Numerisches Programmieren (IN0019)

Frank R. Schmidt

Winter Semester 2016/2017

9. Symmetrisches Eigenwertproblem

Eigenwert-Problem

Verallgemeinerte Fourier-Reihe

Das Berechnen von Eigenwerten wird bei viele praktische Anwendungen vorausgesetzt, z.B. bei der Verallgemeinerung der Fourier-Analyse.

Wir haben bereits die Vorteile der Fourier-Reihe gesehen. Ein wesentlicher Bestandteil ist die Orthogonalbasis

$$c_n(x) := \cos(n \cdot x) \qquad s_n(x) := \sin(n \cdot x)$$

Diese Funktionen sind aber nur auf $\mathbb{R}$ definiert. Um die Fourier-Reihe zu verallgemeinern, sollte man diese Funktionen eindeutiger charakterisieren.

Interessanterweise erfüllen die Funktionen folgende Gleichungen

$$c_n'' = -n^2 c_n \qquad s_n'' = -n^2 s_n,$$

Ableitungen als Lineare Abbildungen

Wir hatten bereits gesehen, dass man die Funktionen c_n und s_n als Elemente des Vektorraums $C^0([-\pi;\pi])$ ansehen kann.

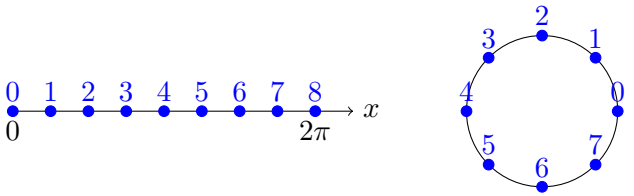
Weiter haben wir gesehen, dass man das Integral als lineare Abbildung $\int: C^0([-\pi;\pi]) \to \mathbb{R}$ interpretieren kann.

Man kann aber auch Ableitungen als lineare Abbildungen verstehen

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2}: C^\infty([-\pi;\pi]) &\to C^\infty([-\pi;\pi]) \\ f &\mapsto f''\end{aligned}$$

Damit kann man c_n und s_n als **Eigenfunktionen** zu den **Eigenwerten** $-n^2$ von der **linearen Abbildung** $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ interpretieren.

Diskretisierung periodischer Funktionen



Bei der Fourier-Reihe betrachtet man **periodische Funktionen** $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

$$f(x + 2\pi) = f(x)$$

Solche Funktionen kann man sich auch als Funktionen $f : \mathbb{S}^1 \to \mathbb{R}$ vorstellen, wobei $\mathbb{S}^1$ den Kreisrand beschreibt:

$$\mathbb{S}^1 = \{x \in \mathbb{R}^2 | \, \|x\| = 1\}$$

Diskretisiert man f äquidistant, erhält man $v = (v_0, \ldots, v_{n-1}) \in \mathbb{R}^n$.

Diskretisierung der 2. Ableitung

Da f äquidistant diskretisiert ist, ist der Abstand zwischen zwei Stellen

$$h = \frac{2\pi}{n}$$

Die erste Ableitung diskretisieren wir wie folgt ($x_i = i \cdot h$)

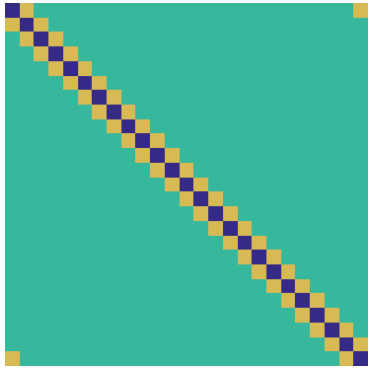
$$f'\left(x_i + \frac{h}{2}\right) \approx \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h} = \frac{v_{i+1} - v_i}{h}$$

Für die zweite Ableitung gilt nun

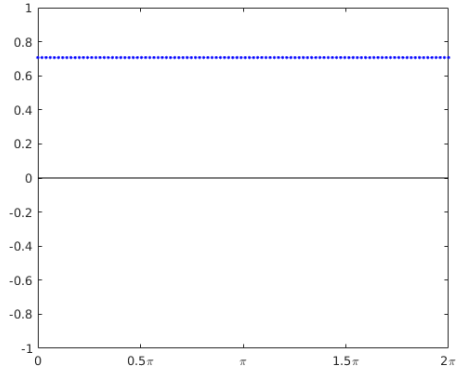
$$f''(x_i) \approx \frac{f'\left(x_i + \frac{h}{2}\right) - f'\left(x_i - \frac{h}{2}\right)}{h} = \frac{v_{i-1} - 2v_i + v_{i+1}}{h^2} =: D_2 \cdot v$$

wobei $i - 1$ und $i + 1$ modulo n berechnet wird.

