

RA

**stichting
mathematisch
centrum**



REKENAFDELING

CR 17/70

JUNI

CURSUS WETENSCHAPPELIJK REKENEN B

PROF.DR. E. VAN SPIEGEL
NUMERIEKE ANALYSE, DEEL 1c

RA

2e boerhaavestraat 49 amsterdam

BIBLIOTHEEK MATHEMATISCH CENTRUM
AMSTERDAM

Tweede deel Numerieke Analyse

Lineaire algebra

In de volgende paragrafen behandelen we de numerieke methoden voor het oplossen van problemen uit de lineaire algebra. Die problemen zijn: het oplossen van een stelsel lineaire vergelijkingen, het inverteren van een matrix en het bepalen van de eigenwaarden van een matrix.

13. Matrices

Als inleiding op de behandeling van de genoemde methoden wordt in deze paragraaf een samenvatting gegeven van de matrixtheorie.

Een rechthoekig schema van, in het algemeen, complexe getallen heet een matrix en wordt als volgt genoteerd:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix} \quad (13.1)$$

In verkorte notatie $A = (a_{ij})$, $i=1,2,\dots,n$; $j=1,2,\dots,m$.

De getallen a_{ij} zijn de elementen van de matrix met n rijen en m kolommen.

Twee matrices zijn gelijk als al de overeenkomstige elementen gelijk zijn.

Als $n=1$ (resp. $m=1$) noemen we A een rij (resp. kolom) matrix.

Als $n=m$ dan is A een vierkante matrix.

De vierkante matrix A wordt een diagonaalmatrix genoemd als $a_{ij} = 0$ voor $i \neq j$; als bovendien $a_{11} = a_{22} = \dots = a_{nn}$ heet de matrix scalair.

Een bijzonder geval hiervan is de eenheidsmatrix E : $a_{ii} = 1$.

Tenslotte wordt de matrix waarvan alle elementen gelijk aan nul zijn de nulmatrix O genoemd.

Na het verwisselen van rijen en kolommen in (13.1) krijgen we de getransponeerde matrix

$$A' = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{n1} \\ a_{12} & a_{22} & \dots & a_{n2} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ a_{1m} & a_{2m} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix} \quad (13.2)$$

Een vierkante matrix A is gelijk aan zijn getransponeerde A' dan en alleen dan als A symmetrisch is, d.i. als $a_{ij} = a_{ji}$. Duidelijk is dat de getransponeerde van een kolommatrix een rijmatrix is.

Door de elementen a_{ij} van A te vervangen door $\overline{a_{ij}}$ krijgen we de complex toegevoegde matrix $\overline{A}$. Als alle a_{ij} reëel zijn is $\overline{A} = A$.

De complex toegevoegde matrix van A' noemen we de geconjugeerde A^* van A . Dus $A^* = A'$.

We zien onmiddellijk in dat $(A^*)^* = A$ en dat $A^* = A'$ als A reëel is.

Scalaire vermenigvuldiging en optelling

Zij α een complex getal en A een matrix met elementen a_{ij} , $i=1,2,\dots,n$; $j=1,2,\dots,m$.

Dan is αA de matrix waarvan de elementen zijn

$$\alpha a_{ij}, \quad i=1,2,\dots,n; \quad j=1,2,\dots,m. \quad (13.3)$$

Als $B = (b_{ij})$ evenals A n rijen en m kolommen heeft, dan is

$$A+B = (a_{ij}+b_{ij}), \quad i=1,2,\dots,n; \quad j=1,2,\dots,m. \quad (13.4)$$

Voor deze optelling en scalaire vermenigvuldiging gelden, zoals eenvoudig is na te gaan, de volgende eigenschappen:

1. $A + (B+C) = (A+B) + C$
2. $A+B = B+A$
3. $A+O = A$
4. $(\alpha+\beta)A = \alpha A + \beta A$
5. $\alpha(A+B) = \alpha A + \alpha B$
6. $1 \cdot A = A$
7. $\alpha(\beta A) = (\alpha\beta)A$

Hierin zijn A , B en C matrices, α en β complexe getallen.

Vermenigvuldiging van matrices

Het produkt AB van de matrices A en B wordt slechts gedefinieerd als het aantal kolommen van A gelijk is aan het aantal rijen van B .

Zij $A = (a_{ij})$, $i=1,2,\dots,n$; $j=1,2,\dots,m$
 $B = (b_{ij})$, $i=1,2,\dots,m$; $j=1,2,\dots,p$.

Dan is $AB = (c_{ij})$, $i=1,2,\dots,n$; $j=1,2,\dots,p$

$$\text{met} \quad c_{ij} = \sum_{k=1}^m a_{ik} b_{kj}. \quad (13.5)$$

Opmerking

Het produkt BA bestaat alleen als $n=p$. AB en BA kunnen alleen gelijk zijn als A en B vierkante matrices zijn van dezelfde orde (beide n rijen en n kolommen); zelfs dan geldt in het algemeen niet dat $AB = BA$ zoals blijkt uit het volgende voorbeeld.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5 & 3 \\ -9 & 7 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}.$$

Wel zijn scalaire matrices commutatief met alle vierkante matrices van dezelfde orde. Een bijzonder geval hiervan is $AE = EA = A$.

Eigenschappen matrixvermenigvuldiging

1. De matrixvermenigvuldiging is associatief, d.w.z. als de produkten AB en (AB)C bestaan dan bestaan ook de produkten BC en A(BC) en bovendien

$$(AB)C = A(BC).$$

Bewijs. Het element uit de i^e rij en de j^e kolom van (AB)C is

$$\sum_{\beta} (\sum_{\alpha} a_{i\alpha} b_{\alpha\beta}) c_{\beta j}.$$

$$\sum_{\beta} (\sum_{\alpha} a_{i\alpha} b_{\alpha\beta}) c_{\beta j} = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} a_{i\alpha} b_{\alpha\beta} c_{\beta j} = \sum_{\alpha} a_{i\alpha} (\sum_{\beta} b_{\alpha\beta} c_{\beta j}).$$

Dit is het element uit de i^e rij en de j^e kolom van A(BC).
Dus overeenkomstige elementen uit (AB)C en A(BC) zijn gelijk.

2. $\alpha(AB) = (\alpha A)B = A(\alpha B)$.
3. $(A+B)C = AC + BC$.
 $C(A+B) = CA + CB$.
4. $(AB)' = B'A'$.
5. $\overline{AB} = \overline{A} \overline{B}$.
6. $(AB)^* = B^*A^*$, te bewijzen met 4. en 5.

Partitionning van matrices

Bij matrices van grote orde is het nuttig om matrixbewerkingen terug te brengen tot bewerkingen met matrices van lagere orde. Daarvoor passen we partitionning van matrices toe in cellen. We zullen twee voorbeelden geven om deze verdeling in cellen duidelijk te maken.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{c|ccc} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ \hline a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{cc|cc} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ \hline a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ \hline a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{array} \right).$$

We beperken ons tot partitionning van vierkante matrices. De cellen die diagonaalelementen bevatten heten diagonaalcellen en we nemen in het vervolg aan dat de partitionning zodanig is dat de diagonaalcellen vierkante matrices zijn.

Als A en B, van dezelfde orde, verdeeld zijn in k^2 cellen:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1k} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2k} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ A_{k1} & A_{k2} & \dots & A_{kk} \end{pmatrix} \quad \text{en} \quad B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1k} \\ B_{21} & B_{22} & \dots & B_{2k} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ B_{k1} & B_{k2} & \dots & B_{kk} \end{pmatrix}$$

waarbij bovendien A_{ii} en B_{ii} , diagonaalcellen van A en B, vierkante matrices van gelijke orde zijn, dan geldt:

$$A+B = \begin{pmatrix} A_{11}+B_{11} & A_{12}+B_{12} & \dots & A_{1k}+B_{1k} \\ A_{21}+B_{21} & A_{22}+B_{22} & \dots & A_{2k}+B_{2k} \\ . & . & \dots & . \\ A_{k1}+B_{k1} & A_{k2}+B_{k2} & \dots & A_{kk}+B_{kk} \end{pmatrix}$$

en

$$AB = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1k} \\ C_{21} & C_{22} & \dots & C_{2k} \\ . & . & \dots & . \\ C_{k1} & C_{k2} & \dots & C_{kk} \end{pmatrix}$$

met C_{ii} van dezelfde orde als A_{ii} en

$$C_{ij} = \sum_{\ell=1}^k A_{i\ell} B_{\ell j}, \quad i, j=1, 2, \dots, k. \quad (13.6)$$

Dit laatste zullen we aantonen.

Het produkt $A_{i\ell} B_{\ell j}$ kan gevormd worden, omdat het aantal kolommen van $A_{i\ell}$ gelijk is aan het aantal rijen van $B_{\ell j}$. Deze produkten kunnen opgeteld worden omdat elk produkt een matrix is met evenveel rijen als A_{i1} en evenveel kolommen als B_{1j} . Zij $c_{\alpha\beta}$ een element uit de cel C_{ij} . Dan is

$$\begin{aligned} c_{\alpha\beta} &= (a_{\alpha_1} b_{1\beta} + \dots + a_{\alpha_{s_1}} b_{s_1\beta}) + \\ &+ \dots + \\ &+ (a_{\alpha_{s_{k-1}+1}} b_{s_{k-1}+1\beta} + \dots + a_{\alpha_{s_k}} b_{s_k\beta}). \end{aligned}$$

Hierin zijn $s_1, s_2-s_1, \dots, s_k-s_{k-1}$ de orden van de matrices $A_{11}, A_{22}, \dots, A_{kk}$. De termen tussen de haakjes, waarvan de som $c_{\alpha\beta}$ is, zijn elementen van de matrices $A_{i1} B_{1j}, A_{i2} B_{2j}, \dots, A_{ik} B_{kj}$. Hiermee is aangetoond dat

$$C_{ij} = \sum_{\ell=1}^k A_{i\ell} B_{\ell j}.$$

Een gerande matrix is een speciaal geval van een matrix waarop partitionning is toegepast. We gaan uit van

$$A_{n-1} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n-1} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n-1} \\ . & . & \dots & . \\ a_{n-11} & a_{n-12} & \dots & a_{n-1n-1} \end{pmatrix}.$$

Door toevoegen van een rij, een kolom en een getal krijgen we

$$A_n = \begin{pmatrix} & & & a_{1n} \\ & A_{n-1} & & a_{2n} \\ & & & \vdots \\ & & & a_{n-1n} \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{n-1} & u \\ v & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Evenzo

$$B_n = \begin{pmatrix} B_{n-1} & x \\ y & b_{nn} \end{pmatrix}.$$

Dan geldt

$$A_n + B_n = \begin{pmatrix} A_{n-1} + B_{n-1} & u+x \\ v+y & a_{nn} + b_{nn} \end{pmatrix}$$

en

$$A_n B_n = \begin{pmatrix} A_{n-1} B_{n-1} + uy & A_{n-1} x + b_{nn} u \\ v B_{n-1} + a_{nn} y & vx + a_{nn} b_{nn} \end{pmatrix}.$$

Hierin zijn $A_{n-1} B_{n-1}$ en uy matrices van de orde $n-1$;

$A_{n-1} x$ en $b_{nn} u$ kolommatrices;

$v B_{n-1}$ en $a_{nn} y$ rijmatrices;

vx en $a_{nn} b_{nn}$ getallen.

Een ander speciaal geval van partitionning treedt op als $A_{ij} = 0$ voor $i \neq j$; zo'n matrix noemen we quasi-diagonaal. Als twee quasi-diagonale matrices dezelfde structuur hebben, is volgens (13.6) hun produkt ook weer quasi-diagonaal. De determinant van een quasi-diagonaal matrix is het produkt der determinanten van de diagonaalcellen.

Inverse en geadjungeerde matrices

Een vierkante matrix A heet niet-singulier als $\det A \neq 0$. We zeggen dat de matrix B de inverse is van de vierkante matrix A als

$$AB = E \quad (13.7)$$

Opdat de inverse matrix van A bestaat is nodig en voldoende dat $\det A \neq 0$.

1. Nodig. $AB = E$, dus $\det A \cdot \det B = 1$ ofwel als de inverse bestaat is $\det A \neq 0$.

2. Voldoende.

We beschouwen de geadjungeerde matrix van A . Dit is de matrix

$$C = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{21} & \dots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \dots & A_{n2} \\ . & . & \dots & . \\ A_{1n} & A_{2n} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

waarin A_{ij} de algebraïsche cofactor van a_{ij} is (d.i. de onderdeterminant van a_{ij} vermenigvuldigd met $(-1)^{i+j}$.)

Het element in de i^e rij en de j^e kolom van AC is

$$d_{ij} = a_{i1} A_{j1} + a_{i2} A_{j2} + \dots + a_{in} A_{jn}.$$

Volgens een bekende stelling uit de theorie der determinanten is

$$\begin{aligned} d_{ij} &= 0 \text{ als } i \neq j \\ d_{ij} &= \det A \text{ als } i = j. \end{aligned} \quad (13.8)$$

Dus $AC = (\det A)E$. Evenzo is $CA = (\det A)E$.

Bij iedere vierkante matrix bestaat de geadjungeerde matrix. De matrix $B = (\det A)^{-1}C$ is de inverse matrix van de niet-singuliere matrix A want

$$AB = A(\det A)^{-1}C = (\det A)^{-1}AC = E.$$

Deze matrix B heeft ook de eigenschap $BA = E$, omdat $CA = (\det A)E$.

Tenslotte zullen we aantonen dat de inverse matrix eenduidig bepaald is.

Stel dat er een matrix X bestaat zó dat $AX = E$. Dan is $BAX = BE$.

$BE = B$ en $BAX = X$. Dus $X = B$.

Als verondersteld wordt dat $YA = E$ dan geldt $YAB = EB$.

Maar $EB = B$ en $YAB = Y$, dus $Y = B$.

De inverse matrix van de matrix A schrijven we als A^{-1} . A^{-1} heeft de volgende eigenschappen:

1. $\det(A^{-1}) = (\det A)^{-1}$;
2. $(A^{-1})^{-1} = A$;
3. $(A_1 A_2)^{-1} = A_2^{-1} A_1^{-1}$, immers $A_1 A_2 A_2^{-1} A_1^{-1} = E$.

Polynomen van matrices

Als n een natuurlijk getal is, definiëren we

$$A^n = A \cdot A \dots A \quad (n \text{ factoren } A).$$

Omdat de matrixvermenigvuldiging associatief is kunnen we dit produkt zonder haakjes schrijven.

Voorts stellen we $A^0 = E$. Eigenschappen:

$$A^n A^m = A^{n+m}$$

$$(A^n)^m = A^{nm}.$$

Een uitdrukking van de vorm

$$\alpha_0 A^n + \alpha_1 A^{n-1} + \dots + \alpha_n E$$

waarin α_i getallen zijn, heet een matrixpolynoom, door substitutie van de matrix verkregen uit het algebraïsch polynoom

$$\varphi(t) = \alpha_0 t^n + \alpha_1 t^{n-1} + \dots + \alpha_n.$$

De rekenregels voor matrixpolynomen verschillen niet van de rekenregels voor algebraïsche polynomen. Als bijvoorbeeld voor iedere t geldt

$$\rho(t) = \psi(t) + \chi(t)$$

dan geldt voor iedere matrix A

$$\rho(A) = \psi(A) + \chi(A).$$

Het karakteristiek polynoom

De vergelijking

$$\begin{vmatrix} a_{11} - t & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{12} & a_{22} - t & \dots & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ a_{1n} & a_{2n} & \dots & a_{nn} - t \end{vmatrix} = 0$$

wordt de karakteristieke vergelijking van de matrix $A = (a_{ij})$ genoemd. Het linkerlid is het karakteristiek polynoom $\det(A - tE)$ van de matrix A . Zij

$$\varphi(t) = \det(A - tE) = (-1)^n (t^n - p_1 t^{n-1} - p_2 t^{n-2} - \dots - p_n)$$

dan

$$\begin{aligned} p_1 &= a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn} \\ p_n &= (-1)^{n+1} \det A. \end{aligned} \quad (13.9)$$

De nulpunten van het karakteristiek polynoom heten de eigenwaarden van de matrix. Als $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ de eigenwaarden zijn van A dan geldt dus:

$$\varphi(t) = (-1)^n (t - \lambda_1)(t - \lambda_2) \dots (t - \lambda_n).$$

Volgens bekende eigenschappen van nulpunten van polynomen geldt

$$\begin{aligned}\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n &= p_1 \\ \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n &= (-1)^{n-1} p_n.\end{aligned}\quad (13.10)$$

Als we (13.9) en (13.10) combineren krijgen we

$$\begin{aligned}\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n &= a_1 + a_2 + \dots + a_n \\ \text{en } \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n &= \det A.\end{aligned}$$

Opmerking

$a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn}$ noemen we het spoor van matrix A, notatie $\text{Sp}(A)$, of $\text{Tr}(A)$ van het engelse trace.

De stelling van Cayley-Hamilton

Als $\varphi(t)$ het karakteristieke polynoom is van de matrix A, dan is $\varphi(A) = 0$.

Bewijs

Zij B de geadjungeerde van de matrix $A - tE$. Iedere algebraïsche cofactor van $A - tE$, dus ieder element van B is een polynoom in t, hoogstens van de graad $n-1$. Daarom kunnen we schrijven:

$$B = B_{n-1} + B_{n-2}t + \dots + B_0 t^{n-1},$$

hierin zijn $B_{n-1}, B_{n-2}, \dots, B_0$ matrices die onafhankelijk zijn van t. Volgens (13.8) is

$$\begin{aligned}(B_{n-1} + B_{n-2}t + \dots + B_0 t^{n-1})(A - tE) &= \det(A - tE)E \\ &= (-1)^n (t^n - p_1 t^{n-1} - \dots - p_n)E.\end{aligned}$$

Deze identiteit is equivalent met het volgende stelsel gelijkheden.

$$\begin{aligned}B_{n-1}A &= (-1)^{n+1} p_n E && \times E \\ B_{n-2}A - B_{n-1} &= (-1)^{n+1} p_{n-1} E && \times A \\ \cdot &\cdot && \cdot \\ B_0 A - B_1 &= (-1)^{n+1} p E && \times A^{n-1} \\ - B_0 &= (-1)^n E && \times A^n\end{aligned}$$

Als we nu deze $(n+1)$ gelijkheden rechts vermenigvuldigen met resp. $E, A, A^2, \dots, A^{n-1}, A^n$ en dan sommeren, dan is het linkerlid van de aldus verkregen matrix-gelijkheid de nulmatrix en het rechterlid is

$$(-1)^n (A^n - p_1 A^{n-1} - \dots - p_{n-1} A - p_n E) = \varphi(A).$$

Dus $\varphi(A) = 0$.

Het minimaalpolynoom

Volgens de stelling van Cayley-Hamilton is er bij een matrix een polynoom waarvan de matrix nulpunt is, want voor het karakteristiek polynoom $\varphi(t)$ van matrix A geldt $\varphi(A) = \mathcal{O}$. Het polynoom met A als nulpunt is niet eenduidig bepaald immers als $\phi(A) = \mathcal{O}$ dan zal ook $\chi(A) = \mathcal{O}$ als $\chi(t)$ deelbaar is door $\phi(t)$.

Het polynoom van de laagste graad met de eigenschap dat de matrix A er nulpunt van is heet het minimaalpolynoom van de matrix. Dit polynoom is op een constante factor na bepaald.

Stelling. Het karakteristiek polynoom $\varphi(t)$ is deelbaar door het minimaalpolynoom $\phi(t)$.

Bewijs

Als we $\varphi(t)$ delen door $\phi(t)$ krijgen we het quotient $q(t)$ en de rest $r(t)$.

Ofwel $\varphi(t) = \phi(t)q(t) + r(t)$.

Hierin is de graad van $r(t)$ kleiner dan de graad van $\phi(t)$.

Als we de matrix A substitueren krijgen we

$$r(A) = \varphi(A) - \phi(A)q(A) = \mathcal{O}, \text{ want } \varphi(A) = \phi(A) = \mathcal{O}.$$

Dus de matrix A is nulpunt van het polynoom $r(t)$. Maar dan is $r(t) \equiv 0$, want anders zou $\phi(t)$ niet het minimaalpolynoom zijn. Dus $\varphi(t)$ is deelbaar door $\phi(t)$.

Op dezelfde manier kan aangetoond worden dat elk polynoom $w(t)$, waarvoor $w(A) = \mathcal{O}$, deelbaar is door het minimaalpolynoom.

Voorbeeld

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \varphi(t) = (1-t)^3 \quad \text{en} \quad \phi(t) = 1-t \quad \text{want} \quad E - A = \mathcal{O}.$$

Gelijkvormige matrices

We definiëren dat de matrix B gelijkvormig is met de matrix A als er een niet-singuliere matrix C bestaat, zodat $B = C^{-1}AC$. De matrix B wordt uit de matrix A verkregen door middel van een gelijkvormigheidstransformatie.

Eigenschappen.

$$1. C^{-1}A_1C + C^{-1}A_2C + \dots + C^{-1}A_nC = C^{-1}(A_1 + A_2 + \dots + A_n)C$$

$$2. C^{-1}A_1C \cdot C^{-1}A_2C \cdot \dots \cdot C^{-1}A_nC = C^{-1}(A_1A_2 \dots A_n)C$$

$$\text{In het bijzonder } (C^{-1}AC)^n = C^{-1}A^nC$$

Bovendien geldt voor ieder polynoom $f(t)$

$$f(C^{-1}AC) = C^{-1}f(A)C$$

Uit dit laatste volgt onmiddellijk:

gelijkvormige matrices hebben hetzelfde minimaalpolynoom.

Opmerking. In het vervolg schrijven we $|A|$ voor $\det A$.

3. Gelijkvormige matrices hebben hetzelfde karakteristiek polynoom.

$$\text{Bewijs. Als } B = C^{-1}AC \text{ dan } |B - tE| = |C^{-1}AC - tC^{-1}EC| =$$

$$|C^{-1}| |A - tE| |C| = |A - tE|.$$

Eigenwaarden van matrixpolynomen

Stelling. Als $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ de eigenwaarden zijn van de matrix A , dan heeft het matrixpolynoom $f(A)$, afgeleid van het polynoom $f(t)$ de eigenwaarden $f(\lambda_1), f(\lambda_2), \dots, f(\lambda_n)$.

Bewijs. Eerst bepalen we $|f(A)|$.

Als $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_m$ de nulpunten zijn van $f(t) = a_0 + a_1 t + \dots + a_m t^m$ dan is

$$f(t) = a_m (t - \mu_1)(t - \mu_2) \dots (t - \mu_m)$$

Daaruit volgt dat

$$f(A) = a_m (A - \mu_1 E)(A - \mu_2 E) \dots (A - \mu_m E)$$

en dus

$$\begin{aligned} |f(A)| &= a_m^n |A - \mu_1 E| |A - \mu_2 E| \dots |A - \mu_m E| = \\ &= a_m^n \varphi(\mu_1) \varphi(\mu_2) \dots \varphi(\mu_m). \end{aligned}$$

Voor het karakteristiek polynoom $\varphi(t)$ van de matrix A geldt

$$\varphi(t) = (\lambda_1 - t)(\lambda_2 - t) \dots (\lambda_n - t).$$

Daarom kunnen we schrijven

$$|f(A)| = a_m^n \prod_{j=1}^m \varphi(\mu_j) = a_m^n \prod_{j=1}^m \prod_{i=1}^n (\lambda_i - \mu_j) = \prod_{i=1}^n a_m \prod_{j=1}^m (\lambda_i - \mu_j)$$

ofwel

$$|f(A)| = \prod_{i=1}^n f(\lambda_i) \quad (13.11)$$

(13.11) is een identiteit t.a.v. de coëfficiënten $a_0, a_1, \dots, a_m$ van het polynoom $f(t)$.

Nu passen we (13.11) toe op het polynoom $f(t) - u$.

Het resultaat is

$$|f(A) - uE| = (f(\lambda_1) - u)(f(\lambda_2) - u) \dots (f(\lambda_n) - u).$$

Dit betekent dat $f(\lambda_1), f(\lambda_2), \dots, f(\lambda_n)$ de eigenwaarden zijn van $f(A)$.

Uit deze stelling leiden we af dat $\lambda_1^k, \lambda_2^k, \dots, \lambda_n^k$ de eigenwaarden zijn van de matrix A^k .

Elementaire transformaties van matrices

Voor numerieke methoden zijn de volgende eenvoudige bewerkingen op matrices belangrijk.

- a) Het vermenigvuldigen van de elementen van een rij met een getal.
- b₁) Een rij vermeerderen met het scalaire veelvoud van een voorafgaande rij.
- b₂) Een rij vermeerderen met het scalaire veelvoud van een volgende rij.

Elk van deze transformaties is equivalent met linksvermenigvuldiging van de matrix met een niet-singuliere matrix van een speciaal type.

ad a. Linksvermenigvuldiging uitvoeren met de matrix

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \alpha & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \quad (13.12)$$

Bij de i° rij wordt het a -voud van de j° rij opgeteld.
Voorbeeld

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & a \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & c \\ x & y & z \\ u & v & w \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b & c \\ x+au & y+av & z+aw \\ u & v & w \end{pmatrix}$$

Opmerking. Om analoge bewerkingen uit te voeren met kolommen moeten we rechts-vermenigvuldigingen uitvoeren met de boven aangeduide matrices.

Een vierkante matrix (a_{ij}) ($i, j = 1, 2, \dots, n$) waarvoor geldt $a_{ij} = 0$ voor $i < j$ heet een linkertriangulaire matrix (L-matrix). Als $a_{ij} = 0$ voor $i > j$ is het een rechtertriangulaire matrix (R-matrix).

Eigenschappen.

1. De determinant van een triangulaire matrix is het product van de elementen op de diagonaal.
2. Het product van L(resp.R)-matrices is weer een L(resp.R)-matrix.
3. De inverse van een triangulaire, niet singuliere matrix is triangulair.

Het resultaat van successieve transformaties van het type a en b_1 wordt met één linksvermenigvuldiging met een L-matrix

$$C = \begin{pmatrix} c_{11} & 0 & . & . & . & 0 \\ c_{21} & c_{22} & . & . & . & 0 \\ . & . & . & . & . & . \\ c_{n1} & c_{n2} & . & . & . & c_{nn} \end{pmatrix}$$

verkregen omdat (13.12) en (13.13) L-matrices zijn.

Evenzo wordt het resultaat van opeenvolgende bewerkingen van het type a en b_2 met één linksvermenigvuldiging met een R-matrix

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & . & . & . & b_{1n} \\ 0 & b_{22} & . & . & . & b_{2n} \\ . & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & . & . & . & b_{nn} \end{pmatrix}$$

verkregen omdat (13.12) en (13.14) R-matrices.

Opmerking. Successieve bewerkingen van het type a en b_1 (resp. a en b_2) op kolommen komen overeen met één rechtsvermenigvuldiging met een R^2 (resp.L)-matrix.

LR-decompositie van een matrixStelling. De matrix

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{nn} \end{pmatrix}$$

kan geschreven worden als het product van een L-matrix C en een R-matrix B als

$$a_{11} \neq 0, \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \neq 0, \dots, \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{1n-1} \\ a_{21} & a_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{2n-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{n-1,n-1} \end{pmatrix} \neq 0.$$

Bewijs. We passen volledige inductie toe.

Voor $n = 1$ is de bewering triviaal: $a_{11} = b_{11} c_{11}$, waarin een der factoren willekeurig $\neq 0$ gekozen wordt.

Neem aan dat de stelling geldt voor matrices van de orde $k-1$.

De matrix

$$A_k = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{2k} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{kk} \end{pmatrix}$$

wordt beschouwd als een gerande matrix.

Dus

$$A_k = \begin{pmatrix} A_{k-1} & u \\ v & a_{kk} \end{pmatrix}$$

We zoeken triangulaire matrices C_k en B_k , eveneens volgens rand-partitio-ning, te schrijven als

$$C_k = \begin{pmatrix} C_{k-1} & \sigma \\ x & c_{kk} \end{pmatrix}$$

$$B_k = \begin{pmatrix} B_{k-1} & y \\ \sigma & b_{kk} \end{pmatrix}$$

en wel zó dat

$$A_k = C_k B_k.$$

Volgens (13.6) krijgen we voor het product van gerande matrices

$$C_k B_k = \begin{pmatrix} C_{k-1} B_{k-1} & C_{k-1} y \\ x B_{k-1} & xy + c_{kk} b_{kk} \end{pmatrix}$$

Dit matrixproduct zal de matrix A_k zijn als C_{k-1} , B_{k-1} , x , y , b_{kk} en c_{kk} aan de volgende voorwaarden voldoen.

$$C_{k-1} B_{k-1} = A_{k-1} \quad (13.16)$$

$$C_{k-1} y = u \quad (13.17)$$

$$x B_{k-1} = v \quad (13.18)$$

$$xy + c_{kk} b_{kk} = a_{kk} \quad (13.19)$$

De triangulaire matrices C_{k-1} en B_{k-1} die aan (13.16) voldoen bestaan volgens de inductie-aanname.

Uit de voorwaarde $|A_{k-1}| \neq 0$ volgt dat $|C_{k-1}| \neq 0$ en $|B_{k-1}| \neq 0$.

Daarom zijn de kolom y en de rij x bepaald door de betrekkingen

$$y = C_{k-1}^{-1} u$$

$$x = v B_{k-1}^{-1}$$

De diagonaalelementen c_{kk} en b_{kk} moeten nog bepaald worden uit de vergelijking

$$c_{kk} b_{kk} = a_{kk} - xy.$$

Een van deze factoren kan willekeurig gekozen worden, de andere factor is dan volledig bepaald.

Dus is A_k te schrijven als het product van twee triangulaire matrices.

Uit het bewijs volgt dat de decompositie eenduidig is als we tevoren de diagonaalelementen van één van de triangulaire matrices vastleggen.

In het vervolg nemen we $b_{ii} = 1$ ($i = 1, 2, \dots, n$).

Tenslotte kunnen we de volgende ontbinding krijgen:

$$A = \tilde{C} \Lambda B \quad (= CB).$$

Hierin is $\tilde{C}_{ii} = 1$ en Λ de diagonaal matrix met de diagonaalelementen $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ van C als elementen.

$$\alpha_1 = \frac{|A_1|}{|A_{1-1}|} \text{ want uit de partitionning volgt:}$$

$$|A_1| = |C_1| |B_1| = c_{11} |C_{1-1}| b_{11} |B_{1-1}| = c_{11} |C_{1-1} B_{1-1}| = \alpha_1 |A_{1-1}|.$$

Opmerking

De voorwaarden $|A_i| \neq 0$, $i = 1, 2, \dots, n-1$ zijn voor de decompositie ook nodig zoals ten overvloede blijkt bij het uitschrijven van de matrixvergelijking:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & 0 & \dots & 0 \\ c_{21} & c_{22} & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ c_{n1} & c_{n2} & \dots & c_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ 0 & 1 & \dots & b_{2n} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Dan krijgen we nl.

$$\begin{cases} c_{j1} = a_{j1} & j = 1, 2, \dots, n \\ b_{1j} = \frac{a_{1j}}{c_{11}} & j = 2, 3, \dots, n \end{cases}$$

$$\begin{cases} c_{j2} = a_{j2} - c_{j1} b_{12} & j = 2, 3, \dots, n \\ b_{2j} = \frac{1}{c_{22}} (a_{2j} - c_{21} b_{1j}) & j = 3, 4, \dots, n \end{cases}$$

$$\begin{cases} c_{j3} = a_{j3} - c_{j1} b_{13} - c_{j2} b_{23} & j = 3, 4, \dots, n \\ b_{3j} = \frac{1}{c_{33}} (a_{3j} - c_{31} b_{1j} - c_{32} b_{2j}) & j = 4, 5, \dots, n \end{cases}$$

etc.

De elementen b_{ij} bestaan slechts als alle $c_{ii} \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n-1$) d.i. als al de principaalminoren $|A_i|$ ongelijk zijn aan nul.

Decompositie van in cellen verdeelde matrices

Een in cellen verdeelde matrix B heet een rechterquasi-triangelulaire matrix als alle cellen B_{ij} met $i > j$ nulmatrices zijn. Als alle cellen C_{ij} met $i < j$ nulmatrices zijn in de partitioned matrix C, dan is dit een linkerquasi-triangelulaire matrix.

Stelling. Als de matrices

$$A_1 = A_{11}, A_2 = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}, \dots, A_{n-1} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1, n-1} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2, n-1} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ A_{n-1,1} & A_{n-1,2} & \dots & A_{n-1, n-1} \end{pmatrix}$$

niet singulier zijn dan is de partitioned matrix

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

voor te stellen als het product van een linker en een rechter-quasi-triangelaire matrix. In één van die matrices kunnen voor de diagonaalcellen willekeurige, niet-singuliere matrices van geschikte orde gekozen worden.

Het bewijs verloopt analoog met dat van de vorige paragraaf. Voor de matrix A_{11} is de decompositie

$$A_{11} = A_{11} E.$$

Stel: voor A_{n-1} is de ontbinding

$$A_{n-1} = C_{n-1} B_{n-1}$$

al verkregen.

We nemen weer randpartitioning voor A_n , dus

$$A = \begin{pmatrix} A_{n-1} & U \\ V & A_{nn} \end{pmatrix}$$

en we zoeken quasi-triangelaire matrices van de vorm

$$B_n = \begin{pmatrix} B_{n-1} & Y \\ \sigma & B_{nn} \end{pmatrix} \quad \text{en} \quad C = \begin{pmatrix} C_{n-1} & \sigma \\ X & C_{nn} \end{pmatrix}$$

De voorwaarde $A_n = C_n B_n$ geeft de volgende vergelijkingen

$$C_{n-1} B_{n-1} = A_{n-1} \quad (13.20)$$

$$C_{n-1} Y = U \quad (13.21)$$

$$X B_{n-1} = V \quad (13.22)$$

$$XY + C_{nn} B_{nn} = A_{nn} \quad (13.23)$$

De quasi-triangelaire matrices C_{n-1} en B_{n-1} die aan (13.20) voldoen bestaan volgens de inductie aanname.

$|A_{n-1}| \neq 0$ en dus ook $|B_{n-1}| \neq 0$ en $|C_{n-1}| \neq 0$. Uit (13.21) en (13.22) volgt:

$$Y = C_{n-1}^{-1} U$$

$$X = V B_{n-1}^{-1}$$

en tenslotte

$$B_{nn} = C_{nn}^{-1} (A_{nn} - XY),$$

waarin we voor C_{nn} een willekeurige niet-singuliere matrix hebben genomen.

Matrixnotatie voor een stelsel lineaire vergelijkingen

We beschouwen n vergelijkingen met n onbekenden

[illegible]

In matrixnotatie krijgen we de matrixvergelijking

$$Ax = f \quad (13.25)$$

waarin A de coëfficiëntenmatrix (a_{ij})

f de kolom van constante termen

x de kolom met onbekenden.

Als A niet-singulier is, levert linksvermenigvuldiging met A^{-1} de oplossing

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{f} = \frac{1}{|\mathbf{A}|} \mathbf{B} \mathbf{f}, \quad (13.26)$$

waarin B de geadjungeerde matrix van A is.

