

4. Vollständige Tridiagonalisierung symmetrischer Matrizen nach Givens

Das Givens-Verfahren zur Tridiagonalisierung verwendet Jacobi-Rotationen, um symmetrische (oder hermitesche) Matrizen Spalte für Spalte zu tridiagonalisieren. Konkret eliminiert man mit P_{pq} ($p < q$) das Element $a_{p-1,q}$ (und aus Symmetriegründen $a_{q,p-1}$):

$$0 \stackrel{!}{=} a'_{p-1,q} = c a_{p-1,q} + s \overset{\text{Nebendiagonalelement}}{\downarrow} a_{p-1,p}$$

$$\text{falls } a_{p-1,p} = 0 \Rightarrow c = 0, s = 1$$

$$\text{sonst: } \frac{s}{c} = \tan(\varphi) = - \frac{a_{p-1,q}}{a_{p-1,p}}$$

Da für die Bearbeitung der Spalte r nur Jacobi-Matrizen P_{pq} mit $r < p < q$ eingesetzt werden, bleibt diese von der Spaltenkopplung unbeeinflusst. Die Zeilenkopplung wiederum erfasst nur das Nebendiagonalelement sowie das ausgesuchte Element.

Somit bleiben alle einmal erzeugten Nullelemente außerhalb der tridiagonalen erhalten. Das Verfahren benötigt höchstens $\frac{(N-1)(N-2)}{2}$ Schritte.

Gesamtordnung (ohne Transformationsmatrix): $\frac{4}{3} N^3$

Beispiel (5x5-Matrix):

$$\begin{array}{ccccc}
 * & * & * & * & * \\
 * & * & * & * & * \\
 * & * & * & * & * \\
 * & * & * & * & * \\
 * & * & * & * & *
 \end{array}
 \xrightarrow{P_{23}}
 \begin{array}{ccccc}
 * & * & 0 & * & * \\
 * & * & * & * & * \\
 0 & * & * & * & * \\
 * & * & * & * & * \\
 * & * & * & * & *
 \end{array}
 \xrightarrow{P_{24}}
 \begin{array}{ccccc}
 * & * & 0 & 0 & * \\
 * & * & * & * & * \\
 0 & * & * & * & * \\
 0 & * & * & * & * \\
 * & * & * & * & *
 \end{array}$$

$$\begin{array}{ccccc}
 * & * & 0 & 0 & 0 \\
 * & * & * & * & * \\
 0 & * & * & * & * \\
 0 & * & * & * & * \\
 0 & * & * & * & *
 \end{array}
 \xrightarrow{P_{25}}
 \begin{array}{ccccc}
 * & * & 0 & 0 & 0 \\
 * & * & * & 0 & * \\
 0 & * & * & * & * \\
 0 & 0 & * & * & * \\
 0 & * & * & * & *
 \end{array}
 \xrightarrow{P_{34}}
 \begin{array}{ccccc}
 * & * & 0 & 0 & 0 \\
 * & * & * & 0 & * \\
 0 & * & * & * & * \\
 0 & 0 & * & * & * \\
 0 & * & * & * & *
 \end{array}
 \xrightarrow{P_{35}}
 \begin{array}{ccccc}
 * & * & 0 & 0 & 0 \\
 * & * & * & 0 & 0 \\
 0 & * & * & * & * \\
 0 & 0 & * & * & * \\
 0 & 0 & * & * & *
 \end{array}$$

$$\begin{array}{ccccc}
 * & * & 0 & 0 & 0 \\
 * & * & * & 0 & 0 \\
 0 & * & * & * & 0 \\
 0 & 0 & * & * & * \\
 0 & 0 & 0 & * & *
 \end{array}
 \xrightarrow{P_{45}}
 \begin{array}{ccccc}
 * & * & 0 & 0 & 0 \\
 * & * & * & 0 & 0 \\
 0 & * & * & * & 0 \\
 0 & 0 & * & * & * \\
 0 & 0 & 0 & * & *
 \end{array}$$

