学校编码：10384　　分类号______ 密级______
学号：19120081152737　　UDC______

厦门大学

硕 士 学 位 论 文

解二次特征值问题的广义二阶 Arnoldi 方法的重新启动

On Restarting the Generalized Second-order Arnoldi Method for the Quadratic Eigenvalue Problems

吴倩

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：

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

基于正交投影与 Arnoldi 过程，产生了二阶 Arnoldi(SOAR) 方法。其不仅可直接作用于二次特征值问题去计算一些特征值，而且保持了原问题的结构。然而 SOAR 方法却不能进行有效的重新启动，为了能进行重新启动，对 SOAR 方法进行修正，提出了广义的二阶 Arnoldi(GSOAR)过程，并且为了得到更精确的近似向量，结合精化投影技术得到精化广义二阶 Arnoldi 过程。利用广义二阶 Arnoldi 过程与 Arnoldi 过程的关系，本文先介绍将两种经典的重新启动方法运用于精化广义二阶 Arnoldi 过程中，并对其进行讨论。之后利用 Sorensen 方法产生的子空间的性质，提出一个新的重新启动方法，该方法可以有效地计算分布密集的特征值。通过数值试验说明该方法的有效性及优越性。

关键词： 二次特征值问题；广义二阶 Arnoldi 子空间；精化 ritz 向量；Sorensen 方法；重新启动。

Abstract

Based on the orthogonal projection principle and a second-order Arnoldi procedure, the second-order Arnoldi (SOAR) method has been proposed for the quadratic eigenvalue problem. It can be uesd to computer some eigenpairs of the quadratic eigenvalue problem by working on it directly, and preserve physical structures of the original problem. However, the SOAR method cannot be restarted effectively. To correct this serious deficiency, we instead use a generalized second-order Arnoldi (GSOAR) procedure starting with a general vector, and based on the refined projection technique, we propose a refined generalized second-order Arnoldi method for attaining more exact eigenvectors. By using the connections between GSOAR procedure and the Arnoldi process, two generic restaring techniques can be applied to the RGSOAR procedure，and we would discuss them. Then we propose a new restarting method based on the property of the subspace generalized by Sorensen's method, it can computer some eigenvalues efficiently which are not well-separated. Numerical examples illustrate the efficiency and superiority of the new methods.

Key words: quadratic eigenvalue problem; generalized second-order Arnoldi subspace; refined Ritz vector; Sorensen's method; restarting.

第 一 章 绪论

本文考虑的二次特征值问题 (QEP) 具有如下形式

$$(\lambda^2 M + \lambda D + K)x = 0, \tag{1-1}$$

其中 $\lambda \in \mathbb{C}, x \in \mathbb{C}^n \setminus 0$，且 $M, D, K \in \mathbb{C}^{n\times n}$,$\lambda$ 与非零向量 x 分别称为 QEP(1-1) 的特征值与特征向量。

全文中假设所有特征值为半单的，那么问题就有n个线性无关的特征向量。主要的目的是算出部分特征对，比如模最大的几个或靠近复数域中某个数的几个。QEP的实际应用很广泛，比如微电子机械系统 [1]，快速列车的震动结构分析 [2]，流体力学 [3]。对于QEP的应用、谱理论、扰动分析与数值方法的全面概述，可以参考文献 [4]。

一种解 QEP(1-1) 的标准方法是将 QEP 转换为一个等价的 $2n \times 2n$ 线性化广义特征问题

$$\begin{bmatrix} -C & -K \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda x \\ x \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} M & 0 \\ 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda x \\ x \end{bmatrix}. \tag{1-2}$$

本文假设 M 是可逆的,则 (1-2) 可转化为

$$\begin{bmatrix} -M^{-1}D & -M^{-1}K \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda x \\ x \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \lambda x \\ x \end{bmatrix}. \tag{1-3}$$

如此便可以用诸如 Arnoldi 算法 [5,6] 的标准 Krylov 子空间投影方法解 (1-3)。然而线性化使问题的维数比原问题的多了两倍，相应地运算量与储存量会增加。而且利用线性化解 QEP(1-1) 的另一个缺点是即使对线性化问题使用向后稳定的方法，也不一定保证对于 QEP 是稳定的，这是因为 (1-2) 稳定所允许的扰动比 (1-1) 大 [7]。再者通过线性化解 QEP，其必要的结构不一定能保存，比如：M, D, K 是实数阵，M 对称正定，D 对称且 K 反对称，则 QEP 的特征值在 λ 为实数时，以 $(\lambda, -\lambda)$ 形式出现，在 λ 为复数时，以 $(\lambda, -\lambda, \overline{\lambda}, -\overline{\lambda})$ 形式出现，若通过线性化去解，则算出的特征值不会有这样结构。那么需要一个方法能直接作用于 QEP 以保持其必要结构。

