

## Zur Außen- und Inneneinschließung von Eigenwerten bei toleranzbehafteten Matrizen

MSC (1980): 15A18, 65F15, 65G10

Gegeben sei eine Matrix mit toleranzbehafteten Daten  $[A] := \{A \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid \underline{A}_{ij} \leq A_{ij} \leq \bar{A}_{ij}\}$  für  $\underline{A}, \bar{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ . Es werden Methoden diskutiert zur Einschließung (auch mehrfacher) Eigenwerte aller  $A \in [A]$ ,  $A$  symmetrisch und zur Einschließung einfacher Eigenwerte von  $A - \lambda B$ ,  $A \in [A]$ ,  $B \in [B]$ ,  $A, B$  beliebig. Außerdem werden Bereiche  $A := \{A \in \mathbb{R} \mid \underline{\lambda} \leq \lambda \leq \bar{\lambda}\}$  berechnet mit der Eigenschaft, daß jedes  $\lambda \in \mathbb{R}$  mit  $\lambda \in A$  Eigenwert jeweils eines der o. g. Probleme ist. Die folgenden Überlegungen gelten insbesondere für weitere Toleranzen.

### 1. Mehrfache Eigenwerte symmetrischer Matrizen

Wir verwenden die übliche Notation der Intervallrechnung, siehe etwa [1], [3]. In [2] ist für  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  folgendes Verfahren angegeben: Für nichtsinguläres  $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$  hat  $V^{-1}AV$  das gleiche Spektrum wie  $A$ . Enthält  $V$  für symmetrisches  $A$  Näherungen der Eigenvektoren von  $A$ , ist  $V^{-1}AV$  näherungsweise diagonal und die Eigenwerte können (bei exakter Rechnung) mit dem Satz von Gerschgorin eingeschlossen werden. Die Inverse  $V^{-1}$  kann man einschließen durch

$$V^{-1} \in V^T \pm \delta, \quad \delta := \|V^T\| \cdot \|C\| / (1 - \|C\|) \quad \text{für } C := I - V^T V \quad (1.1)$$

oder mittels Einschließungsmethoden [4]. In letzterem Fall löst man  $n$  Gleichungssysteme mit rechten Seiten  $(A \cdot V)_i$ . Es ergeben sich also zwei Methoden, die für toleranzbehaftete Matrizen  $[A]$  formuliert werden:

1. Sei  $A := \text{mid}([A])$ ,  $V, D$  Näherungen für Eigenvektoren, Diagonalmatrix der Eigenwerte von  $A$  aus EISPACK ( $A \cdot V \approx V \cdot D$ )
 

Methode I	Methode II
2. Berechne Einschließung $\tilde{V}$ für $V^{-1}$ gemäß (1.1) und berechne $T := \tilde{V} \cdot [A] \cdot V$	2. Berechne Einschließung $T$ für $V^{-1} \cdot (A \cdot V)$ durch Lösen der linearen Gleichungssysteme
3. Berechne Eigenwerteneinschließungen von  $T$  nach Gerschgorin.

Verwendet man in Schritt 2 und 3 Intervalloperationen, ergeben sich Schranken für  $\lambda([A])$ . Die Verfahren sind durchführbar insoweit  $\|C\| < 1$  bzw.  $Vx = b$  in Methode II gelöst werden kann. Das wird in praktischen Fällen sicher erfüllt sein, da  $V$  annähernd orthogonal ist. In beiden Methoden I und II werden jedes  $A \in [A]$  und nicht nur die symmetrischen Matrizen aus  $[A]$  für die Einschließung berücksichtigt.

Sei  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  symmetrisch,  $V, D \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $V$  regulär. Dann gilt

$$A \cdot V - V \cdot D = E \Rightarrow |\lambda_i(A) - \lambda_i(D)| \leq \|E\|_2 / \sigma_n(V) \quad (1.2)$$

für jedes  $1 \leq i \leq n$  ( $\sigma_n$  bezeichnet den kleinsten Singulärwert). Denn ist  $Q \cdot R = V$  eine QR-Zerlegung von  $V$ , so folgt

$$AQR - QRD = E \quad \text{oder} \quad Q^T A Q - RDR^{-1} = Q^T E R^{-1}.$$

Für alle  $1 \leq i \leq n$  gilt wegen  $\lambda(Q^T A Q) = \lambda(A)$

$$\lambda_i(A) + \lambda_n(Q^T E R^{-1}) \leq \lambda_i(RDR^{-1}) \leq \lambda_i(A) + \lambda_1(Q^T E R^{-1}),$$

wobei die Eigenwerte  $\lambda_i$  monoton fallend geordnet sind. Das heißt

$$|\lambda_i(A) - \lambda_i(RDR^{-1})| = |\lambda_i(A) - \lambda_i(D)| \leq \|ER^{-1}\|_2 \leq \|E\|_2 / \sigma_n(V).$$

