Fachbereich Mathematik
Prof. Dr. P. Spellucci
Wintersemester 2007/2008

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT

3.12.2007

Numerik des Matrizeneigenwertproblems
Übung 7

Präsenzübung

Ü 19 Es sei $A = A^H$ und $x \neq 0$. Setzen Sie

$$\varrho = R(x;A) \quad \text{und} \quad r = Ax - \varrho x \; .$$

Zeigen Sie:

a) Sind r und x linear abhängig, dann ist x ein Eigenvektor und geben Sie den zugehörigen Eigenwert an.

b) Sind r und x linear unabhängig, dann gilt mit

$$M \stackrel{def}{=} \frac{xr^H + rx^H}{x^H x}$$

1. $$(A - M)x = \varrho x$$

2. $$||M||_2 = \frac{||r||_2}{||x||_2}$$

3. $$\exists \lambda = \lambda(A) : \quad |\lambda - \varrho| \leq \frac{||r||_2}{||x||_2}$$

Ü 20 Sei im Folgenden wiederum A hermitisch. Die `RQI`-Iteration (Rayleigh-Quotient-Iteration) ist definiert durch die iterative Berechnungsvorschrift

1. $\varrho_k = R(x^k;A)$
2. Wenn $A - \varrho_k I$ singulär ist, dann löse

$$(A - \varrho_k I)y_{k+1} = 0$$

und breche die Iteration ab, andernfalls löse

$$(A - \varrho_k I)y_{k+1} = x_k$$

3. $$x_{k+1} = \frac{y_{k+1}}{||y_{k+1}||}$$

Bem.: Man kann die Normierung der Vektoren auch völlig unterlassen und erst bei der Beendigung der Iteration mit einem geeigneten Abbruchkriterium (z.B. $||y_{k+1}|| > ||x_k||/\texttt{eps}$, wobei `eps` die Rechengenauigkeit bezeichnet) vornehmen.

a) Führen Sie zwei Schritte von `RQI` aus für

$$A = \operatorname{diag}(4,2,1) \quad \text{und} \quad x_0 = (0.1, 1, 0.1)^T \ .$$

b) Zeigen Sie: Ist (ϱ_k, x_k) eine von `RQI` erzeugte Folge für die Matrix A, dann ist (ϱ_k, Qx_k) eine von `RQI` erzeugte Folge für $B = QAQ^H$ mit dem Startvektor Qx_0 bei unitärem Q. Welche Konsequenz ziehen Sie daraus für eine Konvergenzanalyse von `RQI`?

Ü 21 Sei weiter wie in Übung 20 (ϱ_k, x_k) die von `RQI` erzeugte Folge bei hermitischem A und es gelte

$$x_k \ \rightarrow \ z \quad \text{mit } z \text{ Eigenvektor von } A\ .$$

Man definiere ϕ_k als Winkel zwischen x_k und z und u_k aus

$$x_k = z\cos(\phi_k) + u_k \sin(\phi_k)$$

mit $u_k^H z = 0$ und $||u_k||_2 = 1$. Man zeige

$$\lambda - \varrho_k = (\lambda - R(u_k; A)) \sin^2(\phi_k)$$

Hausübung

H 19 Sei weiterhin A hermitisch. Zeigen Sie mit Hilfe der Gruppenübungen 20 und 21: konvergiert eine von `RQI` erzeugte Vektorfolge $\{x_k\}$ gegen einen Eigenvektor z von A, dann gilt für den Winkel ϕ_k zwischen z und x_k

$$\exists \lim_{k \to \infty} \left|\frac{\phi_{k+1}}{\phi_k^3}\right| \leq \gamma$$

Hinweis: benutzen Sie insbesondere die Gruppenübung 21 sowie die speziell wählbare Form der Matrix und damit von z.
Bem.: Man kann sogar $\gamma \leq 1$ zeigen.

