

II. 4 Numerische Verfahren zur vollständigen Bestimmung aller Eigenwerte und (optional) Eigenvektoren

1. Naive Strategie: (i) Bestimme charakteristisches Polynom $p(\lambda)$
 (ii) Finde Nullstellen λ_i
 (iii) Für jedes i : Löse $(A - \lambda_i \mathbb{1}) \vec{x}_i = \vec{0}$

Probleme: (i) Die direkte Bestimmung von $p(\lambda)$ z.B. über Entwicklung der Determinante nach Spalten ist ineffizient ($N!$ Operationen). Selbst die effizienteste Determinantenbestimmung ($\frac{1}{3} N^3$ Additionen und Multiplikationen bei LU-Zerlegung) wäre zu teuer, da sie für jedes λ wiederholt werden müsste.

- (ii) Die Nullstellenbestimmung $p(\lambda) = \{\lambda_i\}$ ist schlecht konditioniert (dagegen ist die gesamte EW-Bestimmung von hermiteschen Matrizen gut konditioniert), d.h. kleine Rundungsfehler in den Koeffizienten von $p(\lambda)$ können zu großen Fehlern in den EW führen.
 (iii) Nullstellensuche ist im Fall mehrerer Nullstellen schwierig, besonders für (2n)-fache Nullstellen.

2. Von-Mises-Verfahren (wiederholte Multiplikation mit H), ggf. mit Orthogonalisierung: siehe 3. Übung

Inverse Iteration (Wielandt). Multiplikation mit $(H - \tilde{\lambda})^{-1}$ geschätzten Eigenwert $\tilde{\lambda}$: gut zur Verfeinerung von $\tilde{\lambda} \rightarrow \lambda$ und selektiven EV-Bestimmung.

Beide Varianten sind ungeeignet zur Bestimmung vieler/aller EW/EV von großen Matrizen.

Moderne Verfahren zur Bestimmung von Eigenwerten und -vektoren beruhen auf Ähnlichkeits transformationen mit unitären Matrizen, mit deren Hilfe die gegebene Matrix (teilweise oder vollständig) auf Diagonalgestalt transformiert wird. Dies kann direkt oder über den Zwischenschritt einer Tridiagonal-Matrix erfolgen. Zuerst behandeln wir eine konzeptionell einfache direkte Methode.

3. Iterative Diagonalisierung mit Jacobi-Rotationen

Grundidee: die Diagonalisierung einer hermiteschen Matrix A soll erreicht werden, indem wiederholt einzelne Nicht-Diagonal-Elemente a_{pq} ($p \neq q$) eliminiert werden. Im Fall reeller Matrizen gelingt dies mit Hilfe der orthogonalen Rotationsmatrix (Jacobi-Matrix):

$$P_{pq} = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & & & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & & & \\ & & c & 0 & \dots & 0 & s & \\ 0 & & 0 & \ddots & & \mathbb{1} & & 0 \\ & & 0 & \vdots & & & & \\ & & -s & 0 & \dots & 0 & c & \\ & & & & & & & \ddots \\ 0 & & & 0 & & & & \mathbb{1} \end{pmatrix}$$

mit $c^2 + s^2 = 1 \Rightarrow c = \cos(\varphi); s = \sin(\varphi)$

Damit entspricht die Ähnlichkeitstransformation

$A \rightarrow P_{pq}^T A P_{pq}$ einer Rotation in der p - q -Ebene

um den Winkel φ . Konkret ändert dabei die Linksmultiplikation einer Matrix M mit P_{pq}^T ,

$M \rightarrow M' = P_{pq}^T M$ nur die Zeilen p und q von M ,

die Rechtsmultiplikation $M \rightarrow M' = M P_{pq}$ entsprechend

nur die Spalten p und q . Folglich unterscheidet

sich $A' = P_{pq}^T A P_{pq}$ von A höchstens in den

Elementen:

$$A' = \begin{pmatrix} & & a'_{ip} & & a'_{iq} & & \\ & & \vdots & & \vdots & & \\ a'_{p1} & \dots & a'_{pp} & \dots & a'_{pq} & \dots & a'_{pn} \\ & & \vdots & & \vdots & & \\ a'_{q1} & \dots & a'_{qp} & \dots & a'_{qq} & \dots & a'_{qn} \\ & & \vdots & & \vdots & & \\ & & a'_{np} & & a'_{nq} & & \end{pmatrix}$$

