Implicit Restarted Symplectic Lanczos für Hamiltonische Eigenwertprobleme

Martin Stoll

Fakultät für Mathematik
Technische Universität Chemnitz

12. Mai 2005

Gliederung

Definitionen

Hamiltonische und symplektische Matrizen

Definition

- $J = \begin{pmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2n,2n}$,

Definitionen

Hamiltonische und symplektische Matrizen

Definition

- $J = \begin{pmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2n,2n}$,
- $H \in \mathbb{R}^{2n,2n}$ ist Hamiltonische Matrix $\Longleftrightarrow (JH)^T = JH$,

Definitionen

Hamiltonische und symplektische Matrizen

Definition

- $J = \begin{pmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{2n,2n}$,
- $H \in \mathbb{R}^{2n,2n}$ ist Hamiltonische Matrix $\Longleftrightarrow (JH)^T = JH$,
- $S \in \mathbb{R}^{2n,2n}$ ist symplektische Matrix $\Longleftrightarrow S^T JS = J$.

Eigenschaften

Hamiltonische und symplektische Matrizen

- $H \in \mathbb{R}^{2n,2n}$ ist Hamiltonische Matrix $\Longleftrightarrow$
  $H = \begin{bmatrix} A & G \\ Q & -A^T \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2n,2n}$,
  mit $G = G^T$ und $Q = Q^T$.

Eigenschaften
Hamiltonische und symplektische Matrizen

- $H \in \mathbb{R}^{2n,2n}$ ist Hamiltonische Matrix $\Longleftrightarrow$ $H = \begin{bmatrix} A & G \\ Q & -A^T \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2n,2n}$, mit $G = G^T$ und $Q = Q^T$.
- Sei H Hamiltonisch und S symplektisch $\Longrightarrow$ $S^{-1}HS$ Hamiltonisch

Eigenschaften
Hamiltonische und symplektische Matrizen

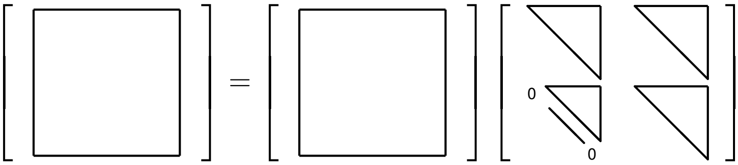
- $H \in \mathbb{R}^{2n,2n}$ ist Hamiltonische Matrix $\Longleftrightarrow$
  $H = \begin{bmatrix} A & G \\ Q & -A^T \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2n,2n}$,
  mit $G = G^T$ und $Q = Q^T$.
- Sei H Hamiltonisch und S symplektisch $\Longrightarrow$ $S^{-1}HS$ Hamiltonisch
- Eigenwerte symmetrisch zu beiden Achsen.
  Sei λ Eigenwert.
  $\lambda \in \mathbb{R} \Rightarrow -\lambda \in \mathbb{R}$ ebenfalls,
  $\lambda \in \mathbb{C} \Rightarrow -\lambda, \bar{\lambda}, -\bar{\lambda} \in \mathbb{C}$ ebenfalls.

SR Zerlegung

SR Algorithmus

Definition

Für $A \in \mathbb{R}^{2n,2n}$ ist $A = SR$, die SR Zerlegung mit einer symplektischen Matrix $S \in \mathbb{R}^{2n \times 2n}$ und J-Dreiecks-Matrix R.

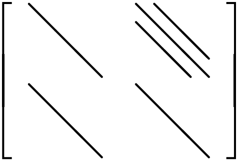


Hamiltonische J-Hessenberg-Matrix

SR Algorithmus

Definition

Eine Hamiltonische J-Hessenberg-Matrix H hat die folgende Gestalt,

$H =$ 

Allgemeine Aussagen

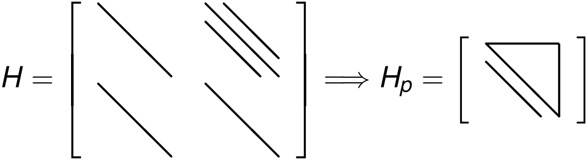
Implizite Shifts und SR Algorithmus

- H Hamiltonische J-Hessenberg-Matrix und $p_k(H) = SR$, dann ist $\tilde{H} = S^{-1}HS$ auch Hamiltonische J-Hessenberg-Matrix,
- SR Zerlegung eindeutig, Pendant zum impliziten Q Theorem gilt.

