

Prolongations- und Iterationsverfahren zur Ermittlung invarianter Unterräume aus Messdaten von Eigenpaaren

**Vom Promotionsausschuss der
Technischen Universität Hamburg-Harburg
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Naturwissenschaften
genehmigte Dissertation**

von

Bastian Ebeling

aus Hamburg

2010

1. Gutachter: Prof. Dr. Wolfgang Mackens
(Technische Universität Hamburg-Harburg)
2. Gutacher: Prof. Dr. Thomas Schuster
(Helmut-Schmidt-Universität)

Tag der mündlichen Prüfung: 31. Mai 2010

Für meine Frau und meinen Sohn.

Ich danke Herrn Prof. Dr. Hans-Jürgen Seifert, der mir seinerzeit die Arbeitsstelle als wissenschaftlicher Assistent an der Universität der Bundeswehr angeboten hat. Weiterhin danke ich Herrn Prof. Dr. Wolfgang Mackens für die Betreuung meiner Arbeit und Herrn Prof. Dr. Thomas Schuster für die Begutachtung. Zusätzlich danke ich allen Kollegen, die mich während der Zeit meiner Promotion unterstützt haben; besonderer Dank gilt hier Herrn Dr. Tim Pfitzenreiter für diverse anregende Diskussionen.

Symbolverzeichnis

Matrizen

- Ξ Diagonalmatrix $\in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$ aller Eigenwertapproximationen μ_i
- B Massenmatrix $\in \mathbb{R}^{n \times n}$ des allgemeinen Eigenwertproblems
- G Messmatrix $\in \mathbb{R}^{n \times k}$ - B^{-1} -orthogonal: $G^T B^{-1} G = I$
- Q Noch zu erfüllende Messbedingungen (spaltenweise): Für Aufdatierungen $Y \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ von Vektoren $U \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ muss $G^T Y = Q \in \mathbb{R}^{k \times \ell}$ gelten
- U Spalten-Matrix $\in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ aller Eigenvektornäherungen
- W Gewichtungsmatrix $\in \mathbb{R}^{(n+k) \times (n+k)}$

Operationen

- \circ^H hermitesch konjugiert bzw. konjugiert komplex transponiert
- \circ^T transponiert
- \circ_0 normierte Richtung von \circ
- $\hat{\circ}$ optimaler Wert für \circ bzw. Parameter, der Extremum liefert
- $\mathcal{O}(\circ)$ O-Notation nach Landau

$$\|\circ\|_{M,m} = \max_{0 \neq v \in \mathbb{R}^n} \frac{\|\circ v\|_M}{\|v\|_m}$$

$$\|\circ\|_M \quad \text{für } \circ \in \mathbb{R}^n : \sqrt{\circ^T M \circ}, \quad \text{für } \circ \in \mathbb{R}^{n \times n} : \max_{0 \neq v \in \mathbb{R}^n} \frac{\|\circ v\|_M}{\|v\|_M}$$

Skalare

- α der Spektralradius von $B^{-1}(A - \lambda B)$
- ϵ Eigenwertfehler in \mathbb{R} : Näherung minus exakt
- η_v Messfehler $\in \mathbb{R}$
- γ der Abstand von λ zum nächsten Eigenwert — der Gap
- $[\circ]_i$ i . Komponente des Vektors \circ
- μ Eigenwertnäherung $\in \mathbb{R}$

\tilde{w}	Gewichtungsgröße mit der approximativ die zweite Ableitung von $\frac{1}{\ u\ _B}$ ermittelt wird
ϑ	Skalierungsfaktor für die Messung $\in \mathbb{R}$
ξ_v	Messbarkeit des Vektors v
ζ_v	Fehlerwinkel: Winkel zwischen exakter und bekannter Messung von v
k	Anzahl der Messwerte pro Messung — in der Regel $\geq \ell$
n	Dimension des Vektorraumes, auf dem das Eigenwertproblem formuliert ist
ℓ	Anzahl der gemessenen (identifizierten) Schwingungen

Vektoren

m	(fehlerbehaftete) Eigenvektormessung $\in \mathbb{R}^k$
q	noch zu erfüllende Messbedingung: für eine Aufdatierung y von u muss $G^T y = q \in \mathbb{R}^k$ gelten
u	Eigenvektornäherung $\in \mathbb{R}^n$
v	Eigenvektor $\in \mathbb{R}^n$

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Prolongation	9
2.1	Einführung	9
2.2	Charakteristische Größen der Messung	12
2.2.1	Messmatrix	12
2.2.2	Messfehler	12
2.2.3	Messbarkeit	14
2.3	Ausgleichsproblem	15
2.3.1	Gewichtung	20
2.3.2	Interpretation und explizite Lösung	23
2.4	Eigenresiduen-Minimierung	25
2.5	Kondensation bzw. Quasi-Rayleigh-Quotienten-Minimierung	28
2.6	Bewertung der Verfahren	31
2.6.1	Fast optimale Prolongation	32
2.7	Numerische Ergebnisse	38
2.7.1	MatrixMarket	39
2.7.2	Schallproblem	39
3	Iteration	47
3.1	Block-Newton-Iteration	49
3.1.1	Die Methode nach Schwetlick	49
3.1.2	Die Methode mit Messinformationen	52
3.2	Die Chord-Methoden	55
3.2.1	Die Chord-Schwetlick-Methode	56
3.2.2	Die Chord-Block-Newton-Methode mit Messungen	56
3.3	Fixpunktiteration	57
3.3.1	Verallgemeinerung der Normierung durch Messung	58
3.3.2	Lösung des überbestimmten Problems	66
3.4	Krylov-Unterraum-Verfahren	67
3.4.1	Das rationale Krylov-Verfahren nach Ruhe	67
3.4.2	Das Block-Rationale-Krylovraum-Verfahren	68
3.4.3	Lock and Purge	70
3.4.4	Effiziente Verbesserung	73
3.4.5	Gesamtalgorithmus	74
3.4.6	Lucky-Breakdown	74
3.4.7	Abstrakte Deutung der Lösungsstruktur	74
3.4.8	Das Block-Rationale-Krylovraum-Gesamtverfahren	75

3.5 Numerische Ergebnisse	76
4 Zusammenfassung und Ausblick	79
Tabellenverzeichnis	A
Abbildungsverzeichnis	C
Index	E
Literaturverzeichnis	G
Lebenslauf	M

Kapitel 1

Einleitung

In der vorliegenden Arbeit befassen wir uns mit der Berechnung von Näherungspaaren $(u \in \mathbb{R}^n, \mu \in \mathbb{R})$ für Eigenpaare $(v \in \mathbb{R}^n, \lambda \in \mathbb{R})$ des allgemeinen symmetrischen Eigenwertproblems

$$Av = Bv\lambda,$$

wobei $A = A^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist und $B = B^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ zusätzlich positiv definit.

Entsprechend der praktischen und theoretischen Bedeutung des Eigenwertproblems in Gleichung 2.1 ist die zugehörige Literatur fast unüberschaubar. Man findet in [DDRvdV00] einen aktuellen Überblick über zur Verfügung stehende Techniken zur numerischen Behandlung.

Wir erörtern in dieser Arbeit spezieller die Frage, wie Vorinformationen über die Lösung $(v \in \mathbb{R}^n, \lambda \in \mathbb{R})$ zur beschleunigten Ermittlung von dem entsprechenden Näherungen $(u \in \mathbb{R}^n, \mu \in \mathbb{R})$ herangezogen werden können.

Tatsächlich sind Vorinformationen über Eigenpaare sehr häufig bekannt: Bei vielen Arbeiten, die sich in jüngerer Zeit mit dem allgemeinen Thema „Eigenreanalysis“¹ befasst haben ([Ina88], [Chu90], [CYL00], [Hof01], [Kir08]), liegen zum Beispiel Eigenpaare einer benachbarten Aufgabe, aus der die aktuelle durch Störung hervorgegangen ist, als Näherungen $(u \in \mathbb{R}^n, \mu \in \mathbb{R})$ vor.

Wir wenden uns in dieser Arbeit derartigen Problemen, bei denen bereits approximative Eigenpaare $(u \in \mathbb{R}^n, \mu \in \mathbb{R})$ vorliegen, in Kapitel 3 zu.

In Kapitel 2 dieser Arbeit gehen wir abweichend von der Reengineering-Vorgabe davon aus, dass neben einer Näherung $\mu \in \mathbb{R}$ des gesuchten Eigenwertes $\lambda \in \mathbb{R}$ nur Messungen des gesuchten Eigenvektors $v \in \mathbb{R}^n$ vorliegen, worunter wir Werte $F_i(v) \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, k$ linearer Funktionale von v verstehen. Im Gegensatz zu dem Fall vorliegender „Vollraum-Approximation“ \hat{u} (wie bei der Eigenreanalysis), in dem mittels Rayleigh-Quotienten

$$\hat{\mu} := \frac{\hat{u}^T A \hat{u}}{\hat{u}^T \hat{u}}$$

(oder Variationen hiervon) bekanntlich sehr gute Approximationen von λ gewonnen werden können, ist dies bei lediglich vorliegenden Messungen nicht möglich.

Zur Verdeutlichung betrachten wir das kontinuierliche Randeigenwertproblem²

$$-y'' = \lambda y, y(0) = y(\pi) = 0,$$

¹Eigenreanalysis ist ein in der Literatur üblicher Begriff für die Kombination von Eigenanalysis und Reengineering.

²Ein diskretes Beispiel wäre ebenso möglich, würde aber bei mehr Schreiarbeit nur die Übersichtlichkeit beeinträchtigen.

das mathematische Modell einer schwingenden Saite.

Als Konkretisierung nehmen wir hier an, dass wir die Werte der Eigenfunktion $y_2 = \sin(2x)$ an den Stellen $\pi/8$ und $5\pi/8$ gemessen hätten.

$$\begin{aligned} m_1 &:= 2y_2(\pi/8) = 1/\sqrt{2} \\ m_2 &:= 2y_2(5\pi/8) = -1/\sqrt{2} \end{aligned} \tag{1.1}$$

Aus diesen beiden Werten lässt sich nicht auf das zugehörige Eigenpaar schließen, da zum Beispiel, wie in Abbildung 1.1 zu erkennen, die Eigenfunktion $y_6 = \sin(6x)$ und unendlich viele weitere Eigenfunktionen an diesen Stellen mit der Messung übereinstimmen.

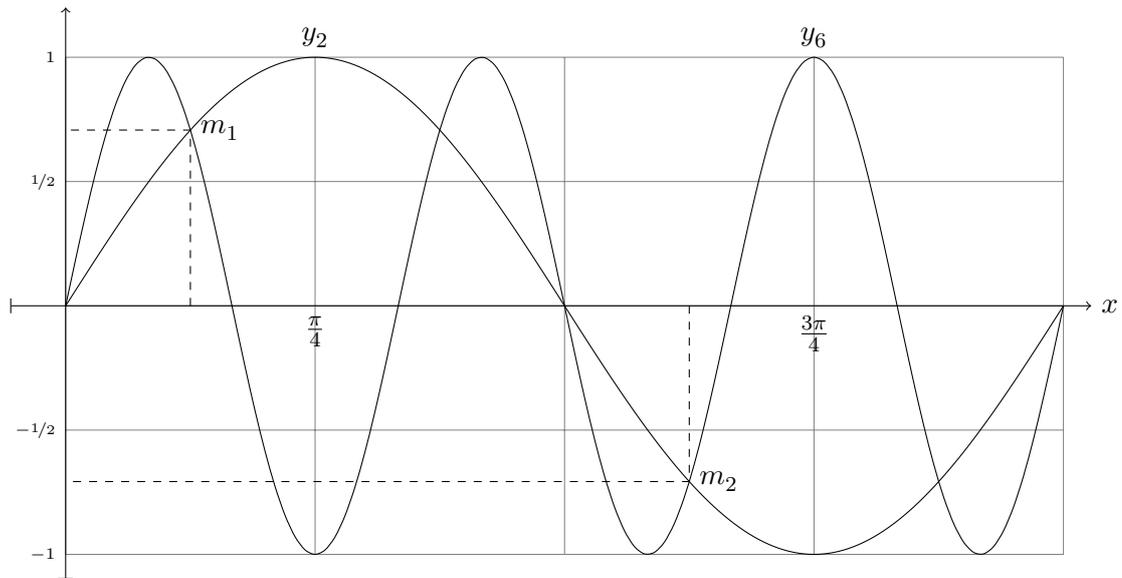


Abbildung 1.1: exemplarische Messung einer Saite

Ohne Informationen über den zugehörigen Spektralbereich sind derartige Messungen daher relativ nichtssagend.

Näherungen μ für Eigenwerte sind hingegen Information genug, um zugehörige Eigenfunktionsapproximationen zu konstruieren. Dies kann zum Beispiel durch geschiftete inverse Iteration gemäß

$$u_{n+1} = (A - \mu B)^{-1} B u_n, \quad u_0 \in \mathbb{R}^n, n \in \mathbb{N}_0$$

mit einem zufällig initialisierten Startvektor u_0 geschehen. Eine weitere Methode wäre das Lösen eines Ausgleichsproblems

$$\min_{u \in \mathbb{R}^n: l^T u = 1} \|Au - \mu B u\|_{B^{-1}}, \quad l \in \mathbb{R}^n$$

mit zufälligem Abtastvektor l , wie dies für das spezielle Eigenwertproblem (also mit $B = I$) bei Hecker und Lurie [HL07] erfolgt.

Im kontinuierlichen Fall liefert dieser Zugang durch das Ausgleichsproblem

$$\min_y \int_0^\pi (y''(x) + \mu y(x))^2 dx, y(0) = y(\pi) = 0$$

mit der Bedingung $y'(0) = 1$, um eine eindeutige Lösung zu fixieren, über die Euler-Lagrange-Gleichung zum Beispiel nach [Bär06] (mit der natürlicher Randbedingung $y''(\pi) = 0$)

$$y^{(iv)}(x) + 2\mu y''(x) + \mu^2 y(x) = 0, y(0) = y(\pi) = 0, y'(0) = 1, y''(\pi) = 0$$

die Näherungseigenfunktion

$$y(x, \mu) = \frac{\pi \sin(\omega x) - x \sin(\omega \pi) \cos(\omega(x - \pi))}{\omega \pi - \sin(\omega \pi) \cos(\omega \pi)}$$

mit $\omega := \sqrt{\mu}$. Mit einer asymptotischen Entwicklung über μ an der Stelle λ erhalten wir

$$y(x, \mu) - \frac{\sin(\sqrt{\lambda}x)}{\sqrt{\lambda}} \left(1 + \frac{x(x - 2\pi)}{2} (\sqrt{\mu} - \sqrt{\lambda})^2\right) \in \mathcal{O}\left((\sqrt{\mu} - \sqrt{\lambda})^3\right).$$

Für μ dicht bei einem Eigenwert λ ist somit $y(x, \mu)$ eine (in Abbildung 1.2 erkennbar) gute Näherung für die Eigenfunktion $y(x, \lambda) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \sin(\sqrt{\lambda}x)$.

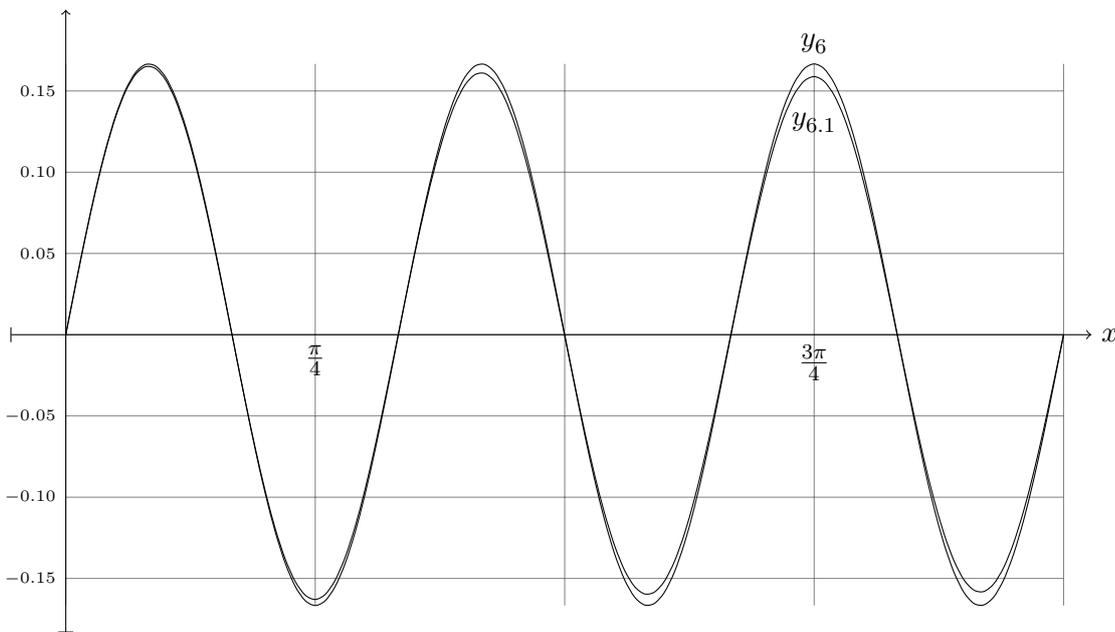


Abbildung 1.2: kontinuierliches Fortsetzungsbeispiel

Tatsächlich liegt bei der technischen Messung von Eigenschwingungen (zum Beispiel [OW09] oder [Irm09]) neben den Messungen von Auslenkungen an gewissen Messpunkten stets auch eine Schätzung der zugehörigen Eigenfrequenz vor, da die nötige Erregungsfrequenz so eingerichtet wird, dass auf näherungsweise Resonanz geschlossen werden kann.

Die Fixierung auf einen Teil des Spektrums durch Spezifikation der Näherung μ kann daher bei der Verwertung von Messungen der Form nach Gleichung 1.1 sicher hilfreich verwendet werden:

Wir können mit der Information, dass bei $\sqrt{\lambda_1} \approx \sqrt{\mu_1} = 2.1$ und $\sqrt{\lambda_2} \approx \sqrt{\mu_2} = 6.1$ Eigenwerte liegen, durch stückweise (an die Frequenz angepasste) Interpolation der vorliegenden Abtastungen (markiert durch \diamond) an den Stellen $x = 0, \pi/8, 5\pi/8, \pi$ Fortsetzungen bzw. Prolongationen der Daten zu Funktionen des betrachteten Funktionenraumes liefern, die wenigstens grob (siehe Abbildung 1.3) das richtige Verhalten der Eigenfunktion aufweisen und somit als Initialdaten für eine Iteration dienen können.

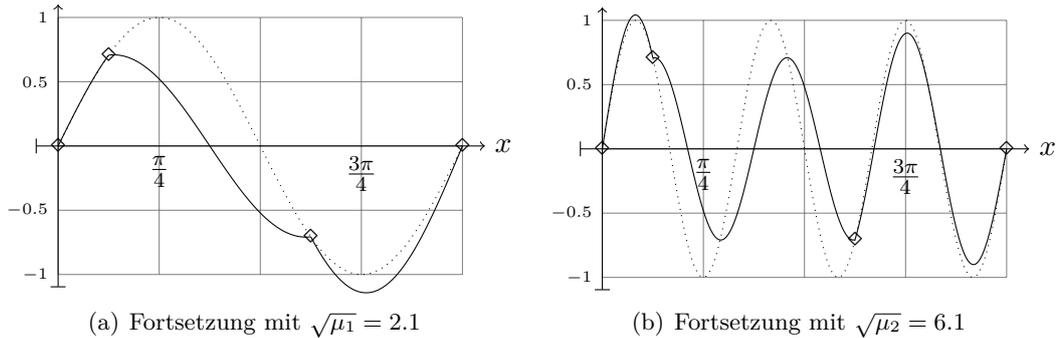


Abbildung 1.3: angepasste stückweise Interpolation

Eben diese Beobachtung hat bereits Kai Rothe in seiner Dissertation [Rot89] verwendet, in der er für einen Projektionsansatz zur Lösung elliptischer Eigenwertprobleme in finite Elemente einen approximativen Eigenwert analog der eben demonstrierten Weise einbrachte. Ähnliche — von einer Eigenwertschätzung abhängige — Prolongationen sind bei Multigrid-Lösungen von Eigenwertaufgaben (zum Beispiel [Hac03]) oder bei sogenannten dynamischen Kondensationsmethoden (siehe [MV99] — hier genauer „dynamischen Master-Slave-Fortsetzungen“) zu finden.

Die vorliegende Arbeit behandelt in Kapitel 2 einen Zugang zur Fortsetzung von Messungen der Eigenvektoren des diskreten Problems in Gleichung 2.1. Hierbei nehmen wir an, dass für die Vektoren $v \in \mathbb{R}^n$ aus Gleichung 2.1 Messungen $[m]_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, k$ als Werte linearer Funktionale von v gemäß

$$[m]_i := g_i^T v$$

vorliegen. Hiermit können wir Abtastungen einzelner Einträge und Linearkombinationen (also auch „energieartige“ Messungen) modellieren.

Da bei Eigenvektoren prinzipiell nur die Richtung und nicht die Länge entscheidend ist, stellen wir keine Forderung an die Norm von v , müssen jedoch verlangen, dass die Messungen $[m]_i$ alle von der gleich skalierten Eigenrichtung v entstanden sind³. Für bequemere Notation fassen wir die k Funktionalvektoren $g_i \in \mathbb{R}^n$ spaltenweise zu einer Matrix $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ zusammen und definieren damit den Vektor $m \in \mathbb{R}^k$ der alle Messungen von v gemäß

$$m := G^T v$$

³Dies wird in der Praxis bedeuten, dass am besten alle Abtastungen zeitgleich gemessen werden.

zusammenfasst.

Die Wahl der g_i beeinflusst die Resultate erheblich. Würden etwa beim kontinuierlichen Beispiel die Messpunkte jeweils in den Knoten (den Nulldurchgängen) liegen, brächte dies für die stückweise Interpolation keine zu verwertenden Informationen.

Bei tatsächlichen Messungen in der Mechanik (etwa bei Schwingungen von Tragflächen wie in [OW09]) wird versucht, die Messungen in den Antiknoten (den „Bäuchen“) der Schwingung vorzunehmen. Diese Schwingung wird in der Regel über sogenannte Shaker mit einer Frequenz angeregt, die beim Messobjekt zur Resonanz führt. Diese Anregungsfrequenz kann demnach also als Näherung für die gesuchte Resonanzfrequenz genutzt werden.

Die Abweichung zwischen Anregungsfrequenz und gesuchter Resonanzfrequenz wird sicherlich zusammen mit der Art der Messung das Ergebnis beeinflussen. Wir führen darum in Abschnitt 2.2 die Begriffe Messbarkeit, Messfehler und Messfehlerwinkel ein. In unseren Abschätzungen zeigen wir den Einfluss dieser Größen auf die „Qualität“ der fortgesetzten Vektoren.

Die derart definierten Messungen bringen wir wie Hecker und Lurie in ihrer Arbeit [HL07] anstelle der dortigen Normierung in ein Ausgleichsproblem ein. Wir erörtern weiterhin eine mögliche Gewichtung dieser Messinformationen relativ zu den anderen Gleichungen.

Wir zeigen weiter, dass unsere Ergebnisse das Resultat von Hecker und Lurie verallgemeinern. Durch die hier eingeführten Begriffe können die in den Abschätzungen auftretenden Größen anschaulich gedeutet werden. Wir zeigen durch die Abschätzung, dass die von unserer Methode erzeugten Resultate approximative Eigenvektoren darstellen, die weiterhin der wohl natürlichen Annahme genügen, umso dichter an den gesuchten zu sein, je besser die Messinformationen sind. Im Gegensatz zu der zitierten Methode, können mit der hier eingeführten auch approximative Eigenvektoren gefunden werden, die nicht zu dem Eigenwert gehören, der am dichtesten bei dem verwendeten Shift liegt.

Wir widmen uns in Abschnitt 2.4 der Idee, die Fortsetzung der Messdaten mittels bedingter Minimierung des Eigenresiduums

$$\left\| \frac{1}{2} B^{-1} (A - \mu B) u \right\|_B$$

zu erreichen. Wir formulieren eine Methode und geben für diese eine Abschätzung der Qualität der fortgesetzten Vektoren an. Wir stellen fest, dass diese Art der Fortsetzung ein Sonderfall der gewichteten vorigen Variante ist. Damit gelingt es uns in Unterabschnitt 2.6.1, eine quasi iterative Fortsetzung zu definieren, bei der die optimale Gewichtung approximativ bestimmt wird.

In Abschnitt 2.7 wenden wir die entwickelten Algorithmen an: Wir beginnen mit rein synthetisch erzeugten Messinformationen zu einem Problem aus der Internet-Datenbank Matrix-Market; konkret einem Problem der dynamischen Strukturanalyse einer eingespannten Platte. Weiterhin nutzen wir unsere Fortsetzungsalgorithmen für ein Schallproblem aus [Irm09]. Dort wurden Messungen angefertigt, wie wir sie für die Fragestellung unserer Arbeit angenommen haben.

In Kapitel 3 untersuchen wir die Frage, wie Vorinformationen über die Lösung von Gleichung 2.1 genutzt werden können, um bekannte Iterationen für Eigenpaarnäherungen zu verbessern.

Wir betrachten in Abschnitt 3.1 die auf Hubert Schwetlick ([LST98] und [SS01]) zurückgehende Block-Newton-Iteration. Deren Idee ist es, mit einem Newton-Verfahren für den

gesamten Block $U \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ von Näherungseigenvektoren des Problems in Gleichung 2.1 ein Aufdatierung $Y \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ zu finden, so dass $U + Y$ invariant unter $B^{-1}A$ ist. Zusätzlich zu den Näherungseigenwerten in der Diagonalmatrix $\Xi \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$ fließt die Normierungsbedingung

$$\langle U, U + Y \rangle_B = I \quad (1.2)$$

in den Algorithmus ein.

Wir haben in Unterabschnitt 3.1.2 den Algorithmus insofern angepasst, dass anstelle der Normierungsbedingung Gleichung 1.2 für alle Spalten $i = 1, \dots, \ell$ die Messbedingung

$$\langle G, u_i + y_i \rangle = m_i \frac{m_i^T G^T u_i}{m_i^T m_i} \quad (1.3)$$

verwendet wird. Durch die Gleichung 1.3 wird sichergestellt, dass für alle aufdatierten Spalten der Wert von $G^T(u_i + y_i)$ ein Vielfaches der Messung m_i ist. Die anschauliche Bedeutung dieser Forderung ist Abbildung 1.4 zu entnehmen.

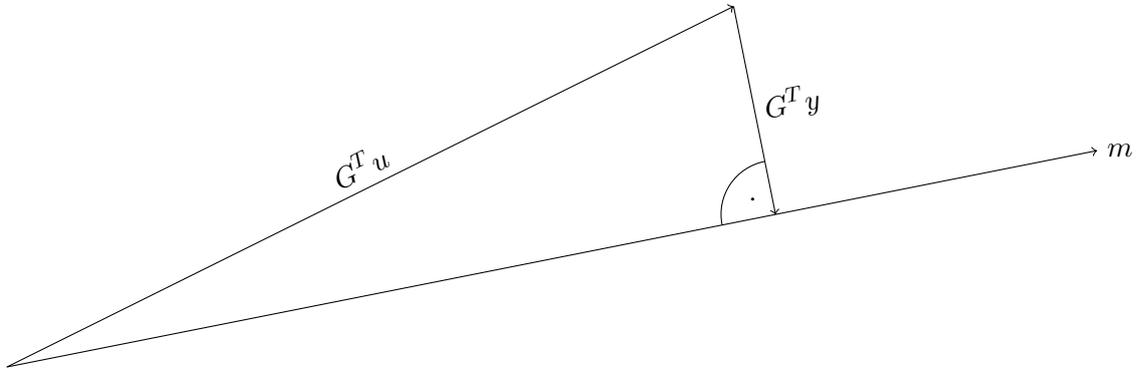


Abbildung 1.4: Bedingung für Verbesserung y von u

Wir nehmen an, dass für $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ (höchstens) $\ell \leq k$ Eigenpaare gesucht werden. Bei $\ell = k$ können die Gleichungen analog zu [LST98] aufgestellt und bearbeitet werden; ansonsten berücksichtigen wir Gleichung 1.3 mit Hilfe von Lagrange-Parametern.

Der numerische Aufwand dieser Block-Newton-Methoden ist dadurch, dass in jedem Iterationsschritt für jede Spalte ein neues Gleichungssystem in n Dimensionen zu lösen ist, sehr groß. Wir nutzen in Abschnitt 3.2 sogenannte Chord-Methoden⁴ zur Lösung der auftretenden Gleichungen, um den Aufwand zu reduzieren. Die hierdurch entstehenden Algorithmen sind prinzipiell inverse Iterationen und haben daher eine geringere Konvergenzordnung. Bei hinreichend guten Startapproximationen der Eigenpaare überwiegt jedoch der Vorteil des verminderten rechentechnischen Aufwands.

Die vorigen Methoden basieren auf der Idee, für gegebene Näherungen X und Ξ die Block-Gleichung

$$A(X + Y) = B(X + Y)(\Xi + \Gamma)$$

mit den Startwerten $Y = 0$ und $\Gamma = 0$ durch eine Newton-Iteration zu lösen. Hierbei wird der in den Unbekannten nichtlineare Ausdruck BYT vernachlässigt.

⁴Chord-Methoden sind eine mehrdimensionale Verallgemeinerung der Sehnenmethode.

Wir nutzen stattdessen in Abschnitt 3.3, analog zu der Idee von Symm und Wilkinson aus [SW80], eine Fixpunktiteration für dieses allgemeine Eigenwertproblem. Die Normierungsbedingung aus der Referenzarbeit haben wir, wie bei den vorherigen Methoden, durch die Messbedingung aus Gleichung 1.3 ersetzt. Wir formulieren eine Block-Iteration und zeigen für den Fall $k = \ell$ geometrische Konvergenz.

Sowohl die betrachteten Chord-Methoden aus Abschnitt 3.2 als auch die Fixpunktiteration aus Abschnitt 3.3 haben die Eigenschaft, dass die ermittelten Lösungen Elemente eines rationalen Krylov-Raumes, wie von Axel Ruhe in den Veröffentlichungen [Ruh84, Ruh94d, Ruh94e, Ruh94c, Ruh94a, Ruh94b, Ruh98] definiert, sind. Da keine der vorhergehenden Methoden die spezielle Struktur ausnutzt, widmen wir uns in Abschnitt 3.4 den rationalen Krylov-Raum-Methoden zur Bestimmung der gesuchten Eigenrichtungen.

In der Literatur (zum Beispiel [Jar03]) wird mehrfach darauf hingewiesen, dass Lock-and-Purge-Schritte⁵ dringend notwendig sind, da die Iterationsbasis sonst zu sehr wächst. Wir nutzen die vorliegenden Abtastungen zur Qualifikation der gesuchten Richtungen.

Die zuletzt genannten Methode hat weiterhin den Vorteil, dass keine Fortsetzung der Messdaten nötig ist, da diese implizit passieren kann.

In Abschnitt 3.5 wenden wir die hier erwähnten Iterationen auf die fortgesetzten Daten aus Kapitel 2 an. Wir führen die Algorithmen jeweils solange aus, bis in der Rechnerarithmetik keine Verbesserung mehr festgestellt werden kann, und vergleichen daraufhin die Resultate: Wir zeigen Vor- und Nachteile der unterschiedlichen Iterationen auf und gehen auf die Laufzeit der Methoden ein.

⁵Lock-and-Purge bezeichnet das Festhalten konvergierender und Verwerfen unnötiger Suchrichtungen.

Kapitel 2

Prolongation

In diesem Kapitel führen wir Methoden ein, um aus Paaren (μ, m) von Eigenwertnäherungen $\mu \in \mathbb{R}$ und zugehörigen Messungen $m \in \mathbb{R}^k$, $k \ll n$ der entsprechenden Eigenvektoren $v \in \mathbb{R}^n$ Näherungen $u \in \mathbb{R}^n$ für diese zu ermitteln. Wir nehmen an, dass die Einträge $m_i, i = 1, \dots, k$ des Vektors $m \in \mathbb{R}^k$ Approximationen an Werte linearer Funktionale $\langle g_i, v \rangle$, die wir als exakte Messungen verstehen, des gesuchten Vektor v sind. Der Approximationsfehler beinhaltet in unserem Sinne sowohl den Modellierungsfehler als auch die Messungenauigkeit.

Anschaulich werden die Messinformationen durch die folgenden Methoden zu einer vollständigen Approximation $u \in \mathbb{R}^n$ ergänzt.

Eine derartige Fortsetzung passiert auch bei den sogenannten Multi-Grid-Methoden (siehe [Hac03]): Der Transfer der Grob-Gitter-Informationen (vgl. \mathbb{R}^k) mittels einer linearen injektiven Abbildung auf ein feineres Gitter (vgl. \mathbb{R}^n) wird dort Prolongation genannt. Weiterhin gibt es in diesem Kontext die sogenannte Restriktion — eine lineare surjektive Abbildung von einem feinen (vgl. \mathbb{R}^n) auf ein grobes Gitter (vgl. \mathbb{R}^k). Die hier auftretende Messung kann als solche Restriktion verstanden werden.

