4 Eigenwertberechnung

Kondition des Eigenwertproblems

(4.1) Satz
Sei $A \in \mathbb{C}^{N\times N}$ und $\lambda_0 \in \mathbb{C}$ ein einfacher Eigenwert von A. Seien $x_0, y_0 \in \mathbb{C}^N$ normierte Eigenvektoren zu λ_0 mit $Ax_0 = \lambda_0 x_0$ und $A^H y_0 = \bar{\lambda}_0 y_0$.
Sei $B \in \mathbb{C}^{N\times N}$ und $A(t) = A + tB$. Dann gilt: Es existiert ein $\varepsilon > 0$ und eine differenzierbare Funktion $\lambda : (-\varepsilon, \varepsilon) \to \mathbb{C}$ mit $\lambda(0) = \lambda_0$ so, dass $\lambda(t)$ Eigenwert zu $A(t)$ ist. Es gilt

$$\lambda'(0) = \frac{y_0^H B x_0}{y_0^H x_0}$$

(4.2) Folgerung

1. *Wenn $|y_0^H x_0| \ll 1$, dann ist die Eigenwertberechnung sehr schlecht konditioniert.*
2. *Für symmetrische Matrizen gilt $y_0 = \alpha x_0$ mit $\alpha \in \mathbb{C}$ und $|\alpha| = 1$ (bzw. es kann $x_0 = y_0$ gewählt werden). Damit ist $|y_0^H x_0| = 1$, und die Eigenwertberechnung ist gut konditioniert.*
   Somit ist auch die Singulärwertzerlegung gut konditioniert, da $A^T A$ symmetrisch ist.

Beweis. Sei χ_A das charakteristische Polynom zu A und sei λ einfache Nullstelle, also $\chi_A'(\lambda) \neq 0$. Definiere $F(t,\lambda) = \chi_{A(t)}(\lambda)$, d.h. $F(0,\lambda) = 0$, $\partial_2 F_2(0,\lambda) \neq 0$.
Betrachte nun $F(t,\lambda(t)) = 0$. Nach dem Hauptsatz implizit definierter Funktionen existiert $\lambda : (-\varepsilon,\varepsilon) \to \mathbb{C}$ mit $F(t,\lambda(t)) = 0$ und $\lambda(0) = \lambda_0$. $\lambda(t)$ ist also Eigenwert von $A(t)$.
Entsprechend existiert $x : (-\varepsilon,\varepsilon) \to \mathbb{C}^N$ mit $x(0) = x_0$. Betrachte $A(t)x(t) = \lambda(t)x(t)$. Ableiten nach t liefert

$$A'(t)x(t) + A(t)x'(t) = \lambda'(t)x(t) + \lambda(t)x'(t).$$

Setzt man $t = 0$, so folgt

$$Bx_0 + Ax'(0) = \lambda'(0)x_0 + \lambda_0 x'(0).$$

Aus $y_0^H A x'(0) = (A^H y_0)^H x'(0) = \lambda_0 y_0^H x'(0)$ folgt $y_0^H B x_0 = \lambda'(0) y_0^H x_0$.

□

Problemreduktion

(4.3) Definition
Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{N,N}$ heißt reduzibel, *wenn eine Permutationsmatrix P und ein $n < N$ existiert mit $(PAP^T)[n+1:N, 1:n] = 0$, d.h. für $B = PAP^T$ gilt*

$$B = \begin{pmatrix} B[1:n,1:n] & B[1:n,n+1:N] \\ 0 & B[n+1:N,n+1:N] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ 0 & B_{22} \end{pmatrix}$$

Sie heißt irreduzibel, *wenn keine Permutationsmatrix P existiert, so dass PAP^T reduzibel ist.*

Bemerkung
Im Fall $P = I_N$ gilt für reduzible Matrixen A:

1. *Aus* $\det(A - tI_N) = \det(A_{11} - tI_n)\det(A_{22} - tI_{N-n})$ *folgt* $\sigma(A) = \sigma(A_{11}) \cup \sigma(A_{22})$.

