

„Weniger ist mehr.“

Eigenwertfilterung am Beispiel hermitescher
Eigenwertprobleme

Thorsten Matthias Lucke

Betreuer: Prof. Jrg Liesen, Prof. Christian Mehl

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science

Department Name
Technische Universitt Berlin

28. Juli 2017

Dedicatio

Meiner Familie, der Thesisselbsthilfegruppe, der Hängemathe und dem 1 Caf

Declaratio

Hiermit erkläre ich, dass ich alles von Wikipedia abgeschrieben habe, so wie sich das gehört für eine großartige Arbeit.

Recognitio

Danke an

- Thesis Selbsthilfegruppe
- Prof. Liesen, Prof. Mehl
- Chopin, dessen Musik mich durch die Frustphasen der Arbeit geführt hat

Inhaltsverzeichnis

1	Präludium	6
1.1	Grundlagen und Notation	6
2	Filbertechniken	8
2.1	Rayleigh-Ritz-Verfahren	8
2.2	Konturintegration	13
2.3	Illustration	15
3	Rationales Filtern	17
3.1	Beschleunigtes Rayleigh-Ritz Verfahren	17
3.2	Rationale Funktionen	18
3.3	Approximation des Spektralprojektors	18
3.4	Der FEAST-Algorithmus	20
A	yolo	21

Kapitel 1

Präludium

Das Lösen von Eigenwertproblemen ist eine Standarddisziplin in der numerischen linearen Algebra. Gleichungen der Gestalt

$$Ax = \lambda Bx \tag{1.1}$$

begegnet man in ganz unterschiedlichen Kontexten. So sind sie beispielsweise bei der Bestimmung von Eigenfrequenzen oder dem Ermitteln von Fixpunkten beim Rotieren eines Fuballs¹ ebenso wie beim Untersuchen des PageRanks einer Website von Bedeutung. Entsprechend strotzt der Kanon von angebotenen numerischen Lösungsmethoden von Vielfalt und Virtuosität.

Nun mag der Fall eintreten, da es notwendig wird, lediglich eine Teilmenge aus der Menge aller Eigenpaare zu untersuchen.

Geeignetes Beispiel finden.

Wie soll nun aber der eifrige Numeriker die gewünschte Menge an Eigenpaaren finden?

Man könnte zunächst versuchen sämtliche Eigenpaare zu berechnen, die das Problem hergibt und händisch die gewünschte Teilmenge auswählen. Bei einem Problem dieser Größenordnung dürfte der Rechenknecht allerdings eine ordentliche Weile beschäftigt sein und das Leben ist fröhlich zu knapp, um auf das Terminieren von Algorithmen zu warten.

1.1 Grundlagen und Notation

gauss-legendre quadratur, spektral projektoren (später?), rationale funktionen, spektralzerlegung für allg eigenwertproblem

Um das Lesen dieser Arbeit mehr zu einer Freude denn zu einer Schikane zu machen, soll dieser Abschnitt einige Grundlagen der linearen Algebra und der Funktionentheorie bereitstellen. Obschon sich der Autor bemüht hat, in der Literatur gängige Notation zu

¹Hier wird auf den bekannten *Satz vom Fuball* angespielt. Dieser besagt, dass auf einem Fuball zwei Punkte existieren, die zu Spielbeginn und zur Halbzeit an der gleichen Stelle liegen – informell formuliert.

benutzen, bittet er den verständnisvollen Leser bei Unklarheiten im Anhang „Notationen“ nachzuschlagen.

Den Anfang machen Definitionen und Resultaten aus der Matrizentheorie. Eine Matrix $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ wird als *hermitesch* bezeichnet, falls sie die Identität $A = A^H$ erfüllt. Sie ist *positiv definit*, sofern für alle Vektoren $x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ die Abschätzung

$$x^H A x > 0$$

gilt. Folglich werden wir eine Matrix *hermitesch positiv definit (HPD)* nennen, wenn sie sowohl hermitesch als auch positiv definit ist.

Ist $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ eine solche HPD-Matrix und sind $x, y \in \mathbb{C}^n$, so werden wir anstelle von $x^H A y$ die Notation $\langle x, y \rangle_A$ verwenden. Im Falle $A = I_n$ schreiben wir kurz $\langle x, y \rangle$.

ne anders: $\langle x, y \rangle = y^H x$ oder doch nicht anders? einfach einträge tauschen oder so
Im Rahmen dieser Arbeit werden überwiegend Hermitesche Eigenwertprobleme betrachtet.

Proposition 1.1. Ist p eine Projektion auf den Unterraum U , dann gilt $p(u) = u$ für alle $u \in U$.

Beweis. Sei zunächst $u \in \text{Bild } p$. Dann existiert $v \in V$ mit $p(v) = u$. Nach Definition gilt aber auch $p^2(v) = p(u) = u$. Also folgt $p(u) = u$. **gilt Bild(p) = U?** \square

Bilinearität von $\langle \cdot, \cdot \rangle_A$ Kontur (komplex), Jordankurven, Invarianter Unterraum, Matrixpolynom

Eigenwertproblem $Ax = \lambda Bx$. Eigenpaare von (A, B) . Im Spezialfall $B = I$ kurz Eigenpaare von A .

Theorie zunächst nicht auf hermitesche Probleme beschränkt oder doch? Jedenfalls einige Resultate für hermitesche EWP

Kapitel 2

Filtertechniken

Dieses Kapitel widmet sich der Frage, ob und wie man aus der Menge aller Eigenpaare des Problems

$$Ax = \lambda Bx$$

eine gewünschte Teilmenge auswählen kann. Dazu werden im Rahmen dieser Arbeit aus dem Katalog der Verfahren die zwei Folgenden ausgewählt und vorgestellt: Rayleigh-Ritz-Verfahren¹ und Konturintegration. An einem abschließenden Beispiel wird außerdem die Kompatibilität beider Konzepte dargelegt.