H 20 Zeigen Sie: Für hermitisches A gilt für `RQI` mit der Bezeichnung

$$r_k = Ax_k - R(x_k; A)x_k$$

daß

$$||r_{k+1}||_2 \leq ||r_k||_2 \ .$$

Hinweis: Benutzen Sie die Optimalitätseigenschaft des Rayleighquotienten und die Tatsache daß $|x^H y| = ||x||_2 ||y||_2$ wenn x und y linear abhängig sind.

H 21 Erstellen Sie für tridiagonales A ein `MATLAB`-Programm zur Implementierung von `RQI` und testen Sie es an den Beispielen aus H15 (Routine `tridigen`). Wählen Sie als Startvektor verschiedene Einheitsvektoren.

Numerik des Matrizeneigenwertproblems
Übung 7, Lösungsvorschlag

Präsenzübung

Ü 19 Es sei $A = A^H$ und $x \neq 0$. Setzen Sie

$$\varrho = R(x;A) \quad \text{und} \quad r = Ax - \varrho x \,.$$

Zeigen Sie:

a) Sind r und x linear abhängig, dann ist x ein Eigenvektor und geben Sie den zugehörigen Eigenwert an.

b) Sind r und x linear unabhängig, dann gilt mit

$$M \stackrel{def}{=} \frac{xr^H + rx^H}{x^H x}$$

1.
$$(A - M)x = \varrho x$$

2.
$$||M||_2 = \frac{||r||_2}{||x||_2}$$

3.
$$\exists \lambda = \lambda(A): \quad |\lambda - \varrho| \leq \frac{||r||_2}{||x||_2}$$

a) Mit $r = \alpha x$ ist wegen $r^H x = 0$ auch $r = 0$ also ist ϱ Eigenwert.

b) Nun ist die oben definierte Matrix M vom Rang 2 und r nicht null. Offensichtlich ist nach Konstruktion der Orthogonalraum zum Unterraum aus r und x invarianter Unterraum von M zum Eigenwert null.

1.

$$\begin{aligned}
(A - M)x &= Ax - \frac{x(r^H x) + rx^H x}{x^H x} \\
&= Ax - r - \frac{x(x^H A x - \bar{\varrho} x^H x)}{x^H x} \\
&= \varrho x - \varrho x + \varrho x \quad \text{weil } A = A^H \\
&= \varrho x
\end{aligned}$$

2. M ist hermitisch, hat also nur reelle Eigenwerte und es ist $||M||_2$ gleich dem Spektralradius von M. Sei μ ein Eigenwert ungleich null zu einem Eigenvektor

$$z = \alpha r + \beta x$$

Nach Definition von M also

$$\mu(\alpha r + \beta x) \;=\; \beta r + \alpha \frac{||r||_2^2}{||x||^2} x \quad (*)$$

Man beachte

$$r^H x \;=\; 0$$

Multiplikation von (*) mit r bzw. x ergibt

$$\begin{array}{rcl} \mu\alpha||r||_2^2 & = & \beta||r||_2^2 \\ \mu\beta||x||_2^2 & = & \alpha||r||_2^2 \\ & \Longleftrightarrow & \\ \mu^2\alpha\beta||r||_2^2||x||_2^2 & = & \alpha\beta||r||_2^4 \end{array}$$

und wegen $\alpha\beta \;\neq\; 0$ die Behauptung :

$$|\mu| \;=\; ||r||_2$$

3. *Diese Behauptung folgt unmittelbar aus Satz 1.1.7.*

Ü 20 Sei im Folgenden wiederum A hermitisch. Die `RQI`-Iteration (Rayleigh-Quotient-Iteration) ist definiert durch die iterative Berechnungsvorschrift

1. $\varrho_k \;=\; R(x^k; A)$
2. Wenn $A - \varrho_k I$ singulär ist, dann löse
$$(A - \varrho_k I)y_{k+1} \;=\; 0$$
und breche die Iteration ab, andernfalls löse
$$(A - \varrho_k I)y_{k+1} \;=\; x_k$$
3. $$x_{k+1} \;=\; \frac{y_{k+1}}{||y_{k+1}||}$$

