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

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

7.1.2008

Numerik des Matrizeneigenwertproblems
Übung 10

Präsenzübung

Ü 28 Berechnen Sie den ersten Schritt der Ähnlichkeitstransformation auf Schursche Normalform für die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ -2 & 5 & -1 \\ -2 & -1 & 5 \end{pmatrix}.$$

Hinweis: Ein Eigenvektor von A ist $(1, 2, 2)^T$.

Ü 29 Führen Sie einen Schritt des QR-Verfahrens für die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

mit dem Shift $\mu = 1$ durch.

Ü 30 Zeigen Sie:

a) Die Schur-Normalform einer hermitischen Matrix ist diagonal.

b) Ist A eine obere Dreiecksmatrix und zugleich unitär, dann ist A diagonal mit Diagonalelementen vom Betrag 1.

Hausübung

H 28 Führen Sie einen Schritt des QR-Verfahrens für die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 4 & 0 \\ 4 & 12 & 3 \\ 0 & 3 & 8 \end{pmatrix}$$

mit dem Shift $\mu = 10$ durch und bestimmen Sie eine neue Schätzung für den Eigenwert aus dem letzten Diagonalelement. (Zum Vergleich: $\lambda_2 \approx 8.8432$).

H 29 Sei A eine diagonalisierbare, nichtzerfallende reguläre obere $n \times n$ Hessenbergmatrix (d.h. $\alpha_{i,i-1} \neq 0$) mit genau einem betragskleinsten Eigenwert. Seien ferner:

$$A_0 = A, \qquad A_k = Q_k R_k, \qquad A_{k+1} = R_k Q_k,$$

also A_k die iterierten Matrizen des QR Verfahrens mit dem Shift $\mu_k = 0$ für alle k. Zeigen Sie:

$$\lim_{k\to\infty} (\alpha_k)_{nn-1} = 0, \quad \text{mit } A_k = ((\alpha_k)_{ij})$$

in folgenden Schritten:

a) $\tilde{Q}_k = Q_0 \cdots Q_k, \qquad \tilde{R}_k = R_k \cdots R_0 \quad \Rightarrow \quad A_{k+1} = \tilde{Q}_k^H A \tilde{Q}_k.$

b) $A^{k+1} = \tilde{Q}_k \tilde{R}_k.$

c) Es gibt ein ν_k mit $|\nu_k| = 1$, so daß $\nu_k \tilde{Q}_k e_n = B^{k+1} e_n / ||B^{k+1} e_n||_2$ mit $B = A^{-H}$ und $e_n = (0, ..., 0, 1)^T$.

d) B aus c) erfüllt die Voraussetzungen des v.Mises Verfahrens für $x_0 = e_n$.

e) Zeigen Sie mit Hilfe von $e_{n-1}^T A_k^H e_n$ die geforderte Aussage.

H 30 Zeigen Sie: Sind Q und V beide unitär und sind sowohl

$$Q^H A Q \stackrel{def}{=} H \quad \text{und} \quad V^H A V \stackrel{def}{=} G$$

obere Hessenbergmatrizen, und ist $Qe_1 = Ve_1$, dann gilt folgendes: Sei k der kleinste Index mit

$$h_{k+1,k} = 0 \quad \text{mit } k < n$$

bzw. $k = n$. Dann gilt

$$Qe_i = \theta_i V e_i \quad \text{und} \quad |h_{i,i-1}| = |g_{i,i-1}| \quad \text{für } i = 2, \ldots, k$$

mit $|\theta_i| = 1$. Ist $k < n$, dann ist auch $g_{k+1,k} = 0$.
Hinweis: Zeigen Sie $GW = WH$ mit unitärem W und zeigen Sie, daß W diagonal sein muss. Betrachten Sie dazu die Spalten 1 bis $k-1$ von GW.
Bem.: Dieser Satz wird benötigt, um die implizite Shift-Technik beim QR-Verfahren zu begründen und den konjugiert-komplexen Doppelshift im Reellen ausführen zu können.

Numerik des Matrizeneigenwertproblems
Übung 10, Lösungsvorschlag

Präsenzübung

Ü 28 Berechnen Sie den ersten Schritt der Ähnlichkeitstransformation auf SCHURsche Normalform für die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ -2 & 5 & -1 \\ -2 & -1 & 5 \end{pmatrix}.$$

Hinweis: Ein Eigenvektor von A ist $(1, 2, 2)^T$.

