

Numerik symmetrischer Matrizen

Unter Mitwirkung von
Prof. Dr. H. RUTISHAUSER und
Prof. Dr. E. STIEFEL

verfaßt von
Privatdozent Dr. sc. math. H. R. SCHWARZ, Zürich

Mit 38 Figuren und 49 Beispielen



BSB B.G. TEUBNER VERLAGSGESELLSCHAFT

Inhalt

1. Euklidischer Vektorraum. Normen. Quadratische Formen. Symmetrisch-definite Gleichungssysteme

1.1. Der lineare Vektorraum, Matrizen	11
1.1.1. Der n -dimensionale Vektorraum	11
1.1.2. Lineare Transformationen. Matrizen	13
1.2. Normen, Kondition einer Matrix	17
1.3. Notwendige und hinreichende Kriterien für die Definitheit einer quadratischen Form	23
1.3.1. Direkte Kriterien, notwendige Bedingungen	23
1.3.1.1. Spezielle Beispiele	23
1.3.1.2. Notwendige Bedingungen	24
1.3.2. Kriterium der überwiegenden positiven Diagonalelemente	25
1.3.3. Systematische Reduktion auf eine Summe von Quadraten	28
1.4. Symmetrische Dreieckszerlegung, Methode von Cholesky	31
1.4.1. Dreiecksmatrizen	31
1.4.2. Die Methode von Cholesky	34
1.4.3. Auflösung symmetrisch-definiten Gleichungssysteme	36
1.4.4. Inversion einer positiv definiten Matrix	40
1.4.5. Symmetrisch-definite Bandmatrizen	41

2. Relaxationsmethoden

2.1. Grundlagen der Relaxationsrechnung	45
2.1.1. Symmetrisch-definites Gleichungssystem als Minimumproblem	45
2.1.2. Grundprinzip der Relaxation	46
2.2. Das Einzelschrittverfahren	48
2.2.1. Handrelaxation	48
2.2.2. Das Einzelschrittverfahren (Gauß-Seidel)	50
2.2.3. Methode der Überrelaxation	55
2.2.4. Optimale Wahl des Überrelaxationsfaktors	59
2.3. Gradientenmethoden	66
2.3.1. Das Prinzip	66
2.3.2. Methode des stärksten Abstiegs	67
2.3.3. Das Gesamtschrittverfahren	68

2.4. Methode der konjugierten Gradienten	71
2.4.1. Herleitung	71
2.4.2. Eigenschaften und Vereinfachungen	72
2.4.3. Der Rechenprozeß	75
3. Ausgleichsrechnung	
3.1. Problemstellung	78
3.1.1. Vermittelnde Ausgleichung	79
3.1.2. Bedingte Ausgleichung	81
3.2. Vermittelnde Ausgleichung	82
3.2.1. Die Gaußschen Normalgleichungen	82
3.2.2. Zur Auflösung der Normalgleichungen	84
3.3. Bedingte Ausgleichung	87
3.3.1. Die Korrelatengleichungen	87
3.3.2. Dualität der Ausgleichung	90
3.4. Die Methode der Orthogonalisierung in der Ausgleichsrechnung	93
3.4.1. Das Schmidtsche Orthogonalisierungsverfahren	93
3.4.2. Anwendung auf Ausgleichsprobleme	96
3.4.3. Numerische Gegenüberstellung mit der Methode von Cholesky.	100
3.5. Die Methode der konjugierten Gradienten in der Ausgleichs- rechnung	103
4. Symmetrische Eigenwertprobleme	
4.1. Eigenwertprobleme der Physik	103
4.2. Kritik des charakteristischen Polynoms	106
4.3. Das Hauptsachsentheorem	109
4.4. Transformation auf Diagonalform. Simultane Berechnung aller Eigenwerte	113
4.4.1. Elementare orthogonale zweidimensionale Drehungen	113
4.4.2. Das klassische Jacobi-Verfahren	116
4.4.3. Zyklische Jacobi-Verfahren	123
4.5. Transformation auf tridiagonale Form. Sturmsche Kette. Berech- nung einzelner Eigenwerte	126
4.5.1. Die Methode von Givens	127
4.5.2. Die Methode von Householder	129
4.5.3. Die Sturmsche Kette	134
4.5.4. Die Eigenwerte von symmetrischen tridiagonalen Matrizen	137
4.5.5. Die Eigenvektoren von tridiagonalen Matrizen	144
4.6. LR-Transformation und QD-Algorithmus. Berechnung der kleinsten Eigenwerte	146
4.6.1. Die LR-Transformation	147

4.6.2. Konvergenzbeweis des LR-Cholesky-Verfahrens	150
4.6.3. Konvergenzverhalten, Koordinatenverschiebung	152
4.6.4. Symmetrisch-definite Bandmatrizen	160
4.6.5. Der QD-Algorithmus	163
4.6.6. Anwendungen des QD-Algorithmus	172
4.7. Vektoriteration. GröÙte und kleinste Eigenwerte	175
4.7.1. Klassische Vektoriteration. Potenzmethode	176
4.7.2. Bestimmung des zweitgrößten Eigenwertes	179
4.7.3. Inverse Vektoriteration	180
4.7.4. Simultane Vektoriteration	182
4.8. Das allgemeine symmetrische Eigenwertproblem	187
4.8.1. Transformation auf ein spezielles symmetrisches Eigenwertproblem	187
4.8.2. Jacobische Methode	188
4.8.3. Methode der Vektoriteration	190
4.9. Übersicht über die Eigenwertmethoden	191
5. Randwertprobleme, Relaxation	
5.1. Randwertprobleme	193
5.1.1. Die Energiemethode	193
5.1.2. Selbstadjungiertheit	195
5.1.3. Diskretisation	197
5.1.4. Struktur der linearen Gleichungen	203
5.2. Operatorgleichungen und Relaxation	206
5.2.1. Elementare Relaxationsmethoden	206
5.2.2. Überrelaxation, Property A	208
5.2.3. Implizite Blockrelaxation	216
5.2.4. Methode der alternierenden Richtungen	223
5.2.5. Methode der konjugierten Gradienten	231
5.3. Das Eigenwertproblem	232
Literatur	235
Sachverzeichnis	239