Allgemeine Aussagen
Implizite Shifts und SR Algorithmus

- H Hamiltonische J-Hessenberg-Matrix und $p_k(H) = SR$, dann ist $\tilde{H} = S^{-1}HS$ auch Hamiltonische J-Hessenberg-Matrix,
- SR Zerlegung eindeutig, Pendant zum impliziten Q Theorem gilt.

Permutierte Form:



Einfacher Shift

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Shift hat die Form $H_p - \mu I$

Einfacher Shift

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Shift hat die Form $H_p - \mu I$
- Erste Spalte ist $x = [\otimes, \otimes, 0, \ldots, 0]^T$

Einfacher Shift

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Shift hat die Form $H_p - \mu I$
- Erste Spalte ist $x = [\otimes, \otimes, 0, \dots, 0]^T$
- Bestimmen S_p, so dass $S_p x = \alpha e_1$

Einfacher Shift

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Shift hat die Form $H_p - \mu I$
- Erste Spalte ist $x = [\otimes, \otimes, 0, \ldots, 0]^T$
- Bestimmen S_p, so dass $S_p x = \alpha e_1$
- Berechnen $\hat{H}_p = S_p^{-1} H_p S_p$

Einfacher Shift

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Shift hat die Form $H_p - \mu I$
- Erste Spalte ist $x = [\otimes, \otimes, 0, \ldots, 0]^T$
- Bestimmen S_p, so dass $S_p x = \alpha e_1$
- Berechnen $\hat{H}_p = S_p^{-1} H_p S_p$
- $\hat{H}_p$ hat keine permutierte J-Hessenberg-Form mehr

Einfacher Shift

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Shift hat die Form $H_p - \mu I$
- Erste Spalte ist $x = [\otimes, \otimes, 0, \ldots, 0]^T$
- Bestimmen S_p, so dass $S_p x = \alpha e_1$
- Berechnen $\hat{H}_p = S_p^{-1} H_p S_p$
- $\hat{H}_p$ hat keine permutierte J-Hessenberg-Form mehr
- 'Bulge Chasing' Algorithmus für $\hat{H}_p$ mit Ergebnis $\tilde{H}_p$

Einfacher Shift

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Shift hat die Form $H_p - \mu I$
- Erste Spalte ist $x = [\otimes, \otimes, 0, \ldots, 0]^T$
- Bestimmen S_p, so dass $S_p x = \alpha e_1$
- Berechnen $\hat{H}_p = S_p^{-1} H_p S_p$
- $\hat{H}_p$ hat keine permutierte J-Hessenberg-Form mehr
- 'Bulge Chasing' Algorithmus für $\hat{H}_p$ mit Ergebnis $\tilde{H}_p$
- $\tilde{H}_p$ hat wieder permutierte J-Hessenberg-Form

Doppelshift

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Shift hat die Form $(H_p - \mu_1 I)(H_p - \mu_2 I)$
- Erste Spalte ist $x = [\otimes, \otimes, \otimes, 0, \ldots, 0]^T$
- Bestimmen S_p, so dass $S_p x = \alpha e_1$
- Berechnen $\hat{H}_p = S_p^{-1} H_p S_p$
- $\hat{H}_p$ hat keine permutierte J-Hessenberg-Form mehr
- 'Bulge Chasing' Algorithmus für $\hat{H}_p$ mit Ergebnis $\tilde{H}_p$
- $\tilde{H}_p$ hat wieder permutierte J-Hessenberg-Form

Quadrupelshift

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Shift hat die Form $(H_p - \mu_1 I)(H_p + \mu_1 I)(H_p - \mu_2 I)(H_p + \mu_2 I)$
- Erste Spalte ist $x = [\otimes, \otimes, \otimes, 0, \ldots, 0]^T$
- Bestimmen S_p, so dass $S_p x = \alpha e_1$
- Berechnen $\hat{H}_p = S_p^{-1} H_p S_p$
- $\hat{H}_p$ hat keine permutierte J-Hessenberg-Form mehr
- 'Bulge Chasing' Algorithmus für $\hat{H}_p$ mit Ergebnis $\tilde{H}_p$
- $\tilde{H}_p$ hat wieder permutierte J-Hessenberg-Form