柏兆俊和苏仰峰提出的二阶 Aronldi (SOAR) 方法 [5] 就是这样一个方法，它不仅能保持必要结构而且能利用解线性化问题的 Arnoldi 类型方法的优点。SOAR 过程计算由矩阵 A 和 B 产生二阶 Krylov 子空间的正交基，直接将 (1-1) 投影到这个子空间上，得到的投影问题保持了(1-1)的必要结构。文献 [5] 给出了 SOAR 方法与运用于线性化

问题 (1-3) 的 Arnoldi 类型方法的关系。随着 SOAR 方法的进行，所需的运算量与储存量不断增加，因此需要进行重新启动。然而 SOAR 方法本身不能进行有效的重新启动，为了克服这个问题，文献 [8] 提出了广义二阶 Aronldi (GSOAR) 方法，它将 SOAR 方法中特殊的初始向量换为一般的向量。基于 GSOAR，便可以对 SOAR 方法进行重新启动。将 GSOAR 方法与精化投影原理结合，得到 RGSOAR 方法，其计算的精化 Ritz 向量比 Ritz 向量更近似特征向量。重新启动需要选择新的初始向量，鉴于 GSOAR 过程与 Arnoldi 过程的关系，将 Arnoldi 方法的重新启动运用于 RGSOAR 方法中。本文先介绍将两种常用重新启动应用于 RGSOAR 方法，并对它们进行讨论，之后我提出一种新的重新启动方法，该方法是基于 Sorensen 方法产生的子空间的性质得到的. 最后通过数值试验来说明新的重新启动方法的有效性及优越性。

全文内容组织如下：第二章回顾二阶 Aronldi (SOAR) 方法，给出其产生二阶 Krylov 子空间正交基的过程及一些相关定理；第三章给出 GSOAR 方法，对其执行过程进行描述，并将精化投影原理与之结合得到 RGSOAR 方法；第四章介绍将两种常用的重新启动方法运用于 RGSOAR 方法，并对其执行细节及收敛行为进行讨论；第五章利用 Sorensen 方法产生的 Krylov 子空间的性质，提出新的重新启动方法，通过数值试验来说明其优越性与有效性。

符号说明：e^j 表示单位阵的第 j 列。0 表示零向量或零矩阵。上标 T 与 $*$ 分别表示转置与共轭转置。$\|\cdot\|_1$ 与 $\|\cdot\|_2$ 分别表示 1- 范数与 2- 范数。用 Matlab 的符号 $A(i:j,k:l)$ 表示矩阵 A 的包括 i 行到 j 行与 k 列到 l 列的子阵。

第 二 章　SOAR 方法

2.1　二阶 Krylov 子空间与 SOAR 过程

柏兆俊和苏仰峰在文献 [5] 中提出了下面的概念。

定义 2.1：令 A, B 为 n 阶方阵，u 为 n 阶向量，且 $u \neq 0$，定义：

$$\begin{aligned} r_0 &= u \\ r_1 &= Ar_0 \\ r_j &= Ar_{j-1} + Br_{j-2} \quad j \geq 2. \end{aligned}$$

则 $r_0, r_1, \ldots r_{k-1}$ 称为基于 A, B 与 u 的二阶 Krylov 序列，而

$$\mathcal{G}_k(A, B; u) = span\{r_0, r_1, \ldots, r_{k-1}\}$$

称为 k 维二阶 Krylov 子空间。

若 B 为零矩阵，则 $\mathcal{G}(A, B; u)$ 与 Krylov 子空间 $\mathcal{K}_k(A, u)$ 关系如下

$$\mathcal{G}_k(A, 0; u) = \mathcal{K}_k(A, u) = span\{u, Au, \ldots, A^{k-1}u\}.$$

