6.4 Praktische Durchführung des QR-Algorithmus

Die QR-Zerlegung nach Householder benötigt $\frac{2}{3}n^3$ *flops*, das Produkt RQ deren $\frac{1}{2}n^3$. Damit verlangt ein einziger QR-Schritt $\frac{7}{6}n^3$ *flops*.

Eine erhebliche Reduktion dieser Anzahl erreicht man, wenn man den QR-Algorithmus auf Hessenberg-Matrizen anwendet. Für eine Hessenberg-Matrix $H = (\ell_{i,j})$ ist $h_{i,j} = 0$ für $i > j+1$. Man sieht leicht, daß ein QR-Schritt eine Hessenberg-Matrix immer wieder in eine solche überführt.

Ist A eine beliebige (n,n)-Matrix, so kann man mit Hilfe des Householder-Verfahrens eine unitäre Matrix U berechnen, so daß $H = UAU^*$ eine Hessenberg - Matrix ist. Dazu setzt man $U = U_{n-1}\cdots U_1$, wobei U_i die Gestalt

$$U_i = \begin{pmatrix} I_i & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & S_i \end{pmatrix}$$

mit der i-dimensionalen Einheitsmatrix I_i und einer $(n-i)$-dimensionalen Spiegelung S_i ist. S_i wird so bestimmt, daß der $(n-i)$-dimensionale Vektor in der i-ten Spalte von $U_{i-1}\cdots U_1 A U_1^* \cdots U_{i-1}^*$ in und unterhalb der Hauptdiagonalen in ein Vielfaches des $(n-i)$-dimensionalen Einheitsvektors e_1 abgebildet wird. Der QR-Schritt für Hessenberg-Matrizen kann durch die Givens-Rotation

$$U_{i,k} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & c & & s & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & -s & & c & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

ausgeführt werden. Die nichttrivialen Elemente $c = \cos(\varphi)$, $s = \sin(\varphi)$ stehen dabei in Zeilen und Spalten i, k. $U_{i,k}$ vermittelt eine Drehung in der $i-k$-Ebene um den Winkel φ. Wir verwenden nur $U_{k,k+1}$ mit den Elementen $c_k = \cos(\varphi_k)$, $s_k = \sin(\varphi_k)$. In einem ersten Schritt überschreibt man die

Hessenberg-Matrix H durch den rechten Faktor R in der QR-Zerlegung $H = QR$:

$$
\begin{array}{lll}
\text{for} \quad k & = & 1, \ldots, n-1 \\
& \{ & \text{Bestimme } \varphi_k \text{ so, daß } \begin{pmatrix} c_k & s_k \\ -s_k & c_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{k,k} \\ h_{k+1,k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \times \\ 0 \end{pmatrix} \\
& & \text{for } \ j = k, \ldots, n \\
& & \begin{pmatrix} h_{k,j} \\ h_{k+1,j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_k & s_k \\ -s_k & c_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{k,j} \\ h_{k+1,j} \end{pmatrix} \\
& \} &
\end{array}
$$

Der unitäre Faktor Q ist dann natürlich $U^*_{1,2} \cdots U^*_{n-1,n}$. In einem zweiten Schritt wird RQ gebildet:

$$
\begin{array}{l}
\text{for} \quad k = 1, \ldots, n-1 \\
\text{for} \quad j = 1, \ldots, k+1 \\
\qquad (h_{j,k}, h_{j,k+1}) = (h_{j,k}, h_{j,k+1}) \begin{pmatrix} c_k & -s_k \\ s_k & c_k \end{pmatrix} .
\end{array}
$$

Jeder dieser Schritte benötigt $2n^2$, insgesamt also $4n^2$ *flops*. Das ist erheblich günstiger als die $\frac{7}{6}n^3$ *flops* eines QR-Schrittes mit einer allgemeinen Matrix.