SR Algorithmus

Implizite Shifts und SR Algorithmus

Durchführen von SR Schritten bis H folgende Gestalt hat

$$\tilde{H} = S^{-1}HS = \begin{bmatrix} \tilde{H}_{1,1} & & & \tilde{H}_{1,n+1} & & \\ & \ddots & & & \ddots & \\ & & \tilde{H}_{n,n} & & & \tilde{H}_{n,2n} \\ \tilde{H}_{n+1,1} & & & \tilde{H}_{n+1,n+1} & & \\ & \ddots & & & \ddots & \\ & & \tilde{H}_{2n,n} & & & \tilde{H}_{2n,2n} \end{bmatrix},$$

Größe der Blöcke ist 1 oder 2.

Bestimmung der Eigenwerte
Implizite Shifts und SR Algorithmus

$$H_j^2 = \begin{bmatrix} \delta_j & \beta_j \\ \nu_j & -\delta_j \end{bmatrix} \text{ und } H_j^4 = \begin{bmatrix} \delta_j & 0 & \beta_j & \zeta_j \\ 0 & \delta_{j+1} & \zeta_j & \beta_{j+1} \\ \nu_j & 0 & -\delta_j & 0 \\ 0 & \nu_{j+1} & 0 & -\delta_{j+1} \end{bmatrix}$$

Für 2×2:

$$\lambda_{1/2} = \pm\sqrt{\delta_j^2 + \nu_j\beta_j}$$

Für 4×4:

$$\lambda_{1/2} = \pm\sqrt{\frac{\delta_j^2 + \nu_j\beta_j + \delta_{j+1}^2 + \nu_{j+1}\beta_{j+1}}{2} + \sqrt{\frac{(\delta_j^2 + \nu_j\beta_j - \delta_{j+1}^2 - \nu_{j+1}\beta_{j+1})^2}{4} + \nu_j\nu_{j+1}\zeta_j^2}}$$

$$\lambda_{3/4} = \pm\sqrt{\frac{\delta_j^2 + \nu_j\beta_j + \delta_{j+1}^2 + \nu_{j+1}\beta_{j+1}}{2} - \sqrt{\frac{(\delta_j^2 + \nu_j\beta_j - \delta_{j+1}^2 - \nu_{j+1}\beta_{j+1})^2}{4} + \nu_j\nu_{j+1}\zeta_j^2}}$$

Bestimmung der Eigenvektoren

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Endform nach ursprünglich von Mehrmann/Bunse-Gerstner vorgestelltem Algorithmus

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} \tilde{H}_{11} & \tilde{H}_{12} \\ 0 & \tilde{H}_{22} \end{bmatrix}$$

- Diagonalelemente von $\tilde{H}_{11}$ sind reelle Eigenwerte mit negativem Realteil oder
  eine Matrix Δ mit den Eigenwerten $-\lambda$ und $-\mu$
- reelle Eigenvektoren direkt ablesbar

Bestimmung der Eigenvektoren

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Givenstransformation G (siehe LAPACK Routine slanv2) transformiert Δ auf

$$\begin{bmatrix} -\alpha & c \\ b & -\alpha \end{bmatrix},$$

wobei $-\lambda = -\alpha + i\beta$ und $i\beta = \sqrt{bc}$.

- Diagonalmatrix D erzwingt Gestalt

$$\begin{bmatrix} -\alpha & \beta \\ -\beta & -\alpha \end{bmatrix}$$

oder

$$\begin{bmatrix} -\alpha & -\beta \\ \beta & -\alpha \end{bmatrix}.$$

Bestimmung der Eigenvektoren für Eigenwerte mit positivem Realteil

Implizite Shifts und SR Algorithmus

Für Bestimmung der zweiten Hälfte Eigenvektoren bieten sich zwei Möglichkeiten

- Inverse Iteration, d.h. $(\tilde{H} - \mu I)y^{(k+1)} = y^{(k)}$

Bestimmung der Eigenvektoren für Eigenwerte mit positivem Realteil

Implizite Shifts und SR Algorithmus

Für Bestimmung der zweiten Hälfte Eigenvektoren bieten sich zwei Möglichkeiten

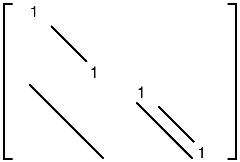
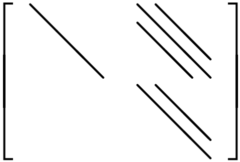
- Inverse Iteration, d.h. $(\tilde{H} - \mu I)y^{(k+1)} = y^{(k)}$
- Bestimmung mittels Schur-ähnlicher Form

$$\begin{bmatrix} \tilde{H}_{11} & u & \tilde{H}_{13} \\ 0 & \mu & v^T \\ 0 & 0 & \tilde{H}_{33} \end{bmatrix}$$

