

7 Eigenwertaufgaben

Im Folgenden betrachten wir quadratische Matrizen $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ mit Elementen aus $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$.

Definition 7.1: (i) Eine Zahl $\lambda \in \mathbb{C}$ ist „Eigenwert“ von A , wenn es einen zugehörigen „Eigenvektor“ $w \in \mathbb{C}^n$, $w \neq 0$, gibt mit $Aw = \lambda w$. Die Eigenwerte sind gerade die Nullstellen des „charakteristischen Polynoms“ χ_A von A

$$\chi_A(z) = \det(A - zI) = (-1)^n z^n + b_1 z^{n-1} + \dots + b_n.$$

Es gibt genau n (ihrer Vielfachheit als Nullstelle entsprechend oft gezählte) Eigenwerte in \mathbb{C} , welche sich unabhängig voneinander bestimmen lassen.

(ii) Man spricht vom „partiellen Eigenwertproblem“, wenn nur einzelne Eigenwerte (etwa der kleinste oder der größte) und gegebenenfalls die zugehörigen Eigenvektoren gesucht sind, und vom „vollständigen Eigenwertproblem“, wenn alle Eigenwerte und eventuell zugehörige Eigenvektoren berechnet werden sollen.

Ist ein Eigenwert λ bekannt, so erhält man die zugehörigen Eigenvektoren als Lösung des homogenen Gleichungssystems $(A - \lambda I)w = 0$. Umgekehrt bestimmt ein Eigenvektor w eindeutig den zugehörigen Eigenwert etwa durch den sog. „Rayleigh¹-Quotienten“

$$\lambda = \frac{(Aw, w)_2}{\|w\|_2^2}.$$

Dabei bezeichnen wieder $(\cdot, \cdot)_2$ das euklidische Skalarprodukt und $\|\cdot\|_2$ die zugehörige Vektornorm. Im Folgenden stellen wir einige Tatsachen und Definitionen der linearen Algebra zusammen: Das charakteristische Polynom einer Matrix $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ besitzt mit seinen paarweise verschiedenen Nullstellen λ_i (den Eigenwerten von A) die Darstellung

$$\chi_A(z) = \prod_{i=1}^m (z - \lambda_i)^{\sigma_i}, \quad \sum_{i=1}^m \sigma_i = n.$$

Die Eigenvektoren zum Eigenwert λ_i bilden einen Unterraum von \mathbb{C}^n , den sog. „geometrischen Eigenraum“ zu λ_i , mit der Dimension $\rho_i = \dim(\text{Kern}(A - \lambda_i I))$. Es heißen σ_i die „algebraisch“ und ρ_i die „geometrische“ Vielfachheit von λ_i . Es ist stets $\rho_i \leq \sigma_i$.

Beispiel 7.1: Die Bedeutung der folgenden Matrizen $C_m(\lambda)$ liegt darin, dass aus ihnen die sog. „Jordansche² Normalform“ einer Matrix A aufgebaut ist (siehe Abschnitt 7.3):

¹John William Strutt (Lord Rayleigh) (1842–1919): Englischer Mathematiker und Physiker; forschte zunächst als (adliger) Privatgelehrter, 1879–1884 Professor für experimentelle Physik in Cambridge; fundamentale Beiträge zur theoretischen Physik: Streutheorie, Akustik, Elektro-Magnetismus, Gasdynamik.

²Marie Ennemond Camille Jordan (1838–1922): Französischer Mathematiker; Professor in Paris; Beiträge zur Algebra, Gruppentheorie, Analysis und Topologie.

$$C_m(\lambda) = \begin{bmatrix} \lambda & 1 & & & 0 \\ & \lambda & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \lambda & 1 \\ 0 & & & & \lambda \end{bmatrix} \in \mathbb{K}^{m \times m}, \quad \text{Eigenwerte: } \lambda \in \mathbb{C}$$

$$\chi_{C_m(\lambda)}(z) = (\lambda - z)^m \Rightarrow \sigma = m, \quad \text{Rang}(C_m(\lambda) - \lambda I) = m - 1 \Rightarrow \rho = 1.$$

Der naheliegende Weg zur Berechnung der Eigenwerte einer Matrix $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ wäre die Bestimmung der Koeffizienten ihres charakteristischen Polynoms $p_A(z)$ und die anschließende Berechnung der Nullstellen von $\chi_A(z)$ mit einem geeigneten numerischen Verfahren. Dieses Vorgehen ist jedoch i. Allg. nicht angeraten, da die Nullstellenbestimmung bei Polynomen ein hochgradig schlecht konditioniertes Problem ist, obwohl das ursprüngliche Eigenwertproblem, wie wir sehen werden, meist gut konditioniert ist.

Beispiel 7.2: Sei $A \in \mathbb{R}^{20 \times 20}$ symmetrisch mit Eigenwerten $\lambda_j = j$, $j = 1, \dots, 20$:

$$\chi_A(z) = \prod_{j=1}^{20} (z - j) = z^{20} \underbrace{-210}_{b_1} z^{19} + \dots + \underbrace{20!}_{b_{20}}$$

Der Koeffizient b_1 sei gestört: $\tilde{b}_1 = -210 + 2^{-23} \sim -210,000000119\dots$,

$$\text{relativer Fehler} \quad \left| \frac{\tilde{b}_1 - b_1}{b_1} \right| \sim 10^{-10}.$$

Das gestörte Polynom $\tilde{\chi}_A(z)$ hat dann u. a. die Wurzeln: $\lambda_{\pm} \sim 16,7 \pm 2,8i$.

Über das charakteristische Polynom werden die Eigenwerte nur für sehr einfach strukturierte Matrizen berechnet, bei denen dies möglich ist, ohne die Koeffizienten von $\chi_A(z)$ auszurechnen. Dies sind u. a. „Tridiagonalmatrizen“ und allgemeiner sog. „Hessenberg³-Matrizen“.

Tridiagonalmatrix

$$\begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & & \\ & c_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & & b_{n-1} \\ & & & c_n & a_n \end{bmatrix}$$

Hessenberg-Matrix

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & & & a_{1n} \\ a_{21} & \ddots & & & \vdots \\ & \ddots & & & a_{n-1,n} \\ 0 & & a_{n,n-1} & & a_{nn} \end{bmatrix}$$

³Karl Adolf Hessenberg (1904–1959): Deutscher Elektroingenieur; arbeitete zunächst an der TU Darmstadt und dann bei AEG; Dissertation „Die Berechnung der Eigenwerte und Eigenlösungen linearer Gleichungssysteme“, TU Darmstadt 1942.

7.1 Konditionierung des Eigenwertproblems

Hilfssatz 7.1 (Stabilität): Seien $A, B \in \mathbb{K}^{n \times n}$ beliebige Matrizen und $\|\cdot\|$ eine natürliche Matrixnorm. Dann gilt für jeden Eigenwert λ von A , der nicht zugleich auch Eigenwert von B ist, die Beziehung

$$\|(\lambda I - B)^{-1}(A - B)\| \geq 1. \quad (7.1.1)$$

Beweis: Ist w Eigenvektor zum Eigenwert λ von A , so folgt aus der Identität

$$(A - B)w = (\lambda I - B)w,$$

wenn λ kein Eigenwert von B ist,

$$(\lambda I - B)^{-1}(A - B)w = w.$$

Also ist

$$1 \leq \sup_{x \in \mathbb{K}^n \setminus \{0\}} \frac{\|(\lambda I - B)^{-1}(A - B)x\|}{\|x\|} = \|(\lambda I - B)^{-1}(A - B)\|,$$

was zu zeigen war. Q.E.D.

