

Mat-1.139 Matematiikan erikoistyöt

Yleistetyn ominisarvotetävän ratkaisu Lanczos-iteroinnilla

Jarkko Niiranen

40710 P

27. kesäkuuta 2000

Sisällys

1. Johdanto	1
2. Lanczos-iteroinnin perusteet	2
2.1 Krylovin aliavaruuden kannanmuodostus	2
2.2 Lanczos-iteraatio	3
2.3 Lanczos-iteraation suppenemisominaisuudet	4
2.4 Lanczos-vektorien uudelleenortogonalisointi	5
2.4.1 Täydellinen uudelleenortogonalisointi	5
2.4.2 Valikoiva uudelleenortogonalisointi	6
2.5 Lohko-Lanczos-iteraatio	7
2.6 Lohko-Lanczos-iteraation suppenemisominaisuudet	8
3. Lanczos-sovelluksessa käytetyt ratkaisutekniikat	9
3.1 Yleistetty ominaisarvotehtävä	9
3.2 Yleistetty lohko-Lanczos-iteraatio	9
3.3 Projisoitu ominaisarvotehtävä	11
3.4 QR-hajotelman muodostaminen	12
3.5 Lanczos-vektorien ortogonaalisuuden säilyttäminen	12
3.6 Spektrin viipalointi	13
3.7 Matriisin B positiivisemidefiniittisyyden aiheuttamat muutokset	14
3.8 Iterointikokonaisuuden uudelleenaloitus	14
3.9 Ohjelmoinnin toteutus	15
3.10 Esimerkkitapaus	16
Viitteet	18

1 Johdanto

Yleistetty ominaisarvotehtävä [6]

$$Ax = \lambda Bx, \quad (1)$$

missä A ja B ovat $n \times n$ -matriiseja, x nollasta poikkeava n -vektori sekä λ skalaari, on ollut pitkään erilaisten sovellusalueiden kannalta tärkeä laskennallinen tehtävä [5]. Kun matriisi B on yksikkömatriisi I , kyseessä on tavallinen ominaisarvotehtävä [6]. Tehtävän ratkaisut, mahdolliset n ominaisarvo—ominaisvektori-paria (λ, x) voivat kuvata esimerkiksi rakenteen ominaisvärähtelytaajuuksia ja -muotoja. Yhtälöryhmän dimensio n voi olla kymmeniä tuhansia, jolloin laskenta vie paljon aikaa, vaikka ratkaistaisiinkin vain muutama ominaisarvo esimerkiksi ominaisarvojoukon eli spektrin ääripäistä tai tietyltä väliltä. [5]

[5] Krylovin aliavaruuteen perustuvat ratkaisumenetelmät ovat osoittautuneet useissa suurten ja harvojen matriisien tapauksissa paremmiksi menetelmiksi kuin vektori-iteraatiot (suora tai käänteinen) [3], transformaatiomenetelmät (Jacobi, Hausholder tai Givens) [3] tai determinanttihaku [1]. Lähtövektoriin q_1 , $\|q_1\|_2 = 1$, liittyvä matriisin A Krylovin aliavaruus

$$K(A, q_1, j) = \text{span}\{q_1, Aq_1, \dots, A^{j-1}q_1\} \quad (2)$$

eli vektorien $q_1, Aq_1, \dots, A^{j-1}q_1$ virittämä aliavaruus. Osoittautuu, että jonon j :s vektori suppenee normeerattuna kohti matriisin A suurinta ominaisarvoa vastaavaa ominaisvektoria. Lanczos-iteraatiossa muodostetaan kanta Krylovin aliavaruudelle ja alkuperäinen ominaisarvotehtävä projisoidaan tähän kantaan, jolloin tuloksena on alkuperäistä tehtäväkokoa pienempi tridiagonaalisen matriisin tavallinen ominaisarvotehtävä, joka voidaan ratkaista tehokkaasti useilla eri menetelmillä. [3]

Lanczos-iteraatiosta saadaan vielä tehokkaampi ja käytännöllisempi ratkaisumenetelmä muuntamalla se lohkomuotoon ja käyttämällä spektrin viipalointia. Lohko-Lanczos-iteraatiossa vektorin q_1 tilalla on $n \times p$ -matriisi $Q_1 = [q_1^{(1)} q_1^{(2)} \dots q_1^{(p)}]$, $Q_1^T Q_1 = I$, $1 < p \ll n$, missä p on lohkokoko, jolloin vastaava Krylovin aliavaruus

$$K(A, Q_1, j) = \text{span}\{Q_1, AQ_1, \dots, A^{j-1}Q_1\}. \quad (3)$$

Lohkoversion avulla erityisesti moninkertaiset ominaisarvot löytyvät paremmin. Spektrinviipalointimenetelmässä suoritetaan ns. siirros- ja inversiovaiheet, joista inversiovaihe vaatii myös matriisin LU-hajotelman muodostamisen. Siirros-inversioinnointi nopeuttaa siirroksen lähellä sijaitsevien ominaisarvojen suppenemista, mutta on kuitenkin huomattava, että LU-hajotelman muodostaminen vie ainakin osan säästetyistä ajasta. Peräkkäisillä siirros—inversio-vaiheilla ominaisarvot voidaan ratkaista pienissä osissa viipale kerrallaan. Jos halutaan ratkaista suuri määrä ominaisarvoja tai spektri on kimputtunut, tämä menettely tekee ratkaisualgoritmista normaalia versiota huomattavasti tehokkaamman. [5]

Tämän työn luvussa 2 käsitellään Lanczos-algoritmien perusteita seuraten viitteitä [2], [3], [6] ja [7]. Luvussa 3 käsitellään yleistetyn ominaisarvotehtävän (1) ratkaisuun tarkoitettua Lanczos-sovellusta [5].

2 Lanczos-iteroinnin perusteet

[3] Tarkastellaan tavallista ominaisarvotehtävää

$$Ax = \lambda x, \quad (4)$$

missä A on suuri, symmetrinen, harva ja reaalinen $n \times n$ -matriisi, x nolosta poikkeava n -vektori ja λ reaaliluku. Tehtävän (4) ratkaisuun — erityisesti suurimpien tai pienimpien ominaisarvojen λ suhteen — soveltuvan Lanczos-iteraation perusidea voidaan esittää esimerkiksi Krylovin aliavaruuden (2) kannanmuodostuksen näkökulmasta.

2.1 Krylovin aliavaruuden kannanmuodostus

[3] Rayleigh'n suhteen

$$r(x) = \frac{x^T Ax}{x^T x}, \quad (5)$$

missä $x \neq 0$, maksimi- ja minimiarvot ovat matriisiin A maksimi- ja minimiominaisarvot $\lambda^{(1)}(A)$ ja $\lambda^{(n)}(A)$. Olkoon $\{q_j\} \subset R^n$ ortonormaalien vektorien jono ja luvut

$$M_j = \lambda^{(1)}(U_j^T A U_j) = \max_{y \neq 0} \frac{y^T (U_j^T A U_j) y}{y^T y} = \max_{\|y\|_2=1} r(U_j y) \leq \lambda^{(1)}(A) \text{ ja} \quad (6)$$

$$m_j = \lambda^{(n)}(U_j^T A U_j) = \min_{y \neq 0} \frac{y^T (U_j^T A U_j) y}{y^T y} = \min_{\|y\|_2=1} r(U_j y) \geq \lambda^{(n)}(A), \quad (7)$$

missä $y \in R^j$ ja

$$U_j = [q_1 \dots q_j]. \quad (8)$$

Lanczos-iteraatio voidaan johtaa vastaamaan seuraavaan kysymykseen: Miten vektorit q_1, \dots, q_j olisi valittava, jotta luvut M_j ja m_j olisivat indeksin j edetessä aina vain paranevia ominaisarvojen $\lambda^{(1)}(A)$ ja $\lambda^{(n)}(A)$ arvioita.

