Contents

Chapter 2

Common Issues

2.1 疎行列格納形式

J. Dongarra

本書で扱う多くの反復法の性能は主として行列ベクトル積の性能によって達成される。それゆえ、行列の格納形式にも影響を受ける。しばしば、使われる行列の格納形式は特定の応用問題から自然に生じたものである。

本節では ITPACK [263], NSPCG [345], and SPARSPAK [191], のような数値計算パッケージで使われているもっとも一般的な疎行列格納形式のいくつかと、BLAS Technical Forum (詳細は ETHOME を見よ) による新しい標準化ソフトウェアの一部としてとり入れらているものを概観する。. §2.2.2 では、2 種類の疎行列格納形式によってどのように行列ベクトル積が計算されるかを示す。

行列 A が疎行列ならば、A のゼロ要素が更新も格納もされないとき、もっとも効率的に大規模固有値問題が計算できる。疎行列格納形式は、行列の非ゼロ要素ときわめて小数のゼロ要素をメモリ上の連続した領域に配置する。もちろん、疎行列格納形式はそれらの要素が行列全体のどこに収まるかを知る仕組みを持っている。

データの格納方法はいろいろである (たとえば、Saad [386] や Eijkhout [156] を見よ)。ここでは、圧縮行格納形式、圧縮列格納形式、ブロック行圧縮格納形式、対角格納形式、Jagged Diagonal 格納形式、そしてスカイライン格納形式について述べる。

2.1.1 圧縮行格納法（Compressed Row Storage, CRS 法）

圧縮行格納形式と圧縮列格納形式（次節）は最も一般的な形式で、行列の疎構造にいかなる仮定もしないし、, ひとつとして不要な要素も格納しない。一方，行列–ベクトル積または前処理解法では，それぞれのスカラー演算に対して間接アドレス参照を必要とするため、大変効率が良いというわけではない。

圧縮行格納形式（CRS 法）では行列の行内の非ゼロ要素をメモリ上に連続した配置する。非対称疎行列 A を仮定すると，1 本の浮動小数点数ベクトル（`val`）、2 本の整数ベクトル（`col_ind`，`row_ptr`）、計 3 本のベクトルがいる。`val` ベクトルは行列 A の非ゼロ要素を行方向に格納する。`col_ind` ベクトル

は val ベクトルの要素の列インデックスを格納する。つまり，val(k) $=a_{i,j}$ なら col_ind(k) $=j$ である。row_ptr ベクトルは val ベクトル上での行の開始位置を格納する。つまり，val(k) $=a_{i,j}$ なら row_ptr(i) $\le k <$ row_ptr(i + 1) である。便宜上，row_ptr(n + 1) $= nnz+1$ と定義する。ここで nnz は行列 A の非ゼロ要素数である。この方法による格納領域の節約は顕著であり、n^2 要素を格納する代わりに，たった $2nnz+n+1$ の格納場所で済む。

ひとつの例として，次のような非対称行列 A を考える：

$$A=\begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 3 & 9 & 0 & 0 & 0 & 3 \\ 0 & 7 & 8 & 7 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 8 & 7 & 5 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 9 & 9 & 13 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 2 & -1 \end{bmatrix}. \tag{2.1}$$

この行列に対する CRS 形式は以下のような値の配列 {val，col_ind，row_ptr} で表される：

val	10	-2	3	9	3	7	8	7	$3\cdots 9$	13	4	2	-1
col_ind	1	5	1	2	6	2	3	4	$1\cdots 5$	6	2	5	6

row_ptr	1	3	6	9	13	17	20

行列 A が対称なら，行列の上三角部分または下三角部分だけを格納すればよい。トレードオフはいくぶん異なるデータアクセスパターンを持つより複雑なアルゴリズムになることである。

2.1.2 圧縮列格納形式（Compressed Column Storage, CCS 法)

圧縮行格納形式と同様，圧縮列格納形式法（CCS 法）という方法もある。この方法は *Harwell-Boeing* 疎行列形式 [139] とも呼ばれている。CCS 形式では行方向ではなく列方向に A が格納されている以外は CRS 形式と同じである。言い換えると，CCS 形式は A^T に対する CRS 形式である。

CCS 形式は 3 つの配列 {val，row_ind，col_ptr} によって表される。row_ind は非ゼロ要素の行インデックスを格納し，col_ptr は val ベクトル上での列の開始位置を格納する。(2.1) の行列 A に対する CCS 形式は以下のようになる：

val	10	3	3	9	7	8	4	8	$8\cdots 9$	2	3	13	-1
row_ind	1	2	4	2	3	5	6	3	$4\cdots 5$	6	2	5	6

col_ptr	1	4	8	10	13	17	20

2.1.3 ブロック圧縮行格納法（Block Compressed Row Storage, BCRS 法）

疎行列 A が非ゼロ要素からなる正方密ブロックの規則的なパターンからできているなら，そのようなブロックパターンを活用するように CRS 格納形式（または CCS 格納形式）を修正できる。典型的なブロック行列はひとつの格子点に複数の自由度 *degrees of freedom* を持つ偏微分方程式の離散化からでてくる。

そこで自由度に等しい大きさの小さなブロックに分け，いくつかのゼロを含んでいたとしてもそれらのブロックを密行列として扱う。

n_b を各ブロックの次元，$nnzb$ を $n \times n$ 行列 A 中の非ゼロブロック数とすると，全体で必要な格納領域は $nnz = nnzb \times n_b^2$ である。A のブロック次元 n_d は $n_d = n/n_b$ として定義される。

CRS 形式と同様に，BCRS 形式も 3 つの配列を必要とする：浮動小数点数のための長方形配列（`val`$(1:nnzb,\ 1:n_b,\ 1:n_b)$）には（ブロックの）行方向にそって非ゼロブロックを、整数配列（`col_ind`$(1:nnzb)$）には各非ゼロブロックの $(1,1)$ 要素の元の行列 A における列インデックスを、そしてポインタ配列（`row_blk`$(1:n_d+1)$）には `val(:,:,:)` と `col_ind(:)` 中のそれぞれのブロックのある行開始位置を格納している。BCRS 法における格納位置と間接アドレス付けに要する計算時間は、大きな n_b を持つ行列に対して大きく削減できる。

2.1.4 圧縮対角格納法（Compressed Diagonal Storage, CDS 格納形式）

行列 A のそれぞれの行がほとんど一定の帯幅を持つ帯行列であるとき，行列の副対角要素を連続した場所に格納する格納形式を用いてこの構造を利用することには大きな利点がある。列や行を識別するベクトルを排除できるだけでなく，行列–ベクトル積がより効率良く実行するよう非ゼロ要素を詰め込むことができる。特にこの格納形式は，行列がテンソル積格子上の有限要素離散化あるいは有限差分離散化で作られたときに役立つ。

左帯半幅，右帯半幅と呼ばれる非負の定数 p, q に対して、$i-p \le j \le i+q$ のときにのみ $a_{i,j} \neq 0$ となるなら，行列 $A = (a_{i,j})$ を帯行列という。この場合，行列 A に配列 `val(1:n,-p:q)` を割り当てる。行と列を逆にした宣言 (`-p:q,n`) は `LINPACK` の帯形式 [132] に対応している。CDS 法とは異なり，`LINPACK` の帯形式は $\mathtt{p}+\mathtt{q}$ が小さいときは行列–ベクトル積の効率的なベクトル化ができない。

通常，帯形式はいくつかのゼロを格納している。CDS 形式は行列要素にまったく対応していない配列要素を含んでさえいる。以下に定義された非対称行列 A を考える：

$$A = \begin{bmatrix} 10 & -3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 9 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 7 & 8 & 7 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 7 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 & 9 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & -1 \end{bmatrix}. \tag{2.2}$$

CDS 形式では，射影：

$$\mathtt{val(i,j)} = a_{i,i+j}. \tag{2.3}$$

を用いて、行列 A を (`6,-1:1`) 次元の配列に格納する。それゆえ，配列 `val(:,:)` の行は

`val(:,-1)`	0	3	7	8	9	2
`val(:, 0)`	10	9	8	7	9	-1
`val(:,+1)`	-3	6	7	5	13	0

となる。存在しない行列要素に対応した 2 つのゼロに注意せよ。

2.1.5 Jagged Diagonal 格納形式（Jagged Diagonal Storage, JDS 形式）

Jagged Diagonal 格納形式は並列プロセッサやベクトルプロセッサ上で反復法を実現するのに役立つ（Saad [385] 参照）。CDS 形式のように，本質的には行列サイズと同じ長さのベクトル長を与える。集積/散布演算のコストの点で CDS 法よりもより格納効率が良い。

ITPACK 格納形式や Purdue 格納形式と呼ばれる JDS 法を単純化した形式ものは以下のように記述できる。先ほどの非対称行列では，すべての非ゼロ要素が左寄せされ，

$$\begin{bmatrix} 10 & -3 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 6 & 0 & -2 & 0 \\ 3 & 0 & 8 & 7 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 7 & 5 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 9 & 13 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & -1 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} 10 & -3 & 1 & \\ 9 & 6 & -2 & \\ 3 & 8 & 7 & \\ 6 & 7 & 5 & 4 \\ 9 & 13 & & \\ 5 & -1 & & \end{bmatrix}$$

となり，その後各列が連続して格納される。すべての行には長さを等しくするため右にゼロが詰められる。行列要素の配列 `val(:,:)` に対応して，列インデックスの配列 `col_ind(:,:)` も格納される。

`val`(:, 1)	10	9	3	6	9	5
`val`(:, 2)	−3	6	8	7	13	−1
`val`(:, 3)	1	−2	7	5	0	0
`val`(:, 4)	0	0	0	4	0	0

,

`col_ind`(:, 1)	1	2	1	2	5	5
`col_ind`(:, 2)	2	3	3	4	6	6
`col_ind`(:, 3)	4	5	4	5	0	0
`col_ind`(:, 4)	0	0	0	6	0	0

.

この構造でゼロを詰めることは，特に行列の帯幅が大きく変わるときに不利になりかねないことは明らかである。それゆえ，JDS 形式では、行あたりの非ゼロ要素数がだんだんと少なくなるよう行列の行を並べ換える。圧縮されて，入れ換えられた対角要素は 1 次元配列に格納される。その新しいデータ構造が *jagged diagonals* と呼ばれる。

特に、 すべての最初は `val` に（密）ベクトルを格納する。`col_ind` にはそれぞれの行における対応する要素の列インデックスを格納する。２番目の Jagged Doagonal が左から２番目に対応した場所に入る。これらの Jagged Diagonal をもっともっと（その長さの降順に）つなげていく。

Jagged Diagonal の数は第 1 行目の非ゼロ要素の数，すなわち A のすべての行の中の非ゼロ要素の最大数に等しい。それゆえ $n \times n$ の行列 A を表すためのデータ構造は，行の番号付けを変える置換配列（`perm(1:n)`），それぞれの Jagged Diagonal を連続して格納する浮動小数点数の配列（`jdiag(:)`），対応した列インデックスを含む整数配列（`col_ind(:)`），そして各 Jagged Diagonal の開始位置を示す要素を持つポインタ配列（`jd_ptr(:)`）からなる。行列の積に関する JDS 法の利点は Saad [385] で議論されている。

先ほどの行列 A に対する 1 次元配列 {`perm`, `jdiag`, `col_ind`, `jd_ptr`} を用いた JDS 形式は以下のようになる（Jagged Diagonal をセミコロンで区切る）:

`jdiag`	6	10	9	3	9	5;	7	-3	1 ··· -1;	4	1	-2	7;	4
`col_ind`	2	1	2	1	5	5;	4	2	3 ··· 6;	5	4	5	4;	6

`perm`	4	1	2	3	5	6

`jd_ptr`	1	7	13	17

.