In (13.26) staat dat

$$\cdot x_i = \frac{A_{1i}^f + A_{2i}^f + \dots + A_{ni}^f}{|A|} \quad (13.27)$$

(A_{ji} is de algebraïsche cofactor van het element a_{ji})

We herkennen (13.27) als de regel van Cramer voor het oplossen van een stelsel lineaire vergelijkingen, want in de teller staat de determinant van de matrix uit A verkregen door daarin de i^e kolom te vervangen door de kolom f .

Kwadratische vormen

Een kwadratische vorm is een homogeen polynoom van de tweede graad in verschillende variabelen. In deze vorm schrijven we de coëfficiënt van het product van ongelijke variabelen als som van twee gelijke termen. Uitgeschreven levert dit

[illegible]

met $a_{ij} = a_{ji}$.

De matrix

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

heet de matrix van de kwadratische vorm F . Deze matrix is symmetrisch. Met een kwadratische vorm is één-éénduidig een symmetrische matrix verbonden.

We kunnen een kwadratische vorm in matrixnotatie weergeven.

Immers

$$\begin{aligned} F(x_1, x_2, \dots, x_n) &= x_1(a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n) \\ &\quad + x_2(a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n) \\ &\quad \dots \\ &\quad + x_n(a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n) \end{aligned}$$

$$= (x_1, x_2, \dots, x_n) \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n \end{pmatrix}$$

$$= (x_1, x_2, \dots, x_n) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = x' Ax$$

waarin $x' = (x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Een reële kwadratische vorm heet positief definitief als

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) > 0 \quad \text{voor } (x_1, x_2, \dots, x_n) \neq (0, 0, \dots, 0).$$

De reële symmetrische matrix $A = (a_{ij})$ wordt positief definitief genoemd als de kwadratische vorm

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} x_i x_j \quad \text{positief definitief is.}$$

De eenheidsmatrix is positief definitief want $x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2$ heeft deze eigenschap.

Een quasi-diagonaalmatrix is dan en alleen dan positief definitief als de cellen ervan positief definitief zijn.

We zullen onderzoeken hoe de coëfficiënten van een kwadratische vorm veranderen als de variabelen een lineaire transformatie ondergaan.

Veronderstel dat

$$\begin{aligned} x_1 &= b_{11}y_1 + b_{12}y_2 + \dots + b_{1n}y_n \\ x_2 &= b_{21}y_1 + b_{22}y_2 + \dots + b_{2n}y_n \\ &\vdots \\ x_n &= b_{n1}y_1 + b_{n2}y_2 + \dots + b_{nn}y_n \end{aligned}$$

ofwel $x = By$.

Dan krijgen we dat de kwadratische vorm als volgt transformeert

$$\mathbf{x}'\mathbf{A}\mathbf{x} = (\mathbf{B}\mathbf{y})'\mathbf{A}(\mathbf{B}\mathbf{y}) = \mathbf{y}'\mathbf{B}'\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{y} = \mathbf{y}'\mathbf{C}'\mathbf{y}$$

met $C = B'AB$.

C is ook symmetrisch want $C' = (B'AB)' = B'A(B')' = B'AB = C$.

Stelling. Een positief definitie kwadratische vorm blijft positief definit bij een lineaire transformatie der variabelen als de transformatie matrix niet-singulier is.

Bewijs. We moeten aantonen dat $y'B'ABy$ positief definit is als $x'Ax$ positief definit is.

Stel dat $y_0' B' A B y_0 \leq 0$. Dan zou $x' A x \leq 0$ zijn voor $x = B y_0$. Maar dit is alleen mogelijk voor $B y_0 = 0$. B is niet singulier, dus alleen voor $y_0 = 0$ is $y_0' B' A B y_0 \leq 0$.

Gauss-transformaties

Het stelsel lineaire vergelijkingen

$$Ax = f \quad (13.29)$$

waarin de coëfficiëntenmatrix A niet singulier is, kan herleid worden tot een stelsel vergelijkingen waarvan de coëfficiënten-matrix symmetrisch en positief definit is.

Stelling. Als A niet singulier is, dan zijn de symmetrische matrices AA' en $A'A$ positief definit.

Bewijs. De kwadratische vorm $x'Ex$ is positief definit. Dus zijn ook $x'A'EAx$ en $x'AEA'x$ positief definit, want A is niet singulier.

Conclusie: AA' en $A'A$ zijn positief definitief.

We vermenigvuldigen (13.29) links met A' :

$$A'Ax = A'f \quad (13.30)$$

Deze vergelijkingen, met dezelfde oplossing als (13.29) hebben nu een symmetrische, positief definitie coëfficiëntenmatrix. (13.30) werd verkregen door de z.g. linker Gauss-transformatie.

Bij de rechter Gauss-transformatie beschouwen we i.p.v. (13.29) het hulpsysteem

$$AA'y = f \quad (13.31)$$

De oplossing van (13.29) vinden we uit die van (13.31) met de formule

$$x = A'y.$$

Opmerking

Het product van symmetrische matrices is niet altijd een symmetrische matrix. Als A en B symmetrische matrices zijn, dan

$$(AB)' = B'A' = BA.$$

Dus $(AB)' = AB$ dan en alleen dan als A en B commuteren.

Orthogonale matrices

Een reële matrix $A = (a_{ij})$ $i, j = 1, 2, \dots, n$ heet orthogonaal als

$$\sum_{i=1}^n a_{ij}^2 = 1 \quad j = 1, 2, \dots, n$$

(13.32)

$$\text{en } \sum_{i=1}^n a_{ij} a_{ik} = 0 \text{ voor } j \neq k$$

dus als $A'A = E$.

Eigenschappen

1. E is orthogonaal
2. Als A orthogonaal is, dan $A' = A^{-1}$
3. Als A orthogonaal is, dan is A' ook orthogonaal.
Daarom geldt voor orthogonale matrices ook:

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}^2 = 1 \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$\text{en } \sum_{j=1}^n a_{ij} a_{kj} = 0 \text{ voor } i \neq k$$

4. Als de matrices A en B orthogonaal zijn, dan is ook AB orthogonaal. Immers $(AB)'AB = B'A'AB = B'EB = E$.
5. Als A orthogonaal is dan

$$1 = |E| = |A'A| = |A'| |A| = |A|^2.$$

Dus $A = +1$ (direct orthogonaal) of -1 (gespiegeld orthogonaal).

De elementaire rotatie matrices zijn orthogonale matrices van de vorm

$$T_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & c & & -s & & & & \\ & & \vdots & & \vdots & & & & \\ & & \vdots & & \vdots & & & & \\ & & s & & c & & & & \\ & & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} i \\ j \end{matrix}$$

waarbij $c^2 + s^2 = 1$.

Er is een hoek φ zó dat $\cos \varphi = c$ en $\sin \varphi = s$.
De matrix

$$\begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}$$

beschrijft de coördinatentransformatie bij een rotatie over een hoek φ in het platte vlak.

Door de matrix T_{ij} wordt deze rotatie ingebed in de n -dimensionale ruimte.

De matrix T_{ij} wordt toegepast om een matrix te transformeren.

1. $A = (a_{\alpha\beta})$ linksvermenigvuldigen met T_{ij} : $A^{(1)} = T_{ij}A = (a_{\alpha\beta}^{(1)})$

$A^{(1)}$ verschilt alleen in de i^e en j^e rij van A .

$$a_{i\beta}^{(1)} = c a_{i\beta} - s a_{j\beta} \quad \beta = 1, 2, \dots, n \quad (13.33)$$

$$a_{j\beta}^{(1)} = s a_{i\beta} + c a_{j\beta}$$

2. $A = (a_{\alpha\beta})$ rechtsvermenigvuldigen met T_{ij} : $A^{(2)} = AT_{ij} = (a_{\alpha\beta}^{(2)})$

$A^{(2)}$ verschilt alleen in de i^e en j^e kolom van A .

$$a_{\alpha i}^{(2)} = c a_{\alpha i} + s a_{\alpha j} \quad \alpha = 1, 2, \dots, n \quad (13.34)$$

$$a_{\alpha j}^{(2)} = -s a_{\alpha i} + c a_{\alpha j}$$

ad 1. Stel tenminste één der twee elementen $a_{i\beta}$ en $a_{j\beta}$ is ongelijk aan nul.
Dan zijn de getallen c en s zó te kiezen dat in $A^{(1)}$ het element $a_{j\beta}^{(1)} = 0$
Daartoe kiezen we volgens (13.33)

$$s = -\frac{a_{j\beta}}{\sqrt{a_{i\beta}^2 + a_{j\beta}^2}} \quad \text{en} \quad c = \frac{a_{i\beta}}{\sqrt{a_{i\beta}^2 + a_{j\beta}^2}} \quad (13.35)$$

Bij deze keuze van c en s krijgen we

$$\begin{aligned} a_{i\beta}^{(1)} &= \sqrt{a_{i\beta}^2 + a_{j\beta}^2} > 0 \\ a_{j\beta}^{(1)} &= 0. \end{aligned} \quad (13.36)$$

Stelling. Iedere reële, niet singuliere matrix kan door een rij van links vermenigvuldigingen met elementaire rotatie matrices getransformeerd worden in een rechter triangulaire matrix waarvan alle diagonaalelementen, behalve eventueel het laatste element, positief zijn.

Bewijs. Zij

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ . & . & \dots & . \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

een niet singuliere matrix. We vermenigvuldigen matrix A successievelijk met de elementaire rotatiematrices $T_{12}, T_{13}, \dots, T_{1n}$. Deze matrices worden zo gekozen dat we achtereenvolgens alle elementen van de eerste kolom, behalve het eerste element dat positief wordt, gelijk maken aan nul. Deze rij van transformaties levert

$$A^{(1)} = T_{1n} T_{1n-1} \dots T_{13} T_{12} A = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ . & . & \dots & . \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}$$

Hierin is $a_{11}^{(1)} > 0$ volgens (13.36).

Als $a_{21} = a_{31} = \dots = a_{n1} = 0$ en $a_{11} < 0$ dan vermenigvuldigen we A links met de diagonaalmatrix $(-1, 1, 1, \dots, 1, -1)$.

Omdat $A^{(1)}$ niet singulier is, is tenminste één der elementen $a_{22}^{(1)}, a_{32}^{(1)}, \dots, a_{n2}^{(1)}$ ongelijk aan nul. Nu vermenigvuldigen we $A^{(1)}$ achtereenvolgens met $T_{23}, T_{24}, \dots, T_{2n}$ zodanig dat alle elementen op de tweede kolom onder de diagonaal nul worden. Dit proces zetten we voort tot we uiteindelijk krijgen:

$$A^{(n-1)} = T_{n-1,n} T_{n-2,n} T_{n-2,n-1} \dots T_{13} T_{12} A = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ . & . & \dots & . \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

(13.37)

waarin alle $a_{ii}^{(i)}$ behalve eventueel $a_{nn}^{(n-1)}$, positief zijn.

Opmerkingen

1. Om de matrix $A^{(n-1)}$ te verkrijgen moeten hoogstens $\frac{1}{2}n(n-1)$ matrix vermenigvuldigingen uitgevoerd worden.

2. Uit (13.37) volgt

$$A = Q A^{(n-1)} \quad (13.38)$$

waarin $A^{(n-1)}$ een rechter triangulaire matrix en

$$Q = (T_{n-1,n} T_{n-2,n} T_{n-2,n-1} \dots T_{13} T_{12})^{-1}.$$

Volgens (13.38) is dus iedere niet singuliere matrix te schrijven als het produkt van een direkt orthogonale matrix en een rechter triangulaire matrix (QR-decompositie).

3. Als A singulier is, is de QR-decompositie ook mogelijk. Dan zijn niet alle diagonaalelementen van de R-matrix ongelijk aan nul.
Voorbeeld

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{5} & 2\sqrt{5} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Stelling. Iedere direkt orthogonale matrix is een produkt van elementaire rotatie matrices.

Bewijs. Zij A een direkt orthogonale matrix. Dan is volgens (13.37)

$$A = T_{12}^{-1} T_{13}^{-1} \dots T_{n-1,n}^{-1} A^{(n-1)}$$

waarin alle diagonaalelementen van $A^{(n-1)}$ positief zijn.

We zullen aantonen dat $A^{(n-1)} = E$.

$A^{(n-1)}$ is evenals A direkt orthogonaal. Dus is $a_{11}^{(1)} = 1$, want de som van de kwadraten der elementen van de eerste kolom is één. Omdat de som van de produkten van de elementen van de eerste kolom met de overeenkomstige elementen van de andere kolommen nul is, geldt

$$a_{12}^{(1)} = a_{13}^{(1)} = \dots = a_{1n}^{(1)} = 0.$$

De som van de kwadraten van de elementen van de tweede kolom is één, dus $a_{22}^{(2)} = 1$. Zo voortgaande vinden we $A^{(n-1)} = E$.

Definitie

De matrix A is normaal als $AA' = A'A$.

De symmetrische matrices behoren evenals de orthogonale matrices tot de klasse van normale matrices.

Hermiteese matrices

Een matrix $A = (a_{ij})$ met complexe elementen wordt hermiteese matrix genoemd als

$$a_{ij} = \overline{a_{ji}} \quad (13.39)$$

ofwel als $A = A^*$.

Uit (13.39) volgt dat $a_{ii} = \overline{a_{ii}}$, dus de diagonaal elementen zijn reëel.

Vele eigenschappen van symmetrische matrices gelden onveranderd voor hermitesese matrices.

1. A en B zijn hermitesese matrices.

Het product is dan en alleen dan een hermitesese matrix als $AB = BA$.

2. Voor iedere complexe matrix A geldt dat A^*A en AA^* hermitesese matrices zijn.

Unitaire matrices

De complexe matrix $A = (a_{ij})$ heet unitair als

$$\sum_{i=1}^n |a_{ij}|^2 = 1 \quad j = 1, 2, \dots, n$$

$$\text{en } \sum_{i=1}^n a_{ij} a_{ik} = 0 \quad j \neq k.$$

Ofwel als $A^*A = E$.

De bij de orthogonale matrices opgesomde vijf eigenschappen (NA-193) gelden ook voor unitaire matrices. Alleen volgt voor unitaire matrices uit $|A^*A| = 1$ dat

$$1 = |A^*| |A| = |\overline{A}| |A| = \overline{|A|} |A| = \|A\|^2.$$

Dus $A = e^{i\varphi}$.

Elementaire unitaire matrices zijn matrices van de vorm:

$$U_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & & \\ & & & \ddots & & & & & \\ & & & & c e^{i\varphi_1} & & -s e^{i\varphi_2} & & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & s e^{i\varphi_3} & & c e^{i\varphi_4} & & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & \ddots & & \\ & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} i \\ j \end{matrix}$$

met $c > 0$, $s > 0$, $c^2 + s^2 = 1$ en $\varphi_1 - \varphi_2 = \varphi_3 - \varphi_4$.

Dan is $|U_{ij}| = e^{i(\varphi_1 + \varphi_4)}$.

Opdat $|U_{ij}| = 1$ is nodig en voldoende dat $\varphi_1 = -\varphi_4 \pmod{2\pi}$, en dus ook $\varphi_2 = -\varphi_3 \pmod{2\pi}$.

$$\begin{pmatrix} c e^{i\varphi_1} & -s e^{i\varphi_2} \\ s e^{-i\varphi_2} & c e^{-i\varphi_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a c e^{i\varphi_1} - b s e^{i\varphi_2} \\ a s e^{-i\varphi_2} + b c e^{-i\varphi_1} \end{pmatrix}$$

Als $|a| + |b| \neq 0$ dan zal

$$ace^{i\varphi_1} - bse^{i\varphi_2} > 0$$

$$ase^{-i\varphi_2} + bce^{-i\varphi_1} = 0$$

als

$$c = \frac{|a|}{\sqrt{|a|^2 + |b|^2}}, \quad s = \frac{|b|}{\sqrt{|a|^2 + |b|^2}}, \quad \varphi_1 = -\arg a \quad \text{en} \quad \varphi_2 = \pi - \arg b.$$

Met deze elementaire unitaire matrices kunnen we, op dezelfde manier als bij de elementaire orthogonale matrices bewijzen:

Stelling. Iedere niet-singuliere complexe matrix kan met een rij van linksvermenigvuldigingen met elementaire unitaire matrices, waarvan de determinanten één zijn, getransformeerd worden in een rechter triangulaire matrix waarvan alle diagonaal elementen, behalve eventueel het laatste, positief zijn.

Opmerkingen

1. Iedere niet-singuliere matrix is product van een unitaire matrix U met $|U| = 1$ en een rechter triangulaire matrix waarvan alle diagonaal elementen, behalve mogelijk het laatste, positief zijn.
2. Iedere unitaire matrix U , met $|U| = 1$, is product van elementaire unitaire matrices waarvan de determinanten ook een zijn.

14. Lineaire ruimten

Na de formele behandeling van matrices introduceren we nu het begrip lineaire ruimte, waarmee aan matrices een meetkundige betekenis gegeven wordt.

Definitie

Een lineaire ruimte is een verzameling R van objecten, vectoren genaamd, die aan de volgende axioma's voldoet.

- A. Bij ieder paar x, y van vectoren bestaat een vector $x + y$, de som van x en y genaamd, zó dat
 1. $x + y = y + x$
 2. $(x + y) + z = x + (y + z)$
 3. Er is een element 0 zodat voor iedere x uit R geldt $x + 0 = x$
 4. Bij iedere x uit R is er een vector $-x$ zó dat $x + (-x) = 0$
- B. Bij iedere vector x en ieder getal α bestaat een vector αx , het product van α en x zó dat
 5. $1x = x$ voor iedere vector x
 6. $(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x$
 7. $\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y$
 8. $\alpha(\beta x) = (\alpha\beta)x$

Opmerkingen

1. Er is slechts één nulelement 0 want stel dat ook

$$x + 0' = x.$$

$$\text{Dan } (-x) + x + 0' = (-x) + x \Rightarrow 0 + 0' = 0 \Rightarrow 0' = 0.$$

Ook is eenvoudig te bewijzen dat het negatieve element $-x$ eenduidig bepaald is, dat $0x = 0$ en dat $-x = (-1)x$

2. Een ruimte heet reëel (resp. complex) als de vermenigvuldiging gedefinieerd is voor reële (resp. complexe) getallen.

De ruimte heet eindig dimensionaal als aan de volgende voorwaarde is voldaan:

9. Er bestaat een eindig aantal vectoren $x_1, x_2, \dots, x_N$ zodat iedere vector geschreven kan worden als

$$\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots + \alpha_N x_N.$$

De dimensie van een eindig dimensionale ruimte is het kleinste getal N waarmee aan voorwaarde 9 voldaan kan worden.

Als voorwaarde 9 niet vervuld is, heet R oneindig dimensionaal.

Het getal (x, y) dat aan vectoren x en y wordt toegevoegd heet het inwendig product van x en y als deze toevoeging aan de volgende voorwaarden voldoet:

$$10. (x, x) > 0 \text{ voor } x \neq 0 \text{ en } (x, x) = 0 \text{ als } x = 0$$

$$11. (x, y) = \overline{(y, x)}$$

$$12. (x_1 + x_2, y) = (x_1, y) + (x_2, y)$$

$$13. (\alpha x, y) = \alpha(x, y)$$

Opmerkingen

1. In een reële ruimte zij (x, y) reëel, zodat in die ruimte geldt $(x, y) = (y, x)$
2. Een reële (resp. complexe) ruimte met inwendig product noemen we euclidisch (resp. unitair).
3. $|x| = \sqrt{(x, x)}$ noemen we de lengte van de vector x .

Stelling 1, Voor ieder paar x, y van vectoren geldt

$$|(x, y)| \leq |x| \cdot |y| \quad (14.1)$$

Bewijs. Deze ongelijkheid van Cauchy geldt als $x = 0$, want $(0, y) = 0$ en $|0| = 0$. Stel $x \neq 0$. We voeren nu in $z = y - \alpha x$, met $\alpha = \frac{(y, x)}{(x, x)}$. Omdat $(z, x) = (y, x) - \alpha(x, x) = 0$ krijgen we:

$$|z|^2 = (z, y - \alpha x) = (z, y) = (y, y) - \alpha(x, y) = \frac{|x|^2 |y|^2 - |(x, y)|^2}{|x|^2}$$

$$\text{Dus } |x|^2 |y|^2 - |(x, y)|^2 \geq 0.$$

$$\text{D.i. } |(x, y)| \leq |x| \cdot |y|.$$

Vanwege (14.1) is er in een euclidische ruimte bij ieder paar vectoren x en y een hoek φ , de hoek tussen x en y , zó dat

$$\cos \varphi = \frac{(x, y)}{|x| \cdot |y|} \quad (14.2)$$

Voorbeelden

1. De arithmetische ruimte R_n ; hierin is iedere vector een rij van n getallen $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$.

$$(x_1, x_2, \dots, x_n) + (y_1, y_2, \dots, y_n) = (x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots, x_n + y_n)$$

$$\alpha(x_1, x_2, \dots, x_n) = (\alpha x_1, \alpha x_2, \dots, \alpha x_n).$$

Bij deze optelling en vermenigvuldiging met een scalar zijn de axioma's 1 t/m 8 eenvoudig te verifiëren.

De nulvector is $(0, 0, \dots, 0)$. Iedere vector in R_n is te schrijven als $x_1 e_1 + x_2 e_2 + \dots + x_n e_n$.

Hierin is $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ d.i. alleen i^e component is één.

Dus R_n is eindig dimensionaal.

Het inwendig product van de vectoren x en y is

$$(x, y) = x_1 \bar{y}_1 + x_2 \bar{y}_2 + \dots + x_n \bar{y}_n. \quad (14.3)$$

Als R_n reëel is:

$$(x, y) = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_n y_n. \quad (14.4)$$

Dit inwendig product kan ook geschreven worden als matrixproduct:

$$(x, y) = (x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n) \begin{pmatrix} \bar{y}_1 \\ \bar{y}_2 \\ \vdots \\ \bar{y}_n \end{pmatrix} = (\bar{y}_1, \bar{y}_2, \dots, \bar{y}_n) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

2. De verzameling van alle vierkante matrices van orde n .

3. De verzameling van polynomen in één variabele met graad $\leq n$.

Lineaire afhankelijkheid

De vector $y = \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots + \alpha_m x_m$ is een lineaire combinatie van de vectoren $x_1, x_2, \dots, x_m$.

De vectoren $x_1, x_2, \dots, x_m$ zijn lineair afhankelijk als er getallen $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ niet allen gelijk nul, bestaan zodat

$$\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots + \alpha_m x_m = 0. \quad (14.5)$$

Als (14.5) alleen geldt als $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_m = 0$ dan noemen we de vectoren $x_1, x_2, \dots, x_m$ lineair onafhankelijk.

Als de vectoren $x_1, x_2, \dots, x_m$ lineair afhankelijk zijn, dan is minstens één x_i lineaire combinatie van de andere vectoren. Als b.v. $c_m \neq 0$, dan

$$x_m = -\frac{c_1}{c_m} x_1 - \frac{c_2}{c_m} x_2 - \dots - \frac{c_{m-1}}{c_m} x_{m-1} \quad (14.6)$$

Stelling 2. Als de vectoren $y_1, y_2, \dots, y_k$ lineaire combinaties zijn van de vectoren $x_1, x_2, \dots, x_m$ en $k > m$ dan zijn $y_1, y_2, \dots, y_k$ lineair afhankelijk.

Bewijs. We bewijzen met volledige inductie.

Voor $m = 1$ (dus $k > 1$) is het triviaal.

Neem aan dat de stelling geldt voor $m-1$.

Zij

$$y_1 = \alpha_{11}x_1 + \alpha_{12}x_2 + \dots + \alpha_{1m}x_m$$

$$y_2 = \alpha_{21}x_1 + \alpha_{22}x_2 + \dots + \alpha_{2m}x_m$$

$$\dots\dots\dots$$

$$y_k = \alpha_{k1}x_1 + \alpha_{k2}x_2 + \dots + \alpha_{km}x_m.$$

Als in één kolom van de matrix $A = (\alpha_{ij})$ alle elementen nul zijn, dan zijn $y_1, y_2, \dots, y_k$ lineaire combinaties van $m-1$ vectoren, dus volgens inductie hypothese zijn $y_1, y_2, \dots, y_k$ dan lineair afhankelijk.

Stel: $\alpha_{11} \neq 0$.

Beschouw het stelsel vectoren

$$y'_2 = y_2 - \frac{\alpha_{21}}{\alpha_{11}} y_1$$

$$y'_3 = y_3 - \frac{\alpha_{31}}{\alpha_{11}} y_1$$

$$\dots\dots\dots$$

$$y'_k = y_k - \frac{\alpha_{k1}}{\alpha_{11}} y_1$$

(14.7)

Deze $k-1$ vectoren zijn lineaire combinaties van de $m-1$ vectoren $x_2, x_3, \dots, x_m$. Volgens de inductie-aanname zijn $y'_2, y'_3, \dots, y'_k$ lineair afhankelijk, ofwel

$$\gamma_2 y'_2 + \gamma_3 y'_3 + \dots + \gamma_k y'_k = 0 \quad (14.8)$$

$$\text{met } (\gamma_2, \gamma_3, \dots, \gamma_k) \neq (0, 0, \dots, 0) \quad (14.9)$$

Als we (14.7) substitueren in (14.8) krijgen we

$$\gamma_1 y_1 + \gamma_2 y_2 + \dots + \gamma_k y_k = 0 \quad (14.10)$$

waarin

$$\gamma_1 = -\frac{\alpha_{21}}{\alpha_{11}} \gamma_2 - \frac{\alpha_{31}}{\alpha_{11}} \gamma_3 - \dots - \frac{\alpha_{k1}}{\alpha_{11}} \gamma_k$$

uit (14.9) en (14.10) volgt dat $y_1, y_2, \dots, y_k$ lineair afhankelijk zijn.

Basis van een ruimte

Een stelsel van lineair onafhankelijke vectoren heet een basis van een ruimte als iedere vector van de ruimte lineaire combinatie is van elementen uit dit stelsel.

In R_n vormen $e_1, e_2, \dots, e_n$ een basis, want uit

$$\alpha_1 e_1 + \alpha_2 e_2 + \dots + \alpha_n e_n = 0$$

volgt

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_n = 0$$

en iedere vector $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ kan geschreven worden als

$$x_1 e_1 + x_2 e_2 + \dots + x_n e_n.$$

Dit is de natuurlijke basis van R_n .

In een ruimte van dimensie n bestaan n vectoren waarvan alle vectoren in die ruimte lineaire combinaties zijn. Deze n vectoren vormen een basis want als ze afhankelijk waren kon met minder dan n vectoren volstaan worden om de ruimte "op te spannen". Dus zou dan de dimensie kleiner zijn dan n . Er zijn ook niet meer dan n lineair onafhankelijke vectoren want elk stel van m vectoren met $m > n$ is volgens stelling 2 afhankelijk. Daarom is het aantal vectoren in een basis onafhankelijk van de keuze van die basis: het is gelijk aan de dimensie van de ruimte.

Stelling 3. Elk stelsel van n lineair onafhankelijke vectoren vormt een basis voor een n -dimensionale ruimte.

Bewijs. Zij $u_1, u_2, \dots, u_n$ een stelsel lineair onafhankelijke vectoren en zij x een willekeurige vector van de ruimte. Volgens stelling 2 zijn de vectoren $u_1, u_2, \dots, u_n, x$ lineair afhankelijk, want elk van deze vectoren is lineaire combinatie van n basisvectoren. Dus er bestaan getallen $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$, niet allen gelijk aan nul, zodat

$$\alpha_0 x + \alpha_1 u_1 + \dots + \alpha_n u_n = 0.$$

Maar $\alpha_0 \neq 0$ want anders zouden de vectoren $u_1, u_2, \dots, u_n$ lineair afhankelijk zijn. Dus

$$x = -\frac{\alpha_1}{\alpha_0} u_1 - \frac{\alpha_2}{\alpha_0} u_2 - \dots - \frac{\alpha_n}{\alpha_0} u_n.$$

Hiermede is aangetoond dat iedere vector lineaire combinatie is van de lineair onafhankelijke vectoren $u_1, u_2, \dots, u_n$. Deze vectoren vormen derhalve een basis.

Coördinaten van vectoren

Zij $u_1, u_2, \dots, u_n$ een basis van een ruimte. Dan is iedere vector x lineaire combinatie van $u_1, u_2, \dots, u_n$, n.l.

Van een vector x zijn $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ de coördinaten t.o.v. de basis $u_1, u_2, \dots, u_n$ terwijl $\xi'_1, \xi'_2, \dots, \xi'_n$ de coördinaten van x zijn t.o.v. de nieuwe basis $u'_1, u'_2, \dots, u'_n$.

Dit betekent dat

$$\begin{aligned} x &= \xi_1 u_1 + \xi_2 u_2 + \dots + \xi_n u_n \\ &= \xi'_1 u'_1 + \xi'_2 u'_2 + \dots + \xi'_n u'_n \\ &= \xi'_1 (a_{11} u_1 + a_{21} u_2 + \dots + a_{n1} u_n) \\ &\quad + \xi'_2 (a_{12} u_1 + a_{22} u_2 + \dots + a_{n2} u_n) \\ &\quad + \dots \\ &\quad + \xi'_n (a_{1n} u_1 + a_{2n} u_2 + \dots + a_{nn} u_n) \end{aligned}$$

Omdat $u_1, u_2, \dots, u_n$ lineair onafhankelijk zijn geldt

$$\begin{aligned} \xi_1 &= a_{11} \xi'_1 + a_{12} \xi'_2 + \dots + a_{1n} \xi'_n \\ \xi_2 &= a_{21} \xi'_1 + a_{22} \xi'_2 + \dots + a_{2n} \xi'_n \\ &\dots \\ \xi_n &= a_{n1} \xi'_1 + a_{n2} \xi'_2 + \dots + a_{nn} \xi'_n. \end{aligned} \tag{14.14}$$

In matrix-notatie

$$x = Ax'$$

waarin

$$x = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{pmatrix} \quad \text{en} \quad x' = \begin{pmatrix} \xi'_1 \\ \xi'_2 \\ \vdots \\ \xi'_n \end{pmatrix}.$$

Deelruimten

Een deelruimte van een lineaire ruimte R is een verzameling V van vectoren uit R zodanig dat elke lineaire combinatie van vectoren uit V weer een vector uit V is.

Voorbeelden

1. R zelf
2. De verzameling met slechts een element: de nulvector

Een deelruimte is zelf een lineaire ruimte want aan de axioma's 1 t/m 8 is voldaan. Een deelruimte van een n -dimensionale ruimte is eindig dimensionaal met dimensie $\leq n$. Als de dimensie van een deelruimte n is, dan is de deelruimte R zelf.

Iedere basis van een deelruimte kan uitgebreid worden tot een basis van de gehele ruimte.

Deelruimten opgespannen door vectoren

De verzameling V van alle lineaire combinaties van de vectoren $x_1, x_2, \dots, x_m$ is een deelruimte, de deelruimte opgespannen door het stelsel $x_1, x_2, \dots, x_m$.

Stelling 4. De dimensie van een deelruimte opgespannen door de vectoren $x_1, x_2, \dots, x_m$ is gelijk aan de rang van de matrix die als kolommen heeft de coördinaten van deze vectoren t.o.v. een basis.

Bewijs. Zij

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nm} \end{pmatrix} \quad (14.15)$$

de matrix waarvan de kolommen bestaan uit de coördinaten van de vectoren $x_1, x_2, \dots, x_m$ t.o.v. zekere basis. Zij $\text{rang } X = r$. Dan is, volgens de definitie van de rang van een matrix, tenminste één minor van de orde r ongelijk aan nul en zijn alle minoren met orde groter dan r gelijk aan nul. We mogen aannemen (indien nodig nummeren we n.l. de vectoren $x_1, x_2, \dots, x_m$ en de coördinaten, d.w.z. de basisvectoren om, dus in X verwisselen we kolommen resp. rijen), dat

$$\delta = \begin{vmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1r} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2r} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ x_{r1} & x_{r2} & \dots & x_{rr} \end{vmatrix} \quad (14.16)$$

een minor ongelijk aan nul is.

We zullen aantonen dat $x_1, x_2, \dots, x_r$ een basis is van de deelruimte P opgespannen door $x_1, x_2, \dots, x_m$.

(a) De vectoren $x_1, x_2, \dots, x_r$ zijn lineair onafhankelijk.

Stel $\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \dots + \alpha_r x_r = 0$.

In coördinaten uitgeschreven krijgen we:

$$y_k = \begin{vmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1r} & x_{1s} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2r} & x_{2s} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{r1} & x_{r2} & \dots & x_{rr} & x_{rs} \\ x_{k1} & x_{k2} & \dots & x_{kr} & x_{ks} \end{vmatrix} \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (14.20)$$

als $k \leq r$ dan is $y_k = 0$ want dan zijn in (14.20) twee rijen gelijk.
 Als $k > r$ dan geldt ook $y_k = 0$, immers (14.20) is in dat geval een minor van X van de orde $r+1$ en deze minoren zijn allen nul.

Dus $y = \mu_1 x_1 + \mu_2 x_2 + \dots + \mu_r x_r + \mu x_s = 0$.

Maar omdat $\mu = \delta \neq 0$ geldt

$$x_s = -\frac{\mu_1}{\mu} x_1 - \frac{\mu_2}{\mu} x_2 - \dots - \frac{\mu_r}{\mu} x_r.$$

Uit (a) en (b) volgt dat de vectoren $x_1, x_2, \dots, x_r$ een basis vormen van P . Dus heeft P de dimensie r .

Conclusie: het maximum aantal lineair onafhankelijke kolommen zowel als het maximum aantal lineair onafhankelijke rijen van een matrix X is de rang van die matrix.

15. Lineaire operatoren

We beschouwen een functie die aan iedere vector uit de lineaire ruimte R een element uit een verzameling Ω toevoegt.

Als Ω een verzameling van (reële of complexe) getallen is, dan noemen we de functie een functionaal.

Als Ω een verzameling van vectoren uit R is dan wordt de functie een afbeelding, een transformatie of een operator genoemd.

Voorbeelden van functionalen

1. Het inwendig product van een vector $x \in R$ en een vaste vector $y_0 \in R$.
2. $|x| = \sqrt{(x, x)}$, de lengte van $x \in R$.

Een functionaal φ heet lineair als voor alle getallen α_1, α_2 en alle vectoren x_1, x_2 uit R geldt

$$\varphi(\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2) = \alpha_1 \varphi(x_1) + \alpha_2 \varphi(x_2).$$

Lineaire operatoren

Een operator A heet lineair als aan de volgende voorwaarden voldaan is:

1. $A(ax) = aAx$ voor ieder getal a en iedere $x \in R$.
2. $A(x_1 + x_2) = Ax_1 + Ax_2$ voor iedere $x_1, x_2 \in R$.

Het product AB van de operatoren A en B is de operator C die aan iedere vector $x \in R$ toevoegt de vector

$$Cx = A(Bx) \quad (15.1)$$

d.w.z. eerst B toepassen op x en dan A op Bx .

Als A en B lineair zijn dan is ook AB lineair.