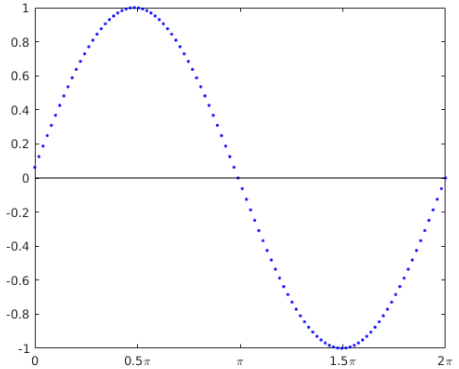
Eigenfunktionen (Bsp.)



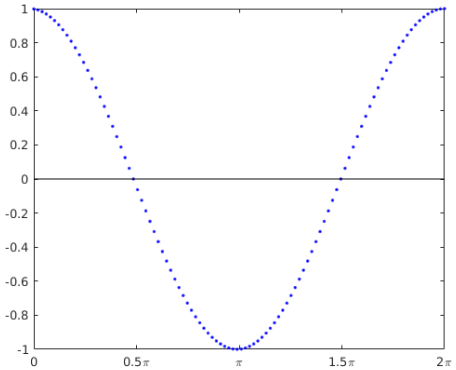
Matrix D_2



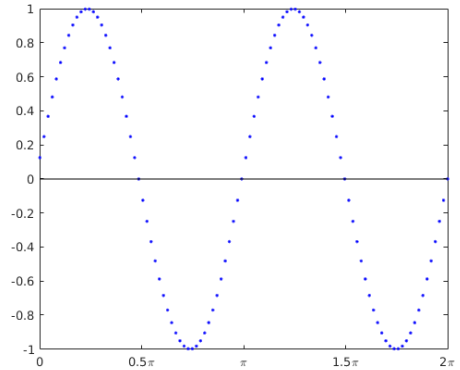
Eigenwert $\lambda = 0$



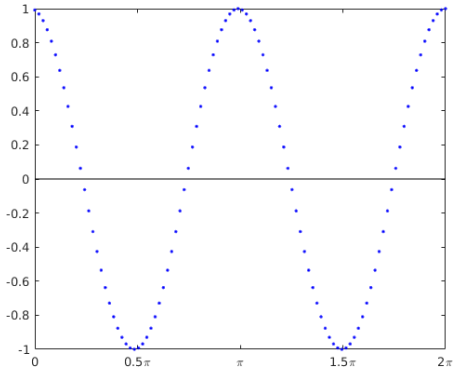
Eigenwert $\lambda = -1$



Eigenwert $\lambda = -1$



Eigenwert $\lambda = -4$



Eigenwert $\lambda = -4$

Eigenwerte (Wdh.)

Ein Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ heißt **Eigenvektor** zum **Eigenwert** $\lambda \in \mathbb{R}$ einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, wenn gilt:

$$A \cdot x = \lambda \cdot x \qquad (x \neq 0),$$

d.h. die Richtung x beschreibt die **Fixgerade** der Abbildung $x \mapsto A \cdot x$.

Daher ist $x \neq 0$ eine Lösung des Gleichungssystems

$$(A - \lambda I) \cdot x = 0.$$

Somit is $A - \lambda I$ eine singuläre Matrix und es gilt

$$p_A(\lambda) = 0 \qquad p_A(t) := \det(A - t \cdot I)$$

Das Polynom p_A nennt man das **charakteristische Polynom bzgl.** A.

Nullstellen von Polynomen

Das Eigenwertproblem ist also äquivalent zum Berechnen von Nullstellen des charakteristischen Polynoms.

Abel bewies 1824, dass die Nullstellen eines Polynoms p vom Grad $\deg(p) > 4$ im Allgemeinen nicht durch Elementaroperationen (Addition, Multiplikation, Wurzelziehen) darstellbar sind. Daher lösen wir das Eigenwertproblem **iterativ**.

Man könnte das **charakteristische Polynom** berechnen und die Nullstellen mit Hilfe des **Newton-Verfahrens** finden. Das ist aber oft sehr instabil.

So besitzt das Polynom

$$p_\varepsilon(t) = (t-1) \cdot \ldots \cdot (t-20) - \varepsilon \cdot t^{19}$$

für $\varepsilon = 0$ die ganzzahligen Nullstellen $1, \ldots, 20$
und für $\varepsilon = 2^{-23}$ insgesamt 10 komplexe Nullstellen ($\Im \in [0.6; 2.0]$).

Lösen des Eigenwertproblems

Möchte man also die Eigenwerte der Diagonalmatrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 20 \end{pmatrix}$$

berechnen, reicht es, diese Informationen **aus der Diagonalen abzulesen**, anstatt das numerisch instabile charakteristische Polynom aufzustellen und zu lösen.