Inverse Iteration und LU Zerlegung

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Hauptaufwand in Berechnung von $(\tilde{H} - \mu I)y^{(k+1)} = y^{(k)}$,
- Schwache Besetzungsstruktur hilft bei LU

$L =$  $U =$ 

- Lösen $Lw = y^{(k)}$ und dann $Ry^{(k+1)} = w$

Schur-ähnliche Form für reelle Eigenwerte

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Für reelle Eigenwerte

$$\begin{bmatrix} \tilde{H}_{11} & u & \tilde{H}_{13} \\ 0 & \mu & v^T \\ 0 & 0 & \tilde{H}_{33} \end{bmatrix}$$

Schur-ähnliche Form für reelle Eigenwerte

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Für reelle Eigenwerte

$$\begin{bmatrix} \tilde{H}_{11} & u & \tilde{H}_{13} \\ 0 & \mu & v^T \\ 0 & 0 & \tilde{H}_{33} \end{bmatrix}$$

- Lösen $(\tilde{H}_{11} - \mu I)w = -u$, wobei $\mu \notin \sigma(\tilde{H}_{11})$
- Haben zum Eigenwert μ Eigenvektor

$$x = S \begin{bmatrix} w \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Schur-ähnliche Form für komplexe Eigenwerte

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Für komplexe Eigenwerte

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} \tilde{H}_{11} & [u_1\, u_2] & \tilde{H}_{14} \\ 0 & \Delta & [v_1\, v_2]^T \\ 0 & 0 & \tilde{H}_{44} \end{bmatrix}, \Delta \in \left\{ \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \alpha & -\beta \\ \beta & \alpha \end{bmatrix} \right\}$$

Schur-ähnliche Form für komplexe Eigenwerte

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Für komplexe Eigenwerte

$$\tilde{H} = \begin{bmatrix} \tilde{H}_{11} & [u_1 \, u_2] & \tilde{H}_{14} \\ 0 & \Delta & [v_1 \, v_2]^T \\ 0 & 0 & \tilde{H}_{44} \end{bmatrix}, \Delta \in \left\{ \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta & \alpha \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \alpha & -\beta \\ \beta & \alpha \end{bmatrix} \right\}$$

- Ziel ist

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \hat{H}_{11} & \hat{u}_1 & \hat{u}_2 & \hat{H}_{14} \\ 0 & \alpha + i\beta & 0 & \hat{v}_1^T \\ 0 & 0 & \alpha - i\beta & \hat{v}_2^T \\ 0 & 0 & 0 & \hat{H}_{44} \end{bmatrix},$$

Schur-ähnliche Form für komplexe Eigenwerte

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Transformation von Δ mit

$$Q = \begin{bmatrix} -i & 1 \\ 1 & -i \end{bmatrix} \quad oder \quad Q = \begin{bmatrix} i & 1 \\ 1 & i \end{bmatrix}$$

Schur-ähnliche Form für komplexe Eigenwerte

Implizite Shifts und SR Algorithmus

- Transformation von Δ mit

$$Q = \begin{bmatrix} -i & 1 \\ 1 & -i \end{bmatrix} \quad oder \quad Q = \begin{bmatrix} i & 1 \\ 1 & i \end{bmatrix}$$

- Lösen

$$(\hat{H}_{11} - \lambda I)w_1 = -\hat{u}_1 \quad und \quad (\hat{H}_{11} - \mu I)w_2 = -\hat{u}_2$$

liefert Eigenvektoren

$$x = S \begin{bmatrix} w_1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad und \quad y = S \begin{bmatrix} w_2 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Der unsymmetrische Lanczosalgorithmus

Definition

Der unsymmetrische Lanczosprozess wird durch die folgenden Gleichungen beschrieben,

$$AP_k = P_k T_k + \beta_{k+1} p_{k+1} e_k^T$$

$$A^T Q_k = Q_k T_k^T + \gamma_{k+1} q_{k+1} e_k^T,$$

Für viele Matrizen kann die Berechnung mit A^T umgangen werden.

