2. Iterative Diagonalisierung einer Tridiagonalmatrix mittels QR- bzw. QL-Zerlegung

Jede reelle Matrix A kann in der Form

$$A = QR; \quad Q^T Q = \mathbb{1}; \quad R = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ & \ddots & & \vdots \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & & * \end{pmatrix},$$

also in das Produkt einer orthogonalen Matrix und einer oberen Dreiecksmatrix zerlegt werden (alternativ ist auch $A = QL$ mit unterer Dreiecksmatrix L möglich).

Dann ist $\quad A' = RQ = Q^T A Q \quad$ unitär ähnlich zu A. Man kann zeigen, dass die Folge $A^{(n)}$ mit sequentiellen QR-Updates gegen eine Diagonalmatrix konvergiert. Dabei gilt für $r \neq s$ und $\lambda_r < \lambda_s$:

$$a_{rs}^{(n)} \sim \left(\frac{\lambda_r}{\lambda_s}\right)^n$$

Im Allgemeinen (volle symmetrische Matrix A) würde jede Iteration $\mathcal{O}(n^3)$ Operationen benötigen, was prohibitiv teuer ist.

In der Anwendung auf Tridiagonalmatrizen lässt sich Q aus Jacobi-Rotationen aufbauen:

$$A = \begin{pmatrix} * & * & & & 0 \\ * & * & * & & \\ & * & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & * \\ 0 & & & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{P_{12}^T\cdot} \begin{pmatrix} * & * & * & & 0 \\ 0 & * & * & & \\ & * & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & * \\ 0 & & & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{P_{23}^T\cdot} \begin{pmatrix} * & * & * & & & 0 \\ 0 & * & * & * & & \\ & 0 & * & * & & \\ & & * & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & * \\ 0 & & & & * & * \end{pmatrix} \to \dots$$

$$\xrightarrow{P_{N-1,N}^T\cdot} \begin{pmatrix} * & * & * & & 0 \\ 0 & * & * & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & * \\ 0 & & 0 & * & * \\ & & & 0 & * \end{pmatrix} = R \quad ; \quad P_{n,n+1} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{n-1} & & & 0 \\ & c & s & \\ & -s & c & \\ 0 & & & \mathbb{1}_{N-n-1} \end{pmatrix}$$

$$Q^T = P_{N-1,N}^T \cdots P_{12}^T$$

Dabei sind die Bedingungen an die Koeffizienten c, s wieder anders als bei der Jacobi-Diagonalisierung oder der Givens-Tridiagonalisierung, z.B. für P_{12}:

$$a_{12}' = c\,a_{12} - s\,a_{22} \overset{!}{=} 0$$

falls $a_{22} = 0$: $c = 0$, $s = 1$, sonst: $\frac{s}{c} = \tan(\varphi) = \frac{a_{12}}{a_{22}}$

Auf den ersten Blick sieht es so aus, als würde der QR-Schritt die Tridiagonalität zerstören. Multiplikation mit Q führt allerdings auf:

$$R \xrightarrow{\cdot P_{12}} \begin{pmatrix} * & * & * & & 0 \\ * & * & * & \ddots & \\ & 0 & \ddots & \ddots & * \\ 0 & & 0 & \ddots & * \\ & & & & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\cdot P_{23}} \begin{pmatrix} * & * & * & & 0 \\ * & * & * & \ddots & \\ & * & * & \ddots & * \\ & & 0 & \ddots & * \\ & & & & * \end{pmatrix} \to \dots \xrightarrow{P_{N-1,N}} \begin{pmatrix} * & * & * & & 0 \\ * & * & * & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & * & * \\ 0 & & & * & * \\ & & & * & * \end{pmatrix} = A'$$

(Beachte, dass die Rechtsmultiplikation mit $P_{n,n+1}$ nur die Spalten n und $n+1$ „durchmischt" und alle anderen invariant lässt.)

Damit ist $A' = Q^T A Q$ obere Hessebergmatrix.

Andererseits ist $(A')^T = Q^T A^T Q = Q^T A Q = A'$ symmetrisch, also wieder tridiagonal!

Aspekte der praktischen Anwendung:

1) Ändere Reihenfolge:

$$A' = P_{N-1,N}^T \cdots \left(P_{23}^T \left(P_{12}^T A \; P_{12}\right) P_{23}\right) \cdots \; P_{N-1,N}$$

Für Konjugationen sind kompakte Updates (nach *) möglich.

2) Aber: jeweils Speicherung eines Außer-tridiagonalelements nötig.

3) Parameter t bzw. φ für $P_{n-1,n}$ hängt von Form der Matrix nach „halben Update" (nur Multiplikation mit $P_{n-2,n-1}^T$, nicht volle Konjugation) ab!