Als Folgerung aus Hilfssatz 7.1 erhalten wir zunächst den wichtigen Einschließungssatz von Gerschgorin⁴ (1931).

Satz 7.1 (Satz von Gerschgorin): Alle Eigenwerte einer Matrix $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ liegen in der Vereinigung der sog. „Gerschgorin-Kreise“

$$K_j := \left\{ z \in \mathbb{C} : |z - a_{jj}| \leq \sum_{k=1, k \neq j}^n |a_{jk}| \right\}, \quad j = 1, \dots, n. \quad (7.1.2)$$

Sind die Mengen $U \equiv \cup_{i=1}^m K_{j_i}$ und $V \equiv \overline{\cup_{j=1}^n K_j} \setminus U$ disjunkt, so liegen in U genau m und in V genau $n - m$ Eigenwerte von A (mehrfache Eigenwerte ihrer algebraischen Vielfachheiten entsprechend oft gezählt).

Beweis: (i) Wir setzen $B \equiv D = \text{diag}(a_{jj})$ in Hilfssatz 7.1 und nehmen die „maximale Zeilensumme“ als natürliche Matrixnorm. Damit folgt dann für $\lambda \neq a_{jj}$:

$$\|(\lambda I - D)^{-1}(A - D)\|_\infty = \max_{j=1, \dots, n} \frac{1}{|\lambda - a_{jj}|} \sum_{k=1, k \neq j}^n |a_{jk}| \geq 1,$$

d. h.: λ liegt in einem der Gerschgorin-Kreise.

⁴Semyon Aranovich Gershgorin (1901–1933): Russischer Mathematiker; seit 1930 Professor in Leningrad (St. Petersburg); arbeitete über Algebra, Funktionentheorie, Differentialgleichungen und Numerik.

(ii) Zum Beweis der zweiten Behauptung setzen wir $A_t \equiv D + t(A - D)$. Offenbar liegen genau m Eigenwerte von $A_0 = D$ in U und $n - m$ Eigenwerte in V . Dasselbe folgt dann auch für $A_1 = A$, da die Eigenwerte von A_t stetige Funktionen von t sind. Q.E.D.

Der Satz von Gerschgorin liefert sehr viel genauere Informationen über die Lage der Eigenwerte λ von A als die uns schon bekannte grobe Abschätzung $|\lambda| \leq \|A\|_\infty$. Die Matrizen A und A^T haben dieselben Eigenwerte. Durch Anwendung von Satz 7.1 auf A^T erhält man oft eine weitere Verschärfung der Abschätzung für die Eigenwerte.

Beispiel 7.3:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0.1 & -0.2 \\ 0 & 2 & 0.4 \\ -0.2 & 0 & 3 \end{bmatrix} \quad \|A\|_\infty = 3.2, \quad \|A\|_1 = 3.6.$$

$$\begin{aligned} K_1 &= \{z \in \mathbb{C} : |z - 1| \leq 0.3\} & K_1^T &= \{z \in \mathbb{C} : |z - 1| \leq 0.2\} \\ K_2 &= \{z \in \mathbb{C} : |z - 2| \leq 0.4\} & K_2^T &= \{z \in \mathbb{C} : |z - 2| \leq 0.1\} \\ K_3 &= \{z \in \mathbb{C} : |z - 3| \leq 0.2\} & K_3^T &= \{z \in \mathbb{C} : |z - 3| \leq 0.6\} \end{aligned}$$

$$|\lambda_1 - 1| \leq 0.2, \quad |\lambda_2 - 2| \leq 0.1, \quad |\lambda_3 - 3| \leq 0.2$$

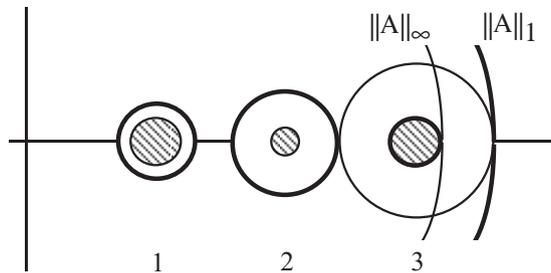


Abbildung 7.1: Gerschgorin-Kreise

Weiter erhalten wir mit Hilfssatz 7.1 den folgenden Stabilitätssatz:

Satz 7.2 (Stabilitätssatz): Sei $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine Matrix, zu der es n linear unabhängige Eigenvektoren $\{w_1, \dots, w_n\}$ gibt, und sei $B \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine zweite Matrix. Dann gibt es zu jedem Eigenwert $\lambda(B)$ von B einen Eigenwert $\lambda(A)$ von A , so dass mit der Matrix $W = [w_1, \dots, w_n]$ gilt:

$$|\lambda(A) - \lambda(B)| \leq \text{cond}_2(W) \|A - B\|_2. \quad (7.1.3)$$

Beweis: Die Eigenwertgleichungen $Aw^{(i)} = \lambda_i(A)w^{(i)}$ lassen sich in der Form $AW = W \cdot \text{diag}(\lambda_i(A))$ schreiben mit der regulären Matrix $W = [w_1, \dots, w_n]$. Also ist

$$A = W \text{diag}(\lambda_i(A)) W^{-1},$$

d. h.: A ist "ähnlich" zu der Diagonalmatrix $\Lambda = \text{diag}(\lambda_i(A))$. Wenn $\lambda = \lambda(B)$ nun kein Eigenwert von A ist, so gilt

$$\begin{aligned} \|(\lambda I - A)^{-1}\|_2 &= \|W(\lambda I - \Lambda)^{-1}W^{-1}\|_2 \\ &\leq \|W^{-1}\|_2 \|W\|_2 \|(\lambda I - \Lambda)^{-1}\|_2 \\ &= \text{cond}_2(W) \max_{i=1, \dots, n} |\lambda - \lambda_i(A)|^{-1}. \end{aligned}$$

Hilfssatz 7.1 ergibt dann die Behauptung.

Q.E.D.

Für hermitesche Matrizen $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ existiert eine Orthonormalbasis des \mathbb{K}^n von Eigenvektoren, so dass die Matrix W in Satz 7.2 als unitär angenommen werden kann: $W\bar{W}^T = I$. In diesem Fall gilt dann:

$$\text{cond}_2(W) = \|\bar{W}^T\|_2 \|W\|_2 = 1. \quad (7.1.4)$$

Wir fassen die gefundenen Ergebnisse zusammen.

Regel 7.1: *Das Eigenwertproblem hermitescher Matrizen ist gut konditioniert, während das allgemeine Eigenwertproblem je nach Größe von $\text{cond}_2(W)$ beliebig schlecht konditioniert sein kann.*

7.2 Iterative Verfahren

Im Folgenden betrachten wir ein iteratives Verfahren zur Lösung des partiellen Eigenwertproblems einer Matrix $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$.

Definition 7.2: *Die „Potenzmethode“ nach v. Mises⁵ erzeugt ausgehend von einem Startvektor $z^0 \in \mathbb{C}^n$ mit $\|z^0\| = 1$ eine Folge von Iterierten $z^t \in \mathbb{C}^n$, $t = 1, 2, \dots$, durch*

$$\tilde{z}^t = Az^{t-1}, \quad z^t = \frac{\tilde{z}^t}{\|\tilde{z}^t\|}. \quad (7.2.5)$$

⁵Richard von Mises (1883–1953): Östereichischer Mathematiker; Professor für Angewandte Mathematik und Mechanik in Straßburg (1909–1918), in Dresden und dann Gründer des neuen Instituts für Angewandte Mathematik in Berlin (1919–1933), danach Emigration in die Türkei (Istanbul) und schließlich in die USA (1938); Professor an der Harvard University; wichtige Beiträge zur theoretischen Strömungsmechanik (Einführung des „Spannungstensors“), Aerodynamik, Numerik, Statistik und Wahrscheinlichkeitstheorie.