Weiterhin ist  $\|E\|_2 \leq \|E\|_F = \|E\|_F$  und  $\sigma_n(V) = \lambda_n(V^T V)^{1/2}$ , also

$$|\lambda_i(A) - \lambda_i(D)| \leq \|E\|_F / s \quad \text{mit} \quad s = \lambda_n(V^T V)^{1/2}. \quad (1.3)$$

Sind die Spalten von  $V$  Näherungen der Eigenvektoren von  $A$  (z. B. aus EISPACK), ist  $V^T V$  annähernd diagonal, und eine Einschließung für  $s$  kann nach Gerschgorin bestimmt werden. Es ergibt sich:

- Methode III: 1. wie in Methode I, II
2.  $E := [A] \cdot V - V \cdot D$ ;  $J := V^T V$ ;
  3. Berechne untere Schranke  $s$  für  $\lambda_n(J)^{1/2}$  nach Gerschgorin und Eigenwertschranken nach (1.3).

Methode III ist durchführbar, solange die untere Schranke für  $s$  positiv bleibt. Das beweist auch die Nichtsingularität von  $V \cdot J$  ist annähernd gleich der Einheitsmatrix.

Alle drei Verfahren können nun folgendermaßen modifiziert werden: Aus der Perturbationstheorie für Eigenwerte folgt für symmetrisches  $\text{rad}([A])$ :

$$\lambda([A]^\varepsilon) \subseteq \lambda(\text{mid}([A])) \pm \|\text{rad}([A])\|_2 \quad (1.4)$$

Die Methoden I, II, III können also auf die Mittelpunktmatrix angewandt und dann Schranken für  $\lambda([A]^\varepsilon)$  vermöge (1.4) gewonnen werden.

Es wurden eine Reihe von Matrizen  $[A] := A \cdot (1 \pm \varepsilon)$  getestet. Es sei

$$A_{\min} := |\lambda_{\min}(A) - \lambda_{\min}([A]^\varepsilon)|$$

die Perturbation des kleinsten Eigenwerts der Mittelpunktmatrix innerhalb der Toleranzen, entsprechend  $A_{\max}$ . Alle drei Methoden berechnen Schranken  $\bar{A}_m$  für  $A_m, m \in \{\min, \max\}$ . In den folgenden Tabellen ist

$$\text{rad}(\bar{A}_m) / \text{rad}(A_m) \quad \text{gegen} \quad \varepsilon = \text{rad}([A]) / \text{mid}([A]) \quad (1.5)$$

aufgetragen. Das Verhältnis ist  $\geq 1$ ; ist es gleich 1, sind die Schranken scharf.  $A_m$  wurde mittels Monte Carlo-Simulation und einer später noch zu besprechenden Heuristik berechnet.

Die Ergebnisse sind allesamt sehr ähnlich, stellvertretend sei  $A = Q^T \cdot \text{diag}(0,5, \dots, 0,5, 1,5, \dots, 1,5) \cdot Q \in \mathbb{R}^{30 \times 30}$  herausgegriffen mit je 15fachem Eigenwert 0,5 und 1,5,  $Q$  orthogonalisierte Zufallsmatrix. Die Ergebnisse der Methoden I, II, III sind jeweils durch die strichpunktierte, gepunktete und durchgezogene Linie gezeigt, in Bild 1 für  $[A]$  eingesetzt, in Bild 2 mittels (1.4).