Es ist also sinnvoller, für das Eigenwertproblem direkt mit A zu arbeiten.

Im Folgenden sei eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gegeben und wir sind auf der Suche nach einem Eigenwert $\lambda \in \mathbb{R}$. Um dieses Problem eindeutig zu beschreiben, gehen wir davon aus, dass λ eine einfache Nullstelle von p_A ist und eindeutig beschreibbar ist (z.B. kleinster Eigenwert, größter Eigenwert, 42ter Eigenwert).

Beschreibung des Eigenwertproblems

Die **absolute Kondition eines Problems** ist durch die Ableitung bestimmt.

Wir nehmen an, dass die Matrix A durch eine Matrix $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gestört wird:

$$A(t) = A + t \cdot C.$$

Damit erhalten wir eine Eigenwertsfunktion $\lambda(t)$ und eine Eigenvektorsfunktion $x(t)$, so dass Folgendes gilt:

$$A(t) \cdot x(t) = \lambda(t) \cdot x(t)$$

Um die Notation zu vereinfachen, schreiben wir

$$\lambda_0 := \lambda(0) \qquad\qquad x_0 := x(0)$$

Partielle Ableitung des EW-Problems

Da $p_{A^\top} = p_A$, ist λ_0 auch ein Eigenwert der Matrix $A^\top$. Es sei nun y_0 ein Eigenvektor von $A^\top$ zum Eigenwert λ_0.

Damit erhalten wir

$$\begin{aligned} 0 &= \left\langle \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} A(t)x(t) - \lambda(t)x(t)\Big|_{t=0}, y_0 \right\rangle \\ &= \big\langle Cx_0 + Ax'(0) - \lambda'(0)x_0 - \lambda_0 x'(0), y_0 \big\rangle \\ &= \big\langle Cx_0 - \lambda'(0)x_0, y_0 \big\rangle + \underbrace{\big\langle Ax'(0) - \lambda_0 x'(0), y_0 \big\rangle}_{=0} \end{aligned}$$

Insgesamt erhalten wir also

$$\lambda'(0) = \frac{\langle Cx_0, y_0 \rangle}{\langle x_0, y_0 \rangle}.$$

Absolute Kondition des EW-Problems

Betrachten wir nun das Eigenwertproblem als Funktion $\lambda\colon \mathbb{R}^{n\times n} \to \mathbb{R}$. Dann ist die absolute Kondition gerade:

$$\kappa_{\text{abs}} = \limsup_{C\to 0} \frac{|\lambda(A+C)-\lambda(A)|}{\|C\|_2} = \limsup_{C\neq 0} \frac{\frac{\langle Cx_0, y_0\rangle}{\langle x_0, y_0\rangle}}{\|C\|_2}$$

Es gilt (für $C = y_0 \otimes x_0$ gilt Gleichheit)

$$|\langle Cx_0, y_0\rangle| \leqslant \|Cx_0\|\,\|y_0\| \leqslant \|C\|_2\,\|x_0\|\,\|y_0\|$$

und wir erhalten somit

$$\kappa_{\text{abs}} = \frac{1}{|\cos(\measuredangle(x_0, y_0))|}.$$

Symmetrisches Eigenwert-Problem

Ist A symmetrisch, so ist $x_0 = y_0$ und wir erhalten für die absolute Kondition

$$\kappa_{\text{abs}} = \frac{1}{\cos\left(\measuredangle\left(x_0, x_0\right)\right)} = 1$$

Für die relative Kondition gilt dann

$$\kappa = \frac{\|A\|_2}{|\lambda_0|}.$$

Für nicht-symmetrische Matrizen kann die Kondition sehr groß werden. Für $A = \left(\begin{smallmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{smallmatrix}\right)$ und $\tilde{A} = \left(\begin{smallmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon & 1 \end{smallmatrix}\right)$ gilt $\lambda_1 = 1$ und $\tilde{\lambda}_{1,2} = 1 \pm \sqrt{\varepsilon}$ und somit

$$\kappa_{\text{abs}} \geqslant \frac{|\pm\sqrt{\varepsilon}|}{\left\|\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \varepsilon & 0 \end{pmatrix}\right\|_2} = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\varepsilon} = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \to \infty \qquad \text{für } \varepsilon \to 0$$

Vektor-Iteration

Es sei eine symmetrische Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gegeben.
Weiter besitze A die Eigenwerte $0 < |\lambda_1| < \ldots < |\lambda_n|$ und die dazu gehörigen normierten Eigenvektoren $v_1, \ldots, v_n \in \mathbb{R}^n$.