Oletetaan, että $u_j \in \text{span}\{q_1, \dots, q_j\}$ siten, että $M_j = r(u_j)$. Koska suhde $r(x)$ kasvaa nopeimmin gradienttinsa

$$\nabla r(x) = \frac{2(Ax - r(x)x)}{x^T x} \quad (9)$$

suunnassa, niin $M_{j+1} > M_j$, jos q_{j+1} määritellään siten, että $\nabla r(u_j) \in \text{span}\{q_1, \dots, q_{j+1}\}$ (olettaen, että $\nabla r(u_j) \neq 0$). Vastaavasti, jos $v_j \in \text{span}\{q_1, \dots, q_j\}$ siten, että $m_j = r(v_j)$, niin $m_{j+1} < m_j$, jos q_{j+1} määritellään siten, että $\nabla r(v_j) \in \text{span}\{q_1, \dots, q_{j+1}\}$.

Koska $\nabla r(x) \in \text{span}\{x, Ax\}$, niin edellä asetetut oletukset ja niistä johdetut vaatimukset täyttyvät, jos

$$\text{span}\{q_1, \dots, q_j\} = \text{span}\{q_1, Aq_1, \dots, A^{j-1}q_1\} = K(A, q_1, j) \text{ ja} \quad (10)$$

$$\text{span}\{q_1, \dots, q_{j+1}\} = \text{span}\{q_1, Aq_1, \dots, A^j q_1\} = K(A, q_1, j+1). \quad (11)$$

Vektorien q_1, \dots, q_j on siis muodostettava Krylovin aliavaruuden $K(A, q_1, j)$ ortonormaali kanta.

Luonnollisesti kantavektorijoukko $\{q_j\}$ voitaisiin muodostaa monella eri tavalla. Periaatteessa matriisi A voitaisiin tridiagonalisoida ortogonaalimatriisilla, jonka ensimmäinen sarake on vektori q_1 : Jos $Q^T A Q = T$, missä T on tridiagonaalimatriisi ja $Q e_1 = q_1$, niin Krylovin matriisin QR-hajotelmaksi saadaan

$$[q_1 \ Aq_1 \ \dots \ A^{n-1} q_1] = Q [e_1 \ T e_1 \ \dots \ T^{n-1} e_1]. \quad (12)$$

Tridiagonalisointi voitaisiin suorittaa esimerkiksi Householder-muunnoksilla, mutta useissa harvan matriisin tapauksissa tämä menetelmä ja muut ns. päivitysmenetelmät eivät ole käyttökelpoisia, sillä matriisi A ei välttämättä pysy enää päivitettäessä harvana.

Lanczos-iteraatio perustuu siihen, että tridiagonaalimatriisin

$$T = T_n = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ 0 & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix} \quad (13)$$

alkiot pyritään laskemaan suoraan määritelmän avulla. Asettamalla $Q = [q_1 \ \dots \ q_n]$ saadaan yhtälöt

$$b_0 q_0 = 0 \text{ ja} \quad (14)$$

$$Aq_j = \beta_{j-1} q_{j-1} + \alpha_j q_j + \beta_j q_{j+1} \quad (15)$$

kaikilla $j = 1, \dots, n-1$. Koska vektorijoukko $\{q_1, \dots, q_n\}$ on ortonormaali, niin

$$\alpha_j = q_j^T A q_j.$$

Lisäksi, jos

$$r_j = (A - \alpha_j I)q_j - \beta_{j-1} q_{j-1} \quad (16)$$

on nolasta poikkeava, niin

$$q_{j+1} = \frac{r_j}{\beta_j}, \quad (17)$$

missä $\beta_j = \pm \|r_j\|_2$.

2.2 Lanczos-iteraatio

[3] Yhtälöistä (13) — (17) saadaan Lanczos-iteraatio, jossa matriisilla A kerrotaan ainoastaan vektoria q_j ; matriisia A ei siis käsitellä millään muulla tavalla.

2.2-1 Lanczos-iteraatio.

I. Alustus:

$$\text{I.1. } r_0 = q_1, \beta_0 = 1, q_0 = 0, j = 0$$

II. Lanczos-iteraatioaskeleet:

Toistetaan seuraavat rivit kunnes $\beta_j = 0$:

II.1. $q_{j+1} = r_j / \beta_j$,

II.2. $j \leftarrow j + 1$

II.3. $\alpha_j = q_j^T A q_j$

II.4. $r_j = (A - \alpha_j I) q_j - \beta_{j-1} q_{j-1}$

II.5. $\beta_j = \| r_j \|_2$

III. Lopetus:

Ratkaistaan ominaisarvot (ja -vektorit):

III.1. $T_j s^{(k)} = \theta^{(k)} s^{(k)}$

III.2. $x^{(k)} = U_j s^{(k)}$

Lanczos-iteraatioissa muodostuvia vektoreita q_1, \dots, q_j sanotaan Lanczos-vektoreiksi. Lanczos-iteraation tehokkuus nähdään algoritmin 2.2-1 kohdasta II: Jos halutaan ratkaista vain ominaisarvoja $\theta^{(k)}$, uuden Lanczos-vektorin q_{j+1} laskentaa varten Lanczos-vektoreista q_1, \dots, q_j ei tarvitse säilyttää kuin kaksi viimeistä. Jos halutaan laskea myös ominaisvektoreita $x^{(k)}$, kohdasta III nähdään, että kaikki Lanczos-vektorit on säilytettävä. Kohdan III projisoitu ominaisarvot tehtävä voidaan ratkaista esimerkiksi käyttämällä symmetristä QR-algoritmia [3]. Lanczos-iteraation perusominaisuudet käyvät ilmi seuraavasta lauseesta [3]:

2.2-2 Lause. Olkoon A symmetrinen ja reaalinen $n \times n$ -matriisi, $q_1 \in R^n$ ja $\|q_1\|_2 = 1$. Silloin Lanczos-iteraatio 2.2-1 etenee, kunnes $j = \text{rank}[q_1 A q_1 \dots A^{n-1} q_1] =: m$. Lisäksi kaikilla $j = 1, \dots, m$ pätee

$$A U_j = U_j T_j + r_j e_j^T, \tag{18}$$

missä T_j on yhtälön (13) tridiagonaalimatriisi, yhtälön (8) matriisin U_j sarakkeet ovat ortogonaaliset ja $\text{range} U_j = K(A, q_1, j)$.

2.3 Lanczos-iteraation suppenemisominaisuudet

[3] Kun $\beta_j = 0$ Lanczos-iteraatioissa 2.2-1, niin on muodostunut invariantti aliavaruus (jos ehdosta $0 \neq x \in K$ seuraa, että $Ax \in K$, niin aliavaruus K on invariantti matriisin A suhteen), jolloin kaikki T_j :n ominaisarvot ovat supenneet ja $\lambda(T_j) \subset \lambda(A)$. Käytännössä β_j on harvoin tasan nolla tai edes hyvin pieni. Seuraava lause antaa paremman arviointikriteerin ominaisparien suppenemiselle.

2.3-1 Lause. Olkoon

$$S_j^T T_j S_j = \text{diag}(\theta^{(1)}, \dots, \theta^{(j)}) \tag{19}$$

Lanczos-iteraation askeleen j tridiagonaalimatriisin T_j Schurin hajotelma, missä $S_j = (s_{pq})$. Jos merkitään

$$Y_j = [y_1 \dots y_j] = U_j S_j, \tag{20}$$

niin kaikilla $k = 1, \dots, j$ pätee

$$\|A y^{(k)} - \theta^{(k)} y^{(k)}\| = |\beta_j| |s_{jk}|. \tag{21}$$

Lauseesta 2.3-1 saadaan virhearvio matriisin T_j ominaisarvoille $\theta^{(k)}$:

$$\min_{\mu \in \lambda(A)} |\theta^{(k)} - \mu| \leq |\beta_j| \|s_{jk}\|, \quad k = 1, \dots, j. \quad (22)$$

Lanczos-iteraation suppenemisominaisuuksia koskevat tulokset tunnetaan nimellä Kaniel—Paige-teoria [3]. Seuraavien lauseiden mukaan spektrin ääripään ominaisarvot suppenevat nopeasti [3]. Lauseissa esiintyvä j :s Chebychevin polynomi määritellään rekursiolla $c_j(x) = 2xc_{j-1}(x) - c_{j-2}(x)$, $c_0 = 1$, $c_1 = x$. Polynomi on ykkösellä rajoitettu välillä $[-1, 1]$ ja kasvaa hyvin nopeasti välin ulkopuolella. [6]

2.3-2 Lause. Olkoon A symmetrinen ja reaalinen $n \times n$ -matriisi, jonka ominaisarvot ovat $\lambda^{(n)} \leq \dots \leq \lambda^{(1)}$ ja vastaavat ortonormaalit ominaisvektorit $z^{(n)}, \dots, z^{(1)}$. Olkoot $\theta^{(j)} \leq \dots \leq \theta^{(1)}$ Lanczos-iteraation 2.2-1 matriisin T_j ominaisarvot. Tällöin

$$\lambda^{(1)} - \varepsilon \leq \theta^{(1)} \leq \lambda^{(1)}, \quad (23)$$

missä $\varepsilon = \frac{(\lambda^{(1)} - \lambda^{(n)}) \tan^2 \varphi^{(1)}}{c_{j-1} (1 + 2\rho^{(1)})^2}$ sekä $\cos \varphi^{(1)} = |q^{(1)T} z^{(1)}|$, $\rho^{(1)} = \frac{\lambda^{(1)} - \lambda^{(2)}}{\lambda^{(2)} - \lambda^{(n)}}$ ja c_{j-1} on $j-1$:s Chebychevin polynomi.