2. *A ist regulär genau dann, wenn A_{11}, A_{22} regulär sind.*
   $Ax = b$ lässt sich wie folgt lösen:

$$\begin{aligned} x[n+1:N] &= A_{22}^{-1} b[n+1:N] \\ x[1:n] &= A_{11}^{-1}(b[1:n] - A_{12}x[n+1:N]) \end{aligned}$$

(4.4) Definition
Eine Matrix $H \in \mathbb{R}^{N\times N}$ heißt (obere) Hessenbergmatrix*, wenn $H[n+2:N,n] = 0_{N-n-1}$ für $n = 1,...,N-2$ gilt.*

Eine Hessenbergmatrix ist reduzibel, falls $H[n+1,n] = 0$ für ein $0 < n < N$.

Symmetrische Hessenbergmatrizen sind tridiagonal.

(4.5) Satz
Sei $A \in \mathbb{R}^{N,N}$. Dann existiert eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{N\times N}$, so dass $H = QAQ^T$ eine Hessenbergmatrix ist. Die Berechnung von Q benötigt $O(N^3)$ Operationen.

Bemerkung
Ist A symmetrisch, so ist $H = QAQ^T$ eine symmetrische Tridiagonalmatrix.

Beweis. (Beweis von 4.5) Induktion über N.
Für $N < 3$ ist nichts zu zeigen.
Sei nun $N \geq 3$: Definiere $v \in \mathbb{R}^N$ mit: $v[1] = 0,\ v[2:N] = A[2:N,1]$

1.Fall $v[3:N] = 0_{N-2}$
Setze $Q_1 := I_N,\ A_1 := A$.

2.Fall $v[3:N] \neq 0_{N-2}$
Setze

$$\begin{aligned} \sigma &= \begin{cases} -|v|_2, & v[2] > 0 \\ |v|_2, & v[2] \leq 0 \end{cases}, \\ w &= \frac{1}{v[2] - \sigma}\left(v - \sigma e_2\right) \in \mathbb{R}^N, \\ Q_1 &= I_N - \beta w w^T \text{ mit } \beta := \frac{2}{w^T w}. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich

$$A_1 := Q_1 A Q_1^T = \begin{pmatrix} A[1,1] & A_1[1,2:N] \\ \sigma & \\ 0_{N-2} & A_2 \end{pmatrix}$$

mit

$$\begin{aligned} A_1[1,2:N] &= A[1,2:N] - \beta(A[1,2:N]w[2:N])w[2:N]^T \\ A_2 &= (I_{N-1} - \beta w[2:N]w[2:N]^T)A[2:N,2:N](I_{N-1} - \beta w[2:N]w[2:N]^T)\,. \end{aligned}$$

Nach Induktionsvoraussetzung existiert eine orthogonale Matrix $Q_2 \in \mathbb{R}^{(N-1)\times(N-1)}$ mit $Q_2[2:N-1] = 0_{N-2}$ (nach Konstruktion), so dass $H_2 = Q_2 A_2 Q_2^T$ eine obere Hessenbergmatrix ist. Setze

$$Q := \begin{pmatrix} 1 & 0_{N-1}^T \\ 0_{N-1} & Q_2 \end{pmatrix} Q_1 \,.$$

Somit folgt

$$QAQ^T = \begin{pmatrix} 1 & 0_{N-1}^T \\ 0_{N-1} & Q_2 \end{pmatrix} A_1 \begin{pmatrix} 1 & 0_{N-1}^T \\ 0_{N-1} & Q_2^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A[1,1] & A[1;2:N]Q_2^T \\ \sigma & \\ O_{N-2} & H_2 \end{pmatrix} = H$$

Damit ist der Induktionsschritt bewiesen.

Zum Aufwand: In jedem Schritt werden $O(N^2)$ Operationen benötigt, insgesamt also $O(N^3)$ Operationen.

□

Strategie zur Eigenwertberechnung von symmetrischen Matrizen $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$:

1. Transformation in eine Hessenbergmatrix H. Ist A symmetrisch, dann ist H symmetrisch und tridiagonal.
2. Zerlegung in irreduzible Tridiagonalmatrizen
3. Eigenwertberechnung von irreduziblen Tridiagonalmatrizen

(4.6) Lemma
Eine symmetrische Tridiagonalmatrix $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ ist genau dann irreduzibel, wenn

$$A[n+1,n] \neq 0 \qquad n = 1,\dots,N-1\,.$$

Beweis. Wir unterscheiden zwei Fälle.