2.1 Rayleigh-Ritz-Verfahren

Die Idee dieser Klasse von Verfahren ist das Approximieren des von den gesuchten Eigenvektoren aufgespannten Unterraums. Bevor wir das allgemeine Eigenwertproblem untersuchen, wenden wir unsere Aufmerksamkeit dem gewöhnlichen Eigenwertproblem

$$Ax = \lambda x$$

zu und betrachten für eine Zahl $m \in \mathbb{N}$ mit $m \leq n$ einen m -dimensionalen Unterraum $\mathcal{U}_m \subseteq \mathbb{C}^n$. Dieser zunächst nicht näher bestimmte *Suchraum* wird als Grundlage für das Verfahren gewählt. Gesucht sind nun Paare $(\tilde{\lambda}, \tilde{x}) \in \mathbb{C} \times \mathcal{U}_m \setminus \{0\}$ – die wir als approximierte Lösungen des Eigenproblems verstehen wollen – welche die Eigenschaft

$$\langle u, A\tilde{x} - \tilde{\lambda}\tilde{x} \rangle = 0 \tag{2.1}$$

für alle $u \in \mathcal{U}_m$ erfüllen. Das Residuum $(A\tilde{x} - \tilde{\lambda}\tilde{x})$ soll also orthogonal auf dem Suchraum stehen. Paare, die diesem Anliegen nachkommen, werden auch *Ritz-Paare* bezüglich des Suchraums \mathcal{U}_m genannt.²

¹Die im Folgenden präsentierte Vorgehensweise wird in der Literatur nicht einheitlich bezeichnet. Anstelle von Rayleigh-Ritz-Verfahren sind auch die Bezeichnungen Galerkin-Methoden oder ... üblich (siehe da und da). In dieser Arbeit wird durchgängig vom Rayleigh-Ritz-Verfahren oder der Rayleigh-Ritz-Methode gesprochen.

²Ritz-Paare müssen nicht notwendigerweise eine Orthogonalitätsbedingung erfüllen... oder doch?

Wir wollen nun annehmen, dass mit der Menge von Vektoren $\{u_i\}_{i=1:m} \subseteq \mathbb{C}^n$ eine Orthonormalbasis des Unterraums \mathcal{U}_m gegeben ist. Definieren wir dann die Matrix $U_m := [u_i]_{i=1:m} \in \mathbb{C}^{n,m}$, so muss wegen $\tilde{x} \in \mathcal{U}_m$ ein Vektor $y \in \mathbb{C}^m$ existieren, mit $U_m y = \tilde{x}$. Die Forderung (2.1) ist dann zu der Gleichung

$$U_m^H (AU_m y - \tilde{\lambda} U_m y) = 0$$

äquivalent. Als direkte Konsequenz dieser Umformulierung erhalten wir unter Ausnutzung der Orthogonalität der Spalten von U_m mit

$$(U_m^H A U_m) y = \tilde{\lambda} y \quad (2.2)$$

ein neues Eigenwertproblem. Jedes Eigenpaar $(\tilde{\lambda}, y)$ von (2.2) liefert dann nach Konstruktion mit $(\tilde{\lambda}, U_m y)$ ein Ritz-Paar des gewöhnlichen Eigenwertproblems bezüglich des Suchraums \mathcal{U}_m . In Abhängigkeit von der Wahl des Suchraumes variiert natürlich Güte der Approximation. Ist etwa \mathcal{U}_m durch Eigenvektoren aufgespannt, so ist jedes Ritz-Paar schon ein Eigenpaar. Wir werden später aus den Untersuchungen des allgemeinen Eigenwertproblems folgern, dass bereits im Falle der Invarianz von \mathcal{U}_m unter A jedes Ritz-Paar von A bezüglich \mathcal{U}_m bereits ein Eigenpaar von A ist. An dieser Stelle begnügen wir uns vorerst mit dieser erfreulichen Botschaft.

Die eben skizzierte Vorgehensweise zur Berechnung von Ritz-Paaren des gewöhnlichen Eigenwertproblems lässt sich algorithmisch wie folgt zusammenfassen.

Algorithmus 1 Berechnung von Ritz-Paaren

- 1: Berechne ONB $\{u_i\}_{i=1:m}$ von \mathcal{U}_m und setze $U_m \leftarrow [u_i]_{i=1:m}$.
 - 2: Setze $\tilde{A} \leftarrow U_m^H A U_m$ und löse $\tilde{A} Y = Y \Lambda$ in Y und Λ .
 - 3: Setze $\tilde{X} \leftarrow U_m Y$ und gib Ritz-Paare $(\lambda_i, \tilde{x}_i)_{i=1:m}$ aus.
-

Hierbei entsprechen die Spalten von $Y \in \mathbb{C}^{n,m}$ gewissen Eigenvektoren von (2.2), während auf der Diagonalen von $\Lambda \in \mathbb{C}^{m,m}$ die zugehörigen Eigenwerte zu finden sind.

Die Idee dieser Methode ist also simpel: Transformiere das Eigenwertproblem mit einer gewissen Matrix in ein anderes Eigenwertproblem und benutze dessen Lösungen, um Ritz-Paare des ursprünglichen Problems zu erhalten. Doch wozu die Mühe, das ursprüngliche Eigenwertproblem in ein anderes Eigenwertproblem zu überführen? Zwar gelingt es, aus dem transformierten Problem (2.2) Ritz-Paare zu extrahieren, aber wäre nicht auch denkbar, sämtliche Eigenpaare von A zu approximieren und die zum Unterraum \mathcal{U}_m korrespondierende Teilmenge direkt auszuwählen?