2.1 Einführung

Bis auf gekennzeichnete Ausnahmen werden in dieser Arbeit die folgenden grundlegenden Annahmen an die Steifigkeitsmatrix A und die Massenmatrix B des zu untersuchenden allgemeinen Eigenproblems

$$Av = Bv\lambda \tag{2.1}$$

sowie die von uns Messmatrix genannte Matrix $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ getroffen:

$$\begin{array}{lll} A \in \mathbb{R}^{n \times n} & A^T = A & \text{symmetrisch} \\ B \in \mathbb{R}^{n \times n} & B^T = B \wedge \forall x \neq 0 : x^T Bx > 0 & \text{symmetrisch positiv definit} \\ G \in \mathbb{R}^{n \times k} & G^T B^{-1} G = I & B^{-1}\text{-orthogonal} \\ & \mathbb{N} \ni k \ll n \in \mathbb{N} & \end{array}$$

Zudem setzen wir für alle gegebenen Näherungseigenwerte $\mu \in \mathbb{R}$ voraus, dass $A - \mu B$ regulär ist. Diese Forderung ist sicherlich nicht zu restriktiv, da ansonsten μ bereits ein gesuchter Eigenwert wäre.

Um die auftretenden Normierungen und inneren Produkte besser verdeutlichen zu können, führen wir hier einen etwas allgemeineren Formalismus an:

Die gesuchten Eigenvektoren stammen aus dem Vektorraum $\mathfrak{V} = \mathbb{R}^n$. Da die gesuchten Eigenvektoren bekanntlich bezüglich der B -Matrix orthogonal sind, ist die Wahl der Norm

für Elemente $x \in \mathfrak{V} = \mathbb{R}^n$ des Raumes der Zustände mittels der Matrix B gemäß

$$\|x\|_{\mathfrak{V}} := \|x\|_B = \sqrt{x^T B x}$$

naheliegender. Die Spalten $g \in \mathbb{R}^n$ der Matrix $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ wirken gemäß des kanonischen inneren Produkts

$$\langle g, x \rangle := g^T x$$

als lineare Funktionale auf Vektoren $x \in \mathfrak{V} = \mathbb{R}^n$ und stammen demnach aus dem Dualraum $\mathfrak{V}^* = \mathbb{R}^n$.

Wir versehen daher den Raum $\mathfrak{V}^* = \mathbb{R}^n$ der Messvektoren g mit der Dualnorm

$$\|g\|_{\mathfrak{V}^*} := \sup_{\|x\|_{\mathfrak{V}}=1} |\langle g, x \rangle|.$$

Aus der äquivalenten Darstellung

$$\|g\|_{\mathfrak{V}^*}^2 := \sup_{x \neq 0} \frac{x^T g g^T x}{x^T B x} \quad (2.2)$$

erhalten wir mittels Differentiation nach x die Gleichung

$$g \underbrace{g^T \hat{x} \hat{x}^T B \hat{x}}_{\in \mathbb{R}} = \underbrace{\hat{x}^T g g^T \hat{x}}_{\in \mathbb{R}} B \hat{x}$$

als notwendige Bedingung für den zum Supremum gehörigen Vektor \hat{x} . Die Richtung von g muss demnach der von $B \hat{x}$ entsprechen; es muss die Proportionalität

$$g \propto B \hat{x}$$

gelten. Da die Länge von x die Definition in Gleichung 2.2 nicht beeinflusst, wählen wir

$$\hat{x} = B^{-1} g$$

und diese Wahl liefert eingesetzt

$$\|g\|_{\mathfrak{V}^*} = \frac{g^T B^{-1} g}{\sqrt{g^T B^{-1} g}} = \sqrt{g^T B^{-1} g} = \|g\|_{B^{-1}}.$$

Es wird für die späteren Rechnungen vereinfachend sein, wenn wir voraussetzen, dass alle Spalten g im zugehörigen inneren Produkt

$$\langle g_i, g_j \rangle := g_i^T B^{-1} g_j$$

orthonormiert sind.

Lemma 1:

Es sei $\tilde{G} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ spaltenregulär¹. Zu jeder symmetrisch positiv-definiten Matrix $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ existiert eine reguläre Matrix $R \in \mathbb{R}^{k \times k}$ mit der

$$G := \tilde{G} R^{-1} : G^T B^{-1} G = I$$

gilt.

¹Wir nennen eine Matrix spaltenregulär, wenn die Menge aller Spaltenvektoren linear unabhängig ist. Dies entspricht der Forderung, dass der Spaltenrang (nach [Fis05, Abschnitt 1.5, Seite 96]) gleich der Anzahl der Spalten ist.

Anmerkung: Eine derartige Matrix R läßt sich zum Beispiel durch eine kleine Anpassung des Gram-Schmidt-Verfahrens (siehe Algorithmus 1.2 aus [Saa03, Kapitel 1.7]) ermitteln: Es ist lediglich nötig, alle im Algorithmus auftretenden inneren Produkte und Normierungen durch die mit B^{-1} gewichteten zu ersetzen.

Beweis von Lemma 1:

Mit den Annahmen existiert $B^{-\frac{1}{2}}$ und $\check{G} := B^{-\frac{1}{2}}\tilde{G}$ ist ebenfalls spaltenregulär. Wir definieren nun die Spaltenvektoren von $Q \in \mathbb{R}^{n \times k}$ als die orthogonale Basis des Spaltenraumes von \check{G} . Damit gilt $Q^T Q = I \in \mathbb{R}^{k \times k}$ und die Matrix

$$R := Q^T \check{G} \in \mathbb{R}^{k \times k}$$

ist regulär. Die Matrix

$$G := B^{\frac{1}{2}}Q$$

ist dann B^{-1} -orthogonal und erfüllt die Aussage. ■

Anmerkung: Durch die Freiheit in der Wahl der orthogonalen Basis der Spalten von \check{G} ist diese Zerlegung nicht eindeutig.

Wir können mit Hilfe der Matrix R aus Lemma 1 einen Vektor $\tilde{m} \in \mathbb{R}^k$ mit Messungen eines Zustands $x \in \mathbb{R}^n$, der mit einer spaltenregulären Messmatrix $\tilde{G} \in \mathbb{R}^{n \times k}$ gemäß

$$\tilde{m} = \tilde{G}^T x$$

erzeugt wurde, zu einem Vektor $m := R^{-T}\tilde{m}$ umrechnen, der der Messung des Zustands x mit einer B^{-1} -orthogonalen Matrix $G := \tilde{G}R^{-1}$ entspricht.

Anmerkung: Somit ist die Voraussetzung, die Messmatrix G als B^{-1} -orthogonal anzunehmen, keine Einschränkung der Allgemeinheit.

Lemma 2:

Durch die Forderung $G^T B^{-1}G = I$ gilt für alle $v \in \mathbb{R}^n$

$$\|G^T v\|_2 \leq \|v\|_B.$$

Beweis von Lemma 2:

Da B symmetrisch und positiv-definit ist, existiert $B^{\frac{1}{2}}$ ebenfalls symmetrisch und positiv-definit und damit gilt

$$\|G^T v\|_2 = \|G^T B^{-\frac{1}{2}} B^{\frac{1}{2}} v\|_2 \leq \|G^T B^{-\frac{1}{2}}\|_2 \|B^{\frac{1}{2}} v\|_2.$$

Der größte Singulärwert von $G^T B^{-\frac{1}{2}}$ ist gleich der Wurzel aus dem größten Eigenwert von $C := B^{-\frac{1}{2}} G G^T B^{-\frac{1}{2}} \neq 0$. Diese symmetrische Matrix ist wegen

$$C^2 = \left(B^{-\frac{1}{2}} G G^T B^{-\frac{1}{2}} \right)^2 = B^{-\frac{1}{2}} G \underbrace{G^T B^{-1} G}_{=I} G^T B^{-\frac{1}{2}} = C$$

idempotent, und somit gilt

$$\|G^T B^{-\frac{1}{2}}\|_2 = 1. \quad \blacksquare$$

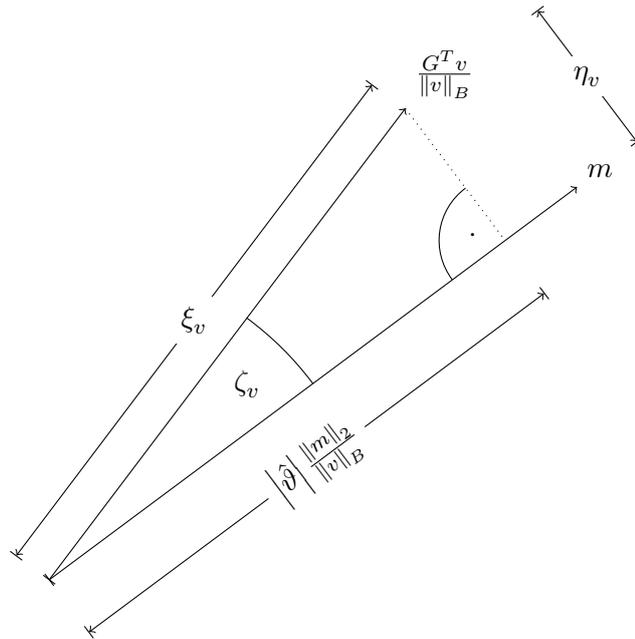


Abbildung 2.1: Messfehler η_v , Messfehlerwinkel ζ_v , Messbarkeit ξ_v und Skalierung \hat{v}

2.2 Charakteristische Größen der Messung

2.2.1 Messmatrix

Wie in der Einleitung bemerkt, modellieren wir eine Messung als lineares Funktional. Für einen diskretisierten Systemzustand $v \in \mathbb{R}^n$ ist dies ein inneres Produkt mit einem Vektor aus dem \mathbb{R}^n . Wir nennen diese Vektoren $g_i \in \mathbb{R}^n : i = 1, \dots, k$ Meßfunktionalvektoren und schreiben damit jede einzelne Messung als $m_i = g_i^T v$.

Wir fassen alle Meßfunktionalvektoren in den Spalten der Matrix $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ zusammen und nennen diese die Messmatrix. Um die Analyse einfacher zu gestalten, werden ihre Spalten mit der Massenmatrix B des allgemeinen Eigenwertproblems B^{-1} -orthogonal gewählt (wie in Abschnitt 2.1 begründet); also gilt $G^T B^{-1} G = I$.

Ebenso fassen wir alle einzelnen Messungen m_i in einem Vektor $m \in \mathbb{R}^k$ zusammen. Für diesen gilt demnach $m = G^T v$.

Anmerkung: Das Zusammenfassen der einzelnen Messvektoren g_i für alle $i = 1, \dots, k$ zu der Matrix G und Nutzen dieser als Modell für die Messung entspricht der Annahme, dass alle Messungen an genau dem selben Zustand (vgl. $v \in \mathbb{R}^n$) passieren — also idealerweise zeitgleich.

2.2.2 Messfehler

Definition 1 (Messfehler):

Zu einer (ggf. fehlerbehafteten) Messung $0 \neq m \in \mathbb{R}^k$ eines Vektors $0 \neq v \in \mathbb{R}^n$ unter einer

B^{-1} -orthogonalen Messmatrix $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ definieren wir den Messfehler

$$\eta_v := \frac{1}{\|v\|_B} \min_{\vartheta} \|G^T v - \vartheta m\|_2.$$

Weiterhin nennen wir

$$\hat{\vartheta}(m, v) := \frac{m^T G^T v}{m^T m}$$

die zu diesem Minimum gehörende optimale Skalierung.

Anmerkung: Um die Messung lediglich abhängig von der Richtung des v zu bewerten, wurde der Fehler mit obiger Definition invariant unter Skalierung von v und m gewählt.

Für die zugehörige optimale Skalierung gilt

$$\hat{\vartheta} \propto \frac{\|v\|_B}{\|m\|_2}.$$

Beobachtung 1:

Sei $v_0 := \frac{v}{\|v\|_B}$ und $m_0 := \frac{m}{\|m\|_2}$ so gilt für den Messfehler die Aussage

$$\eta_v = \left\| \left(I - m_0 m_0^T \right) G^T v_0 \right\|_2.$$

Anmerkung: Der Messfehler ist gleich der Länge des zur fehlerbehafteten Messung orthogonalen Anteils der exakten Messung des normierten Vektors v_0 . In Abbildung 2.1 ist dies die Länge der Gegenkathete.

Beweis von Beobachtung 1:

Die optimale Skalierung $\hat{\vartheta}$ aus Definition 1 erhalten wir zum Beispiel durch Lösen des Minimierungsproblems mittels der Normalengleichungen. Das gesuchte Minimum ist — wie in Abbildung 2.1 ersichtlich — die Länge der Abweichung bei einer orthogonalen Projektion. Setzen wir nun $\hat{\vartheta}(m_0, v_0) = m_0^T G^T v_0$ ein, erhalten wir die Behauptung. ■

Beobachtung 2:

Für jedes $0 \neq v \in \mathbb{R}^n$ mit zu einer B^{-1} -orthogonalen Messmatrix $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ zugehörigen Messungen $0 \neq m \in \mathbb{R}^k$ können wir mit dem optimalen $\hat{\vartheta}(m, v)$ nach Definition 1 ein

$$w := B^{-1} G \left(\hat{\vartheta} m - G^T v \right)$$

definieren. Mit diesem w können wir v so ergänzen, dass die Messbedingung

$$G^T (v + w) = \hat{\vartheta} m$$

erfüllt ist. Weiterhin gilt

$$\|w\|_B = \eta_v \|v\|_B.$$

Anmerkung: Die B -Norm des zum Erfüllen der Messbedingung nötigen Korrekturvektors w ist proportional zum Messfehler η_v .

Beweis von Beobachtung 2:

Das Erfüllen der Messbedingung ist durch die B^{-1} -Orthogonalität von G offensichtlich. Wir betrachten nun

$$\|w\|_B^2 = (\hat{v}m - G^T v)^T G^T B^{-T} B B^{-1} G (\hat{v}m - G^T v).$$

Da B symmetrisch ist, gilt weiter

$$\|w\|_B^2 = (\hat{v}m - G^T v)^T G^T B^{-1} G (\hat{v}m - G^T v)$$

und wegen der schon erwähnten B^{-1} -Orthogonalität von G erhalten wir

$$\|w\|_B = \|\hat{v}m - G^T v\|_2 = \frac{\|\hat{v}m - G^T v\|_2}{\|v\|_B} \|v\|_B.$$

■

2.2.3 Messbarkeit

Definition 2 (Messbarkeit):

Wir nennen den Quotienten

$$\xi_v := \frac{\|G^T v\|_2}{\|v\|_B}$$

die Messbarkeit von $0 \neq v \in \mathbb{R}^n$ unter der B^{-1} -normierten Messmatrix $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$.

Anmerkung: Anschaulich gesprochen bewertet die Messbarkeit $0 \leq \xi_v \leq 1$ relativ, wie viel Information der Ausgangsrichtung v durch die Messung mit G detektiert wird.

Beobachtung 3:

In Abbildung 2.1 erkennen wir $\xi_v \geq \eta_v$ und somit gilt für die euklidische Norm der mit $\hat{v}(m, v_0)$ aus Definition 1 skalierten fehlerbehafteten Messung $0 \neq m \in \mathbb{R}^k$ eines normierten Vektors $v_0 \in \mathbb{R}^n$

$$\|\hat{v}m\|_2 = \sqrt{\xi_v^2 - \eta_v^2} \geq \xi_v - \eta_v.$$

Beweis von Beobachtung 3:

Da $\hat{v}(m, v_0)$ in Definition 1 das Minimum liefert, gilt

$$G^T v_0 - \hat{v}m \perp m$$

und somit (vgl. Satz des Pythagoras) für die euklidische Norm

$$\|G^T v_0 - \hat{v}m\|_2^2 + \|\hat{v}m\|_2^2 = \|G^T v_0\|_2^2$$

beziehungsweise

$$\|\hat{v}m\|_2^2 = \|G^T v_0\|_2^2 - \|G^T v_0 - \hat{v}m\|_2^2.$$

Da $\|v_0\|_B = 1$ gilt, können wir auch

$$\|\hat{\vartheta}m\|_2^2 = \|G^T v_0\|_2^2 - \frac{1}{\|v_0\|_B^2} \|G^T v_0 - \hat{\vartheta}m\|_2^2.$$

schreiben und erhalten durch Nutzen der Definitionen 1 und 2

$$\|\hat{\vartheta}m\|_2^2 = \xi_v^2 - \eta_v^2.$$

■

Definition 3 (Messfehlerwinkel):

Wir nennen den Winkel $\zeta_v \in \mathbb{R}$ zwischen den fehlerbehafteten Messdaten $m \in \mathbb{R}^k$ einer Richtung $v \in \mathbb{R}^n$ unter der B^{-1} -orthogonalen Messmatrix $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ und der exakten Messung $G^T v \in \mathbb{R}^k$ *Messfehlerwinkel*.

Mit Definition 3 können wir nun die Größen Messfehler η_v und Messbarkeit ξ_v anschaulich deuten. Wir erkennen in Abbildung 2.1 aus der Definition des Sinus

$$\sin(\zeta_v) = \frac{\eta_v}{\xi_v}. \quad (2.3)$$

Aus der Definition des Kosinus erhalten wir

$$\frac{\|\hat{\vartheta}m\|_2}{\|v\|_B} = \cos(\zeta_v) \xi_v$$

und weiterhin

$$|\hat{\vartheta}| = \frac{\cos(\zeta_v) \xi_v}{\|m\|_2} \|v\|_B. \quad (2.4)$$

2.3 Ausgleichsproblem

Wie in der Einleitung bereits angesprochen, berechnen D. Hecker und D. Lurie in der Arbeit [HL07] zu einem Näherungseigenwert $\mu \in \mathbb{C}$ eines speziellen Eigenwertproblems einer Matrix $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ einen Näherungseigenvektor $y \in \mathbb{C}^n$. Ihr Vorgehen kann mit einer zufälligen Richtung $v \in \mathbb{C}^n$ als das bedingte Minimierungsproblem

$$y := \arg \min_{y \in \mathbb{C}^n} \left\| \begin{pmatrix} (A - \mu I) y \\ v^T y - 1 \end{pmatrix} \right\|_2$$

geschrieben werden. Die Autoren geben eine im Wesentlichen von der Güte der Eigenwertnäherung μ abhängige Fehlerabschätzung an.

Wir lösen hier das Ausgleichsproblem für das allgemeine symmetrische Eigenwertproblem. Als weitere Verallgemeinerung ihrer Herangehensweise erweitern wir die Methode durch Verwendung mehrerer Nebenbedingungen so, dass sie auch zur Prolongation genutzt werden kann. Weiterhin formulieren wir vergleichbare aber schärfere Schranken.

Das folgende Lemma 3 ist eine Grundlage für die genauere Analyse der Ergebnisse. Die Grundidee kommt aus [HL07, Abschnitt 4]; wir haben eine Anpassung an das allgemeine symmetrische Eigenwertproblem vorgenommen.

Lemma 3:

Sei $\lambda \in \mathbb{R}$ ein Eigenwert der Gleichung 2.1. Sei dazu das Residuum

$$\rho := \|(A - \lambda B) u_0\|_{B^{-1}} = \left\| B^{-1} (A - \lambda B) u_0 \right\|_B$$

zu einem B -normierten Vektor $u_0 \in \mathbb{R}^n$ bekannt. Sofern der Abstand $\gamma \in \mathbb{R}$ von λ zum nächsten Eigenwert

$$\gamma > \rho$$

erfüllt, gibt es einen B -normierten Vektor $v' \in \mathbb{R}^n$ im Eigenraum zu λ , für den

$$\|v' - u_0\|_B \leq \frac{\sqrt{2}}{\gamma} \rho$$

gilt. Weiterhin erfüllt der Winkel zwischen v' und u_0 die Ungleichung

$$\tan \sphericalangle (v', u_0) \leq \frac{\rho}{\sqrt{\gamma^2 - \rho^2}} \leq \frac{\rho}{\gamma - \rho}. \quad (2.5)$$

Beweis von Lemma 3:

Sei der Vektor $u_0 =: v + w$ in seinen Anteil v in Richtung des Eigenraumes zu λ und seinen dazu B -orthogonalen Rest w zerlegt, so gilt

$$\rho = \|(A - \lambda B) u_0\|_{B^{-1}} = \left\| B^{-1} (A - \lambda B) (v + w) \right\|_B.$$

Da v laut Voraussetzung im Kern von $A - \lambda B$ liegt, ergibt dies

$$\rho = \left\| B^{-1} (A - \lambda B) w \right\|_B = \left\| B^{-\frac{1}{2}} (A - \lambda B) B^{-\frac{1}{2}} B^{\frac{1}{2}} w \right\|_2.$$

Wir erhalten die Ungleichung

$$\rho \geq \gamma \|w\|_B$$

und damit die Aussage

$$\|w\|_B \leq \frac{\rho}{\gamma}. \quad (2.6)$$

Da $v^T B w = 0$ gilt, erhalten wir

$$1 = \|u_0\|_B^2 = \|v + w\|_B^2 = \|v\|_B^2 + \|w\|_B^2. \quad (2.7)$$

Dazu gilt mit $v' := \frac{v}{\|v\|_B}$

$$\|v' - u_0\|_B^2 = \left\| \frac{v}{\|v\|_B} - v - w \right\|_B^2 = (1 - \|v\|_B)^2 + \|w\|_B^2.$$

Wir verwenden nun Gleichung 2.7 und erhalten

$$\|v' - u_0\|_B^2 = (1 - \|v\|_B)^2 + 1 - \|v\|_B^2 = 2(1 - \|v\|_B).$$

Da $\|v\|_B \leq 1$ ist, gilt dann

$$\|v' - u_0\|_B^2 \leq 2(1 - \|v\|_B^2).$$

Erneute Verwendung von Gleichung 2.7 liefert

$$\|v' - u_0\|_B \leq \sqrt{2} \|w\|_B.$$

In Kombination mit Gleichung 2.6 erhalten wir die erste Aussage aus Lemma 3. Es ist nun noch die Winkelbeziehung aus Gleichung 2.5 zu zeigen. Aus

$$\tan \sphericalangle (v', u_0)^2 = \frac{\|w\|_B^2}{\|v\|_B^2} = \frac{\|w\|_B^2}{1 - \|w\|_B^2}$$

erhalten wir nach Nutzen von Gleichung 2.6

$$\tan \sphericalangle (v', u_0)^2 \leq \frac{\frac{\rho^2}{\gamma^2}}{1 - \frac{\rho^2}{\gamma^2}} = \frac{\rho^2}{\gamma^2 - \rho^2}$$

und daraus dann

$$\tan \sphericalangle (v', u_0) \leq \frac{\rho}{\sqrt{\gamma^2 - \rho^2}}.$$

Für den hinteren Teil der Behauptung erhalten wir mit der dritten binomischen Formel

$$\tan \sphericalangle (v', u_0) \leq \frac{\rho}{\sqrt{(\gamma - \rho)(\gamma + \rho)}}$$

und erkennen, da $\gamma > \rho > 0$ gilt

$$\tan \sphericalangle (v', u_0) \leq \frac{\rho}{\sqrt{(\gamma - \rho)(\gamma - \rho)}}.$$

Radizieren liefert die zu beweisende Aussage. ■

Satz 1:

Für ein Eigenpaar $(\lambda \in \mathbb{R}, v \in \mathbb{R}^n)$ der Gleichung 2.1 seien Approximationen $\mathbb{R} \ni \mu \approx \lambda : \mu \neq \lambda$ und $0 \neq m \approx G^T v$ zu einer B^{-1} -orthogonalen Messmatrix $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ bekannt. Sei $\gamma \in \mathbb{R}$ der Abstand von λ zum nächsten Eigenwert und $\alpha \in \mathbb{R}$ der Spektralradius von $B^{-1}(A - \lambda B)$.

Mit der Gewichtungsmatrix

$$W := \begin{bmatrix} B & O \\ O & I \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+k) \times (n+k)}$$

sei

$$u := \arg \min_{u \in \mathbb{R}^n} \left\| \begin{bmatrix} B^{-1}(A - \mu B) \\ G^T \end{bmatrix} u - \begin{pmatrix} 0 \\ m \end{pmatrix} \right\|_W$$

und $u_0 := \frac{u}{\|u\|_B}$ die B -normierte Richtung. Sei $\epsilon := \mu - \lambda$ und seien η_v , ζ_v und ξ_v die Kenngrößen nach Abschnitt 2.2 der gegebenen Informationen μ und m .

Mit diesen Größen gilt „**a-posteriori**“

$$\|B^{-1}(A - \lambda B) u_0\|_B \leq |\epsilon| + \frac{|\epsilon| + \eta_v}{\xi_v \cos(\zeta_v)} \frac{\|m\|_2}{\|u\|_B}.$$

Es existiert ein normiertes $v' \in \mathbb{R}^n$ im Eigenraum zu λ für das

$$\|v' - u_0\|_B \leq \frac{\sqrt{2}}{\gamma} \left(|\epsilon| + \frac{|\epsilon| + \eta_v}{\xi_v \cos(\zeta_v)} \frac{\|m\|_2}{\|u\|_B} \right).$$

erfüllt ist.

„**A-priori**“ gilt mit $h := \frac{(\alpha + |\epsilon|)^2 + 1}{\xi_v - \eta_v}$

$$\|B^{-1}(A - \lambda B)u_0\|_B \leq |\epsilon|(1 + h) + \eta_v h$$

und auch

$$\|v' - u_0\|_B \leq \frac{\sqrt{2}}{\gamma} (|\epsilon|(1 + h) + \eta_v h).$$

Anmerkung: Die Gliederung der Schranken in „a-priori“ und „a-posteriori“ wurde gewählt, da für letztere Wissen über den zur Lösung zugehörigen Vektor u nötig ist. Sie verdeutlichen den Einfluss der Kenngrößen η_v , ξ_v , ζ_v und ϵ auf die Genauigkeit des Resultats.

Beobachtung 4:

Nutzt man die Schranken aus Satz 1, um eine Aussage für die in [HL07] gestellte Problemstellung zu erhalten, müssen die Kenngrößen zunächst angepasst werden.

Da in der zitierten Arbeit die Abtastung nur eindimensional (mit einem einzelnen Messvektor g) erfolgt, wird der Messfehler und somit der zugehörige -Winkel verschwinden: $\eta_v = 0$ und $\zeta_v = 0$. Die Messbarkeit ist somit $\xi_v = g^T v_0$. Die Messung ist eine skalare Größe; in der genannten Arbeit wurde $m = 1$ gewählt. Somit vereinfachen sich die Schranken zu einerseits

$$\|B^{-1}(A - \lambda B)u_0\|_B \leq |\epsilon| \left(1 + \frac{1}{|g^T v_0| \|u\|_B} \right) \quad (2.8)$$

und andererseits

$$\|B^{-1}(A - \lambda B)u_0\|_B \leq |\epsilon| \left(1 + \frac{(\alpha + |\epsilon|)^2 + 1}{|g^T v_0|} \right) \quad (2.9)$$

Der Vergleich mit der genannten Arbeit zeigt, dass die dortige erste Schranke mit der aus Gleichung 2.8 übereinstimmt. Die Schranke in Gleichung 2.9 ist durch die abweichende Herleitung etwas schärfer — in der Arbeit steht bis auf vergleichbare Größen im Zähler anstelle der 1 eine 2.

Beweis von Satz 1:

Zunächst gilt

$$\frac{\|B^{-1}(A - \mu B)u\|_B}{\|u\|_B} \leq \frac{1}{\|u\|_B} \left\| \begin{pmatrix} B^{-1}(A - \mu B)u \\ G^T u - m \end{pmatrix} \right\|_W.$$

Wir wählen die normierte gesuchte Eigenrichtung $v_0 := \frac{v}{\|v\|_B}$ und $\hat{v}(m, v_0) = \frac{m^T G^T v_0}{m^T m}$ als die zu v_0 passende optimale Skalierung nach Definition 1. Da u die rechte Seite minimiert, wird der Ausdruck für $\frac{v_0}{\hat{v}}$ höchstens größer. Wir erhalten

$$\frac{\|B^{-1}(A - \mu B)u\|_B}{\|u\|_B} \leq \frac{1}{\|u\|_B} \left\| \begin{pmatrix} B^{-1}(A - \mu B) \frac{v_0}{\hat{v}} \\ G^T \frac{v_0}{\hat{v}} - m \end{pmatrix} \right\|_W$$

und nach Abschätzung der W -Norm

$$\frac{\|B^{-1}(A - \mu B)u\|_B}{\|u\|_B} \leq \frac{|\epsilon| + \eta_v}{\|u\|_B |\hat{v}|}. \quad (2.10)$$

Dazu gilt

$$\frac{\|B^{-1}(A - \mu B)u\|_B}{\|u\|_B} \geq \frac{\|B^{-1}(A - \lambda B)u\|_B}{\|u\|_B} - \frac{|\epsilon| \|u\|_B}{\|u\|_B}$$

und kombiniert mit Gleichung 2.10 erkennen wir

$$\frac{\|B^{-1}(A - \lambda B)u\|_B}{\|u\|_B} \leq |\epsilon| + \frac{|\epsilon| + \eta_v}{\|u\|_B |\hat{v}|} \quad (2.11)$$

Einsetzen von Gleichung 2.4 unter Berücksichtigung, dass hier \hat{v} zu einem normierten v gehört, liefert die erste „a-posteriori“-Aussage.

Für die „a-priori“-Aussage ist eine untere Schranke für $\|u\|_B$ zu bestimmen.

Mit

$$S := \begin{bmatrix} B^{-1}(A - \mu B) \\ G^T \end{bmatrix}$$

gilt aus den Normalgleichungen

$$u = (S^T W S)^{-1} G m. \quad (2.12)$$

Wir multiplizieren von links mit $B^{\frac{1}{2}}$ und erhalten

$$B^{\frac{1}{2}} u = B^{\frac{1}{2}} (S^T W S)^{-1} G m.$$

Durch Einfügen von $B^{\frac{1}{2}} B^{-\frac{1}{2}}$ ergibt dies

$$B^{\frac{1}{2}} u = \left(B^{-\frac{1}{2}} S^T W S B^{-\frac{1}{2}} \right)^{-1} B^{-\frac{1}{2}} G m. \quad (2.13)$$

Wir erhalten daraus die Abschätzung

$$\|u\|_B \geq \frac{1}{\left\| B^{-\frac{1}{2}} S^T W S B^{-\frac{1}{2}} \right\|_2} \left\| B^{-\frac{1}{2}} G m \right\|_2.$$

Wir setzen S ein und nutzen die B^{-1} -Orthogonalität von G , um zu

$$\|u\|_B \geq \frac{\|m\|_2}{\left\| B^{-\frac{1}{2}} \left((A - \mu B)^T B^{-1} (A - \mu B)^T + GG^T \right) B^{-\frac{1}{2}} \right\|_2}$$

zu gelangen. Wir erhalten durch Auflösen der äußeren Klammer dann

$$\|u\|_B \geq \frac{\|m\|_2}{\left\| B^{-\frac{1}{2}} (A - \mu B)^T B^{-1} (A - \mu B)^T B^{-\frac{1}{2}} + B^{-\frac{1}{2}} GG^T B^{-\frac{1}{2}} \right\|_2}.$$

Mit Weyls-Monotonie-Theorem (aus [Par98, Kapitel 10-3]) und α sowie ϵ aus der Behauptung erkennen wir

$$\|u\|_B \geq \frac{\|m\|_2}{(\alpha + |\epsilon|)^2 + 1}$$

und damit dann

$$\frac{1}{\|u\|_B} \leq \frac{(\alpha + |\epsilon|)^2 + 1}{\|m\|_2}.$$

Zusammen mit Gleichung 2.11 ergibt dies die Abschätzung

$$\frac{\|B^{-1}(A - \lambda B)u\|_B}{\|u\|_B} \leq |\epsilon| + \frac{|\epsilon| + \eta_v}{\|m\|_2 |\hat{\nu}|} \left((\alpha + |\epsilon|)^2 + 1 \right). \quad (2.14)$$

Wir nutzen nun Beobachtung 3 und erhalten

$$\frac{\|B^{-1}(A - \lambda B)u\|_B}{\|u\|_B} \leq |\epsilon| + \frac{|\epsilon| + \eta_v}{\xi_v - \eta_v} \left((\alpha + |\epsilon|)^2 + 1 \right).$$

Mit dem dort gewählten h ist nun die erste „a-priori“-Ungleichung gezeigt. Die beiden Aussagen des Satzes zu $\|v' - u_0\|_B$ erhalten wir mit Lemma 3. ■

2.3.1 Gewichtung

Zusätzlich zu der für das allgemeine Eigenwertproblem angepassten Gewichtung² W betrachten wir hier eine Gewichtung $w \in \mathbb{R}^+$ der Block-Gleichungen zueinander. Hierdurch kann entweder die Messbedingung oder die Bedingung durch das Eigenresiduum stärker berücksichtigt werden.