1. Fall Es existiert ein k mit $A[k+1,k] = 0$.
Dann folgt $A[k+1:N,1:k] = 0$ und A ist reduzibel.

2. Fall Es gilt $A[n+1,n] \neq 0$ für $n = 1,\dots,N-1$.
Dann gilt für jede Permutationsmatrix $P = P_\pi$

$$\begin{aligned}(P_\pi A P_\pi^T)[\pi(n+1),\pi(n)] &= A[n+1,n] \neq 0\\ (P_\pi A P_\pi^T)[\pi(n),\pi(n+1)] &= A[n,n+1] = A[n+1,n] \neq 0\end{aligned}$$

Annahme: Es gilt $(P_\pi A P_\pi^T)[k+1:N,1:k] = 0$. Dann gilt:

$$\begin{aligned}\pi(n) \le k &\implies \pi(n+1) \le k\\ \pi(n) \ge k+1 &\implies \pi(n+1) \ge k+1\end{aligned}$$

Das ist ein Widerspruch zur Annahme; A ist irreduzibel.

□

Ziel: Zeige, dass irreduzible, symmetrische Tridiagonalmatrizen N verschiedene Eigenwerte haben.

(4.7) Lemma
Sei $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ eine symmetrische Tridiagonalmatrix.

Setze $P_n(t) = \det(A[1:n, 1:n] - tI_n) \in \mathbb{P}_n$ und $P_0(t) = 1$. Dann gilt für $n = 2, \dots, N$ die Dreitermrekursion

$$P_n(t) = (A[n,n] - t)P_{n-1}(t) - A[n-1,n]^2 P_{n-2}(t)$$

Beweis. Setze $\alpha_n := A[n,n]$, $\beta_n := A[n-1,n]$, damit gilt

$$A - tI_N = \begin{pmatrix} \alpha_1 - t & \beta_2 & & \\ \beta_2 & \alpha_2 - t & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_n \\ & & \beta_n & \alpha_n - t \end{pmatrix}$$

und es folgt mit dem Entwicklungssatz

$$P_n(t) = (\alpha_n - t)\underbrace{\det(A[1:n-1, 1:n-1] - tI_{n-1})}_{=P_{n-1}(t)} - \beta_n^2 \underbrace{\det(A[1:n-2, 1:n-2] - tI_{n-2})}_{=P_{n-2}(t)}$$

□

(4.8) Definition
Seien $P_n \in \mathbb{P}_n\,(n = 1, \dots, N)$ Polynome mit reellen Nullstellen $\lambda_1^n \le \lambda_2^n \le \dots \lambda_n^n$. Dann heißt $P_1, \dots, P_n$ eine Sturmsche Kette*, wenn*

$$\lambda_k^n < \lambda_k^{n-1} < \lambda_{k+1}^n$$

für $n = 2, \dots, N$, $k = 1, \dots, N-1$ gilt. λ_k^n bezeichnet die k-te Nullstelle des n-ten Polynoms.

(4.9) Satz
Eine symmetrische irreduzible Tridiagonalmatrix

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & \\ \beta_2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_N \\ & & \beta_N & \alpha_N \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N\times N}$$

hat N verschiedene Eigenwerte.

Beweis. A ist symmetrisch, d.h. alle Eigenwerte sind reell.
Zeige induktiv, dass $P_1, P_2, \dots, P_N$ aus 4.7 eine Sturmsche Kette bilden.

$n = 2$: $\quad P_1(t) = \alpha_1 - t$ hat die Nullstelle $\lambda_1^1 = \alpha_1$.
Es gilt

$$P_2(t) = \det\begin{pmatrix} \alpha_1 - t & \beta_2 \\ \beta_2 & \alpha_2 - t \end{pmatrix} = (\alpha_1 - t)(\alpha_2 - t) - \beta_2^2$$