Dies mag in Einzelfällen in der Tat sinnvoller sein. Sprechen wir allerdings von Matrixdimensionen jenseits der Vorstellungskraft, ist eine vollständige Berechnung aller Eigenpaare mitunter ein sehr zeitintensives Vergnügen. Bei genauerer Betrachtung der Gleichung (2.2) fällt auf, dass die Matrix $(U_m^H A U_m) \in \mathbb{C}^{m,m}$ im Falle $n \gg m$ ein mitunter deutlich kleine-

res Format hat, als die Matrix A im ursprünglichen Problem. Man darf hier also erwarten, dass die benötigte Laufzeit zur Bestimmung der Ritz-Paare mit dem Algorithmus 2.1 geringer ist, als beim Approximieren sämtlicher Eigenpaare von A . Dies wird im vierten Kapitel anhand ausgewählter Beispiele vorgeführt.

Nun, da wir der Existenz und Funktionsweise der Rayleigh-Ritz-Methode gewahr wurden, erweitern wir die obige Theorie auf das verallgemeinerte Eigenwertproblem

$$Ax = \lambda Bx. \quad (2.3)$$

Dabei gehen wir ganz analog zum gewöhnlichen Eigenwertproblem vor und betrachten wieder einen m -dimensionalen Suchraum $\mathcal{U}_m \subseteq \mathbb{C}^n$. Gefunden werden sollen dieses Mal Paare $(\tilde{\lambda}, \tilde{x}) \in \mathbb{C} \times \mathcal{U}_m \setminus \{0\}$ die der Orthogonalitätsbedingung

$$A\tilde{x} - \tilde{\lambda}B\tilde{x} \perp \mathcal{U}_m \quad (2.4)$$

genügen. Durch die Wahl eines geeigneten Vektors $y \in \mathbb{C}^m$ kann die Näherungslösung \tilde{x} wie zuvor durch das Produkt U_my ersetzt werden, wobei die Spalten von U_m erneut eine ONB des Suchraums \mathcal{U}_m bilden. Folglich lässt sich die zu (2.4) äquivalente Forderung

$$U_m^H(AU_my - \tilde{\lambda}BU_my) = 0.$$

aufstellen. Wie bereits beim gewöhnlichen Eigenwertproblem, lässt sich nun aus jeder Lösung $(\tilde{\lambda}, y)$ von

$$(U_m^H AU_m)y = \tilde{\lambda}(U_m^H BU_m)y. \quad (2.5)$$

mit $(\tilde{\lambda}, U_my)$ ein Ritz-Paar für das verallgemeinerte Eigenwertproblem gewinnen.

Da mit der Matrix B ein weiterer Darsteller auf der Eigenproblembühne berücksichtigt werden muss, zieht dies als Konsequenz eine Anpassung des Algorithmus' 2.1 nach sich. Wir können diesen in der folgenden Manier abwandeln.

Algorithmus 2 Berechnung von Ritz-Paaren

- 1: Berechne ONB $\{u_i\}_{i=1:m}$ von \mathcal{U}_m und setze $U_m \leftarrow [u_i]_{i=1:m}$.
 - 2: Setze $\tilde{A} \leftarrow U_m^H AU_m$, $\tilde{B} \leftarrow U_m^H BU_m$ und löse $\tilde{A}Y = \tilde{B}Y\Lambda$ in Y und Λ .
 - 3: Setze $\tilde{X} \leftarrow U_m Y$ und gib Ritz-Paare $(\lambda_i, \tilde{x}_i)_{i=1:m}$ aus.
-

Wir wollen uns nun vorerst von der Algorithmik verabschieden und einige Beobachtungen festhalten. Eingangs wurde behauptet, dass die Invarianz des Suchraumes \mathcal{U}_m unter A dazu führt, dass jedes Ritz-Paar bezüglich \mathcal{U}_m ein Eigenpaar von A ist. Doch warum ist das so? Dies zu beantworten verpflichtet sich der folgende Satz.

Satz 2.1. Neben zwei Matrizen $A, B \in \mathbb{C}^{n,n}$ – wobei B eine HPD-Matrix ist – sei für $m \in \mathbb{N}$ mit $m \leq n$ ein m -dimensionaler Unterraum $\mathcal{U}_m \subseteq \mathbb{C}_n$ gegeben. Ist dieser invariant unter $B^{-1}A$, so ist jedes Ritzpaar von $B^{-1}A$ bezüglich \mathcal{U}_m auch ein Eigenpaar von (A, B) .

Beweis. Beginnen wir mit einer ONB $\{u_i\}_{i=1:m} \subseteq \mathcal{U}_m$ des Unterraums \mathcal{U}_m und setzen wie

bisher $U_m := [u_i]_{i=1:m} \in \mathbb{C}^{n,m}$. Aufgrund der Invarianz von \mathcal{U}_m unter $B^{-1}A$ muss eine Matrix $V_m \in \mathbb{C}^{m,m}$ existieren, welche die Gleichung

$$B^{-1}AU_m = U_mV_m \quad (2.6)$$

erfüllt. Insbesondere folgt unter Ausnutzung der Orthogonalität der Spalten von U_m die Identität $U_m^H B^{-1}AU_m = V_m$. Sind nun $\lambda \in \mathbb{C}$ und $y \in \mathbb{C}^m \setminus \{0\}$ so gewählt, dass (λ, U_my) ein Ritz-Paar von $B^{-1}A$ ist, so folgt aus

$$U_m^H B^{-1}AU_my = V_my$$

mit (2.6) die Gleichung

$$B^{-1}AU_my = U_mV_my = \lambda U_my$$

und schließlich auch die Behauptung durch Umstellen. \square

Da das gewöhnliche Eigenwertproblem ein Spezialfall des allgemeinen Eigenwertproblems ist, können wir aus dem eben bewiesenen Resultat unmittelbar das folgende Korollar ableiten.