Bem.: Man kann die Normierung der Vektoren auch völlig unterlassen und erst bei der Beendigung der Iteration mit einem geeigneten Abbruchkriterium (z.B. $||y_{k+1}|| \;>\; ||x_k||/$`eps`, wobei `eps` die Rechengenauigkeit bezeichnet) vornehmen.

a) Führen Sie zwei Schritte von `RQI` aus für

$$A \;=\; \mathrm{diag}(4, 2, 1) \;\; \text{und} \;\; x_0 \;=\; (0.1, 1, 0.1)^T \;.$$

b) Zeigen Sie: Ist (ϱ_k, x_k) eine von `RQI` erzeugte Folge für die Matrix A, dann ist (ϱ_k, Qx_k) eine von `RQI` erzeugte Folge für $B = QAQ^H$ mit dem Startvektor Qx_0 bei unitärem Q. Welche Konsequenz ziehen Sie daraus für eine Konvergenzanalyse von `RQI`?

a)
```
x0=[0.1,1,0.1];
A=[4,2,1];
rho0=sum(A.*(x0.^2))/sum(x0.^2);
r0=norm(A.*x0-rho0*x0);
x1=x0./(A-rho0);
x1=x1/norm(x1);
rho1=sum(A.*(x1.^2));
r1=norm(A.*x1-rho1*x1);
x2=x1./(A-rho1);
x2=x2/norm(x2);
rho2=sum(A.*(x2.^2));
r2=norm(A.*x2-rho2*x2);
format long
[rho0,rho1,rho2]

ans =

   2.00980392156863   1.99999954273551   2.00000000000000

[r0,r1,r2]

ans =

   0.22338746783182   0.00138320467791   0.00000000049782
```

b) Offensichtlich ist

$$x_k^H Q^H B Q x_k \;=\; x_k^H Q^H Q A Q^H Q x_k \;=\; x_k^H A x_k \;=\; \varrho_k$$

und weil

$$(A - \varrho_k I) y_{k+1} \;=\; x_k \;\Leftrightarrow\; (QAQ^H - \varrho QQ^H) Q y_{k+1} \;=\; Q x_k$$

besteht in der Tat der geforderte Zusammenhang zwischen beiden Folgen. Also genügt es, bei der Konvergenzuntersuchung reelle Diagonalmatrizen zugrundezulegen.

Ü 21 Sei weiter wie in Übung 20 (ϱ_k, x_k) die von `RQI` erzeugte Folge bei hermitischem A und es gelte

$$x_k \;\to\; z \quad \text{mit } z \text{ Eigenvektor von } A\,.$$

Man definiere ϕ_k als Winkel zwischen x_k und z und u_k aus

$$x_k \;=\; z\cos(\phi_k) + u_k \sin(\phi_k)$$

mit $u_k^H z \;=\; 0$ und $||u_k||_2 \;=\; 1$. Man zeige

$$\lambda - \varrho_k \;=\; (\lambda - R(u_k; A))\sin^2(\phi_k)$$

Seien $z_2, \ldots, z_n$ die übrigen Eigenvektoren von A mit der üblichen Orthonormierung und den Eigenwerten $\lambda_2, \ldots, \lambda_n$.

$$u_k \;=\; \sum_{i=2}^{n} \mu_{i,k} z_i$$

Dann

$$\begin{aligned}
x_k &= z\cos(\phi_k) + u_k \sin(\phi_k) \;\Leftrightarrow \\
Ax_k &= Az\cos(\phi_k) + Au_k \sin(\phi_k) \;\Leftrightarrow \\
\varrho_k &= (x_k^H)\lambda z\cos(\phi_k) + \sin(\phi_k)(x_k^H)\sum_{i=2}^{n} \mu_{i,k}\lambda_i z_i \;\Leftrightarrow \\
\varrho_k &= \lambda(z\cos(\phi_k) + u_k\sin(\phi_k))^H z\cos(\phi_k) + \sum_{i=2}^{n} |\mu_{i,k}|^2 \lambda_i \sin^2(\phi_k) \;\Leftrightarrow \\
\varrho_k - \lambda &= -\lambda\sin^2(\phi_k) + \sin^2(\phi_k) R(u_k; A)
\end{aligned}$$

wegen der Orthogonalität und Normierung der Vektoren $z, z_2, \ldots, z_n$.

