

Nichtlineare Eigenwertprobleme

Die Konturintegral-Methode

Richard Weiss

Florian Schager

Freitag, 22.1.2021, 9:00-12:00

1 Einführung

Die herkömmliche (lineare) Formulierung des Eigenwert-Problems dürfte bekannt sein: Sei $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ eine Matrix. Suche $\lambda \in \mathbb{C}$ und $v \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}$, sodass $Av = \lambda v$, oder äquivalent

$$B(\lambda)v = 0, \quad B(\lambda) := A - I_N \lambda. \quad (1)$$

Dabei bezeichnet $\ker B(\lambda)$ den Eigenraum von λ . In manchen Anwendungen ist die Funktion B jedoch nicht mehr linear oder gar polynomiell. Herkömmliche Algorithmen zur Suche von Eigenwerten sind jedoch bloß für lineare B , so wie in (1), konzipiert.

Die wohl naheliegendste Variante, einer nichtlinearen Eigenwert-Suche ist eine Nullstellen-Suche des nicht-linearen charakteristischen Polynoms $\lambda \mapsto \det B(\lambda)$. Bereits bei linearen Eigenwertproblemen kann man folgende Nachteile erkennen:

1. Die Berechnung der Determinante ist (insbesondere für große Matrizen) überaus kostspielig und numerisch instabil.
2. Wir bekommen bloß eine Nullstelle (Eigenwert).
3. Selbst wenn ein Algorithmus wie das Newton-Verfahren zur Nullstellen-Suche verwendet wird, wird immer noch ein geeigneter Startwert benötigt.

Die, in [1] vorgeschlagene Konturintegral-Methode wird all diese Probleme umgehen. Deren Grundbaustein ist folgendes Resultat aus der komplexen Analysis.

2 Der Satz von Keldysh

Bevor wir starten, benötigen wir noch die folgende Begriffsbildung.

Definition 2.1. Seien $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$, $\lambda \in \mathbb{C}$, und $v \in \mathbb{C}^N$, mit $Av = \lambda v$. Wir nennen (λ, v) ein *Rechts-Eigenpaar* von A , v einen *Rechts-Eigenvektor* von A zum Eigenwert λ , und $\ker(A - I_N \lambda)$ den *Rechts-Eigenraum* von λ . Seien $B \in \mathbb{C}^{N \times N}$, $\mu \in \mathbb{C}$ und $w \in \mathbb{C}$, mit $w^* B = \mu w^*$. Wir nennen (μ, w) ein *Links-Eigenpaar* von B , w einen *Links-Eigenvektor* von B zum Eigenwert μ , $\ker(B^* - I_N \bar{\mu})$ den *Links-Eigenraum* von μ .

Bemerkung 2.2. Wir schließen direkt an die Definition 2.1 an. Der Rechts-Eigenvektor v von A zum Eigenwert λ ist auch Links-Eigenvektor von A^* zum Eigenwert $\bar{\lambda}$, weil

$$v^* A^* = (Av)^* = (\lambda v)^* = \bar{\lambda} v^*.$$

Der Links-Eigenvektor w von B zum Eigenwert μ ist auch Rechts-Eigenvektor von B^* zum Eigenwert $\bar{\mu}$. $\ker(B^* - I_N \bar{\mu})$ den Links-Eigenraum von μ zu nennen, macht also durchaus Sinn. Sollte A hermitesch (selbstadjungiert) sein, so sind alle Eigenwerte reell, und damit alle Rechts-Eigenvektoren auch Links-Eigenvektoren und umgekehrt.

Wir führen den Satz von Keldysh zunächst in seiner allgemeinsten Form aus.

Satz 2.3 (Keldysh, nicht-linear). Sei $\Lambda \subset \mathbb{C}$ ein beschränktes Gebiet und $A \in H(\Lambda, \mathbb{C}^{N \times N})$ holomorph. Es existiere ein $\lambda \in \Lambda$, sodass $A(\lambda) \in \text{GL}_N(\mathbb{C})$.