2.1.5.1 スカイライン格納形式（Skyline Storage, SKS 法）

われわれの考える最後の格納形式ものはスカイライン行列用のもので、可変帯行列，またはプロファイル行列とも呼ばれている（Duff, Erisman,and Reid [138] 参照)。この手法の重要性の多くは直接法に対してであるが，ブロック行列分解で対角ブロックを扱うのにも使用できる。スカイライン行列を係数持つ線形方程式を解くいちばんの利点は，軸選択が必要ないとき、スカイライン構造がガウス消去法の間を通じて保たれることにある。行列が対称なら，行列の下三角部分のみを格納すればよい。スカイライン行列の要素を格納するための直接的なアプローチでは，浮動小数点数配列（`val(:)`）にすべての行を順番に置き，それから各行の開始位置を示す整数配列（`row_ptr(:)`）を確保する。`val(:)` に格納されている非ゼロ要素の列インデックスは容易に導きだせるので格納しない。

図 2.1 に示したような非対称なスカイライン行列に対しては，下三角部分の要素を SKS 形式，上三角行列部分の要素を列方向の SKS 形式（転置行列を行方向の SKS 形式で格納したもの）で格納する。これら 2 つに分けられた部分構造は様々な方法で連結できる。Saad [386] によって議論されたひとつのアプローチは，下三角部分の行と上三角部分の列を浮動小数点数配列（`val(:)`）の中で続けて格納することである。そのときは下三角部分の要素と上三角部分の要素を分けている対角要素がどこにあるかを示すための付加的なポインタが必要になる。

2.2 行列–ベクトル積と行列–行列積

J. Dongarra, P. Koev, and X. Li

2.2.1 BLAS

ここ 15 ほど、線形代数問題のアルゴリズムと解法ソフトウェアの分野で大きな動きがあっｔ。線形代数のコミュニティは、長いこと、アルゴリズムからソフトウェア開発までに何らかの支援が必要なことを認識していた。何年か前、コミュニティの努力の成果として、線形代数アルゴリズムとソフトウェアで必要とされる基本的な操作をデファクトスタンダードとしてまとめた。計画では、基本線形代数プログラム (Basic Linear Algebra Subprograms, BLAS) として知られる標準として集められたルーチンが、多くのメーカによって最新のアーキテクチャのコンピュータで効率的な実装がなされ、広範囲のマシンで効率的な実装がなされることで移植性という利点を得られるはずでした。目標の多くは達成されました。

最新のアーキテクチャのコンピュータに対する線形代数アルゴリズムを設計する際の鍵となるわれわれの考えは、高性能を達成するためには異なるメモリ階層間のデータ移動を最小化するである。したがって、われわれの実装でベクトル化と並列性を見いだすためのアルゴリズムアプローチは、特に高度に最適化された行列–ベクトルと行列–行列演算カーネル (レベル 2 BLAS とレベル 3 BLAS) のカーネルを併用したブロック化アルゴリズムの使用である。一般に、ブロック化アルゴリズムではベクトルやスカラー単

+	x	x														
x	+	x	x													
x	x	+	x			x										
	x	x	+	x	x	x	x									
			x	+	x	x	x									
		x	x	x	+	x	x									
				x	x	+	x			x		x				
				x	x	x	+	x	x	x		x				
				x	x	x	x	+	x	x		x				
								x	+	x	x	x				
						x	x	x	x	+	x	x				
									x	x	+	x			x	
									x	x	x	+	x	x	x	
											x	x	+	x	x	
														+	x	x
												x	x	x	+	x
																+

Figure 2.1: 非対称スカイライン行列あるいは可変帯行列のプロファイル

位でなく、ブロック単位でのデータ移動を必要とするが、データの総移動量は変わらず、データ移動に必要なメッセージが大幅に減るため、データ移動に伴うレーテンシイ（立ち上がりに要するコスト）が大きく削減される。

もうひとつの鍵となるアイデアは、データ配置を特定するパラメータをユーザが変化させることでアルゴリズムのパフォーマンスを調整することです。これは、共有メモリマシンではブロックサイズの制御、分散メモリマシンではブロックサイズと論理プロセスグリッド (logical process mesh) の構成の制御になります。

「マシンが提供するレベルの高性能を得るために、性能に関係するこれらのいろいろな要素をどのように制御すればよいのか」という疑問がわくでしょう。疑問に対する答えは、「きちんと BLAS を使うこと」です。

3つのレベルの BLAS が存在します：

Level 1 BLAS [288]: ベクトル演算 $y \leftarrow \alpha x + y$;

Level 2 BLAS [133]: 行列–ベクトル演算 $y \leftarrow \alpha Ax + \beta y$;

Level 3 BLAS [134]: 行列–行列演算 $C \leftarrow \alpha AB + \beta C$.

ここで、A, B, C は行列; x と y はベクトル; α と β はスカラー。

レベル 1 BLAS は LAPACK のようなパッケージで、性能というよりは利便性のために使われ、計算のわずかな部分を実行する。現代的なスーパーコンピュータの多くでは高性能が発揮できない。

レベル 2 BLAS は多くのベクトルコンピュータ、たとえば CRAY X-MP や Y-MP, Convex C-2 のようなシングルプロセッサで最高性能に近い性能を発揮する。いっぽう、CRAY-2 や IBM 3090 VF のような他のベクトルベクトルコンピュータにおけるレベル 2 BLAS の性能は異なるメモリ階層間のデータ移動性能に制約される。

レベル 3 BLAS はこの制限をうけない。この 3 番目の BLAS は、レベル 2 BLAS が $O(n^2)$ のデータに対して $O(n^2)$ の演算 s じか実行できなかったの対し、$O(n^2)$ のデータに対して $O(n^3)$ の浮動小数点演算を実行する。レベル 3 BLAS は、レベル 3 BLAS を呼び出すソフトウェアから透過的な形で並列性を見いだしてくれる。レベル 2 BLAS が狭い範囲での並列性を提供するの対し、レベル 3 BLAS は広い範囲での並列性を提供する。

ユーザーコミュニティは、パフォーマンス上の理由だけでなく、BLAS のような共通のルーチンの核を中心にソフトウェア開発をすることがソフトウェアエンジニアリングの優れた実践であるため、BLAS の多くを受け入れました。マシン固有で高度に効率的な BLAS の実装は、最新の高性能コンピュータのほとんど利用できます。BLAS によって、ポータブルなコードで高性能を実現するソフトウェアが可能になりました。

初期の BLAS ミーティングの精神と、Massing-Passing Interface（MPI）および High-Performance Fortran（HPF）フォーラムの標準化努力により、最新のソフトウェア、言語、 およびハードウェア開発における BLAS の拡張を考える技術フォーラムが設立されました。。BLAS テクニカルフォーラム会議は、テネシー大学における 1995 年 11 月のワークショップで始まりました。会議は大学とソフトウェアおよびハードウェアのベンダーによってホストされました。

全体的な機能、言語インターフェイス、スパース BLAS、分散メモリ密行列 BLAS、拡張および混合精度 BLAS、区間演算 BLAS、既存の BLAS に対する拡張などの問題を検討するため、さまざまなワーキンググループが設立されました。フォーラムのルールは、MPI フォーラムおよび HPF フォーラムで使用されているルールが使われました。

このドキュメントに定義された標準化の主な目的は、線形代数ライブラリ（パブリックドメインと商用の両方）を効率的で、信頼性があり、簡単に相互運用できるようにすることです。われわれは、ハードウェアとソフトウェアのベンダー、ハイレベルのライブラリ作成者、およびアプリケーションプログラマーは、すべてこのフォーラムの努力から便宜を得ており、これらの標準化が想定しているエンドユーザーであると考えています。

BLAS と BLAS テクニカルフォーラムに関する詳細は本書のホームページ ETHOME にある。

2.2.2 スパース BLAS

密行列に対する BLAS の精神に基づいて、BLAS テクニカルフォーラムでは、スパース BLAS の標準を確立するための作業が進行中です。スパース BLAS インターフェイスは、 rm unstructured スパース行列向けの計算ルーチンとなります。スパース BLAS は、密行列の場合と同様、3 つのレベルの演算が含まれています。ただし、密行列の BLAS の小さなサブセットのみが指定されています：

Level 1: 疎な内積、ベクトル更新、集約／分散;

Level 2: 疎行列–ベクトル積、三角解法;

Level 3: 疎行列–密行列積、複数右辺ベクトルに対する三角解法.

これらは線形方程式や固有値問題に対する反復解法の多くで使われる基本演算である。レベル 2 とレベル 3 スパース BLAS のインターフェースは、9 種類の疎行列格納形式をサポートする。9 種類の格納形式は、CRS 形式のような要素エントリー形式 (*point entry* formats) と BCRS 形式のようなブロックエントリー形式 (*block entry* formats) に 2 分される。ブロックエントリー形式では、疎構造は小さな密行列ブロックの列として表現される。 §2.1 で概観した格納形式で、JDS 形式と SKS 形式以外は 9 種類の格納形式に含まれていることに注意せよ。

スパース BLAS のインターフェイス設計は、密行列の BLAS とは根本的に異なります。任意のスパース行列操作に対して、唯一の「最適な」格納形式は存在しないため、レベル 2 およびレベル 3 のスパース BLAS のスパース行列引数はある特定の格納形式を使用しません。そのかわりに、これらのルーチンに対して総称インターフェース (*generic interface*) が定義されており、そこではスパース行列に対する引数は行列を表すハンドル (*handle*) (整数）となっています。スパース BLAS ルーチンを呼び出す前に、作成ルーチンを呼び出して、9 つの形式のいずれかの格納形式のスパース行列ハンドルを作成する必要があります。スパース BLAS ルーチンを呼び出した後、クリーンアップルーチンを呼び出して、行列ハンドルに関連付けられたリソースを解放する必要があります。このハンドルベースのアプローチにより、疎行列格納形式とは関係なくスパース BLAS が使用できます。内部表現は実装依存で、最高のパフォーマンスが得られるように選択できます。

行列–ベクトル積は反復法に費やされる時間のほとんどを占めることが多いため、いくつかの研究でパフォーマンスの最適化が試みられました [438, 439, 240, 239]。行列–ベクトル積では、行列の各エントリはたった 1 回だけの演算に関与しますが、ベクトルの各エントリは複数回の演算に関与することがあります。最適化の主な目標は、異なるレベルのメモリ階層間でのソースベクトルのデータ移動量を減らすことです。最適化手法には、行列要素の並べ替え (matrix reordering)、キャッシュブロッキング、レジスタブロッキングなどがあります。SPARSITY [240, 239] と呼ばれる最近開発されたツールボックスには、これらすべてのテクニックが含まれています。マトリックス構造にもよるが、SPARSITY の作者は単一プロセッサ上で最大 3 倍の高速化を実現しています。SPARSITY には、行列とマシンの特性に基づいて最適なブロックサイズを自動選択するメカニズムも含まれています。

これまでに議論した多くの反復解法の多くで、行列とベクトルの積、転置行列とベクトルの積が必要になります。すなわち、入力ベクトル x に対して、以下の積

$$y = Ax \qquad \text{and} \qquad y = A^T x.$$

を計算することになります。 §2.1 で述べた格納形式 CRS 形式に対するアルゴリズムをつぎの 2 節で示そう。

2.2.2.1 CRS 形式の行列–ベクトル積

CRS 形式を用いた行列–ベクトル積 $y = Ax$ は，行列 A が行方向に格納されているため，普通の方法で

$$y_i = \sum_j a_{i,j} x_j,$$

と表され、$n \times n$ 行列 A に対して，行列–ベクトル積は以下のようになる：

```
for i = 1, n
    y(i)  = 0
    for j = row_ptr(i), row_ptr(i+1) - 1
        y(i) = y(i) + val(j) * x(col_ind(j))
    end;
end;
```

この手法は行列の非ゼロ要素に対する乗算のみなので，演算回数は A の非ゼロ要素数の 2 倍になる。これは，$2n^2$ が必要な密行列に対する演算に比べると大きな節約となる。

転置行列積 $y = A^T x$ には式

$$y_i = \sum_j (A^T)_{i,j} x_j = \sum_j a_{j,i} x_j,$$

は使えない。なぜなら、これは行列を列方向に参照することを意味していて，CRS 形式で格納された行列に対しては極端に効率の悪い操作になるからである。そこで，添字を以下のように変更する。

$$\text{for all } j, \text{ do for all } i: \qquad y_i \leftarrow y_i + a_{j,i} x_j.$$

A^T を含む行列–ベクトル積は以下のようになる：

```
for i = 1, n
    y(i) =  0
end;
for j = 1, n
    for i = row_ptr(j), row_ptr(j+1)-1
        y(col_ind(i)) = y(col_ind(i)) + val(i) * x(j)
    end;
end;
```

上で述べた両方の行列–ベクトル積はおおよそ同じ構造をしていて，両方とも間接番地付けを用いている。ゆえに，ベクトル化の可能性はいかなる計算機上でも同じである。しかしながら，最初の積 $(y = Ax)$ は外側ループの 1 反復あたり 2 つのベクトルデータ（行列 A の行と入力ベクトル x）を読み込み，ひとつのスカラーを書き出すという点でより有利なメモリ参照パターンになっている。一方，転置行列の積 $(y = A^T x)$ は入力ベクトルの 1 要素と行列 A の 1 行を読み込み，結果のベクトル y に対して読み込みと書き出しの両方をする。これらの手法が 3 つの独立なメモリパスを持つ（すなわち Cray のベクトルコンピュータのような）コンピュータに実装されているのでなければ，メモリ参照が実行性能を制限することになる。これは RISC に基づいたアーキテクチャでは重要な考慮事項である。

2.2.2.2 CDS 形式の行列–ベクトル積

$n \times n$ 行列 A が CDS 形式で格納されていれば、依然として行ごとのまたは列ごとの行列–ベクトル積 $y = Ax$ が実行できるが、しかしこれで CDS 形式の利点は活かせない。アイデアは 2 重にネストしたルー

プ中の座標を変化させることにある。$j \to i + j$ と置き換えて以下の式を得る：

$$y_i \leftarrow y_i + a_{i,j}x_j \quad \Rightarrow \quad y_i \leftarrow y_i + a_{i,i+j}x_{i+j}\ .$$

内側ループで添字 i を用いると，式 $a_{i,i+j}$ は行列の j 番目の副対角要素を参照することがわかる（ここで主対角は 0 番目である)。

今，アルゴリズムは外側ループが diag=-p,q と動く 2 重にネストしたループを持つ。p と q は非負で、主対角要素の左側，右側の要素数を示す。内側ループの範囲は

$$1 \leq \mathtt{i}, \mathtt{i} + \mathtt{j} \leq n.$$

から導かれ、アルゴリズムは以下のようになる：

```
for i = 1, n
    y(i) = 0
end;
for diag = -diag_left, diag_right
    for loc = max(1,1-diag), min(n,n-diag)
        y(loc) = y(loc) + val(loc,diag) * x(loc+diag)
    end;
end;
```

転置行列–ベクトル積 $y = A^T x$ は上記アルゴリズムのちょっとした変形である。更新の式

$$\begin{aligned} y_i &\leftarrow y_i + a_{i+j,i}x_j \\ &= y_i + a_{i+j,i+j-j}x_{i+j} \end{aligned}$$

を使えば、次のアルゴリズムを得る:

```
for i = 1, n
    y(i) = 0
end;
for diag = -diag_right, diag_left
    for loc = max(1,1-diag), min(n,n-diag)
        y(loc) = y(loc) + val(loc+diag, -diag) * x(loc+diag)
    end;
end;
```