由 (1-3) 是 (1-1) 的线性化，记 $A = -M^{-1}D, B = -M^{-1}K$，定义 $2n \times 2n$ 矩阵

$$H = \begin{bmatrix} A & B \\ I & 0 \end{bmatrix} \tag{2-1}$$

与 2n 维初始向量 v，可以产生 Krylov 子空间

$$\mathcal{K}_k(H, v) = span\{v, Hv, \ldots, H^{k-1}v\}. \tag{2-2}$$

特别的，令 $v = [u^T, 0]^T$，则有

$$\begin{bmatrix} r_j \\ r_{j-1} \end{bmatrix} = H^j v \quad j \geq 0, r_{-1} = 0. \tag{2-3}$$

这说明 $\mathcal{K}_k(H,v)$ 的上半部分就是 $\mathcal{G}_k(A,B;u)$ ，而下半部分是 $\mathcal{G}_{k-1}(A,B;u)$.意味着子空间 $\mathcal{G}_k(A,B;u)$ 包含了 $\mathcal{K}_k(H,v)$ 中所包含的信息，所以 $\mathcal{G}_k(A,B;u)$ 可以直接作用于 QEP(1-1)。而不是将 $\mathcal{G}_k(A,B;u)$ 作用于 H 去解。

文献 [5] 给出了下列过程，计算 $\mathcal{G}_k(A,B;u)$ 的正交基与辅助向量序列 $\{p_j\}$。它是 Arnoldi 过程的拓展。

算法1. SOAR过程

```
1:  q_1 = u/||u||
2:  p_1 = 0
3:  for j = 1, 2, ..., k do
4:      r = A q_j + B p_j
5:      s = q_j
6:      for i = 1, 2, ..., j do
7:          t_ij = q_i^* r
8:          r = r - q_i t_ij
9:          s = s - p_i t_ij
10:     end for
11:     t_{j+1,j} = ||r||
12:     if t_{j+1,j} = 0, stop
13:     q_{j+1} = r / t_{j+1,j}
14:     p_{j+1} = s / t_{j+1,j}
15: end for
```

算法 1 在第 12 行 $t_{j+1,j}=0$ 时停止，得到下列结果。

定理 2.1： *[5]* 定义 $Q_k=[q_1,q_2,\ldots,q_k]$ 与 $P_k=[p_1,p_2,\ldots,p_k]$ ，则有

$$span\{Q_k\}=\mathcal{G}_k(A,B;u), \tag{2-4}$$

且 SOAR 分解为

$$AQ_k+BP_k=Q_kT_k+q_{k+1}t_{k+1,\,k}e_k^* \tag{2-5}$$

$$Q_k=P_kT_k+p_{k+1}t_{k+1,\,k}e_k^*. \tag{2-6}$$

其中 e_k 为 k 阶单位阵的第 j 列。

定义 $\widehat{T}_k = \begin{bmatrix} T_k \\ t_{k+1,\,k}e_k^* \end{bmatrix}$，则 SOAR 分解可写为

$$\begin{bmatrix} A & B \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_k \\ P_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{k+1} \\ P_{k+1} \end{bmatrix} \widehat{T}_k \tag{2-7}$$

其中 $Q_k = [Q_k, q_{k+1}]$, $P_{k+1} = [P_k, p_{k+1}]$. 这类似于以 $v = [q_1^T, p_1^T]^T = [q_1^T, 0]^T$ 为初始的 H 的 Arnoldi 分解。但是 $[Q_k^T, P_k^T]^T$ 的列是 $K_k(H, v)$ 的非正交的一组基，其中 $q_1, q_2, \ldots, q_k$ 形成了 $\mathcal{G}_k(A, B; u)$ 的一组正交基，而 $p_2, \ldots, p_k$ 为 $\mathcal{G}_{k-1}(A, B; u)$ 的一组非正交的基。

2.2　SOAR 方法

若算法 1 在第 j 步停止，有两种可能。一种是 $r_i, i = 0, \ldots, j$ 是线性相关的，但 $[r_i^T, r_{i-1}^T]^T, i = 0, \ldots, j$ 线性无关，在这种情况下，有 $\mathcal{G}_{j+1}(A, B; u) = \mathcal{G}_j(A, B; u)$，但是 $K_{j+1}(H, v) \neq K_j(H, v)$，$H$ 的 Arnoldi 过程并没有终止，称这种情况为压缩。另一种可能是序列 $\{r_j\}$ 与 $\{[r_i^T, r_{i-1}^T]^T\}$ 都线性相关，这种情况称为中断，即 SOAR 过程与 H 的 Arnoldi 过程都终止。若 SOAR 过程在第 j 步发生压缩，则 $K_j(H, v)$ 不是不变子空间，不包含 H 的任何特征向量，所以 $\mathcal{G}_j(A, B; u)$ 也不包含 QEP(1-1) 的任何特征向量，需要采取方法进行纠正。