Immers:

$$C(x_1 + x_2) = A(B(x_1 + x_2)) = A(Bx_1 + Bx_2) = A(Bx_1) + A(Bx_2) = Cx_1 + Cx_2.$$

$$C(ax) = A(B(ax)) = A(aBx) = aA(Bx) = aCx.$$

De operator E met de eigenschap dat voor iedere $x \in R$ geldt

$$Ex = x \quad (15.2)$$

heet de eenheidsoperator.

E is lineair en ook is gemakkelijk in te zien dat

$$EA = AE = A \quad \text{voor iedere operator } A.$$

De som $A + B$ van de operatoren A en B is een operator C die aan iedere vector $x \in R$ toevoegt de vector

$$Cx = (A + B)x = Ax + Bx.$$

Het is eenvoudig te bewijzen dat de som van lineaire operatoren weer een lineaire operator is, dat derhalve geldt

$$(A + B)(x_1 + x_2) = (A + B)x_1 + (A + B)x_2$$

$$\text{en} \quad (A + B)(ax) = a(A + B)x.$$

De operator O die aan iedere $x \in R$ de nulvector toevoegt heet de nuloperator.

Voor iedere operator A en iedere $x \in R$ geldt

$$(A + O)x = Ax + Ox = Ax.$$

Dus $A + O = A$.

Evenzo geldt $O + A = A$. De nuloperator is lineair.

Het product van een operator A en een getal a is een operator die aan $x \in R$ toevoegt de vector aAx .

Als A lineair is dan is ook aA lineair.

Tenslotte voeren we machten van operatoren in:

$$A^k = A A \dots A \quad (k \text{ keer } A \text{ toepassen}) \quad \text{en} \quad A^0 = E$$

Uit (15.4) en (15.7) volgt

$$Ax = \sum_{i=1}^n \zeta_i A u_i = \sum_{i=1}^n \zeta_i \sum_{k=1}^n a_{ki} u_k = \sum_{k=1}^n \left(\sum_{i=1}^n a_{ki} \zeta_i \right) u_k. \quad (15.9)$$

Als we (15.8) en (15.9) combineren krijgen we

$$y_k = \sum_{i=1}^n a_{ki} \zeta_i \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (15.10)$$

Ofwel in matrix-notatie

$$Y = AX \quad (15.11)$$

waarin Y en X kolommatrices zijn met als elementen de coördinaten van y resp. x t.o.v. $u_1, u_2, \dots, u_n$.

(15.11) is de bij een gekozen basis eenduidig bepaalde matrix-voorstelling van (15.8).

Als we uitgaan van een matrix A dan wordt omgekeerd uit

$$Y = AX \quad (15.8)$$

verkregen

$$y = Ax. \quad (15.11)$$

Dus bestaat er een een-eenduidig verband tussen de operator A en de matrix A .

Dit 1-1 verband blijft behouden bij bewerkingen met operatoren, d.w.z. de matrix van de som (resp. het product) van operatoren is de som (resp. het product) van de matrices behorende bij die operatoren.

Overgang op andere basis

We zullen onderzoeken hoe de matrix van een operator verandert als we overgaan op een andere basis.

$u_1, u_2, \dots, u_n$ is de oorspronkelijke basis, $u'_1, u'_2, \dots, u'_n$ de nieuwe basis. Volgens (14.14) zullen de coördinaten van een vector x veranderen volgens de formule

$$X = AY.$$

Hierin is X de kolommatrix met de coördinaten van x t.o.v. $u_1, u_2, \dots, u_n$
 Y de kolommatrix met de coördinaten van x t.o.v. $u'_1, u'_2, \dots, u'_n$
 A de matrix die de vectoren $u'_1, u'_2, \dots, u'_n$ uitdrukt in $u_1, u_2, \dots, u_n$.

Nu beschouwen we een operator $\mathcal{A}$ waarmee in de basis $u_1, u_2, \dots, u_n$ de matrix B en in de basis $u'_1, u'_2, \dots, u'_n$ de matrix C correspondeert. Zij

$$v = \mathcal{A} x.$$

Stel V en W zijn de kolommatrices waarvan de elementen de coördinaten zijn van de vector v t.o.v. de basis $u_1, u_2, \dots, u_n$ resp. $u'_1, u'_2, \dots, u'_n$. Dan

$$V = B X$$

$$W = C Y$$

Maar $X = A Y$ en $V = A W$ en dus

$$A W = B A Y, \text{ want } V = A W \text{ en } V = B X = B A Y.$$

Ofwel

$$W = A^{-1} B A Y.$$

Dus

$$C = A^{-1} B A.$$

Hieruit concluderen we dat de matrices die de operator $\mathcal{A}$ representeren t.o.v. verschillende bases gelijkvormig zijn.

Opmerkingen

1. De matrix A is niet singulier, want A heeft een inverse: de matrix die de vectoren $u_1, u_2, \dots, u_n$ uitdrukt in $u'_1, u'_2, \dots, u'_n$.
2. Iedere niet singuliere matrix A kan geïdentificeerd worden met een coördinaten-transformatie.

Rang van een operator

De verzameling van alle vectoren $\mathcal{A}x$, met $x \in R$, duiden we aan met $\mathcal{A}R$.

Stelling 5. Als $\mathcal{A}$ een lineaire operator is, dan is $\mathcal{A}R$ een deelruimte van R .

Bewijs. Neem aan y_1 en y_2 zijn elementen van $\mathcal{A}R$. Dan bestaan er vectoren x_1 en x_2 zodat

$$y_1 = \mathcal{A} x_1 \quad \text{en} \quad y_2 = \mathcal{A} x_2.$$

Maar dan is $\alpha_1 y_1 + \alpha_2 y_2 = \mathcal{A}(\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2)$ ook een vector in $\mathcal{A}R$.

$\mathcal{A}R$ heet de beeldruimte van $\mathcal{A}$. De dimensie van $\mathcal{A}R$ noemen we de rang van de operator $\mathcal{A}$.

De beeldruimte wordt opgespannen door $\mathcal{A}u_1, \mathcal{A}u_2, \dots, \mathcal{A}u_n$ als $u_1, u_2, \dots, u_n$ een basis is.

Volgens stelling 4 is de rang van de operator A gelijk aan de rang van de A representerende matrix A bij zekere basis. De dimensie AR is onafhankelijk van de basiskeuze, dus hebben de matrices die A representeren bij verschillende bases dezelfde rang. Hieruit concluderen we dat gelijkvormige matrices dezelfde rang hebben.

De beeldruimte AR valt dan en alleen dan samen met de gehele ruimte als de rang van A gelijk is aan de dimensie van R , dus als de determinant van de A representerende matrix ongelijk is aan nul. Dan noemen we de operator niet-ontaard.

Als de rang van A kleiner is dan n ($= \dim R$) dan heet A ontaard.

De verzameling Q van vectoren $y \in R$ zó dat $Ay = 0$ is ook een deelruimte van R . Als n.l. $y_1, y_2 \in Q$ dan $Ay_1 = Ay_2 = 0$ en dus is $A(\alpha_1 y_1 + \alpha_2 y_2) = \alpha_1 Ay_1 + \alpha_2 Ay_2 = 0$, ofwel ook $\alpha_1 y_1 + \alpha_2 y_2 \in Q$. Q noemen we de kern van A .

Stelling 6. Voor iedere operator A geldt:

$$\dim AR + \dim Q = \dim R.$$

Bewijs. Stel $u_1, u_2, \dots, u_m$ is een basis van de kern Q van A .

We vullen deze verzameling vectoren aan met de vectoren $v_1, v_2, \dots, v_{n-m}$ tot een basis van R . Nu zullen we aantonen dat de vectoren

$Av_1, Av_2, \dots, Av_{n-m}$ een basis vormen van de beeldruimte AR .

(a) De vectoren $Av_1, Av_2, \dots, Av_{n-m}$ zijn lineair onafhankelijk.

$$\text{Zij } \alpha_1 Av_1 + \alpha_2 Av_2 + \dots + \alpha_{n-m} Av_{n-m} = 0.$$

$$\text{Dan is } A(\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \dots + \alpha_{n-m} v_{n-m}) = 0, \text{ d.w.z.}$$

$$\alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \dots + \alpha_{n-m} v_{n-m} \in Q, \text{ dus bestaan er getallen } \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m$$

$$\text{zó dat } \alpha_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \dots + \alpha_{n-m} v_{n-m} = \beta_1 u_1 + \beta_2 u_2 + \dots + \beta_m u_m.$$

Omdat de vectoren $v_1, v_2, \dots, v_{n-m}, u_1, u_2, \dots, u_m$ lineair onafhankelijk zijn vinden we dus dat $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_{n-m} = 0$.

Dus zijn de vectoren $Av_1, Av_2, \dots, Av_{n-m}$ lineair onafhankelijk.

(b) Iedere vector in AR is lineaire combinatie van $Av_1, Av_2, \dots, Av_{n-m}$.

Stel $y \in AR$, dan is er een vector x zodat $Ax = y$.

x is lineaire combinatie van basisvectoren, dus te schrijven als

$$x = \gamma_1 u_1 + \dots + \gamma_m u_m + \delta_1 v_1 + \dots + \delta_{n-m} v_{n-m}.$$

Maar dan is

$$y = \delta_1 Av_1 + \dots + \delta_{n-m} Av_{n-m}$$

$$\text{omdat } Au_1 = Au_2 = \dots = Au_m = 0.$$

Dus is $\dim AR = n-m$ en omdat volgens aanname $\dim Q = m$ is hiermee de stelling bewezen.

Eigenschappen

1. A^{-1} is lineair, want als $A^{-1}z = x$ en $A^{-1}w = v$, dan $Ax = z$ en $Av = w$.

Dus $A(x + v) = z + w$. D.w.z. $A^{-1}(z + w) = x + v = A^{-1}z + A^{-1}w$.

2. $AA^{-1} = A^{-1}A = E$.

3. Bij een gegeven basis corresponderen met de operatoren A en A^{-1} matrices die elkaars inversen zijn.

Bewijs. Zij $y = Ax$, dus $A^{-1}y = x$. In matrices wordt, bij zekere basis de eerste relatie: $Y = AX$. Dus $X = A^{-1}Y$.

Bij overgang op andere basis worden deze matrix vergelijkingen:

$W = C^{-1}ACV$ en $V = C^{-1}A^{-1}CW$, waarin V en W de kolommatrices zijn

behorend bij x en y t.o.v. de nieuwe basis en C de transformatie-matrix is die de nieuwe basis-vectoren uitdrukt in de oude (zie NA-210). De matrices $C^{-1}AC$ en $C^{-1}A^{-1}C$ zijn ook elkaars inversen.

Eigenvectoren en eigenwaarden van operatoren

Een eigenwaarde van een operator A is een getal λ zodanig dat er een vector $x \neq 0$ bestaat waarvoor geldt

$$Ax = \lambda x. \quad (15.13)$$

De vector x in (15.13) wordt eigenvector van A behorend bij λ genoemd. Het spectrum van A is de verzameling van alle eigenwaarden van A .

Zij $A = (a_{ik})$ de matrix die bij een zekere basis de operator A representeert en stel dat op deze basis de eigenvector x de coördinaten $x_1, x_2, \dots, x_n$ heeft.

Dan zijn de coördinaten van Ax :

$$\sum_{k=1}^n a_{1k} x_k, \dots, \sum_{k=1}^n a_{nk} x_k.$$

De coördinaten $x_1, x_2, \dots, x_n$ en de eigenwaarde λ bepalen het volgende systeem van vergelijkingen:

$$\begin{aligned} (a_{11} - \lambda)x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= 0 \\ a_{21}x_1 + (a_{22} - \lambda)x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= 0 \\ \dots &\dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + (a_{nn} - \lambda)x_n &= 0 \end{aligned} \quad (15.14)$$

Dit stelsel zal dan en alleen dan een niet-triviale oplossing $x_1, x_2, \dots, x_n$ als

$$\begin{vmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda & \dots & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn}-\lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (15.15)$$

dus als λ een nulpunt is van het karakteristiek polynoom van A .

Matrices die dezelfde operator representeren in verschillende bases zijn gelijkvormig, en gelijkvormige matrices hebben hetzelfde karakteristiek polynoom. Daarom kunnen we spreken van het karakteristiek polynoom van een operator.

Als $\varphi(t)$ het karakteristiek polynoom is van $\mathcal{A}$, gerepresenteerd door A , dan geldt volgens de stelling van Cayley-Hamilton $\varphi(A) = \mathcal{O}$ en dus ook $\varphi(\mathcal{A}) = \mathcal{O}$, want $\varphi(\mathcal{A})$ wordt gerepresenteerd door $\varphi(A)$.

Ook bij een operator spreken we van een minimaal polynoom: het polynoom van de laagste graad waarvan de operator "nulpunt" is.

Stelling 7. Ieder nulpunt van het karakteristiek polynoom van een operator is ook nulpunt van het minimaal polynoom $\phi(t)$ van die operator.

Bewijs. Zij x een eigenvector van $\mathcal{A}$ behorend bij een eigenwaarde λ . Volgens de reststelling geldt

$$\phi(t) = p(t)(t - \lambda) + \phi(\lambda).$$

Dus is $\phi(\mathcal{A})x = p(\mathcal{A})(\mathcal{A} - \lambda\mathcal{E})x + \phi(\lambda)x$.

Maar $(\mathcal{A} - \lambda\mathcal{E})x = 0$ en $\phi(\mathcal{A}) = \mathcal{O}$ dus $\phi(\lambda)x = 0$.

Maar dan is $\phi(\lambda) = 0$ want $x \neq 0$.

Dus de eigenwaarde λ is nulpunt van $\phi(t)$.

Het karakteristiek polynoom is deelbaar door het minimaal polynoom (zie NA-182), elk nulpunt van minimaal polynoom is derhalve ook nulpunt van het karakteristieke polynoom.

Karakteristiek en minimaal polynoom hebben dus dezelfde nulpunten die echter in het karakteristiek polynoom grotere multipliciteit kunnen hebben.

Bij iedere eigenwaarde λ van $\mathcal{A}$ kan men met (15.14) de bijbehorende eigenvectoren bepalen. De eigenvectoren bij een eigenwaarde λ vormen een deelruimte van R : de kern van $\mathcal{A} - \lambda\mathcal{E}$.

Stelling 8. De dimensie ℓ van de kern van $\mathcal{A} - \lambda\mathcal{E}$ is kleiner of gelijk aan de multipliciteit k van het nulpunt λ van het karakteristiek polynoom.

Bewijs. Stel $x_1, x_2, \dots, x_\ell$ zijn lineair onafhankelijke eigenvectoren bij de eigenwaarde λ . Dit stelsel breiden we uit met $x_{\ell+1}, \dots, x_n$ tot een basis van R . Met deze basis wordt de operator $\mathcal{A}$ voorgesteld door een matrix waarvan de eerste ℓ kolommen zijn:

$$\begin{array}{cccccc}
 \lambda & 0 & . & . & . & 0 \\
 0 & \lambda & . & . & . & 0 \\
 . & . & . & . & . & . \\
 0 & 0 & . & . & . & \lambda \\
 0 & 0 & . & . & . & 0 \\
 . & . & . & . & . & . \\
 0 & 0 & . & . & . & 0
 \end{array}$$

omdat $Ax_1 = \lambda x_1, Ax_2 = \lambda x_2, \dots, Ax_\ell = \lambda x_\ell$.

Het karakteristiek polynoom van deze matrix is deelbaar door $(t - \lambda)^\ell$ en dus heeft het nulpunt λ een multipliciteit $k \geq \ell$.

Opmerkingen

1. Het aantal lineair onafhankelijke eigenvectoren kan kleiner zijn dan de multipliciteit van de bijbehorende eigenwaarde, zoals blijkt uit het volgende voorbeeld:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}; |A - tE| = (t - 3)^2, \text{ dus } \lambda = 3 \text{ is een dubbel}$$

nulpunt van het karakteristiek polynoom : $k = 2$.

Om de eigenvectoren te bepalen moeten we oplossen:

$$\begin{aligned}
 3x_1 + x_2 &= 3x_1 \\
 3x_2 &= 3x_2
 \end{aligned}$$

We vinden slechts één lineair onafhankelijke eigenvector n.l. $(1, 0)$.
Dus $\ell = 1 < k$.

2. Als $k = 1$, dus λ een enkelvoudig nulpunt is, is ook $\ell = 1$.
Immers $\ell \leq 1$ en $\ell > 0$.

Eigenvectoren van een matrix

Een eigenvector van een matrix X is een kolomvector x , waarvan niet alle elementen nul zijn, zodanig dat

$$AX = \lambda x \tag{15.16}$$

waarin λ de bij x behorende eigenwaarde van A genoemd wordt.

X is de matrix-voorstelling van de eigenvector x van de operator $\mathcal{A}$ die, bij zekere basis, gerepresenteerd wordt door A .

Uit (15.16) volgt dat

$$\overline{AX} = \overline{\lambda x}. \tag{15.17}$$

Als A reëel is geldt derhalve

$$A\overline{x} = \overline{\lambda x}$$

ofwel: met $\overline{\lambda}$ is ook $\overline{\lambda}$ eigenwaarde van A .

We kiezen

$$x_{ii} = 1.$$

De eerste $i-1$ vergelijkingen van (15.19) leveren de eerste $i-1$ componenten van X_i .

De eigenvector bij $\lambda_i = b_{ii}$ is dus $X_i = (x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{i-1,i}, 1, 0, \dots, 0)$.

Conclusie: de matrix X waarvan de kolommen bestaan uit de componenten van de eigenvectoren $X_1, X_2, \dots, X_n$ van de R -matrix B is ook een R -matrix.

Een matrix op diagonaalvorm transformeren

Stel dat $x_1, x_2, \dots, x_n$ de eigenvectoren zijn van $\mathcal{A}$ behorend bij de eigenwaarden $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$.

Dan: $\mathcal{A}x_1 = \lambda_1 x_1, \mathcal{A}x_2 = \lambda_2 x_2, \dots, \mathcal{A}x_n = \lambda_n x_n$.

Zij matrix A de representant van $\mathcal{A}$ t.o.v. zekere basis.

We nemen aan dat $x_1, x_2, \dots, x_n$ lineair onafhankelijk zijn, dus een basis vormen van de ruimte. In deze nieuwe basis is de i^e component van $\mathcal{A}x_i$ gelijk aan λ_i , de andere componenten van $\mathcal{A}x_i$ zijn nul.

T.o.v. deze basis wordt $\mathcal{A}$ dus gerepresenteerd door de diagonaal-matrix

$$B = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

B is gelijkvormig met de matrix A , dus bestaat er een niet-singuliere matrix C zodanig dat

$$B = C^{-1}AC.$$

Stel dat $X_1, X_2, \dots, X_n$ kolomvectoren zijn die in de oorspronkelijke basis de vectoren $x_1, x_2, \dots, x_n$ representeren en dat in de nieuwe basis de vectoren $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$ dit doen.

Dan geldt

$$X_i = CY_i. \quad (15.21)$$

Maar $Y_i = (0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$, i^e element is 1.

Uit (15.21) volgt dat de i^e kolom van C de componenten bevat van x_i t.o.v. de oorspronkelijke basis.

C is dus de matrix met in de kolommen de componenten van $x_1, x_2, \dots, x_n$ t.o.v. de oorspronkelijke basis.

Stelling 9. Eigenvectoren behorend bij ongelijke eigenwaarden zijn lineair onafhankelijk.

Bewijs. We nemen aan dat $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_s$ paarsgewijs verschillende eigenwaarden zijn van operator A en dat $x_1, x_2, \dots, x_s$ bijbehorende eigenvectoren zijn.

Stel dat $x_1, x_2, \dots, x_j$ lineair onafhankelijk zijn en dat $x_{j+1}, x_{j+2}, \dots, x_s$ lineaire combinaties zijn van $x_1, x_2, \dots, x_j$.

Als

$$x_\ell = \sum_{i=1}^j \gamma_{i\ell} x_i \quad (j < \ell \leq s) \quad (15.22)$$

dan geldt:

$$Ax_\ell = \sum_{i=1}^j \gamma_{i\ell} Ax_i = \sum_{i=1}^j \gamma_{i\ell} \lambda_i x_i. \quad (15.23)$$

Anderzijds:

$$Ax_\ell = \lambda_\ell x_\ell = \sum_{i=1}^j \gamma_{i\ell} \lambda_\ell x_i \quad (15.24)$$

Uit (15.23) en (15.24) volgt dat

$$\sum_{i=1}^j (\lambda_\ell - \lambda_i) \gamma_{i\ell} x_i = 0.$$

Dit impliceert dat $(\lambda_\ell - \lambda_i) \gamma_{i\ell} = 0$ omdat de vectoren $x_1, x_2, \dots, x_j$ lineair onafhankelijk zijn. Omdat $\lambda_\ell \neq \lambda_i$ is

$$\gamma_{1\ell} = \gamma_{2\ell} = \dots = \gamma_{j\ell} = 0.$$

Volgens (15.22) is dus $x_\ell = 0$, maar d.i. in strijd met de aanname dat x_ℓ een eigenvector is. Het uitgangspunt is weerlegd: de vectoren $x_1, x_2, \dots, x_s$ zijn lineair onafhankelijk.

Als het karakteristiek polynoom van een operator alleen enkelvoudige nulpunten heeft dan is er, volgens stelling 9, een basis bestaande uit eigenvectoren.

In matrix formulering: als alle eigenwaarden van een matrix paarsgewijs ongelijk zijn, dan is die matrix op diagonaalvorm te brengen.

Algemeen geldt: de matrix A is op diagonaalvorm te brengen als het aantal lineair onafhankelijke eigenvectoren gelijk is aan de orde van die matrix.

16. De Jordan normaalvorm van een matrix

Een matrix waarvan het aantal lineair onafhankelijke eigenvectoren kleiner is dan de orde van die matrix noemen we defect.

Een dergelijke matrix is niet op diagonaalvorm te brengen. We zullen zien hoe een defecte matrix met een gelijkvormigheidstransformatie

veranderd kan worden tot een z.g. kanonieke Jordan vorm, waarvan de diagonaalvorm een speciaal geval is.

- (i) De afleiding van zo'n transformatie beschouwen we eerst voor het eenvoudige geval dat slechts twee eigenwaarden samenvallen en dat met deze twee eigenwaarden slechts één lineair onafhankelijke eigenvector correspondeert.

Stel dat $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n$ de eigenwaarden zijn van A en dat alleen $\lambda_1 = \lambda_2$ voor $i=1$ en $j=2$. De bijbehorende eigenvectoren zijn $X_1, X_3, X_4, \dots, X_n$.

Volgens de stelling van Cayley-Hamilton geldt

$$(A - \lambda_1 E)^2 (A - \lambda_3 E) \dots (A - \lambda_n E) = 0. \quad (16.1)$$

Nu voegen we aan $X_1, X_3, X_4, \dots, X_n$ de vector Y_2 toe zodat een basis van R verkregen wordt. Op de vector Y_2 passen we het linkerlid van (16.1) toe. Dan krijgen we

$$(A - \lambda_1 E)^2 (A - \lambda_3 E) \dots (A - \lambda_n E) Y_2 = 0. \quad (16.2)$$

Als we $(A - \lambda_1 E)^2 Y_2 = V_n$ stellen wordt (16.2)

$$(A - \lambda_3 E) \dots (A - \lambda_n E) V_n = 0. \quad (16.3)$$

Om (16.3) op te lossen beschouwen we het volgende stelsel matrixvergelijkingen

$$\begin{aligned} (A - \lambda_3 E) V_3 &= 0 \\ (A - \lambda_4 E) V_4 &= V_3 \\ &\dots \dots \dots \\ (A - \lambda_n E) V_n &= V_{n-1}. \end{aligned}$$

De oplossingen van dit stelsel zijn:

$$\begin{aligned} V_3 &= \alpha_3 X_3 \\ V_4 &= \frac{\alpha_3}{\lambda_3 - \lambda_4} X_3 + \alpha_4 X_4 \\ &\dots \dots \dots \\ V_n &= \alpha_3 X_3 + \alpha_4 X_4 + \dots + \alpha_n X_n. \end{aligned} \quad (16.4)$$

Dus

$$(A - \lambda_1 E)^2 Y_2 = \sum_{i=3}^n \alpha_i X_i. \quad (16.5)$$

De vector $(A - \lambda_1 E)^2 Y_2$ heeft geen componenten in de "richtingen" X_1 en Y_2 hoewel Y_2 een willekeurig gekozen n^e basisvector is.

Nu bepalen we een vector X_2 zodanig dat

$$(A - \lambda_1 E)^2 X_2 = 0. \quad (16.6)$$

X_1 voldoet aan (16.6); we zoeken echter een oplossing van (16.6) in de ruimte opgespannen door $Y_2, X_3, X_4, \dots, X_n$.

Stel

$$X_2 = Y_2 + \sum_{i=3}^n \beta_i X_i. \quad (16.7)$$

Met (16.5) en (16.6) krijgen we dan

$$0 = (A - \lambda_1 E)^2 (Y_2 + \sum_{i=3}^n \beta_i X_i) = \sum_{i=3}^n \alpha_i X_i + \sum_{i=3}^n \beta_i A X_i - \sum_{i=3}^n \lambda_1 \beta_i X_i.$$

Ofwel:

$$\sum_{i=3}^n (\alpha_i + \beta_i (\lambda_i - \lambda_1)) X_i = 0.$$

Omdat $X_3, X_4, \dots, X_n$ lineair onafhankelijk zijn krijgen we

$$\beta_i = \frac{\alpha_i}{\lambda_i - \lambda_1}. \quad (16.8)$$

Hiermee is het bestaan van de vector X_2 , lineaire combinatie van $Y_2, X_3, X_4, \dots, X_n$, zodat $(A - \lambda_1 E)^2 X_2 = 0$ aangetoond.

I.p.v. (16.6) kunnen we schrijven

$$(A - \lambda_1 E) \{ (A - \lambda_1 E) X_2 \} = 0.$$

Ofwel

$$(A - \lambda_1 E) X_2 = X_1. \quad (16.9)$$

D.w.z.

$$A X_2 = \lambda_1 X_2 + X_1.$$

Deze vector X_2 , die niet een eigenvector is van A , noemen we een gegeneraliseerde eigenvector van A .

Omdat de vectoren $X_1, Y_2, X_3, \dots, X_n$ een basis vormen van R zijn ook de vectoren $X_1, X_2, \dots, X_n$ een basis van R , want iedere lineaire combinatie van $X_1, Y_2, \dots, X_n$ is volgens (16.7) ook een lineaire combinatie van $X_1, X_2, \dots, X_n$.

Bij deze nieuwe, z.g. kanonieke basis, vinden we de volgende relaties

$$\begin{aligned} A X_1 &= \lambda_1 X_1 \\ A X_2 &= \lambda_1 X_2 + X_1 \\ A X_3 &= \lambda_3 X_3 \\ &\dots \dots \dots \\ A X_n &= \lambda_n X_n \end{aligned} \quad (16.10)$$

De bij matrix A behorende operator $\mathcal{A}$ wordt t.o.v. deze basis gerepresenteerd door

$$C^{-1}AC = \left(\begin{array}{cccccc|cccc} \lambda_1 & 1 & 0 & \dots & 0 & & & & \\ 0 & \lambda_1 & 0 & \dots & 0 & & & & \\ \hline 0 & 0 & \lambda_3 & \dots & 0 & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_n & & & & \end{array} \right) \quad (16.11)$$

De matrix C heeft de kolomvectoren $X_1, X_2, \dots, X_n$ als kolommen.
De matrix

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 1 \\ 0 & \lambda_1 \end{pmatrix}$$

wordt de Jordan-kast behorend bij eigenwaarde λ_1 genoemd.

Opmerkingen

1. De vector X_2 , oplossing van (16.9) is op de vector X_1 na bepaald want x_1 is een element van de kern van $\mathcal{A} - \lambda_1 \mathcal{E}$.
2. Een vector X heet een gegeneraliseerde eigenvector van matrix A bij eigenwaarde λ als $(A - \lambda E)^m X = 0$ voor zekere $m > 1$.

Stelling 10. Een gegeneraliseerde eigenvector bestaat alleen als bij een twee-voudige eigenwaarde slechts één lineair onafhankelijke eigenvector bestaat.

Bewijs. Stel $\lambda_1 = \lambda_2$ met daarbij behorend twee lineair onafhankelijke eigenvectoren X_1 en X_2 ; $X_3, X_4, \dots, X_n$ zijn de eigenvectoren behorend bij de paarsgewijs verschillende eigenwaarden $\lambda_3, \lambda_4, \dots, \lambda_n$. Stel dat er een gegeneraliseerde eigenvector Y bestaat, waarvoor geldt

$$(A - \lambda_1 E)^2 Y = 0$$

ofwel

$$(A - \lambda_1 E) Y = X_1.$$

Deze vector Y is te schrijven als

$$\sum_{i=1}^n \gamma_i X_i.$$

Dus

$$(A - \lambda_1 E) \sum_{i=1}^n \gamma_i X_i = X_1.$$

X_1 en X_2 zijn eigenvectoren bij λ_1 , dus $(A - \lambda_1 E)X_1 = (A - \lambda_1 E)X_2 = 0$.

Dus

$$X_1 = (A - \lambda_1 E) \sum_{i=3}^n \gamma_i X_i = \sum_{i=3}^n \gamma_i (\lambda_i - \lambda_1) X_i.$$

Dit resultaat is in strijd met de lineaire onafhankelijkheid van de vectoren $X_1, X_3, \dots, X_n$. Nu is weerlegd dat de gegeneraliseerde eigenvector bestaat.

- (ii) Stel dat $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_p$ en dat bij deze p gelijke eigenwaarden slechts één lineair onafhankelijke eigenvector X_1 bestaat. We nemen voorts aan dat de andere eigenwaarden paarsgewijs ongelijk zijn.

We voegen aan de eigenvectoren $X_1, X_{p+1}, \dots, X_n$ de gegeneraliseerde eigenvectoren $X_2, X_3, \dots, X_p$ toe. Deze verkrijgen we door de volgende matrix-vergelijkingen op te lossen:

$$(A - \lambda_1 E)^k X_k = 0 \quad k = 2, 3, \dots, p \quad (16.12)$$

waarbij we bovendien de eis stellen dat

$$(A - \lambda_1 E)^{k-1} X_k \neq 0 \quad k = 2, 3, 4, \dots, p. \quad (16.13)$$

Uitgeschreven krijgen we

$$\begin{aligned} (A - \lambda_1 E) X_1 &= 0 \\ (A - \lambda_1 E)^2 X_2 &= 0 \\ &\dots \dots \dots \\ (A - \lambda_1 E)^p X_p &= 0. \end{aligned} \quad (16.14)$$

Dit levert

$$\begin{aligned} (A - \lambda_1 E) X_1 &= 0 \\ (A - \lambda_1 E) X_2 &= X_1 \\ &\dots \dots \dots \\ (A - \lambda_1 E) X_p &= X_{p-1} \end{aligned}$$

ofwel

$$\begin{aligned} A X_1 &= \lambda_1 X_1 \\ A X_2 &= \lambda_1 X_2 + X_1 \\ &\dots \dots \dots \\ A X_p &= \lambda_1 X_p + X_{p-1}. \end{aligned} \quad (16.15)$$

T.o.v. de kanonieke basis $X_1, X_2, \dots, X_n$ wordt de operator A , behorend bij matrix A voorgesteld door:

$$C^{-1}AC = \left(\begin{array}{cccc|cccc} \lambda_1 & 1 & . & 0 & . & . & 0 \\ 0 & \lambda_1 & 1 & 0 & . & . & 0 \\ . & . & . & 1 & . & . & . \\ 0 & 0 & . & \lambda_1 & 0 & . & 0 \\ \hline 0 & . & . & 0 & \lambda_{p+1} & . & 0 \\ . & . & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & . & . & . & . & \lambda_n \end{array} \right)$$

De matrix C heeft de vectoren $X_1, X_2, \dots, X_n$ als kolommen.

Opmerking

We bewijzen hier niet dat de vectoren $X_2, X_3, \dots, X_p$ die aan (16.12) en (16.13) voldoen bestaan. Evenmin dat deze vectoren met $X_1, X_{p+1}, \dots, X_n$ een basis vormen van R .

- (iii) In het algemene geval hebben we bij een p -voudige eigenwaarde λ_1 k lineair onafhankelijke eigenvectoren ($k < p$). Zonder bewijs vermelden we hier dat ook in dit geval een kanonieke basis geconstrueerd kan worden. De operator A wordt t.o.v. deze basis gerepresenteerd door een matrix waarin k Jordan kastjes voorkomen die elk op de diagonaal λ_1 hebben.

B.v.

$$\left(\begin{array}{cccc|cc} \lambda_1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_1 \end{array} \right) \quad k = 2, \quad p = 6.$$

In dit voorbeeld worden twee systemen vergelijkingen van het type (16.14) gebruikt om de verzameling van gegeneraliseerde eigenvectoren te vinden waarmee de verzameling van eigenvectoren wordt uitgebreid tot een kanonieke basis van de ruimte.

Voorbeeld

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} \lambda_1 = \lambda_2 = 1 \\ \lambda_3 = 2. \end{array}$$

Bij $\lambda_1 = 1$ vinden we slechts één lineair onafhankelijke eigenvector n.l. $X_1 = (1, 0, 0)$.

Bij $\lambda_3 = 2$ hoort de eigenvector $X_3 = (5, 3, 1)$.

We berekenen de gegeneraliseerde eigenvector X_2 uit

$$(A - \lambda_1 E) X_2 = X_1.$$

Uitgeschreven krijgen we

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ofwel} \quad \begin{aligned} \xi_2 + 2\xi_3 &= 1 \\ 3\xi_3 &= 0 \\ \xi_3 &= 0 \end{aligned}$$

Dit geeft de oplossing $\xi_2 = 1$ en $\xi_3 = 0$. We nemen $\xi_1 = 0$, want de vector X_2 is op een veelvoud van X_1 na bepaald (x_1 is een element van de kern van $(A - \lambda_1 E)$). Dus $X_2 = (0, 1, 0)$.

De transformatie matrix is derhalve

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Met eenvoudig rekenwerk vinden we

$$C^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -5 \\ 0 & 1 & -3 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

De Jordan normaalvorm van A is dus

$$C^{-1}AC = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -5 \\ 0 & 1 & -3 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Symmetrische matrices

Stelling 11. Een symmetrische matrix is niet defect.

Bewijs. Stel dat er een gegeneraliseerde eigenvector X_2 bij de eigenwaarde λ van de symmetrische matrix A bestaat, zodat

$$(A - \lambda E)^2 X_2 = 0$$

en tevens

$$(A - \lambda E) X_2 \neq 0.$$

Dan is

$$X_2^* (A - \lambda E)^2 X_2 = 0. \quad (16.16)$$

Nu voeren we in: $Y = (A - \lambda E) X_2$. Dan wordt (16.16)

$$X_2^* (A - \lambda E) Y = 0. \quad (16.17)$$

Omdat $Y' = X_2'(A - \lambda E)' = X_2'(A' - \lambda E) = X_2'(A - \lambda E)$, wordt (16.17):

$$Y'Y = 0.$$

Dus is $Y = 0$. Maar $(A - \lambda E) X_2 = 0$ is in strijd met de veronderstelling dat X_2 geen eigenvector is. Hiermee is onze veronderstelling dat A een defecte matrix is weerlegd.

