Eigenwertabschätzungen für Matrizen

Herrn Prof. Dr. Karl Nickel zum 60. Geburtstag gewidmet

Von *Arnold Neumaier* in Freiburg i. Br.

In dieser Note geben wir eine einheitliche Herleitung vieler bekannter und einiger neuer Schranken für die Eigenwerte einer reellen oder komplexen $n \times n$-Matrix A.

1. A ist hermitesch

$x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ sei ein fest vorgegebener Vektor. An sich kann x beliebig sein, aber für *gute* Schranken muß x eine Näherung eines Eigenvektors sein.

Für alle reelle rationale Funktionen $h(t)$, für die $h(A)$ existiert, definieren wir $Lh := x^* h(A) x$. Für den so definierten Operator L gilt in Verallgemeinerung von Wielandt 1948:

Satz 1. *Ist $Lh \leqq 0$, so gibt es mindestens einen Eigenwert λ mit $h(\lambda) \leqq 0$.*

Beweis. Aus der Annahme folgt, daß $h(A)$ nicht positiv definit ist; daher ist mindestens ein Eigenwert von $h(A)$ — die alle die Form $h(\lambda)$, λ Eigenwert von A, haben — $\leqq 0$. $\square$

Aus diesem Satz folgen eine ganze Reihe bekannter Schrankenaussagen. Diese stellen wir in einer Tabelle zusammen, für die wir die folgenden Abkürzungen benutzen.

$\exists \lambda$ $\quad :\Leftrightarrow$ „Es gibt einen Eigenwert λ von A mit",

$\underline{\lambda}$ $\quad := \min \{\lambda \mid \lambda$ Eigenwert von $A\}$,

$\bar{\lambda}$ $\quad := \max \{\lambda \mid \lambda$ Eigenwert von $A\}$,

μ_i $\quad := \dfrac{(Ax)_i}{x_i}$ (falls $x_i \neq 0$), $\underline{\mu} := \min\limits_{x_i \neq 0} \mu_i$, $\bar{\mu} := \max\limits_{x_i \neq 0} \mu_i$,

$\langle \alpha, \beta \rangle$ $= $ Intervall mit Endpunkten α, β,

m_i $\quad := Lt^i = x^T A^i x$,

$\|z\|$ $\quad := \sqrt{z^* z} =$ Länge von z.

f und g sind beliebige reelle Funktionen, für die $f(A)$, $g(A)$ definiert sind, α ist eine beliebige reelle Zahl (Eigenwertnäherung). Die unbestimmte Zahl ε wird in der folgenden Tabelle stets so gewählt, daß $Lh=0$ wird; es ergeben sich für ε die Werte der jeweiligen Schranken.

Nr.	$h(t)$	Existenzaussage	Quelle
1	$(t-\alpha)^2-\varepsilon^2$	$\exists\lambda: \lvert\lambda-\alpha\rvert \leqq \dfrac{\lVert Ax-\alpha x\rVert}{\lVert x\rVert}$	Walker/Weston 1949
2	$(t-\alpha)^2-\varepsilon^2 t^2$	$\exists\lambda: \lvert(\lambda-\alpha)/\lambda\rvert \leqq \dfrac{\lVert Ax-\alpha x\rVert}{\lVert Ax\rVert}$	Stummel/Hainer 1971[1])
3	$f(t)^2-\varepsilon^2$	$\exists\lambda: \lvert f(\lambda)\rvert \leqq \dfrac{\lVert f(A)x\rVert}{\lVert x\rVert}$	Stoer/Bulirsch 1973[1])
4	$t-\varepsilon$	$R_x \in [\underline{\lambda}, \bar{\lambda}]$	Rayleigh 1899
5	$(t-\varepsilon)(t-\alpha)$	$\exists\lambda: \lambda\in\langle\alpha, T(\alpha)\rangle$	Wielandt 1948[2])
6	$\dfrac{t-\varepsilon}{t-\alpha}$	$\exists\lambda: \lambda\in\langle\alpha, \tau(\alpha)\rangle$	Löwdin 1962
7	$(t-\underline{\mu})(t-\bar{\mu})$	$\exists\lambda\in[\underline{\mu}, \bar{\mu}]$	Collatz 1942
8	$(t-R_x)^2-\varepsilon_x^2$	$\exists\lambda: \lvert\lambda-R_x\rvert \leqq \varepsilon_x$	Weinstein 1934[3])

[1]) Spezialfälle einer Aussage in Bauer/Householder 1960

[2]) Temple 1929

[3]) Krylov/Bogoljubov 1929 (für Differentialgleichungen)