Die Nullstellen sind

$$\begin{aligned}
\lambda_1^2 &= \frac{\alpha_1+\alpha_2-\sqrt{(\alpha_1-\alpha_2)^2+4\beta_2^2}}{2} \\
\Longrightarrow \quad \lambda_1^2 &< \frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_2-\sqrt{(\alpha_1-\alpha_2)^2}) = \frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_2-|\alpha_1-\alpha_2|) \\
&= \min\{\alpha_1,\alpha_2\} \le \alpha_1 = \lambda_1^1 \\
\lambda_2^2 &= \frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_2+\sqrt{(\alpha_1-\alpha_2)^2+4\beta_2^2}) > \frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_2+|\alpha_1-\alpha_2|) \\
&= \max\{\alpha_1,\alpha_2\} \ge \alpha_1 = \lambda_1^1
\end{aligned}$$

Also gilt $\lambda_1^2 < \lambda_1^1 < \lambda_2^2$.
$n \to n+1$: Sei $\lambda_k^n < \lambda_k^{n-1} < \lambda_{k+1}^n$ für $k = 1,\dots,n-1$.
$P_{n-1}(t)$ hat eine Nullstelle $\lambda_k^{n-1} \in (\lambda_k^n, \lambda_{k+1}^n)$. Es gilt $P_{n-1}(\lambda_k^n)P_{n-1}(\lambda_{k+1}^n) < 0$ (wegen Vorzeichenwechsel in $(\lambda_k^n, \lambda_{k+1}^n)$). Aus 4.7 folgt

$$P_{n+1}(\lambda_k^n) = (\alpha_{n+1}-\lambda_k^n)\underbrace{P_n(\lambda_k^n)}_{=0} - \beta_n^2 P_{n-1}(\lambda_k^n) = -\beta_n^2 P_{n-1}(\lambda_k^n)$$

D.h. es gilt, aufgrund verschiedener Vorzeichen, $P_{n+1}(\lambda_k^n)P_{n-1}(\lambda_k^n) < 0$. Weiterhin ist $P_{n+1}(\lambda_k^n)P_{n+1}(\lambda_{k+1}^n) < 0$ für $k = 1,\dots,n-1$. Also existiert mindestens eine Nullstelle $\lambda_{k+1}^{n+1} \in (\lambda_k^n, \lambda_{k+1}^n)$. Somit existieren $n-1$ Nullstellen von P_{n+1} in $(\lambda_1^n, \lambda_n^n)$.
Analog (ohne Beweis): Es existieren zwei weitere Nullstellen $\lambda_1^{n+1} < \lambda_1^n$ und $\lambda_{n+1}^{n+1} < \lambda_n^n$.
Also: $P_N(t)$ hat N verschiedene Nullstellen. Nach Definition von P_N sind dies die Eigenwerte von A.

□

Bemerkung
Sei $w(t) := \#\{k \in \{1,\dots,N\} : P_{k-1}(t)P_k(t) < 0$ *oder* $P_{k-1}(t) = 0\}$. *Dann gilt*

$$\begin{aligned}
\lambda_{w(t)}^N < t &\le \lambda_{w(t)+1}^N \\
-\|A\|_\infty &< \lambda_1^N \\
\lambda_N^N &< \|A\|_\infty
\end{aligned}$$

Damit lassen sich durch Bisektion Eigenwerte einschließen. Bisektion konvergiert nur linear; es gibt bessere Algorithmen.

Sei $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ symmetrisch, irreduzibel, mit Eigenwerten $\lambda_1,\dots,\lambda_N$ und Orthonormalbasis $v_1,\dots,v_N$ aus Eigenvektoren. Dann gilt

$$\begin{aligned}
V &= (v_1|\dots|v_N) \in \mathbb{R}^{N\times N} \text{ ist orthogonal} \\
V^T A V &= \operatorname{diag}(\lambda_1,\dots,\lambda_N) \\
x &= \sum_{n=1}^N (x^T v_n) v_n \\
Ax &= \sum_{n=1}^N (x^T v_n)\lambda_n v_n
\end{aligned}$$

(4.10) Definition
$r(A,x) = \frac{x^T Ax}{x^T x}$ *heißt* Rayleigh-Quotient *zu* A *und* $x \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}$*, und es gilt*

$$r(A, v_n) = \frac{v_n^T A v_n}{v_n^T v_n} = \lambda_n$$

Bemerkung
Für alle $c \neq 0$ *gilt* $r(A, cx) = r(A, x)$*.*

(4.11) Satz
Sei $|\lambda_1| = \rho(A) = \max_{n=1,...,N} |\lambda_n|$*, d.h.* $|\lambda_n| < |\lambda_1|$ *für* $n = 2,...,N$*. Dann gilt für alle* $w \in \mathbb{R}^N$ *mit* $w^T v_1 > 0$*:*

$$\lim_{k \longrightarrow \infty} r(A, A^k w) = \lambda_1 , \qquad \lim_{k \longrightarrow \infty} \frac{1}{|A^k w|_2} A^k w = v_1 .$$