Anmerkung: Falls zum Beispiel die Eigenwertmessung wesentlich präziser erfolgen konnte als die Abtastung, kann mit dieser Gewichtung dann dementsprechend der Bedingung des Eigenresiduums mehr Einfluss gegeben werden.

Satz 2:

Mit den Voraussetzungen aus Satz 1 und einer gegebenen Gewichtung $w \in \mathbb{R}^+$ sei $u_0 = \frac{u}{\|u\|_B} \in \mathbb{R}^n$ die normierte Richtung der Lösung des gewichteten Ausgleichsproblems

$$u := \arg \min_u \left\| \begin{bmatrix} wB^{-1}(A - B\mu) \\ G^T \end{bmatrix} u - \begin{pmatrix} 0 \\ m \end{pmatrix} \right\|_W. \quad (2.15)$$

²Mit der Gewichtung W berücksichtigen wir, dass die Eigenvektoren des allgemeinen Eigenwertproblems paarweise B -orthogonal sind.

A-posteriori gilt

$$\left\| B^{-1} (A - \lambda B) u_0 \right\|_B \leq |\epsilon| + \frac{w |\epsilon| + \eta_v}{w \xi_v \cos(\zeta_v)} \frac{\|m\|_2}{\|u\|_B}.$$

Weiterhin existiert ein B -normiertes $v' \in \mathbb{R}^n$ im Eigenraum zu λ mit dem

$$\|v' - u_0\| \leq \frac{\sqrt{2}}{\gamma} \left(|\epsilon| + \frac{w |\epsilon| + \eta_v}{w \xi_v \cos(\zeta_v)} \frac{\|m\|_2}{\|u\|_B} \right)$$

gilt. Mit $h(w) := \frac{w^2(\alpha+|\epsilon|)^2+1}{w(\xi_v-\eta_v)}$ gilt **a-priori**

$$\left\| B^{-1} (A - \lambda B) u_0 \right\|_B \leq |\epsilon| (1 + wh(w)) + \eta_v h(w)$$

und auch

$$\|v' - u_0\| \leq \frac{\sqrt{2}}{\gamma} (|\epsilon| (1 + wh(w)) + \eta_v h(w)).$$

Anmerkung: Wie schon bei Satz 1 wurden die Schranken in a-priori und a-posteriori gegliedert, da für letztere Wissen über den zur Lösung zugehörigen Vektor u nötig ist. Auch hier verdeutlichen sie den Einfluss der Kenngrößen η_v , ξ_v , ζ_v und ϵ auf die Genauigkeit des Resultats.

Beweis von Satz 2:

Die Aussagen ergeben sich analog zu dem Beweis von Satz 1, wobei eben die Gewichtung w zusätzlich mit berücksichtigt wird. ■

Lemma 4:

Es gibt, da wir $\epsilon = \mu - \lambda \neq 0$ gefordert haben, für $\xi_v > \eta_v > 0$ genau eine optimale Gewichtung $\hat{w} \in \mathbb{R}^+$, die die „a-priori-Fehlerabschätzung“ aus Satz 2 minimiert.

Anmerkung: Die mögliche Verbesserung durch die zusätzliche Gewichtung ist, wie ein Blick in Tabelle 2.1 zeigt, nur gering. Die Betrachtung ist dennoch interessant: Die Gewichtung kann nach Gleichung 2.19 als Regularisierungsparameter verstanden werden. Weiterhin entspricht die Methode für den Grenzübergang der Gewichtung $w \rightarrow 0$ dem Vorgehen in Abschnitt 2.4.

Beweis von Lemma 4:

Es gilt gemäß Satz 2

$$\left\| B^{-1} (A - \lambda B) u_0 \right\|_B \leq |\epsilon| (1 + wh) + \eta_v h =: d(w)$$

und mit den Abkürzungen $\kappa := \frac{\eta_v}{|\epsilon|} \geq 0$ und $b := \alpha + |\epsilon| > 0$ sind die stationären Punkte von $d(w)$ gleich denen von

$$\begin{aligned} g(w) &:= (\xi_v - \eta_v) \left(\frac{d(w)}{|\epsilon|} - 1 \right) - 1 \\ &= (\xi_v - \eta_v) h(w + \kappa) - 1 \\ &= \frac{w^2 b^2 + 1}{w} (w + \kappa) - 1 \\ &= b^2 w^2 + b^2 \kappa w + \frac{\kappa}{w}. \end{aligned}$$

Durch Differentiation erhalten wir

$$g'(w) = 2b^2w + b^2\kappa - \frac{\kappa}{w^2}$$

und daher ist die notwendige Bedingung für Extrema

$$0 \stackrel{!}{=} w^3 + \frac{\kappa}{2}w^2 - \frac{\kappa}{2b^2} =: f(w). \quad (2.16)$$

Die direkte Lösung ist mit Hilfe der Formeln von Cardano möglich aber aufwendig. Mit Hilfe der folgenden Umwandlungen können wir jedoch zeigen, dass es eine eindeutige positive Lösung \hat{w} gibt:

Wie schreiben zunächst die Bedingung aus Gleichung 2.16 zu

$$\frac{\kappa}{2b^2} = w^3 + \frac{\kappa}{2}w^2 \quad (2.17)$$

um. Die rechte Seite der Gleichung 2.17 verschwindet bei $w \rightarrow 0$ und strebt für $w \rightarrow +\infty$ gegen $+\infty$. Sie ist streng monoton für $w \in \mathbb{R}^+$, da die erste Ableitung der rechten Seite von Gleichung 2.17 nach w nur positive Werte annimmt. Diese stetige Funktion nimmt also im Bereich \mathbb{R}^+ jede positive Konstante — und damit insbesondere den Wert $\frac{\kappa}{2b^2} > 0$ der linken Seite der Gleichung 2.17 — nur genau einmal an.

Da für $w \in \mathbb{R}^+$

$$g''(w) = 2b^2 + \frac{2\kappa}{w^3} > 0$$

gilt, ist das gefundene eindeutige Extremum ein Minimum. ■

Um die Methode angemessen zu gewichten, kann Gleichung 2.16 approximativ gelöst werden. Die quadratische Taylor-Approximation³ um $w = 0$ lautet

$$t_0(w) = \frac{\kappa}{2}w^2 - \frac{\kappa}{2b^2} = \frac{\kappa}{2} \left(w^2 - \frac{1}{b^2} \right)$$

und motiviert mit ihrer positiven Lösung die Gewichtung

$$\tilde{w} = \frac{1}{b}$$

oder eine weitere Verbesserung dieser mit Hilfe eines Newton-Schrittes zu

$$\check{w} = \tilde{w} - \frac{1}{3b + \kappa b^2} = \frac{1}{b} \left(1 - \frac{1}{3 + \kappa b} \right).$$

Die Approximations-Schritte sind in Abbildung 2.2 skizziert. Die quadratische Näherung t_0 verläuft unterhalb der gesuchten Funktion f , da der fehlende Term w^3 im zulässigen Bereich $w > 0$ positiv ist.

Die Angabe einer optimalen Gewichtung für die *a-posteriori-Schranke* ist durch die (nicht lineare) Abhängigkeit der Norm der Lösung $\|u\|_B$ schwierig (wenn nicht gar unmöglich). In Unterabschnitt 2.6.1 wird diese iterativ ermittelt.

³Die lineare Taylor-Approximation ist konstant.

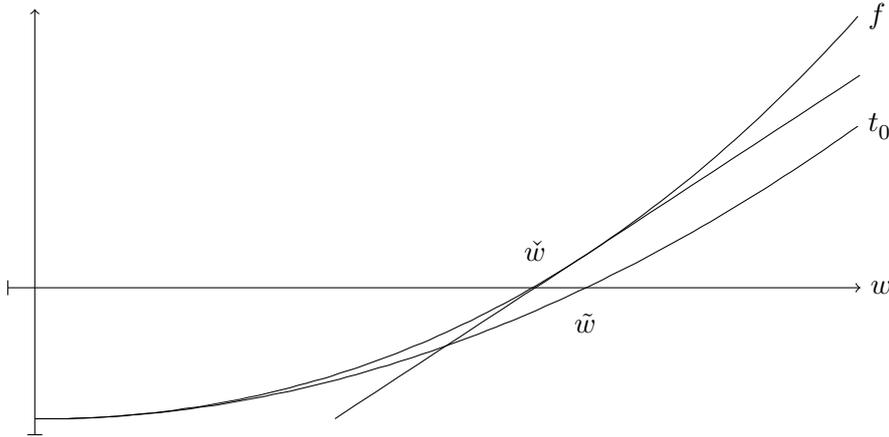


Abbildung 2.2: Problem und Approximation

2.3.2 Interpretation und explizite Lösung

Ähnlich zu Gleichung 2.13 erhält man unter Berücksichtigung der Gewichtung w die Darstellung

$$B^{\frac{1}{2}}u = \left(w^2 B^{-\frac{1}{2}} (A - \mu B) B^{-1} (A - \mu B) B^{-\frac{1}{2}} + B^{-\frac{1}{2}} G G^T B^{-\frac{1}{2}} \right)^{-1} B^{-\frac{1}{2}} G m. \quad (2.18)$$

Mit Hilfe der Koordinatentransformation $\tilde{u} := B^{\frac{1}{2}}u$ und den zugehörigen Matrizen $\tilde{A} := B^{-\frac{1}{2}}AB^{-\frac{1}{2}}$ und $\tilde{G} := B^{-\frac{1}{2}}G$, mit denen das allgemeine Eigenwertproblem

$$Au = Bu\lambda$$

für symmetrisch positiv definite Matrizen B in das spezielle Eigenwertproblem

$$\tilde{A}\tilde{u} = \tilde{u}\lambda$$

transformiert werden kann, erhalten wir aus Gleichung 2.18

$$\tilde{u} = \left(w^2 (\tilde{A} - \mu I)^2 + \tilde{G}\tilde{G}^T \right)^{-1} \tilde{G}m.$$

Mit der Annahme, die Messung sei exakt, also

$$m = G^T v = G^T B^{-\frac{1}{2}} B^{\frac{1}{2}} v = \tilde{G}^T \tilde{v},$$

ergibt dies

$$\tilde{u} = \left(w^2 (\tilde{A} - \mu I)^2 + \tilde{G}\tilde{G}^T \right)^{-1} \tilde{G}\tilde{G}^T \tilde{v}. \quad (2.19)$$

$\tilde{G}\tilde{G}^T$ ist ein Projektor auf einen Unterraum und demnach singular. Der vordere Summand $w^2 (\tilde{A} - \mu I)^2$ regularisiert diesen, so dass die Summe invertiert werden kann. Insofern kann Gleichung 2.19 und damit die gesamte Methode aus Abschnitt 2.3 so verstanden werden, dass der irreversible Prozess der Messung (die Projektion auf einen Unterraum) mit Hilfe der Eigeninformation in $(\tilde{A} - \mu I)^2$ approximativ rückgängig gemacht wird. Für die Rechnung kann dies mit Hilfe von Lemma 5 vereinfacht werden.

Lemma 5:

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine reguläre Matrix. Existiert zu einer mit $U, V \in \mathbb{R}^{n \times k}$ und regulärem $D \in \mathbb{R}^{k \times k}$ als $A + UDV^T$ notierten Modifikation von A die Inverse, so gilt für diese angewandt auf U

$$(A + UDV^T)^{-1} U = A^{-1} U (D^{-1} + V^T A^{-1} U)^{-1} D^{-1}.$$

Beweis von Lemma 5:

Die hier gegebene Gleichung ist ein Sonderfall der Identität von Sherman-Morrison-Woodbury (siehe [GL96, Seite 50]) und läßt sich gemäß der folgenden Schritte herleiten.

Ausgehend von

$$(A + UDV^T)^{-1} = A^{-1} - A^{-1} U (D^{-1} + V^T A^{-1} U)^{-1} V^T A^{-1}$$

erhalten wir nach Anwendung auf U

$$(A + UDV^T)^{-1} U = A^{-1} U - A^{-1} U (D^{-1} + V^T A^{-1} U)^{-1} V^T A^{-1} U.$$

Durch Ausklammern von $A^{-1} U$ ergibt dies

$$(A + UDV^T)^{-1} U = A^{-1} U \left(I - (D^{-1} + V^T A^{-1} U)^{-1} V^T A^{-1} U \right)$$

und nach weiterem Ausklammern von $(D^{-1} + V^T A^{-1} U)^{-1}$ dann

$$(A + UDV^T)^{-1} U = A^{-1} U (D^{-1} + V^T A^{-1} U)^{-1} (D^{-1} + V^T A^{-1} U - V^T A^{-1} U).$$

Da sich die letzten beiden Summanden auslöschen, erhalten wir mit

$$(A + UDV^T)^{-1} U = A^{-1} U (D^{-1} + V^T A^{-1} U)^{-1} D^{-1}$$

die formulierte Aussage. ■

Wir erhalten mit der Abkürzung

$$H := (A - \mu B)^{-1} B (A - \mu B)^{-1} G$$

dann

$$u = H (w^2 I + G^T H)^{-1} m \tag{2.20}$$

als die Lösung der Minimierungsaufgabe aus Gleichung 2.15.

Der wesentliche Rechenaufwand muss beim Lösen mit der um μB geshifteten Matrix A betrieben werden. Insofern bietet es sich an, eine Zerlegung von $A - \mu B$ zu ermitteln, da auch die anschließenden Verfahren aus Kapitel 3 diese nutzen können.

Da $G^T H$ symmetrisch positiv definit ist, können wir mit Gleichung 2.20 eine stetige Fortsetzung für $w = 0$ definieren. Diese Gewichtung entspricht der Forderung, dass die Messbedingung $G^T v = m$ exakt erfüllt wird. Wir diskutieren diesen Ansatz in Abschnitt 2.4.

2.4 Eigenresiduen-Minimierung

In diesem Abschnitt ermitteln wir zu einer Eigenwertnäherung $\mu \in \mathbb{R}$ und Messungen $m \in \mathbb{R}^k$ einen Vektor $u \in \mathbb{R}$, der die Messbedingung $G^T u = m$ zu einer B^{-1} -orthogonalen Matrix $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ erfüllt und die Residuennorm $\left\| B^{-1} (A - \mu B) u \right\|_B$ minimiert.

Durch die Hinzunahme der Nebenbedingung, kann auch ein Eigenpaar gefunden werden, dessen Eigenwert nicht am dichtesten bei μ liegt.

Wir fordern, dass G spaltenregulär ist, woraus die Regularität von

$$G^T \left((A - \mu B) B^{-1} (A - \mu B) \right)^{-1} G$$

folgt.

Das Problem

$$\min_{u: G^T u = m} \left\| \frac{1}{2} B^{-1} (A - \mu B) u \right\|_B \quad (2.21)$$

führt mit dem Lagrange-Parameter-Vektor l auf die notwendigen Bedingungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u} \left\{ \frac{1}{2} u^T (A - \mu B) B^{-1} (A - \mu B) u + l^T (G^T u - m) \right\} &\stackrel{!}{=} 0 \\ \frac{\partial}{\partial l} \left\{ \frac{1}{2} u^T (A - \mu B) B^{-1} (A - \mu B) u + l^T (G^T u - m) \right\} &\stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

und liefert nach Differentiation das System

$$\begin{bmatrix} (A - \mu B) B^{-1} (A - \mu B) & G \\ G^T & O \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ m \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

mit den Komponenten

$$\begin{aligned} l &= - \left(G^T (A - \mu B)^{-1} B (A - \mu B)^{-1} G \right)^{-1} m \\ u &= - (A - \mu B)^{-1} B (A - \mu B)^{-1} G l \end{aligned}$$

des Lösungsvektors. Mit der einleitend erwähnten Forderung an G sind die notwendigen Bedingungen auch hinreichend.

Korollar 1:

Mit

$$r := \sqrt{-\frac{l^T m}{u^T B u}}$$

gibt es ein $\hat{\lambda} : |\hat{\lambda} - \mu| \leq r$ für das $\det(A - \hat{\lambda} B) = 0$.

Anmerkung: Da l durch Anwendung einer symmetrisch-positiv-definiten Matrix auf $-m$ entsteht, ist $l^T m \leq 0$ und somit ist der Ausdruck unter der Wurzel positiv.

Wir haben mit dem r aus Korollar 1 also eine obere Schranke für den Abstand von μ zu einem Eigenwert $\hat{\lambda}$ und können diesen zur Laufzeit prüfen.

Beweis von Korollar 1:

Die erste Blockzeile aus Gleichung 2.22 lautet

$$(A - \mu B) B^{-1} (A - \mu B) u = -Gl.$$

Wir erhalten daraus den Rayleigh-Quotienten

$$\frac{u^T (A - \mu B) B^{-1} (A - \mu B) u}{u^T B u} = -\frac{u^T Gl}{u^T B u}.$$

Da gemäß der Nebenbedingung $G^T u = m$ erfüllt ist, vereinfacht sich die rechte Seite zu

$$\frac{u^T (A - \mu B) B^{-1} (A - \mu B) u}{u^T B u} = -\frac{l^T m}{u^T B u} =: R(u).$$

Dieser Ausdruck ist der Rayleigh-Quotient des allgemeinen Eigenwertproblems

$$(A - \mu B) B^{-1} (A - \mu B) u = \lambda B u$$

und hierfür gilt mit der B -orthogonalen Spektralzerlegung $u = \sum_{i=1}^n \alpha_i v_i$ und den zugehörigen Eigenwerten λ_i dann

$$R(u) = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i^2 (\lambda_i - \mu)^2}{\sum_{i=1}^n \alpha_i^2}.$$

Wir wählen nun $\hat{\lambda} = \lambda_k : (\lambda_k - \mu)^2 = \min_{\lambda_i} (\lambda_i - \mu)^2$ und erhalten daraus die Aussage

$$R(u) \geq \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i^2 (\hat{\lambda} - \mu)^2}{\sum_{i=1}^n \alpha_i^2} = (\hat{\lambda} - \mu)^2.$$

Radizieren dieser Aussage liefert die Behauptung. ■

Satz 3:

Für ein Eigenpaar $(\lambda \in \mathbb{R}, v \in \mathbb{R}^n)$ des Problems in Gleichung 2.1 seien Werte $\mathbb{R} \ni \mu \approx \lambda : \mu \neq \lambda$ und Messungen $0 \neq m \approx G^T v$ zu B^{-1} -orthogonalem $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ bekannt.

Sei $\gamma \in \mathbb{R}$ der Abstand von λ zum nächsten Eigenwert und $\alpha \in \mathbb{R}$ der Spektralradius von $B^{-1}(A - \lambda B)$.

Sei $u \in \mathbb{R}^n$ die Lösung von

$$u := \arg \min_{u: G^T u = m} \left\| \frac{1}{2} B^{-1} (A - \mu B) u \right\|_B \tag{2.23}$$

und $u_0 := \frac{u}{\|u\|_B}$ die B -normierte Richtung.

Mit $\epsilon := \mu - \lambda$ und den Kenngrößen der Messung gemäß Abschnitt 2.2 gilt die Abschätzung

$$\left\| B^{-1} (A - \lambda B) u_0 \right\|_B \leq |\epsilon| \left(1 + \frac{1 + \eta_v}{\xi_v - \eta_v} \right) + \eta_v \frac{\alpha}{\xi_v - \eta_v}. \tag{2.24}$$

Zudem existiert ein B -normierter Vektor $v' \in \mathbb{R}^n : \|v'\|_B = 1$ im Eigenraum zu λ , für den

$$\|v' - u_0\|_B \leq \frac{\sqrt{2}}{\gamma} \left(|\epsilon| \left(1 + \frac{1 + \eta_v}{\xi_v - \eta_v} \right) + \eta_v \frac{\alpha}{\xi_v - \eta_v} \right)$$

ist.

Anmerkung: Es stellt sich an dieser Stelle die Frage, ob die Hinzunahme der Messinformationen im Vergleich zur Verwendung lediglich einer (beliebigen) Normierungsbedingung⁴ einen Vorteil liefert.

Bei Normierung gilt $\eta_v = 0$ und wir erhalten aus Gleichung 2.24 für letzteren Fall die Schranke

$$s_{\text{norm}} := |\epsilon| + \frac{|\epsilon|}{\xi_v}.$$

Unter der Annahme, dass sich die Messbarkeit ξ_v durch die zusätzlichen Informationen um den Faktor $c > 1$ zu $c\xi_v$ verbessert, erhalten wir für den Fall mit Messungen die Schranke

$$s_{\text{meas}} := |\epsilon| + \frac{|\epsilon| + |\epsilon| \eta_v + \alpha \eta_v}{c\xi_v - \eta_n}.$$

Durch Umformung der Forderung $s_{\text{meas}} < s_{\text{norm}}$ erhalten wir die Bedingung

$$c > 1 + \eta_v \left(1 + \frac{\alpha}{|\epsilon|} + \frac{1}{\xi_v} \right) \quad (2.25)$$

mit der wir eine geringere Schranke erreichen. Wir können also annehmen, dass die zusätzliche Nutzung von Messinformationen nur hilfreich ist, wenn die hierdurch erreichte multiplikative Verbesserung c der Messbarkeit ξ_v die Ungleichung 2.25 erfüllt.

Beweis von Satz 3:

Da für $u \in \mathbb{R}^n$ ein Minimum in Gleichung 2.23 angenommen wird, gilt mit dem normierten Eigenvektor $v \in \mathbb{R}^n$ zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{R}$ und einem nach Beobachtung 2 gewählten Korrekturvektor $w \in \mathbb{R}^n$, mit dem die Messbedingung erfüllt werden kann, dann

$$\begin{aligned} \left\| B^{-1}(A - \mu B)u \right\|_B &\leq \left\| B^{-1}(A - \mu B) \frac{v+w}{\hat{\vartheta}} \right\|_B \\ &\leq \frac{1}{\hat{\vartheta}} \left(\left\| B^{-1}(A - \mu B)v \right\|_B + \left\| B^{-1}(A - \mu B)w \right\|_B \right) \\ &\leq \frac{1}{\hat{\vartheta}} \left(|\epsilon| + \left\| B^{-1}(A - \lambda B)w \right\|_B + \|(\lambda - \mu)w\|_B \right). \end{aligned}$$

Da nach Wahl $\|w\|_B \leq \eta_v \|v\|_B = \eta_v$ gilt, folgt

$$\left\| B^{-1}(A - \mu B)u \right\|_B \leq \frac{|\epsilon| + \alpha \eta_v + |\epsilon| \eta_v}{\hat{\vartheta}}$$

und somit auch

$$\frac{\left\| B^{-1}(A - \mu B)u \right\|_B}{\|u\|_B} \leq \frac{|\epsilon| + \alpha \eta_v + |\epsilon| \eta_v}{\hat{\vartheta} \|u\|_B}.$$

⁴Mit dieser Forderung wird der triviale Vektor als Lösung ausgeschlossen.

Aus der Nebenbedingung $m = G^T u$ erhalten wir mit Lemma 2

$$\|m\|_2 = \|G^T u\|_2 \leq \|u\|_B$$

und zusammen dann

$$\frac{\|B^{-1}(A - \mu B)u\|_B}{\|u\|_B} \leq \frac{|\epsilon| + \alpha\eta_v + |\epsilon|\eta_v}{\hat{\nu}\|m\|_2} = \frac{|\epsilon|(1 + \eta_v) + \alpha\eta_v}{\hat{\nu}\|m\|_2}.$$

Die Dreiecksungleichung besagt

$$\begin{aligned} \|B^{-1}(A - \mu B)u^0\|_B &= \|B^{-1}(A - \lambda B)u^0 + (\lambda - \mu)u^0\|_B \\ &\geq \|B^{-1}(A - \lambda B)u^0\|_B - \|(\lambda - \mu)u^0\|_B, \end{aligned}$$

also gilt

$$\|B^{-1}(A - \mu B)u^0\|_B \geq \|B^{-1}(A - \lambda B)u^0\|_B - |\epsilon|.$$

Zusammen mit Gleichung 2.4 erhalten wir

$$\frac{\|B^{-1}(A - \lambda B)u\|_B}{\|u\|_B} \leq |\epsilon| + \frac{|\epsilon|(1 + \eta_v) + \alpha\eta_v}{\hat{\nu}\|m\|_2}.$$

Hieraus ergibt sich mit Beobachtung 3 die erste Behauptung.

Die zweite Aussage des Satzes ergibt sich durch Anwendung von Lemma 3. ■

2.5 Kondensation bzw. Quasi-Rayleigh-Quotienten-Minimierung

Das Prinzip der Kondensation eines Problems wird häufig eingesetzt, um Approximationen zur Lösung von sehr großen Systemen durch die Lösung von deutlich kleineren Problemen zu erlangen.

Spricht man von nodaler Kondensation, so werden die Freiheitsgrade⁵ des Problems in sogenannte Master⁶ m und Slaves s unterteilt.

Das Gleichungssystem wird dementsprechend partitioniert. Der zu den Mastern m gehörigen Teil wird anschließend mit vernachlässigten (dies wird statische Kondensation genannt) oder approximativen (dies wird dynamische Kondensation genannt) Trägheitskräften an den Slave-Freiheitsgraden gelöst. In Abhängigkeit dieser so ermittelten Masterwerte, werden mit Hilfe der verbleibenden Gleichungszeilen, die Slaves $s(m)$ berechnet; die Informationen der Master werden fortgesetzt.

Zum Beispiel in den Arbeiten [MV99, Hof01] wird gezeigt, wie man dieses Vorgehen zu sogenannten nicht nodalen Kondensationsmethoden verallgemeinern kann.

⁵Die Freiheitsgrade heißen häufig Knoten (eng. nodes), daher nodal.

⁶Wir verwenden den Bezeichner m hier erneut, da die Master gerade so gewählt wurden, dass sie mit diesem übereinstimmen.

Für die Notation führen wir eine (B^{-1} -orthogonale) Matrix $R \in \mathbb{R}^{n \times (n-k)}$ ein, mit der

$$\begin{bmatrix} G & R \end{bmatrix}^T B^{-1} \begin{bmatrix} G & R \end{bmatrix} = I \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

gilt. Gemeinsam bilden die Spalten von $\begin{bmatrix} G & R \end{bmatrix}$ also eine B^{-1} -orthogonale Basis des \mathbb{R}^n . Wir gehen zunächst davon aus, dass die im Folgenden auftretenden inversen Matrizen existieren. In Lemma 7 und dem zugehörigen Beweis gehen wir kritisch auf diese Annahme ein. Da für exaktes $\mu = \lambda$ der gesuchte Vektor u

$$(A - \mu B)u = 0$$

erfüllt, betrachten wir zunächst

$$(A - \mu B) \underbrace{B^{-1} \begin{bmatrix} G & R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G & R \end{bmatrix}^T}_I u = 0$$

und erkennen durch Auswerten des letzten Produkts

$$(A - \mu B) B^{-1} \begin{bmatrix} G & R \end{bmatrix} \begin{pmatrix} G^T u \\ R^T u \end{pmatrix} = 0$$

in dem oberen Block des Vektors genau die Messinformation $G^T u = m$ und nennen diese Koordinaten Master. Die verbleibenden Informationen im unteren Block des Vektors definieren die Slaves $s := R^T u$. Da die Master als bekannt vorliegen, erhalten wir das überbestimmte Gleichungssystem

$$(A - \mu B) B^{-1} \begin{bmatrix} G & R \end{bmatrix} \begin{pmatrix} m \\ s(m) \end{pmatrix} = 0$$

welches uns somit eine Fortsetzung der Master-Informationen (und somit der Messungen) auf die restlichen Freiheitsgrade (sprich die Slaves $s(m)$) definiert.

Wir schwächen die Überbestimmung ab, indem wir lediglich fordern, dass die Gleichung im Spaltenraum von $B^{-1}R$ — also in dem Raum der Slaves — gelöst sein soll⁷. Dies ergibt die Gleichung

$$R^T B^{-1} (A - \mu B) B^{-1} \begin{bmatrix} G & R \end{bmatrix} \begin{pmatrix} m \\ s(m) \end{pmatrix} = 0$$

mit der Lösung

$$s(m) = - \left(R^T B^{-1} (A - \mu B) B^{-1} R \right)^{-1} R^T B^{-1} (A - \mu B) B^{-1} G m$$

Hieraus können wir den gesuchten Vektor $u \in \mathbb{R}^n$ aus

$$u = B^{-1} G m + B^{-1} R s(m)$$

ermitteln. Wir erhalten nach dem Einsetzen

$$u = \left(I - B^{-1} R \left(R^T B^{-1} (A - \mu B) B^{-1} R \right)^{-1} R^T B^{-1} (A - \mu B) \right) B^{-1} G m.$$

Da R häufig größere Dimension hat als G , oder gar nicht zur Verfügung steht, kann u mit Lemma 6 alternativ ermittelt werden.

⁷Diese Wahl der Abschwächung hat den Vorteil, dass mit einer symmetrischen Matrix gelöst werden muss.

Lemma 6:

Das wie oberhalb beschrieben ermittelte u kann auch via

$$u = (A - \mu B)^{-1} G \left(G^T (A - \mu B)^{-1} G \right)^{-1} m$$

berechnet werden.

Anmerkung: Diese Lösung ist ein über u und l stationärer Punkt von

$$\frac{1}{2} u^T (A - \mu B) u + l^T (G^T u - m).$$

Wir haben daher diese Methode auch Quasi-Rayleigh-Quotienten-Minimierung genannt.

Beweis von Lemma 6:

Die oberhalb notierten Forderungen an u sind äquivalent zu

$$\begin{bmatrix} G^T \\ R^T B^{-1} (A - \mu B) \end{bmatrix} u = \begin{pmatrix} m \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Laut der unteren Blockzeile ist $(A - \mu B) u$ dann B^{-1} -orthogonal zu R und liegt somit im Spaltenraum von G . Daher existiert ein l (vgl. Lagrange-Parameter) mit dem

$$\begin{bmatrix} G^T \\ (A - \mu B) \end{bmatrix} u = \begin{pmatrix} m \\ Gl \end{pmatrix} \tag{2.26}$$

gilt. Nun folgt

$$\begin{bmatrix} G^T \\ I \end{bmatrix} u = \begin{pmatrix} m \\ (A - \mu B)^{-1} Gl \end{pmatrix}$$

und durch Multiplikation der unteren Zeile mit G^T auch

$$\begin{bmatrix} G^T \\ G^T \end{bmatrix} u = \begin{pmatrix} m \\ G^T (A - \mu B)^{-1} Gl \end{pmatrix}.$$

Aus den beiden Einträgen der rechten Seite erhalten wir

$$l = \left(G^T (A - \mu B)^{-1} G \right)^{-1} m.$$

Durch Einsetzen dieser Teillösung in die zweite Zeile von Gleichung 2.26 erhalten wir die Behauptung

$$u = (A - \mu B)^{-1} G \left(G^T (A - \mu B)^{-1} G \right)^{-1} m.$$

■

Für die weitere Bewertung ist Lemma 7 wichtig:

Lemma 7:

Sofern von $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ nur Spaltenregularität gefordert wird, kann der Ausdruck

$$\left\| B^{-1} (A - \mu B) u \right\|_B$$

für ein gemäß Lemma 6 bestimmtes $u \in \mathbb{R}^n$ nicht beschränkt werden.

Anmerkung: Da wir auch punktweise Abtastungen zulassen wollen, können wir kaum weitere Annahmen an G treffen. Sollte die Matrix G aus approximativen Eigenvektoren bestehen, so bietet sich für G eine additive Zerlegung in die Anteile der gesuchten Richtungen und die Anteile der dazu orthogonalen Richtungen an, um weitere Aussagen zu formulieren.