$R_x=\dfrac{m_1}{m_0}$ Rayleigh-Quotient, $\qquad \varepsilon_x^2=\dfrac{m_2}{m_0}-\left(\dfrac{m_1}{m_0}\right)^2 \geqq 0$

$T(\alpha)=\dfrac{m_2-m_1\alpha}{m_1-m_0\alpha}$ Temple-Quotient, $\qquad \tau(\alpha)=\alpha+\dfrac{x^*x}{x^*(A-\alpha I)^{-1}x}$

Bemerkung. 1. $\tau(A)$ fällt als Nebenprodukt bei der inversen Iteration an. Man kann leicht nachrechnen, daß $\tau(\alpha)$ mit dem Temple-Quotient von α für den Vektor $y:=(A-\alpha I)^{-1}x$ (anstelle von x) übereinstimmt.

2. Durch die Wahl eines Polynoms 4. Grades für $f(t)$ kann man gleichzeitig zwei Einschließungsintervalle für zwei Eigenwerte erhalten; siehe dazu Kreyszig 1954, 1979. Zur Konstruktion *eines* Intervalles, das mehrere Eigenwerte einschließt, siehe Goerisch/Albrecht und dort zitierte Arbeiten.

3. Aus der Beziehung

$$\sum_{i=1}^{n} a_i \leqq 0 \Rightarrow a_i \leqq 0 \quad \text{für ein} \quad i\in\{1,\dots,n\}$$

für reelle Zahlen $a_1, \ldots, a_n$ erhält man

$$(R_x - \alpha)\,(R_x - T(\alpha)) = -\varepsilon_x^2 \leqq 0, \quad \text{also} \quad R_x \in \langle \alpha, T(\alpha) \rangle;$$

$$\sum x_i^2 (\mu_i - R_x) = 0, \quad \text{also} \quad R_x \in [\underline{\mu}, \bar{\mu}];$$

$$\sum x^2 (\mu_i - \alpha)\,(\mu_i - T(\alpha)) = 0, \quad \text{also} \quad [\underline{\mu}, \bar{\mu}] \not\subseteq \langle \alpha, T(\alpha) \rangle.$$

Insbesondere ist der Temple-Quotient dem Einschließungssatz von Collatz überlegen:

$$\underline{\mu} \leqq T(\bar{\mu}) \leqq R_x \leqq T(\underline{\mu}) \leqq \bar{\mu}.$$

2. A ist normal

Wegen der fehlenden Symmetrie machen wir den allgemeineren Ansatz

$$L^* h := x^* h(A^*, A)\, x$$

für alle reellwertigen rationalen Funktionen $h(s, t)$, für die $h(A^*, A)$ existiert. Es gilt dann die folgende Variante von Satz 1.

Satz 2. *Ist $L^* h = 0$, so gibt es für alle $\kappa \in \mathbb{C}$ mindestens einen (u. U. von κ abhängigen) Eigenwert λ von A mit* $\mathrm{Re}\,(\kappa h(\bar{\lambda}, \lambda)) \leqq 0$.

Beweis. $x = \sum u_\lambda$ sei die Zerlegung von x nach den Eigenräumen von A. Wegen der Vertauschbarkeit von A und A^* und der Orthogonalität der Eigenräume ist dann

$$0 = L^* h = x^* h(A^*, A)\, x = \sum h(\bar{\lambda}, \lambda)\, u_\lambda^* u_\lambda.$$

Da wegen $x \neq 0$ mindestens ein $u_\lambda^* u_\lambda \neq 0$ ist, folgt der Satz aus der für beliebige $a_1, \ldots, a_n$, $\kappa \in \mathbb{C}$ gültigen Beziehung

$$(1) \qquad \sum_{i=1}^{n} a_i = 0 \Rightarrow \mathrm{Re}\,(\kappa a_i) \leqq 0 \quad \text{für ein} \quad i \in \{1, \ldots, n\}. \qquad \square$$

Die Existenzaussagen Nr. 1—3 gelten unverändert; anstelle von $h(t) = f(t)^2 - \varepsilon^2 g(t)^2$ benutzt man $h(s, t) = f(s) f(t) - \varepsilon^2 g(s)\, g(t)$. Ebenso gilt Nr. 8, aber mit

$$h(s, t) = (s - R_x)\,(t - R_x) - \varepsilon_x^2,$$

wobei jetzt

$$R_x = \frac{m_{01}}{m_{00}}, \quad \varepsilon_x^2 = \frac{m_{11}}{m_{00}} - \frac{m_{01} m_{10}}{m_{00}^2}, \quad m_{ik} = L^* s^i t^k = (A^i x)^* (A^k x).$$

