

Σύνοψη

Η παρούσα εργασία πραγματεύεται τις μεθόδους υποχώρων Krylon για την επίλυση μη συμμετρικών πολυωνυμικών προβλημάτων ιδιοτιμών. Η δομή της εργασίας είναι ως εξής: Στο πρώτο κεφάλαιο παρατίθενται βασικές εισαγωγικές έννοιες από τις περιοχές της Γραμμικής Άλγεβρας και της Ανάλυσης Πινάκων. Στο δεύτερο κεφάλαιο εισάγεται το θεωρητικό πλαίσιο των προβολικών διαδικασιών, διαδικασιών τύπου Rayleigh-Ritz για την προσέγγιση της ιδιοπληροφορίας στην περίπτωση των γραμμικών ιδιο-προβλημάτων και πραγματοποιείται μια εισαγωγή στις θεωρητικές ιδιότητες των υποχώρων Krylon. Έπειτα περιγράφεται η κατασκευή της διαδικασίας Arnoldi ακολουθούμενη από την μέθοδο Arnoldi, στην συνέχεια παρουσιάζονται δύο σχήματα επανεκκίνησης, το σχήμα Implicit επανεκκίνησης για την διαδικασία Arnoldi και το σχήμα Krylon-Schur για διασπάσεις Krylon. Τέλος, παρατίθεται η μη συμμετρική εκδοχή της διαδικασίας Lanczos. Το τρίτο κεφάλαιο επικεντρώνεται στις διαδικασίες και μεθόδους τύπου Arnoldi για την επίλυση των πολυωνυμικών προβλημάτων ιδιοτιμών, επεκτείνοντας το θεωρητικό πλαίσιο που είχε αναπτυχθεί στο δεύτερο κεφάλαιο. Πιο αναλυτικά, εισάγονται οι γενικευμένοι υποχώροι Krylon και η εφαρμογή των ορθών προβολικών διαδικασιών σε αυτούς. Έπειτα γίνεται μια σύντομη εισαγωγή στην γραμμικοποίηση πολυωνυμικών προβλημάτων, κατασκευάζονται οι γενικευμένες μέθοδοι Arnoldi. Εφαρμόζοντας την τεχνική των refined προβολών κατασκευάζονται οι refined γενικευμένες μέθοδοι Arnoldi. Ολοκληρώνοντας επεκτείνεται το implicit σχήμα επανεκκίνησης δίνοντας έμφαση στην στρατηγικές επιλογής των τιμών φίλτρου.

Abstract

This thesis presents Krylov methods utilized for approximating solutions of non-symmetric, polynomial, eigenvalue problems. The first chapter consists of introductory concepts from the fields of Linear Algebra and Matrix Analysis. The second chapter introduces the theoretical framework of projection methods, Rayleigh-Ritz method and some useful properties of the Krylov subspaces. The rest of the chapter describes the construction of the Arnoldi process and the Arnoldi method followed by the introduction of the implicit restarted schema and the krylov-Schur method. The final part constructs the non-Hermitian Lanczos method. The third chapter generalizes the aforementioned Arnoldi methods for the non-symmetric, polynomial, eigenvalue problems. Firstly, the theoretical framework of projection methods and Krylov subspaces is expanded to include the generalized Krylov subspaces. The rest of the third chapter constructs the generalized Arnoldi method, refined generalized Arnoldi method and finally the implicit restarted schema is expanded to the polynomial eigenvalue problem.

Ευχαριστίες

Ολοκληρώνοντας την εκπόνηση της διπλωματικής εργασίας μου θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέπων καθηγητή μου, κύριο Παναγιώτη Ψαρράκο, για τις υποδείξεις του, ενδιαφέρον του και την επιστημονική του καθοδήγηση καθ' όλη τη διάρκεια της εκπόνησης της παρούσας εργασίας. Επιπλέον, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για την στήριξη, συμπαράσταση και κατανόηση καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών μου.

Περιεχόμενα

1	Στοιχεία Γραμμικής Άλγεβρας	8
1	Διανυσματικοί Χώροι	8
2	Πίνακες	10
3	Διανύσματα	12
4	(Χρήσιμες) Κλάσεις Πινάκων.	14
5	Διαμερίσεις Πινάκων.	16
6	Νόρμες Διανυσμάτων και οι Ιδιότητες τους.	18
7	Νόρμες Πινάκων	20
8	Υπόχωροι και Ιδιότητες	22
9	Το Πρόβλημα Ιδιοτιμών	24
10	Παραγοντοποίηση QR	26
	10.1 Μέθοδος QR	28
2	Μέθοδοι Υποχώρων Krylov	30
1	Προβολικές Διαδικασίες	30

1.1	Ορθές Προβολικές Διαδικασίες	31
1.2	Πλάγιες Προβολικές Διαδικασίες	33
2	Υπόχωροι Krylon και Ιδιότητες	35
3	Μέθοδος Arnoldi	36
3.1	Διαδικασία Arnoldi	37
3.2	Μέθοδος Arnoldi	41
3.3	Arnoldi με Επανεκκίνηση	43
4	Σχήμα Επανεκκίνησης Krylon-Schur	47
4.1	Μέθοδος Krylon-Schur	48
5	Μέθοδος Lanczos	52
5.1	Μέθοδος Lancos με Αμφιορθογωνιότητα	52
3	Γενικευμένες Μεθόδοι Krylon Τύπου Arnoldi	59
1	Πολυωνυμικά Προβλήματα Ιδιοτιμών	59
2	Γενικευμένοι Υπόχωροι Krylon	60
3	Ορθή προβολική Διαδικασία PEPs	62
4	Γραμμικοποίηση	64
5	Διαδικασίες GSOAR και GAR	66
6	Refined Μέθοδος GSOAR και GAR	73
7	Γενικευμένο Σχήμα Implicit Επανεκκίνησης	75
7.1	Στρατηγικές Exact και Implicit shifts	77
8	Μέθοδος IRGAR	79
	Βιβλιογραφία	82

Ευρετήριο Αλγορίθμων

1	Ορθοκανονικοποίηση Gram-Schmidt	27
2	QR	28
3	Shifted-QR	28
4	Διαδικασία Rayleigh-Ritz	32
5	Διαδικασία Rayleigh-Ritz (Πλάγιων Προβολικών Μεθόδων) . . .	34
6	Διαδικασία Arnoldi	38
7	Μέθοδος Arnoldi	41
8	Μέθοδος Implicitly Restarted Arnoldi	47
9	Μέθοδος Biorthogonal Lanczos	53
10	Διαδικασία Rayleigh-Ritz (PEP)	63
11	Διαδικασία GSOAR	67
12	Διαδικασία GAR	68
13	Μέθοδος RGAR	74
14	Implicit Σχήμα Επανεκκίνησης GAR	79

Κεφάλαιο 1

Στοιχεία Γραμμικής Άλγεβρας

Σε αυτό το εισαγωγικό κεφάλαιο θα παρατεθούν βασικοί ορισμοί των θεμελιωδών στοιχείων που απαρτίζουν τόσο τους αλγόριθμους που θα αναπτυχθούν στα επόμενα κεφάλαια άλλα και την αντίστοιχη θεωρία που τους συνοδευεί.

1 Διανυσματικοί Χώροι

Ορισμός 1.1. (Διανυσματικός Χώρος) Εστώ S ένα μη κενό σύνολο και F το σώμα των πραγματικών ή μιγαδικών αριθμών. Θεωρούμε την εσωτερική πράξη της πρόσθεσης $+$: $S \times S \rightarrow S$ και την εξωτερική πράξη του βαθμωτού πολλαπλασιασμού \cdot : $F \times S \rightarrow S$. Τότε η τριάδα $(S, +, \cdot)$ καλείται *διανυσματικός* (ή *γραμμικός*) *χώρος* (*vector/linear space*) αν ικανοποιούνται οι παρακάτω ιδιότητες:

Ως προς την πράξη "+":

- i) (Αντιμεταθετικότητα) $u + v = v + u, \forall u, v \in S$.

ii) (Προσεταιριστικότητα) $u + (v + w) = (u + v) + w, \forall u, v, w \in S.$

iii) (Ουδέτερο στοιχείο πρόσθεσης) υπάρχει $0_S \in S$ ώστε,

$$u + 0_S + u = 0_S + u = u, \forall u \in S.$$

iv) (Αντίθετο στοιχείο) Για κάθε $u \in S$, υπάρχει $(-u) \in S$ ώστε,

$$u + (-u) = (-u) + u = 0_S.$$

Ως προς την πράξη " \cdot ":

i) $\lambda(u + v) = \lambda u + \lambda v, \forall \lambda \in F, \forall u, v \in S.$

ii) $(\lambda +_F \mu)u = \lambda u + \mu u, \lambda, \mu \in F, \forall u \in S.$ ¹

iii) $\lambda(\mu u) = (\lambda \cdot_F \mu)u, \lambda, \mu \in F, \forall u \in S.$ ²

iv) (Ουδέτερο στοιχείο πολλαπλασιασμού) $1 \cdot u = u \cdot 1 = u, \forall u \in S.$

Πιο συγκεκριμένα, αν $F = \mathbb{R}$ (ή \mathbb{C}) η τριάδα $(S, +, \cdot)$ καλείται *πραγματικός* (ή *μγαδικός*) *διανυσματικός χώρος*, για λόγους απλότητας λέμε ότι ο S είναι *διανυσματικός χώρος*. Τα στοιχεία ενός διανυσματικού χώρου καλούνται *διανύσματα*.

Ορισμός 1.2. (Υπόχωρος) Έστω S διανυσματικός χώρος και ένα μη κενό υποσύνολο U του S . Το U καλείται (*γραμμικός*) *υπόχωρος* αν είναι *κλειστο* ως προς την πρόσθεση και τον βαθμωτό πολλαπλασιασμό, *ισοδύναμα*, για κάθε $u, v \in U$ και $\lambda \in \mathbb{R}$ ή (\mathbb{C}) τότε $u + v \in U$ και $\lambda u \in U$.

¹όπου $+_F : F \times F \rightarrow F.$

²όπου $\cdot_F : F \times F \rightarrow F.$

Ορισμός 1.3. (Γραμμική θήκη) Έστω S διανυσματικός χώρος, αν $\emptyset \neq K \subset S$. Ορίζουμε ως γραμμική θήκη του του K τον μικρότερο γραμμικό υπόχωρο του S που περιέχει το K και θα συμβολίζεται ως $\text{span}(K)$.

Με αφετηρία τον παραπάνω ορισμό είναι εύκολο να αποδειχθεί μια εναλλακτική, πιο πρακτική έκφραση για την γραμμική θήκη ενός υποσυνολού K κάποιου διανυσματικού χώρου S .

Πρόταση 1.1. Έστω S διανυσματικός χώρος, αν $\emptyset \neq K \subset S$. Τότε

$$\text{span}(K) = \left\{ \sum_{i=1}^n \lambda_i u_i \mid u_i \in S, \lambda_i \in \mathbb{R}, \forall i = 1, 2, \dots, n \right\}.$$

Σχόλιο. Τα στοιχεία της μορφής $\sum \lambda_i u_i$ του διανυσματικού χώρου S καλούνται *γραμμικοί συνδυασμοί* των στοιχείων u_i .

Ορισμός 1.4. Έστω S διανυσματικός χώρος. Το $B \subset S$ καλείται *βάση* του S , αν B γραμμικώς ανεξάρτητο³.

Σχόλιο. Το πλήθος των στοιχείων μιας βάσης καλείται *διάσταση* και συμβολίζεται ως $\dim(\cdot)$.

2 Πίνακες

Ορισμός 1.5. (Πίνακας) Έστω \mathbb{C} (ή \mathbb{R}) το σύνολο των μιγαδικών (ή πραγματικών) αριθμών. Ένας $(m \times n)$ διαστάσεων *μιγαδικός (ή πραγματικός) πίνακας* A θα καλείται *ορθογώνια διάταξη* στοιχείων $a_{ij} \in \mathbb{C}$ (ή \mathbb{R}) της

³ $\forall \lambda_i \in \mathbb{R}, u_i \in B, i = 1, 2, \dots, n$. Τότε, $\sum_{i=1}^n \lambda_i u_i = 0 \Leftrightarrow \lambda_1 = \lambda_2 = \dots = 0$.

μορφής:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad i = 1, \dots, m \quad j = 1, \dots, n.$$

όπου m είναι το πλήθος των γραμμών, n το πλήθος των στηλών του A .

Το σύνολο όλων των $(m \times n)$ μιγαδικών (ή πραγματικών) πινάκων συμβολίζεται ως $\mathbb{C}^{m \times n}$ (ή $\mathbb{R}^{m \times n}$).

Πράξεις Πινάκων

Πρόσθεση Πινάκων. $+$: $F^{m \times n} \times F^{m \times n} \rightarrow F^{m \times n}$ (εσωτερική πράξη). Για πίνακες $A, B \in F^{m \times n}$, υπάρχει $C \in F^{m \times n}$ τέτοιο ώστε,

$$C = A + B,$$

ή ισοδύναμα κατά σημείο,

$$c_{ij} = a_{ij} +_F b_{ij}, \quad i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n.$$

Βαθμωτός Πολλαπλασιασμός. \cdot : $F \times F^{m \times n} \rightarrow F^{m \times n}$ (εξωτερική πράξη). Για πίνακα $B \in F^{m \times n}$, $a \in F$, υπάρχει $C \in F^{m \times n}$ τέτοιο ώστε,

$$C = a \cdot B,$$

ή ισοδύναμα κατα σημείο,

$$c_{ij} = a \cdot_F b_{ij}, \quad i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n.$$

Το σύνολο $F^{m \times n}$ εφοδιασμένο με τις πράξεις της πρόσθεσης πινάκων και του βαθμωτού πολλαπλασιασμού ικανοποιεί τις ιδιότητες του Ορισμού 1.1 συνεπώς αποτελεί διανυσματικό χώρο.

Γινόμενο Πινάκων. $F^{m \times n} \times F^{n \times k} \rightarrow F^{m \times k}$. Για πίνακες $A \in F^{m \times n}$, $B \in F^{n \times k}$ υπάρχει $C \in F^{m \times k}$ ώστε,

$$C = AB,$$

ή ισοδύναμα κατα σημείο,

$$c_{ij} = \sum_{l=1}^n a_{il}b_{lj} \quad i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, k.$$

Αναστροφοσυζηγής Πίνακα. Έστω πίνακας $A \in F^{m \times n}$, $A = a_{ij}$. Ο ανάστροφοσυζηγής του πίνακα A συμβολίζεται ως A^H , και ορίζεται ως,

$$(A^H)_{ij} = \bar{a}_{ji} \quad \forall i, j \quad i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n.$$

Όπου με \bar{a} συμβολίζουμε τον συζυγή (μιγαδικό) αριθμό του a .

3 Διανύσματα

Έστω \mathbb{C}^n διανυσματικός χώρος για $u \in \mathbb{C}^{1 \times n}$, το u καλείται *διάνυσμα-γραμμή* ενώ για $u \in \mathbb{C}^{n \times 1}$, το u καλείται *διάνυσμα-στήλη*. Ομοίως τα παραπάνω ισχύουν για $u \in \mathbb{R}^n$.

Πράξεις Διανυσμάτων

Πρόσθεση Διανυσματών. $+$: $F^n \times F^n \rightarrow F^n$ (εσωτερική πράξη). Για $u, v \in F^n$, υπάρχει $w \in F^n$ τέτοιο ώστε,

$$w = u + v,$$

ή ισοδύναμα κατα σημείο,

$$w_i = u_i + v_i, \quad \forall i = 1, 2, 3, \dots, n.$$

Βαθμωτός Πολλαπλασιασμός. \cdot : $F \times F^n \rightarrow F^n$ (εξωτερική πράξη). Για $u \in F^n, a \in F$, υπάρχει $w \in F^n$, τέτοιο ώστε,

$$w = au,$$

ή ισοδύναμα κατα σημείο,

$$w_i = au_i, \quad \forall i = 1, 2, 3, \dots, n.$$

Εσωτερικό Γινόμενο Διανυσμάτων Έστω S ένας διανυσματικός χώρος. Ορίζουμε ως εσωτερικό γινόμενο την πράξη $\langle \cdot, \cdot \rangle : S \times S \rightarrow F$ το αποτέλεσμα της οποίας είναι βαθμωτό μέγεθος και ικανοποιεί τις παρακάτω ιδιότητες:

i) $\langle x, y \rangle = \langle \bar{y}, x \rangle, \quad \forall x, y \in S.$

ii) $\langle x + \lambda y, z \rangle = \langle x, z \rangle + \lambda \langle y, z \rangle, \quad \bar{\lambda} \in \mathbb{C}, \quad \forall x, y, z \in S.$

iii) $\langle x, x \rangle \geq 0$, αν $\langle x, x \rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0$.

Ειδικότερα, όταν ο χώρος είναι ο F^n , τότε για κάθε $u, v \in F^n$ με $u = [u_1 \ u_2 \ \dots \ u_n]^T$ και $v = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n]^T$ το συνήθες εσωτερικό γινόμενο ορίζεται ως:

$$\langle u, v \rangle = u^H v,$$

ή ισοδύναμα κατά σημείο,

$$\langle u, v \rangle = \sum_{i=1}^n \bar{u}_i v_i.$$

4 (Χρήσιμες) Κλάσεις Πινάκων.

Αραιοί Πίνακες. Οι αραιοί πίνακες αποτελούν μια ιδιαίτερα χρήσιμη κλάση πινάκων που αξιοποιείται στις μεθόδους της αριθμητικής γραμμικής άλγεβρας λόγω της δομής τους. Ένας πίνακας χαρακτηρίζεται ως αραιός (sparse), αν έχει ελάχιστα μη μηδενικά στοιχεία.

Ταινιοειδής (ή λωριδοειδής) Πίνακας. Οι ταινιοειδείς πίνακες (banded matrices) αποτελούν υποκατηγορία των αραιών πινάκων.

Ορισμός 1.6. (Ταινιοειδής Πίνακας) Έστω πίνακας $A \in F^{m \times n}$, $A = a_{ij}$.

Ο A καλείται ταινιοειδής αν,

$$a_{ij} = \begin{cases} 0 & , \text{σταν } i > j + u. \\ \text{μη μηδενικό στοιχείο} & , \text{σταν } i < j + l. \end{cases}$$

Το $u \in \mathbb{N}$ καλείται *άνω εύρος ζώνης*, ενώ το $l \in \mathbb{N}$ καλείται *κάτω εύρος ζώνης*.

Υποπεριπτώσεις Ταινιοειδών Πινάκων.

Ορισμός 1.7. (Άνω (ή Κάτω) Τριγωνικός Πίνακας) Έστω $A \in F^{m \times n}$, τετραγωνικός⁴ ταινιοειδής πίνακας. Ο A θα καλείται *άνω (ή κάτω) τριγωνικός*, αν $l = 0, u = n - 1$ (ή $l = m - 1, u = 0$).