5. Vollständige Tridiagonalisierung symmetrischer Matrizen mit Householder-Transformationen

In der Praxis verwendet man zur vollständigen Tridiagonalisierung statt der Givens-Methode die um den Faktor 2 effizienteren Transformationen mit Householder-Matrizen der Form

$$P_{\vec{w}} = \mathbb{1} - 2 \vec{w} \vec{w}^T; \quad |\vec{w}|^2 = \vec{w}^T \vec{w} = 1$$

Die Matrizen $P_{\vec{w}}$ sind offensichtlich für jeden (normierten) Vektor \vec{w} symmetrisch, außerdem auch orthogonal:

$$\begin{aligned} P_{\vec{w}}^T P_{\vec{w}} &= P_{\vec{w}}^2 = (\mathbb{1} - 2\vec{w}\vec{w}^T)(\mathbb{1} - 2\vec{w}\vec{w}^T) \\ &= \mathbb{1} - 4\vec{w}\vec{w}^T + 4\underbrace{\vec{w}\vec{w}^T\vec{w}\vec{w}^T}_{=1} = \mathbb{1} \end{aligned}$$

Um die Normierung vorläufig offenlassen zu können, schreiben wir $P_{\vec{u}} = \mathbb{1} - \frac{\vec{u}\vec{u}^T}{H}$; $H = \frac{1}{2} |\vec{u}|^2$.

Jetzt partitionieren wir die zu tridiagonalisierende Matrix A und die 1. Transformationsmatrix P_1 als

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \vec{x}^T \\ \vec{x} & * \end{pmatrix}; \quad P_1 = \begin{pmatrix} 1 & \vec{0} \\ \vec{0} & \tilde{P}_1 \end{pmatrix}$$

Der Vektor \vec{x} besteht also aus den Nicht-diagonalelementen der ersten Spalte von A . Im ersten Schritt der Tridiagonalisierung soll dieser auf den ersten Einheitsvektor (im Raum \mathbb{R}^{n-1}) abgebildet werden.

Dazu wählen wir: $\vec{u} = \vec{x} \mp |\vec{x}| \vec{e}_1$

$$\Rightarrow H = \frac{1}{2} |\vec{u}|^2 = \frac{1}{2} [|\vec{x}|^2 + |\vec{x}|^2 \mp 2|\vec{x}|x_1] = |\vec{x}|^2 \mp |\vec{x}|x_1$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \tilde{P}_1 \vec{x} &= \vec{x} - \frac{1}{H} \vec{u}(\vec{u}^T \cdot \vec{x}) \\ &= \vec{x} - \frac{1}{H} \vec{u} [\vec{x}^T \vec{x} \mp |\vec{x}| \underbrace{\vec{e}_1^T \vec{x}}_{x_1}] = \vec{x} - \vec{u} = \pm |\vec{x}| \vec{e}_1 \end{aligned}$$

Damit hat $\vec{x}' = \tilde{P}_1 \vec{x}$ tatsächlich die gewünschte Form, beachte, dass $|\vec{x}'| = |\vec{x}|$, die Norm ist also erhalten. Damit hat $P_1 A$ die Gestalt

$$P_1 A = \begin{pmatrix} a_{11} & & & & \\ \neq |\vec{x}| & & & & \\ 0 & & & & \\ \vdots & & & & \\ 0 & & & & \end{pmatrix} \begin{matrix} \vec{x}'^T \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{matrix}$$

Wegen der Blockgestalt von P bleibt die erste Spalte auch bei Rechtsmultiplikation mit P erhalten:

$$A^{(2)} = P_1 A P_1 = \begin{pmatrix} a_{11} & \neq |\vec{x}| & 0 & \dots & 0 \\ \neq |\vec{x}| & & & & \\ 0 & & & & \\ \vdots & & & & \\ 0 & & & & \end{pmatrix} \begin{matrix} * \\ * \\ * \\ * \\ * \end{matrix}$$

Weitere Schritte mit $P_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \tilde{P}_2 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$ usw. lassen

alle vorher tridiagonalisierten Spalten (und Zeilen) invariant (d.h. P_q lässt die r -ten Spalten für $r < q$ invariant), so dass $Q = P_1 P_2 \dots P_{n-2}$ A tridiagonalisiert.