Korollar 2.2. Ist $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ und $\mathcal{U}_m \subseteq \mathbb{C}^n$ ein m -dimensionaler A -invarianter Unterraum, so ist jedes Ritz-Paar von A bezüglich \mathcal{U}_m ein Eigenpaar von A .

Beweis. Betrachte für $B := I_n$ das verallgemeinerte Eigenwertproblem

$$Ax = \lambda Bx = \lambda x.$$

Die Aussage folgt dann aus dem vorigen Satz. \square

Es wird sich zu einem späteren Zeitpunkt herausstellen, dass diese Erkenntnis aus algorithmischer Sicht höchst nützlich ist. Die Rayleigh-Ritz-Methode lässt sich nämlich in ein iteratives Verfahren umwandeln, welches in jedem Schritt den Suchraum ändert. Ist die Suchraumiterierte irgendwann einmal A -invariant, so kann der Algorithmus abgebrochen werden.

Wenden wir uns einer weiteren Kuriosität zu. Zwischen obigem Verfahren und dem Konzept der Projektion besteht ein enger Zusammenhang. Um zu dieser Einsicht zu gelangen, bedarf es ein wenig Vorbereitung.

Satz 2.3. Es sei $B \in \mathbb{C}^{n,n}$ eine HPD-Matrix und für $m \in \mathbb{N}$ mit $m \leq n$ sei ein m -dimensionaler Unterraum $\mathcal{U}_m \subseteq \mathbb{C}^n$ gegeben. Sei weiter $\{u_i\}_{i=1:m} \subseteq \mathcal{U}_m$ eine Basis B -orthonormaler Vektoren, das heißt, die Matrix $U_m := [u_i]_{i=1:m} \in \mathbb{C}^{n,m}$ erfülle die Gleichung $U_m^H B U_m = I_m$. Dann ist die von der Matrix $P := U_m U_m^H B \in \mathbb{C}^{n,n}$ induzierte lineare Abbildung

$$p: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n, x \mapsto U_m U_m^H B x$$

eine B -orthogonale Projektion auf den Unterraum \mathcal{U}_m . Außerdem gilt für alle $x \in \mathbb{C}^n$ die

Identität

$$\|x - p(x)\|_B = \min_{y \in \mathcal{U}_m} \|x - y\|_B.$$

Beweis. Aus der B -Orthogonalität von U_m folgt für alle $x \in \mathbb{C}^n$

$$p^2(x) = U_m U_m^H B U_m U_m^H B x = U_m U_m^H B x = p(x).$$

Ist nun $y \in \mathcal{U}_m$ und $x \in \mathbb{C}^n$, dann folgt wegen $p(y) = y$ und $B = B^H$ auch

$$\begin{aligned} \langle y, x - p(x) \rangle_B &= y^H (Bx - B U_m U_m^H B x) \\ &= y^H (Bx - B^H U_m U_m^H B x) \\ &= y^H B x - p(y)^H B x = 0. \end{aligned}$$

Es gilt demnach $x - p(x) \perp_B \mathcal{U}_m$. Die Optimierungsaufgabe wird schließlich wegen

$$\begin{aligned} \|x - y\|_B^2 &= \|x - p(x) + p(x) - y\|_B^2 \\ &= \|x - p(x)\|_B^2 + \|p(x) - y\|_B^2 \\ &\geq \|x - p(x)\|_B^2 \end{aligned}$$

gelöst. Dabei ist bei der zweiten Gleichheit zu berücksichtigen, dass $x - p(x) \in \mathcal{U}_m^\perp$ und $p(x) - y \in \mathcal{U}_m$ gilt. \square

Mit Hilfe der im Satz eingeführten Projektionsmatrix P , lässt sich die Gleichung (2.5) – zu finden auf Seite 10 – umformulieren. Durch Linksmultiplikation mit $B^H U_m$ und dem Einschub der Identität $U_m^H B U_m$ gilt nämlich

$$B^H U_m (U_m^H A U_m) (U_m^H B U_m) y = \tilde{\lambda} B^H U_m (U_m^H B U_m) (U_m^H B U_m) y$$

und folglich

$$P^H A P U_m y = \tilde{\lambda} P^H B P U_m y.$$

Wenn wir uns an dieser Stelle erinnern, dass \tilde{x} durch $U_m y$ ersetzt wurde, so erhalten wir

$$P^H A P \tilde{x} = \tilde{\lambda} P^H B P \tilde{x}.$$

Im Fall der gewöhnlichen Eigenwertgleichung erhalten wir speziell

$$P A P \tilde{x} = \tilde{\lambda} \tilde{x}.$$

Wenden wir uns nun nochmal dem Rayleigh-Ritz-Verfahren zu und betrachten das verallgemeinerte Eigenwertproblem für eine hermitesche Matrix $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ sowie eine HPD-Matrix $B \in \mathbb{C}^{n,n}$. Angenommen, uns stünde mit dem Suchraum \mathcal{U}_m bereits ein von Eigenvektoren aufgespannter Unterraum zur Verfügung. Dann existiert eine Matrix $U_m := [u_i]_{i=1:m} \in \mathbb{C}^{n,m}$ mit B -orthonormalen Spalten aus Eigenvektoren von (A, B) und $\text{Bild}(U_m) = \mathcal{U}_m$,

sowie eine reelle Diagonalmatrix $\Lambda_m := \text{diag}(\lambda_i)_{i=1:m} \in \mathbb{C}^{m,m}$ mit

$$AU_m = BU_m\Lambda_m.$$

Dabei entsprechen die Diagonaleinträge von Λ_m gerade den zu den Spalten von U_m korrespondierenden Eigenwerten von (A, B) . Folglich wäre das Bild des Spektralprojektors $P = U_m U_m^H B$ nach Konstruktion wegen

$$B^{-1}AP = B^{-1}(AU_m)U_m^H B = B^{-1}(BU_m\Lambda)U_m^H B = U_m\Lambda U_m^H B = \left(\sum_{i=1}^m \lambda_i u_i u_i^H \right) \cdot B$$

ein $(B^{-1}A)$ -invarianter Unterraum. Daher erscheint es wegen Satz 2.1 sinnvoll, den Spektralprojektor P in das Rayleigh-Ritz-Verfahren zu integrieren. Da jedoch der Unterraum \mathcal{U}_m im Allgemeinen nicht bekannt ist, stellt sich die Frage, ob es überhaupt sinnvoll ist nach dem Projektor zu suchen. Wir werden jedoch alsbald feststellen, dass die Matrix $U_m U_m^H$ analytisch berechnbar ist.