Weiter sei $\lambda_1 \in \Lambda$ ein halb-einfacher Eigenwert, d.h. es existiere eine Orthonormalbasis aus (Rechts-)Eigenvektoren $v_{1,1}, \dots, v_{1,L_1}$ von $\ker A(\lambda_1)$. Für diese gelte

$$\forall l = 1, \dots, L_1 : A'(\lambda_1)v_{1,l} \notin \text{ran } A(\lambda_1).$$

Dann existiert eine Basis aus Links-Eigenvektoren $w_{1,1}, \dots, w_{1,L_1}$ von $\ker A^*(\lambda_1)$, sodass

$$\forall l, k = 1, \dots, L_1 : w_{1,l}^* A'(\lambda_1)v_{1,k} = \delta_{l,k}. \quad (2)$$

Weiterhin existiert eine Umgebung U_1 von λ_1 und $R_1 \in H(U_1, \mathbb{C}^{N \times N})$ holomorph, sodass

$$\forall \lambda \in U_1 \setminus \{\lambda_1\} : A(\lambda)^{-1} = \frac{1}{\lambda - \lambda_1} S_1 + R_1(\lambda), \quad \text{mit} \quad S_1 := \sum_{l=1}^{L_1} v_{1,l} w_{1,l}^*. \quad (3)$$

Der Beweis dieses Satzes ist sehr aufwändig und nicht zentraler Teil dieser Arbeit. Wir verweisen dazu also auf [1]. Wir wollen aber dennoch eine Intuition dafür vermitteln. Dazu behandeln wir dessen linearen Spezialfall mit der zusätzlichen Voraussetzung, dass die Matrix dabei hermitesch ist. Es wird sich herausstellen, dass die Eigenschaften aus Satz 2.3 Verallgemeinerungen bekannter (oder zumindest plausibler) Begriffe und Tatsachen aus dem linearen Setting sind.

Bemerkung 2.4 (Keldysh, hermitesch). Sei $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ hermitesch (selbstadjungiert). Seien $\lambda_1 < \dots < \lambda_k$ deren Eigenwerte, jeweils zu den Vielfachheiten L_1, \dots, L_k , und für alle $n = 1, \dots, k$ sei $V_n = (v_{n,1}, \dots, v_{n,L_n})$ eine Orthonormalbasis von $\ker(A - I_N \lambda_n)$, sodass A unitär diagonalisierbar ist, d.h.

$$A = V^* D V, \quad \text{mit} \quad V := (V_1, \dots, V_k) \in \text{U}_N(\mathbb{C}), \quad D := \text{diag}(I_{L_1} \lambda_1, \dots, I_{L_k} \lambda_k).$$

In Analogie zu Satz 2.3, bilden nun $-v_{1,1}, \dots, -v_{1,L_1}$ eine Basis von $\ker(A^* - I_N \bar{\lambda}_1)$, sodass

$$\forall l, k = 1, \dots, L_1 : -v_{1,l}^* (-I_N) v_{1,k} = \delta_{l,k},$$

und es gilt

$$\begin{aligned} \forall \lambda \in U_1 \setminus \{\lambda_1\} : (A - I_N \lambda)^{-1} &= (V^* D V - V^* \lambda V)^{-1} \\ &= (V^* \text{diag}((\lambda_1 - \lambda) I_{L_1}, \dots, (\lambda_k - \lambda) I_{L_k}) V)^{-1} \\ &= V^* \text{diag}\left(\frac{1}{\lambda_1 - \lambda} I_{L_1}, \dots, \frac{1}{\lambda_k - \lambda} I_{L_k}\right) V \\ &\stackrel{!}{=} \sum_{n=1}^k \frac{1}{\lambda_n - \lambda} \sum_{l=1}^{L_n} v_{n,l}^* v_{n,l} \\ &= \frac{1}{\lambda - \lambda_1} \sum_{l=1}^{L_1} v_{1,l} (-v_{1,l})^* + R_1(\lambda), \end{aligned}$$

wobei $U_1 \subseteq \rho(A) \cup \{\lambda_1\}$ eine nichtleere Umgebung von λ_1 ist und

$$R_1 \in H(U_1, \mathbb{C}^{N \times N}), \quad \lambda \mapsto \sum_{n=2}^k \frac{1}{\lambda - \lambda_n} \sum_{l=1}^{L_n} v_{n,l} (-v_{n,l})^*.$$

Die Gleichheit mit dem „!“ erhält man durch eine elementare, aber sperrige Rechnung.

Bemerkung 2.5. $P_1 := S_1 A'(\lambda_1)$ ist eine Projektion von \mathbb{C}^N auf den (Rechts-)Eigenraum $\ker A(\lambda_1)$. Sei nämlich $x \in \mathbb{C}^N$, so gilt

$$P_1 x = \sum_{l=1}^{L_1} v_{1,l} \underbrace{w_{1,l}^* A'(\lambda_1) x}_{\in \mathbb{C}} \in \ker A(\lambda).$$

Außerdem ist P_1 idempotent, weil

$$\begin{aligned} \forall x \in \ker A(\lambda_1) : P_1 x &= \sum_{l=1}^{L_1} v_{1,l} w_{1,l}^* A'(\lambda_1) \sum_{k=1}^{L_1} (x, v_{1,k})_2 v_{1,k} \\ &= \sum_{l=1}^{L_1} \sum_{k=1}^{L_1} (x, v_{1,k})_2 v_{1,l} \underbrace{w_{1,l}^* A'(\lambda_1) v_{1,k}}_{=\delta_{l,k}} = \sum_{l=1}^{L_1} (x, v_{1,l})_2 v_{1,l} = x. \end{aligned}$$