Beweis von Lemma 7:

Wir multiplizieren u aus Lemma 6 mit $B^{-1} (A - \mu B)$ und erhalten in der B -Norm

$$\left\| B^{-1} (A - \mu B) u \right\|_B = \left\| \left(G^T (A - \mu B)^{-1} G \right)^{-1} m \right\|_2.$$

Durch die Identität

$$\left(G^T (A - \mu B)^{-1} G \right)^{-1} = \left(G^T B^{-\frac{1}{2}} \left(B^{-\frac{1}{2}} A B^{-\frac{1}{2}} - \mu I \right)^{-1} B^{-\frac{1}{2}} G \right)^{-1}$$

ist zu erkennen, dass im Inneren der Inversen eine orthogonale Projektion (auf den Spaltenraum von $B^{-\frac{1}{2}} G$) der Inversen der gegebenenfalls indefiniten Matrix $B^{-\frac{1}{2}} A B^{-\frac{1}{2}} - \mu I$ auftritt. Für die Eigenwerte dieser projizierten Matrix gilt das Interlacing-Theorem von Cauchy (siehe [Par98, Seiten 186-188]); sie sind demnach ohne weitere Annahmen nicht von der Null separierbar. Die untersuchte Norm kann nicht beschränkt werden. ■

2.6 Bewertung der Verfahren

Wir stellen in diesem Abschnitt die Fehlerschranken der erwähnten Methoden gegenüber. Zum Überblick geben wir in Tabelle 2.1 nochmals die „a-priori-Schranken“ an — jeweils entweder für verschwindenden Eigenwertfehler ϵ verschwindenden Messfehler η_v bzw. gleiche Fehlergrößen $f := |\epsilon| = \eta_v$. Für das „Kondensations-Prolongationsverfahren“ aus Abschnitt

	$\eta_v = 0$	$f := \epsilon = \eta_v$	$\epsilon = 0$
Eigenresiduen	$ \epsilon \left(1 + \frac{1}{\xi_v} \right)$	$f \frac{\alpha+1+\xi_v}{\xi_v-f}$	$\eta_v \frac{\alpha}{\xi_v-\eta_v}$
Ausgleich	$ \epsilon \left(1 + \frac{w^2(\alpha+ \epsilon)^2+1}{\xi_v} \right)$	$f \frac{(\alpha+f)^2(w^3+w^2)+w(1+\xi_v-f)+1}{w(\xi_v-f)}$	$\eta_v \frac{w^2\alpha^2+1}{w(\xi_v-\eta_v)}$
Ausgleich \tilde{w}	$ \epsilon \left(1 + \frac{2}{\xi_v} \right)$	$f \frac{2\alpha+2+\xi_v+f}{\xi_v-f}$	$\eta_v \frac{2\alpha}{\xi_v-\eta_v}$
Ausgleich \check{w}	$ \epsilon \left(1 + \frac{13}{9\xi_v} \right)$	$f \frac{2\alpha+2+\xi_v+f+\mathcal{O}(\frac{1}{\alpha})}{\xi_v-f}$	$\eta_v \frac{2\alpha}{(\xi_v-\eta_v)}$

Tabelle 2.1: „A-priori“-Fehlerschranken der Prolongationsmethoden

2.5 können wegen der dort angeführten Gründe keine Schranken gegeben werden; es wird von dieser Methode abgeraten.

Da der Spektralradius $\alpha \in \mathbb{R}^+$ ist, zeigen die Tabellen-Einträge der verbleibenden Methoden, daß das hier vorgestellte Verfahren der Eigenresiduenprolongation kleinere Fehler-schranken liefert: Es ist bei Betrachtung der „a-priori“-Schranken zu empfehlen.

2.6.1 Fast optimale Prolongation

Dieser Abschnitt befasst sich mit der optimalen Gewichtung w für die „a-posteriori“-Schranke aus Satz 2. Mit $S_\mu := (A - \mu B) B^{-1} (A - \mu B)$ wird hier eine Methode zur approximativen Lösung diese Problems definiert, die kaum mehr Rechenaufwand benötigt, als die Prolongation gemäß Abschnitt 2.4.

Davon ausgehend, dass keine Informationen für eine angemessene Gewichtung w vorliegen, wird anfangs ein Schritt der Residuen-Prolongation ausgeführt (vgl. Abschnitt 2.4 — entspricht einem Ausgleich mit $\lim_{w \rightarrow 0}$). Die auftretenden Matrizen $H_1 \in \mathbb{R}^{n \times k}$ und $H_2 \in \mathbb{R}^{k \times k}$ sind Hilfsgrößen, durch deren Nutzung der numerischer Aufwand vermindert wird. Wir bestimmen zunächst

$$H_1 := S_\mu^{-1} G$$

und

$$H_2 := G^T H_1.$$

Mit diesen Größen und einer Zerlegung⁸ von H_2 berechnen wir

$$u_0 := H_1 H_2^{-1} m$$

und für spätere Zwecke nach Gleichung 2.30 auch

$$\left. \frac{d^2}{dw^2} u \right|_{w \rightarrow 0} = \ddot{u}_0 = -2H_1 H_2^{-2} m. \quad (2.27)$$

Nach Lemma 8 stehen hiermit alle notwendigen Größen für die Taylor-Entwicklung vom Grad 2 zur Aproximation von $\frac{1}{\|u\|_B}$ um $w = 0$ zur Verfügung.

Lemma 8:

Sei $u(w) \in \mathbb{R}^n$ der zur Lösung des gewichteten Ausgleichsproblems aus Satz 2 zugehörige Vektor, so sind die Ableitungen für $\lim_{w \rightarrow 0}$

$$\begin{aligned} \left. \frac{d}{dw} u \right|_{w \rightarrow 0} &=: \dot{u}_0 = 0 \\ \left. \frac{d^2}{dw^2} u \right|_{w \rightarrow 0} &=: \ddot{u}_0 = -2S_\mu^{-1} G \left(G^T S_\mu^{-1} G \right)^{-2} m. \end{aligned}$$

Beweis von Lemma 8:

Die Ableitungen des Vektors $u \in \mathbb{R}^n$ nach dem Parameter $w \in \mathbb{R}$ entnehmen wir den impliziten Darstellungen. Wir setzen $w \in \mathbb{R}^+$ nach Satz 2 und W aus Satz 1 in Gleichung 2.12 ein und erhalten

$$\left(w^2 S_\mu + G G^T \right) u = G m.$$

⁸Aus Effizienzgründen sollte eine geeignete Zerlegung bestimmt werden, da mehrfach mit H_2 gelöst wird.

Mittels Differentiation nach w ergibt dies

$$2wS_\mu u + (w^2S_\mu + GG^T)\dot{u} = 0$$

und nach erneuter Differentiation nach w dann

$$2S_\mu u + 4wS_\mu \dot{u} + (w^2S_\mu + GG^T)\ddot{u} = 0.$$

Wir überführen diese beiden Darstellungen mit Hilfe von Lemma 5 in die expliziten Gleichungen

$$\begin{aligned} u &= S_\mu^{-1}G(w^2I + G^T S_\mu^{-1}G)^{-1} m, \\ \dot{u} &= -2wS_\mu^{-1}G(w^2I + G^T S_\mu^{-1}G)^{-2} m \end{aligned}$$

und

$$\ddot{u} = 8w^2S_\mu^{-1}G(w^2I + G^T S_\mu^{-1}G)^{-3} m - 2S_\mu^{-1}G(w^2I + G^T S_\mu^{-1}G)^{-2} m$$

Weiterhin können wir die Ausdrücke

$$u_0 = S_\mu^{-1}G(G^T S_\mu^{-1}G)^{-1} m, \quad (2.28)$$

$$\dot{u}_0 = 0, \quad (2.29)$$

$$\ddot{u}_0 = -2S_\mu^{-1}G(G^T S_\mu^{-1}G)^{-2} m. \quad (2.30)$$

als stetige Fortsetzungen für $\lim_{w \rightarrow 0}$ einführen. ■

Beobachtung 5:

Für die Ableitung der B -Norm eines Vektors $u(w)$ nach einem reellen skalaren Parameter w gilt mit $\dot{u} := \frac{d}{dw}u$

$$\frac{d}{dw} \|u\|_B = \frac{\langle u, \dot{u} \rangle_B}{\|u\|_B},$$

und für die Ableitung des Kehrwertes der B -Norm von $u(w)$ gilt

$$\frac{d}{dw} \frac{1}{\|u\|_B} = -\frac{\langle u, \dot{u} \rangle_B}{\|u\|_B^3}.$$

Beweis von Beobachtung 5:

Die Gleichung

$$\frac{d}{dw} \|u\|_B = \frac{d}{dw} \sqrt{u^T B u}$$

kann mit der Regel für verkettete Funktionen abgeleitet werden. Dies ergibt dann

$$\frac{d}{dw} \|u\|_B = \frac{1}{2\sqrt{u^T B u}} (\dot{u}^T B u + u^T B \dot{u})$$

und durch Ausnutzung der Symmetrie von B erhalten wir

$$\frac{d}{dw} \|u\|_B = \frac{u^T B \dot{u}}{\sqrt{u^T B u}} = \frac{\langle u, \dot{u} \rangle_B}{\|u\|_B}.$$

Der weitere Teil der Beobachtung folgt aus der Verwendung der Kettenregel. ■

Für die weiteren Schritte benötigen wir

Beobachtung 6:

Mit $\epsilon := \mu - \lambda$ gilt für die beiden Ausdrücke

$$S_\mu := (A - \mu B) B^{-1} (A - \mu B) \tag{2.31}$$

und

$$S_\lambda := (A - \lambda B) B^{-1} (A - \lambda B) \tag{2.32}$$

die Identität

$$S_\lambda = S_\mu + 2\epsilon(A - \mu B) + \epsilon^2 B. \tag{2.33}$$

Satz 4:

Seien $\mathbb{R} \ni \mu \approx \lambda : \mu \neq \lambda$ und $m \neq 0 \approx G^T v$ Approximationen zu einem Eigenpaar λ, v des Eigenwertproblems in Gleichung 2.1 mit einer B^{-1} -orthogonalen Messmatrix $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$. Mit S_μ gemäß Gleichung 2.31 existieren die Vektoren u_0 und \ddot{u}_0 gemäß den Gleichungen 2.28 und 2.30. Sofern für $\epsilon := \mu - \lambda$ mit

$$a := u_0^T S_\mu \left(I - \frac{u_0 u_0^T B}{u_0^T B u_0} \right) \ddot{u}_0$$

und

$$b := u_0^T (A - \mu B) \left(I - \frac{u_0 u_0^T B}{u_0^T B u_0} \right) \ddot{u}_0$$

die Ungleichung

$$a + 2\epsilon b < 0 \tag{2.34}$$

erfüllt ist, liegt bei $w = 0$ ein lokales Maximum von

$$\frac{\|B^{-1} (A - \lambda B) u(w)\|_B}{\|u(w)\|_B}$$

vor. Für $a < 0$ ist mit

$$|\epsilon| < \left| \frac{a}{2b} \right|$$

Gleichung 2.34 erfüllt.

Anmerkung: Sofern Gleichung 2.34 erfüllt ist, gibt es also ein $w > 0$, mit dem $u(w)$ eine bessere Näherung als u_0 an die gesuchte Eigenrichtung v ist.

Beweis von Satz 4:

Wir untersuchen bei $w = 0$ das Verhalten des Ausdrucks

$$q(w) := \frac{\|B^{-1}(A - \lambda B)u(w)\|_B^2}{\|u(w)\|_B^2}.$$

Um die Lesbarkeit zu erhöhen, verzichten wir in den folgenden Schritten auf die Notation der Abhängigkeit von w . Um auftretende Brüche zu vermeiden, schreiben wir mit Gleichung 2.32

$$qu^T B u = u^T S_\lambda u.$$

Mit Hilfe der Kurzschreibweisen $\dot{u} := \frac{\partial}{\partial w} u$ und $\dot{q} := \frac{\partial}{\partial w} q$ und analog für die höheren Ableitungen gilt dann

$$\dot{q}u^T B u + 2qu^T B \dot{u} = 2u^T S_\lambda \dot{u}$$

und

$$\ddot{q}u^T B u + 4\dot{q}u^T B \dot{u} + 2q\dot{u}^T B \dot{u} + 2qu^T B \ddot{u} = 2\dot{u}^T S_\lambda \dot{u} + 2u^T S_\lambda \ddot{u}.$$

Da $u_0 := u(0) \neq 0$ gilt, erhalten wir bei $w = 0$ mit Gleichung 2.29

$$\left. \frac{\partial}{\partial w} q(w) \right|_{w=0} =: \dot{q}_0 = 0$$

und mit analoger Definition

$$\ddot{q}_0 u_0^T B u_0 = 2u_0^T S_\lambda \left(I - \frac{u_0 u_0^T}{u_0^T B u_0} B \right) \ddot{u}_0.$$

Wir untersuchen nun das Vorzeichen von \ddot{q}_0 und erhalten mit Gleichung 2.33

$$\text{sgn}(\ddot{q}_0) = \text{sgn} \left(u_0^T \left(S_\mu + 2\epsilon(A - \mu B) + \epsilon^2 B \right) \left(I - \frac{u_0 u_0^T}{u_0^T B u_0} B \right) \ddot{u}_0 \right).$$

Wir vereinfachen dies zu

$$\text{sgn}(\ddot{q}_0) = \text{sgn} \left(u_0^T \left(S_\mu + 2\epsilon(A - \mu B) \right) \left(I - \frac{u_0 u_0^T}{u_0^T B u_0} B \right) \ddot{u}_0 \right).$$

Mit den im Satz eingeführten Variablen a und b gilt dann

$$\text{sgn}(\ddot{q}_0) = \text{sgn}(a + 2\epsilon b)$$

und somit für ein lokales Maximum die Forderung

$$a + 2b\epsilon < 0.$$

Hiermit ist gezeigt, dass Ungleichung 2.34 eine hinreichende Bedingung ist. Es gilt äquivalent

$$\frac{b}{|b|} \epsilon = \text{sgn}(b) \epsilon < \frac{-a}{2|b|}.$$

Für $a < 0$ ist die rechte Schranke positiv. Die Ungleichung

$$|\epsilon| < \left| \frac{a}{2b} \right|$$

impliziert dann die Gültigkeit von Gleichung 2.34. ■

Mit Satz 4 können einige Fälle erkannt werden, in denen die Prolongation mit einer Gewichtung $w > 0$ eine bessere Approximation des gesuchten Eigenvektors v liefern kann.

Wir versuchen nun, eine (zumindest lokal) optimale Gewichtung ω für die „a-posteriori“-Fehlerschranke zu finden.

Die Abhängigkeit dieser Größe von w ist kompliziert. Um wenigstens eine Approximation an die optimale Lösung zu finden, ersetzen wir $\frac{1}{\|u\|_B}$ durch die zugehörige Taylor-Approximation zweiten Grades. Hierzu ermitteln wir mit den Kurzschreibweisen $\dot{u} := \frac{\partial}{\partial w} u(w)$ und $\ddot{u} := \frac{\partial^2}{\partial w^2} u(w)$ für

$$f(w) := \frac{1}{\|u\|_B}$$

die ersten beiden Ableitungen

$$f'(w) = -\frac{\langle u, \dot{u} \rangle_B}{\|u\|_B^3}$$

und

$$f''(w) = 3\frac{\langle u, \dot{u} \rangle_B^2}{\|u\|_B^5} - \frac{\langle u, \ddot{u} \rangle_B + \langle \dot{u}, \dot{u} \rangle_B}{\|u\|_B^3}.$$

Da \dot{u} am Entwicklungspunkt $w = 0$ verschwindet, erhalten wir das Approximationspolynom

$$t_{f_0}(w) = \frac{1}{\|u_0\|_B} - \frac{\langle u_0, \ddot{u}_0 \rangle_B}{\|u_0\|_B^3} \frac{w^2}{2}. \quad (2.35)$$

Beobachtung 7:

Da die Funktion $f(w) \in \mathcal{C}^\infty$ nur quadratisch von w abhängt, verschwinden alle Koeffizienten der Terme ungerader Potenzen. t_{f_0} ist deswegen sogar eine Approximation vom Grad 3. Es gilt

$$\frac{1}{\|u(w)\|_B} - t_{f_0}(w) =: r(w) \in \mathcal{O}(w^4).$$

Wir erhalten mit Gleichung 2.35 aus der „a-posteriori“-Fehlerabschätzung von Satz 2 das Optimierungsproblem

$$\omega := \arg \min_w \left\{ \left(|\epsilon| + \frac{\eta_v}{w} \right) t_{f_0}(w) \right\}$$

um eine approximativ (lokal) optimale Gewichtung w zu finden. Wir ermitteln dafür die notwendige Bedingung

$$\left(|\epsilon| + \frac{\eta_v}{\omega} \right) t'_{f_0}(\omega) = \frac{\eta_v}{\omega^2} t_{f_0}(\omega) \quad (2.36)$$

beziehungsweise für $\eta_v \neq 0$ äquivalent auch

$$\left(\frac{|\epsilon|}{\eta_v} \omega^2 + \omega \right) t'_{f_0}(\omega) = t_{f_0}(\omega). \quad (2.37)$$

Durch Einsetzen von Gleichung 2.35 und Sortieren erhalten wir

$$\frac{|\epsilon|}{\eta_v} \omega^3 + \frac{\omega^2}{2} = \frac{\|u_0\|_B^2}{-\langle u_0, \ddot{u}_0 \rangle_B}. \quad (2.38)$$

Die linke Seite der Gleichung 2.38 ist über \mathbb{R}^+ stetig und monoton. Bei $w \rightarrow 0$ geht sie gegen den Wert 0 und strebt für $w \rightarrow +\infty$ gegen $+\infty$. Demnach wird jeder positive Wert genau einmal angenommen.

Für $\langle u_0, \ddot{u}_0 \rangle_B > 0$ existiert über \mathbb{R}^+ keine reelle Nullstelle von $p(w)$.

Für $\langle u_0, \ddot{u}_0 \rangle_B < 0$ gibt es eine eindeutige Nullstelle. Wir qualifizieren nun das zugehörige lokale Extremum mit Hilfe der zweiten Ableitung

$$\frac{\partial^2}{\partial w^2} \left\{ \left(|\epsilon| + \frac{\eta_v}{w} \right) t_{f_0}(w) \right\} = \left(|\epsilon| + \frac{\eta_v}{w} \right) t''_{f_0}(w) + \frac{2}{w} \left(\frac{\eta_v}{w^2} t_{f_0}(w) - \frac{\eta_v}{w} t'_{f_0}(w) \right)$$

der untersuchten Größe. Wir werten diesen Ausdruck bei $w = \omega$ aus und erhalten durch Einsetzen von Gleichung 2.36 in der hinteren Klammer

$$\frac{\partial^2}{\partial w^2} \left\{ \left(|\epsilon| + \frac{\eta_v}{w} \right) t_{f_0}(w) \right\}_{w=\omega} = \left(|\epsilon| + \frac{\eta_v}{\omega} \right) t''_{f_0}(\omega) + \frac{2}{\omega} |\epsilon| t'_{f_0}(\omega).$$

Da für die Existenz von ω ohnehin $\langle u_0, \ddot{u}_0 \rangle_B < 0$ gefordert wurden, gilt sowohl $t''_{f_0}(\omega) > 0$ als auch $t'_{f_0}(\omega) > 0$ und damit dann

$$\operatorname{sgn} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial w^2} \left\{ \left(|\epsilon| + \frac{\eta_v}{w} \right) t_{f_0}(w) \right\} \right\}_{w=\omega} > 0.$$

Das Extremum der Approximation ist also ein lokales Minimum. Wir gehen wegen Beobachtung 7 davon aus, dass dies auch eine Verbesserung der gesuchten Größe liefert und führen darum mit diesem ω einen gewichteten Prolongationsschritt aus:

$$u_\omega := H_1 \left(\omega^2 I + H_2 \right)^{-1} m.$$

Prinzipiell könnte dieses Ergebnis zum Beispiel mit Newton-Methoden noch verbessert werden — da aber nur eine gute Basis für anschließende Iteration (Kapitel 3) gefunden werden soll, wird diese Idee nicht weiter verfolgt.

Bei der numerischen Ermittlung von \ddot{u}_0 ist durch das zweifache Lösen (also Verdoppeln der Kondition) mit $H_2 = G^T S_\mu^{-1} G$ Vorsicht geboten. Um derartige Probleme zu vermeiden, kann anstelle von Gleichung 2.35 auch die Konstante \tilde{c} in dem Interpolationspolynom zweiten Grades

$$\tilde{t}_{f_0}(w) = \frac{1}{\|u_0\|_B} + \frac{w^2}{2\tilde{c}\|u_0\|_B}$$

bestimmt werden, so dass es für ein berechnetes Paar $(\tilde{w}, \|u(\tilde{w})\|_B)$ exakt ist.

Diese Konstante muss dann explizit

$$\tilde{c} = \frac{\tilde{w}^2}{2 \frac{\|u(\tilde{w})\|_B}{\|u_0\|_B} - 2}$$

lauten. Somit stimmt $\tilde{t}_{f_0}(w)$ dann mit $f(w)$ bei $w = 0$ in Funktions- und Ableitungs- und bei \tilde{w} im Funktionswert überein. Das bestimmte \tilde{c} ist eine Approximation für $\frac{\|u_0\|_B^2}{-\langle u_0, \ddot{u}_0 \rangle_B}$ und hiermit kann weiter verfahren werden.

Satz 5:

Es sei ω die approximativ optimale Gewichtung des vorhergehenden Abschnittes für die Ausgleichsprolongation.

Mit dieser Gewichtung gilt „a-posteriori“ für den Ergebnisvektor u_ω mit der Abkürzung $\frac{\|u_0\|_B^2}{-\langle u_0, \ddot{u}_0 \rangle_B} =: c > 0$ die Fehlerschranke

$$\frac{\|B^{-1}(A - \lambda B)u_\omega\|_B}{\|u_\omega\|_B} \lesssim |\epsilon| + \left(|\epsilon| \left(1 + \frac{3}{2c} \omega^2 \right) + \frac{\eta_v \omega}{c} \right) \frac{\|m\|_2}{\xi_v \cos(\zeta_v) \|u_0\|_B}.$$

Anmerkung: Es fällt in dieser Darstellung der Schranke auf, dass selbst ein kleiner Wert ω sich nicht negativ auswirkt, da nur positive Potenzen existieren. Bei praktischer Verwendung diese Methode ergab sich ein sehr geringer Einfluß von w auf $\|u(w)\|_B$ und resultierend ein deutlich von 0 verschiedener Wert für c .

Beweis von Satz 5:

Die notwendige Bedingung aus Gleichung 2.37 ergibt nach Umformung

$$\frac{\eta_v}{\omega} t_{f_0}(\omega) = (|\epsilon| \omega + \eta_v) t'_{f_0}(\omega).$$

Die Behauptung ergibt dich durch Einsetzen in die Abschätzung aus Satz 2. ■

Abschließend sind in Tabelle 2.2 für die Fälle optimaler Eigenwert- oder Eigenvektormessung und einem dazwischen liegenden Sonderfall die approximativ optimalen Gewichtungen und die zugehörigen Fehlerschranken notiert.

Annahme	Gewichtung	Schranke für $\ B^{-1}(A - \lambda B)u\ _B$
$\epsilon = 0$	$\omega = \sqrt{2c}$	$\tan(\zeta_v) \sqrt{\frac{2}{c}} \frac{\ m\ _2}{\ u_0\ _B}$
$54c\epsilon^2 = \eta_v^2$	$\omega = \frac{n}{6\epsilon} = \sqrt{\frac{3}{2}c}$	$ \epsilon + \frac{49\ m\ _2}{4\xi_v \cos(\zeta_v)\ u_0\ _B} \epsilon $
$\eta_v = 0$	$\omega = 0$	$ \epsilon + \frac{\ m\ _2}{\xi_v\ u_0\ _B} \epsilon $

Tabelle 2.2: „A-posteriori“-Schranken bei approximativ optimaler Gewichtung

2.7 Numerische Ergebnisse

In diesem Abschnitt wende wir die angeführten Algorithmen numerisch an. Die Berechnungen erfolgten auf einer Intel Core i7 950 3.07 GHz CPU mit 12 GB DDR3 RAM, Windows 7 und Matlab 7.8.0 (R2009a).

2.7.1 MatrixMarket

In der Datenbank Matrix-Market (siehe [Mat]) liegen diverse Problem-Matrizen vor — unter anderem auch diverse Eigenwert-Probleme. In dem Paket BCSSTRUC3 (BCS Structural Engineering Matrices siehe [BCS]) der Harwell-Boeing Collection (siehe [HBC]) gibt es das Masse- und Steifigkeitspaar BCSSTM21 und BCSSTK21 der dynamischen Strukturanalyse einer eingespannten Platte. Das Problem wurde auf ein 20×30 Gitter mit jeweils 6 Freiheitsgraden diskretisiert. Daraus entstehen die Matrizen $A, B \in \mathbb{R}^{3600 \times 3600}$.

Hierzu passend wurde eine B^{-1} -orthogonale Messmatrix $G \in \mathbb{R}^{3600 \times 10}$ erzeugt, die mit 103 von Null verschiedenen Einträgen die Messung von 10 Linearkombinationen von Knotenwerten (der z-Richtung) simuliert. Aus den ersten 20 Eigenformen wurden (zufällig) 5 ausgewählt: 1, 7, 10, 13 und 14. Von diesen wurden mittels G Messungen durchgeführt, in denen durch Skalierung auf Länge 5 und anschließende ganzzahlige Rundung Meßfehler enthalten sind. Die Eigenwerte wurden durch zufällige Störung durch Zufallszahlen mit 6% Standardabweichung simuliert gemessen.

Ausgehend von dieser Datenbasis wurde die Methode der fast optimal gewichteten Prolongation (siehe Unterabschnitt 2.6.1) angewandt. Die Qualität der approximativ optimalen Gewichtung (mit $\tilde{w} = 1e - 5$ erzeugt) aus diesem Verfahren ist in Abbildung 2.3 zu erkennen: Die diamantenförmigen Markierungen zeigen diese in den blauen Plots der B -Norm der Fehlergröße $B^{-1}(A - \lambda B) \frac{u}{\|u\|_B \lambda}$ über der logarithmischen Gewichtung $\log_{10}(w)$. In grün ist die Abschätzung dargestellt; in rot deren Approximation.

Der Plot unten rechts zeigt die Korrelation der prolongierten mit den gesuchten Vektoren. Eine numerische Bewertung der Ergebnisse ist in Tabelle 2.3 notiert.

Index	Messwert [Hz]	Eigenwert [Hz]	Messfehler	Fehlerwinkel (°)
1	303.7836	300.4260	0.0230	4.6058
2	237.2875	220.3927	0.0203	9.4447
3	195.3425	193.4214	0.0176	1.7325
4	161.5634	160.8854	0.0450	0.1384
5	143.8823	137.5200	0.0299	2.7942

Tabelle 2.3: Iterationsprolongation der Platte

Die Spalten für Messwert und Messfehler geben an, wie gut die synthetisch erzeugten Messungen die gesuchten Daten approximieren. Die Spalte Fehlerwinkel zeigt die Richtungsabweichung der fortgesetzten Vektoren zu den gesuchten.

2.7.2 Schallproblem

Um die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Methoden am praktischen Beispiel zu demonstrieren, verwenden wir in diesem Abschnitt Messdaten, die uns freundlicherweise von der Professur für Mechatronik der Helmut-Schmidt-Universität⁹ unter der Leitung von Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. Delf Sachau zur Verfügung gestellt wurden.

Die Daten stammen aus der Diplomarbeit [Irm09], die im Rahmen der Entwicklung von Methoden zur Schallquellenortung mit Hilfe der inversen FEM entstand.

⁹Dies ist die Universität der Bundeswehr in Hamburg.

Präprozessing

Die zur Verfügung gestellten Daten bestanden aus sechs Paaren von jeweils einer identifizierten (fast) Resonanzfrequenz und den zugehörigen Schallamplituden und Phasenwinkeln an 180 definierten Messpunkten. Weiterhin war ein auf 91 705 Knoten diskretisiertes Masse-/Steifigkeits-System des vermessenen Schallinnenraums gegeben.

Definition 4 (baryzentrische Interpolation):

Wir betrachten ein Simplex S in n Dimensionen — also ein von $n + 1$ Eckpunkten: $x_i \in \mathbb{R}^n$, $i = 1, \dots, n + 1$ aufgespanntes Polytop, welches in keinem n -dimensionalen affinen Unterraum enthalten ist (siehe z. B. [Nak90, Kapitel 3.2]). Es gibt dann (bis auf Normierung) eindeutige sogenannte *baryzentrischen Koordinaten* α_i , $i = 1, \dots, n + 1$ eines Punktes $p \in \mathbb{R}^n$ die definitionsgemäß

$$p \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i = \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i x_i$$

beziehungsweise

$$p = \frac{\sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i x_i}{\sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i}$$

erfüllen. Hiermit definieren wir

$$f(p) := \frac{\sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i f(x_i)}{\sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i}$$

als die (lineare) baryzentrische Interpolation einer Funktion f am Punkt p .

Anmerkung: In [BT04] ist eine detaillierte Analyse dieser Interpolation abgehandelt.

Die notwendigen Schritte lassen sich wie folgt gliedern:

1. Zunächst musste die Matrix $\tilde{G} \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ mit $n := 91\,705$ und $\ell := 180$ konstruiert werden: Jede Spalte g_i , $i = 1, \dots, \ell$ entspricht einer Messung. Sofern die Position eines Messpunktes genau auf einen Gitterknoten fällt, wird die zugehörige Vektorkomponente in g_i gleich eins gesetzt — eine Anwendung dieses Vektors selektiert also den Wert an der Stelle. Für zwischen den Gitterknoten liegenden Messpositionen entnimmt man die Koeffizienten nach Triangulierung¹⁰ aus Definition 4. Wir bestimmen die normierte baryzentrische Koordinate der Messposition bezogen auf die Eckpunkte des zugehörigen Simplex (aus der Triangulierung). Diese Koeffizienten tragen wir an den durch die Simplex-Eckpunkte gegebenen Stellen in den zugehörigen Vektor g_i ein: Durch diesen Vektor wird mit dem (euklidischen) inneren Produkt eine Konvexkombination gebildet.
2. In einem weiteren Schritt müssen die reellen Schwingungsamplituden aus den Messwerten extrahiert werden. Eine ausführliche Behandlung dieser Frage ist in [FM95, speziell Kapitel 4.3] zu finden. Im vorliegenden Fall treten jedoch Phasenwinkel auf, die den

¹⁰Die Zerlegung eines Gebietes in Simplexes wird Triangulierung genannt.

in der Referenz genannten Anforderungen widersprechen, und somit wird eine eigene Methode verwandt:

Da im Resonanzfall alle Knoten gleichphasig schwingen würden und Messungen von Resonanzen betrachtet werden, wird für alle Messwerte jeder gemessenen Schwingung der gemeinsame Phasenwinkel ermittelt, um den diese zur (normierten) Maximierung des Realteils¹¹ gedreht werden müssen.

Der Vorteil dieser Methode wird in Tabelle 2.4 deutlich: Es sind die Winkel¹² zwischen den Vektoren der exakten Messungen und den Vektoren der mit den unterschiedlichen Methoden erzeugten reellen Messungen aufgeführt. Der kleinste Winkel wird jeweils mit der hier formulierten Methode (rechte Spalte) erreicht.

Eben dieser optimierte Realteil wird fortan als Messung M genutzt. Die Berechnung dieser Werte erfolgt mit Beobachtung 8.

Beobachtung 8:

Für einen komplexen Vektor $m \in \mathbb{C}^k$ wird für

$$-\frac{\pi}{2} < \phi = \frac{-\arg(m^T m)}{2} < \frac{\pi}{2}$$

der Ausdruck $\|\Re(me^{i\phi})\|_2$ maximal.

Beweis von Beobachtung 8:

Um den gegebenen Ausdruck zu maximieren, kann gleichwertig auch

$$f(\phi) := 4 \|\Re(me^{i\phi})\|_2^2$$

maximiert werden. Hierfür gilt

$$f(\phi) = (me^{i\phi} + \bar{m}e^{-i\phi})^T (me^{i\phi} + \bar{m}e^{-i\phi})$$

oder ausmultipliziert

$$f(\phi) = m^T me^{2i\phi} + \bar{m}^T \bar{m}e^{-2i\phi} + m^T \bar{m} + \bar{m}^T m$$

und für die Ableitungen

$$f'(\phi) = 2i (m^T me^{2i\phi} - \bar{m}^T \bar{m}e^{-2i\phi})$$

und

$$f''(\phi) = -4 (m^T me^{2i\phi} + \bar{m}^T \bar{m}e^{-2i\phi}).$$

¹¹Die Norm des Realteilvektors wird maximiert.

¹²Zur besseren Veranschaulichung haben wir diese im Gradmass angegeben.

Sei nun $\mu := \arg(m^T m)$ so gewählt¹³, dass $\mu \in (-\pi, \pi)$, so gilt für $\hat{\phi} := \frac{-\mu}{2} \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$

$$f'(\hat{\phi}) = 2i(m^T m e^{2i\hat{\phi}} - \bar{m}^T \bar{m} e^{-2i\hat{\phi}}).$$

Mit der Abkürzung $\rho := |m^T m|$ erhalten wir

$$f'(\hat{\phi}) = 2i(\rho e^{i\mu} e^{2i\hat{\phi}} - \rho e^{-i\mu} e^{-2i\hat{\phi}})$$

und durch Nutzung der Beziehung zwischen μ und $\hat{\phi}$ dann

$$f'(\hat{\phi}) = 2i(\rho - \rho) = 0,$$

so dass bei $\hat{\phi}$ ein stationärer Punkt vorliegt. Dieser ist wegen

$$\begin{aligned} f''(\hat{\phi}) &= -4(\rho e^{i\mu} e^{2i\hat{\phi}} + \rho e^{-i\mu} e^{-2i\hat{\phi}}) \\ &= -4(\rho + \rho) = -8\rho < 0 \end{aligned}$$

ein lokales Maximum. ■

Messung	Betrag mit Kosinus-Vorzeichen	komplexe Transformation	Maximierung des Realteils
1	13.430	12.156	11.937
2	10.811	8.360	8.110
3	83.372	68.419	39.639
4	52.150	17.234	10.591
5	76.688	76.289	76.261
6	21.689	16.072	16.006

Tabelle 2.4: Wir bewerten die „Qualität“ der reellen Messungen durch den Fehlerwinkel (aus Gründen der Anschaulichkeit im Gradmaß) zwischen den extrahierten Messdaten und der exakten Messungen (mittels G) der exakten Eigenvektoren.