Für $h(s, t) = t - \varepsilon$ (Nr. 4) ergibt sich, daß links von jeder Geraden durch R_x ein Eigenwert liegt, so daß R_x in der konvexen Hülle der Eigenwerte liegt. Da durch

$$\mathrm{Re}\,(\kappa(\lambda - \varepsilon)\,(\bar{\lambda} - \bar{\alpha})) = 0$$

gerade die Kreislinien durch α und ε beschrieben werden, ergibt der Ansatz

$$h(s, t) = (s - \bar{\varepsilon})\,(t - \alpha)$$

die Existenz eines Eigenwerts in jedem Kreis, der entweder α und den jetzt durch

$$T(\alpha) := \frac{m_{11} - \bar{\alpha} m_{01}}{m_{10} - \bar{\alpha} m_{00}}$$

definierten Temple-Quotient enthält (Wielandt 1948; $\triangleq$ Nr. 5), oder der alle μ_i enthält (Walker/Weston 1949; $\triangleq$ Nr. 7). Wieder sind die „Temple-Kreise" den „Collatz-Kreisen" überlegen; eine weitergehende Optimalitätsaussage wird in Wielandt 1949 hergeleitet. Der Ansatz $h(s,t)=\frac{t-\varepsilon}{t-\alpha}$ ($\triangleq$ Nr. 6) ergibt die Existenz eines Eigenwerts in jedem Kreis durch α und $\tau(\alpha)$ (wie vorher definiert); denn $\operatorname{Re}\left(\kappa\frac{\lambda-\varepsilon}{\lambda-\alpha}\right)=\frac{\operatorname{Re}\left(\kappa(\lambda-\varepsilon)(\bar\lambda-\bar\alpha)\right)}{|\lambda-\alpha|^2}$, so daß durch $\operatorname{Re}\left(\kappa\frac{\lambda-\varepsilon}{\lambda-\alpha}\right)\leqq 0$ ebenfalls Kreise durch α und ε gegeben sind.

3. A ist beliebig

Diesmal definieren wir für alle rationalen Funktionen $h(t)$, für die $h(A)$ existiert,

$$Th := \operatorname{sp} h(A) := \sum_{i=1}^{n} h(A)_{ii}.$$

Sind $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ die Eigenwerte von A in irgendeiner Reihenfolge, entsprechend ihrer Vielfachheit gezählt, so ist

$$Th=\sum_{i=1}^{n} h(\lambda_i);$$

dies läßt sich auch für transzendentes $h(t)$ als Definition von Th gebrauchen. Aus (1) erhält man sofort:

Satz 3. *Ist $Th=0$, so gibt es für alle $\kappa\in\mathbb{C}$ einen Eigenwert von A mit* $\operatorname{Re}(\kappa h(\lambda))\leqq 0$.

Da für das charakteristische Polynom

$$p(t):=\det(tI-A)$$

die Beziehung

$$\log|p(t)|=\sum_i \log|t-\lambda_i| \tag{2}$$

gilt, ergibt sich im Spezialfall $h(t):=\log\frac{1}{\varepsilon}\left|\frac{t-\alpha}{t-\beta}\right|$ aus Satz 3:

Folgerung 1. Für beliebige $\alpha,\beta\in\mathbb{C}$ mit $|p(\alpha)|<|p(\beta)|$ liegt mindestens ein Eigenwert λ von A im Kreis

$$\left|\frac{\lambda-\alpha}{\lambda-\beta}\right|\leqq\varepsilon:=\sqrt[n]{\left|\frac{p(\alpha)}{p(\beta)}\right|}<1;$$

das ist ein Kreis, dessen Mittelpunkt μ und Radius ρ durch

$$\mu:=\frac{\alpha-\varepsilon^2\beta}{1-\varepsilon^2},\qquad \rho:=\frac{\varepsilon(\alpha-\beta)}{1-\varepsilon^2}$$

gegeben sind.

Für $\beta \to \alpha$ erhält man im Grenzwert einen Kreis um α mit Radius $n\left|\frac{p(\alpha)}{p'(\alpha)}\right|$; daß dieser Kreis eine Nullstelle des charakteristischen Polynoms p enthält, folgt auch aus einem Satz von Fekete (1923). Für Polynome war allerdings schon früher ein schärferes Ergebnis dieser Art bekannt, das wir aus Satz 3 mit $h(t) := \frac{t-\varepsilon}{t-\alpha}$ durch Differentiation von (2) bekommen:

Folgerung 2 (vgl. Laguerre 1880). Es sei $\alpha \in \mathbb{C}$. Dann liegt in jedem Kreis, der α und

$$\alpha - \frac{n}{\operatorname{sp}(\alpha I - A)^{-1}} = \alpha - n\frac{p(\alpha)}{p'(\alpha)}$$

enthält, mindestens ein Eigenwert von A.