Mit dem gegebenen Eigenvektor $v = (1, 2, 2)^T$ wird die erste HOUSEHOLDER-*Matrix bestimmt, als*

$$U_1 = I - \beta_1 u_1 u_1^T$$

wobei

$$u_1 = \begin{pmatrix} sign(v_1)(|v_1| + \|v\|_2) \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

und folglich $\beta_1 = \frac{2}{u_1^T u_1} = \frac{1}{12}$ ist. Es wird natürlich vermieden die Housholdermatrix explizit aufzustellen, vielmehr berechnen wir die Matrix $A_1 = U_1 A U_1$ spaltenweise, bzw. zeilenweise.

Dazu zuerst $\tilde{A}_1 = U_1 A$:

$$u_1^T A = (4, 2, 2) \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ -2 & 5 & -1 \\ -2 & -1 & 5 \end{pmatrix} = (-12, 12, 12)$$

$$\tilde{A}_1 = A - \beta_1 u_1 u_1^T A = A - \begin{pmatrix} -4 & 4 & 4 \\ -2 & 2 & 2 \\ -2 & 2 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & -3 & -3 \\ 0 & 3 & -3 \\ 0 & -3 & 3 \end{pmatrix}$$

und jetzt $A_1 = \tilde{A}_1 U_1$:

$$\tilde{A}_1 u_1 = 0$$
$$\Longrightarrow A_1 = \tilde{A}_1$$

und damit ist drei der Eigenwert zum angegebenen Eigenvektor.

Ü 29 Führen Sie einen Schritt des QR-Verfahrens für die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

mit dem Shift $\mu = 1$ durch.

Die Matrix $A - \mu I$ lautet

$$\widetilde{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Von dieser Matrix muß eine QR-Zerlegung berechnet werden. Der erste Schritt der Householder–Transformation mit dem Vektor:

$$u_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\widetilde{A}_1 = U_1\widetilde{A} = \widetilde{A} - 2\frac{u_1{u_1}^T}{{u_1}^T u_1}\widetilde{A} = \widetilde{A} - \frac{2}{2}u_1(1,0,1) = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Der zweite QR-Schritt mit dem Vektor u_2

$$u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1-\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$R = U_2\widetilde{A}_1 = \widetilde{A}_1 - 2\frac{u_2{u_2}^T}{{u_2}^T u_2}\widetilde{A}_1 = \widetilde{A}_1 - \frac{2}{4+2\sqrt{2}}u_2(0, 2+\sqrt{2}, 0) = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Um aus dieser Zerlegung eine Ähnlichkeitstransformation zu machen, müssen die Householdermatrizen U_1 und U_2 von rechts an R multipliziert und um $-\mu$ geshiftet werden

$$A_1 = RQ + \mu I = RU_1U_2 + \mu I.$$

$$R_1 = RU_1 = R - \frac{2}{u_1^T u_1}Ru_1u_1^T = R - \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} u_1^T = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 \\ -\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$R_2 = R_1U_2 = R_1 - \frac{2}{u_2^T u_2}R_1u_2u_2^T = R_1 - \frac{1}{2+\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -2-\sqrt{2} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} u_2^T = \begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Folglich ist

$$A_1 = \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ -\sqrt{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ein Eigenwert lautet also 1.

Ü 30 Zeigen Sie:

a) Die Schur-Normalform einer hermitischen Matrix ist diagonal.

b) Ist A eine obere Dreiecksmatrix und zugleich unitär, dann ist A diagonal mit Diagonalelementen vom Betrag 1.

a) Nach Annahme ist

$$R = Q^H AQ = Q^H A^H Q = (Q^H AQ)^H = R^H \quad (*)$$

und zugleich R obere Dreiecksmatrix. Also müssen wegen

$$r_{i,j} = \bar{r}_{j,i} = 0 \text{ für } j < i$$

nach (*) alle Ausserdiagonalelemente von R null sein.

b) Wegen

$$QQ^H = Q^H Q = I$$

für jede unitäre Matrix müssen sowohl die Zeilen als auch die Spalten einer unitären Matrix die Länge eins haben. Wir gehen nun induktiv über die Spalten und Zeilen vor: Da A obere Dreiecksmatrix ist und die erste Spalte die Länge eins hat, muss

$$|a_{1,1}| = 1$$

gelten. Damit die erste Zeile von A nun auch die Länge eins hat, müssen die übrigen Elemente der Zeile eins alle null sein:

$$a_{1,2} = \ldots = a_{1,n} = 0$$

Nun ist das einzige Nichtnullelement in Spalte 2 von A das Diagonalelement $a_{2,2}$ und daher

$$|a_{2,2}| = 1$$

usw.

