

Kapitel 5

Berechnung von Eigenwerten und Eigenvektoren

5.1 Einführung

Bemerkung 5.1 *Aufgabenstellung.* Diese Kapitel behandelt numerische Verfahren zur Lösung des Eigenwertproblems. Gegeben sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Bestimme $\lambda \in \mathbb{C}$ und $\mathbf{v} \in \mathbb{C}^n$, $\mathbf{v} \neq \mathbf{0}$, so dass

$$A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \quad (5.1)$$

gilt. Hierbei heißt λ Eigenwert und \mathbf{v} Eigenvektor zum Eigenwert λ .

In der Vorlesung wird vor allem der Fall betrachtet, dass A eine symmetrische Matrix ist. Dann sind alle Eigenwerte und alle Eigenvektoren reell. \square

Beispiel 5.2 *Spektralnorm und Spektralkondition einer symmetrischen Matrix.* Für eine symmetrische invertierbare Matrix A gelten $\|A\|_2 = |\lambda_{\max}(A)|$ und $\|A^{-1}\|_2 = |\lambda_{\min}(A)|^{-1}$. Damit muss man für die Berechnung der Spektralnorm von A den betragsmäßig größten Eigenwert bestimmen und zur Berechnung der Spektralkondition noch zusätzlich den betragsmäßig kleinsten Eigenwert. Es ist jedoch nicht nötig, alle Eigenwerte zu berechnen. \square

Beispiel 5.3 *Modellierung von Schwingungsabläufen, Sturm¹-Liouville²-Problem.* Die gedämpfte Schwingung einer Feder wird durch die Differentialgleichung

$$u''(x) + \lambda r(x)u(x) = 0, \quad x \in (0, 1), \quad (5.2)$$

mit den Randbedingungen $u(0) = u(1) = 0$ modelliert. In (5.2) ist die Funktion $r \in C([0, 1])$ mit $r(x) > 0$ gegeben und die Funktion $u(x)$ sowie die Zahlen λ sind gesucht. Die Funktion $r(x)$ beschreibt die Dichte der Feder im Punkt x .

Im Fall $r(x) \equiv 1$ rechnet man direkt nach, dass $\lambda = (k\pi)^2$ und $u(x) = \sin(k\pi x)$, $k = 0, 1, 2, \dots$ Lösungen von (5.2) sind.

Ist $r(x)$ nicht konstant, dann gibt es aber im Allgemeinen keine geschlossene Formel, um die Lösungen darzustellen. Man muss die Lösungen numerisch approximieren. Dazu kann man $[0, 1]$ in ein äquidistantes Gitter mit n Intervallen und der Schrittweite $h = 1/n$ zerlegen. Nun werden die Funktionen $r(x)$ und $u(x)$ in (5.2) in den Gitterpunkten x_i , $i = 0, \dots, n$, betrachtet und die zweite Ableitung in den inneren Gitterpunkten wird durch einen Differenzenquotienten approximiert

$$u''(x_i) \approx \frac{u(x_i + h) - 2u(x_i) + u(x_i - h))}{h^2}, \quad i = 1, \dots, n - 1. \quad (5.3)$$

¹Jacques Charles Francois Sturm (1803 – 1855)

²Joseph Liouville (1809 – 1882)

Man nennt $p(\lambda) \in P_n$ das charakteristische Polynom der Matrix A . Seine Nullstellen sind die Eigenwerte von A .

Die Verwendung des charakteristischen Polynoms zur Berechnung der Eigenwerte von A besitzt jedoch in der Praxis entscheidende Nachteile. Zuerst müssen die Koeffizienten des Polynoms berechnet werden. Das ist für große n aufwändig. Des Weiteren hängen die Nullstellen oft sensibel von den Koeffizienten des charakteristischen Polynoms ab. Das Problem ist also schlecht konditioniert, insbesondere wenn die Matrix mehrfache Eigenwerte besitzt. Insgesamt ist das charakteristische Polynom zur numerischen Berechnung von Eigenwerten einer Matrix nicht brauchbar. (Übungsaufgabe) \square

Bemerkung 5.6 *Weitere bekannte Aussagen, Begriffe.*

- Das charakteristische Polynom $p(\lambda)$ besitzt nach dem Fundamentalsatz der Algebra genau n (mit entsprechender Vielfachheit gezählte) reelle oder komplexe Nullstellen $\lambda_1, \dots, \lambda_n$.
- Der Eigenwert λ_i heißt einfacher Eigenwert, wenn die entsprechende Nullstelle des charakteristischen Polynoms einfach ist.
- Die Menge aller Eigenwerte von A

$$\sigma(A) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$$

heißt Spektrum von A .

- Zwei Matrizen $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißen ähnlich (über dem Körper der reellen Zahlen), wenn es eine invertierbare Matrix $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gibt mit der Eigenschaft

$$B = T^{-1}AT.$$

Ähnliche Matrizen besitzen das gleiche Spektrum

$$\sigma(A) = \sigma(T^{-1}AT)$$

für eine beliebige invertierbare Matrix $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

- Die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt diagonalisierbar, wenn A zu einer Diagonalmatrix ähnlich ist. Die Matrix A ist genau dann diagonalisierbar, wenn sie n linear unabhängige Eigenvektoren hat.
- Besitzt $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ n verschiedene Eigenwerte, so ist A diagonalisierbar.

\square

Lemma 5.7 Reelle Schur³-Faktorisierungen. *Zu jeder Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gibt es eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, so dass*

$$Q^T A Q = \begin{pmatrix} R_{11} & & & \\ & \ddots & & * \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \ddots \\ & & & & R_{mm} \end{pmatrix} = R. \quad (5.4)$$

Dabei ist für jedes $i \in \{1, \dots, m\}$ entweder $R_{ii} \in \mathbb{R}$ oder $R_{ii} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$. Im letzteren Fall hat R_{ii} ein Paar von konjugiert komplexen Eigenwerten. Die Menge aller Eigenwerte der R_{ii} , $i = 1, \dots, m$, bilden das Spektrum von A . Die Zerlegung ist nicht eindeutig.

