STICHTING
MATHEMATISCH CENTRUM
2e BOERHAAVESTRAAT 49
AMSTERDAM
ZW 1961-001

Voordracht in de serie "Actualiteiten"

Dr. Th.J. Dekker

28 januari 1961

Een directe methode voor het bepalen van eigenwaarden en eigenvectoren

1961

STICHTING
MATHEMATISCH CENTRUM
2e BOERHAAVESTRAAT 49
AMSTERDAM

ZW 1961-001

Voordracht in de serie "Actualiteiten"
door

Dr. Th.J. Dekker

28 januari 1961

Een directe methode voor het bepalen van eigenwaarden en eigenvectoren

De eigenwaarden van een vierkante matrix A zijn de wortels van de karakteristieke vergelijking $\det(A-\lambda I) = 0$. Dit is een vergelijking van de graad n in λ, als n de orde van A is. De coëfficiënten van deze vergelijking zijn sommen van subdeterminanten van A en kunnen volgens een directe, d.w.z. niet-iteratieve, methode berekend worden. Heeft men de coëfficiënten berekend, dan zou men de wortels λ_i m.b.v. een of ander iteratief proces kunnen bepalen. De eigenkolommen x_i kan men daarna vinden door het oplossen der homogene lineaire stelsels $(A-\lambda_i I)x_i = 0$.
Deze theoretisch voor de hand liggende methode is numeriek gezien zeer inefficient. De wortels van een n-de graadsvergelijking kunnen namelijk zeer gevoelig zijn voor kleine afwijkingen in de coëfficiënten.
Een niet-defecte matrix A heeft n lineair onafhankelijke eigenkolommen; deze vormen samen een niet-singuliere vierkante matrix $X = (x_{ij})$, waarbij x_{ij} = j-de element van de i-de eigenkolom. Deze matrix X transformeert matrix A in de diagonale vorm Λ, d.w.z. $X^{-1}AX = \Lambda$, waarbij de diagonale elementen van Λ de eigenwaarden van A zijn.
Als A een reële symmetrische matrix is, dan heeft A altijd n lineair onafhankelijke eigenvectoren en kan dus steeds in diagonale vorm getransformeerd worden. De matrix X is dan orthogonaal, d.w.z.: $X^{-1} = X^T$.

Er zijn diverse numerieke methoden ter bepaling van eigenwaarden en -vectoren (W. Givens [6], [7], C. Lanczos [9]), die gebaseerd zijn op transformatie van de matrix in een tripel diagonale matrix (d.w.z. $a_{ij} = 0$ als $|i-j| > 1$) m.b.v. een direct rekenproces, gevolgd door een iteratieve bepaling van de eigenwaarden. A.S. Householder [5] en J.H. Wilkinson [1] hebben een zeer practische methode aangegeven om een symmetrische matrix in een tripel diagonale vorm te transformeren. Daarvoor worden orthogonale symmetrische matrices gebruikt van de vorm

$$P_r = I - 2\, w_r\, w_r^T ,$$

waarbij w_r een genormeerde kolomvector is (d.w.z. $w_r^T\, w_r = 1$), waarvan de eerste r-1 elementen 0 zijn, m.a.w.

$$w_r^T = (0,\ldots,0,w_{rr},\ldots,w_{rn}).$$

De vector w_r moet genormeerd zijn om te zorgen dat P_r orthogonaal is.

Uitgaande van de symmetrische matrix $A^{(1)} = A$ worden achtereenvolgens geconstrueerd matrices $A^{(r)} = P_r A^{(r-1)} P_r$ $(r=2(1)n-1)$, zodanig, dat in de (r-1)-ste rij en kolom de gewenste nullen ontstaan.

Stel $A^{(r-1)}$ heeft de gedaante

$$\begin{pmatrix}
a_1 & b_1 & 0 & \cdots & & \cdots & 0 \\
b_1 & a_2 & \ddots & & & & \vdots \\
0 & \ddots & \ddots & \ddots & & & \vdots \\
\vdots & & a_{r-2} & b_{r-2} & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & & b_{r-2} & a_{r-1,r-1} & a_{r-1,r} & \cdots & a_{r-1,n} \\
\vdots & & 0 & a_{r-1,r} & a_{rr} & \cdots & a_{rn} \\
\vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
0 & \cdots & 0 & a_{r-1,n} & a_{rn} & \cdots & a_{nn}
\end{pmatrix}$$