Betrachten wir nun die Folge der **Vektor-Iteration (eng. Power Method)**

$$x_0 \in \mathbb{R}^n, \|x_0\| = 1 \qquad x_{k+1} = \frac{Ax_k}{\|Ax_k\|}$$

Alle Vektoren x_k lassen sich wie folgt darstellen:

$$x_k = \sum_{i=1}^{n} \alpha_{k,i} v_i$$

Im Folgenden gehen wir davon aus, dass $\forall i : \alpha_{0,i} \neq 0$ gilt.

Als Nächstes werden wir uns die Folgen $\alpha_{k,i}$ ansehen.
Insbesondere sind wir an $\lim_{k \to \infty} \alpha_{k,i}$ für jedes $i = 1, \ldots, n$ interessiert.

Konvergenz (Vektor-Iteration)

Es gilt nun

$$Ax_k = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \alpha_{k,i} v_i \qquad \Rightarrow \qquad \alpha_{k+1,i} = \frac{\lambda_i}{\sqrt{\sum_{j=1}^{n} \lambda_j^2 \alpha_{k,j}^2}} \alpha_{k,i} \neq 0$$

Für $i < n$ ergibt sich

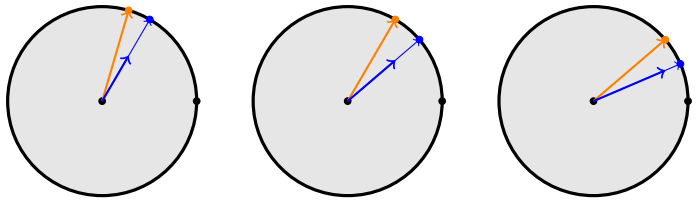
$$\frac{\alpha_{k+1,i}}{\alpha_{k+1,n}} = \underbrace{\frac{\lambda_i}{\lambda_n}}_{<1} \frac{\alpha_{k,i}}{\alpha_{k,n}}$$

Damit erhalten wir insgesamt

$$\begin{aligned} \lim_{k\to\infty} \alpha_{k,i} &= 0 && i < n \\ \lim_{k\to\infty} \alpha_{k,n} &= \pm 1 \\ \lim_{k\to\infty} x_k &= \pm v_n \end{aligned}$$

Vektor-Iteration (Bsp.)

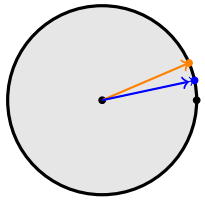
Betrachten wir die Matrix $A = \left(\begin{smallmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{smallmatrix}\right)$ und den Startvektor $x_0 = \left(\begin{smallmatrix} 0.28 \\ 0.96 \end{smallmatrix}\right)$:



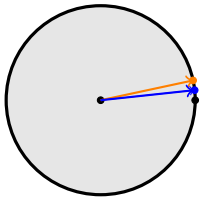
1. Iteration

2. Iteration

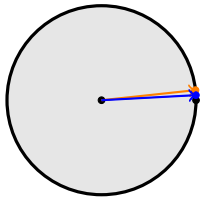
3. Iteration



4. Iteration



5. Iteration



6. Iteration

Berechnung aller Eigenvektoren

Die Vektor-Iteration konvergiert gegen den **größten Eigenvektor**, falls für den Startwert x_0 Folgendes gilt:

$$x_0 = \sum_{i=1}^{n} \alpha_{0,i} v_i \qquad \forall i : \alpha_{0,i} \neq 0$$

Wenn einige $\alpha_{0,i} = 0$ sind, konvergiert die Vektor-Iteration gegen den größten Eigenvektor v_i, für den $\alpha_{0,i} \neq 0$ gilt.

Da Eigenvektoren symmetrischer Matrizen **orthogonal** zu einander sind, kann man die Vekoriteration **mehrmals durchführen**, indem man nur solche Vektoren zulässt, die senkrecht auf **bereits gefundenen** Eigenvektoren stehen.

Wähle einen **zufälligen Vektor** x_0, der senkrecht auf $v_1, \ldots, v_\nu$ steht und führe die Vektor-Iteration mit x_0 als **Startwert** durch.
Damit können iterativ **alle** Eigenvektoren gefunden werden.

Zusammenfassung (Vektor-Iteration)

Die Vektor-Iteration ist einfach zu implementieren, da sie nur **Matrix-Vektor-Multiplikation** und **Vektor-Normierung** benutzt.

Beginnt man mit einem zufälligen Vektor x_0, konvergiert die Iterationsfolge $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ zu einem Eigenvektor.

In den meisten Fällen ist dieser Eigenvektor v_i ein Eigenvektor zum größten Eigenwert λ_n.