Beweis. Es gilt

$$A^k w = A^{k-1} \sum_{n=1}^{N} (w^T v_n) \lambda_n v_n = \sum_{n=1}^{N} (w^T v_n) \lambda_n^k v_n = \lambda_1^k \sum_{n=1}^{N} \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k (w^T v_n) v_n$$

Es gilt

$$\lim_{k \to \infty} \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k = \begin{cases} 1, & n = 1 \\ 0, & n \neq 1 \end{cases} .$$

Damit ergibt sich

$$\lim_{k \to \infty} \frac{1}{\lambda_1^k} A^k w = (w^T v_1) v_1$$

und es folgt

$$\lim_{k \to \infty} r(A, A^k w) = \lim_{k \to \infty} r\left(A, \frac{1}{\lambda_1^k} A^k w \right) = r(A, (w^T v_1) v_1) = r(A, v_1) = \lambda_1$$

sowie

$$\lim_{k \to \infty} \frac{1}{|A^k w|_2} A^k w = \lim_{k \to \infty} \frac{w^T v_1}{|w^T v_1|_2} v_1 = v_1$$

$\square$

Definiere also für $k = 1, 2, \ldots$

$$w_k := \frac{1}{|A^k w|} A^k w$$
$$\mu_k := r(A, w_k)$$

zur Approximation von $v_1 = \lim_{k \longrightarrow \infty} w_k$ und $\lambda_1 = \lim_{k \longrightarrow \infty} \mu_k$.

Als Abbruchkriterium verwendet man das Residuum $Aw_k - \mu_k w_k$. Ist das sinnvoll?

(4.12) Satz (Satz von Weinstein)
Sei $w \in \mathbb{R}^N$, $w^T w = 1$, $\mu = r(A,w)$. Dann gilt

$$\min_{n=1,\dots,N} |\lambda_n - \mu| \le |Aw - \mu w|$$

Beweis. Sei $A = \sum \lambda_n v_n v_n^T \in \mathbb{R}^{N\times N}$, $\mu = r(A,w) = \frac{w^T A w}{w^T w} = w^T A w$. Aus $w = \sum_{n=1}^N (v_n^T w) v_n$ folgt $w^T w = \sum (v_n^T w)^2$. Somit gilt

$$\begin{aligned}
|Aw - \mu w|_2^2 &= \left| \sum_{n=1}^N \big((v_n^T w)\lambda_n v_n - \mu (v_n^T w) v_n \big) \right|_2^2 \\
&= \sum_{n=1}^N (v_n^T w)^2 (\lambda_n - \mu)^2 \\
&\ge \min_{n=1,\dots,N} (\lambda_n - \mu)^2 \sum_{n=1}^N (v_n^T w)^2 \\
&= \min_{n=1,\dots,N} (\lambda_n - \mu)^2
\end{aligned}$$

□

Vektoriteration

S0) Wähle $z_0 \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}$, $\varepsilon > 0$, setze $k = 0$

S1) $w_k = \frac{1}{|z_k|} z_k, \qquad \mu_k = r(A, w_k)$

S2) Falls $|Aw_k - \mu_k w_k|_2 < \varepsilon$ STOP

S3) $z_{k+1} = A w_k$

S4) Setze $k := k+1$, gehe zu S1).

Varianten

- In S3): $z_{k+1} = A^{-1} w_k$
  Dann konvergiert μ_k gegen den betragskleinsten Eigenwert
- Inverse Iteration mit festem Shift $s \in \mathbb{R}$:
  In S3): $z_{k+1} = (A - sI_N)^{-1} w_k$
  μ_k konvergiert linear gegen den nächsten Eigenwert zu s.
- Inverse Iteration mit $s_k = \mu_k$, d.h. S3) $z_{k+1} = (A - \mu_k I_N)^{-1} w_k$ konvergiert kubisch.