CDS 形式に基づいた行列–ベクトル積 $y = Ax$ (あるいは $y = A^T x$) のメモリ参照は，内側の反復あたり 3 本のベクトルである。一方，間接番地付けはないし，アルゴリズムは本質的に行列の次元 n のベクトル長でベクトル化可能である。規則的なデータ参照のため，ほとんどの計算機は 3 つのベースレジスタを確保し，単純なオフセット番地付けを用いることで、このアルゴリズムを効率良く実行できる。

2.2.3 構造化行列に対する高速な行列–ベクトル積

実用上、しばしば $O(n)$ 個のパラメータから決まる密行列が現れる。例として、以下の行列が挙げられる。

ヴァンデルモンド行列：

$$V = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots & x_n^2 \\ & & \ddots & \\ x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & \dots & x_n^{n-1} \end{bmatrix},$$

テプリッツ行列：

$$T = \begin{bmatrix} t_0 & t_{-1} & \dots & t_{2-n} & t_{1-n} \\ t_1 & t_0 & t_{-1} & & t_{2-n} \\ \vdots & t_1 & t_0 & \ddots & \vdots \\ t_{n-2} & & \ddots & \ddots & t_{-1} \\ t_{n-1} & t_{n-2} & \dots & t_1 & t_0 \end{bmatrix},$$

ハンケル行列： $H = (H_{ij}) = (c_{i+j})$,

コーシー行列： $C = (C_{ij}) = (\frac{1}{x_i - y_j})$, その他 [257] である。

これらの行列とその逆行列のベクトル積は $O(n \log^k n)$ 時間で実行できます。構造によって異なりますが、$O(n^2)$ または $O(n^3)$ 時間でなく $0 \le k \le 2$ になります。このことは、これらの行列に対して反復ソルバを使用する場合に特に便利です。$(A+B)x = b$ という形式のシステムで A と B の両方が構造化されているが、別の種類の構造化クラスに属している場合、あるいは A が構造化行列で B が帯行列や疎行列などの場合を反復ソルバで解く場合にも役立ちます。反復法は、ブロックが構造化行列であるが、一部のブロックが疎である可能性のある異なる構造化クラスに属している場合のブロックシステムを解くのにも役立ちます。たとえば、積

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Ax + By \\ Cx \end{bmatrix}$$

は、 A が対角行列で、 B と C がテプリッツ行列のときには $O(n \log n)$ 時間で構成できる.

ヴァンデルモンド行列とヴァンデルモンド行列の逆行列とベクトルの積は $O(n \log^2 n)$ [196, 195] 時間で計算できる。同じことは、ヴァンデルモンドもどきの行列 (Vandermonde-like) とその逆行列とベクトルの積にもいえ、ここでもどきの行列 (“-like” matrices) とは § 2.3.4 で定義されている。テプリッツ行列とテプリッツもどきの行列に対する行列ベクトル積は、高速フーリエ変換 (FFT) を使って $O(n \log n)$ 時間で計算できる [198]。コーシー行列に対する行列ベクトル積 Cz は、関数

$$\Phi(w) = \sum_{i=1}^{n} \frac{-z_i}{y_i - w}$$

n 個の異なる点 $x_1, x_2, \dots, x_n$ の評価と同等であり、高速多重極展開法用いて $O(n)$ 時間で計算できる [76, 205].

この節の残りの部分では、テプリッツ行列に対する行列ベクトル積が、どのようにして $O(n \log n)$ でできるかを示す [198]。その他の構造化行列に対しては、[196] と [195] を示して読者にお任せしよう。

循環行列 (circulant matrix) は以下の形をした特殊なテプリッツ行列である：

$$C_n = \begin{bmatrix} a_0 & a_{-1} & \dots & a_{2-n} & a_{1-n} \\ a_1 & a_0 & a_{-1} & & a_{2-n} \\ \vdots & a_1 & a_0 & \ddots & \vdots \\ a_{n-2} & & \ddots & \ddots & a_{-1} \\ a_{n-1} & a_{n-2} & \dots & a_1 & a_0 \end{bmatrix},$$

ここで $1 \le k \le n-1$ に対して $a_{-k} = a_{n-k}$ という性質を持つ. 循環行列は FFT で対角化できる。すなわち

$$C_n = F_n^* \cdot \mathrm{diag}(F_n a) \cdot F_n,$$

ここで $a = [a_0, a_1, \dots, a_n]$、$F_n$ はフーリエ行列 $F_n(j,k) = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{-(j-1)(k-1)2\pi\sqrt{-1}/n}$ である. よく知られているように、 F_n はユニタリ行列で、その積 $F_n x$ は $O(n \log n)$ 時間で構成できる [453]. 以下の 4 ステップにしたがって、積 $y = C_n x$ もまた $O(n \log n)$ 時間で構成できる:

(1) $f = F_n x,$

(2) $g = F_n a,$

(3) $z^T = [f_1 g_1, f_2 g_2, \dots, f_n g_n],$

(4) $y = F_n^* z.$

いま、T_n をテプリッツ行列

$$T_n = \begin{bmatrix} t_0 & t_{-1} & \dots & t_{2-n} & t_{1-n} \\ t_1 & t_0 & t_{-1} & & t_{2-n} \\ \vdots & t_1 & t_0 & \ddots & \vdots \\ t_{n-2} & & \ddots & \ddots & t_{-1} \\ t_{n-1} & t_{n-2} & \dots & t_1 & t_0 \end{bmatrix},$$

とすれば、積 $T_n x$ は、 T_n を $2n \times 2n$ の循環行列 C_{2n} へ埋め込むことによって $O(n \log n)$ 時間で計算できる。なぜなら、

$$C_{2n} \cdot \begin{bmatrix} y \\ 0 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} T_n & B_n \\ B_n & T_n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_n y \\ B_n y \end{bmatrix}$$

と

$$B_n = \begin{bmatrix} 0 & t_{n-1} & \dots & t_2 & t_1 \\ t_{1-n} & 0 & t_{n-1} & & t_2 \\ \vdots & t_{1-n} & 0 & \ddots & \vdots \\ t_{-2} & & \ddots & \ddots & t_{n-1} \\ t_{-1} & t_{-2} & \dots & t_{1-n} & 0 \end{bmatrix}.$$

だからである。

2.3 直接解法の概略

J. Demmel, P. Koev, and X. Li

本書で最も効果的な方法の多くは、特にシフトと反転を用いる場合、($A-$ $sigmaI$) $x = b$ または ($A-$ $sigmaI)^*x = b$ の形の連立一次方程式の解法が必要になります。ここで $sigma$ はシフト点 (em shift) で、通常は A の近似固有値に選びます。この方法ではほとんどの時間が連立一次方程式の解法に費やされ、したがって、利用可能な最善の解法を使うことか重要となります。

($A-$ $sigmaI$) $x = b$ を解くには、直接法と反復法の 2 つの基本アプローチがあります。直接法では、通常、ガウスの消去法の変形を用います。 $sigma$ を固有値に近くに選べば、$A-$ $sigmaI$ はほぼ特異になり、多くの反復法が収束の問題を起こすような場合でも効果的です。セクション ref sec：IterativeSolver で反復法と、Jacobi–Davidson 法のような反復法が効果的に使用できるアルゴリズムについて述べます。ここでは直接的法のみを検討します。

直接法では、$(A-\sigma I)x = b$ を次の 2 ステップで解きます：

1. $A-\sigma I$ の分解 (*factorization*). この部分はもっともコストがかかる部分になります。

2. 分解結果を使った $(A-\sigma I)x = b$ あるいは $(A-\sigma I)^*x = b$ の計算.

通常、ステップ 1 はステップ 2 より大幅なコスト増となる (密行列の場合、ステップ 2 が $O(n^2)$ に対してステップ 1 は $O(n^3)$)。多くの異なる右辺に対して $(A-\sigma I)x = b$ を解く場合は分解は再利用される。分解はシフト点 σ 変更された場合に限って再計算される。幸いなるかな、多くに反復解法は同一のシフト点に対して異なる右辺を持つ連立一次方程式を何回も解くので、ステップ 2 に対してステップ 1 はたいへん少ない回数の計算ですむ。

ステップ 1，2 のアルゴリズムの選択は、 $A-\sigma I$ の数学的な構造 (*mathematical structure*) と行列 A の格納形式 (*storage structure*) の両方に依存する。数学的構造の観点では、$A-\sigma I$ がエルミートかエルミートでないか、定値かそうでないかを意味する。

エルミートで定値の場合*:* この場合は、コレスキー分解 (*Cholesky factorization*) $A-\sigma I = \pm LL^T$, L は下三角行列を計算します。符号は、$A-\sigma I$ が正定値ならば (+), 負定値ならば (−) とします。疎行列の場合は置換行列 P を用いたコレスキー分解 $A-\sigma I = \pm PLL^*P^*$ を計算します。

エルミートだが定値でない場合*:* この場合は、*Hermitian indefinite factorization* $A-\sigma I = PLDL^*P^*$ を計算します。L は下三角行列、P は置換行列、D は 1 行 1 列と 2 行 2 列のブロックをもつブロック対角行列、あるいは 3 重対角行列である。

エルミートでない場合*:* この場合は、三角分解 (*triangular factorization*) $A-\sigma I = P_1LUP_2$ を計算する。ここで、L は下三角行列、U は上三角行列、P_1 と P_2 は置換行列である (しばしば、片方の P_i は省略される)。

A がテプリッツ行列のときは $a_{i,j}$ の値は $i-j$ にのみ依存するなど、他にも同じような醸造や分解がある.

格納形式は、密、帯、疎 (§2.1 の節で説明した格納形式いずれか)、あるいは構造化（他の要素が決定できるよう、テプリッツ行列の最初の行と列を保存するなど) などを意味します。 §2.1 の節で述べたように、疎な非エルミート行列も疎なエルミート格納形式として格納できる。

数学的構造と格納形式の多くの組み合わせに特化したアルゴリズムとソフトウェアがあり、適切なアルゴリズムを選択すると、大規模行列問題では計算時間には数桁の差が生じる可能性がある。この節では、最良のアルゴリズムとソフトウェアを要約します。多くの場合、研究論文で最良とされたアルゴリズムは、適切に設計されて簡単にアクセス可能なソフトウェアとはなっていないため、利用可能なソフトウェアに注目します。利用可能なソフトウェアがないのであれば、十分に管理されたパブリックドメインのソフトウェア、低コストで利用できるソフトウェアをお勧めします。

われわれは 4 つのケース、密行列に対する方法、帯行列に対する方法、疎行列に対する方法、およびテプリッツ行列のような構造化行列に対する方法を検討します。

2.3.1 密行列向け直接解法

変換法を使用する代わりに、密行列に対する反復法を検討する理由は 2 つあります。

1. ひとつもしくはいくつかのシフト点 σ の近くにある少数の固有値、あるいは少数の固有値・固有ベクトルが必要な場合、変換法を使うのでなく、反復スキームによるシフトと反転 shift-and-invert を使うほうが安価である。変換法がより高速なエルミート行列よりも非エルミート行列の場合によりあてはまります。当てはまります。

2. 行列の疎度が小さい（スパースでない）場合や、行列が巨大でない場合、密行列に対する直接法はスパースソルバよりも高速である。

密行列に対する解法の選択は、以下に述べる $A-\sigma I$ の数学的な構造に依存する。

$A-\sigma I$ がエルミート定値 この場合はコレスキー分解を選択する。LAPACK では、分解が `xPOTRF`、分解を使った求解が `xPOTRS` として実装されている (両者は LAPACK driver routine `xPOSVX` にまとめられている)。 圧縮方式の格納形式版も利用可能で、それには `PO` を `PP` と置き換えればよい。コレスキー分解は `PxPOTRF`, `PxPOTRS`, `PxPOSVX` などの似た名前で ScaLAPACK ルーチンとしても実装されている。MATLAB のコレスキー分解は `chol` である。

$A-\sigma I$ がエルミートだが、定値でない この場合は Bunch–Kaufman を選択する。実数版 (複素数版) の LAPACK では、分解が `xSYTRF(xHETRF)`、分解を用いた求解が `xSYTRS(xHETRS)` として実装されている (両者は LAPACK driver routine `xSYSVX(xHESVX)` にまとめられている)。 圧縮方式の格納形式版も利用可能で、それには `SY(HE)` を `SP(HP)` と置き換えればよい。ScaLAPACK と MATLAB では利用できない。

$A-\sigma I$ がエルミートでない この場合はガウスの消去法を選択する。LAPACK では、分解が `xGETRF`、分解を用いた求解が `xGETRS` として実装されている (両者は LAPACK driver routine `xGESVX` にまとめられている)。`PxGETRF`, `PxGETRS`, `PxGESVX` などの似た名前で ScaLAPACK ルーチンとしても実装されている。MATLAB では `lu` である。

2.3.2 帯行列向け直接解法

本セクションは §2.3.1 の密行列に対する直接解法と同様の説明である：

$A - \sigma I$ **がエルミート定値** この場合はコレスキー分解を選択する。LAPACK では、分解が `xPBTRF`、分解を使った求解が `xPBTRS` として実装されている (両者は LAPACK driver routine `xPBSVX` にまとめられている)。コレスキー分解は `PxPBTRF`, `PxPBTRS`, `PxPBSVX` などの似た名前で ScaLAPACK ルーチンとしても実装されている。

$A - \sigma I$ **がエルミートでない** この場合はガウスの消去法を選択する。LAPACK では、分解が `xGBTRF`、分解を用いた求解が `xGBTRS` として実装されている (両者は LAPACK driver routine `xGBSVX` にまとめられている)。部分軸選択付きが `PxGBTRF`, `PxGBTRS`, `PxGBSVX`、部分軸選択付きよりも速いがリスクの大きい軸選択なしが `PxDBTRF`, `PxDBTRS`, `PxDBSV` などの似た名前で ScaLAPACK ルーチンとしても実装されている。