Stelling 12. De eigenvectoren van een symmetrische matrix behorend bij verschillende eigenwaarden zijn orthogonaal.

Bewijs. Stel $\lambda_i \neq \lambda_j$, X_i en X_j zijn de eigenvectoren bij λ_i resp. λ_j . We beschouwen nu de volgende vergelijkingen:

$$X_i'AX_j = \lambda_j X_i'X_j \quad (16.18)$$

$$X_j'AX_i = \lambda_i X_j'X_i \quad (16.19)$$

Hieruit volgt

$$\lambda_i = \frac{X_j'AX_i}{X_j'X_i}, \quad \lambda_j = \frac{X_i'AX_j}{X_i'X_j}. \quad (16.20)$$

$$\text{Omdat } X_j'X_i = (X_j'X_i)' = X_i'X_j$$

$$\text{en } X_j'AX_i = (X_j'AX_i)' = X_i'A'X_j = X_i'AX_j$$

vinden we dat in (16.20) zowel de tellers als de noemers nul zijn, anders zou immers $\lambda_i = \lambda_j$.

Dus $X_i'X_j = 0$, ofwel $X_i \perp X_j$.

Als de eigenwaarde λ p-voudig voorkomt horen daarbij p lineair onafhankelijke eigenvectoren. De andere n-p eigenvectoren $X_{p+1}, X_{p+2}, \dots, X_n$ staan loodrecht op deze p eigenvectoren $Y_1, Y_2, \dots, Y_p$. Nu construeren we successievelijk vectoren $X_1, X_2, \dots, X_p$, die onderling orthogonaal zijn, met behulp van de volgende relaties:

$$X_1 = Y_1$$

$$X_2 = Y_2 + \alpha_{21} X_1$$

$$\dots$$

$$X_p = Y_p + \alpha_{p1} X_1 + \alpha_{p2} X_2 + \dots + \alpha_{p,p-1} X_{p-1}.$$

De coëfficiënten

$$\alpha_{21}$$

$$\alpha_{31} \quad \alpha_{32}$$

$$\dots$$

$$\alpha_{p1} \quad \alpha_{p2} \quad \dots \quad \alpha_{p,p-1}$$

vinden we door achtereenvolgens te stellen:

$$\begin{aligned} X_1' X_2 &= 0 \\ X_1' X_3 &= X_2' X_3 = 0 \\ &\dots \dots \dots \\ X_1' X_p &= X_2' X_p = \dots = X_{p-1}' X_p = 0. \end{aligned}$$

De vectoren $X_1, X_2, \dots, X_p$ zijn evenals $Y_1, Y_2, \dots, Y_p$ eigenvectoren van de matrix A behorende bij de eigenwaarde λ . Met dit orthogonalisatie-procede is nu aangetoond dat

$$X_i' X_j = 0 \quad i \neq j, \quad i = 1, 2, \dots, p.$$

Door ditzelfde procede ook toe te passen op de lineair onafhankelijke eigenvectoren behorend bij andere meervoudige eigenwaarden wordt een orthogonaal systeem van eigenvectoren verkregen.

Als we deze vectoren normeren (lengte 1) dan is de matrix C met in de kolommen die genormeerde eigenvectoren een orthogonale matrix. Dan geldt dus $C^{-1} = C'$.

De met A gelijkvormige diagonaalmatrix is derhalve

$$C^{-1}AC = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix} = C'AC \quad (16.21)$$

Conclusie: bij de symmetrische matrix A bestaat een orthogonale matrix C zodanig dat $C'AC$ een diagonaalmatrix is.

Stelling 13. De eigenwaarden van een reëel symmetrische matrix zijn reëel.

Bewijs. Beschouw het Rayleigh quotient

$$R(X) = \frac{X^*AX}{X^*X}$$

van de vector X bij de matrix A .

Stel $X = U + iV$, waarin U en V reële kolomvectoren zijn. Dan is $X^* = U' - iV'$.

$$X^*AX = (U' - iV') A(U + iV) = (U'AU + V'AV) + i(U'AV - V'AU).$$

Omdat $U'AV = (U'AV)' = V'A'U = V'AU$ is

$$X^*AX = U'AU + V'AV.$$

Dus is ook X^*X reëel, want $X^*X = X^*EX$ en E is symmetrisch.

Conclusie: $R(x)$ is reëel.

Als we aannemen dat X een eigenvector is bij de eigenwaarde λ dan geldt:

$$R(X) = \frac{X^*AX}{X^*X} = \frac{\lambda X^*X}{X^*X} = \lambda.$$

Dus de eigenwaarde λ is reëel.

Opmerking

De eigenvectoren van een reëel symmetrische matrix zijn ook reëel want $AX = \lambda X$ geeft, in coördinaten uitgeschreven, n lineaire homogene vergelijkingen met een reële coëfficiënten matrix $A - \lambda E$.

Positief definitie matrices

Definitie. De reëel symmetrische matrix A heet positief definit als $X^*AX > 0$ voor iedere $X \neq 0$.

Als A positief definit is geldt $R(X) = \frac{X^*AX}{X^*X} > 0$ voor $X \neq 0$. Dus alle eigenwaarden van A zijn positief. Omdat geen eigenwaarde nul is bevat de kern van A alleen de nulvector: A is niet-singulier. Omgekeerd is een symmetrische matrix met uitsluitend positieve eigenwaarden positief definit. Iedere vector X is n.l. lineaire combinatie van de orthonormale eigenvectoren $X_1, X_2, \dots, X_n$ (stelling 12). Dus

$$X^*AX = \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i X_i \right)^* A \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i X_i \right) = \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i X_i \right)^* \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i X_i \right) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \alpha_i^2 > 0.$$

Stelling 14. De matrix A is positief definit. Dan geldt:

- (a) Als B positief definit is, dan ook $\gamma_1 A + \gamma_2 B$ als $\gamma_1 > 0$, $\gamma_2 > 0$
- (b) A^{-1} positief definit
- (c) Als C niet-singulier is dan is C^*AC positief definit
- (d) Er bestaat een positief definitie matrix M zodanig dat $M^2 = A$
- (e) Als B reëel symmetrisch is dan zijn alle eigenwaarden van AB reëel
- (f) Als B ook positief definit is dan heeft BA uitsluitend positieve eigenwaarden
- (g) Als B reëel symmetrisch is en alle eigenwaarden van AB positief zijn is ook B positief definit
- (h) Als ook B positief definit is én $AB = BA$, dan is AB positief definit.

Bewijs. (a) $X^*(\gamma_1 A + \gamma_2 B)X = \gamma_1 X^*AX + \gamma_2 X^*BX > 0$ als $X \neq 0$ en

$$(\gamma_1 A + \gamma_2 B)^* = \gamma_1 A + \gamma_2 B.$$

(b) Stel $A^{-1}X = Y$, dus $X = AY$. Dan is $X^*A^{-1}X = (AY)^*Y = Y^*AY > 0$ als $Y \neq 0$, dus als $X \neq 0$. Bovendien is A^{-1} symmetrisch, want $AA^{-1} = A^{-1}A = E$. Hier volgt n.l. uit dat $(A^{-1})^*A = A(A^{-1})^* = E$ ofwel $(A^{-1})^* = A^{-1}$.

(c) $X^*(C^*AC)X = (CX)^*A(CX) > 0$ als $CX \neq 0$, dus als $X \neq 0$. Voorts is $(C^*AC)^* = C^*AC$.

(d) Stel dat $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ de eigenwaarden zijn van A met bijbehorende eigenvectoren $X_1, X_2, \dots, X_n$. Dan $AX_i = \lambda_i X_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$). Beschouw nu de matrix M met $MX_i = \sqrt{\lambda_i} X_i$. De bijbehorende operator $\mathcal{M}$ beeldt R af op zichzelf. Dan geldt:

$$M^2 X_i = M(MX_i) = M(\sqrt{\lambda_i} X_i) = \lambda_i X_i.$$

Dus $M^2 = A$. Alle eigenwaarden van M zijn positief.

Bovendien is $M' = M$. Immers $M^2 = A = A' = M'M'$. Omdat M eenduidig bepaald is geldt derhalve dat $M = M'$.

We schrijven voor M voortaan $A^{\frac{1}{2}}$.

(e) $AB = A^{\frac{1}{2}}(A^{\frac{1}{2}}BA^{\frac{1}{2}})A^{-\frac{1}{2}}$. AB en $A^{\frac{1}{2}}BA^{\frac{1}{2}}$ hebben daarom dezelfde eigenwaarden. $(A^{\frac{1}{2}}BA^{\frac{1}{2}})' = (A^{\frac{1}{2}})'B'(A^{\frac{1}{2}})' = A^{\frac{1}{2}}BA^{\frac{1}{2}}$. De eigenwaarden van $A^{\frac{1}{2}}BA^{\frac{1}{2}}$ zijn volgens stelling 13 reëel.

(f) $AB = A^{\frac{1}{2}}(A^{\frac{1}{2}}BA^{\frac{1}{2}})A^{-\frac{1}{2}}$. AB heeft dezelfde eigenwaarden als $A^{\frac{1}{2}}BA^{\frac{1}{2}}$. Maar $A^{\frac{1}{2}}BA^{\frac{1}{2}} = (A^{\frac{1}{2}})'BA^{\frac{1}{2}}$ en deze matrix $(A^{\frac{1}{2}})'BA^{\frac{1}{2}}$ is volgens (c) definitief positief en heeft derhalve uitsluitend positieve eigenwaarden.

(g) AB heeft positieve eigenwaarden, dus ook $A^{-\frac{1}{2}}(AB)A^{\frac{1}{2}} = A^{\frac{1}{2}}BA^{\frac{1}{2}}$. De symmetrische matrix $A^{\frac{1}{2}}BA^{\frac{1}{2}}$ is dus positief definitief. Volgens (c) is dus $B = (A^{-\frac{1}{2}})(A^{\frac{1}{2}}BA^{\frac{1}{2}})(A^{-\frac{1}{2}}) = (A^{-\frac{1}{2}})'(A^{\frac{1}{2}}BA^{\frac{1}{2}})A^{-\frac{1}{2}}$ positief definitief.

(h) $AB = BA$, dus $(AB)' = B'A' = BA = AB$. Volgens (f) zijn alle eigenwaarden van AB bovendien positief. AB is derhalve een positief definitieve matrix.

De positief definitieve eenheidsmatrix definieert in de n -dimensionale ruimte een lengte, metriek genaamd van een vector volgens

$$(X'EX)^{\frac{1}{2}} = (X'X)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{i=1}^n \xi_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

waarin $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ de coördinaten zijn van de vector X t.o.v. een orthonormale basis. Deze metriek is afgeleid van het product van een rij- en een kolomvector, n.l.

$$X'EY = X'Y.$$

Twee vectoren zijn (E) orthogonaal als $X'EY = X'Y = 0$. Dit product voldoet aan de voor het inwendig product gedefinieerde axioma's 10 t.m. 13 (NA-199) zoals blijkt als $X'Y$ geïdentificeerd wordt met (x, y) .

Bij een positief definitieve matrix zal het product $X'AY$, als we dit identificeren met (x, y) , voldoen aan de axioma's 10 t.m. 13 (NA-199).

Immers

1. $X'AX > 0$ als $X \neq 0$
2. $X'AY = Y'AX$
3. $(X_1 + X_2)'AY = X_1'AY + X_2'AY$
4. $(\alpha X)'AY = \alpha(X'AY)$.

Van dit inwendig product $(x,y) = X'AY$ leiden we de A-metrick af:

$$|x| = (x,x)^{\frac{1}{2}} = (X'AX)^{\frac{1}{2}}$$

is de A-lengte van de vector X.

Twee vectoren X en Y zijn A-orthogonaal als $X'AY = 0$.

Eigenschappen

1. Omdat volgens stelling 1 geldt:

$$|(x,y)| \leq |x| \cdot |y|$$

krijgen we bij dit speciale geval:

$$(X'AY)^2 \leq (X'AX) \cdot (Y'AY).$$

2. Paarsgewijs A-orthogonale vectoren zijn lineair onafhankelijk.

Bewijs. Zij $X_1, X_2, \dots, X_k$ een A-orthogonaal stelsel van vectoren en stel $\alpha_1 X_1 + \alpha_2 X_2 + \dots + \alpha_k X_k = 0$.

Dan geldt

$$0 = (\alpha_1 X_1 + \alpha_2 X_2 + \dots + \alpha_k X_k)'AX_i = \alpha_1 X_i'AX_i \quad i = 1, 2, \dots, k.$$

Omdat $X_i'AX_i > 0$ is dus $\alpha_i = 0$ ($i = 1, 2, \dots, k$).

De A-orthogonale vectoren zijn dus lineair onafhankelijk.

3. Met de p lineair onafhankelijke vectoren $Y_1, Y_2, \dots, Y_p$ kunnen we een A-orthogonaal stelsel van p vectoren $X_1, X_2, \dots, X_p$ construeren met behulp van de volgende relaties:

$$\begin{aligned} X_1 &= Y_1 \\ X_2 &= Y_2 + \beta_{21} Y_1 \\ &\dots \dots \dots \\ X_p &= Y_p + \beta_{p1} Y_1 + \dots + \beta_{pp-1} Y_{p-1} \end{aligned} \tag{16.22}$$

Bewijs. We bewijzen met volledige inductie.

Stel dat de A-orthogonale vectoren $X_1, X_2, \dots, X_{m-1}$ al geconstrueerd zijn met de relaties (16.22).

De vector X_m , A-orthogonaal t.o.v. $X_1, X_2, \dots, X_{m-1}$, schrijven we als

$$X_m = Y_m + \alpha_{m1} X_1 + \alpha_{m2} X_2 + \dots + \alpha_{mm-1} X_{m-1}. \tag{16.23}$$

De coëfficiënten $\alpha_{m1}, \alpha_{m2}, \dots, \alpha_{mm-1}$ bepalen we uit de A-orthogonaliteitsvoorwaarden

$$X_1'AX_m = X_2'AX_m = \dots = X_{m-1}'AX_m = 0.$$

Dit levert

$$X_j^* A (Y_m + \alpha_{m1} X_1 + \dots + \alpha_{mm-1} X_{m-1}) = 0 \quad j = 1, 2, \dots, m-1$$

Omdat volgens de inductie-aanname

$$X_j^* A X_i = 0 \quad i \neq j \quad \text{en } i, j \leq m-1$$

geldt

$$X_j^* A Y_m + \alpha_{mj} X_j^* A X_j = 0 \quad j = 1, 2, \dots, m-1$$

Dus

$$\alpha_{mj} = - \frac{X_j^* A Y_m}{X_j^* A X_j} \quad j = 1, 2, \dots, m-1$$

X_m is derhalve een eenduidig bepaalde lineaire combinatie van $Y_m, X_1, X_2, \dots, X_{m-1}$.

Als we in (16.23) voor $X_1, X_2, \dots, X_{m-1}$ de al bepaalde en in (16.22) uitgeschreven lineaire combinaties van $Y_1, Y_2, \dots, Y_{m-1}$ substitueren, blijkt dat X_m een lineaire combinatie is van $Y_1, Y_2, \dots, Y_m$:

$$X_m = Y_m + \beta_{m1} Y_1 + \dots + \beta_{mm-1} Y_{m-1}$$

X_m is niet de nulvector, want anders waren $Y_1, Y_2, \dots, Y_m$ lineair afhankelijk.

De aanvang van de inductie is triviaal: voor $m = 1$ "construeren" we de vector X_1 zó dat $X_1 = Y_1$.

Opmerkingen

1. De hier bewezen mogelijkheid een stelsel vectoren te "A-orthogonaliseren" kwam al ter sprake bij het bepalen van een E-orthogonale basis van een eigenruimte van een symmetrische matrix (NA-226)
2. Door de vectoren $X_1, X_2, \dots, X_p$ te delen door resp. $(X_j^* A X_j)^{\frac{1}{2}}$, $j = 1, 2, \dots, p$ verkrijgen we een A-orthogonaal vectorsysteem.

Reële niet symmetrische matrices

Als de matrix A niet symmetrisch is, bestaat het volledige eigenwaarde probleem uit het bepalen van de eigenkolommen X:

$$AX = \lambda X \quad (16.24)$$

en het bepalen van de eigenrijen Y^*

$$Y^* A = \mu Y^* \quad (16.25)$$

I.p.v. (16.25) kunnen we schrijven:

$$A^* Y = \bar{\mu} Y.$$

Voor de eigenwaarden λ behorend bij de eigen kolommen geldt:

$$|A - \lambda E| = 0. \quad (16.26)$$

Voor de eigenwaarden μ behorend bij de eigenrijen geldt:

$$|A^* - \bar{\mu} E| = 0. \quad (16.27)$$

$$\text{Ofwel } |(A - \mu E)^*| = \overline{|A - \mu E|} = 0. \quad (16.27a)$$

De karakteristieke polynomen van A en A^* hebben complex geconjugeerde coëfficiënten, de eigenwaarden van A^* zijn dus de complex geconjugeerden van de eigenwaarden van A .

Als A reëel is hebben A en A^* dezelfde eigenwaarden.

Bovendien volgt uit (16.26) en (16.27a): bij iedere eigenwaarde van A bestaat tenminste één eigenrij en één eigenkolom. Stel $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ zijn de eigenwaarden van A . Hierbij behoren de eigenkolommen $X_1, X_2, \dots, X_n$ en de eigenrijen $Y_1^*, Y_2^*, \dots, Y_n^*$.

Stelling 15. Als $\lambda_i \neq \lambda_j$ dan geldt $Y_i^* X_j = 0$.

$$\text{Bewijs. } AX_j = \lambda_j X_j \quad (16.28)$$

$$\text{Omdat } Y_i^* A = \lambda_i Y_i^*$$

$$\text{geldt } A^* Y_i = \bar{\lambda}_i Y_i. \quad (16.29)$$

$$\text{Dan is } Y_i^* A X_j = \lambda_j Y_i^* X_j. \quad (16.30)$$

$$\text{Maar } (Y_i^* A) X_j = \lambda_i Y_i^* X_j. \quad (16.31)$$

Hieruit volgt:

$$\lambda_j Y_i^* X_j = \lambda_i Y_i^* X_j.$$

Omdat $\lambda_i \neq \lambda_j$ is dus

$$Y_i^* X_j = 0. \quad (16.32)$$

Conclusie: als de eigenwaarden van een matrix paarsgewijs verschillend zijn dan geldt voor de eigenkolommen $X_1, X_2, \dots, X_n$ en de eigenrijen $Y_1^*, Y_2^*, \dots, Y_n^*$

$$Y_i^* X_j = 0 \quad i \neq j.$$

Een dergelijk stelsel van $2n$ vectoren noemen we een biorthogonaal systeem.

Als $\lambda_1 = \lambda_2$ en bij deze tweevoudige eigenwaarde twee lineair onafhankelijke eigenkolommen X_1, X_2 (dus ook twee lineair onafhankelijke eigenrijen Y_1^*, Y_2^* , want $\text{rang}(A - \lambda_1 E) = \text{rang}(A^* - \bar{\lambda}_1 E) = n-2$) behoren dan kunnen we op de volgende manier een biorthogonaal systeem van eigenrijen en eigenkolommen construeren.

$$\text{Stel } U_2 = X_1 + \alpha X_2$$

$$V_2 = Y_1^* + \beta Y_2^*.$$

$$\text{Dan geldt } AU_2 = \lambda_1 U_2 \text{ en } A^* V_2 = \bar{\lambda}_1 V_2.$$

Nu bepalen we α zodanig dat $Y_1^* U_2 = 0$, dus

$$Y_1^*(X_1 + \alpha X_2) = 0.$$

We vinden voor :

$$\alpha = - \frac{Y_1^* X_1}{Y_1^* X_2}.$$

Evenzo bepalen we β zodanig dat $X_1^* V_2 = 0$.

Dan krijgen we

$$\beta = - \frac{X_1^* Y_1}{X_1^* Y_2}.$$

Met deze keuze van α en β vormen de vectoren $X_1, U_2, X_3, \dots, X_n$ en $Y_1, V_2, Y_3, \dots, Y_n$ een biorthogonaal systeem.

Algemeen geldt: als het aantal lineair onafhankelijke eigenvectoren van een matrix gelijk is aan de orde van die matrix, dan bestaat er een biorthogonaal stelsel van eigenkolommen en eigenrijen.

Als van de eigenwaarden $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ alleen $\lambda_1 = \lambda_2$ en bij de tweevoudige eigenwaarde λ_1 slechts één lineair onafhankelijke eigenkolom X_1 (dus ook slechts één lineair onafhankelijke eigenrij Y_2^*) bestaat, gaan we aan de verzameling van eigenkolommen en eigenrijen gegeneraliseerde eigenvectoren toevoegen om een biorthogonaal systeem te verkrijgen.

Zij X_2 een gegeneraliseerde eigenkolom. Dan geldt dus

$$AX_1 = \lambda_1 X_1 \quad (16.33)$$

$$AX_2 = \lambda_1 X_2 + X_1. \quad (16.34)$$

Zij Y_1^* een gegeneraliseerde eigenrij:

$$A^* Y_2 = \bar{\lambda}_1 Y_2 \quad (16.35)$$

$$A^* Y_1 = \bar{\lambda}_1 Y_1 + Y_2. \quad (16.36)$$

Uit (16.33) volgt

$$Y_1^* A X_1 = \lambda_1 Y_1^* X_1. \quad (16.37)$$

Maar volgens (16.36) is

$$(Y_1^* A) X_1 = (A^* Y_1)^* X_1 = (\bar{\lambda}_1 Y_1 + Y_2)^* X_1 = \lambda_1 Y_1^* X_1 + Y_2^* X_1.$$

Met (16.37) levert dit

$$Y_2^* X_1 = 0.$$

Omdat $Y_j^* X_1 = 0$ ($j = 2, 3, \dots, n$) is $Y_1^* X_1 \neq 0$.

$Y_j^* X_2 = 0$ voor $j = 3, 4, \dots, n$

Immers $Y_j^* A X_2 = \lambda_1 Y_j^* X_2 + Y_1^* X_1 = \lambda_1 Y_j^* X_2$

$$(Y_j^* A) X_2 = (A^* Y_j)^* X_2 = (\bar{\lambda}_j Y_j)^* X_2 = \lambda_j Y_j^* X_2.$$

$$\text{Dus } \lambda_1 Y_j^* X_2 = \lambda_j Y_j^* X_2.$$

Maar dan is $Y_j^* X_2 = 0$ want $\lambda_1 = \lambda_j$ ($j = 3, 4, \dots, n$).

Stel nu dat $Y_1^* X_2 \neq 0$.

Dan bestaat er een vector

$$U_2 = X_2 + \alpha_1 X_1$$

zodanig dat

$$Y_1^* U_2 = 0.$$

Immers

$$Y_1^* U_2 = Y_1^* X_2 + \alpha_1 Y_1^* X_1 = 0 \quad \text{als} \quad \alpha_1 = -\frac{Y_1^* X_2}{Y_1^* X_1}. \quad (16.38)$$

De vector U_2 is een gegeneraliseerde eigenkolom van A (een gegeneraliseerde eigenvector is immers op X_1 na bepaald) die loodrecht staat op Y_j ($j = 3, 4, \dots, n$) want X_1 én X_2 staan loodrecht op deze vectoren. Met deze vector U_2 , loodrecht op Y_1 , is een biorthogonaal systeem

$$X_1, U_2, X_3, \dots, X_n$$

$$Y_1, Y_2, Y_3, \dots, Y_n$$

verkregen.

Opmerkingen

1. Voor U_2 geldt:

$$AU_2 = \lambda_1 U_2 + X_1.$$

Immers

$$AU_2 = A(X_2 + \alpha_1 X_1) = \lambda_1 X_2 + (1 + \alpha_1 \lambda_1) X_1 = \lambda_1 (U_2 - \alpha_1 X_1) + (1 + \alpha_1 \lambda_1) X_1.$$

$$2. Y_1^* AU_2 = Y_1^* (\lambda_1 U_2 + X_1) = Y_1^* X_1.$$

$$\text{Maar } (Y_1^* A) U_2 = (A^* Y_1)^* U_2.$$

$$\text{Dus } Y_1^* AU_2 = (\lambda_1 Y_1 + Y_2)^* U_2 = \lambda_1 Y_1^* U_2 + Y_2^* U_2 = Y_2^* U_2.$$

$$\text{Conclusie: } Y_1^* X_1 = Y_2^* U_2.$$

$$3. Y_1^* AU_2 = \lambda_1 Y_1^* U_2 + Y_1^* X_1 = Y_1^* X_1.$$

$$\text{Maar } Y_2^* AX_1 = \lambda_1 Y_2^* X_1 = 0.$$

Als we de genormeerde (al dan niet gegeneraliseerde) eigenkolommen (resp. eigenrijen) van A als kolommen (resp. rijen) gebruiken wordt de matrix C (resp. R) verkregen. Wegens de biorthogonaliteit geldt

$$RC = E. \quad (16.39)$$

Volgens (16.11) wordt de bij A behorende operator $\mathcal{A}$ t.o.v. de kanonieke basis $X_1, U_2, X_3, \dots, X_n$ door de Jordan normaalvorm gerepresenteerd.

Volgens (16.39) levert dit:

$$RAC = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix} \quad (16.40)$$

In het algemeen geldt:

Er bestaan voor de matrices A en A* biorthogonale kanonieke bases. Als deze vectoren kolommen (resp. rijen) zijn van de matrices R (resp. C) dan is

$$RAC = J$$

waarin J de Jordannormaalvorm is van A.

Opmerking

Bij symmetrische matrices is, volgens (16.21) $R = C'$ en dan is $C'AC$ een diagonaalmatrix.

Kwadratische vormen

Stelling 16. Iedere kwadratische vorm met een reële coëfficiëntenmatrix kan getransformeerd worden tot een kanonieke vorm:

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i^2,$$

waarin $y_1, y_2, \dots, y_n$ lineaire combinaties zijn van $x_1, x_2, \dots, x_n$.

Bewijs. We hebben gezien (NA-191) dat we de kwadratische vorm kunnen schrijven als

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = X'AX. \quad (16.41)$$

Hierin is A de reële symmetrische matrix behorend bij $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ en $X' = (x_1, x_2, \dots, x_n)$.

Volgens (16.21) bestaat er een orthogonale matrix C zodanig dat

$$C'AC = \Lambda \quad (16.42)$$

waarin Λ de diagonaalmatrix is met de eigenwaarden λ_i van A op de diagonaal.

Uit (16.42) volgt dat

$$A = CAC'.$$

Met dit resultaat wordt (16.41)

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = X'(CAC')X = (C'X)' \Lambda (C'X).$$

Stel nu $C'X = Y$ ofwel $X = CY$.

Dan krijgen we

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = Y' \Lambda Y = \lambda_1 y_1^2 + \lambda_2 y_2^2 + \dots + \lambda_n y_n^2 \quad (16.43)$$

met $(y_1, y_2, \dots, y_n) = Y'$.

Positief definitie kwadratische vormen

De kwadratische vorm $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ noemen we positief definit als $F(x_1, x_2, \dots, x_n) > 0$ voor $(x_1, x_2, \dots, x_n) \neq (0, 0, \dots, 0)$. Uit (16.43) blijkt dat $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ dan en alleen dan positief definit is als alle eigenwaarden van de matrix A , behorende bij $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ positief zijn, dus als de matrix A positief definit is.

Stelling 17. De kwadratische vorm $X'AX = F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ is dan en alleen dan positief definit als

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= a_{11} > 0 \\ \Delta_2 &= \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} > 0 \\ &\dots \dots \dots \\ \Delta_n &= |A| > 0.\end{aligned}$$

Bewijs. Stel $F(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} x_i x_j$ is positief definit. Volgens (16.21) is er een orthogonale matrix C zodanig dat

$$C'AC = \Lambda$$

waarin Λ de diagonaalmatrix is met $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ op de diagonaal en bovendien is $\lambda_i > 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$) omdat A positief definit is.

Dus

$$A = C \Lambda C'.$$

Nu blijkt:

$$\Delta_n = |A| = |C| |\Lambda| |C'| = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n |C|^2 > 0. \quad (16.44)$$

Beschouw nu

$$F(x_1, x_2, \dots, x_k, 0, \dots) = \sum_{i,j=1}^k a_{ij} x_i x_j.$$

Voor deze positief definitie kwadratische vorm geldt volgens hetzelfde argument als bij (16.44)

$$\Delta_k > 0.$$

Om omgekeerd te bewijzen dat $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ positief definit is als $\Delta_i > 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$) beschouwen we de LR-decompositie van de matrix A (NA-187):

$$A = C A B$$

waar A diagonaalmatrix $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ met $\alpha_i = \frac{\Delta_i}{\Delta_{i-1}}$

$$\left. \begin{array}{l} C \text{ een L-matrix} \\ B \text{ een R-matrix} \end{array} \right\} \text{ met enen op de diagonaal.}$$

Bij deze decompositie is

$$\alpha_i = \frac{\Delta_i}{\Delta_{i-1}} > 0 \quad (\Delta_0 = 1).$$

Omdat de matrix A symmetrisch is geldt

$$CAB = A = A' = B'AC'.$$

Vanwege de eenduidigheid der decompositie is

$$C = B'.$$

$$\text{Dus} \quad A = B'AB. \quad (16.45)$$

Maar dan is

$$A = (B')^{-1}AB^{-1} = (B^{-1})'AB^{-1}.$$

Met de matrix B^{-1} wordt de kwadratische vorm $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ getransformeerd tot de kanonieke vorm waarvan A de matrix is. Deze kanonieke vorm heeft positieve coëfficiënten α_i en dus is $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ positief definit.

In formule: Stel $X = B^{-1}Y$.

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = X'AX = (B^{-1}Y)'A(B^{-1}Y) = Y'(B^{-1})'AB^{-1}Y = Y'AY.$$

Omdat

$$Y'AY > 0 \quad \text{als } Y \neq 0$$

zal dus

$$X'AX > 0 \quad \text{als } X \neq 0$$

want B^{-1} is niet-singulier.

Stelling 18. $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ en $\Phi(x_1, x_2, \dots, x_n)$ zijn kwadratische vormen. Als $\Phi(x_1, x_2, \dots, x_n)$ positief is kunnen beide kwadratische vormen met één transformatie van variabelen op kanonieke vorm gebracht worden.

Bewijs. We transformeren eerst $\Phi(x_1, x_2, \dots, x_n)$ tot de kanonieke vorm

$$\Phi(x_1, x_2, \dots, x_n) = \alpha_1 y_1^2 + \alpha_2 y_2^2 + \dots + \alpha_n y_n^2. \quad (16.46)$$

Hierbij gaat $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ over in $F_1(y_1, y_2, \dots, y_n)$.

Nu gaan we in beide vormen over op nieuwe variabelen:

$$z_1 = y_1 \sqrt{\alpha_1}, \quad z_2 = y_2 \sqrt{\alpha_2}, \dots, \quad z_n = y_n \sqrt{\alpha_n}.$$

Deze transformatie is mogelijk omdat alle $\alpha_i > 0$, immers $\Phi(x_1, x_2, \dots, x_n)$ is positief definit.

Met deze transformatie krijgen we:

$$\Phi(x_1, x_2, \dots, x_n) = z_1^2 + z_2^2 + \dots + z_n^2.$$

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = F_2(z_1, z_2, \dots, z_n).$$

Tenslotte transformeren we $F_2(z_1, z_2, \dots, z_n)$ op kanonieke vorm met de orthogonale transformatie P .

Deze transformatie levert

$$F_2(z_1, z_2, \dots, z_n) = \lambda_1 t_1^2 + \lambda_2 t_2^2 + \dots + \lambda_n t_n^2.$$

De kanonieke vorm $z_1^2 + z_2^2 + \dots + z_n^2$ wordt getransformeerd tot $t_1^2 + t_2^2 + \dots + t_n^2$, want als $Z' = (z_1, z_2, \dots, z_n)$ en $T' = (t_1, t_2, \dots, t_n)$ dan geldt

$$Z = PT$$

en

$$\Phi(x_1, x_2, \dots, x_n) = Z'Z = (PT)'PT = T'P'PT = T'T,$$

omdat P orthogonaal is.

Met deze drie successieve transformaties is dus verkregen:

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = \lambda_1 t_1^2 + \lambda_2 t_2^2 + \dots + \lambda_n t_n^2 \quad (16.47)$$

$$\Phi(x_1, x_2, \dots, x_n) = t_1^2 + t_2^2 + \dots + t_n^2. \quad (16.48)$$

De coëfficiënten $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ in (16.47) kunnen we zonder de drie transformaties uit te voeren bepalen.

Zij C de matrix van de lineaire transformatie die F en Φ simultaan op kanonieke vorm brengt, A de matrix behorend bij F , B de matrix behorend bij Φ en Λ de diagonaalmatrix met $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ uit (16.47) op de diagonaal.

Dan geldt dus:

$$C'AC = \Lambda$$

$$C'BC = E$$

De functiewaarden van de Hermiteese vorm zijn reëel, want:

$$\overline{F(z_1, z_2, \dots, z_n)} = \overline{\sum_{i,j=1}^n a_{ij} z_i \bar{z}_j} = \sum_{i,j=1}^n \bar{a}_{ij} \bar{z}_i z_j = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} z_i \bar{z}_j = F(z_1, \dots, z_n)$$

Een Hermiteese vorm heet positief definitief als

$$F(z_1, z_2, \dots, z_n) > 0 \quad \text{voor} \quad (z_1, z_2, \dots, z_n) \neq (0, 0, \dots, 0).$$

De matrix van een positief definitief Hermiteese vorm heet een positief definitief Hermiteese matrix.

De bewijzen van de hieronder genoemde stellingen verlopen analoog met die van de overeenkomstige stellingen voor kwadratische vormen.

1. Iedere Hermiteese vorm kan met een niet-singuliere lineaire transformatie van variabelen op kanonieke vorm:

$$\alpha_1 |z_1|^2 + \alpha_2 |z_2|^2 + \dots + \alpha_n |z_n|^2$$

gebracht worden (vgl. stelling 16).

2. Opdat een Hermiteese vorm positief definitief is, is nodig en voldoende dat al de coëfficiënten α_i in de kanonieke vorm positief zijn.
3. De kanonieke vorm kan bij een Hermiteese vorm verkregen worden met een unitaire transformatie.
4. Twee Hermiteese vormen, waarvan één positief definitief is, kunnen met één lineaire transformatie op kanonieke vorm gebracht worden (vgl. stelling 18).

17. Het numeriek bepalen van eigenwaarden

Vóór de behandeling van verschillende numerieke methoden ter bepaling van de eigenwaarden van een matrix wordt eerst de stelling van Gershgorin bewezen, waarin een schatting gegeven wordt voor de eigenwaarden van een matrix.

Stelling 19. Zij $A = (a_{ij})$ een matrix met complexe elementen. Alle eigenwaarden van A liggen in de vereniging van de cirkels

$$|z - a_{ii}| \leq R_i \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

waarin

$$R_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij}.$$

Bewijs. Stel dat λ een eigenwaarde is van de matrix A en dat $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ de bij λ behorende eigenvector is.