Satz 2.6 (Keldysh, linear). Sei λ_1 ein halb-einfacher Eigenwert einer Matrix $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$, d.h. geometrische Vielfachheit L_1^{geo} und algebraische Vielfachheit L_1^{alg} stimmen überein:

$$L_1 := L_1^{\text{geo}} := \text{def}(A - I_N \lambda_1) = L_1^{\text{alg}} := \mu_1 = \max \{ \mu \in \mathbb{N} : (\lambda - \lambda_1)^\mu \mid \chi_A(\lambda) \}.$$

(i) Es gibt also eine Orthonormalbasis $V_1 = (v_{1,1}, \dots, v_{1,L_1})$ von $\ker(A - I_N \lambda_1)$.

Weiters gelten folgende 2 Analoga zu Satz 2.3.

(ii) Es gibt eine Basis $W_1 = (w_{1,1}, \dots, w_{1,L_1})$ von $\ker(A^* - I_N \bar{\lambda}_1)$, sodass

$$\forall l, k = 1, \dots, L_1 : (v_{1,k}, w_{1,l})_2 = -\delta_{l,k}.$$

(iii) Es existiert eine Umgebung U_1 von λ_1 und $R_1 \in H(U_1, \mathbb{C}^{N \times N})$ holomorph, sodass $\forall \lambda \in U_1 \setminus \{\lambda_1\}$:

$$(A - I_N \lambda)^{-1} = \frac{1}{\lambda - \lambda_1} S_1 + R_1(\lambda), \quad S_1 := \sum_{l=1}^{L_1} v_{1,l} w_{1,l}^*.$$

Beweis (als Korollar). Wir wollen Satz 2.3 auf $\lambda \mapsto A - I_N \lambda$ anwenden. Wir überprüfen also die Voraussetzungen.

1. Unsere (lineare) Matrix-Funktion $\lambda \mapsto A - I_N \lambda$ ist offensichtlich (komponentenweise) holomorph.
2. Für alle $\lambda \in \rho(A)$, ist $A - I_N \lambda \in \text{GL}_N(\mathbb{C})$.

3. Die Existenz einer Orthonormalbasis V_1 von $\ker(A - I_N \lambda_1)$, wenn $\lambda_1 \in \sigma(A)$ halb-einfach ist, ist ein Resultat der Linearen Algebra.
4. Wir müssen uns also eigentlich bloß überlegen, dass

$$\forall l = 1, \dots, L_1 : \frac{d}{d\lambda}(A - I_N \lambda) \Big|_{\lambda=\lambda_1} v_{1,l} = -I_N v_{1,l} = -v_{1,l} \notin \text{ran}(A - I_N \lambda_1).$$

Weil λ_1 halb-einfach ist, sein Jordan-Block genau $I_{L_1} \lambda_1$. Alle zugehörigen Jordan-Kästchen haben also die Größe 1×1 . Es gibt somit bloß Hauptvektoren 1-ter Stufe (Eigenwerte), und keine 2-ter oder höherer.

Sei $y \in \ker(A - I_N \lambda_1) \cap \text{ran}(A - I_N \lambda_1)$, dann

$$\exists x \in \mathbb{C}^N : (A - I_N \lambda_1)x = y, \quad (A - I_N \lambda_1)^2 x = (A - I_N \lambda_1)y = 0.$$

Angenommen, $y \neq 0$, dann wäre x ein Hauptvektor 2-ter Stufe. Widerspruch! Damit gilt also

$$\ker(A - I_N \lambda_1) \cap \text{ran}(A - I_N \lambda_1) = \{0\} \not\ni v_{1,1}, \dots, v_{1,L_1} \begin{cases} \in \ker(A - I_N \lambda), \\ \notin \text{ran}(A - I_N \lambda). \end{cases}$$

Wir können also Satz 2.3 anwenden.

(ii) Der Satz 2.3 gibt uns eine Basis $w_{1,1}, \dots, w_{1,L_1}$ von $\ker(A - I_N \lambda_1)^* = \ker(A^* - I_N \bar{\lambda}_1)$, sodass

$$\forall l, k = 1, \dots, L_1 : (v_{1,k}, w_{1,l})_2 = w_{1,l}^* v_{1,k} = -w_{1,l}^* (-I_N) v_{1,k} = -w_{1,l}^* \frac{d}{d\lambda}(A - I_N \lambda) \Big|_{\lambda=\lambda_1} v_{1,k} = -\delta_{l,k}.$$

(iii) Diese Tatsache kann 1 : 1 aus Satz 2.3 übernommen werden.