文献 [5] 给出了一个算法可以纠正压缩，称为带压缩的 SOAR 过程。

算法2.带压缩的 SOAR 过程

$q_1 = u/\|u\|$

$p_1 = 0$

$for\ j = 1, 2, \ldots, k\ do$

　　$r = Aq_j + Bp_j$

　　$s = q_j$

　　$for\ i = 1, 2, \ldots, j\ do$

　　　　$t_{ij} = q_i^* r$

　　　　$r = r - q_i t_{ij}$

　　　　$s = s - p_i t_{ij}$

　　$end\ for$

　　$t_{j+1,j} = \|r\|$

　　$if\ t_{j+1,j} = 0, stop$

　　　　$if\ s \in span\{p_i |\ i : q_i = 0, 1 \le i \le j\}$

$\qquad\qquad break$
$\qquad else\ deflation$
$\qquad\qquad reset\ t_{j+1,j} = 1$
$\qquad\qquad q_{j+1} = 0$
$\qquad\qquad p_{j+1} = s$
$\qquad end\ if$
$else$
$\qquad q_{j+1} = r/t_{j+1,j}$
$\qquad p_{j+1} = s/t_{j+1,j}$
$end\ if$
$end\ for$

由算法2，若 $t_{j+1,j} = 0$，令$t_{j+1,j} = 1, q_{j+1} = 0$，用 s 是否属于 $span\{p_i|\ i : q_i = 0, 1 \leq i \leq j\}$ 来判断是压缩还是中断 [5,引理3.2]，此过程需要用到 Gram-Schmidt 正交化。若发生压缩，$\{q_j\}$中非零向量仍可张成二阶 Krylov 子空间 $\mathcal{G}_k(A, B; u)$，但子空间维数小于 k . 对于带压缩的 SOAR 过程，定理2.1与关系式（2-7）仍成立。

定理 2.2： *[5]* 若以$v = [q_1^T, 0]^T$为初始的H的 Arnoldi 过程在第 k 步中断，当且仅当算法2在第 k 步中断。

SOAR 过程基于正交投影原理，将 QEP(1-1) 投影在 $\mathcal{G}_k(A, B; u)$ 上得到投影后的 QEP

$$(\theta^2 M_k + \theta C_k + K_k)g = 0. \tag{2-8}$$

其中 $M_k = Q_k^* M Q_k, C_k = Q_k^* C Q_k, K_k = Q_k^* K Q_k$. 假设 (θ, g) 为 (2-8) 的特征对，则 SOAR 方法用 $(\theta, z = Q_k g)$ 作为 QEP(1-1) 的特征对的近似。θ 与 z 分别称为 QEP(1-1) 关于 $\mathcal{G}_k(A, B; u)$ 的 Ritz 值与 Ritz 向量。由 $p_1 = 0$,则 (2-6) 与 (2-5) 可分别写成

$$Q_k = P_{k+1}\widehat{T}_k = P_{k+1}(:, 2 : k+1)\widehat{T}_k(2 : k+1, 1 : k)$$

与

$$AQ_k + BQ_k S_k = Q_k T_k + q_{k+1} t_{k+1,\,k} e_k^*.$$

其中 S_k为$k \times k$ 严格上三角阵

$$S_k = \begin{bmatrix} 0 & \widehat{T}_k(2:k, 1:k-1)^T \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

所以由 $p_{j+1} = Q_j \widehat{T}_k(2:k, 1:k-1)^T e_j$ 来算 p_{j+1}，节省了算法2一半的存储量。

第 三 章　GSOAR 方法

3.1　广义二阶 Krylov 子空间与 GSOAR 过程

随着迭代步数 k 的增加，SOAR 方法的运算量与储存量也增加，而且产生的正交基的正交性会更差，这是很不实际的，所以有必要进行重新启动。设定一个最大迭代数 k，若方法在第 k 步没有收敛，选择一个新的初始向量 u^+ 去构造子空间 $\mathcal{G}_k(A,B;u^+)$，使得这个子空间包含更多关于想要的特征向量的信息，以得到更好的近似特征对，如此下去直到方法收敛。

