学校编码：10384　　　　分类号＿＿＿＿ 密级＿＿＿＿
学号：19120081152735　　　　UDC＿＿＿＿

厦门大学

硕 士 学 位 论 文

求解非对称广义特征问题的非准确精化位移求逆 IRA 方法

An Inexact Refined Shift-and-Invert IRA Method For Large Unsymmetric Generalized Eigenproblems

邱廷月

指导教师姓名：卢　琳　璋　教授
专 业 名 称：计　算　数　学

论文提交日期：2011　年　5　月
论文答辩日期：2011　年　6　月
学位授予日期：2011　年　　月

答辩委员会主席：＿＿＿＿＿＿
评　　阅　　人：＿＿＿＿＿＿

2011 年 5 月

厦门大学学位论文原创性声明

兹呈交的学位论文，是本人在导师指导下独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考的其他个人或集体的研究成果，均在文中以明确方式标明。本人依法享有和承担由此论文产生的权利和责任。

声明人（签名）：

年　　月　　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人完全了解厦门大学有关保留、使用学位论文的规定。厦门大学有权保留并向国家主管部门或其指定机构送交论文的纸质版和电子版，有权将学位论文用于非赢利目的的少量复制并允许论文进入学校图书馆被查阅，有权将学位论文的内容编入有关数据库进行检索，有权将学位论文的标题和摘要汇编出版。保密的学位论文在解密后适用本规定。

本学位论文属于

1、保密　（　），在　　　年解密后适用本授权书。

2、不保密（　）

作者签名：　　　　　　　日期：　　年　月　日

导师签名：　　　　　　　日期：　　年　月　日

目 录

Contents

中文摘要

本文讨论用带有隐式重启的非准确精化位移求逆Arnoldi方法计算非对称广义特征问题：

$$A\varphi = \lambda B\varphi, \qquad \varphi^H\varphi = 1,$$

这里$A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$是大型稀疏阵。

在每步Arnoldi（即外迭代）中，涉及变换算子的矩阵-向量乘积是通过对应线性方程组的迭代解（即内迭代）进行。解的代价用每次外迭代下内迭代收敛时的次数来衡量。文献[1]把文献[2]的放宽策略推广到隐式重启Arnoldi方法，即给出一个解内迭代时的放宽策略，并用数值实验验证了该策略的优越性。本文从另一个角度把文献[2]的放宽策略推广到精化的隐式重启Arnoldi方法，提出一个新的放宽策略。并通过理论分析和数值实验说明了应用新的放宽策略能够使收敛时需要的内迭代次数随着外迭代的进行不断减少，而且比应用文献[1]中的放宽策略需要的内迭代次数更少。

关键词：非准确精化Arnoldi方法；隐式重启；位移求逆；Ritz值；精化Ritz向量；放宽。

Abstract

In this paper, we consider the computation of a few eigenpairs of nonsymmetric matrix pairs using inexact refined shift-and-invert Arnoldi's method with implicit restarts:

$$A\varphi = \lambda B\varphi, \qquad \varphi^H\varphi = 1,$$

Where $A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ are large sparse matrices.

In each Arnoldi step(outer iteration) the matrix-vector product involving the transformed operator is performed by iterative solution(inner iteration) of the corresponding linear system of equations. The costs of the solves are measured by the number of inner iterations needed by the iterative solver at each outer step of the algorithm. [1] applies the relaxation strategy in [2] to implicitly restarted Arnoldi's method, gives a relaxation strategy for inner iteration, and demonstrates the effectiveness by numerical experiments. In this paper,we extend the relaxation strategy developed in [2] to refined implicitly restarted Arnoldi's, provide a new relaxation strategy to the inner solver. In addition, numerical experiments illustrate the theory that the inner iteration cost can be further reduced through the use of the new strategy than the strategy of [1].

Key words: inexact refined Arnoldi's method; implicitly restarted; shift-and-invert; Ritz value; refined Ritz vector; relaxation.

