NEUERE VERFAHREN ZUR BESTIMMUNG DER EIGENWERTE VON MATRIZEN

L. Elsner

1. EINLEITUNG

Wir werden in dieser Arbeit über einen Algorithmus zur Bestimmung aller Eigenwerte einer reellen Matrix berichten. Er ist im Rahmen der Theorie von Della Dora der einzige vernünftige Algorithmus neben dem QR-Algorithmus, wenn man sich auf Gruppen von Isometrien beschränkt. Es stellt sich heraus, daß er durchaus konkurrenzfähig zum QR-Algorithmus ist.

2. DIE THEORIE VON DELLA DORA

Wir umreißen kurz die Theorie von Della Dora [2], die davon ausgeht, daß QR- und LR-Algorithmus große formale Ähnlichkeit besitzen.
Sei $GL_n(R)$ die (multiplaktive) Gruppe der nichtsingulären reellen $n{\times}n$-Matrizen und T_n^+ die Gruppe der oberen Dreiecksmatrizen in $GL_n(R)$. Sei G eine Untergruppe von $GL_n(R)$, T eine Untergruppe von T_n^+ und

$$\Omega = GT = \{g\tau : g \in G, \tau \in T\} \quad .$$

Es sei

(1) Ω offen in $GL_n(R)$, $\overline{\Omega} = GL_n(R)$, $G \cap T = \{I\}$.

(2) $G \cap T_n^+$ bestehe aus Diagonalmatrizen.

Dann existiert für fast alle $A \in GL_n(R)$ die eindeutige Zerlegung

$$A = g\tau \ , \quad g \in G \ , \quad \tau \in T$$

und es sei dabei

(3) $A \to g$ stetig.

Zu gegebenem A sei der Algorithmus

(4) $A_1 = A$; $A_i = g_i r_i$, $A_{i+1} = r_i g_i$ $\qquad i = 1,2,\ldots$

konstruierbar (d.h. $A_i \in \Omega$, $i = 1,2,\ldots$) .
Sei A diagonalisierbar, $A = XDX^{-1}$, wobei gelte

$$X^{-1} \text{ besitzt LR-Zerlegung, } X \in \Omega \quad .$$

Die Eigenwerte von A mögen verschiedene Beträge besitzen. Dann konvergiert die Folge der Diagonalelemente von A_i gegen die Eigenwerte von A .

3. BEISPIELE

Neben den Standardbeispielen $G = O_n$ = orthogonale Gruppe, $T = T_n^+$ mit positiver Diagonale bzw. G = untere Dreiecksmatrizen mit 1-er Diagonale, $T = T_n^+$, die zum QR- bzw. zum LR-Algorithmus führen, schlug Della Dora bereits die Verwendung der symplektischen Gruppe S vor:

Sei

$$J_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

und für $n = 2k$ gerade

$$J = \mathrm{diag}(J_1,\ldots,J_1) = I_k \times J_1$$

wo I_k die k-dimensionale Einheitsmatrix und "x" das Tensorprodukt bezeichnet.

S_{2k} ist die Gruppe der Isometrien bezüglich der alternierenden Bilinearform

$$(x,y)_J = x^T J y \quad ,$$

d.h.

$$\begin{aligned} S_{2k} &= \{B \in GL_n(R) \mid (Bx,By)_J = (x,y)_J \text{ für alle } x,y \in R^n\} \\ &= \{B \in GL_n(R) \mid B^T J B = J\} \ . \end{aligned}$$

Aus den Ergebnissen des 5. Abschnitts in [3] läßt sich folgendes Resultat herleiten:

<u>Satz 1</u>

Sei G eine Gruppe von Isometrien bezüglich einer symmetrischen oder alternierenden nichtsingulären Bilinearform. Dann sind äquivalent

(1) GT_n^+ dicht in $GL_n(R)$

(2) $G = R\, O_n\, R^{-1}$ mit $R \in T_n^+$ oder
$n = 2k$ und $G = RS_{2k}R^{-1}$ mit $R \in T_n^+$.

Das zeigt, daß das einzige zusätzliche vernünftige Beispiel $G = S_{2k}$ ist, wenn man sich auf Isometrien beschränkt und von Ähnlichkeitstransformationen mit oberen Dreiecksmatrizen absieht.

Zur Diskussion von (1) (2) bemerkt man schnell, daß

$$B \in S_{2k} \cap T_{2k}^+ \Leftrightarrow B = \mathrm{diag}(B_i) \ , \quad B_i = \begin{pmatrix} a_i & c_i \\ 0 & a_i^{-1} \end{pmatrix} , \quad a_i \neq 0 \ .$$

Um eine eindeutige Zerlegung, d.h. $G \cap T = \{I\}$ zu erreichen, muß man S_{2k} oder T_{2k}^+ einschränken.