Hausübung

H 19 Sei weiterhin A hermitisch. Zeigen Sie mit Hilfe der Gruppenübungen 20 und 21: konvergiert eine von `RQI` erzeugte Vektorfolge $\{x_k\}$ gegen einen Eigenvektor z von A, dann gilt für den Winkel ϕ_k zwischen z und x_k

$$\exists \lim_{k \to \infty} |\frac{\phi_{k+1}}{\phi_k^3}| \leq \gamma$$

Hinweis: benutzen Sie insbesondere die Gruppenübung 21 sowie die speziell wählbare Form der Matrix und damit von z.
Bem.: Man kann sogar $\gamma \leq 1$ zeigen.

Den trivialen Fall eines finiten Abbruchs der Iteration schliessen wir aus. Wir beginnen mit der Darstellung

$$x_k = z\cos(\phi_k) + u_k \sin(\phi_k)$$

Multiplikation mit $(A - \varrho_k I)^{-1}$ *ergibt, da* z *Eigenvektor zu* λ *ist*

$$y_{k+1} = z\cos(\phi_k)/(\lambda - \varrho_k) + u_{k+1}\sin(\phi_k)||(A - \varrho_k I)^{-1}u_k||$$

wo

$$u_{k+1} = (A - \varrho_k I)^{-1}u_k/||(A - \varrho_k I)^{-1}u_k|| \; .$$

z *ist orthogonal zu* u_{k+1} *und in der* (z, u_{k+1})*–Ebene gilt wie im* $\mathbb{R}^2$ *und wegen* $\angle(y_{k+1}, z) = \angle(x_{k+1}, z)$

$$\begin{aligned}
\tan(\angle(x_{k+1}, z)) &= \frac{\sin(\phi_k)||(A - \varrho_k I)^{-1}u_k||}{\cos(\phi_k)/(\lambda - \varrho_k)} \\
&= (\lambda - \varrho_k)||(A - \varrho_k I)^{-1}u_k||\tan(\phi_k) \\
&= (\lambda - R(u_k; A))||(A - \varrho_k I)^{-1}u_k||\tan(\phi_k)\sin^2(\phi_k) \text{ \textit{wegen Ü21}}
\end{aligned}$$

Wir können wegen Ü20 A *als diagonal ,* z *als den ersten Koordinateneinheitsvektor und* λ *als das erste Diagonalelement von* A *annehmen. Dann wird wegen* $||u_k||_2 = 1$

$$||(A - \varrho_k I)^{-1}u_k||_2 \leq \frac{1}{\min\{|\lambda_j - \lambda_1| \; : \; \lambda_j \neq \lambda_1\}}$$

und natürlich ist

$$|\lambda - \varrho_k| \leq 2||A||_2 \; .$$

Somit

$$\tan(\phi_{k+1}) \leq C\tan(\phi_k)\sin^2(\phi_k)$$

$\phi_k \to 0$ *gehört zu unserer Annahme, also ist für genügend grosses* k

$$\phi_k \leq \tan(\phi_k) \leq 2\tan(\phi_k)$$

und wegen $\sin(x) \leq x$ *für* $x \in [0, \pi/2]$ *folgt*

$$\phi_{k+1} \leq 2C\phi_k^3 \text{ für genügend grosses } k ,$$

womit wir hier fertig sind. Um $2C$ *noch durch 1 zu ersetzen, muss man man die Situation der Konvergenz bzw. Nichtkonvergenz von* $\{u_k\}$ *gegen einen anderen Eigenvektor von* A *betrachten, da* u_{k+1} *aus* u_k *durch einen Wielandtschritt mit den Shift* ϱ_k *entsteht.*

H 20 Zeigen Sie: Für hermitisches A gilt für `RQI` mit der Bezeichnung

$$r_k = Ax_k - R(x_k; A)x_k$$

daß

$$||r_{k+1}||_2 \leq ||r_k||_2 .$$

Hinweis: Benutzen Sie die Optimalitätseigenschaft des Rayleighquotienten und die Tatsache daß $|x^H y| = ||x||_2||y||_2$ wenn x und y linear abhängig sind.