(4.13) Satz
Sei $\lambda = \lambda_n$ ein einfacher Eigenwert, und der Startvektor z_0 sei hinreichend nahe bei einem Eigenvektor $v \in \mathbb{R}^N$ zu λ mit $v^T v = 1$. Dann konvergiert die inverse Iteration mit variablem Shift kubisch.

Beweis. (i) Sei $\rho > 0$ mit $(\lambda-\rho,\lambda+\rho)\cap\sigma(A)=\{\lambda\}$, d. h. $|\lambda-\lambda_j|>\rho$ für alle weiteren Eigenwerte $\lambda_j \neq \lambda$.
In S1) definiere $\tilde{w}_k = w_k - (v^T w_k)v$, d. h. $\tilde{w}^T v = 0$. Es gilt

$$1 = |w_k|_2^2 = (v^T w_k)^2 + |\tilde{w}_k|_2^2 = (\cos\phi_k)^2 + (\sin\phi_k)^2, \quad \phi_k \in [0,2\pi),$$

d. h. $w_k = \cos\phi_k v + \sin\phi_k \hat{w}_k$ mit $\hat{w}_k = \frac{1}{|\tilde{w}_k|}\tilde{w}_k$.
Zeige: Es gilt $|\sin\phi_{k+1}| \le C|\sin\phi_k|^3$ f alls ϕ_k klein genug ist.
Aus $|\sin\phi - \phi| = O(\phi^3)$ folgt damit die Behauptung $|\phi_{k+1}| \le \tilde{C}|\phi_k|^3$.
(ii) Es ist $Aw_k = \lambda\cos\phi_k v + \sin\phi_k A\hat{w}_k$. Damit gilt

$$\mu_k = r(A,w_k) = w_k^T A w_k = \lambda\cos^2\phi_k + \hat{w}_k^T A\hat{w}_k \sin^2\phi_k = \lambda + (\hat{w}_k^T A\hat{w}_k - \lambda)\sin^2\phi_k$$

Es folgt $|\mu_k - \lambda| \le 2\|A\|_2 \sin^2\phi_k$.
(iii) Es gilt

$$z_{k+1} = (A-\mu_k I_N)^{-1} w_k = \frac{1}{\lambda-\mu_k}\cos\phi_k v + \sin\phi_k (A-\mu_k I_N)^{-1}\hat{w}_k\,,$$

$$(A-\mu_k I_N)^{-1}\hat{w}_k = \sum_{j\neq n}(A-\mu_k I_N)^{-1}\left(\hat{w}_k^T v_j\right)v_j = \sum_{j\neq n}\frac{\hat{w}_k^T v_j}{\lambda_j-\mu_k}v_j\,.$$

Daraus folgt $v^T(A-\mu_k I_N)^{-1}\hat{w}_k = 0$ und somit

$$|z_{k+1}|_2 \ge \frac{1}{|\lambda-\mu_k|}|\cos\phi_k|\,.$$

Mit dem Resultat aus (ii) erhalten wir

$$\frac{1}{|z_{k+1}|_2} \le \frac{1}{|\cos\phi_k|}2\|A\|_2\sin^2\phi_k$$

(iv) Sei z_k so nahe bei v, dass $2\|A\|_2\sin^2\phi_k \le \frac{\rho}{2}$ gilt. Für $j \neq n$ folgt dann

$$|\lambda_j-\mu_k| \ge |\lambda_j-\lambda| - |\lambda-\mu_k| \ge \rho - 2\|A\|_2\sin^2\phi_k \ge \frac{\rho}{2}$$

$$|\cos\phi_k|^2 = 1-\sin^2\phi_k \ge 1-\frac{\rho}{4\|A\|_2}\,,$$

$$\left|(A-\mu_k I_N^{-1})\hat{w}_k\right|_2 \le \frac{2}{\rho}\,,$$

$$w_{k+1} = \frac{1}{|z_{k+1}|}z_{k+1} = \cos\phi_{k+1}v + \sin\phi_{k+1}\hat{w}_{k+1}\,.$$

