$r^{(i)}$ sehr schnell ihre Orthogonalität verlieren. Die Orthogonalität ist aber für alle Aussagen über das Verfahren entscheidend.

Beispiel 5.7.1 *Es sollen die kleinsten Eigenwerte der* 50×50 *5-Bandmatrix*

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ -2 & 5 & -4 & 1 & & & \vdots \\ 1 & -4 & 6 & -4 & 1 & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & 1 & -4 & 6 & -4 & 1 \\ \vdots & & & 1 & -4 & 5 & -2 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

berechnet werden. Dieses Problem entsteht aus der Diskretisierung des Differentialgleichungs-eigenwertproblems

$$y^{(4)} = \lambda y,$$
$$y''(0) = y'''(0) = y''(1) = y'''(1) = 0.$$

(Balkenbiegung eines beidseitig elastisch gelagerten Balkens).
Die 10 kleinsten Eigenwerte von A sind

$$\begin{aligned} \lambda_{50} &= 1.43894475 \cdot 10^{-5}, \\ \lambda_{49} &= 2.29794694 \cdot 10^{-4}, \\ \lambda_{48} &= 1.15966134 \cdot 10^{-3}, \\ \lambda_{47} &= 3.6489003 \cdot 10^{-3}, \\ \lambda_{46} &= 8.85782128 \cdot 10^{-3}, \\ \lambda_{45} &= 0.0182399992, \\ \lambda_{44} &= 0.0335144259, \\ \lambda_{43} &= 0.0566323917, \\ \lambda_{42} &= 0.0897396256, \\ \lambda_{41} &= 0.1351343. \end{aligned}$$

Es wurde das Lanczos-Verfahren in Verbindung mit der inversen Iteration verwendet. Als Startvektor diente dabei $x^{(0)} = [1, 2, 3, \ldots]^T$. *Schon im dritten Lanczosschritt ergeben sich die Näherungen*

$$\begin{aligned} \Theta_3 &= \underline{1.4389}9796 \cdot 10^{-5} && \textit{für } \lambda_{50}, \\ \Theta_2 &= \underline{2}.40714104 \cdot 10^{-4} && \textit{für } \lambda_{49}, \\ \Theta_1 &= \underline{0.01}54333215 && (\textit{für } \lambda_{45}). \end{aligned}$$

Die korrekten Stellen sind unterstrichen.

Ferner ist

$$\|I - \hat{Q}_3^T \hat{Q}_3\|_E = 1.75 \cdot 10^{-8}, [4]$$

d.h. die ersten drei $\hat{q}^{(i)}$ *erfüllen die Forderung der Orthonormalität im Rahmen der Rechengenauigkeit von 10 Stellen recht gut (*$\hat{q}^{(i)}$ *bezeichnet die tatsächlich berechneten Werte).*

Im 5. Lanczos-Schritt haben wir

$$\begin{aligned}
\Theta_5 &= \underline{1.43899}751 \cdot 10^{-5} && \textit{für } \lambda_{50}, \\
\Theta_4 &= \underline{2.29795}209 \cdot 10^{-4} && \textit{für } \lambda_{49}, \\
\Theta_3 &= \underline{1.1}6123194 \cdot 10^{-3} && \textit{für } \lambda_{48}, \\
\Theta_2 &= 4.51726268 \cdot 10^{-3}, \\
\Theta_1 &= 0.125580791, \\
\|I - \hat{Q}_5^T \hat{Q}_5\|_E &= 3.75 \cdot 10^{-4}.
\end{aligned}$$

Im 7. Lanczos-Schritt schließlich wird

$$\begin{aligned}
\Theta_7 &= \underline{1.43899}751 \cdot 10^{-5} && \textit{für } \lambda_{50}, \\
\Theta_6 &= \underline{1.43}901098 \cdot 10^{-5} && \textit{für } \lambda_{50} \quad (!), \\
\Theta_5 &= \underline{2.29795}195 \cdot 10^{-4} && \textit{für } \lambda_{49}, \\
\Theta_4 &= \underline{1.15966}716 \cdot 10^{-3} && \textit{für } \lambda_{48}, \\
\Theta_3 &= \underline{3.6}8169396 \cdot 10^{-3} && \textit{für } \lambda_{47}, \\
\Theta_2 &= \underline{0.01}16532546 && \textit{für } \lambda_{45}, \\
\Theta_1 &= 0.257072226, \\
\|I - \hat{Q}_7^T \hat{Q}_7\|_E &= 1.414 \quad (!),
\end{aligned}$$

d.h. die Matrix $\hat{Q}_7$ *ist nun auch nicht annäherungsweise orthonormal. Gleichzeitig tritt eine Näherung für* λ_{50} *als Doublette auf, obwohl* λ_{50} *ein einfacher, gut separierter Eigenwert von* A *ist.*