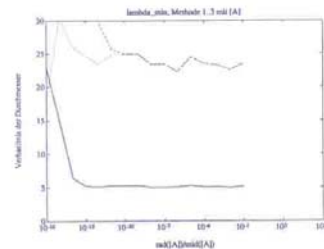


Bild 1

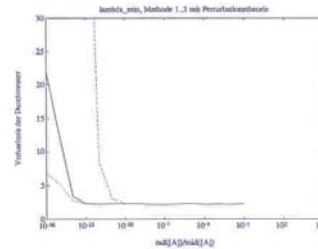


Bild 2

Man beachte die weite Variation von  $\varepsilon$  von  $10^{-16}$  bis  $10^{-1}$ , also bis 10%. Generell sind die linken Kurven ungünstiger als die rechten, im rechten Bild scheint Methode II bei sehr kleinen Toleranzen vorteilhaft zu sein. Sehr rasch, bereits ab  $\varepsilon = 10^{-13}$  ist das Verhältnis (1,5) nahe bei 1, die errechneten Schranken also scharf (vgl. Bild 3 und 4).

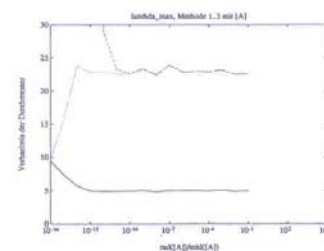


Bild 3

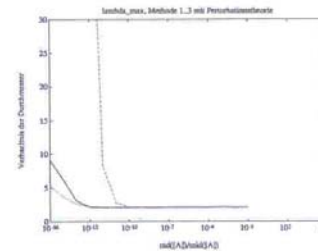


Bild 4

Beim kleinsten Eigenwert sehen die Verhältnisse sehr ähnlich aus, bereits bei recht kleinen Toleranzen sind die Schranken scharf. Es sei noch erwähnt, daß nach Schritt 1 der Aufwand für Methode II ca.  $3n^3 + O(n^2)$  gegenüber  $2n^3 + O(n^2)$  bei Methode III beträgt. Außerdem wird man in Methode III nur  $|AV - VD|$  und  $|V^T V|$  nach oben gerichtet gerundet berechnen.

In nur einem Testbeispiel traten deutliche Überschätzungen auf, und zwar bei Pascal-Matrizen. Die sich ergebenden Verhältnisse von (1,5) bis  $10^4$  könnten allerdings durch Unterschätzung des wahren  $A_m$  entstanden sein.

## 2. Mindestvariation von Eigenwerten

Seien  $[A], [B]$  mit Toleranzen behaftete Matrizen. In [5], Satz 2 wird ein Verfahren angegeben, Intervalle  $\tilde{A}$  und  $\tilde{\lambda} \subseteq \tilde{A}$  zu berechnen mit der Eigenschaft, daß jedes  $\lambda \in \tilde{\lambda}$  Eigenwert des verallgemeinerten Eigenwertproblems  $Ax - \lambda Bx$  ist für ein  $A \in [A], B \in [B]$ . Es wird außerdem gezeigt, daß für jedes  $A \in [A], B \in [B]$  genau ein Eigenwert von  $A - \lambda B$  in  $\text{interior}(\tilde{\lambda})$  liegt.

Als Beispiel betrachten wir etwa für  $A = H_{10}$  die  $10 \times 10$ -Hilbert Matrix (ganzzahlig skaliert),  $B = I$  mit  $[A] := A \cdot (1 \pm 10^{-13})$ . Die Konditionszahl von  $A$  ist etwa  $10^{-13}$ . Es ergibt sich

$$\tilde{A} = [1,752; 3,338] \cdot 10^{-5} \subseteq [1,744; 3,346] \cdot 10^{-5} = \tilde{\lambda}.$$



Alle  $A \in [A]$  sind also positiv definiert. Der Unterschied zwischen Innen- und Außeneinschließung entspricht etwa der Strichdicke der eckigen Klammern.

In einem zweiten Beispiel sei

$$\left. \begin{array}{l} A \text{ symmetrische } 10 \times 10 \text{ Matrix mit Diagonale } (5, 6, \dots, 6, 5) \text{ und} \\ \text{Nebendiagonalen } -4 \text{ und } 1, B = H_{10} \text{ mit Toleranzen von } 0,1\%: \\ [A] := A \cdot (1 \pm 10^{-3}), \quad [B] := B \cdot (1 \pm 10^{-3}). \end{array} \right\} \quad (2.1)$$

Es ergibt sich

$$\tilde{A} = [2,159; 3,235] \cdot 10^{-11} \subseteq [-9,288; 14,682] \cdot 10^{-11} = \tilde{\lambda}. \quad (2.2)$$

Es konnte also nicht nachgewiesen werden, daß  $[A] - \lambda[B]$  negative Eigenwerte enthält.