Zwei Möglichkeiten sind

(a) $\quad G = \hat{S}_{2k} = \{B \in S_{2k}\ ,\ \sum_{\nu=1}^{n} b_{i\nu} = 1\ ,\quad i = 1,\ldots,n\}\ ,\quad T = T_{2k}^{+}\ .$

(1) (2) sind erfüllt.

(b) $$G = S_{2k}\ ,\quad T = \{T \in T_{2k}^{+} \mid \begin{pmatrix} t_{2i+1,2i+1} & t_{2i+2,2i+1} \\ t_{2i+2,2i+1} & t_{2i+2,2i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_i & 0 \\ 0 & \pm\alpha_i \end{pmatrix}\ ,$$

$$\alpha_i > 0\ ,\quad i = 0,\ldots,n-1\}\ .$$

(1) ist erfüllt, (2) nicht.

4. ZUR NUMERISCHEN DURCHFÜHRUNG

Viele der besonderen Tricks, die zur schnellen Durchführung des QR-Algorithmus beitragen, lassen sich auch beim auf der Zerlegung

$$\Omega = \hat{S}_{2k} \cdot T_{2k}^{+}$$

beruhenden nunmehr SR-Algorithmus genannten Verfahren (4) anwenden.

(i) So ist evident, daß mit A_1 auch sämtliche A_i obere Hessenbergmatrizen sind.

(ii) Um die Zerlegung $A = s \cdot r \quad s \in S_{2k}\ ,\ r \in T_{2k}^{+}$ zu berechnen, multipliziert man A von vorn mit einfachen Matrizen aus S_{2k} , um so alle Elemente unter der Diagonalen zu eliminieren. Als einfache Matrizen wählt man Transvektoren der Form $I + vw^T$. Hier gilt

$$I + vw^T \in S_{2k} \Leftrightarrow \exists u \text{ mit } I + vw^T = I \pm uu^T J\ .$$

(iii) Man weiß, daß A eine Zerlegung

$$A = sr\ ,\quad s \in S_{2k}\ ,\quad r \in T_{2k}^{+}$$

genau dann zuläßt, wenn alle führenden Hauptabschnittsdeterminanten gerader Ordnung von $A^T JA$ nicht verschwinden [3, Thm. 11]. Daraus ersieht man, daß nur für endlich viele Werte $\kappa \in R$ die Matrix $A + \kappa I$ keine SR-Zerlegung zuläßt. Ein Zusammenbruch läßt sich also stets durch Shifts (sog. exzeptionelle Shifts) vermeiden.

(iv) Ebenso wie beim QR-Algorithmus dienen Einzel- und Doppelshifts zur Konvergenzbeschleunigung. Die Vermeidung komplexer Arithmetik im Falle konjugiert-komplexer Shifts ist möglich aufgrund des folgenden Satzes.

Satz 2

Sei A gegeben, S,T zwei Matrizen in $\hat{S}_{2k}$ mit gleicher erster Spalte, H_1,H_2 zwei obere Hessenbergmatrizen, wo mindestens eine unreduziert sei (alle Elemente der unteren Nebendiagonale $\neq 0$) und

$$AS = SH_1 \;, \quad AT = TH_2 \;.$$

Dann ist $S = T$, $H_1 = H_2$.
Zum Beweis benötigen wir das folgende Ergebnis:

<u>Satz 3</u>
Sind H_1 , H_2 zwei obere Hessenbergmatrizen, wo mindestens eine unreduziert ist und U eine nichtsinguläre Matrix mit erster Spalte $e_1 = (1,0,\ldots,0)^T$ und

$$UH_1 = H_2U \;.$$

Dann ist U obere Dreiecksmatrix.
Der Beweis erfolgt dadurch, daß man durch Koeffizientenvergleich spaltenweise zeigt, daß die Elemente von U unter der Diagonale verschwinden.
Der Beweis von Satz 2 folgt nun aus der Beobachtung, daß $T^{-1}SH_1 = H_2T^{-1}S$ impliziert, daß $T^{-1}S \in \hat{S}_{2k} \cap T^+_{2k} = \{I\}$.