2.2 Konturintegration

Die folgenden Zeilen präsentieren eine Vorgehensweise, die es gestattet, den im vorigen Abschnitt eingeführten Spektralprojektor analytisch zu konstruieren. Wir werden zu einem späteren Zeitpunkt untersuchen, in wie weit die Numerik in der Lage ist, dieses Verfahren algorithmisch umzusetzen.

Zunächst ist es erforderlich einige Begriffe und Notationen einzuführen. Für zwei Zahlen $z_1, z_2 \in \mathbb{C}$ sei mit der Menge

$$[z_1, z_2] := \{(1-t)z_1 + tz_2 \in \mathbb{C} \mid t \in [0, 1]\}$$

die direkte Verbindungsstrecke zwischen z_1 und z_2 bezeichnet. Im Spezialfall $z_1, z_2 \in \mathbb{R}$ stellen wir uns daher unter $[z_1, z_2]$ ein reellwertiges Intervall eingebettet in die komplexe Zahlenebene vor. Des Weiteren benötigen wir sogenannte *Jordan-Kurven*. Diese definieren wir im Kontext dieser Arbeit wie folgt.

Definition 2.4. *Es sei $S := \{z \in \mathbb{C} : |z| = 1\}$. Eine Menge $\Gamma \subset \mathbb{C}$ heißt Jordan-Kurve, falls ein Homöomorphismus $\gamma: S \rightarrow \mathbb{C}$ existiert mit $\Gamma = \text{Bild}(\gamma)$. Dabei ist ein Homöomorphismus eine stetige Bijektion mit stetiger Umkehrabbildung.*

Insbesondere sind Jordan-Kurven also geschlossene und überschneidungsfreie Kurven. Ausgestattet mit diesen neuen Vokabeln kann die nun Präsentation des angekündigten Verfahrens beginnen. Im weiteren Verlauf seien $A, B \in \mathbb{C}^{n,n}$ hermitesche Matrizen und B zusätzlich positiv definit.

Wir wollen annehmen, dass zwei Zahlen $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$ mit $\lambda_1 < \lambda_2$ vorgegeben sind, die das abgeschlossene Intervall $I := [\lambda_1, \lambda_2]$ definieren. Wie bisher sollen Paare der Gestalt

$(\lambda, x) \in I \times \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ ermittelt werden, welche der verallgemeinerten Eigenwertgleichung

$$Ax = \lambda Bx \quad (2.7)$$

genügen. Der Ausgangspunkt zur Bestimmung der gesuchten Eigenpaare ist die durch

$$\begin{aligned} G: \Omega &\rightarrow \mathbb{C}^{n,n} \\ \omega &\mapsto (\omega B - A)^{-1} \end{aligned}$$

definierte *Green-Funktion*, wobei $\Omega \subseteq \mathbb{C}$ eine vom Spektrum von $B^{-1}A$ disjunkte Teilmenge der komplexen Zahlen ist.³ Diese Funktion G wird nun über eine Jordan-Kurve Γ , die um das vorgegebene Intervall I „herumläuft“, in der Gestalt

$$\frac{1}{2\pi\iota} \int_{\Gamma} G(\omega) \, d\omega \quad (2.8)$$

integriert.⁴ Das Integral ist hierbei eintragsweise zu verstehen.

Wir wollen nun annehmen, dass es genau $m \in \mathbb{N}$ Eigenwerte gibt, die im Inneren von I liegen. Dann kann man nachweisen, dass sich (2.8) durch eine Matrix $U_m = [u_i]_{i=1:m} \in \mathbb{C}^{n,m}$ mit B -orthonormalen Spalten in

$$\frac{1}{2\pi\iota} \int_{\gamma} G(\omega) \, d\omega = U_m U_m^H$$

faktorisieren lässt, wobei u_i für jedes $i = 1 : m$ ein zu einem in I liegenden Eigenwert korrespondierender Eigenvektor ist.⁵ Als direkte Konsequenz erhalten wir folglich mit dem Produkt

$$\left(\frac{1}{2\pi\iota} \int_{\gamma} G(\omega) \, d\omega \right) \cdot B$$

den Spektralprojektor $U_m U_m^H B$.

³Wäre Ω nicht disjunkt vom Spektrum von $B^{-1}A$, so gäbe es ein $\omega \in \Omega$, welches zur Singularität von $(\omega B - A)$ führte.

⁴Mit ι ist im Folgenden stets die imaginäre Einheit bezeichnet, also $\iota = \sqrt{-1}$.

⁵Für einen Beweis des Spezialfalls $B = I$ sei auf [IG96, 64f] und [Lie13, S. 222-226] verwiesen.

2.3 Illustration

Bevor wir uns vom zweiten Kapitel verabschieden, sollen die Erkenntnisse der vorangegangenen Abschnitte an einem Beispiel vorgeführt werden. Dabei werden wir ausgehend von einem verallgemeinerten Eigenwertproblem gewisse Eigenwerte filtern und die Konturintegration mit der Ritz-Methode kombinieren.