Die Schranken in Folgerung 1 und 2 sind gut, falls α eine gute Näherung für einen einfachen Eigenwert ist. Genauere Schranken (insbesondere für mehrfache Eigenwerte) kann man mit dem Ansatz $h(t) = \frac{(t-\varepsilon_1)(t-\varepsilon_2)}{(t-\alpha)^2}$ erhalten; die Formeln werden aber wesentlich komplizierter.

4. Globale Schranken

Sie erhält man ebenfalls aus Satz 3. Der Einfachheit halber betrachten wir hier nur den Fall reeller symmetrischer Matrizen. Wir setzen dazu

$$s_i := \operatorname{tr} A^i;$$

insbesondere gilt dann

$$s_0 = n, \quad s_1 = \sum_i a_{ii}, \quad s_2 = \sum_{i,k} a_{ik}^2.$$

Mit den Abkürzungen

$$m := \frac{s_1}{s_0}, \quad s^2 := \frac{s_2 s_0 - s_1^2}{s_0^2} \geqq 0 \text{ (Cauchy-Schwarz!)}$$

ist dann

$$s_0 = n, \quad s_1 = mn, \quad s_2 = (m^2 + s^2)\, n,$$

und wir erhalten für $h(t) := (t-\alpha)^2 - \varepsilon^2$ bzw. $(t-m)^2 - s^2$, bzw. $(t-\varepsilon)(t-\alpha)$:

Folgerung 3. Sei $\alpha \in \mathbb{R}$. Dann gibt es einen Eigenwert λ von A mit

$$|\lambda - \alpha| \leqq \sqrt{s^2 + (\alpha - m)^2};$$

insbesondere gibt es einen Eigenwert λ von A mit

$$|\lambda - m| \leqq s.$$

Folgerung 4. Für alle $\alpha \in \mathbb{R}$ liegt zwischen α und $Q(\alpha) := \frac{s_2 - s_1\alpha}{s_1 - s_0\alpha}$ mindestens ein Eigenwert von A.

Aber es geht noch viel besser:

Satz 4. *Es seien $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, $\alpha+\beta \geqq 0$. Dann liegen im Intervall $[m-\alpha, m+\beta]$ mindestens $i_{\alpha\beta} := \left\lceil \frac{4n(\alpha\beta - s^2)}{(\alpha+\beta)^2} \right\rceil$ Eigenwerte von A, und in den Intervallen $[m-\alpha, \infty)$ und $(-\infty, m+\alpha]$ jeweils mindestens $i_\alpha := \left\lceil \frac{n\alpha^2}{\alpha^2+s^2} \right\rceil$ Eigenwerte von A (gezählt entsprechend ihrer Vielfachheit). Dabei bezeichnet $\lceil q \rceil$ die kleinste ganze Zahl $\geqq q$.*

Beweis. Enthält $[m-\alpha, m+\beta]$ genau i Eigenwerte, so gilt mit $a=m-\alpha$, $b=m+\beta$ die Beziehung

$$\begin{aligned} 0 &\leqq \sum_{a<\lambda<b} \left(\lambda - \frac{a+b}{2}\right)^2 + \sum_{\lambda \leqq a} (\lambda-a)(\lambda-b) + \sum_{\lambda \geqq b} (\lambda-a)(\lambda-b) \\ &= s_2 - (a+b)\, s_1 + \left(\frac{a+b}{2}\right)^2 i + ab(s_0 - i). \end{aligned}$$

Daher ist $i \geqq \frac{4n(\alpha\beta - s^2)}{(\alpha+\beta)^2}$, wegen der Ganzzahligkeit von i also $i \geqq i_{\alpha\beta}$. Das Übrige folgt entsprechend. □

Folgerung 5 (Wolkowicz/Styan 1980). Die Eigenwerte von A seien

$$\bar{\lambda} = \lambda_1 \geqq \lambda_2 \geqq \cdots \geqq \lambda_n = \underline{\lambda}.$$