→ Ziehen von Wurzeln nötig

http://komet337.physik.uni-mainz.de/Bluemer/Scripts/num-meth-ss07-v12.pdf

$(A = \{\{3,1,0\},\{1,2,1\},\{0,1,1\}\})//\text{MatrixForm}$

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Eigenvalues[A]

$\{2+\sqrt{3}, 2, 2-\sqrt{3}\}$

$c[\text{t\_}] = 1/(\text{Sqrt}[1+t\text{^}2])$

$\frac{1}{\sqrt{1+t^2}}$

$s[\text{t\_}] = t/(\text{Sqrt}[1+t\text{^}2])$

$\frac{t}{\sqrt{1+t^2}}$

$(\text{P12}[\text{t\_}] = \{\{c[t], s[t], 0\}, \{-s[t], c[t], 0\}, \{0,0,1\}\})//$
MatrixForm

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} & \frac{t}{\sqrt{1+t^2}} & 0 \\ -\frac{t}{\sqrt{1+t^2}} & \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

P12[$-1/3$]//MatrixForm

$$\begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{10}} & -\frac{1}{\sqrt{10}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$1.0 * \text{P12}[-1/3]//\text{MatrixForm}$

$$\begin{pmatrix} 0.948683 & -0.316228 & 0 \\ 0.316228 & 0.948683 & 0 \\ 0 & 0 & 1. \end{pmatrix}$$

$\text{At} = \text{Transpose}[\text{P12}[-1/3]].A$

$$\left\{\left\{\sqrt{10}, \sqrt{\tfrac{2}{5}} + \tfrac{3}{\sqrt{10}}, \tfrac{1}{\sqrt{10}}\right\}, \left\{0, 3\sqrt{\tfrac{2}{5}} - \tfrac{1}{\sqrt{10}}, \tfrac{3}{\sqrt{10}}\right\}, \{0,1,1\}\right\}$$

Simplify[%]//MatrixForm

$$\begin{pmatrix} \sqrt{10} & \sqrt{\frac{5}{2}} & \frac{1}{\sqrt{10}} \\ 0 & \sqrt{\frac{5}{2}} & \frac{3}{\sqrt{10}} \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Ats = At.P12[−1/3]

$$\left\{\left\{3+\frac{\sqrt{\frac{2}{5}}+\frac{3}{\sqrt{10}}}{\sqrt{10}}, -1+\frac{3\left(\sqrt{\frac{2}{5}}+\frac{3}{\sqrt{10}}\right)}{\sqrt{10}}, \frac{1}{\sqrt{10}}\right\}, \left\{\frac{3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}}{\sqrt{10}}, \frac{3\left(3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}\right)}{\sqrt{10}}, \frac{3}{\sqrt{10}}\right\}, \left\{\frac{1}{\sqrt{10}}, \frac{3}{\sqrt{10}}, 1\right\}\right\}$$

Simplify[%]//MatrixForm

$$\begin{pmatrix} \frac{7}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{10}} \\ \frac{1}{2} & \frac{3}{2} & \frac{3}{\sqrt{10}} \\ \frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} & 1 \end{pmatrix}$$

(P23[t_] = {{1, 0, 0}, {0, $c[t]$, $s[t]$}, {0, $-s[t]$, $c[t]$}})//
MatrixForm

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} & \frac{t}{\sqrt{1+t^2}} \\ 0 & -\frac{t}{\sqrt{1+t^2}} & \frac{1}{\sqrt{1+t^2}} \end{pmatrix}$$

P23[−Sqrt[2/5]]//MatrixForm

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{5}{7}} & -\sqrt{\frac{2}{7}} \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{7}} & \sqrt{\frac{5}{7}} \end{pmatrix}$$

Att = Transpose[P23[−Sqrt[2/5]]].At

$$\left\{\left\{\sqrt{10}, \sqrt{\frac{2}{5}}+\frac{3}{\sqrt{10}}, \frac{1}{\sqrt{10}}\right\}, \left\{0, \sqrt{\frac{2}{7}}+\sqrt{\frac{5}{7}}\left(3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}\right), \sqrt{\frac{2}{7}}+\frac{3}{\sqrt{14}}\right\}, \left\{0, \sqrt{\frac{5}{7}}-\sqrt{\frac{2}{7}}\left(3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}\right), \sqrt{\frac{5}{7}}-\frac{3}{\sqrt{35}}\right\}\right\}$$