Ορισμός 1.8. (Διαγώνιος) Έστω $A \in F^{n \times n}$ τετραγωνικός ταινιοειδής πίνακας. Ο A θα καλείται *διαγώνιος*, αν $l = u = 0$. Οι διαγώνιοι πίνακες θα συμβολίζονται ως $A = \text{diag}(a_{11}, \dots, a_{nn})$

Ορισμός 1.9. (Άνω (ή Κάτω) Hessenberg Πίνακας) Έστω $A \in F^{n \times n}$ ταινιοειδής πίνακας. Ο A θα καλείται *άνω (ή κάτω) Hessenberg* πίνακας, αν $l = 1, u = n - 1$ (ή $l = m - 1, u = 1$)

Άλλες κλάσεις τετραγωνικών πινάκων

Ορισμός 1.10. Έστω $A \in F^{n \times n}, A = (a_{ij})$. Ο A καλείται:

- i *Συμμετρικός πίνακας*, αν $A^T = A$, ή ισοδύναμα, $a_{ji} = a_{ij}$.
- ii *Αντίσυμμετρικός πίνακας*, αν $A^T = -A$, ή ισοδύναμα, $a_{ji} = -a_{ij}$.
- iii *Ερμιτιανός πίνακας*, αν $A^H = A$, ή ισοδύναμα, $\bar{a}_{ji} = a_{ij}$.
- iv *Κανονικός πίνακας*, αν $A^H A = A A^H$.
- v *Ορθομοναδιαίος πίνακας*, αν $A^H A = A A^H = I$.

⁴Ένας πίνακας καλείται *τετραγωνικός* όταν το πλήθος των στηλών ταυτίζεται με το πλήθος των γραμμών του.

5 Διαμερίσεις Πινάκων.

Οι διαμερίσεις πινάκων αποτελούν ένα ιδιαίτερο χρήσιμο εργαλείο για την απλούστερη παρουσίαση αλγορίθμων.

Διαμερίσεις Γραμμών. Έστω πίνακας $A \in F^{m \times n}$:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}. \quad (1.1)$$

Αν θεωρήσουμε διανύσματα-γραμμές της μορφής:

$$a_1 = [a_{11} \ \cdots \ a_{1n}], a_2 = [a_{12} \ \cdots \ a_{2n}], \dots, a_m = [a_{m1} \ \cdots \ a_{mn}].$$

Τότε ο πίνακας της σχέσης (1.1) μπορεί να γραφθεί στην μορφή:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hline a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ \hline a_m \end{bmatrix}.$$

Η παραπάνω έκφραση καλείται *διαμέριση γραμμών* του πίνακα A .

Διαμερίσεις Στηλών. Με ανάλογο τρόπο πραγματοποιείται και η διαμέριση σε στήλες ενός πίνακα. Έστω ο πίνακας της σχέσης (1.1) και τα διανύσματα στήλες:

$$a_1 = \begin{bmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{bmatrix}, a_2 = \begin{bmatrix} a_{12} \\ \vdots \\ a_{m2} \end{bmatrix}, \dots, a_n = \begin{bmatrix} a_{1n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{bmatrix}.$$

Τότε ο πίνακας μπορεί να γραφθεί στην μορφή:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} = \left[\begin{array}{c|c|c} a_1 & a_2 & \dots & a_m \end{array} \right]. \quad (1.2)$$

Η παραπάνω έκφραση καλείται *διαμέριση στηλών* του πίνακα A . Οι προαναφερθέν διαμερίσεις αποτελούν ειδικές περιπτώσεις της block διαμέρισης ενός πίνακα.

Block διαμέριση πίνακα. Έστω πίνακας $A = (a_{ij}), A \in F^{m \times n}$. Θεωρούμε $k_1, \dots, k_r \in \mathbb{N}$, ώστε $\sum_{i=1}^r k_i = m$ και $l_1, \dots, l_s \in \mathbb{N}$, ώστε $\sum_{i=1}^s l_i = n$.

Τα blocks σχηματίζονται απο την ταυτόχρονη διαμέριση σε γραμμές και στήλες του αρχικού πίνακα A . Διαδοχικά κάθε ένας απο τους αριθμούς k_1, \dots, k_r δηλώνει το πλήθος των γραμμών που μετέχουν σε κάθε διαδοχική διαμέριση γραμμών, κατ'αντιστοιχία κάθε ένας από τους αριθμούς l_1, \dots, l_s δηλώνει το πλήθος των στηλών που μετέχουν σε κάθε διαδοχική διαμέριση στηλών. Έτσι προκύπτει:

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1s} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{r1} & \dots & A_{rs} \end{bmatrix}.$$

Τα blocks $A_{kl} \in F^{\mu_k \times \mu_l}$ καλούνται $(r \times s)$ block διαμερίσεις του A .

Σχόλιο. Τα blocks ως πίνακες μπορούν να ανήκουν σε οποιαδήποτε κλάση πινάκων.

Αντίστροφος Πίνακας

Ορισμός 1.11. (Αντιστρέψιμος Πίνακας) Έστω $A \in F^{n \times n}$. Ο A καλείται *αντιστρέψιμος*, αν υπάρχει πίνακας $B \in F^{n \times n}$ ώστε,

$$AB = BA = I,$$

όπου I ο μοναδιαίος $(n \times n)$ πίνακας. Ο πίνακας B καλείται *αντίστροφος* του A και συμβολίζεται ως A^{-1} .

Πρόταση 1.2. Αν υπάρχει ο αντίστροφος ενός πίνακα, είναι μοναδικός.

6 Νόρμες Διανυσμάτων και οι Ιδιότητες τους.

Ορισμός 1.12. (Νόρμα Διανύσματος) Έστω ο διανυσματικός χώρος F^n . Η απεικόνιση $\|\cdot\|: F^n \rightarrow \mathbb{R}$ καλείται *νόρμα διανύσματος*, αν ικανοποιεί τις παρακάτω ιδιότητες:

- i) $\|u\| = 0 \Leftrightarrow u = 0$.
- ii) $\|u\| \geq 0, \forall u \in S$.
- iii) $\|\lambda u\| = |\lambda| \cdot \|u\|, \forall \lambda \in \mathbb{R}, \forall u \in S$.

$$\text{iv) } \|u + v\| \leq \|u\| + \|v\|, \forall u, v \in S.$$

Ορισμός 1.13. Μια απεικόνιση που ικανοποιεί μονάχα τις ιδιότητες iii),iv) καλείται *ημι-νόρμα*.

Η νόρμα, όπως προκύπτει από τον ορισμό που δόθηκε παραπάνω, προσδίδει μια αφηρημένη έννοια απόστασης ή μεγέθους για τα διανύσματα ενός διανυσματικού χώρου εκφράζοντας την απόσταση αυτή ως στοιχεία του \mathbb{R} .

Για $u \in \mathbb{C}, u = [u_1 \ u_2 \ \dots \ u_n]^T$. Μία σημαντική κλάση διανυσματικών νορμών αποτελούν οι l_p -νόρμες, οι οποίες ορίζονται ως:

$$p \in \mathbb{N}, p \geq 1 \quad \|u\|_p = \left(|u_1| + |u_2| + \dots + |u_n| \right)^{\frac{1}{p}} = \left(\sum_{i=1}^n |u_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}.$$

Μεταξύ των l_p -νορμών οι πιο πρακτικές νόρμες είναι οι:

l_1 -νόρμα (ή νόρμα Manhattan ή 1-νόρμα),

$$p = 1, \quad \|u\|_1 = |u_1| + |u_2| + \dots + |u_n| = \sum_{i=1}^n |u_i|.$$

l_2 -νόρμα (ή Ευκλείδεια νόρμα ή 2-νόρμα),

$$p = 2, \quad \|u\|_2 = \left(|u_1|^2 + |u_2|^2 + \dots + |u_n|^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{i=1}^n |u_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

και καθώς $p \rightarrow \infty$ η ∞ -νόρμα που ορίζεται ως

$$\|x\|_\infty = \max \{ |x_1|, |x_2|, \dots, |x_n| \}.$$

7 Νόρμες Πινάκων

Αντίστοιχα με τον ορισμό της νόρμας διανυσμάτων έχουμε και τον ορισμό της νόρμας πινάκων.

Ορισμός 1.14. Έστω $F^{n \times n}$ ο χώρος των τετραγωνικών πινάκων. Η απεικόνιση $\|\cdot\|: F^{n \times n} \rightarrow F$ καλείται *νόρμα πινάκων*, αν είναι νόρμα (διανυσμάτων) στον χώρο $F^{n \times n}$ και επιπλέον ικανοποιεί την ιδιότητα:

$$(\text{Υποπολλαπλασιαστικότητα}) \forall A, B \in F^{n \times n} \quad \|\| \leq \|A\| \cdot \|B\|.$$

Μια σημαντική κλάση νορμών πινάκων είναι οι επαγόμενες νόρμες.

Ορισμός 1.15. (Επαγόμενη Νόρμα) Έστω οι διανυσματικοί χώροι F^m, F^n . Αν $\|\cdot\|_a, \|\cdot\|_b$ είναι μια νόρμα διανυσμάτων στον F^m, F^n αντίστοιχα, τότε η απεικόνιση $\|\cdot\|: F^{m \times n}$ καλείται *επαγόμενη νόρμα* και ορίζεται ως:

$$\begin{aligned} \|A\| &= \sup \left\{ \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \mid x \in F^n, x \neq 0 \right\} \\ &= \sup \{ \|Ax\| \mid x \in F^n, \|x\| \leq 1 \} \\ &= \sup \{ \|Ax\| \mid x \in F^n, \|x\| = 1 \}. \end{aligned}$$

Κατ'αντιστοιχία με τις l_p -νόρμες διανυσμάτων ορίζονται και οι l_p -νόρμες πινάκων. Πιο συγκεκριμένα, αν θεωρήσουμε έναν πίνακα $A = (a_{ij}) \in F^{n \times n}$ τότε οι l_p -νόρμες ορίζονται ως:

$$\|A\|_p = \left\{ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^p \right\}^{\frac{1}{p}}.$$

Με ιδιαίτερο ενδιαφέρον να παρουσιάζουν οι περιπτώσεις για $p = 1, 2, \infty$. Η l_2 -νόρμα (ή νόρμα *Frobenius*) επίσης ορίζεται ως εξής:

$$\|A\|_F = \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \text{trace}(A^H A),$$

όπου $\text{trace}(A)$ το γνωστό ίχνος του πίνακα.

Σχόλιο. Αν θεωρήσουμε μια διαμέριση στηλών ενός πίνακα $A \in F^{n \times n}$, έστω $A = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n]$ τότε $\|A\|_F = \sum_{i=1}^n \|a_i\|$.

Ιδιότητες νορμών

Πρόταση 1.3. Η νόρμα διανυσμάτων ή πινάκων είναι συνεχής απεικόνιση των στοιχείων του διανύσματος.

Η l_2 -νόρμα διανυσμάτων είναι ορθομοναδιαία αναλλοιώτη. Δηλαδή αν $U \in F^{n \times n}$ ορθομοναδιαίος πίνακας τότε για κάθε $v \in F^n$ ισχύει ότι,

$$\|Uv\|_2 = \|v\|_2.$$

Αντίστοιχα ισχύει ότι και η *νορμα-Frobenius* είναι ορθομοναδιαία αναλλοιώτη. Δηλαδή αν $U, V \in F^{n \times n}$ ορθομοναδιαίοι πίνακες τότε για κάθε $A \in F^{n \times n}$ ισχύει ότι,

$$\|UAV\|_F = \|A\|_F.$$

Θεώρημα 1.1. (Ισοδυναμία νορμών) Σε κάθε πεπερασμένης διαστάσης διανυσματικό χώρο S οποιεσδήποτε δύο νόρμες είναι ισοδύναμες. Δηλαδή αν $\|\cdot\|_a,$

$\|\cdot\|_b$ δύο νόρμες στον S τότε υπάρχουν σταθερές $c_1, c_2 > 0$ ώστε για κάθε $u \in S$,

$$c_1\|u\|_a \leq \|u\|_b \leq c_2\|u\|_a.$$

Ορισμός 1.16. Εστω ο διανυσματικός χώρος F^n , αν $u^{(k)} \in F^n$ ακολουθία διανυσμάτων και $\|\cdot\|$ νόρμα στον F^n . Θα λέμε ότι η ακολουθία συγκλίνει στο $u \in F^n$ αν

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|u^{(k)} - u\| = 0.$$

Άμεση συνέπεια της ισοδυναμίας νορμών, είναι ότι αν μια ακολουθία (διανυσμάτων) συγκλίνει ως προς μια νόρμα σε έναν πεπερασμένο διανυσματικό χώρο τότε συγκλίνει και προς οποιαδήποτε άλλη νόρμα.

8 Υπόχωροι και Ιδιότητες

Υπάρχουν κυρίως δύο υπόχωροι που σχετίζονται με έναν πίνακα $A \in F^{m \times n}$ αυτοί είναι ο πυρήνας και η εικόνα ενός πίνακα.

Ορισμός 1.17. (Πυρήνας) Έστω ο διανυσματικός χώρος $F^{m \times n}$. Αν $A \in F^{m \times n}$ τότε ο πυρήνας του A συμβολίζεται ως $\ker(A)$ και ορίζεται ως:

$$\ker(A) = \{x \in F^n \mid Ax = 0\}.$$

Ορισμός 1.18. (Εικόνα) Έστω ο διανυσματικός χώρος $F^{m \times n}$. Αν $A \in F^{m \times n}$ τότε η εικόνα του A συμβολίζεται ως $\text{Image}(A)$ (ή $\text{Im}(A)$) και ορίζεται ως:

$$\text{Image}(A) = \{Ax \mid x \in F^n\}.$$

Σχόλιο. Για έναν πίνακα $A \in F^{m \times n}$ θεωρούμε μια διαμέριση στηλών, έστω

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix},$$

τότε εύκολα προκύπτει ότι η εικόνα του A είναι ίση με την γραμμική θήκη των στηλών του.

Διαστάσεις υποχώρων. Η διάσταση της εικόνας ενός πίνακα A , καλείται βαθμός του πίνακα. Κατα συνέπεια του προηγούμενου σχόλιου είναι το μέγιστο πλήθος γραμμικά ανεξάρτητων στηλών του A .

Ένα σημαντικό αποτέλεσμα της γραμμικής άλγεβρας είναι το παρακάτω θεώρημα.

Θεώρημα 1.2. *Εστω διανυσματικός χώρος $F^{m \times n}$. Τότε για $A \in F^{m \times n}$ ισχύει:*

$$\text{rank}(A) + \dim(\ker(A)) = n.$$

Ολοκληρώνοντας, παρατίθεται ο ορισμός του αναλλοίωτου υπόχωρου.

Ορισμός 1.19. (Αναλλοίωτος Υπόχωρος) Έστω S διανυσματικός χώρος και U υπόχωρος του. Ο U καλείται *αναλλοίωτος* (υπό τετραγωνικό πίνακα A) αν

$$AS \in S.$$

Ορθογωνιότητα

Ορισμός 1.20. Έστω H χώρος με εσωτερικό γινόμενο $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Αν $U = \{u_i\}_{i \in I}$ ώστε:

$$\text{i) } u_i \perp u_j \Leftrightarrow \langle u_i, u_j \rangle = 0, \forall i, j \text{ με } i \neq j.$$

$$\text{ii) } \|u_i\| = 1, \forall i \in I.$$

Το σύνολο U καλείται *ορθοκανονικό*. Αν ικανοποιείται μονάχα η πρώτη ιδιότητα το σύνολο καλείται *ορθογώνιο*.

Σχόλιο. Από τον ορισμό έπεται ότι τα στοιχεία ενός ορθοκανονικού (ή ορθογώνιου συνόλου) είναι γραμμικώς ανεξάρτητα.

Ορισμός 1.21. (Πίνακας Προβολής) Έστω τετραγωνικός πίνακας $\mathcal{P} \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Ο πίνακας \mathcal{P} καλείται *πίνακας προβολής* αν ισχύει,

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}^2.$$

Αν επιπλέον ισχύει ότι,

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}^H,$$

τότε ο πίνακας \mathcal{P} καλείται *πίνακας ορθής προβολής*.

9 Το Πρόβλημα Ιδιοτιμών

Η πρώτη κλάση προβλημάτων είναι το *γραμμικό πρόβλημα ιδιοτιμών (Linear Eigenvalue Problem- LEP)*. Για πίνακα $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ζητείται ζεύγος (λ, x) το οποίο να ικανοποιεί την εξίσωση:

$$(A - \lambda I)x = 0. \tag{1.3}$$

Η τιμή λ είναι βαθμωτό μέγεθος και καλείται *ιδιοτιμή* του A και το διάνυσμα $0 \neq x \in \mathbb{C}^n$ που αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή λ καλείται *ιδιοδιάνυσμα* του A . Το σύνολο

$$\lambda(A) = \{c \in \mathbb{C} \mid \det(A - cI) = 0\}.$$

καλείται *φάσμα* του πίνακα A .

Το LEP αποτελεί ειδική περίπτωση της κλάσης του γενικευμένου προβλήματος ιδιοτιμών (**Generalized Eigenvalue Problem-GEP**). Για πίνακες $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ζητείται ζεύγος ιδιοτιμή-ιδιοδιανύσματος (λ, x) , $\lambda \in \mathbb{C}$, $0 \neq x \in \mathbb{C}^n$ ώστε να ικανοποιεί την εξίσωση:

$$(A - \lambda B)x = 0. \quad (1.4)$$

το αντίστοιχο φάσμα ορίζεται ως

$$\lambda(A, B) = \{c \in \mathbb{C} \mid \det(A - cB) = 0\}.$$

Τέλος, το **GEP** μπορεί και αυτό να γενικευθεί περαιτέρω στην κλάση του πολυωνυμικού προβλήματος ιδιοτιμών (**Polynomial Eigenvalue Problem-PEP**). Για πίνακες $A_0, A_1, \dots, A_d \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Ζητείται η εύρεση ζεύγους ιδιοτιμής-ιδιοδιανύσματος (λ, x) ώστε να ικανοποιούν την παρακάτω εξίσωση:

$$(\lambda^d A_d + \dots + \lambda A_1 + A_0)x = 0. \quad (1.5)$$

Συμβολικά μπορούμε να γράψουμε το εξής:

$$LEP \subset QEP \subset PEP.$$

10 Παραγοντοποίηση QR

Έστω πίνακας $A \in C^{m \times n}$ με γραμμικώς ανεξάρτητες στήλες. Τότε υπάρχει ορθομοναδιαίος Q και άνω τριγωνικός R ώστε,

$$A = QR.$$

Η παραπάνω παραγοντοποίηση του A , καλείται *παραγοντοποίηση QR* και είναι μοναδική.

Η κατασκευή των πινάκων Q, R μπορεί να πραγματοποιηθεί με διάφορες διαδικασίες, στα πλαίσια της εργασίας, επιλέχθηκε η διαδικασία *Ορθοκανονικοποίησης Gram-Schmidt*.

Ορθοκανονικοποίηση Gram-Schmidt. Έστω ότι θέλουμε να κατασκευάσουμε μια ορθοκανονική βάση για τον χώρο που παράγεται από τις στήλες του A , δηλαδή θέλουμε ένα ορθοκανονικό σύνολο διανυσμάτων $\{q_1, q_2, \dots, q_n\}$ ώστε,

$$\text{span}\{q_1, q_2, \dots, q_n\} = \text{span}\{a_1, a_2, \dots, a_n\}.$$

Η ορθοκανονικοποίηση Gram-Schmidt κατασκευάζει μια ορθοκανονική βάση (και κατ'επέκταση τους πίνακες Q, R) από την αρχική βάση $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$

σύμφωνα με τον παρακάτω αλγόριθμο.