Koeffizientenvergleich mit (iii) liefert

$$|\sin\phi_{k+1}| = \frac{|\sin\phi_{k+1}|}{|z_{k+1}|_2}\left|(A-\mu_k I_N)^{-1}\hat{w}_k\right|_2 \le \frac{2\|A\|_2}{|\cos\phi_k|}|\sin\phi_k|^3\frac{2}{\rho} \le \frac{1}{\rho}\frac{4\|A\|_2}{\sqrt{1-\frac{\rho}{4\|A\|_2}}}|\sin\phi_k|^3\,.$$

□

Nun betrachten wir die Vektoriteration mit dem speziellen Anfangsvektor $z_0 = e_N$. Damit ergibt sich als ersten Rayleigh-Quotient $\mu_0 = A[N,N]$. Um nun $A-\mu_0 I_N$ möglichst gut konditioniert zu invertieren, berechenen wir eine QR-Zerlegung $QR = A-\mu_0 I_N$ und damit die nächste Iterierte $z_1 = R^{-1}Q^T e_N$. Da $A-\mu_0 I_N$ symmetrisch ist, gilt $QR = R^T Q^T$, also $z_1 = QR^{-T}e_N = R[N,N]^{-1}Qe_N$ und somit

$$z_1^T A z_1 = R[N,N]^{-2}e_N^T Q^T AQTe_N = e_N^T A_1 e_N\, z_1^T z_1\,, \qquad A_1 = Q^T AQ = RQ + \mu_0 I_N\,.$$

Für den Rayleigh-Quotient $\mu_1 = r(A,z_1)$ gilt daher $\mu_1 = A_1[N,N]$. Wiederholte Anwendung von diesem Prinzip ergibt die QR-Iteration mit Shift.

QR-Iteration mit Shift Gegeben sei $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ symmetrisch.

S0) Berechne $A_0 = QAQ^T$ tridiagonal (Hessenberg-Transformation).
Wähle $\varepsilon \geq 0$. Setze $k = 0$.

S1) Falls $|A_k[n+1,n]| \leq \varepsilon$ für ein n:
Getrennte Eigenwertberechnung für $A_k[1:n,1:n]$ und $A_k[n+1:N,n+1:N]$.

S2) Berechne $d_k = \frac{1}{2}(A_k[N-1,N-1] - A_k[N,N])$ und

$$\mu_k = A_k[N,N] + d_k - \operatorname{sgn}(d_k)\sqrt{d_k^2 + A_k[N-1,N]^2}$$

S3) Berechne eine QR-Zerlegung

$$Q_k R_k = A_k - \mu_k I_N$$

und setze

$$A_{k+1} = R_k Q_k + \mu_k I_N$$

S4) Setze $k := k+1$, gehe zu S1).

Bemerkung

1. *Es gilt*

$$\begin{aligned} A_{k+1} &= R_k Q_k + \mu_k I_N \\ &= Q_k^T Q_k (R_k Q_k + \mu_k I_N) \\ &= Q_k^T (\underbrace{Q_k R_k}_{=A_k - \mu_k I_N} + \mu_k I_N) Q_k \\ &= Q_k^T A_k Q_k, \end{aligned}$$

d.h. $\sigma(A_{k+1}) = \sigma(A_k)$ *mit* $\lim_{k\to\infty} A_k = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_N)$, $QQ_1Q_2 \ldots Q_k$ *konvergiert gegen die Eigenvektoren.*

2. *S2) berechnet den Eigenwert von* $A[N-1:N, N-1:N]$, *der näher an* $A[N,N]$ *liegt.*

3. *In der Praxis werden etwa 2N-3N Iterationen benötigt.*

4. *Ist* A_k *tridiagonal, dann lässt sich die Hessenbergmatrix* Q_k *mit* $N-1$ *Givensrotationen bestimmen. Weiterhin ist* $A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k$ *eine symmetrische Hessenbergmatrix, also tridiagonal.*