□

Korollar 2.7. Sei $\Lambda \subset \mathbb{C}$ ein beschränktes Gebiet und $A \in H(\Lambda, \mathbb{C}^{N \times N})$ holomorph. Es existiere ein $\lambda \in \Lambda$, sodass $A(\lambda) \in \text{GL}_N(\mathbb{C})$, d.h. invertierbar ist. Mögen $\lambda_1, \dots, \lambda_k$, paarweise verschiedene Eigenwerte von A , die Voraussetzungen von Satz 2.3 erfüllen. Seien S_1, \dots, S_k die entsprechenden Summen aus (3). Dann existiert ein $R \in H(\Lambda, \mathbb{C}^{N \times N})$, sodass $\forall \lambda \in \Lambda \setminus \{\lambda_1, \dots, \lambda_k\}$:

$$A(\lambda)^{-1} = \sum_{n=1}^k \frac{1}{\lambda - \lambda_n} S_n + R(\lambda).$$

Beweis. Laut 2.3, existiert für $m = 1, \dots, k$ eine Umgebung U_m von λ_m und $R_m \in H(U_m, \mathbb{C}^{N \times N})$ holomorph, sodass

$$\forall \lambda \in U_m \setminus \{\lambda_m\} : A(\lambda)^{-1} = \frac{1}{\lambda - \lambda_m} S_m + R_m(\lambda).$$

Die beiden Funktionen $R_\Lambda \in H(\Lambda \setminus \{\lambda_1, \dots, \lambda_k\}, \mathbb{C}^{N \times N})$ und $R_{U_m} \in H(U_m, \mathbb{C}^{N \times N})$ stimmen auf $U_m \setminus \{\lambda_m\}$ überein:

$$\begin{aligned}
\forall \lambda \in U_m \setminus \{\lambda_m\} : R_\Lambda(\lambda) &:= A(\lambda)^{-1} - \sum_{n=1}^k \frac{1}{\lambda - \lambda_n} S_n \\
&= \frac{1}{\lambda - \lambda_m} S_m + R_m(\lambda) - \sum_{n=1}^k \frac{1}{\lambda - \lambda_n} S_n = R_m(\lambda) - \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq m}}^k \frac{1}{\lambda - \lambda_n} S_n =: R_{U_m}(\lambda).
\end{aligned}$$

Die folgende Funktion R ist also wohldefiniert, holomorph auf Λ und leistet das gewünschte:

$$R : \Lambda \rightarrow C^{N \times N} : \lambda \mapsto \begin{cases} R_\Lambda(\lambda), & \lambda \in \Lambda \setminus \{\lambda_1, \dots, \lambda_k\}, \\ R_{U_m}(\lambda), & \exists m = 1, \dots, k : \lambda \in U_m \end{cases}$$

□

3 Herleitung des Verfahrens

Definitionen und Vorbereitungen

Es gelten die Bezeichnungen des vorherigen Kapitels. Sei $\Gamma \subset \Lambda$ zudem eine positiv orientierte Jordan-Kurve (d.h. ein geschlossener Weg). Γ umschlieÙe alle Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_k \notin \Gamma$, und sonst keine weiteren. Eine Veranschaulichung dazu ist in Abbildung 1 zu finden.

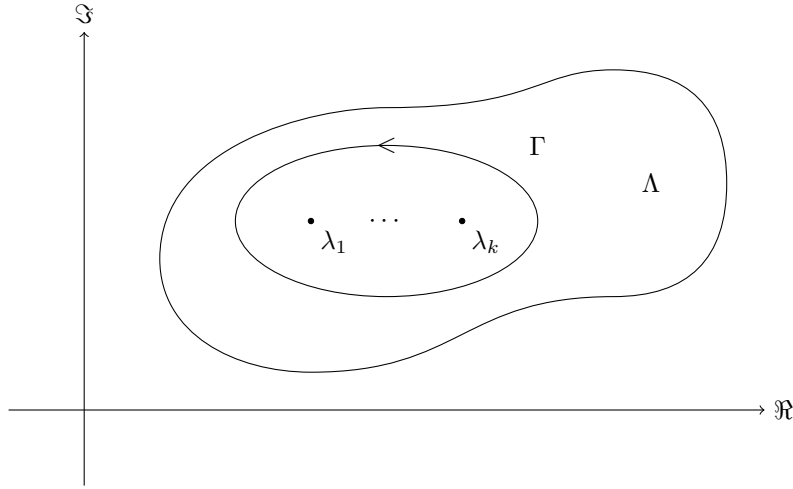


Abbildung 1: Λ Gebiet, Γ Jordan-Kurve, $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ Eigenwerte