Für einen beliebigen Index $k \in \{1, \dots, n\}$ (etwa den der „maximalen“ Komponente von z^t) wird gesetzt

$$\lambda^t := \frac{(Az^t)_k}{z_k^t}. \quad (7.2.6)$$

Zur Normierung wird üblicherweise $\|\cdot\| = \|\cdot\|_\infty$ oder $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$ verwendet. Zur Analyse dieses Verfahrens nehmen wir an, dass die Matrix A „diagonalisierbar“, d. h. ähnlich zu einer Diagonalmatrix, ist. Dies ist, äquivalent dazu, dass A eine Basis von Eigenvektoren $\{w_1, \dots, w_n\}$ besitzt (Übungsaufgabe). Diese Eigenvektoren w_i seien normiert. Wir nehmen weiter an, dass der Startwert z^0 eine nichttriviale Komponente bzgl. w_n besitzt. Dies ist keine wesentliche Einschränkung, da aufgrund des unvermeidbaren Rundungsfehlers dieser Fall im Verlauf der Iteration sicher einmal eintritt

Satz 7.3 (Potenzmethode): Die Matrix A sei diagonalisierbar und ihr betragsgrößter Eigenwert sei separiert von den anderen Eigenwerten, d. h.: $|\lambda_n| > |\lambda_i|$, $i \neq n$. Ferner habe der Startvektor z^0 eine nichttriviale Komponente bzgl. des zugehörigen Eigenvektors w_n . Dann gibt es Zahlen $\sigma_t \in \mathbb{C}$, $|\sigma_t| = 1$, so dass

$$\|z^t - \sigma_t w_n\| \rightarrow 0 \quad (t \rightarrow \infty), \quad (7.2.7)$$

und es gilt

$$\lambda^t - \lambda_n = O\left(\left|\frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n}\right|^t\right) \quad (t \rightarrow \infty). \quad (7.2.8)$$

Beweis: Sei $z^0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i w_i$ die Basisdarstellung der Startvektoren. Für die Iterierten z^t gilt

$$z^t = \frac{\tilde{z}^t}{\|\tilde{z}^t\|} = \frac{Az^{t-1}}{\|Az^{t-1}\|} = \frac{A\tilde{z}^{t-1}}{\|\tilde{z}^{t-1}\|} \frac{\|\tilde{z}^{t-1}\|}{\|A\tilde{z}^{t-1}\|} = \dots = \frac{A^t z^0}{\|A^t z^0\|}.$$

Ferner ist

$$A^t z^0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^t w_i = \lambda_n^t \alpha_n \left\{ w_n + \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\alpha_i}{\alpha_n} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_n}\right)^t w_i \right\}$$

und folglich wegen $|\lambda_i/\lambda_n| < 1$, $i = 1, \dots, n-1$,

$$A^t z^0 = \lambda_n^t \alpha_n \{w_n + o(1)\} \quad (t \rightarrow \infty).$$

Dies ergibt

$$z^t = \frac{\lambda_n^t \alpha_n \{w_n + o(1)\}}{|\lambda_n^t \alpha_n| \|w_n + o(1)\|} = \frac{\lambda_n^t \alpha_n}{\underbrace{|\lambda_n^t \alpha_n|}_{=: \sigma_t}} w_n + o(1).$$

Die Iterierten z^t konvergieren also gegen $\text{span}\{w_n\}$. Weiter gilt (wegen $\alpha_n \neq 0$)

$$\begin{aligned}\lambda^t &= \frac{(Az^t)_k}{z_k^t} = \frac{(A^{t+1}z^0)_k}{\|A^t z^0\|} \frac{\|A^t z^0\|}{(A^t z^0)_k} \\ &= \frac{\lambda_n^{t+1} \{ \alpha_n w_{n,k} + \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_n}\right)^{t+1} w_{i,k} \}}{\lambda_n^t \{ \alpha_n w_{n,k} + \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_n}\right)^t w_{i,k} \}} = \lambda_n + O\left(\left|\frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n}\right|^t\right) \quad (t \rightarrow \infty).\end{aligned}$$

Q.E.D.

Die Konvergenz der Potenzmethode ist um so besser, je mehr der betragsgrößte Eigenwert λ_n von den übrigen betragsmäßig separiert ist. Der Konvergenzbeweis lässt sich verallgemeinern für diagonalisierbare Matrizen, bei denen der betragsgrößte Eigenwert zwar mehrfach sein kann, aber $|\lambda_n| = |\lambda_i|$ notwendig $\lambda_n = \lambda_i$ impliziert. Für noch allgemeinere Matrizen ist die Konvergenz nicht mehr gesichert.

Bei hermiteschen Matrizen erhält man im Rahmen der Potenzmethode bessere Eigenwertnäherungen mit Hilfe des Rayleigh-Quotienten:

$$\lambda^t := (Az^t, z^t), \quad \|z^t\| = 1. \quad (7.2.9)$$

In diesem Fall kann $\{w_1, \dots, w_n\}$ als Orthonormalsystem gewählt werden, so dass gilt:

$$\begin{aligned}\lambda^t &= \frac{(A^{t+1}z^0, A^t z^0)}{\|A^t z^0\|^2} = \frac{\sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2 \lambda_i^{2t+1}}{\sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2 \lambda_i^{2t}} \\ &= \frac{\lambda_n^{2t+1} \{ |\alpha_n|^2 + \sum_{i=1}^{n-1} |\alpha_i|^2 \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_n}\right)^{2t+1} \}}{\lambda_n^{2t} \{ |\alpha_n|^2 + \sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2 (\lambda_i |\lambda_n|)^{2t} \}} = \lambda_n + O\left(\left|\frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n}\right|^{2t}\right).\end{aligned}$$

Die Konvergenz der Eigenwertnäherungen ist hier also doppelt so schnell wie im nicht hermiteschen Fall. Für die praktische Rechnung ist die einfache Potenzmethode nur bedingt brauchbar, da sie schlecht konvergiert, wenn $|\lambda_{n-1}/\lambda_n| \sim 1$ ist, und auch nur den betragsgrößten Eigenwert liefert.

Eine Weiterentwicklung der Potenzmethode ist die sog. „Inverse Iteration“ nach Wielandt⁶. Hier wird davon ausgegangen, dass man bereits eine gute Näherung $\tilde{\lambda}$ für einen Eigenwert λ_k der Matrix A kennt (durch Einschließungssätze oder andere Verfahren), so dass gilt:

$$|\lambda_k - \tilde{\lambda}| \ll |\lambda_i - \tilde{\lambda}|, \quad i = 1, \dots, n, \quad i \neq k. \quad (7.2.10)$$

Im Falle $\tilde{\lambda} \neq \lambda_k$ hat $(A - \tilde{\lambda}I)^{-1}$ die Eigenwerte $\mu_i = (\lambda_i - \tilde{\lambda})^{-1}$, $i = 1, \dots, n$, und es gilt:

$$\left| \frac{1}{\lambda_k - \tilde{\lambda}} \right| \gg \left| \frac{1}{\lambda_i - \tilde{\lambda}} \right|, \quad i = 1, \dots, n, \quad i \neq k. \quad (7.2.11)$$

⁶Helmut Wielandt (1910–2001): Deutscher Mathematiker; Professor in Mainz (1946–1951) und Tübingen (1951–1977); Beiträge zu Gruppentheorie, Lineare Algebra und Matrix-Theorie.