Αλγόριθμος 1: Ορθοκανονικοποίηση Gram-Schmidt

Input : Πίνακας $A = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n]$
Output Πίνακες Q, R

```

1  for  $i \leftarrow 1$  to  $n$  do
2  |    $\hat{q}_i = a_i$ 
3  |   for  $j \leftarrow 1$  to  $n$  do
4  |   |    $r_{ij} = \langle q_j, \hat{q}_i \rangle$ 
5  |   |    $\hat{q}_i = \hat{q}_i - r_{ij}q_j$ 
6  |   end
7  |    $r_{ii} = \|\hat{q}_i\|_2$ 
8  |    $q_i = \frac{\hat{q}_i}{r_{ii}}$ 
9  end

```

Ο αλγόριθμος που παρουσιάστηκε παραπάνω ξεκίνα με ένα διάνυσμα του A και καθιστά ορθογώνιο κάθε επόμενο διάνυσμα, όπως φαίνεται στις γραμμές (4-5) και στην συνέχεια κανονικοποιείται. Κάθε συντελεστής Gram-Schmidt αποθηκεύεται στον πίνακα R .

Είναι εμφανές πως ο αλγόριθμος προτείνει μια σειριακή διαδικασία, συνεπώς ένα ημιτελής τερματισμός θα έχει ως αποτέλεσμα μια μερικώς ορθοκανονικοποιημένη βάση. Αυτή η παρατήρηση στα πλαίσια της QR παραγοντοποίησης ίσως δεν έχει ιδιαίτερο νόημα, άλλα θα είναι ιδιαίτερα χρήσιμη στο επόμενο Κεφάλαιο κατά την ανάπτυξη ορισμένων μεθόδων που αξιοποιούν παρόμοιες διαδικασίες ορθογωνιοποίησης.

10.1 Μέθοδος QR

Η μέθοδος QR αποτελεί ένας από τους πιο διάσημους αλγόριθμους πυκνής άλγεβρας για την επίλυση προβλημάτων ιδιοτιμών άλλα και ένα ιδιαίτερα χρήσιμο εργαλείο για την βελτίωση ορισμένων μεθόδων αραιής άλγεβρας, πιο συγκεκριμένα για την κατασκευή της Implicit Restarted Arnoldi.

Η ιδέα πίσω από την μέθοδο QR στηρίζεται σε διαδοχικούς μετασχηματισμούς ομοιότητας μιας Hessenberg διάσπασης του A ώστε τελικά οι προσεγγίσεις των ιδιοτιμών να βρίσκονται στην κύρια διαγώνιου του πίνακα H όπου H τέτοιος ώστε $AQ = QH$. Οι αλγόριθμοι κατασκευής τέτοιων διασπάσεων δεν θα μας απασχολήσουν στα πλαίσια αυτής της εργασίας. Στην συνέχεια παρατίθενται δύο εκδοχές της μεθόδου.

Αλγόριθμος 2: QR	Αλγόριθμος 3: Shifted-QR
<pre> 1 while $i < n$ do 2 $[Q, R] = \text{FactorQR}(H)$ 3 $H = RQ$ 4 $i = i + 1$ 5 end </pre>	<pre> 1 while $i < n$ do 2 $[Q, R] = \text{FactorQR}(H - s_i I)$ 3 $H = RQ + s_i I$ 4 $i = i + 1$ 5 end </pre>

Η παράληψη ενός κριτηρίου σύγκλισης στους παραπάνω αλγόριθμους έγινε σκοπίμως μιας και στο υπόλοιπο της εργασίας το ενδιαφέρον βρίσκεται κυρίως στην κατασκευή των πινάκων Q, H . Για λόγους πληρότητας, ένα απλό κριτήριο θα ήταν αίτηση των στοιχείων που βρίσκονται κάτω της κύριας διαγώνιου του πίνακα H σε κάθε επανάληψη της μεθόδου, να είναι μικρότερα μιας σταθεράς tol (user-defined). Μεγαλύτερο ενδιαφέρον στο επόμενο κεφάλαιο έχει η Shifted εκδοχή της μεθόδου QR. Οι τιμές s_i καλούνται φίλτρα

(ή shifts). Αν η μέθοδος Shifted-QR χρησιμοποιηθεί ως μέθοδο υπολογισμού των ιδιοτιμών ενός πυκνού πίνακα, τότε επιλέγοντας τιμές φίλτρου πλησίον των ιδιοτιμών του πίνακα επιταγχύνεται η σύγκλιση της μεθόδου. Όπως θα συζητηθεί σε επόμενο σημείο της εργασίας η μέθοδος QR ως μέρος την Implicit Restarted Arnoldi εκπληρώνει παρόμοιο σκοπό.

Κεφάλαιο 2

Μέθοδοι Υποχώρων Krylov

1 Προβολικές Διαδικασίες

Οι μέθοδοι υποχώρων Krylov που χρησιμοποιούνται για την προσέγγιση των προβλημάτων ιδιοτιμών μεγάλων, αραιών πινάκων, και θα μελετηθούν για το υπόλοιπο τμήμα της εργασίας, επιστρατεύουν κάποια κλάση προβολικής διαδικασίας είτε ως μέρος της μεθόδους, είτε απαρτίζοντας εξ' ολοκλήρου την μέθοδο.

Το θεωρητικό πλαίσιο των προβολικών διαδικασιών θα μπορούσε να διαιρεθεί σε δύο τμήματα:

- Προβολή του προβλήματος σε ένα πρόβλημα μικρότερης διάστασης.
- Προσέγγιση της επιθυμητής ιδιοποληροφορίας μέσω της διαδικασίας Rayleigh-Ritz.

Έστω οι υπόχωροι \mathcal{K} , \mathcal{L} , οι οποίοι καλούνται δεξιός και αριστερός υπόχωρος αντίστοιχα. Υποθέτουμε ότι υπόχωρος \mathcal{K} , περιέχει προσεγγίσεις \hat{x}

των ιδιοδιανύσματος x του **LEP** ενός πίνακα A , τότε επιβάλλοντας την *Petrov-Galerkin* συνθήκη ορθογωνιότητας στους χώρους \mathcal{K}, \mathcal{L} μπορούμε να εξάγουμε το προσεγγιστικό ιδιοδιάνυσμα \hat{x} . Οι προβολικές διαδικασίες διακρίνονται περαιτέρω ανάλογα με την επιλογή του αριστερού υποχώρου \mathcal{L} :

- *Ορθή Προβολική Μέθοδος*, αν $\mathcal{K} = \mathcal{L}$.
- *Πλάγια Προβολική Μέθοδος*, αν $\mathcal{K} \neq \mathcal{L}$.

1.1 Ορθές Προβολικές Διαδικασίες

Θεωρούμε το εξής πλαίσιο:

- Το **LEP** ενός πίνακα $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$.
- Το ζεύγος (λ, x) με $\lambda \in \mathbb{C}, x \in \mathbb{C}^n$ που ικανοποιεί το **LEP**.
- Τον m -διάστατο υπόχωρο $\mathcal{K} \subset \mathbb{C}^n$.
- Και έναν πίνακα $Q = [q_1 \ q_2 \ \cdots \ q_m]$ ώστε οι στήλες του Q να αποτελούν ορθοκανονική βάση του υπόχωρου \mathcal{K} .

Μια ορθή προβολική διαδικασία εξάγει την προσέγγιση του ζεύγους (λ, x) , έστω $(\hat{\lambda}, \hat{x})$ όπου $\hat{\lambda} \in \mathbb{C}, \hat{x} \in \mathcal{K}$ εφαρμόζοντας την συνθήκη ορθογωνιότητας *Petrov-Galerkin*,

$$\begin{aligned}
 & (A - \hat{\lambda}I)\hat{x} \perp \mathcal{K} \\
 \Leftrightarrow & \langle (A - \hat{\lambda}I)\hat{x}, u \rangle = 0, \quad \forall u \in \mathcal{K} \\
 \Leftrightarrow & \langle (A - \hat{\lambda}I)Qv, q_i \rangle, \quad i = 1, 2, \dots, m. \tag{2.1}
 \end{aligned}$$

Όπου στην σχέση (2.1) η προσέγγιση \hat{x} εκφράστηκε στην ορθοκανονική βάση του υποχώρου \mathcal{K} , ως $\hat{x} = Qv$. Επιπλέον, με την σχέση (2.1) το αρχικό πρόβλημα έχει μετασχηματιστεί στην εύρεση ζεύγους ιδιοτιμής-ιδιοδιανύσματος για το πρόβλημα

$$Q^H A Q v = \hat{\lambda} v.$$

Άρα το αρχικό πρόβλημα διαστάσεων $[n \times n]$ ανάχθηκε σε ένα πρόβλημα διαστάσεων $[m \times m]$.

Στρέφουμε τώρα την προσοχή μας στον υπολογισμό των προσεγγίσεων. Η διαδικασία που θα χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό τους καλείται *διαδικασία Rayleigh-Ritz*. Έστω όπως και πριν ότι διαθέτουμε μια ορθοκανονική βάση του δεξιού υποχώρου \mathcal{K} τότε:

Αλγόριθμος 4: Διαδικασία Rayleigh-Ritz

- 1 Υπολόγισε τον πίνακα $U = Q^H A Q$.
 - 2 Υπολόγισε το επιθυμητό τμήμα του φάσματος
 $\{\hat{\lambda}_i\}_{i=1}^k \subset \lambda(U), \quad k \leq m.$
 - 3 Υπολόγισε τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα v_i του βήματος 2.
 - 4 Υπολόγισε τα προσεγγιστικά ιδιοδιανύσματα του πίνακα A ως
 $\hat{x} = Q v_i.$
-

Οι προσεγγιστικές ιδιοτιμές, ιδιοδιανύσματα καλούνται και τιμές, διανύσματα Ritz αντίστοιχα. Η παρακάτω πρόταση αναφέρεται στο [15] και εξετάζει την συμπεριφορά των ζευγών Ritz στην περίπτωση όπου ο αριστερός υπόχωρος \mathcal{K} είναι αναλλοίωτος (υπό τον A).

Πρόταση 2.1. Αν ο (αριστερός) υπόχωρος \mathcal{K} είναι αναλλοίωτος (υπό τον A) τότε τα προσεγγιστικά ιδιοζεύγη ταυτίζονται με τα ιδιοζεύγη του A .

1.2 Πλάγιες Προβολικές Διαδικασίες

Για τις πλάγιες προβολικές διαδικασίες θεωρούμε το πλαίσιο

- Το **LEP** ενός πίνακα $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$.
- Το ζεύγος (λ, x) με $\lambda \in \mathbb{C}, x \in \mathbb{C}^n$ που ικανοποιεί το **LEP**.
- Τους υπόχωρους $\mathcal{K}, \mathcal{L} \subset \mathbb{C}^n$.
- Τους πίνακες $Q = [q_1 \ q_2 \ \dots \ q_m], G = [g_1 \ g_2 \ \dots \ g_m]$ ώστε,
 - $Q^H G = I \Leftrightarrow \det(Q, H) \neq 0$.
 - Οι στήλες του Q αποτελούν ορθοκανονική βάση του υπόχωρου \mathcal{K} .
 - Οι στήλες του G αποτελούν ορθοκανονική βάση του υπόχωρου \mathcal{L} .

Πριν αναπτυχθούν περαιτέρω οι προβολικές διαδικασίες οφείλεται να γίνει μια διευκρίνιση για την συνθήκη που ικανοποιούν οι δύο βάσεις Q, G . Η πρώτη σχέση $Q^H G = I$ υποδεικνύει πως οι δύο βάσεις πρέπει να είναι αμφοριθοκανονικές (biorthonormal). Προκειμένου να είναι αμφοριθοκανονικές οφείλουν να ικανοποιούν την σχέση $\det(Q, H) \neq 0$, δηλαδή κανένα στοιχείο του χώρου \mathcal{K} δεν είναι κάθετο σε κάποιο στοιχείο του χώρου \mathcal{L} .

Στις πλάγιες προβολικές μεθόδους αναζητούμε προσέγγιση \hat{x} από τον χώρο \mathcal{K} και εξάγουμε την προαναφερθέν προσέγγιση εφαρμόζοντας την εξής συν-

θήκη Petrov-Galerkin στον υπόχωρο \mathcal{L}

$$\begin{aligned} & (A - \hat{\lambda}I)\hat{x} \perp \mathcal{L} \\ \Leftrightarrow & \langle (A - \hat{\lambda}I)\hat{x}, v \rangle = 0, \quad \forall v \in \mathcal{L} \\ \Leftrightarrow & \langle (A - \hat{\lambda}I)Qv, g_i \rangle, \quad i = 1, 2, \dots, m. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Ομοιάς με την προηγούμενη ενότητα καταλήγουμε στο εξής, υποβιβασμένης διάστασης, πρόβλημα $[m \times m]$:

$$G^H A Q = \hat{\lambda} v.$$

Η διαδικασία Rayleigh-Ritz γενικεύεται και για τις πλάγιες προβολικές μεθόδους. Έστω ότι διαθέτουμε τις δύο βάσεις G, Q των υποχώρων \mathcal{K}, \mathcal{L} τότε:

Αλγόριθμος 5: Διαδικασία Rayleigh-Ritz (Πλάγιων Προβολικών Μεθόδων)

- 1 Υπολόγισε τον πίνακα $U = G^H A Q$.
 - 2 Υπολόγισε το επιθυμητό τμήμα του φάσματος $\{\hat{\lambda}_i\}_{i=1}^k \subset \lambda(U)$ $k \leq m$.
 - 3 Υπολόγισε τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα v_i του βήματος 2.
 - 4 Υπολόγισε τα προσεγγιστικά ιδιοδιανύσματα του πίνακα A ως $\hat{x} = Qv_i$.
-

Προφανώς η πρόταση των ορθογώνιων προβολικών διαδικασιών επεκτείνεται φυσικά και για τις πλάγιες προβολικές διαδικασίες.

Καθ' ολη την παρουσίαση των θεωρητικού πλαισίου των προβολικών διαδικασιών δεν έχει γίνει ξεκάθαρη αναφορά ποίοι είναι οι υπόχωροι \mathcal{K}, \mathcal{L} . Για το υπόλοιπο τμήμα της εργασίας τόσο ο \mathcal{K} , όσο και ο \mathcal{L} , θα είναι υπόχωροι

Krylov.

2 Υπόχωροι Krylov και Ιδιότητες

Ορισμός 2.1. (Υπόχωρος Krylov) Έστω $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ αντιστρέψιμος πίνακας, και $0 \neq u \in \mathbb{C}^n$ τότε ο m -οστός υπόχωρος Krylov, συμβολίζεται ως $K_m(A, u)$ και ορίζεται ως:

$$\mathcal{K}_m(A, u) = \text{span}\{A^0u, A^1u, A^2u, \dots, A^{m-1}u\}.$$

Ο πίνακας $K(A, u) = [u \ Au \ A^2u \ \dots \ A^{m-1}u]$ καλείται *πίνακας Krylov*, και η γραμμική θήκη των στηλών του παράγει τον αντίστοιχο υπόχωρο Krylov,

Σχόλιο. Μια άμεση παρατήρηση που προκύπτει από τον ορισμό των υποχώρων Krylov: $K_1 \subset K_2 \subset \dots \subset K_m$.

Ιδιότητες υποχώρων Krylov:

i) $\mathcal{K}_m(A, u) = \mathcal{K}_m(\alpha A, \beta u), \forall \alpha, \beta \neq 0$.

ii) $\mathcal{K}_m(A \pm \delta I, u) = \mathcal{K}_m(A, u)$.

iii) Για ορθομοναδιαίο V ισχύει ότι:

$$V\mathcal{K}_m(V^H AV, V^H u) = \mathcal{K}_m(A, u).$$

Εστώ υπόχωρος Krylov $\mathcal{K}_m(A, u)$, τότε ένα διάνυσμα $x \in K_m$ μπορεί να

εκφραστεί ως,

$$x = c_{n-1}A^{n-1}u + \cdots + c_2A^2u + c_1Au + c_0u,$$

ή ισοδύναμα,

$$x = \pi(A)u,$$

όπου π είναι το πολυώνυμο $\pi(x) = c_{n-1}x^{n-1} + \cdots + c_1x + c_0$.

Ορισμός 2.2. (Ελάχιστο Πολυώνυμο) Έστω ένας τετραγωνικός πίνακας $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Ένα πολυώνυμο της μορφής $\mu(A) = A^n + c_{n-1}A^{n-1} + \cdots + c_1A + c_0$ καλείται *ελάχιστο* αν έχει τον μικρότερο βαθμό ώστε

$$\mu(A) = 0.$$

Πρόταση 2.2. Έστω \mathcal{K}_m υπόχωρος Krylon. Αν d ο βαθμός του ελάχιστου πολυωνύμου του u , τότε ο \mathcal{K}_d είναι αναλλοίωτος υπό τον A και για κάθε $m \geq d$ τότε ισχύει ότι $\mathcal{K}_m = \mathcal{K}_d$.

3 Μέθοδος Arnoldi

Η μέθοδος Arnoldi προτάθηκε από τους W.E. Arnoldi στο [1], η αναθεωρημένη εκδοχή της ανήκει στην οικογένεια των ορθογώνιων προβολικών μεθόδων υποχώρων Krylon και αποσκοπεί στην προσέγγιση (μερικών) ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων ενός (μεγάλου, αραιού) πίνακα $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$.

3.1 Διαδικασία Arnoldi

Έστω ένας πίνακας $A \in C^{n \times n}$ και ένα αρχικό διάνυσμα q . Ένα γνωστό αποτέλεσμα είναι πως υπάρχουν πάντα πίνακες Q, H με $Q^H Q = I$ και H άνω-Hessenberg ώστε,

$$AQ = QH, \quad (2.3)$$

δηλαδή μια μείωση του A σε άνω-Hessenberg μορφή μέσω ενός μετασχηματισμού ομοιότητας. Η διαδικασία Arnoldi κατασκευάζει του πίνακες Q, H ώστε να ισχύει η εξίσωση (2.3) και $\text{span}\{Q(:, i)\} = \mathcal{K}(A, q)$.

