

Kapitel 10

Von–Mises–Wielandt–Verfahren

Im Folgenden wollen wir uns ausschließlich auf reelle, symmetrischen Matrizen der Ordnung n beschränken. Wie im letzten Kapitel diskutiert, sind für solche Matrizen alle Eigenwerte λ_i , $i = 0, 1, \dots, n - 1$, und Eigenvektoren \mathbf{u}_i reell. Weiters gilt, dass die Eigenvektoren ein vollständiges Basissystem bilden, d.h., dass jeder Vektor \mathbf{x} auf diesen Satz von Vektoren aufgespannt werden kann,

$$\mathbf{x} = \sum_i c_i \mathbf{u}_i. \quad (10.1)$$

Unter der Annahme, dass alle \mathbf{u}_i die Länge Eins besitzen, d.h. $\|\mathbf{u}_i\| = 1$, sind die Koeffizienten durch $c_i = \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{x}$ gegeben.

10.1 Größter Eigenwert einer Matrix

Das Verfahren von v. Mises und Wieland ist das einfachste Verfahren unter den sogenannten Unterraummethoden. Da es in der Regel nur langsam konvergiert, wird es in der ursprünglichen Form in der Praxis fast nie angewendet. Sein Verständnis ist aber grundlegend für das vieler anderer Verfahren. Deshalb wollen wir hier etwas ausführlicher darauf eingehen.

Das Verfahren besteht darin, dass man versucht, den größten Eigenwert einer Matrix \mathbf{A} zu bestimmen (weiter unten werden wir auch Verallgemeinerungen für die Bestimmung des kleinsten bzw. beliebiger Eigenwerte angeben). Es soll ein geeigneter Startvektor $\mathbf{x}^{(0)}$ gegeben sein, den wir entsprechend Glg. (10.1) auf die Eigenvektoren aufspannen können,

$$\mathbf{x}^{(0)} = \sum_i c_i \mathbf{u}_i. \quad (10.2)$$

Es sei an dieser Stelle betont, dass wir die Eigenvektoren \mathbf{u}_i *nicht* kennen. Allerdings wird sich im Folgenden zeigen, dass wir ausgehend von Glg. (10.2) einige bestimmte Eigenwerte sowie zugehörige Eigenvektoren einfach bestimmen können. Dazu multiplizieren wir Glg. (10.2) von links mit \mathbf{A} , und erhalten

$$\mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)} = \sum_i c_i \lambda_i \mathbf{u}_i. \quad (10.3)$$

Entsprechend liefert die k -fache Anwendung von \mathbf{A}

$$\mathbf{A}^k \mathbf{x}^{(0)} = \sum_i c_i \lambda_i^k \mathbf{u}_i = \lambda_0^k \left(c_0 \mathbf{u}_0 + \sum_{i=1}^{n-1} c_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right)^k \mathbf{u}_i \right), \quad (10.4)$$

wobei wir im letzten Schritt den betragsmäßig größten Eigenwert λ_0 herausgezogen haben. Offensichtlich gilt, dass in der Summe alle Beiträge mit $|\lambda_i| < \lambda_0$ für $k \rightarrow \infty$ gegen Null gehen. Also gilt

$$\frac{1}{\lambda_0^k} \mathbf{A}^k \mathbf{x}^{(0)} \longrightarrow c_0 \mathbf{u}^{(0)} \quad \text{mit } k \rightarrow \infty. \quad (10.5)$$

Durch sukzessive Anwendung der Matrix \mathbf{A} auf den Startvektor $\mathbf{x}^{(0)}$ erhalten wir somit den betragsmäßig größten Eigenwert sowie den zugehörigen Eigenvektor. Damit das Verfahren funktioniert muss also gelten, dass kein Eigenwert λ_i betragsmäßig gleich λ_0 ist (d.h. nur *ein* größter Eigenwert existiert) sowie der ursprüngliche Startvektor $\mathbf{x}^{(0)}$ eine von Null verschiedene Komponente entlang \mathbf{u}_0 besitzt (d.h. $c_0 \neq 0$).

Es ist einsichtig, dass es numerisch nicht sinnvoll ist, die Folge $\mathbf{A}^k \mathbf{x}^{(0)}$ zu berechnen, weil dann sehr schnell sehr große bzw. sehr kleine Zahlen auftreten. Man wird also $\mathbf{x}^{(k)}$ jedesmal wieder geeignet normieren, da es bei einem Eigenvektor ohnehin nicht auf den Normierungsfaktor ankommt. Dies ergibt folgende Rechenvorschrift: Gegeben sei $\mathbf{x}^{(0)}$ mit $\|\mathbf{x}^{(0)}\| = 1$. Für $k = 1, 2, \dots$ berechne man

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^{(k)} &= \mathbf{A} \mathbf{x}^{(k-1)}, \\ \rho_k &= \mathbf{x}^{(k-1)} \cdot \mathbf{y}^{(k)}, \\ \mathbf{x}^{(k)} &= \mathbf{y}^{(k)} / \|\mathbf{y}^{(k)}\| \end{aligned} \quad (10.6)$$

solange, bis sich der approximative Eigenwert ρ_k bzw. Eigenvektor $\mathbf{x}^{(k)}$ nur mehr geringfügig ändert. Das vollständige Verfahren ist in Box 10.1 dargestellt.