Dan is

$$\sum_{j=1}^n a_{kj} x_j = \lambda x_k \quad (k = 1, 2, \dots, n)$$

Ofwel

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n a_{kj} x_j = (\lambda - a_{kk}) x_k.$$

Zij i de index van het, in modulus, grootste element van X .

Dan geldt dus

$$\lambda - a_{ii} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} \frac{x_j}{x_i}$$

Ofwel

$$|\lambda - a_{ii}| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| \left| \frac{x_j}{x_i} \right| \leq \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| = R_i.$$

Voor iedere eigenwaarde van A vinden we een index i en een cirkel met middelpunt a_{ii} en straal R_i zodat alle eigenwaarden van A in de vereniging van al deze cirkels liggen.

We nemen aan dat de matrix A reëel is en niet defect. $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ zijn de eigenwaarden van A met bijbehorend de eigenkolommen $X_1, X_2, \dots, X_n$ en de eigenrijen $Y_1^*, Y_2^*, \dots, Y_n^*$. Dan geldt dus

$$\begin{aligned} A X_i &= \lambda_i X_i & i &= 1, 2, \dots, n. \\ A^* Y_i &= \bar{\lambda}_i Y_i \end{aligned}$$

Bovendien nemen we aan dat $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n|$.

De Powermethode

De powermethode is een iteratieve methode waarbij, met een (bijna) willekeurige startvector beginnend, de grootste eigenwaarde λ_1 en de daarbij behorende eigenvector X_1 , bepaald wordt.

Zij $X^{(0)}$ de startvector die te schrijven is als

$$X^{(0)} = \gamma_1 X_1 + \gamma_2 X_2 + \dots + \gamma_n X_n, \quad (17.1)$$

waarbij we aannemen dat $X^{(0)}$ zo gekozen is dat $\gamma_1 \neq 0$.

Nu berekenen we iteranden $X^{(k)}$ volgens het volgende iteratieprocédé:

$$X^{(k)} = A X^{(k-1)} \quad k = 1, 2, \dots \quad (17.2)$$

Dan geldt

$$X^{(k)} = A X^{(k-1)} = \sum_{i=1}^n \gamma_i \lambda_i^k X_i \quad (17.3)$$

Als $|\lambda_1| > |\lambda_2|$ zal de component van $X^{(k)}$ in de richting van X_1 steeds meer "versterkt" worden dan alle andere componenten in de richtingen $X_2, X_3, \dots, X_n$.

Daarom geldt in dit geval:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_1^{-k} X^{(k)} = \gamma_1 X_1 \quad (17.4)$$

Als $|\lambda_1| > 1$ wordt de coëfficiënt van X_1 in (17.3) groot, als $|\lambda_1| < 1$ wordt deze coëfficiënt klein.

Uit de lineariteit van A volgt dat voor het j^e kental $X_j^{(k)}$ van $X^{(k)}$ geldt:

$$X_j^{(k)} = \sum_{i=1}^n \gamma_i \lambda_i^k X_{ij} \quad j = 1, 2, \dots, n$$

waarin X_{ij} het j^e kental is van de eigenkolom X_i . We normeren de vector $X^{(k)}$ zo dat het grootste kental, zeg $X_\ell^{(k)}$ van $X^{(k)}$ gelijk is aan één.

We beschouwen nu de aangroeiing van dit kental per iteratie:

$$\frac{X_\ell^{(k+1)}}{X_\ell^{(k)}} = \frac{\sum_{i=1}^n \gamma_i \lambda_i^{k+1} X_{i\ell}}{\sum_{i=1}^n \gamma_i \lambda_i^k X_{i\ell}} \quad (17.5)$$

Met enig rekenen vinden we met (17.5):

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{X_\ell^{(k+1)}}{X_\ell^{(k)}} = \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_1 \frac{1 + \alpha_2 \beta_2^{k+1} + \dots + \alpha_n \beta_n^{k+1}}{1 + \alpha_2 \beta_2^k + \dots + \alpha_n \beta_n^k} = \lambda_1 \quad (17.6)$$

waarin

$$\alpha_i = \frac{\gamma_i X_{i\ell}}{\gamma_1 X_{1\ell}}, \quad \beta_i = \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \quad i = 2, 3, \dots, n$$

Uit (17.5) leiden we een schatting af voor de relatieve fout na k iteraties voor de berekening van λ_1 . Die relatieve fout geven we aan met het orde-symbool O .

We vinden n.l.

$$\frac{X_\ell^{(k+1)}}{X_\ell^{(k)}} = \lambda_1 \{1 + O(\beta_2^k)\} \quad (17.7)$$

Opmerking

$$\frac{1}{\lambda_1} \frac{X_\ell^{(k+1)}}{X_\ell^{(k)}} - 1 = O(\beta_2^k)$$

betekent dat er een getal $A > 0$ bestaat zodanig dat

$$\left| \frac{1}{\lambda_1} \frac{X_\ell^{(k+1)}}{X_\ell^{(k)}} - 1 \right| < A |\beta_2^k|$$

als $k \rightarrow \infty$.

Dit iteratieproces levert ons ook de eigenvector X_1 , n.l.

$$X^{(k)} = \lambda_1^k \{ \gamma_1 X_1 + \gamma_2 \beta_2^k X_2 + \dots + \gamma_n \beta_n^k X_n \} = \gamma_1 \lambda_1^k [X_1 + O(\beta_2^k) X_2] \quad (17.8)$$

Voor de eigenwaarde λ_1 kunnen we, als de matrix symmetrisch is, een betere benadering verkrijgen met het Rayleigh-quotient.

We beschouwen

$$R(X^{(k)}) = \frac{X^{(k)'} A X^{(k)}}{X^{(k)'} X^{(k)}}.$$

Dan vinden we

$$\lim_{k \rightarrow \infty} R(X^{(k)}) = \lambda_1.$$

De relatieve fout na k iteraties is eenvoudig te bepalen omdat de eigenvectoren van een symmetrische matrix een orthonormaal stelsel vormen. Met deze eigenschap leiden we af:

$$\begin{aligned} \frac{X^{(k)'} X^{(k+1)}}{X^{(k)'} X^{(k)}} &= \frac{\gamma_1^2 \lambda_1^{2k+1} + \dots + \gamma_n^2 \lambda_n^{2n+1}}{\gamma_1^2 \lambda_1^{2k} + \dots + \gamma_n^2 \lambda_n^{2k}} = \lambda_1 \left\{ 1 - \frac{\gamma_2^2}{\gamma_1^2} \beta_2^{2k} (1 - \beta_2) + \dots \right\} \quad (17.9) \\ &= \lambda_1 \{ 1 + O(\beta_2^{2k}) \}. \end{aligned}$$

Een kleine verbetering van de nauwkeurigheid krijgen we door als benadering van λ_1 te nemen

$$\frac{X^{(k+1)'} A X^{(k)}}{X^{(k+1)'} X^{(k)}}$$

in welk geval de relatieve fout $O(\beta_2^{2k+1})$ bedraagt.

Conclusie: bij toepassing van het Rayleigh-quotient wordt de eigenwaarde bepaald met een relatieve precisie $O(\beta_2^{2k})$ terwijl de (gelijktijdig berekende) eigenvector een relatieve precisie $O(\beta_2^k)$ heeft.

Opmerkingen

1. Als de matrix A positief definit is zal de benaderde waarde van λ_1 kleiner zijn dan λ_1 (zie 17.9).
2. Als $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3|$ onderscheiden we twee gevallen:

a. $\lambda_1 = -\lambda_2$.

Na k iteraties, voor k voldoende groot, krijgen we een vector evenredig met $\gamma_1 X_1 + (-1)^k \gamma_2 X_2$.

Voor k even levert dit $\gamma_1 X_1 + \gamma_2 X_2$.

Voor k oneven levert dit $\gamma_1 X_1 - \gamma_2 X_2$.

Uit deze relaties vinden we benaderingen voor X_1 en X_2 en met het Rayleigh-quotient berekenen we dan λ_1 .

b. $\lambda_1 = \lambda_2$.

Voor grote k krijgen we een vector evenredig met $\gamma_1 X_1 + \gamma_2 X_2$.

Dit is een benadering van een vector uit de twee-dimensionale eigenruimte. Met een andere startvector vinden we een tweede vector van deze ruimte.

3. Om de vector $X^{(k)}$ te berekenen hebben we $X^{(0)}$ k keer linksvermenigvuldigd met A . We vragen ons nu af, of het tijdwinvend is met machten van A te rekenen, dus links vermenigvuldigingen uit te voeren met $A^2, A^4, A^8, \dots$.

Om A^2 te berekenen moeten n^2 vectorproducten (inwendige producten) berekend worden.

Stel dat voor de vereiste nauwkeurigheid k iteraties verricht moeten worden.

Bij iteratie met A : k stappen dus kn vectorvermenigvuldigingen

"	"	"	$A^2 : \frac{1}{2}k$	"	"	$\frac{1}{2}kn + n^2$	"
"	"	"	$A^4 : \frac{1}{4}k$	"	"	$\frac{1}{4}kn + 2n^2$	"
"	"	"	$A^8 : \frac{1}{8}k$	"	"	$\frac{1}{8}kn + 3n^2$	"

Hieruit volgt dat:

iteratie met A	voorkeur verdient als	$k < 2n$
"	" A^2	" $2n < k < 4n$
"	" A^4	" $4n < k < 8n$.

In het algemeen zal iteratie met machten van A te prefereren zijn boven iteratie met A zelf als k groot en n klein is.

Powermethoden voor niet-symmetrische matrices

Als $|\lambda_1| > |\lambda_2|$ verschilt de powermethode voor niet-symmetrische matrices niet van het bovenbehandelde voor symmetrische matrices.

De veronderstelling "A is symmetrisch" kwam voor het eerst ter sprake bij het Rayleigh-quotient. We gebruikten in (17.9) n.l. dat de eigenvectoren een orthonormaal systeem vormen.

Bij niet-symmetrische matrices moeten we, ook al zijn de matrixelementen reëel, complex rekenen. De startvector dient in het algemeen complex te zijn.

We zullen het Rayleigh-quotient procédé generaliseren om het toe te kunnen passen op niet-symmetrische matrices. We beginnen het iteratieproces met een startkolom $X^{(0)}$ en een startrij $Y^{(0)*}$.

Zij

$$X^{(0)} = \sum_{i=1}^n \gamma_i X_i \quad \text{en} \quad Y^{(0)} = \sum_{i=1}^n \delta_i Y_i. \quad (17.10)$$

Dan geldt:

$$X^{(k)} = \sum_{i=1}^n \gamma_i \lambda_i^k X_i \quad \text{en} \quad Y^{(k)} = \sum_{i=1}^n \delta_i \bar{\lambda}_i Y_i \quad (17.11)$$

Eigenkolommen en eigenrijen vormen een biorthogonaal stelsel; als deze vectoren genormeerd zijn geldt:

$$Y_i^* X_j = \delta_{ij}. \quad (17.12)$$

Beschouw

$$R(X^{(k)}, Y^{(k)}) = \frac{Y^{(k)*} A X^{(k)}}{Y^{(k)*} X^{(k)}}.$$

Met (17.12) leiden we af:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} R(X^{(k)}, Y^{(k)}) = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\left(\sum_{i=1}^n \delta_i \lambda_i^k Y_i^* \right) \left(\sum_{j=1}^n \gamma_j \lambda_j^{k+1} X_j \right)}{\left(\sum_{i=1}^n \delta_i \lambda_i^k Y_i^* \right) \left(\sum_{j=1}^n \gamma_j \lambda_j^k X_j \right)} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^n \delta_i \gamma_i \lambda_i^{2k+1}}{\sum_{i=1}^n \delta_i \gamma_i \lambda_i^{2k}} = \lambda_1.$$

Evenals in (17.9) vinden we dat de relatieve fout is:

$$O\left(\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{2k}\right).$$

Om deze nauwkeurigheid te bereiken, in k stappen moeten $2k$ vectoren bewerkt worden. Het voordeel van het Rayleigh-quotient t.o.v. de formule

$$\lambda_1 = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{X_{\ell}^{(k+1)}}{X_{\ell}^{(k)}}$$

is dus bij niet-symmetrische matrices niet meer aanwezig.

Tenslotte bespreken we de methode van de vierkantsvergelijking waarmee de eigenwaarden λ_1 en λ_2 bepaald kunnen worden, ook als $|\lambda_1| = |\lambda_2| > |\lambda_3|$. Hierbij is het uitgangspunt dat voor grote k $X^{(k)}$ element is van de ruimte opgespannen door X_1 en X_2 en dat de bij enkele opeenvolgende stappen gevonden vectoren lineair afhankelijk zijn. Met deze lineaire afhankelijkheid worden X_1 en X_2 bepaald.

Zij

$$X^{(k)} = \gamma_1 \lambda_1^k X_1 + \gamma_2 \lambda_2^k X_2 + O(\lambda_3^k) X_3$$

en

$$Y^{(k)} = \bar{\delta}_1 \bar{\lambda}_1^k Y_1 + \bar{\delta}_2 \bar{\lambda}_2^k Y_2 + O(\lambda_3^k) Y_3.$$

We vormen nu achtereenvolgens, gebruik makend van de biorthogonaliteit:

$$\begin{aligned} P_{2k+1} &= Y^{(k+1)*} X^{(k)} = \gamma_1 \delta_1 \lambda_1^{2k+1} + \gamma_2 \delta_2 \lambda_2^{2k+1} + O(\lambda_3^{2k+1}) \\ P_{2k+2} &= Y^{(k+2)*} X^{(k)} = \gamma_1 \delta_1 \lambda_1^{2k+2} + \gamma_2 \delta_2 \lambda_2^{2k+2} + O(\lambda_3^{2k+2}) \\ P_{2k+3} &= Y^{(k+2)*} X^{(k+1)} = \gamma_1 \delta_1 \lambda_1^{2k+3} + \gamma_2 \delta_2 \lambda_2^{2k+3} + O(\lambda_3^{2k+3}) \\ P_{2k+4} &= Y^{(k+2)*} X^{(k+2)} = \gamma_1 \delta_1 \lambda_1^{2k+4} + \gamma_2 \delta_2 \lambda_2^{2k+4} + O(\lambda_3^{2k+4}) \end{aligned} \quad (17.13)$$

Als we stellen: $\varphi_1 = \gamma_1 \delta_1 \lambda_1^{2k+1}$ en $\varphi_2 = \gamma_2 \delta_2 \lambda_2^{2k+1}$ en aannemen dat k groot genoeg is om $O\left(\left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right)^{2k+1}\right)$ te verwaarlozen, wordt (17.13):

$$\begin{aligned} P_{2k+1} &= \varphi_1 + \varphi_2 \\ P_{2k+2} &= \varphi_1 \lambda_1 + \varphi_2 \lambda_2 \\ P_{2k+3} &= \varphi_1 \lambda_1^2 + \varphi_2 \lambda_2^2 \\ P_{2k+4} &= \varphi_1 \lambda_1^3 + \varphi_2 \lambda_2^3 \end{aligned} \quad (17.14)$$

Dit zijn vier vergelijkingen met twee onbekenden φ_1 en φ_2 .

Voor de oplosbaarheid van (17.14) is nodig en voldoende:

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & P_{2k+1} \\ \lambda_1 & \lambda_2 & P_{2k+2} \\ \lambda_1^2 & \lambda_2^2 & P_{2k+3} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & P_{2k+2} \\ \lambda_1^2 & \lambda_2^2 & P_{2k+3} \\ \lambda_1^3 & \lambda_2^3 & P_{2k+4} \end{vmatrix} = 0$$

Ofwel

$$\begin{aligned}\lambda_1 \lambda_2 P_{2k+1} - (\lambda_1 + \lambda_2) P_{2k+2} + P_{2k+3} &= 0 \\ \lambda_1 \lambda_2 P_{2k+2} - (\lambda_1 + \lambda_2) P_{2k+3} + P_{2k+4} &= 0.\end{aligned}\quad (17.15)$$

Deze twee vergelijkingen met de twee onbekenden $\lambda_1 \lambda_2$ en $\lambda_1 + \lambda_2$ hebben als oplossing:

$$\lambda_1 \lambda_2 = \frac{P_{2k+3}^2 - P_{2k+2} P_{2k+4}}{P_{2k+2}^2 - P_{2k+1} P_{2k+3}} = \beta \quad (17.16)$$

en

$$\lambda_1 + \lambda_2 = \frac{P_{2k+2} P_{2k+3} - P_{2k+1} P_{2k+4}}{P_{2k+2}^2 - P_{2k+1} P_{2k+3}} = 2\alpha. \quad (17.17)$$

Dus λ_1 en λ_2 zijn wortels van de vierkantsvergelijking

$$\lambda^2 - 2\alpha\lambda + \beta = 0. \quad (17.18)$$

Om het verlies aan cijfers te beperken berekenen we 2α niet uit (17.17) maar uit de formule

$$2\alpha = \frac{P_{2k+4} + P_{2k+2} \beta}{P_{2k+3}} \quad (17.19)$$

zodt de onnauwkeurigheid van de coëfficiënten in (17.18) uitsluitend veroorzaakt wordt door het cijferverlies in teller en noemer van β .

Om het cijferverlies bij de berekening van β na te gaan voeren we de grootte

$$\delta = \frac{\varphi_2}{\varphi_1} = O\left(\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{2k+1}\right)$$

in.

Dan vinden we:

$$\begin{aligned}P_{2k+1} &= \varphi_1 (1 + \delta); & P_{2k+3} &= \lambda_1^2 \varphi_1 \left(1 + \frac{\lambda_2^2}{\lambda_1^2} \delta\right); \\ P_{2k+2} &= \lambda_1 \varphi_1 \left(1 + \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \delta\right); & P_{2k+4} &= \lambda_1^3 \varphi_1 \left(1 + \frac{\lambda_2^3}{\lambda_1^3} \delta\right).\end{aligned}$$

Dit resultaat gebruikend leiden we af:

$$\begin{aligned}P_{2k+3}^2 - P_{2k+2} P_{2k+4} &= -\lambda_1 \lambda_2 (\lambda_1 - \lambda_2)^2 \varphi_1^2 \delta \\ P_{2k+2}^2 - P_{2k+1} P_{2k+3} &= -(\lambda_1 - \lambda_2)^2 \varphi_1^2 \delta.\end{aligned}$$

Als λ_1 en λ_2 dicht bij elkaar liggen treedt cijferverlies in β op door $(\lambda_1 - \lambda_2)^2$, als dit niet het geval is dan wordt cijferverlies in β door δ veroorzaakt. Hetzelfde gebeurt in de uitdrukking (17.17) voor 2α .

Als we echter (17.19) substitueren in de vierkantsvergelijking, dan blijken de fouten in de daarmee berekende λ_1 en λ_2 te zijn:

$$O\left(\left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right)^{2k+1}\right) \quad \text{resp.} \quad O\left(\left(\frac{\lambda_3}{\lambda_2}\right)^{2k+1}\right)$$

Het voordeel van (17.19) t.o.v. (17.17) blijkt ook als $\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^{2k+1}$ te verwaarlozen is voor grote k . Dan vallen in (17.16) en (17.17) cijfers weg in zowel de teller als de noemer.

Maar met de tweede uitdrukking voor 2α wordt de vierkantsvergelijking:

$$\lambda\left(\lambda - \frac{P_{2k+4}}{P_{2k+3}}\right) - \beta\left(\frac{P_{2k+2}}{P_{2k+3}}\lambda - 1\right) = 0.$$

Bij deze verhouding van λ_2 en λ_1 geldt dan ook

$$\frac{P_{2k+4}}{P_{2k+3}} = \frac{P_{2k+3}}{P_{2k+2}} = \tilde{\lambda}_1,$$

zodat de vierkantsvergelijking naast een slecht bepaalde wortel in ieder geval een wortel $\lambda = \lambda_1$ overhoudt.

De fout in λ_2 is $O\left(\left(\frac{\lambda_3}{\lambda_2}\right)^{2k+1}\right)$ en deze fout is in dit geval groter dan de fout in λ_1 . Dit is gevolg van het feit dat in de geïtereerde vectoren $X^{(k)}$ en $Y^{(k)}$ slechts decimalen vanaf een zeker rangnummer door X_2 en Y_2 worden beïnvloed.

De vierkantsvergelijkingmethode levert dus goede benaderingen voor λ_1 en λ_2 mits $|\lambda_2| > |\lambda_3|$.

Als $\tilde{\lambda}_1$ en $\tilde{\lambda}_2$ de benaderingen zijn voor λ_1 en λ_2 , berekend met (17.18), dan vinden we de bijbehorende (benaderde) eigenkolommen en eigenrijen met de volgende formules:

$$\begin{aligned} \tilde{X}_1 &= \tilde{\lambda}_2 X^{(k+1)} - X^{(k+2)}; & \tilde{Y}_1 &= \tilde{\lambda}_2 Y^{(k+1)} - Y^{(k+2)} \\ \tilde{X}_2 &= \tilde{\lambda}_1 X^{(k+1)} - X^{(k+2)}; & \tilde{Y}_2 &= \tilde{\lambda}_1 Y^{(k+1)} - Y^{(k+2)}. \end{aligned}$$

Men kan laten zien dat de fout in $\tilde{X}_1$ en $\tilde{Y}_1$ in het algemeen $O\left(\left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1}\right)^{k+1}\right)$ is en die in $\tilde{X}_2$ en $\tilde{Y}_2$ in het algemeen $O\left(\left(\frac{\lambda_3}{\lambda_2}\right)^{k+1}\right)$.

De methode van de vierkantsvergelijking is te prefereren boven de gewone powermethode (al dan niet gebruik makend van het Rayleigh-quotient) als

$$\left| \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right| \text{ dicht bij één ligt en } \left| \frac{\lambda_3}{\lambda_2} \right| < 1.$$

Powermethode bij defecte matrices

We beschouwen de defecte matrix A waarvan $\lambda_1 = \lambda_2$ en X_2 een gegeneraliseerde eigenvector is.

Dan geldt

$$AX_2 = \lambda_1 X_2 + X_1. \quad (16.9)$$

De geïtereerde vectoren kunnen op de volgende manier geschreven worden:

$$\begin{aligned} X^{(0)} &= \gamma_1 X_1 + \gamma_2 X_2 + \gamma_3 X_3 + \dots + \gamma_n X_n \\ A X^{(0)} &= (\gamma_1 \lambda_1 + \gamma_2) X_1 + \gamma_2 \lambda_1 X_2 + \gamma_3 \lambda_3 X_3 + \dots + \gamma_n \lambda_n X_n \\ &\dots \dots \dots \\ A X^{(k-1)} = X^{(k)} &= (\gamma_1 \lambda_1^k + k \gamma_2 \lambda_1^{k-1}) X_1 + \gamma_2 \lambda_1^k X_2 + \gamma_3 \lambda_3^k X_3 + \dots + \gamma_n \lambda_n^k X_n. \end{aligned} \quad (17.20)$$

Voor grote k geldt:

$$X^{(k)} = \gamma_1 \lambda_1^k \left\{ \left(1 + \frac{k \gamma_2}{\lambda_1 \gamma_1} \right) X_1 + \frac{\gamma_2}{\gamma_1} X_2 \right\} + O(\lambda_3^k) X_3.$$

Voor de verhouding van de ℓ^e kentallen van opeenvolgende iteranden vinden we:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{X_\ell^{(k+1)}}{X_\ell^{(k)}} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\gamma_1 \lambda_1^{k+1} \left[\left\{ 1 + \frac{(k+1) \gamma_2}{\lambda_1 \gamma_1} \right\} X_{1\ell} + \frac{\gamma_2}{\gamma_1} X_{2\ell} \right] + O(\lambda_3^{k+1})}{\gamma_1 \lambda_1^k \left[\left\{ 1 + \frac{k \gamma_2}{\lambda_1 \gamma_1} \right\} X_{1\ell} + \frac{\gamma_2}{\gamma_1} X_{2\ell} \right] + O(\lambda_3^k)} = \lambda_1 \quad (17.21)$$

Als $\tilde{\lambda}_1$ de met (17.21) verkregen benadering is van λ_1 , dan kunnen we de eigenvector X_1 bepalen met de formule:

$$-\lambda_1 X^{(k)} + X^{(k+1)} = \gamma_2 \lambda_1^k X_1 + O(\lambda_3^k) X_3.$$

Omdat de gegeneraliseerde eigenvector op X_1 na bepaald is, is voor grote k de iterand $X^{(k)}$ een benadering van X_2 .

De moeilijkheid is echter dat bij iedere iteratie deze benadering van X_2 een andere vorm aanneemt, zodat niet onmiddellijk te zien is of de bijdrage van X_3

al in voldoende mate verdwenen is. Als X_1 al bekend is kan bij het bepalen van X_2 met itereren worden opgehouden als X_1 , $X^{(k)}$ en $X^{(k+1)}$ in het vereiste aantal cijfers lineair afhankelijk zijn.

Berekening van de kleinere eigenwaarden van een matrix

De kleinere eigenwaarden $\lambda_2, \lambda_3, \dots$ van een matrix bepalen we met de z.g. deflatie-methode. Bij deze methode wordt de matrix $A (= A^{(1)})$ na de berekening van de grootste eigenwaarde λ_1 omgezet in een matrix $A^{(2)}$ waarvan $0, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n$ de eigenwaarden zijn.

We nemen aan dat de matrix A niet defect is. Dan geldt volgens (16.40)

$$RAC = A \quad \text{met} \quad RC = E.$$

In de kolommen van C staan de eigenkolommen X_i van A en in de rijen van R staan de eigenrijen Y_i^* , en A is de diagonaalmatrix met de eigenwaarden van A als diagonaalelementen. Omdat

$$A = CAR$$

is ieder element a_{ij} van A te schrijven als

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n \left(\sum_{l=1}^n C_{il} \lambda_k \right) R_{kj} = \sum_{k=1}^n C_{ik} \lambda_k R_{kj} \quad (17.22)$$

want A is een diagonaalmatrix.

C_{ik} , het i^{e} element van de k^{e} kolom van C , is het i^{e} element van de k^{e} eigenkolom X_k .

R_{kj} , het j^{e} element van de k^{e} rij van R , is het j^{e} element van de k^{e} eigenrij Y_k^* .

λ_{kk} is de k^{e} eigenwaarde λ_k .

Maar dan kunnen we (17.22) schrijven als

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n \lambda_k X_{ki} Y_{kj}^*$$

ofwel

$$A = \sum_{k=1}^n \lambda_k X_k Y_k^* \quad (17.23)$$

In (17.23) is de matrix A geschreven als som van n matrices die elk producten zijn van een kolom- en een rijvector.

Veronderstel nu dat van de matrix A de eigenwaarde λ_1 , de bijbehorende eigenkolom X_1 en de eigenrij Y_1^* berekend zijn. Om nu de kleinere eigenwaarden te berekenen verwijderen we uit A het aandeel afkomstig van λ_1 , X_1 en Y_1^* . We vormen n.l. de matrix

$$A^{(2)} = A - \lambda_1 X_1 Y_1^* \quad (17.24)$$

Deze matrix heeft eigenwaarden $0, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n$ eigenkolommen $X_1, X_2, \dots, X_n$ en eigenrijen $Y_1^*, Y_2^*, \dots, Y_n^*$.

Immers:

$$A^{(2)} X_i = A X_i - \lambda_1 X_1 Y_1^* X_i = \lambda_i X_i \quad (i \geq 2)$$

want $Y_1^* X_i = 0$

en

$$A^{(2)} X_1 = A X_1 - \lambda_1 X_1 Y_1^* X_1 = \lambda_1 X_1 - \lambda_1 X_1 = 0$$

want $Y_1^* X_1 = 1$.

Als $\lambda_n \neq 0$ heeft de singuliere matrix $A^{(2)}$ de rang $n-1$.

De rijvectoren $Y_2^*, Y_3^*, \dots, Y_n^*$ (resp. kolomvectoren $X_2, X_3, \dots, X_n$) spannen een $(n-1)$ -dimensionale ruimte op die orthogonaal is op X_1 (resp. Y_1^*).

Bij het berekenen van

$$A^{(2)} = A - \lambda_1 X_1 Y_1^*$$

treedt cijferverlies op, zodat $A^{(2)}$ niet singulier zal zijn maar een zeer kleine eigenwaarde zal hebben.

Om λ_2 , X_2 en Y_2^* te bepalen kunnen we de powermethode met het gegeneraliseerde Rayleigh-quotient toepassen of de vierkantsvergelijking-methode om tegelijk ook λ_3 , X_3 en Y_3^* te berekenen.

Dan gaan we verder met

$$A^{(3)} = A^{(2)} - \lambda_2 X_2 Y_2^*$$

$$\text{resp.} \quad A^{(4)} = A^{(2)} - \lambda_2 X_2 Y_2^* - \lambda_3 X_3 Y_3^*.$$

Aan de hand van een foutenbeschouwing kan men laten zien dat als X_1 en Y_1 in p cijfers en λ_1 in $2p$ cijfers nauwkeurig zijn berekend, het mogelijk is na voldoende iteraties X_2 en Y_2 in $p-r$ cijfers en λ_2 in weer het dubbele aantal, dus $2(p-r)$ cijfers nauwkeurig te vinden. Hierin is

$$r = 10 \log \left| \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right|$$

Eigenwaarden van het product van twee symmetrische matrices

Bij trillingsvraagstukken is de matrix A waarvan de eigenwaarden moeten worden berekend vaak het product van twee symmetrische matrices.

De bewegingsvergelijking van een trillend systeem met n vrijheidsgraden kan geschreven worden als

$$PX = \sqrt{2}KX \quad (17.25)$$

waarbij met de kwadratische vorm behorend bij de symmetrische matrix P de potentiële energie wordt weergegeven. De kinetische energie wordt beschreven met de kwadratische vorm behorend bij de symmetrische matrix K en $\sqrt{2}$ ten slotte is de eigenfrequentie van het systeem.

In plaats van (17.25) schrijven we:

$$AX = \lambda X$$

waarbij $\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}}$ en $A = P^{-1}K$.

De powermethode levert eerst de grootste eigenwaarde, dus de kleinste eigenfrequentie en daarna door deflatie de grotere eigenfrequentie(s). De physicus is gelukkig veelal het meest geïnteresseerd in de kleine frequenties.

De eigenwaarden vindt men met de formule:

$$\lambda_i = \frac{Y_i^T A X_i}{Y_i^T X_i} \quad (17.26)$$

waarin X_i en Y_i de eigenkolommen zijn van A en A' .

Uitgeschreven levert dit:

$$AX_i = \lambda_i X_i$$

$$A'Y_i = \lambda_i Y_i.$$

Omdat P en K symmetrisch zijn is

$$A' = (P^{-1}K)' = KP^{-1}$$

$$\text{dus} \quad KP^{-1}Y_i = \lambda_i Y_i. \quad (17.27)$$

Als we (17.27) linksvermenigvuldigen met P^{-1} krijgen we

$$P^{-1}KP^{-1}Y_i = \lambda_i P^{-1}Y_i.$$

$$\text{Ofwel} \quad A(P^{-1}Y_i) = \lambda_i (P^{-1}Y_i).$$

Hieruit volgt dat

$$X_i = P^{-1}Y_i, \text{ dus}$$

$$Y_i = PX_i.$$

Deze betrekking substitueren in (17.26) geeft

$$\lambda_1 = \frac{X_1' P A X_1}{X_1' P X_1} = \frac{X_1' K X_1}{X_1' P X_1}.$$

Voor de eigenfrequentie v_1 vinden we derhalve:

$$v_1^2 = \frac{X_1' P X_1}{X_1' K X_1}.$$

Deze uitdrukking, waarin slechts gerekend hoeft te worden met de kolommen X_1 , gebruiken we om met de powermethode v_1^2 te bepalen. Na k iteraties vinden we, als k voldoende groot is, een benadering voor v_1^2 :

$$v_1^2 = \frac{X^{(k)'} P X^{(k)}}{X^{(k)'} K X^{(k)}}.$$

Bij de deflatie (17.24) maken we ook gebruik van het verband tussen X_1 en Y_1 . Omdat $X_1 = P^{-1} Y_1$ geldt:

$$A^{(2)} = A - \lambda_1 X_1 Y_1' = P^{-1} K - \lambda_1 P^{-1} Y_1 Y_1' = P^{-1} (K - \lambda_1 E).$$

Bij de deflatie blijft de matrix P ongewijzigd, maar alle diagonaal-elementen van K worden met λ_1 verminderd.

Opmerking

Om de convergentie van de powermethode op te voeren wordt wel eens spectrum-translatie toegepast.

Als n.l. alle diagonaal-elementen van een matrix met eenzelfde getal worden vermeerderd, worden ook alle eigenwaarden met dit getal vermeerderd terwijl de eigenvectoren onveranderd blijven.

Immers uit

$$AX = \lambda X$$

volgt dat $(A + \sigma)X = (\lambda + \sigma)X$,

zodat $\lambda_1 + \sigma$ eigenwaarde met eigenvector X_1 is van de matrix $A + \sigma E$ als λ_1 eigenwaarde met eigenvector X_1 is van de matrix A .

Door geschikte keuze van σ is $\left| \frac{\lambda_2 + \sigma}{\lambda_1 + \sigma} \right| < \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|$ zodat de convergentie van de powermethode toegepast op $A + \sigma E$ beter is dan bij de oorspronkelijke matrix A .

18. Transformatiemethoden voor het bepalen van eigenwaarden

We zullen nu methoden behandelen waarmee alle eigenwaarden en eigenvectoren van een matrix bepaald worden. Bij deze methoden wordt door gelijkvormigheids-transformaties uit de matrix A een matrix verkregen waarvan op een eenvoudige manier de eigenwaarden kunnen worden bepaald.

Methode van Jacobi

Dit is een iteratieve methode voor symmetrische matrices waarbij door orthogonale gelijkvormigheidstransformaties uit de matrix $A = (A^{(0)})$ de matrix $A^{(k)}$ wordt verkregen, die zodanig is dat

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = A.$$

Omdat A symmetrisch is bestaat er een orthogonale matrix C (zie NA-227) zodat

$$C'AC = \Lambda.$$

In de matrix C zijn de kolommen eigenvectoren van A .

Deze matrix C wordt bij de methode van Jacobi benaderd met het product van een aantal elementaire rotatie matrices T_{pq} (zie NA-193). Voor de elementen t_{ij} van de matrix T_{pq} geldt:

$$\begin{aligned} t_{pp} &= t_{qq} = \cos \theta \\ t_{pq} &= -t_{qp} = \sin \theta \\ t_{ii} &= 1, \quad t_{mj} = t_{im} = t_{ij} = 0 \quad i, j \neq p, q; \quad m = p, q. \end{aligned}$$

De elementaire rotatie matrix T_{pq} beschrijft een rotatie over een hoek θ in het vlak door de p^e en q^e coördinaatas van de arithmetische ruimte R_n .

