

Das klassische Jacobische Verfahren

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	3
2. Grundlagen.....	4
2.1 Basiswechsel	4
2.2 Orthogonale Matrizen	4
2.3 Lineare Selbstabbildungen	4
2.4 Adjungierte Selbstabbildungen	5
2.5 Selbstadjungierte Selbstabbildungen	5
3. Orthogonale Transformationen	6
4. Klassisches Jacobisches Verfahren	7
5. Beispiel.....	8
6. Anhang.....	9

1. Einleitung

Die Jacobischen Verfahren dienen zur Bestimmung von Näherungslösungen des sogenannten vollständigen Eigenwertproblems, also von Näherungen für sämtliche Eigenwerte und zugehörige Eigenvektoren einer Matrix.

Die Jacobischen Verfahren beruhen auf der Idee, durch eine Folge von Ähnlichkeitstransformationen mit elementaren Drehungen die gegebene Matrix näherungsweise auf Diagonalgestalt zu bringen. Die Elemente in der Hauptdiagonalen einer solchen Matrix werden dann Näherungen für die gesuchten Eigenwerte. Das Produkt der Drehmatrizen liefert eine orthogonale Matrix, deren Spalten näherungsweise Eigenvektoren der gegebenen Matrix sind.

2. Grundlagen

Aus der linearen Algebra wurden hier die wichtigsten Sätze zusammengetragen, damit die Jacobischen Verfahren besser verstanden werden können. Es wird vorausgesetzt, daß die Begriffe *Basiswechsel* und *Lineare Selbstabbildung* bekannt sind. Diese und alle übrigen Grundlagen und die Beweise zu den folgenden Sätzen können im Bericht *Eigenvektorzerlegung und selbstadjungierte Abbildungen*¹ nachgelesen werden.

2.1 Basiswechsel

Satz: Es seien S und S' zwei Basen von V . Es sei D die Transformationsmatrix, welche die Vektoren der Basis S als Linearkombination der Vektoren aus S' darstellt. Es sei $f: V \rightarrow V$ eine lineare Selbstabbildung, die bezüglich der Basis S durch die Matrix A und bezüglich der Basis S' durch die Matrix A' beschrieben wird. Dann gilt: $A' = DAD^{-1}$.

2.2 Orthogonale Matrizen

Definition: Es sei A eine $n \times n$ Matrix mit $A^T = A^{-1}$. Ist A eine reelle Matrix, so heißt A *orthogonal*; ist A eine komplexe Matrix, so heißt A *unitär*.

Satz: Es sei A eine reelle $n \times n$ Matrix. Dann sind folgende Aussagen äquivalent:

- (i) A ist orthogonal.
- (ii) $A^T A = I$.
- (iii) $AA^T = I$.
- (iv) A vermittelt einen Basiswechsel zwischen orthonormierten Basen eines n -dimensionalen euklidischen Vektorraums.
- (v) Die Spalten der Matrix A bilden eine orthonormierte Basis des Vektorraums \mathbb{R}^n , versehen mit dem Standard-Skalarprodukt.
- (vi) Die Zeilen der Matrix A bilden eine orthonormierte Basis des Vektorraums \mathbb{R}^n , versehen mit dem Standard-Skalarprodukt.

2.3 Lineare Selbstabbildungen

Korollar: Es sei V ein Vektorraum mit $\dim V = n$ und es sei $f: V \rightarrow V$ eine lineare Selbstabbildung. Dann besitzt f höchstens n verschiedene Eigenwerte. Besitzt f genau n verschiedene Eigenwerte $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, so bilden die zugehörigen Eigenvektoren $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ eine Basis von V . Bezüglich dieser Basis wird f durch folgende Matrix dargestellt:

$$M = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

¹ Dieser Bericht wurde im Rahmen meiner Diplomarbeit ebenfalls von mir geschrieben.

2.4 Adjungierte Selbstabbildungen

Definition: Die zu $f: V \rightarrow V$ *adjungierte Abbildung* $f^*: V \rightarrow V$ ist definiert durch die Beziehung $(f(\xi), \eta) = (\xi, f^*(\eta))$, $\xi, \eta \in V$.

Satz: Es sei V ein endlich-dimensionaler Vektorraum mit Skalarprodukt, und es sei S eine orthonormierte Basis. Wird $f: V \rightarrow V$ bezüglich S durch die Matrix A dargestellt, so wird die adjungierte Abbildung $f^*: V \rightarrow V$ bezüglich S durch die Matrix A^T dargestellt.

2.5 Selbstadjungierte Selbstabbildungen

Definition: Es sei V ein Vektorraum mit Skalarprodukt. Die lineare Selbstabbildung $f: V \rightarrow V$ heißt *selbstadjungiert*, wenn für alle $\xi, \eta \in V$ gilt: $(f(\xi), \eta) = (\xi, f(\eta))$, das heißt wenn $f = f^*$.