Hausübung

H 28 Führen Sie einen Schritt des QR-Verfahrens für die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 4 & 0 \\ 4 & 12 & 3 \\ 0 & 3 & 8 \end{pmatrix}$$

mit dem Shift $\mu = 10$ durch und bestimmen Sie eine neue Schätzung für den Eigenwert aus dem letzten Diagonalelement. (Zum Vergleich: $\lambda_2 \approx 8.8432$).

Die Matrix $A - \mu I$ lautet

$$\widetilde{A} = \begin{pmatrix} 0 & 4 & 0 \\ 4 & 2 & 3 \\ 0 & 3 & -2 \end{pmatrix}.$$

Von dieser Matrix muß eine QR-Zerlegung berechnet werden. Der erste Schritt der Householder–Transformation mit dem Vektor:

$$u_1 = \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\widetilde{A}_1 = U_1 \widetilde{A} = \widetilde{A} - 2\frac{u_1 {u_1}^T}{{u_1}^T u_1}\widetilde{A} = \widetilde{A} - \frac{2}{32} \cdot u_1 \cdot (16, 24, 12) = \begin{pmatrix} -4 & -2 & -3 \\ 0 & -4 & 0 \\ 0 & 3 & -2 \end{pmatrix}.$$

Der zweite QR-Schritt mit dem Vektor u_2

$$u_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -9 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$R = U_2 \widetilde{A}_1 = \widetilde{A}_1 - 2\frac{u_2 {u_2}^T}{{u_2}^T u_2}\widetilde{A}_1 = \widetilde{A}_1 - \frac{2}{81+9} \cdot u_2 \cdot (0, 45, -6) = \begin{pmatrix} -4 & -2 & -3 \\ 0 & 5 & -\frac{6}{5} \\ 0 & 0 & -\frac{8}{5} \end{pmatrix}.$$

Um aus dieser Zerlegung eine Ähnlichkeitstransformation zu machen, müssen die Householdermatrizen U_1 und U_2 von rechts an R multipliziert und um $-\mu I$ geshiftet werden

$$A_1 = RQ + \mu I = RU_1U_2 + \mu I.$$

$$R_1 = RU_1 = R - \frac{2}{u_1^T u_1} R u_1 u_1^T = R - \frac{1}{16} \begin{pmatrix} -24 \\ 20 \\ 0 \end{pmatrix} u_1^T = \begin{pmatrix} 2 & 4 & -3 \\ -5 & 0 & -\frac{6}{5} \\ 0 & 0 & -\frac{8}{5} \end{pmatrix}.$$

$$R_2 = R_1 U_2 = R_1 - \frac{2}{u_2^T u_2} R_1 u_2 u_2^T = R_1 - \frac{1}{45} \begin{pmatrix} -45 \\ -\frac{18}{5} \\ -\frac{24}{5} \end{pmatrix} u_2^T = \begin{pmatrix} 2 & -5 & 0 \\ -5 & -\frac{18}{25} & -\frac{24}{25} \\ 0 & -\frac{24}{25} & -\frac{32}{25} \end{pmatrix}.$$

Folglich ist

$$A_1 = \begin{pmatrix} 12 & -5 & 0 \\ -5 & 9.28 & -0.96 \\ 0 & -0.96 & 8.72 \end{pmatrix}.$$

Die nächste EW-Schätzung ergibt sich also als 8.72. *Bem.: Der Wilkinsonshift hätte hier den Wert 8, wäre also hier noch ungünstiger als der Rayleightshift.*

H 29 Sei A eine diagonalisierbare, nichtzerfallende reguläre obere $n \times n$ Hessenbergmatrix (d.h. $\alpha_{i,i-1} \neq 0$) mit genau einem betragskleinsten Eigenwert. Seien ferner:

$$A_0 = A, \qquad A_k = Q_k R_k, \qquad A_{k+1} = R_k Q_k,$$

also A_k die iterierten Matrizen des QR Verfahrens mit dem Shift $\mu_k = 0$ für alle k. Zeigen Sie:

$$\lim_{k\to\infty} (\alpha_k)_{nn-1} = 0, \quad \text{mit } A_k = ((\alpha_k)_{ij})$$

in folgenden Schritten:

a) $\tilde{Q}_k = Q_0 \cdots Q_k, \qquad \tilde{R}_k = R_k \cdots R_0 \quad \Rightarrow \quad A_{k+1} = \tilde{Q}_k^H A \tilde{Q}_k.$

b) $A^{k+1} = \tilde{Q}_k \tilde{R}_k.$

c) Es gibt ein ν_k mit $|\nu_k| = 1$, so daß $\nu_k \tilde{Q}_k e_n = B^{k+1} e_n / ||B^{k+1} e_n||_2$ mit $B = A^{-H}$ und $e_n = (0, ..., 0, 1)^T$.