Ist die Matrix A symmetrisch sind die Eigenvektoren orthogonal und die Vektor-Iteration kann benutzt werden, um nacheinander alle Eigenvektoren zu berechnen.

Dieses Verfahren kann numerisch instabil werden, da Differenzen benutzt werden, die zu Auslöschungen führen können.

Inverse Vektor-Iteration

Wenn man nur an einem Eigenwert λ interessiert ist, für den man bereits eine gute Schätzung $\tilde{\lambda}$ besitzt, macht es wenig Sinn, die Vektor-Iteration für alle Eigenvektoren durchzuführen.

Stattdessen, kann man das Problem so umformulieren, dass der gesuchte Eigenvektor v_i der größte Eigenvektor einer anderen Matrix ist.

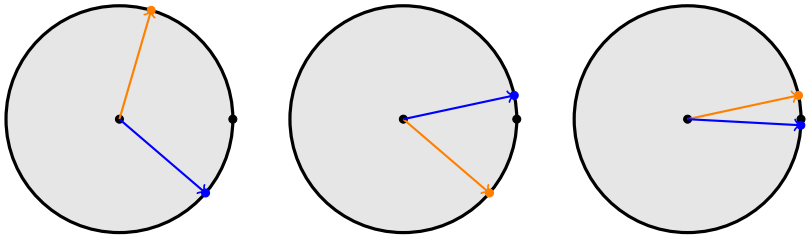
Dies wird von der **inversen Vektor-Iteration (eng. Inverse Power Method)** erreicht. Die Vektor-Iteration wird auf folgende Matrix angewandt

$$\tilde{A} := (A - \tilde{\lambda}I)^{-1}$$

Die Eigenwerte von $\tilde{A}$ sind $\tilde{\lambda}_i := (\lambda_i - \tilde{\lambda})^{-1}$, wobei der größte Eigenwert gerade $|\lambda - \tilde{\lambda}|^{-1}$ ist, d.h. man kann die inverse Vektor-Iteration benutzen, um einen vorher ausgewählten Eigenwert zu berechnen.

Inverse Vektor-Iteration (Bsp.)

Betrachten wir $A = \left(\begin{smallmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0.5 \end{smallmatrix}\right)$, $\tilde{\lambda} = 0.9$ und somit $\tilde{A} = \left(\begin{smallmatrix} 10 & 0 \\ 0 & -2.5 \end{smallmatrix}\right)$.
Dann erhalten wir mit dem Startvektor $x_0 = \left(\begin{smallmatrix} 0.28 \\ 0.96 \end{smallmatrix}\right)$:



1. Iteration 2. Iteration 3. Iteration

Die inverse Vektor-Iteration konvergiert schneller als die Vektor-Iteration, wenn ein $\tilde{\lambda}$ eine gute Schätzung von λ ist.
Allerdings muss die Matrix $\tilde{A}$ invertiert werden.

Berechnung aller Eigenwerte

Die Vektor-Iterationen sind sehr hilfreich, wenn man nur an einem Eigenwert bzw. Eigenvektor interessiert ist. Wenn man aber alle Eigenwerte berechnen möchte, kann eine sukzessive Vektor-Iteration numerisch sehr instabil werden.

Es reicht daher eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ zu finden, so dass:

$$A = Q^\top \Lambda Q$$

Dies kann erreicht werden, indem man eine Folge $(A_n)_{n \in \mathbb{N}}$ von Matrizen findet, so dass sie gegen eine Diagonalmatrix konvergiert und außerdem Folgendes gilt

$$A_{n+1} = Q_n^\top A_n Q_n$$

Dies wird durch das sogenannte **QR-Verfahren** erreicht.

QR-Verfahren

Das QR-Verfahren, berechnet in jeder Iteration die QR-Zerlegung einer Matrix A_n und multipliziert diese beiden Matrizen in umgekehrter Reihenfolge.

Das QR-Verfahren, erzeugt also die folgenden drei Matrizenfolgen

$$\begin{aligned} A_0 &:= A & A_0 &=: Q_0 \cdot R_0 \\ A_{n+1} &:= R_n \cdot Q_n & A_{n+1} &=: Q_{n+1} \cdot R_{n+1} \end{aligned}$$

Es gilt nun

$$A_{n+1} = R_n \cdot Q_n = Q_n^\top Q_n R_n \cdot Q_n = Q_n^\top A_n Q_n,$$

d.h. A_{n+1} hat die gleichen Eigenwerte wie A_n und damit (vollständige Induktion) ebenfalls die gleichen Eigenwerte wie $A = A_0$.

Das QR-Verfahren verwandelt also das symmetrische Eigenwertproblem in jedem Schritt in ein äquivalentes Eigenwertproblem.