Dafür wenden wir uns den beiden Matrizen $A, B \in \mathbb{C}^{3,3}$ zu, welche durch

$$A := \text{diag}(3, 1, 4) \text{ und } B := \text{diag}(1, 5, 9)$$

gegeben sind. Dann ist A hermitesch und B eine HPD Matrix. Durch einfaches Nachrechnen überprüft man, dass das verallgemeinerte Eigenwertproblem (2.7) durch Vektoren $x_1 \in \text{Span}_{\mathbb{C}}\{e_1\}$ mit zugehörigem Eigenwert $\lambda_1 = 3$, Vektoren $x_2 \in \text{Span}_{\mathbb{C}}\{e_2\}$ mit zugehörigem Eigenwert $\lambda_2 = 1/5$, sowie Vektoren $x_3 \in \text{Span}_{\mathbb{C}}\{e_3\}$ mit zugehörigem Eigenwert $\lambda_3 = 4/9$ gelöst wird.⁶

Vergessen wir für den Moment, dass uns die Eigenpaare bekannt sind und versuchen mit den Methoden, die in den vorangegangenen Abschnitten vorgestellt wurden, die Eigenpaare auf $I = [-1, 1]$ zu bestimmen. Gemäß Abschnitt 2.2 wählen wir daher als Integrationskontur Γ das Bild der Funktion

$$\gamma: [0, 2\pi] \rightarrow \mathbb{C}^n, \varphi \mapsto e^{i\varphi} \quad (2.9)$$

und integrieren die Green-Funktion

$$G(\omega) = \text{diag}(\omega - 3, 5\omega - 1, 9\omega - 4)^{-1} = \text{diag}\left(\frac{1}{\omega - 3}, \frac{1}{5\omega - 1}, \frac{1}{9\omega - 4}\right)$$

darüber. Nach Definition 2.4 ist Γ eine Jordan-Kurve. Da nach Konstruktion keiner der Eigenwerte im Bild von γ liegt, ist G auf der gesamten Kontur wohldefiniert. Folgen wir also weiter dem Abschnitt 2.2, so erhalten wir

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} G \, ds = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} G(\gamma(\omega)) \cdot \gamma'(\omega) \, d\omega = \text{diag}\left(0, \frac{1}{5}, \frac{1}{9}\right)$$

Diese Matrix lässt sich mit den B -orthonormalen Vektoren $u_1 = 1/\sqrt{5} \cdot e_2$ und $u_2 = 1/3 \cdot e_3$ wie gewünscht in

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 1/9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1/\sqrt{6} & 0 \\ 0 & 1/3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1/\sqrt{6} & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 \end{bmatrix} =: U_2 U_2^H$$

faktorisieren. Nachdem dies geschafft ist, lassen wir uns von der in Abschnitt 2.1 diskutierten Vorgehensweise inspirieren und reduzieren das Problem zunächst mit Hilfe einer

⁶Hier bezeichnen $e_1, e_2, e_3 \in \mathbb{C}^n$ die kanonischen Einheitsvektoren.

vollrangigen Matrix $V \in \mathbb{C}^{3,2}$ auf ein Problem kleinerer Dimension. Zu diesem Zwecke wählen wir

$$V := \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

und benutzen die Matrix $Q := U_2 U_2^H V$ um das Ausgangsproblem vermöge $\tilde{A} := Q^H A Q$ und $\tilde{B} := Q^H B Q$ auf das Problem

$$\tilde{A}y = \begin{bmatrix} 1/36 & 0 \\ 0 & 1/9 \end{bmatrix} y = \mu \begin{bmatrix} 5/36 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{bmatrix} y = \mu \tilde{B}y$$

der Dimension (2×2) zu transformieren. Die Eigenwerte $1/5$ und $4/9$ lassen sich leicht ablesen und stimmen wie erwartet mit den sich auf $[-1, 1]$ befindlichen Eigenwerten des eingangs formulierten Problems überein. Passende Eigenvektoren sind Elemente aus $\text{Span}_{\mathbb{C}}\{[1 \ 0]^T\}$ und $\text{Span}_{\mathbb{C}}\{[0 \ 1]^T\}$.

Es bleibt die Rücktransformation der Eigenvektoren. Dazu wählen wir aus kosmetischen Gründen die Eigenvektoren

$$y_1 := \begin{bmatrix} \sqrt{6} \\ 0 \end{bmatrix} \text{ und } y_2 := \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \end{bmatrix}$$

und setzen $Y = [y_1 \ y_2]$. Wir erhalten dann

$$QY = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1/6 & 0 \\ 0 & 1/9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1/\sqrt{6} & 0 \\ 0 & 1/3 \end{bmatrix} = U_2.$$

Eine Bemerkung zum Abschluss: Erinnern wir uns an Satz 2.1, so ist es nicht verwunderlich, dass diese Rechnung exakte Eigenpaare liefert. Schließlich hat Q vollen Rang und das Bild der von Q induzierten linearen Abbildung ist invariant unter $B^{-1}A$.

Kapitel 3

Rationales Filtern

In diesem Kapitel soll demonstriert werden, dass Konturintegration und Rayleigh-Ritz-Verfahren in einem engen Zusammenhang stehen **wird sich noch zeigen**. Um dies zu untermauern, orientieren sich die folgenden Absätze an den Ausführungen von Ping Tak Peter Tang und Eric Polizzi in [TP16]. Allerdings wird die Notation im Sinne der Konsistenz an einigen Stellen abweichen.