Definition 7.3: Die sog. „inverse Iteration“ besteht in der Anwendung der Potenzmethode auf die Matrix $(A - \tilde{\lambda}I)^{-1}$ mit einer a priori Schätzung $\tilde{\lambda}$ zum gesuchten Eigenwert λ_k . Ausgehend von einem Startvektor z^0 werden Iterierte z^t bestimmt als Lösungen der Gleichungssysteme

$$(A - \tilde{\lambda}I)z^t = z^{t-1}, \quad z^t = \frac{\tilde{z}^t}{\|\tilde{z}^t\|}, \quad t = 1, 2, \dots \quad (7.2.12)$$

Die zugehörige Eigenwertnäherung wird bestimmt durch

$$\mu^t := \frac{z_k^t}{((A - \tilde{\lambda}I)z^t)_k}, \quad ((A - \tilde{\lambda}I)z^t)_k \neq 0, \quad (7.2.13)$$

oder im symmetrischen Fall wieder mit Hilfe des Rayleigh-Quotienten.

Aufgrund der Aussagen über die Potenzmethode liefert die inverse Iteration also für eine diagonalisierbare Matrix jeden Eigenwert, zu dem bereits eine hinreichend gute Näherung bekannt ist.

Beispiel 7.4: Wir wollen die eben beschriebenen Verfahren auf die Modellmatrix aus Abschnitt 6.3 anwenden. Zur Bestimmung der Schwingungsformen und Frequenzen einer über dem Bereich $\bar{\Omega}$ gespannten Membran (Trommel) hat man das Eigenwertproblem des Laplace-Operators

$$\begin{aligned} -\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}(x, y) - \frac{\partial^2 w}{\partial y^2}(x, y) &= \mu w(x, y) \quad \text{für } (x, y) \in \Omega, \\ w(x, y) &= 0 \quad \text{für } (x, y) \in \partial\Omega, \end{aligned} \quad (7.2.14)$$

zu lösen. Man kann zeigen, dass dieses Problem eine abzählbar unendliche Folge von reellen, positiven Eigenwerten besitzt. Der kleinste von diesen $\mu_{\min} > 0$, beschreibt gerade den Grundton der Trommel und die zugehörige Eigenfunktion w_{\min} die zugehörige Grundschwingungsform. Die Diskretisierung dieses Problems mit Hilfe des oben schon eingeführten 5-Punkte-Differenzenapproximation führt auf eine Matrixeigenwertaufgabe

$$Az = \lambda z, \quad \lambda = h^2 \mu \quad (7.2.15)$$

mit derselben Blocktridiagonalmatrix A wie beim Randwertproblem. Unter Verwendung der Bezeichnungen des Abschnitts 6.3 lassen sich deren Eigenwerte explizit angeben durch

$$\lambda_{kl} = 4 - 2(\cos(kh\pi) + \cos(lh\pi)), \quad k, l = 1, \dots, m.$$

Von Interesse ist nun offenbar insbesondere der kleinste Eigenwert λ_{\min} von A , der mit $h^{-2}\lambda_{\min} \approx \mu_{\min}$ eine Approximation zum kleinsten Eigenwert des Ausgangsproblems

(3.2.9) liefert. Für λ_{\min} und den darauffolgenden Eigenwert $\lambda^* > \lambda_{\min}$ gilt offenbar

$$\begin{aligned}\lambda_{\min} &= 4 - 4 \cos(h\pi) = 2\pi^2 h^2 + O(h^4), \\ \lambda^* &= 4 - 2(\cos(2h\pi) + \cos(h\pi)) = 5\pi^2 h^2 + O(h^4).\end{aligned}$$

Zur Berechnung von λ_{\min} könnte die inverse Iteration (mit Shift $\lambda = 0$) verwendet werden. Dies erfordert in jedem Iterationsschritt die Lösung eines Gleichungssystems

$$Az^t = z^{t-1} \quad (7.2.16)$$

Für die zugehörige Eigenwertnäherung

$$\lambda^t = \frac{(Az^t, z^t)}{\|z^t\|^2} \quad (7.2.17)$$

gilt dann mit dem auf λ_{\min} folgenden Eigenwert $\lambda^* > \lambda_{\min}$ die Konvergenzaussage

$$|\lambda^t - \lambda_{\min}| \approx (\lambda_{\min}/\lambda^*)^{2t} \approx (0,4)^{2t}, \quad (7.2.18)$$

d. h.: Die Konvergenzgeschwindigkeit ist unabhängig von der Gitterweite h bzw. der Dimension $n = m^2 \approx h^{-2}$ der Matrix A . Allerdings müsste zur Erzielung einer vorgegebenen Genauigkeit für die Approximation $\mu^t = h^{-2}\lambda^t$ die Toleranz mit h^{-2} skaliert werden, was wiederum eine logarithmische h -Abhängigkeit der erforderlichen Iterationszahl einführt.

$$t(\varepsilon) \approx \frac{\ln(\varepsilon h^2)}{\ln(0,4)} \approx \ln(n). \quad (7.2.19)$$

Dieser Weg zur Berechnung von μ_{\min} wäre damit sehr aufwendig, wenn die Lösung der Probleme (3.2.11) etwa mit Hilfe des PCG-Verfahrens auf maximale Genauigkeit erfolgen würde. Zur Aufwandsreduktion könnte man die Abbruchgenauigkeit der CG-Iteration am Anfang niedrig ansetzen und sie erst im Laufe der äußeren Iteration sukzessive erhöhen.

7.3 Reduktionsmethoden

Wir rekapitulieren einige für das Folgende wichtigen Eigenschaften „ähnlicher“ Matrizen.

Definition 7.4: Zwei Matrizen $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ heißen „ähnlich“, in Symbolen $A \sim B$, wenn es eine reguläre Matrix $T \in \mathbb{C}^{n \times n}$ gibt, so dass gilt:

$$A = T^{-1}BT. \quad (7.3.20)$$

Wegen

$$\begin{aligned}\det(A - zI) &= \det(T^{-1}[B - zI]T) \\ &= \det(T^{-1}) \det(B - zI) \det(T) = \det(B - zI)\end{aligned} \quad (7.3.21)$$

es eine unitäre Matrix $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$, mit der gilt:

$$\bar{U}^T A U = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & * \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{bmatrix}. \quad (7.3.23)$$

Ist $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ hermitesch, $A^T = \bar{A}$, so ist auch $\bar{U}^T A U$ hermitesch. Folglich sind hermitesche Matrizen $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ stets „unitär-ähnlich“ zu einer Diagonalmatrix, $\bar{U}^T A U = \text{diag}(\lambda_i)$, d. h. „diagonalisierbar“.

Hilfssatz 7.2 (Diagonalisierbarkeit): Für eine Matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ sind die folgenden Aussagen äquivalent:

- (i) A ist diagonalisierbar.
- (ii) Es gibt eine Basis des \mathbb{C}^n aus Eigenvektoren von A .
- (iii) Für alle Eigenwerte von A ist die algebraische gleich der geometrischen Vielfachheit.

Beweis: Übungsaufgabe.

Q.E.D.