Als

$$B = T'_{pq} A T_{pq} \quad (18.1)$$

dan is

$$b_{pk} = \sum_{j, l=1}^n t'_{pj} a_{jl} t_{lk} = \cos \theta \sum_{l=1}^n a_{pl} t_{lk} - \sin \theta \sum_{l=1}^n a_{ql} t_{lk}. \quad (18.2)$$

Als $k \neq p, q$ geldt:

$$b_{pk} = a_{pk} \cos \theta - a_{qk} \sin \theta.$$

Als $k = p$ krijgen we

$$b_{pp} = \cos \theta (a_{pp} \cos \theta - a_{pq} \sin \theta) - \sin \theta (a_{qp} \cos \theta - a_{qq} \sin \theta).$$

Als $k = q$ wordt (18.2)

$$b_{pq} = \cos \theta (a_{pp} \sin \theta + a_{pq} \cos \theta) - \sin \theta (a_{qp} \sin \theta + a_{qq} \cos \theta).$$

We kunnen op deze manier afleiden:

$$\left. \begin{aligned}
 b_{pk} &= a_{pk} \cos \theta - a_{qk} \sin \theta \\
 b_{qk} &= a_{pk} \sin \theta + a_{qk} \cos \theta \\
 b_{ip} &= a_{ip} \cos \theta - a_{iq} \sin \theta \\
 b_{iq} &= a_{ip} \sin \theta + a_{iq} \cos \theta \\
 b_{ik} &= a_{ik}
 \end{aligned} \right\} \quad i, k \neq p, q \quad (18.3)$$

$$\begin{aligned}
 b_{pp} &= a_{pp} \cos^2 \theta + a_{qq} \sin^2 \theta - 2a_{pq} \sin \theta \cos \theta \\
 b_{qq} &= a_{pp} \sin^2 \theta + a_{qq} \cos^2 \theta + 2a_{pq} \sin \theta \cos \theta \\
 b_{pq} &= \frac{1}{2}(a_{pp} - a_{qq}) \sin 2\theta + a_{pq} \cos 2\theta.
 \end{aligned}$$

We kiezen θ zodanig dat

$$b_{pq} = 0.$$

D.w.z.

$$\tan 2\theta = - \frac{2a_{pq}}{a_{pp} - a_{qq}}. \quad (18.4)$$

De rotatiehoek 2θ is op een veelvoud van $\frac{\pi}{2}$ na bepaald. Het is niet nodig de goniometrische functies in (18.3) te berekenen vanwege de eenvoudige relaties tussen $\tan 2\theta$, $\sin \theta$ en $\cos \theta$.

Als we invoeren:

$$\begin{aligned}
 \lambda &= -2a_{pq} \\
 \mu &= a_{pp} - a_{qq}
 \end{aligned}$$

is

$$\tan 2\theta = \frac{\lambda}{\mu}$$

Dus:

$$\cos 2\theta = \frac{\mu}{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}}, \quad \sin \theta = \sqrt{\frac{1 - \frac{\mu}{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}}}{2}}, \quad \cos \theta = \sqrt{1 - \sin^2 \theta} \quad (18.5)$$

Als $\sin \theta$ dicht bij 1 ligt zal bij de berekening van $\cos \theta$ de helft van het aantal significante cijfers waarmee gerekend wordt verloren gaan. Men zou een fout introduceren door $b_{pq} = 0$ te nemen. Daarom is het aan te bevelen de volgende formules te gebruiken:

$$\omega = \operatorname{sgn}(\mu) \frac{\lambda}{\sqrt{\lambda^2 + \mu^2}} = \sin 2\theta,$$

$$\sin \theta = \frac{\omega}{2 \cos \theta} = \frac{\omega}{\sqrt{2(1 + \sqrt{1 - \omega^2})}}$$

$$\cos \theta = \sqrt{1 - \sin^2 \theta}.$$

Bij deze formule geldt: $|\omega| \leq 1$, dus is $-\frac{\pi}{4} \leq \theta \leq \frac{\pi}{4}$ te nemen (want θ is op $\frac{\pi}{2}$ na bepaald) en treedt de onnauwkeurigheid als bovenvermeld niet op in $\cos \theta$. De onnauwkeurigheid zou kunnen optreden in $\sqrt{1 - \omega^2}$ als ω dicht bij 1 ligt.

Dit gebeurt echter alleen als μ klein is. Omdat in b_{pq} de term $2\mu \sin \theta \cos \theta$ voorkomt kan men laten zien dat b_{pq} toch altijd in alle cijfers 0 wordt, omdat $\sin \theta$ en $\cos \theta$ alleen onnauwkeurig bekend zijn als μ zeer klein is, maar dan is de totale fout in $2\mu \sin \theta \cos \theta$ toch voldoende klein.

Wanneer we na deze elementaire transformatie een volgende elementaire transformatie toepassen met hetzelfde p hetzelfde q dan gaat het nul zijn van b_{pq} weer verloren.

We zullen laten zien dat de som van de kwadraten van alle niet-diagonaal-elementen bij de beschreven overgang van A naar B verminderd is met $2a_{pq}^2$.

Met (18.3) is eenvoudig na te rekenen dat:

$$\left. \begin{aligned} b_{pk}^2 + b_{qk}^2 &= a_{pk}^2 + a_{qk}^2 \\ b_{ip}^2 + b_{iq}^2 &= a_{ip}^2 + a_{iq}^2 \\ b_{ik}^2 &= a_{ik}^2 \end{aligned} \right\} \quad i, k \neq p, q$$

$$b_{pp}^2 + b_{qq}^2 + 2b_{pq}^2 = a_{pp}^2 + a_{qq}^2 + 2a_{pq}^2.$$

Daar echter $b_{pq} = b_{qp} = 0$ zien we dat

$$b_{pp}^2 + b_{qq}^2 = a_{pp}^2 + a_{qq}^2 + 2a_{pq}^2.$$

D.w.z. een bedrag ten grootte $2a_{pq}^2$ dat eerst buiten de diagonaal was is nu "in de diagonaaltermen" terechtgekomen. De som van de kwadraten van alle niet-diagonaal-elementen wordt dus bij iedere iteratie kleiner, zodat de diagonaalvorm A steeds beter benaderd wordt. Het exacte einde : de diagonaalvorm wordt echter niet bereikt.

In de praktijk wordt de methode van Jacobi zo toegepast, dat na elkaar alle niet-diagonaal-elementen boven een zekere grens behandeld worden. Zijn er geen elementen meer boven deze grens dan wordt de grens verlaagd. Op deze manier werkend hoeft niet iedere keer het grootste element opgezocht te worden.

Men vindt de eigenvectoren als kolommen van de matrix

$$C = T^{(1)} T^{(2)} T^{(3)} \dots$$

waarin $T^{(1)}, T^{(2)}$ enz. de elementaire rotatie matrices zijn die succesievelijk gebruikt zijn.

Methode van Givens

Bij de methode van Givens wordt de symmetrische matrix A door een orthogonale gelijkvormigheidstransformatie omgezet in een z.g. tridiagonale matrix, d.i. een matrix die alleen op de diagonaal, de erboven gelegen superdiagonaal en de er onder liggende subdiagonaal elementen heeft die van nul verschillen. Dus $B = C'AC$ met

$$b_{ij} = 0 \quad \text{als} \quad |i - j| \geq 2.$$

De orthogonale matrix C is, als bij de methode van Jacobi, product van elementaire rotatie matrices.

Bij de methode van Givens wordt de rotatiehoek θ zodanig gekozen dat bij transformatie met T_{pq}

$$b_{p-1,q} = 0. \quad (18.6)$$

Volgens (18.3) geldt:

$$b_{p-1,q} = a_{p-1,p} \sin \theta + a_{p-1,q} \cos \theta.$$

Volgens (18.6) is dus

$$\tan \theta = - \frac{a_{p-1,q}}{a_{p-1,p}}. \quad (18.7)$$

Bij een rotatie in het (2,3)-vlak wordt $b_{13} = 0$. Daarna roteren in het (2,4)-vlak, dit maakt het (1,4)-element 0. Hierbij verandert het (1,3)-element niet want bij rotatie in (2,4)-vlak veranderen alleen de elementen in de 2^e en 4^e rij en kolom. We kunnen zo successievelijk alle elementen (1,3), (1,4), ..., (1,n) gelijk aan 0 maken.

Daarna roteert men in het (3,4)-vlak en maakt dus het (2,4)-element nul. In principe zouden nu de elementen (1,3) en (1,4) kunnen veranderen. Er geldt echter:

$$\begin{aligned} b_{13} &= a_{13} \cos \theta - a_{14} \sin \theta \\ \text{en} \quad b_{14} &= a_{13} \sin \theta + a_{14} \cos \theta. \end{aligned}$$

Omdat $a_{13} = a_{14} = 0$ blijven b_{13} en b_{14} gelijk aan nul.

De elementen die reeds nul gemaakt zijn blijven als nul behouden. Het resultaat is dat door hoogstens $\frac{1}{2}(n-1)(n-2)$ elementaire rotaties de matrix op tridiagonale vorm wordt gebracht.

Laat deze zijn

$$B = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \cdot & 0 & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & \cdot & 0 & 0 \\ 0 & \beta_3 & \alpha_3 & \cdot & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \alpha_{n-1} & \beta_n \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \beta_n & \alpha_n \end{pmatrix} \quad (18.8)$$

Deze matrix B heeft dezelfde eigenwaarden als A, want gelijkvormige matrices hebben dezelfde eigenwaarden.

Als een der elementen β_i ($i = 2, 3, \dots, n$) gelijk is aan nul, is het karakteristieke polynoom van de matrix B product van de karakteristieke polynomen van de matrices

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \beta_{i-2} & \alpha_{i-1} & \beta_{i-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & \beta_{i-1} & \alpha_{i-1} \end{pmatrix} \text{ en } \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_{i+1} & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ \beta_{i+1} & \alpha_{i+1} & \beta_{i+2} & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \beta_{n-1} & \alpha_{n-1} & \beta_n \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & \beta_n & \alpha_n \end{pmatrix}$$

die ieder voor zich behandeld kunnen worden. Daarom nemen we aan dat alle $\beta_i \neq 0$ zijn.

Het karakteristieke polynoom van B

$$|B - \lambda E| = \begin{vmatrix} \alpha_1 - \lambda & \beta_2 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 - \lambda & \beta_3 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \beta_{n-1} & \alpha_{n-1} - \lambda & \beta_n \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & \beta_n & \alpha_n - \lambda \end{vmatrix} \quad (18.9)$$

duiden we aan met $p_n(\lambda)$, het karakteristieke polynoom van de matrix bestaande uit de eerste n rijen en kolommen van $B - \lambda E$ zij $p_r(\lambda)$. Dan geldt:

$$p_1(\lambda) = \alpha_1 - \lambda$$

$$p_2(\lambda) = (\alpha_2 - \lambda)p_1(\lambda) - \beta_2^2 p_0(\lambda)$$

waarin

$$p_0(\lambda) = 1.$$

Algemeen vinden we bij ontwikkeling naar de r^e rij:

$$p_r(\lambda) = (\alpha_r - \lambda)p_{r-1}(\lambda) - \beta_r^2 p_{r-2}(\lambda) \quad (r = 2, 3, \dots, n). \quad (18.10)$$

Merk op dat

$$\operatorname{sgn} p_r(\lambda) = \begin{cases} 1 & \text{voor } \lambda \rightarrow -\infty \\ (-1)^r & \text{voor } \lambda \rightarrow \infty \end{cases}.$$

De rij polynomen $p_0(\lambda), p_1(\lambda), \dots, p_n(\lambda)$ die aan (18.10) voldoet is een rij van Sturm en heeft de volgende eigenschappen:

a. Als geen der $\beta_i = 0$, heeft $p_n(\lambda)$ geen meervoudige nulpunten.

Bewijs. Als λ_1 tweevoudig nulpunt is van (18.9) bestaan er twee lineair onafhankelijke eigenvectoren bij λ_1 . De rang van $B - \lambda_1 E$ is dan $n-2$, dus is zowel $p_n(\lambda_1) = 0$ als $p_{n-1}(\lambda_1) = 0$.

Uit (18.10) volgt dan dat ook $p_{n-2}(\lambda_1) = 0, p_{n-3}(\lambda_1) = 0, \dots, p_0(\lambda_1) = 0$.

Dit is in strijd met $p_0(\lambda_1) = 1$.

b. Het aantal eigenwaarden dat groter is dan a wordt, als alle $\beta_i \neq 0$ zijn, gegeven door het aantal malen dat in de rij $p_0(a), p_1(a), p_2(a), \dots, p_n(a)$ twee opeenvolgende elementen hetzelfde teken hebben.

Bewijs. Als $a \rightarrow \infty$ zijn de elementen $p_0(a), p_1(a), \dots$ afwisselend positief en negatief terwijl als $a \rightarrow -\infty$ alle elementen van deze rij positief worden. In het interval $(-\infty, \infty)$ heeft $p_1(\lambda)$ één tekenwisseling, $p_2(\lambda)$ twee tekenwisselingen etc.

Uit (18.10) blijkt bovendien dat $p_r(a)$ en $p_{r-2}(a)$ tegengesteld teken hebben als $p_{r-1}(a) = 0$. Daarom kunnen we onderstaand schema maken, waarbij in de eerste kolom een monotoon dalende rij van a -waarden wordt genomen. In de $p_0(a)$ kolom staan alleen +tekens. De $p_1(a)$ kolom zal ergens van negatief in positief overgaan. Voor die waarde van a is $p_2(a)$ negatief. De waarden van a waarvoor p_2 van teken verandert liggen dus aan weerszijden van de waarde van a waarvoor $p_1(a)$ van teken wisselt.

a	$p_0(a)$	$p_1(a)$	$p_2(a)$	$p_3(a)$	$p_4(a)$
∞	+	-	+	-	+
.	+	-	+	-	0
.	+	-	+	-	-
.	+	-	+	0	-
.	+	-	+	+	-
.	+	-	0	+	-
.	+	-	-	+	-
.	+	-	-	+	0
.	+	0	-	+	+
.	+	+	-	+	+
.	+	+	-	0	+
.	+	+	-	-	+
.	+	+	0	-	+
.	+	+	+	-	0
.	+	+	+	-	-
.	+	+	+	0	-
.	+	+	+	+	0
$-\infty$	+	+	+	+	+

Als we dit schema opbouwen zien we dat de $r-1$ tekenwisselingen van p_{r-1} tussen de r tekenwisselingen van p_r liggen. Door een 0 in één van de kolommen p_1 t/m p_{n-1} verandert het aantal malen, dat in een horizontale rij opeenvolgende elementen hetzelfde teken hebben, niet. Dit verandert alleen als $p_n = 0$ wordt en we zien dat het dan steeds toeneemt als we naar kleinere a gaan. Dus is het aantal keren dat we voor een bepaalde a waarde in opvolgende p_r -elementen hetzelfde teken hebben, gelijk aan het aantal wortels van $p_n(\lambda) = 0$ die groter dan a zijn, d.w.z. gelijk aan het aantal eigenwaarden groter dan a .

We kunnen m.b.v. bovenstaande eigenschap b. de eigenwaarden zo nauwkeurig bepalen als we willen. We bepalen, met de stelling van Gershgorin, het interval waarbinnen alle eigenwaarden liggen en door halvering van intervallen verkrijgen we de n intervallen die ieder precies één eigenwaarde bevatten. In elk van deze intervallen passen we regula falsi toe om snel betere benaderingen te vinden.

Het berekenen van de eigenvectoren van de matrix B gaat in principe gemakkelijk uit de afzonderlijke vergelijkingen van het stelsel

$$BX_i = \lambda_i X_i.$$

Stelt men $X_{i1} = 1$ dan volgt X_{i2} uit de eerste vergelijking enz. Tenslotte volgt X_{in} uit de $(n-1)^e$ vergelijking terwijl aan de laatste vergelijking voldaan moet zijn door de berekende getallen X_{in-1} en X_{in} . Er doen zich vaak moeilijkheden voor vanwege het wegvallen van cijfers. Men zie hiervoor: J.H.Wilkinson, "The calculation of the eigenvectors of Codiagonal Matrices", The Computer Journal 1, 90-96, 1958.

Methode van Householder

De symmetrische matrix A wordt, als bij Givens' methode, door gelijkvormigheidstransformaties op tridiagonale vorm gebracht. De tridiagonale matrix B wordt verkregen als $(n-2)^e$ element uit de rij $A^{(0)} (= A), A^{(1)}, A^{(2)}, \dots$, waar-

$$(a_{ij}^{(k)}) = A^{(k)} = P^{(k)} A^{(k-1)} P^{(k)} \quad (18.12)$$

met

$$P^{(k)} = E - 2 V_k V_k'. \quad (18.13)$$

De vector V_k in (18.12) heeft lengte één en is zodanig gekozen dat

$$a_{kj}^{(k)} = 0 \quad j - k \geq 2. \quad (18.14)$$

In de k^e rij van $A^{(k)}$ zijn de niet-tridiagonale elementen dus nul. De transformatie-matrix $P^{(k)}$ is symmetrisch en orthogonaal, want

$$P^{(k)} P^{(k)'} = (E - 2 V_k V_k')^2 = E$$

immers

$$V_k' V_k = 1.$$

De constructie van V_k , zodanig dat aan (18.12), (18.13) en (18.14) is voldaan laten we zien voor een matrix van de orde 4.

Zij

$$V_1' = (0, v_2, v_3, v_4)$$

$$\text{met} \quad 1 = v_2^2 + v_3^2 + v_4^2.$$

Dan is

$$P^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-2v_2^2 & -2v_2v_3 & -2v_2v_4 \\ 0 & -2v_3v_2 & 1-2v_3^2 & -2v_3v_4 \\ 0 & -2v_4v_2 & -2v_4v_3 & 1-2v_4^2 \end{pmatrix}$$

Uit $A^{(1)} = P^{(1)} A P^{(1)}$ leiden we af dat

$$\begin{aligned} a_{12}^{(1)} &= (1-2v_2^2)a_{12} - 2v_2v_3a_{13} - 2v_2v_4a_{14} = a_{12} - 2v_2p \\ a_{13}^{(1)} &= -2v_2v_3a_{12} + (1-2v_3^2)a_{13} - 2v_3v_4a_{14} = a_{13} - 2v_3p \\ a_{14}^{(1)} &= -2v_2v_4a_{12} - 2v_3v_4a_{13} + (1-2v_4^2)a_{14} = a_{14} - 2v_4p \end{aligned} \quad (18.15)$$

met

$$p = v_2a_{12} + v_3a_{13} + v_4a_{14}.$$

Het is eenvoudig na te gaan dat

$$a_{12}^2 + a_{13}^2 + a_{14}^2 = a_{12}^{(1)2} + a_{13}^{(1)2} + a_{14}^{(1)2}.$$

Dus als

$$a_{12}^{(1)} = a_{13}^{(1)} = 0$$

geldt

$$\begin{aligned} a_{12} - 2pv_2 &= \pm (a_{12}^2 + a_{13}^2 + a_{14}^2)^{\frac{1}{2}} \\ a_{13} - 2pv_3 &= 0 \\ a_{14} - 2pv_4 &= 0. \end{aligned} \quad (18.16)$$

Als we de drie vergelijkingen (18.16) met resp. v_2 , v_3 en v_4 vermenigvuldigen en dan optellen krijgen we:

$$p = \mp v_2 (a_{12}^2 + a_{13}^2 + a_{14}^2)^{\frac{1}{2}}.$$

Dit resultaat substitueren we in (18.16) en dan vinden we

$$\begin{aligned} v_2^2 &= \frac{1}{2} \left\{ 1 \mp \frac{a_{12}}{(a_{12}^2 + a_{13}^2 + a_{14}^2)^{\frac{1}{2}}} \right\}; \\ v_3 &= \mp \frac{a_{13}}{2(a_{12}^2 + a_{13}^2 + a_{14}^2)^{\frac{1}{2}}} v_2 \\ v_4 &= \mp \frac{a_{14}}{2(a_{12}^2 + a_{13}^2 + a_{14}^2)^{\frac{1}{2}}} v_2 \end{aligned} \quad (18.17)$$

Om v_2 zo nauwkeurig mogelijk te bepalen en bovendien te verhinderen dat in de uitdrukkingen voor v_3 en v_4 gedeeld wordt door een klein getal nemen we in (18.17) - tekens als $a_{12} < 0$ en + tekens als $a_{12} > 0$.

Met de getallen v_2 , v_3 en v_4 uit (18.17) heeft $A^{(1)}$ nu de vorm

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & 0 & 0 \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & a_{24}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & a_{34}^{(1)} \\ 0 & a_{42}^{(1)} & a_{43}^{(1)} & a_{44}^{(1)} \end{pmatrix}$$

Met de matrix $P^{(2)} = E - 2V_2 V_2^{(1)}$ construeren we de tridiagonale matrix

$$A^{(2)} = (a_{ij}^{(2)}) = P^{(2)} A^{(1)} P^{(2)}.$$

Zij

$$V_2 = (0, 0, w_3, w_4), \quad w_3^2 + w_4^2 = 1.$$

Dan is

$$P^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-2w_3^2 & -2w_3 w_4 \\ 0 & 0 & -2w_4 w_3 & 1-2w_4^2 \end{pmatrix}$$

Bovendien vinden we

$$\begin{aligned} a_{23}^{(2)} &= a_{23}^{(1)} - 2w_3 (w_3 a_{23}^{(1)} + w_4 a_{24}^{(1)}) \\ a_{24}^{(2)} &= a_{24}^{(1)} - 2w_4 (w_3 a_{23}^{(1)} + w_4 a_{24}^{(1)}) \end{aligned}$$

Nu is eenvoudig af te leiden dat

$$a_{23}^{(1)^2} + a_{24}^{(1)^2} = a_{23}^{(2)^2} + a_{24}^{(2)^2}$$

zodat voor w_3 en w_4 geldt:

$$w_3^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{a_{23}^{(1)}}{(a_{23}^{(1)^2} + a_{24}^{(1)^2})^{\frac{1}{2}}} \right\}, \quad w_4 = \mp \frac{a_{24}^{(1)}}{2w_3 (a_{23}^{(1)^2} + a_{24}^{(1)^2})^{\frac{1}{2}}}. \quad (18.18)$$

Bij deze keuze van w_3 en w_4 krijgen we als resultaat de tridiagonale matrix

$$B = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & 0 \\ 0 & \beta_3 & \alpha_3 & \beta_4 \\ 0 & 0 & \beta_4 & \alpha_4 \end{pmatrix}$$

waarvan de eigenwaarden met de rij van Sturm bepaald kunnen worden.

Methode van Lanczos voor symmetrische matrices

Ook bij deze methode wordt met een eindig aantal orthogonale transformaties een tridiagonale matrix B afgeleid uit de symmetrische matrix A. Bij de methode van Lanczos worden successievelijk de kolommen X_k van de orthogonale transformatie-matrix X geconstrueerd waarbij dus $B = X'AX$.

Deze kolommen X_k worden opgebouwd met de volgende drie-terms recurrenente betrekking:

$$X_{k+1} = A X_k - \alpha_k X_k - \beta_k X_{k-1} \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (18.19)$$

met als startvectoren

$$X_0 = 0 \quad \text{en} \quad X_1 \text{ willekeurig.}$$

Voor de orthogonaliteit van deze kolommen stellen we de eis

$$X_k' X_{k+1} = X_{k-1}' X_{k+1} = 0.$$

Daaruit vinden we dat

$$\alpha_k = \frac{X_k' A X_k}{X_k' X_k}, \quad \beta_k = \frac{X_{k-1}' A X_k}{X_{k-1}' X_{k-1}} \quad (18.20)$$

hierbij is gebruikt dat bij de vorige stap de orthogonaliteit van X_k en X_{k-1} bewerkt is.

We bewijzen nu met (18.19) en (18.20) dat X_{k+1} loodrecht staat op alle voorgaande vectoren X_ℓ ($\ell = 1, 2, \dots, k$).

Deze bewering geldt voor $k = 1$ want X_2 staat loodrecht op X_1 en X_0 .

Stel dat de uitspraak geldt voor $k \leq p$.

Dan is

$$X_{p+2} = A X_{p+1} - \alpha_{p+1} X_{p+1} - \beta_{p+1} X_p \quad (18.21)$$

waarbij α_{p+1} en β_{p+1} met (18.20) zo genomen zijn dat X_{p+2} loodrecht staat op X_{p+1} en X_p .

Nu (18.21) linksvermenigvuldigen met X_ℓ' , $\ell = 0, 1, \dots, p-1$.

Dit levert

$$X_\ell' X_{p+2} = X_\ell' A X_{p+1} - \alpha_{p+1} X_\ell' X_{p+1} - \beta_{p+1} X_\ell' X_p \quad (18.22)$$

In (18.22) zijn volgens de inductie aanname de laatste twee termen nul.

Dus

$$X_\ell' X_{p+2} = X_\ell' A X_{p+1} = X_\ell' (X_{p+1} + \alpha_\ell X_\ell + \beta_\ell X_{\ell-1}). \quad (18.23)$$

In (18.23) zijn in het laatste lid alle termen nul volgens de inductie aanname.

Conclusie: behalve in speciale gevallen (bij "ongelukkige" keuze van de startvector X_1) zijn alle vectoren $X_1, X_2, \dots, X_n$ ongelijk aan nul en daarom zal $X_{n+1} = 0$, want alleen de nulvector staat loodrecht op n orthogonale vectoren.

Uit (18.19) blijkt dat de matrix X waarvan $X_1, X_2, \dots, X_n$ de kolommen zijn, aan de matrix-vergelijking

$$AX = XB$$

voldoet, waarin

$$B = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ 1 & \alpha_2 & \beta_3 & 0 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \alpha_3 & \beta_4 & \cdot & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 1 & \alpha_{n-1} & \beta_n \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 & 1 & \alpha_n \end{pmatrix} \quad (18.24)$$

Dus

$$B = X^{-1}AX.$$

Opmerkingen

1. Voor β_k kunnen we een eenvoudiger formule afleiden.

$$\beta_k X_{k-1}' X_{k-1} = X_{k-1}' AX_k = X_k' AX_{k-1} = X_k' (X_k + \alpha_{k-1} X_{k-1} + \beta_{k-1} X_{k-2}) = X_k' X_k.$$

Ofwel

$$\beta_k = \frac{X_k' X_k}{X_{k-1}' X_{k-1}} > 0 \quad (18.25)$$

2. Om de matrix X orthogonaal te maken, normeren we de vectoren X_{k+1} .

I.p.v. (18.19) zij

$$X_{k+1} = \gamma_{k+1} (AX_k - \alpha_k X_k - \beta_k X_{k-1})$$

waarbij γ_{k+1} zo te nemen dat

$$X_{k+1}' X_{k+1} = 1.$$

Deze normering heeft geen invloed op α_k , maar nu is

$$\beta_k = X_{k-1}' AX_k = X_k' AX_{k-1} = \frac{1}{\gamma_k}.$$

Dit geeft als resultaat:

$$AX_k = \frac{1}{\gamma_{k+1}} X_{k+1} + \alpha_k X_k + \frac{1}{\gamma_k} X_{k-1}. \quad (k \geq 2)$$

Ofwel

$$X^T A X = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \frac{1}{\gamma_2} & 0 & \cdot & 0 & 0 \\ \frac{1}{\gamma_2} & \alpha_2 & \frac{1}{\gamma_3} & \cdot & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \alpha_{n-1} & \frac{1}{\gamma_n} \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \frac{1}{\gamma_n} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

3. Omdat $\beta_k > 0$ (zie 18.25) gebruiken we weer de rij van Sturm om de eigenwaarden van B te berekenen.

Voorbeeld

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & \sqrt{2} & 2 \\ \sqrt{2} & -\sqrt{2} & -1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & -1 & \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 2 & \sqrt{2} & \sqrt{2} & -3 \end{pmatrix}$$

Methode van Givens

Rotatie in (2,3)-vlak, $\tan \theta_1 = -\frac{a_{13}}{a_{12}} = -1$, $\cos \theta_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} = -\sin \theta_1$.

Dit levert

$$A^{(1)} = T_{23}^T A^{(0)} T_{23} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & -1 & \sqrt{2} & 2 \\ 0 & \sqrt{2} & 1 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

Rotatie in (2,4)-vlak, $\tan \theta_2 = -\frac{a_{14}^{(1)}}{a_{12}^{(1)}} = -1$, $\cos \theta_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} = -\sin \theta_2$.

Dan krijgen we

$$A^{(2)} = T_{24}^T A^{(1)} T_{24} = \begin{pmatrix} 1 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 2\sqrt{2} & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & -4 \end{pmatrix}$$

Tenslotte rotatie in (3,4)-vlak, $\tan \theta_3 = -\frac{a_{24}^{(2)}}{a_{23}^{(2)}} = 1$, $\cos \theta_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} = \sin \theta_3$.

Het resultaat hiervan is

$$B = T_{34}^T A^{(2)} T_{34} = \begin{pmatrix} 1 & 2\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 2\sqrt{2} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & -\frac{1}{2} & \frac{5}{2} \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & -\frac{5}{2} \end{pmatrix} \quad (18.27)$$

Methode van Householder

Volgens (18.17) is

$$v_2 = v_3 = \frac{1}{2}\sqrt{3} \quad \text{en} \quad v_4 = \frac{1}{6}\sqrt{6}.$$

Dan is

$$P^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{5}{6} & -\frac{1}{3\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{3\sqrt{2}} & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \quad \text{en} \quad A^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & -2\sqrt{2} & 0 & 0 \\ -2\sqrt{2} & 0 & -\frac{1}{3} - \frac{4}{3\sqrt{2}} & -\frac{1}{3} + \frac{4}{3\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{3} - \frac{4}{3\sqrt{2}} & \frac{4}{9} + \frac{8}{9\sqrt{2}} & -\frac{7}{9} + \frac{20}{9\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{3} + \frac{4}{3\sqrt{2}} & -\frac{7}{9} + \frac{20}{9\sqrt{2}} & -\frac{31}{9} - \frac{8}{9\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Met (18.18) vinden we

$$w_3^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{3} + \frac{4}{3\sqrt{2}} \right) \right\} = \frac{5}{6} + \frac{1}{6\sqrt{2}} \quad \text{en} \quad w_4 = \frac{\frac{1}{3} - \frac{4}{3\sqrt{2}}}{2w_3\sqrt{2}},$$

zodat

$$P^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2}{3} - \frac{1}{3\sqrt{2}} & \frac{2}{3} - \frac{1}{3\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & \frac{2}{3} - \frac{1}{3\sqrt{2}} & \frac{2}{3} + \frac{1}{3\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad \text{en} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & -2\sqrt{2} & 0 & 0 \\ -2\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{5}{2} \\ 0 & 0 & -\frac{5}{2} & -\frac{5}{2} \end{pmatrix} \quad (18.28)$$

Methode van Lanczos

Als startvector nemen we $X_1^1 = (1, 0, 0, 0)$. Met (18.19) en (18.25) berekenen we de vector $\overset{\text{en}}{X_1^1}$, AX_1^1 en de elementen α_1 en β_1 uit B :

X_1^1	1	0	0	0	
$(AX_1^1)^1$	1	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	2	$\alpha_1 = 1$
X_2^1	0	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	2	
$(AX_2^1)^1$	8	$\sqrt{2} - 2$	$\sqrt{2} + 2$	-2	$\alpha_2 = 0 \quad \beta_2 = 8$
X_3^1	0	$\sqrt{2} - 2$	$\sqrt{2} + 2$	-2	
$(AX_3^1)^1$	0	$-\sqrt{2} - 4$	$-\sqrt{2} + 4$	10	$\alpha_3 = -\frac{1}{2} \quad \beta_3 = 2$
X_4^1	0	$-\frac{5}{2}\sqrt{2} - 5$	$-\frac{5}{2}\sqrt{2} + 5$	5	
$(AX_4^1)^1$	0	$\frac{25}{2}\sqrt{2}$	$\frac{25}{2}\sqrt{2}$	-25	$\alpha_4 = -\frac{5}{2} \quad \beta_4 = \frac{25}{4}$
X_5^1	0	0	0	0	

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 8 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{1}{2} & \frac{25}{4} \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{5}{2} \end{pmatrix}$$

Opmerking

De tridiagonale matrices (18.27) en (18.28), verkregen uit A met verschillende transformaties, zijn op de tekens van de niet-diagonaal elementen na identiek. Men kan in het algemeen aantonen dat de tridiagonale matrix waartoe de symmetrische matrix A getransformeerd kan worden met orthogonale gelijkvormigheids-transformaties, op de tekens van de niet-diagonaal-elementen na eenduidig bepaald is. Dat deze tekens irrelevant zijn blijkt uit de recurrente betrekking (18.10).

Methode van Lanczos voor niet-symmetrische matrices

Door een biorthogonaal stelsel van vectoren $X_1, X_2, \dots, X_n$ en $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$ te construeren kunnen we ook een niet-symmetrische matrix A op tridiagonale vorm brengen.

De vectoren $X_1, X_2, \dots, X_n$ en $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$ worden weer geconstrueerd met een drie-terms recurrente betrekking:

$$X_{k+1} = AX_k - \alpha_k X_k - \beta_k X_{k-1}, \quad Y_{k+1} = A'Y_k - \alpha'_k Y_k - \beta'_k Y_{k-1}. \quad (18.29)$$

De startvectoren zijn

$$X_0 = 0, X_1 \text{ willekeurig}, \quad Y_0 = 0, Y_1 \text{ willekeurig}.$$

De in (18.29) optredende constanten worden zo gekozen dat

$$Y_k' X_{k+1} = Y_{k-1}' X_{k+1} = 0 \quad \text{en} \quad X_k' Y_{k+1} = X_{k-1}' Y_{k+1} = 0.$$

Dan vinden we:

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \frac{Y_k' A X_k}{Y_k' X_k} & \alpha'_k &= \frac{X_k' A' Y_k}{X_k' Y_k} \\ \beta_k &= \frac{Y_{k-1}' A X_k}{Y_{k-1}' X_{k-1}} & \beta'_k &= \frac{X_{k-1}' A' Y_k}{X_{k-1}' Y_{k-1}} \end{aligned} \quad (18.30)$$

Geheel analoog met de vorige paragraaf kan bewezen worden dat X_{k+1} en Y_{k+1} loodrecht staan op alle vooraf-geconstrueerde vectoren Y_ℓ respectievelijk X_ℓ ($\ell = 1, 2, \dots, k$).

Bovendien is uit (18.30) duidelijk dat $\alpha_k = \alpha'_k$.

Voorts kunnen we voor β_k een eenvoudiger formule afleiden:

$$\beta_k = \frac{X'_k A' Y_{k-1}}{X'_{k-1} Y_{k-1}} = \frac{X'_k (Y_k + \alpha_{k-1} Y_{k-1} + \beta'_{k-1} Y_{k-2})}{X'_{k-1} Y_{k-1}} = \frac{X'_k Y_k}{X'_{k-1} Y_{k-1}} \quad (18.31)$$

Eenzelfde formule is af te leiden voor β_k , dus $\beta_k = \beta'_k$.

De vectoren X_{n+1} en Y_{n+1} zullen beide nul zijn als de vectoren $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$ en $X_1, X_2, \dots, X_n$ lineair onafhankelijk zijn.

De recurrente betrekkingen (18.29) kunnen we als matrix vergelijkingen schrijven:

$$AX = XB \quad \text{en} \quad A'Y = YB \quad (18.32)$$

waarin B de tridiagonale matrix (18.24) is met de α_1 en β_1 bepaald volgens (18.30) en (18.31) en de matrices X en Y de vectoren $X_1, X_2, \dots, X_n$ resp.

$Y_1, Y_2, \dots, Y_n$ als kolommen hebben.