2.3-3 Seuraus. Lauseen 2.3-2 oletuksilla

$$\lambda^{(n)} \leq \theta^{(j)} \leq \lambda^{(n)} + \varepsilon, \quad (24)$$

missä $\varepsilon = \frac{(\lambda^{(1)} - \lambda^{(n)}) \tan^2 \varphi^{(n)}}{c_{j-1} (1 + 2\rho^{(n)})^2}$ sekä $\cos \varphi^{(n)} = |q^{(1)T} z^{(n)}|$, $\rho^{(n)} = \frac{\lambda^{(n-1)} - \lambda^{(n)}}{\lambda^{(1)} - \lambda^{(n-1)}}$ ja c_{j-1} on $j-1$:s Chebychevin polynomi.

2.4 Lanczos-vektorien uudelleenortogonalisointi

2.4.1 Täydellinen uudelleenortogonalisointi

[3] Lauseen 2.2-2 yhtälön (18) likiarvovastineelle pätee

$$A\hat{U}_j = \hat{U}_j \hat{T}_j + \hat{r}_j e_j^T + C_j, \quad (25)$$

missä

$$\|C_j\|_2 \cong u \|A\|_2, \quad (26)$$

mikä on erityisen hyvä tulos. Liukulukupyöristyksen fl ja ykkösen pyöristysvirheen u välillä on yhteys $fl(x) = x(1 + \omega)$, $|\omega| \leq u$. Jos

$$\hat{\beta}_j = fl(\|\hat{r}_j\|_2) \quad (27)$$

ja

$$\hat{q}_{j+1} = fl\left(\frac{\hat{r}_j}{\hat{\beta}_j}\right), \quad (28)$$

niin saadaan

$$\hat{\beta}_j \hat{q}_{j+1} = \hat{r}_j + w_j, \quad (29)$$

missä

$$\|w_j\|_2 \cong u \|\hat{r}_j\|_2 \cong u \|A\|_2, \quad (30)$$

joten kaikilla $k = 1, \dots, j$ pätee

$$|\hat{q}_{j+1}^T \hat{q}_k| \cong \frac{|\hat{r}_j^T \hat{q}_k| + u \|A\|_2}{|\hat{\beta}_j|}. \quad (31)$$

Vektorit q_1, \dots, q_j menettävät siis keskinäisen ortogonaalisuuden (jopa ideaalitapauksessa $\hat{r}_j^T \hat{U}_j = 0$) erityisesti silloin, kun $\hat{\beta}_j$ on pieni eli silloin, kun osa ominaisarvoaprosimaatioista on jo hyvin tarkkoja, mikä nähdään lauseen 2.3-1 yhtälöstä (21). Ortogonaalisuuden menetys kulkee siis rinnan ominaisarvojen suppenemisen kanssa [6]. Ortogonaalisuuden menetys ei siis johdu pääasiassa asteittain kasautuvista pyöristysvirheistä vaan normin $\hat{\beta}_j$ pienentymisen aiheuttamasta epätarkkuudesta vektorin \hat{r}_j laskennassa [3].

2.4.1-1 Lause. Jos yhtälö (25) on voimassa, niin on olemassa ominaisarvot $\mu^{(1)}, \dots, \mu^{(j)} \in \lambda(A)$ siten, että kaikilla $k = 1, \dots, j$ pätee

$$|\mu^{(k)} - \lambda^{(k)}(\hat{T}_j)| \leq \sqrt{2} \frac{\|\hat{r}_j\|_2 + \|C_j\|_2}{\sigma_j(\hat{U}_j)}, \quad (32)$$

missä σ_j tarkoittaa j :nneksi suurinta singulaariarvoa.

[3] Ominaisarvoaprosimaatioiden tarkkuutta voidaan siis parantaa ortogonalisoidamalla jokainen uusi Lanczos-vektori kaikkien edellisten Lanczos-vektorien suhteen eikä siis vain kahden edellisen suhteen. Tästä menetelmästä käytetään nimitystä täydellinen uudelleenortogonalisointi. Lanczos-iteraation 2.2-1 kohtaan II.4 lisätään tällöin korvaukset $r_j \leftarrow r_j - q_m(q_m^T r_j)$, $m \leq j$ [6]. On huomattava, että tällöin kaikki Lanczos-vektorit q_m , $m \leq j$, täytyy säilyttää.

Koska useiden ortogonalisointien suorittaminen vie aikaa ja vaatii vektoreiden säilyttämisen, on kehitetty edullisempia ortogonalisointimenetelmiä selvittämällä tarkemmin, miten ortogonaalisuus menetetään [3].

2.4.2 Valikoiva uudelleenortogonalisointi

[3] Oletetaan, että on saatu projisoidun ominaisarvotekävän ominaisarvoille ja ominaisvektoreille likiarvoratkaisut $\hat{\theta}^{(1)}, \dots, \hat{\theta}^{(j)}$ ja $\hat{s}^{(1)}, \dots, \hat{s}^{(j)}$. Jos alkuperäisen ominaisarvotekävän ominaisvektoreiden matriisi

$$\hat{Y}_j = [\hat{y}^{(1)} \dots \hat{y}^{(j)}] = \mathcal{A}(\hat{U}_j \hat{S}_j), \quad (33)$$

missä projisoidun ominaisarvotekävän ominaisvektoreiden matriisi $\hat{S}_j = (\hat{s}_{pq})$, niin kaikilla $k = 1, \dots, j$ pätee

$$|\hat{q}_{j+1}^T \hat{y}^{(k)}| \cong \frac{u \|A\|_2}{|\hat{\beta}_j| |\hat{s}_{jk}|} \text{ ja} \quad (34)$$

$$\|A \hat{y}^{(k)} - \hat{\theta}^{(k)} \hat{y}^{(k)}\|_2 \cong |\hat{\beta}_j| |\hat{s}_{jk}|. \quad (35)$$

Viimeisin laskettu Lanczos-vektori \hat{q}_{j+1} voi siis sisältää minkä tahansa supenneen Ritzin vektorin $\hat{y}^{(k)}$ suuntaisia komponentteja. Tätä ei-toivottua ominaisuutta voidaan kompensoida ortogonalisoinnalla Lanczos-vektori \hat{q}_{j+1} kaikkien supenneiden Ritzin vektorien suhteen. Usein ortogonalisointi suoritetaan kuitenkin vain joidenkin parhaiten supenneiden Ritzin vektorien suhteen. Tästä menetelmästä käytetään nimitystä valikoiva uudelleenortogonalisointi [6]. Lanczos-iteraation 2.2-1 kohtaan II.4 lisätään tällöin korvaukset $r_j \leftarrow r_j - x^{(k)}(x^{(k)T} r_j)$, joillakin $k \leq j$ [2]. On huomattava, että tällöin kaikki Lanczos-vektorit q_k , $k \leq j$, täytyy säilyttää ominaisvektorien $x^{(k)}$ laskemista varten.