Sei nun $f \in H(\mathbb{C}, \mathbb{C})$ holomorph. Für $n = 1, \dots, k$, sei dazu r_n hinreichend klein, sodass $B(\lambda_n, r_n) \subset U_n$. Wir wenden Korollar 2.7 sowie die Cauchyche Integralformel und den Cauchychen Integralsatz an, und erhalten

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(\lambda) A(\lambda)^{-1} d\lambda &\stackrel{2.7}{=} \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(\lambda) \left(\sum_{n=1}^k \frac{1}{\lambda - \lambda_n} S_n + R(\lambda) \right) d\lambda \\
&= \sum_{n=1}^k \underbrace{\frac{1}{2\pi i} \int_{\partial B(\lambda_n, r_n)} \frac{f(\lambda)}{\lambda - \lambda_n} d\lambda}_{=f(\lambda_n)} S_n + \underbrace{\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} f(\lambda) R(\lambda) d\lambda}_{=0} = \sum_{n=1}^k f(\lambda_n) \sum_{l=1}^{L_n} v_{n,l} w_{n,l}^*. \quad (4)
\end{aligned}$$

Diese Formel bildet die Grundlage zur Berechnung der Eigenwerte. Sei J die Summe aller Eigenraum-Dimensionen, d.h.

$$J := \sum_{n=1}^k L_n.$$

Wir vereinigen die Basen aller (Rechts)-Eigenräume zu

$$\begin{aligned} V &:= (V_1, \dots, V_k) = (v_{1,1}, \dots, v_{1,L_1}, \dots, v_{k,1}, \dots, v_{k,L_k}) \\ &= \begin{pmatrix} v_{1,1,1} & \cdots & v_{1,L_1,1} & \cdots & v_{k,1,1} & \cdots & v_{k,L_k,1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{1,1,N} & \cdots & v_{1,L_1,N} & \cdots & v_{k,1,N} & \cdots & v_{k,L_k,N} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{N \times J}. \end{aligned}$$

Wir vereinigen die Basen aller Links-Eigenräume zu

$$\begin{aligned} W &:= (W_1, \dots, W_k) = (w_{1,1}, \dots, w_{1,L_1}, \dots, w_{k,1}, \dots, w_{k,L_k}) \\ &= \begin{pmatrix} w_{1,1,1} & \cdots & w_{1,L_1,1} & \cdots & w_{k,1,1} & \cdots & w_{k,L_k,1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{1,1,N} & \cdots & w_{1,L_1,N} & \cdots & w_{k,1,N} & \cdots & w_{k,L_k,N} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{N \times J}. \end{aligned}$$

Sei D die Diagonal-Matrix der Eigenwerte, ihrer Vielfachheit nach aufgeführt, d.h.

$$D := \text{diag}(\underbrace{\lambda_1, \dots, \lambda_1}_{L_1\text{-viele}}, \dots, \underbrace{\lambda_k, \dots, \lambda_k}_{L_k\text{-viele}}) = \text{diag}(I_{L_1} \lambda_1, \dots, I_{L_k} \lambda_k) \in \mathbb{C}^{N \times N}. \quad (5)$$

Sei $\hat{V} \in \mathbb{C}^{N \times j}$ zunächst beliebig mit $J \leq j \ll N$. Die folgenden Matrizen A_0 und A_1 sind der Grund für die Namensgebung der „Konturintegral-Methode“.

$$A_0 := \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \lambda^0 A(\lambda)^{-1} \hat{V} \, d\lambda \in \mathbb{C}^{N \times j}, \quad A_1 := \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \lambda^1 A(\lambda)^{-1} \hat{V} \, d\lambda \in \mathbb{C}^{N \times j} \quad (6)$$

(4) lässt uns nun A_0 und A_1 wie folgt umformulieren. Letztere Gleichheit ist dabei eine elementare, aber sperrige Rechnung.

$$A_i \stackrel{(6)}{=} \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \lambda^i A(\lambda)^{-1} \hat{V} \, d\lambda \stackrel{(8)}{=} \sum_{n=1}^k \lambda_n^i \sum_{l=1}^{L_n} v_{n,l} w_{n,l}^* \hat{V} \stackrel{!}{=} V D^i W^* \hat{V}, \quad i = 0, 1 \quad (7)$$

Zusammenfassung

Wenn wir in (7) explizit für $i = 0, 1$ einsetzen, erhalten wir

$$A_0 = V W^* \hat{V}, \quad A_1 = V D W^* \hat{V}. \quad (8)$$

Nun gilt es, D , die Diagonal-Matrix aller Eigenwerte, zu bestimmen. A_0 und A_1 bieten dazu einen vielversprechenden Anfang. Unsere Hoffnung besteht nämlich darin, D aus A_1 mittels A_0 irgendwie zu „isolieren“.