Dan is

$$B = X^{-1}AX = Y^{-1}A'Y.$$

Opmerking

Het is mogelijk dat $Y'_k X_k = 0$ voor $k \leq n$. Hierbij moeten we de volgende gevallen onderscheiden:

- a. $X_k = 0, Y_k \neq 0$
- b. $X_k \neq 0, Y_k = 0$
- c. $X_k = 0, Y_k = 0$
- d. $X_k \neq 0, Y_k \neq 0$.

De constructie van het biorthogonale stelsel moet dan voortgezet worden met een vector X_k die loodrecht staat op $Y_1, Y_2, \dots, Y_{k-1}$ (geval a, c en d) en/of een vector Y_k die loodrecht staat op $X_1, X_2, \dots, X_{k-1}$ (geval b, c en d). Als $Y'_k X_k \neq 0$ voor $k < n+1$ zijn, zoals eenvoudig aangetoond kan worden de vectoren $Y_1, Y_2, \dots, Y_n$ en $X_1, X_2, \dots, X_n$ lineair onafhankelijk.

De numerieke aspecten van de situatie $Y'_k X_k = 0$ ($k < n+1$) worden beschreven in Wilkinson, J.H., 1958, The calculation of eigenvectors by the method of Lanczos, The computer Journal, 1, 148-52.

De matrix B kan complexe eigenwaarden hebben, zodat bij niet-symmetrische matrices het proces met de rij van Sturm niet gebruikt kan worden.

Als $p_k(\lambda)$ het karakteristieke polynoom is van de matrix bestaande uit de eerste k kolommen en rijen van B, dan geldt:

$$\begin{aligned} p_0(\lambda) &= 1, \quad p_1(\lambda) = \alpha_1 - \lambda \\ p_{k+1}(\lambda) &= (\alpha_k - \lambda)p_k(\lambda) - \beta_k p_{k-1}(\lambda) \quad k = 1, 2, \dots, n-1 \quad (18.33) \end{aligned}$$

De karakteristieke vergelijking $p_n(\lambda) = 0$ die met (18.33) verkregen kan worden kunnen we met b.v. de methode van Bairstow oplossen. Omdat de bepaling van de nulpunten van een polynoom veelal gevoelig is voor cijferverlies in de coëfficiënten, moet de recurrentie (18.33) in dubbele lengte (dubbele precisie) uitgevoerd worden.

Een alternatief is de methode van Muller waarbij (18.33) gebruikt wordt om drie functiewaarden $p_n(x_{k-2})$, $p_n(x_{k-1})$ en $p_n(x_k)$ uit te rekenen.

Vervolgens bepalen we de kwadratische functie die door de drie punten $(x_{k-2}, p_n(x_{k-2}))$, $(x_{k-1}, p_n(x_{k-1}))$ en $(x_k, p_n(x_k))$ bepaald is. Eén van de nulpunten van de kwadratische functie zij x_{k+1} . Dan wordt de iteratie voortgezet met

$$(x_{k-1}, p_n(x_{k-1})), (x_k, p_n(x_k)) \text{ en } (x_{k+1}, p_n(x_{k+1}))$$

tot $|x_k - x_{k+1}|$ klein genoeg is.

De iteratie begint met drie startwaarden x_1, x_2, x_3 .

Als een benadering van het nulpunt λ_1 van $p_n(\lambda)$ gevonden is wordt dezelfde procedure toegepast op het polynoom

$$\frac{p_n(\lambda)}{\lambda - \lambda_1}$$

waarbij de deling niet expliciet uitgevoerd wordt, maar voor successieve waarden x_k de functiewaarden $\frac{p_n(x_k)}{x_k - \lambda_1}$ berekend word m.b.v. (18.33).

Voorbeeld

$$A_i = \begin{pmatrix} 8 & -1 & -5 \\ -4 & 4 & -2 \\ 18 & -5 & -7 \end{pmatrix}$$

De startvectoren X_1^i en Y_1^i zijn beide $(1, 0, 0)$.

$$\begin{array}{ll}
X_1^! = (1 & 0 & 0) & Y_1^! = (1 & 0 & 0) \\
(AX_1)^! = (8 & -4 & 18) & (A^!Y_1)^! = (8 & -1 & -5) & \alpha_1 = 8 \\
X_2^! = (0 & -4 & 18) & Y_2^! = (0 & -1 & -5) \\
(AX_2)^! = (-86 & -52 & -106) & (A^!Y_2)^! = (-86 & 21 & 37) & \alpha_2 = -\frac{291}{43}, \beta_2 = -86 \\
X_3^! = (0 & -\frac{3400}{43} & \frac{680}{43}) & Y_3^! = (0 & \frac{612}{43} & \frac{136}{43}) \\
(AX_3)^! = (0 & -\frac{14960}{43} & \frac{12240}{43}) & (A^!Y_3)^! = (0 & \frac{1768}{43} & -\frac{2176}{43}) & \alpha_3 = \frac{162}{43}, \beta_3 = \frac{23120}{1849} \\
X_4^! = (0 & 0 & 0) & Y_4^! = (0 & 0 & 0)
\end{array}$$

De tridiagonale matrix, met elementen afgerond op één decimaal, is

$$B = \begin{pmatrix} 8 & -86 & 0 \\ 1 & -6.8 & 12.5 \\ 0 & 1 & 3.8 \end{pmatrix}$$

De rij principaalminoren van $|B - \lambda E|$ is:

$$p_0(\lambda) = 1; p_1(\lambda) = 8 - \lambda; p_2(\lambda) = (-6.8 - \lambda)p_1(\lambda) + 86; p_3(\lambda) = (3.8 - \lambda)p_2(\lambda) - 12.5p_1(\lambda) \quad (18.34)$$

We starten de methode van Muller met $x_1 = 0$, $x_2 = 2$ en $x_3 = 4$.

Dan vinden we:

$$p_3(0) = 20.08, p_3(2) = -15.24, p_3(4) = -58.56.$$

De kwadratische functie bepaald door $(0, p_3(0))$, $(2, p_3(2))$ en $(4, p_3(4))$ is

$$\lambda^2 + 15.66\lambda - 20.08$$

waarvan een nulpunt benaderd wordt door $\lambda = 1.2$.

Nu gaan we verder met $(0, p_3(0))$, $(2, p_3(2))$ en $(1.2, p_3(1.2))$ waarbij $p_3(1.2) = -2.84$.

De kwadratische functie door dit drietal punten is

$$1.8\lambda^2 - 21.26\lambda + 20.08$$

waarvan een nulpunt dichtbij 1.03 ligt. Deze uitkomst correspondeert de eigenwaarde $\lambda_1 = 1$ van A. Om de resterende eigenwaarden te berekenen passen we dezelfde methode toe op de functie

$$q_3(\lambda) = \frac{p_3(\lambda)}{\lambda - \lambda_1} \quad (18.35)$$

De functiewaarden $q_3(0)$, $q_3(2)$ en $q_3(4)$ berekenen we met (18.34) en (18.35). We krijgen als resultaat:

$$q_3(0) = -20.08 \quad q_3(2) = -15.24 \quad q_3(4) = -19.52$$

De kwadratische functie hierbij behorende is

$$1.14\lambda^2 - 4.7\lambda + 20.08$$

waarvan de nulpunten (bij benadering) zijn $2.1 \pm 3.7i$. Deze waarden corresponderen met de exacte eigenwaarden $2 \pm 4i$ van A.

19. Het oplossen van stelsels lineaire vergelijkingen

Bij het oplossen van een stelsel lineaire vergelijkingen onderscheiden we directe methoden (eliminatie methoden) en iteratieve methoden.

Bij de directe methode wordt één keer een rij bewerkingen uitgevoerd waarvan het resultaat een benadering is van de exacte oplossing van het stelsel.

Indien alle bewerkingen exact uitgevoerd worden krijgen we de exacte oplossing van het stelsel. De benadering van de exacte oplossing is slechts te wijten aan de afrondingsfouten bij optellen, vermenigvuldigen en delen, en dus afhankelijk van de rekenapparatuur die gebruikt wordt.

Voorbeelden van de directe oplossingsmethoden.

1. Eliminatiemethode van Gauss. Door eliminatie wordt het stelsel in de tri-angulaire vorm gebracht. In het algemeen is het gunstig pivotal condensation toe te passen.
2. Gauss-Jordan eliminatie. De coëfficiënten-matrix wordt herleid tot een diagonaalmatrix. Ook hier is grootste pivot kiezen aan te bevelen.
3. Reductiemethode van CROUT. Met LR-decompositie van de coëfficiënten-matrix wordt de Gauss-eliminatie compact genoteerd.

Het effect van de afrondingsfouten bij het oplossen van

$$AX = Z \tag{19.1}$$

hangt af van de matrix A. Als kleine wijzigingen in de coëfficiënten-matrix A een grote verandering in de oplossing van (19.1) veroorzaken spreken we over een "ill-conditioned" stelsel.

Het corrigeren van een benaderde oplossing

Zij $X^{(0)}$ een benaderde oplossing van (19.1) met een directe methode verkregen, dus $X^{(0)}$ is een benadering van $A^{-1}Z$.

Deze vector $x^{(0)}$ kunnen we opvatten als oplossing van

$$BX = Z$$

waarin B^{-1} een benadering is van de matrix A^{-1} , ofwel

$$X^{(0)} = B^{-1}Z. \tag{19.2}$$

Nu wensen we op $X^{(0)}$ een correctie $\Delta^{(0)}$ aan te brengen zodanig dat $X^{(0)} + \Delta^{(0)}$ aan (19.1) voldoet.

Dan geldt dus

$$A \Delta^{(0)} = Z - AX^{(0)} \quad (19.3)$$

Met het al afgeleide eliminatieschema kunnen we (19.3) zonder veel werk oplossen:

$$\Delta^{(0)} = B^{-1}(Z - AX^{(0)}),$$

waarmee we de volgende benadering van de oplossing verkrijgen:

$$X^{(1)} = X^{(0)} + B^{-1}(Z - AX^{(0)}) = (E + (E - B^{-1}A))B^{-1}Z.$$

Deze correcties voortzettend krijgen we als iteratieschema voor de successieve benaderingen:

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} + B^{-1}(Z - AX^{(k)}), \quad X^{(0)} = B^{-1}Z. \quad (19.4)$$

Omdat $X^{(k+1)} = (E - B^{-1}A)X^{(k)} + X^{(0)}$ krijgen we achtereenvolgens:

$$\begin{aligned} X^{(0)} &= B^{-1}Z \\ X^{(1)} &= (E + C)B^{-1}Z \\ X^{(2)} &= (E + C + C^2)B^{-1}Z \\ &\dots \dots \dots \\ X^{(k)} &= (E + C + C^2 + \dots + C^k)B^{-1}Z \end{aligned} \quad (19.5)$$

waarin

$$C = E - B^{-1}A. \quad (19.6)$$

Als de matrix C verschillende eigenwaarden heeft, gerangschikt naar moduli:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots > |\lambda_n|,$$

dan zijn de corresponderende eigenvectoren Y_l ($l = 1, 2, \dots, n$) lineair onafhankelijk, dus iedere vector is lineaire combinatie van deze eigenvectoren.

Volgens (19.4) geldt:

$$\begin{aligned} X - X^{(k)} &= C(X - X^{(k-1)}) \\ X^{(k+1)} - X^{(k)} &= C(X^{(k)} - X^{(k-1)}) \\ Z - AX^{(k)} &= BCB^{-1}(Z - AX^{(k-1)}). \end{aligned}$$

Voor de errorvector $X - X^{(k)} = E^{(k)}$, de correctievector $X^{(k+1)} - X^{(k)} = \Delta^{(k)}$ resp. de residuvector $Z - AX^{(k)} = R^{(k)}$ vinden we derhalve

$$E^{(k)} = C^{k+1} X$$

$$\Delta^{(k)} = C^{k+1} X^{(0)}$$

$$R^{(k)} = BC^{k+1} X^{(0)}$$

want $\Delta^{(0)} = CX^{(0)} = B^{-1} R^{(0)}.$

Als

$$X = \sum_{\ell=1}^n \alpha_{\ell} Y_{\ell} \quad \text{en} \quad X^{(0)} = \sum_{\ell=1}^n \beta_{\ell} Y_{\ell} \quad (19.6^a)$$

leiden we af dat

$$E^{(k)} = \sum_{\ell=1}^n \alpha_{\ell} \lambda_{\ell}^{k+1} Y_{\ell} \rightarrow \alpha_1 \lambda_1^{k+1} Y_1$$

$$\Delta^{(k)} = \sum_{\ell=1}^n \beta_{\ell} \lambda_{\ell}^{k+1} Y_{\ell} \rightarrow \beta_1 \lambda_1^{k+1} Y_1 \quad (19.7)$$

$$R^{(k)} = \sum_{\ell=1}^n \beta_{\ell} \lambda_{\ell}^{k+1} BY_{\ell} \rightarrow \beta_1 \lambda_1^{k+1} BY_1.$$

Uit (19.7) blijkt dat het correctie-proces $X^{(k)}$ convergeert naar de oplossing X van (19.1) als $|\lambda_1| < 1$. We zien voorts dat voor k voldoende groot zal gelden:

$$\begin{aligned} E^{(k)} &= \lambda_1 E^{(k-1)} \\ \Delta^{(k)} &= \lambda_1 \Delta^{(k-1)} \\ R^{(k)} &= \lambda_1 R^{(k-1)}. \end{aligned} \quad (19.8)$$

Dit resultaat gebruiken we om de convergentie van het correctie-proces te versnellen. Uit

$$X - X^{(k)} = \lambda_1 (X - X^{(k-1)}) \quad (19.9)$$

volgt n.l.

$$X = X^{(k-1)} + (1 - \lambda_1)^{-1} \Delta^{(k-1)}.$$

Als we (19.9) voor twee opeenvolgende waarden van k gebruiken om λ_1 te elimineren, krijgen we voor de componenten X_i van X de extrapolatie formule van Aitken:

$$X_i = \frac{X_i^{(k+1)} X_i^{(k-1)} - X_i^{(k)^2}}{X_i^{(k+1)} - 2X_i^{(k)} + X_i^{(k-1)}} = X_i^{(k+1)} - \frac{(X_i^{(k+1)} - X_i^{(k)})^2}{X_i^{(k+1)} - 2X_i^{(k)} + X_i^{(k-1)}} \quad (19.10)$$

Als de eigenwaarde λ_1 complex is, dus $\lambda_2 = \bar{\lambda}_1$, moet de extrapolatie formule van Aitken aan die situatie aangepast worden. Voor de errorvector vinden we dan:

$$X - X^{(k)} \rightarrow \alpha_1 \lambda_1^{k+1} Y_1 + \bar{\alpha}_1 \bar{\lambda}_1^{k+1} \bar{Y}_1 \quad (19.11)$$

Bij de afleiding van (19.10) gebruikten we $X^{(k+1)}$, $X^{(k)}$ en $X^{(k-1)}$ om λ_1 en α_1 te elimineren.

Om de onbekenden uit (19.11) te elimineren hebben we vijf vectoren nodig. De extrapolatie formule is dan:

$$X_i = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \Delta_i^{(k)} & \Delta_i^{(k+1)} & \Delta_i^{(k+2)} \\ \Delta_i^{(k+1)} & \Delta_i^{(k+2)} & \Delta_i^{(k+3)} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} X_i^{(k)} & X_i^{(k+1)} & X_i^{(k+2)} \\ X_i^{(k+1)} & X_i^{(k+2)} & X_i^{(k+3)} \\ X_i^{(k+2)} & X_i^{(k+3)} & X_i^{(k+4)} \end{vmatrix} \quad (19.12)$$

Dezelfde formule kan gebruikt worden om X_i te berekenen als de moduli van λ_1 en λ_2 weinig verschillen.

Voorbeeld

$$\begin{aligned} 5x_1 + 7x_2 + 6x_3 + 5x_4 &= 23 \\ 7x_1 + 10x_2 + 8x_3 + 7x_4 &= 32 \\ 6x_1 + 8x_2 + 10x_3 + 9x_4 &= 33 \\ 5x_1 + 7x_2 + 9x_3 + 10x_4 &= 31. \end{aligned}$$

Neem aan dat het eliminatie proces overeenkomt met het gebruik van de volgende, niet-symmetrische benadering van A^{-1} :

$$B^{-1} = \begin{pmatrix} 77.888 & -46.929 & -19.429 & 11.443 \\ -46.977 & 28.584 & 11.493 & -6.897 \\ -19.489 & 11.493 & 5.612 & -3.363 \\ 11.495 & -6.897 & -3.368 & 2.218 \end{pmatrix}$$

en zij voorts $X^{(0)'} = (3.272, -0.321, 0.472, 1.295)$ het resultaat van de eliminatie oplossingsmethode.

Het iteratieve correctie proces levert de volgende resultaten:

$X^{(0)}$	3.272	-0.321	0.472	1.295
$R^{(0)}$	-0.420	-0.535	-0.439	-0.311
$\Delta^{(0)}$	-2.635	1.537	0.619	-0.349
$X^{(1)}$	0.637	1.216	1.091	0.946
$R^{(1)}$	0.027	0.031	0.026	0.024
$\Delta^{(1)}$	0.418	-0.249	-0.105	0.062
$X^{(2)}$	1.055	0.967	0.986	1.008

Aitken's formule toegepast op $X^{(0)}$, $X^{(1)}$ en $X^{(2)}$ geeft de goede benadering $(0.998, 1.002, 1.001, 0.999)$ van de exacte oplossing $(1, 1, 1, 1)$.

Een aanwijzing voor deze convergentie versnelling vinden we in de bijna constante verhoudingen tussen de componenten van $\Delta^{(1)}$ en $\Delta^{(0)}$: -0.159 , -0.162 , -0.170 en -0.178 , die een benadering geven van λ_1 .

De verhoudingen van de componenten van $R^{(1)}$ en $R^{(0)}$ zijn echter -0.064 , -0.058 , -0.059 en -0.077 .

Nader onderzoek van $C = E - B^{-1}A$ leert dat $\lambda_1 = -0.1446$ en $\lambda_2 = -0.0414$; de corresponderende eigenvectoren zijn zodanig dat in (19.6^a) β_1 en β_2 van vergelijkbare grootte zijn, maar BY_2 heeft veel grotere componenten dan BY_1 . In het begin van het correctie proces, dus voor kleine k , geldt daarom nog niet dat

$$Z - AX^{(k)} = \sum_{\ell=1}^4 \beta_{\ell} \lambda_{\ell}^{k+1} BY_{\ell}$$

benaderd wordt door

$$\beta_1 \lambda_1^{k+1} BY_1,$$

dan wordt de grootste bijdrage nog geleverd door $\beta_2 \lambda_2^{k+2} BY_2$.

Correctie proces bij het bepalen van de inverse van een matrix

Zij B_0^{-1} een benadering, met b.v. een eliminatie-methode verkregen, van A^{-1} .

Nu brengen we op B_0^{-1} een correctie ΔB_0^{-1} aan, zodanig dat

$$A(B_0^{-1} + \Delta B_0^{-1}) = E.$$

Dan geldt dus

$$A \Delta B_0^{-1} = E - AB_0^{-1}.$$

We bepalen een benadering van ΔB_0^{-1} volgens

$$\Delta B_0^{-1} = B_0^{-1}(E - AB_0^{-1}).$$

Dan krijgen we als nieuwe benadering van de inverse A^{-1} :

$$B_1^{-1} = B_0^{-1} + \Delta B_0^{-1} = B_0^{-1}(2E - AB_0^{-1}).$$

Deze correcties voortzettend krijgen we als iteratie schema voor de succesieve benaderingen van A^{-1}

$$B_{k+1}^{-1} = B_k^{-1}(2E - AB_k^{-1}) \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (19.13)$$

De rij van matrices $B_0^{-1}, B_1^{-1}, B_2^{-1}, \dots$ convergeert onder bepaalde omstandigheden naar A^{-1} (zie NA-280).

Omdat

$$\|X + Y\|_1 = \sum_{j=1}^n |x_j + y_j| \leq \sum_{j=1}^n \{|x_j| + |y_j|\} = \|X\|_1 + \|Y\|_1$$

en

$$\begin{aligned} \|X + Y\|_\infty &= \max_j |x_j + y_j| \leq \max_j \{|x_j| + |y_j|\} \leq \max_{j,k} \{|x_j| + |y_k|\} = \\ &= \|X\|_\infty + \|Y\|_\infty \end{aligned}$$

zijn $\|\cdot\|_1$ en $\|\cdot\|_\infty$ ook normen.

Als $X^{(1)}, X^{(2)}, X^{(3)}, \dots$ een rij vectoren is in R_n zeggen we dat

$$\lim_{k \rightarrow \infty} X^{(k)} = X$$

als

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|X^{(k)} - X\| = 0.$$

We bewijzen hier niet dat het bestaan van een limiet onafhankelijk is van de keuze van de norm.

Een reeks van vectoren convergeert als de rij van partiële sommen een limiet heeft.

De norm van een matrix definieren we met de al gedefinieerde vectornorm als volgt

$$\|A\| = \max_{\|X\|=1} \|AX\| \quad (19.17)$$

Dit betekent dat

$$\|A\| = \max_{X \neq 0} \frac{\|AX\|}{\|X\|}.$$

Voor alle $X \in R_n$ geldt derhalve:

$$\|AX\| \leq \|A\| \cdot \|X\|. \quad (19.18)$$

Ten aanzien van de lineaire ruimte van matrices is (19.17) een norm. Immers

1. $\|A\| \geq 0$ en $\|A\| = 0$ impliceert $\|AX\| = 0$ dus $AX = 0$ voor alle $X \in R_n$ ofwel $A = 0$.

2. Voor alle $X \in R_n$ geldt $\|\alpha AX\| = |\alpha| \cdot \|AX\|$, dus $\|\alpha A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$.

3. Voor alle $X \in R_n$ is $\|(A + B)X\| = \|AX + BX\| \leq \|AX\| + \|BX\|$.

Volgens (19.18) geldt dus $\|(A + B)X\| \leq (\|A\| + \|B\|) \cdot \|X\|$ ofwel

$$\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|.$$

Voor de norm van het product van de matrices A en B leiden we af:

$$\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|.$$

Bewijs. Volgens (19.18) geldt voor iedere $X \in R_n$

$$\|(AB)X\| = \|A(BX)\| \leq \|A\| \cdot \|BX\| \leq \|A\| \cdot \|B\| \cdot \|X\|.$$

Dus

$$\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|. \quad (19.19)$$

Als speciaal geval van (19.19) krijgen we: $\|A^m\| \leq \|A\|^m$.

Zij $A^{(1)}, A^{(2)}, A^{(3)}, \dots$ een rij matrices. We zeggen dat

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A^{(k)} = A$$

als

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|A^k - A\| = 0.$$

Een reeks van matrices convergeert als de rij van partiële sommen een limiet heeft.

Conclusies

1. Uit deze definitie volgt dat $\lim_{m \rightarrow \infty} A^m = 0$ als $\lim_{m \rightarrow \infty} \|A^m\| = 0$. Hiertoe is

voldoende dat $\|A\| < 1$.

2. Als de matrix A op diagonaalvorm Λ gebracht kan worden:

$$A = C^{-1} \Lambda C$$

dan is

$$A^m = C^{-1} \Lambda^m C.$$

Daarom is $A^m \rightarrow 0$ een nodige en voldoende voorwaarde opdat $A^m \rightarrow 0$. D.w.z. $A^m \rightarrow 0$ dan en alleen dan als alle eigenwaarden van A in modulus kleiner zijn dan één. Deze stelling geldt ook als A niet diagonaliseerbaar is.

3. Voor iedere norm geldt: $\|A\| \geq |\lambda_k|$ (λ_k is een eigenwaarde van A). Immers als X_k de bijbehorende eigenvector is dan is

$$|\lambda_k| \cdot \|X_k\| = \|\lambda_k X_k\| = \|AX_k\| \leq \|A\| \cdot \|X_k\|. \quad (19.20)$$

4. Tenslotte beschouwen we de reeks $E + A + A^2 + \dots$.

Voor de convergentie van deze reeks is nodig dat $A^m \rightarrow 0$. Deze voorwaarde is ook voldoende.

Als $A^m \rightarrow 0$ zijn alle eigenwaarden in modulus kleiner dan één, dus bestaat $(E - A)^{-1}$.

Uit $(E + A + A^2 + \dots + A^m)(E - A) = E - A^{m+1}$ volgt dat

$$E + A + A^2 + \dots + A^m = (E - A)^{-1} - A^{m+1}(E - A)^{-1} \quad (19.21)$$

Het rechterlid in (19.21) heeft $(E - A)^{-1}$ als limiet als $m \rightarrow \infty$, dus

$$E + A + A^2 + \dots + A^m + \dots = (E - A)^{-1} \quad (19.22)$$

Opmerkingen

1. We bewijzen hier niet dat het bestaan van een limiet van een rij matrices onafhankelijk is van de keuze van de norm.
2. Met de drie vectornormen (19.16) corresponderen de volgende matrixnormen

$$\|A\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \quad (\text{kolom met maximale moduli-som})$$

$$\|A\|_2 = \lambda_1^{\frac{1}{2}}, \quad \lambda_1 \text{ is de grootste eigenwaarde van de pos.def.matrix } AA'$$

$$\|A\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad (\text{rij met maximale moduli-som}).$$

3. Het resultaat van conclusie 4. kunnen we toepassen op het correctie-proces (19.14).

$$B_k^{-1} = B_0^{-1}(E + C + C^2 + \dots + C^{2^k-1}) \rightarrow B_0^{-1}(E - C)^{-1} \text{ als } \|C\| < 1.$$

$$\text{We zien voorts dat } B_0^{-1}(E - C)^{-1} = B_0^{-1}(AB_0^{-1})^{-1} = A^{-1}.$$

4. Evenzo convergeert het correctie-proces (19.4) als $\|C\| = \|E - B^{-1}A\| < 1$.

Iteratieve methoden voor het oplossen van lineaire vergelijkingen

De algemene vergelijking voor een iteratief proces is van de vorm

$$x^{(k+1)} = a^{(k)} + f_k(x^{(k)})$$

waarin $x^{(k)}$ een getal, vector, functie of matrix is, $a^{(k)}$ onafhankelijk van x maar niet noodzakelijk onafhankelijk van k en f_k tenslotte een functie is of een operator die afhankelijk kan zijn van k .

Als a en f onafhankelijk zijn van k heet de iteratie stationair.

We zagen in (19.4) en (19.13) voorbeelden van stationaire iteraties:

$$x^{(k+1)} = B^{-1}z + (E - B^{-1}A)x^{(k)} \quad (19.4)$$

resp.

$$B_{k+1}^{-1} = B_k^{-1}(2E - AB_k^{-1}) \quad (19.13)$$

Iteratieve methode gebruikt bij

- 1^e problemen waarvan bekend is dat de iteratie snel convergeert, zodat minder werk nodig is dan bij het direct oplossen.
- 2^e matrices met veel nulelementen. Bij eliminatie gaat deze eigenschap verloren en is bovendien meer geheugenruimte nodig.

Voorbeelden

ad 1.
$$\begin{pmatrix} 10^6 & 1 & 1 \\ 1 & 10^6 & 1 \\ 1 & 1 & 10^6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} \quad (19.23)$$

De oplossing zal niet veel verschillen van $10^{-6}(z_1, z_2, z_3)$. Daarom zal het volgende iteratie-schema snel convergeren:

$$\begin{aligned} 10^6 x_1^{(k+1)} &= z_1 - x_2^{(k)} - x_3^{(k)} \\ 10^6 x_2^{(k+1)} &= z_2 - x_1^{(k)} - x_3^{(k)} \\ 10^6 x_3^{(k+1)} &= z_3 - x_1^{(k)} - x_2^{(k)}. \end{aligned} \quad (19.24)$$

ad.2 Matrices met veel nulelementen komen voor bij het oplossen van elliptische partiële differentiaalvergelijkingen met eindige differentie methoden. De coëfficiënten matrix kan de volgende vorm hebben:

$$\begin{pmatrix} \begin{array}{ccc|ccc} x & x & & x & & \\ x & x & x & & x & \\ & x & x & x & & \\ & & x & x & & x \\ \hline x & & & x & x & x \\ & x & & x & x & x \\ & & x & & x & x \\ & & & x & x & \\ \hline & & & x & & \\ & & & & x & \\ & & & & & x \\ \hline & & & & x & x \\ & & & & x & x & x \\ & & & & & x & x & x \\ & & & & & & x & x \end{array} \end{pmatrix}$$

Deze matrices hebben veelal een grote orde.

Bij het oplossen van een stelsel lineaire vergelijkingen $AX = Z$ is de meest algemene vorm van de stationaire iteratie

$$X^{(k+1)} = CX^{(k)} + V \quad (19.25)$$

waarin C een matrix en V een vector is. Voor de oplossing moet gelden

$$X = CX + V. \quad (19.26)$$

Dus $A^{-1}Z = CA^{-1}Z + V$

ofwel

$$V = (E - C)A^{-1}Z \quad (19.27)$$

Als we (19.26) van (19.25) aftrekken krijgen we

$$X^{k+1} - X = C(X^{(k)} - X)$$

Voor de errorvector $E^{(k)} = X - X^{(k)}$ geldt dus

$$E^{(k+1)} = CE^{(k)} = C^{(k+1)}E^{(0)}$$

Een voldoende voorwaarde voor de convergentie van (19.25) is dus $\|C\| < 1$; nodig én voldoende is dat alle eigenwaarden van C in modulus kleiner zijn dan één (zie conclusies 1. en 2. van de vorige paragraaf). De keuze van de matrix C in (19.25) geeft aanleiding tot verschillende iteratieve methoden.

Jacobi iteratie

De matrix A schrijven we als som van drie matrices:

$$A = L + D + U.$$

D is het diagonaal gedeelte van A .

L het linker triangulaire deel van A met nullen op de diagonaal. U het rechtertriangulaire deel van A eveneens met nullen op de diagonaal.

Het iteratie-schema (19.24), naar Jacobi genoemd, kunnen we nu in matrix-vorm schrijven:

$$DX^{(k+1)} = Z - (L + U)X^{(k)} \quad (19.28)$$

Met de notatie van (19.25) hebben we dus hier:

$$C = -D^{-1}(L + U), \quad V = D^{-1}Z.$$

(19.27) is eenvoudig te verifiëren.

Voor de convergentie is voldoende dat $\|D^{-1}(L + U)\| < 1$.

Voorbeeld

$$1. \quad \begin{pmatrix} 3 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 3 \end{pmatrix} \quad X = (1, 1, 1)$$

$$X^{(0)} = \left(\frac{5}{3}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right); X^{(1)} = \left(\frac{2}{3}, \frac{3}{4}, \frac{2}{3}\right); X^{(2)} = \left(\frac{7}{6}, \frac{7}{6}, \frac{7}{6}\right); X^{(3)} = \left(\frac{8}{9}, \frac{11}{12}, \frac{11}{12}\right)$$

$$E^{(0)} = \left(-\frac{2}{3}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right); E^{(1)} = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{3}\right); E^{(2)} = \left(-\frac{1}{6}, -\frac{1}{6}, -\frac{1}{6}\right); E^{(3)} = \left(\frac{1}{9}, \frac{1}{12}, \frac{1}{12}\right)$$

De iteratie-matrix is

$$C = -D^{-1}(L+U) = -\begin{pmatrix} 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$\|C\|_1 = \|C\|_\infty = \frac{2}{3}$. De grootste eigenwaarde (in absolute waarde) is ongeveer -0.55.

$$2. \quad \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 3 \\ 2 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 5 \\ 4 \end{pmatrix} \quad X(1,1,1)$$

$$X^{(0)} = (2, \frac{5}{2}, 2); X^{(1)} = (-\frac{1}{3}, -\frac{1}{2}, 0); X^{(2)} = (\frac{7}{3}, \frac{5}{2}, \frac{7}{3}); \dots$$

Hier treedt geen convergentie op. De iteratie matrix

$$C = -D^{-1}(L + U) = - \begin{pmatrix} 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & \frac{3}{2} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

heeft een eigenwaarde -1.1. $\|C\|_1 = \frac{11}{6}$, $\|C\|_\infty = \frac{3}{2}$.

3. Tenslotte een voorbeeld om te laten zien dat de voorwaarde $\| -D^{-1}(L+U) \| < 1$ wel voldoende maar niet nodig is voor convergentie.

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}; \quad -C = D^{-1}(L + U) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$\|C\|_1 = \frac{7}{6}$, $\|C\|_\infty = \frac{4}{3}$. Omdat de grootste eigenwaarde (in modulus) ongeveer 0.75 is convergeert het proces hoewel $\|C\|_1$ en $\|C\|_\infty$ groter zijn dan één.

Gauss-Seidel iteratie

De Jacobi iteratie kan als volgt gewijzigd worden.

Stel $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}$ zijn bekend. Bereken nu met (19.28) $x^{(k+1)}$, maar gebruik voor de berekening van $x_2^{(k+1)}$ nu $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}$ in plaats van $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}$ etc.

In voorbeeld (19.23) wordt dit

$$\begin{aligned} 10^6 x_1^{(k+1)} &= z_1 - x_2^{(k)} - x_3^{(k)} \\ 10^6 x_2^{(k+1)} &= z_2 - x_1^{(k+1)} - x_3^{(k)} \\ 10^6 x_3^{(k+1)} &= z_3 - x_1^{(k+1)} - x_2^{(k+1)} \end{aligned}$$

Met de boveningevoerde matrices L , D en U kunnen we deze Gauss-Seidel iteratie in matrix notatie weergeven n.l.

$$(D + L)X^{(k+1)} = Z - UX^{(k)} \quad (19.29)$$

Met de notatie van (19.25) hebben we in dit geval

$$C = -(D+L)^{-1}U, \quad V = (D + L)^{-1}Z$$

en weer blijkt aan (19.27) voldaan te zijn.

Voor de convergentie van (19.29) is voldoende dat $\|(D+L)^{-1}U\| < 1$; nodig en voldoende is dat alle eigenwaarden van $(D+L)^{-1}U$ in modulus kleiner zijn dan één.

Stelling De Gauss-Seidel iteratie convergeert als de coëfficiënten matrix A positief definit is.

Bewijs. Neem aan dat λ en Y eigenwaarde en bijbehorende eigenvector zijn van $(D+L)^{-1}U$ ($= (D+L)^{-1}L'$ want A is positief definit). Dus

$$(D + L)^{-1}L'Y = \lambda Y.$$

Ofwel

$$L'Y = \lambda(D + L)Y. \quad (19.30)$$

Omdat A positief definit is, is geen der diagonaalelementen van D nul, dus $D+L$ is niet-singulier.

Hoewel A symmetrisch is, hoeft $(D+L)^{-1}U$ dit niet te zijn, we mogen derhalve niet aannemen dat λ en Y reëel zijn.