2.5 Lohko-Lanczos-iteraatio

[6] Koska tridiagonaalimatriisilla T_j ei voi olla moninkertaisia ominaisarvoja, on moninkertaisten ominaisarvojen ratkaisuun käytettävä tavanomaisen Lanczos-iteraation suhteen analogista lohko-versiota. Lohkokoon p on oltava vähintään yhtä suuri kuin ominaisarvojen monikerroista suurin. Lanczos-iteraatiossa 2.2-1 on suoritettava seuraavat korvaukset [3]:

1. vektori $q_j \leftarrow n \times p$ -matriisi Q_j
2. vektori $r_j \leftarrow n \times p$ -matriisi R_j
3. reaaliluku $\alpha_j \leftarrow p \times p$ -matriisi F_j
4. reaaliluku $\beta_j \leftarrow p \times p$ -yläkolmiomatriisi G_j

$$5. \text{ tridiagonaalimatriisi } T_j \leftarrow \text{lohkotridiagonaalimatriisi } T_j = \begin{bmatrix} F_1 & G_1 & & 0 \\ G_1 & F_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & G_{j-1} \\ 0 & & G_{j-1} & F_j \end{bmatrix}$$

Lohko-Lanczos-iteraatio voidaan esittää seuraavassa muodossa [6]:

2.5-1 Lohko-Lanczos-iteraatio.

I. Alustus:

$$I.1. R_0 = Q_1, Q_1^T Q_1 = I, G_0 = I, Q_0 = 0, j_{\max} \leq n/p, j = 0$$

II. Lanczos-iteraatioaskeleet:

Toistetaan seuraavat rivit askelille $j = 1, \dots$ kunnes halutut ominaisparit ovat supenneet tai $j = j_{\max}$:

$$II.1. R_{j-1} = Q_j G_{j-1}, \text{ QR-hajotelma}$$

$$II.2. R_j = A Q_j - Q_{j-1} G_{j-1}^T$$

$$II.3. F_j = Q_j^T R_j$$

$$II.4. R_j \leftarrow R_j - Q_j F_j$$

Ratkaistaan ominaisarvot (ja -vektorit):

$$II.5. T_j s^{(k)} = \theta^{(k)} s^{(k)}$$

$$(II.6. x^{(k)} = U_j s^{(k)})$$

Lanczos-iteraation tehokkuuden oleelliset tekijät säilyvät myös lohkoversiona: Jos halutaan ratkaista vain ominaisarvoja $\theta^{(k)}$, uuden Lanczos-lohkon Q_{j+1} laskentaa varten Lanczos-lohkoista Q_1, \dots, Q_j ei tarvitse säilyttää kuin kaksi viimeistä. Jos halutaan laskea myös ominaisvektoreita $x^{(k)}$, kaikki Lanczos-lohkot on säilytettävä. Lohko-Lanczos-iteraation 2.5-1 kohdan II QR-hajotelma voidaan muodostaa esimerkiksi modifioidulla Gram—Schmidt-menetelmällä [3], [5]. Jos lohko-Lanczos-iteraation yhteydessä käytetään esimerkiksi luvun 2.4.2 valikoivaa uudelleenortogonalisointia, jota voidaan pitää suositeltavana ortogonalisointimenetelmänä [6], matriisin R_{j+1} sarakkeet voidaan ortogonalisoida valittujen Ritzin vektorien $x^{(k)}$ suhteen Gram—Schmidt-menetelmällä [3], [5] (ks. luku 2.4.2).

2.6 Lohko-Lanczos-iteraation suppenemisominaisuudet

Lohkokoko p vaikuttaa myös ominaisarvojen suppenemiseen [3]:

2.6-1 Lause. Olkoon A symmetrinen ja reaalinen $n \times n$ -matriisi, jonka ominaisarvot ovat $\lambda^{(n)} \leq \dots \leq \lambda^{(1)}$ ja vastaavat ortonormaalit ominaisvektorit $z^{(n)}, \dots, z^{(1)}$. Olkoot $\mu^{(p)} \leq \dots \leq \mu^{(1)}$ lohko-Lanczos-iteraation matriisin T_j p suurinta ominaisarvoa. Jos $Z_1 = [z^{(1)} \dots z^{(p)}]$ ja $\cos\theta^{(p)} = \sigma_p(Z_1^T Q_1) > 0$, missä σ_p tarkoittaa p :nneksi suurinta singulaariarvoa, niin kaikilla $k = 1, \dots, p$ pätee

$$\lambda^{(k)} - \varepsilon^{(k)} \leq \mu^{(k)} \leq \lambda^{(k)}, \quad (36)$$

missä $\varepsilon^{(k)} = \frac{(\lambda^{(1)} - \lambda^{(k)}) \tan^2 \theta^{(p)}}{c_{j-1} \left(\frac{1 + \gamma^{(k)}}{1 - \gamma^{(k)}} \right)^2}$ sekä $\gamma^{(k)} = \frac{\lambda^{(k)} - \lambda^{(p+1)}}{\lambda^{(k)} - \lambda^{(n)}}$ ja c_{j-1} on $j-1$:s Chebychevin polynomi.

Virherajat siis paranevat, kun lohkokoko p kasvaa. Matriisin T_j ominaisarvojen vaatima laskentatyö on kuitenkin verrannollinen lohkokoon p toiseen potenssiin [6].

3 Lanczos-sovelluksessa käytetyt ratkaisutekniikat

3.1 Yleistetty ominaisarvotehtävä

Yleistetyn ominaisarvotehtävän (1) ominaisarvot voidaan määritellä seuraavalla tavalla [2]:

3.1-1 Määritelmä. Olkoot A ja B $n \times n$ -matriiseja. Jos $\det(A - \lambda B)$ ei ole identtisesti nolla, niin matriisi $A - \lambda B$ (tai matriisipari (A, B)) on säännöllinen, muussa tapauksessa singulaarinen. Jos $A - \lambda B$ on säännöllinen, polynomi $p(\lambda) = \det(A - \lambda B)$ on matriisin $A - \lambda B$ karakteristinen polynomi ja matriisin $A - \lambda B$ ominaisarvot ovat joko

1. yhtälön $p(\lambda) = 0$ juuret tai
2. ∞ (monikertana $n - \deg(p)$), jos $\deg(p) < n$.

[6] Yleistetyllä ominaisarvotehtävällä (1) on kolme oleellista uutta ominaisuutta verrattuna tavalliseen ominaisarvotehtävään (4): Kaikki skalaarit voivat olla jotakin ominaisvektoria vastaavia ominaisarvoja; ominaisarvona voi olla ∞ ; ominaisarvot voivat olla kompleksisia, vaikka matriisit A ja B olisivatkin symmetrisiä. Seuraava lause antaa kuitenkin ehdot ominaisarvojen reaalisuudelle:

3.1-2 Lause. Olkoot A ja B symmetrisiä $n \times n$ -matriiseja. Jos matriisi B on lisäksi positiividefiniitti, niin matriisiparilla (A, B) on n reaalista ominaisarvoa välillä $[-\|B^{-1}A\|, \|B^{-1}A\|]$ ja n vastaavaa lineaarisesti riippumatonta ominaisvektoria. Lisäksi, jos ominaisarvoille pätee $\lambda^{(i)} \neq \lambda^{(j)}$, niin vastaavat ominaisvektorit ovat B -ortogonaaleja: $z^{(i)T} B z^{(j)} = 0$. Jos $\lambda^{(i)} = \lambda^{(j)}$, niin vastaavat ominaisvektorit voidaan valita siten, että ne ovat B -ortogonaaleja.

[7] Yleistetty ominaisarvotehtävä (1) voidaan redusoida tavalliseen muotoon (4) usealla eri tavalla riippuen matriisien A ja B ominaisuuksista: Jos matriisi B on ei-singulaarinen, voidaan käyttää esimerkiksi muotoa $B^{-1}Ax = \lambda x$; jos taas matriisi A on ei-singulaarinen, voidaan käyttää esimerkiksi muotoa $A^{-1}Bx = (1/\lambda)x$ [4]. Jos matriisit A ja B ovat hermiittisiä ja esimerkiksi matriisi B on positiividefiniitti, niin kaikki tavallisen hermiittisen ominaisarvotehtävän tyypillisimmät ominaisuudet ovat voimassa, jos euklidinen sisätulo korvataan B -sisätulolla [7] (vrt. lause 3.1-2).