Der symplektische Lanczosalgorithmus

- Folge von Matrizen

$$S_p^{2n,2k} = [v_1, w_1, v_2, w_2, \ldots, v_k, w_k] \in \mathbb{R}^{2n,2k},$$

Der symplektische Lanczosalgorithmus

- Folge von Matrizen

$$S_p^{2n,2k} = [v_1, w_1, v_2, w_2, \ldots, v_k, w_k] \in \mathbb{R}^{2n,2k},$$

- Genügen der Lanczosrekursion

$$H_p S_p^{2n,2k} = S_p^{2n,2k} \tilde{H}_p^{2k,2k} + \zeta_{k+1} v_{k+1} e_{2k}^T.$$

Der symplektische Lanczosalgorithmus

- Folge von Matrizen

$$S_p^{2n,2k} = [v_1, w_1, v_2, w_2, \ldots, v_k, w_k] \in \mathbb{R}^{2n,2k},$$

- Genügen der Lanczosrekursion

$$H_p S_p^{2n,2k} = S_p^{2n,2k} \tilde{H}_p^{2k,2k} + \zeta_{k+1} v_{k+1} e_{2k}^T.$$

- Spaltenweise Betrachtung

$$H_p S_p e_m = S_p \tilde{H}_p e_m, \qquad m = 1, 2, \ldots, 2k-1.$$

Bestimmung der Vektoren

Der symplektische Lanczosalgorithmus

- Dabei gilt für ungerade Spalten

$$\begin{aligned} H_p v_{m+1} &= \delta_{m+1} v_{m+1} + \nu_{m+1} w_{m+1} \\ &\Longleftrightarrow \\ \nu_{m+1} w_{m+1} &= H_p v_{m+1} - \delta_{m+1} v_{m+1} \\ &=: \tilde{w}_{m+1} \end{aligned}$$

Bestimmung der Vektoren

Der symplektische Lanczosalgorithmus

- Dabei gilt für ungerade Spalten

$$\begin{array}{rcl} H_p v_{m+1} & = & \delta_{m+1} v_{m+1} + \nu_{m+1} w_{m+1} \\ & \Longleftrightarrow & \\ \nu_{m+1} w_{m+1} & = & H_p v_{m+1} - \delta_{m+1} v_{m+1} \\ & =: & \tilde{w}_{m+1} \end{array}$$

- für die geraden Spalten zeigt sich

$$\begin{array}{rcl} H_p w_m & = & \zeta_m v_{m-1} + \beta_m v_m - \delta_m w_m + \zeta_{m+1} v_{m+1} \\ & \Longleftrightarrow & \\ \zeta_{m+1} v_{m+1} & = & H_p w_m - \zeta_m v_{m-1} - \beta_m v_m + \delta_m w_m \\ & =: & \tilde{v}_{m+1} \end{array}$$

Bestimmung der Parameter

Der symplektische Lanczosalgorithmus

Bestimmung der Parameter der Hamiltonischen Matrix

- Da $S_p^T J_p S_p = J_p$,

$$\zeta_{m+1} = \|\tilde{v}_{m+1}\|_2 \quad und \quad \nu_{m+1} = v_{m+1}^T J_p H_p v_{m+1}.$$

- Symplektizität liefert

$$\beta_m = -w_m^T J_p H_p w_m.$$

- δ_m ist frei zu wählen, beispielsweise $\delta_m = 1$ oder $\delta_m = v_m^T H_p v_m$

Implicit Restarted Symplectic Lanczosalgorithmus

Beispiel mit Quadrupelshift

- $H_p S_p^{2n,2m} = S_p^{2n,2m} \tilde{H}_p^{2m,2m} + \zeta_{m+1} v_{m+1} e_{2m}^T$

Implicit Restarted Symplectic Lanczosalgorithmus

Beispiel mit Quadrupelshift

- $H_p S_p^{2n,2m} = S_p^{2n,2m} \tilde{H}_p^{2m,2m} + \zeta_{m+1} v_{m+1} e_{2m}^T$
- $(\tilde{H}_p^{2m} - \mu_i I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_i I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_{i+1} I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_{i+1} I) = S_p^{(i)} R_p^{(i)}$