³Issai Schur (1875 – 1941)

Beweis: Für einen Beweis sei auf die Literatur verwiesen, zum Beispiel (Golub and Van Loan, 1996, S. 341). ■

Folgerung 5.8 Diagonalisierbarkeit symmetrischer Matrizen. *Jede symmetrische Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ lässt sich mittels einer orthogonalen Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ durch eine Ähnlichkeitstransformation auf Diagonalgestalt bringen*

$$Q^{-1}AQ = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n).$$

Die Matrix A besitzt somit nur reelle Eigenwerte und n linear unabhängige, zueinander orthogonale Eigenvektoren, nämlich die Spalten von Q

Beweis: Die Symmetrie von R folgt direkt aus (5.4) und der Symmetrie von A

$$R^T = (Q^{-1}AQ)^T = Q^T A^T Q^{-T} = Q^{-1}AQ = R.$$

Auf Grund der speziellen Gestalt von R , siehe (5.4), ist der mit * markierte Block ein Nullblock. Es können nun noch symmetrische 2×2 Blöcke R_{ii} auftreten. Man rechnet aber direkt nach, dass symmetrische 2×2 Matrizen immer reelle Eigenwerte besitzen, da die Diskriminante des charakteristischen Polynoms nichtnegativ ist. Somit widerspricht das Auftreten von symmetrischen 2×2 Blöcken den Aussagen von Lemma 5.7 und R muss eine Diagonalmatrix sein. ■

5.3 Kondition des Eigenwertproblems

Bemerkung 5.9 Inhalt. In diesem Abschnitt wird untersucht, wie stark sich Eigenwerte und Eigenvektoren bei Störungen in A verändern. □

Satz 5.10 Absolute Kondition des Eigenwertproblems. *Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ diagonalisierbar, das heißt es existiert eine Matrix $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit*

$$T^{-1}AT = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n).$$

Sei $\Delta A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine Störung von A und sei μ ein Eigenwert der gestörten Matrix $A + \Delta A$. Dann gilt

$$\min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \mu| \leq \|T\|_p \|T^{-1}\|_p \|\Delta A\|_p \quad (5.5)$$

für alle $p \in [1, \infty]$.

Beweis: Auch hier sei für den Beweis wieder auf die Literatur, zum Beispiel Golub and Van Loan (1996) oder Stoer and Bulirsch (2005). ■

Bemerkung 5.11 Interpretation von Satz 5.10. Die absolute Kondition des Eigenwertproblems

$$\sup_{\Delta A} \frac{\min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \mu|}{\|\Delta A\|_p}$$

hängt von $\kappa_p(T) = \|T\|_p \|T^{-1}\|_p$ und nicht von $\kappa_p(A)$ ab. Da die Spalten von T gerade die Eigenvektoren von A sind, bedeutet (5.5) gerade, dass für eine diagonalisierbare Matrix die Kondition der Eigenvektorbasis eine große Rolle bei der Empfindlichkeit der Eigenwerte von A bezüglich Störungen spielt. □

Beispiel 5.12 *Kondition eines Eigenwertproblems.* Betrachte

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

und die gestörte Matrix

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

mit $\delta > 0$. Die Eigenwerte von A sind $\lambda_1 = \lambda_2 = 0$ und die von $A + \Delta A$ sind $\tilde{\lambda}_{1,2} = \pm\sqrt{\delta}$. Für die Kondition des Eigenwertproblems ergibt sich somit

$$\kappa_2 \geq \frac{|\tilde{\lambda}_1 - \lambda_1|}{\|A + \Delta A - A\|_2} = \frac{\sqrt{\delta}}{\delta} = \frac{1}{\sqrt{\delta}} \rightarrow \infty$$

für $\delta \rightarrow 0$.

Offenbar kann das Eigenwertproblem für beliebige Matrizen beliebig schlecht konditioniert sein. \square

Folgerung 5.13 **Kondition des Eigenwertproblems für symmetrische Matrizen.** Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch und sei μ ein Eigenwert der gestörten Matrix $A + \Delta A$. Dann gilt

$$\min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \mu| \leq \|\Delta A\|_2.$$

Das Eigenwertproblem für symmetrische Matrizen ist also gut konditioniert.

Beweis: Nach Folgerung 5.8 lässt sich A mittels einer Orthogonalmatrix Q diagonalisieren. Da für Orthogonalmatrizen $\kappa_2(Q) = 1$ gilt, folgt die Behauptung direkt aus (5.5). \blacksquare

5.4 Abschätzungen für Eigenwerte

Bemerkung 5.14 *Inhalt.* In diesem Abschnitt werden Abschätzungen für Eigenwerte angegeben, welche man aus direkt zugänglichen Informationen, zum Beispiel den Einträgen der Matrix, erhält, ohne dass man die Eigenwerte explizit berechnen muss. \square

Lemma 5.15 **Eigenschaften von Eigenwerten und des Spektrums.** Seien $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Dann gelten die folgenden Aussagen.

- i) Falls $\det(A) \neq 0$ und λ ein Eigenwert von A ist, so ist λ^{-1} ein Eigenwert von A^{-1} .
- ii) Ist $\lambda \in \sigma(A)$, dann ist $\alpha\lambda \in \sigma(\alpha A)$ für beliebiges $\alpha \in \mathbb{C}$.
- iii) Ist $\lambda \in \sigma(A)$, dann ist $(\lambda - \alpha) \in \sigma(A - \alpha I)$. Man nennt α Spektralverschiebung oder Shift.
- iv) Ist $\lambda \in \sigma(A)$, dann ist $\bar{\lambda} \in \sigma(A)$.
- v) Es gilt $\sigma(A) = \sigma(A^T)$.
- vi) Es gilt $\sigma(AB) = \sigma(BA)$.