第一章 引言

本文考虑非对称广义特征问题

$$A\varphi_i = \lambda_i B\varphi_i, \qquad \varphi_i^H \varphi_i = 1 \tag{1-1}$$

这里$A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$是大型稀疏矩阵。科学工程中的大量应用问题，如文献[3]，需要计算(A, B)的内部特征值和相应的特征向量，即给定一个目标点σ，计算最靠近它的一些特征值，或计算某区域中的特征值和相应的特征向量。因为该问题是大型的，所以不能采用小规模和中规模矩阵的标准数值方法。

解决这类问题的有效方法是采用位移求逆Arnoldi方法。即当$A-\sigma B$对于σ是可逆时，如果对（1-1）进行位移求逆变换（称为谱变换），则矩阵对(A, B)靠近位移σ的特征值被变换成位移求逆矩阵$(A-\sigma B)^{-1}B$的外部特征值，特征向量保持不变。对于求解位移求逆矩阵$(A-\sigma B)^{-1}B$的外部特征值问题，我们可以应用Arnoldi方法（[4]），该方法在小维Krylov子空间生成$(A-\sigma B)^{-1}B$的投影矩阵，通过计算投影矩阵的特征对得到$(A-\sigma B)^{-1}B$的近似特征对，因而(A, B)的近似特征对可以从已得到的$(A-\sigma B)^{-1}B$的近似特征对计算得到。

Arnoldi方法有个缺点：Krylov子空间的维数会不断增加，因此存储量和计算量将限制了计算太多Arnoldi基向量。为了克服这个缺点，隐式重启Arnoldi方法（IRA）（[5]）被使用。把Arnoldi方法（或IRA）应用于$(A-\sigma B)^{-1}B$，意味着Arnoldi方法的每一步都必须求解一形如

$$(A-\sigma B)r = Bv_j \tag{1-2}$$

的线性方程组，这里右端项Bv_j是给定的。对于大规模的线性方程组问题，如果用直接法求解，则计算量和存储量通常难以接受，甚至根本不可行，因此一般只能借助于迭代法近似非准确地求解线性方程组，这称之为内迭代。对于对称（Hermite）和非对称（非Hermite）线性方程组，常用的迭代法有CG，SYMMLQ（Lanczos），MINRES，Arnoldi（FOM），GMRES，BICG，BICGSTAB和CGS，QMR 等（[6]）。用Arnoldi过程计算近似特征值和近似特征向量称之为外迭代。由此得到的数值方法称为非准确（精确）的数值方法或内外迭代法（如文献[7–9]）。

自上个世纪九十年代中期至今，因其重大的理论意义和应用价值，求解大规模矩阵特征问题的非准确数值方法在国际上吸引了越来越多的研究者，该课题已成为数值代数领域的最重要研究方向之一。目前大部分研究主要集中在非准确逆迭代法（即位移求

逆幂法)。该方法为了得到收敛一般需要增加非准确解的精确性，而变动的位移可以加快收敛速度（文献[7,9–14]）。文献[15]把非准确逆迭代法推广到块版本上，即考虑了非准确逆子空间迭代的收敛性。文献[8]和[16]表明Lanczos或Arnoldi方法中，我们需要开始于非常准确的矩阵向量乘积，但随着算法的进行，准确性允许放宽，而这并不会明显影响近似特征对的收敛性。对于Arnoldi方法的这种现象，文献[2]中用不变子空间的扰动理论对其进行分析。它表明在Arnoldi过程中，矩阵向量乘积允许的误差与要求的特征对的残量范数成反比。因此，随着Arnoldi方法的进行和要求特征对的收敛，矩阵向量乘积的准确性允许放宽。非准确矩阵向量乘积在一系列Krylov子空间线性解法中也被应用，如[17,18]，[19–21]和[22,23]。

文献[1]给出非准确Arnoldi方法的新的研究，它将文献[2]的理论从非准确Arnoldi方法推广到标准特征问题位移求逆变换的非准确IRA，提出了一个解线性方程组时实际可行的放宽的门槛，即用包含想要和不想要Ritz值的两个矩阵谱的分离度得到的门槛，并用数值实验说明门槛的降低能够使非准确IRA的总的内迭代次数减少。

