

51 Numerische Berechnung von Eigenwerten und Eigenvektoren

51.1 Motivation

Die Berechnung der Eigenwerte einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ als Lösungen der charakteristischen Gleichung (vgl. Kapitel 45) ist für $n \geq 5$ unpraktikabel, da für allgemeine Polynomgleichungen höheren als vierten Grades keine algebraische Auflösungsformel existiert. Daher sind numerische Näherungsverfahren notwendig.

51.2 Einfache Vektoriteration

Andere Bezeichnungen: Potenzmethode, von-Mises-Verfahren

Idee: Es sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch und $u_0 \in \mathbb{R}^n$ ein beliebiger Vektor. Wir betrachten die Iterationsvorschrift

$$u_{k+1} = Au_k, \quad k = 0, 1, \dots \quad (*)$$

Was lässt sich über die Folge (u_k) aussagen?

Im Folgenden seien $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ die (reellen) Eigenwerte der Matrix A und v_1, \dots, v_n zugehörige orthonormale Eigenvektoren. Ohne Einschränkung der Allgemeingültigkeit gelte $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_n|$.

Es sei nun

$$u_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i v_i$$

die Darstellung von u_0 bezüglich der Basis $\{v_1, \dots, v_n\}$. Dann gilt

$$u_1 = Au_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i Av_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i v_i.$$

Allgemein ergibt sich (vgl. Satz 45.15)

$$u_k = A^k u_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^k v_i = \lambda_1^k \left(\alpha_1 v_1 + \sum_{i=2}^n \frac{\lambda_i^k}{\lambda_1^k} \alpha_i v_i \right).$$

Falls $|\lambda_1| > |\lambda_2|$ (man sagt in diesem Falle, λ_1 ist **dominanter Eigenwert**), so konvergiert $\sum_{i=2}^n \frac{\lambda_i^k}{\lambda_1^k} \alpha_i v_i$ für $k \rightarrow \infty$ gegen den Nullvektor (da $\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)$ geometrische Folge mit einem Quotienten betragsmäßig kleiner als 1 ist).

Ist daher der „Startvektor“ u_0 „allgemein“ gewählt (präzise: so, dass $\alpha_1 \neq 0$), so konvergieren die Vektoren $\frac{u_k}{\lambda_1^k}$ gegen $\alpha_1 v_1$, also bis auf Normierung gegen den **dominanten Eigenvektor** v_1 . Die Konvergenz ist um so schneller, je kleiner die $\left|\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right|$ für $i = 2, \dots, n$ sind.

Weiterhin konvergiert auch der Rayleigh-Koeffizient

$$R_A(u_k) = \frac{u_k^T A u_k}{u_k^T u_k} = \frac{u_k^T u_{k+1}}{u_k^T u_k}$$

gegen

$$\lim_{k \rightarrow \infty} R_A(u_k) = \frac{(\alpha_1 v_1)^T (\lambda_1 \alpha_1 v_1)}{(\alpha_1 v_1)^T (\alpha_1 v_1)} = \lambda_1 .$$

Ergebnis: Die Vektoriteration (*) ist ein einfaches Verfahren zur numerischen Annäherung des dominanten Eigenwertes (und damit der Spektralnorm) sowie des dominanten Eigenvektors einer symmetrischen Matrix.

In der Praxis möchte man die durch den Faktor λ_1^k erzeugten sehr großen (falls $|\lambda_1| > 1$) oder sehr kleinen (falls $|\lambda_1| < 1$) numerischen Werte vermeiden. Man normiert u_k daher nach jedem Iterationsschritt.

51.3 Beispiel

Gegeben sei $A = \begin{pmatrix} 0,9635 & 1,4266 \\ 1,4266 & 0,0365 \end{pmatrix}$ und der (bereits normierte) Anfangsvektor $u_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Wir berechnen mit 4 Nachkommastellen

i	$u_i := A\tilde{u}_{i-1}$	$\tilde{u}_i := \frac{u_i}{ u_i }$	$R_A(\tilde{u}_{i-1})$
0	$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$	
1	$\begin{pmatrix} 1,4266 \\ 0,0365 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,9997 \\ 0,0256 \end{pmatrix}$	0,0365
2	$\begin{pmatrix} 0,9997 \\ 1,4271 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,5737 \\ 0,8190 \end{pmatrix}$	1,0358
3	$\begin{pmatrix} 1,7211 \\ 0,8483 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,8970 \\ 0,4421 \end{pmatrix}$	1,6824
4	$\begin{pmatrix} 1,4950 \\ 1,2958 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,7557 \\ 0,6550 \end{pmatrix}$	1,9137
5	$\begin{pmatrix} 1,6625 \\ 1,1020 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,8335 \\ 0,5525 \end{pmatrix}$	1,9780
6	$\begin{pmatrix} 1,5913 \\ 1,2092 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,7962 \\ 0,6050 \end{pmatrix}$	1,9944
7	$\begin{pmatrix} 1,6302 \\ 1,1579 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,8153 \\ 0,5791 \end{pmatrix}$	1,9985
8	$\begin{pmatrix} 1,6117 \\ 1,1842 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,8059 \\ 0,5921 \end{pmatrix}$	1,9996
9	$\begin{pmatrix} 1,6212 \\ 1,1713 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,8106 \\ 0,5856 \end{pmatrix}$	1,9999
10	$\begin{pmatrix} 1,6164 \\ 1,1778 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0,8082 \\ 0,5889 \end{pmatrix}$	2,0000

Tatsächlich ist (auf 4 Nachkommastellen) der dominante Eigenwert von A gleich 2 und der zugehörige normierte Eigenvektor $\begin{pmatrix} 0,8090 \\ 0,5878 \end{pmatrix}$.