Beweis: Alle Aussagen sind aus der Linearen Algebra bekannt. \blacksquare

Lemma 5.16 **Abschätzung von Eigenwerten mit Matrixnormen.** Es gilt $|\lambda| \leq \|A\|$ für jedes $\lambda \in \sigma(A)$ und jede Matrixnorm $\|\cdot\|$.

Beweis: Sei $\lambda \in \sigma(A)$ und sei \mathbf{v} ein zugehöriger Eigenvektor mit $\|\mathbf{v}\| = 1$, wobei die Vektornorm zur Matrixnorm verträglich ist. Dann gilt mit einer Normeigenschaft, der Eigenwertaufgabe und der Verträglichkeit der Normen

$$|\lambda| = |\lambda| \|\mathbf{v}\| = \|\lambda \mathbf{v}\| = \|A\mathbf{v}\| \leq \|A\| \|\mathbf{v}\| = \|A\|.$$

■

Bemerkung 5.17 Zur Abschätzung von Eigenwerten mit Matrixnormen.

- Der Spektralradius einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist definiert durch

$$\rho(A) = \max\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(A)\}.$$

Aus Lemma 5.16 folgt sofort, dass $\rho(A) \leq \|A\|$ für jede Matrixnorm.

- Man kann zeigen, dass es zu jedem $\varepsilon > 0$ eine Matrixnorm $\|\cdot\|$ gibt, so dass die Ungleichung $\|A\| \leq \rho(A) + \varepsilon$ gilt.

□

Satz 5.18 Kreissatz von Gerschgorin⁴. Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und seien

$$K_i = \left\{ z \in \mathbb{C} : |z - a_{ii}| \leq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \right\}$$

die Gerschgorin-Kreise. Dann gilt

$$\sigma(A) \subseteq \bigcup_{i=1}^n K_i. \quad (5.6)$$

Das heißt, alle Eigenwerte liegen in der Vereinigung der Gerschgorin-Kreise.

Beweis: Sei λ ein Eigenwert von A mit Eigenvektor \mathbf{x} . Für einen Index i gilt $|x_i| \geq |x_j|$ für alle $j \neq i$. Da \mathbf{x} ein Eigenvektor ist, gilt insbesondere $|x_i| > 0$. Die i -te Gleichung des Eigenwertproblems hat die Gestalt

$$\sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} x_j + (a_{ii} - \lambda) x_i = 0.$$

Mit Dreiecksungleichung folgt

$$|\lambda - a_{ii}| |x_i| = \left| \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} x_j \right| \leq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| |x_j|.$$

Nun ergibt Division mit $|x_i| > 0$ und $|x_i| \geq |x_j|$

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

Also liegt λ in einem der Gerschgorin-Kreise und damit erst recht in der Vereinigung aller Gerschgorin-Kreise. ■

Folgerung 5.19 Weitere Einschränkungen des Bereiches der Eigenwerte.

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit den Gerschgorin-Kreisen K_i und seien K_i^T die Gerschgorin-Kreise von A^T . Dann gilt

$$\sigma(A) \subseteq \left(\bigcup_{i=1}^n K_i \right) \cap \left(\bigcup_{i=1}^n K_i^T \right).$$

⁴Semjon Aronowitsch Gerschgorin (1901 – 1933)

Falls A symmetrisch ist gilt

$$\sigma(A) \subseteq \bigcup_{i=1}^n (K_i \cap \mathbb{R}).$$

Beweis: Aus Lemma 5.15 v) und dem Kreissatz von Gerschgorin für A^T folgt

$$\sigma(A) = \sigma(A^T) \subseteq \bigcup_{i=1}^n K_i^T.$$

Zusammen mit (5.6) folgt damit die erste Aussage.

Die zweite Aussage folgt daraus, dass alle Eigenwerte einer symmetrischen Matrix reell sind. ■

Beispiel 5.20 Anwendung des Kreissatzes von Gerschgorin. Betrachte die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 \\ 0 & -2 & -1 \\ -1 & -1 & 3 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte von A sind (mit MATLAB berechnet) $\lambda_1 = -2.2223$, $\lambda_{2,3} = 3.6111 \pm 0.0974i$.

Zunächst kann man den Betrag der Eigenwerte mit Normen von A abschätzen. Man erhält

$$\|A\|_1 = 5, \quad \|A\|_F = 5.7446, \quad \|A\|_\infty = 5.$$

Damit ergibt sich $|\lambda_i| \leq 5$, $i = 1, 2, 3$.

Die Gerschgorin-Kreise von A und A^T sind

$$\begin{aligned} K_1 &= \{z : |z - 4| \leq 1\}, & K_1^T &= \{z : |z - 4| \leq 1\}, \\ K_2 &= \{z : |z + 2| \leq 1\}, & K_2^T &= \{z : |z + 2| \leq 2\}, \\ K_3 &= \{z : |z - 3| \leq 2\}, & K_3^T &= \{z : |z - 3| \leq 1\}. \end{aligned}$$

Betrachtet man nun den Schnitt gemäß Folgerung 5.19, so erhält man

$$\sigma(A) \subset \tilde{K}_1 \cup \tilde{K}_2 \cup \tilde{K}_3$$

mit

$$\tilde{K}_1 = \{z : |z - 4| \leq 1\}, \quad \tilde{K}_2 = \{z : |z + 2| \leq 1\}, \quad \tilde{K}_3 = \{z : |z - 3| \leq 1\}.$$

□

5.5 Die Potenzmethode oder Vektoriteration

Bemerkung 5.21 Grundidee. Die Potenzmethode oder Vektoriteration ist ein Verfahren zur Berechnung des betragsgrößten Eigenwertes und eines zugehörigen Eigenvektors einer Matrix A . Dieses Verfahren geht auf von Mises⁵ zurück. Es liefert das Grundkonzept für die Entwicklung weiterer Verfahren zur Berechnung von Eigenwerten und -vektoren.