Simplify[%]//MatrixForm

$$\begin{pmatrix} \sqrt{10} & \sqrt{\frac{5}{2}} & \frac{1}{\sqrt{10}} \\ 0 & \sqrt{\frac{7}{2}} & \frac{5}{\sqrt{14}} \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{35}} \end{pmatrix}$$

Atst = Transpose[P23[−Sqrt[2/5]]].Ats

$$\left\{\left\{3+\frac{\sqrt{\frac{2}{5}}+\frac{3}{\sqrt{10}}}{\sqrt{10}},-1+\frac{3\left(\sqrt{\frac{2}{5}}+\frac{3}{\sqrt{10}}\right)}{\sqrt{10}},\frac{1}{\sqrt{10}}\right\},\right.$$
$$\left\{\frac{1}{\sqrt{35}}+\frac{3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}}{\sqrt{14}},\frac{3}{\sqrt{35}}+\frac{3\left(3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}\right)}{\sqrt{14}},\sqrt{\frac{2}{7}}+\frac{3}{\sqrt{14}}\right\},$$
$$\left.\left\{\frac{1}{\sqrt{14}}-\frac{3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}}{\sqrt{35}},\frac{3}{\sqrt{14}}-\frac{3\left(3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}\right)}{\sqrt{35}},\sqrt{\frac{5}{7}}-\frac{3}{\sqrt{35}}\right\}\right\}$$

Simplify[%]//MatrixForm

$$\begin{pmatrix} \frac{7}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{10}} \\ \frac{\sqrt{\frac{7}{5}}}{2} & \frac{3\sqrt{\frac{7}{5}}}{2} & \frac{5}{\sqrt{14}} \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{35}} \end{pmatrix}$$

Atsts = Atst.P23[−Sqrt[2/5]]

$$\left\{\left\{3+\frac{\sqrt{\frac{2}{5}}+\frac{3}{\sqrt{10}}}{\sqrt{10}},\frac{1}{\sqrt{35}}+\sqrt{\frac{5}{7}}\left(-1+\frac{3\left(\sqrt{\frac{2}{5}}+\frac{3}{\sqrt{10}}\right)}{\sqrt{10}}\right),\right.\right.$$
$$\left.\frac{1}{\sqrt{14}}-\sqrt{\frac{2}{7}}\left(-1+\frac{3\left(\sqrt{\frac{2}{5}}+\frac{3}{\sqrt{10}}\right)}{\sqrt{10}}\right)\right\},$$
$$\left\{\frac{1}{\sqrt{35}}+\frac{3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}}{\sqrt{14}},\sqrt{\frac{2}{7}}\left(\sqrt{\frac{2}{7}}+\frac{3}{\sqrt{14}}\right)+\sqrt{\frac{5}{7}}\left(\frac{3}{\sqrt{35}}+\frac{3\left(3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}\right)}{\sqrt{14}}\right),\right.$$
$$\left.\sqrt{\frac{5}{7}}\left(\sqrt{\frac{2}{7}}+\frac{3}{\sqrt{14}}\right)-\sqrt{\frac{2}{7}}\left(\frac{3}{\sqrt{35}}+\frac{3\left(3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}\right)}{\sqrt{14}}\right)\right\},$$
$$\left\{\frac{1}{\sqrt{14}}-\frac{3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}}{\sqrt{35}},\sqrt{\frac{2}{7}}\left(\sqrt{\frac{5}{7}}-\frac{3}{\sqrt{35}}\right)+\sqrt{\frac{5}{7}}\left(\frac{3}{\sqrt{14}}-\frac{3\left(3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}\right)}{\sqrt{35}}\right),\right.$$
$$\left.\left.\sqrt{\frac{5}{7}}\left(\sqrt{\frac{5}{7}}-\frac{3}{\sqrt{35}}\right)-\sqrt{\frac{2}{7}}\left(\frac{3}{\sqrt{14}}-\frac{3\left(3\sqrt{\frac{2}{5}}-\frac{1}{\sqrt{10}}\right)}{\sqrt{35}}\right)\right\}\right\}$$

Simplify[%]//MatrixForm

$$\begin{pmatrix} \frac{7}{2} & \frac{\sqrt{\frac{7}{5}}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{\frac{7}{5}}}{2} & \frac{31}{14} & \frac{2\sqrt{\frac{2}{5}}}{7} \\ 0 & \frac{2\sqrt{\frac{2}{5}}}{7} & \frac{2}{7} \end{pmatrix}$$

1.0 ∗ Atsts//MatrixForm

$$\begin{pmatrix} 3.5 & 0.591608 & 0. \\ 0.591608 & 2.21429 & 0.180702 \\ 5.55112\times 10^{-17} & 0.180702 & 0.285714 \end{pmatrix}$$

A = Atsts;