定値でないエルミート行列の構造を活用するルーチンはありません（軸選択によって帯幅がどれだけ増加しうるかについての単純な上限がないため）。MATLAB には帯行列ルーチンがありません。$A - \sigma I$ がエルミート行列で帯幅がじゅうぶんに狭い場合、たとえば 3 重対角行列なら、§**??** で述べた直接法による固有値解法を使うべきである。

2.3.3 疎行列に対する直接解法

疎行列に対する直接解法は、密行列の場合よりもはるかに複雑なアルゴリズムが含んでいます。主な問題は、L および U 要素の em fill-in を効率的に処理する必要性に起因しています。典型的なスパースソルバは、密行列の場合の 2 ステップとは対照的に、4 つの異なるステップから構成されています。

1. 分解後にできるだけ fill が増えないように、あるいは行列がブロック三角形のような特別な構造を持つように、行と列を並べ替えるオーダリングステップ
2. 分解後の要素の非ゼロ構造を決定し、それに適したデータ構造を作成する分析ステップまたは記号分解ステップ
3. L および U 要素を計算する数値分解ステップ
4. 分解結果を使って、前進代入と交代代入を行う求解ステップ

各ステップには関連づけられた非常に多様なアルゴリズムがあります。Duff [137] ([135, Chapter 6] も参照）および Heath、Ng、Peyton [219] によるレビュー論文は、さまざまなアルゴリズムに対する優れたリファレンスとなっています。通常、ステップ 1 とステップ 2 には行列グラフのみが含まれ、したがって整数演算のみで実行されます。ステップ 3 とステップ 4 には浮動小数点演算が含まれます。通常、ステップ 3 が最も時間がかかる部分で、ステップ 4 はそれよりも約 1 桁高速です。ステップ 1 で使用されるアルゴリズムは、ステップ 3 で使用されるアルゴリズムとは完全に独立である。しかし、多くの場合、ステップ 2 のアルゴリズムはステップ 3 のアルゴリズムと密接に関連してる。最も単純な方程式、すなわち対称

かつ正定値の方程式では 4 つのステップがうまく分離されている。最も一般的な非対称な方程式の場合、ソルバーはステップ 2 とステップ 3 を組み合わせたり（SuperLU など）、ステップ 1、ステップ 2、ステップ 3 を組み合わせたり（UMFPACK など）、計算された値が消去順序の決定に関与する。

過去 10 年間、メモリ階層や並列処理などの新しいアーキテクチャの特徴を活かした多くの新しいアルゴリズムとより新しいソフトウェアが登場した。表 2.1 は、疎行列に対する直接解法のかなり包括的なリストである。ソフトウェアは、逐次計算機用ソフトウェア、SMP 用ソフトウェア、および分散並列計算機用ソフトウェアの 3 つのカテゴリに分類するのが最も便利である。

すべてのタイプの連立一次方程式に対して最適となる単一のアルゴリズムやソフトウェアはありません。あるソフトウェアは対称正定値行列を対象とし、またあるものはより一般的なケースを対象にしています。これは、表の 3 列目の「対象」に反映させています。対象が同じであっても、ソフトウェアは特定のアルゴリズムや特定の実装技法を選ぶことがあり、それはある応用には良いのですが、他のものに対してはよくありません。2 列目の「技法」には、高水準のアルゴリズム記述を示します。left-looking, right-looking, multifrontal, その実装とパフォーマンスについては、の違いを示したレビュー論文が「列」の列 3 に反映されています。同じ範囲であっても、ソフトウェアは特定のアルゴリズムまたは実装手法を使用することを決定する場合があります。列 2 の「テクニック」では、高度なアルゴリズムの説明を示します。左向き、右向き、およびマルチフロンタルの違いとパフォーマンスへの影響のレビューについては、Heath, Ng, and Peyton [219] と Rothberg [370] の論文を示す。最良の（あるいは唯一の）ソフトウェアはパブリックドメインではないかもしれないが、市販品あるいは研究用プロトタイプは利用できることがある。4 列目の「作成者」は、市販品を提供する会社名または研究用コードの作者名である。

固有値解析におけるシフトおよび反転スペクトル変換（SI）のコンテキストでは、固定の A について $A-\ sigmaI$ を分解する必要がある。したがって、$A-\ sigmaI$ の非ゼロ要素の構造は不変である。同じシフト点 σ に対して、同じ行列と異なる右辺に対する多くの方程式を解くことが一般的です（この場合、解法のコストは分解のコストに匹敵する）。ステップ 1 とステップ 2 にもう少し時間をかけて、ステップ 3 とステップ 4 を高速化するのが合理的である。つまり、さまざまなオーダリングを試して、記号分解に基づいた数値分解と解法のコストを推定し、最適なオーダリングが使用できる。たとえば、SVD の計算では、AA^*, A^*A, $\left[\begin{smallmatrix} 0 & A \\ A^* & 0 \end{smallmatrix}\right]$ に対するシフトと反転からいずれかを選択できます。$\sim$ ref chap：svd の章で説明されているように、これらはすべてかなり異なる分解コストを持つている。

一部のソルバにはオーダリングスキーマが組み込まれていますが、他のソルバには組み込まれていません。また、組み込みのオーダリングスキーマが目的とする応用に最適でないこともあります。ときには、組み込みのオーダリングスキーマを外部のオーダリングスキーマに置き換えたほうが良いこともあります。多くのソルバは、ユーザーがこのような置き換えが簡単にできるよう、明確に定義されたインターフェイスを提供します。どうすればよいかを確認するため、あるいは推奨のオーダリング法を見つけるため、ソルバの文書を読んでください。

2.3.4 構造化行列に対する直接解法

§2.2.3 に記述されている構造化行列を係数にもつ連立 1 次方程式には、$O(n^3)$ ではなく、$O(n^2)$ の時間で解けるという魅力的な性質があります。

このように、連立一次方程式を $O(n^2)$ 時間で高速に解くことを可能にする共通の特徴は、これらが低

変位次元 *low displacement rank* [257] を持っているという事実です。

変位次元は次のように定義できます：与えられた行列 A と F, および行列 T に対して、演算子

$$\Delta_{A,F}(T) = A \cdot T - T \cdot F$$

と定義し、$\alpha = \mathrm{rank}(\Delta_{A,F}(T))$ と表します。α を、演算子 $\Delta_{A,F}$ に対する T の「変位次元 “displacement rank” 」と言います。α が小さい場合（通常は $O(1)$ ）、行列 T は「低変位次元」を持つと言う。$\mathrm{rank}(\Delta_{A,F}(T)) = \alpha$ から、$\Delta_{A,F}(T) = G \cdot B^T$ となる $n \times \alpha$ 次元の行列 G と B が存在する。行列 G と B は、T の生成子 em generators と呼ばれる。低変位次元の行列を変位構造 *displacement structure* を持つと言うことがある。

たとえば、コーシー行列 $C = (C_{ij}) = (1/(x_i - y_j))$ の場合

$$\Delta_{\mathrm{diag}(x),\mathrm{diag}(y)}(C) = \mathrm{diag}(x) \cdot C - C \cdot \mathrm{diag}(y) = (1,1,\ldots,1)^T \cdot (1,1,\ldots,1).$$

なので、コーシー行列は変位次元が１、生成子が $G = B = (1,1,\ldots,1)^T$ である。

演算子 $\Delta_{\mathrm{diag}(x),\mathrm{diag}(y)}$ に対する低変位次元 α を持つ行列 (この場合 1 である必要性はない) はコーシーライク Cauchy-like と呼ばれる。同様に、バンデルモンドライク Vandermonde-like 行列, テプリッツライク Toeplitz-like 行列等々を定義する。これらの高次の変位次元を持つ連立一次方程式は $O(\alpha n^2)$ の時間で求解可能である。

高速アルゴリズム Fast algorithms は、行列 F の LU 分解を生成するために変位方程式を活用します。アルゴリズムは、マトリックス自体ではなくマトリックスの生成子に機能するため、より高速に処理できます。

ブロック-テプリッツ行列および T^TT タイプの行列（ここで、T はテプリッツ）は、低変位次元 [257] を持つ。

A と B が変位構造を持っている場合、$(A + \sigma B)x = b$ の形の方程式は、異なる変位演算子に対しても $A + \sigma B$ と同様な変位構造を持つ場合に限って、高速な低変位次元解法を用いて解くことができる。たとえば、A がハンケルで $B = I$ のとき、 $A + \sigma B$ はテプリッツ・ハンケル (Toeplitz-plus-Hankel) で、これも変位構造を持つ。$A + \sigma B$ に変位構造がない場合、シフト点ゼロ $\sigma = 0$ または高速な行列ベクトル積のみが使われる高速な反復解法の使用に制限されます [257]。

いくつかの方法は、行列が対称（Toeplitz）であるとか、正定値であるといった追加の制限を課します。これによって、利用可能なシフト点の選択にも追加の制限が生じることがあります。

構造化マトリックスに対して高速アルゴリズムを使用する場合、高速性はしばしば精度を犠牲にするため、特別な注意が必要です。一部の変位次元アルゴリズムは、与えられた行列自体に対してではなくジェネレータ上で動作することによって、ガウスの消去（部分軸選択、完全軸選択、または軸選択なし）をシミュレートする [193]。それでも、これらのアルゴリズムはガウス消去法と同じ数値特性を持たないことがあります。なぜなら、非常に珍しいが、きわめて条件のよい行列に対しても発生する「ジェネレータの成長 (“generator growth”） [257]」の可能性があるからです。

ジェネレータの成長の問題を含む高速アルゴリズムを安定させるための多くの方法があります [257, p. 111]、そして時折不安定になるにもかかわらずこれらの方法は常に魅力的です。

高速アルゴリズムは文献で非常によく説明されていますが、信頼できるソフトウェアライブラリはありません。$O(n^2)$ 表記に隠されている定数と、それによって n がじゅうぶん大きい場合（構造にもよる

が、通常は少なくとも数百）に限って従来の n アルゴリズムより高速になることを知っておく必要がある。従来からの $O(n^3)$ アルゴリズムは、多くの場合、コードがプロセッサの最大速度近くで実行されるよう、BLAS 3 を使用し、コンピュータのメモリ階層を効率的に使用するように最適化されている（ §2.2.1 を見よ)。高速アルゴリズムは通常 BLAS 2 のみが使用でき、コンピュータのキャッシュと高速メモリを効率的に使用するように高速アルゴリズムを最適化することは困難または不可能なことがある。これは、高速な $O(n^2)$ アルゴリズムと低速な $O(n^3)$ アルゴリズムが同数の浮動小数演算を実行する場合でも、これらの最適化によって「低速」アルゴリズムの方が非常に高速になりうることを意味する。

また、Vandermonde および 3 項の Vandermonde 方程式を解くための Bjorck–Pereyra タイプのアルゴリズムについても言及する必要があります [51, 230]。これらの $O(n^2)$ 解法には、顕著な数値特性があります。 Vandermonde 行列のノードの順序と右辺の符号パターンに関する付加的な制限によって、これらのシステムは完全なマシン精度で解くことができる。

2.4 反復解法の概要

H. van der Vorst

固有問題の文脈では、たとえば次の状況で線形連立一次方程式を解く必要がある場合があります。

- Jacobi–Davidson 法では、線形補正式の（近似）解が必要です。
- **??**章で説明したような inexact methods は、近似的なシフトと反転のステップに基づいており、そのため線形連立一次方程式を近似的に解く必要がある。
- 固有値のよい近似が与えられた場合、対応する左または右の固有ベクトルは、シフトされた行列を持つ連立一次方程式をから計算されます。

これらのすべての場合に、シフトされた行列 $A - \theta I$ に対する連立一次方程式を解かなければなりません。Jacobi–Davidson 法のように射影のなか投影に埋め込まれることもあります。そのような方程式を正確に解く必要のある場合、最初は直接法（スパースソルバ) が検討されます。多くの場合、同じシフト点に対する方程式を何回も解く必要があり、これはスパース LU 分解に必要な大きなコストの償却に役立ちます。方程式を正確に解かなくてもよい場合、または直接法が高くつきすぎる場合、反復法が検討されます。一般的な反復解法は、*Templates for the Solution of Linear Systems* [41] で解説されています。手短な概要説明の前に、固有値問題に関係する連立一次方程式は、通常、シフト点を含むため定値行列にならないことを読者に警告しておきます。シフト点の値が外側の固有値に近い場合、これは必ずしもすべての場合に障害になるとは限りませんが、シフト点が内部の固有値に近い場合は必ず収束の問題があります。またシフト点が固有値に非常に近い場合、たとえば左固有値または右固有値を決定したい場合、反復法ではほぼ特異な方程式を解くのが非常に難しいことを理解する必要があります。これは、左固有ベクトルや右固有ベクトルに対する逆反復の場合のように、（ほとんど）特異な方向に関心があるような状況で特に当てはまります。反復法を魅力的なものにするために、反復法には効率的な前処理が必要であるということが一般に受け入れられています。これは特に、シフトされた行列の場合です。あいにく、不定行列のための効果的な前処理の構築は扱いにくい。詳細は、 **??** 章を参照してください。

現在、最も人気のある反復法は、クリロフ部分空間法 Krylov suspace methods に属します。これらの方法では、いわゆるクリロフ部分空間で解の近似値を構成します。連立一次方程式 $Ax = b$ （前処理付きの場合、 A と b は前処理後の値）と残差ベクトルが $r_0 = b - Ax_0$ となる初期ベクトル x_0 に関連付けられた i 次元のクリロフ部分空間 $\mathcal{K}^i(A; r_0)$ は、ベクトル $\{r_0, Ar_0, A^2r_0, \ldots, A^{i-1}r_0\}$ によって張られる部分空間ととして定義される。