d) B aus c) erfüllt die Voraussetzungen des v.Mises Verfahrens für $x_0 = e_n$.

e) Zeigen Sie mit Hilfe von $e_{n-1}^T A_k^H e_n$ die geforderte Aussage.

a) $A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^H A_k Q_k = Q_k^H R_{k-1} Q_{k-1} Q_k = ... = \tilde{Q}_k^H A \tilde{Q}_k.$

b) $A^{k+1} = (Q_0 R_0)^{k+1} = Q_0 A_1^k R_0 = Q_0 (Q_1 R_1)^k R_0 = \tilde{Q}_1 A_2^{k-1} \tilde{R}_1 = ... = \tilde{Q}_k \tilde{R}_k.$

c) $A^{k+1} = \tilde{Q}_k \tilde{R}_k \quad \Rightarrow \quad \left(A^{-H}\right)^{k+1} e_n = \tilde{Q}_k \tilde{R}_k^{-H} e_n = \left(\overline{(\rho_k)_{nn}}\right)^{-1} \tilde{Q}_k e_n,$

wobei $\tilde{R}_k = ((\rho_k)_{ij})$ *eine obere nichtsinguläre Dreiecksmatrix ist. Es kann dann*

$$\nu_k = |(\rho_k)_{nn}| / \overline{(\rho_k)_{nn}}$$

gewählt werden.

d) *A diagonalähnlich $\Rightarrow$ B diagonalähnlich.*

Seien $0 < |\lambda_1| < |\lambda_2| \leq ... \leq |\lambda_n|$ *die Eigenwerte von A, so gibt es ein Linkseigenvektorsystem* $\{v_i\}$ *und ein Rechtseigenvektorsystem* $\{u_i\}$ *von B jeweils bestehend aus linear unabhängigen Vektoren mit* $v_i^H u_j = \delta_{ij}$ *sowie:*

$$v_i^H B = \frac{1}{\bar{\lambda}_i} v_i^H \qquad B u_i = \frac{1}{\bar{\lambda}_i} u_i.$$

Setzen wir $x_0 = \sum_{i=1}^n \xi_i u_i$, *so müssen wir* $\xi_1 \neq 0$ *zeigen. Wegen*

$$v_1^H x_0 = \sum_{i=1}^n \xi_i v_1^H u_i = \xi_1,$$

darf x_0 *nicht auf* v_1 *senkrecht stehen. Sei etwa* $v_1^H e_n = 0$, *dann folgt* $(v_1)_n = 0$. *Weiter gilt:*

$$v_1^H B = \frac{1}{\bar{\lambda}_1} v_1^H \;\Rightarrow\; v_1^H A^{-H} = \frac{1}{\bar{\lambda}_1} v_1^H \;\Rightarrow\; v_1^H A^H = \bar{\lambda}_1 v_1^H,$$

d.h.

$$0 = \bar{\lambda}_1 v_1^H e_n = v_1^H A^H e_n = \overline{(v_1)_{n-1}}\,\overline{\alpha_{nn-1}}.$$

Wegen $\alpha_{nn-1} \neq 0$ *folgt* $(v_1)_{n-1} = 0$. *Durch Induktion erhalten wir schließlich* $v_1 = 0$ *im Widerspruch. (Hier geht die Bedingung 'nichtzerfallend' ein.)*

e) *Die Eigenwerte von* B *sind* $1/\bar{\lambda}_1, ..., 1/\bar{\lambda}_n$ *mit*

$$\frac{1}{|\bar{\lambda}_1|} > \frac{1}{|\bar{\lambda}_2|} \geq ... \geq \frac{1}{|\bar{\lambda}_n|},$$

und die Folge $x_{k+1} = B^{k+1} e_n$ *konvergiert nach Teil d) gegen ein Vielfaches von* u_1 *mit*

$$x_k = \xi_1 \left(\frac{1}{\bar{\lambda}_1}\right)^k \left(u_1 + \mathcal{O}\left|\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right|^k\right).$$