Aufgabe 10.1— Implementieren Sie das Von-Mises-Wielandt-Verfahren. Benutzen Sie die Vorlage aus

Von–Mises–Wielandt–Verfahren

1. Gegeben sei eine reelle, symmetrische $n \times n$ -Matrix \mathbf{A} , ein Startvektor $\mathbf{x}^{(0)} \neq \mathbf{0}$ sowie die Toleranz ϵ (z.B. $\epsilon = 10^{-8}$)
2. Schleife über $k = 1, 2, \dots$
 - (a) Berechne $\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{A} \mathbf{x}^{(k-1)}$
 - (b) Berechne $\rho_k = \mathbf{x}^{(k-1)} \cdot \mathbf{y}^{(k)}$
 - (c) Setze $\mathbf{x}^{(k)} = \mathbf{y}^{(k)} / \|\mathbf{y}^{(k)}\|$
3. Falls $|\rho^{(k)} - \rho^{(k-1)}| > \epsilon$ zurück zu 2.

Box 10.1. Von–Mises–Wielandt–Verfahren zur Bestimmung des größten Eigenwertes einer reellen, symmetrischen $n \times n$ -Matrix. Nach Abbruch der Schleife über k ist ρ_k der angenäherte größte Eigenwert und $\mathbf{x}^{(k)}$ der zugehörige angenäherte Eigenvektor.

<http://physik.uni-graz.at/~uxh/lineare-algebra/EigenIterate.cc>

und vervollständigen Sie die Funktion `double iterate`, die die Schritte (a–c) aus Box 10.1 durchführt, und den approximativen Eigenwert ρ_k zurückliefert.

Testen Sie das Verfahren für die Matrix

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 17 & 3 & 2 & 13 \\ 3 & 11 & 11 & 8 \\ 2 & 11 & 8 & 12 \\ 13 & 8 & 12 & 2 \end{pmatrix}, \quad (10.7)$$

mit dem betragsmäßig größten Eigenwert 34.0455 und dem zugehörigen Eigenvektor $(-0.344151, -0.0872938, -0.477034, 0.8080655)$.

10.2 Kleinster Eigenwert einer Matrix

In vielen Anwendungen sind die betragskleinsten Eigenwerte gesucht. Der betragskleinste Eigenwert von \mathbf{A} ist der inverse betragsgrößte Eigenwert von \mathbf{A}^{-1} . Die Anwendung des Verfahrens aus dem vorigen Abschnitt auf \mathbf{A}^{-1} liefert also die Möglichkeit, den betragskleinsten Eigenwert von \mathbf{A} zu bestimmen.

Aufgabe 10.2— Vervollständigen Sie das Programm aus Aufgabe 10.1 so, dass auch der betragsmäßig kleinste Eigenwert berechnet wird. Benutzen Sie hierzu die in Kapitel 4 erstellte Routine `GaussJordanPivot`.

Testen Sie das Verfahren für die Matrix aus Aufgabe 10.1, wobei der betragsmäßig kleinste Eigenwert -0.391124 ist.

Löschen Sie in `EigenvIterate.cc` die Zeile

```
1 fill (x,x+n,0.); x[n-1]=1;
```

Welches Ergebnis erhalten Sie? Warum?

Bei der Bestimmung des betragskleinsten Eigenwertes ist es nicht einmal nötig, \mathbf{A}^{-1} explizit zu bilden. Vielmehr genügt es, die Bildung von $\mathbf{y}^{(k)}$ durch

$$\mathbf{A}\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k-1)} \quad (10.8)$$

zu ersetzen. Somit können wir auch das LU -Verfahren bzw. seine Verallgemeinerung für tridiagonale Matrizen verwenden.

Harmonischer Oszillator.—Gegeben sei die Eigenwertgleichung

$$\frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dx^2} + x^2 \right) \psi(x) = E \psi(x), \quad (10.9)$$

für die der kleinste Eigenwert E_0 sowie der zugehörige Eigenvektor $\psi_0(x)$ gesucht seien. Für $x \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$ können wir den Ortsbereich in n äquidistante Intervalle der Länge h unterteilen.

Der Differentialoperator in Glg. (10.9) kann dann entsprechend der Diskussion aus Abschnitt 6.4.2 diskretisiert werden, und wir erhalten eine Tridiagonalmatrix mit den Diagonalelementen

$$\frac{1}{h^2} + (-L/2 + i \cdot h)^2, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n-1, \quad (10.10)$$

und den Nebendiagonalelementen $-1/(2h^2)$.

Aufgabe 10.3— Berechnen Sie den kleinsten Eigenwert für den harmonischen Oszillator. Benutzen Sie die Vorlage

<http://physik.uni-graz.at/~uxh/lineare-algebra/EigenvHarmonic.cc>

sowie die Klasse `Tridiag` aus Abschnitt 6.4.1 zur Invertierung von tridiagonalen Matrizen, und vervollständigen Sie die Schleife über `it` im Hauptprogramm. Welches Ergebnis erhalten Sie?

10.3 Beliebige Eigenwerte

Schließlich wollen wir noch diskutieren, wie man beliebige Eigenwerte bestimmt. Wenn wir in der Gleichung $\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ auf beiden Seiten den Term $\mu\mathbf{x}$ subtrahieren, erhalten wir

$$(\mathbf{A} - \mu\mathbf{I})\mathbf{x} = (\lambda - \mu)\mathbf{x}. \quad (10.11)$$

Offensichtlich können wir diese Gleichung benutzen, um die Eigenwerte zu bestimmen, die am nächsten bei μ liegen. Dazu verwenden wir das Verfahren aus dem vorigen Abschnitt zur Berechnung des betragskleinsten Eigenwertes, allerdings für die “verschobene” Matrix $\mathbf{A} - \mu\mathbf{I}$ anstelle von \mathbf{A} .

Bei der Diskussion des *QL*-Verfahrens werden wir noch einmal auf diese “Verschiebung” zurückkommen und zeigen, dass das Konvergenzverhalten durch geeignete Wahl von μ gesteuert werden kann.

Aufgabe 10.4— Versuchen Sie durch “Verschiebung” die restlichen Eigenwerte aus Aufgabe 10.1 zu bestimmen.