Der Einfachheit halber werden für die Konvergenzanalyse einige Annahmen gemacht. Die Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sei diagonalisierbar. Weiter gelte für die Eigenwerte

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|,$$

⁵Richard von Mises (1883 – 1953)

das heißt, der betragsgrößte Eigenwert soll einfach sein. Insbesondere sind damit alle Eigenwerte reell, alle Eigenvektoren \mathbf{v}_j , $j = 1, \dots, n$, reell und die Eigenvektoren spannen \mathbb{R}^n auf.

Für die Potenzmethode benötigt man einen Startvektor $\mathbf{x}^{(0)} \in \mathbb{R}^n$. Dieser lässt sich als Linearkombination der Eigenvektoren darstellen

$$\mathbf{x}^{(0)} = \sum_{j=1}^n c_j \mathbf{v}_j.$$

Sei $\mathbf{x}^{(0)}$ so gewählt, dass $c_1 \neq 0$ gilt. Multipliziert man die Darstellung von $\mathbf{x}^{(0)}$ mit der k -ten Potenz A^k von, so erhält man

$$A^k \mathbf{x}^{(0)} = \sum_{j=1}^n c_j A^k \mathbf{v}_j = \sum_{j=1}^n c_j \lambda_j^k \mathbf{v}_j.$$

Damit gilt

$$\mathbf{x}^{(k)} := A^k \mathbf{x}^{(0)} = \lambda_1^k \left(c_1 \mathbf{v}_1 + \sum_{j=2}^n c_j \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{v}_j \right) =: \lambda_1^k \left(c_1 \mathbf{v}_1 + \mathbf{r}^{(k)} \right). \quad (5.7)$$

Wegen $|\lambda_j/\lambda_1| < 1$ folgt

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{r}^{(k)} = \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{j=2}^n c_j \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{v}_j = \mathbf{0}.$$

Das bedeutet, für große k dominiert in (5.7) der Beitrag vom ersten Eigenwert und Eigenvektor. \square

Satz 5.22 Konvergenz der Vektoriteration. Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und erfülle A die Voraussetzungen aus Bemerkung 5.21. Sei $\mathbf{x}^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ die k -te Iterierte der Potenzmethode und sei

$$\lambda^{(k)} = \frac{(\mathbf{x}^{(k)})^T A \mathbf{x}^{(k)}}{\|\mathbf{x}^{(k)}\|_2^2} = \frac{(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{x}^{(k+1)}}{\|\mathbf{x}^{(k)}\|_2^2}.$$

Dann gilt

$$|\lambda_1 - \lambda^{(k)}| = \mathcal{O} \left(\left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^k \right).$$

Beweis: Man betrachtet den Abstand zwischen dem Unterraum $S^{(k)} := \{\alpha \mathbf{x}^{(k)} : \alpha \in \mathbb{R}\}$ und dem Eigenvektor \mathbf{v}_1

$$d(S^{(k)}, \mathbf{v}_1) := \min_{\mathbf{x} \in S^{(k)}} \|\mathbf{x} - \mathbf{v}_1\|_2 = \min_{\alpha \in \mathbb{R}} \|\alpha \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{v}_1\|_2.$$

Nun formt man (5.7) äquivalent um

$$\left(\lambda_1^k c_1 \right)^{-1} \mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{v}_1 + c_1^{-1} \mathbf{r}^{(k)}. \quad (5.8)$$

Wählt man in $d(S^{(k)}, \mathbf{v}_1)$ den Wert $\alpha = \alpha_k := (\lambda_1^k c_1)^{-1}$, so erhält man damit und der Definition von $\mathbf{r}^{(k)}$

$$d(S^{(k)}, \mathbf{v}_1) \leq \|\alpha_k \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{v}_1\|_2 = |c_1^{-1}| \|\mathbf{r}^{(k)}\|_2 = \mathcal{O} \left(\left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^k \right). \quad (5.9)$$

Damit ist $\alpha_k \mathbf{x}^{(k)}$ eine Approximation an \mathbf{v}_1 , also

$$A \alpha_k \mathbf{x}^{(k)} \approx \lambda_1 \alpha_k \mathbf{x}^{(k)} \implies A \mathbf{x}^{(k)} \approx \lambda_1 \mathbf{x}^{(k)}.$$

Durch Multiplikation dieser Beziehung von links mit $(\mathbf{x}^{(k)})^T$ folgt, dass

$$\lambda^{(k)} = \frac{(\mathbf{x}^{(k)})^T A \mathbf{x}^{(k)}}{\|\mathbf{x}^{(k)}\|_2^2} = \frac{(\mathbf{x}^{(k)})^T \mathbf{x}^{(k+1)}}{\|\mathbf{x}^{(k)}\|_2^2}$$

eine Approximation an λ_1 ist. Analog ist $\alpha_{k+1} \mathbf{x}^{(k+1)}$ mit $\alpha_{k+1} = (\lambda_1^{k+1} c_1)^{-1} = \alpha_k / \lambda_1$ eine Approximation von \mathbf{v}_1 . Jetzt muss man noch die Güte dieser Approximation untersuchen.