Eigenschaften des QR-Verfahrens

Die Analyse des QR-Verfahren ist nicht ganz einfach. Allerdings kann man folgende Eigenschaften für den symmetrischen Startwert $A_0 = A$ beweisen:

$$\begin{aligned} \lim_{n\to\infty} Q_n &= I \\ \lim_{n\to\infty} R_n &= \Lambda \end{aligned}$$

Definiert man außerdem $U_n = \prod_{i=0}^{n} Q_i$, so kann man zeigen, dass Folgendes gilt:

$$A = U^\top \Lambda U$$

Zusammenfassung

Wir haben zwei iterative Verfahren kennen gelernt, um das symmetrische Eigenwertproblem zu lösen, die **Vektor-Iteration** und das **QR-Verfahren**.

Jede Iteration der Vektor-Iteration benötigt $\mathcal{O}(n^2)$ Schritte, während jede Iteration des QR-Verfahrens $\mathcal{O}(n^3)$ Schritte benötigt.

Wenn man nur einen Eigenvektor berechnen möchte, bietet sich die Vektor-Iteration an. Ist man an allen Eigenvektoren interessiert, ist das QR-Verfahren zu bevorzugen.

Das QR-Verfahren konvergiert auch, wenn ein Eigenwert mehrfach vorkommt, d.h. anstelle der Forderung

$$0 < |\lambda_1| < \ldots < |\lambda_n|$$

wird lediglich Folgendes gefordert

$$0 < |\lambda_1| \leqslant \ldots \leqslant |\lambda_n|$$

Approximation von Eigenwerten

Auch wenn wir mit dem QR-Verfahren eine Folge von Matrizen A_n generiert haben, die gegen die Diagonalmatrix Λ konvergiert, wird Λ nie exakt erreicht.

Die Frage ist dann wie weit sich die Diagonaleinträge einer Matrix von ihren Eigenwerten unterscheidet.

Es sei also eine beliebige Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gegeben. Dann definieren wir mit

$$d_i := a_{ii}$$

die Diagonaleinträge der Matrix A.

Weiter beschreiben wir mit

$$\rho_i := \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}|$$

wie weit sich die i-te Zeile von A von einer Diagonalmatrix unterscheidet.

Eigenwerte und Diagonaleinträge

Sei nun v ein Eigenvektor von A zum Eigenwert λ.

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir Folgendes annehmen:

$$\max_{j=1,\dots,n} |v_j| = v_i = 1$$

Dann gilt

$$\lambda = \lambda v_i = (\lambda v)_i = (Av)_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} v_j = a_{ii} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{ij} v_j$$

Und somit

$$|\lambda - d_i| \leqslant \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}| = \rho_i$$

Gerschgorin-Kreise

Wir haben also gesehen, dass es zu jedem **Eigenwert** λ eine Zeile i von A gibt, so dass sich λ von dem **Diagonaleintrag** d_i nicht mehr als den **Radius** ρ_i unterscheidet.

Damit haben wir das **Kreistheorem von Gerschgorin** bewiesen:

