Das Verfahren von Maehly

Berechnet werden sollen alle Eigenwerte λ einer symmetrischen reellwertigen Tridiagonalmatrix

$$J_n = \begin{pmatrix} \delta_1 & \gamma_2 & & 0 \\ \gamma_2 & \delta_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \gamma_n \\ 0 & & \gamma_n & \delta_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}. \tag{1}$$

Analytisch würde man die Nullstellen des charakteristischen Polynoms

$$p_n(\lambda) = \det(J_n - \lambda I_n) \tag{2}$$

bestimmen. Für die k-ten Abschnittsmatrizen gilt die 3-Term-Rekursion

$$\begin{aligned} p_0(\lambda) &= 1 \\ p_1(\lambda) &= \delta_1 - \lambda \\ p_k(\lambda) &= (\delta_k - \lambda) p_{k-1}(\lambda) - \gamma_k^2 p_{k-2}(\lambda), \qquad k = 2, \ldots, n. \end{aligned} \tag{3}$$

Sei nun $\gamma_k \neq 0$ für alle $k = 2, \ldots, n$ vorausgesetzt, wir definieren den Vektor

$$q(\lambda) := \begin{pmatrix} q_0(\lambda) \\ \vdots \\ q_{n-1}(\lambda) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n \tag{4}$$

mit

$$\begin{aligned} q_0(\lambda) &:= 1 \\ q_k(\lambda) &:= \frac{(-1)^k p_k(\lambda)}{\gamma_2 \cdot \cdots \cdot \gamma_{k+1}}, \qquad k = 1, \ldots, n, \quad \gamma_{n+1} := 1. \end{aligned} \tag{5}$$

Dann ist die 3-Term-Rekursion (3) äquivalent zu der Gleichung

$$(J_n - \lambda I_n) q(\lambda) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -q_n(\lambda) \end{pmatrix} \tag{6}$$

Beweis:
Schreibe Gleichung (6) aus:

$$\begin{pmatrix} \delta_1 - \lambda & \gamma_2 & & 0 \\ \gamma_2 & \delta_2 - \lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \gamma_n \\ 0 & & \gamma_n & \delta_n - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_0(\lambda) \\ \vdots \\ q_{n-1}(\lambda) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -q_n(\lambda) \end{pmatrix}$$

Berechnung der linken Seite:

$$\begin{pmatrix} \delta_1-\lambda & \gamma_2 & & 0 \\ \gamma_2 & \delta_2-\lambda & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \gamma_n \\ 0 & & \gamma_n & \delta_n-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_0(\lambda) \\ \vdots \\ q_{n-1}(\lambda) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\delta_1-\lambda)q_0(\lambda)+\gamma_2 q_1(\lambda) \\ \gamma_2 q_0(\lambda)+(\delta_2-\lambda)q_1(\lambda)+\gamma_3 q_2(\lambda) \\ \vdots \\ \gamma_n q_{n-2}(\lambda)+(\delta_n-\lambda)q_{n-1}(\lambda) \end{pmatrix}$$

Für Zeile 1 gilt mit $q_0(\lambda)=1$ und $q_1(\lambda)=\frac{-p_1(\lambda)}{\gamma_2}$:

$$(\delta_1-\lambda)+\gamma_2\frac{-p_1(\lambda)}{\gamma_2}=(\delta_1-\lambda)-(\delta_1-\lambda)=0.$$

Für Zeile j gilt (unter Ausnutzung der Gleichung $q_k(\lambda)=\frac{(-1)^k p_k(\lambda)}{\gamma_2\cdot\dots\cdot\gamma_{k+1}}$ und der 3-Term-Rekursion (3) für den Term $p_j(\lambda)$):