本文从另一个角度把文献[2]的理论从非准确Arnoldi方法推广到广义特征问题的非准确IRA方法，提出了一个新的放宽门槛的策略，并通过数值实验比较本文的门槛和文献[1]的门槛，说明了它的优越性。

在位移求逆变换中，如果适当选择位移σ，使得矩阵对(A,B)接近位移σ的特征值是集中的，那么变换后的矩阵$\mathcal{A}=(A-\sigma B)^{-1}B$的谱可以顺利求出。而且，应用于位移求逆矩阵$\mathcal{A}$特征问题的Arnoldi方法在位移$\sigma$附近可以收敛更快。此外，Ruhe提供了一种动态选择位移σ的有效方法，使得得到的变形（有理Krylov算法）更有效（例如文献[24,25]）。

然而，文献[26–28]已经证得Arnoldi方法可能不收敛：即使Krylov子空间包含想要求的特征向量的有效信息且对应的近似特征值收敛，由该方法得到的近似特征向量也可能收敛不稳定甚至不收敛。为了纠正这个问题，精化算法被开发，并且已证得精化Arnoldi方法比对应的标准Arnoldi方法更具优越性（文献[29,30]），因此本文采用精化位移求逆Arnoldi方法。

全文共分为五个部分：第一章简要介绍了广义特征问题及非准确算法的背景；第二章介绍了精化位移-逆Arnoldi方法及其重启过程；第三章给出了一种新的放宽策略；并对其进行证明；第四章的数值实验验证了新的放宽策略的可行性以及优越性。

本文中，我们假定矩阵对(A,B)是正规的，即存在位移σ使得$A-\sigma B$非奇异。$\|\cdot\|=\|\cdot\|_2$，U^H指U的共轭转置，$\sigma_{min}(X)$指矩阵X的最小奇异值，I_m是$m\times m$的单位阵，$\tilde{I}_m=\begin{bmatrix} I_m \\ 0 \end{bmatrix}$是$(m+1)\times m$阵，$\mathcal{A}$=$(A-\sigma B)^{-1}B$.

第 二 章　精化位移求逆Arnoldi方法和隐式重启

2.1　精化位移求逆Arnoldi方法

如果矩阵$A-\sigma B$对于某个位移σ是可逆的，则特征问题（1-1）可以变成标准特征问题

$$\mathcal{A}\varphi_i = \theta_i\varphi_i, \tag{2-1}$$

其中$\theta_i = 1/(\lambda_i - \sigma)$.

容易证得(λ_i, φ_i)是问题（1-1）的特征对当且仅当(θ_i, φ_i)是矩阵$\mathcal{A}$的特征对。因此，特征问题（1-1）的位移求逆Arnoldi方法数学上等价于变换后的特征问题（2-1）的标准Arnoldi方法。

令$\mathcal{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$，对于任意单位长度向量$v_1 \in \mathbb{C}^n$，考虑m-维Krylov子空间

$$\mathcal{K}_m(\mathcal{A}, v_1) = span\{v_1, \mathcal{A}v_1, \mathcal{A}^2v_1, \ldots, \mathcal{A}^{m-1}v_1\}.$$

Arnoldi方法用于构造Krylov子空间$\mathcal{K}_m(\mathcal{A}, v_1)$的一组正交基$V_m$.则特征问题（2-1）的近似特征对可以从$\mathcal{K}_m(\mathcal{A}, v_1)$提取出。那么问题（1-1）的近似解就可以从这些近似特征对计算得到。

位移求逆Arnoldi过程可以写出矩阵形式

$$(A-\sigma B)^{-1}BV_m = V_mH_m + h_{m+1,m}v_{m+1}e_m^H, \tag{2-2}$$

或

$$(A-\sigma B)^{-1}BV_m = V_{m+1}\tilde{H}_m, \tag{2-3}$$

其中e_m是单位阵的第m列，$V_{m+1} = (V_m, v_{m+1}) = (v_1, v_2, \ldots, v_{m+1})$是$n\times(m+1)$矩阵，它的列构成$(m+1)$-维Krylov子空间$\mathcal{K}_m(\mathcal{A}, v_1)$的一组正交基，$m\times m$Hessenberg阵$H_m = V_m^H\mathcal{A}V_m$ 是 $\mathcal{A}$在该Krylov子空间的正交投影，$\tilde{H}_m = \begin{bmatrix} H_m \\ h_{m+1,m}e_m^H \end{bmatrix}$.