5. *S0) benötigt* $O(N^3)$, *S3)* $O(N^2)$ *Operationen*

Eigenwert-Abschätzungen

(4.14) Satz (Satz von Gerschgorin)
Zu $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ sind die Gerschgorin-Kreise durch

$$K_n = \Big\{\lambda \in \mathbb{C}\colon |\lambda - A[n,n]| \le \sum_{k\neq n} |A[n,k]|\Big\}, \qquad n = 1,...,N$$

definiert. Dann gilt

$$\sigma(A) \subset \bigcup_{n=1}^{N} K_n .$$

Beweis. Sei $\lambda \in \sigma(A)$. Dann existiert ein $w \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}$ mit $Aw = \lambda w$. Also existiert ein $n \in \{1,\dots,N\}$ mit

$$0 \neq |w[n]| \ge |w[k]|, \qquad k = 1,\dots,N .$$

Damit folgt

$$\begin{aligned}(Aw)[n] = A[n,1:N]w = \lambda w[n] &\implies |A[n,n]-\lambda||w[n]| = \Big|\sum_{k\neq n} A[n,k]w[k]\Big| \\ &\implies |A[n,n]-\lambda| \le \sum_{k\neq n} |A[n,k]|\frac{|w[k]|}{|w[n]|} \le \sum_{k\neq n} |A[n,k]|\end{aligned}$$

Somit gilt $\lambda \in K_n$.

□

Bemerkung

1. *Wenn für $I \subset \{1,\dots,N\}$ gilt:*

$$\bigcup_{i\in I} K_i \cap \bigcup_{i\notin I} K_i = \emptyset,$$

dann enthält $\bigcup_{i\in I} K_i$ genau #I Eigenwerte (mit Vielfachheiten).

2. *Wenn A irreduzibel ist, dann gilt $\sigma(A) \subset \operatorname{int}\big(\bigcup_{n=1}^N K_n\big)$.*

Beispiel

1. *Sei*

$$A = \begin{pmatrix} d_1 & \varepsilon & \varepsilon \\ \varepsilon & d_2 & \varepsilon \\ \varepsilon & \varepsilon & d_3 \end{pmatrix}, |\varepsilon| \ll |d_n|.$$

Dann existiert ein λ_n mit $|d_n - \lambda_n| \le 2\varepsilon$.

2. *Sei*

$$A = \begin{pmatrix} 2 & \frac12 & & & \\ \frac12 & 2 & \frac12 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \frac12 \\ & & & \frac12 & 2 \end{pmatrix}.$$

Dann gilt $\sigma(A) \subset (1,3)$ und $\kappa_2(A) \le 3$.

3. *Sei*

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

A ist regulär und es gilt $\sigma(A) \subset (0,4)$.

(4.15) Satz (Min-Max-Theorem)
Sei $A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ symmetrisch mit Eigenwerten $\lambda_N \leq \lambda_{N-1} \leq \ldots \leq \lambda_1$. Dann gilt

$$\lambda_n = \max_{\substack{\dim S = n \\ S\subset\mathbb{R}^N}} \min_{x\in S\setminus\{0\}} r(A,x)$$

Beweis. Sei $(v_1|\ldots|v_N)$ Orthonormalbasis in $\mathbb{R}^N$ mit $A = \sum \lambda_n v_n v_n^T$.

$\leq$: Setze $S_n = \operatorname{span}\{v_1,\ldots,v_n\}$, $x \in S_n$; also $x = \sum_{k=1}^n (x^T v_k) v_k$. Dann gilt

$$x^T A x = \sum_{k=1}^n \lambda_k (x^T v_k)^2 \geq \lambda_n \sum_{k=1}^n (x^T v_k)^2 = \lambda_n x^T x$$

und mit $v_n \in S_n$ folgt

$$\lambda_n = \min_{x\in S_n} r(A,x) \leq \max_{\dim S = n} \min_{x\in S} r(A,x)$$

$\geq$: Wähle $S \subseteq \mathbb{R}^N, \dim S = n$. Es gilt $\dim(\underbrace{S}_{\dim n} \cap \underbrace{\operatorname{span}\{v_n,\ldots,v_N\}}_{\dim N-n+1}) \geq 1$. Also existiert ein $y \in S$ mit $y = \sum_{k=n}^N (y^T v_k) v_k$. Somit gilt

$$\lambda_n \geq r(A,y) \geq \min_{x\in S\setminus\{0\}} r(A,x).$$

Da S beliebig war, folgt die Behauptung.

□

Bemerkung
Es gilt $\lambda_{N+1-n} = \min_{\dim S = n} \max_{x\in S\setminus\{0\}} r(A,x)$.