Mit $\theta_k = (\nu_k ||u_1 + \mathcal{O}(|\lambda_1/\lambda_2|^k)||_2)^{-1}$ *und* $||\tilde{Q}_k^H e_{n-1}||_2 = 1$ *erhalten wir mit Hilfe von a) und c)*

$$\begin{aligned} e_{n-1}^T A_{k+1}^H e_n &= e_{n-1}^T \tilde{Q}_k^H A^H \tilde{Q}_k e_n = e_{n-1}^T \tilde{Q}_k^H B^{-1} \theta_k \left(u_1 + \mathcal{O}\left|\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right|^k\right) \\ &= \theta_k \bar{\lambda}_1 e_{n-1}^T \tilde{Q}_k^H u_1 + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right|^k\right). \end{aligned}$$

Weil

$$\theta u_1 = \Theta_k \tilde{Q}_k e_n + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_1}{\lambda_2}\right|^k\right) \text{ mit } |\Theta_k| = 1$$

ist, konvergiert $e_{n-1}^T A_k^H e_n$ *gegen Null.*

H 30 Zeigen Sie: Sind Q und V beide unitär und sind sowohl

$$Q^H A Q \overset{def}{=} H \quad \text{und} \quad V^H A V \overset{def}{=} G$$

obere Hessenbergmatrizen, und ist $Qe_1 = Ve_1$, dann gilt folgendes: Sei k der kleinste Index mit

$$h_{k+1,k} = 0 \quad \text{mit } k < n$$

bzw. $k = n$. Dann gilt

$$Qe_i = \theta_i V e_i \quad \text{und} \quad |h_{i,i-1}| = |g_{i,i-1}| \quad \text{für } i = 2, \dots, k$$

mit $|\theta_i| = 1$. Ist $k < n$, dann ist auch $g_{k+1,k} = 0$.
Hinweis: Zeigen Sie $GW = WH$ mit unitärem W und zeigen Sie, daß W diagonal sein muss. Betrachten Sie dazu die Spalten 1 bis $k-1$ von GW.
Bem.: Dieser Satz wird benötigt, um die implizite Shift-Technik beim QR-Verfahren zu begründen und den konjugiert-komplexen Doppelshift im Reellen ausführen zu können.

Nach Annahme ist

$$A = VGV^H = QHQ^H$$

also

$$G = V^H QHQ^H V$$

also mit $W = V^H Q$

$$GW = WH .$$

Wie üblich bezeichne hier und im Folgenden w_i *die* $i-$*te Spalte von* W, *und analog für* Q *und* V . *Wir betrachten nun die Spalten 1 bis* $k-1$ *von* GW. *Es ist für* $i = 2, \dots, k$

$$GWe_{i-1} = Gw_{i-1} = \sum_{j=1}^{i} h_{j,i-1} w_j$$

oder

$$h_{i,i-1} w_i = Gw_{i-1} - \sum_{j=1}^{i-1} h_{j,i-1} w_j .$$

Nach Annahme $q_1 = v_1$ *ist* $w_1 = e_1$ *also hat* w_2 *höchstens die Elemente 1 und 2 ungleich null (da* G *obere Hessenbergmatrix ist) , und entsprechend für* $i = 3$ w_3 *nur die ersten drei Elemente usw., d.h. die Matrix aus den Spalten* $w_1, \dots, w_k$ *hat obere Dreiecksgestalt. Weil aber* W *unitär ist, sind die* w_i *Einheitsvektoren, multipliziert mit komplexen Zahlen vom Betrag eins, im Reellen also* ± 1. *Wegen*

$$w_j = V^H q_j \quad \text{und} \quad h_{i,i-1} = w_i^H G w_{i-1}$$

ist also

$$v_j = \theta_j q_j \quad \text{mit} \quad |\theta_j| = 1$$

und

$$|h_{i,i-1}| = |q_i^H A q_{i-1}| = |v_i^H A v_{i-1}| = |g_{i,i-1}|$$

Wenn $k < n$ gilt, dann ist auch noch

$$\begin{aligned}
0 = h_{k+1,k} &= e_{k+1}^T \sum_{i=1}^{k+1} h_{i,k} e_i \\
&= e_{k+1}^T \sum_{i=1}^{k+1} h_{i,k} e_i \theta_i \\
&= e_{k+1}^T \sum_{i=1}^{k+1} h_{i,k} w_i \;=\; e_{k+1}^T W H e_k \\
&= e_{k+1}^T G W e_k \;=\; e_{k+1}^T G e_k \theta_k \\
&= g_{k+1,k} \theta_k
\end{aligned}$$

mit $|\theta_k| = 1.$