$$\begin{aligned}
||r_{k+1}|| &= ||(A - \varrho_{k+1}I)x_{k+1}|| \text{ nach Def.} \\
&\leq ||(A - \varrho_k I)x_{k+1}|| \text{ wegen der Optimalitätseigenschaft von } \varrho_{k+1} \\
&= |x_k^H(A - \varrho_k I)x_{k+1}| \text{ weil } x_k \text{Vielfaches von } (A - \varrho_k I)x_{k+1} \text{ ist} \\
&\leq ||(A - \varrho_k I)^H x_k||||x_{k+1}|| \text{ nach Cauchy–Schwarz} \\
&= ||r_k|| \text{ weil } ||x_{k+1}|| = 1 \text{ und } A \text{ hermitisch}
\end{aligned}$$

H 21 Erstellen Sie für tridiagonales A ein `MATLAB`-Programm zur Implementierung von `RQI` und testen Sie es an den Beispielen aus H15 (Routine `tridigen`). Wählen Sie als Startvektor verschiedene Einheitsvektoren.

```
[a,b]=tridigen('exam2');
x0=randn(length(a),1);
[lambda,v,resnorm,flag,history,historyend]=rqi(a,b,x0,100);
history(1:historyend,:)

ans =

   1.93761780409377   0.63399966810107
   1.88549438674327   0.95373142812575
   1.89827497173878   0.90103055292369
   1.97354427337964   0.28695600927821
   1.99907279164207   0.01019911656836
   1.99999995883327   0.00000045283408
   2.00000000000000                  0
```

```
[lambda,resnorm,flag]

ans =

     2     0     1

==========================================================
[a,b]=tridigen('exam1');
x0=randn(length(a),1);
[lambda,v,resnorm,flag,history,historyend]=rqi(a,b,x0,100);
history(1:historyend,:)

ans =

   2.14033090058051 -12.04975631085087
 -10.38193387287452   0.65725638417398
 -10.70905956511602  -0.06240065083263
 -10.74613846458944  -0.00009229148036
 -10.74619418281671  -0.00000000014352
 -10.74619418290336  -0.00000000000000
 -10.74619418290336  -0.00000000000000

[lambda,resnorm,flag]

ans =

 -10.74619418290336   0.00000000000000   1.00000000000000
===========================================================
[a,b]=tridigen('exam3');
x0=[zeros(length(a)-1,1);1];
[lambda,v,resnorm,flag,history,historyend]=rqi(a,b,x0,100);
history(1:historyend,:)

ans =

  10.00000000000000   1.00000000000000
  10.24591950611865   0.82219147467535
  10.64052423270489   0.18279604640512
  10.74551654019907   0.00112270628857
  10.74619417001049   0.00000002135522
  10.74619418290336   0.00000000000006
  10.74619418290336   0.00000000000006
```

```
  10.74619418290335   0.00000000000006
  10.74619418290333   0.00000000000003
  10.74619418290332   0.00000000000001
  10.74619418290332   0.00000000000001
  10.74619418290332   0.00000000000002
  10.74619418290332                  0

[lambda,resnorm,flag]

ans =

  10.74619418290332   0.00000000000000   1.00000000000000
============================================================
[a,b]=tridigen('exam4');
x0=randn(length(a),1);
[lambda,v,resnorm,flag,history,historyend]=rqi(a,b,x0,100);
history(1:historyend,:)

ans =

   3.22317257968736   4.34908504621359
   3.57025809793389   3.06235896010213
   3.74586299236517   1.96439816172673
   3.93890993037376   0.50183939039839
   3.99683483476618   0.02633071381016
   3.99999194654497   0.00006703696559
   3.99999999994799   0.00000000043292
   4.00000000000000   0.00000000000000

[lambda,resnorm,flag]

ans =

   4.00000000000000   0.00000000000000   1.00000000000000
```