Mit der Symmetrie von A erhalten wir:

$$a'_{pp} = c^2 a_{pp} + s^2 a_{qq} - 2sc a_{pq}$$

$$a'_{qq} = s^2 a_{pp} + c^2 a_{qq} + 2sc a_{pq}$$

$$* \quad a'_{pq} = (c^2 - s^2) a_{pq} + sc (a_{pp} - a_{qq})$$

$$a'_{rp} = c a_{rp} - s a_{rq} \quad \text{für } r \neq p, r \neq q$$

$$a'_{rq} = c a_{rq} + s a_{rp} \quad \text{für } r \neq p, r \neq q$$

Verifikation: Berechne zunächst $\tilde{A} = A P_{pq}$

$$\tilde{a}_{ir} = a_{ir} \text{ für } r \neq p, r \neq q$$

$$\tilde{a}_{ip} = c a_{ip} - s a_{iq}$$

$$\tilde{a}_{iq} = s a_{ip} + c a_{iq}$$

führe jetzt die zweite Multiplikation durch:

$$a'_{ri} = \tilde{a}_{ri} \text{ für } r \neq p, r \neq q$$

$$a'_{pi} = c \tilde{a}_{pi} - s \tilde{a}_{qi}$$

$$a'_{qi} = s \tilde{a}_{pi} + c \tilde{a}_{qi}$$

$$\Rightarrow a'_{pp} = c \tilde{a}_{pp} - s \tilde{a}_{qp} = c(c a_{pp} - s a_{pq}) - s(c a_{qp} - s a_{qq})$$

$$\stackrel{A=A^T}{=} c^2 a_{pp} + s^2 a_{qq} - 2sc a_{pq}$$

analog: $a'_{qq} = s^2 a_{pp} + c^2 a_{qq} + 2sc a_{pq}$

$$a'_{pq} = c \tilde{a}_{pq} - s \tilde{a}_{qq} = c(s a_{pp} + c a_{pq}) - s(s a_{qp} + c a_{qq})$$

$$\stackrel{A=A^T}{=} (c^2 - s^2) a_{pq} + sc (a_{pp} - a_{qq})$$

$$a'_{rp} = \tilde{a}_{rp} = c a_{rp} - s a_{rq} \text{ für } r \neq p, r \neq q$$

$$a'_{rq} = \tilde{a}_{rq} = s a_{rp} + c a_{rq} \text{ für } r \neq p, r \neq q$$

Um den Eintrag mit Koordinaten p, q zu eliminieren, fordern wir:

$$0 \stackrel{!}{=} a'_{pq} \Leftrightarrow \frac{c^2 - s^2}{2sc} = \frac{a_{qq} - a_{pp}}{2a_{pq}} \equiv \Theta \quad (1)$$

$$\text{Es gilt: } \Theta = \frac{c^2 - s^2}{2sc} = \frac{\cos^2(\varphi) - \sin^2(\varphi)}{2 \sin(\varphi) \cos(\varphi)} = \frac{\cos(2\varphi)}{\sin(2\varphi)} = \cot(2\varphi)$$

Vor der Rotation ist Θ bekannt. Wir könnten also theoretisch setzen: $\varphi = \frac{1}{2} \arctan(\Theta)$; $c = \cos(\varphi)$, $s = \sin(\varphi)$ und dann mit \star A' ausrechnen.

Stattdessen formt man in der Praxis um:

$$t \equiv \frac{s}{c} (= \tan(\varphi)) \Rightarrow \Theta = \frac{1 - t^2}{2t} \Leftrightarrow t^2 + 2t\Theta - 1 = 0$$

und löst die quadratische Gleichung numerisch stabil nach der betragskleineren Lösung auf:

$$(2) \quad t = \begin{cases} \frac{\text{sign}(\Theta)}{|\Theta| + \sqrt{\Theta^2 + 1}} & \text{falls } \Theta^2 < \text{MAX} \\ \frac{1}{2\Theta} & \text{sonst} \end{cases}$$
$$c = \frac{1}{\sqrt{t^2 + 1}}; \quad s = tc$$

Um Rundungsfehler zu minimieren, vermeidet man es, verschiedene Diagonalelemente (die i.A. betragsgroß sind) zu addieren. Daher benutzt man statt \star z.B.

$$0 = a'_{pq} = (c^2 - s^2)a_{pq} + sc a_{pp} - sc a_{qq}$$
$$\Leftrightarrow a_{qq} = a_{pp} + \frac{c^2 - s^2}{sc} a_{pq}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow a'_{pp} &= c^2 a_{pp} + s^2 a_{qq} - 2sc a_{pq} \\
&= \underbrace{(c^2 + s^2)}_{=1} a_{pp} + \underbrace{\frac{s}{c}}_{=t} \underbrace{(c^2 - s^2 - 2c^2)}_{=-1} a_{pq} \\
&= a_{pp} - t a_{pq}
\end{aligned}$$

