

HERLEITUNG DES QR-VERFAHRENS

S. BARTELS, 29.6.2020

1.1. **QR-Verfahren.** Um in der Potenzmethode auch eine Approximation des betragsmäßig zweitgrößten Eigenwerts λ_2 der Matrix A und eines zugehörigen Eigenvektors zu erhalten, folgen wir der Argumentation in [HW05] und berechnen zwei Folgen von Vektoren $(x_k)_{k=0,1,\dots}$ und $(y_k)_{k=0,1,\dots}$ mit der Potenzmethode, führen jedoch in jedem Schritt eine Korrektur durch, die sicher stellt, dass die Vektoren x_k und y_k für alle $k \geq 0$ orthogonal zueinander sind. Seien dazu $x_0, y_0 \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ orthogonal und bestimme für $k = 1, 2, \dots$ die Iterierten x_k und y_k durch

$$x_k = Ax_{k-1}, \quad y_k = Ay_{k-1} - \beta_k x_k,$$

wobei β_k so gewählt sei, dass $x_k \cdot y_k = 0$ gilt. Die Vektoren lassen sich äquivalent durch die Gleichungen

$$x_k = A^k x_0, \quad y_k = A^k y_0 - \gamma_k x_k$$

definieren, wobei wiederum γ_k so gewählt sei, dass $x_k \cdot y_k = 0$ gilt. Ist (v_1, v_2, \dots, v_n) eine Basis des \mathbb{R}^n bestehend aus Eigenvektoren zu den Eigenwerten $|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|$ von A , so gilt

$$x_k = \sum_{i=1}^n a_i \lambda_i^k v_i, \quad y_k = \sum_{j=1}^n (b_j - \gamma_k a_j) \lambda_j^k v_j.$$

Dabei nehmen wir an, dass a_1 und $r = b_2 - b_1 a_2 / a_1$ von Null verschieden sind. Die Orthogonalität $x_k \cdot y_k = 0$ impliziert, dass

$$0 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i (b_j - \gamma_k a_j) \lambda_i^k \lambda_j^k v_i \cdot v_j.$$

Eine Division dieser Identität durch λ_1^{2k} impliziert wegen $|\lambda_\ell / \lambda_1| < 1$ für $\ell = 2, 3, \dots, n$, dass

$$b_1 - \gamma_k a_1 \rightarrow 0$$

für $k \rightarrow \infty$ gilt. Damit ergibt sich für große Zahlen k , dass

$$y_k \approx \sum_{j=2}^n (b_j - \gamma_k a_j) \lambda_j^k v_j.$$

Wegen $b_2 - \gamma_k a_2 \rightarrow r \neq 0$ dominiert in dieser Summe der erste Summand, sodass y_k für $k \rightarrow \infty$ gegen ein Vielfaches des Eigenvektors v_2 konvergiert.

Für die praktische Realisierung verwenden wir Normalisierungen, das heißt wir setzen

$$\tilde{x}_k = \frac{x_k}{\|x_k\|}, \quad \tilde{y}_k = \frac{y_k}{\|y_k\|}$$

und erhalten die Beziehungen

$$c_k \tilde{x}_k = A \tilde{x}_{k-1}, \quad d_k \tilde{y}_k = A \tilde{y}_{k-1} - e_k \tilde{x}_k$$

mit geeigneten Zahlen $c_k, d_k, e_k \in \mathbb{R}$. Mit den Definitionen

$$U_k = [\tilde{x}_k \quad \tilde{y}_k] \in \mathbb{R}^{n \times 2}, \quad R_k = \begin{bmatrix} c_k & e_k \\ 0 & d_k \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$$

ergibt sich

$$AU_{k-1} = U_k R_k.$$

Aufgrund der Orthogonalität und Normalisierung der Vektoren \tilde{x}_k und \tilde{y}_k ist U_k eine orthogonale Matrix, das heißt es gilt $U_k^\top U_k = I_2$. Definieren wir

$$A_{k+1} = U_k^\top A U_k, \quad Q_k = U_{k-1}^\top U_k$$

so folgt im Fall $n = 2$, dass $Q_k \in O(2)$, und

$$\begin{aligned} A_k &= U_{k-1}^\top A U_{k-1} = (U_{k-1}^\top U_k) R_k = Q_k R_k, \\ A_{k+1} &= U_k^\top A U_k = U_k^\top A U_{k-1} U_{k-1}^\top U_k = R_k Q_k, \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt $R_k = U_k^\top U_{k-1} U_{k-1}^\top A U_{k-1} = U_k^\top A U_{k-1}$ verwendet wurde. Es wird also eine QR -Faktorisierung von A_k bestimmt und anschließend A_{k+1} durch Vertauschung der Faktoren definiert. Dieses Vorgehen lässt sich auf den Fall $n > 2$ verallgemeinern und führt auf das QR -Verfahren, das unter geeigneten Voraussetzungen Approximationen sämtlicher Eigenwerte einer Matrix liefert. Als Startvektoren werden die kanonischen Basisvektoren gewählt.

Algorithmus 1 (QR -Verfahren). Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Setze $A_0 = A$ und $k = 0$.

- (1) Bestimme die QR -Zerlegung $A_k = Q_k R_k$ und setze $A_{k+1} = R_k Q_k$.
- (2) Stoppe falls $\|A_{k+1} - A_k\| \leq \varepsilon_{\text{stop}}$; andernfalls erhöhe $k \rightarrow k + 1$ und wiederhole Schritt (1).

LITERATUR

[HW05] E. Hairer and G. Wanner, *Introduction à l'Analyse Numérique*, 2005, Vorlesungsskript, Université de Genève.