Die direkte Transformation einer gegebenen Matrix auf Normalform ist i. Allg. nur bei vorheriger Kenntnis der Eigenvektoren in endlich vielen Schritten möglich. Daher transformiert man in der Praxis eine Matrix zunächst nur in eine einfachere Form (z. B. Hessenberg-Form) und wendet auf diese dann andere Verfahren an:

$$A = A^{(0)} \rightarrow A^{(1)} = T_1^{-1} A^{(0)} T_1 \rightarrow \dots \rightarrow A^{(m)} = T_m^{-1} A^{(m-1)} T_m.$$

Die Transformationsmatrizen T_i sollten dabei explizit durch die Elemente von $A^{(i-1)}$ angebar sein. Ferner sollte das Eigenwertproblem der Matrix $A^{(i)} = T_i^{-1} A^{(i-1)} T_i$ nicht wesentlich schlechter konditioniert sein als das von $A^{(i-1)}$.

Sei $\|\cdot\|$ eine natürliche Matrizenorm zur Vektornorm $\|\cdot\|$ auf \mathbb{C}^n . Für zwei ähnliche Matrizen $B \sim A$ gilt dann

$$B = T^{-1} A T, \quad B + \delta B = T^{-1} (A + \delta A) T, \quad \delta A = T \delta B T^{-1},$$

bzw.

$$\|B\| \leq \text{cond}(T) \|A\|, \quad \|\delta A\| \leq \text{cond}(T) \|\delta B\|.$$

Folglich ist

$$\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \leq \text{cond}(T)^2 \frac{\|\delta B\|}{\|B\|}. \quad (7.3.24)$$

Für große $\text{cond}(T) \gg 1$ werden also kleine Änderungen in B die Eigenwerte unter Umständen wesentlich stärker verfälschen als solche in A . Um die Gutartigkeit der Re-

7.4 Tridiagonal- und Hessenberg-Matrizen

Im Folgenden behandeln wir Verfahren zur Lösung des Eigenwertproblems symmetrischer Tridiagonalmatrizen und von Hessenberg-Matrizen, die durch Anwendung einer Reduktionsmethode aus einer allgemeinen Matrix erzeugt werden.

7.4.1 LR- und QR-Verfahren

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ zunächst eine beliebige Matrix. Wir betrachten zwei iterative Verfahren zur Lösung des vollständigen Eigenwertproblems von A :

(I) Das „LR-Verfahren“ nach Rutishauser⁹ (1958) erzeugt ausgehend von $A^{(1)} := A$ eine Folge von Matrizen $A^{(t)}$, $t \in \mathbb{N}$, durch die Vorschrift

$$A^{(t)} = L^{(t)} R^{(t)} \text{ (LR-Zerlegung)}, \quad A^{(t+1)} := R^{(t)} L^{(t)}. \quad (7.4.26)$$

Wegen

$$A^{(t+1)} = R^{(t)} L^{(t)} = [L^{(t)}]^{-1} \underbrace{L^{(t)} R^{(t)}}_{= A^{(t)}} L^{(t)}$$

sind alle Iterierten $A^{(t)}$ ähnlich zu A und haben somit dieselben Eigenwerte. Unter geeigneten Voraussetzungen an A lässt sich zeigen, dass

$$\lim_{t \rightarrow \infty} A^{(t)} = \lim_{t \rightarrow \infty} R^{(t)} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & * \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{bmatrix}, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} L^{(t)} = I, \quad (7.4.27)$$

wobei λ_i die Eigenwerte von A sind.

Das LR-Verfahren erfordert in jedem Schritt die Berechnung einer LR-Zerlegung und ist folglich viel zu aufwendig für allgemeine vollbesetzte Matrizen. Bei Hessenberg-Matrizen ist der Aufwand jedoch vertretbar. Der schwerwiegende Nachteil des LR-Verfahrens ist die notwendige Voraussetzung der Existenz der LR-Zerlegungen $A^{(t)} = L^{(t)} R^{(t)}$. Hat man nur $P^{(t)} A^{(t)} = L^{(t)} R^{(t)}$ mit einer Permutationsmatrix $P^{(t)} \neq I$, so braucht keine Konvergenz vorzuliegen.

(II) Das „QR-Verfahren“ nach Francis¹⁰ (1961) gilt als das derzeit effizienteste zur Lösung des Eigenwertproblems von Hessenberg-Matrizen. Zur Umgehung der Hauptschwierigkeit beim LR-Verfahren liegt es nahe, eine analoge Iteration mit Hilfe der stets existierenden

⁹Heinz Rutishauser (1918–1970): Schweizer Mathematiker und Informatiker; seit 1962 Professor an der ETH Zürich; Beiträge zu Numerische Lineare Algebra (LR-Verfahren: Solution of eigenvalue problems with the LR transformation, Appl. Math. Ser. nat. Bur. Stand. 49, 47-81(1958).) und Analysis sowie zu Grundlagen der Computer-Arithmetik.

¹⁰John F. G. Francis (1934–): Englischer Informatiker; arbeitete in mehreren Industriefirmen; bekannt durch den von ihm gefundenen „QR-Algorithmus“ zur Eigenwertberechnung: „The QR transformation. A unitary analogue to the LR transformation“, Computer J. 4, 265-271 (1961/1962).

QR-Zerlegung anzusetzen:

$$A^{(t)} = Q^{(t)} R^{(t)}, \quad A^{(t+1)} := R^{(t)} Q^{(t)}, \quad t \in \mathbb{N}, \quad (7.4.28)$$

wobei $Q^{(t)}$ unitäre und $R^{(t)}$ rechte obere Dreiecksmatrizen mit positiven Diagonalelementen sind. Die QR-Zerlegung wird etwa mit Hilfe des Householder-Verfahrens vorgenommen. Auch hier kommt aus Ökonomiegründen nur eine Anwendung auf einfach strukturierte Matrizen wie Hessenberg-Matrizen in Frage. Wegen

$$A^{(t+1)} = R^{(t)} Q^{(t)} = Q^{(t)T} \underbrace{Q^{(t)} R^{(t)}}_{= A^{(t)}} Q^{(t)}$$

sind wieder alle Iterierten $A^{(t)}$ ähnlich zu A . Zum Nachweis der Konvergenz des QR-Verfahrens benötigen wir den folgenden Hilfssatz:

Hilfssatz 7.3: *Es seien $E^{(t)} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $t \in \mathbb{N}$, reguläre Matrizen mit $\lim E^{(t)} = I$ und $E^{(t)} = Q^{(t)} R^{(t)}$ zugehörige QR-Zerlegungen. Dann gilt notwendig*

$$\lim_{t \rightarrow \infty} Q^{(t)} = I = \lim_{t \rightarrow \infty} R^{(t)}. \quad (7.4.29)$$

Beweis: Wegen

$$\|E^{(t)} - I\|_2 = \|Q^{(t)} R^{(t)} - Q^{(t)} Q^{(t)T}\|_2 = \|R^{(t)} - Q^{(t)T}\|_2 \rightarrow 0$$

konvergiert $q_{jk}^{(t)} \rightarrow 0$ ($t \rightarrow \infty$), $j < k$. Dies erzwingt wegen

$$I = Q^{(t)} Q^{(t)T} = \begin{bmatrix} \square & & & \rightarrow 0 \\ & \square & & * \\ & & \ddots & \\ & * & & \square \\ & & & & \square \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \square & & & & \\ & \square & & & * \\ & & * & \ddots & \\ & & & & \square \\ \rightarrow 0 & & & & \square \end{bmatrix}$$

notwendig

$$q_{jj}^{(t)} \rightarrow \pm 1, \quad q_{jk}^{(t)} \rightarrow 0 \quad (t \rightarrow \infty), \quad j > k.$$

Also konvergiert $Q^{(t)} \rightarrow \text{diag}(\pm 1)$ ($t \rightarrow \infty$). Wegen

$$Q^{(t)} R^{(t)} = E^{(t)} \rightarrow I \quad (t \rightarrow \infty), \quad r_{jj} > 0$$

ist also $\lim_{t \rightarrow \infty} Q^{(t)} = I$. Dann ist aber auch

$$\lim_{t \rightarrow \infty} R^{(t)} = \lim_{t \rightarrow \infty} Q^{(t)T} E^{(t)} = I,$$

was zu zeigen war.