Das Vorgehen von Francis (siehe [5, p. 529]) kann ohne weiteres nachvollzogen werden. Dabei ist es nötig die folgenden Grundaufgaben zu lösen:

1. Zu $b \neq 0$ finde $S \in \hat{S}_{2k}$ mit $Sb = \kappa e_1$
2. Zu gegebener Matrix A finde $S \in \hat{S}_{2k}$, erste Spalte e_1 , so daß $S^{-1}AS$ obere Hessenbergmatrix ist.

Während 1. für $b_2 \neq 0$ mit einer Transvektion S leicht lösbar ist, ist 2. etwas mühevoller, da geradzahlige und ungeradzahlige Spalten bei der Elimination verschieden zu behandeln sind.
Es liegen einige numerische Erfahrungen vor, die im Rahmen einer Diplomarbeit von V. Mehrmann gewonnen worden sind [4].
Demnach benötigt der SR-Algorithmus meist etwas weniger Schritte als der QR-Algorithmus, wobei die Anzahl der Rechenoperationen pro Schritt jeweils etwa gleich sind.
Trotzdem ist der QR-Algorithmus noch schneller. Das scheint im wesentlichen daran zu liegen, daß der SR-Algorithmus etwas mehr Organisation verlangt, Deflation nur in Zweierschritten möglich ist und gelegentlich exzeptionelle Shifts nötig sind.

5. DER HR-ALGORITHMUS, EINE ERWEITERUNG

Ein zu Satz 1 analoges Ergebnis läßt sich ebenfalls aus [3] herleiten:

Satz 4

Sei J eine nichtsinguläre symmetrische Matrix, $(x,y)_J = x^TJy$ und G_J die Gruppe der zugehörigen Isometrien $\{B: B^TJB = J\}$. Dann sind äquivalent

(1) $G_JT_n^+$ besitzt innere Punkte

(2) Es gibt eine Matrix $R \in T_n^+$, so daß R^TJR eine Diagonalmatrix mit Diagonalelementen ± 1 ist.

Nach Satz 1 ist aber i.a. für

$$J \in \mathcal{J}_p = \{\text{diag}(\pm 1)\ ;\ p \text{ Diagonalelemente } -1\} \quad p \leq n/2$$

und $p \geq 1$ $\quad G_JT_n^+$ nicht dicht in $GL_n(R)$, also "zu klein". Für $J_1, J_2 \in \mathcal{J}_p$ sei

$$G_{J_1,J_2} = \{S: S^TJ_1S = J_2\}$$

d.h. die Menge aller Matrizen mit $(Sx,Sy)_{J_1} = (x,y)_{J_2}$.

Dann gilt das folgende Ergebnis, das im wesentlichen eine Umformulierung von [3, Thm. 9, 10] darstellt.

Satz 5

Sei $J_1 \in \mathcal{J}_p$ und

$$\hat{G}_{J_1} = \bigcup_{J \in \mathcal{J}_p} G_{J_1,J} \quad .$$

Dann gilt

(1) für $J_2, J_3 \in \mathcal{J}_p$ ist

$$G_{J_1,J_2}T_n^+ \cap G_{J_1,J_3}T_n^+ \neq \emptyset \Leftrightarrow J_2 = J_3$$

(2) $\hat{G}_{J_1}T_n^+$ dicht in $GL_n(R)$

(3) $\hat{G}_{J_1} \cap T_n^+$ besteht aus Diagonalmatrizen.

Der sogenannte HR-Algorithmus, der etwa in [1] (siehe dort auch weitere Literatur) behandelt wird, beruht auf der Zerlegung $\hat{G}_{J_1}T_n^+$ für verschiedene, von Schritt zu Schritt wechselnde J_1. Seine besonderen Vorteile sind die Erhaltung der Pseudosymmetrie (A pseudosymmetrisch $\Leftrightarrow \exists\ J = \text{diag}(\pm 1)$ mit $JA = (JA)^T$) und damit die Erhaltung der Form betragssymmetrischer Tridiagonalmatrizen.

LITERATUR

[1] A. Bunse-Gerstner: Der HR-Algorithmus zur numerischen Bestimmung der Eigenwerte einer Matrix.
Dissertation, Bielefeld, 1978.

[2] J. Della Dora: Numerical linear algorithms and group theory.
Linear Algebra and Applications 10, 267-283, 1973.

[3] L. Elsner: On some algebraic problems in connection with general eigenvalue algorithms.
To appear in Linear Algebra and Applications.

[4] V. Mehrmann: Der SR-Algorithmus.
Diplomarbeit, Bielefeld, 1979.

[5] J.H. Wilkinson: The algebraic eigenvalue problem.
Clarendon Press, Oxford, 1967.