Man erhält mit (5.8), (5.9) und $\|\mathbf{v}_1\|_2 = 1$

$$\begin{aligned} \lambda^{(k)} &= \frac{(\alpha_k \mathbf{x}^{(k)})^T (\alpha_k \mathbf{x}^{(k+1)})}{\|\alpha_k \mathbf{x}^{(k)}\|_2^2} = \lambda_1 \frac{(\alpha_k \mathbf{x}^{(k)})^T (\alpha_{k+1} \mathbf{x}^{(k+1)})}{\|\alpha_k \mathbf{x}^{(k)}\|_2^2} \\ &= \lambda_1 \frac{(\mathbf{v}_1 + c_1^{-1} \mathbf{r}^{(k)})^T (\mathbf{v}_1 + c_1^{-1} \mathbf{r}^{(k+1)})}{\|\mathbf{v}_1 + c_1^{-1} \mathbf{r}^{(k)}\|_2^2} \\ &= \lambda_1 \frac{(\mathbf{v}_1 + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right))^T (\mathbf{v}_1 + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^{k+1}\right))}{\left\|\mathbf{v}_1 + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right)\right\|_2} \\ &= \lambda_1 \frac{1 + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right)}{1 + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right)} = \lambda_1 \left(1 + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right)\right). \end{aligned}$$

Die Gültigkeit des letzten Schrittes sieht man aus

$$\begin{aligned} \left(1 + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right)\right) \left(1 + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right)\right) &= 1 + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right) + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^{2k}\right) \\ &= 1 + \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right), \end{aligned}$$

vergleiche Definition des Landau⁶-Symbols. Durch Umstellen folgt

$$|\lambda_1 - \lambda^{(k)}| = \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^k\right).$$

■

Bemerkung 5.23 *Symmetrische Matrizen.* Falls A eine symmetrische Matrix ist, kann man sogar

$$|\lambda_1 - \lambda^{(k)}| = \mathcal{O}\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^{2k}\right).$$

zeigen. □

Bemerkung 5.24 *Skalierung der Iterierten.* Wendet man das bisherige Verfahren an, so gelten

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}^{(k)}\|_2 &\rightarrow \infty \quad \text{falls } |\lambda_1| > 1, \\ \|\mathbf{x}^{(k)}\|_2 &\rightarrow 0 \quad \text{falls } |\lambda_1| < 1. \end{aligned}$$

⁶Edmund Georg Hermann Landau (1877 – 1938)

Aus diesen Gründen ist es zweckmäßig, die Iterierten zu skalieren. Damit werden starke Änderungen in der Größenordnung vermieden. Die Konvergenzaussagen ändern sich durch Skalierung auch nicht, da weder der Unterraum $S^{(k)}$ noch die Iterierte $\lambda^{(k)}$ von einer Skalierung von $\mathbf{x}^{(k)}$ abhängen. \square

Algorithmus 5.25 *Potenzmethode, Vektoriteration.* Seien $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $\mathbf{y}^{(0)} \neq \mathbf{0}$ mit $\|\mathbf{y}^{(0)}\|_2 = 1$ gegeben. Für $k = 0, 1, \dots$ berechne

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{y}}^{(k+1)} &= A\mathbf{y}^{(k)} \\ \lambda^{(k)} &= \left(\tilde{\mathbf{y}}^{(k+1)}\right)^T \mathbf{y}^{(k)} \\ \mathbf{y}^{(k+1)} &= \frac{\tilde{\mathbf{y}}^{(k+1)}}{\|\tilde{\mathbf{y}}^{(k+1)}\|_2}.\end{aligned}$$

\square

Bemerkung 5.26 *Zu Algorithmus 5.25.*

- Wählt man $\mathbf{y}^{(0)} = \mathbf{x}^{(0)}$, so weist man mit vollständiger Induktion nach, dass

$$\mathbf{y}^{(k)} = \frac{\mathbf{x}^{(k)}}{\|\mathbf{x}^{(k)}\|_2} = \frac{A^k \mathbf{x}^{(0)}}{\|A^k \mathbf{x}^{(0)}\|_2}.$$

Also liefert Algorithmus 5.25, bis auf Skalierung in $\mathbf{x}^{(k)}$, die oben analysierten Folgen $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ und $\{\lambda^{(k)}\}$.

- Die Konvergenzgeschwindigkeit der Potenzmethode hängt wesentlich vom Verhältnis von $|\lambda_1|$ und $|\lambda_2|$ ab.

\square

Beispiel 5.27 *Sturm–Liouville–Problem.* Betrachte das in Beispiel 5.3 hergeleitete Eigenwertproblem $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$. Sei $r(x) \equiv 1$, dann sind die Eigenwerte von A bekannt

$$\lambda_{n-j} = \frac{4}{h^2} \sin^2\left(\frac{j\pi h}{2}\right), \quad j = 1, \dots, n-1, \quad h = \frac{1}{n}.$$

Es ist $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_{n-1}$. Dann erhält man mit $h = 1/n$, einem Additionstheorem für die Sinusfunktion, Taylorentwicklung und Polynomdivision

$$\begin{aligned}\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right| &= \frac{\sin^2\left(\frac{(n-2)\pi h}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{(n-1)\pi h}{2}\right)} = \frac{\sin^2\left(\frac{\pi}{2} - \pi h\right)}{\sin^2\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\pi h}{2}\right)} = \frac{\cos^2(\pi h)}{\cos^2\left(\frac{\pi h}{2}\right)} \\ &\approx \frac{\left(1 - \frac{(\pi h)^2}{2}\right)^2}{\left(1 - \frac{(\pi h/2)^2}{2}\right)^2} = \frac{1 - \pi^2 h^2 + \frac{\pi^4 h^4}{4}}{1 - \frac{\pi^2 h^2}{4} + \frac{\pi^4 h^4}{64}} \approx 1 - \frac{3}{4}\pi^2 h^2.\end{aligned}$$