$$\begin{aligned}
& \gamma_j q_{j-2}(\lambda)+(\delta_j-\lambda)q_{j-1}(\lambda)+\gamma_{j+1}q_j(\lambda) \\
= \;& \gamma_j\frac{(-1)^{j-2}p_{j-2}(\lambda)}{\gamma_2\cdot\dots\cdot\gamma_{j-1}}+(\delta_j-\lambda)\frac{(-1)^{j-1}p_{j-1}(\lambda)}{\gamma_2\cdot\dots\cdot\gamma_j}+\gamma_{j+1}\frac{(-1)^j p_j(\lambda)}{\gamma_2\cdot\dots\cdot\gamma_{j+1}} \\
\overset{(3)}{=} \;& \gamma_j^2\frac{(-1)^{j-2}p_{j-2}(\lambda)}{\gamma_2\cdot\dots\cdot\gamma_j}+(\delta_j-\lambda)\frac{(-1)^{j-1}p_{j-1}(\lambda)}{\gamma_2\cdot\dots\cdot\gamma_j}+\frac{(-1)^j\left[(\delta_j-\lambda)p_{j-1}(\lambda)-\gamma_j^2 p_{j-2}(\lambda)\right]}{\gamma_2\cdot\dots\cdot\gamma_j} \\
= \;& \frac{(-1)^{j-2}}{\gamma_2\cdot\dots\cdot\gamma_j}\left[\gamma_j^2 p_{j-2}(\lambda)-(\delta_j-\lambda)p_{j-1}(\lambda)+(\delta_j-\lambda)p_{j-1}(\lambda)-\gamma_j^2 p_{j-2}(\lambda)\right] \\
= \;& 0
\end{aligned}$$

Für die letzte Zeile gilt schließlich:

$$\begin{aligned}
\gamma_n q_{n-2}(\lambda)+(\delta_n-\lambda)q_{n-1}(\lambda) &= \gamma_n\frac{(-1)^{n-2}p_{n-2}}{\gamma_2\cdot\dots\cdot\gamma_{n-1}}+(\delta_n-\lambda)\frac{(-1)^{n-1}p_{n-1}}{\gamma_2\cdot\dots\cdot\gamma_n} \\
&= \frac{(-1)^{n+1}}{\gamma_2\cdot\dots\cdot\gamma_n}\left[(\delta_n-\lambda)p_{n-1}-\gamma_n^2 p_{n-2}\right] \\
&\overset{(3)}{=} \frac{(-1)^{n+1}}{\gamma_2\cdot\dots\cdot\gamma_n}p_n(\lambda) \;=\; -q_n(\lambda)
\end{aligned}$$

□

Also muss für die Eigenwerte λ_k von J_n gelten:

$$p_n(\lambda_k)=0 \qquad \Rightarrow \qquad q_n(\lambda_k)=0,$$

d.h. $(J_n - \lambda_k I_n)q(\lambda_k) = 0$ mit $q(\lambda_k) \neq 0$. Also ist $q(\lambda_k)$ Eigenvektor zum Eigenwert λ_k. Leite nun die Gleichung (6) nach λ ab:

$$-q(\lambda) + (J_n - \lambda I_n)q'(\lambda) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -q_n'(\lambda) \end{pmatrix}$$

Auswertung in λ_k und Multiplikation von links mit $q(\lambda_k)^T$ ergibt

$$\begin{aligned} -q(\lambda_k)^T q(\lambda_k) + \underbrace{q(\lambda_k)^T (J_n - \lambda_k I_n)}_{=0,\ \text{da}\ (J_n - \lambda_k I_n)q(\lambda_k)=0} q'(\lambda) &= q(\lambda_k)^T \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -q_n'(\lambda_k) \end{pmatrix} \\ \Leftrightarrow \quad -q(\lambda_k)^T q(\lambda_k) &= -q_{n-1}(\lambda_k) q_n'(\lambda_k) \\ \Leftrightarrow \quad \underbrace{q(\lambda_k)^T q(\lambda_k)}_{=\sum_{i=0}^{n-1} q_i(\lambda_k)^2 > 0} &= q_{n-1}(\lambda_k) q_n'(\lambda_k) \end{aligned}$$