- Nach diesen Schritten existieren reelle Messungen M und eine Matrix \tilde{G} , die transponiert angewandt auf einen beliebigen Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ die Messung simuliert:

$$\tilde{m}_x := \tilde{G}^T x$$

Wird nun hierzu einer verallgemeinerte QR -Zerlegung

$$\tilde{G} = GR, \quad G^T B^{-1} G = I$$

¹³Das ist in vielen Programmiersprachen genau so implementiert.

ermittelt, folgt somit

$$\tilde{m}_x = R^T G^T x$$

und damit

$$m_x := R^{-T} \tilde{m}_x = G^T x. \quad (2.39)$$

Es kann also eine B^{-1} -orthogonale Messmatrix G ermittelt werden, die angewandt auf einen Vektor die Messung simuliert. Die vorhandenen Messungen müssen also gemäß Gleichung 2.39 umgerechnet werden.

Die Qualität der approximativ optimalen Gewichtung (mit $\tilde{w} = 1e - 5$ erzeugt) aus diesem Verfahren ist in Abbildung 2.4 zu erkennen: Die ermittelten Gewichtungen sind mittels der diamantenförmigen Markierungen in den blauen Plots der Fehlergröße $\left\| (A - \lambda B) \frac{u}{\|u\|_{B\lambda}} \right\|_{B^{-1}}$ über der logarithmischen Gewichtung $\log_{10}(w)$ dargestellt. Die Abschätzung ist grün und die Approximation dieser ist rot dargestellt.

Der Plot unten links zeigt die Korrelation der prolongierten mit den gesuchten Vektoren.

Eine numerische Bewertung der Ergebnisse ist in Tabelle 2.5 notiert. Wir bewerten die fortgesetzten Vektoren gemäß des eingeschlossenen Winkels zu dem jeweils gesuchten Eigenvektor. Wir erkennen für die dritte, vierte und sechste Messung trotz geringer Messfehler-

Messung	Messwert [Hz]	Eigenfrequenz [Hz]	Messfehler	Fehlerwinkel [°]
1	102	85.7502	0.0097	0.3058
2	178	171.5013	0.0067	1.6195
3	198	188.4631	0.0301	21.6868
4	218	207.0548	0.0086	1.5585
5	262	254.8176	0.0464	79.3889
6	266	257.2544	0.0130	11.7273

Tabelle 2.5: Iterationsprolongation des Schalldrucks

Der hier angegebene Fehlerwinkel zwischen den gesuchten und den fortgesetzten Vektoren ist ein „Gütekriterium“. Der Vollständigkeit halber wurden die jeweils zugehörigen Messwerte, gesuchten Eigenwerte und Messfehler η_v mit angegeben.

Werte große Richtungsabweichung in der Spalte der Fehlerwinkel.

Zusätzlich zeigen wir in Tabelle 2.6 mit den Rayleigh-Quotienten und den zugehörigen Schranken nach Krylov-Bogoliubov, dass zu den fortgesetzten Vektoren ebenfalls gute Näherungen der gesuchten Eigenwerte gehören. Lediglich in einem Fall (markiert mit †) ist der approximierte Eigenwert nicht der gesuchte.

Messung	Rayleigh-Quotient [Hz]	rel. Unschärfe	Eigenfrequenz [Hz]
1	85.7541	0.0236	85.7502
2	171.5173	0.0073	171.5013
3	188.6764	0.0713	188.4631
4	207.0485	0.0135	207.0548
↯ 5	257.1740	0.0038	↯ 254.8176
6	257.1536	0.0053	257.2544

Tabelle 2.6: Iterationsprolongation des Schalldrucks

Die „Güte“ der approximativen Eigenwerte wird durch den zugehörigen Rayleigh-Quotient und die angegebene relative Unschärfe im Vergleich zum gesuchten Eigenwert verdeutlicht. Die erwähnte Unschärfe wurde mit Hilfe der Schranke von Krylov-Bogoliubov ermittelt.

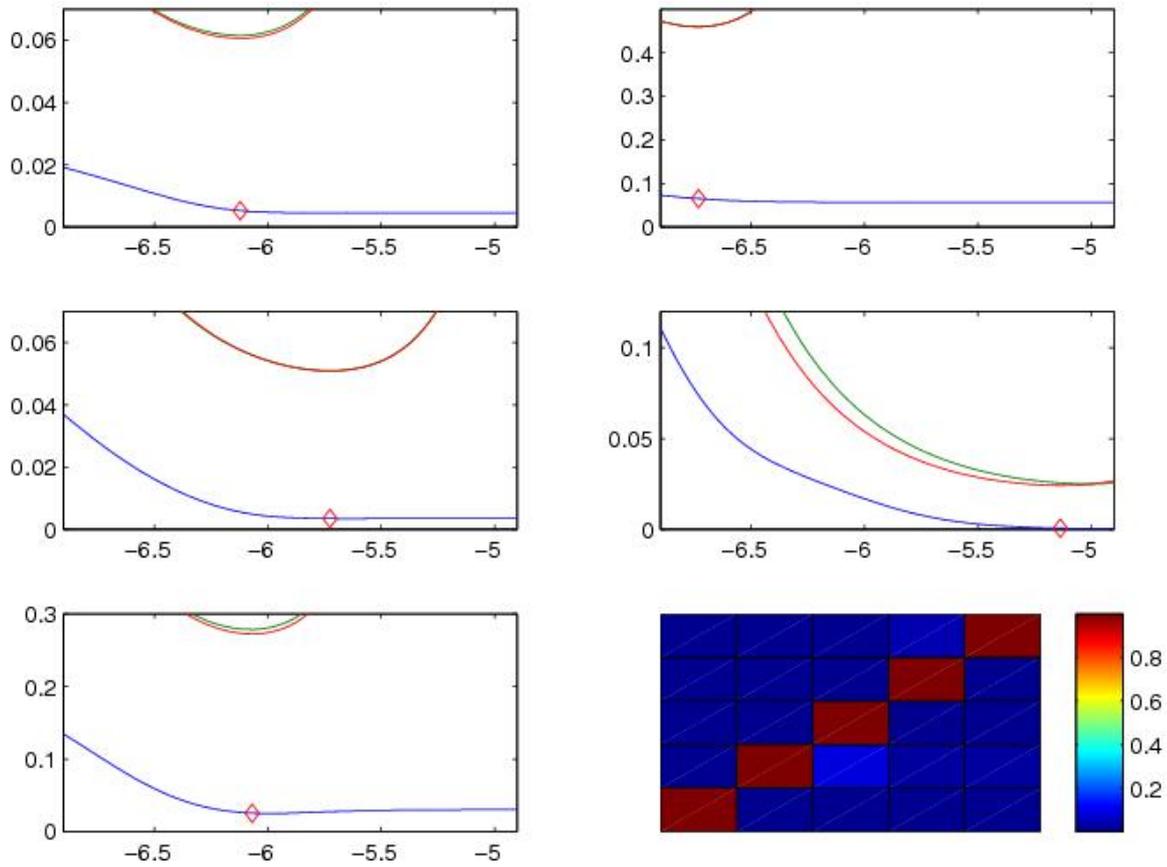


Abbildung 2.3: Iterationsprolongation Platte

Aufgetragen sind in grün die Abschätzung, in rot die Taylor-Approximation der Abschätzung und in blau die B -Norm der relativen Fehlergröße $B^{-1} (A - \lambda B) \frac{u}{\|u\|_B \lambda}$ über der logarithmischen Gewichtung $\log_{10}(w)$. Die diamantförmigen Markierungen zeigen die approximativ ermittelte optimale Gewichtung.

Unten rechts ist die Korrelation der fortgesetzten Vektoren mit den gesuchten Eigenvektoren dargestellt.

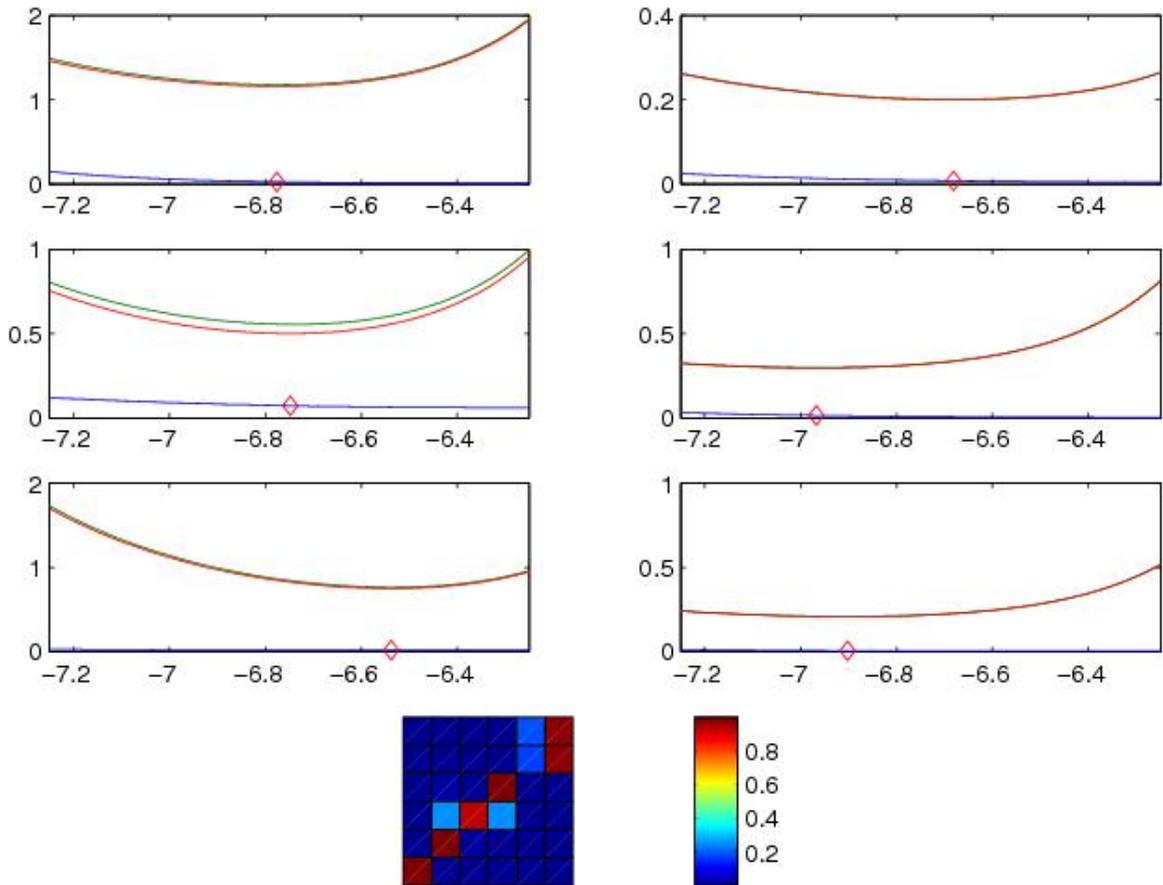


Abbildung 2.4: Iterationsprolongation Schallproblem:

In der Abbildung sind in den oberen sechs Darstellungen für jeden gesuchten Eigenwert, die exakte relative Fehlergröße $\left\| (A - \lambda B) \frac{u}{\|u\|_B} \right\|_{B^{-1}}$ über der logarithmischen Gewichtung $\log_{10}(w)$ in blau zu finden. Die Abschätzung dieser Größe gemäß Gleichung 2.15 wurde in grün eingezeichnet. Die für die Suche nach der optimalen Gewichtung genutzte Approximation ist rot. Die sich ergebenden optimalen Gewichtungen sind durch die Diamanten gekennzeichnet. Darunter zeigt ein Korrelationsplot (im B -inneren Produkt) die Eigenschaften der fortgesetzten Vektoren.

Kapitel 3

Iteration

Nach der Fortsetzung der Messinformationen aus Kapitel 2 stehen nun für alle $i = 1, \dots, \ell$ zu den erwähnten Messdaten $\mu_i \in \mathbb{R}$ und $m_i \in \mathbb{R}^k$ Näherungsvektoren $u_i \in \mathbb{R}^n$ zur Verfügung. Im Regelfall wird mit diesen Näherungsvektoren das Block-Residuum

$$R := AU - BU\xi$$

für die zusammengesetzten Matrizen

$$U := \begin{bmatrix} u_1 & \cdots & u_\ell \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$$

und

$$\xi := \begin{bmatrix} \mu_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \mu_\ell \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$$

nicht verschwinden, denn sonst wären bereits ℓ Eigenpaare gefunden.

Wir untersuchen in diesem Kapitel Methoden, mit denen die Matrizen U und ξ durch erneutes Einbringen der Vorinformationen verbessert werden.

Diese Verbesserungen seien im Folgenden die Korrekturmatriizen $Y \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ (bestehend aus den Spaltenvektoren $y_i, i = 1, \dots, \ell$) und $\Gamma \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$, mit denen

$$A(U + Y) = B(U + Y)(\xi + \Gamma) \tag{3.1}$$

erfüllt wird. Diese sind nicht eindeutig festgelegt. Wir versprechen uns jedoch von der Suche nach Lösungen dieser Gleichung, mit kleinem Y und Γ , die dicht bei U und ξ liegenden Eigenpaare zu finden.

Anmerkung: Wir erlauben auch Außerdiagonalelemente in Γ , da hierdurch die kommenden Algorithmen blockartig arbeiten und somit den gesamten durch die Spalten von U aufgespannten Unterraum berücksichtigen können.

Zur Bestimmung von Eigenpaaren des ursprünglichen Problems ist nur noch das Lösen des speziellen Eigenwertproblems in

$$(\xi + \Gamma)v = \lambda v$$

nötig.

Definition 5:

Wir nennen Gleichung 3.1 Bestimmungsgleichung für einen invarianten Unterraum; der durch die Spalten von $U + Y$ aufgespannte Raum ist invariant unter $B^{-1}A$.

Zur Verwendung der Messinformationen ist es zweckmäßig, eine angemessene Forderung an die Korrektur $y_i \in \mathbb{R}^n$ unserer vorliegenden Approximation $u_i \in \mathbb{R}^n$ zu stellen. Hierzu kombinieren wir die längenunabhängige Messbedingung $G^T(u_i + y_i) \in \text{span}\{m_i\}$ mit der in Abbildung 1.4 durch die Orthogonalität veranschaulichten Forderung $\|G^T y_i\|_2 \stackrel{!}{=} \min$. Wir erhalten die Gleichung

$$G^T y_i = \frac{m_i^T G^T u_i}{m_i^T m_i} m_i - G^T u_i. \quad (3.2)$$

Für die Verwendung in den Algorithmen definieren wir

$$q_i := \left(\frac{m_i m_i^T}{m_i^T m_i} - I \right) G^T u_i \quad (3.3)$$

und können mit der Matrix Q der Spalten q_i die Blockbedingung

$$G^T Y = Q \quad (3.4)$$

formulieren.

Die mathematische Literatur ([Kos89, OR70, Sch84, Saa03, DH08, Vog01]) enthält diverse Methoden zum Lösen nichtlinearer Probleme. Vielfach werden Newton-Methoden eingesetzt.

Wir untersuchen eine derartige Methode zum Lösen der in Y und Γ nichtlinearen Bestimmungsgleichung 3.1 in Abschnitt 3.1.

Wir greifen in Unterabschnitt 3.1.1 die Block-Newton-Rayleigh-Quotienten-Iteration von Hubert Schwetlick (aus [LST98] beziehungsweise [SS01]) auf. Wir werden diese Iteration in Unterabschnitt 3.1.2 so anpassen, dass die Messinformationen gemäß Gleichung 3.2 genutzt werden können.

Die erwähnten Newton-Methoden haben gemeinsam, dass in jedem Iterationsschritt für jeden Näherungseigenwert ein Gleichungssystem mit einer anderen Matrix aus dem $\mathbb{R}^{n \times n}$ gelöst werden muß. Es bietet sich zur Vermeidung dieses numerischen Aufwands an, das Problem mit Hilfe der Sehnemethode zu lösen. Diese ist auch als vereinfachtes Newton-Verfahren oder Chord-Methode bekannt.

Wir setzen diese Idee in Abschnitt 3.2 leicht abgewandelt ein, da die (berandete) Struktur der auftretenden Gleichungen es ohne deutlichen numerischen Mehraufwand ermöglicht, einen Teil weiterhin exakt zu lösen. Die aus dieser Idee resultierenden Änderungen der obigen Algorithmen sind in den Unterabschnitten 3.2.1 und 3.2.2 vorgenommen worden.

Ein anderer Ansatz zum Lösen des Problems aus der Bestimmungsgleichung 3.1 sind Fixpunkt-Iterationen, die wir in Abschnitt 3.3 behandeln.

In der Arbeit [SW80] haben H. J. Symm und J. H. Wilkinson eine Fixpunktiteration für ein approximatives Eigenpaar eines speziellen Eigenwertproblems erklärt, für die geometrische Konvergenz gezeigt werden kann. Wir haben diese Iteration an das allgemeine Eigenwertproblem angepaßt und für die gleichzeitige Iteration mehrerer approximativer Eigenpaare — ähnlich wie in der Arbeit [DMW83] (hier als numerisch stabile Implementation der Newton-Methode bezeichnet) von J. J. Dongarra, C. B. Moler und J. H. Wilkinson — verallgemeinert. Weiterhin wird die ursprünglich für eine Vektorkomponente enthaltene Normierungsbedingung so generalisiert, dass allgemeine Bedingungen, die sich als inneres Produkt schreiben lassen, eingebracht werden können.

Wir werden je nach Anzahl der Vorinformationen entweder einen eindeutigen Fall wie in Unterabschnitt 3.3.1 oder wie in Unterabschnitt 3.3.2 einen überbestimmten betrachten.

Bei den hier erwähnten nicht Newton'schen Methoden fällt auf, dass die Resultate jeweils in einem rationalen Krylov-Raum (wie von Axel Ruhe in seinen diversen Arbeiten eingeführt) liegen. Es werden in jedem Iterationsschritt etliche neue Suchrichtungen bestimmt — aber außer einer ausgewählten Linearkombination werden alle anderen verworfen. In Abschnitt 3.4 gehen wir darauf ein, die berechneten Richtungen weiter zu nutzen. Derartige Methoden sind Verallgemeinerungen des sogenannten Arnoldi- (siehe [Arn51]) oder des Lanczos-Verfahrens (siehe [Lan50]).

Wir werden in Unterabschnitt 3.4.2 einen Algorithmus für Block-Rationale-Krylov-Räume formulieren. Es zeigt sich zudem in Unterabschnitt 3.4.3, dass wir mit der Idee, die zu erhaltenden Richtungen mit Hilfe der vorliegenden Messinformationen auszuwählen, eine neue Lock-and-Purge-Strategie¹ für Blöcke definieren können.

3.1 Block-Newton-Iteration

In diesem Abschnitt werden zwei verschiedene Newton-Verfahren zum Lösen der Gleichung 3.1 nach dem gesamten Block Y und Γ — sogenannte Block-Newton-Verfahren — eingesetzt. Entsprechend der Grundidee von Newton-Methoden wird die Gleichung bei U und Ξ linearisiert; der quadratische Term YT wird vernachlässigt.

Das Verfahren in Unterabschnitt 3.1.1 ist aus diversen Veröffentlichungen (siehe dort angeführte Referenzen) bekannt, während das Verfahren aus dem Unterabschnitt 3.1.2 hier neu eingeführt wird.

3.1.1 Die Methode nach Schwetlick

Dieses Verfahren ist als Block-Rayleigh-Quotienten-Iteration bekannt, da das Verfahren auch als Minimierung der Rayleigh-Quotienten verstanden werden kann.

Die Verwendung dieses Verfahrens scheint vielversprechend zu sein. In [Fat98] zeigt Jean-Luc Fattebert lokal quadratische Konvergenz. Hubert Schwetlick gelingt es auf Basis der Verallgemeinerung nach [LST98] kubische Konvergenz (vgl. gewöhnliche Newton-Verfahren) zu zeigen².

Wir wandeln das gegebene Verfahren für das allgemeine Eigenwertproblem aus Gleichung 2.1 ab. Wir benötigen hierzu die

Definition 6 (allgemeine Winkelmessung):

Zu zwei B -orthogonalen Matrizen $U \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ und $V \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ und einer zu V B -orthogonalen Matrix $W \in \mathbb{R}^{n \times (n-\ell)}$: $\begin{bmatrix} V & W \end{bmatrix}^T B \begin{bmatrix} V & W \end{bmatrix} = I \in \mathbb{R}^{n \times n}$ definieren wir

$$\sin_B \angle(U, V) := \left\| U^T B W \right\|_2.$$

Anmerkung: Wenn wir auf die Matrizen U , V und W die Transformationen anwenden, mit denen das Eigenwertproblem $Av = Bv\lambda$ in das spezielle Eigenwertproblem $\tilde{A}\tilde{v} = \tilde{v}\lambda$ überführt wird, erhalten wir die (euklidisch-)orthogonalen

¹Mit solchen Methoden wird die Größe der Iterationsbasis handhabbar gehalten.

²Details sind dem Vortrag [SS01] des GAMM-Workshops „Numerical Linear Algebra 2001“ in Berlin zu entnehmen.

Matrizen $\tilde{U} = B^{\frac{1}{2}}U$, $\tilde{V} = B^{\frac{1}{2}}V$ und $\tilde{W} = B^{\frac{1}{2}}W$. Betrachten wir nun den definierten Ausdruck, so erhalten wir

$$\sin_B \angle(U, V) = \|\tilde{U}^T \tilde{W}\|_2 = \sin \angle(\tilde{U}, \tilde{W}).$$

Der zu dem Sinuswert aus Definition 6 gehörige Winkel $\angle(U, V)$, ist gleich dem Winkel zwischen den für das spezielle Eigenwertproblem transformierten Spaltenvektoren in U und V .

Die Gleichung 3.1 soll mittels einer Newton-Methode in den Unbekannten Y und Γ gelöst werden. Wie in den genannten Artikeln sollen die verbesserten Vektoren $U + Y$ eine Normierungsbedingung — hier $W^T B(U + Y) = I$ — für ein gegebenes $W \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ erfüllen. Es ergeben sich die Gleichungen

$$AY - BY\xi - BU\Gamma = -AU + BU\xi \quad (3.5)$$

$$W^T BY = I - W^T BU \quad (3.6)$$

die ein Sylvestersystem³ in Y sind. Mit den Annahmen, dass ξ diagonal ist und dass die Spalten von U bereits die Normierungsbedingung ($W^T BU = I$) erfüllen, können die Gleichungen 3.5 und 3.6 für alle Spalten $i = 1, \dots, \ell$ als

$$\begin{bmatrix} A - B\mu_i & -BU \\ W^T B & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_i \\ \gamma_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(A - B\mu_i) u_i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

gelesen werden. Diese Gleichungssysteme sind, sofern die Schurkomplemente

$$K := W^T B(A - B\mu_i)^{-1} BU$$

regulär sind, eindeutig lösbar. Wir nehmen an, dass sich die Näherungen $U \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ der gesuchten Eigenvektoren $V_1 \in \mathbb{R}^{n \times \ell} : V_1^T B V_1 = I$ mit den verbleibenden Eigenvektoren $V_2 \in \mathbb{R}^{n \times (n-\ell)} : V_2^T B V_2 = I$, einer regulären Matrix $X \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$ und einer Matrix $F \in \mathbb{R}^{(n-\ell) \times \ell} = V_2^T B U$ als

$$U = V_1 X + V_2 F \quad (3.8)$$

schreiben lassen. Mit den Diagonalmatrizen D_1 und D_2 der jeweils zu V_1 und V_2 zugehörigen Eigenwerte gilt dann

$$K = W^T B V_1 (D_1 - \mu_i I)^{-1} X + W^T B V_2 (D_2 - \mu_i I)^{-1} F.$$

Isolieren wir nun V_1 in Gleichung 3.8 und setzen dies ein, erhalten wir

$$\begin{aligned} K &= W^T B U X^{-1} (D_1 - \mu_i I)^{-1} X + W^T B V_2 (D_2 - \mu_i I)^{-1} F \\ &\quad - W^T B V_2 F X^{-1} (D_1 - \mu_i I)^{-1} X. \end{aligned}$$

Mit der Normierungsannahme $W^T BU = I$ erhalten wir

$$\begin{aligned} K &= X^{-1} (D_1 - \mu_i I)^{-1} X \\ &\quad + W^T B V_2 \left((D_2 - \mu_i I)^{-1} F - F X^{-1} (D_1 - \mu_i I)^{-1} X \right). \end{aligned}$$

³Ein Problem in X der Form $AX + XB = C$ wird Sylvestersystem genannt.

Wir klammern aus und gelangen zu der Darstellung

$$K = \left(I + W^T B V_2 \left((D_2 - \mu_i I)^{-1} F X^{-1} (D_1 - \mu_i I) X - F \right) \right) X^{-1} (D_1 - \mu_i I)^{-1} X.$$

Mit $\delta := \left\| (D_1 - \mu_i I)^{-1} \right\|_2 = \left\| X^{-1} (D_1 - \mu_i I)^{-1} X \right\|_2$, $\gamma := \frac{1}{\left\| (D_2 - \mu_i I)^{-1} \right\|_2}$ und der Annahme $\left\| W^T B V_2 \right\|_2 \left\| F \right\|_2 \left(\frac{\delta}{\gamma} + 1 \right) < 1$ ergibt dies

$$\frac{1}{\left\| K^{-1} \right\|_2} \geq \frac{1}{\delta} \left(1 - \left\| W^T B V_2 \right\|_2 \left\| F \right\|_2 \left(\frac{\delta}{\gamma} + 1 \right) \right).$$

Mit Hilfe von Definition 6 gelangen wir zu der anschaulichen Darstellung

$$\frac{1}{\left\| K^{-1} \right\|_2} \geq \frac{1}{\delta} \left(1 - \sin_B \angle (W, V_1) \sin_B \angle (U, V_1) \left(\frac{\delta}{\gamma} + 1 \right) \right).$$

Mit der Annahme

$$\sin_B \angle (W, V_1) \sin_B \angle (U, V_1) \left(\frac{\delta}{\gamma} + 1 \right) < 1 \quad (3.9)$$

ist die Existenz von K^{-1} gesichert. Wir erhalten dann aus Gleichung 3.7 die Lösungen

$$\begin{aligned} \gamma_i &= \left(W^T B (A - B\mu_i)^{-1} B U \right)^{-1} W^T B u_i \\ u_i + y_i &= (A - B\mu_i)^{-1} B U \gamma_i \end{aligned}$$

Im Sinne einer Iteration kann im nächsten Schritt der Vorteil, dass Ξ diagonal ist, jedoch nicht ausgenutzt werden, da im Allgemeinen die γ_i auch Außerdiagonalaufdatierungen liefern werden.

Um dieses Problem zu umgehen, wird in der neu ermittelten Basis $U + Y$ ein Rayleigh-Ritz-Schritt durchgeführt, wodurch eine neue Diagonalmatrix der approximativen Eigenwerte entsteht. Insbesondere ist dieser Schritt durch geschickte Nutzung von Γ mit geringem numerischen Aufwand durchführbar. Dies ist die von Hubert Schwetlick in [LST98] genutzte Verallgemeinerung.

Lemma 9:

Wir betrachten das Eigenwertproblem aus Gleichung 2.1. Es seien die Spalten von $U \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ B -orthogonale, linear unabhängige Approximationen der Eigenvektoren und die entsprechenden Einträge der Diagonalmatrix seien Approximationen an die zugehörigen Eigenwerte.

Wird ein Schritt des Verfahrens gemäß Gleichung 3.7 mit der Gewichtung $W = U$ ausgeführt, so gilt mit der B -orthogonalen QR-Zerlegung $\hat{U} R = (U + Y)$ der aufdatierten Spalten die Aussage

$$\hat{U}^T A \hat{U} = R \Xi R^{-1} + R^{-T} \Gamma R^{-1}. \quad (3.10)$$

Anmerkung: Die zu einem Rayleigh-Ritz-Schritt nötige Projektion auf den Spaltenraum von $U + Y$ ist durch die Identität in Gleichung 3.10 aus Lemma 9 mit geringem numerischen Aufwand (ohne Operationen auf dem \mathbb{R}^n) zu ermitteln.

Beweis von Lemma 9:

Für $W = U$ kann $A(U + Y)$ in der Gleichung

$$\hat{U}^T A \hat{U} = \hat{U}^T A (U + Y) R^{-1}$$

gemäß Gleichung 3.5 ersetzt werden:

$$\begin{aligned} \hat{U}^T A \hat{U} &= \hat{U}^T (B(U + Y) \Xi + BU\Gamma) R^{-1} \\ &= \hat{U}^T (B\hat{U}R\Xi + BU\Gamma) R^{-1} \\ &= \hat{U}^T B\hat{U}R\Xi R^{-1} + R^{-T} (U + Y)^T BU\Gamma R^{-1}. \end{aligned}$$

Da \hat{U} per Konstruktion B -orthogonal ist, ergibt dies zusammen mit der Normierungsbedingung aus Gleichung 3.6 dann

$$\hat{U}^T A \hat{U} = R\Xi R^{-1} + R^{-T} \Gamma R^{-1}$$

■

Wir können den Algorithmus mit dem jeweils i -ten Einheitsvektor e_i wie folgt zusammenfassen:

- Starte mit B -orthogonalem U und diagonalem Ξ
- Iteriere bis zur Konvergenz
 - $H_R = BU$
 - Lösen der Newton-Gleichung für alle i
 - * $H_L = (A - B\mu_i)^{-1} H_R$
 - * $\gamma_i = (H_R^T H_L)^{-1} e_i$
 - * $u_i + y_i = H_L \gamma_i$
 - Bilden der B -orthogonalen QR-Zerlegung: $\hat{U}R = U + Y$
 - vollständiges Lösen des speziellen Eigenwertproblems (in V und D)

$$(R\Xi R^{-1} + R^{-T} \Gamma R^{-1}) V = VD$$

- Aufdatieren der Näherungen: $U \leftarrow \hat{U}V, \Xi \leftarrow D$

3.1.2 Die Methode mit Messinformationen

Das Verfahren in Unterabschnitt 3.1.1 berücksichtigt für die Iteration — zumindest im ersten Schritt — die Messungen μ_i der Eigenwerte. Es wird diese Methode hier derart verallgemeinert, dass auch die Messungen m_i der Eigenvektoren berücksichtigt werden.

Die Grundidee ist folgende: Die Normierungsbedingung (in Gleichung 3.6) wird durch die Messbedingung (Gleichung 3.2) ersetzt.

Wir setzen $k \geq \ell$ und $G^T (A - \mu_i B)^{-1} BU \in \mathbb{R}^{k \times \ell}$ für alle i spaltenregulär für $U \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ und $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ voraus.

Mit diesen Annahmen wird das Residuum der Gleichung 3.5 in der B^{-1} -Norm⁴ unter der Nebenbedingung $G^T Y = Q$ (aus Gleichung 3.4) minimiert. Mit dem Vektor l_i der Lagrange-Parameter erhalten wir für alle $i = 1, \dots, \ell$ mit den Abkürzungen $S_i := (A - \mu_i B)$ die Gleichungssysteme

$$\begin{bmatrix} S_i B^{-1} S_i & -S_i U & G \\ -U^T S_i & U^T B U & 0 \\ G^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_i \\ \gamma_i \\ l_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -S_i B^{-1} S_i u_i \\ U^T S_i u_i \\ q_i \end{pmatrix}.$$

Diese können äquivalent auch als

$$\begin{bmatrix} S_i & -B U & B S_i^{-1} G \\ -U^T S_i & U^T B U & 0 \\ G^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_i \\ \gamma_i \\ l_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -S_i u_i \\ U^T S_i u_i \\ q_i \end{pmatrix}$$

dargestellt werden. Durch Blockelimination können die Gleichungen mit den Spaltenvektoren

$$m_{\alpha i} := \frac{m m^T}{m^T m} G^T u_i, i = 1, \dots, \ell$$

in

$$\begin{bmatrix} I & -S_i^{-1} B U & S_i^{-1} B S_i^{-1} G \\ 0 & 0 & U^T B S_i^{-1} G \\ 0 & G^T S_i^{-1} B U & -G^T S_i^{-1} B S_i^{-1} G \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_i \\ \gamma_i \\ l_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u_i \\ 0 \\ m_{\alpha i} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

überführt werden.