Προκειμένου να εξαχθούν οι σχέσεις που χαρακτηρίζουν την διαδικασία Arnoldi θέτουμε ως αφετηρία την σχέση (2.3) και εξισώνουμε την j -οστή στήλη και των δύο μελών της.

$$\begin{aligned} Aq_j = \sum_{i=1}^{j+1} q_i h_{ij} &\Leftrightarrow q_k^H Aq_j = \sum_{i=1}^{j+1} q_k^H q_i h_{ij} = h_{kj} \text{ για κάθε } i \leq k \leq j \\ &\Leftrightarrow h_{j+1,j} q_{j+1} = r_j = Aq_j - \sum_{i=1}^j q_i h_{ij}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Εφόσον $H = Q^H A Q$ τότε $h_{ij} = q_i^H A q_j$ για $i = 1, \dots, k$. Επιπλέον κάθε καινούργιο διάνυσμα q_{j+1} μπορεί να γραφθεί μέσω της (2.4) ως $q_{j+1} = \frac{r_j}{h_{j+1,j}}$, ή ισοδύναμα, $q_{j+1} = \frac{r_j}{\|r_j\|}$. Τέλος, η σχέση (2.4) υποδεικνύει πως η διαδικασία Arnoldi πρακτικά αποτελεί μια τροποποιημένη εκδοχή της διαδικασίας ορθοκανονικοποίησης Gram-Schmidt. Συνεπώς μπορούμε να επεκτείνουμε την παρατήρηση που είχε γίνει κατά την ανάλυση της, δηλαδή αν η διαδικασία Arnoldi τερματιστεί πρόωγα τότε παράγει μια ημιτελή βάση για τον υπόχωρο

Κρυλον και προφανώς ένα ημιτελή πίνακα H . Αυτή η παρατήρηση θα αποκτήσει ιδιαίτερη σημασία στην κατασκευή ενός σχήματος επανεκκίνησης για την μέθοδο Arnoldi.

Αλγόριθμος 6: Διαδικασία Arnoldi

Input : Πίνακας A , τυχαίο διάνυσμα q_1 ώστε $\|q_1\|_2 = 1$
Output Πίνακας Q με ορθοκανονικές στήλες, H άνω-Hessenberg

```

1  for  $i \leftarrow 1$  to  $n$  do
2       $r = Aq_i$ 
3       $r_{norm} = \|r\|$ 
4      for  $j \leftarrow 1$  to  $i - 1$  do
5           $h_{ij} = q_i^H r$ 
6           $r = r - h_{ij}q_j$ 
7      end
8       $h_{j+1,j} = \|r\|$ 
9      if  $h_{j+1,j} < 0.707r_{norm}$  then
10         for  $k \leftarrow 1$  to  $i - 1$  do
11              $u = q_k^H r$ 
12              $r = r - uq_k$ 
13              $h_{ik} = h_{ik} + u$ 
14         end
15     end
16      $h_{j+1,1} = \|r\|$ ;
17     if  $h_{j+1,j} == 0$  then
18         break
19     end
20      $q_{j+1} = \frac{r}{h_{j+1,j}}$ 
21 end

```

Παρατηρήσεις

- Η διατύπωση του παραπάνω αλγόριθμου αναφέρεται σε finite precision arithmetic.
- Πραγματοποιείται μονάχα μια κλήση του πίνακα A στο εξωτερικό loop.
- Οι γραμμές (4-7) πραγματοποιούν το πρώτο στάδιο ορθογωνιοποίησης.

- Οι γραμμές (9-15) επαναορθογωνιοποιούν συγκρίνοντας τις νόρμες του διανύσματος r πριν και μετά το πρώτο στάδιο ορθογωνιοποίησης. Προφανώς μπορεί να επιλεχθεί άλλη τιμή πέραν της $\frac{1}{\sqrt{2}} = 0.707$, η συγκεκριμένη επιλογή χρησιμοποιείται στην υλοποίηση του πακέτου ARPACK.
- Τέλος, η γραμμή (20) κανονικοποιεί το κατασκευασμένο διάνυσμα εφόσον το $h_{j+1,j}$ δεν είναι μηδεν.
- Απο πλευρά υλοποίησης τα εσωτερικά *for – loops* των ορθογωνιοποιήσεων μπορούν να απαληφθούν με χρήση *vectorization*.

Πρόταση 2.3. Έστω πίνακας A , ένα αρχικό διάνυσμα q_1 και ο υπόχωρος Krylov $\mathcal{K}_m(A, q_1)$. Αν q_i είναι τα διανύσματα που παράγονται από την διαδικασία Arnoldi τότε:

$$\text{span}\{q_1, q_2, \dots, q_n\} = \text{span}\{q_1, Aq_1, \dots, A^{m-1}q_1\}.$$

Η παραπάνω πρόταση είναι άμεση συνέπεια την κατασκευής των διανυσμάτων q_i . Από την σχέση (2.4) κάθε ένα απο q_i μπορεί να εκφραστεί ως,

$$q_{j+1} = \frac{1}{h_{j+1,j}} (A\pi_{j-1}(A)q_1 - \sum_{i=1}^j h_{ij}\pi_{i-1}(A)q_1).$$

όπου $\pi(A)$ είναι ένα πολυώνυμο i -οστού βαθμού του A . Προφανώς τα διανύσματα q_i είναι ορθοκανονικά λόγω της κατασκευής τους.

Σχέση Arnoldi υπο μορφή πινάκων. Έστω ότι έχουμε εκτελέσει j -βήματα του αλγόριθμου 6 τότε προκύπτει ότι:

$$\begin{aligned} Aq_j = \sum_{i=1}^{j+1} q_i h_{ij} &\Leftrightarrow Aq_j = \sum_{i=1}^j q_i h_{ij} + h_{j+1,j} q_{j+1} e_j^H \\ &= \sum_{i=1}^j q_i h_{ij} + r_j e_j^H. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Διαφορετικά εκφράζοντας την παραπάνω σχέση ως πίνακες:

$$AQ_j = Q_j H_j + r_j e_j^H.$$

Η σχέση (21) καλείται *j -βηματική διάσπαση Arnoldi*.

$$\underbrace{\begin{bmatrix} * & * & \dots & * \\ * & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & \dots & * \end{bmatrix}}_{n \times n} \underbrace{\begin{bmatrix} * & \dots & * \\ * & \dots & * \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ * & \dots & * \end{bmatrix}}_{n \times j} = \underbrace{\begin{bmatrix} * & \dots & * \\ * & \dots & * \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ * & \dots & * \end{bmatrix}}_{n \times j} \underbrace{\begin{bmatrix} * & * & \dots & * \\ * & * & \dots & * \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & & & * & * \end{bmatrix}}_{j \times j} + r_j e_j^H.$$

Σκοπίμως μέχρι αυτό το σημείο δεν έχει γίνει αναφορά στην συνθήκη τερματισμού, δηλαδή τις γραμμές (17-19). Αν στην j -οστή επανάληψη προκύψει ο μηδενισμός του στοιχείου $h_{j+1,j}$ ισοδύναμα, $r_j = 0$ τότε ο βαθμός του ελάχιστου πολυώνυμο είναι j άρα ο \mathcal{K}_j είναι αναλλοίωτος υπό τον A όπως προκύπτει από την πρόταση 2.1 και ως αναλλοίωτος, από την πρόταση 1.1 τα ζεύγη

Ritz που προκύπτουν από τον πίνακα H είναι ακριβείς προσεγγίσεις της ιδιοπληροφορίας του πίνακα A . Συνοψίζοντας τον παραπάνω συλλογισμό προκύπτει η εξής πρόταση.

Πρόταση 2.4. Έστω ότι εκτελούμε την διαδικασία Arnoldi για πίνακα A και αρχικό διάνυσμα q , τότε η διαδικασία Arnoldi τερματίζεται στο j -οστό βήμα, αν και μόνο αν, $\deg(\mu(q)) = j$. Ο υπόχωρος Krylov \mathcal{K}_j , είναι αναλλοίωτος υπό τον A και τα ζεύγη Ritz που παράγονται από την διαδικασία Rayleigh-Ritz είναι ακριβείς προσεγγίσεις της ιδιοπληροφορίας του A .

3.2 Μέθοδος Arnoldi

Επιστρέφοντας στο πρόβλημα προσέγγισης μερικών ιδιοζευγών ενός μεγάλου αραιού πίνακα A . Η μέθοδος Arnoldi μπορεί περιγραφεί ως εξής.

Αλγόριθμος 7: Μέθοδος Arnoldi

- 1 Κατασκευάσε τον πίνακα Q, H μέσω την διαδικασίας Arnoldi.
 - 2 Υπολόγισε το επιθυμητό τμήμα του φάσματος του πίνακα H $\{\hat{\lambda}_1, \dots, \hat{\lambda}_k\} \subset \lambda(H)$ και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα v_i .
 - 3 Υπολόγισε τα διανύσματα Ritz, ως $\hat{x}_i = Qv_i$ για $i = 1, \dots, k$.
-

Σχόλιο. (1) Η μέθοδος Arnoldi αποτελεί μια αναδιατύπωση της διαδικασίας Rayleigh-Ritz που παρουσιάστηκε την ενότητα των ορθών προβολικών διαδικασιών.

(2) Για το βήμα 2.) της μεθόδου έχει παρουσιαστεί ένα απλοϊκός αλγόριθμος στο εισαγωγικό κεφάλαιο για τον υπολογισμό της επιθυμητής ιδιοπληροφορίας, η μέθοδος QR.

Εστω ότι διαθέτουμε τα ζεύγη Ritz $(\hat{\lambda}_i, \hat{x}_i)$ το επόμενο θεώρημα διερευνά εκτιμήσεις σφάλματος για τα προαναφερθέν ζεύγη.

Θεώρημα 2.1. Έστω $AQ_j = Q_jH_j + r_j e_j^H$ μια j -Διάσπαση Arnoldi και $(\hat{\lambda}, v)$ ένα ιδιοζεύγος του πίνακα H_j . Αν $\|v\|_2 = 1$ και $\hat{x} = Q_j v$ το διάνυσμα Ritz, με $\|\hat{x}\|_2 = 1$. Τότε:

$$\|Av - \hat{\lambda}v\|_2 = |h_{j+1,j}| |\hat{x}_j|. \quad (2.6)$$

Η παραπάνω σχέση είναι άμεση συνέπεια της j -βηματικής διάσπασης Arnoldi.

$$\begin{aligned} AQ_j v &= Q_j H_j v + r_j e_j^H v = \hat{\lambda} Q_j v + r_j e_j^H v \\ \Leftrightarrow A\hat{x} &= \hat{\lambda}\hat{x} + r_j e_j^H v \\ \Leftrightarrow A\hat{x} - \hat{\lambda}\hat{x} &= h_{j+1,j} v_j \\ \Leftrightarrow \|(A - \hat{\lambda}I)\hat{x}\| &= |h_{j+1,j}| \|v_j\|. \end{aligned}$$

Σχόλιο. Το παραπάνω θεώρημα προσφέρει ταυτόχρονα και ένα εναλλακτικό, πιο πρακτικό, κριτήριο τερματισμού. Μέχρι αυτού του σημείου η διαδικασία Arnoldi τερμάτιζε είτε όταν έχει κατασκευάσει αναλλοίωτο υπόχωρο Krylov είτε έχει εκτελέσει το εξωτερικό loop $\dim(A)$ -φορές. Ας εξετάσουμε τα προβλήματα που προκύπτουν από τα δύο κριτήρια.

(1) Προκειμένου να εκμεταλλευτούμε το πρώτο κριτήριο πρέπει να διαθέτουμε κάποια πληροφορία για την κατανομή των ιδιοτιμών, συνεπώς τυχαία επιλογή του αρχικού διανύσματος δεν μπορεί να εγγυηθεί την κατασκευή αναλλοίωτου υποχώρου Krylov.

(2) Αν εκτελεστούν $\dim(A)$ βήματα οι απαιτήσεις σε μνήμη και χρόνο, για τους πίνακες Q, H αυξάνονται σε απαγορευτικά επίπεδα, διότι σε αντιδιασ-

τολή με τον πίνακα A που μπορεί να αποθηκευθεί σε μικρότερο χώρο λόγω της αραιής δομής του, κάτι ανάλογο δεν μπορεί να πραγματοποιηθεί για τους Q, H .

3.3 Arnoldi με Επανεκκίνηση

Η κλασική μέθοδο Arnoldi πάσχει σε δύο σημαντικούς τομείς. Πρώτα, ο αριθμός των βημάτων, η ακρίβεια των ζευγών Ritz και κατά συνέπεια η ταχύτητα σύγκλισης της μεθόδου Arnoldi εξαρτάται εξ'ολοκλήρου από την επιλογή του αρχικού διανύσματος. Συνήθως η ζητούμενη ιδιοπληροφορία εμφανίζεται για μεγάλο πλήθος βημάτων κατά συνέπεια οι απαιτήσεις σε χώρο της μεθόδου αυξάνουν και άρα δυσχεραίνεται η πρακτικότητα της μεθόδου.

Η μέθοδος *Implicitly Restarted Arnoldi* αντιμετωπίζει τα δύο μελανά σημεία της μεθόδου Arnoldi κατασκευάζοντας βελτιωμένα αρχικά διανύσματα και επιστρατεύοντας τεχνικές επανεκκίνησης προκειμένου οι διαστάσεις των πινάκων Q, H που κατασκευάζονται να παραμένουν σταθερές.

IRA-Implicitly Restarted Arnoldi's Method

Η μέθοδος **IRA** αποτελεί μια βελτίωση της μεθόδου Arnoldi και αξιοποιεί μια τεχνική γνωστή ως *πολυωνυμικό φιλτράρισμα* ή *επιτάγχυση* (*polynomial filtering*).

Το πολυωνυμικό φιλτράρισμα, διαθέτοντας κάποια πληροφορία για την κατανομή των επιθυμητών ιδιοτιμών ενός πίνακα A (π.χ ζητούνται οι k πρώτες ιδιοτιμές με το μεγαλύτερο πραγματικό μέρος) επιταχύνει την σύγκλιση προς εκείνο το τμήμα του φάσματος. Στην περίπτωση της μεθόδου **IRA** η εφαρ-

μογή του πολυωνυμικού φίλτρου πραγματοποιείται με την χρήση της μεθόδου *Shifted-QR* [16].

Πολυωνυμικό Φίλτρο. Διάφορα πολυώνυμα έχουν εφαρμοστεί ως πολυωνυμικά φίλτρα, μεταξύ άλλων, από τα πιο επιτυχή, αποτελούν τα *πολυώνυμα Chebyshev*, για πληρέστερη ανάλυση παραπέμπουμε στο [15], στην παρούσα εργασία όμως θα εξετασθεί ένα άλλο είδος πολυωνυμικών φίλτρων, πολυώνυμα της μορφής:

$$\pi(\lambda) = c \prod_{i=1}^p (\lambda - \phi_i), \quad (2.7)$$

οπού c σταθερά. Οι τιμές $\phi_i, i = 1, \dots, p$ καλούνται *τιμές φίλτρου* (shifts) και ως σύνολο καθορίζουν μερικώς (ή ακόμη και ολικώς) το σύνολο των μη επιθυμητών τιμών Ritz.

Έστω $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ και ένα τυχαίο αρχικό διάνυσμα q , το q αναμένεται να περιέχει πληροφορία προς όλα τα ιδιοδιανύσματα του A , ισοδύναμα μπορεί να γραφθεί ως γραμμικός συνδυασμός αυτών. Η τεχνική του πολυωνυμικού φιλτραρίσματος ενισχύει τα στοιχεία του διανύσματος q προς την κατεύθυνση της ιδιοπληροφορίας ενδιαφέροντος. Δηλαδή, αν \hat{q} το βελτιωμένο διάνυσμα τότε θα ισχύει:

$$\hat{q} = \sum_{i=1}^n c_i \pi(\lambda_i) v_i, \quad (2.8)$$

όπου v_i τα ιδιοδιανύσματα του A . Συνεπώς ανάλογα με το ποίο τμήμα του φάσματος μας ενδιαφέρει επιλέγονται οι τιμές ϕ_i . Η μέθοδος **IRA** "εισάγει" το πολυωνυμικό φίλτρο που συζητήθηκε παραπάνω αξιοποιώντας την μέθοδο *Shifted-QR*.

Ας εξετάσουμε πιο συγκροτημένα την εισαγωγή των πολυωνυμικών φίλ-

τρών. Έστω A, q όπως πριν και επιπλέον μια k -βηματική διάσπαση Arnoldi του A , $AQ_k = Q_k H_k + r_k e_k^H$ με $k \ll n$. Έστω μ_1, \dots, μ_k οι ιδιοτιμές του πίνακα H_k αρχικά χωρίζουμε τις ιδιοτιμές ανάλογα με την ιδιότητα που είναι επιθυμητή, σε δύο υποσύνολα M_1 το επιθυμητό τμήμα, και M_2 το ανεπιθυμητό τμήμα με p το πλήθος στοιχεία. Αν εκτελέσουμε την μέθοδο shifted QR για τον πίνακα H_k με τιμές φίλτρου το σύνολο M_2 τότε κατασκευάζεται έναν νέος Hessenberg πίνακα H^+ τέτοιος ώστε,

$$H^+ = V^H H V,$$

όπου ο πίνακας V είναι ισοδύναμος με ένα διαδοχικό γινόμενο ανω-Hessenberg ορθοκανονικών πινάκων V_1, V_2, \dots, V_p . Ολοκληρώνοντας, το παρακάτω θεώρημα [5], υποδεικνύει πως το πολυωνυμικό φίλτρο εφαρμόζεται μέσω την παραγοντοποίησης QR της μεθόδου shifted QR.

Θεώρημα 2.2. Για $V = V_1 \cdots V_p$, $R = R_1 \cdots R_p$ που έχουν παραχθεί από το βήμα παραγοντοποίησης QR της μεθόδου QR ισχύει ότι:

$$VR = \prod_{i=1}^p (H - \phi_i I). \quad (2.9)$$

Διαδικασία Επανεκκίνησης. Έχοντας (μερικώς) ολοκληρώσει την περιγραφή δημιουργίας του νέου βελτιωμένου διανύσματος στρέφουμε το ενδιαφέρον προς την διαδικασία επανεκκίνησης που επιστρατεύει η μέθοδος **IRA**, πιο συγκεκριμένα την δυνατότητα της μεθόδου να διατήρει μια k -βηματική διάσπασης σε σταθερό μήκος k ενώ ταυτόχρονα σε κάθε επανεκκίνηση "εμπλουτίζεται" με την πληροφορία από το πολυωνυμικό φιλτράρισμα.

Έστω μια k -βηματική διάσπαση Arnoldi:

$$AQ_k = Q_k H_k + r_k e_k^H.$$

Εισάγουμε τη πληροφορία των πολυωνυμικών φίλτρων πολλαπλασιάζοντας την παραπάνω σχέση με τον πίνακα $V = \prod_{i=1}^p V_i$,

$$AQ_k V = Q_k V V^H H V + r_k e_k^H V.$$

Θέτουμε τώρα $Q_k^+ = Q_k V, H_k^+ = V^H H_k$. Τότε,

$$AQ_k^+ = Q_k^+ H_k^+ + r_k e_k^H V.$$

Για το γινόμενο $e_k^H V$ παρατηρούμε ότι:

$$e_k^H V = [0, 0, \dots, 0, v_1, v_2, \dots, v_{k-p}].$$

Συνεπώς απο τους αρχικούς πίνακες Q_k^+, H_k^+ μπορούμε να διατηρήσουμε μονάχα τους υποπίνακες διάστασης $m = k - p$, δηλαδή τους $Q_k^+(:, 1 : m)$, $H_k^+(1 : m, 1 : m)$. Τέλος προσαρμόζοντας κατάλληλα το υπόλοιπο ως $v_{km} r_k e_m$ καταλήξαμε και πάλι σε μία διάσπαση Arnoldi, η οποία "απέχει" p βήματα από την αρχική συνεπώς μπορούμε να επαναλάβουμε την παραπάνω διαδικασία διαρκώς μέχρι την σύγκλιση στην επιθυμητή ιδιοπληροφορία. Ενοποιημένα η παραπάνω στρατηγική συνοψίζεται με τον αλγόριθμο της μεθόδου **IRA**.