Dazu müssen A_0 und A_1 zunächst „berechnet“, bzw. mit einer Quadraturformel approximiert werden. Das motivieren wir im ersten Schritt mit einer komplexen Variante der summierten Trapezregel. Nachdem dieser Schritt der weitaus teuerste ist, folgt eine genaue Konvergenz-Analyse im vierten Kapitel. Wie diese „Isolation“ von D vonstattengehen soll, erklären wir vollständig im zweiten Schritt.

Die Konturintegral-Methode ist zunächst oberflächlich im Algorithmus 2 zusammengefasst worden. Genauere Erklärungen zur ersten und zweiten Zeile folgen im ersten und zweiten Schritt. Die Auseinandersetzung mit der dritten Zeile (bzw. dem dritten Schritt) ist nicht Teil dieser Arbeit. Wir verwenden lediglich den Befehl `linalg.eigvals`, aus der `scipy`-Bibliothek.

Algorithm 2

procedure INTEGRAL-METHODE ZUSAMMENFASSUNG

Berechne (bzw. approximiere) $A_0, A_1 \in \mathbb{C}^{N \times j}$;

Berechne und reduziere eine Singulärwert-Zerlegung $A_0 = \tilde{V} \Sigma \tilde{W}^*$ auf J Singulärwerte;

Berechne Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ der Matrix $\tilde{V} A_1 \tilde{W} \Sigma^{-1} \approx D$;

return $\lambda_1, \dots, \lambda_k$

end procedure

1. Schritt: Konturintegrale

Wir parametrisieren den Kreis $\partial B(0, R) \subset U$ vermöge dem komplexen Weg

$$\gamma : [0, 1) \rightarrow \partial B(0, R) : t \mapsto R \exp(2\pi i t), \quad \text{mit} \quad \gamma' : t \mapsto 2\pi i R \exp(2\pi i t).$$

Wir approximieren ihn durch die m -ten Einheitswurzeln. Diese wählen wir dann auch als Quadraturknoten, gemeinsam mit gleichmäßigen Gewichten (bzw. Gewicht) $1/m$. In Formeln geschrieben, lauten diese

$$\omega_m^0, \dots, \omega_m^{m-1}, \quad \text{mit} \quad \omega_m := \exp\left(\frac{2\pi i}{m}\right), \quad m \in \mathbb{N}.$$

Sei $f \in H(U, \mathbb{C})$ holomorph. Wir verwenden nun tatsächlich eine klassische summierte Rechtecksregel und erhalten

$$\begin{aligned} Q(f) &:= \frac{1}{2\pi i} \int_{|\lambda|=R} f(\lambda) \, d\lambda = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} f(\lambda) \, d\lambda = \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 \gamma'(t) f(\gamma(t)) \, dt \\ &= \int_0^1 R \exp(2\pi i t) f(R \exp(2\pi i t)) \, dt \approx \sum_{\nu=0}^{m-1} \frac{1}{m} R \exp\left(\frac{2\pi i \nu}{m}\right) f\left(R \exp\left(\frac{2\pi i \nu}{m}\right)\right) \\ &= \frac{R}{m} \sum_{\nu=0}^{m-1} \omega_m^\nu f(R \omega_m^\nu) =: Q_m(f). \end{aligned}$$

Um $A(\lambda)^{-1} \hat{V}$ in den Integranden von A_0 und A_1 zu bestimmen, werden wir nicht $A(\lambda)^{-1}$ direkt berechnen. Stattdessen, bestimmen wir eine LU-Zerlegung von $A(\lambda)$. Der Einfachheit halber sei diese $LU = A(\lambda)$, mit L und U als untere bzw. obere Dreiecks-Matrizen. Dann führen wir für alle Spalten $\hat{v}_1, \dots, \hat{v}_j$ der Zufallsmatrix $\hat{V} \in \mathbb{C}^{N \times j}$ jeweils eine Vorwärts- und Rückwärts-Substitution durch. Es gilt ja schließlich

$$\forall i = 1, \dots, j : A(\lambda)^{-1} \hat{v}_i = x_i \iff \hat{v}_i = A(\lambda) x_i = L U x_i = L y_i, \quad y_i = U x_i.$$

2. Schritt: Singulärwert-Zerlegung

Wir führen zunächst eine Singulärwert-Zerlegung von A_0 durch. Diese sei gegeben in der Form

$$\tilde{V}\Sigma\tilde{W}^* = A_0 \in \mathbb{C}^{N \times j}, \quad \tilde{V} \in U_N(\mathbb{C}), \quad \tilde{W} \in U_j(\mathbb{C}), \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_J, \dots, \sigma_j) \\ 0_{(N-j) \times j} \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{N \times j}$$

Dabei gehen wir nicht auf die technischen Details zur Bestimmung der Singulärwert-Zerlegung ein. Wir verwenden lediglich den Befehl `linalg.svd`, aus der `scipy`-Bibliothek.