假定$(\tilde{\theta}_i, \tilde{y}_i), i = 1, 2, \ldots, m$是矩阵$H_m$的特征对，

$$H_m\tilde{y}_i = \tilde{\theta}_i\tilde{y}_i. \tag{2-4}$$

令

$$\tilde{\lambda}_i = \sigma + \frac{1}{\tilde{\theta}_i}, \qquad \tilde{\varphi}_i = V_m \tilde{y}_i. \tag{2-5}$$

那么位移求逆Arnoldi方法用$(\tilde{\lambda}_i, \tilde{\varphi}_i)$近似问题（1-1）的特征对$(\lambda_i, \varphi_i)$. $\tilde{\lambda}_i$和$\tilde{\varphi}_i$ 分别称为(A, B)关于$\mathcal{K}_m(\mathcal{A}, v_1)$的Ritz值和Ritz向量。定义对应的残量为

$$\tilde{r}_i = (A - \tilde{\lambda}_i B)\tilde{\varphi}_i. \tag{2-6}$$

则有下面定理：

定理 2.1： [30]通过位移求逆Arnoldi方法得到的近似特征对$(\tilde{\lambda}_i, \tilde{\varphi}_i)$对应的残量$\tilde{r}_i$满足

$$\|\tilde{r}_i\| \leq h_{m+1,m} \mid \tilde{\lambda}_i - \sigma \mid \|A - \sigma B\| \mid e_m^H \tilde{y}_i \mid . \tag{2-7}$$

证明： 从关系式（2-2），（2-3）和（2-5），我们可以得到

$$\begin{aligned}
\|\tilde{r}_i\| &= \|(A - \tilde{\lambda}_i B)\tilde{\varphi}_i\| \\
&= \|(A - \tilde{\lambda}_i B)V_m \tilde{y}_i\| \\
&= \|((A - \sigma B) - (\tilde{\lambda}_i - \sigma)B)V_m \tilde{y}_i\| \\
&= \|((A - \sigma B)(I - (\tilde{\lambda}_i - \sigma)(A - \sigma B)^{-1}B)V_m \tilde{y}_i\| \\
&= \mid \tilde{\lambda}_i - \sigma \mid \|(A - \sigma B)((A - \sigma B)^{-1}B - \tilde{\theta}_i I)V_m \tilde{y}_i\| \\
&\leq \mid \tilde{\lambda}_i - \sigma \mid \|A - \sigma B\| \|V_{m+1}(\tilde{H}_m - \tilde{\theta}_i \tilde{I}_m)\tilde{y}_i\| \\
&= h_{m+1,m} \mid \tilde{\lambda}_i - \sigma \mid \|A - \sigma B\| \mid e_m^H \tilde{y}_i \mid .
\end{aligned}$$

□

然而，文献[26–28]已经证得Arnoldi方法可能不收敛：即使Krylov子空间包含想要求的特征向量的有效信息且对应的近似特征值收敛，由该方法得到的近似特征向量也可能收敛不稳定甚至不收敛。为了修正Ritz向量的可能不收敛性，文献[30] 提出了应用于广义特征问题的精化位移求逆Arnoldi方法。

精化方法以如下方式应用于广义特征问题的位移求逆Arnoldi方法。对于每个$\tilde{\theta}_i$，寻找一个单位范数的向量$u_i \in \mathcal{K}_m(\mathcal{A}, v_1)$，使得满足下面的优化条件：

$$\|((A - \sigma B)^{-1}B - \tilde{\theta}_i I)u_i\| = \min_{\substack{u \in \mathcal{K}_m(\mathcal{A}, v_1) \\ \|u\|=1}} \|((A - \sigma B)^{-1}B - \tilde{\theta}_i I)u\|. \tag{2-8}$$