3.2 Yleistetty lohko-Lanczos-iteraatio

Seuraavaksi tarkastellaan Lanczos-iteraation soveltamista yleistettyyn ominaisarvotehtävään pääasiassa viitteen [5] mukaisesti. Muut viitteet on merkitty asiayhteyteensä. Lohko-Lanczos-iteraatiota sovelletaan yleistettyyn ominaisarvotehtävään (1), jossa matriisi B on positiivi(semi)definiitti. Lisäksi oletetaan, että matriisit A ja B ovat reaalisia ja symmetrisiä. Jotta kaikki ominaisarvot olisivat reaalisia, oletetaan vielä, että on olemassa matriisien A ja B positiividefiniitti lineaarikombinaatio.

Jos σ on ominaisarvosta poikkeava reaaliluku, niin yleistetty ominaisarvotehtävä (1) voidaan esittää muodossa

$$BA_\sigma^{-1}Bx = \frac{1}{\lambda - \sigma} Bx, \quad (37)$$

missä $A_\sigma = A - \sigma B$. Tällöin sekä symmetria että ominaisvektorit säilyvät, mutta ominaisarvoksi tulee nyt $1/(\lambda - \sigma)$. Yhtälö (37) voidaan esittää myös yksinkertaisemmassa muodossa $A_\sigma^{-1}Bx = 1/(\lambda - \sigma)x$, missä operaattori $A_\sigma^{-1}B$ on itse-adjungaatti matriisin B suhteen [7], minkä takia sen ominaisarvot ovat reaaliset [6].

Lanczos-iteraatioissa ominaisarvojen suppeneminen riippuu ominaisarvojen jakautumisesta, mutta yleensä spektrin ääripäiden ominaisarvot suppenevat nopeimmin. Siirroksen ja inversion jälkeen alunperin siirroksen molemmiin puolin olleet ominaisarvot ovat yhtälön (37) mukaisessa tehtävänasettelussa spektrin ääripäissä ja suppenevat siis yleensä ensimmäisenä. Peräkkäisillä siirros—inversio-vaiheilla ominaisarvot voidaan ratkaista pienissä osissa viipale kerrallaan (luvut 3.6 ja 3.8). On kuitenkin huomattava, että inversiovaihe vaatii myös LU-hajotelman muodostamisen, mikä vie ainakin osan ajasta, joka säästyä suppenemisen nopeutuessa.

Yhtälön (37) tehtävänasettelua vastaava lohko-Lanczos-iteraatio saadaan muuntamalla lohko-Lanczos-iteraatiota 2.5-1 ottamalla huomioon luvun 3.1 huomautukset ja lause 3.1-2. Lanczos-iteraation johtamisessa käytettyä Krylovin aliavaruutta (2) tai (3) vastaa nyt aliavaruus $K(A_\sigma^{-1}B, Q_1, j) = \text{span}\{Q_1, (A_\sigma^{-1}B)Q_1, \dots, (A_\sigma^{-1}B)^{j-1}Q_1\}$ [4].

3.2-1. Yleistetty lohko-Lanczos-iteraatio.

I. Alustus:

- I.1. Valitaan lohkokoko p , iteraatioaskelten enimmäislukumäärä j_{\max} ja suppenemistoleranssi tol
- I.2. Valitaan siirros σ ja määritetään siirromatriisi $A_\sigma = A - \sigma B$
- I.3. Asetetaan lähtöarvot $Q_0 = 0$ ja $R_0 \neq 0$
- I.4. Muodostetaan hajotelma $R_0 = Q_1 G_1$ siten, että $Q_1^T B Q_1 = I$ (QR-hajotelma, luku 3.4)

II. Lanczos-iteraatioaskeleet:

Suoritetaan askeleet $j = 1, \dots, j_{\max}$

- II.j.1. Matriisitulo ja yhtälönratkaisu: $R_j = A_\sigma^{-1} B Q_j$ (LU-hajotelma)
- II.j.2. Matriisitulo ja korvaus: $R_j \leftarrow R_j - Q_{j-1} G_j^T$
- II.j.3. Matriisitulo, pistetulo ja korvaus: $F_j \leftarrow Q_j^T B R_j$
- II.j.4. Matriisitulo ja korvaus: $R_j \leftarrow R_j - Q_j F_j$
- II.j.5. Hajotelma: $R_j = Q_{j+1} G_{j+1}$ siten, että $Q_{j+1}^T B Q_{j+1} = I$ (QR-hajotelma, luku 3.4)
- II.j.6. Tarvittaessa Q_j :n ja Q_{j+1} :n ortogonalisointi U_{j-1} :n suhteen (luku 3.5)
- II.j.7. Lisäykset: matriisi Q_j kantaan U_j sekä lohkot F_j ja G_j matriisiin T_j
- II.j.8. Projisoidun ominaisarvotekävän ratkaisu: $T_j s_j^{(k)} = \theta_j^{(k)} s_j^{(k)}$, $k = 1, \dots, p \times j$
- II.j.9. Ominaisarvoapksimaatiot: $\tilde{\lambda}_j^{(k)} = \sigma + 1/\theta_j^{(k)}$, $k = 1, \dots, p \times j$

$$\text{II.j.10. Suppenemistesti: } \left\| A_\sigma^{-1} B \tilde{x}_j^{(k)} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_j^{(k)} - \sigma} \tilde{x}_j^{(k)} \right\|_B = \|G_{j+1} t_j^{(k)}\|_B \leq tol, k = 1, \dots, p \times j$$

Jos riittävä määrä ominaispareja on supennut, siirrytään kohtaan III.

III. Lopetus:

Supenneiden ominaisparien ominaisvektoriapksimaatiot: $\tilde{x}_j^{(k)} = U_j s_j^{(k)}$

Yleistetyin lohko-Lanczos-iteraation 3.2-1 kohdassa II.j.10 vektori $t_j^{(k)}$ sisältää vektorin $s_j^{(k)}$ p pohjimmaista alkia. Lanczos-iteraation tehokkuuden oleelliset tekijät säilyvät myös yleistetyssä versiossa: Jos halutaan ratkaista vain ominaisarvoja $\theta_j^{(k)}$, uuden Lanczos-lohkon Q_{j+1} laskentaa varten Lanczos-

lohkoista Q_1, \dots, Q_j ei tarvitse säilyttää kuin kaksi viimeistä [7]. Jos halutaan laskea myös ominaisvektoreita $x^{(k)}$, kaikki Lanczos-lohkokot on säilytettävä.

Kun lohko-Lanczos-iteraation j askelta on suoritettu, kanta

$$U_j = [Q_1 \ Q_2 \ \dots \ Q_j], \quad (38)$$

$$U_j^T B U_j = I \text{ ja} \quad (39)$$

$$U_j^T B A_\sigma^{-1} B U_j = T_j. \quad (40)$$

Siis, kun yleistetty ominaisarvotehtävä projisoidaan kantaan U_j , symmetristä matriisia $B A_\sigma^{-1} B$ vastaa symmetrinen lohkotridiagonaalimatriisi T_j . Projisoidun ominaisarvotehtävän (luku 3.3)

$$T_j s_j^{(k)} = \theta_j^{(k)} s_j^{(k)} \quad (41)$$

ominaispareista $(\theta_j^{(k)}, s_j^{(k)})$ saadaan alkuperäisen ominaisarvotehtävän ominaispareille approksimaatiot eli Ritzin arvot

$$\tilde{\lambda}_j^{(k)} = \sigma + \frac{1}{\theta_j^{(k)}} \quad (42)$$

ja Ritzin vektorit (ks. myös luku 3.7)

$$\tilde{x}_j^{(k)} = U_j s_j^{(k)}. \quad (43)$$

Kun $s_j^{(k)T} s_j^{(k)} = 1$, niin $\tilde{x}_j^{(k)T} B \tilde{x}_j^{(k)} = 1$.