3.1 Beschleunigtes Rayleigh-Ritz Verfahren

Betrachten wir also wie bisher das verallgemeinerte Eigenwertproblem mit zwei komplexwertigen, hermiteschen $(n \times n)$ -Matrizen A und B und fordern zusätzlich die positive Definitheit von B . Zu diesem Duo gesellt sich nun mit $p(B^{-1}A)$ ein Polynom in $B^{-1}A$, welches wir benutzen um gemäß dem oben zitierten Paper den Algorithmus () aus dem vorigen Kapitel wie folgt zu ändern.

Algorithmus 3 Beschleunigtes iteratives Rayleigh-Ritz-Verfahren

- 1: Wähle m Zufallsvektoren $Q_{(0)} \leftarrow [q_i]_{i=1:m} \in \mathbb{C}^{n,m}$. Setze $k \leftarrow 1$.
 - 2: **repeat**
 - 3: Approximiere den Unterraumprojektor: $Y_{(k)} \leftarrow p(B^{-1}A)Q_{(k-1)}$
 - 4: Reduziere die Dimension: $\tilde{A}_{(k)} \leftarrow Y_{(k)}^H A Y_{(k)}$, $\tilde{B}_{(k)} \leftarrow Y_{(k)}^H B Y_{(k)}$.
 - 5: Löse das transformierte Problem $\tilde{A}_{(k)} \tilde{X}_{(k)} = \tilde{B}_{(k)} \tilde{X}_{(k)} \tilde{\Lambda}_{(k)}$ in $\tilde{X}_{(k)}$ und $\tilde{\Lambda}_{(k)}$.
 - 6: Setze $Q_{(k)} \leftarrow Y_{(k)} \tilde{X}_{(k)}$.
 - 7: $k \leftarrow k + 1$.
 - 8: **until** Abbruchkriterium ist erfüllt.
-

Das Polynom p wird in diesem Kontext auch als *Filter* oder *Beschleuniger* bezeichnet. Von dessen Wahl hängt nämlich ab, ob und wie gut Eigenpaare approximiert werden. Es ist sogar möglich, gezielt solche Eigenpaare zu finden, wie sie im Abschnitt 2.2 gesucht waren.

Um dies einzusehen, greifen wir erneut die Notationen aus besagtem Kapitel auf: Es sei $[\lambda_1, \lambda_2]$ dasjenige Intervall, auf dem die Eigenwerte und korrespondierenden Eigenvektoren gefunden werden sollen und X_k sei diejenige Matrix dessen Spalten aus gerade diesen Eigenvektoren besteht. Es wurde bereits diskutiert, dass die durch Konturintegration ermit-

telten Eigenvektoren B -orthogonal sind. Damit lässt sich also – wie im Satz 2.3 bewiesen – der Spektralprojektor $P = X_k X_k^H B$ konstruieren. Falls nun $p(B^{-1}A)$ mit diesem Projektor übereinstimmt, dann terminiert Algorithmus 3.1 im Falle der Vollrangigkeit von $Y_{(1)}$ nach einer Iteration.¹ Dies folgt unter Ausnutzung der Invarianz des Bildes von $PQ_{(0)}$ unter $B^{-1}A$ aus dem Satz 2.1.

Da der Spektralprojektor in den meisten Fällen unbekannt sein dürfte, liegt die Idee nahe, ihn zumindest zu approximieren. Da in [TP16, S. 356] bemerkt wird, dass dies gut funktioniert, wenn p eine durch *Gauß-Legendre-Quadratur* konstruierte rationale Funktion ist, wird sich das folgende Intermezzo mit eben dieser Klasse von Funktionen beschäftigen, bevor wir mit der Konstruktion des Projektors fortfahren.

3.2 Rationale Funktionen

Ausgehend von zwei Polynomen $p, q \in \mathbb{C}[t]$ mit

$$p := \sum_{k=0}^n p_k t^k \quad \text{und} \quad q := \sum_{k=0}^n q_k t^k$$

definieren wir eine rationale Funktion $\varrho: \mathbb{C} \setminus N_q \rightarrow \mathbb{C}$ vermöge

$$\varrho(t) := \frac{p(t)}{q(t)}$$

und identifizieren wie üblich die Unbestimmte t mit den Argumenten von p und q . Dabei ist $N_q := \{t \in \mathbb{C} \mid q(t) = 0\}$. Eine rationale Funktion wird als *echt gebrochen* bezeichnet, falls die Bedingung $\text{Grad}(p) < \text{Grad}(q)$ erfüllt ist.

3.3 Approximation des Spektralprojektors

Nun da die für den weiteren Verlauf der Arbeit wichtigen Eigenschaften rationaler Funktionen wiederholt wurden, widmen wir uns der Approximation des Spektralprojektors $P = X_k X_k^H B$. Dafür setzen wir den in Abschnitt 3.1 bereits begonnen Gedankengang aus [TP16] fort und übernehmen die zu letzt vereinbarten Voraussetzungen und Notationen.

Wenden wir uns also wieder dem reellen Intervall $I := [\lambda_1, \lambda_2]$ zu. Das Ziel ist die Konstruktion einer rationalen Funktion $\varrho: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ mit $\varrho|_{\mathbb{R}} \subseteq \mathbb{R}$, die auf I näherungsweise der Indikatorfunktion von I entspricht. Dazu bemühen wir die Cauchy'sche Integraldarstellung der Indikatorfunktion und wandeln diese mit Hilfe numerischer Quadraturformeln in die gewünschte rationale Funktion ϱ um.

Zuächst zur Indikatorfunktion: Ist $c \in \mathbb{R}$ der Mittelpunkt des Intervalls I und r der

¹ Hierbei ist entscheidend, dass die Anzahl der Spalten von Q mit der Anzahl der Eigenpaare übereinstimmt, die auf dem Intervall zu finden sind (Vgl. [TP16, S. 356]).