Man erkennt, dass man im Fall $h \ll 1$ mit einer sehr langsamen Konvergenz $\lambda^{(k)} \rightarrow \lambda_1$ rechnen muss. \square

Bemerkung 5.28 *Fazit.* Falls A diagonalisierbar ist und λ_1 ein einfacher Eigenwert ist, dann konvergiert Algorithmus 5.25. Die Konvergenz kann aber sehr langsam sein. \square

Bemerkung 5.29 *Berechnung anderer Eigenwerte, inverse Vektoriteration, Spektralverschiebung.* Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ nichtsingulär und diagonalisierbar. Die Eigenwertgleichung $A\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$, $i = 1, \dots, n$, ist äquivalent zu

$$\frac{1}{\lambda_i} \mathbf{v}_i = A^{-1} \mathbf{v}_i.$$

Damit würde die Vektoriteration angewandt mit A^{-1} unter der Annahme

$$|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_{n-1}| > |\lambda_n|$$

den betragsmäßig größten Eigenwert λ_n von A^{-1} berechnen, das heißt den betragsmäßig kleinsten Eigenwert von A .

Nach Lemma 5.15, iii), ist λ_i ein Eigenwert von A genau dann, wenn $\lambda_i - \mu$ ein Eigenwert von $A - \mu I$ ist. Angenommen, man hätte eine Schätzung $\mu \approx \lambda_i$ eines beliebigen einfachen reellen Eigenwertes von A , so dass

$$|\lambda_i - \mu| < |\lambda_j - \mu|, \quad \text{für alle } i \neq j. \quad (5.10)$$

Dann ist $(\lambda_i - \mu)^{-1}$ der betragsmäßig größte Eigenwert von $(A - \mu I)^{-1}$. Zur Berechnung dieses Eigenwertes kann man die Vektoriteration anwenden. \square

Algorithmus 5.30 *Inverse Vektoriteration mit Spektralverschiebung.* Gesucht ist der einfache reelle Eigenwert λ_i von $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Wähle μ so, dass (5.10) gilt und wähle einen Startvektor $\mathbf{y}^{(0)} \neq \mathbf{0}$ mit $\|\mathbf{y}^{(0)}\|_2 = 1$. Für $k = 0, 1, \dots$ berechne

$$\begin{aligned} (A - \mu I) \tilde{\mathbf{y}}^{(k+1)} &= \mathbf{y}^{(k)} & (5.11) \\ \lambda^{(k)} &= \frac{1}{(\tilde{\mathbf{y}}^{(k+1)})^T \mathbf{y}^{(k)}} + \mu \\ \mathbf{y}^{(k+1)} &= \frac{\tilde{\mathbf{y}}^{(k+1)}}{\|\tilde{\mathbf{y}}^{(k+1)}\|_2}. \end{aligned}$$

\square

Bemerkung 5.31 *Zu Algorithmus 5.30.*

- In (5.11) muss man ein lineares Gleichungssystem mit der Matrix $(A - \mu I)$ lösen. Dafür berechnet man einmal eine LU - oder QR -Zerlegung von $(A - \mu I)$.
- Die Vektoriteration, Algorithmus 5.25, strebt gegen $(\lambda_i - \mu)^{-1}$. Das bedeutet für die Iterierten aus Algorithmus 5.30, dass

$$\lambda^{(k)} = \frac{1}{(\tilde{\mathbf{y}}^{(k+1)})^T \mathbf{y}^{(k)}} + \mu \rightarrow \lambda_i - \mu + \mu = \lambda_i$$

für $k \rightarrow \infty$.

- Die Konvergenzgeschwindigkeit von Algorithmus 5.30 hängt wie bei der Vektoriteration von Verhältnis der betragsgrößten Eigenwerte ab. Das ist hier

$$\frac{\max_{j \neq i} |\lambda_j - \mu|^{-1}}{|\lambda_i - \mu|^{-1}} = \frac{(\min_{j \neq i} |\lambda_j - \mu|)^{-1}}{|\lambda_i - \mu|^{-1}} = \frac{|\lambda_i - \mu|}{\min_{j \neq i} |\lambda_j - \mu|}.$$

Hat man also eine gute Schätzung μ von λ_i , dann gilt

$$\frac{|\lambda_i - \mu|}{\min_{j \neq i} |\lambda_j - \mu|} \ll 1$$

und das Verfahren konvergiert sehr schnell. In der Praxis ist allerdings im Allgemeinen nicht klar, wie man μ wählen sollte.

- Die Konvergenzgeschwindigkeit kann verbessert werden, wenn man während der Iteration den Parameter μ geeignet anpasst, zum Beispiel mit der aktuellen Iterierten $\mu = \lambda^{(k)}$. Nach jeder Anpassung muss man allerdings die Matrix $(A - \mu I)$ neu faktorisieren, so dass die Kosten dieses Iterationsschrittes sehr hoch sind.

\square

5.6 Das QR-Verfahren

Bemerkung 5.32 *Inhalt.* Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische Matrix. Aus Folgerung 5.13 ist bekannt, dass das Eigenwertproblem für A gut konditioniert ist. Dieser Abschnitt stellt ein Verfahren zur Berechnung aller Eigenwerte und Eigenvektoren von A vor. \square

Bemerkung 5.33 *Transformationen von A durch Orthogonaltransformationen.* Aus Folgerung 5.8 ist bekannt, dass alle Eigenwerte von A reell sind, A diagonalisierbar ist und eine Orthonormalbasis aus Eigenvektoren $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n\}$ existiert, so dass

$$Q^{-1}AQ = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$$

mit $Q = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n]$.