3.3 Projisoitu ominaisarvotehtävä

Projisoitu ominaisarvotehtävä (41) voidaan ratkaista esimerkiksi redusoimalla matriisi T_j tridiagonaalimuotoon ja käyttämällä symmetristä QR-algoritmia [3]. Redusoidun tehtävän ratkaisuaika kasvaa luonnollisesti lohkokoon p kasvaessa. Kuitenkin useissa tapauksissa projisoidun tehtävän spektrin ääripäiden ominaisarvoista saadaan hyviä approksimaatioita alkuperäisen tehtävän ominaisarvoille, vaikka $j \ll n$. Virhevektorin

$$B A_\sigma^{-1} B \tilde{x}_j^{(k)} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_j^{(k)} - \sigma} B \tilde{x}_j^{(k)} \quad (44)$$

suuruutta voidaan arvioida normilla

$$\left\| A_\sigma^{-1} B \tilde{x}_j^{(k)} - \frac{1}{\tilde{\lambda}_j^{(k)} - \sigma} \tilde{x}_j^{(k)} \right\|_B = \left\| U_j (T_j s_j^{(k)} - \theta_j^{(k)} s_j^{(k)}) + R_j E_j s_j^{(k)} \right\|_B = \left\| R_j E_j s_j^{(k)} \right\|_B = \left\| G_{j+1} t_j^{(k)} \right\|_B = \beta_j^{(k)} \quad (45)$$

missä normi on otettu matriisin B suhteen, matriisin E_j j :s lohko on yksikkömatriisi ja muut lohkot ovat nollia sekä vektori $t_j^{(k)}$ sisältää vektorin $s_j^{(k)}$ p pohjimmaista alkia.

3.4 QR-hajotelman muodostaminen

Lohko-Lanczos-iteraation 3.2-1 kohdan II.j.5 QR-hajotelma $R_j = Q_{j+1}G_{j+1}$ saadaan aikaan modifioidulla Gram—Schmidt-menetelmällä [3] — mahdollisesti $2p$ kertaa iteroiden, jotta $\| Q_{j+1}^T BQ_{j+1} - I \|_2$ saadaan riittävän pieneksi. Lisäksi voidaan suorittaa matriisien Q_j ja Q_{j+1} erillinen ortogonalisointi (luku 3.5). Tämän laskentavaiheen yhteydessä huomataan, jos matriisin R_j sarakkeiden B -normit ovat hyvin pieniä, jolloin matriisin G_{j+1} normi on hyvin pieni ja on siis muodostunut lähes invariantti aliarvuus (luku 2.3).

3.5 Lanczos-vektorien ortogonaalisuuden säilyttäminen

Yleensä muutaman askeleen jälkeen kannan U_j vektorien riittävä ortogonaalisuus menetetään johtuen sekä laskennan pyöristysvirheistä että ominaisparin $(\tilde{\lambda}_j^{(k)}, \tilde{x}_j^{(k)})$ suppenemisesta. Näitä tekijöitä voidaan kuvata lisätermillä yhtälössä

$$R_j = Q_{j+1}G_{j+1} = A_\sigma^{-1}BQ_j - Q_jF_j - Q_{j-1}G_j^T. \quad (46)$$

Ortogonaalisuuden menetystä voidaan kompensoida suorittamalla luvun 2.4.1 mukainen täydellinen uudelleenortogonalisointi eli ortogonalisoidaan R_j edellisten lohkojen Q_i , $i < j$ suhteen, mikä voidaan toteuttaa siten, että yleistetyn lohko-Lanczos-iteraation 3.2-1 kohdat II.j.3 ja II.j.4 toistetaan niin, että matriisin Q_j tilalla on matriisi Q_i , $i < j$. Tämä menettely aiheuttaa kuitenkin niin paljon ylimääräistä laskentaa jokaisella askeleella, että on tyydyttävä jonkinlaiseen kompromissiin ja suoritettava vain välttämätön määrä ortogonalisointeja.

Luvun 2.4.2 mukaisella valikoivalla uudelleenortogonalisoinnilla matriisin R_j sarakkeet pyritään pitämään ortogonaalisina kaikkien suppenneiden Ritzin vektorien $\tilde{x}_j^{(k)}$ suhteen. Aina kun virhe $\beta_j^{(k)}$ alittaa vaaditun suppenemistoleranssin, lasketaan ja talletetaan vastaava Ritzin vektori $\tilde{x}_j^{(k)}$. Seuraavilla askelilla matriisi R_j ortogonalisoidaan vektorin $\tilde{x}_j^{(k)}$ suhteen riippuen normista $\tau_{j+1}^{(k)} = \|\tilde{x}_j^{(k)T} BQ_{j+1}\|_2$, jolle saadaan arvio käyttämättä eksplisiittisesti vektoria $\tilde{x}_j^{(k)}$.

Myös osittaisella uudelleenortogonalisoinnilla matriisi R_j pyritään pitämään ortogonaalisena kaikkien matriisien Q_i , $i < j$, suhteen. Ortogonaalisuuden taso mitataan normilla $\nu_{i,j+1} = \|Q_i^T BQ_{j+1}\|_2$, jolle saadaan arvio ilman matriisitulojen eksplisiittistä laskemista. Aina kun normi $\nu_{i,j+1}$ on suurempi kuin vaadittu toleranssi, Q_{j+1} ortogonalisoidaan vastaavan Q_i :n suhteen.

Tässä työssä kuvattavassa sovelluksessa Ritzin vektorit lasketaan vasta kunkin iterointikokonaisuuden lopussa, joten valikoiva ortogonalisointi suoritetaan ainoastaan, jos on tarvittu iterointikokonaisuuden uudelleenaloitusta (luku 3.8). Osittainen ortogonalisointi suoritetaan siten, että kaikki edelliset matriisit Q_i , $i < j$, otetaan huomioon eli itse asiassa joillakin askelilla suoritetaan täydellinen ortogonalisointi. Lisäksi molemmissa ortogonalisointimenetelmissä sekä Q_j että Q_{j+1} ortogonalisoidaan, koska molempia tarvitaan Q_{j+2} :n laskennassa.

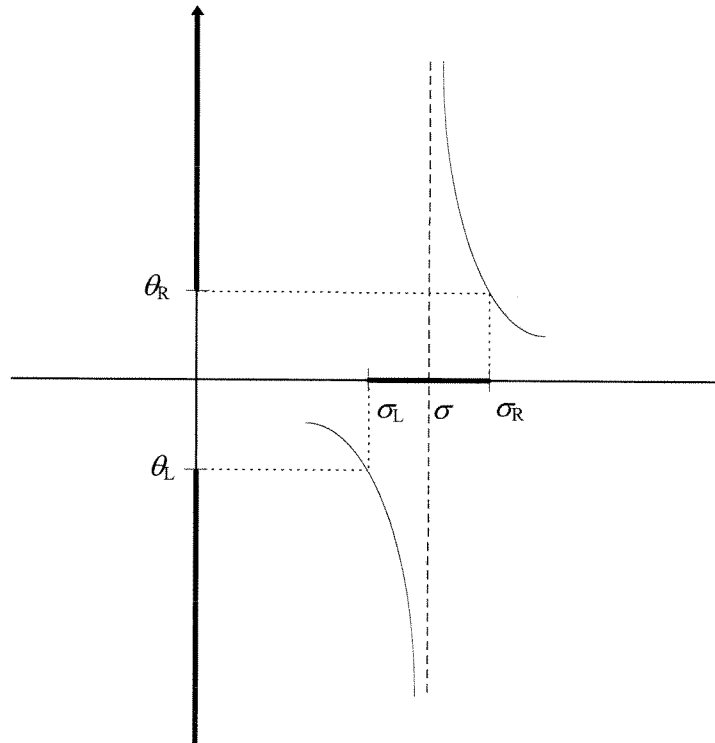
Valikoivaan ortogonalisointiin tarvittava laskentamäärä on verrannollinen suppenneiden ominaisarvojen lukumäärään ja osittaiseen ortogonalisointiin tarvittava laskentamäärä askelten lukumäärään. Molemmissa tapauksissa laskennan määrä kasvaa lohkokoon p kasvaessa.

3.6 Spektrin viipalointi

Yhtälön (37) mukaisella siirros—inversio-menettelyllä alunperin siirroksen lähellä olevat ominaisarvot sijaitsevat uuden akselin ääripäissä (kuva 1), jolloin niitä vastaavat approksimaatiot ovat hyvin tarkkoja jo kohtuullisella toleranssilla:

$$|\lambda - \hat{\lambda}_j| \leq \frac{\beta_j}{\theta_j^2} = \beta_j |\hat{\lambda}_j - \sigma|^2. \quad (47)$$

Kun siirrosmatriisille A_σ käytetään LDL^T -hajotelmaa, niin siirrosmenettelyllä saadaan myös tietyn välin ominaisarvolukumäärät selville soveltamalla ns. Sturminkin tarkistusta [1], [3], jossa ominaisarvojen lukumäärä välillä $[\sigma_L, \sigma_R]$ saadaan vastaavien siirrosmatriisihajotelmien diagonaalimatriisien D_L ja D_R negatiivisten alkioiden lukumäärien erotuksena. Tämä perustuu siihen, että matriisien A_σ ja D inertiat eli kolmikot (negatiivisten ominaisarvojen lkm, nollaominaisarvojen lkm, positiivisten ominaisarvojen lkm) ovat samat.