Q.E.D.

Satz 7.8 (QR-Algorithmus): Die Eigenwerte der Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ seien betragsmäßig separiert: $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|$. Dann gilt für die durch das QR-Verfahren erzeugten Matrizen $A^{(t)} = (a_{jk}^{(t)})_{j,k=1,\dots,n}$:

$$\left\{ \lim_{t \rightarrow \infty} a_{jj}^{(t)} \mid j = 1, \dots, n \right\} = \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}. \quad (7.4.30)$$

Beweis: Es gilt

$$\begin{aligned} A^{(t+1)} &= R^{(t)}Q^{(t)} = Q^{(t)T} \underbrace{Q^{(t)}R^{(t)}}_{= A^{(t)}} Q^{(t)} = \\ &= \dots = [Q^{(1)} \dots Q^{(t)}]^T A \underbrace{[Q^{(1)} \dots Q^{(t)})]}_{=: P^{(t)}} \end{aligned}$$

Die normierten Eigenvektoren w_i , $\|w_i\| = 1$, zu den Eigenwerten λ_i sind linear unabhängig. Die Matrix $W = [w_1, \dots, w_n]$ ist also regulär und genügt der Beziehung $AW = W\Lambda$ mit der Diagonalmatrix $\Lambda = \text{diag}(\lambda_i)$. Folglich gilt

$$A = W\Lambda W^{-1}.$$

Sei $QR = W$ die QR-Zerlegung von W und $LS = PW^{-1}$ eine LR-Zerlegung von PW^{-1} (P geeignete Permutationsmatrix). Wir betrachten im Folgenden den Fall $P = I$. Es ist

$$\begin{aligned} A^t &= [W\Lambda W^{-1}]^t = W\Lambda^t W^{-1} = W\Lambda^t LS = W[\Lambda^t L(\Lambda^{-1})^t] \Lambda^t S \\ &= W \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ l_{jk} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_k}\right)^t & & & 1 \end{bmatrix} \Lambda^t S = W[I + N^{(t)}] \Lambda^t S \\ &= QR[I + N^{(t)}] \Lambda^t S = Q[R + RN^{(t)}] \Lambda^t S, \end{aligned}$$

und somit

$$A^t = Q[I + RN^{(t)}R^{-1}]R\Lambda^t S.$$

Da die Eigenwerte λ_i betragsmäßig der Größe nach geordnet sind, ist $|\lambda_j/\lambda_k| < 1$, $j > k$, d. h.

$$N^{(t)} \rightarrow 0, \quad RN^{(t)}R^{-1} \rightarrow 0 \quad (t \rightarrow \infty).$$

Für die QR-Zerlegungen $I + RN^{(t)}R^{-1} = \tilde{Q}^{(t)}\tilde{R}^{(t)}$ folgt dann nach Hilfssatz 7.3

$$\tilde{Q}^{(t)} \rightarrow I, \quad \tilde{R}^{(t)} \rightarrow I \quad (t \rightarrow \infty).$$

Weiter ist

$$A^t = Q\tilde{Q}^{(t)}[\tilde{R}^{(t)}R\Lambda^t S]$$

offenbar eine QR-Zerlegung von A^t (mit nicht notwendig positiven Diagonalelementen

von R !). Aus

$$\begin{aligned} \underbrace{Q^{(1)} \dots Q^{(t)}}_{= P^{(t)}} \underbrace{R^{(t)} \dots R^{(1)}}_{=: S^{(t)}} &= \underbrace{Q^{(1)} \dots Q^{(t-1)}}_{= P^{(t-1)}} A^{(t)} \underbrace{R^{(t-1)} \dots R^{(1)}}_{=: S^{(t-1)}} \\ &= P^{(t-1)} \underbrace{[P^{(t-1)^T} A P^{(t-1)}]}_{\text{s. Beweisbeginn}} S^{(t-1)} \\ &= A P^{(t-1)} S^{(t-1)} \end{aligned}$$

folgt

$$P^{(t)} S^{(t)} = A P^{(t-1)} S^{(t-1)} = \dots = A^{t-1} P^{(1)} S^{(1)} = A^t.$$

Also ist $P^{(t)} S^{(t)} = A^t$ eine zweite QR-Zerlegung von A^t (mit positiven Diagonalelementen von R !). Es gibt folglich Diagonalmatrizen $D^{(t)} = \text{diag}(\pm 1)$, so dass

$$P^{(t)} = Q \underbrace{\tilde{Q}^{(t)} D^{(t)}}_{=: T^{(t)}}, \quad (|\tilde{q}_{jk}^{(t)}|)_{j,k=1,\dots,n} \rightarrow I \quad (t \rightarrow \infty).$$

Damit finden wir, dass

$$\begin{aligned} A^{(t+1)} &= P^{(t)T} A P^{(t)} = [Q T^{(t)}]^T A Q T^{(t)} = T^{(t)T} Q^T A Q T^{(t)} \\ &= T^{(t)T} R \Lambda R^{-1} T^{(t)} \quad (\text{wegen } W^{-1} A W = \Lambda \Leftrightarrow R^{-1} Q^T A Q R = \Lambda). \\ &= T^{(t)T} \begin{bmatrix} \lambda_1 & & * \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{bmatrix} \tilde{Q}^{(t)} D^{(t)}. \end{aligned}$$

Wegen $\tilde{Q}^{(t)} \rightarrow I$ ($t \rightarrow \infty$) konvergiert also

$$D^{(t)} A^{(t+1)} D^{(t)} \rightarrow \begin{bmatrix} \lambda_1 & & * \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_n \end{bmatrix} \quad (t \rightarrow \infty).$$

Besitzt W^{-1} keine LR-Zerlegung, so erscheinen die Eigenwerte λ_i nicht mehr betragsmäßig der Größe nach geordnet. Q.E.D.

Die Konvergenzgeschwindigkeit des QR-Verfahrens wird bestimmt durch die Größen

$$\left| \frac{\lambda_j}{\lambda_k} \right| < 1, \quad j > k,$$

d. h.: Die Konvergenz ist um so schneller, je besser die Eigenwerte von A betragsmäßig

separiert sind. Für positiv definite Matrizen kann man zeigen, dass das QR-Verfahren doppelt so schnell konvergiert wie das entsprechende LR-Verfahren; es benötigt jedoch pro Iterationsschritt auch etwa die doppelte Anzahl von Operationen. Unter gewissen Bedingungen kann für da QR-Verfahren sogar *kubische* Konvergenz erreicht werden, d. h.: $|\lambda^{(t)} - \lambda| \leq c|\lambda^{(t-1)} - \lambda|^3$. Wie das LR-Verfahren wendet man das QR-Verfahren nur auf bereits reduzierte Matrizen an, für die eine QR-Zerlegung leichter zu berechnen ist: Hessenberg-Matrizen, symmetrische Tridiagonalmatrizen oder allgemeiner Bandmatrizen der Bandbreite $2m + 1 \ll n$. Dies ist gerechtfertigt aufgrund der folgenden Aussage:

Hilfssatz 7.4: *Ist A eine Hessenberg-Matrix (oder eine symmetrische $2m+1$ -Bandmatrix), so gilt dasselbe für alle vom QR-Algorithmus erzeugten Matrizen $A^{(t)}$.*

Praktische Erfahrungen zeigen, dass das QR-Verfahren in Verbindung mit der Reduktionsmethode für moderat große Matrizen ($n \leq 10^5$) allen anderen bekannten Verfahren zur Lösung des vollständigen Eigenwertproblems überlegen ist. Für sehr große Eigenwertaufgaben der Dimension $n = 10^5 - 10^8$, wie sie z. B. in der hydrodynamischen Stabilitätstheorie und der Molekulardynamik/Quantenmechanik auftreten verwendet man spezielle, struktur-ausnutzende Varianten der Projektionsmethoden („Krylov-Raum-Methoden“) aus dem vorigen Kapitel.