Implicit Restarted Symplectic Lanczosalgorithmus

Beispiel mit Quadrupelshift

- $H_p S_p^{2n,2m} = S_p^{2n,2m} \tilde{H}_p^{2m,2m} + \zeta_{m+1} v_{m+1} e_{2m}^T$
- $(\tilde{H}_p^{2m} - \mu_i I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_i I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_{i+1} I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_{i+1} I) = S_p^{(i)} R_p^{(i)}$
- $H_p \check{S}_p^{2n,2m} = \check{S}_p^{2n,2m} \check{H}_p^{2m,2m} + \check{\zeta}_{m+1} \check{v}_{m+1} e_{2m}^T S_p$, mit $\check{S}_p^{2n,2m} = S_p^{2n,2m} S_p$ und $\check{H}_p^{2m,2m} = S_p^{-1} \tilde{H}_p^{2m,2m} S_p$

Implicit Restarted Symplectic Lanczosalgorithmus

Beispiel mit Quadrupelshift

- $H_p S_p^{2n,2m} = S_p^{2n,2m} \tilde{H}_p^{2m,2m} + \zeta_{m+1} v_{m+1} e_{2m}^T$
- $(\tilde{H}_p^{2m} - \mu_i I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_i I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_{i+1} I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_{i+1} I) = S_p^{(i)} R_p^{(i)}$
- $H_p \check{S}_p^{2n,2m} = \check{S}_p^{2n,2m} \check{H}_p^{2m,2m} + \check{\zeta}_{m+1} \check{v}_{m+1} e_{2m}^T S_p$, mit $\check{S}_p^{2n,2m} = S_p^{2n,2m} S_p$ und $\check{H}_p^{2m,2m} = S_p^{-1} \tilde{H}_p^{2m,2m} S_p$
- Residuenterm

$$\zeta_{m+1} v_{m+1} (s_{2m,2m-4q} e_{2m-4q}^T + s_{2m,2m-3q} e_{2m-3q}^T + \ldots + s_{2m,2m} e_{2m}^T)$$

Implicit Restarted Symplectic Lanczosalgorithmus

Beispiel mit Quadrupelshift

- $H_p S_p^{2n,2m} = S_p^{2n,2m} \tilde{H}_p^{2m,2m} + \zeta_{m+1} v_{m+1} e_{2m}^T$
- $(\tilde{H}_p^{2m} - \mu_i I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_i I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_{i+1} I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_{i+1} I) = S_p^{(i)} R_p^{(i)}$
- $H_p \check{S}_p^{2n,2m} = \check{S}_p^{2n,2m} \check{H}_p^{2m,2m} + \check{\zeta}_{m+1} \check{v}_{m+1} e_{2m}^T S_p$, mit $\check{S}_p^{2n,2m} = S_p^{2n,2m} S_p$ und $\check{H}_p^{2m,2m} = S_p^{-1} \tilde{H}_p^{2m,2m} S_p$
- Residuenterm

$$\zeta_{m+1} v_{m+1} (s_{2m,2m-4q} e_{2m-4q}^T + s_{2m,2m-3q} e_{2m-3q}^T + \ldots + s_{2m,2m} e_{2m}^T)$$

- $H_p \check{S}_p^{2n,2k} = \check{S}_p^{2n,2k} \check{H}^{2k,2k} + r_k e_{2k}^T$

Implicit Restarted Symplectic Lanczosalgorithmus

Beispiel mit Quadrupelshift

- $H_p S_p^{2n,2m} = S_p^{2n,2m} \tilde{H}_p^{2m,2m} + \zeta_{m+1} v_{m+1} e_{2m}^T$
- $(\tilde{H}_p^{2m} - \mu_i I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_i I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_{i+1} I)(\tilde{H}_p^{2m} + \mu_{i+1} I) = S_p^{(i)} R_p^{(i)}$
- $H_p \check{S}_p^{2n,2m} = \check{S}_p^{2n,2m} \check{H}_p^{2m,2m} + \check{\zeta}_{m+1} \check{v}_{m+1} e_{2m}^T S_p$, mit $\check{S}_p^{2n,2m} = S_p^{2n,2m} S_p$ und $\check{H}_p^{2m,2m} = S_p^{-1} \tilde{H}_p^{2m,2m} S_p$
- Residuenterm

$$\zeta_{m+1} v_{m+1} (s_{2m,2m-4q} e_{2m-4q}^T + s_{2m,2m-3q} e_{2m-3q}^T + \ldots + s_{2m,2m} e_{2m}^T)$$