Dies ist typisch für das Lanczos-Verfahren unter Rundungsfehlereinfluß. Das Erkennen solcher falschen Doubletten stellt eine besondere Schwierigkeit für die Anwendung des Verfahrens dar. Man erkennt auch, daß die Eigenwerte nicht alle systematisch angenähert werden, z.B. fehlt eine Näherung für λ_{46}*, während eine für* λ_{45} *vorliegt. Dies liegt am Startvektor.* □

Den Verlust der Orthogonalität bei den $\hat{q}^{(i)}$ könnte man dadurch ausgleichen, daß man jedes berechnete $\hat{q}^{(i)}$ sofort bezüglich aller zuvor berechneten Vektoren $\hat{q}^{(1)}, \ldots, \hat{q}^{(i-1)}$ orthogonalisiert. Dies würde aber den Rechen- und auch den Speicherzugriffsaufwand für das Verfahren (die $\hat{q}^{(i)}$ wird man bei großem n gewöhnlich auf einem Hintergrundspeicher halten) enorm erhöhen. Um das Entstehen falscher Doubletten zu vermeiden genügt es, $\hat{q}^{(i)}$ bzgl. der bereits mit hinreichender Genauigkeit gefundenen Eigenvektoren von A zu orthogonalisieren (sogenannte selektive Orthogonalisierung). Als „hinreichend“ genau definiert man dabei einen Defekt in der Einsetzprobe von der Größenordnung der halben Rechengenauigkeit, d.h.

$$\|Ay_i - \Theta_i y_i\|_2 \leq \sqrt{\varepsilon}\, \|A\|_E,$$

wobei nur die y_i getestet werden, für die

$$|\beta_j||v_{ji}| \leq \sqrt{\varepsilon}\, \|A\|_E$$

im j-ten Lanczos-Schritt gilt. Natürlich muß man dazu in jedem Schritt das vollständige Eigenwert / Eigenvektor-Problem der Matrizen T_j lösen, was aber nur wenig aufwendig ist.

[4] Ist A eine beliebige Matrix, so ist $\|A\|_E := (\mathrm{Sp}(AA^*))^{1/2}$

Beispiel 5.7.2 *Wir betrachten die Aufgabenstellung von Beispiel 5.7.1, jetzt mit selektiver Orthogonalisierungs-Testgröße*

$$\|Ay_i - \Theta_i y_i\| \le 16 \cdot 10^{-5}.$$

Im 10-ten Lanczos-Schritt ist

$$\begin{aligned}
\|I - \hat{Q}_{10}^T \hat{Q}_{10}\|_E &= 4.631 \cdot 10^{-4},\\
\Theta_{10} &= \underline{1.43899}752 \cdot 10^{-5},\\
\Theta_9 &= \underline{2.29795}196 \cdot 10^{-4},\\
\Theta_8 &= \underline{1.15966}203 \cdot 10^{-3},\\
\Theta_7 &= \underline{3.64890}097 \cdot 10^{-3},\\
\Theta_6 &= \underline{8.85782}268 \cdot 10^{-3},\\
\Theta_5 &= \underline{0.0182}40746,\\
\Theta_4 &= \underline{0.0337}289387,\\
\Theta_3 &= 0.0651717673,\\
\Theta_2 &= 0.185803438,\\
\Theta_1 &= 1.74281859.
\end{aligned}$$

Mit einem Aufwand, der 10 Schritten der einfachen inversen Iteration im wesentlichen entspricht, sind bereits die sieben kleinsten Eigenwerte von A mit guter Genauigkeit gefunden. □

5.8 Allgemeine Eigenwertprobleme

Neben dem speziellen Eigenwertproblem tritt häufig auch das allgemeine Eigenwertproblem

$$A\,x = \lambda\,B\,x, \qquad x \ne 0, \tag{5.9}$$

auf, allerdings meistens für $A = A^H$, $B = B^H$, B positiv definit. In den Anwendungen treten auch noch allgemeinere Aufgaben auf, etwa

$$(\,K + \lambda\,C - \lambda^2\,M)\,x = 0, \qquad x \ne 0, \tag{5.10}$$

oder sogar

$$(\,A - \,M(\lambda))\,x = 0, \qquad x \ne 0,$$

mit einer von λ abhängenden Matrix $M(\lambda)$.

Wir wollen zunächst (5.9) im Falle allgemeiner komplexer $n \times n$ Matrizen A, B betrachten. Solange B invertierbar bleibt, kann (5.9)unmittelbar auf das spezielle Eigenwertproblem zurückgeführt werden:

$$A\,x = \lambda\,B\,x \quad \Leftrightarrow \quad B^{-1}\,A\,x = \lambda\,x.$$

Die explizite Durchführung dieser Transformation ist nur dann zu empfehlen, wenn die Dimension des Problems nicht groß und B nicht zu schlecht konditioniert ist. Wenn A