Zur Konvergenzbeschleunigung führt man *shifts* durch, und zwar in der Form

$$
\begin{aligned}
A_k - \sigma_k I &= Q_k R_k \\
A_{k+1} &= R_k Q_k + \sigma_k I \ .
\end{aligned}
$$

Für σ_k verwendet man eine Näherung für den betragskleinsten Eigenwert, etwa das (n, n)-Element von A_k. Das führt zu einer schnellen Konvergenz von λ_n. Danach spaltet man Zeile und Spalte n ab und führt den QR-Algorithmus für die verbleibende $(n-1, n-1)$-Matrix weiter.

6.5 Fehlerabschätzung bei Eigenwertproblemen

Wir wollen zunächst einen Satz kennenlernen, der ohne viel Rechnung die grobe Lokalisierung der Eigenwerte einer Matrix gestattet.

Satz 6.5.1 *(Gerschgorin) Sei A (n,n)-Matrix und seien*

$$\begin{aligned} r_i &= \sum_{j\neq i} |a_{ij}| \\ K_i &= \{z \in C : |z - a_{ii}| \leq r_i\} \ . \end{aligned}$$

Für die "Gerschgorin-Kreise" K_i gilt dann:

a) Alle Eigenwerte von A sind in $\bigcup\limits_{i=1}^{n} K_i$ enthalten.

b) m der Kreise K_i seien punktfremd mit den restlichen K_j. Dann haben die in der Vereinigung dieser K_i liegenden Eigenwerte zusammen genau die algebraische Vielfachheit m.

Beispiel:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 & -2 \\ 1 & 11 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 12 & -1 \\ -3 & 1 & 0 & 3 \end{pmatrix} \qquad \begin{aligned} r_1 &= 5 \\ r_2 &= 2 \\ r_3 &= 2 \\ r_4 &= 4 \end{aligned}$$

Es liegen Eigenwerte jeweils der Gesamtvielfachheit 2 in $K_1 \cup K_4$ und $K_2 \cup K_3$.

Beweis:

(a) Sei λ Eigenwert und x Eigenvektor von A mit $\|x\|_\infty = 1 = |x_{i_0}|$. $Ax = \lambda x$ bedeutet

$$(a_{i,i} - \lambda)x_i = -\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} a_{i,j}x_j \ ,$$

also

$$|a_{i,i} - \lambda||x_i| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{i,j}||x_j| \leq r_i \ .$$

Für $i = i_0$ folgt $\lambda \in K_{i_0}$.

(b) Der Beweis beruht auf einem Stetigkeitsargument. Wir geben nur die Idee. Für eine exakte Fassung siehe etwa J. Werner, Kapitel 5.1.

Wir setzen $A(t) = D + t(A - D)$ mit der Diagonalen D von A. Dann ist $A(0) = D$, $A(1) = A$. Die Gerschgorin-Kreise von $A(t)$ sind tK_i. Wir beweisen (b) für alle $A(t)$ mit $0 \leq t \leq 1$. Wir benutzen folgendes

Lemma 6.5.1 *Es gibt n stetige Funktionen $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ auf $[0,1]$, so daß $\lambda_1(t), \ldots, \lambda_n(t)$ die Eigenwerte von $A(t)$ sind.*

Nun argumentiert man folgendermaßen. Für $t = 0$ ist (b) offenbar richtig. Wir wählen nun $t_0 > 0$ so, daß für $t \leq t_0$ tK_i, tK_j für alle i, j mit $a_{i,i} \neq a_{j,j}$ punktfremd sind. Dann müssen für $t \leq t_0$ wegen des Lemmas in tK_i genau so viele $\lambda_j(t)$ liegen, wie es j gibt mit $a_{j,j} = a_{i,i}$. Also ist (b) richtig für $A(t)$ mit $t \leq t_0$.

Lassen wir jetzt t weiter anwachsen bis zum ersten Mal einige der bisher punktfremden tK_i zusammenstoßen. Die so entstehende Vereinigung von $tK_i's$ enthält dann genau diejenigen Eigenwerte, welche bisher in den einzelnen $tK_i's$ lagen. So fortfahrend erhält man schließlich das Resultat für $A(t)$ in $0 \leq t \leq 1$.