Im Allgemeinen ist es jedoch nicht möglich, Q in endlich vielen Schritten zu bestimmen. Damit wäre auch ein endliches Verfahren zur Bestimmung aller Nullstellen eines Polynoms n -ten Grades gefunden. Ein solches Verfahren, basierend auf elementaren Rechenoperation und der Quadratwurzel, kann es aber nach dem Satz von Abel⁷ nicht geben.

Es ist auch nicht möglich, A mit Orthogonaltransformationen, zum Beispiel mit Housholder-Spiegelungen auf Diagonalgestalt zu bringen. Mit einer ersten Housholder-Spiegelung kann man die Elemente der ersten Spalte unterhalb der Diagonalen zu Null machen. Wendet man dann eine Housholder-Spiegelung auf die erste Zeile an, dann wird die erste Spalte wieder gefüllt

$$A = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Q_1} \begin{pmatrix} * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Q_2} \begin{pmatrix} * & 0 & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \end{pmatrix}.$$

Man verliert auch die Symmetrie der Matrix.

Es ist jedoch möglich, A mit orthogonalen Transformationen auf Tridiagonalgestalt zu bringen. Verwendet man eine orthogonale Matrix deren erste Zeile der erste Einheitsvektor ist und deren Spalten durch eine Housholder-Spiegelung so konstruiert sind, dass die Elemente der ersten Spalte unter a_{21} verschwinden, so erhält man

$$A = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Q_1} \begin{pmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{Q_1^T} \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \end{pmatrix}.$$

Die Anwendung von Q_1^T hat keine Auswirkungen auf die erste Spalte. Auf diese Art und Weise fährt man fort bis man eine Tridiagonalmatrix erhält. \square

Lemma 5.34 Transformationen auf Tridiagonalgestalt. Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch. Dann existiert eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, die das Produkt von $(n - 2)$ Householder-Spiegelungen ist, so dass QAQ^T eine symmetrische Tridiagonalmatrix ist.

⁷Niels Henrik Abel (1802 – 1829)

Beweis: Die Fortsetzung des in Bemerkung 5.33 beschriebenen Prozesses und die Eigenschaften der Householder-Matrizen Q_1, \dots, Q_{n-2} liefern

$$QAQ^T = Q_{n-2} \dots Q_1 A Q_1^T \dots Q_{n-2}^T = \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}.$$

■

Bemerkung 5.35 *Reduktion des Eigenwertproblems.* Die Matrizen A und QAQ^T sind ähnlich und sie besitzen gemäß Bemerkung 5.6 dieselben Eigenwerte. Damit hat man also das Problem der Bestimmung der Eigenwerte einer symmetrischen Matrix auf das Problem der Bestimmung der Eigenwerte einer symmetrischen Tridiagonalmatrix reduziert. □

Bemerkung 5.36 *Iteration mit Tridiagonalmatrizen.* Die Berechnung der Eigenwerte einer Tridiagonalmatrix wird iterativ erfolgen. Die grundlegende Idee wurde in Rutishauser (1958) vorgestellt. Sei

$$B = B_1 = \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}.$$

Dann kann man eine Faktorisierung von B bestimmen, wobei in Rutishauser (1958) die LU-Zerlegung vorgeschlagen wurde. Für Tridiagonalmatrizen erhält man ein Produkt aus zwei Bidiagonalmatrizen

$$B = B_1 = LU = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ * & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & * & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & * & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & * & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 & 0 \\ 0 & * & * & 0 & 0 \\ 0 & 0 & * & * & 0 \\ 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix}.$$

Nun vertauscht man die Faktoren

$$B_2 = UL = \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 & 0 \\ 0 & * & * & 0 & 0 \\ 0 & 0 & * & * & 0 \\ 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ * & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & * & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & * & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & * & 1 \end{pmatrix}$$

und wiederholt das Verfahren mit B_2 . In den Arbeiten Francis (1961/1962) und Kublanovskaja (1961) wurde das Verfahren modifiziert, indem statt der LU-Zerlegung die stabile QR-Zerlegung verwendet wurde.

Mit diesem Verfahren erhält man eine Folge von Matrizen $\{B_k\}_{k \in \mathbb{N}}$. □

Lemma 5.37 Eigenschaften der Matrizen $\{B_k\}_{k \in \mathbb{N}}$. Die Matrizen $\{B_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ seien mit dem Verfahren aus Bemerkung 5.36 definiert, wobei die Faktorisierung mittels einer QR-Zerlegung vorgenommen wurde $B_k = Q_k R_k$, $B_{k+1} = R_k Q_k$. Dann gelten:

- i) B_k ist ähnlich zu B , $k \geq 1$.
- ii) Falls B symmetrisch ist, so ist auch B_k symmetrisch, $k \geq 1$.

iii) Falls B symmetrisch und tridiagonal ist, so ist auch B_k symmetrisch und tridiagonal, $k \geq 1$.