7.4.2 Verfahren der Sturmschen Kette

Wir stellen zum Abschluss noch ein klassisches Verfahren vor zur stabilen, *direkten* Berechnung der Eigenwerte einer symmetrischen (unzerlegbaren) Tridiagonalmatrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ aus ihrem charakteristischen Polynom P_A . Sei also $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische Tridiagonalmatrix mit $b_i \neq 0$, $i = 1, \dots, n - 1$:

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & & 0 \\ b_1 & & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & b_{n-1} & a_n \end{bmatrix}.$$

Zur Berechnung des charakteristischen Polynoms $p_A(z)$ dienen die Rekursionsformeln

$$\begin{aligned} p_0(z) &= 1, & p_1(z) &= a_1 - z, \\ p_i(z) &= (a_i - z)p_{i-1}(z) - b_{i-1}^2 p_{i-2}(z), & i &= 2, \dots, n. \end{aligned}$$

Die Polynome $p_i \in P_i$ sind gerade die i -ten Hauptminoren von $\det(A - zI)$, d. h.: $p_n = p_A$. Um dies einzusehen, entwickle man den $(i + 1)$ -ten Hauptminor nach der $(i + 1)$ -ten Spalte:

Wir finden also

$$(A - zI)w(z) = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -w_n(z) \end{bmatrix}. \quad (7.4.32)$$

Für einen Eigenwert λ von A ist $w_n(\lambda) = \text{konst.} \cdot p_A(\lambda) = 0$, d. h.

$$(A - \lambda I)w(\lambda) = 0.$$

Ableitung der Identität (7.4.32) ergibt

$$[(A - zI)w(z)]' = -w(z) + (A - zI)w'(z) = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -w'_n(z) \end{bmatrix}.$$

Wir setzen $z = \lambda$ mit einem Eigenwert λ von A und multiplizieren mit $-w(\lambda)$:

$$\begin{aligned} 0 &< \|w(\lambda)\|_2^2 - \underbrace{([A - \lambda I]w(\lambda), w'(\lambda))}_{=0} \\ &= w_{n-1}(\lambda)w'_n(\lambda) = -\frac{p_{n-1}(\lambda)p'_n(\lambda)}{b_1^2 \dots b_{n-1}^2}. \end{aligned}$$

Folglich ist $p'_n(\lambda) \neq 0$, d. h. wir haben allgemein:

(S1) *Alle Nullstellen von p_n sind einfach.*

(S2) *Für jede Nullstelle λ von p_n gilt*

$$p_{n-1}(\lambda)p'_n(\lambda) < 0.$$

Weiter gilt

(S3) *Für jede reelle Nullstelle ζ von p_{i-1} ist*

$$p_i(\zeta)p_{i-2}(\zeta) < 0, \quad i = 2, \dots, n;$$

denn in diesem Fall ist $p_i(\zeta) = -b_{i-1}^2 p_{i-2}(\zeta)$ und wäre $p_i(\zeta) = 0$, so folgte der Widerspruch

$$0 = p_i(\zeta) = p_{i-1}(\zeta) = p_{i-2}(\zeta) = \dots = p_0(\zeta) = 1.$$

Schließlich gilt trivialerweise

(S4) *$p_0 \neq 0$ hat keinen Vorzeichenwechsel.*

Definition 7.5: Eine Folge von Polynomen $p = p_n, p_{n-1}, \dots, p_0$ (oder allgemeiner stetiger Funktionen f_n, f_{n-1}, \dots, f_0) mit den Eigenschaften (S1)-(S4) heißt eine „Sturmsche¹¹ Kette“ von p .

Die vorausgegangene Überlegung hat also zu folgendem Resultat geführt:

Satz 7.9 (Sturmsche Kette): Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische, unzerlegbare Tridiagonalmatrix. Dann bilden die Hauptminoren $p_i(z)$ der Matrix $A - zI$ eine Sturmsche Kette des charakteristischen Polynoms $p_A(z) = p_n(z)$ von A .

Der Wert der Existenz einer Sturmschen Kette zu einem Polynom p beruht auf dem folgenden Resultat:

Satz 7.10 (Intervallschachtelung): Es sei p ein Polynom und $p = p_n, p_{n-1}, \dots, p_0$ eine zugehörige Sturmsche Kette. Dann ist die Anzahl der reellen Nullstellen von p in einem Intervall $[a, b]$ gleich $N(b) - N(a)$, wobei $N(\zeta)$ die Anzahl der Vorzeichenwechsel der Kette $p_n(\zeta), \dots, p_0(\zeta)$ bezeichnet.

Beweis: Wir betrachten die Zahl der Vorzeichenwechsel $N(a)$ für wachsendes a . $N(a)$ bleibt konstant, solange a keine Nullstelle eines der p_i passiert. Sei nun a Nullstelle eines der p_i ; wir unterscheiden zwei Fälle:

(i) Fall $p_i(a) = 0$ für $i \neq n$: In diesem Fall ist $p_{i+1}(a) \neq 0$, $p_{i-1}(a) \neq 0$. Die Vorzeichen von $p_j(a)$, $j \in \{i-1, i, i+1\}$ zeigen daher für genügend kleines $h > 0$ ein Verhalten, das durch eines der zwei folgenden Tableaus skizziert werden kann:

| | | | |
|-------|-------|-----|-------|
| | $a-h$ | a | $a+h$ |
| $i-1$ | - | - | - |
| i | +/- | 0 | -/+ |
| $i+1$ | + | + | + |

| | | | |
|-------|-------|-----|-------|
| | $a-h$ | a | $a+h$ |
| $i-1$ | + | + | + |
| i | +/- | 0 | -/+ |
| $i+1$ | - | - | - |

In jedem Fall ist $N(a-h) = N(a) = N(a+h)$, und die Anzahl der Vorzeichenwechsel ändert sich nicht.

(ii) Fall $p_n(a) = 0$: In diesem Fall kann das Verhalten von $p_j(a)$, $j \in \{n-1, n\}$, durch eines der folgenden beiden Tableaus beschrieben werden (wegen (S2)):

| | | | |
|-------|-------|-----|-------|
| | $a-h$ | a | $a+h$ |
| n | - | 0 | + |
| $n-1$ | - | - | - |

| | | | |
|-------|-------|-----|-------|
| | $a-h$ | a | $a+h$ |
| n | + | 0 | - |
| $n-1$ | + | + | + |

¹¹ Jacques Charles François Sturm (1803–1855): Französisch-Schweizer Mathematiker; Professor an der École Polytechnique in Paris seit 1840; Beiträge zur Mathematischen Physik, Differentialgleichungen, („Sturm-Liouville-Problem“) und Differentialgeometrie.

Also ist $N(a-h) = N(a) = N(a+h) - 1$, d. h.: Beim Passieren einer Nullstelle von p_n kommt genau ein Vorzeichenwechsel hinzu. Für $a < b$ gibt daher $N(b) - N(a) = N(b+h) - N(a-h)$, $h > 0$ genügend klein, die Anzahl der Nullstellen von p_n im Intervall $[a-h, b+h]$ an. Da h beliebig klein gewählt werden kann, folgt die Behauptung. Q.E.D.