様々な方法はつぎのように分類されます：

(a) A が対称正定値の場合、共役勾配法 *conjugate gradient* method [226] は、２項漸化式（回帰式？）を用いて、クリロフ部分空間 $\mathcal{K}^i(A; r_0)$ 内のすべてのベクトルに対して、A-ノルムまたはエネルギーノルムと呼ばれる $(x - x_i, A(x - x_i))$ が最小になるような近似解 x_i を生成する。

(b) A が対称だが、正定値ではない場合、ランチョス法 *Lanczos*[286] と MINRES 法 *MINRES* methods [350] が考えられる。MINRES 法では $x_i \in\in \mathcal{K}^i(A; r_0)$ は残差ベクトルの 2-norm $\|b - Ax_i\|_2$ が最小化となるように、それに対してランチョス法ではクリロフ部分空間内で x_i と $b - Ax_i$ が直交するように決められる。

(c) A が非対称の場合、一般には、短い漸化式で $x_i \in K^i(A, r_0)$ で最適な近似解を決めることができない。[163] で証明されています。しかしながら、共役勾配法と MINRES 法のような短い漸化式で、$b - Ax_i \perp \mathcal{K}^i(A^T; s_0)$ (通常、$s_0 = r_0$ とする) となるような $x_i \in \mathcal{K}^i(A; r_0)$ を計算することはできる。これが双共役勾配法 *bi-conjugate gradient method* [169] である。より洗練されたものが quasi-minimal residual (QMR) [179] であり、よりスムーズな収束特性を持ち、双共役勾配法よりも頑健である。

(d) A が非対称の場合、ユークリッドノルとして残差ノルムを最小化するように $x_i \in \mathcal{K}^i(A, r_0)$ を計算でき、これは GMRES method [389] として実現されました。この方法では、第 i 反復で i 回の内積と i 回のベクトル更新が必要となり、反復 i とともに付加的な演算コストが線形に増加することを意味します。

(e) 双共役勾配法における転置演算 A^T （転置行列ベクトル積）は、$\langle x, A^T y\rangle$ equals $\langle Ax, y\rangle$ （ここで $\langle \ldots \rangle$ は内積）という事実から A に対する演算に置き換えることができる。共役勾配法における A^T をかける機能は、残差を直交させるための双空間を維持するだけのために使われているので、これを A についての演算に置き換えてクリロフ部分空間を拡張し、よりよい近似解をみつけることが１反復あたり双共役勾配法と同一コストで仮想的にできる。これが、いわゆるハイブリッド法で、二乗共役勾配法 Conjugate gradients squared [418], Bi-CGSTAB [445], Bi-CGSTAB(ℓ) [409], TFQMR [174], hybrids of QMR [78] などがある。

(f) 定値でない場合、正規方程式 $A^TAx = A^Tb$ に共役勾配法を適用することも効果的かもしれない。これを直接的に適用すると、A^TA の条件数は A の条件数の２乗になるため、数値的な不安定性が生じるだろう。より洗練された頑健な実装が least squares QR [351] にある。

これらの方法の多くは [41] で説明され、ソフトウェアも利用可能です。ソフトウェアの入手方法に関するガイドラインは、本書のホームページ ETHOME を参照してください。一部の手法では、 [135] のような

テンプレート形式の説明になっています。この本は、またさまざまな前処理の方法についての概要も含まれています。

2.5 並列性

J. Dongarra and X. Li

この節では，本書で取り上げた反復法に関する並列性を議論する。反復法は多くの計算カーネルを共有するので，これらを解法とは独立に議論する。反復法で多くの時間を消費する基本カーネルは：

- 内積;
- ベクトル更新;
- 行列–ベクトル積, すなわち $Ap^{(i)}$ (いくつかの手法では $A^Tp^{(i)}$ も);
- $(A - \sigma B)x = b$ の解法.

である。

内積　2 つのベクトルの内積計算は、各プロセッサが各ベクトルの対応するセグメントの内積（局所的な内積、LIPs）を計算することで容易に並列化できる。分散メモリ方式の計算機では，グローバルな内積に結合させるため、 LIPs を他のプロセッサに送らなければならない。これは、すべてのプロセッサが LIPs の総和を計算するために all-to-all 送信をするか，あるいはひとつのプロセッサが累積をとってその結果を放送することになる。明らかに，このステップでは通信が必要になる。

共有メモリ方式の計算機では，LIPs の足し込みはすべてのプロセッサがそれぞれの局所的な結果を順番に全体の結果に加算するクリティカルセクションとして実装するか、あるいは逐次コードの一部としてひとつのプロセッサが総和を実行する。

ベクトル更新.　ベクトル更新の並列化は自明であり、それぞれのプロセッサが自分のセグメントを更新する。

行列–ベクトル積　行列–ベクトル積は，行列の行を短冊状に分割してベクトルセグメントに対応させることで、共有メモリ方式の計算機では容易に並列化できる。各プロセッサは短冊ひとつ分の行列–ベクトル積を計算する。分散メモリ方式の計算機では，各プロセッサがメモリ上にベクトルの 1 セグメントだけしか持っていないことが問題かもしれない。行列の帯幅に応じて他のベクトル要素を通信する必要が生じて、通信のボトルネックとなるかもしれない。しかしながら，多くの疎行列問題は近くの節点とだけ接続するネットワークから生じている。たとえば有限差分法や有限要素法の問題から生じる行列は，典型的な局所的接続のみを含む。すなわち，変数 i と j が物理的に近いときに限り行列要素 $a_{i,j}$ が非ゼロ要素となる。そのような場合，ネットワークまたは格子を適切なブロックに小分けして，それらをプロセッサに分散させるが自然だろう。$Ap^{(i)}$ を計算する際，各プロセッサは隣接したブロック内のいくつかの節点での $p^{(i)}$ の

値を必要とする。これら隣接したブロックへの接続の数が内部の節点数に比べて小さければ，通信時間は計算時間に重ね合わされる。

最近、 em graph partitioning は、非局所接続をもつ一般的な問題に対処するための強力なツールとして使われています。$y\ leftarrowAx$ と（対称）行列 A に対応する無向グラフ G を考えます。頂点 i は、すべての j に対して x_i, y_i、および非ゼロの $a_{i、j}$ を格納すると仮定します。 頂点 i は $y_i =\ sum_j a_{i、j} x_j$ の計算ジョブを表します。y_i を計算する操作の数を頂点 i の重みとして割り当て、辺（i、j）に重み 1 を割り当てます。これは、頂点 i と j が異なるプロセッサに割り当てられた場合に、x_j を頂点 i に送信するコストを表します。優れたグラフ分割ヒューリスティックは、以下の条件で G を P プロセッサに対応させ、頂点を P 個のサブセットに分割します。

- それぞれの部分集合で頂点の重みの和がほぼ等しい,
- 部分集合を横切る辺の総数が最小化されている.

これは良好な負荷バランスを実現し、通信を最小限に抑えます。よいグラフパーティションソフトウェアとして、Chaco [223] と METIS [259] (並列版である ParMETIS) があります。

分割後、通信を削減するためのさらなる最適化を実行できます。たとえば、頂点のサブセットに別のサブセットへの複数のエッジが含まれる場合、ベクトルの対応する要素を 1 つのメッセージにパックして、各プロセッサは別のプロセッサにメッセージをひとつだけしか送信できなようにします。分散メモリシステムへの実装の詳細については、De Sturler and van der Vorst [111, 112] と Pommerell [369] を参照してください。

分散メモリマシン用の高品質並列アルゴリズムは、Aztec [236] や PETSc [38] などのソフトウェアパッケージに実装されています。それらのソフトウェアは、本書のホームページ ETHOME から入手できます。

ソルバー. 上記の 3 つのカーネルに加えて、シフトと反転を使用する反復法では、線形システムの直接解法を必要とします。行列分解と三角解法は、特に超並列マシンでは、はるかに複雑な並列アルゴリズムになります。この分野では多くの研究活動が行われており、密行列および帯行列に対する最新の並列アルゴリズムの多くは ScaLAPACK に実装され (§ 2.3 を参照)、疎行列に対する最新の並列アルゴリズムが実装されたソフトウェアは表 2.1 にまとめられています。

Table 2.1: 直接法を用いた疎行列解法ソフトウェア.

Code	技法	対象	作成者	
逐次計算環境				
MA27	Multifrontal	Sym	HSL	[140]
MA41	Multifrontal	Sym-pat	HSL	[6]
MA42	Frontal	Unsym	HSL	[144]
MA47	Multifrontal	Sym	HSL	[141]
MA48	Right-looking	Unsym	HSL	[142]
SPARSE	Right-looking	Unsym	Kundert	[281]
SPARSPAK	Left-looking	SPD	George	[191]
SPOOLES	Left-looking	Sym and Sym-pat	Ashcraft	[21]
SuperLLT	Left-looking	SPD	Ng	[339]
SuperLU	Left-looking	Unsym	Li	[126]
UMFPACK	Multifrontal	Unsym	Davis	[103]
SMP マシン				
Cholesky	Left-looking	SPD	Rothberg	[405]
DMF	Multifrontal	Sym	Lucas	[308]
MA41	Multifrontal	Sym-pat	HSL	[7]
PanelLLT	Left-looking	SPD	Ng	[211]
PARASPAR	Right-looking	Unsym	Zlatev	[471]
PARDISO	Left-right looking	Sym-pat	Schenk	[395]
SPOOLES	Left-looking	Sym and Sym-pat	Ashcraft	[21]
SuperLU_MT	Left-looking	Unsym	Li	[127]
分散並列環境				
CAPSS	Multifrontal	SPD	Raghavan	[220]
DMF	Multifrontal	Sym	Lucas	[308]
MUMPS	Multifrontal	Sym and Sym-pat	Amestoy	[8]
PaStiX	Left-right looking*	SPD	CEA	[224]
PSPASES	Multifrontal	SPD	Gupta	[210]
SPOOLES	Left-looking	Sym and Sym-pat	Ashcraft	[21]
SuperLU_DIST	Right-looking	Unsym	Li	[306]
S+	Right-looking†	Unsym	Yang	[182]

* 論文のタイトルとは異なる

† LU 分解における任意の fill-in に静的に対応するため QR 法の格納形式を使用

表中の略記は以下のとおり: SPD = 対称かつ正定値; Sym = 対称、おそらく定値でない; Sym-pat = 配置は対称だが、値は非対称; Unsym = 非対称; HSL = Harwell Subroutine Library: `http://www.cse.clrc.ac.uk/Activity/HSL`

Bibliography

[1] M. R. Abdel-Aziz. Safeguarded use of the implicit restarted Lanczos technique for solving nonlinear structural eigensystems. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 37:3117–3133, 1994.

[2] A. Abramow and M. Neuhaus. Bemerkungen über Eigenwertprobleme von Matrizen höherer Ordnung. In *Les mathématiques de l'ingénieur*, pages 176–179. Mém. Publ. Soc. Sci. Arts Lett. Hainaut, Vol. hors Série, Maison Léon Losseau, Mons, France, 1958.

[3] G. Adams, A. Bojanczyk, and F. T. Luk. Computing the PSVD of two 2×2 triangular matrices. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 15(2):366–382, 1994.

[4] L. Ahlfors. *Complex Analysis.* McGraw-Hill, New York, 1966.

[5] J. I. Aliaga, D. L. Boley, R. W. Freund, and V. Hernández. A Lanczos-type method for multiple starting vectors. *Math. Comp.* 69:1577–1601, 2000.

[6] P. R. Amestoy and I. S. Duff. Vectorization of a multiprocessor multifrontal code. *Internat. J. Supercomputer Appl.*, 3:41–59, 1989.

[7] P. R. Amestoy and I. S. Duff. Memory management issues in sparse multifrontal methods on multiprocessors. *Internat. J. Supercomputer Appl.*, 7:64–82, 1993.

[8] P. R. Amestoy, I. S. Duff, J.-Y. L'Excellent, and J. Koster. A fully asynchronous multifrontal solver using distributed dynamic scheduling. Technical Report RAL-TR-1999-059, Rutherford Appleton Laboratory, Oxfordshire, UK, 1999. Software available at `http://www.pallas.de/parasol`.

[9] G. S. Ammar, W. B. Gragg, and L. Reichel. Downdating Szegö polynomials and data fitting applications. *Linear Algebra Appl.*, 172:315–336, 1992.

[10] G. S. Ammar and C. He. On an inverse eigenvalue problem for unitary Hessenberg matrices. *Linear Algebra Appl.*, 218:263–271, 1995.

[11] G. S. Ammar, L. Reichel, and D. C. Sorensen. Algorithm 730: An implementation of a divide and conquer method for the unitary eigenproblem. *ACM Trans. Math. Software*, 20:161–170, 1994.

[12] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, and D. Sorensen. *LAPACK Users' Guide.* SIAM, Philadelphia, Third edition, 1999.

[13] P. J. Anderson and G. Loizou. A Jacobi type method for complex symmetric matrices. *Numer. Math.*, 25:347–363, 1976.

[14] I. Andersson. Experiments with the conjugate gradient algorithm for the determination of eigenvalues of symmetric matrices. Technical Report UMINF-4.71, University of Umeå, Sweden, 1971.

[15] P. Arbenz and G. H. Golub. On the spectral decomposition of Hermitian matrices modified by low rank perturbations with applications. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 9:40–58, 1988.

[16] T. Arias, A. Edelman, and S. Smith. Curvature in conjugate gradient eigenvalue computation with applications. In J. G. Lewis, editor, *Proceedings of the* 1994 *SIAM Applied Linear Algebra Conference*, pages 233–238. SIAM, Philadelphia, 1994.