我们用$(\tilde{\lambda}_i, u_i)$近似(A, B)的特征对(λ_i, φ_i).u_i是$\mathcal{K}_m(\mathcal{A}, v_1)$上关于$\tilde{\theta}_i$和2-范数的最好的近似，称为精化Ritz向量。我们称该方法为精化位移求逆Arnoldi方法。

定义精化近似特征对$(\tilde{\lambda}_i, u_i)$的残量范数如下：

$$\|\tilde{r}_i\| = \|(A - \tilde{\lambda}_i B)u_i\|, \tag{2-9}$$

则有下面结果：

定理 2.2：[30]假设z_i是$(m+1)\times m$维Hessenberg阵$\tilde{H}_m - \tilde{\theta}_i\tilde{I}_m$的最小奇异值$\sigma_{min}(\tilde{H}_m - \tilde{\theta}_i\tilde{I}_m)$对应的右奇异向量，那么

$$\begin{aligned} u_i &= V_m z_i, && (2\text{-}10)\\ \|\tilde{r}_i\| &\leq \mid \tilde{\lambda}_i - \sigma \mid \|A - \sigma B\|\sigma_{min}(\tilde{H}_m - \tilde{\theta}_i\tilde{I}_m). && (2\text{-}11) \end{aligned}$$

如果位移求逆Arnoldi过程中断，即$h_{m+1,m} = 0$，那么有$u_i = \tilde{\varphi}_i = \varphi_i, \tilde{\lambda}_i = \lambda_i, i = 1, 2, \ldots, m$.

证明： 因为V_m和V_{m+1}都是酉阵，所以可以从（2-3），（2-8）和（2-9）得：

$$\begin{aligned} \|((A-\sigma B)^{-1}B - \tilde{\theta}_i I)u_i\| &= \min_{\substack{z\in\mathbb{C}^m\\ \|z\|=1}} \|((A-\sigma B)^{-1}B - \tilde{\theta}_i I)V_m z\| \\ &= \min_{\substack{z\in\mathbb{C}^m\\ \|z\|=1}} \|V_{m+1}(\tilde{H}_m - \tilde{\theta}_i\tilde{I}_m)z\| \\ &= \min_{\substack{z\in\mathbb{C}^m\\ \|z\|=1}} \|(\tilde{H}_m - \tilde{\theta}_i\tilde{I}_m)z\| \\ &= \|(\tilde{H}_m - \tilde{\theta}_i\tilde{I}_m)z_i\| \\ &= \sigma_{min}(\tilde{H}_m - \tilde{\theta}_i\tilde{I}_m). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \|\tilde{r}_i\| &= \|(A - \tilde{\lambda}_i B)u_i\| \\ &= \|(A - \tilde{\lambda}_i B)V_m z_i\| \\ &= \|((A-\sigma B) - (\tilde{\lambda}_i - \sigma)B)V_m z_i\| \\ &= \|(A-\sigma B)(I - (\tilde{\lambda}_i - \sigma)(A-\sigma B)^{-1}B)V_m z_i\| \\ &= \mid \tilde{\lambda}_i - \sigma \mid \|(A-\sigma B)((A-\sigma B)^{-1}B - \tilde{\theta}_i I)V_m z_i\| \\ &\leq \mid \tilde{\lambda}_i - \sigma \mid \|A-\sigma B\|\|V_{m+1}(\tilde{H}_m - \tilde{\theta}_i\tilde{I}_m)z_i\| \\ &= \mid \tilde{\lambda}_i - \sigma \mid \|A-\sigma B\|\|(\tilde{H}_m - \tilde{\theta}_i\tilde{I}_m)z_i\| \\ &= \mid \tilde{\lambda}_i - \sigma \mid \|A-\sigma B\|\sigma_{min}(\tilde{H}_m - \tilde{\theta}_i\tilde{I}_m). \end{aligned}$$