- $H_p \check{S}_p^{2n,2k} = \check{S}_p^{2n,2k} \check{H}^{2k,2k} + r_k e_{2k}^T$
- Residuum $r_k = \check{\zeta}_{k+1} \check{v}_{k+1} + \zeta_{m+1} s_{2m,2k} v_{m+1}$

Abbruchkriterien

Implicit Restarted Symplectic Lanczosalgorithmus

Haben $H^{2n,2n}S^{2n,2k} = S^{2n,2k}\tilde{H}^{2k,2k} + \tilde{r}_k e_{2k}^T$

- Wenn $x = S^{2n,2k}y$, dann gilt

$$\|Hx - \lambda x\| = |e_{2k}^T y| \|(\check{\zeta}_k \tilde{\tilde{v}}_k + \zeta_{k+1} s_{2m,2k} \tilde{v}_{k+1})\|$$

- $\|E\|$ ist aussagekräftig, wenn $(H - E)x = \lambda x$

Abbruchkriterien

Implicit Restarted Symplectic Lanczosalgorithmus

Haben $H^{2n,2n}S^{2n,2k} = S^{2n,2k}\tilde{H}^{2k,2k} + \tilde{r}_k e_{2k}^T$

- Wenn $x = S^{2n,2k}y$, dann gilt

$$\|Hx - \lambda x\| = |e_{2k}^T y| \|(\check{\zeta}_k \tilde{\tilde{v}}_k + \zeta_{k+1} s_{2m,2k} \tilde{v}_{k+1})\|$$

- $\|E\|$ ist aussagekräftig, wenn $(H - E)x = \lambda x$
- Sei H diagonalisierbar mit Hilfe von Y

$$Y^{-1}H^{2k,2k}Y = \begin{bmatrix} -\lambda_1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & -\lambda_k & & & \\ & & & \lambda_1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \lambda_k \end{bmatrix} = \Lambda,$$

Abbruchkriterien

Implicit Restarted Symplectic Lanczosalgorithmus

- Es gilt $HX = X\Lambda + \tilde{r}_k e_{2k}^T Y$ mit $X = S^{2n,2k} Y$

Abbruchkriterien

Implicit Restarted Symplectic Lanczosalgorithmus

- Es gilt $HX = X\Lambda + \tilde{r}_k e_{2k}^T Y$ mit $X = S^{2n,2k} Y$
- Spaltenweise Betrachtung liefert

$$\begin{aligned} Hx_i &= -\lambda_i x_i + y_{2k,i}\tilde{r}_k \\ Hx_{k+i} &= \lambda_i x_{k+i} + y_{2k,k+i}\tilde{r}_k \end{aligned}$$

Abbruchkriterien

Implicit Restarted Symplectic Lanczosalgorithmus

- Es gilt $HX = X\Lambda + \tilde{r}_k e_{2k}^T Y$ mit $X = S^{2n,2k} Y$
- Spaltenweise Betrachtung liefert

$$\begin{aligned} Hx_i &= -\lambda_i x_i + y_{2k,i}\tilde{r}_k \\ Hx_{k+i} &= \lambda_i x_{k+i} + y_{2k,k+i}\tilde{r}_k \end{aligned}$$

- Abschätzung dank Eigentripel $(-\lambda_i, x_i, (Jx_{k+i})^T)$ $(\lambda_i, x_{k+i}, (Jx_i)^T)$

$$\begin{aligned} \|E_{(-\lambda_i)}\| &= max\left\{\frac{|y_{2k,i}|\|\tilde{r}_k\|}{\|x_i\|}, \frac{|y_{2k,k+i}|\|\tilde{r}_k^T J\|}{\|Jx_{k+i}\|}\right\} \\ \|E_{\lambda_i}\| &= max\left\{\frac{|y_{2k,k+i}|\|\tilde{r}_k\|}{\|x_{k+i}\|}, \frac{|y_{2k,i}|\|\tilde{r}_k^T J\|}{\|Jx_i\|}\right\}. \end{aligned}$$

Ausblick

- Purging und Locking für IRSL
- Untersuchungen zur Krylov Schur Form
- weitreichende numerische Tests