De eerste r-2 rijen en kolommen (dus met name de reeds verkregen nullen) en bovendien het element $a_{r-1,r-1}$ worden door voor- en navermenigvuldiging met P_r niet gewijzigd. De vector w_r wordt nu zó gekozen, dat de elementen $a_{r-1,r+1},\ldots,a_{r-1,n}$ in 0 overgaan. Omdat de eerste r-1 elementen van w_r gelijk aan 0 zijn, blijft de (r-1)-ste rij ongewijzigd bij linksvermenigvuldiging met P_r. Voor de bepaling van w_r hoeven we dus slechts naar het effect van de rechtsvermenigvuldiging met P_r te kijken.

$$\begin{aligned} A^{(r-1)}P_r &= A^{(r-1)} - 2A^{(r-1)}w_r w_r^T \\ &= A^{(r-1)} - 2p\, w_r^T , \end{aligned}$$

als $p = A^{(r-1)}w_r$.

De eerste r-2 elementen van p zijn 0, m.a.w.

$$p^T = (0,\dots,0,p_{r-1},\dots,p_n).$$

Om nullen te krijgen op de (r-1)-ste rij moet w_r blijkbaar voldoen aan

$$(1) \qquad a_{r-1,j} - 2p_{r-1}w_{rj} = 0 \qquad (j=r+1(1)n).$$

Samen met de eis $w_r^T w_r = 1$ zijn dit n-r+1 vergelijkingen met n-r+1 onbekenden, die de elementen van vector w_r bijna eenduidig vastleggen.

Wegens de orthogonaliteit van P_r is de som der quadraten der elementen in elke rij van A invariant, zodat moet gelden:

$$(2) \qquad a_{r-1,r} - 2p_{r-1}\, w_{rr} = \pm\sqrt{S},$$

waarbij $S = a_{r-1,r}^2 + \dots + a_{rn}^2$.

Vermenigvuldigen we (1) met w_{rj} en (2) met w_{rr} en sommeren we, dan volgt wegens $w_r^T w_r = 1$:

$$p_{r-1} = \mp\, w_{rr}\sqrt{S}\ .$$

Dus:
$$w_{rr}^2 = \tfrac{1}{2}(1 \mp a_{r-1,r}/\sqrt{S})$$
$$w_{rj} = \mp\, a_{r-1,j}/(2w_{rr}\sqrt{S}) \qquad (j=r+1(1)n).$$

Om het wegvallen van cijfers bij de vorming van w_{rr}^2 te vermijden, kiezen we de volgende oplossing:

$$w_{rr} = \sqrt{\tfrac{1}{2}(1 + |a_{r-1,r}|/\sqrt{S})}$$
$$w_{rj} = a_{r-1,j}\ \mathrm{sign}(a_{r-1,r})/(2w_{rr}\sqrt{S}) \qquad (j=r+1(1)n).$$

De nieuwe waarde van $a_{r-1,r}$ wordt dan

$$b_{r-1} = -\ \mathrm{sign}(a_{r-1,r})\sqrt{S}.$$

Rest ons nog te bepalen hoe hierbij de submatrix

$$\begin{pmatrix} a_{rr} & - - - & a_{rn} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{rn} & & a_{nn} \end{pmatrix}$$

getransformeerd wordt. We hebben

$$P_r A^{(r-1)} P_r = (I-2w_r w_r^T)A^{(r-1)}(I-2w_r w_r^T)$$
$$= A^{(r-1)} - 2w_r q^T - 2q\, w_r^T,$$

waarbij $q = A^{(r-1)}w_r - (w_r^T A^{(r-1)} w_r) w_r$

$= p - (w_r^T p) w_r$.

Voert men de hierboven uiteengezette transformatie uit achtereenvolgens met $P_2, \ldots, P_{n-1}$, dan ontstaat een tripel-diagonale matrix

$$S = A^{(n-1)} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & & 0 \\ b_1 & a_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ 0 & & & b_{n-1} & a_n \end{pmatrix}$$

De volgende stap is het bepalen van de eigenwaarden van S, welke theoretisch gelijk zijn aan die van A en practisch daarmee redelijk overeenstemmen (zie J.H. Wilkinson [1] en [3]). Zij $S^{(i)}$ de submatrix bestaande uit de eerste i rijen en kolommen van S en

$$f_i(\lambda) = \det(\lambda I - S^{(i)}) \qquad (i=1(1)n).$$

Dan is $f_n(\lambda) = \det(\lambda I - S)$ de karakteristieke veelterm van S. De $f_i(\lambda)$ kunnen worden berekend met de recursie-formule:

$$f_i(\lambda) = (\lambda - a_i) f_{i-1}(\lambda) - b_{i-1}^2 \; f_{i-2}(\lambda) \qquad (i > 1)$$

met de beginwaarden $f_0 = 1$ en $f_1(\lambda) = \lambda - a_1$.