Nehmen wir zunächst an, dass die Rechts- bzw. Links-Eigenraum-Basen $V, W \in \mathbb{C}^{N \times J}$ vollen Rang J haben, und die Zufallsmatrix $\hat{V} \in \mathbb{C}^{N \times j}$ vollen Rang j hat. Weiters gehen wir davon aus, dass $W^*\hat{V} \in \mathbb{C}^{J \times j}$ vollen Rang $J \leq j$ hat. Das heißt, V und $W^*\hat{V}$ sind injektiv, also auch deren Komposition $A_0 = VW^*\hat{V}$. Daher ist auch die Annahme, dass A_0 Rang J hat, sinnvoll.

Matrizen haben genau dann denselben Rang, wenn sie bzgl. \equiv äquivalent sind (d.h. modulo Multiplikation mit zwei regulären Matrix von jeweils links bzw. rechts). \tilde{V} und \tilde{W}^* sind als unitäre Matrizen regulär. Für jede \equiv -Äquivalenzklasse finden wir einen Repräsentanten in einer Normalform als Blockmatrix einer Einheitsmatrix und sonst 0-en. Wir erhalten die Äquivalenz

$$\begin{pmatrix} \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_J, \dots, \sigma_j) \\ 0_{(N-j) \times j} \end{pmatrix} = \Sigma \equiv \tilde{V}\Sigma\tilde{W}^* = A_0 \equiv \begin{pmatrix} I_J & 0_{J \times (j-J)} \\ 0_{(N-J) \times j} \end{pmatrix}.$$

Damit verschwinden die letzten Singulärwerte $\sigma_{J+1} = \dots = \sigma_j = 0$. Somit können wir statt der alten vollen Singulärwert-Zerlegung (jetzt indiziert mit „full“) eine reduzierte (indiziert mit „reduced“) verwenden. Dabei bestehen $\tilde{V}_{\text{reduced}}$, Σ_{reduced} , und $\tilde{W}_{\text{reduced}}$ aus den 1-ten J Spalten von \tilde{V}_{full} , Σ_{full} , bzw. \tilde{W}_{full} . Diese beiden Singulärwert-Zerlegungen sind tatsächlich gleichwertig, weil

$$A_0 = \tilde{V}_{\text{full}}\Sigma_{\text{full}}\tilde{W}_{\text{full}}^* = \begin{pmatrix} \tilde{V}_{\text{reduced}} & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Sigma_{\text{reduced}} & 0_{J \times (j-J)} \\ 0_{(N-J) \times J} & 0_{(N-J) \times (j-J)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{W}_{\text{reduced}}^* \\ * \end{pmatrix} = \tilde{V}_{\text{reduced}}\Sigma_{\text{reduced}}\tilde{W}_{\text{reduced}}^*.$$

$\tilde{V}_{\text{full}} \in U_N(\mathbb{C})$ und $\tilde{W}_{\text{full}} \in U_j(\mathbb{C})$ sind ja unitär, d.h. ihre Adjungierten sind ihre Inversen. Etwas Ähnliches gilt für die reduzierten Varianten, weil

$$I_N = \tilde{V}_{\text{full}}^* \tilde{V}_{\text{full}} = \begin{pmatrix} \tilde{V}_{\text{reduced}}^* \\ * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{V}_{\text{reduced}} & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{V}_{\text{reduced}}^* \tilde{V}_{\text{reduced}} & * \\ * & * \end{pmatrix},$$

$$I_j = \tilde{W}_{\text{full}}^* \tilde{W}_{\text{full}} = \begin{pmatrix} \tilde{W}_{\text{reduced}}^* \\ * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{W}_{\text{reduced}} & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{W}_{\text{reduced}}^* \tilde{W}_{\text{reduced}} & * \\ * & * \end{pmatrix}.$$

Wir vereinbaren, ab sofort nur noch die reduzierte Singulärwert-Zerlegung zu verwenden und den Index wegzulassen. Insgesamt erhalten wir also folgende Tatsachen über unsere reduzierte Singulärwert-Zerlegung.