Es bietet sich an, eine Fallunterscheidung anhand der Einträge der zweiten Matrix-Zeile durchzuführen:

1. $G^T S_i^{-1} B U$ regulär, $k = \ell$:

Es folgt direkt, dass alle Lagrange-Parameter $l_i = 0$ sein müssen und Gleichung 3.5 exakt erfüllt werden kann. Die zweite Zeile und dritte Spalte kann gestrichen werden und es bleibt das Problem

$$\begin{bmatrix} I & -S_i^{-1} B U \\ 0 & G^T S_i^{-1} B U \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_i \\ \gamma_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u_i \\ m_{\alpha i} \end{pmatrix}$$

mit den Lösungen

$$\begin{aligned} \gamma_i &= (G^T S_i^{-1} B U)^{-1} m_{\alpha i} \\ u_i + y_i &= S_i^{-1} B U \gamma_i. \end{aligned}$$

2. $G^T S_i^{-1} B U$ (nur) spaltenregulär, $k > \ell$:

Das Gleichungssystem muss vollständig gelöst werden; die Lösung minimiert die Norm des Residuums aus Gleichung 3.5.

⁴Die Wahl dieser Norm ergibt sich durch den Vergleich mit einem Residuenvektor eines speziellen Eigenwertproblems.

Mit der Abkürzung $H := (G^T S_i^{-1} B S_i^{-1} G)^{-1}$ (die nach dem Interlacing-Theorem existiert, da G spaltenregulär und $S_i^{-1} B S_i^{-1}$ symmetrisch positiv definit ist) erhalten wir durch Umschreiben der ersten Unbekannten zu $u_i + y_i$ aus Gleichung 3.11 dann

$$\begin{bmatrix} I & -S_i^{-1} B U & S_i^{-1} B S_i^{-1} G \\ 0 & 0 & U^T B S_i^{-1} G \\ 0 & G^T S_i^{-1} B U & -H^{-1} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_i + y_i \\ \gamma_i \\ l_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ m_{\alpha i} \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Wir nutzen die Abkürzungen $H_l := S_i^{-1} B U$ und $H_r := H_l^T G H G^T$. Nach einem Gauß-Schritt erhalten wir

$$\begin{bmatrix} I & -H_l & S_i^{-1} B S_i^{-1} G \\ 0 & H_r H_l & 0 \\ 0 & -H G^T H_l & I \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_i + y_i \\ \gamma_i \\ l_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ H_r B^{-1} G m_{\alpha i} \\ -H m_{\alpha i} \end{pmatrix}.$$

Da $H_r H_l$ nach analoger Begründung wie oberhalb für H regulär ist, führt dies zu den Lösungen

$$\begin{pmatrix} H_l (H_r H_l)^{-1} H_r B^{-1} G m_{\alpha i} - S_i^{-1} B S_i^{-1} G l_i \\ (H_r H_l)^{-1} H_r B^{-1} G m_{\alpha i} \\ H G^T (H_l (H_r H_l)^{-1} H_r - I) B^{-1} G m_{\alpha i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_i + y_i \\ \gamma_i \\ l_i \end{pmatrix}.$$

Notiert man $H_l (H_r H_l)^{-1} H_r$ und $S_i^{-1} B S_i^{-1} G H G^T$ als die schiefwinkligen Projektoren \mathcal{P} und \mathcal{Q} , so lesen sich die Lösungen als

$$\begin{pmatrix} u_i + y_i \\ \gamma_i \\ l_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I - (I - \mathcal{Q})(I - \mathcal{P}) \\ (H_r H_l)^{-1} H_r \\ H G^T (\mathcal{P} - I) \end{pmatrix} B^{-1} G m_{\alpha i}.$$

Wir zeigen als nächstes, wie auch hier für die Iteration die Verallgemeinerungsidee mit geschickter (numerisch günstiger) Rayleigh-Ritz-Methode angewandt werden kann. In diesem Fall ist eine Galerkin-Bedingung nötig, die Orthogonalität des Residuums auf einem vom Ansatzraum verschiedenen Raum fordert.

Sei zunächst $Q := M_\alpha - G^T U$ die Matrix der verbleibenden Messinformationen und F die aus den Spalten

$$f_i := S_i^{-1} G l_i, \quad i = 1, \dots, \ell$$

gebildete Matrix.

Mit einer GG^T -orthogonalen Zerlegung⁵ $\hat{U} R = U + Y$, $\hat{U}^T G G^T \hat{U} = I$, die existiert, wenn $G^T (U + Y)$ spaltenregulär⁶ ist, ergibt dies

$$\hat{U}^T G G^T B^{-1} A \hat{U} = \hat{U}^T G G^T B^{-1} A (U + Y) R^{-1}.$$

Durch Nutzen der ersten Zeile aus Gleichung 3.12 erhalten wir

$$\hat{U}^T G G^T B^{-1} A \hat{U} = \hat{U}^T G G^T B^{-1} (B (U + Y) (\Xi + \Gamma) - B Y \Gamma - B F) R^{-1}$$

⁵Die Zerlegung ist vergleichbar mit einer QR-Zerlegung.

⁶Dann sind die Vektoren $G^T (u_i + y_i)$, $i = 1, \dots, \ell$ linear unabhängig.

und nach Ausmultiplizieren und Nutzen der speziellen Orthogonalität von \hat{U} ergibt dies

$$\hat{U}^T G G^T B^{-1} A \hat{U} = R(\Xi + \Gamma) R^{-1} - R^{-T} M_\alpha^T (Q\Gamma + G^T F) R^{-1}.$$

Die Berechnung des vorderen Terms ist mit nur geringem numerischen Aufwand verbunden, da die auftretenden Matrizen lediglich aus $\mathbb{R}^{\ell \times \ell}$ sind. Der vordere Summand des hinteren Terms ist nur im ersten Iterationsschritt präsent — da in den weiteren Schritten $G^T Y = Q = 0$ gilt. Im Fall $k = \ell$ ist $F = 0$ und somit entfällt der letzte Summand. Ansonsten ist dieser zu ermitteln.

Insofern legt dies die Rayleigh-Ritz-Approximation nahe, Vektoren \tilde{u} in dem Spaltenraum von \hat{U} und passende Eigenwertapproximationen $\tilde{\mu}$ zu suchen, deren Residuum $A\tilde{u} - B\tilde{\mu}$ bezüglich $G G^T B^{-1}$ zu \hat{U} orthogonal ist.

Die ungewöhnliche Zerlegung ist der B -orthogonalen Zerlegung sehr ähnlich, da $G G^T = B^{\frac{1}{2}} \left(B^{-\frac{1}{2}} G G^T B^{-\frac{1}{2}} \right) B^{\frac{1}{2}}$ gilt und der eingeklammerte Ausdruck lediglich ein Projektor ist.

Nun können wir auch für Messnebenbedingungen anstelle der Normierung einen Algorithmus formulieren:

- Starte mit B -orthogonalem U und diagonalem Ξ
- Bestimmen von M_α und Q
- Iteriere bis zur Konvergenz
 - Lösen der Newton-Gleichung für alle Spalten i
 - * γ_i, u_i und l_i bestimmen
 - * i . Spalte $f_i = (A - B\mu_i)^{-1} G l_i$ von F errechnen
 - Bilden der $G G^T$ -orthogonalen QR-Zerlegung: $\hat{U} R = U + Y$
 - Lösen des speziellen Eigenwertproblems

$$[V, D] = \text{eig} \left(R(\Xi + \Gamma) R^{-1} - R^{-T} M_\alpha^T (Q\Gamma + G^T F) R^{-1} \right)$$

- Aufdatieren der Näherungen: $U \leftarrow \hat{U} V, \Xi \leftarrow D$
- nach dem ersten Schritt $Q = 0$ setzen (bzw. in den folgenden Schritten nicht mehr berücksichtigen)

3.2 Die Chord-Methoden

Die Methoden aus Abschnitt 3.1 haben einen wesentlichen Punkt gemeinsam: In jedem Iterationsschritt wird für jede Spalte wieder ein (in der Regel) neues Gleichungssystem gelöst. Die Vermutung liegt nahe, dass bei hinreichend guten Näherungen der Eigenwerte der numerische Aufwand nicht gerechtfertigt ist.

Die sogenannte Chord-Methode⁷ vereinfacht die Newton-Iteration, indem die Inverse der Ableitung nur zum Iterationsstart ermittelt wird. Alle weiteren Schritte werden mit dieser iteriert (entspricht schrittweise der gleichen Steigung — wie im Sehnungsverfahren).

⁷Eindimensional ist diese Methode genau das sogenannte Sehnungsverfahren.

Wir verwenden diese Grundidee hier, um die Algorithmen aus Abschnitt 3.1 abzuwandeln. Da in beiden Algorithmen die (vom Spaltenindex i abhängige) Systemmatrix $A - \mu_i B$ berandet auftaucht, wird die Chord-Methode insofern verallgemeinert, als dass nur die Systemmatrix nicht neu ermittelt wird — die in der Matrix auftretenden Berandungen werden in jedem Schritt aufdatiert.

3.2.1 Die Chord-Schwetlick-Methode

In Unterabschnitt 3.1.1 ist das Problem bereits blockweise gelöst worden. An dieser Stelle wird nun lediglich die Systemmatrix nicht mit iteriert. Dies zieht jedoch die Konsequenz mit sich, dass die aufdatierten Eigenwertnäherungen (außer für das Ergebnis bei Konvergenz) nicht verwendet werden. Insofern ist dies eher eine abgewandelte Block-Inverse-Iteration.

- Starte mit B -orthogonalem U und diagonalem Ξ
- Ermittle für alle i eine Zerlegung Z_i von $A - B\mu_i$
- Iteriere bis zur Konvergenz
 - $H_R = BU$
 - Lösen der Newton-Gleichung \forall Spalten i
 - * $H_L = Z_i^{-1}H_R$
 - * $\gamma_i = \left(H_R^T H_L\right)^{-1} H_R^T u_i$
 - * $u_i + y_i = H_L \gamma_i$
 - Aufdatieren der Näherungen: $U \leftarrow U + Y$
- Bilden der B -orthogonalen QR-Zerlegung: $\hat{U}R = U$
- Lösen des speziellen Eigenwertproblems

$$[V, D] = \text{eig} \left(R\Xi R^{-1} + R^{-T}\Gamma R^{-1} \right)$$

- Aufdatieren der Näherungen: $U \leftarrow \hat{U}V, \Xi \leftarrow D$

3.2.2 Die Chord-Block-Newton-Methode mit Messungen

Wir verwenden die Blocklösungen aus Unterabschnitt 3.1.2 und iterieren mit spaltenweise konstanter Systemmatrix. Wie in Unterabschnitt 3.2.1 kann die Lösung des Eigenwertproblems entfallen. Dies ergibt zusammengefasst diesen Algorithmus:

- Starte mit B -orthogonalem U und diagonalem Ξ
- Bestimmen von M_α und Q
- Ermittle für alle i eine Zerlegung Z_i von $A - B\mu_i^{(0)}$
- Ermittle für alle i die Hilfsmatrix $H_i = Z_i^{-1}BZ_i^{-1}G$

- Ermittle für alle i die Hilfsmatrix $h_i = (G^T H_i)^{-1}$
- Iteriere bis zur Konvergenz
 - Lösen der Newton-Gleichung für alle Spalten i
 - * $H_L = Z_i^{-1} B U$
 - * $H_R = H_L^T G h_i G^T$
 - * $\gamma_i = (H_R H_L)^{-1} H_L^T G h_i m_\alpha$
 - * $l_i = h_i G^T H_L \gamma_i - h_i m_\alpha$
 - * $u_i + y_i = H_L \gamma_i - H_i l$
 - Aufdatieren der Näherungen: $U \leftarrow U + Y$
 - nach dem ersten Schritt $Q = 0$ setzen (bzw. in den folgenden Schritten nicht mehr berücksichtigen)
- Bilden der GG^T -orthogonalen QR-Zerlegung: $\hat{U}R = U$
- Bilden von F aus allen Spalten $f_i = Z_i^{-1} G l$
- Lösen des speziellen Eigenwertproblems

$$[V, D] = \text{eig} \left(R (\Xi + \Gamma) R^{-1} - R^{-T} M_\alpha^T (Q\Gamma + G^T F) R^{-1} \right)$$
- Aufdatieren der Näherungen: $U \leftarrow \hat{U}V, \Xi \leftarrow D$

3.3 Fixpunktiteration

Die bisher betrachteten Methoden aus Abschnitt 3.1 und Abschnitt 3.2 berücksichtigen jeweils nur einen linearisierten Anteil der Gleichung 3.1. In diesem Abschnitt hier soll nun auch der nichtlineare Teil berücksichtigt werden.

Wir gehen zu diesem Zweck wie in den Arbeiten [SW80] und [DMW83] vor: Die in den Unbekannten nichtlineare Matrix-Gleichung über mehrere Spalten (also einen Block) wird mit Hilfe einer Fixpunktiteration gelöst.

Wir haben dieses Vorgehen an das allgemeine Eigenwertproblem angepasst und so verallgemeinert, dass anstelle der sonst enthaltenen Normierungskriterien auch vorliegende Messungen von Eigenpaaren genutzt werden können.

Wir gehen von Gleichung 3.1 aus und sortieren diese nach linearem Auftreten der Unbekannten Y und Γ . Wir erhalten

$$AY - BY\Xi - BUT = BU\Xi - AU + BY\Gamma.$$

Unter Berücksichtigung der Messbedingung aus Gleichung 3.2 mit den Spalten q_i der Matrix Q aus Gleichung 3.3 erhalten wir das für $k > l$ überbestimmte Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} A - B\mu_i & -BU \\ G^T & O \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_i^{(p+1)} \\ \gamma_i^{(p+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(A - B\mu_i) u_i \\ q_i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} BY^{(p)} \gamma_i^{(p)} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

in Iterationsform über den Index p .

Die Gleichung 3.13 ist für alle Spalten i zu erfüllen und besteht jeweils aus $n + k$ skalaren Gleichungen für $n + \ell$ skalare Unbekannte.

Wie bereits bei den Newton-Methoden unterscheiden wir den Fall $k = \ell$, den wir in Unterabschnitt 3.3.1 behandeln, und den Fall $k > \ell$, dem wir uns in Unterabschnitt 3.3.2 widmen.

3.3.1 Verallgemeinerung der Normierung durch Messinformationen

In diesem Unterabschnitt betrachten wir die Lösungen von Gleichung 3.13 für $k = \ell$. Mit $S_i := (A - \mu_i B)^{-1} B$ ist dieser Fall für reguläre $G^T S_i U$ eindeutig bestimmt; dies kann mittels der Forderung aus Gleichung 3.9 gesichert werden.

Anmerkung: Sofern die Messvektoren m_i , $i = 1, \dots, \ell$ linear unabhängig sind, können wir die Messung als Verallgemeinerung der Normierung betrachten.

Die Lösung des Problems lautet

$$\begin{aligned} \gamma_i^{(p+1)} &= \left(G^T S_i U\right)^{-1} \left(q_i + G^T \left(u_i - S_i Y^{(p)} \gamma_i^{(p)}\right)\right) \\ &= \left(G^T S_i U\right)^{-1} \left(m_{\alpha i} - G^T S_i Y^{(p)} \gamma_i^{(p)}\right) \\ u_i + y_i^{(p+1)} &= S_i \left(Y^{(p)} \gamma_i^{(p)} + U \gamma_i^{(p+1)}\right). \end{aligned}$$

Mit diesen Gleichungen können somit alle Spalten der gesuchten Aufdatierungsmatrizen Y und Γ schrittweise ermittelt werden. Wir gehen davon aus, dass die in U enthaltenen Startnäherungen bestmöglich sind, und initialisieren die Aufdatierungen mit $Y = 0$ und $\Gamma = 0$.

Da die S_i unabhängig von dem Iterationsindex p sind, bietet es sich an, diese in jedem Schritt benötigten Matrizen vorab zu zerlegen, um den numerischen Aufwand gering zu halten.

Konvergenz der Fixpunkt-Iteration

In [SW80] wird ein Beweis geführt, der zeigt, dass die Fixpunkt-Iteration für die Lösung der dortigen Matrix-Gleichung (zur Berechnung eines invarianten Unterraums) geometrisch konvergiert.

Wir verallgemeinern diesen Beweis für das zu lösende Problem in

$$\begin{bmatrix} A - B\mu_i & -BU \\ G^T & O \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_i^{(p+1)} \\ \gamma_i^{(p+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(A - B\mu_i) u_i \\ q_i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} BY^{(p)} \gamma_i^{(p)} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Mit Hilfe der Abkürzung $r_i := -(A - B\mu_i) (u_i + B^{-1} G q_i)$ und einer Koordinatentransformation überführen wir das Problem in die Form

$$\begin{bmatrix} A - B\mu_i & -BU \\ G^T & O \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_i^{(p+1)} - B^{-1} G q_i \\ \gamma_i^{(p+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_i \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} BY^{(p)} \gamma_i^{(p)} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Diese bietet den Vorteil, dass die untere Blockzeile eine homogene Nebenbedingung darstellt, so dass wir das folgende Lemma 10 nutzen können.

Anmerkung: Die Koordinatentransformation kann anschaulich gedeutet werden: Es wird ein Teil der Aufdatierung $y_i^{(p+1)}$ schon vor der Rechnung an u_i angebracht. Dieser Teil lautet $B^{-1}Gq_i$ und sorgt dafür, dass die verbleibende Aufdatierung $y_i^{(p+1)} - B^{-1}Gq_i$ verschwindend unter der Messmatrix G gewählt werden kann. Gemäß der Definition aus Gleichung 3.3 sind die q_i ohnehin sehr klein, wenn die Anfangsapproximationen u_i gut mit der Messbedingung übereinstimmen. Weiterhin erhalten wir durch Einsetzen

$$u_i + B^{-1}Gq_i = \left(I - B^{-1}GG^T \right) u_i + B^{-1}Gm_{\alpha i}$$

und können daraus erkennen, dass mit diesem Schritt lediglich derartige Korrekturen an u_i angebracht werden, durch die die Messbedingung erfüllt wird. Die nicht messbaren Richtungen in u_i bleiben unverändert.

Mit dieser Erklärung ist zu erkennen, dass $u_i + B^{-1}Gq_i$ bei hinreichend guten Messinformationen eine gute Approximation an die gesuchte Eigenrichtung ist. Damit wird $\|r_i\|_{B^{-1}}$ ebenfalls klein sein.

Lemma 10:

Gegeben sei ein lineares Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} S & N \\ G^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

mit $S \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $N \in \mathbb{R}^{n \times m}$ und $G \in \mathbb{R}^{n \times m}$, wobei $\text{rang}(G) = m = \text{rang}(N)$ gelte. Mit $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sei weiterhin $G^T B^{-1} G = I$ erfüllt. Dazu sei $x \in \mathbb{R}^n$, $c \in \mathbb{R}^n$ und $y \in \mathbb{R}^m$. Das in Gleichung 3.16 genannte Gleichungssystem ist mit $h := x + B^{-1}Gy$ äquivalent zu

$$\begin{bmatrix} S \left(I - B^{-1}GG^T \right) + NG^T \\ G^T \end{bmatrix} h = \begin{pmatrix} c \\ y \end{pmatrix}.$$

Anmerkung: Sofern $G^T S^{-1} N$ regulär ist, existiert für symmetrische B die Inverse von $S \left(I - B^{-1}GG^T \right) + NG^T$ und wir können

$$h = \left(S \left(I - B^{-1}GG^T \right) + NG^T \right)^{-1} c$$

ermitteln. Wir erhalten dann $y = G^T h$ und $x = -B^{-1}Gy$. Die Existenzbehauptung folgt aus diesen Schlüssen: Sofern

$$S \left(I - B^{-1}GG^T \right) + NG^T$$

regulär ist, ist auch

$$SB^{-\frac{1}{2}} \left(I - B^{-\frac{1}{2}}GG^T B^{-\frac{1}{2}} \right) + NG^T B^{-\frac{1}{2}}$$

regulär. Äquivalent ist dann auch

$$SB^{-\frac{1}{2}} \left(I - B^{-\frac{1}{2}}GG^T B^{-\frac{1}{2}} \right) B^{-\frac{1}{2}} S^T + N \underbrace{G^T B^{-\frac{1}{2}} B^{-\frac{1}{2}} G}_{I} N^T$$

invertierbar. Die beiden Summanden sind symmetrisch positiv semidefinit. Angenommen, die Summe wäre singulär, so müsste ein $0 \neq x \in \mathbb{R}^n$ existieren, mit dem

$$x^T S B^{-\frac{1}{2}} \left(I - B^{-\frac{1}{2}} G G^T B^{-\frac{1}{2}} \right) B^{-\frac{1}{2}} S^T x + x^T N N^T x$$

verschwindet. Aus dem ersten Summanden folgt, dass ein $0 \neq h \in \mathbb{R}^m$ existieren muss, mit dem dann $S^T x = Gh$ gilt. Damit auch der zweite Summand verschwinden könnte, müsste das Produkt $G^T S^{-1} N$ singulär sein — und dies ist durch die Regularitätsforderung ausgeschlossen.

Beweis von Lemma 10:

Es gilt

$$G^T x = 0 \Leftrightarrow B^{-1} G G^T x = 0 \Leftrightarrow \left(I - B^{-1} G G^T \right) x = x.$$

Somit kann das Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} S & N \\ G^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ 0 \end{pmatrix}$$

äquivalent in

$$\begin{bmatrix} S \left(I - B^{-1} G G^T \right) & N \\ G^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ 0 \end{pmatrix}$$

umgeformt werden. Mit der Voraussetzung $G^T B^{-1} G = I$ ergibt dies

$$\begin{bmatrix} S \left(I - B^{-1} G G^T \right) & N G^T \\ G^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ B^{-1} G y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Nach Addition von $S \left(I - B^{-1} G G^T \right) B^{-1} G y = 0$ in der ersten Zeile erhalten wir

$$\begin{bmatrix} S \left(I - B^{-1} G G^T \right) & N G^T \\ G^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x + B^{-1} G y \\ B^{-1} G y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ y \end{pmatrix}.$$

Wegen $G^T x = 0 \Leftrightarrow N G^T x = 0$ gilt auch

$$\begin{bmatrix} S \left(I - B^{-1} G G^T \right) & N G^T \\ G^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x + B^{-1} G y \\ x + B^{-1} G y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ y \end{pmatrix}.$$

Mit $h = x + B^{-1} G y$ erhalten wir die äquivalente Darstellung

$$\begin{bmatrix} S \left(I - B^{-1} G G^T \right) & N G^T \\ G^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} h \\ h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c \\ y \end{pmatrix}$$

und durch Zusammenfassen dann

$$\left[S \left(I - B^{-1} G G^T \right) + N G^T \right] h = \begin{pmatrix} c \\ y \end{pmatrix}.$$

■

Wir nutzen Lemma 10 und schreiben für alle n die Gleichungen 3.15 mit jeweils nur einer unbekanntem Variablen

$$h_i^{(n)} := y_i^{(n)} - B^{-1}Gq_i + B^{-1}G\gamma_i^{(n)} \in \mathbb{R}^n$$

und den Gleichungen

$$G^T h_i^{(n)} = \gamma_i^{(n)}.$$

und

$$(I - B^{-1}GG^T) h_i^{(n)} = y_i^{(n)} - B^{-1}Gq_i. \quad (3.17)$$

Wir erhalten damit die Gleichung

$$\left((A - B\mu_i) (I - B^{-1}GG^T) - BUG^T \right) h_i^{(p+1)} = r_i + BY^{(p)}\gamma_i^{(p)}. \quad (3.18)$$

Fassen wir die so gebildeten Vektoren $h_i^{(p)}$ zu einer Matrix

$$H^{(p)} := \begin{bmatrix} h_1^{(p)} & \dots & h_\ell^{(p)} \end{bmatrix}$$

zusammen, erfüllt diese mit Q aus Gleichung 3.4

$$Y^{(p)} = (I - B^{-1}GG^T) H^{(p)} + B^{-1}GQ.$$

Wir schreiben die Iterationsmatrizen als

$$C_i := (A - B\mu_i) (I - B^{-1}GG^T) - BUG^T.$$

Gemäß der Anmerkung zu Lemma 10 werden diese C_i durch die Forderung, dass die Matrizen $G^T S_i U$ regulär sind, invertierbar sein.

Anmerkung: Sofern der Spaltenraum von U gute Approximationen an die gesuchten Eigenrichtungen zu μ_i enthält, kann dies wohl angenommen werden: Die „fast-Singularität“ in $A - B\mu_i$ wird durch BUG^T sozusagen regularisiert.

Mit der Matrix $H^{(p)}$ kann die Gleichung 3.18 dann als

$$C_i h_i^{(p+1)} = r_i + B \left((I - B^{-1}GG^T) H^{(p)} + B^{-1}GQ \right) G^T h_i^{(p)}$$

notiert werden.

Zur genaueren Analyse benötigen wir weitere Abkürzungen:

$$\epsilon_i \rho_i := C_i^{-1} r_i \quad \text{mit } \rho_i \in \mathbb{R}^n : \|\rho_i\|_B = 1, \epsilon_i > 0$$

$$\kappa_i := \left\| B^{\frac{1}{2}} C_i^{-1} B^{\frac{1}{2}} \right\|_2$$

$$\Upsilon_i := \|q_i\|_2$$

$$\epsilon := \max_i \epsilon_i \quad (3.19)$$

$$\kappa := \max_i \kappa_i \quad (3.20)$$

$$\Upsilon := \max_i \Upsilon_i \quad (3.21)$$

$$\bar{h}^{(p)} := \max_i \left\| h_i^{(p)} \right\|_B \quad (3.22)$$

Für die Abschätzungen der auftretenden Matrizen benötigen wir

Lemma 11 (Idee aus [HJ85] Seiten 313 und 314):

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ und $a_i \in \mathbb{R}^n, i = 1, \dots, \ell$ ihre Spaltenvektoren, so gilt

$$\|A\|_2 \leq \sqrt{\ell} \max_i \|a_i\|_2.$$

Beweis von Lemma 11:

Es gilt

$$\|A\|_2 = \max_{v \neq 0} \frac{\|Av\|_2}{\|v\|_2} = \max_{v \neq 0} \frac{\|\sum_i a_i v_i\|_2}{\|v\|_2}.$$

Wir nutzen die Dreiecksungleichung und erhalten

$$\|A\|_2 \leq \max_{v \neq 0} \frac{\sum_i \|a_i v_i\|_2}{\|v\|_2} = \max_{v \neq 0} \frac{\sum_i \|a_i\|_2 |v_i|}{\|v\|_2} \leq \max_{v \neq 0} \max_j \|a_j\|_2 \frac{\sum_i |v_i|}{\|v\|_2}.$$

Sei nun

$$s := \text{sgn}(v) \in \mathbb{R}^\ell$$

der Vorzeichenvektor von v , so gilt

$$\|A\|_2 \leq \max_j \|a_j\|_2 \max_{v \neq 0} \frac{s^T v}{\|v\|_2}$$

und wir erhalten mit Hilfe der Cauchy-Schwarz-Ungleichung

$$\|A\|_2 \leq \max_j \|a_j\|_2 \max_{v \neq 0} \frac{\|s\|_2 \|v\|_2}{\|v\|_2} = \max_j \|a_j\|_2 \|s\|_2 \leq \sqrt{\ell} \max_j \|a_j\|_2. \quad \blacksquare$$

Es gilt definitionsgemäß

$$\|H^{(p)}\|_{B,2} = \|B^{\frac{1}{2}} H^{(p)}\|_2$$

und daraus nach Lemma 11

$$\|H^{(p)}\|_{B,2} \leq \sqrt{\ell} \max_i \|B^{\frac{1}{2}} h_i^{(p)}\|_2 = \sqrt{\ell} \bar{h}^{(p)}. \quad (3.23)$$

Für die Iteration gilt dann

$$h_i^{(p+1)} = \epsilon_i \rho_i + C_i^{-1} B \left((I - B^{-1} G G^T) H^{(p)} + B^{-1} G Q \right) G^T h_i^{(p)}. \quad (3.24)$$

Mit den Startdaten $H^{(0)} = 0$ kann nun die Iteration ausgeführt werden.

Um die Konvergenz dieser Iteration zu zeigen, beweisen wir in Satz 6 zunächst die Existenz einer Schranke für $\|h^{(p)}\|_B$.

Satz 6:

Es seien die Voraussetzungen aus Unterabschnitt 3.3.1 erfüllt. Wir nutzen die Abkürzungen aus Gleichung 3.19, Gleichung 3.20 und Gleichung 3.21. Die Ausdrücke

$$c_1 := 1 - \kappa \Upsilon \sqrt{\ell}$$

und

$$c_2 := \frac{\kappa\sqrt{\ell}\epsilon}{(1 - \kappa\Upsilon\sqrt{\ell})^2} = \frac{\kappa\sqrt{\ell}\epsilon}{c_1^2}$$

mögen sowohl

$$0 < c_1 \leq 1$$

als auch

$$c_2 < \frac{1}{4}$$

erfüllen. Sei hierzu α die kleinere Lösung von

$$\alpha = (1 + c_2\alpha)^2 \tag{3.25}$$

so erfüllen die gemäß Gleichung 3.24 iterierten Variablen die Abschätzung

$$\|h_i^{(p)}\|_B \leq \frac{\epsilon\sqrt{\alpha}}{c_1}. \tag{3.26}$$

Anmerkung: Die Voraussetzung an c_1 führt grob gesprochen zu lokaler Konvergenz: Die enthaltenen Konstanten sind ein Maß für die Güte der Startdaten in U und Ξ . Sind diese gut genug, das bedeutet dicht genug an den gesuchten Eigenpaaren, so konvergiert das Verfahren.

Beweis von Satz 6:

Wir beweisen zunächst durch Induktion, dass

$$\|h_i^{(p)} - \epsilon_i\rho_i\|_B \leq \frac{\epsilon}{c_1} (1 - c_1 + \alpha c_2) \tag{3.27}$$

gilt. Wir beginnen bei $p = 0$ mit den Startdaten $H^{(0)} = 0$ und erhalten aus Gleichung 3.24

$$h_i^{(1)} = \epsilon_i\rho_i.$$

Hiermit ist die Behauptung in Gleichung 3.27 für den ersten Iterationsschritt erfüllt; dies ist der Induktionsanfang.

Wir zeigen nun, dass aus der Aussage in Gleichung 3.27 für $p = n$ die Aussage für $p = n + 1$ folgt. Zunächst erhalten wir aus der Dreiecksungleichung

$$\|h_i^{(n)}\|_B \leq \frac{\epsilon}{c_1} (1 - c_1 + \alpha c_2) + \epsilon = \frac{\epsilon}{c_1} (1 + \alpha c_2).$$

Mit Gleichung 3.25 ergibt dies

$$\|h_i^{(n)}\|_B \leq \frac{\epsilon}{c_1} \sqrt{\alpha}.$$

Gemäß der Definition aus Gleichung 3.22 gilt dann auch

$$\bar{h}^{(n)} \leq \frac{\epsilon}{c_1} \sqrt{\alpha}. \tag{3.28}$$

gelten. Zusätzlich untersuchen wir nun

$$d_i^{(n+1)} := \left\| h_i^{(n+1)} - \epsilon_i \rho_i \right\|_B.$$

Aus der Bestimmungsgleichung 3.24 erhalten wir

$$d_i^{(n+1)} = \left\| C_i^{-1} B \left((I - B^{-1} G G^T) H^{(n)} + B^{-1} G Q \right) G^T h_i^{(n)} \right\|_B.$$

Wir schreiben den Ausdruck zum Vereinfachen der Norm mit Hilfe des orthogonalen Projektors

$$\mathcal{P}_G := B^{-\frac{1}{2}} G G^T B^{-\frac{1}{2}}$$

als

$$d_i^{(n+1)} = \left\| B^{\frac{1}{2}} C_i^{-1} B^{\frac{1}{2}} \left((I - \mathcal{P}_G) B^{\frac{1}{2}} H^{(n)} + B^{-\frac{1}{2}} G Q \right) G^T B^{-\frac{1}{2}} B^{\frac{1}{2}} h_i^{(n)} \right\|_2.$$

Die Submultiplikativität liefert zusammen mit der Dreiecksungleichung und den Abkürzungen aus den Gleichungen 3.19, 3.20 und 3.21

$$d_i^{(n+1)} \leq \kappa \left(\left\| H^{(n)} \right\|_{B,2} + \|Q\|_2 \right) \left\| h_i^{(n)} \right\|_B.$$

Mit Gleichung 3.23 erhalten wir dann

$$d_i^{(n+1)} \leq \kappa \sqrt{\ell} \left(\bar{h}^{(n)} + \Upsilon \right) \bar{h}^{(n)}. \quad (3.29)$$

Wir setzen nun Gleichung 3.28 ein und notieren

$$d_i^{(n+1)} \leq \kappa \sqrt{\ell} \left(\frac{\epsilon^2}{c_1^2} \alpha + \frac{\epsilon}{c_1} \sqrt{\alpha} \Upsilon \right) = \frac{\epsilon}{c_1} \left(\frac{\kappa \sqrt{\ell} \epsilon}{c_1} \alpha + \kappa \sqrt{\ell} \Upsilon (1 + c_2 \alpha) \right).$$

Durch erneutes Nutzen der eingeführten Werte c_1 und c_2 erhalten wir

$$d_i^{(n+1)} \leq \frac{\epsilon}{c_1} (c_2 c_1 \alpha + (1 - c_1) (1 + c_2 \alpha)) = \frac{\epsilon}{c_1} (1 - c_1 + c_2 \alpha)$$

Wir haben hiermit die Gültigkeit von Gleichung 3.27 bewiesen. Die Aussage des Satzes ist durch Gleichung 3.28 ebenfalls bewiesen. \blacksquare

Hiermit gelingt es nun, die Konvergenz von $h_i^{(p)}$ gegen einen Grenzwert (Vektor) \hat{h}_i zu beweisen.