Insgesamt folgt mit $q_n'(\lambda) = \frac{(-1)^n p_n'(\lambda)}{\gamma_2 \cdots \gamma_n}$

$$0 < q_{n-1}(\lambda_k) q_n'(\lambda_k) = -\frac{p_{n-1}(\lambda_k) p_n'(\lambda_k)}{\gamma_2^2 \dots \gamma_n^2},$$

insbesondere gilt demnach

$$p_n'(\lambda_k) \neq 0.$$

Damit ist λ_k einfache Nullstelle des charakteristischen Polynoms $p_n(\lambda)$! Es gilt also $\lambda_n < \cdots < \lambda_2 < \lambda_1$. Berechne die Ableitung $p_n'(\lambda_k)$ durch Ableitung der 3-Term-Rekursion (3):

$$\begin{aligned} p_0'(\lambda) &= 0, \\ p_1'(\lambda) &= -1, \\ p_k'(\lambda) &= -p_{k-1}(\lambda) + (\delta_k - \lambda) p_{k-1}'(\lambda) - \gamma_k^2 p_{k-2}'(\lambda), k = 2, \dots, n. \end{aligned} \tag{7}$$

Maehly-Algorithmus:

Gesucht sind die Eigenwerte der Tridiagonalmatrix (1), diese werden durch die Berechnung der Nullstellen des char. Polynoms (2) bestimmt. Für Nullstellenberechnungen kennen wir das Newton-Verfahren, welches hier angewandt wird. Wir setzen voraus, dass $\gamma_j \neq 0$ für

$j = 2, \dots, n$. Dann hat das Polynom $p_n(\lambda)$ nach obiger Rechnung n einfache Nullstellen $\lambda_n < \cdots < \lambda_2 < \lambda_1$. Also hat das Polynom

$$p_{n,j}(\lambda) := \frac{p_n(\lambda)}{(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)\dots(\lambda - \lambda_j)}, \quad j = 1, \dots, n-1 \tag{8}$$

die Nullstellen $\lambda_{j+1}, \dots, \lambda_n$, welche wir mit dem Newton-Verfahren berechnen wollen. Leite dazu (8) nach λ ab:

$$p'_{n,j}(\lambda) = \frac{p'_n(\lambda)}{(\lambda - \lambda_1)\dots(\lambda - \lambda_j)} - \frac{p_n(\lambda)}{(\lambda - \lambda_1)\dots(\lambda - \lambda_j)} \sum_{i=1}^{j} \frac{1}{\lambda - \lambda_i}, \quad j = 1, \dots, n-1. \tag{9}$$

Das Newton Verfahren für $p_{n,j}(\lambda) = 0$ zur Berechnung des Eigenwertes λ_{j+1} lautet

$$\lambda^{(k+1)} = \lambda^{(k)} - \frac{p_{n,j}(\lambda^{(k)})}{p'_{n,j}(\lambda^{(k)})} \tag{10}$$

$$= \lambda^{(k)} - \frac{p_n(\lambda^{(k)})}{p'_n(\lambda^{(k)}) - p_n(\lambda^{(k)}) \sum_{i=1}^{j} \frac{1}{\lambda - \lambda_i}}, \quad k = 0, 1, \dots \tag{11}$$

Ist also der Eigenwert λ_1 bekannt, können die weiteren berechnet werden. Der erste Eigenwert λ_1 wird durch das Newton-Verfahren als Nullstelle des charakteristischen Polynoms berechnet. Fehlt nur noch ein Startwert $\lambda^{(0)}$, den erhalten wir durch die Abschätzung

$$|\lambda_k| \le \rho(J_n) \le ||J_n||_\infty = \max_{k=1,\dots,n} \{|\gamma_k| + |\delta_k| + |\gamma_{k+1}|\} =: \lambda^{(0)},$$

wobei $\gamma_1 = \gamma_{n+1} = 0$.
Die benutzen Polynome $p_n(\lambda), p'_n(\lambda)$ werden mit den Rekursionsformel (3) und (7) berechnet. Die Eigenvektoren $q(\lambda_k)$ berechnen sich durch Formel (4) bzw. (5).

Anmerkung:
Falls für ein k $\gamma_k = 0$ gilt, zerfällt die Matrix J_n in 2 Blöcke, auf die wiederum der Maehly-Algorithmus angewandt werden kann! Dies soll jedoch im Programm nicht berücksichtigt werden.