In der Praxis erfolgen die Aktualisierungen $A^{(n)} \rightarrow A^{(n+1)}$ im n -ten Schritt wie folgt (hier $A \equiv A^{(n)}$):

- $$\sigma = \text{sign}(a_{n+1,n}) \sum_{i=n+1}^N |a_{in}|^2$$

2. $\vec{u} = (0, \dots, 0, \overbrace{a_{n+1, n} + \sigma_1}, \dots, a_{N, n})^T$
3. $H = \frac{1}{2} |\vec{u}|^2$
4. $\vec{p} = \frac{1}{H} A \vec{u}$
5. $K = \frac{1}{2H} \vec{u}^T \vec{p}$
6. $\vec{q} = \vec{p} - K \vec{u}$
7. $\vec{A}' = A - \vec{q} \vec{u}^T - \vec{u} \vec{q}^T$

Allerdings vertauschen die Numerical Recipes und z.B. EISPACK die Reihenfolge, statt von links oben wird dort die Matrix von rechts unten aus tridiagonalisiert.

Endergebnis einer Tridiagonalisierung nach Givens, Householder oder Lanczos (siehe II.6) sind

(i) der Diagonalvektor $\vec{d} = (a_{11}^{(N-1)}, a_{22}^{(N-1)}, \dots, a_{NN}^{(N-1)})$

(ii) der Nebendiagonalvektor, z.B. $\vec{e} = (0, a_{12}^{(N-1)}, a_{23}^{(N-1)}, \dots, a_{N-1, N}^{(N-1)})$

(iii) ggf. die Transformationsmatrix Q

Für den nächsten Schritt, die iterative Diagonalisierung, benötigen wir ein Verfahren, das die Tridiagonalgestalt erhält. Das oben besprochene Jacobi-Verfahren kommt daher nicht infrage.

II.5 Bestimmung aller Eigenwerte und (optional) Eigenvektoren von symmetrischen Tridiagonalmatrizen

Die hier besprochenen Verfahren zur iterativen Diagonalisierung ergänzen die in II.4 und II.6 behandelten Tridiagonalisierungsverfahren.

1. Bestimmung der EVs aus charakteristischem Polynom

Das charakteristische Polynom einer hermiteschen Tridiagonalmatrix A lässt sich leicht rekursiv auswerten ($p(\lambda) \equiv p_n(\lambda)$):

$$p_1(\lambda) = a_{11} - \lambda$$

$$p_n(\lambda) = (a_{nn} - \lambda) p_{n-1}(\lambda) - |a_{n,n-1}|^2 p_{n-2}(\lambda) \quad (n > 1)$$

Dabei wurde die Konvention benutzt: $p_0(\lambda) = 1$

Diese lassen sich sogar differenzieren

$$p'_1(\lambda) = \frac{d}{d\lambda} p_1(\lambda) = -1$$

$$p'_n(\lambda) = -p_{n-1}(\lambda) + (a_{nn} - \lambda) p'_{n-1}(\lambda) - |a_{n,n-1}|^2 p'_{n-2}(\lambda)$$

was den Einsatz des Newton-Verfahrens zur Nullstellensuche ermöglicht, z.B. in den Gerschgorin-

Grenzen $\lambda_n \geq \min_i \{ a_{ii} - \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \}$; $\lambda_n \leq \max_i \{ a_{ii} + \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \}$.

Allerdings ist die EW-Bestimmung via $p(\lambda)$ (wie in II.4 besprochen) nicht stabil.