Satz 7.10 führt auf ein einfaches „Bisektionsverfahren“ zur Bestimmung der Nullstellen des charakteristischen Polynoms p_A einer symmetrischen, irreduziblen Tridiagonalmatrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Offenbar besitzt A nur reelle, einfache Eigenwerte $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n$. Für $x \rightarrow -\infty$ besitzt die Kette

$$\begin{aligned} p_0(x) &= 1, & p_1(x) &= a_1 - x \\ i = 2, \dots, n &: & p_i(x) &= (a_i - x)p_{i-1}(x) - b_i^2 p_{i-2}(x), \end{aligned}$$

die Vorzeichenverteilung $+, \dots, +$; also ist $N(x) = 0$. Folglich gibt $N(\zeta)$ gerade die Anzahl der Nullstellen λ von p_A mit $\lambda < \zeta$ an. Für die Eigenwerte λ_i von A gilt also:

$$\lambda_i < \zeta \iff N(\zeta) \geq i. \quad (7.4.33)$$

Zur Bestimmung des i -ten Eigenwertes λ_i startet man mit einem Intervall $[a_0, b_0]$, das λ_i sicher enthält, z. B.: $a_0 < \lambda_1 < \lambda_n < b_0$. Dann halbiert man sukzessiv das Intervall und testet mit Hilfe der Sturmschen Kette, in welchem der beiden neuen Teilintervalle λ_i liegt, d. h.: Man bildet für $t = 0, 1, 2, \dots$:

$$\mu_t := \frac{a_t + b_t}{2}, \quad \begin{aligned} a_{t+1} &:= \begin{cases} a_t, & \text{falls } N(\mu_t) \geq i \\ \mu_t, & \text{falls } N(\mu_t) < i \end{cases} \\ b_{t+1} &:= \begin{cases} \mu_t, & \text{falls } N(\mu_t) \geq i \\ b_t, & \text{falls } N(\mu_t) < i \end{cases} \end{aligned} \quad (7.4.34)$$

Teilintervalle λ_i liegt, d. h.: Man bildet für $t = 0, 1, 2, \dots$: Es gilt dann stets $\lambda_i \in [a_{t+1}, b_{t+1}]$,

$$[a_{t+1}, b_{t+1}] \subset [a_t, b_t], \quad |a_{t+1} - b_{t+1}| = \frac{1}{2}|a_t - b_t|,$$

und a_t konvergiert monoton wachsend, b_t monoton fallend gegen λ_i . Dies Verfahren ist zwar langsam, aber sehr robust (geringe Rundungsfehleranfälligkeit) und gestattet die Bestimmung eines jeden beliebigen Eigenwertes unabhängig von den übrigen.

7.5 Übungsaufgaben

Übung 7.1: a) Man zeige, dass sich jedes Skalarprodukt (\cdot, \cdot) auf dem \mathbb{K}^n bzgl. des euklidischen Skalarprodukts $(\cdot, \cdot)_2$ mit einer hermiteschen, positiv definiten Matrix $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ in der Form

$$(x, y) = (Ax, y)_2, \quad x, y \in \mathbb{K},$$

darstellen lässt.

b) Man zeige, dass eine positiv definite Matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ notwendig auch hermitesch ist, d. h.: $A = \bar{A}^T$. Dies ist i. Allg. nicht richtig für reelle Matrizen $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, d. h.: Für reelle Matrizen geht die Definition von „positiv definit“ gewöhnlich zusammen mit der Voraussetzung „symmetrisch“.

Übung 7.2: Man zeige, dass in einer zusammenhängenden Vereinigung von k Gerschgorin-Kreisen einer Matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ (disjunkt zu allen anderen $n - k$ Kreisen) genau k Eigenwerte von A liegen (ihrer algebraischen Vielfachheiten entsprechend oft gezählt). Dies impliziert, dass eine solche Matrix mit paarweise disjunkten Gerschgorin-Kreisen genau n einfache Eigenwerte hat und folglich diagonalisierbar ist.

Übung 7.3: Sei $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ ($\mathbb{K} = \mathbb{R}$ oder $\mathbb{K} = \mathbb{C}$) eine hermitesche Matrix.

(i) Man zeige, dass Eigenvektoren zu unterschiedlichen Eigenwerten $\lambda_1(A)$ und $\lambda_2(A)$ orthogonal zu einander sind. Ist das auch richtig für nicht-hermitesche aber „normale“ Matrizen, d. h.: $\bar{A}^T A = A \bar{A}^T$?

(ii) Man zeige die Beziehungen

$$\lambda_{\min}(A) = \min_{x \in \mathbb{K}^n \setminus \{0\}} \frac{(Ax, x)_2}{\|x\|_2^2} \leq \max_{x \in \mathbb{K}^n \setminus \{0\}} \frac{(Ax, x)_2}{\|x\|_2^2} = \lambda_{\max}(A),$$

wobei $\lambda_{\min}(A)$ und $\lambda_{\max}(A)$ die minimalen und maximalen (reellen) Eigenwerte von A sind. (Hinweis: Eine hermitesche Matrix besitzt bekanntlich eine ONB von Eigenvektoren.)

Übung 7.4: Der Beweis der Konvergenz der Potenzmethode für eine symmetrische, positiv definite Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ basierte auf der Identität

$$\lambda^t = (Az^t, z^t)_2 = \frac{(\lambda_n)^{2t+1} \left\{ |\alpha_n|^2 + \sum_{i=1}^{n-1} |\alpha_i|^2 \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_n} \right)^{2t+1} \right\}}{(\lambda_n)^{2t} \left\{ |\alpha_n|^2 + \sum_{i=1}^{n-1} |\alpha_i|^2 \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_n} \right)^{2t} \right\}} = \lambda_{\max} + \mathcal{O} \left(\left| \frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_{\max}} \right|^{2t} \right),$$

wobei $\lambda_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, n$, die Eigenwerte von A sind, $\{w^i, i = 1, \dots, n\}$ eine zugehörige ONB von Eigenvektoren und α_i die Koeffizienten in der Entwicklung des Startvektors $z^0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i w^i$. Man zeige, dass im Falle $\alpha_n \neq 0$ in dieser Identität der Fehlerterm rechts gleichmäßig bzgl. der Dimension n von A beschränkt ist, aber linear mit $|\lambda_n|$ wächst.

Übung 7.5: Jede Matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ besitzt eine QR-Zerlegung $A = QR$ mit einer unitären Matrix $Q = [q^1, \dots, q^n]$ und einer oberen Dreiecksmatrix $R = (r_{ij})_{i,j=1}^n$. Diese Zerlegung ist, wie man sich leicht klar macht, nicht eindeutig bestimmt. Man zeige, dass für reguläres A die QR-Zerlegung eindeutig bestimmt ist, wenn zusätzlich $r_{ii} \in \mathbb{R}_+$, $i = 1, \dots, n$, gefordert wird. (Hinweis: Die QR-Zerlegung von A liefert eine Cholesky-Zerlegung von $\bar{A}^T A$.)

Übung 7.6: Sei A eine Hessenberg-Matrix oder eine symmetrische Tridiagonalmatrix. Man zeige, dass dasselbe gilt für alle durch den QR-Algorithmus erzeugten Iterierte A^t

$$\begin{aligned} A^0 &:= A, \\ A^{t+1} &:= R^t Q^t \text{ mit } A^t = Q^t R^t, \quad t \geq 0. \end{aligned}$$