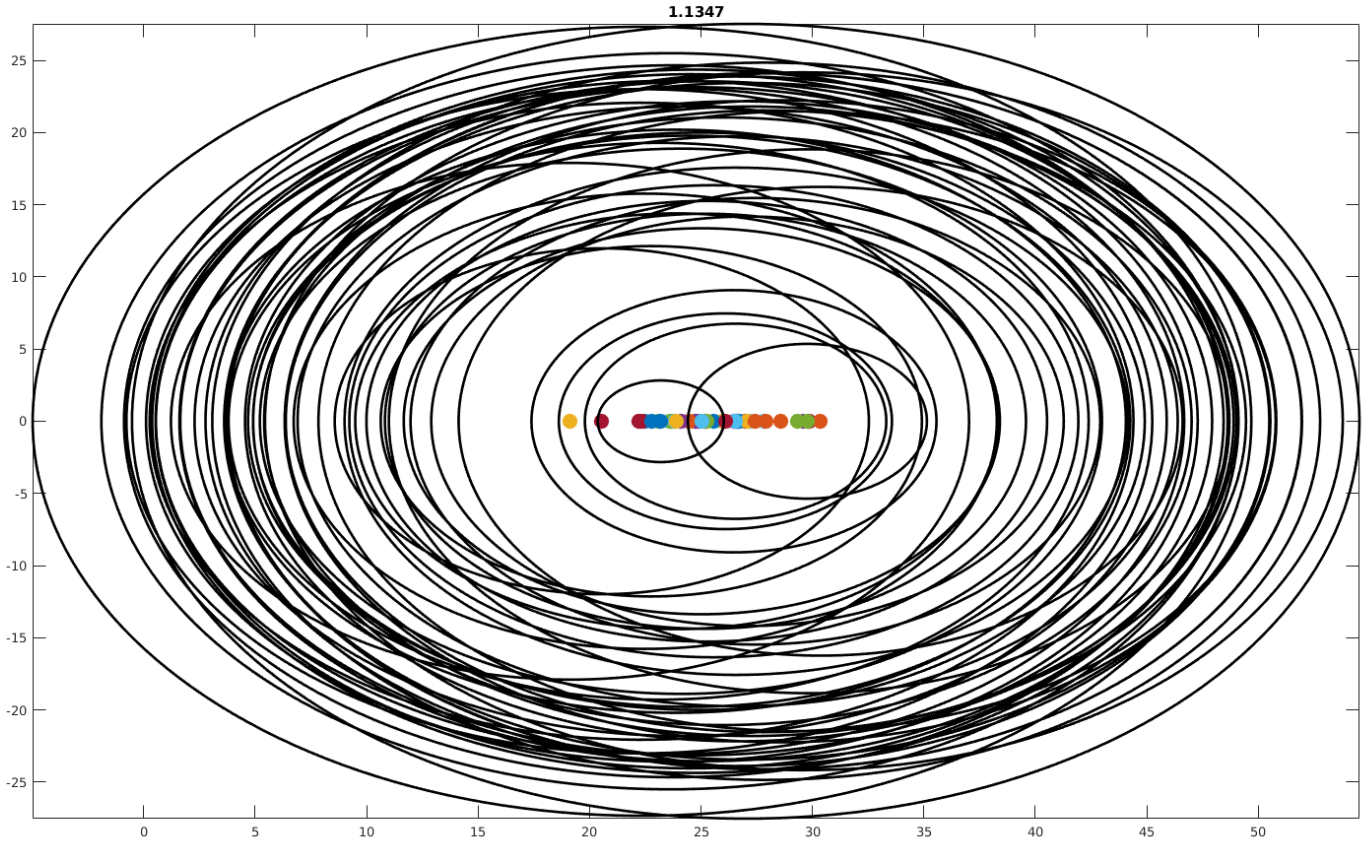
Theorem 1 (Gerschgorin). *Sei $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ und d_i sowie ρ_i wie oben definiert. Dann gilt für die Eigenwerte λ_i von A stets:*

$$\{\lambda_1, \ldots, \lambda_n\} \subset \bigcup_{i=1}^{n} B_{\rho_i}(d_i)$$

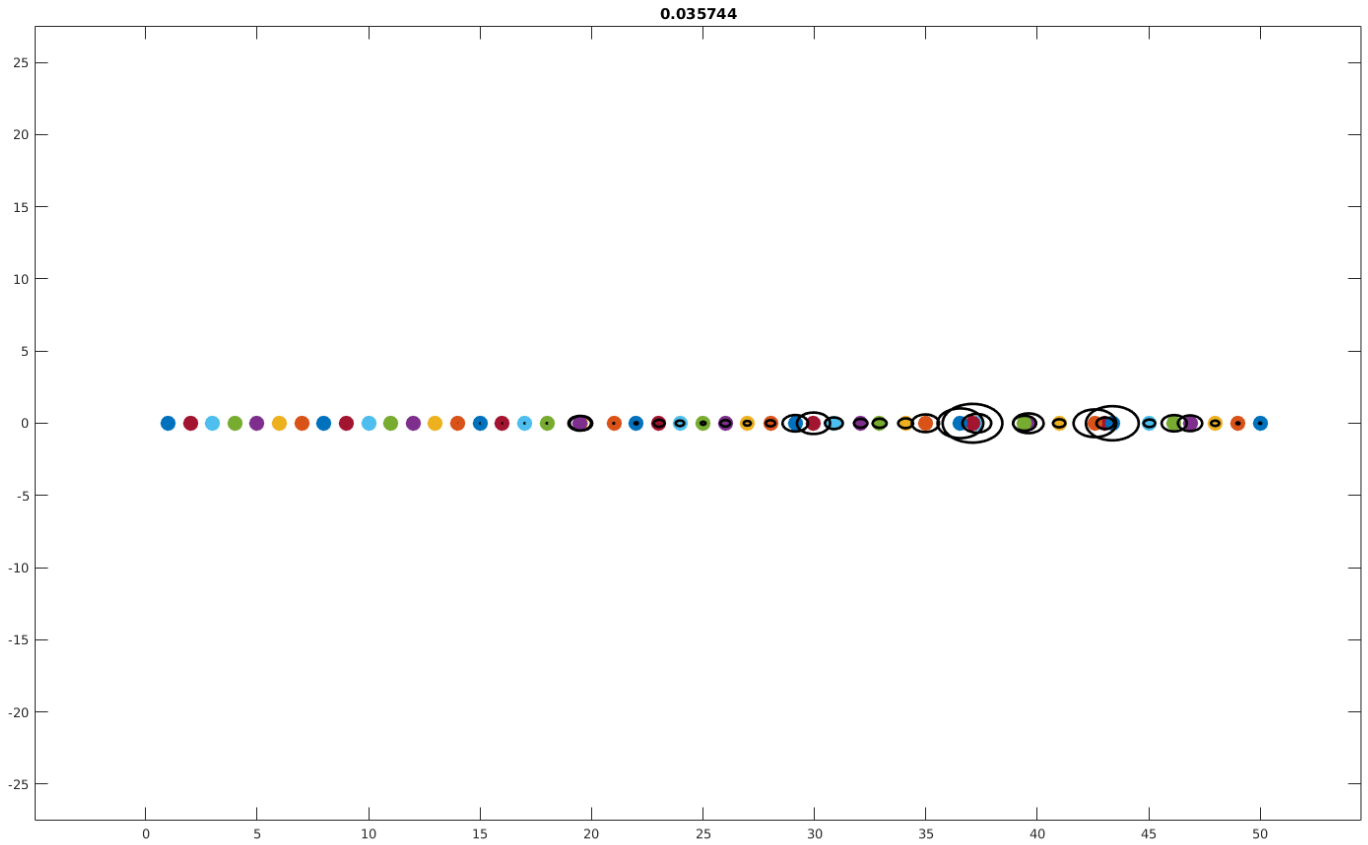
Das Kreistheorem hilft uns bei der Analyse des QR-Verfahrens.