Αλγόριθμος 8: Μέθοδος Implicitly Restarted Arnoldi

Input : Πίνακας A , αρχικό διάνυσμα q_1, \maxIter
Output Πίνακες Q, H

```

1  $Q(:, 1) = \frac{q_1}{\|q_1\|}$ 
2  $H = []$ 
3  $[Q_k, H_k] = \text{Arnoldi}(A, Q, H, k)$ 
4 while  $iter < \maxIter$  do
5    $[Q_m, H_m] = \text{Arnoldi}(A, Q_k, H_k, p)$ 
6    $[\mu_1, \dots, \mu_p] = \text{Shifts}(H_m, p)$ 
7    $[H_m^+, V] = \text{ShiftedQR}(H_m, (\mu_1, \dots, \mu_p))$ 
8    $Q_k = Q_m V_m(:, 1 : k)$ 
9    $H_k = V^H H_m V(1 : k, 1 : k)$ 
10   $iter++$ 
11 end
```

4 Σχήμα Επανεκκίνησης Krylov-Schur

Η μέθοδος Krylov-Schur προτάθηκε από τον G.W Stewart στο [18] και αποτελεί ένα εναλλακτικό σχήμα επανεκκίνησης που είναι μαθηματικά ισοδύναμο με το σχήμα implicit επανεκκίνησης που είχε προταθεί από τους Lehoucq και Sorensen. Η βασική ιδέα της μεθόδου στηρίζεται σε μια διάσπαση Schur μιας διάσπασης Krylov. Η διάσπαση Krylov αποτελεί γενίκευση της διάσπασης Arnoldi.

Ορισμός 2.3. (Διάσπαση Krylov) Μια k -βηματική διάσπαση Krylov καλείται μια σχέση της μορφής:

$$AU_k = U_k B_k + u_{k+1} b_{k+1}^H,$$

με $[U_k \ u_{k+1}]$ γραμμικώς ανεξάρτητες στήλες που καλούνται και βάση της Krylov διάσπασης.

Μάλιστα από τις ιδιότητες που είχαν παραταθεί στο κεφάλαιο 2 είναι γνωστό πως οι υπόχωροι Krylov δεν επηρεάζονται από translations και μετασχηματισμούς ομοιότητας συνεπώς με την χρήση κατάλληλων μετασχηματισμών μια διάσπαση Krylov μπορεί να υποβιβαστεί σε μια διάσπαση Arnoldi. Η απόδειξη του προαναφερθέν συλλογισμού μπορεί να βρεθεί στο [18].

4.1 Μέθοδος Krylov-Schur

Έστω μία διάσπαση Krylov της μορφής:

$$AU_k = U_k S_k + u_{k+1} b_{k+1}^H.$$

Λόγω της δομής του πίνακα S , δηλαδή $S = \begin{bmatrix} S_{11} & * \\ 0 & S_{22} \end{bmatrix}$ με $S_{11} \in \mathbb{C}^{p \times p}$, $S_{22} \in \mathbb{C}^{q \times q}$ ($p + q = k$) είναι πρακτικά εύκολο να εξάγουμε μια μικρότερης διάστασης διάσπαση Krylov μήκους $p < k$ που 1) διατηρεί την ιδιοπληροφορία ενδιαφέροντος και 2) μπορεί και πάλι να επεκταθεί σε μια k -βηματική διάσπαση krylov. Η παραπάνω διαδικασία επιτυγχάνεται με την χρήση της μορφής Schur του πίνακα S_k . Πιο αναλυτικά, για έναν πίνακα A και ένα αρχικό διάνυσμα v_1 :

1. Επέκτεινε σε μια k -βηματική διάσπαση Krylov: $AU_k = U_k S_k + u_{k+1} b_{k+1}^H$.
2. Υπολόγισε την Schur μορφή του πίνακα S_k : $S_k Q_k = Q_k T$.

3. Ταξινόμησε τα στοιχεία του T , ώστε οι p τιμές Ritz ενδιαφέροντος να βρίσκονται στο πρώτο αριστερό block του πίνακα T .
4. Κατασκεύασε τις διαμερίσεις $Q_k = [Q_p, \sim]$ και $T = \begin{bmatrix} T_{11} & * \\ 0 & T_{12} \end{bmatrix}$.
5. Θέσε $U_p = U_k Q_p, S_p = T_{11}$ και $b_{p+1} = Q_p^H b_{k+1}$.
6. Αν $b_{k+1} > tol$ πήγαινε στο βήμα 1, διαφορετικά σταμάτα.

Στην παραπάνω διαδικασία η επέκταση της διάσπασης Krylov γίνεται με την χρήση της διαδικασίας Arnoldi με πλήρη ή μερική επανορθογωνιοποίηση και η διάταξη των επιθυμητών τιμών Ritz με μετασχηματισμούς ομοιότητας.

Locking. Στην περίπτωση που ένα πλήθος των ιδιοτιμών έχει συγκλίνει τότε είναι δυνατόν να μην συμπεριληφθούν στους μετέπειτα υπολογισμούς. Δηλαδή αν οι l πρώτες στήλες του πίνακα U_p κατασκευάζουν προσεγγιστικά έναν αναλλοίωτο υπόχωρο τότε τα l πρώτα στοιχεία του διανύσματος b_{k+1} είναι μηδενικά ή σχεδόν μηδενικά. Σε μια τέτοια κατάσταση ο πίνακας που προκύπτει μετά την επέκταση είναι άνω Hessenberg και πιο συγκεκριμένα έχει την παρακάτω μορφή:

$$H_k = \begin{bmatrix} T & M \\ B & H \end{bmatrix}.$$

Με $T = \begin{bmatrix} T_{11} & * \\ 0 & T_{12} \end{bmatrix}$, $B = \begin{bmatrix} 0 & b_2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$, όπου b_2 είναι το μη μηδενικό τμήμα του διανύσματος b_{k+1} και H άνω Hessenberg. Συνεπώς, με την χρήση ενός πίνακα $\hat{Q} = \begin{bmatrix} I_l & 0 \\ 0 & Q \end{bmatrix}$, με Q ορθομοναδιαίο μπορούμε να μετατρέψουμε

τον πίνακα H_k σε άνω τριγωνικό. Η παραπάνω στατηγική μείωσης του υπολογιστικού κόστους καλείται *locking*.

Το επόμενο θεώρημα εξετάζει την σχέση μεταξύ των δύο σχημάτων επανεκκίνησης που έχουν περιγραφεί μέχρι στιγμής.

Θεώρημα 2.3. Έστω μια διάσπαση Arnoldi:

$$P := AQ = QH + rue_k^H,$$

και μία διάσπαση Krylov:

$$Q := AV = VS + ub^H.$$

Έστω ότι εκτελείται ένας κύκλος συμπίεσης-επέκτασης της **IRA** στην P , και ένας κύκλος διάσπασης της Krylov-Schur στην Q . Αν απορριφθούν οι ίδιες τιμές Ritz τότε οι δύο διασπάσεις είναι ισοδύναμες.

(Απόδειξη) Αρκεί να δειχθεί πως οι υπόχωροι που κατασκευάζουν οι δύο διασπάσεις είναι ίδιοι. Στο αρχικό στάδιο της κατασκευής των διασπάσεων κατασκευάζονται τα ίδια διανύσματα. Έστω ότι έχει πραγματοποιηθεί το στάδιο της επανεκκίνησης και έχουν απορριφθεί το ίδιο τμήμα του φάσματος. Τότε οι νέες διασπάσεις μπορούν να γραφθούν ως:

$$\hat{P} := A\hat{Q} = \hat{Q}\hat{H} + \hat{r}\hat{u}e_k^H.$$

και

$$\hat{Q} := A\hat{V} = \hat{V}\hat{S} + \hat{u}\hat{b}^H.$$

Για κάποιο ορθομοναδιαίο πίνακα W ισχύει ότι $\hat{V} = \hat{Q}W$, άρα

$$\hat{S} = \hat{V}^H A \hat{V} = W^H \hat{Q}^H A \hat{Q} W = W^H \hat{H} W.$$

Συνεπώς, οι δύο πίνακες είναι όμοιοι και άρα έχουν απορρίψει τις ίδιες τιμές Ritz. Τέλος, αν P, Q οι μετασχηματισμοί που εφαρμόστηκαν στους πίνακες \hat{S}, \hat{H} των \hat{P}, \hat{Q} αντίστοιχα, τότε μένει να δειχθεί ότι οι χώροι που παράγονται από τους πίνακες $P_k = \hat{Q}P(:, 1 : k)$ και $Q_k = \hat{V}Q(:, 1 : k)$ Άμεσα από την κατασκευή, ο χώρος $R(P_k) = \mathcal{P}$ είναι ο ιδιοχώρος των Schur διανυσμάτων του \hat{H} και ομοίως για τον \hat{S} ο χώρος $\mathcal{R}(Q_k)$ είναι ο ιδιόχωρος \mathcal{Q} και είναι ίδιοι. Εφόσον, $W^H \hat{S} W = \hat{H}$ ο πίνακας $W^H P_k$ παράγει τον χώρο \mathcal{Q} συνεπώς υπάρχει ορθομοναδιαίος πίνακας R ώστε $Q_k = W^H P_k R$ και κατά συνέπεια

$$\hat{V}Q_k = \hat{U}W W^H P_k R = \hat{U}P_k R.$$

Άρα, οι υπόχωροι που παράγονται από τους $\hat{V}Q_k, \hat{Q}P_k$ είναι ίδιοι.

Για περαιτέρω ιδιότητες που αφορούν στην ευστάθεια της μεθόδου παραπέμπουμε στο [18].

Σχόλιο. 1) Στην περίπτωση της IRA λόγω της χρήσης της μεθόδου QR για την εφαρμογή του πολυωνυμικού φίλτρου υπήρχε το ενδεχόμενο να επανεμφανισθούν τιμές Ritz που αντιστοιχούν στο ανεπιθύμητο τμήμα του φάσματος και άρα να δυσχεραίνουν την σύγκλιση της μεθόδου, το οποίο δεν συμβαίνει στην περίπτωση του σχήματος Krylov-Schur.

2) Είναι ευκολότερο στην διαδικασία Krylov-Schur να μην μετέχουν στους επόμενους υπολογισμούς ήδη συγκλίνοντα τμήματα του φάσματος. Στην περίπτωση

της **IRA** μια στρατηγική αντίστοιχη του locking είναι δυσκολότερο να εφαρμοσθεί λόγω της απαίτησης της να διατηρεί συνεχώς μια "αυστηρή" διάσπαση Arnoldi.

3) Με χρήση της μεθόδου Krylov-Schur χάνεται η ευελιξία της επιλογής του πολυωνυμικού φίλτρου που υπήρχε στην **IRA**.

5 Μέθοδος Lanczos

Η κλασική (συμμετρική) μέθοδος Lanczos, προτάθηκε στο [9], είναι προγενέστερη της μεθόδου Arnoldi αλλά μπορεί να περιγραφεί ως μια ειδική περίπτωση της δεύτερης, συγκεκριμένα όταν ο πίνακας εισόδου A είναι Ερμιτιανός, τότε ως αποτέλεσμα της συμμετρικότητας του, προκύπτει τελικά ότι ο άνω Hessenberg H μετατρέπεται σε άνω τριδιαγώνιο¹ Για πλήρη ανάλυση της συμμετρικής μεθόδου Lanczos παραπέμπουμε σε [5]. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η γενίκευση της για μη ερμιτιανούς πίνακες.

5.1 Μέθοδος Lancos με Αμφιορθογωνιότητα

Η Γενίκευση της Lanczos σε μη Ερμιτιανούς πίνακες καλείται Μέθοδος Lanczos με αμφιορθογωνιότητα ή μη Ερμιτιανή μέθοδος Lanczos αποτελεί μια πλάγια προβολική μέθοδος υποχώρων Krylov, δηλαδή οι δύο υπόχώροι \mathcal{K} , \mathcal{L} στους οποίους επιβάλεται η συνθήκη ορθογωνιότητας Petrov-Galerkin, δεν ταυτίζονται, σε αντίθεση με τις μεθόδους τύπου Arnoldi. Λόγω των διαφορετικών υποχώρων Krylov που αξιοποιεί η μέθοδος, έχει την δυνατότητα

¹Τριδιαγώνιος Πίνακας: Ένας πίνακας καλείται τριδιαγώνιος αν είναι άνω και κάτω Hessenberg.

προσέγγισης αριστερών και δεξιών ιδιοδιανυσμάτων του πίνακα A .

Έστω ένας πίνακας $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ και διανύσματα $u, v \in \mathbb{C}^n$. Στόχος της μη συμμετρικής Lanczos είναι η κατασκευή βάσεων για δύο υποχώρους Krylov, έστω $\mathcal{K}(A, u)$, $\mathcal{K}(A^H, v)$ ώστε να ικανοποιούν την σχέση αμφορθογωνιότητας.

Ως παράγωγο της διαδικασίας κατασκευής αμφορθογώνιων βάσεων είναι η κατασκευή τριδιαγώνιου πίνακα T .

Ομοίως με την μέθοδο Arnoldi, η μη ερμιτιανή Lanczos χρησιμοποιείται για την εκτίμηση μερικών ιδιοτιμών του πίνακα A μέσω των ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων του τριδιαγώνιου πίνακα T .

Μια απλή εκδοχή της μεθόδου όπως παρατίθεται απο τον Saad στο [15].

Αλγόριθμος 9: Μέθοδος Biorthogonal Lanczos

Input Πίνακας A , αρχικά διάνυσμα u, v ώστε $\langle u_1, v_1 \rangle = 1$

:

- 1 **Initialize:** $\beta = 0, u_0 = 0, v_0 = 0$
- 2 **for** $i \leftarrow 1, 2, \dots, n$ **do**
- 3 **set** $\alpha_i = \langle Au_i, v_i \rangle$
- 4 **set** $r_{i+1} = Au_i - \alpha_i u_i - \beta_i u_{i-1}$
- 5 **set** $p_{i+1} = A^H v_i - \bar{\alpha}_i v_i - \delta_i v_{i-1}$
- 6 **set** $\delta_{i+1} = \|\langle r_{i+1}, p_{i+1} \rangle\|^{\frac{1}{2}}$
- 7 **set** $\beta_{i+1} = \frac{\langle r_{i+1}, p_{i+1} \rangle}{\delta_{i+1}}$
- 8 **set** $v_{i+1} = \frac{p_{i+1}}{\beta_{i+1}}$
- 9 **set** $u_{i+1} = \frac{r_{i+1}}{\delta_{i+1}}$
- 10 **end**

Ο Saad επισημαίνει ότι η επιλογή των δ, β μπορεί να γίνει με ποικίλους

τρόπους αρκεί να ικανοποιείται η συνθήκη $\delta_i \beta_i = \langle r_i, p_i \rangle$. Στην παραπάνω εκδοχή η επιλογή τους πραγματοποιείται ώστε να προκύπτει το ίδιο υπόλοιπο. Οι τιμές Ritz προκύπτουν απο την επίλυση του γενικευμένου προβλήματος ιδιοτιμών $T_k x = \text{diag}(\langle u_i, v_i \rangle) x$.

Ορισμός 2.4. (*k*-βηματική Διάσπαση Lanczos) Έστω ότι έχουν εκτελεσθεί *k*-βήματα της μη Ερμιτιανής Μεθόδου Lanczos, και $\{u_1, \dots, u_m\}, \{v_1, \dots, v_m\}$ το αμφορθογώνιο σύστημα. Οι σχέσεις:

$$\begin{aligned} AV_k &= V_k T_k + d_{k+1} v_{k+1} e_k^H, \\ A^H U_k &= U_k T_k + \delta_{k+1} u_{k+1} e_k^H. \end{aligned}$$

περιγράφουν μια *k*-βηματική διάσπαση Μη Ερμιτιανής Lanczos.

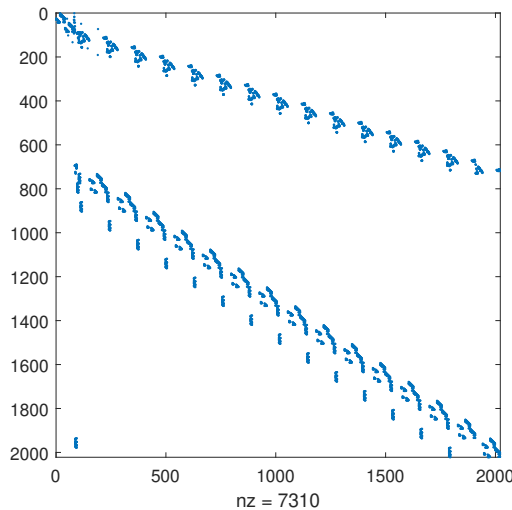
Είναι άμεσα εμφανες ότι οι προηγούμενες σχέσεις είναι και διασπάσεις τύπου Arnoldi για τους πίνακες A, A^H . Συνεπώς το κριτήριο σύγκλισης που είχε δοθεί υπο μορφή πρότασης για την μέθοδος Arnoldi μπορεί να επεκταθεί και για την μη Ερμιτιανή μέθοδο Lanczos. Δηλαδή αν (λ_i, y_i) ιδιοζεύγη του πίνακα T_k , τότε για $x = V_k y$ προκύπτει πως:

$$\|A - \lambda_i x\| = |\delta_{k+1} e_k^H| |e_k^H y_k|. \quad (2.10)$$

Τέλος, αν y_i τα αριστερά ιδιοδιανύσματα του πίνακα T . Τότε, τα αριστερά ιδιοδιανύσματα του πίνακα A προσεγγίζονται απο τα διανύσματα $U y_i$.

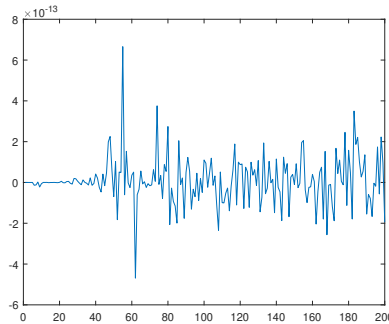
Απώλεια Ορθογωνιότητας-Arnoldi

Όπως είχε αναφερθεί σε finite precision arithmetic η διαδικασία Arnoldi χάνει την ορθογωνιότητα των στηλών του ορθοκανονικού πίνακα Q καθώς το πλήθος των βημάτων αυξάνεται, όταν ο αρχικός πίνακας A είναι ill-Conditioned. Για την ανάδειξη του παραπάνω προβλήματος υλοποιήθηκε μια εκδοχή της διαδικασίας Arnoldi με την δυνατότητα επιλογής αν θα πραγματοποιηθεί το δεύτερο στάδιο ορθογωνιοποίησης. Επιλέχθηκαν ο πίνακας *west2021* με δείκτη κατάστασης $= 7.5023e + 12$ από την ανοιχτή συλλογή πινάκων, παρακάτω παρατίθενται το sparsity γράφημα

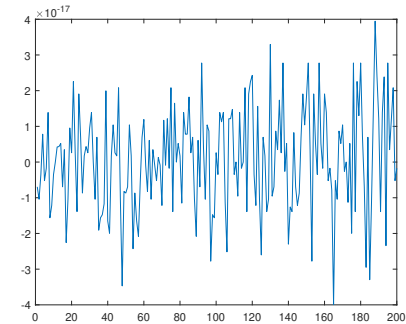


Εικόνα 2.1: Πίνακας *west2021*.