Beweis: i). Die Aussage ist bewiesen, wenn man gezeigt hat, dass B_k und B_{k+1} für beliebiges $k \geq 1$ ähnlich sind. Nach Konstruktion der Matrizen $\{B_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ und einer Eigenschaft von Orthogonalmatrizen, Lemma 2.14, gilt

$$Q_k B_{k+1} Q_k^T = Q_k R_k Q_k Q_k^T = Q_k R_k = B_k.$$

Das ist genau die Ähnlichkeit der beiden Matrizen.

ii). Diese Aussage wird durch vollständige Induktion nach k gezeigt. Der Induktionsanfang, die Symmetrie von $B_1 = B$ ist klar. Gelte also die Symmetrie für B_k . Dann folgt

$$\begin{aligned} B_{k+1}^T &= B_{k+1}^T Q_k^T Q_k = (Q_k B_{k+1})^T Q_k = (Q_k R_k Q_k)^T Q_k = (B_k Q_k)^T Q_k \\ &= Q_k^T B_k^T Q_k = Q_k^T B_k Q_k = Q_k^T Q_k R_k Q_k = R_k Q_k = B_{k+1}. \end{aligned}$$

iii). Der Beweis wird mit vollständiger Induktion nach k erbracht. Der Induktionsanfang ist wieder klar. Sei nun B_k eine Tridiagonalmatrix. Dann kann man mit $(n-1)$ Givens-Drehungen $G_{i,k}$ die Einträge der unteren Hauptnebendiagonalen zu Null machen und erhält eine Dreiecksmatrix R_k mit dem Besetzmuster

$$B_k = Q_k R_k = G_{1,k} \dots G_{n-1,k} R_k = G_{1,k} \dots G_{n-1,k} \begin{pmatrix} * & * & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix}.$$

Beispielsweise im ersten Schritt, bei der Givens-Drehung $G_{1,k}$, wird ein Vielfaches der zweiten Zeile von B_k zur ersten Zeile addiert. Da B_k tridiagonal ist, also $b_{2j} = 0$ für $j > 3$, bleiben alle Elemente der ersten Zeile der resultierenden Matrix mit einem Spaltenindex größer als Drei Null. Nun ist

$$\begin{aligned} B_{k+1} &= R_k Q_k = R_k G_{1,k} \dots G_{n-1,k} = \begin{pmatrix} * & * & * & 0 & 0 \\ * & * & * & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} G_{2,k} \dots G_{n-1,k} \\ &= \begin{pmatrix} * & * & * & 0 & 0 \\ * & * & * & * & 0 \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} G_{3,k} \dots G_{n-11,k} = \dots = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

da $G_{1,k}$ nur die ersten beiden Zeilen beeinflusst, $G_{2,k}$ nur die zweite und dritte und so weiter. Nach Teil ii) ist B_{k+1} aber auch symmetrisch. Das bedeutet, dass der ganze Fill-in im oberen Dreieck über der oberen Hauptnebendiagonalen verschwindet. Damit ist B_{k+1} tridiagonal. ■

Satz 5.38 Iteration zur Approximation der Eigenwerte. Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch mit Eigenwerten $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, welche die Eigenschaft

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n| > 0$$

haben mögen. Weiter seien die Matrizenfolgen $\{A_k\}_{k \in \mathbb{N}}$, $\{Q_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ und $\{R_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ durch $A_1 = A$, $A_k = Q_k R_k$, $A_{k+1} = R_k Q_k$ definiert. Dann gibt es (Vorzeichen-) Matrizen $S_k = \text{diag}(\sigma_1^{(k)}, \dots, \sigma_n^{(k)})$ mit $|\sigma_i^{(k)}| = 1$ so dass

$$\lim_{k \rightarrow \infty} S_{k-1} Q_k S_k = I$$

und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} S_k R_k S_{k-1} = \lim_{k \rightarrow \infty} S_{k-1} A_k S_k = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = D.$$

Es gilt also insbesondere, da aus der Existenz des Grenzwertes $S_{k-1} = S_k$ ab einem gewissen Index folgt, dass

$$\lim_{k \rightarrow \infty} a_{jj}^{(k)} = \lambda_j, \quad j = 1, \dots, n,$$

wobei $a_{jj}^{(k)}$ das j -te Diagonalelement von A_k ist.

Beweis: Der Beweis ist recht umfangreich und deshalb wird auf die Literatur verwiesen, zum Beispiel auf Wilkinson (1965). ■

Bemerkung 5.39 Zu Satz 5.38.

- Satz 5.38 bietet einen Algorithmus zur Konstruktion einer Schur-Faktorisierung von A gemäß (5.4).
- Der Algorithmus aus Satz 5.38 lässt sich als Verallgemeinerung der Vektoriteration auffassen. Er entspricht der Projektion auf die Unterräume, die von den Spalten von A_k aufgespannt werden, siehe (Stoer and Bulirsch, 2005, S. 58). □

Algorithmus 5.40 *QR-Verfahren zur Eigenwertberechnung.* Sei die symmetrische matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gegeben.

1. Transformiere A mit Hilfe von Householder-Spiegelungen auf Tridiagonalgestalt $B = Q^T A Q$.
2. Wende auf B den Algorithmus aus Satz 5.38 mit Givens-Drehungen an, womit

$$G B G^T \approx D$$

und G das Produkt aller Givens-Matrizen ist. Die Diagonale von $G B G^T$ approximiert die Eigenwerte von A und die Spalten von $G Q^T$ die zugehörigen Eigenvektoren. □

Bemerkung 5.41 *Zum QR-Verfahren.*

- Der Aufwand des ersten Schrittes beträgt $\mathcal{O}(\frac{2}{3}n^3)$ Multiplikationen/Divisionen. Jede Iteration im 2. Schritt benötigt $\mathcal{O}(n^2)$ Multiplikationen/Divisionen.
- Man kann zeigen, dass die Konvergenzgeschwindigkeit des QR-Verfahrens von den Faktoren $|\lambda_{j+1}/\lambda_j|$ für $j = 1, \dots, n-1$, abhängt. Liegt dieser Wert für einen oder mehrere Indizes nahe bei Eins, dann ist die Effizienz des Verfahrens schlecht. Abhilfe kann man auch hier mit einer Spektralverschiebung schaffen, vergleiche Algorithmus 5.30.
- Mit einigen Modifikationen lässt sich das Verfahren auch auf nichtsymmetrische Matrizen anwenden, siehe beispielsweise Stoer and Bulirsch (2005). □