由 (2-7)，更新 $\mathcal{G}_k(A,B;u)$ 相当于更新 $K_k(H,v)$，要更新 $K_k(H,v)$ 所使用的新初始向量 v^+ 是形如 $\gamma v^+ = \psi(H)v$，其中 γ 使 $\|v^+\| = 1$，$\psi(z)$ 为filter多项式。但是 SOAR 方法的初始向量形如 $\begin{bmatrix} u \\ 0 \end{bmatrix}$ 的向量，而 v^+ 一般不具有这样的形式，所以 SOAR 方法不能进行有效的重新启动。为了能进行重新启动，文献 [8] 提出将二阶 Krylov 子空间进行修改得到广义二阶 Krylov 子空间。

定义 3.1：令 A,B 为 n 阶方阵，u_1,u_2 为 n 阶向量，且 $u_1 \neq 0$，则序列：

$$\begin{aligned} r_0 &= u_1 \\ r_1 &= Ar_0 + Bu_2 \\ r_j &= Ar_{j-1} + Br_{j-2} \quad j \geq 2. \end{aligned} \tag{3-1}$$

称为基于 A,B 与 u_1,u_2 的广义二阶 Krylov 序列，而

$$\mathcal{G}_k(A,B;u_1,u_2) = span\{r_0, r_1, \ldots, r_{k-1}\}$$

称为 k 维广义二阶 Krylov 子空间。

当 $u_2 = 0$ 时，广义二阶 Krylov 子空间就是二阶 Krylov 子空间。

令 $v = [u_1^T, u_2^T]^T$，由于 H 与 v 产生的 Krylov 子空间为 $K_k(H,v)$，很容易验证广义二阶 Krylov 向量序列 $\{r_j\}$ 与 Krylov 向量序列 $\{H^j v\}$ 的关系如下：

$$\begin{bmatrix} r_j \\ r_{j-1} \end{bmatrix} = H^j v \quad j \geq 1. \tag{3-2}$$

与 SOAR 方法一样，$\mathcal{G}_k(A,B;u_1,u_2)$可直接作用于 QEP(1-1)。下面算法描述产生 $\mathcal{G}_k(A,B;u_1,u_2)$ 的一组正交基的广义二阶 Arnoldi(GSOAR) 过程 [8]，其中包括了对压缩的处理。

算法3. GSOAR过程

输入：矩阵 A,B 与非零向量 u_1,u_2，最大迭代数 k .

输出：若无发生压缩，$q_1,\dots q_{k+2}$中非零向量为 $\mathcal{G}_{k+1}(A,B;u_1,u_2)$ 的一组正交基,序列 $p_1,\dots p_{k+1}$ 为 $\mathcal{G}_k(A,B;u_1,u_2)$ 的一组非正交的基，得到一个 $(k+1)\times k$ 的上 Hessenberg 阵$\widehat{T}_k=(t_{ij})$.

1: $q_1=u_1/\|u_1\|, p_1=u_2/\|u_2\|, l=0.$
2: $for\ j=1,2,\dots,k\ do$
3: $\quad r=Aq_j+Bp_j$
4: $\quad s=q_j$
5: $\quad for\ i=1,2,\dots,j\ do$
6: $\quad\quad t_{ij}=q_i^*r$
7: $\quad\quad r=r-q_it_{ij}$
8: $\quad\quad s=s-p_it_{ij}$
9: $\quad end\ for$
10: $\quad t_{j+1,j}=\|r\|$
11: $\quad if\ t_{j+1,j}=0, stop$
12: $\quad\quad l=l+1, t_{j+1,j}=1, q_{j+1}=0, p_{j+1}=s, f_l=p_{j+1}.$
13: $\quad\quad if\ (l=1\&p_{j+1}=0)\ or\ (l>1\&p_{j+1}\in span\{f_1,\dots f_{l-1}\})$
14: $\quad\quad\quad break, go\ to\ step\ 21.$
15: $\quad\quad end\ if$
16: $\quad else$
17: $\quad\quad q_{j+1}=r/t_{j+1,j}$
18: $\quad\quad p_{j+1}=s/t_{j+1,j}$
19: $\quad end\ if$
20: $end\ for$

由算法3及 (3-2) 式，类似于 SOAR 过程，下列结果成立。

定理 3.1： 算法3产生的 Q_k 的列为 $\mathcal{G}_k(A,B;u_1,u_2)$ 的一组正交基，(2-5)~(2-7)仍成立，$\begin{bmatrix} Q_k \\ P_k \end{bmatrix}$的列为 $K_k(H,v)$ 的一组非正交的基。而且与定理2.2一样，H 的 Arnoldi 过