Kann man auch die nicht dominanten Eigenwerte und Eigenvektoren bestimmen?

Wir lernen jetzt ein einfaches und robustes Verfahren zur Bestimmung *aller* Eigenwerte und Eigenvektoren einer symmetrischen Matrix kennen.

51.4 Das Jacobi-Verfahren

Grundidee: Wendet man auf eine symmetrische Matrix A eine orthogonale Matrix Q an, so erhält man die Matrix $Q^T A Q$, die dieselben Eigenwerte wie A besitzt, vgl. 44.8 (Wechsel zwischen Orthonormalbasen) und 46.4 (Hauptachsentransformation).

Man transformiert nun A mithilfe einer Folge (Q_k) orthogonaler Matrizen auf Diagonalgestalt. Damit wird (numerisch angenähert) die Hauptachsennorm $A = Q \Lambda Q^T$ erzeugt, aus der die Eigenwerte und Eigenvektoren abgelesen werden können.

Algorithmische Umsetzung: Als orthogonale Transformationen verwendet man Rotationsmatrizen vom Typ

$$Q(i, j, \varphi) := \begin{pmatrix} 1 & 0 & & \dots & & & & 0 \\ 0 & \ddots & & & & & & \\ & & \cos \varphi & \dots & \sin \varphi & & & \\ & & & 1 & & & & \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & & \vdots \\ & & & & & 1 & & \\ & & -\sin \varphi & \dots & \cos \varphi & & & \\ & & & & & & \ddots & 0 \\ 0 & & & \dots & & & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

(die Rotationsmatrixeinträge stehen in der i -ten und j -ten Zeile und Spalte).

Die Anwendung von $Q(i, j, \varphi)$ verändert nur die i -te und j -te Zeile und Spalte von A .

Man iteriert nun über die Nichtdiagonalelemente a_{ij} . Wird im Iterationsschritt k das Element a_{ij} , $i \neq j$, betrachtet, so wählt man den Rotationswinkel φ_k so,

dass $Q = Q(i, j, \varphi_k)$ gerade die Einträge a_{ij} und a_{ji} zu Null macht: Mit

$$\varphi_k := \frac{1}{2} \operatorname{arccot} \frac{a_{jj} - a_{ii}}{2a_{ij}}$$

erhält man

$$\begin{pmatrix} a'_{ii} & a'_{ij} \\ a'_{ji} & a'_{jj} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi_k & -\sin \varphi_k \\ \sin \varphi_k & \cos \varphi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ a_{ji} & a_{jj} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varphi_k & \sin \varphi_k \\ -\sin \varphi_k & \cos \varphi_k \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} \cos^2 \varphi_k \cdot a_{ii} - 2 \cos \varphi_k \sin \varphi_k \cdot a_{ij} & \cos \varphi_k \sin \varphi_k (a_{ii} - a_{jj}) \\ \quad + \sin^2 \varphi_k \cdot a_{jj} & \quad + (\cos^2 \varphi_k - \sin^2 \varphi_k) a_{ij} \\ \cos \varphi_k \sin \varphi_k (a_{ii} - a_{jj}) & \sin^2 \varphi_k \cdot a_{ii} + 2 \cos \varphi_k \sin \varphi_k \cdot a_{ij} \\ \quad + (\cos^2 \varphi_k - \sin^2 \varphi_k) a_{ij} & \quad + \cos^2 \varphi_k \cdot a_{jj} \end{pmatrix},$$

wobei wegen

$$\frac{\cos^2 \varphi_k - \sin^2 \varphi_k}{2 \cos \varphi_k \sin \varphi_k} = \frac{\cos(2\varphi_k)}{\sin(2\varphi_k)} = \cot(2\varphi_k) = \frac{a_{jj} - a_{ii}}{2a_{ij}}$$

die Nebendiagonaleinträge $a'_{ij} = a'_{ji}$ verschwinden.

Bei wiederholtem Durchlauf über alle Nichtdiagonaleinträge entsteht so eine Kette von orthogonalen Transformationen Q_1, Q_2, \dots , und man kann zeigen, dass

$$Q_k^T \dots Q_2^T Q_1^T A Q_1 Q_2 \dots Q_k \rightarrow \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \quad \text{für } k \rightarrow \infty.$$

Zugleich enthält die i -te Spalte der orthogonalen Matrix $P_k := Q_1 Q_2 \dots Q_k$ eine Approximation des Eigenvektors zum Eigenwert λ_i . Auch im Falle mehrfacher Eigenwerte entsteht automatisch ein orthonormales Eigenvektorsystem (keine Gram-Schmidt-Orthonormalisierung erforderlich).

Ein ausgearbeiteter Algorithmus zum Jacobi-Verfahren ist zu finden in

H. R. Schwarz: Numerische Mathematik. Teubner, Stuttgart.

Komplexität: Im Falle einer $n \times n$ -Matrix werden pro Zyklus (einmaliges Durchlaufen aller Nichtdiagonaleinträge) etwa $32n^3$ Multiplikationen benötigt. Typischerweise sind etwa sechs bis acht Zyklen erforderlich.

Bemerkungen: Die numerische Berechnung von Eigenwerten (und Eigenvektoren) ist rechenaufwändig.

Sowohl für symmetrische Matrizen als auch im allgemeineren Fall nichtsymmetrischer Matrizen gibt es weitere, kompliziertere Verfahren zur Eigenwertbestimmung.