□

Für hermite'sche Matrizen kann man einfache und befriedigende Aussagen über die Lage von Eigenwerten machen. Zunächst haben wir folgenden Einschließungssatz.

Satz 6.5.2 *Sei A hermite'sch und seien λ, x Näherungen für einen Eigenwert von A mit zugehörigem Eigenvektor. Sei $d = Ax - \lambda x$.*

Dann gibt es einen Eigenwert λ_k von A mit

$$|\lambda_k - \lambda| \leq \frac{\|d\|_2}{\|x\|_2}\,.$$

Beweis: Sei $\{x_1, \ldots, x_n\}$ ein Orthonormalsystem von Eigenvektoren von A. Dann gilt

$$x = \sum_{i=1}^{n} c_i x_i, c_i = x_i^* x \ , \quad \|x\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} |c_i|^2$$

und

$$d = Ax - \lambda x = \sum_{i=1}^{n} c_i(\lambda_i - \lambda) x_i \ ,$$

$$\|d\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} |c_i|^2 |\lambda_i - \lambda|^2 \geq \sum_{i=1}^{n} |c_i|^2 \min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \lambda|^2 = \|x\|_2^2 |\lambda_k - \lambda|^2 \ .$$

□

Im allgemeinen Fall sind Störungsresultate sehr viel verwickelter und ungünstiger.

Satz 6.5.3 *Sei A eine (n,n)-Matrix mit Eigenwerten $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$, und sei ν die maximale Länge der Jordan-Kästchen von A. Sei X eine Matrix, welche A auf Jordan'sche Normalform bringt. Sei $A_\varepsilon = A + \varepsilon F, \ \ 0 \leq \varepsilon \leq 1$. Dann liegen sämtliche Eigenwerte von A_ε in der Vereinigung der Kreise*

$$K_\ell = \{z \in \mathbb{C} : |z - \lambda_\ell| \leq \varepsilon^{1/\nu}(1 + k_\infty(X)) \|F\|_\infty\} \ .$$

Beweis: Es ist $A = XJX^{-1}$. Also haben $A + \varepsilon F, \ J + \varepsilon G$ mit $G = X^{-1}FX$ die gleichen Eigenwerte. Wir behandeln zwei Fälle.

1) J besteht aus genau einem Jordan-Kästchen der Länge $\nu = n$. Sei D die Diagonalmatrix mit der Diagonale $1, \ \varepsilon^{1/\nu}, \ldots, \varepsilon^{(\nu-1)/\nu}$. Dann ist

$$J = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & & & \\ & \lambda & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & & 1 \\ & & & & \lambda \end{pmatrix} \quad , \quad D^{-1}JD = \begin{pmatrix} \lambda & \varepsilon^{1/\nu} & & & \\ & \lambda & \varepsilon^{1/\nu} & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & & \varepsilon^{1/\nu} \\ & & & & \lambda \end{pmatrix} .$$

Die Matrix $D^{-1}(J+\varepsilon G)D$ hat die gleichen Eigenwerte wir $A+\varepsilon F$. Wir wenden den Satz von Gerschgorin auf $D^{-1}(J+\varepsilon G)D$ an. Die Gerschgorin-Kreise haben Mittelpunkt $\lambda + \varepsilon g_{i,i}$ und Radius

$$r_i \leq \varepsilon^{1/\nu} + \varepsilon\varepsilon^{(1-\nu)/\nu} \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |g_{ij}| = \varepsilon^{1/\nu}\left(1 + \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |g_{ij}|\right) .$$

Jeder Eigenwert μ von A_ε liegt in einem dieser Kreise, also

$$|\lambda + \varepsilon g_{ii} - \mu| \leq r_i$$

für ein i. Es folgt

$$\begin{aligned} |\lambda - \mu| &\leq \varepsilon |g_{ii}| + r_i \\ &\leq \varepsilon^{1/\nu}\left(1 + \sum_{j=1}^{n} |g_{ij}|\right) \\ &\leq \varepsilon^{1/\nu}(1 + \|G\|_\infty) \\ &\leq \varepsilon^{1/\nu}(1 + k_\infty(X)\|F\|_\infty) . \end{aligned}$$