Die Diagonaleinträge von A_n approximieren die Eigenwerte und die Nebendiagonaleinträge geben die Approximationsgüte an.

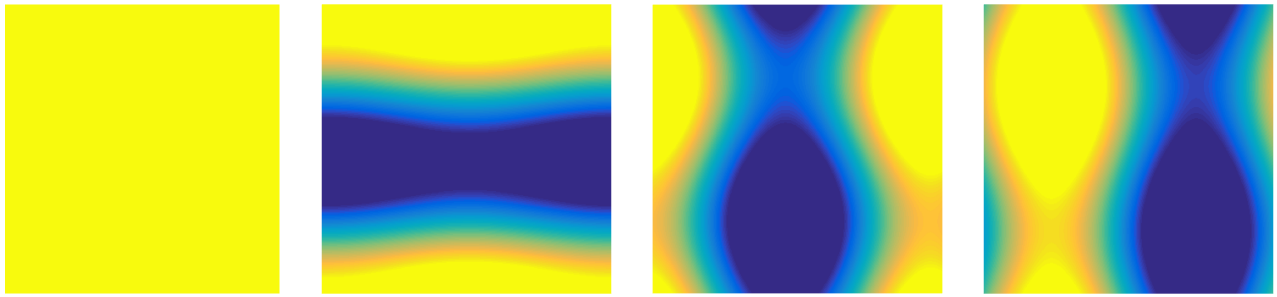
Gerschgorin-Kreise



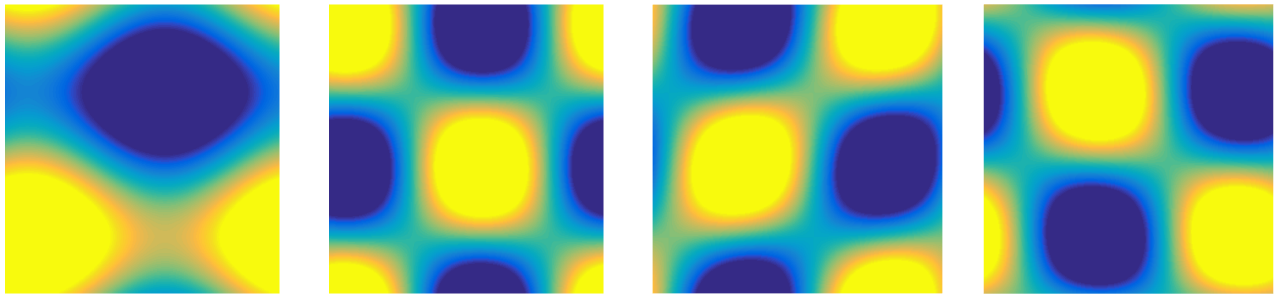
Gerschgorin-Kreise



“Frequenzen” im $\mathbb{R}^2$



$\lambda = 0$ $\lambda = -1$ $\lambda = -1$ $\lambda = -1$



$\lambda = -1$ $\lambda = -2$ $\lambda = -2$ $\lambda = -2$

“Frequenzen” einer Katze