Satz²: Es sei V ein endlich-dimensionaler Vektorraum mit Skalarprodukt und S eine orthonormierte Basis. Die lineare Selbstabbildung $f: V \rightarrow V$ werde bezüglich S durch die Matrix A beschrieben. Genau dann ist $f: V \rightarrow V$ selbstadjungiert, wenn gilt $A = A^T$.

Satz: Es sei V ein Vektorraum der Dimension n mit Skalarprodukt, und es sei $f: V \rightarrow V$ eine selbstadjungierte Selbstabbildung. Dann sind alle Nullstellen des charakteristischen Polynoms $p_f(x)$ reell; es gilt dann also³: $p_f(x) = \pm (x - \lambda_1) \cdots (x - \lambda_n)$ mit $\lambda_1 \dots \lambda_n \in \mathbb{R}$.

Theorem: Es sei V ein endlich-dimensionaler Vektorraum mit Skalarprodukt, und es sei f eine selbstadjungierte Selbstabbildung. Dann existiert eine orthonormierte Basis von V , die aus den Eigenvektoren von f besteht.

² Eine Matrix A , für die gilt $A = A^T$ ist symmetrisch.

³ Nach dem Fundamentalsatz der Algebra läßt sich das komplexe charakteristische Polynom in Linearfaktoren aufspalten. Für das charakteristische Polynom von selbstadjungierte Selbstabbildungen kann eine Aufspaltung in Linearfaktoren immer mit reellen Nullstellen durchgeführt werden.

3. Orthogonale Transformationen

In den Jacobischen Verfahren transformiert man die gegebene reelle symmetrische Matrix $A = (a_{jk})$ durch eine Folge von zweidimensionalen Drehungen in Ebenen, die durch geeignet ausgewählte Paare σ, τ von Koordinatenrichtungen aufgespannt werden.

Zu jedem Paar natürlicher Zahlen $\sigma, \tau = 1, 2, \dots, n, \sigma \neq \tau$ und jeder reellen Zahl φ betrachtet man Matrizen $U = (u_{jk})$ der Gestalt:

$$U = I + (\cos \varphi - 1)(I_{\sigma\sigma} + I_{\tau\tau}) + \sin \varphi (I_{\tau\sigma} - I_{\sigma\tau}) =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \cos \varphi & & \sin \varphi & \\ & & & 1 & & \\ & & & & -\sin \varphi & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

Es läßt sich sehr einfach zeigen, daß U eine orthogonale Matrix ist, also $U^T = U^{-1}$. Die Jacobischen Verfahren transformieren eine gegebene Matrix schrittweise auf Diagonalgestalt. Zur Untersuchung des Konvergenzverhaltens Jacobischer Verfahren definiert man daher mit Hilfe der Quadratsummennorm $\| \cdot \|_2$ für Matrizen den Ausdruck:

$$|A| = \|A - \text{diag}(a_{jj})\|_2 = \left(\sum_{j \neq k} |a_{jk}|^2 \right)^{1/2}, \quad A = (a_{jk})$$

der ein Maß dafür bildet, wie weit die Matrix A von der Diagonalgestalt abweicht. Der obige Ausdruck definiert zudem für quadratische Matrizen eine Halbnorm, bei der $|A| = 0$, wenn A eine Diagonalmatrix ist.

Satz: Für jede reelle symmetrische Matrix $A = (a_{jk})$ und jede orthogonale Matrix U der obigen Gestalt genügt die transformierte Matrix $B = U^T A U$ der Beziehung:

$$|B|^2 = |A|^2 + 2(b_{\sigma\tau}^2 - a_{\sigma\tau}^2), \quad b_{\sigma\tau} = a_{\sigma\tau} \cos 2\varphi + 1/2(a_{\tau\tau} - a_{\sigma\sigma}) \sin 2\varphi$$

4. Klassisches Jacobisches Verfahren

Beim klassischen Jacobischen Verfahren bestimmt man zu einer reellen symmetrischen Matrix $A = (a_{jk})$ eine Folge symmetrischer Matrizen A_t mit der Anfangsmatrix $A_0 = A$ und einer Folge orthogonaler Transformationen U_t durch die Vorschrift:

$$A_{t+1} = U_t^T A_t U_t, \quad t = 0, 1, 2, K$$

Dabei wählt man in jedem Schritt für U eine orthogonale Matrix der Gestalt aus Kapitel (3), wobei $\sigma = \sigma_t$ der Zeilenindex und $\tau = \tau_t$ der Spaltenindex eines betragsgrößten Elements der Matrix A_t außerhalb der Hauptdiagonalen ist:

$$|a_{\sigma\tau}^{(t)}| = \max_{\substack{j \neq k \\ j,k=1,K,n}} |a_{jk}^{(t)}|$$