Sei  $x, y$  Rechts- bzw. Linkseigenvektor von  $A - \lambda B$  zum einfachen Eigenwert  $\hat{\lambda}$ . Für  $[A]_\varepsilon := A \pm \varepsilon \cdot [A^*], [B]_\varepsilon := B \pm \varepsilon \cdot [B^*]$  ergibt sich als Empfindlichkeit von  $\hat{\lambda}$  für  $\varepsilon$ -Perturbationen mit  $[A^*], [B^*]$  gewichtet

$$|y^T \cdot ([A^*] + |\hat{\lambda}| \cdot [B^*]) \cdot x| / |y^T B x| \quad (2.3)$$

für  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Das Resultat ist von WILKINSON für  $[A^*] = |A|, [B^*] = |B|$  formuliert. Die tatsächliche Änderung des Eigenwertes  $\hat{\lambda}$  für endliche Störungen ergibt sich zu

$$\lambda(\tilde{A} - \lambda \tilde{B}) - \hat{\lambda} \rightarrow y^T \cdot (\tilde{A} - \hat{\lambda} \tilde{B}) \cdot x / (y^T \tilde{B} x) \quad (2.4)$$

für  $\tilde{A} - A = \varepsilon \cdot \tilde{A}^*, \tilde{B} - B = \varepsilon \cdot \tilde{B}^*$ . Der maximale Wert von (2.4), also (2.3), wird also gerade angenommen für

$$\text{sign}(\tilde{A} - A) = \text{sign}(y \cdot x^T) \quad \text{und} \quad \text{sign}(\tilde{B} - B) = -\text{sign}(\hat{\lambda}) \cdot \text{sign}(y x^T).$$

M. a. W. erzeugt eine Perturbation in Richtung  $\tilde{A}^*, \tilde{B}^*$  lokal stärkste Änderung von  $\hat{\lambda}$ . Die Heuristik ist, in diese Richtung bis zum Rand von  $[A], [B]$  zu gehen und den  $\hat{\lambda}$  entsprechenden Eigenwert einzuschließen. Daß dies kein anderer sein kann, folgt aus der erwähnten individuellen Eindeutigkeit der Eigenwerte in  $\tilde{\lambda}$ . Man beachte, daß für die so gewonnene Inneneinschließung nur zwei Punkt-Eigenprobleme zu lösen sind; Überschätzungen durch Intervalloperationen können nicht auftreten.

In unserem Beispiel (2.1) ergibt sich der Nachweis der Existenz negativer Eigenwerte:

$$\tilde{A} = [-3,723; 7,819] \cdot 10^{-11} \subseteq [-9,288; 14,682] \cdot 10^{-11} = \tilde{\lambda}.$$

Oben erwähnte Heuristik wurde ebenfalls bei den Inneneinschließungen für  $A_m$  im zweiten Abschnitt angewandt. In den gerechneten Beispielen arbeitete diese Heuristik immer besser als Monte-Carlo Abschätzungen.

## Literatur

- 1 ALEFIELD, G.; HERZBERGER, J.: Introduction to interval computations. Academic Press 1983.
- 2 LOHNER, R.: Enclosing all eigenvalues for symmetric matrices. In ULLRICH, CH.; WOLFF VON GUDENBERG, J. (Hrsg.): Accurate numerical algorithms. Springer 1989, pp. 87–103.
- 3 NEUMAIER, A.: Interval methods for systems of equations. Cambridge University Press 1990.
- 4 RUMP, S. M.: Solving algebraic problems with high accuracy. Habilitationsschrift, in KULISCH, U. W.; MIRANKER, W. L. (eds.): A new approach to scientific computation. Academic Press, 1983, pp. 51–120.
- 5 Rump, S. M.: Guaranteed inclusions for the complex generalized eigenproblem. Computing **42** (1989), 225–238.

*Anschrift:* Prof. Dr. SIEGFRIED M. RUMP, Technische Universität Hamburg-Harburg, Informatik III, Eißendorfer Straße 38, D-W-2100 Hamburg 90, Deutschland