Satz 7:

Seien die Spalten $u_i \in \mathbb{R}^n$ der Matrix $U \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$ zusammen mit den Einträgen $\mu_i \in \mathbb{R}$ der Diagonalmatrix $\Xi \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$ Näherungen für Eigenpaare des allgemeinen Eigenwertproblems aus Gleichung 2.1.

Sei weiterhin $G \in \mathbb{R}^{n \times k}$ eine B^{-1} -orthogonale (Mess-)Matrix und liegen (ggf. fehlerbehaftete) Messungen der gesuchten Eigenrichtungen $v_i \in \mathbb{R}^n$ in $M \in \mathbb{R}^{k \times k}$ vor.

Die weiteren Größen $c_1 \in \mathbb{R}^+$, $c_2 \in \mathbb{R}^+$, $\epsilon \in \mathbb{R}^+$, $\kappa \in \mathbb{R}^+$ und $\Upsilon \in \mathbb{R}^+$ seien wie in Satz 6 und den Gleichungen 3.19, 3.20 und 3.21 definiert.

Wenn $k = \ell$ und die Voraussetzungen von Satz 6 gelten, dann konvergiert die Fixpunkt-Iteration gemäß Unterabschnitt 3.3.1 im Sinne von $\left\| h_i^{(n)} - \hat{h}_i \right\|_B$ geometrisch mit dem Konvergenzfaktor

$$\gamma = 1 - c_1 \sqrt{1 - 4c_2}$$

für alle Spalten i gegen die Lösung \hat{h}_i .

Anmerkung: Die Lösungsvektoren \hat{h}_i beinhalten gemäß Lemma 10 die Informationen \hat{y}_i und $\hat{\gamma}_i$ für einen invarianten Unterraum von $B^{-1}A$.

Beweis von Satz 7:

Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird auf den geschriebenen Index i verzichtet. Für zwei aufeinander folgende Iterationslösungen gilt

$$\begin{aligned} h^{(p+1)} &= \epsilon\rho + C^{-1}B \left((I - B^{-1}GG^T) H^{(p)} + B^{-1}GQ \right) G^T h^{(p)} \\ h^{(p)} &= \epsilon\rho + C^{-1}B \left((I - B^{-1}GG^T) H^{(p-1)} + B^{-1}GQ \right) G^T h^{(p-1)}. \end{aligned}$$

Somit ergibt sich für die Differenz

$$\delta^{(p+1)} := h^{(p+1)} - h^{(p)}$$

durch Einsetzen

$$\begin{aligned} \delta^{(p+1)} &= C^{-1}B \left(I - B^{-1}GG^T \right) \left(H^{(p)} G^T h^{(p)} - H^{(p-1)} G^T h^{(p-1)} \right) \\ &\quad + C^{-1}GQ \left(h^{(p)} - h^{(p-1)} \right). \end{aligned}$$

Mit analog definierten Differenzmatrizen

$$\Delta^{(p)} := H^{(p)} - H^{(p-1)}$$

erhalten wir dann

$$\begin{aligned} \delta^{(p+1)} &= C^{-1}B \left(I - B^{-1}GG^T \right) \\ &\quad \left(\left(H^{(p-1)} + \Delta^{(p)} \right) G^T \left(h^{(p-1)} + \delta^{(p)} \right) - H^{(p-1)} G^T h^{(p-1)} \right) \\ &\quad + C^{-1}GQ\delta^{(p)}. \end{aligned}$$

Vereinfachen liefert

$$\delta^{(p+1)} = C^{-1}B \left(I - B^{-1}GG^T \right) \left(H^{(p)} G^T \delta^{(p)} + \Delta^{(p)} G^T h^{(p-1)} \right) + C^{-1}GQ\delta^{(p)}.$$

Betrachten der B -Norm führt dann auf

$$\left\| \delta^{(p+1)} \right\|_B \leq \kappa\sqrt{\ell} \left(\bar{h}^{(p)} + \bar{h}^{(p-1)} + \Upsilon \right) \left\| \delta^{(p)} \right\|_B.$$

Mit Gleichung 3.26 erhalten wir

$$\left\| \delta^{(p+1)} \right\|_B \leq \underbrace{\kappa\sqrt{\ell} \left(2 \frac{\epsilon\sqrt{\alpha}}{1 - \kappa\Upsilon\sqrt{\ell}} + \Upsilon \right)}_{=: \gamma} \left\| \delta^{(p)} \right\|_B. \quad (3.30)$$

Wir benötigen hier eine explizite Darstellung des in Satz 6 genutzten α und ermitteln hierfür

$$\alpha = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - 4c_2}}{2c_2} \right)^2$$

Der Ausdruck in der Klammer ist nach den Voraussetzungen positiv und so setzen wir

$$\sqrt{\alpha} = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - 4c_2}}{2c_2} \right)$$

in γ aus Gleichung 3.30 ein. Wir nutzen zusätzlich die Definition von c_1 und erhalten

$$\gamma = \frac{2\epsilon\kappa\sqrt{\ell}}{c_1} \left(\frac{1 - \sqrt{1 - 4c_2}}{2c_2} \right) + 1 - c_1.$$

Mit der Definition von c_2 ergibt dies

$$\gamma = 2c_1c_2 \frac{1 - \sqrt{1 - 4c_2}}{2c_2} + 1 - c_1 = 1 - c_1\sqrt{1 - 4c_2}.$$

Gemäß der Voraussetzungen ist dieses $\gamma < 1$. Die Korrektur ist also eine geometrische Nullfolge und somit konvergiert die zugehörige Reihe. \blacksquare

3.3.2 Lösung des überbestimmten Problems: Es stehen mehr Messpunkte zur Verfügung, als für die Bestimmung des gesuchten Blocks nötig sind

Der im Vorherigen vorgestellte Algorithmus basiert auf der Annahme, dass die Matrix $G^T(A - B\mu_i)^{-1}BU$ für alle i regulär ist. Insbesondere muss somit gelten, dass G und U gleich viele Spalten haben. Dies ist sicherlich zu restriktiv.

Wir formulieren den Algorithmus hier so um, dass er auch genutzt werden kann, falls $G^T(A - B\mu_i)^{-1}BU$ für alle i (nur) spaltenregulär ist.

Auf die Notation der Spaltenindizes verzichten wir aus Gründen der Übersichtlichkeit. Seien alle Variablen wie in Unterabschnitt 3.3.1 so lösen wir anstelle des sonst überbestimmten Gleichungssystems 3.14 das Minimierungsproblem

$$\min_{\gamma, y: G^T y = q} \frac{1}{2} \left\| \begin{bmatrix} (A - B\mu_i) & -BU \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u + y \\ \gamma \end{pmatrix} - B\tilde{Y}\tilde{\gamma} \right\|_{B^{-1}}^2$$

mit Nebenbedingungen. Mit den Lagrange-Parametern in dem Vektor $l \in \mathbb{R}^k$ und der Abkürzung $S := (A - B\mu_i)$ lautet die notwendige Bedingung

$$\begin{bmatrix} SB^{-1}S & -SU & G \\ -U^T S & U^T BU & 0 \\ G^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y \\ \gamma \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S\tilde{Y}\tilde{\gamma} - SB^{-1}Su \\ U^T Su - U^T B\tilde{Y}\tilde{\gamma} \\ q \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

Nach Blockelimination erhalten wir die Darstellung

$$\begin{bmatrix} I & -S^{-1}BU & S^{-1}BS^{-1}G \\ 0 & 0 & U^T BS^{-1}G \\ G^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y \\ \gamma \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S^{-1}B\tilde{Y}\tilde{\gamma} - u \\ 0 \\ q \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

und erkennen in der zweiten Zeile, dass falls $U^T BS^{-1}G$ regulär ist, der Lagrange-Parametervektor $l = 0$ sein muss. Dieser Ansatz beinhaltet den vorherigen, denn durch Streichung der zweiten Zeile und letzten Spalte ist das verbleibende Gleichungssystem äquivalent zu

Gleichung 3.14.

Für die algorithmische Analyse hingegen wird Gleichung 3.31 mit den Variablen $z := y - B^{-1}Gq$ und $r := u + B^{-1}Gq$ zu

$$\begin{bmatrix} SB^{-1}S & -SU & G \\ -U^T S & U^T BU & 0 \\ G^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} z \\ \gamma \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S\tilde{Y}\tilde{\gamma} - SB^{-1}Sr \\ U^T Sr - U^T B\tilde{Y}\tilde{\gamma} \\ 0 \end{pmatrix}$$

umgeformt. Diese Form zeichnet sich durch die homogene Nebenbedingung (in der letzten Zeile) aus. Durch Einführen einer Hilfsvariable⁸ $h := z + B^{-1}Gl$ (mit den Eigenschaften $G^T h = l \wedge (I - B^{-1}GG^T)h = z$) kann das Problem als

$$\begin{bmatrix} SB^{-1}S(I - B^{-1}GG^T) + GG^T & -SU \\ -U^T S(I - B^{-1}GG^T) & U^T BU \end{bmatrix} \begin{pmatrix} h \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S\tilde{Y}\tilde{\gamma} - SB^{-1}Sr \\ U^T Sr - U^T B\tilde{Y}\tilde{\gamma} \end{pmatrix}$$

notiert werden. Das Vorgehen in der Anmerkung zu Lemma 10 zeigt, dass der linke obere Block der Matrix invertierbar ist, da $G^T S^{-1} B S^{-1} G$ regulär ist.

Durch die strukturelle Ähnlichkeit zu Gleichung 3.18 liegt die Vermutung nahe, dass bei entsprechenden Forderungen an die Matrix der linken Seite, die Iteration konvergieren wird. Bei Tests konnte diese Konvergenz bisher nicht sichergestellt werden.

3.4 Krylov-Unterraum-Verfahren

Die bisherigen Methoden haben gemein, dass nach jedem Iterationsschritt nur noch die Lösungen nicht aber die vorherigen Approximationen genutzt werden.

Bei den sogenannten Krylov-Raum-Methoden wird iterativ der Suchraum für die Lösungen vergrößert. Die Vorteile derartiger Verfahren sind bekannt und sollen auch hier genutzt werden.

3.4.1 Das rationale Krylov-Verfahren nach Ruhe

Dadurch, dass jedoch unterschiedliche Shifts (die Eigenwertnäherungen) vorliegen, ist das mit den klassischen Methoden (Arnoldi-Verfahren, Shift-Invert-Verfahren) so nicht möglich. Axel Ruhe hat in den Veröffentlichungen [Ruh84, Ruh94e, Ruh94d, Ruh95a, Ruh95b, RS98, Ruh98, Ruh00] die Krylov-Raum-Idee verallgemeinert: Während im klassischen Fall jedes Element des Krylov-Raumes als ein Polynom in dem Operator über dem Startvektor dargestellt werden kann, enthält der von Axel Ruhe definierte rationale Krylov-Raum die Elemente, die durch eine rationale Funktion in dem Operator (mit durch die Shifts vorgegebenen Polen) dargestellt werden können.

Die wesentliche Erkenntnis dieser Methode ist, dass ein Krylov-Raum über einer geshifteten inversen Matrix in einen Krylov-Raum über eine anders geshiftete inverse Matrix umgerechnet werden kann.

Hierdurch erwächst der Vorteil, dass ein bereits aufgebauter Unterraum auch für eine Iteration mit einem anderen Shift weiter verwendet werden kann.

⁸Diese Variable ist vergleichbar mit der in Gleichung 3.17.

3.4.2 Das Block-Rationale-Krylovraum-Verfahren

Informationen liegen häufig nicht nur als Vektor sondern als gesamter Block mehrerer Vektoren vor — so wie in dieser Arbeit die Matrix U der approximativen Eigenvektoren, die iterativ verbessert werden sollen. Eine rationale Iteration dafür wäre wünschenswert. In [EL97] haben Elfadel und Ling versucht, eine derartige Iteration einzuführen. Leider gelingt dort die Umrechnung der Unterrauminformationen nicht, so dass bei einem neuen Shift (siehe Algorithmus 1 der Arbeit) wieder über der Startblock iteriert wird.

In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass die Umrechnung durchaus möglich ist. Wir gehen zunächst davon aus, dass kein „Lucky-Breakdown“⁹ passiert.

Wir betrachten das Eigenwertproblem aus Gleichung 2.1 mit zusätzlich ℓ verschiedenen Shifts $\mu_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, \ell$ und einem B -orthogonalen Startblock $U \in \mathbb{R}^{n \times \ell}$.

Das Verfahren beginnt wie (siehe [DDRvdV00]) die Block-shift-invert-Arnoldi-Methode. Nach j Schritten existiert eine B -orthogonale Basis $U_{j+1} \in \mathbb{R}^{n \times (j+1)\ell}$ und eine obere Hessenbergmatrix¹⁰ $H_{j+1,j} \in \mathbb{R}^{(j+1)\ell \times n\ell}$. Mit der Untermatrix $U_j \in \mathbb{R}^{n \times j\ell}$, der vorderen Spalten von U_{j+1} ist die Rekursion

$$(A - \mu_1 B)^{-1} B U_j = U_{j+1} H_{j+1,j} \quad (3.33)$$

erfüllt.

Um diese Informationen für den nächsten Shift μ_2 nutzen zu können, wird die Rekursion umgerechnet.

Satz 8:

Für die Matrizen A, B mit Forderungen wie in Abschnitt 2.1 lasse sich die Rekursion der Block-invers-geshifteten Arnoldi-Methode mit dem Shift μ_1 als

$$(A - \mu_1 B)^{-1} B U_j = U_{j+1} H_{j+1,j}$$

notieren.

Sei weiterhin

$$Q_{j+1,j+1} R_{j+1,j} = K_{j+1,j}$$

die *vollständige* QR-Zerlegung von $K_{j+1,j} := I_{j+1,j} + (\mu_1 - \mu_2) H_{j+1,j}$ und P_j die Matrix der akkumulierten zeilenweise aufwärts angewandten Householder-Transformationen mit denen

$$Q_{j+1,j+1}^T H_{j+1,j} R_{j,j}^{-1} P_j$$

obere Hessenberggestalt hat.

Mit

$$\tilde{U}_{j+1} := U_{j+1} Q_{j+1,j+1} \begin{bmatrix} P & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}$$

und

$$\tilde{H}_{j+1,j} := \begin{bmatrix} P^T & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} Q_{j+1,j+1}^T H_{j+1,j} R_{j,j}^{-1} P_j$$

⁹Unter „Lucky-Breakdown“ wird die Situation verstanden, bei der der Algorithmus abbricht, weil bereits eine Lösung (fast) exakt ermittelt wurde.

¹⁰Bei einer Hessenbergmatrix ist maximal das rechte obere Dreieck und die erste Subdiagonale besetzt.

gilt nun

$$(A - \mu_2 B)^{-1} B \tilde{U}_{j+1} = \tilde{U}_{j+1} \tilde{H}_{j+1,j}$$

wobei die Spalten von \tilde{U} den selben Raum aufspannen, wie die Spalten von U .

Anmerkung: Der mit dem Shift μ_1 erzeugte rationale Krylov-Raum kann also in einen zu dem Shift μ_2 gehörigen rationalen Krylov-Raum umgerechnet werden.

Beweis von Satz 8:

Es gilt

$$BU_j = (A - \mu_1 B) U_{j+1} H_{j+1,j}$$

und durch beidseitigen Addition von $(\mu_1 - \mu_2) BU_{j+1} H_{j+1,j}$

$$BU_j + (\mu_1 - \mu_2) BU_{j+1} H_{j+1,j} = (A - \mu_2 B) U_{j+1} H_{j+1,j}.$$

Etwas lesbarer ist die Darstellung

$$BU_{j+1} \left(I_{j+1,j} + (\mu_1 - \mu_2) H_{j+1,j} \right) = (A - \mu_2 B) U_{j+1} H_{j+1,j}$$

und mit der Matrix $K_{j+1,j} = I_{j+1,j} + (\mu_1 - \mu_2) H_{j+1,j}$ wieder in Shift-Invert-Notation

$$(A - \mu_2 B)^{-1} BU_{j+1} K_{j+1,j} = U_{j+1} H_{j+1,j}. \quad (3.34)$$

Hier treten links und rechts obere Hessenbergmatrizen $K_{j+1,j}$ und $H_{j+1,j}$ auf. Prinzipiell können mit deren quadratischen Untermatrizen $K_{j,j} \in \mathbb{R}^{j^\ell \times j^\ell}$ und $H_{j,j} \in \mathbb{R}^{j^\ell \times j^\ell}$ durch Lösen des allgemeinen Eigenwertproblems in

$$H_{j,j} w = K_{j,j} w \lambda$$

Rayleigh-Ritz-Approximationen zu dem gegebenen Problem ermittelt werden.

Durch folgende Zeilen ist es jedoch möglich, die Rekursion aus Gleichung 3.34 in eine zu Gleichung 3.33 analoge umzuformen:

Begonnen wird mit einer (vollständigen) QR -Zerlegung von

$$K_{j+1,j} = Q_{j+1,j+1} R_{j+1,j},$$

die eingesetzt dann

$$(A - \mu_2 B)^{-1} BU_{j+1} Q_{j+1,j+1} \begin{bmatrix} R_{j,j} \\ 0 \end{bmatrix} = U_{j+1} H_{j+1,j}$$

liefert. Durch Rechtsmultiplikation mit $R_{j,j}^{-1}$ (diese Inverse existiert, sofern die Hessenbergmatrix $K_{j+1,j}$ unreduziert ist) erhalten wir

$$(A - \mu_2 B)^{-1} BU_{j+1} Q_{j+1,j} = U_{j+1} H_{j+1,j} R_{j,j}^{-1}.$$

Aus der äquivalenten Darstellung

$$(A - \mu_2 B)^{-1} BU_{j+1} Q_{j+1,j} = U_{j+1} Q_{j+1,j+1} Q_{j+1,j+1}^T H_{j+1,j} R_{j,j}^{-1}$$

erkennen wir, dass $Q_{j+1,j+1}^T H_{j+1,j} R_{j,j}^{-1}$ auf obere Hessenberggestalt gebracht werden muss, um der Struktur von Gleichung 3.33 zu gleichen. Mit Hilfe von zeilenweise aufwärts angewandten Householder-Transformationen kann dies geschehen. *Nur zur Notation* werden diese in der Matrix P_j „gesammelt“, so dass $Q_{j+1,j+1}^T H_{j+1,j} R_{j,j}^{-1} P_j$ obere Hessenberggestalt hat. Mit dieser Matrix P_j definieren wir die „neue“ Hessenbergmatrix

$$\tilde{H}_{j+1,j} := \begin{bmatrix} P^T & 0 \\ 0 & I_{j,j} \end{bmatrix} Q_{j+1,j+1}^T H_{j+1,j} R_{j,j}^{-1} P_j.$$

Mit Hilfe dieser schreiben wir nun

$$(A - \mu_2 B)^{-1} B U_{j+1} Q_{j+1,j} P = U_{j+1} Q_{j+1,j+1} \begin{bmatrix} P & 0 \\ 0 & I_{j,j} \end{bmatrix} \tilde{H}_{j+1,j}$$

so dass mit der „neuen“ B -orthogonalen Basis

$$\tilde{U}_{j+1} := U_{j+1} Q_{j+1,j+1} \begin{bmatrix} P & 0 \\ 0 & I_{j,j} \end{bmatrix}$$

dann die gewünschte Form

$$(A - \mu_2 B)^{-1} B \tilde{U}_{j+1} = \tilde{U}_{j+1} \tilde{H}_{j+1,j} \quad (3.35)$$

erreicht ist. ■

Somit kann die Rekursion aus Gleichung 3.35 mit der Block-shift-invert-Arnoldi-Methode fortgesetzt werden. Der bereits aufgebaute Krylovraum kann also erweitert, und die bisherigen Rechenergebnisse können somit weiter verwendet werden.

Die erwähnten Shifts werden gemäß den Messungen (der Eigenwerte) gewählt. Insofern nutzt die Methode die approximativen Eigenwerte. Die Eigenwertmessungen werden hier nicht genutzt — werden aber in Unterabschnitt 3.4.3 berücksichtigt.

3.4.3 Lock and Purge

Wie diverse Autoren (zum Beispiel [Jar03]) betonen, ist es bei derartigen Methoden nötig, konvergierte Richtung festzuhalten („locking“) und ungewünschte Richtungen aus der Iterationsbasis zu entfernen („purging“), da sonst die Basis zu sehr wächst.

Bei Iterationen über einzelne Vektoren wird häufig so vorgegangen, dass hinreichend konvergierte Richtungen festgehalten werden und nur eine weitere Richtung — die für die weitere Iteration am meisten Erfolg verspricht — in der Basis belassen wird. Wir übertragen dies hier auf Blöcke, in dem wir die Vektoren gemäß Ihrer Übereinstimmung mit den vorliegenden Messungen bewerten.

Wir belassen für jede noch gesuchte Richtung genau den Vektor in der Suchbasis, der am besten zu den vorliegenden Messdaten passt: Wir bewerten die Übereinstimmung mit Hilfe des Korrelationskoeffizienten zwischen dem vorliegenden Messdatenvektor m und der zur ermittelten Approximation y zugehörigen Messungen $G^T y$.

Ausgehend von der Situation mit einer Iterationsbasis aus j Vektoren und bereits d „gelockten“ Eigenpaaren bei einer Blockgröße b , kann die Arnoldi-Rekursion als

$$(A - \mu B)^{-1} B U_j = U_{j+b} H_{j+b,j} \quad (3.36)$$

geschrieben werden. Die Hessenbergmatrix $H_{j+b,j}$ hat mit $\check{H} \in \mathbb{R}^{(j-d) \times (j-d)}$ und $\check{h} \in \mathbb{R}^{b \times (j-d)}$ die besondere Struktur

$$H_{j+b,j} = \begin{bmatrix} D_{d,d} & 0 \\ 0 & \check{H} \\ 0 & \check{h} \end{bmatrix}. \quad (3.37)$$

Seien nun in $X_1 \in \mathbb{R}^{(j-d) \times g}$ die zu den neu zu lockenden Vektoren zugehörigen Eigenvektoren von \check{H} und in $X_2 \in \mathbb{R}^{(j-d) \times (b-g)}$ die zu den dann fehlenden gesuchten Eigenvektoren am besten passenden Eigenvektoren von \check{H} notiert. Nun gilt mit den jeweils zugehörigen Eigenwert-Diagonalmatrizen $\rho_1 \in \mathbb{R}^{g \times g}$ und $\rho_2 \in \mathbb{R}^{(b-g) \times (b-g)}$

$$\check{H} \begin{bmatrix} X_1 & X_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \rho_1 & 0 \\ 0 & \rho_2 \end{bmatrix}.$$

Wir wählen nun mit $Z := \begin{bmatrix} I_{d,d} & 0 & 0 \\ 0 & X_1 & X_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{j \times (d+b)}$

$$\tilde{U}_{d+b} = U_j Z.$$

Zusammen mit der kompakten QR -Zerlegung

$$\check{h} X_2 = z \check{h}, \quad (3.38)$$

mit der also $z \in \mathbb{R}^{b \times (b-g)}$ gilt, definieren wir

$$\begin{bmatrix} \tilde{u}_{d+b+1} & \cdots & \tilde{u}_{d+2b-g} \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} u_{j+1} & \cdots & u_{j+b} \end{bmatrix} z$$

und nutzen nun für $i = 1, \dots, d + 2b - g$ die Menge aller Vektoren \tilde{u}_i als neue Basis. Durch Multiplikation der Rekursion in Gleichung 3.36 mit Z erhalten wir

$$(A - \mu B)^{-1} B U_j Z = U_{j+b} H_{j+b,j}.$$

Mit der Struktur von $H_{j+b,j}$ aus Gleichung 3.37 gilt dann

$$(A - \mu B)^{-1} B \tilde{U}_{d+b} = U_{j+b} \begin{bmatrix} D_{d,d} & 0 \\ 0 & \check{H} \\ 0 & \check{h} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_{d,d} & 0 & 0 \\ 0 & X_1 & X_2 \end{bmatrix}.$$

Ausmultiplizieren liefert

$$(A - \mu B)^{-1} B \tilde{U}_{d+b} = U_{j+b} \begin{bmatrix} D_{d,d} & 0 & 0 \\ 0 & X_1 \rho_1 & X_2 \rho_2 \\ 0 & \check{h} X_1 & \check{h} X_2 \end{bmatrix}.$$

Wir können nun zusammen mit der Annahme, dass X_1 zu den konvergierten¹¹ Vektoren gehört (daher folgt $\check{h} X_1 = 0$) und der QR -Zerlegung von $\check{h} X_2$ nach Gleichung 3.38 auch

$$(A - \mu B)^{-1} B \tilde{U}_{d+b} = U_{j+b} \begin{bmatrix} I_{d,d} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & X_1 & X_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_{d,d} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_1 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_2 \\ 0 & 0 & \check{h} \end{bmatrix}$$

¹¹Dies kann zur Laufzeit geprüft werden — und insofern kann auch zur Laufzeit entschieden werden, welche Richtungen konvergiert (also in X_1) sind.

schreiben. Es ergibt sich mit $D_{d+g,d+g} := \begin{bmatrix} D_{d,d} & 0 \\ 0 & \rho_1 \end{bmatrix}$

$$(A - \mu B)^{-1} B \tilde{U}_{d+b} = \tilde{U}_{d+2b-g} \begin{bmatrix} D_{d+g,d+g} & 0 \\ 0 & \rho_2 \\ 0 & \tilde{h} \end{bmatrix}.$$

Aus dieser Darstellung können wir mit der neuen Basis \tilde{U} , der neuen Anzahl gelockter Vektoren $\tilde{d} := d + g$, der neuen Basisgröße $\tilde{j} := d + b$ und der neuen Blockgröße $\tilde{b} := b - g$ zusammen mit der neuen Hessenbergmatrix

$$\tilde{H}_{d+2b-g,d+b} := \begin{bmatrix} D_{d+g,d+g} & 0 \\ 0 & \rho_2 \\ 0 & \tilde{h} \end{bmatrix}$$

mit dem rationalen Block-Krylov-Algorithmus fortfahren (also Shift-Umrechnung und weitere Block-Arnoldi-Iterationen durchführen).

Zusätzlich können wir, falls der konvergierte Vektor der dichteste am Shift ist, die Idee aus [ER80] nutzen: Mit sehr geringem Aufwand kann der Lösungsvektor ein weiteres mal invers iteriert werden — und damit verbessert werden. Wir gehen auf diesen Aspekt in Unterabschnitt 3.4.4 ein. Diese Verbesserung können wir nicht in den Algorithmus (in die Basis) einfließen lassen, aber wir können die Richtung als Ergebnis des Verfahrens präsentieren.

Die hier notierte Hessenbergmatrix beinhaltet einen Diagonalblock. Dieser ist bei der Shift-Umrechnung (vgl. Satz 8) besonders zu behandeln.

Satz 9:

Es seien $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ Matrizen, die Abschnitt 2.1 genügen. Weiterhin seien $U_{j+b} \in \mathbb{R}^{n \times (j+b)}$ und $H_{j+b,j}$ die Matrizen, die sich aus einer inversen mit μ_1 geshifteten Block-Arnoldi-Iteration ergeben.

Es bezeichne $T(\circ)$ die notwendige Transformation der Hessenbergmatrix beim Shiftwechsel von μ_1 nach μ_2 . Werde nun gemäß Unterabschnitt 3.4.3 ein „Lock-and-Purge“-Schritt durchgeführt, so gilt:

$$T(\tilde{H}) = \begin{bmatrix} \left(D_{d+g,d+g}^{-1} + (\mu_1 - \mu_2) I \right)^{-1} & 0 \\ 0 & T \left(\begin{bmatrix} \rho_2 \\ \tilde{h} \end{bmatrix} \right) \end{bmatrix}$$

Die auf der rechten Seite notierte Transformation kann gemäß Satz 8 ermittelt werden.

Beweis von Satz 9:

Seien in der Matrix $V \in \mathbb{R}^{n \times d+g}$ die zu $D_{d+g,d+g} \in \mathbb{R}^{(d+g) \times (d+g)}$ zugehörigen Spalten der Matrix $U_{j+b} \in \mathbb{R}^{n \times j+b}$, so gilt

$$(A - \mu_1 B)^{-1} B V = V D_{d+g,d+g}.$$

Durch Multiplikation mit $A - \mu_1 B$ erhalten wir

$$B V = (A - \mu_1 B) V D_{d+g,d+g}.$$

Wir addieren nun auf beiden Seiten $BVD_{d+g,d+g}(\mu_1 - \mu_2)$ und erhalten

$$BVD_{d+g,d+g}(\mu_1 - \mu_2) + BV = (A - \mu_2 B)VD_{d+g,d+g}$$

Nach Verwendung des Distributivgesetzes ergibt dies

$$BV \left(D_{d+g,d+g}(\mu_1 - \mu_2) + I \right) = (A - \mu_2 B)VD_{d+g,d+g}$$

und wir können durch Multiplikation mit $(A - \mu_2 B)^{-1}$

$$(A - \mu_2 B)^{-1} BV = VD_{d+g,d+g} \left(D_{d+g,d+g}(\mu_1 - \mu_2) + I \right)^{-1}$$

schreiben. Vereinfachen der rechten Seite liefert nun

$$(A - \mu_2 B)^{-1} BV = V \left(I(\mu_1 - \mu_2) + D_{d+g,d+g}^{-1} \right)^{-1}$$

und beinhaltet somit die Aussage. ■

3.4.4 Effiziente Verbesserung

Wir präsentieren hier eine Methode, mit der für einen Näherungsvektor aus dem rationalen Krylov-Raum zu dem Shift μ ein weiterer Schritt mit um μ geshifteter inverser Iteration fast ohne numerischen Aufwand ermittelt werden kann. Sofern bekannt ist, dass der zur approximierten Eigenrichtung zugehörige Eigenwert am dichtesten bei dem gewählten Shift μ liegt, ist dies eine Verbesserung der Approximation.

Diese Prozedur ist eine Block-Verallgemeinerung der Methode aus [ER80, Abschnitt 3].

Satz 10:

Es seien mit den Matrizen aus Abschnitt 2.1 einige Schritte der um μ geshifteten Block-inversen Arnoldi-Iteration ausgeführt worden, so dass sich die dann gültige Rekursion als

$$(A - \mu B)^{-1} BV = V\check{H} + v\check{h}$$

schreiben läßt.

Für einen Ritzvektor $y = Vu$ zu dem Ritzwert d kann ein (weiterer) Schritt um μ geshifteter inverser Iteration effizient gemäß

$$z := y + \frac{1}{d} v\check{h}u$$

ermittelt werden.

Anmerkung: Es gilt $z \propto (A - \mu B)^{-1} By$.

Beweis von Satz 10:

Sei die Hessenbergmatrix gemäß

$$H = \begin{bmatrix} \check{H} \\ 0 \quad \check{h} \end{bmatrix}$$

partitioniert. Wir können nun die Block-Arnoldi-Rekursion auch als

$$(A - \mu B)^{-1} BV = V\check{H} + v\check{h}$$

schreiben. Mit dem Eigenpaar

$$u, d : \check{H}u = ud$$

und $y := Vu$ gilt nach Multiplikation mit u

$$(A - \mu B)^{-1} BVu = V\check{H}u + v\check{h}u.$$

Durch Ausnutzen der Eigenwertgleichung erhalten wir dann

$$(A - \mu B)^{-1} By = yd + v\check{h}u.$$

■

3.4.5 Gesamtalgorithmus

- Startblock U_0 sei B -orthogonal
- Initialisiere $H = []$ und $D = []$ (also leer)
- iteriere bis alle gesuchten Richtungen konvergiert sind
 - wähle i so, dass μ_i der Median aller ist, wenn bekannt clusterweise
 - ab zweiter Durchlauf: Shiftumrechnung ausführen
 - ermittle angemessene Zerlegung $Z_i = (A - \mu_i I)^{-1} B$
 - führe Block-inverse-Arnoldi-Methode mit Z_i durch, Suchrichtungen B -orthogonal
Abbruchkriterium z. B. aus oberer Dreiecksmatrix $\|\check{h}\|_2 < \text{tol}_1$ (also nur maximales Diagonal-Element)
 - führe „Lock-and-Purge“ durch:
konvergierte Richtungen k werden gemäß $\|\check{h}_{x_k}\|_2 < \text{tol}_2$ erkannt
 - konvergierte Messungen aus M und Ξ streichen

3.4.6 Lucky-Breakdown

Bisher wurden sogenannte „Lucky-Breakdowns“ ausgeschlossen.