[17] M. Arioli, I. S. Duff, and D. Ruiz. Stopping criteria for iterative solvers. Report RAL-91-057, Central Computing Center, Rutherford Appleton Laboratory, Oxfordshire, UK, 1992.

[18] V. I. Arnold. On matrices depending on parameters. *Russian Math. Surveys*, 26:29–43, 1971.

[19] W. E. Arnoldi. The principle of minimized iterations in the solution of the matrix eigenvalue problem. *Quart. Appl. Math.*, 9:17–29, 1951.

[20] E. Artin. *Geometric Algebra.* Interscience, New York, 1957.

[21] C. Ashcraft and R. Grimes. SPOOLES: An object-oriented sparse matrix library. In *Proceedings of the Ninth SIAM Conference on Parallel Processing.* SIAM, Philadelphia, 1999. Software available at `http://www.netlib.org/linalg/spooles`.

[22] J. Baglama, D. Calvetti, and L. Reichel. Iterative methods for the computation of a few eigenvalues of a large symmetric matrix. *BIT*, 36(3):400–421, 1996.

[23] J. Baglama, D. Calvetti, and L. Reichel. Fast Leja points. *Electron. Trans. Numer. Anal.*, 7:124–140, 1998.

[24] J. Baglama, D. Calvetti, L. Reichel, and A. Ruttan. Computation of a few close eigenvalues of a large matrix with application to liquid crystal modeling. *J. Comput. Phys.*, 146:203–226, 1998.

[25] Z. Bai. The CSD, GSVD, their applications and computations. Preprint Series 958, Institute for Mathematics and Its Applications, University of Minnesota, Minneapolis, April 1992. Available at `http://www.cs.ucdavis.edu/~bai`.

[26] Z. Bai. Error analysis of the Lanczos algorithm for the nonsymmetric eigenvalue problem. *Math. Comp.*, 62:209–226, 1994.

[27] Z. Bai. A spectral transformation block Lanczos algorithm for solving sparse non-Hermitian eigenproblems. In J. G. Lewis, editor, *Proceedings of the Fifth SIAM Conference on Applied Linear Algebra*, pages 307–311. SIAM, Philadelphia, 1994.

[28] Z. Bai, D. Day, J. Demmel, and J. Dongarra. A test matrix collection for non-Hermitian eigenvalue problems. Technical Report CS-97-355, University of Tennessee, Knoxville, 1997. LAPACK Working Note #123, Software and test data available at `http://math.nist.gov/MatrixMarket/`.

[29] Z. Bai, D. Day, and Q. Ye. ABLE: An adaptive block lanczos method for non-hermitian eigenvalue problems. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20:1060–1082, 1999.

[30] Z. Bai and J. Demmel. Design of a parallel nonsymmetric eigenroutine toolbox, Part I. In R. F. Sincovec et al., editors, *Proceedings of the Sixth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*. SIAM, Philadelphia, 1993. Long version available as Computer Science Report CSD-92-718, University of California, Berkeley, 1992.

[31] Z. Bai and J. Demmel. Using the matrix sign function to compute invariant subspaces. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 19:205–225, 1998.

[32] Z. Bai, J. Demmel, and M. Gu. An inverse free parallel spectral divide and conquer algorithm for nonsymmetric eigenproblems. *Numer. Math.*, 76:279–308, 1997.

[33] Z. Bai and J. W. Demmel. On swapping diagonal blocks in real Schur form. *Linear Algebra Appl.*, 186:73–95, 1993.

[34] Z. Bai, P. Feldmann, and R. W. Freund. How to make theoretically passive reduced-order models passive in practice. In *Proceedings of the IEEE* 1998 *Custom Integrated Circuits Conference*, pages 207–210. IEEE Press, Piscataway, NJ, 1998.

[35] Z. Bai and R. W. Freund. A band symmetric Lanczos process based on coupled recurrences with applications. Technical Report Numerical Analysis Manuscript, Bell Laboratories, Murray Hill, NJ, USA, 1998.

[36] Z. Bai and G. Golub. Some unusual matrix eigenvalue problems. In J. Palma, J. Dongarra, and V. Hernandez, editors, *Proceedings of VECPAR*'98 - *Third International Conference for Vector and Parallel Processing*, Lecture Notes in Computer Science. Vol. 1573, pages 4–19. Springer-Verlag, New York, 1999.

[37] Z. Bai and G. W. Stewart. Algorithm 776. SRRIT — A FORTRAN subroutine to calculate the dominant invariant subspaces of a nonsymmetric matrix. *ACM Trans. Math. Software*, 23:494–513, 1998.

[38] S. Balay, W. Gropp, L. C. McInnes, and B. Smith. PETSc 2.0 Users Manual. Technical Report ANL-95/11 - Revision 2.0.28, Argonne National Laboratory, Argonne, IL, 2000. Software available at `http://www.mcs.anl.gov/petsc`.

[39] R. E. Bank. Analysis of a multilevel inverse iteration procedure for eigenvalue problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 19(5):886–898, 1982.

[40] J. Barlow and J. Demmel. Computing accurate eigensystems of scaled diagonally dominant matrices. *SIAM J. Numer. Anal.*, 27(3):762–791, 1990.

[41] R. Barrett, M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and H. van der Vorst. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods.* SIAM, Philadelphia, 1994.

[42] K.-J. Bathe and E. L. Wilson. *Numerical Methods in Finite Element Analysis.* Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1976.

[43] P. Benner and H. Faßbender. The symplectic eigenvalue problem, the butterfly form, the SR algorithm, and the Lanczos method. *Linear Algebra Appl.*, 275/276:19–47, 1998.

[44] P. Benner, H. Fassbender, and D. Watkins. SR and SZ algorithms for the symplectic (butterfly) eigenproblem. *Linear Algebra Appl.*, 287:41–76, 1999.

[45] P. Benner, V. Mehrmann, and H. Xu. A new method for computing the stable invariant subspace of a real hamiltonian matrix. *J. Comput. Appl. Math.*, 86:17–43, 1997.

[46] P. Benner, V. Mehrmann, and H. Xu. A numerical stable, structure preserving method for computing the eigenvalues of real Hamiltonian or symplectic pencils. *Numer. Math.*, 78:329–358, 1998.

[47] P. Benner, V. Mehrmann, and H. Xu. A note on the numerical solution of complex Hamiltonian and skew-Hamiltonian eigenvalue problem. *Electron. Trans. Numer. Anal.*, 8:115–126, 1999.

[48] L. Bergamaschi, G. Gambolati, and G. Pini. Asymptotic convergence of conjugate gradient methods for the partial symmetric eigenproblem. *Numer. Linear Algebra Appl.*, 4(2):69–84, 1997.

[49] M. Berry. Large scale singular value computations. *Internat. J. Supercomputer Appl.*, 6(1):13–49, 1992.

[50] Å. Björck. *Numerical Solutions for Least Squares Problems.* SIAM, Philadelphia, 1996.

[51] Å. Björck and V. Pereyra. Solution of vandermonde systems of equations. *Math. Comp.*, 24:893–903, 1970.

[52] L. S. Blackford, J. Choi, A. Cleary, E. D'Azevedo, J. Demmel, I. Dhillon, J. Dongarra, G. Henry, A. Petitet, K. Stanley, D. Walker, and R. Whaley. *ScaLAPACK Users' Guide.* SIAM, Philadelphia, 1997.

[53] A. Bojanczyk and P. Van Dooren. On propagating orthogonal transformations in a product of 2×2 triangular matrices. In *Numerical Linear Algebra.* de Gruyter, Berlin, 1993.

[54] A. Bojanczyk, P. Van Dooren, L. M. Ewerbring, and F. T. Luk. An accurate product SVD algorithm. *J. Signal Processing*, 25:189–201, 1991.

[55] D. Boley. The algebraic structure of pencils and block Toeplitz matrices. *Linear Algebra Appl.*, 279:255–279, April 1998.

[56] D. Boley and G. H. Golub. A survey of matrix inverse eigenvalue problems. *Inverse Problems*, 3:595–622, 1987.

[57] F. Bourquin. Analysis and comparison of several component mode synthesis methods on one-dimensional domains. *Numer. Math.*, 58(1):11–33, 1990.

[58] F. Bourquin. Component mode synthesis and eigenvalues of second order operators: discretization and algorithm. *RAIRO Modél. Math. Anal. Numér.*, 26(3):385–423, 1992.

[59] F. Bourquin. A domain decomposition method for the eigenvalue problem in elastic multistructures. In *Asymptotic Methods for Elastic Structures* (*Lisbon*, 1993), pages 15–29. de Gruyter, Berlin, 1995.

[60] F. Bourquin and P. G. Ciarlet. Modelling and justification of eigenvalue problems for junctions between elastic structures. *J. Funct. Anal.*, 87(2):392–427, 1989.

[61] W. W. Bradbury and R. Fletcher. New iterative methods for solution of the eigenproblem. *Numer. Math.*, 9:259–267, 1966.

[62] J. H. Bramble. *Multigrid Methods.* Longman Scientific & Technical, Harlow, UK, 1993.

[63] J. H. Bramble, J. E. Pasciak, and A. V. Knyazev. A subspace preconditioning algorithm for eigenvector/eigenvalue computation. *Adv. Comput. Math.*, 6(2):159–189, 1996.

[64] A. Brandt, S. McCormick, and J. Ruge. Multigrid methods for differential eigenproblems. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 4(2):244–260, 1983.

[65] C. Brezinski, M. Redivo Zaglia, and H. Sadok. Avoiding breakdown and near-breakdown in Lanczos type algorithms. *Numer. Algorithms*, 1:261–284, 1991.

[66] W. L. Briggs. *A Multigrid Tutorial.* SIAM, Philadelphia, 1987.

[67] A. Bunse-Gerstner, R. Byers, V. Mehrmann, and N. K. Nichols. Numerical computation of an analytic singular value decomposition of a matrix valued function. *Numer. Math.*, 60:1–39, 1991.

[68] A. Bunse-Gerstner and C. He. On the Sturm sequence of polynomials for unitary Hessenberg matrices. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 16:1043–1055, 1995.

[69] A. Bunse-Gerstner and V. Mehrmann. The quaternion QR algorithm. *Numer. Math.*, 55:83–95, 1989.

[70] J. V. Burke, A. S. Lewis, and M. L. Overton. Optimizing matrix stability. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 1999, to appear.

[71] R. Byers. A Hamiltonian QR-algorithm. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7:212–229, 1986.

[72] R. Byers. Solving the algebraic Riccati equation with the matrix sign function. *Linear Algebra Appl.*, 85:267–279, 1987.

[73] R. Byers, C. He, and Mehrmann. The matrix sign function method and the computation of invariant subspaces. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 18:615–632, 1997.

[74] Z. Q. Cai, J. Mandel, and S. McCormick. Multigrid methods for nearly singular linear equations and eigenvalue problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34:178–200, 1997.

[75] C. Carey, G. H. Golub, and K. H. Law. A Lanczos-based method for structural dynamics reanalysis problems. Manuscript na–93–03, Computer Science Department, Stanford University, Stanford, CA, 1993.

[76] J. Carrier, L. Greengard, and V. Rokhlin. A fast adaptive multipole algorithm for particle simulations. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 9:669–686, 1988.

[77] F. Chaitin-Chatelin and V. Frayssé. *Lectures on Finite Precision Computations.* SIAM, Philadelphia, 1996.

[78] T. F. Chan, E. Gallopoulos, V. Simoncini, T. Szeto, and C. H. Tong. A quasi-minimal residual variant of the Bi-CGSTAB algorithm for nonsymmetric systems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 15:338–347, 1994.

[79] F. Chatelin. *Eigenvalues of Matrices.* Wiley, New York, 1993.

[80] I. Chavel. *Riemannian Geometry—A Modern Introduction.* The Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1993.

[81] T.-Y. Chen. Balancing sparse matrices for computing eigenvalues. Master's thesis, University of California, Berkeley, May 1998.

[82] T.-Y. Chen and J. Demmel. Balancing sparse matrices for computing eigenvalues. *Linear Algebra Appl.*, 309:261–287, 2000.

[83] X. Chi and M. Gu. Updating the SVD. CAM technical report, Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, 2000.

[84] M. T. Chu. Inverse eigenvalue problems. *SIAM Rev.*, 40:1–39, 1998.

[85] B. D. Craven. Complex symmetric matrices. *J. Austral. Math. Soc.*, 10:341–354, 1969.

[86] C. R. Crawford. Algorithm 646 PDFIND: A routine to find a positive definite linear combination of two real symmetric matrices. *ACM Trans. Math. Software*, 12:278–282, 1986.

[87] C. R. Crawford and Y. S. Moon. Finding a positive definite linear combination of two Hermitian matrices. *Linear Algebra Appl.*, 51:37–48, 1983.

[88] M. Crouzeix, B. Philippe, and M. Sadkane. The Davidson method. *SIAM J. Sci. Comput.*, 15:62–76, 1994.

[89] J. K. Cullum and W. E. Donath. A block Lanczos algorithm for computing the q algebraically largest eigenvalues and a corresponding eigenspace for large, sparse symmetric matrices. In *Proceedings of the* 1994 *IEEE Conference on Decision and Control*, pages 505–509. IEEE Press, Piscataway, NJ, 1974.

[90] J. K. Cullum and R. A. Willoughby. Computing eigenvalues of very large symmetric matrices—an implementation of a Lanczos algorithm with no reorthogonalization. *J. Comput. Phys.*, 44:329–358, 1981.

[91] J. K. Cullum and R. A. Willoughby. *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations. Volume* 1*, Theory.* Birkhäuser, Boston, 1985.

[92] J. K. Cullum and R. A. Willoughby. *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations. Volume* 2*, Programs.* Birkhäuser, Boston, 1985.