Στην συνέχεια υπολογίσθηκαν τα γινόμενα $Q(:, 1)^H Q(:, 1 : k)$ για $k = 200$ για τυχαίο q_0 χωρίς δεύτερο στάδιο ορθογωνιοποίηση και με συνεχή ορθογωνιοποίηση.



(a) Χωρίς επαναορθογωνιοποίηση.

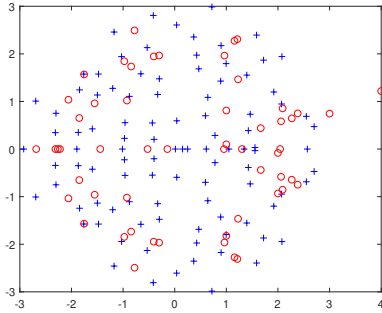


(b) Συνεχής επαναορθογωνιοποίηση.

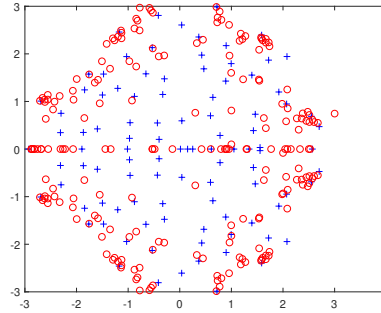
Εναλλακτική ποσότητα που εκφράζει την απώλεια ορθογωνιότητας είναι η νόρμα $\tau = \|Q^H Q - I\|$. Στην πρώτη περίπτωση προκύπτει $\tau = 4.0198e - 11$ ενώ στην δεύτερη $\tau = 1.1476e - 15$.

Προσέγγιση Εξωτερικών Ιδιοδιανυσμάτων

Ένα χαρακτηριστικό των μεθόδων τύπου Arnoldi είναι ότι τείνουν να προσεγγίζουν τις ιδιοτιμές που αντιστοιχούν στο εξωτερικό τμήμα του φάσματος. Για ένα τυχαίο αραιό πίνακα $[100 \times 100]$ προέκυψαν γραφικά τα εξής αποτελέσματα για 10 και 20 επαναλήψεις αντίστοιχα:

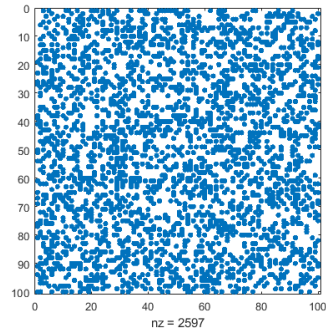


(a) 10 Επαναλήψεις.

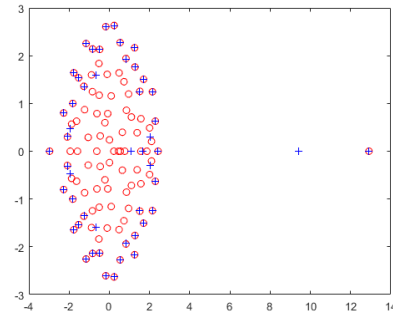


(b) 20 επαναλήψεις.

Η παραπάνω συμπεριφορά αιτιολογείται λόγω των ιδιοτήτων των υποχώρων Krylov, καθώς κάθε διάνυσμα x μπορεί να γραφθεί υπό την μορφή $x = \pi(A)u$ όπως στην ενότητα 2 του κεφαλαίου 2. Συνεπώς ενώ το διάνυσμα q αρχικά έχει πληροφορία προς όλα τα ιδιοδιανύσματα του A καθώς αυξάνονται οι επαναλήψεις τα c_i των εξωτερικών ιδιοδιανυσμάτων ενισχύονται με αποτέλεσμα να προσεγγίζονται καλύτερα οι ιδιοτιμές των εξωτερικών ιδιοδιανυσμάτων. Αντίστοιχα, την ίδια συμπεριφορά μπορούμε να παρατηρήσουμε και από την εκτέλεση της μη ερμιτιανής Μεθόδου Lanczos. Πιο αναλυτικά για έναν τυχαίο $[100 \times 100]$ αραιό πίνακα και αρχικά διανύσματα $u, v = e_1 \in \mathcal{C}^{100 \times 1}$ εκτελέστηκαν 50 επαναλήψεις την μη ερμιτιανής μεθόδου Lanczos. Παρακάτω παρατίθεται ο πίνακας διασποράς του αρχικού πίνακα και οι προσεγγίσεις των ιδιοτιμών ταυτόχρονα με τις πραγματικές ιδιοτιμές του αρχικού πίνακα.



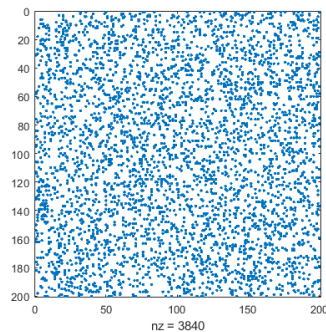
(a) Διάγραμμα Διασποράς.



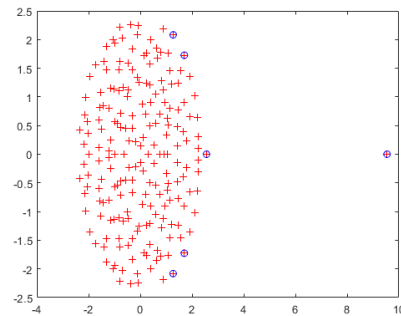
(b) 50 επαναλήψεις.

Παράδειγμα Εφαρμογής της Μεθόδου Krylov-Schur

Ως τελευταίο παράδειγμα του δεύτερου κεφαλαίου παρατίθεται η εφαρμογή της μεθόδου Krylov-Schur σε έναν τυχαίο αραιό πίνακα, με τυχαίο αρχικό διάνυσμα. Πιο αναλυτικά, επιλέχθηκε ένας $[200 \times 200]$ τυχαίος αραιός πίνακας, ως επιθυμητό τμήμα του φάσματος επιλέχθηκαν οι έξι μεγαλύτερες ιδιοτιμές του A και τέλος για τους κύκλους διάσπασης χρησιμοποιήθηκε διάσπαση Arnoldi μήκους 12. Σημειώνεται πως το στάδιο επέκτασης σε μια 12-βηματική διάσπαση έχει υλοποιηθεί με συνέχη ορθογωνιοποίηση.



(a) Διάγραμμα Διασποράς.



(b) Αποτέλεσμα της Μεθόδου.

Κεφάλαιο 3

Γενικευμένες Μεθόδοι Krylov Τύπου Arnoldi

Το παρόν κεφάλαιο επικεντρώνεται στην παρουσίαση των γενικευμένων μεθόδων υποχώρων Krylov τύπου Arnoldi για την κλάση προβλημάτων τύπου **QEP** (*Quadratic-Eigenvalue-Problem*), και στην συνέχεια για την γενικότερη κλάση τύπου **PEP** (*Polynomial-Eigenvalue-Problem*).

1 Πολυωνυμικά Προβλήματα Ιδιοτιμών

Ορισμός 3.1 (QEP). Για πίνακες M, D, K , με M αντιστρέψιμο πίνακα, ζητείται ζεύγος (λ, x) που να ικανοποιεί την εξίσωση:

$$(\lambda^2 M + \lambda D + K)x = 0.$$

Με $\lambda \in \mathbb{C}$, $0 \neq x \in \mathbb{C}$ και $M, D, K \in \mathbb{C}^{n \times n}$.

Σχόλιο. Το **QEP** έχει $2n$ ιδιοζεύγη, δηλαδή $2n$ ιδιοτιμές και $2n$ ιδιοδιανύσματα.

Η επίλυση του QEP προκύπτει σε πλήθος εφαρμογών όπως συνήθης διαφορικές εξισώσεις 2^{ου} βαθμού¹ προβλήματα ακουστικής με στόχο την μείωση του θορύβου οχημάτων και αεροσκαφών, προβλήματα ρευστομηχανικής κατά την μελέτη γραμμικής ευστάθειας ροών, φραγμένων (Constrained) προβλημάτων ελαχίστων τετραγώνων, προβλήματα ανάλυσης σημάτων και άλλων τα οποία παρουσιάζονται σε βάθος στο έργο των Tisseur και Meerbergen [19]

Στόχος όλων των μεθόδων που θα περιγραφούν στο υπόλοιπο της εργασίας είναι η προσέγγιση κάποιου τμήματος ενδιαφέροντος της ιδιοπληροφορίας των προβλημάτων **QEP** ή **PEP**. Ως μέθοδοι τύπου Arnoldi επιστρατεύουν ορθές προβολικές διαδικασίες για τον υποβιβασμό του προβλήματος σε ένα ισοδύναμο μικρότερης διάστασης και στην συνέχεια την διαδικασία Rayleigh-Ritz για την προσέγγιση της επιθυμητής ιδιοπληροφορίας.

2 Γενικευμένοι Υπόχωροι Krylov

Προκειμένου να περιγράψουμε τις ορθές προβολικές διαδικασίες για τα **QEP** **PEP** πρέπει να επεκταθεί ο ορισμός των υποχώρων Krylov σε έναν γενικότερο ορισμό. Έτσι προκύπτουν για το **QEP** [2]:

Ορισμός 3.2. Έστω $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ και $u_1, u_2 \in \mathbb{C}^n$ με $u_1 \neq 0$. Αν,

$$r_0 = u_1$$

$$r_1 = Au_1 + Bu_2$$

¹ $M\ddot{q}(t) + C\dot{q}(t) + Kq(t) = f(t)$. Με $M, C, K \in \mathcal{F}^{n \times n}$, $q(t) \in \mathcal{F}^n$, όπου $\mathcal{F} = \mathbb{R}$ ή \mathbb{C} .

$$r_j = Ar_{j-1} + Br_{j-2}, \quad j \geq 2.$$

τότε η ακολουθία $\{r_0, r_1, \dots, r_{d-1}\}$ καλείται *Γενικευμένη Ακολουθία Krylov 2^{ης} Τάξης* που καθορίζεται από τους πίνακες A, B , και τα αρχικό διάνυσμα u_1, u_2 . Ο αντίστοιχος χώρος:

$$\mathcal{G}_d(A, B, u_1, u_2) = \text{span}\{r_0, r_1, \dots, r_{d-1}\},$$

καλείται *d-όστος Γενικευμένος Υπόχωρος Krylov 2^{ης} τάξης*.

Σχόλιο. Στην περίπτωση που $u_2 = 0$ ο *d-όστος γενικευμένος υπόχωρος Krylov 2^{ης}* καλείται *d-όστος υπόχωρος Krylov 2^{ης} τάξης* και συνδέονται μέσω της σχέσης:

$$\mathcal{G}_d(A, B, u_1, 0) = \mathcal{K}_d(A, B, u_1).$$

Η έννοια των γενικευμένων υποχώρων Krylov 2^{ης} τάξης μπορεί να επεκταθεί φυσικά και για το **PEP**[3].

Ορισμός 3.3. Έστω A_0, A_1, \dots, A_{d-1} τετραγωνικοί πίνακες και διανύσματα u_0, u_1, \dots, u_{d-1} με $u_{d-1} \neq 0$ ώστε

$$r_0 = u_1$$

$$r_1 = u_2$$

$$\vdots$$

$$r_{n-2} = u_{d-1}$$

$$r_{n-1} = A_{d-1}u_{d-1} + A_{d-2}u_{d-2} + A_0u_0$$

$$r_j = A_{d-1}r_{j-1} + A_{d-2}r_{j-2} + A_0r_{j-d}, \quad j \geq d.$$

Η ακολουθία $\{r_i\}_{i=0}^{d-1}$ καλείται γενικευμένη ακολουθία Krylov και ο χώρος

$$\mathcal{G}_m(\{A_i\}_{i=0}^{d-1}, \{u_i\}_{i=0}^{d-1}) = \text{span}\{r_{d-2}, r_{d-1}, \dots, r_{d+m-3}\}, j \geq d.$$

καλείται m -όστος Γενικευμένος Υπόχωρος Krylov

3 Ορθή προβολική Διαδικασία PEPs

Έστω τετραγωνικοί πίνακες $A_0, A_1, A_2, \dots, A_d$ αναζητούμε προσεγγιστικό ζεύγος $(\hat{\lambda} \in \mathbb{C}, \hat{x} \in \mathcal{G}_m)$, $m < d$, του ζεύγους (λ, x) , στον δεξίο υπόχωρο ή χώρο προσεγγίσεων $\mathcal{K} = \mathcal{G}_m(\{A_i\}_{i=0}^{d-1}, \{u_i\}_{i=0}^{d-1}) = \mathcal{L}$ θεωρούμε επιπλέον μια ορθοκανονική βάση του \mathcal{K} , έστω Q_m , τότε το $\hat{x} = Q_m g$. Τότε επιβάλλοντας την *Petrov -Galerkin συνθήκη Ορθογωνιότητας* προκύπτει:

$$\begin{aligned} (\hat{\lambda}^d A_d + \dots + \hat{\lambda} A_1 + A_0) \hat{x} &\perp \mathcal{G}_m. \\ u^H (\hat{\lambda} A_d + \dots + \hat{\lambda} A_1 + A_0) \hat{x} &= 0 \quad \forall u \in \mathcal{G}_m. \end{aligned}$$

εφόσον $\hat{x} = G_m q$,

$$G_m^H (\hat{\lambda}^d A_d + \dots + \hat{\lambda} A_1 + A_0) G_m q = 0.$$

Άρα,

$$\underbrace{(\hat{\lambda}^d Q_m^H A_d Q_m)}_{\hat{A}_d} + \dots + \underbrace{\hat{\lambda} Q_m^H A_1 Q_m}_{\hat{A}_1} + \underbrace{Q_m^H A_0 Q_m}_{\hat{A}_0} q = 0.$$

Τελικά,

$$(\hat{\lambda}^d \hat{A}_d + \cdots + \hat{\lambda} \hat{A}_1 + \hat{A}_0)q = 0. \quad (3.1)$$

Συνεπώς το αρχικό **PEP** διάστασης n υποβιβάστηκε σε ένα ισοδύναμο **PEP** διάστασης m .

Έστω τώρα το $(\hat{\lambda}^2 M + \hat{\lambda} D + K)\hat{x} = 0$ θεωρούμε υπόχωρο προσέγγισης $\mathcal{K} = \mathcal{G}_m(A, B, u_1, u_2) = \mathcal{L}$ και Q_m ορθοκανονική βάση του \mathcal{K} και προσεγγιστικό ζεύγος $\hat{\lambda}, \hat{x}$ ακολουθώντας την ίδια συλλογιστική πορεία το ισοδύναμο υποβιβασμένο πρόβλημα διάστασης m που προκύπτει θα είναι

$$(\hat{\lambda}^2 \hat{M} + \hat{\lambda} \hat{D} + \hat{K})q = 0. \quad (3.2)$$

Με $\hat{M} = Q_m^H M Q_m$, $\hat{D} = Q_m^H D Q_m$, $\hat{K} = Q_m^H K Q_m$ οι πίνακες του ισοδύναμου υποβιβασμένου **QEP**.

Διαθέτοντας τα υποβιβασμένα προβλήματα είναι εύκολο να προσαρμοσθεί η διαδικασία Rayleigh-Ritz για τα **PEPs**:

Αλγόριθμος 10: Διαδικασία Rayleigh-Ritz (**PEP**)

- 1 Κατασκεύασε την ορθοκανονική βάση Q του υπόχωρου \mathcal{G}_m .
 - 2 Κατασκεύασε τους πίνακες $\hat{A}_i = Q_m^H A_i Q_m$.
 - 3 Υπολόγισε το επιθυμητό τμήμα του φάσματος $\{\hat{\lambda}_i\}_{i=1}^k$ του υποβιβασμένου προβλήματος $P(\hat{\lambda}, \hat{A}_i)$ και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα y .
 - 4 Υπολόγισε τα προσεγγιστικά ιδιοδιανύσματα $\hat{x} = Qy$.
-

4 Γραμμικοποίηση

Η κλασική προσέγγιση για την επίλυση των **PEPs** είναι μέσω την γραμμικοποίησης.

Η διαδικασία την γραμμικοποίησης ανάγει ένα πολυωνυμικό πρόβλημα ιδιοτιμών σε ένα γραμμικό πρόβλημα ιδιοτιμών στο οποίο μπορεί να εφαρμοσθεί κάποια αριθμητική μέθοδος, όπως η μέθοδος **IRA** για την προσέγγιση της επιθυμητής ιδιοπληροφορίας. Η γραμμικοποίηση ενός **PEP** δεν είναι μοναδική, στην συνέχεια θα παρουσιαστεί η συνηθέστερη γραμμικοποίηση για το **QEP** και θα γενικευθεί για το **PEP**. Έστω το **QEP**, $Q(\lambda) = \lambda^2 M + \lambda D + K$ και

διάνυσμα $v = \begin{bmatrix} \lambda x \\ x \end{bmatrix}$ τότε το αρχικό **QEP** μπορεί να γραφθεί στην μορφή:

$$\left(\lambda \underbrace{\begin{bmatrix} M & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix}}_G - \underbrace{\begin{bmatrix} -D & -K \\ I & 0 \end{bmatrix}}_C \right) \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda x \\ x \end{bmatrix}}_u = 0. \quad (3.3)$$

Το οποίο στην συνέχεια μπορεί περαιτέρω να αναχθεί στο **LEP** αν θεωρήσουμε τον πίνακα:

$$H = G^{-1}C = \begin{bmatrix} -M^{-1}D & -M^{-1}K \\ I & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ I & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.4)$$

Αν θεωρήσουμε τώρα το **PEP** της μορφής:

$$P(A_i, \lambda) = A_d \lambda^d + \dots + A_1 \lambda + A_0$$

με A_0, A_1, \dots, A_d τετραγωνικοί, αραιοί πίνακες. Για την γραμμικοποίηση του

PEP θεωρούμε ένα διάνυσμα της μορφής $v = \begin{bmatrix} \lambda^{d-1}x \\ \vdots \\ x \end{bmatrix}$ τότε οι πίνακες G, C

της προηγούμενης παραγράφου μπορούν να γραφθούν ως εξής:

$$C = \begin{bmatrix} -A_{d-1} & -A_{d-2} & \dots & A_0 \\ I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & I & 0 \end{bmatrix}, G = \begin{bmatrix} A_d & & & \\ & I & & \\ & & \ddots & \\ & & & I \end{bmatrix}.$$

Και στην συνέχεια να μετασχηματιστεί το παραπάνω γενικευμένο πρόβλημα στο γραμμικό ισοδύναμο με τον πίνακα M :

$$M = \begin{bmatrix} M_{d-1} & M_{d-2} & \dots & M_0 \\ I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & I & 0 \end{bmatrix}, M_i = -A_d^{-1}A_i \quad i = 1, \dots, d-1. \quad (3.5)$$

Μειονεκτήματα της Γραμμικοποίησης. Η γραμμικοποίηση αυξάνει τις διαστάσεις του προβλήματος και δεν διατηρεί τις δομικές ιδιότητες των αρχικών πινάκων. Ακόμη ο τελικός πίνακα, δηλαδή οι πίνακες (H ή M) που μετασχηματίζει το πολυωνυμικό σε γραμμικό πρόβλημα ιδιοτιμών, συνήθως είναι ill-conditioned. Συνεπώς η χρήση κάποιας μεθόδου υποχωρών Krylov γραμμικών προβλημάτων θα έχει αυξημένο υπολογιστικό κόστος και χρόνο

ενώ παράλληλα οι ill-conditioned πίνακες θα επηρεάσουν την ακρίβεια της μέθοδου.