Als we (19.30) linksvermenigvuldigen met $\bar{Y}'$ krijgen we

$$\bar{Y}'L'Y = \lambda \bar{Y}'(D+L)Y = \alpha + i\beta. \quad (19.31)$$

Dan is

$$\bar{Y}'LY = Y'L'\bar{Y} = \overline{\bar{Y}'L'Y} = \alpha - i\beta$$

en

$$\bar{Y}'AY = \bar{Y}'(L+D+L')Y = 2\alpha + \bar{Y}'DY. \quad (19.32)$$

Omdat A positief definit is, is

$$(U' - iV')A(U + iV) = U'AU + V'AV > 0$$

dus

$$2\alpha + \bar{Y}'DY > 0.$$

Uit (19.31) leiden we af dat

$$\lambda = \frac{\alpha + i\beta}{\bar{Y}'DY + \alpha - i\beta}, \quad |\lambda|^2 = \frac{\alpha^2 + \beta^2}{(\bar{Y}'DY + \alpha)^2 + \beta^2}.$$

Als $\alpha > 0$ is $|\lambda|^2 < 1$ want $\bar{Y}'DY > 0$; als $\alpha < 0$ geldt ook $|\lambda|^2 < 1$ want volgens (19.32) is zelfs $\bar{Y}'DY > 2|\alpha|$.

Dus de moduli van de eigenwaarden van $(D+L)^{-1}U$ zijn kleiner dan één.

Voorbeeld

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -3 \end{pmatrix}$$

De matrices $D^{-1}(L+U)$ en $(D+L)^{-1}U$ voor de Jacobi en Gauss-Seidel iteratie zijn respectievelijk:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \lambda_1 = 0.748 \\ \lambda_{2,3} = -0.374 \pm i 0.868 \\ |\lambda_2| = 0.945 \end{matrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \lambda_1 = \lambda_2 = 0 \\ \lambda_3 = 1. \end{matrix}$$

Aan de berekende eigenwaarden zien we dat het Jacobi proces convergeert (zij het langzaam) terwijl de Gauss-Seidel iteratie divergeert.

Versnelling van de convergentie

We hebben gezien (NA-273) dat de errorvector $E^{(k)} = X - X^{(k)}$ aan de vergelijking

$$E^{(k+1)} = C E^{(k)}$$

voldoet als C de iteratie matrix is.

Als deze iteratie matrix eigenwaarden λ_ℓ en n lineair onafhankelijke eigenvectoren Y_ℓ ($\ell = 1, 2, \dots, n$) heeft dan kunnen we schrijven

$$E^{(0)} = \sum_{\ell=1}^n \alpha_\ell Y_\ell$$

zodat

$$E^{(k)} = C^{(k)} E^{(0)} = \sum_{\ell=1}^n \alpha_\ell \lambda_\ell^k Y_\ell.$$

Voor grote k is

$$\lambda_1^{-k} E^{(k)} = \alpha_1 Y_1 \quad (19.33)$$

als

$$|\lambda_1| > |\lambda_i| \quad i = 2, 3, \dots, n.$$

Bij deze lineaire convergentie kunnen we Aitken's δ^2 -proces (extrapolatie) toepassen om de convergentie te versnellen.

Als $|\lambda_1| = |\lambda_2|$ komen in het rechterlid van (19.33) twee termen voor, zodat de drietermsextrapolatieformule (19.10) dan niet gebruikt kan worden (zie NA-275). Zelfs als A symmetrisch is, is er geen garantie dat C reële eigenwaarden heeft.

Als de matrix A positief definit is, zal Aitken's "double sweep" methode (ook wel to-fro of forward-backward methode genoemd), toegepast op het Gauss-Seidel proces, een iteratie matrix opleveren waarvan de grootste eigenwaarde reëel is en kleiner dan één. Bij deze methode berekenen we successievelijk $x_1, x_2, \dots, x_n$ en "terugkerend" berekenen we $x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_2, x_1$.

Voorbeeld

$$\begin{aligned} x_1 + \frac{1}{2} x_2 + \frac{1}{2} x_3 &= 2 \\ \frac{1}{2} x_1 + x_2 + \frac{1}{2} x_3 &= 2 \\ \frac{1}{2} x_1 + \frac{1}{2} x_2 + x_3 &= 2. \end{aligned}$$

De Jacobi-iteratie divergeert want $D^{-1}(L + U)$ heeft een eigenwaarde -1.

De Gauss-Seidel iteratie convergeert want A is positief definit. De iteratie matrix $(D + L)^{-1}U$ heeft twee complexe eigenwaarden en een eigenwaarde nul; (19.10) kan daarom niet met succes toegepast worden.

We nemen $X^{(0)} = (0.8, 0.8, 0.8)$

	Jacobi				Gauss-Seidel	
k = 0	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8
1	1.2	1.2	1.2	1.2	1.0	0.9
2	0.8	0.8	0.8	1.05	1.025	0.9625
3	1.2	1.2	1.2	1.0062	1.0156	0.9891
4	0.8	0.8	0.8	0.9976	1.0067	0.9978
5	1.2	1.2	1.2	0.9977	1.0022	1.0000
6	0.8	0.8	0.8	0.9989	1.0006	1.0003

Als we (19.10) toepassen op $X^{(4)}$, $X^{(5)}$ en $X^{(6)}$ krijgen we (0.9976, 0.9997, 1.0003)
Met de double sweep methode vinden we de volgende iteranden:

$$\begin{aligned} X^{(0)} &= 0.8 & 0.8 & 0.8 \\ X^{(1)} &= 1.075 & 0.95 & 0.9 \\ X^{(2)} &= 1.0297 & 0.9844 & 0.9562 \\ X^{(3)} &= 1.0120 & 0.9943 & 0.9816 \end{aligned}$$

Extrapolatieformule (19.10) toegepast op $X^{(1)}$, $X^{(2)}$ en $X^{(3)}$ geeft

$$1.0006, 0.9983, 1.0025$$

Stelling. Als de coëfficiënten matrix A positief definit is convergeert de Gauss-Seidel iteratie met double sweep methode.

De grootste eigenwaarde van de iteratie matrix is reëel.

Bewijs. De double sweep wordt beschreven met twee matrix vergelijkingen:

$$\begin{aligned}(D + L)X^{(k+\frac{1}{2})} &= Z - L'X^{(k)} \\ (D + L')X^{(k+1)} &= Z - LX^{(k+\frac{1}{2})}.\end{aligned}$$

De volledige iteratie is dus

$$\begin{aligned}(D + L')X^{(k+1)} &= Z - L(D + L)^{-1}(Z - L'X^{(k)}) \\ &= L(D + L)^{-1}L'X^{(k)} + \{E - L(D + L)^{-1}\} Z.\end{aligned}$$

Voor de iteratie matrix vinden we

$$C = (D + L')^{-1}L(D + L)^{-1}L' = (D + L')^{-1}(LD^{-1})(E + LD^{-1})^{-1}L' \quad (19.34)$$

$LD^{-1} = P^{(1)}$ is een linker triangulaire matrix waarvan alle diagonaalelementen nul zijn: $P_{ij}^{(1)} = 0$ voor $j \geq i$.

Een eenvoudige berekening toont dat voor $P^{(2)} = (LD^{-1})^2$ geldt

$$P_{ij}^{(2)} = 0, \quad j \geq i-1.$$

Algemeen geldt voor $P^{(k)} = (LD^{-1})^k$

$$P_{ij}^{(k)} = 0, \quad j \geq i - k + 1.$$

Dus is $(LD^{-1})^n = 0$.

Daarom geldt de volgende identiteit

$$(E + LD^{-1})^{-1} = E - (LD^{-1}) + (LD^{-1})^2 - \dots + (-1)^{n-1}(LD^{-1})^{n-1}.$$

In (19.34) kunnen dus de factoren LD^{-1} en $(E + LD^{-1})^{-1}$ verwisseld worden:

$$C = (D + L')^{-1}(E + LD^{-1})^{-1}LD^{-1}L'.$$

Als $CY = \lambda Y$ geldt derhalve

$$LD^{-1}L'Y = (E + LD^{-1})^{-1}(D + L')\lambda Y = (A + LD^{-1}L')\lambda Y.$$

Hiermee vinden we voor de eigenwaarde

$$\lambda = \frac{\bar{Y}'LD^{-1}L'Y}{\bar{Y}'AY + \bar{Y}'LD^{-1}L'Y} \quad (19.35)$$

In (19.35) zijn teller en noemer reëel en $\bar{Y}'AY$ is positief.
 Bovendien is $\bar{Y}'LD^{-1}L'Y$ niet negatief want $LD^{-1}L' = (D^{-\frac{1}{2}}L')'(D^{-\frac{1}{2}}L')$.
 Hieruit concluderen we dat λ reëel is en $0 \leq \lambda < 1$.

Convergentie versnelling met relaxatiefactoren

Uitgaande van de Jacobi resp. Gauss-Seidel iteratie proberen we een iteratie matrix C (zie (19.26)) te bepalen waarvan de grootste eigenwaarde kleiner is dan die van $D^{-1}(L + U)$ en $(D + L)^{-1}U$.

Uit vergelijking (19.28) voor de Jacobi iteratie leiden we af dat

$$D(X^{(k+1)} - X^{(k)}) = Z - AX^{(k)} = R^{(k)}. \quad (19.36)$$

Uit (19.36) blijkt dat de verandering in iedere component gelijk is aan de corresponderende component van de residu vector van de voorafgaande benadering gedeeld door het diagonaalelement. Vooruitlopend op het gedrag na de k^e iteratie kunnen we deze wijziging vergroten of verkleinen, door die verandering met een getal ω , de relaxatie factor, te vermenigvuldigen. Deze factor hoeft niet voor iedere component hetzelfde te zijn en kan bovendien afhankelijk zijn van k . Daarom vervangen we (19.36) door

$$D(X^{(k+1)} - X^{(k)}) = C_k(Z - AX^{(k)}) \quad (19.37)$$

waarin C_k een diagonaalmatrix is. Bij stationaire processen is deze matrix onafhankelijk van k ; voorts nemen we aan dat $C_k = \omega E$, om de analyse eenvoudig te houden.

Dan geldt dus dat

$$X^{(k+1)} = (E - \omega D^{-1}A)X^{(k)} + \omega D^{-1}Z. \quad (19.38)$$

De iteratie matrix van de hier beschreven simultane overrelaxatie is $E - \omega D^{-1}A$. Zij μ een eigenwaarde van $E - \omega D^{-1}A$ en μ' een eigenwaarde van de Jacobi iteratie matrix $E - D^{-1}A$.

Dan is $(E - D^{-1}A)Y = \mu'Y$, dus $(E - \omega D^{-1}A)Y = (1 + \omega(\mu' - 1))Y$.

Hieruit concluderen we dat

$$\mu - 1 = \omega(\mu' - 1).$$

Als de matrix A positief definit is kunnen we schrijven

$$A = D^{\frac{1}{2}} B D^{\frac{1}{2}}$$

waarin B een positief definitie matrix is met $B_{ii} = 1$.

De vergelijkingen $AX = Z$ worden dan

$$BY = D^{-\frac{1}{2}} Z, \quad Y = D^{\frac{1}{2}} X. \quad (19.40)$$

De iteratie matrix van het Jacobi proces toegepast op

$$BY = D^{-\frac{1}{2}} Z$$

is $E - B$; de iteratie matrix van de simultane overrelaxatie is $E - \omega B$.

Als λ een eigenwaarde is van B zal de Jacobi iteratie convergeren als

$|1 - \lambda| < 1$. Omdat alle eigenwaarden van B positief zijn convergeert de Jacobi iteratie als $\lambda_1 < 2$, waarin λ_1 de grootste eigenwaarde van B is.

De simultane overrelaxatie convergeert als $|1 - \lambda\omega| < 1$; dit is het geval als we ω zo kiezen dat $\omega\lambda_1 < 2$ ($\omega > 0$). De beste keuze voor ω is die waarvoor geldt

$$1 - \lambda_n \omega = - (1 - \lambda_1 \omega) \quad (19.41)$$

waarin λ_1 de grootste en λ_n de kleinste eigenwaarde van B is. Immers dan zijn de grootste eigenwaarden van $E - \omega B$ op teken na gelijk.

Uit (19.41) volgt dat

$$\omega = \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_n}$$

en

$$|1 - \lambda\omega| = \left| 1 - \frac{2\lambda}{\lambda_1 + \lambda_n} \right| \leq \left| \frac{\lambda_1 - \lambda_n}{\lambda_1 + \lambda_n} \right| = \frac{\left| \frac{\lambda_1}{\lambda_n} - 1 \right|}{\left| \frac{\lambda_1}{\lambda_n} + 1 \right|} < 1. \quad (19.42)$$

We merken op dat de invoering van de relaxatie factor het meest effect heeft als de eigenwaarden van B dicht bij elkaar liggen, dus als λ_1 / λ_n weinig van één verschilt. Zo'n matrix is slecht geconditioneerd voor het eigenwaardeprobleem maar juist goed geconditioneerd voor het oplossen van een stelsel vergelijkingen.

Voor de Gauss-Seidel iteratie.

$$(D + L) X^{(k+1)} = Z - UX^{(k)}$$

leiden we af dat

$$D(X^{(k+1)} - X^{(k)}) = Z - AX^{(k)} - L(X^{(k+1)} - X^{(k)}).$$

De correctie vector $X^{(k+1)} - X^{(k)}$ beïnvloeden we weer met de relaxatie factor ω :

$$D(X^{(k+1)} - X^{(k)}) = \omega \{Z - AX^{(k)} - L(X^{(k+1)} - X^{(k)})\}. \quad (19.43)$$

In (19.43) staat het iteratieschema van de successieve overrelaxatie.

In plaats van (19.43) schrijven we

$$(\omega^{-1}D + L)X^{(k+1)} = Z - UX^{(k)} - (1 - \omega^{-1})DX^{(k)}.$$

De iteratie matrix van de successieve overrelaxatie is

$$C = -(\omega^{-1}D + L)^{-1}\{(1 - \omega^{-1})D + U\}. \quad (19.44)$$

Voor coefficienten matrices met veel nulelementen zijn de eigenwaarden van de iteratie matrix bestudeerd. Dergelijke matrices treden op bij het oplossen van partiële differentiaalvergelijkingen met eindige differentie methoden.

Voor verschillende matrices, o.a. die behorende bij de 5-punts formule voor de Laplace vergelijking (zie NA-133), is bewezen dat de grootste eigenwaarde van $(D + L)^{-1}U$ (Gauss-Seidel iteratie) het kwadraat is van de grootste eigenwaarde λ_1 van $D^{-1}(L + U)$ (Jacobi iteratie). Als deze eigenwaarden kleiner zijn dan één, dus convergentie verzekerd is, zal de successieve overrelaxatie optimaal convergeren als

$$\omega = \frac{2}{1 + (1 - \lambda_1^2)^{\frac{1}{2}}}. \quad (19.45)$$

De hiermee corresponderende grootste eigenwaarde van C is dan

$$\frac{1 - (1 - \lambda_1^2)^{\frac{1}{2}}}{1 + (1 - \lambda_1^2)^{\frac{1}{2}}} = \omega - 1. \quad (19.46)$$

Voor dergelijke matrices is de tridiagonale cel structuur kenmerkend:

$$A = \begin{pmatrix} D_1 & U_1 & 0 & 0 \\ L_1 & D_2 & U_2 & 0 \\ 0 & L_2 & D_3 & U_3 \\ 0 & 0 & L_3 & D_4 \end{pmatrix}$$

Hierin zijn D_i diagonaalmatrices, die niet van dezelfde orde hoeven te zijn.

Voorbeeld

$$A = \left(\begin{array}{c|cc} 4 & 2 & -1 \\ \hline 3 & 5 & 0 \\ -1 & 0 & 5 \end{array} \right)$$

De iteratie matrix van het Jacobi proces

$$-D^{-1}(L + U) = - \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} \\ \frac{3}{5} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

heeft eigenwaarden $\lambda_1 = 0.425^{\frac{1}{2}}$, $\lambda_2 = -0.425^{\frac{1}{2}}$, $\lambda_3 = 0$.

De iteratie matrix van het Gauss-Seidel proces

$$-(D + L)^{-1}U = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} \\ 0 & -\frac{3}{10} & \frac{3}{20} \\ 0 & \frac{1}{4} & -\frac{1}{8} \end{pmatrix}$$

heeft eigenwaarden $\lambda_1 = 0.425$, $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$.

Nog beter dan de Gauss-Seidel iteratie convergeert de successieve overrelaxatie waarbij we, volgens (19.45) nemen $\omega = 1.138$. De grootste eigenwaarde van de matrix C (19.44) is dan $0.138 = \lambda_1$, $\lambda_2 = \lambda_3 = -0.138$.

In de praktijk is het moeilijk om een goede relaxatie factor te vinden. De methode van de successieve overrelaxatie wordt daarom alleen gebruikt bij grote stelsels met veel nulelementen waarbij de bepaling van een goede ω slechts een klein gedeelte is van het gehele proces.

Als we in (19.37) $\omega_k E$ substitueren voor C_k krijgen we een niet-stationaire iteratie. Toegepast op

$$BY = D^{-\frac{1}{2}}Z, \quad (19.40)$$

waarbij $B_{ii} = 1$ levert dit

$$X^{(k+1)} = (E - \omega_k B)X^{(k)} + \omega_k D^{-\frac{1}{2}}Z$$

ofwel:

$$X^{(k+1)} = \prod_{\ell=1}^k (E - \omega_{\ell} B)X^{(0)} + V.$$

We zijn daarom geïnteresseerd in de eigenwaarden van het matrixpolynoom

$$P_k(B) = \prod_{\ell=1}^k (E - \omega_{\ell} B).$$

Als de matrix B eigenwaarden λ_i heeft, dan zijn de eigenwaarden van $P_k(B)$ gelijk aan $P_k(\lambda_i)$ (zie NA-183).

Nu willen we ω_k zo kiezen dat het algebraïsche polynoom $P_k(t)$ zo klein mogelijk is over het gehele interval waarin de eigenwaarden λ_i liggen. $P_k(t)$ is een polynoom van de graad k . Van alle polynomen van de graad k (met coefficient van t^k één) heeft het Tschebyscheff polynoom de kleinste maximale variatie op een gegeven interval. Op het interval $[-1,1]$ is het Tschebyscheff polynoom

$$T_k(t) = \cos(k \arccos t).$$

Dit polynoom heeft $k+1$ maxima (+1) en minima (-1).

Als we weten dat de eigenwaarden λ_i in het interval $[a,b]$ liggen, dan is het gezochte polynoom

$$P_k(t) = \frac{T_k\left(\frac{b+a-2t}{b-a}\right)}{T_k\left(\frac{b+a}{b-a}\right)}.$$

Voor de relaxatiefactoren ω_k nemen we de reciproken van de nulpunten van $P_k(t)$.

De directe oplosmethoden vereisen $\frac{1}{3}n^3$ vermenigvuldigingen. Omdat het vermenigvuldigen van een matrix en een vector n^2 vermenigvuldigingen vereist, zal een iteratieve methode minder werk vergen dan een directe methode als er minder dan $\frac{1}{3}n$ iteraties uitgevoerd moeten worden om de oplossing in de gevraagde nauwkeurigheid te berekenen. Bij de matrices met veel systematisch verdeelde nulelementen zal het aantal vermenigvuldigingen veel kleiner zijn dan n^2 . In dit geval zal een iteratieve methode te preferen zijn boven een eliminatie methode vanwege de geringere hoeveelheid werk en het geringer aantal geheugenplaatsen dat nodig is. Ook wat de nauwkeurigheid betreft is de iteratieve methode bij dergelijke matrices (veelal van zéér grote orde) te verkiezen boven eliminatie methoden. De oorspronkelijke coefficienten matrix, of een daarvan afgeleide iteratie matrix, wordt bij iedere iteratie weer gebruikt zodat afrondingsfouten niet cumuleren.

Deze voordelen vallen weg bij slecht geconditioneerde stelsels waarbij de grootste eigenwaarde van de iteratie matrix weinig van één verschilt. Dan zal de verandering $X^{(k+1)} - X^{(k)}$ zeer klein zijn hoewel de oplossing X

nog niet voldoende benaderd is.

Immers voor grote k geldt

$$X - X^{(k+1)} = \lambda_1 (X - X^{(k)}).$$

Voorbeeld

$$\begin{aligned} x_1 - 0.70710 x_2 &= 0.29290 & x_1 &= 0.26267 \\ 0.70710 x_1 + 0.50000 x_2 &= 0.20711 & x_2 &= 0.04275 \end{aligned}$$

Theoretisch convergeert de Gauss-Seidel iteratie want A is positief definit. Als we rekenen met vijf cijfers achter de komma en beginnen met $X^{(0)} = (0,0)$ dan stopt de iteratie al na de eerste slag met als resultaat $X^{(1)} = (0.29290, 0.00000)$.

Dit is de exacte oplossing van het stelsel

$$\begin{aligned} x_1 + 0.70710 x_2 &= 0.29290 \\ 0.70710 x_1 + 0.50000 x_2 &= 0.20711 + 0.00000041. \end{aligned}$$

Bij het itereren zijn niet de exacte coëfficiënten gebruikt en de storing die daardoor in de oplossing met de iteratieve methode optreedt is van dezelfde orde als die welke optreedt bij de eliminatie methode.

Bij slecht geconditioneerde stelsels convergeert de iteratie slecht; dit verschijnsel correspondeert met cijfer-verlies in de pivots bij de eliminatie methode.

Dit wordt duidelijk als we de karakteristieke vergelijking beschouwen van de iteratie matrix.

Bij de Jacobi iteratie is deze vergelijking

$$| -D^{-1}(L + U) - \lambda E | = | L + U + \lambda D | = 0. \quad (19.47)$$

Bij de Gauss-Seidel iteratie is deze vergelijking

$$| -(L + D)^{-1}U - \lambda E | = | U + \lambda(L + D) | = 0. \quad (19.48)$$

Het is duidelijk dat voor beide vergelijkingen een wortel weinig van één verschilt als $|A|$ weinig van nul verschilt, d.i. als het stelsel slecht geconditioneerd is.

Omdat de beschreven iteratie methoden afhankelijk zijn van de volgorde waarin de vergelijkingen opgeschreven worden, kan de convergentie van het iteratieproces veranderd worden door de vergelijkingen op een nieuwe wijze te rangschikken (ordenen).

Voorbeeld

De Jacobi én de Gauss-Seidel methode convergeren als de coëfficiëntenmatrix de eenheidsmatrix is; bij een permutatie van de rijen zal zowel D als D+L singulier worden dus dan convergeren noch de Jacobi noch de Gauss-Seidel iteratie.

Als rijen én overeenkomstige kolommen gepermuteerd worden zal dit geen invloed hebben op de Jacobi iteratie wel echter op het Gauss-Seidel proces. Zij P de permutatie matrix, dan is de nieuwe matrixvergelijking

$$P(D + U + L)P^t(PX) = PZ. \quad (19.49)$$

Het Jacobi iteratieschema is dan

$$PDP^t(PX^{(k+1)}) = PZ - P(U + L)P^t(PX^{(k)}) \quad (19.50)$$

en het Gauss-Seidel schema

$$P(D + U)P^t(PX^{(k+1)}) = PZ - PLP^t(PX^{(k)}). \quad (19.51)$$

Met permutatie matrix

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (19.52)$$

is (19.50) in uitgeschreven vorm

$$\begin{aligned} a_{22}x_2^{(k+1)} &= z_2 - a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k)} \\ a_{33}x_3^{(k+1)} &= z_3 - a_{31}x_1^{(k)} - a_{32}x_2^{(k)} \\ a_{11}x_1^{(k+1)} &= z_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} \end{aligned}$$

en (19.51) geeft bij uitschrijven

$$\begin{aligned} a_{22}x_2^{(k+1)} &= z_2 - a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k)} \\ a_{33}x_3^{(k+1)} &= z_3 - a_{31}x_1^{(k)} - a_{32}x_2^{(k+1)} \\ a_{11}x_1^{(k+1)} &= z_1 - a_{12}x_2^{(k+1)} - a_{13}x_3^{(k+1)}. \end{aligned} \quad (19.53)$$

Bij het oorspronkelijke Gauss-Seidel proces

$$\begin{aligned} a_{11}x_1^{(k+1)} &= z_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} \\ a_{22}x_2^{(k+1)} &= z_2 - a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{23}x_3^{(k)} \\ a_{33}x_3^{(k+1)} &= z_3 - a_{31}x_1^{(k+1)} - a_{32}x_2^{(k+1)} \end{aligned}$$

gebruiken we $x_1^{(k+1)}$ om $x_2^{(k+1)}$ te berekenen, terwijl we in (19.53) daartoe $x_1^{(k)}$ aanwenden.

Bij matrices met een tridiagonale celstructuur zijn er permutaties van rijen en kolommen waarbij de ordening consistent is met het oorspronkelijke stelsel, d.w.z. dat het Gauss-Seidel proces na de permutatie volgens dezelfde arithmetiek verloopt als bij het oorspronkelijke systeem.

Voorbeeld

$$\left(\begin{array}{c|cc} 4 & 2 & -1 \\ \hline 3 & 5 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{array} \right) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} 4x_1^{(k+1)} &= z_1 - 2x_2^{(k)} + x_3^{(k)} \\ 5x_2^{(k+1)} &= z_2 - 3x_1^{(k+1)} \\ 2x_3^{(k+1)} &= z_3 + x_1^{(k+1)} \end{aligned} \quad (19.54)$$

Bij de ordening 1,3,2 krijgen we

$$\left(\begin{array}{c|cc} 4 & -1 & 2 \\ \hline -1 & 2 & 0 \\ 3 & 0 & 5 \end{array} \right) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_3 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_3 \\ z_2 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} 4x_1^{(k+1)} &= z_1 - 2x_2^{(k)} + x_3^{(k)} \\ 2x_3^{(k+1)} &= z_3 + x_1^{(k+1)} \\ 5x_2^{(k+1)} &= z_2 - 3x_1^{(k+1)} \end{aligned} \quad (19.55)$$

Karakteristiek voor deze consistente ordening is dat de elementen ongelijk aan nul boven de diagonaal, na de permutatie zich ook boven de diagonaal bevinden.

Als bij een permutatie de tridiagonale celstructuur behouden blijft verandert de convergentie van het proces niet hoewel de arithmetiek gewijzigd wordt.

De permutatie 2,3,1 heeft als resultaat

$$\left(\begin{array}{c|cc} 5 & 0 & 3 \\ \hline 0 & 2 & -1 \\ 2 & -1 & 4 \end{array} \right) \begin{pmatrix} x_2 \\ x_3 \\ x_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_2 \\ z_3 \\ z_1 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} 5x_2^{(k+1)} &= z_2 - 3x_1^{(k)} \\ 2x_3^{(k+1)} &= z_3 + x_1^{(k)} \\ 4x_1^{(k+1)} &= z_1 - 2x_2^{(k+1)} + x_3^{(k+1)} \end{aligned} \quad (19.56)$$

De iteratie matrices van (19.54), (19.55) en (19.56) hebben de eigenwaarden 0, 0, $\frac{17}{40}$.

Elliptische partiële differentiaalvergelijkingen

Met de centrale differentie formules krijgen we voor de lineaire partiële differentiaalvergelijking

$$Au_{xx} + Cu_{yy} + Du_x + Eu_y + Fu = G$$

de bekende vijfpunts differentie formule (zie NA-140)

$$u_{r,s} = \beta_1 u_{r+1,s} + \beta_3 u_{r-1,s} + \beta_2 u_{r,s+1} + \beta_4 u_{r,s-1} + \tau_{r,s} \quad (19.57)$$

als we althans alleen de eerste term meenemen.

Bij het randwaarden probleem is het resultaat een stelsel met evenveel vergelijkingen en onbekenden als er roosterpunten zijn binnen de rand.

We nemen aan dat $\beta_i \geq 0$ ($i = 1, 2, 3, 4$) en $\sum_{i=1}^4 \beta_i \leq 1$.

A. Punt iteratieve methoden

Het iteratie schema voor het Jacobi proces is

$$u_{r,s}^{(n+1)} = \beta_1 u_{r+1,s}^{(n)} + \beta_3 u_{r-1,s}^{(n)} + \beta_2 u_{r,s+1}^{(n)} + \beta_4 u_{r,s-1}^{(n)} + \tau_{r,s}. \quad (19.58)$$

Bij de Gauss-Seidel methode werken we per iteratiestap stelselmatig alle roosterpunten rijsgewijs af en wel van links naar rechts. Dan is het iteratie schema:

$$u_{r,s}^{(n+1)} = \beta_1 u_{r+1,s}^{(n)} + \beta_3 u_{r-1,s}^{(n+1)} + \beta_2 u_{r,s+1}^{(n)} + \beta_4 u_{r,s-1}^{(n+1)} + \tau_{r,s}. \quad (19.59)$$

Als de Gauss-Seidel methode toegepast wordt op de vergelijking van Laplace

$$u_{xx} + u_{yy} = 0 \quad (19.60a)$$

waarbij de rand vierkant is en het rooster een wijdte $h = \frac{1}{M}$ heeft dan geldt voor λ , de convergentie factor van de Gauss-Seidel iteratie

$$\lambda = \cos^2 \frac{\pi}{M} \sim 1 - \left(\frac{\pi}{M}\right)^2.$$

De successieve overrelaxatie toegepast op (19.57) heeft als iteratie schema

$$u_{r,s}^{(n+1)} = \omega \{ \beta_1 u_{r+1,s}^{(n)} + \beta_3 u_{r-1,s}^{(n+1)} + \beta_2 u_{r,s+1}^{(n)} + \beta_4 u_{r,s-1}^{(n+1)} + \tau_{r,s} \} - (\omega - 1) u_{r,s}^{(n)}. \quad (19.60)$$

Als (19.60) toegepast wordt op de vergelijking (19.60a) spreken we van de geëxtrapoleerde methode van Liebmann.

De successieve overrelaxatie convergeert optimaal als

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \lambda}},$$

waarin λ de convergentiefactor is van het gewone Gauss-Seidel proces.

B. Rij-iteratieve methoden

Bij rij-iteratieve methoden verbeteren we de waarden van de oplossingsbenadering gelijktijdig voor alle roosterpunten op één rij.

De simultane rij-iteratie (Jacobi) heeft het volgende schema:

$$u_{r,s}^{(n+1)} = \beta_1 u_{r+1,s}^{(n+1)} + \beta_3 u_{r-1,s}^{(n+1)} + \beta_2 u_{r,s+1}^{(n)} + \beta_4 u_{r,s-1}^{(n)} + \tau_{r,s}. \quad (19.61)$$

Bij de successieve rij-iteratie worden de verbeterde waarden van de voorafgaande rij gebruikt:

$$u_{r,s}^{(n+1)} = \beta_1 u_{r+1,s}^{(n+1)} + \beta_3 u_{r-1,s}^{(n+1)} + \beta_2 u_{r,s+1}^{(n)} + \beta_4 u_{r,s-1}^{(n+1)} + \tau_{r,s}. \quad (19.62)$$

Bij iedere waarde van s is het voor de bepaling van de verbeterde waarden nodig een stelsel van M vergelijkingen met M onbekenden op te lossen. Met

M wordt het aantal inwendige roosterpunten op de rij in kwestie aangeduid. De matrix van dit stelsel is tridiagonaal zodat het aantal bewerkingen voor het oplossen van dit systeem met de methode van Crout evenredig is met M. Ook bij de successieve rij-iteratie kunnen we overrelaxatie toepassen:

$$u_{r,s}^{(n+1)} = \omega \{ \beta_1 u_{r+1,s}^{(n+1)} + \beta_3 u_{r-1,s}^{(n+1)} + \beta_2 u_{r,s+1}^{(n)} + \beta_4 u_{r,s-1}^{(n+1)} + \tau_{r,s} - u_{r,s}^{(n)} \} + u_{r,s}^{(n)}. \quad (19.63)$$

Als λ de convergentiefactor is van de successieve rij-iteratie (19.62) dan convergeert (19.63) optimaal als

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \lambda}}.$$

De successieve rij-overrelaxatie heeft voor de vergelijking van Laplace bij vierkante rand als convergentiefactor

$$\lambda = \left(\frac{\cos \pi h}{2 - \cos \pi h} \right)^2 \sim 1 - 2 \left(\frac{\pi}{M} \right)^2$$

waar $h = \frac{1}{M}$ de roosterwijdte is.

Deze relaxatiemethode convergeert dus bijna twee keer zo snel als de successieve punt-overrelaxatie (19.60). De successieve rij-overrelaxatie geeft vooral snel een goede benadering als de eens berekende elementen van de inverse van de tridiagonale matrix, nodig om rijsgewijs een stelsel op te lossen, bewaard en gebruikt worden.

C. Alternated direction implicit methode

Een recente modificatie van de rij-overrelaxatie is de "alternated direction implicit" methode (ADI), waarbij op het rooster eerst een rij-iteratie wordt uitgevoerd en daarna een kolom-iteratie (double sweep).

Voor de vergelijking van Laplace is het iteratie schema van deze methode:

$$u_{r,s}^{(n+\frac{1}{2})} = u_{r,s}^{(n)} + \omega \{ u_{r+1,s}^{(n+\frac{1}{2})} + u_{r-1,s}^{(n+\frac{1}{2})} - 2u_{r,s}^{(n+\frac{1}{2})} \} + \omega \{ u_{r,s+1}^{(n)} + u_{r,s-1}^{(n)} - 2u_{r,s}^{(n)} \} \quad \text{rij-iteratie}$$

$$u_{r,s}^{(n+1)} = u_{r,s}^{(n+\frac{1}{2})} + \omega \{ u_{r+1,s}^{(n+\frac{1}{2})} + u_{r-1,s}^{(n+\frac{1}{2})} - 2u_{r,s}^{(n+\frac{1}{2})} \} + \omega \{ u_{r,s+1}^{(n+1)} + u_{r,s-1}^{(n+1)} - 2u_{r,s}^{(n+1)} \} \quad \text{kolom-iteratie}$$

Er is een methode om de factor ω zodanig te bepalen dat bij die waarde de ADI methode optimaal convergeert. De convergentie is aanmerkelijk beter dan de convergentie van de puntsgewijze successieve overrelaxatie (19.60) en van de successieve rij-overrelaxatie (19.63). Een nadeel van de ADI methode is echter dat op een computer veel "organisatie" gevergd wordt om rijen en daarna kolommen van tape (of trommel) naar het kerngeheugen te transporteren. Vooral bij een lineair secundair geheugen zal dit inconvenient zich doen gevoelen.

Litteratuur

D.K.Faddeev and V.N.Faddeeva

Computational Methods of Linear Algebra, Freeman, San Francisco [1963].

L.Fox

An Introduction to Numerical Linear Algebra, Clarendon Press, Oxford [1964].

J.Greenstadt

The determination of the Characteristic Roots of a Matrix by the Jacobi Method. Mathematical Methods for digital computers. John Wiley and Sons [1960], 84-91.

D.E.Muller

A Method for solving algebraic equations using a automatic computer. Math.Tab.Wash.10 [1956], 208-15.

J.H.Wilkinson

The calculation of eigenvectors by the method of Lanczos. Comp.Journ.1 [1958], 148-52.

Householder's method for the solution of the algebraic eigenproblem. Comp.Journ. 2 [1960], 23-27.

Matrix Computations. To appear.

D.M.Young

The Numerical Solution of Elliptic and Parabolic Differential Equations. Survey of Numerical Analysis, Mc Graw-Hill Book Company, Inc [1962].

Einde van het college

(De syllabus van dit gedeelte van het college werd verzorgd door
 drs.M.H.C.Paardekooper, Technische Hogeschool Eindhoven).