而且，如果$h_{m+1,m} = 0$，则由定理2.1可得

$$\|(A - \tilde{\lambda}_i B)\tilde{\varphi}_i\| = 0, \qquad i = 1, 2, \ldots, m. \tag{2-12}$$

因此有，$\tilde{\lambda}_i = \lambda_i, \tilde{\varphi}_i = \varphi, i = 1, 2, \ldots, m.$ □

2.2　隐式重启Arnoldi方法（IRA）

对于大型稀疏问题，所有基向量的存储和应用于这些基向量的正交过程对计算量和存储量的要求很高。为了降低存储要求，本文采用隐式重启Arnoldi（IRA）方法（[5]）。

IRA方法提供了一种通过应用越来越好的初始向量v_1的隐式重启迭代，限制Arnoldi分解中基向量数量的方法。这里我们将对其进行描述。

令k是一个大小适中的固定正整数，m是另一个正整数。假定给定$m = k + p$维的Arnoldi分解：

$$\mathcal{A}V_m = V_mH_m + f_me_m^H, \qquad f_m = h_{m+1,m}v_{m+1}. \tag{2-13}$$

令ν是一个位移，$H_m - \nu I = QR$，其中Q是正交阵，R是上Hessenberg阵。则

$$\begin{aligned} (\mathcal{A} - \nu I)V_m - V_m(H_m - \nu I) &= f_me_m^H, \\ (\mathcal{A} - \nu I)V_m - V_mQR &= f_me_m^H, \\ (\mathcal{A} - \nu I)(V_mQ) - (V_mQ)(RQ) &= f_me_m^HQ, \\ \mathcal{A}(V_mQ) - (V_mQ)(RQ + \nu I) &= f_me_m^HQ. \end{aligned}$$

令$\hat{V} = V_mQ$且$\hat{H} = RQ + \nu I$.则$\hat{H}$是上Hessenberg阵，对上面第二式左右两边同时右乘e_1，得到关系式

$$(\mathcal{A} - \nu I)v_1 = \hat{v}_1\rho_{11}. \tag{2-14}$$

其中$\rho_{11} = e_1^HRe_1, \hat{v}_1 = \hat{V}e_1$.称这个过程为在投影阵$H_m$上的一步隐式位移QR算法。

把这个思想推广到连续应用p个位移上，即选择p个位移$\nu_1, \ldots, \nu_p$，并在投影矩阵H_m上运行p步隐式位移QR算法。总的作用是产生矩阵Q_m，使得$\hat{H}_m = Q_m^HH_mQ_m$是上Hessenberg阵，其中 $q(H_m) = Q_mR_m$，Q_m是酉阵，R_m是上三角阵，$q(z) = (z - \nu_1)(z - \nu_2)\ldots(z - \nu_p)$.则从（2-13）得：

$$\mathcal{A}V_mQ_m = V_mQ_mQ_m^HH_mQ_m + f_me_m^HQ_m.$$

令$\hat{V}_m = V_mQ_m$，$\hat{H}_m = Q_m^HH_mQ_m$，则

$$\mathcal{A}\hat{V}_m = \hat{V}_m\hat{H}_m + f_me_m^HQ_m. \tag{2-15}$$

这里$e_m^H Q_m = (Q_m^H e_m)^H = (Q_p^H Q_{p+1}^H \cdots Q_1^H e_m)^H = (\overbrace{\underbrace{0,\ldots,0}_{m-p-1},*}^{k},\overbrace{*,\ldots,*}^{p})$.