Για περαιτέρω πληροφορίες σχετικά με γενικότερες τεχνικές γραμμικοποίησης παραπέμπουμε στο [13]

5 Διαδικασίες GSOAR και GAR

Οι γενικεύσεις των διαδικασιών Arnoldi για την κατασκευή ορθομοναδιαίας βάσης για τους υποχώρους Krylov των **LEP** γενικεύονται για τα τετραγωνικά και πολυωνυμικά προβλήματα ιδιοτιμών με τις διαδικασίες **GSOAR**- (**Generalized Second Order ARnoldi**) και **GAR**-(**Generalized ARnoldi**) που προτάθηκαν από τους Bao, Lin, Wei στο [3]. Στόχος των διαδικασιών είναι η άμεση εφαρμογή της διαδικασίας στους πίνακες των αρχικών προβλημάτων προκειμένου να αποφευχθεί η χρήση του πίνακα γραμμικοποίησης.

Υπόχωροι Krylov για τις διαδικασίες GSOAR και GAR. Έστω το **PEP** και ο πίνακας γραμμικοποίησης όπως στην σχέση (3.5), αν $u = [u_0^H, \dots, u_{d-1}^H]^H$ αρχικά διανύσματα, παρατηρούμε ότι τα διανύσματα της γενικευμένης ακολουθίας Arnoldi, έστω r_i μπορούν να γραφθούν στην μορφή:

$$\begin{bmatrix} r_j \\ r_{j-1} \\ \vdots \\ r_{j-d+1} \end{bmatrix} = M^{j-d+2}u, \quad j \geq d-1. \quad (3.6)$$

Δηλαδή η πληροφορία που περιέχεται στον υπόχωρο Krylov του γραμμικοποιημένου προβλήματος είναι ίδια με την πληροφορία που περιέχεται στον γενικευμένο υπόχωρο Krylov. Αντίστοιχα η παραπάνω παρατήρηση ισχύει και για το **QEP**: Η ακολουθία των γενικευμένων διανυσμάτων 2^{ns} τάξης σχετίζεται με την ακολουθία $\{H^j v\}$ ως εξής:

$$\begin{bmatrix} r_j \\ r_{j-1} \end{bmatrix} = H^j v, \quad j \geq 1.$$

Τέλος, παρατίθενται οι διαδικασίες **GSOAR** και **GAR** που κατασκευάζουν ορθομοναδιαίες βάσης για τους αντίστοιχους γενικευμένους υπόχωρους Krylov.

Αλγόριθμος 11: Διαδικασία GSOAR

Input Πίνακας A, B , αρχικά διάνυσματα u_1, u_2

:

- 1 $q_1 = \frac{u_1}{\|u_1\|_2}$
- 2 $p_1 = \frac{u_2}{\|u_2\|_2}$
- 3 **for** $j \leftarrow 1$ **to** d **do**
- 4 $r = Aq_j + Bp_j$
- 5 $s = q_j$
- 6 **for** $i \leftarrow 1$ **to** j **do**
- 7 $t_{ij} = q_i^T r$
- 8 $r \leftarrow r - q_i t_{ij}$
- 9 $s \leftarrow s - p_i t_{ij}$
- 10 **end**
- 11 $t_{j+1,j} = \|r\|_2$
- 12 **if** $t_{j+1,j} = 0$ **then**
- 13 $stop$
- 14 **end**
- 15 $q_{j+1} = \frac{r}{t_{j+1,j}}$
- 16 $p_{j+1} = \frac{s}{t_{j+1,j}}$
- 17 **end**

Σχόλιο. Η διαδικασία **GSOAR** για αρχικό διάνυσμα $u_2 = 0$ και $p_1 = 0$ κατασκευάζει ορθομοναδιαία βάση για υπόχωρο Krylov 2^{ns} τάξης και καλείται **SOAR**.

Αλγόριθμος 12: Διαδικασία GAR

```

1  $\beta = \|u_{d-1}\|_2$ 
2 
$$\begin{bmatrix} q_1 \\ p_1^{(1)} \\ \vdots \\ p_1^{(d-1)} \end{bmatrix} = \frac{1}{\beta} \begin{bmatrix} u_{d-1} \\ u_{d-2} \\ \vdots \\ u_{(0)} \end{bmatrix}$$

3 for  $j \leftarrow 1$  to  $m$  do
4 
$$\begin{bmatrix} q_{j+1} \\ p_{j+1}^{(1)} \\ \vdots \\ q_{j+1}^{(d-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{d-1} & M_{d-2} & \dots & M_0 \\ I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_j \\ p_j^{(1)} \\ \vdots \\ p_j^{(d-1)} \end{bmatrix}$$

5 for  $i \leftarrow 1$  to  $j$  do
6 
$$h_{ij} = (q_i^{(d-1)})^T q_{j+1}^{d-1}$$

7 
$$\begin{bmatrix} q_{j+1} \\ p_{j+1}^{(1)} \\ \vdots \\ p_{j+1}^{(d-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{j+1} \\ p_{j+1}^{(1)} \\ \vdots \\ p_{j+1}^{(d-1)} \end{bmatrix} - h_{ij} \cdot \begin{bmatrix} q_i \\ p_i^{(1)} \\ \vdots \\ p_i^{(d-1)} \end{bmatrix}$$

8 end
9  $h_{j+1,j} = \|q_{j+1}^{(d-1)}\|_2$ 
10 if  $h_{j+1,j} = 0$  then
11 | Stop
12 else
13 
$$\begin{bmatrix} q_{j+1} \\ p_{j+1}^{(1)} \\ \vdots \\ p_{j+1}^{(d-1)} \end{bmatrix} = \frac{1}{h_{j+1,j}} \begin{bmatrix} q_{j+1} \\ p_{j+1}^{(1)} \\ \vdots \\ q_{j+1}^{(d-1)} \end{bmatrix}$$

14 end
15 end

```

Παρατηρήσεις Είναι άμεσα εμφανές η συσχέτιση των γενικευμένων διαδικασιών Arnoldi με την διαδικασία Arnoldi που είχε περιγραφεί στο προηγούμενο κεφάλαιο, καθώς αποτελούνται από ένα εσωτερικό loop τροποποιημένης ορθογωνιοποίησης gram-Schmidt και στην συνέχεια μια διαδικασία κανονικοποίησης των ορθογωνιοποιημένων διανυσματων που παράχθηκαν απο την προαναφερθέν ορθογωνιοποίηση. Ανάμενεται πως όλες οι προτάσεις επεκτείνονται και για τις περιπτώσεις των διαδικασιων **GSOAR** και **GAR**.

Έστω ότι έχουν εκτελεσθεί m -βήματα της διαδικασίας **GAR** χωρίς να έχει προκύψει τερματισμός λόγω της συνθήκης της γραμμής (10) τότε η κατάσταση μπορεί να περιγραφεί από την παρακάτω σχέση:

$$\begin{bmatrix} M_{d-1} & M_{d-2} & \dots & M_d \\ I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_m \\ P_m^{(1)} \\ \vdots \\ P_m^{(d-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{m+1}^{(d-1)} \\ Q_{m+1}^{(d-2)} \\ \vdots \\ Q_m^{(1)} \end{bmatrix} \cdot \bar{H}_m, \quad (3.7)$$

όπου ο άνω-Hessenberg πίνακας \bar{H}_m προκύπτει από τους υπολογισμούς των στοιχείων τους όπως πραγματοποιούνται στον αλγόριθμο (7) και αντιστοίχως οι πίνακες Q , P προκύπτουν από την αύξουσα παράθεση των q_i, p_i αντίστοιχα. Αν επιπλέον γραφθεί ο πίνακας \bar{H} γραφθεί ως την διαμέριση $\begin{bmatrix} H_m \\ h_{m+1,m} \end{bmatrix}$ τότε η παραπάνω σχέση τρέπεται στην,

$$M \begin{bmatrix} Q_m \\ P_m^{(1)} \\ \vdots \\ P_m^{(d-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_m \\ P_m^{(1)} \\ \vdots \\ P_m^{(d-1)} \end{bmatrix} H_m + h_{m+1,m} \begin{bmatrix} q_{m+1} \\ p_{m+1}^{(1)} \\ \vdots \\ p_{m+1}^{(d-1)} \end{bmatrix} e^H. \quad (3.8)$$

Η παραπάνω σχέση όμως, είναι μια διάσπαση τύπου Arnoldi. Προφανώς μια διάσπαση τύπου Arnoldi θα είναι και το αποτέλεσμα της **GSOAR** έπειτα απο m -βήματα της διαδικασίας χωρίς τερματισμό λόγω της συνθήκης της γραμμής (12) του Αλγόριθμου (8):

$$\begin{bmatrix} A & B \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_m \\ P_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{m+1} \\ P_{m+1} \end{bmatrix} \hat{T}_m, \quad (3.9)$$

όπου $Q_{m+1} = [Q_m \quad Q_{m+1}]$, $P = [P_m \quad p_{m+1}]$ και ο άνω Hessenberg $\hat{T}_n =$

$\begin{bmatrix} T_m \\ t_{m+1,m} \end{bmatrix}$ με $T_m = t_{ij}$ επίσης άνω-Hessenberg. Για λόγους σαφήνειας καλούμε

L τον πίνακα μετασχηματισμού του **QEP** τότε:

$$L \begin{bmatrix} Q_m \\ P_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_m \\ P_m \end{bmatrix} T_m + T_{m+1,m} \begin{bmatrix} q_{m+1} \\ p_{m+1} \end{bmatrix} e^H. \quad (3.10)$$

Προκειμένου να αποδειχθεί πως ο αλγόριθμος **GAR** κατασκευάζει ορθοκανονική βάση για τον γενικευμένο υπόχωρο θα χρειαστεί η παρακάτω πρόταση.

Πρόταση 3.1. Έστω A τυχαίος $n \times n$ πίνακας και $V_{m+1} = [V_m v_{m+1}]$ ώστε

$$AV_m = V_{m+1}H_m. \quad (3.11)$$

Με H_m ένας $(m+1) \times m$ άνω Hessenberg πίνακας. Τότε υπάρχει άνω τριγωνικός πίνακας R_m ώστε

$$V_m R_m = K_m(A, v). \quad (3.12)$$

Όπου $K(A, u)$ ο πίνακας Krylon. Αν επιπλέον η υποδιαγώνιος του H έχει $m-1$ μη μηδενικά στοιχεία και ο R_m είναι αντιστρέψιμος τότε,

$$\text{span}V_m = \mathcal{K}_m(A, v). \quad (3.13)$$

Διαθέτοντας την παραπάνω πρόταση και την σχέση που συνδέουν τους υπόχωρους Krylon με τους γενικευμένους υπόχωρους Krylon μπορεί να διατυπωθεί το παρακάτω θεώρημα.

Θεώρημα 3.1. Αν ο αλγόριθμος **GAR** δεν τερματιστεί στο κριτήριο των γραμμών (10) στο βήμα j τότε κατασκευάζει ορθοκανονική βάση για τον γενικευμένο υπόχωρο Krylon $\mathcal{G}_j(A, u)$.

Απόδειξη

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_j(A, u) &= \text{span}\{r_{d-2}, r_{d-1}, \dots, r_{d+j-3}\} \\
&= \text{span} \left\{ [I \ 0 \ \dots \ 0] \begin{bmatrix} u_{d-1} & r_{d-1} & \dots & r_{d+j-3} \\ u_{d-2} & r_{d-2} & \dots & r_{d+j-4} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ u_0 & r_0 & \dots & r_{j-2} \end{bmatrix} \right\} \\
&= \text{span} \{ [I \ 0 \ \dots \ 0] K(u_1, M) \} \\
&= \text{span} \left\{ [I \ 0 \ \dots \ 0] \begin{bmatrix} Q_j \\ P_j^{(1)} \\ \vdots \\ P_j^{(d-1)} \end{bmatrix} R_j \right\} \\
&= \text{span}\{Q_j\}.
\end{aligned}$$

Περαιτέρω για κριτήριο τερματισμού, η ερμηνεία του είναι ισοδύναμη με αυτή που είχε δοθεί για την περίπτωση της κλασσικής διαδικασίας Arnoldi και επεκτείνεται και για τις γενικευμένες διαδικασίες Arnoldi, δηλαδή αν προκύψει $h_{j+1,j} = 0$ τότε ο γενικευμένος υπόχωρος Krylov είναι αναλλοίωτος υπό τον αντίστοιχο πίνακα γραμμικοποίησης και από την πρόταση που είχε δοθεί για τις ορθές προβολικές διαδικασίες τα ζεύγη Ritz είναι ακριβείς προσεγγίσεις των ιδιοζευγών του αρχικού προβλήματος (**QEP** ή **PEP**).

6 Refined Μέθοδος GSOAR και GAR

Η προηγούμενη ενότητα περιέγραψε την κατασκευή της ορθοκανονικής βάσης για του γενικευμένους υποχώρους Krylov συνέπως ακολουθώντας την διαδικασία Rayleigh-Ritz που παρουσιάστηκε στην αρχή του κεφαλαίου μπορεί να προσεγγισθεί το επιθυμητό τμήμα του φάσματος για το **PEP**. Ερευνητικά αποτελέσματα υποδεικνύουν πως η συγκλιση των διανυσμάτων Ritz αν είναι εφικτή, είναι αργή, ακόμη και αν υπάρχει σύγκλιση των τιμών Ritz [6]. Προκειμένου να βελτιωθούν οι προσεγγίσεις των ιδιοδιανυσμάτων ενός **PEP** κατασκευάζονται νέα διανύσματα Ritz τα οποία καλούνται refined διανύσματα Ritz. Πιο αναλυτικά, εστω ζευγη Ritz $(\hat{\lambda}_i, x_i)$ αιτούνται διανύσματα Ritz \hat{x}_i τα οποία να ικανοποιούν την σχέση:

$$\|(\hat{\lambda}_i^d A_d + \cdots + \hat{\lambda}_i A_1 + A_0)\hat{x}\| = \min_{z \in \mathcal{G}_m(A, u), \|z\|_2=1} \|(\hat{\lambda}_i^d A_d + \cdots + \hat{\lambda}_i A_1 + A_0)x\|_2$$

Εφόσον $z = Q_m g$, τότε:

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \arg \min_{g \in \mathbb{C}^n, \|g\|_2=1} \|(\hat{\lambda}_i^d A_d + \cdots + \hat{\lambda}_i A_1 + A_0)Q_m g\|_2 \\ &= \arg \min_{g \in \mathbb{C}^n, \|g\|_2=1} \underbrace{\|(\hat{\lambda}_i^d A_d Q_m + \cdots + \hat{\lambda}_i A_1 Q_m + A_0 Q_m) g\|_2}_{T_i} \\ &= \arg \min_{g \in \mathbb{C}^n, \|g\|_2=1} \|T_i g\|_2. \end{aligned}$$

Άρα η κατασκευή του \hat{x} βασίζεται στην εύρεση του ιδιάζον εκείνου διανύσματος που αντιστοιχεί στην μικρότερη ιδιάζουσα τιμή του πίνακα T_i . Για το **QEP** ο αντίστοιχος πίνακας θα είναι $\hat{\lambda}^2 M + \hat{\lambda} D + K$. Τέλος, για την ακρίβεια

των ζευγών Ritz γίνεται χρήση της παρακάτω ποσότητας:

$$\alpha_i = \frac{\|(\hat{\lambda}_i^d A_d + \dots + \hat{\lambda}_i A_1 + A_0)z\|_2}{|\hat{\lambda}_i|^d \|A_d\|_F + \dots + |\hat{\lambda}_i| \|A_1\|_F + \|A_0\|_F}. \quad (3.14)$$

Τα α_i καλούνται *σχετικές νόρμες υπολοίπων*.

Συμφωνα με τα παραπάνω μπορούμε να αναδιατυπώσουμε τη διαδικασία Rayleigh-Ritz για το **PEP** ενημερωμένη με την τεχνική refinement που περιγράφηκε παραπάνω.

Αλγόριθμος 13: Μέθοδος RGAR

- 1 Κατασκεύασε την ορθοκανονική βάση Q_m του γενικευμένου υπόχωρου Krylov G_m .
 - 2 Κατασκεύασε του πίνακες $\hat{A}_i = Q_m^H A_i Q_m$ για $i = 1, \dots, d$ με την διαδικασία **GAR**.
 - 3 Υπολόγισε το επιθυμητό τμήμα του φασματος $\{\hat{\lambda}_1, \dots, \hat{\lambda}_k\}$ του υποβιβασμένου **PEP**, και τα αντίστοιχα διανύσματα Ritz.
 - 4 Για κάθε ένα από τα $\hat{\lambda}_i$ Υπολόγισε το δεξιό ιδιάζων διάνυσμα g_i του πίνακα T_i που αντιστοιχεί στην μικρότερη ιδιάζουσα τιμή σ_i , υπολόγισε το refined διάνυσμα Ritz $\hat{x}_i = Q_m g_i$.
 - 5 Για κάθε ζεύγος $(\hat{\lambda}_i, \hat{x}_i)$,
 - 6
 - 7 $i = 1 : k$ υπολόγισε την ποσότητα α_i .
-

Η παραπάνω διαδικασία καλείται μέθοδος **RGAR** (**R**efined-**G**AR). Η εφαρμογή της ίδιας διαδικασίας σε ένα **QEP** με χρήση της διαδικασίας **GSOAR** καλείται μέθοδος **RGSOAR** (**R**efined-**G**SOAR).

7 Γενικευμένο Σχήμα Implicit Επανεκκίνησης

Οι διαδικασίες **GAR** και **GSOAR** αντιμετωπίζουν τα ίδια μειονεκτήματα με την απλή διαδικασία Arnoldi, δηλαδή οι απαιτήσεις σε χώρο αυξάνονται με το πλήθος των επαναλήψεων και η συγκλιση τους εξαρτάται απο την επιλογή της αρχικής εισόδου. Συνεπώς ένα αντίστοιχο σχήμα επανεκκίνησης όπως αυτό που είχε προταθεί απο τους Sorensen στο [16] πρέπει να προσαρμοστεί και στις γενικευμένες μεθόδους. Οι τεχνικές που θα αξιοποιηθούν θα είναι το πολυωνυμικό φιλτράρισμα και η μέθοδος Shifted QR για τις εισαγωγή των τιμών φίλτρου σε μια γενικευμένη διάσπαση Arnoldi.