Abstand des Mittelpunktes zum Rand des Intervalls, dann entspricht die Menge

$$\mathcal{C} := \{z \in \mathbb{C} : |z - c| = r\}$$

gerade einer Sphäre mit Radius r um c . Mit dem Cauchy'schen Integralsatz lässt sich zeigen, dass im Falle $z \notin \mathcal{C}$

$$\frac{1}{2\pi\iota} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{\omega - z} d\omega = \begin{cases} 1 & \text{falls } |z - c| < r \\ 0 & \text{falls } |z - c| > r \end{cases}$$

gilt. Dieses Integral gilt es nun zu approximieren. **wie genau?** (Vgl. [Jäge, S. 20]).

Wir werden das eben diskutierte Integral mit einer Gauß-Legendre Quadraturformel annähern. Dazu ist es nötig die Kontur \mathcal{C} so zu parametrisieren, dass eine Transformation der Integrationsgrenzen auf das Intervall $[-1, 1]$ möglichst einfach möglich ist. Zu diesem Zweck sei

$$\begin{aligned} \gamma: [-1, 3] &\rightarrow \mathbb{C} \\ t &\mapsto c + re^{\iota\frac{\pi}{2}(1+t)} \end{aligned}$$

als Parametrisierung der Sphäre gewählt. Die Ableitung von γ ist dann für jedes $t \in [-1, 3]$ durch

$$\gamma'(t) = \iota \frac{\pi}{2} r e^{\iota\frac{\pi}{2}(1+t)}$$

gegeben. Mit den bekannten Regeln der Integration erhalten wir somit für alle $z \notin \mathcal{C}$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi\iota} \oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{\omega - z} d\omega &= \frac{1}{2\pi\iota} \int_{-1}^3 \frac{\gamma'(t)}{\gamma(t) - z} dt \\ &= \frac{1}{2\pi\iota} \left(\int_{-1}^1 \frac{\gamma'(t)}{\gamma(t) - z} dt + \int_1^3 \frac{\gamma'(t)}{\gamma(t) - z} dt \right) \\ &= \frac{1}{2\pi\iota} \left(\int_{-1}^1 \frac{\gamma'(t)}{\gamma(t) - z} dt + \int_{-1}^1 \frac{\gamma'(2-t)}{\gamma(2-t) - z} dt \right) \\ &= \frac{1}{2\pi\iota} \int_{-1}^1 \left(\frac{\gamma'(t)}{\gamma(t) - z} dt + \frac{\overline{\gamma'(t)}}{\overline{\gamma(t)} - z} dt \right) \end{aligned}$$

wobei $\overline{\gamma(t)}$ und $\overline{\gamma'(t)}$ die komplexen Konjugationen von $\gamma(t)$ beziehungsweise $\gamma'(t)$ bezeichnen.

Für $q \in \mathbb{N}$ mit **wie groß ist q genau?** seien $(w_j, t_j)_{j=1:q}$ die für die Gauß-Legendre-Quadratur benötigten Gewichte und Diskretisierungspunkte. Dann setzen wir

$$\varrho(z) := \frac{1}{2\pi\iota} \sum_{j=1}^q \left(\frac{w_j \cdot \gamma'(t_j)}{\gamma(t_j) - z} - \frac{w_j \cdot \overline{\gamma'(t_j)}}{\overline{\gamma(t_j)} - z} \right)$$

und erhalten nach der Substitution $\gamma(t_j) := \gamma_j$ und $\sigma_j := w_j \gamma'(t_j) / (2\pi\iota)$ die gewünschte

rationale Funktion

$$\varrho: \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}, z \mapsto \sum_{j=1}^q \left(\frac{\sigma_j}{\gamma_j - z} + \frac{\overline{\sigma_j}}{\overline{\gamma_j} - z} \right)$$

zur Approximation der Indikatorfunktion. Hierbei ist bemerkenswert, dass die rationale Funktion bereits in Partialbruchzerlegung vorliegt.

Wir wollen uns nun davon überzeugen, dass der Gebrauch der eben erarbeiteten Quadratur eine sinnvolle Wahl ist.

Erinnerung an Konturkapitel: ... weiter auf Seite 358

3.4 Der FEAST-Algorithmus

Anhang A

yolo

Sed commodo posuere pede. Mauris ut est. Ut quis purus. Sed ac odio. Sed vehicula hendrerit sem. Duis non odio. Morbi ut dui. Sed accumsan risus eget odio. In hac habitasse platea dictumst. Pellentesque non elit. Fusce sed justo eu urna porta tincidunt. Mauris felis odio, sollicitudin sed, volutpat a, ornare ac, erat. Morbi quis dolor. Donec pellentesque, erat ac sagittis semper, nunc dui lobortis purus, quis congue purus metus ultricies tellus. Proin et quam. Class aptent taciti sociosqu ad litora torquent per conubia nostra, per inceptos hymenaeos. Praesent sapien turpis, fermentum vel, eleifend faucibus, vehicula eu, lacus.

Literatur

- [Bar15] Marc van Barel. “Designing rational filter functions for solving eigenvalue problems by contour integration.” In: (2015).
- [Ber16] Mario Berljafa. “Rational Krylov Toolbox for MATLAB.” In: (2016).
- [IG96] P. Lancaster und L. Rodman I. Gohberg. *Invariant subspaces of matrices with applications*. 1996.
- [Jäge] Klaus Jänich. *Funktionentheorie. Eine Einführung*. Irgendein Jahr.
- [Lie13] Jörg Liesen. *Krylov subspace methods. Principles and analysis*. 2013.
- [Pol09] Eric Polizzi. “Density-matrix-based algorithm for solving eigenvalue problems.” In: (2009).
- [Ste13] Gilbert W. Stewart. *Matrix algorithms*. Bd. 2: Eigensystems. 2013.
- [TP16] Ping Tak Peter Tang und Eric Polizzi. “Feast as a subspace iteration eigensolver accelerated by approximate spectral projection.” In: (2016).