Kuva 1. Spektrin siirros—inversio-muunnos.

Spektrin viipalointi on tehokas menetelmä, jos halutaan ratkaista suuri määrä ominaisarvoja tai spektri on kimputtunut. Tällöin saattaa olla tehokkaampaa tehdä uusi hajotelma uudelle siirrosmatriisille A_σ kuin jatkaa kyseistä iterointikokonaisuutta pidemmälle. Automaattisen siirrostamisen kriteeriksi voidaan asettaa CPU-ajan ja suppenemisnopeuden vertailuun perustuvat ehdot:

1. $2p$ pienintä virhettä $\beta_j^{(k)}$, joita vastaavat ominaisparit eivät supenneet, ekstrapoloidaan edellisen askeleen vastaavien virheiden avulla, ja arvioidaan johtaisivatko ne suppenemiseen seuraavalla askeleella.
2. Kannanmuodostukseen kulunutta CPU-aikaa verrataan ortogonalisointiin kuluvaan aikaan.
3. Kannanmuodostukseen kulunutta CPU-aikaa verrataan siirrosmatriisin A_σ LDL^T-hajotelman muodostamiseen kuluvaan aikaan.

Uuden siirroksen suuruus arvioidaan kyseisen siirroksen aikana supenneiden ominaisarvojen avulla: Uusi siirros asetetaan joko kauimmaisen supenneen ominaisarvon ja sitä seuraavan suppenemattoman ominaisarvon välille tai arviointiin käytetään vastaavia edellisiltä askelilta saatuja suppenemissäteitä.

Viipalointimenetelmä on toteutettu siten, että tietyn välin ominaisarvot voidaan ratkaista joko lähtien välin ylärajasta alaspäin tai alarajasta ylöspäin. Vaihtoehtoisesti voidaan ratkaista myös tiettyä siirrosarvoa lähinnä olevat ominaisarvot.

3.7 Matriisin B positiivisemidefiniittisyyden aiheuttamat muutokset

Jos matriisi B on positiivisemidefiniitti, voi olla $y^T B y = 0$ jollakin $y \neq 0$, jolloin yleistetyllä ominaisarvoteknävällä voi olla ominaisarvo ∞ . Tehtävän muotoilu on tässäkin tilanteessa pätevä, jos ominaisvektorit pidetään sallitussa avaruudessa eli niistä poistetaan matriisin B nolla-avaruuden komponentit: Yleistetyn lohko-Lanczos-iteraation 3.2-1 matriisi R_0 korvataan matriisilla BR_0 ja kaikille supenneille Ritzin vektoreille suoritetaan inverssi-iteraation yksi askel suorittamalla yhtälössä (43) korvaus

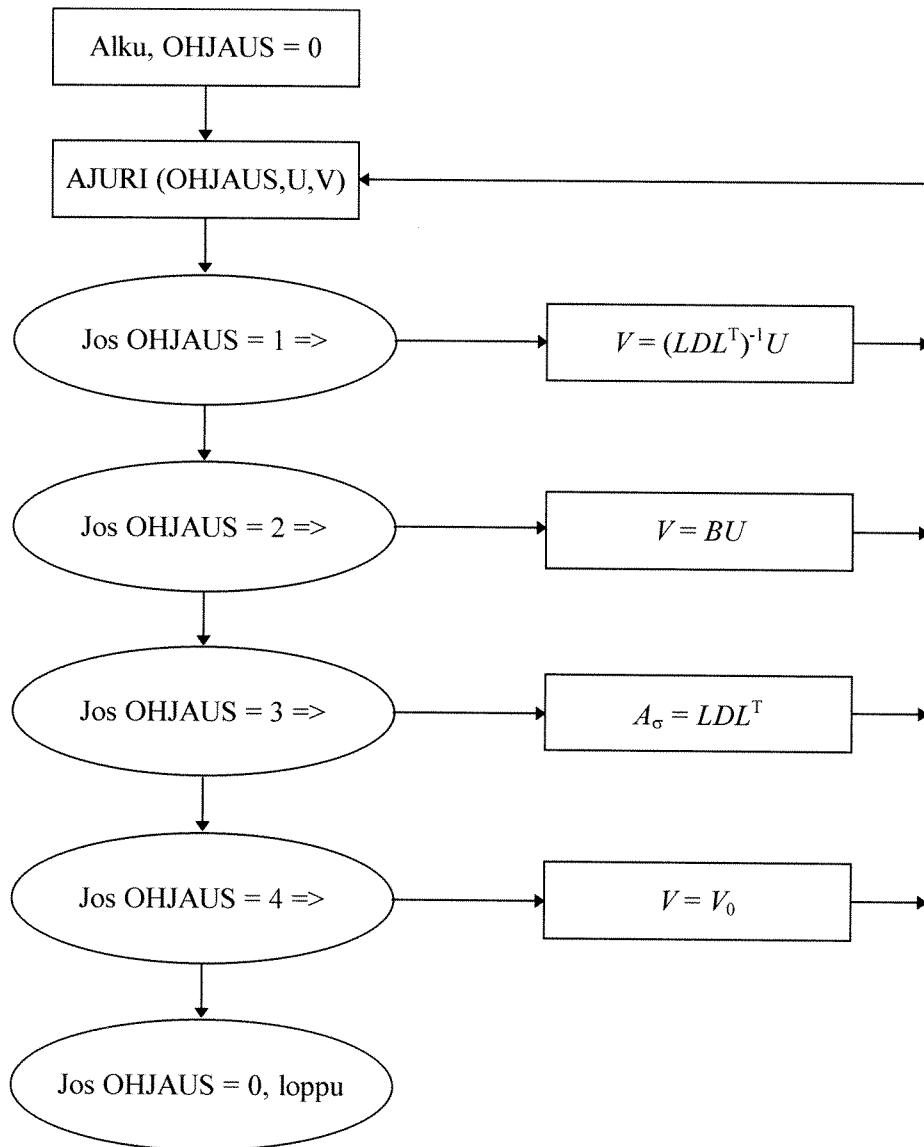
$$\tilde{x}_j^{(k)} \leftarrow \tilde{x}_j^{(k)} + \frac{1}{\theta_j^{(k)}} Q_{j+1} G_{j+1} t_j^{(k)}. \quad (48)$$

3.8 Iterointikokonaisuuden uudelleenaloitus

Tietyissä siirroskohdassa suoritettava iterointikokonaisuus voidaan aloittaa alusta uudelleen, jos kaikki halutut ominaisarvot eivät ole supenneet tai uudelleenaloitus katsotaan edullisemmaksi kuin uuden siirroksen suorittaminen. Uudelleenaloituksessa aloitusvektoreiksi valitaan lineaarikombinaatioita, joiden muodostuksessa on otettu huomioon viimeisimmän askeleen pienimpiä virheitä $\beta_j^{(k)}$ vastaavat $2p$ suppenematonta ominaisvektoria.