Έστω τιμές φίλτρου μ_1, \dots, μ_p και μια m -βηματική γενικευμένη διάσπαση Arnoldi:

$$M \begin{bmatrix} Q_m \\ P_m^{(1)} \\ \vdots \\ P_m^{(d-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_m \\ P_m^{(1)} \\ \vdots \\ P_m^{(d-1)} \end{bmatrix} H_m + h_{m+1,m} \begin{bmatrix} q_{m+1} \\ p_{m+1}^{(1)} \\ \vdots \\ p_{m+1}^{(d-1)} \end{bmatrix} e^H.$$

Έφαρμόζοντας p -βήματα της μεθόδου shifted QR στον πίνακα H προκύπτει ένας νέος άνω Hessenberg πίνακα $H^+ = V^H H V$, V ορθομοναδιαίος πίνακας. Συνεπώς για την εισαγωγή των p φίλτρων στην γενικευμένη διάσπαση Arnoldi

πολλαπλασιάζουμε την σχέση (3.8) με τον πίνακα V :

$$M \begin{bmatrix} Q_m^+ \\ P_m^{(1)+} \\ \vdots \\ P_m^{(d-1)+} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_m^+ \\ P_m^{(1)+} \\ \vdots \\ P_m^{(d-1)+} \end{bmatrix} H_m^+ + h_{m+1,m} \begin{bmatrix} q_{m+1} \\ p_{m+1}^{(1)} \\ \vdots \\ p_{m+1}^{(d-1)} \end{bmatrix} e^H V. \quad (3.15)$$

Στην συνέχεια συμπιέζουμε την παραπάνω m -βηματική διάσπαση σε μία μήκους k διατηρώντας μόνο τους υποπίνακες $1 : k$ σε κάθε μέλος της παραπάνω σχέσης. Τελικά προκύπτει:

$$M \begin{bmatrix} Q_k^+ \\ P_k^{(1)+} \\ \vdots \\ P_k^{(d-1)+} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_k^+ \\ P_k^{(1)+} \\ \vdots \\ P_k^{(d-1)+} \end{bmatrix} H_k^+ + \hat{h}_{k+1,k} \begin{bmatrix} q_{k+1} \\ p_{k+1}^{(1)} \\ \vdots \\ p_{k+1}^{(d-1)} \end{bmatrix} e^H.$$

όπου $Q_k^+ = Q_m V_m(:, 1 : k)$, $P_{+k} = P_m V_m(:, 1 : k)$, $H_k^+ = H_m^+(1 : k, 1 : k)$

άνω Hessenberg και

$$\begin{aligned} & \bullet \begin{bmatrix} q_{k+1}^+ \\ p_{k+1}^{(1)+} \\ \vdots \\ p_{k+1}^{(d-1)+} \end{bmatrix} = \frac{1}{\hat{h}_{k+1,k}} f_{k+1}^+ \text{ και } f_k^+ = h_{k+1,d}^+ \begin{bmatrix} q_{k+1}^+ \\ p_{k+1}^{(1)+} \\ \vdots \\ p_{k+1}^{(d-1)+} \end{bmatrix} + h_{m+1,m} V_m(m, k) \begin{bmatrix} q_{m+1}^+ \\ p_{m+1}^{(1)+} \\ \vdots \\ p_{m+1}^{(d-1)+} \end{bmatrix}. \\ & \bullet \hat{h}_{k+1,k}^+ = \|h_{k+1,k}^+ q_{k+1}^+ + h_{m+1,m} V_m(m, k) q_{m+1}^+\|. \end{aligned}$$

Άρα με την παραπάνω διαδικασία συμπιέζει την αρχική m -βηματική γενικευμένη διάσπαση σε μια k -βηματική γενικευμένη διάσπαση Arnoldi η οποία περιέχει

πληροφορία προς την κατεύθυνση της ιδιοδιανυσμάτων ενδιαφέροντος. Είναι επίσης άμεσο από την παραπάνω διαδικασία ότι μπορεί να εφαρμοσθεί προσαρμόζοντας κατάλληλα τους προαναφερθέν πίνακες και στην περίπτωση του QEP.

7.1 Στρατηγικές Exact και Implicit shifts

Το σημαντικότερο σημείο του γενικευμένου σχήματος Implicit επανεκκίνησης που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη παράγραφο είναι η επιλογή των τιμών φίλτρου διότι καθορίζουν σε μεγάλο βαθμό την επιτυχία της μεθόδου. Οι συνηθέστερες στρατηγικές για την επιλογή των τιμών φίλτρου είναι η στρατηγική με Exact shifts και με Refined shifts. Η πρώτη έχει αναλυθεί στην περιγραφή της μεθόδου **IRA**, σύμφωνα με την ES στρατηγική επιλέγονται ως τιμές φίλτρου, οι ανεπιθύμητες τιμές Ritz. Σε κάποια QEP μπορεί κάποιες τιμές Ritz να προσεγγίζουν ιδιοτιμές με κοινό ιδιοδιάνυσμα, αν επιλεχθούν τέτοιες τιμές ως τιμές φίλτρου η πληροφορία για το επιθυμητο ιδιοδιάνυσμα χάνεται. Για την επίλυση παρόμοιων επιπλοκών προτείνεται μια διαφορετική στρατηγική επιλογής τιμών φίλτρου.

Η στρατηγική των Refined shifts αξιοποιεί την τεχνική refinement, δηλαδή τις μεθόδους **RGAR** και **RGSOAR**, προκειμένου να κατασκευάσει πιο ακριβείς προσεγγίσεις του ανεπιθύμητου τμήματος του φάσματος. Πιο αναλυτικά, από την εκτέλεση της μεθόδου **RGAR** ή **RGSOAR** προκύπτουν $\{\hat{\lambda}_i\}_{i=1}^{dm}$ τιμές Ritz και επιλέγονται $\{\hat{\lambda}_i\}_{i=dm-p+1}^{dm} = Q_m g$ σε αυτές τις τιμές αντιστοιχούν τα refined ritz διανύσματα $\{\hat{x}_i\}_{i=dm-p+1}^{dm} = Q_m g$ Προκειμένου να εξαχθούν ακριβέστερες προσεγγίσεις των τιμών Ritz επιβάλλουμε την Petrov-Galerkin Συνθήκη Ορ-

θογωνιότητας. Ως αποτέλεσμα:

$$\sum_{i=0}^n (g_i^H \hat{A}_i g \hat{\lambda}^d) = 0. \quad (3.16)$$

Και έπειτα από την λύσεις του πολυωνύμου επιλέγονται με ανάλογο τρόπο με την στρατηγική exact shifts. Είναι εμφανές πως για την υλοποίηση της **ES** στρατηγικής απαιτείται η αποθήκευση και κατασκευή όλων των refined διανυσμάτων που αντιστοιχούν στο ανεπιθύμητο τμήμα του φάσματος συνεπώς αυξάνουν το υπολογιστικό κόστος της μεθόδου.

8 Μέθοδος IRGAR

Τέλος, παρατίθεται εννοποιημένα η μεθόδος IRGAR που αξιοποιεί τις τεχνικές που περιγράφηκαν στις προηγούμενες παραγράφους.

Αλγόριθμος 14: Implicit Σχήμα Επανεκκίνησης GAR

Input πίνακες $\{A_i\}_{i=1}^d$, αρχικά διανύσματα $\{u_i\}_{i=1}^d$, πλήθος
 : επιθυμητών ιδιοζευγών p, tol

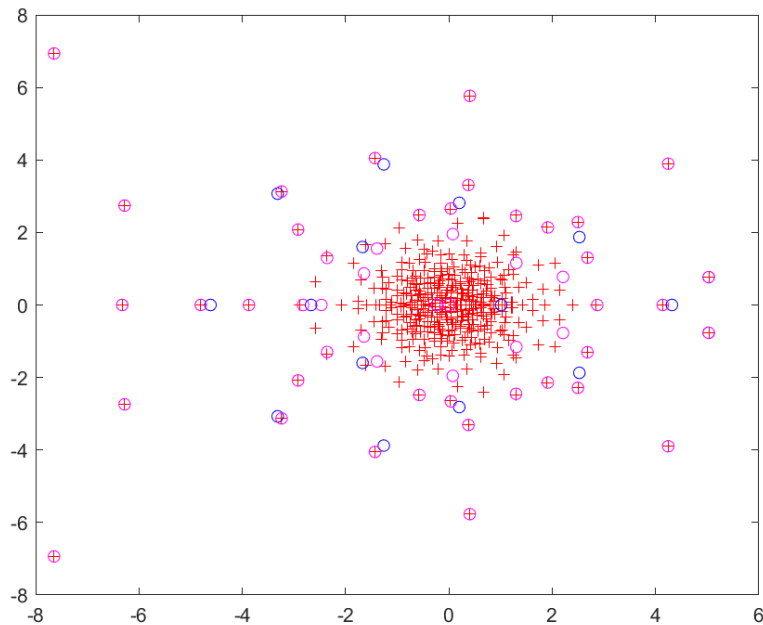
- 1 $M_i = -A_m^{-1}A_i, i = 1, \dots, d$
- 2 $Q_m = GAR(M_i, u)$
- 3 $\hat{A}_i = Q_m^T A_i Q_m, i = 1, \dots, d$
 $\hat{\lambda}_i = solveReducedPEP(\hat{A}_i,) i = 1, 2, \dots, dm$
- 4 **Υπολόγισε** $T_i = \hat{\lambda}_i^d A_d Q_m + \dots + \hat{\lambda}_i A_1 Q_m + A_0 Q_m$
- 5 $(\sigma_i, \hat{g}_i) = minSVD(T_i), i = 1, \dots, k$
- 6 **Υπολόγισε** ζεύγη Ritz $(\theta_i, \hat{x}_i) i=1,2,\dots,k$ // $\hat{x}_i = Q_m \hat{g}$
- 7 **for** $i = 1 \leftarrow k$ **do**
- 8 **Υπολόγισε**

$$\alpha_i = \frac{\sigma_i}{|\theta_i|^d \|A_d\|_F + \dots + |\theta_i| \|A_1\|_F + \|A_0\|_F}$$
- 9 **end**
- 10 Εάν όλα τα σχετικά υπόλοιπα ικανοποιούν $a_i < tol$ επέστρεψε τα (θ, \hat{x}_i) . Διαφορετικά θέσε $p = m - k$ Αν επιλεγθούν Refined shifts πηγαινε στο βήμα 11 ,διαφορετικά στο βήμα 12.
- 11 Βρές τις ρίζες $\{\rho_j^{(i)}\}_{j=1}^d$ του
 $\sum_{i=0}^n (g_i^H \hat{A}_i g \hat{\lambda}^d) = 0 \forall i = dm - p + 1, \dots, dm$
- 12 Επέλεξε p τιμές $\hat{\lambda}_i$ (ή ρ_i) που απέχουν την μεγαλύτερη απόσταση από τις επιθυμητές τιμές Ritz, θέσε $\phi_i = \hat{\lambda}_i$ (ή ρ_i). Εκτέλεσε p βήματα της μεθόδου shifted QR, υπολόγισε τους πίνακες $Q_k^+ P_k^{(i)+}$ το διάνυσμα

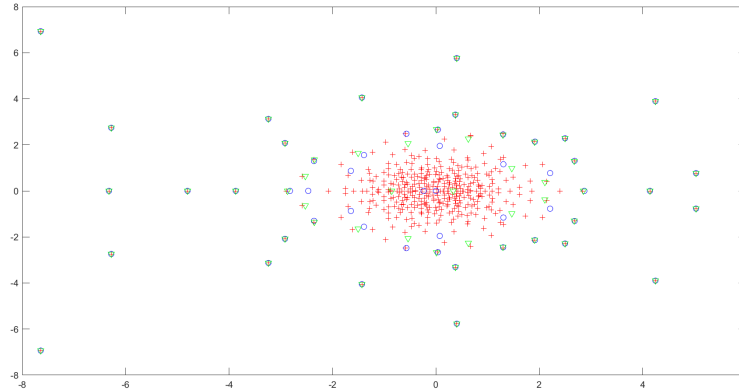
$$\begin{bmatrix} q_{k+1}^+ \\ p_{k+1}^{(1)+} \\ \vdots \\ p_{k+1}^{(n-1)+} \end{bmatrix}$$
 και το μέγεθος f_k^+ πήγαινε στο 1.

Παράδειγμα Εφαρμογής της SOAR

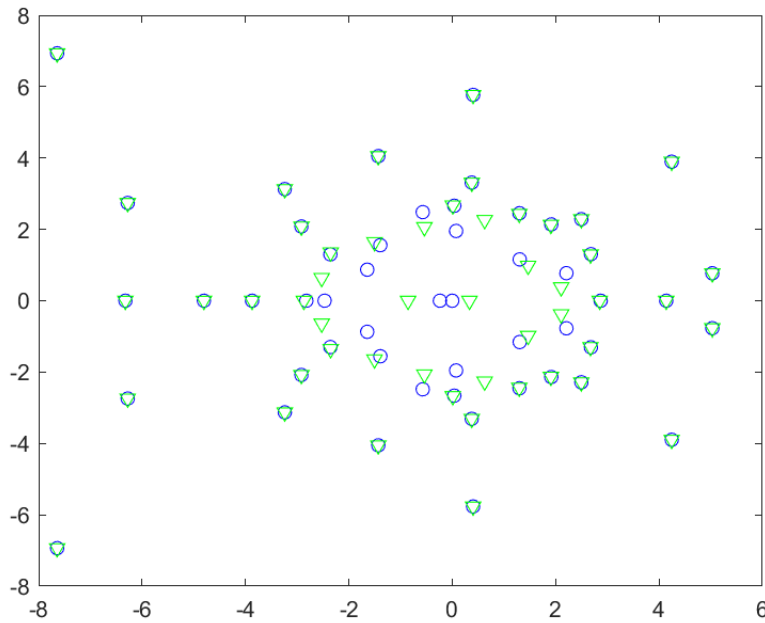
Για το συγκεκριμένο παράδειγμα χρησιμοποιήθηκε ένα QEP με τυχαίους, αραιούς πίνακες διαστάσεων $[200 \times 200]$ και τυχαίο αρχικό διάνυσμα. Πραγματοποιήθηκαν 25, 50 επαναλήψεις της μεθόδου **SOAR** στα πρώτα γραφήματα και στην συνέχεια πραγματοποιήθηκαν 50 επαναλήψεις στον πίνακα του μετασχηματισμένου γραμμικού προβλήματος με χρήση της μεθόδου Arnoldi. Οπώς είναι εμφανές απο τα αποτελέσματα των δύο μεθόδων οι προσεγγίσεις είναι συγκρίσιμες, άλλα όπως είχε αναφερθεί οι δομικές πληροφορίες χάνονται λόγω του μετασχηματισμού.



Εικόνα 3.1: 25, 50 επαναλήψεις της SOAR.



Εικόνα 3.2: 50 επαναλήψεις των μεθόδων Arnoldi, SOAR.



Εικόνα 3.3: 50 επαναλήψεις των μεθόδων Arnoldi, SOAR χωρίς τις πραγματικές ιδιοτιμές.

Βιβλιογραφία

- [1] Walter Edwin Arnoldi. The principle of minimized iterations in the solution of the matrix eigenvalue problem. *Quarterly of applied mathematics*, 9(1): 17–29, 1951.
- [2] Zhaojun Bai and Yangfeng Su. Soar: A second-order arnoldi method for the solution of the quadratic eigenvalue problem. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 26(3):640–659, 2005.
- [3] Liang Bao, Yiqin Lin, and Yimin Wei. Restarted generalized krylov subspace methods for solving large-scale polynomial eigenvalue problems. *Numerical Algorithms*, 50(1):17–32, 2009.
- [4] Fran coise Tisseur. Backward error and condition of polynomial eigenvalue problems. *Linear Algebra and Appl*, 309:339–361, 2000.
- [5] Gene H Golub and Charles F Van Loan. *Matrix computations*, volume 3. JHU press, 2012.
- [6] Tsung-Ming Huang, Zhongxiao Jia, and Wen-Wei Lin. On the convergence

- of ritz pairs and refined ritz vectors for quadratic eigenvalue problems. *BIT Numerical Mathematics*, 53(4):941–958, 2013.
- [7] Zhongxiao Jia. A refined subspace iteration algorithm for large sparse eigenproblems. *Applied numerical mathematics*, 32(1):35–52, 2000.
- [8] Zhongxiao Jia, Yuquan Sun, et al. Implicitly restarted generalized second-order arnoldi type algorithms for the quadratic eigenvalue problem. *Taiwanese Journal of Mathematics*, 19(1):1–30, 2015.
- [9] Cornelius Lanczos. Solution of systems of linear equations by minimized iterations. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 49(1):33–53, 1952.
- [10] Richard B Lehoucq. Implicitly restarted arnoldi methods and subspace iteration. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 23(2):551–562, 2001.
- [11] Richard B Lehoucq and Danny C Sorensen. Deflation techniques for an implicitly restarted arnoldi iteration. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 17(4):789–821, 1996.
- [12] Richard B Lehoucq, Danny C Sorensen, and Chao Yang. *ARPACK users' guide: solution of large-scale eigenvalue problems with implicitly restarted Arnoldi methods*, volume 6. Siam, 1998.
- [13] D Steven Mackey, Niloufer Mackey, Christian Mehl, and Volker Mehrmann. Vector spaces of linearizations for matrix polynomials. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 28(4):971–1004, 2006.

-
- [14] Y Saad. Variations on arnoldi's method for computing eigenproblems of large non-hermitian matrices. *Linear Algebra Appl*, 34:269–295, 1980.
- [15] Youcef Saad. *Numerical methods for large eigenvalue problems*. Manchester University Press, 1992.
- [16] Danny C Sorensen. Implicit application of polynomial filters in ak-step arnoldi method. *Siam journal on matrix analysis and applications*, 13(1): 357–385, 1992.
- [17] Danny C Sorensen. Numerical methods for large eigenvalue problems. *Acta Numerica*, 11:519–584, 2002.
- [18] Gilbert W Stewart. A krylov–schur algorithm for large eigenproblems. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 23(3):601–614, 2002.
- [19] Françoise Tisseur and Karl Meerbergen. The quadratic eigenvalue problem. *SIAM review*, 43(2):235–286, 2001.
- [20] Lloyd N Trefethen and David Bau III. *Numerical linear algebra*, volume 50. Siam, 1997.
- [21] Wei Wei and Hua Dai. Implicitly restarted refined generalised arnoldi method with deflation for the polynomial eigenvalue problem. *East Asian Journal on Applied Mathematics*, 8, 06 2018. doi: 10.4208/eajam.070517.180917a.
- [22] Wei Wei and Hua Dai. Implicitly restarted refined generalised arnoldi method with deflation for the polynomial eigenvalue problem. *EAST ASIAN JOURNAL ON APPLIED MATHEMATICS*, 8(1):82–99, 2018.

- [23] Liping Zhou, Liang Bao, Yiqin Lin, Yimin Wei, and Qinghua Wu. Restarted generalized second-order krylov subspace methods for solving quadratic eigenvalue problems. *International Journal of Computational and Mathematical Sciences*, 4(3):148–155, 2010.