做如下分块：

$$\hat{V}_m = (\hat{V}_k, V_p^+), \qquad \hat{H}_m = \begin{bmatrix} \hat{H}_k & M \\ \hat{h}_{k+1,k} e_1 e_k^H & H_p^+ \end{bmatrix},$$

又注意到

$$e_m^H Q_m = (\underbrace{0,\ldots,0,Q_{m,\,k}}_{k},\underbrace{b^H}_{p}),$$

则（2-15）式可改写成

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(\hat{V}_k, V_p^+) &= (\hat{V}_k, V_p^+)\begin{bmatrix} \hat{H}_k & M \\ \hat{h}_{k+1,k} e_1 e_k^H & H_p^+ \end{bmatrix} + f_m(\underbrace{0,\ldots,0,Q_{m,\,k}}_{k},\underbrace{b^H}_{p}) \\ &= (\hat{V}_k, V_p^+, v_{m+1})\begin{bmatrix} \hat{H}_k & M \\ \hat{h}_{k+1,k} e_1 e_k^H & H_p^+ \\ h_{m+1,m} Q_{m,\,k} e_k^H & h_{m+1,m} b^H \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

取上面等式两边的前k列，得到等式

$$\mathcal{A}\hat{V}_k = \hat{V}_k \hat{H}_k + \hat{f}_k e_k^H. \tag{2-16}$$

其中$\hat{f}_k = \hat{h}_{k+1,k} v_1^+ + Q_{m,\,k} f_m$.
注意到

$$\hat{V}_k^H v_1^+ = 0, \quad \hat{V}_k^H v_{m+1} = 0.$$

所以（2-16）是$\mathcal{A}$的k阶Arnoldi分解。那么Arnoldi过程可以从第k步开始重启，而不用从第一步开始。

正如（2-14）讨论的那样，一个隐式位移ν_j的应用将用初始向量$(\mathcal{A}-\nu_j I)v_1$取代初始向量v_1，p个隐式位移的应用将把初始向量变成$\hat{v}_1 = q(\mathcal{A})v_1/\|q(\mathcal{A})v_1\|$，其中$q(z) = (z-\nu_1)\cdots(z-\nu_p)$.换言之，初始向量$v_1$通过多项式$q(z)$更新，该多项式的根把初始向量中不想要的信息过滤了，而$\hat{v}_1$增强了谱中想要的部分。关于位移$\nu_1,\ldots,\nu_p$的选择主要有几种方案。本文采用的是准确位移策略，即选择H_m不想要的谱作为位移。

引理 2.1：([5])令$AV_k - V_k H_k = f_k e_k^H$是$A$的$k$阶Arnoldi分解，$H$不可约(即$f_j \neq 0, 1 \le j \le k-1$).则$f_k = 0$当且仅当$v_1 = Xy$，其中 $AX = XJ$，$rank(X) = k$，J是k阶约当阵。

在迭代过程中采用这些准确位移有如下结论（文献[5]）：

引理 2.2： 令$\lambda(H)=\{\tilde{\theta}_1,\ldots,\tilde{\theta}_k\}\cup\{\nu_1,\ldots,\nu_p\}$是$H_m$谱的一个不相交分法，令

$$\hat{H}_m=Q_m^H H_m Q_m,$$

其中$Q=Q_1Q_2\cdots Q_p$，Q_j由位移ν_j决定。如果$\hat{h}_{j+1,j}\neq 0, 1\leq j\leq k-1$，则$\hat{h}_{k+1,k}=0$，且

$$\hat{H}_m=\begin{bmatrix}\hat{H}_k & M\\ 0 & H_p^+\end{bmatrix},$$

其中$\lambda(\hat{H}_k)=\{\tilde{\theta}_1,\ldots,\tilde{\theta}_k\}$, $\lambda(H_p^+)=\{\nu_1,\ldots,\nu_p\}$.而且

$$\hat{v}_1=V_mQ_me_1=\sum\tilde{\varphi}_j\ ,$$

其中每个$\tilde{\varphi}_j$是Ritz值$\tilde{\theta}_j$对应的Ritz向量，即$\tilde{\varphi}_j=V_m\tilde{y}_j, H_m\tilde{y}_j=\tilde{y}_j\tilde{\theta}_j, 1\leq j\leq k.$