[93] J. K. Cullum and R. A. Willoughby. A practical procedure for computing eigenvalues of large sparse nonsymmetric matrices. In J. K. Cullum and R. A. Willoughby, editors, *Large Scale Eigenvalue Problems*, pages 193–240. Elsevier Science Publishers, 1986.

[94] J. K. Cullum and R. A. Willoughby. A QL procedure for computing the eigenvalues of complex symmetric tridiagonal matrices. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 17:83–109, 1996.

[95] H. Dai and P. Lancaster. Numerical methods for finding multiple eigenvalues of matrices depending on parameters. *Numer. Math.*, 76:189–208, 1997.

[96] J. W. Daniel, W. B. Gragg, L. Kaufman, and G. W. Stewart. Reorthogonalization and stable algorithms for updating the Gram-Schmidt QR factorization. *Math. Comp.*, 30:772–795, 1976.

[97] D. F. Davidenko. The method of variation of parameters as applied to the computation of eigenvalues and eigenvectors of matrices. *Soviet Math. Dokl.*, 1:364–367, 1960.

[98] D. F. Davidenko. On the computation of eigenvalues and eigenvectors of matrices. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 141:277–280, 1961.

[99] E. R. Davidson. The iterative calculation of a few of the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real symmetric matrices. *J. Comput. Phys.*, 17:87–94, 1975.

[100] E. R. Davidson. Matrix eigenvector methods. In G. H. F. Direcksen and S. Wilson, editors, *Methods in Computational Molecular Physics*, pages 95–113. Reidel, Boston, 1983.

[101] C. Davis and W. Kahan. The rotation of eigenvectors by a perturbation. III. *SIAM J. Numer. Anal.*, 7:1–46, 1970.

[102] G. J. Davis. Numerical solution of a quadratic matrix equation. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2:164–175, 1981.

[103] T. A. Davis and I. S. Duff. A combined unifrontal/multifrontal method for unsymmetric sparse matrices. Technical Report TR-95-020, Computer and Information Sciences Department, University of Florida, Gainesville, 1995. Software available at `http://www.netlib.org/linalg/umfpack2.2.tgz`.

[104] D. Day. *Semi-Duality in the Two-Sided Lanczos Algorithm.* Ph.D. thesis, University of California, Berkeley, 1993.

[105] D. Day. An efficient implementation of the nonsymmetric Lanczos algorithm. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 18:566–589, 1997.

[106] I. De Hoyos. Points of continuity of the Kronecker canonical form. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 11(2):278–300, April 1990.

[107] J. de Leeuw and W. Heiser. Theory of multidimensional scaling. In P. R. Krishnaiah and L. N. Kanal, editors, *Handbook of Statistics, Vol.* 2, pages 285–316. North-Holland, Amsterdam, 1982.

[108] B. De Moor. On the structure of generalized singular value and QR decompositions. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 15(1):347–358, 1994.

[109] G. De Samblanx. *Filtering and restarting projection methods for eigenvalue problems.* PhD Thesis, Katholieke Universiteit Leuven, Department of Computer Science, 3001 Heverlee, Belgium, 1998.

[110] G. De Samblanx and A. Bultheel. Nested Lanczos: implicitly restarting a Lanczos algorithm. *Numer. Algorithms*, 18:31–50, 1998.

[111] E.. De Sturler. A parallel restructed version of GMRES(m). Technical Report Tech. Report Preprint 91-085, Delft University of Technology, Delft, The Netherlands, 1992.

[112] E. De Sturler and H. A. van der Vorst. Communication cost reduction for krylov methods on parallel computers. In W. Gentzsch and U. Harms, editors, *High Performance and Networking Tools, Vol.* 2, Lecture Notes in Computer Science. Vol. 797, pages 190–195. Springer-Verlag, Berlin, 1994.

[113] R. S. Dembo, S. C. Eisenstat, and T. Steihaug. Inexact Newton methods. *SIAM J. Numer. Anal.*, 19:400–408, 1982.

[114] J. Demmel. *Applied Numerical Linear Algebra.* SIAM, Philadelphia, 1997.

[115] J. Demmel. Accurate SVDs of structured matrices. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 21(3):562–580, 2000.

[116] J. Demmel and A. Edelman. The dimension of matrices (matrix pencils) with given Jordan (Kronecker) canonical forms. *Linear Algebra Appl.*, 230:61–87, 1995.

[117] J. Demmel and W. Gragg. On computing accurate singular values and eigenvalues of matrices with acyclic graphs. *Linear Algebra Appl.*, 185:203–217, 1993.

[118] J. Demmel, M. Gu, S. Eisenstat, I. Slapničar, K. Veselić, and Z. Drmač. Computing the singular value decomposition with high relative accuracy. *Linear Algebra Appl.*, 299:21–80, 1999.

[119] J. Demmel and B. Kågström. Computing stable eigendecompositions of matrix pencils. *Linear Algebra Appl.*, 88/89:139–186, 1987.

[120] J. Demmel and B. Kågström. Accurate solutions of ill-posed problems in control theory. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 9(1):126–145, 1988.

[121] J. Demmel and B. Kågström. The generalized Schur decomposition of an arbitrary pencil $A - \lambda B$: Robust software with error bounds and applications. Part I: Theory and algorithms. *ACM Trans. Math. Software*, 19(2):160–174, 1993.

[122] J. Demmel and B. Kågström. The generalized Schur decomposition of an arbitrary pencil $A - \lambda B$: Robust software with error bounds and applications. Part II: Software and applications. *ACM Trans. Math. Software*, 19(2):175–201, 1993.

[123] J. Demmel and W. Kahan. Accurate singular values of bidiagonal matrices. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 11:873–912, 1990.

[124] J. Demmel and K. Veselić. Jacobi's method is more accurate than QR. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 13(4):1204–1245, 1992.

[125] J. W. Demmel, L. Dieci, and M. Friedman. *SIAM J. Sci. Comput.*, 22(1):81–94, 2000.

[126] J. W. Demmel, S. C. Eisenstat, J. R. Gilbert, X. S. Li, and J. W. H. Liu. A supernodal approach to sparse partial pivoting. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20(3):720–755, 1999. Software available at `http://www.nersc.gov/~xiaoye/SuperLU`.

[127] J. W. Demmel, J. R. Gilbert, and X. S. Li. An asynchronous parallel supernodal algorithm for sparse Gaussian elimination. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20(4):915–952, 1999. Software available at `http://www.nersc.gov/~xiaoye/SuperLU`.

[128] I. Dhillon. *A New $O(n^2)$ Algorithm for the Symmetric Tridiagonal Eigenvalue/Eigenvector Problem.* Ph.D. thesis, University of California, Berkeley, 1997.

[129] I. S. Dhillon. Current inverse iteration software can fail. *BIT*, 38(4):685–704, 1998.

[130] D. C. Dobson. An efficient method for band structure calculations in 2D photonic crystals. *J. Comput. Phys.*, 149(2):363–376, 1999.

[131] J. Dongarra, J. Gabriel, D. Kolling, and J. Wilkinson. The eigenvalue problem for Hermitian matrices with time reversal symmetry. *Linear Algebra Appl.*, 60:27–42, 1984.

[132] J. J. Dongarra, J. R. Bunch, C. B. Moler, and G. W. Stewart. *LINPACK Users' Guide.* SIAM, Philadelphia, 1979.

[133] J. J. Dongarra, J. Du Croz, S. Hammarling, and R. J. Hanson. An extended set of FORTRAN basic linear algebra subprograms. *ACM Trans. Math. Software*, 14:1–32, 1988.

[134] J. J. Dongarra, J. DuCroz, I. S. Duff, and S. Hammarling. A set of level 3 basic linear algebra subprograms. *ACM Trans. Math. Software*, 16:1–17, 1990.

[135] J. J. Dongarra, I. S. Duff, D. C. Sorensen, and H. A. van der Vorst. *Numerical Linear Algebra for High-Performance Computers.* SIAM, Philadelphia, PA, 1998.

[136] Z. Drmač. A posteriori computation of the singular vectors in a preconditioned Jacobi SVD algorithm. *IMA J. Numer. Anal.*, 19:191–213, 1999.

[137] I. S. Duff. Direct methods. Technical Report RAL-98-056, Rutherford Appleton Laboratory, Oxfordshire, UK, 1998.

[138] I. S. Duff, A. M. Erisman, and J. K. Reid. *Direct Methods for Sparse Matrices.* Clarendon Press, Oxford, UK, 1986.

[139] I. S. Duff, R. G. Grimes, and J. G. Lewis. Sparse matrix test problems. *ACM Trans. Math. Software*, 15:1–14, 1989.

[140] I. S. Duff and J. K. Reid. The multifrontal solution of indefinite sparse symmetric linear equations. *ACM Trans. Math. Software*, 9(3):302–325, September 1983.

[141] I. S. Duff and J. K. Reid. MA47, a Fortran code for direct solution of indefinite sparse symmetric linear systems. Technical Report RAL-95-001, DRAL, Chilton Didcot, UK, 1995.

[142] I. S. Duff and J. K. Reid. The design of MA48, a code for the direct solution of sparse unsymmetric linear systems of equations. *ACM Trans. Math. Software*, 22:187–226, 1996.

[143] I. S. Duff and J. A. Scott. Computing selected eigenvalues of large sparse unsymmetric matrices using subspace iteration. *ACM Trans. Math. Software*, 19:137–159, 1993.

[144] I. S. Duff and J. A. Scott. The design of a new frontal code for solving sparse unsymmetric systems. *ACM Trans. Math. Software*, 22(1):30–45, 1996.

[145] R. J. Duffin. A minimax theory for overdamped networks. *J. Rational Mech. Anal.*, 4:221–233, 1955.

[146] E. G. D'yakonov. Iteration methods in eigenvalue problems. *Math. Notes*, 34:945–953, 1983.

[147] E. G. D'yakonov. *Optimization in solving elliptic problems.* CRC Press, Boca Raton, FL, 1996. Translated from the 1989 Russian original; translated, edited, and with a preface by Steve McCormick.

[148] E. G. D'yakonov and A. V. Knyazev. Group iterative method for finding lower-order eigenvalues. *Moscow University, Ser.* 15*, Computational Math. and Cybernetics*, 2:32–40, 1982.

[149] E. G. D'yakonov and A. V. Knyazev. On an iterative method for finding lower eigenvalues. *Russian J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 7(6):473–486, 1992.

[150] E. G. D'yakonov and M. Yu. Orekhov. Minimization of the computational labor in determining the first eigenvalues of differential operators. *Math. Notes*, 27(5–6):382–391, 1980.

[151] A. Edelman, T. A. Arias, and S. T. Smith. The geometry of algorithms with orthogonality constraints. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20:303–353, 1999.

[152] A. Edelman, E. Elmroth, and B. Kågström. A geometric approach to perturbation theory of matrices and matrix pencils. Part I: Versal deformations. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 18(3):653–692, 1997.

[153] A. Edelman, E. Elmroth, and B. Kågström. A geometric approach to perturbation theory of matrices and matrix pencils. Part II: A stratification-enhanced staircase algorithm. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20(3):667–699, 1999.

[154] A. Edelman and Y. Ma. Staircase failures explained by orthogonal versal forms. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 21(3):1004–1025, 2000.

[155] A. Edelman and S. T. Smith. On conjugate gradient-like methods for eigen-like problems. *BIT*, 36:494–508, 1996. See also Loyce Adams and J. L. Nazareth, editors, *Proc. Linear and Nonlinear Conjugate Gradient-Related Methods*, SIAM, Philadelphia, 1996.

[156] V. Eijkhout. Distributed sparse data structures for linear algebra operations. Technical Report CS 92-169, Computer Science Department, University of Tennessee, Knoxville, TN, 1992. LAPACK Working Note #50, `http://www.netlib.org/lapack/lawns/lawn50.ps`.

[157] S. C. Eisenstat and I. C. F. Ipsen. Relative perturbation techniques for singular value problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 32:1972–1988, 1995.

[158] L. Eldén. Algorithms for the regularization of ill-conditioned least-squares problems. *BIT*, 17:134–145, 1977.

[159] E. Elmroth, P. Johansson, and B. Kågström. Computation and presentation of graphs displaying closure hierarchies of Jordan and Kronecker structures. Technical Report UMINF-99.12, Department of Computing Science, Umeå University, Umeå, Sweden, 1999.

[160] E. Elmroth and B. Kågström. The set of 2-by-3 matrix pencils—Kronecker structures and their transitions under perturbations. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 17(1):1–34, 1996.

[161] T. Ericsson. A generalised eigenvalue problem and the Lanczos algorithm. In J. K. Cullum and R. A. Willoughby, editors, *Large Scale Eigenvalue Problems*, pages 95–119. Elsevier Science Publishers (North-Holland), Amsterdam, 1986.

[162] T. Ericsson and A. Ruhe. The spectral transformation Lanczos method for the numerical solution of large sparse generalized symmetric eigenvalue problems. *Math. Comp.*, 35:1251–1268, 1980.

[163] V. Faber and T. A. Manteuffel. Necessary and sufficient conditions for the existence of a conjugate gradient method. *SIAM J. Numer. Anal.*, 21(2):352–362, 1984.

[164] C. Farhat and M. Geradin. On a component mode synthesis method and its application to incompatible substructures. *Comput. & Structures*, 51(5):459–473, 1994.

[165] H. Faßbender, D. S. Mackey, and N. Mackey. Hamilton and Jacobi come full circle: Jacobi algorithms for structured Hamiltonian eigenproblems. *To appear in Linear Algebra Appl.*, 2000.

[166] P. Feldmann and R. W. Freund. Reduced-order modeling of large linear subcircuits via a block Lanczos algorithm. In *Proceedings of the* 32*nd Design Automation Conference*, pages 474–479. ACM, New York, 1995.