De methode van Givens([6] , [7]) berust op de volgende

Stelling: Als de nevendiagonaal van de symmetrische tripel diagonale matrix S geen nullen bevat (m.a.w. $b_i \neq 0$, $i = 1(1)n-1$), dan vormt de rij functies f_i $(i=0(1)n)$ een Sturm-rij; het aantal eigenwaarden van S groter dan a is gelijk aan het aantal tekenwisselingen in de rij $1, f_1(a), \ldots, f_n(a)$, mits $f_n(a) \neq 0$; de nulpunten van elke veelterm $f_i(\lambda)$ zijn verschillend en worden gescheiden door de nulpunten van $f_{i-1}(\lambda)$.

Deze stelling maakt het mogelijk de eigenwaarden van S op eenvoudige wijze en zeer nauwkeurig te bepalen.

De bij een eigenwaarde λ_i behorende eigenvector v_i van S wordt bepaald door oplossing van het homogene lineaire stelsel $(S - \lambda_i I) v_i = 0$.

De bijbehorende eigenvector x_i van A is dan

$$x_i = P_2 \ldots P_{n-1} v_i.$$

Komen er in de nevendiagonaal van S nullen voor, dan kan men de matrix S verdelen in submatrices, die apart behandeld kunnen worden. Volgens bovengenoemde stelling moet dit optreden, als S meervoudige eigenwaarden heeft. Zo'n meervoudige eigenwaarde is dan enkelvoudige eigenwaarde van verschillende submatrices en de daarbij gevonden eigenvectoren staan loodrecht op elkaar.

De transformatie van Householder-Wilkinson, toegepast op asymmetrische matrices, leidt tot de zgn. Hessenberg-vorm of bijna-driehoeksvorm, d.w.z. $a_{ij} = 0$ voor $j > i+1$. De vectoren w_r worden gekozen als boven om nullen in de (r-1)-ste rij te verkrijgen, maar omdat de matrix asymmetrisch is, ontstaan er geen nullen in de overeenkomstige kolommen. De bepaling van de eigenwaarden wordt in dit geval gecompliceerder, met name omdat ook niet-reële eigenwaarden kunnen optreden.

Literatuur

[1] J.H. Wilkinson, Householder's method for the solution of the algebraic eigenproblem, Comp.J.3 (1960) 23-27.

[2] ——————, The calculation of the eigenvectors of codiagonal matrices, Comp.J.1 (1958) 90-96.

[3] ——————, Error analysis of floating point computations, Num.Math.2 (1960) 319-340.

[4] ——————, Stability of the reduction of a matrix to almost triangular and triangular forms, J.Ass.Comp.Mach. 6 (1959) 336-359.

[5] A.S. Householder en F.L. Bauer, On certain methods for expanding the characteristic polynomial, Num.Math.1 (1959) p.29 sqq.

[6] W. Givens, A method of computing eigenvalues and eigenvectors suggested by classical results on symmetric matrices, Nat.Bur.Stand.-AMS 29 (1953) 117-122.

[7] ——————, Numerical computation of the characteristic values of a real symmetric matrix, Oak Ridge Nat. Lab.Rep. 1574.

[8] ——————, Computation of plane unitary rotations transforming a general matrix to triangular form, J. Soc.Ind.App.Math.6 (1958) p 26 sqq.

[9] C. Lanczos, An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators, Proc.2nd symp.dig.calc. mach.(1951) 164-206.
Idem: J. Res.Nat.Bur.Stand.45 (1950) p.255 sqq.

[10] R.A. Brooker en F.H. Sumner, The method of Lanczos for calculating the characteristic roots and vectors of a real symmetric matrix. Proc.I.E.E. 103 (1956) dl 3 suppl.1 p. 114 sqq.