证明： 应用p步隐式位移后得到

$$H_mQ_m=Q_m\hat{H}_m$$

其中

$$q_1\equiv Q_me_1=q(H_m)e_1/\|q(H_m)e_1\|,\qquad q(z)=\prod_{j=1}^{p}(z-\nu_j).$$

令

$$\begin{aligned}H_m\tilde{y}_j &= \tilde{\theta}_j\tilde{y}_j, && j=1,2,\ldots,k,\\ H_mz_j &= \nu_jz_j, && j=1,2,\ldots,p.\end{aligned}$$

则

$$e_1=\sum_{j=1}^{k}\alpha_j\tilde{y}_j+\sum_{j=1}^{p}\beta_jz_j.$$

又因为

$$\begin{aligned}q(H_m)\tilde{y}_j &= q(\tilde{\theta}_j)\tilde{y}_j, && j=1,2,\ldots,k,\\ q(H_m)z_j &= q(\nu_j)z_j=0, && j=1,2,\ldots,p,\end{aligned}$$

所以

$$q_1=q(H_m)e_1/\|q(H_m)e_1\|=\sum_{j=1}^{k}\tilde{y}_j\zeta_j.$$

由引理2.1的结论得，$\hat{h}_{k+1,k}=0$成立。而且有，$\hat{v}_1=V_mQ_me_1=V_mq_1=\sum_{j=1}^{k}V_m\tilde{y}_j\zeta_j=\sum_{j=1}^{k}\tilde{\varphi}_j\zeta_j$. □

这个引理为选择准确位移提供了很好的解释。用准确位移排除不想要的特征值数学上等价于更新初始向量$v_1\leftarrow\sum\tilde{\varphi}_j\zeta_j$（要求的特征值相对应的Ritz向量的线性组合）的重启Arnoldi分解。因此，初始向量通过k个近似特征向量的和隐式更新。

下面给出精化隐式重启Arnoldi的具体算法。

算法1:精化位移求逆IRA算法。

1. 开始：给定要求的特征对的个数k，Krylov子空间的维数$m=k+p$，最大重启次数i_{max}，外迭代的门槛tol和内迭代的门槛ε.选择一单位初始向量v_1和位移σ.
2. 计算k步Arnoldi，产生矩阵V_k和H_k：
   迭代：$for\ j=1,2,\ldots,k$
   (a) 用门槛为ε的GMRES求解线性方程组$(A-\sigma B)r=Bv_j$，得到r.
   (b) (MGS)$for\ i=1,\ldots,j$
      - $h_{ij}=(r,v_i)$,
      - $r=r-h_{ij}v_i$.
   (c) 得到新的向量 $v_{j+1}=r/h_{j+1,j}$，其中$h_{j+1,j}=\|r\|$（正规化）。
3. 循环，$for\ i=1,2,\ldots,i_{max}$
   (a) 计算另外p步Arnoldi，产生矩阵V_m和$H_m, m=k+p$，
   $$\mathcal{A}V_m=V_mH_m+f_me_m^H,\quad f_m=h_{m+1,m}v_{m+1}.$$
   (b) 计算$\lambda(H_m)$，选择p个位移$\nu_1,\ldots,\nu_p$（不想要的谱），用关系式（2-8）-（2-10）计算近似解$\tilde{\lambda}_i$ 和u_i，并用$(\tilde{\lambda}_i,u_i)$近似(A,B) 的特征对$(\lambda_i,\varphi_i),i=1,2,\ldots,k$.
   (c) 检验收敛性：如果所有的残量范数$\|\tilde{r}_i\|,i=1,2,\ldots,k$,都小于$tol$，则停止，否则继续。
   (d) 重启：
      i. 令$Q=I_m$.
      ii. 用位移$\nu_1,\ldots,\nu_p$对H_m进行p步QR迭代：
         $for j=1,\ldots,p$
         - 分解$[Q_j,R_j]=qr(H_m-\nu_jI)$,
         - $H_m=Q_j^HH_mQ_j$,
         - $Q=QQ_j$.
      iii. 计算$V_{k+1}=V_mQ(:,1:k+1)$.