12}^T = \underbrace{(B \Omega_{12}^T)^T}_{\tilde{B}^T} \underbrace{B \Omega_{12}^T}_{\tilde{B}},$$

so erhalten wir für \tilde{B} die Matrix

$$\tilde{B} = B \Omega_{12}^T = \begin{bmatrix} * & * & & & \\ \oplus & * & * & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & * \end{bmatrix},$$

wobei an der Stelle \oplus ein neues Element (fill in) erzeugt wurde. Spielt man den QR-Algorithmus für $B^T B$ auf diese Weise auf B zurück, so zeigt sich, daß das Verfahren folgendem Eliminationsprozeß entspricht.

$$\begin{bmatrix} * & * & z_3 & & & & & & & & \\ z_2 & * & * & z_5 & & & & & & & \\ & z_4 & * & * & z_7 & & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & & z_{2n-6} & * & & * & & & & z_{2n-3} \\ & & & & z_{2n-4} & * & & * & & & * \\ & & & & & z_{2n-2} & * & & & & * \end{bmatrix} \tag{5.11}$$

- eliminiere z_2 (Givens von links) \rightarrow erzeugt z_3
- eliminiere z_3 (Givens von rechts) \rightarrow erzeugt z_4
- \vdots
- eliminiere z_{2n-3} (Givens von rechts) \rightarrow erzeugt z_{2n-2}
- eliminiere z_{2n-2} (Givens von links)

Man „jagt“ also den jeweils erzeugten fill-in-Elementen z_2, z_3, \dots entlang der beiden Diagonalen nach und beseitigt dabei mit Givens-Rotationen abwechselnd von links und von rechts die neu entstehenden Einträge. Deswegen heißt dieser Prozeß im Englischen auch *chasing*. Zum Schluß hat die Matrix wieder Bidiagonalgestalt und wir haben einen Iterationsschritt des QR-Verfahrens für $B^T B$ nur auf B ausgeführt. Nach Satz 5.10 gilt

$$B_k^T B_k \rightarrow \Lambda = \text{diag}(\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2) = \Sigma^2 \quad \text{für } k \rightarrow \infty.$$

Daher konvergiert die Folge B_k gegen die Diagonalmatrix der Singulärwerte von B , d.h.

$$B_k \rightarrow \Sigma \quad \text{für } k \rightarrow \infty.$$

Zusammengefaßt erhalten wir folgenden Algorithmus zur Bestimmung der Singulärwerte von A (für Einzelheiten verweisen wir auf [35]):

Algorithmus 5.21 QR-Algorithmus für Singulärwerte.

- a) Bringe $A \in \text{Mat}_{m,n}(\mathbf{R})$ mit Hilfe orthogonaler Transformationen, $P \in \mathbf{O}(m)$ und $Q \in \mathbf{O}(n)$ (z.B. Householder-Reflexionen), auf Bidiagonalgestalt.

$$PAQ = \begin{pmatrix} B \\ 0 \end{pmatrix}, \quad B \in \text{Mat}_n(\mathbf{R}) \text{ obere Bidiagonalmatrix}$$

- b) Führe den QR-Algorithmus für $B^T B$ nach dem „chasing“-Verfahren (5.11) auf B aus und erhalte so eine Folge von Bidiagonalmatrizen $\{B_k\}$, die gegen die Diagonalmatrix Σ der Singulärwerte konvergiert.

Für den Aufwand zählen wir dabei für $m = n$

- a) $\sim \frac{4}{3}n^3$ Multiplikationen für die Reduktion auf Bidiagonalgestalt,
 b) $\mathcal{O}(n^2)$ Multiplikationen für den modifizierten QR-Algorithmus.

5.5 Übungen

Aufgabe 5.1 Bestimmen Sie die Eigenwerte, Eigenvektoren und die Determinante einer Householder-Matrix

$$Q = I - 2 \frac{vv^T}{v^T v}.$$

Aufgabe 5.2 Geben Sie eine Formel (mit Hilfe von Determinanten) für einen Eigenvektor $x \in \mathbf{C}^n$ zu einem einfachen Eigenwert $\lambda \in \mathbf{C}$ einer Matrix $A \in \text{Mat}_n(\mathbf{C})$ an.

Aufgabe 5.3 Zur Berechnung eines Eigenvektors η_j zu einem Eigenwert λ_j einer gegebenen Matrix A benutzt man nach Wielandt die inverse Iteration

$$Az_i - \hat{\lambda}_j z_i = z_{i-1}$$

mit einer Näherung $\hat{\lambda}_j$ für den Eigenwert λ_j . Leiten Sie aus der Beziehung

$$r(\delta) := Az_i - (\hat{\lambda}_j + \delta)z_i = z_{i-1} - \delta z_i$$

eine Korrektur δ für die Näherung $\hat{\lambda}_j$ so her, daß $\|r(\delta)\|_2$ minimal ist.

Aufgabe 5.4 Gegeben sei eine sogenannte Pfeilmatrix Z der Gestalt

$$Z = \begin{bmatrix} A & B \\ B^T & D \end{bmatrix},$$

wobei $A = A^T \in \text{Mat}_n(\mathbf{R})$ symmetrisch, $B \in \text{Mat}_{n,m}$ und D eine Diagonalmatrix, $D = \text{diag}(d_1, \dots, d_m)$. Für $m \gg n$ empfiehlt es sich, die Besetzungsstruktur von Z auszunutzen.