3.9 Ohjelmoinnin toteutus

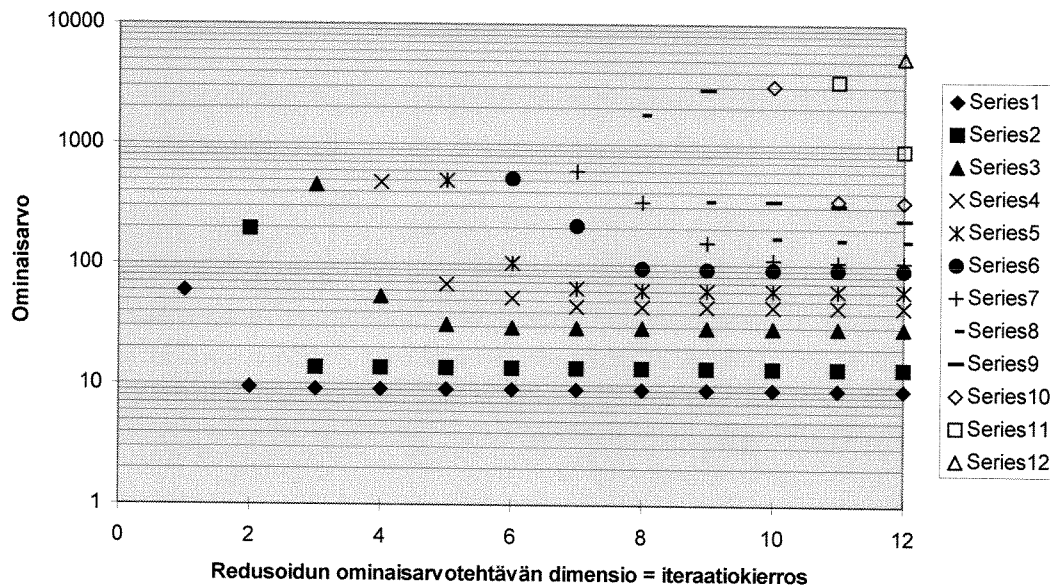
Yleistetyn lohko-Lanczos-iteraation 3.2-1 mukainen algoritmi on toteutettu siten, ettei matriiseja A ja B ei käsitellä parametreina, vaan kaikki niitä koskevat operaatiot suoritetaan varsinaisen koodin ulkopuolella, jolloin on mahdollista käyttää erilaisia yhtälönratkaisumenetelmiä ja matriisintalletusmuotoja. Kuvan 2 vuokaaviossa on esitetty ohjelman kulku oleellisten parametrien eli $n \times p$ -matriisien U ja V sekä ohjausparametrin OHJAUS avulla. Varsinainen iterointi suoritetaan AJURI-aliohjelmassa, joka toimii välittäjänä kuvan 2 oikean laidan toimenpiteille, jotka suoritetaan varsinaisen koodin ulkopuolella.



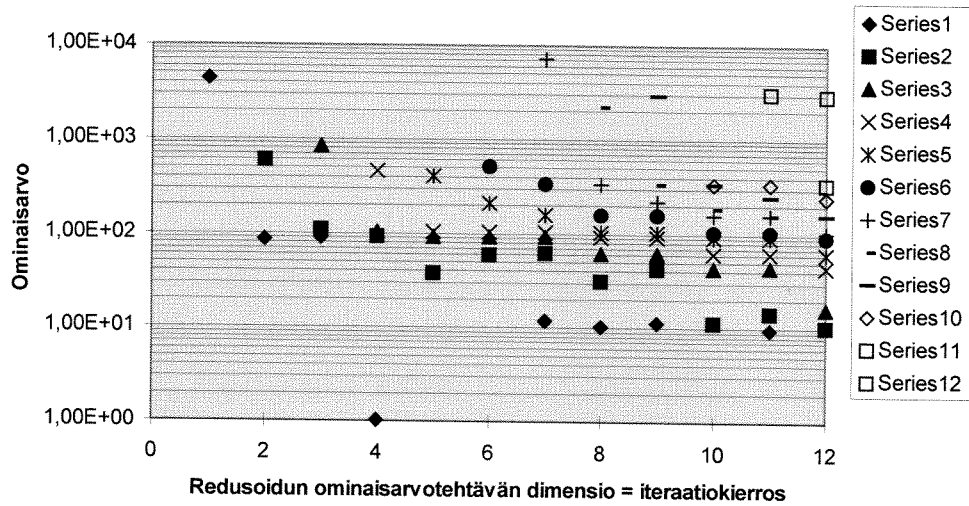
Kuva 2. Lanczos-sovelluksen vuokaavio.

3.10 Esimerkkitapaus

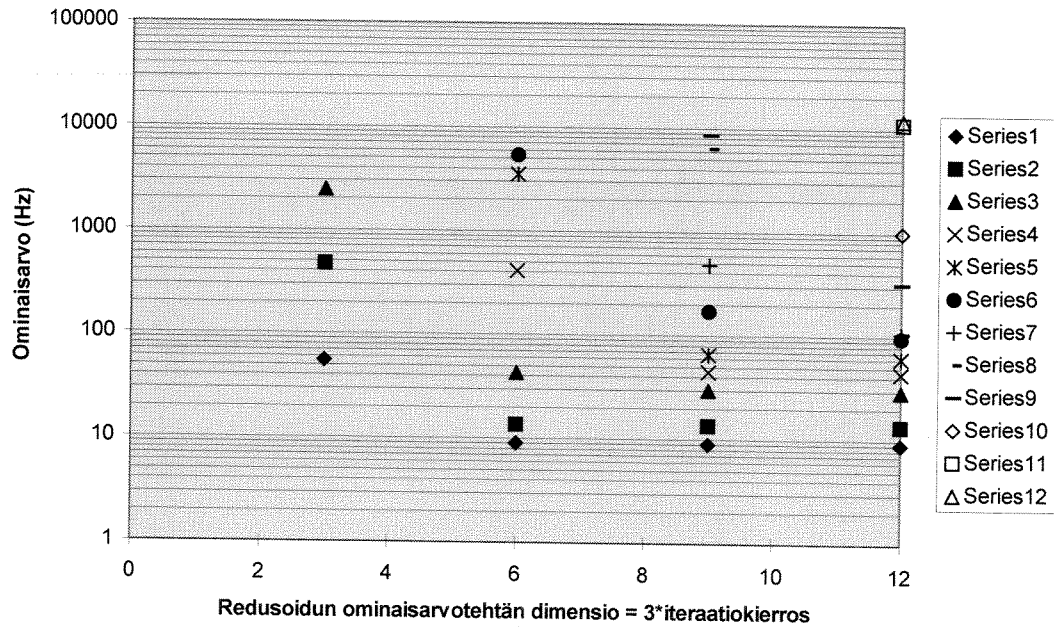
Lanzos-sovellukseen [5] yhdistetyillä luvun 3.9 mukaisilla matriisioperaatiolisäyksillä lasketun esimerkkitapauksen ominaisarvot ja -vektorit vastaavat päistään vapaasti kiinnitetyn palkin ominais-
taajuuksia ja -muotoja. Palkki mallinnettiin elementtimenetelmällä ja tuloksena oli symmetrinen jäyk-
kyysmatriisi A ja diagonaalinen massamatriisi B ; tehtävän dimensio $n = 1806$. Kuvissa 3, 4 ja 5 on
esitetty iteraation kulku tapauksissa $p = 1$ ja $\sigma = 0$; $p = 1$ ja $\sigma = 100$ (Hz); $p = 3$ ja $\sigma = 0$. p on lohko-
koko ja σ yhtälön (37) siirros. Kuvista 3 ja 5 nähdään, että pienimmät ominaisarvot (lähellä siirrosta
 $\sigma = 0$) suppenevat jo muutaman iteraatiokierroksen jälkeen. Kuvasta 4 näkyy siirrosta $\sigma = 100$ (Hz)
lähellä olevien ominaisarvojen nopea suppeneminen.



Kuva 3. Yleistetty lohko-Lanzos-iterointi lohkokokoolla $p = 1$ ja siirroksella $\sigma = 0$.



Kuva 4. Yleistetty lohko-Lanczos-iterointi lohkokokoolla $p = 1$ ja siirroksella $\sigma = 100$ (Hz).



Kuva 5. Yleistetty lohko-Lanczos-iterointi lohkokokoolla $p = 3$ ja siirroksella $\sigma = 0$.

Viitteet

- [1] Bathe K.-J., Wilson E. L., *Numerical Methods in Finite Element Analysis*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, USA, 1976.
- [2] Demmel J. W., *Applied Numerical Linear Algebra*, SIAM, Philadelphia, USA, 1997.
- [3] Golub G. H., Van Loan C. F., *Matrix Computations*, The Johns Hopkins University Press, Baltimore, USA, 1983.
- [4] Marques O. A., Eigensolvers and Applications in Finite Element Analyses, CERFACS Report TR/PA/95/29, Toulouse, France, 1995.
- [5] Marques O. A., BLZPACK: Description and User's Guide, CERFACS Report TR/PA/95/30, Toulouse, France, 1995.
- [6] Parlett B. N., *The Symmetric Eigenvalue Problem*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, USA, 1980.
- [7] Saad Y., *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*, Manchester University Press, England, 1992.