Dann gilt

$$m + \frac{s}{\sqrt{n-1}} \leqq \bar{\lambda} \leqq m + \sqrt{n-1}\, s, \tag{3}$$

$$m - \sqrt{n-1}\, s \leqq \underline{\lambda} \leqq m - \frac{s}{\sqrt{n-1}}, \tag{4}$$

$$m - \sqrt{\frac{i-1}{n-i}}\, s \leqq \lambda_i \leqq m + \sqrt{\frac{n-1-i}{i+1}}\, s \quad \text{für} \quad 1 < i < n. \tag{5}$$

Beweis. Es gilt $0 \leqq \sum_\lambda (\lambda - \underline{\lambda})(\bar{\lambda} - \lambda) = (m - \underline{\lambda})(\bar{\lambda} - m) - s^2$ und

$$\begin{aligned} 0 \leqq \frac{1}{n} \sum_{l \neq i} (\lambda_l - q) &= s_2 - 2qs_1 + q^2 s_0 - (\lambda_i - q)^2 \\ &= s_2 - \lambda_i^2 - 2q(s_1 - \lambda_i) + q^2(s_0 - 1). \end{aligned}$$

Für $q = \frac{s_1 - \lambda_i}{s_0 - 1}$ ergibt sich daraus $(\lambda_i - m)^2 \leqq (n-1)\, s^2$ für alle i. Daraus folgen (3) und (4). (5) folgt durch Optimierung von α und β in Satz 4. □

Zum Schluß sei bemerkt, daß Lehmann 1966 vorgegebene lokale Schranken mit der Kenntnis von s_0, s_1, s_2 verbessert.

Referenzen

[1] *F. L. Bauer* und *A. S. Householder*, Moments and characteristic roots, Numer. Math. **2** (1960), 42—53.
[2] *L. Collatz*, Einschließungssatz für die charakteristischen Zahlen von Matrizen, Math. Z. **48** (1942), 221—226.
[3] *M. Fekete*, Analoga zu den Sätzen von Rolle und Bolzano für komplexe Polynome und Potenzreihen mit Lücken, Jahresber. DMV **32** (1923), 299—306.
[4] *F. Goerisch* und *J. Albrecht*, Eine einheitliche Herleitung von Einschließungssätzen für Eigenwerte, erscheint demnächst.
[5] *E. Kreyszig*, Die Einschließung von Eigenwerten hermitescher Matrizen beim Iterationsverfahren, ZAMM **34** (1954), 459—469.
[6] *E. Kreyszig*, Zur Einschließung von Eigenwerten hermitescher Matrizen beim Zweischrittverfahren, ZAMM (1979), 655—656.
[7] *N. Krylov* und *N. Bogoljubov*, Bull. Acad. Sci. USSR, Classe phys. math. Leningrad **471** (1929).
[8] *E. N. Laguerre*, in: Œuvres de Laguerre.'1, Paris 1880, 56—63.
[9] *N. J. Lehmann*, Zur Verwendung optimaler Eigenwerteingrenzungen bei der Lösung symmetrischer Matrizenaufgaben, Numer. Math. **8** (1966), 42—55.
[10] *P.-O. Löwdin*, Studies in perturbation theory. IV, Solution of eigenvalue problem by projection operator formalism, J. Math. Phys. **3** (1962), 969—982.
[11] *J. W. Rayleigh*, On the calculation of the frequency of vibration of a system in its gravest mode, Philos. Mag. **47** (1899), 556—572.
[12] *J. Stoer* und *R. Bulirsch*, Einführung in die numerische Mathematik. II, Berlin-Heidelberg-New York 1973.
[13] *F. Stummel* und *K. Hainer*, Praktische Mathematik, Stuttgart 1971.
[14] *G. Temple*, The computation of characteristic numbers and characteristic functions, Proc. London Math. Soc. (2) **29** (1929), 257—280.
[15] *A. G. Walker* und *J. D. Weston*, Inclusion theorems for the eigenvalues of a normal matrix, J. London Math. Soc. **24** (1949), 28—31.
[16] *D. H. Weinstein*, Modified Ritz methods, Proc. Nat. Acad. Sc. USA **20** (1934), 529—532.
[17] *H. Wielandt*, Ein Einschließungssatz für charakteristische Wurzeln normaler Matrizen, Arch. Math. **1** (1948), 348—352.
[18] *H. Wielandt*, Die Einschließung von Eigenwerten normaler Matrizen, Math. Annalen **121** (1949), 234—241.
[19] *H. Wolkowicz* und *G. P. H. Styan*, Bounds for eigenvalues using traces, Lin. Alg. Appl. **29** (1980), 471—506.

Institut für Angewandte Mathematik, Universität Freiburg i. Br., D-7800 Freiburg i. Br.

Eingegangen 1. März 1984