Für den Fall, dass während der Block-Arnoldi-Methode Diagonaleinträge der R -Matrix (aus der QR -Zerlegung der neuen Richtungen) verschwinden, ist ein „Lucky-Breakdown“ eingetreten. In diesem Fall ist mindestens ein Teil des Unterraumes (nämlich in der zugehörigen Richtung) — zumindest numerisch — invariant. Es kann sofort (also ohne Prüfen der Abbruchbedingung) zu dem „Lock-and-Purge“-Schritt übergegangen werden. Mit diesem Schritt werden die invarianten Richtungen „geloct“ und es kann mit der verbleibenden Iterationsbasis fortgefahren werden.

3.4.7 Abstrakte Deutung der Lösungsstruktur

Die in diesem Abschnitt definierte Methode liefert Lösungen aus dem rationalen Krylov-Raum über der aus den prolongierten Vektoren bestehenden Basis.

Wir stellen hier den Zusammenhang zwischen den Lösungen und den Messungen her.

Satz 11:

Seien alle Bezeichner wie in Abschnitt 2.1 gewählt, so liegen die Ergebnisvektoren der Methode aus Unterabschnitt 3.4.2 angewandt auf prolongierte Vektoren mittels der Verfahren aus Kapitel 2 alle in einem rationalen Krylov-Raum über dem Block $B^{-1}G$.

Methode	Struktur
Residuenprolongation Abschnitt 2.4	$u_i = (A - \mu_i B)^{-1} B (A - \mu_i B)^{-1} G c_1(\mu_i, m_i)$
Kondensationsprolongation Abschnitt 2.5	$u_i = (A - \mu_i B)^{-1} G c_2(\mu_i, m_i)$
Ausgleichsprolongation Abschnitt 2.3	$u_i = (A - \mu_i B)^{-1} B (A - \mu_i B)^{-1} G c_3(\mu_i, m_i, w)$

Tabelle 3.1: Abstrakte Darstellung der prolongierten Vektoren

Beweis von Satz 11:

Wir untersuchen zunächst die Prolongationsmethoden: Die prolongierten Vektoren lassen sich mit den „Koordinatenfunktionen“¹² $c_n, n \in \{1, 2, 3\}$ gemäß Tabelle 3.1 notieren. Mit den Abkürzungen $O_i := (A - \mu_i B)^{-1} B$ schreiben sich diese jeweiligen Matrizen als

$$O_i^2 B^{-1} G$$

für die Residuen- oder Ausgleichsprolongation und

$$O_i B^{-1} G$$

für die Kondensationsprolongation. Da $B^{-1}G$ als B -orthogonaler Startblock verstanden werden kann, sind die prolongierten und dann auch die gemäß Unterabschnitt 3.4.2 weiter iterierten Vektoren Elemente eines rationalen Krylov-Raumes über diesem Startblock. ■

Anmerkung: Es ist davon auszugehen, dass die Suche in dem gesamten rationalen Krylov-Raum zu besseren Ergebnissen führt, als nur in dem letzten Block — wie es bei den hier genannten Prolongationsmethoden passiert. Der numerische Mehraufwand ist gering. Insofern liegt es nahe, eine weitere Methode basierend auf dieser Idee zu definieren: Diese beinhaltet dann sowohl die Prolongation als auch die iterative Verbesserung.

3.4.8 Das Block-Rationale-Krylovraum-Gesamtverfahren

- Startblock $U_0 := B^{-1}G$ (ist B -orthogonal)
- Initialisiere $H = []$ und $D = []$ (also leer)

¹²Die Werte dieser Funktionen ergeben in der Basis, bestehend aus den Spalten der Matrix, die vor dieser Funktion steht, die Koordinaten der Lösung.

- Iteriere bis alle gesuchten Richtungen konvergiert sind
 - Wähle i so, dass μ_i der Median aller ist, wenn bekannt clusterweise
 - Ab zweiter Durchlauf: Shiftumrechnung ausführen
 - Ermittle angemessene Zerlegung $Z_i = (A - \mu_i I)^{-1} B$
 - Führe Block-inverse-Arnoldi-Methode mit Z_i durch, Suchrichtungen B -orthogonal
Abbruchkriterium z. B. aus oberer Dreiecksmatrix $\|\check{h}\|_2 < \text{tol}_1$ (also nur maximales Diagonal-Element)
 - Führe „Lock-and-Purge“ durch:
konvergierte Richtungen k werden gemäß $\|\check{h}x_k\|_2 < \text{tol}_2$ erkannt
 - Konvergierte Messungen aus M und Ξ streichen

3.5 Numerische Ergebnisse

In diesem Abschnitt stellen wir die Ergebnisse¹³ der Iterationsmethoden gemäß Kapitel 3 angewandt auf das Schallproblem aus Unterabschnitt 2.7.2 dar. In Abbildung 3.1 beschränken wir uns auf die eigentlichen Iterationsmethoden, davon ausgehend, dass hinreichend gute Näherungen als Ausgang zur Verfügung stehen. Wir nutzen hier die Ergebnisse der „fast optimal gewichteten Prolongation“ nach Unterabschnitt 2.6.1.

Bei der Verwendung der hier eingeführten Block-rationalen-Krylov-Iteration sind die Ergebnisse in jedem einzelnen Iterationsschritt schwierig für den gesamten Block zu bewerten, da unter Umständen sowohl vollständig konvergierte als auch noch unbrauchbare Approximationen existieren können. In Abbildung 3.2 ist eine Skizze des zeitlichen Ablaufs der Iteration dargestellt. Markante Iterationsschritte sind durch die Markierungen verdeutlicht. Nach wenigen Sekunden ist die erste nötige Zerlegung (zu dem dritten approximativen Eigenwert) ermittelt. Der dann anschließende Iterationsschritt inklusive Orthogonalisierung benötigt fast eine Minute. Mangels Güte sind zwei weitere Iterationsschritte mit etwa dem selben Zeitaufwand nötig. Nach der dritten Iteration ist der aufgebaute Unterraum von ausreichender Qualität — und der Algorithmus erkennt, dass die dritte und vierte Eigenrichtung konvergiert sind. Für alle verbleibenden gesuchten Richtungen werden die am besten zu den vorliegenden Meßdaten passenden (wie einleitend erwähnt) in der Iterationsbasis belassen. Es wird nun die aufgebaute Arnoldi-Rekursion auf den nächsten Shift (zum zweiten approximativen Eigenwert) umgerechnet. Ebenso wird für diesen Shift eine Zerlegung ermittelt. Es folgt ein weiterer Iterationsschritt, der wegen des Lock-and-Purge-Schrittes erheblich schneller durchführbar ist. Bereits jetzt stellt der Algorithmus für alle verbleibenden Richtungen Konvergenz fest; die Methode ist beendet.

Eine Überprüfung der ermittelten Ergebnisse lieferte (nach Krylov-Bogoliubov-Kahan) die (gerundete) Schranke 3388. Relativ zu den gesuchten Eigenwerten (in der Größenordnung von 10^6) ist dieser Wert klein — etwa im Promillebereich. Die durch die anderen iterativen Verfahren erreichten Ergebnisse weisen geringere Werte auf. Durch eine weitere Anpassung der Abbruchbedingungen im rationalen Block-Krylov-Algorithmus wären diese vermutlich auch erreichbar.

¹³Die Berechnungen erfolgten auf einer Intel Core i7 950 3.07 GHz CPU mit 12 GB DDR3 RAM, Windows 7 und Matlab 7.8.0 (R2009a)

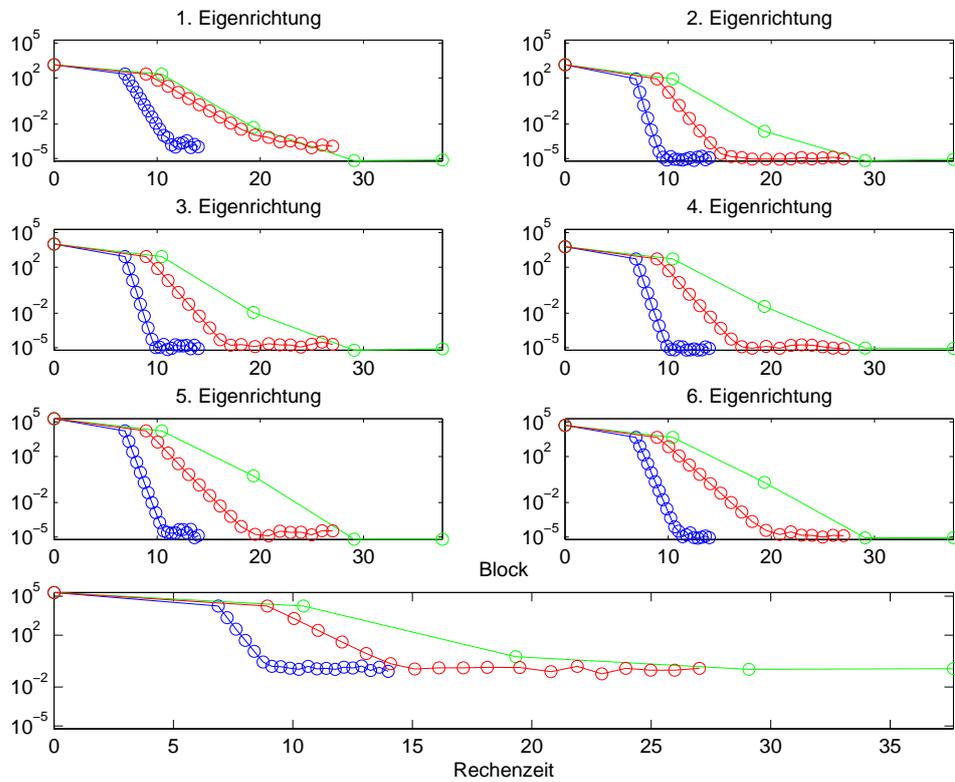


Abbildung 3.1: Iteration des Schallproblems: Gezeigt werden in den oberen 6 Plots jeweils die Eigenresiduen $\|(A - B\lambda_i) u_i^{(p)}\|_{B^{-1}}$ der normierten approximativen Eigenvektoren $u_i^{(p)}$ über der benötigten Iterationszeit (in Sekunden). In grün ist die Konvergenz der Newtonmethode nach Unterabschnitt 3.1.2, in rot die Konvergenz der Chord-Methode nach Unterabschnitt 3.2.2 und in blau die Konvergenz der Fixpunktiteration nach Unterabschnitt 3.3.1 dargestellt. Im unteren Plot ist die Schranke nach Krylov-Bogoliubov-Kahan ebenfalls über der Iterationszeit für den gesamten Block dargestellt.

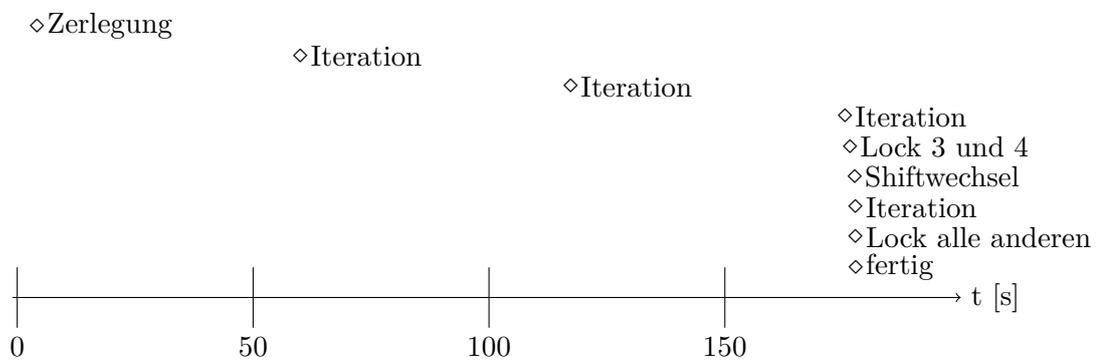


Abbildung 3.2: Eine Skizze des zeitlichen Verlaufs der Block-rationalen-Krylov-Iteration

Kapitel 4

Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit verdeutlicht durch die aufgezeigten Ergebnisse, wie zur Lösung des Problems, aus Abtastungen von Eigenvektoren und Approximationen möglichst effizient Eigenpaare zu ermitteln, vorgegangen werden sollte.

Es wurden in Kapitel 2 zunächst die Größen *Messfehler* η_v und *Messbarkeit* ξ_v eingeführt, mit denen die vorliegenden Abtastungen bewertet werden können. Zusammen mit dem Abstand ϵ zwischen Approximation und gesuchtem Eigenwert können diese Werte die Eigenschaften der eingeführten Verfahren beschreiben.

Es wurden unterschiedliche Methoden zur Vervollständigung vorliegender Abtastungen von Eigenvektoren zu „Vollraumapproximationen“ der gesuchten Eigenrichtungen mit Hilfe der zugehörigen Eigenwertnäherungen erarbeitet und bewertet. Es empfiehlt sich die Verwendung der gewichteten Prolongation aus Unterabschnitt 2.3.1.

Das Kapitel 3 widmet sich der Verbesserung von vorliegenden approximativen Eigenpaaren unter Verwendung der zugehörigen Abtastungen. Die iterative Verbesserung von Eigenpaaren ist ein in der Literatur (zum Beispiel [RW72, Ruh74, DDRvdV00]) sehr häufig behandeltes Thema; die Fragestellung mit den hier zusätzlich vorliegenden Informationen ist jedoch abweichend.

Mit Hilfe der in Definition 6 neu eingeführten „problemangepassten Winkelinterpretation“ werden Forderungen an die Ausgangsdaten gestellt und so unterschiedliche Algorithmen zu dieser Aufgabenstellung formuliert. Die Methoden wurden auf ein hochdimensionales Problem aus der Praxis angewandt. Durch den Vergleich des zeitlichen Aufwandes wird zur Verwendung der in Abschnitt 3.3 vorgestellten Block-Fixpunkt-Iteration geraten. Unter gewissen Voraussetzungen wurde hierfür Konvergenz bewiesen.

Die positiven Ergebnisse öffnen den Blick für weitere Untersuchungen. Für den Fall, dass mit der Matrix G modale Messungen anstelle von Punktabtastungen modelliert werden, können mit einer Zerlegung in die gesuchten Richtungen und die dazu B^{-1} -orthogonalen „Störrichtungen“ (analog zu [Par98, Abschnitt 14-4]) an einigen Stellen dieser Arbeit noch weitere Ergebnisse erwartet werden.

Weiterhin besteht Forschungsbedarf bei der Nutzung der Messungen bzw. bei den Nebenbedingungen in den Gleichungen: Es könnten zusätzlich die Orthogonalitätseigenschaften der Eigenvektoren mit genutzt werden. Mit diesen Zusatzinformationen kann die Beschränkung, dass die Anzahl der Abtastpositionen größer oder gleich der Anzahl der gemessenen Eigenpaare ist, entfallen.

Um bei der hier eingeführten Lock-and-Purge-Methode zu verhindern, dass ungewünschte Richtungen, die zufällig mit den Messungen übereinstimmen (wie in der Einleitung erwähnt), in der Basis verbleiben, kann zudem als zusätzliches Bewertungskriterium der Rayleigh-Quotient der Richtung betrachtet werden: Die Abweichung vom approximativen Eigenwert

sollte einen gewissen Wert nicht überschreiten.

Tabellenverzeichnis

2.1	„A-priori“-Fehlerschranken der Prolongationsmethoden	31
2.2	„A-posteriori“-Schranken bei approximativ optimaler Gewichtung	38
2.3	Iterationsprolongation der Platte	39
2.4	„Qualität“ der reellen Messungen	42
2.5	Schalldruck: prolongierte Richtungen	43
2.6	Schalldruck: approximative Eigenwerte	44
3.1	Abstrakte Darstellung der prolongierten Vektoren	75

Abbildungsverzeichnis

1.1	exemplarische Messung einer Saite	2
1.2	kontinuierliches Fortsetzungsbeispiel	3
1.3	angepaßte stückweise Interpolation	4
1.4	Bedingung für Verbesserung y von u	6
2.1	Messfehler, Messfehlerwinkel, Messbarkeit und Skalierung	12
2.2	Problem und Approximation	23
2.3	Iterationsprolongation Platte	45
2.4	Iterationsprolongation Schallproblem	46
3.1	Iterationsergebnisse des Schallproblems	77
3.2	rationales Block-Krylov-Verfahren	78

Index

- Arnoldi
 - Verfahren, 49
 - Block-, 68
 - Shift-invert-, 68
- Cardano
 - Formeln von, 22
- Cauchy
 - Interlacing-Theorem, 31
- Chord-Methode, 48
- Eigenpaar, 57
- Galerkin-Bedingung, 54
- Hessenberg
 - Matrix, 68
- Householder
 - Transformation, 68
 - Transformationen, 70
- Koordinaten
 - baryzentrische, 40
- Krylov
 - Raum, 67
 - rationaler -Raum, 49, 67
 - rationaler Unterraum, 7
- Lanczos
 - Verfahren, 49
- lock-'n-purge, 70
- locking, 70
- Massenmatrix, 9
- Matrix-Market, 39
- Messbarkeit, 14
- Messfehlerwinkel, 15
- Messmatrix, 9, 12
- Prolongation, 4, 9
- purging, 70
- Restriktion, 9
- Sehnenmethode, 48
- Sherman–Morrison–Woodbury
 - Matrix-Identität von, 24
- Skalierung, optimale, 13
- Spaltenrang, 10
- spaltenregulär, 10
- Steifigkeitsmatrix, 9
- Sylvestersystem, 50
- Triangulierung, 40

Literaturverzeichnis

- [Arn51] W. E. Arnoldi. The principle of minimized iteration in the solution of the matrix eigenvalue problem. *Quart. Appl. Math.*, 9:17–29, 1951. Available from: <http://www.ams.org/journals/qam/>. 49
- [BCS] BCS - Structural Engineering Matrices (eigenvalue problems) from the Harwell-Boeing Collection. Available from: <http://math.nist.gov/MatrixMarket/data/Harwell-Boeing/bcsstruc3/bcsstruc3.html>. 39
- [Bär06] Günter Bärwolff. *Höhere Mathematik für Naturwissenschaftler und Ingenieure (Sav Mathematik)*. Spektrum Akademischer Verlag, 2. a. edition, 6 2006. Available from: <http://amazon.de/o/ASIN/3827416884/>. 3
- [BSM05] Ilja N. Bronstein, Konstantin A. Semendjajew, and Gerhard Musiol. *Taschenbuch der Mathematik*. Deutsch (Harri), August 2005. Available from: <http://www.buchpreis24.de/isbn/9783817120161>.
- [BT04] Jean-Paul Berrut and Lloyd N. Trefethen. Barycentric lagrange interpolation. *SIAM Review*, 46(3):501–517, 2004. Available from: <http://link.aip.org/link/?SIR/46/501/1>, doi:10.1137/S0036144502417715. 40
- [Chu90] Z. Chuanrong. Structural modification and vibration reanalysis. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 83(2):99–108, October 1990. doi:10.1016/0045-7825(90)90145-C. 1
- [CYL00] S. H. Chen, X. W. Yang, and H. D. Lian. Comparison of several eigenvalue reanalysis methods for modified structures. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 20(4):253–259, December 2000. doi:10.1007/s001580050155. 1
- [DDRvdV00] James Demmel, Jack Dongarra, Axel Ruhe, and Henk van der Vorst. *Templates for the solution of algebraic eigenvalue problems: a practical guide*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, 2000. Available from: <http://www.cs.utk.edu/~dongarra/etemplates/index.html>. 1, 68, 79
- [DH08] Peter Deuffhard and Andreas Hohmann. *Numerische Mathematik: Numerische Mathematik 1: Eine algorithmisch orientierte Einführung: Bd I: [Band] 1 (de Gruyter Lehrbuch)*. Gruyter, 4. auflage. edition, 7 2008. Available from: <http://amazon.de/o/ASIN/3110203545/>. 48
- [DMW83] J. J. Dongarra, C. B. Moler, and J. H. Wilkinson. Improving the accuracy of computed eigenvalues and eigenvectors. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 20(1):23–45, 1983. Available from:

<http://scitation.aip.org/getabs/servlet/GetabsServlet?prog=normal&id=SJNAAM000020000001000023000001&idtype=cvips&gifs=yes>,
doi:10.1137/0720002. 48, 57

- [EL97] I. M. Elfadel and David D. Ling. A block rational arnoldi algorithm for multipoint passive model-order reduction of multiport rlc networks. In *ICCAD '97: Proceedings of the 1997 IEEE/ACM international conference on Computer-aided design*, pages 66–71, Washington, DC, USA, 1997. IEEE Computer Society. Available from: <http://portal.acm.org/citation.cfm?id=266388.266425>. 68
- [ER80] T Ericsson and A Ruhe. The spectral transformation Lanczos method for the numerical solution of large sparse generalized symmetric eigenvalue problems. *Math Comp*, 35:1251–1268, 1980. 72, 73
- [Fat98] Jean-Luc Fattebert. A block rayleigh quotient iteration with local quadratic convergence. *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 7:56–74, 1998. Available from: <http://etna.mcs.kent.edu/vol1.7.1998/pp75-89.dir/pp75-89.html>. 49
- [Fis05] Gerd Fischer. *Lineare Algebra*. Vieweg Friedr. + Sohn Ver, 15. edition, 8 2005. Available from: <http://amazon.com/o/ASIN/3834800317/>. 10
- [FM95] M. I. Friswell and J. E. Mottershead. *Finite Element Model Updating in Structural Dynamics*. Kluwer Academic Publishers, first edition edition, 1995. 40
- [GL96] G. H. Golub and C. F. Van Loan. *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, USA, third edition, 1996. 24
- [Hac03] Wolfgang Hackbusch. *Multi-Grid Methods and Applications (Springer Series in Computational Mathematics)*. Springer, 6 2003. Available from: <http://amazon.com/o/ASIN/3540127615/>. 4, 9
- [HBC] Sparse Matrix Collection (Release I). Available from: <http://math.nist.gov/MatrixMarket/collections/hb.html>. 39
- [HJ85] Roger A. Horn and Charles R. Johnson. *Matrix Analysis*. Cambridge University Press, 12 1985. Available from: <http://amazon.com/o/ASIN/0521305861/>. 62
- [HL07] David Hecker and Deborah Lurie. Using least-squares to find an approximate eigenvector. *Electronic Journal of Linear Algebra*, 16:99–110, March 2007. 2, 5, 15, 18
- [Hof01] Birgit Hofferek. *Anwendung der Kondensation mit verallgemeinerten Mastern in der Eigenwert-Reanalysis*. PhD thesis, Technische Universität Hamburg-Harburg, 2001. Available from: <http://gso.gbv.de/DB=2.1/PPNSET?PPN=340142766>. 1, 28

- [Ina88] Toyoshiro Inamura. Eigenvalue reanalysis by improved perturbation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 26(1):167–181, January 1988. doi:10.1002/nme.1620260112. 1
- [Irm09] Alexander Irmscher. Anwendung der Inversen Finite Elemente Methode zur Schallquellenortung an einem 2D-Akustikversuchsstand. Master’s thesis, Helmut-Schmidt-Universität - Fachbereich Maschinenbau - Mechatronik, June 2009. 3, 5, 39
- [Jar03] Elias Jarlebring. Krylov methods for nonlinear eigenvalue problems. Master’s thesis, School of Engineering Physics, 2003. 7, 70
- [Kir08] Uri Kirsch. *Reanalysis of Structures: A Unified Approach for Linear, Nonlinear, Static and Dynamic Systems (Solid Mechanics and Its Applications)*. Springer, 1 edition, 4 2008. Available from: <http://amazon.com/o/ASIN/1402081979/>. 1
- [Kos89] Peter Kosmol. *Methoden zur numerischen Behandlung nichtlinearer Gleichungen und Optimierungsaufgaben*. B.G. Teubner, 1989. Available from: <http://amazon.de/o/ASIN/3519020858/>. 48
- [Lai72] Walter Laird. *Technique of Latin Dancing*. International Dance, 3rd revised edition edition, 11 1972. Available from: <http://amazon.com/o/ASIN/0900326107/>.
- [Lan50] Cornelius Lanczos. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *J. Research Nat. Bur. Standards*, 45:255–282, 1950. 49
- [LST98] Ralf Loesche, Hubert Schwetlick, and Gisela Timmermann. A modified block newton iteration for approximating an invariant subspace of a symmetric matrix. *Linear Algebra and its Applications*, 275-276:381–400, May 1998. Available from: <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6V0R-3TKS76P-S/2/246db5d2a418c877e1504d9d20c0d8f4>. 5, 6, 48, 49, 51
- [Mat] Matrix Market. Available from: <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>. 39
- [MV99] W. Mackens and H. Voss. Nonnodal condensation of eigenvalue problems. *ZAMM*, 79(4):243–255, 1999. 4, 28
- [Nak90] Mikio Nakahara. *Geometry, Topology, and Physics*. Graduate Student Series in Physics. Institute of Physics Publishing, illustrated edition edition, 1 1990. Available from: <http://amazon.de/o/ASIN/0852740956/>. 40
- [OR70] James M. Ortega and Werner C. Rheinboldt. *Iterative Solution of Nonlinear Equations in Several Variables (Computer Science & Applied Mathematics Monograph)*. Academic Press, New York, 6 1970. Available from: <http://amazon.com/o/ASIN/0125285507/>. 48

- [OW09] Burcak Özkök and Uwe Weltin. Model based ground vibration tests. Technical report, University of Technology (TUHH), Eissendorfer Straße 40 , 21073 Hamburg, March 2009. AST 2009. 3, 5
- [Par98] Beresford N. Parlett. *The symmetric eigenvalue problem*. Prentice-Hall, Inc., Upper Saddle River, NJ, USA, 1998. 20, 31, 79
- [Rot89] Kai Rothe. *Lösungsverfahren für nichtlineare Matrixeigenwertaufgaben mit Anwendung auf die Ausgleichselementmethode (Wissenschaftliche Beiträge aus europäischen Hochschulen)*. PhD thesis, Technische Universität Hamburg-Harburg, 1989. 4
- [RS98] Axel Ruhe and Daniel Skoogh. Rational Krylov algorithms for eigenvalue computation and model reduction. In B. Kågström, , J. Dongarra, E. Elmroth, and J. Waśniewski, editors, *Applied Parallel Computing. Large Scale Scientific and Industrial Problems*, Lecture Notes in Computer Science, No. 1541, pages 491–502, 1998. 67
- [Ruh74] A Ruhe. Iterative eigenvalue algorithms for large symmetric matrices. In L. Collatz and K. P. Hadeler, editors, *Eigenwertprobleme, ISNM 24*, volume 24, pages 97–115. Birkhäuser Verlag Basel und Stuttgart, 1974. 79
- [Ruh84] Axel Ruhe. Rational Krylov sequence methods for eigenvalue computation. *Lin. Alg. Appl.*, 58:391–405, 1984. 7, 67
- [Ruh94a] Axel Ruhe. The Rational Krylov algorithm for generalized eigenvalue problems. In Jiang Er-xiong, editor, *Proceedings of '92 Shanghai International Numerical Algebra and its Applications Conference*, pages 105–112. China Science and Technology Press, 1994. 7
- [Ruh94b] Axel Ruhe. The Rational Krylov algorithm for large nonsymmetric eigenvalues – mapping the resolvent norms (pseudospectrum). In *Talk given at Sparse Days at St Girons, July 10-16, 1994*. 7
- [Ruh94c] Axel Ruhe. The Rational Krylov algorithm for nonsymmetric eigenvalue problems. III: Complex shifts for real matrices. *BIT*, 34:165–176, 1994. 7
- [Ruh94d] Axel Ruhe. Rational Krylov algorithms for nonsymmetric eigenvalue problems. In G. Golub, A. Greenbaum, and M. Luskin, editors, *Recent Advances in Iterative Methods, IMA Volumes in Mathematics and its Applications 60*, pages 149–164. Springer-Verlag, New York, 1994. 7, 67
- [Ruh94e] Axel Ruhe. Rational Krylov algorithms for nonsymmetric eigenvalue problems, II: Matrix pairs. *Lin. Alg. Appl.*, 197/198:283–296, 1994. 7, 67
- [Ruh95a] Axel Ruhe. Rational Krylov, a practical algorithm for large sparse nonsymmetric matrix pencils. Technical Report UCB/CSD-95-871, Dept Computer Science, University of California Berkeley, accepted for publication in SISC, 1995. 67

- [Ruh95b] Axel Ruhe. Showing the progress of the Rational Krylov algorithm. Technical report, Dept Computer Science, University of California Berkeley, 1995. Available from: <http://http.cs.berkeley.edu/~ruhe/>. 67
- [Ruh98] Axel Ruhe. Rational Krylov, a practical algorithm for large sparse nonsymmetric matrix pencils. *SIAM J. Sci. Comp.*, 19:1535–1551, 1998. 7, 67
- [Ruh00] Axel Ruhe. *A Rational Krylov algorithm for nonlinear matrix eigenvalue problems*, volume 268 of *Zapiski Nauchnyh Seminarov POMI*, pages 176–180. Petersburg Department of Steklov Institute of Mathematics, 2000. Available from: <http://www.emis.de/journals/ZPOMI/2000/v268.html>. 67
- [RW72] A Ruhe and T Wiberg. The method of conjugate gradients used in inverse iteration. *BIT*, 12:543–554, 1972. 79
- [Saa92] Youcef Saad. *Numerical methods for large eigenvalue problems: Theory and algorithms*. Manchester University Press, Manchester, 1992.
- [Saa03] Yousef Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. Society for Industrial Mathematics, 2 edition, 4 2003. Available from: <http://amazon.de/o/ASIN/0898715342/>. 11, 48
- [Sch84] Hubert Schwetlick. *Numerische Lösung nichtlinearer Gleichungen*. Oldenbourg R. Verlag GmbH, 5 1984. Available from: <http://amazon.de/o/ASIN/3486217313/>. 48
- [Smi95] Paul Smit. The Approximation of an Eigenvector by Ritzvectors. Technical report, Tilburg University, Faculty of Economics and Business Administration, January 1995. Available from: <http://greywww.kub.nl:2080/greyfiles/few/1995/doc/684.pdf>.
- [SS01] Hubert Schwetlick and Uwe Schnabel. Block-Newton Rayleigh-Quotient-Iteration is cubically convergent. GAMM Workshop, Numerical Linear Algebra, Berlin, September 2001. Available from: http://www.math.tu-dresden.de/~schwetli/lectures/gla01_lec.ps. 5, 48, 49
- [SW80] H. J. Symm and J. H. Wilkinson. Realistic error bounds for a simple eigenvalue and its associated eigenvector. *Numerische Mathematik*, 35(2):113–126, June 1980. doi:BF01396310. 7, 48, 57, 58
- [Vog01] Werner Vogt. Zur Numerik nichtlinearer Gleichungssysteme (Teil 1). GAMM Workshop, Numerical Linear Algebra, Berlin, Oktober 2001. Available from: <http://www3.tu-ilmenau.de/site/math/fileadmin/template/ifm/user/Vogt/Preprints/pre01-12.pdf>. 48
- [Zha99] Fuzhen Zhang. *Matrix Theory: Basic Results and Techniques (Universitext)*. Springer, Berlin, 1 edition, 6 1999. Available from: <http://amazon.de/o/ASIN/0387986960/>.

Lebenslauf

Persönliches

Name Bastian Ebeling
Geburt 4. April 1978 in Hamburg
Nationalität Deutsch
Familienstand verheiratet, 1 Kind

Schulausbildung

1984 – 1988 Grundschule Bickbargen
1988 – 1997 Wolfgang-Borchert-Gymnasium
Leistungskurse: Mathematik, Physik
Abitur mit 1,7

Studium

1998 – 2003 Technische Universität Hamburg-Harburg
Studiengang: Informatik-Ingenieurwesen
Vertiefungsrichtung: Wissenschaftliches Rechnen
Studienarbeit: Note 1,0 — Titel: „Hashverfahren zur Erzeugung von URL-sicheren Session-Keys“
2002 – 2003 Fachpraktikum und Diplomarbeit, EADS-Airbus, Hamburg
Titel der Diplomarbeit: „Anpassung von Finite Element Modellen an Standschwingungsversuche“

Berufserfahrung

2003 – laufend Wissenschaftlicher Assistent an der Helmut-Schmidt-Universität (Universität der Bundeswehr Hamburg) in der Fakultät Maschinenbau bei der Professur für Numerische Mathematik
2005 – 2006 Dozent (Mathematik/Statistik) an der FOM und VWA

weiteres

1997 – 1998 Grundwehrdienst im 4. AbcAbwBtl 610 (Albersdorf)
2001 – laufend Stipendium: e-fellows.net
2008 – laufend Ehrenamtliches Engagement im VfL Pinneberg:
Vorstandsmitglied und Pressewart der Tanzsportabteilung