Den Drehwinkel $\varphi = \varphi_t$ der orthogonalen Matrix U_t bestimmt man hierzu aus der Bedingung:

$$b_{\sigma\tau} = a_{\sigma\tau}^{(t+1)} = a_{\sigma\tau}^{(t)} \cos 2\varphi_t + 1/2(a_{\tau\tau}^{(t)} - a_{\sigma\sigma}^{(t)}) \sin 2\varphi_t = 0,$$

so daß an dieser Stelle σ, τ das Element $a_{\sigma\tau}^{(t+1)}$ der neuen Matrix A_{t+1} verschwindet.

Mit Hilfe des Satzes aus Kapitel (3) für $A = A_t$ und $B = A_{t+1}$ gilt dann die folgende, für die Konvergenz des klassischen Jacobischen Verfahrens grundlegende Beziehung:

$$|A_{t+1}|^2 = |A_t|^2 - 2 \max_{\substack{j \neq k \\ j,k=1,K,n}} |a_{jk}^{(t)}|^2, \quad t = 0, 1, 2, K$$

Hiermit wird nämlich $|A_{t+1}|^2 \leq |A_t|^2$, also die Zahlenfolge $|A_t|^2$, $t = 0, 1, 2, \dots$ monoton fallend und daher konvergent.

Die Berechnung des Drehwinkels φ_t in $|\varphi_t| \leq \pi/4$ erfolgt mit den obigen Resultaten durch:

$$a_{\sigma\tau}^{(t)} = 0 \quad \Rightarrow \quad \varphi_t = 0$$

$$a_{\sigma\sigma}^{(t)} = a_{\tau\tau}^{(t)} \quad \Rightarrow \quad \varphi_t = \pi/4$$

In den sonstigen Fällen gilt:

$$\tan 2\varphi_t = \frac{2a_{\sigma\tau}^{(t)}}{a_{\sigma\sigma}^{(t)} - a_{\tau\tau}^{(t)}}$$

Satz: Seien $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ die Eigenwerte der Matrix $A = (a_{jk})$ und a_1, a_2, \dots, a_n die Diagonalelemente der Matrizen A_t in der Anordnung $a_1 \geq a_2 \geq \dots \geq a_n$ für $t = 0, 1, 2, \dots$. Dann konvergieren diese Diagonalelemente a_k für $t \rightarrow \infty$ gegen die Eigenwerte λ_k mit der a-posteriori und a-priori Fehlerabschätzung ($n \geq 2$):

$$|a_k^{(t)} - \lambda_k| \leq |A_t| \leq q^t |A|, \quad k = 1, K, n, \quad t = 0, 1, 2, K, \quad q = \sqrt[n^2 - n]{K} < 1$$

5. Beispiel

Für die reelle symmetrische Matrix:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 4 & 6 & 7 \\ 6 & 8 & 9 \\ 7 & 9 & 5 \end{pmatrix}$$

erhält man als Ergebnis:

$$\text{Eigenwerte} = \begin{pmatrix} 21.9597 & -0.3021 & -3.6984 & 0.0408 \end{pmatrix}$$

$$\text{Eigenvektoren} = \begin{pmatrix} 0.9056 & 0.1730 & 0.2442 & -0.3005 \\ 0.3858 & 0.7001 & 0.4620 & -0.3841 \\ -0.1517 & -0.6844 & 0.6250 & -0.3434 \\ 0.0895 & 0.1069 & 0.5799 & 0.8026 \end{pmatrix}$$

6. Anhang

In diesem Anhang sind die wesentlichen Quelltexte vorhanden, die für Implementierung des klassischen Jacobischen Verfahrens notwendig sind. Diese Implementierung wurde mit dem Microsoft C/C++ 7.0 Compiler in C++ AT&T Release 2.1 durchgeführt. Die grundlegenden objektorientierten Datenstrukturen für den Umgang mit Vektoren und Matrizen wurden nicht beigelegt, da sie mit dem eigentlichen Verfahren nichts zu tun haben.

EIGEN.CPP	⇒	Beispielhaftes Hauptprogramm
ALGEBRA.H	⇒	Deklaration der Standard-Matrix und der Norm-Matrix
ALGEBRA.CPP	⇒	Quadratsummennorm $ A $; betragsgrößtes Element $ a_{\sigma\tau} $ suchen
JACOBI.H	⇒	Deklaration der Eigen-Matrix
JACOBI.CPP	⇒	Winkel φ und Transformationsmatrix U ; Iteration durchführen