2) J besteht aus mehreren Jordan-Kästchen $J_1, \ldots, J_r$. Dann setzt man D aus Diagonalmatrix $D_1, \ldots, D_r$ zusammen und hat dann

$$D^{-1}(J+\varepsilon G)D = \begin{pmatrix} D_1^{-1}J_1D_1 & & \\ & \ddots & \\ & & D_r^{-1}J_rD_r \end{pmatrix} + \varepsilon D^{-1}GD .$$

Anwendung von 1) ergibt die Behauptung.

□

Empfohlenes Buch: J. Werner, Numerische Mathematik 1 + 2, Vieweg 1992, je DM 38,–

Weitere Literatur:

1 Neuere Lehrbücher

- **Deuflhard - Hohmann**: Numerische Mathematik. Eine algorithmisch orientierte Einführung. Walter de Gruyter 1991.
- **Hämmerlin - Hoffmann**: Numerische Mathematik. Springer 1989.
- **Stoer**: Numerische Mathematik I. Springer 1989.
- **Stoer - Bulirsch**: Numerische Mathematik II. Springer 1990.
- **Stummel - Hainer**: Praktische Mathematik. Teubner 1982.
- **Schwarz**: Numerische Mathematik. Teubner 1988.
- **Schaback - Werner, H.**: Numerische Mathematik. Springer 1992.

2 Ältere Lehrbücher

- **Acton**: Numerical Methods that Work. Harper 1970.
- **Björck - Dahlquist**: Numerische Methoden. Oldenbourg 1972.
- **Conte - de Boor**: Elementary Numerical Analysis. McGraw-Hill 1965, 1972.
- **Mennicken - Wagenführer**: Numerische Mathematik 1, 2, 3. Vieweg 1977.
- **Schmeisser - Schirmeier**: Praktische Mathematik. W. de Gruyter 1976.
- **Fröberg**: Introduction to Numerical Analysis. Addison-Wesley 1965.
- **Hamming**: Numerical Methods for Scientists and Engineers. McGraw-Hill, New York 1962.
- **Henrici**: Elements of Numerical Analysis. John Wiley & Sons, Inc., New York 1964.
- **Hildebrand**: Introduction to Numerical Analysis. McGraw-Hill, New York 1956.

- **Stiefel**: Einführung in die Numerische Mathematik. Teubner 1963.
- **Willers**: Methoden der praktischen Analysis. W. de Gruyter 1957.

3 Monographien

- **Beresin - Shidkow**: Numerische Methoden 1, 2. VEB, Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1970.
- **Blum**: Numerical Analysis and Computation. Addison-Wesley & Sons, Inc., New York 1966.
- **Goldstine**: A History of Numerical Analysis. Springer 1977.
- **Hartree**: Numerical Analysis, 2d ed.. Oxford University Press, Fair Lawn, N.J. 1958.
- **Householder**: Principles of Numerical Analysis. McGraw-Hill, New York 1953.
- **Isaacson - Keller**: Analysis of Numerical Methods. John-Wiley & Sons, Inc., New York 1966.
- **Lanczos**: Applied Analysis. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. 1956.
- **Marchuck**: Methods of Numerical Mathematics. Springer 1975.
- **Milne**: Numerical Calculus. Princeton University Press, Princeton, N.J. 1949.
- **Ralston**: A First Course in Numerical Analysis. McGraw-Hill 1965.
- **Young - Gregory**: A Survey of Numerical Mathematics. Addison-Wesley 1972.

4 Programmbibliotheken

- **Press-Flannery-Teukolsky-Vetterling**, Numerical Recipes in **C** (auch FORTRAN, PASCAL erhältlich), Cambridge University Press).
- **IMSL-Bibliothek** (International Mathematical & Statistical Libraries, Inc., Houston).
- **NAG-Bibliothek** (The Numerical Analysis Group Ltd., Oxford).