$$A_0 = \tilde{V}\Sigma\tilde{W}^*, \quad \Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_J) \in \mathbb{C}^{J \times J}, \quad \tilde{V} \in \mathbb{C}^{N \times J}, \quad \tilde{W} \in \mathbb{C}^{j \times J}, \quad \tilde{V}^*\tilde{V} = \tilde{W}^*\tilde{W} = I_J \quad (9)$$

4 Analysis

Satz 4.1. Werden die Kurven in der Definition (6) von A_0 und A_1 als Kreise der Form $z_0 + Re^{it}$ mit $t \in [0, 2\pi)$ gewählt und durch eine Rechtecksregel mit m äquidistant verteilten Punkten diskretisiert, so erhalten wir für die angenäherten Matrizen $A_{0,1}^{(m)} \in \mathbb{C}^{N \times j}$ die Fehlerabschätzung

$$\|A_{0,1}^{(m)} - A_{0,1}\| \leq C(\rho_-^{m-r+1} + \rho_+^{m-r+1}),$$

wobei r die maximale Ordnung der Pole von $A(\lambda)^{-1}$ und

$$\rho_- := \max_{\substack{\lambda \in \sigma(A) \\ |\lambda - z_0| < R}} \frac{|\lambda - z_0|}{R}, \quad \rho_+ := \max_{\substack{\lambda \in \sigma(A) \\ |\lambda - z_0| > R}} \frac{R}{|\lambda - z_0|}$$

ist.

Die Beweise dieser Ergebnisse sind in [1] zu finden.

Die Matrizen A_0 und A_1 können wir somit exponentiell schnell mit Hilfe der Rechtecksregel annähern, sofern wir nur glatte Kurve und passende Quadraturpunkte wählen. Dennoch ist auch die Berechnung der angenäherten Matrizen $A_{0,1}^{(m)}$ sehr aufwändig. Für jeden Quadraturpunkt und jede Spalte von \hat{V} muss ein lineares Gleichungssystem gelöst werden. Dies entspricht somit mj linearen Gleichungssystemen der Größe $N \times N$. Verwendet man eine LU-Zerlegung von $A(\lambda)$ und nehmen wir für diese den Aufwand $\mathcal{O}(N^3)$ an, so erhalten wir in etwa einen Gesamtaufwand zur Berechnung von $A_0^{(m)}$ und $A_1^{(m)}$ von $\mathcal{O}(m(N^3 + 2N^2j))$.

Die Integralmethode zur Berechnung der Eigenwerte nichtlinearer Eigenwertprobleme ist vergleichsweise neu und Gegenstand aktueller Forschung. Ein wesentliches Problem der Methode (neben dem Aufwand) ist, dass sich durch die Verwendung von $A_{0,1}^{(m)}$ die Anzahl der nicht-verschwindenden Singulärwerte deutlich erhöht. Solange die „korrekten“ Singulärwerte um Größenordnungen über den zusätzlichen liegen, können letztere einfach aussortiert werden. Gerade bei großen Fehlern, wie sie z.B. durch Verwendung von Matrix-Kompressionstechniken (z.B. H -Matrizen) oder durch iterative Gleichungslöser entstehen, sind die zusätzlichen Singulärwerte aber häufig nicht mehr von den „korrekten“ zu unterscheiden und führen dann zu zusätzlichen falschen Eigenwerten und zu großen Fehlern bei den eigentlich gesuchten Eigenwerten.

Dennoch hat die Integralmethode die Lösung von nichtlinearen Eigenwertproblemen massiv vereinfacht. Sie ermöglicht bei entsprechender Genauigkeit die zuverlässige Berechnung aller Eigenwerte innerhalb einer gewählten Kurve. Dies ist ein sehr großer Vorteil zu iterativen Verfahren, bei denen typischerweise die Lage der gefundenen Eigenwerte nicht zuverlässig kontrolliert werden kann.

5 Numerische Ergebnisse

In diesem Kapitel werden wir, mit unserer persönlichen Implementierung, das „Hader Problem“ aus [2] lösen, und die theoretischen Ergebnisse veranschaulichen.

Literatur

- [1] Wolf-Jürgen Beyn. „An integral method for solving nonlinear eigenvalue problems“. In: *Linear Algebra and its Applications* 436.10 (2012). Special Issue dedicated to Heinrich Voss’s 65th birthday, S. 3839–3863. ISSN: 0024-3795. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.laa.2011.03.030>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0024379511002540>.
- [2] Yousef Saad, Mohamed El-Guide und Agnieszka Miedlar. *A rational approximation method for the nonlinear eigenvalue problem*. 2020. arXiv: 1901.01188 [math.NA]. URL: <https://arxiv.org/abs/1901.01188>.