- a) Zeigen Sie, daß

$$Z - \lambda I = L^T(\lambda)(Y(\lambda) - \lambda I)L(\lambda) \quad \text{für } \lambda \neq d_i, i = 1, \dots, m,$$

wobei

$$L(\lambda) := \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ (D - \lambda I_m)^{-1} B^T & I_m \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad Y(\lambda) := \begin{bmatrix} M(\lambda) & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix}$$

$$\text{und } M(\lambda) := A - B(D - \lambda I_m)^{-1} B^T.$$

- b) Modifizieren Sie die in Aufgabe 5.3 behandelte Methode derart, daß im wesentlichen nur auf (n, n) -Matrizen operiert wird.

Aufgabe 5.5 Zeigen Sie die Eigenschaften der Singulärwertzerlegung aus Korollar 5.16.

Aufgabe 5.6 Seien gegeben eine (m, n) -Matrix A , $m \geq n$, und ein m -Vektor b . Für verschiedene Werte von $p \geq 0$ sei das folgende lineare Gleichungssystem zu lösen (Levenberg-Marquardt-Verfahren):

$$(A^T A + pI_n)x = A^T b. \quad (5.12)$$

a) Zeigen Sie, daß für $\text{rang } A < n$ und $p > 0$ die Matrix $A^T A + pI_n$ invertierbar ist.

b) A habe die Singulärwerte $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$. Zeigen Sie: Falls $\sigma_n \geq \sigma_1 \sqrt{\text{eps}}$, so gilt:

$$\kappa_2(A^T A + pI_n) \leq \frac{1}{\text{eps}} \quad \text{für } p \geq 0.$$

Falls $\sigma_n < \sigma_1 \sqrt{\text{eps}}$, so existiert ein $\bar{p} \geq 0$ derart, daß gilt:

$$\kappa_2(A^T A + pI_n) \leq \frac{1}{\text{eps}} \quad \text{für } p \geq \bar{p}.$$

Geben Sie \bar{p} an.

c) Entwickeln Sie einen effizienten Algorithmus zur Lösung von (5.12) unter Benutzung der Singulärwertzerlegung von A .

Aufgabe 5.7 Bestimmen Sie die Eigenwerte $\lambda_i(\epsilon)$ und die Eigenvektoren $\eta_i(\epsilon)$ der Matrix

$$A(\epsilon) := \begin{bmatrix} 1 + \epsilon \cos(2/\epsilon) & -\epsilon \sin(2/\epsilon) \\ -\epsilon \sin(2/\epsilon) & 1 - \epsilon \cos(2/\epsilon) \end{bmatrix}.$$

Wie verhalten sich $A(\epsilon)$, $\lambda_i(\epsilon)$ und $\eta_i(\epsilon)$ für $\epsilon \rightarrow 0$?

6 Drei-Term-Rekursionen

Bei vielen Problemen der Mathematik und Naturwissenschaften läßt sich eine Lösungsfunktion bezüglich sogenannter *spezieller Funktionen* entwickeln, die sich durch besondere, dem Problem angemessene Eigenschaften und gegebenenfalls durch ihre Konstruierbarkeit auszeichnen. Das Studium und der Gebrauch spezieller Funktionen ist ein alter Zweig der Mathematik, zu dem viele bedeutende Mathematiker beigetragen haben. Aufgrund neuer Erkenntnisse und erweiterter Rechenmöglichkeiten (z.B. durch symbolisches Rechnen) hat dieses Gebiet in letzter Zeit wieder einen Aufschwung genommen. Als Beispiele für klassische spezielle Funktionen seien an dieser Stelle bereits die Tschebyscheff-, Legendre-, Jacobi-, Laguerre- und Hermite-Polynome sowie die Bessel-Funktionen genannt. Wir werden in den folgenden Kapitel manche dieser Polynome benutzen und die dort jeweils wichtigen Eigenschaften herleiten.

Hier wollen wir uns mit dem Aspekt der Auswertung von Linearkombinationen

$$f(x) = \sum_{k=0}^N \alpha_k P_k(x) \quad (6.1)$$

spezieller Funktionen $P_k(x)$ beschäftigen, wobei wir die Koeffizienten α_k als gegeben voraussetzen. Die Berechnung oder auch nur Approximation dieser Koeffizienten kann mit großen Schwierigkeiten verbunden sein. Wir werden uns damit in Kapitel 7.2.2 am Beispiel der diskreten Fourier-Transformation beschäftigen.

Eine allen speziellen Funktionen gemeinsame Eigenschaft ist ihre *Orthogonalität*. Bisher haben wir von Orthogonalität nur in Zusammenhang mit einem Skalarprodukt auf einem endlich dimensionalen Vektorraum gesprochen. Viele uns von dort vertraute Strukturen lassen sich auf (unendlich dimensionale) Funktionenräume übertragen. Das Skalarprodukt ist dabei zumeist ein Integral. Zur Illustration betrachten wir das folgende Beispiel.

Beispiel 6.1 Wir definieren ein Skalarprodukt

$$(f, g) = \int_{-\pi}^{\pi} f(x)g(x)dx$$