Insgesamt erhält man mit $\tau = \frac{s}{1+c}$ 3
die Aktualisierungsgleichungen:

$$a'_{pp} = a_{pp} - t a_{pq}$$

$$a'_{qq} = a_{qq} + t a_{pq}$$

$$a'_{pq} = 0$$

$$a'_{rp} = a_{rp} - s(a_{rq} + \tau a_{rp}) \text{ für } r \neq p, r \neq q$$

$$a'_{rq} = a_{rq} + s(a_{rp} - \tau a_{rq}) \text{ für } r \neq p, r \neq q$$

4

Damit ist die Jacobi-Rotation vollständig definiert, die ein Nebendiagonalelement „vernichtet“: $a_{pq} \rightarrow 0$. Allerdings können gleichzeitig neue nicht verschwindende Einträge a'_{rp}, a'_{rq} erzeugt werden.

Frage: wurde überhaupt ein Fortschritt erzielt?

Antwort: ja! Betrachte als Maß für die „Nichtdiagonalität“ die Summe der Quadrate der

Nichtdiagonalelemente:
$$S = \sum_{r \neq s} |a_{rs}|^2$$

Aus * folgt für $r \neq p, r \neq q$

$$|a'_{rp}|^2 + |a'_{rq}|^2 = c^2 a_{rp}^2 + s^2 a_{rq}^2 - 2sc a_{rp} a_{rq} \\ + c^2 a_{rq}^2 + s^2 a_{rp}^2 + 2sc a_{rp} a_{rq} = a_{rp}^2 + a_{rq}^2$$

Mit $|a'_{pq}|^2 = 0 = a_{pq}^2 - a_{pq}^2$ und $A^T = A, A'^T = A'$

gilt also:
$$S' = \sum_{r \neq s} |a'_{rs}|^2 = S - 2 a_{pq}^2$$

Bei iterativer Anwendung ist also die Folge S_n streng monoton fallend (bei jeweiliger Wahl von p, q mit $|a_{pq}| > 0$), d.h. das Jacobi-Verfahren führt asymptotisch auf eine Diagonalmatrix, die alle Eigenwerte von A enthält.

(Da die Multiplikation mit einer orthogonalen Matrix die Länge jedes Zeilen- bzw. Spaltenvektors invariant lässt (für $M \rightarrow MP$ bzw. $M \rightarrow P^T M$), bleibt die Summe der Quadrate aller Elemente konstant. Es folgt: $|a'_{pp}|^2 + |a'_{qq}|^2 = a_{pp}^2 + a_{qq}^2 + 2a_{pq}^2$)

Die Eigenvektoren erhält man als Spalten der Gesamttransformationsmatrix: $V = \mathbb{1} P_1 P_2 P_3 \dots$ mit den Updates

$$V' = V P_i \Leftrightarrow$$

$$v'_{rs} = v_{rs} \quad \text{für } s \neq p, s \neq q$$

$$v'_{rp} = c v_{rp} - s v_{rq}$$

$$v'_{rq} = s v_{rp} + c v_{rq}$$

Anwendungsstrategie: offensichtlich ist es wünschenswert, jeweils große Elemente a_{pq} zu eliminieren. Eine vollständige Suche ist jedoch viel zu teuer.

Lösung in Numerical Recipes: normalerweise werden in einem **sweep** nacheinander Rotationen P_{pq} für alle Paare p, q mit $p < q$ versucht, jedoch in den ersten 3 sweeps Rotationen übersprungen, falls

$$|a_{pq}| > \frac{1}{5} \frac{S_0}{N^2}; \quad S_0 = \sum_{r < s} |a_{rs}|$$

also für $|a_{pq}| \geq \frac{1}{10} \overline{|a_{rs}|}$.

Später werden nur bei extrem kleinen $|a_{pq}|$ vereinfachte Updates gemacht ($a'_{pq} = 0$, andere Elemente unverändert), wenn sich dadurch die Ergebnisse nicht ändern.

Typisch sind 6-10 sweeps für Konvergenz auf Maschinengenauigkeit erforderlich, d. h.

$3N^2 - 5N^2$ Jacobi-Rotationen.

Gesamtaufwand: ca. $20N^3$ Operationen (Multiplikationen bzw. Additionen; die Quadratwurzeln beeinflussen nur den N^2 -Term).

Der beschriebene Jacobi-Algorithmus ist einfach und absolut stabil. Trotz Effizienznachteilen gegenüber der Kombination aus Householder- und QR-Verfahren wird er daher für die vollständige Diagonalisierung mäßig großer Matrizen empfohlen.