[167] Y. T. Feng and D. R. J. Owen. Conjugate gradient methods for solving the smallest eigenpair of large symmetric eigenvalue problems. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 39(13):2209–2229, 1996.

[168] K. V. Fernando and B. N. Parlett. Accurate singular values and differential qd algorithms. *Numer. Math.*, 67:191–229, 1994.

[169] R. Fletcher. Conjugate gradient methods for indefinite systems. *Lecture Notes in Mathematics*, Vol. 506, pages 73–89. Springer-Verlag, Berlin, 1976.

[170] R. Fletcher. *Practical Methods of Optimization.* Wiley, New York, second edition, 1987.

[171] D. R. Fokkema. *Subspace Methods for Linear, Nonlinear, and Eigen Problems.* Ph.D. thesis, Utrecht University, Utrecht, the Netherlands, 1996.

[172] D. R. Fokkema, G. L. G. Sleijpen, and H. A. van der Vorst. Jacobi-Davidson style QR and QZ algorithms for the partial reduction of matrix pencils. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20:94–125, 1998.

[173] R. W. Freund. Conjugate gradient-type methods for linear systems with complex symmetric coefficient matrices. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 13:425–448, 1992.

[174] R. W. Freund. A transpose-free quasi-minimal residual algorithm for non-Hermitian linear systems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 14:470–482, 1993.

[175] R. W. Freund. Computing minimal partial realizations via a Lanczos-type algorithm for multiple starting vectors. In *Proceedings of the 36th IEEE Conference on Decision and Control*, pages 4394–4399. IEEE Press, Piscataway, NJ, 1997.

[176] R. W. Freund. Reduced-order modeling techniques based on Krylov subspaces and their use in circuit simulation. In *Applied and Computational Control, Signals, and Circuits, Vol.* 1, pages 435–498. Birkhäuser, Boston, 1999.

[177] R. W. Freund and P. Feldmann. Reduced-order modeling of large linear passive multi-terminal circuits using matrix-Padé approximation. In *Proceedings of the Design, Automation and Test in Europe Conference* 1998, pages 530–537. IEEE Computer Society Press, Los Alamitos, CA, 1998.

[178] R. W. Freund, M. H. Gutknecht, and N. M. Nachtigal. An implementation of the look-ahead Lanczos algorithm for non-Hermitian matrices. *SIAM J. Sci. Comput.*, 14:137–158, 1993.

[179] R. W. Freund and N. M. Nachtigal. QMR: A quasi-minimal residual method for non-Hermitian linear systems. *Numer. Math.*, 60:315–339, 1991.

[180] R. W. Freund and N. M. Nachtigal. QMRPACK: A package of QMR algorithms. *ACM Trans. Math. Software*, 22:46–77, 1996.

[181] S. Friedland, J. Nocedal, and M. L. Overton. The formulation and analysis of numerical methods for inverse eigenvalue problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 24:634–667, 1987.

[182] C. Fu, X. Jiao, and T. Yang. Efficient sparse LU factorization with partial pivoting on distributed memory architectures. *IEEE Trans. Parallel and Distributed Systems*, 9(2):109–125, 1998. Software available at `http://www.cs.ucsb.edu/research/S+`.

[183] Z. Fu and E. M. Dowling. Conjugate gradient eigenstructure tracking for adaptive spectral estimation. *IEEE Trans. Signal Processing*, 43(5):1151–1160, 1995.

[184] K. Gallivan, E. Grimme, and P. Van Dooren. A rational Lanczos algorithm for model reduction. *Numer. Algorithms*, 12:33–64, 1996.

[185] G. Gambolati, G. Pini, and M. Putti. Nested iterations for symmetric eigenproblems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 16(1):173–191, 1995.

[186] G. Gambolati, F. Sartoretto, and P. Florian. An orthogonal accelerated deflation technique for large symmetric eigenproblems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 94(1):13–23, 1992.

[187] F. Gantmacher. *The Theory of Matrices, Vols.* I *and* II (transl.). Chelsea, New York, 1959.

[188] I. Garcia-Planas. Kronecker stratification of the space of quadruples of matrices. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 19(4):872–885, 1998.

[189] G. Geist, G. Howell, and D. Watkins. The BR eigenvalue algorithm. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20(4):1083–1098, 1999.

[190] M. Genseberger and G. L. G. Sleijpen. Alternative correction equations in the Jacobi-Davidson method. Preprint 1073, Department of Mathematics, Utrecht University, Utrecht, the Netherlands, 1998.

[191] A. George and J. Liu. *Computer Solution of Large Sparse Positive Definite Systems.* Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1981.

[192] P. E. Gill, W. Murray, and M. H. Wright. *Practical Optimization.* Academic Press, New York, second edition, 1981.

[193] I. Gohberg, T. Kailath, and V. Olshevsky. Fast gaussian elimination with partial pivoting for matrices with displacement structure. *Math. Comp.*, 64(212):1557–1576, 1995.

[194] I. Gohberg, P. Lancaster, and L. Rodman. *Matrix Polynomials.* Academic Press, New York, 1982.

[195] I. Gohberg and V. Olshevsky. Complexity of multiplication with vectors for structured matrices. *Linear Algebra Appl.*, 202:163–192, 1994.

[196] I. Gohberg and V. Olshevsky. Fast algorithms with preprocessing for matrix-vector mupltiplication problems. *J. Complexity*, 10(4):411–427, 1994.

[197] G. Golub and R. Underwood. The block Lanczos method for computing eigenvalues. In J. Rice, editor, *Mathematical Software* III, pages 364–377. Academic Press, New York, 1977.

[198] G. Golub and C. Van Loan. *Matrix Computations.* The Johns Hopkins University Press, Baltimore, third edition, 1996.

[199] G. Golub and J. H. Wilkinson. Ill-conditioned eigensystems and the computation of the Jordan canonical form. *SIAM Rev.*, 18(4):578–619, 1976.

[200] G. H. Golub, Z. Zhang, and H. Zha. Large sparse symmetric eigenvalue problems with homogeneous linear constraints: The Lanczos process with inner-outer iterations. *Linear Algebra Appl.*, 309:289–306, 2000.

[201] W. B. Gragg. The QR algorithm for unitary Hessenberg matrices. *J. Comput. Appl. Math.*, 16:1–8, 1986.

[202] W. B. Gragg and L. Reichel. A divide and conquer method for unitary and orthogonal eigenproblems. *Numer. Math.*, 57:695–718, 1990.

[203] W. B. Gragg and T.-L. Wang. Convergence of the shifted QR algorithm for unitary Hessenberg matrices. Technical Report NPS-53-90-007, Naval Postgraduate School, Monterey, CA, 1990.

[204] J. F. Grcar. *Analyses of the Lanczos Algorithm and the Approximation Problem in Richardson's Method*. Ph.D. thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1981.

[205] L. Greengard and V. Rokhlin. A fast algorithm for particle simulations. *J. Comput. Phys.*, 73:325–348, 1987.

[206] R. G. Grimes, J. G. Lewis, and H. D. Simon. A shifted block Lanczos algorithm for solving sparse symmetric generalized eigenproblems. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 15:228–272, 1994.

[207] E. Grimme, D. Sorensen, and P. Van Dooren. Model reduction of state space systems via an implicitly restarted Lanczos method. *Numer. Algorithms*, 12:1–32, 1996.

[208] M. Gu, J. Demmel, and I. Dhillon. Efficient computation of the singular value decomposition with applications to least squares problems. Computer Science Dept. Technical Report CS-94-257, University of Tennessee, Knoxville, 1994. LAPACK Working Note #88, `http://www.netlib.org/lapack/lawns/lawn88.ps`.

[209] J.-S. Guo, W.-W. Lin, and C.-S. Wang. Numerical solutions for large sparse quadratic eigenvalue problems. *Linear Alg. Appl.*, 225:57–89, 1995.

[210] A. Gupta, G. Karypis, and V. Kumar. Highly scalable parallel algorithms for sparse matrix factorization. *IEEE Trans. Parallel and Distributed Systems*, 8:502–520, 1997. Software available at `http://www.cs.umn.edu/~mjoshi/pspases`.

[211] A. Gupta, E. Rothberg, E. Ng, and B. W. Peyton. Parallel sparse Cholesky factorization algorithms for shared-memory multiprocessor systems. In R. Vichnevetsky, D. Knight, and G. Richter, editors, *Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations*–VII, pages 622–628. IMACS, New Brunswick, NJ, 1992.

[212] I. Gustafsson. A class of first order factorization methods. *BIT*, 18:142–156, 1978.

[213] M. H. Gutknecht. A completed theory of the unsymmetric Lanczos process and related algorithms, Part I. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 13:594–639, 1992.

[214] M. H. Gutknecht. A completed theory of the unsymmetric Lanczos process and related algorithms, Part II. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 15:15–58, 1994.

[215] W. Hackbusch. On the computation of approximate eigenvalues and eigenfunctions of elliptic operators by means of a multi-grid method. *SIAM J. Numer. Anal.*, 16(2):201–215, 1979.

[216] W. Hackbusch. Multigrid solutions to linear and nonlinear eigenvalue problems for integral and differential equations. *Rostock. Math. Kolloq.*, (25):79–98, 1984.

[217] W. Hackbusch. Multigrid eigenvalue computation. In *Advances in Multigrid Methods* (*Oberwolfach*, 1984), pages 24–32. Vieweg, Braunschweig, Germany, 1985.

[218] W. Hackbusch. *Multigrid Methods and Applications.* Springer-Verlag, Berlin, 1985.

[219] M. Heath, E. Ng, and B. Peyton. Parallel algorithms for sparse linear systems. *SIAM Rev.*, 33:420–460, 1991.

[220] M. T. Heath and P. Raghavan. Performance of a fully parallel sparse solver. *Internat. J. Supercomputer Appl.*, 11(1):49–64, 1997. Software available at `http://www.netlib.org/scalapack`.

[221] R. Heeg. *Stability and Transistion of Attachment-Line Flow.* Ph.D. thesis, Universiteit Twente, Enschede, the Netherlands, 1998.

[222] S. Helgason. *Differential Geometry, Lie Groups, and Symmetric Spaces.* Academic Press, New York, 1978.

[223] B. Hendrickson and R. Leland. The Chaco User's Guide: Version 2.0. Technical Report SAND94–2692, Sandia National Laboratories, 1994.

[224] P. Henon, P. Ramet, and J. Roman. A mapping and scheduling algorithm for parallel sparse fan-in numerical factorization. In P. Amestoy, P. Berger, M. Daydé, I. Duff, V. Frayssé, L. Giraud, and D. Ruiz, editors, *EuroPar'99 Parallel Processing*, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 1685, pages 1059–1067. Springer-Verlag, New York, 1999.

[225] M. R. Hestenes and W. Karush. Solutions of $Ax = \lambda Bx$. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 47:471–478, 1951.

[226] M. R. Hestenes and E. Stiefel. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 49:409–436, 1954.

[227] V. Heuveline and M. Sadkane. Arnoldi-Faber method for large non-Hermitian eigenvalue problems. *Electron. Trans. Numer. Anal.*, 7:62–76, 1997.

[228] N. J. Higham. *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms.* SIAM, Philiadelphia, 1996.

[229] N. J. Higham. QR factorization with complete pivoting and accurate computation of the SVD. *Linear Algebra Appl.*, 309:153–174, 2000.

[230] N. J. Higham. Stability analysis of algorithms for solving confluent Vandermonde-like systems. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 11:23–41, 1990.

[231] D. Hinrichsen and J. O'Halloran. Orbit closures of singular pencils. *J. Pure and Applied Algebra*, 81:117–137, 1992.

[232] K. Hirao and H. Nakatsuji. A generalization of the Davidson's method to large nonsymmetric eigenvalue problem. *J. Comput. Phys.*, 45(2):246–254, 1982.

[233] R. A. Horn and C. R. Johnson. *Matrix Analysis.* Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1985.

[234] A. S. Householder. *The Theory of Matrices in Numerical Analysis.* Blaisdell, New York, 1964. Dover edition, 1975.

[235] L. J. Huang and T.-Y. Li. Parallel homotopy algorithm for symmetric large sparse eigenproblems. *J. Comput. Appl. Math.*, 60(1-2):77–100, 1995.

[236] S. A. Hutchinson, L. V. Prevost, J. N. Shadid, and R. S. Tuminaro. Aztec user's guide, version 2.0 Beta. Technical Report SAND95-1559, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, 1998.

[237] T. Hwang and I. D. Parsons. A multigrid method for the generalized symmetric eigenvalue problem. I. Algorithm and implementation. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 35(8):1663–1676, 1992.

[238] T. Hwang and I. D. Parsons. A multigrid method for the generalized symmetric eigenvalue problem. II. Performance evaluation. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 35(8):1677–1696, 1992.

[239] E.-J. Im. *Automatic Optimization of Sparse Matrix - Vector Multiplication.* Ph.D. thesis, University of California, Berkeley, May 2000.

[240] E.-J. Im and K. A. Yelick. Optimizing sparse matrix vector multiplication on SMPs. In *Proceedings of the Ninth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, SIAM, Philadelphia, 1999.

[241] C. G. J. Jacobi. Ueber ein leichtes Verfahren, die in der Theorie der Säcularstörungen vorkommenden Gleichungen numerisch aufzulösen. *J. Reine Angew. Math.*, 30:51–94, 1846.

[242] A. Jennings. *Matrix Computation for Engineers and Scientists.* Wiley, New York, 1977.

[243] Z. Jia. A block incomplete orthogonalisation method for large nonsymmetric eigenproblems. *BIT*, 35:516–539, 1995.

[244] Z. Jia. Polynomial characterizations of the approximate eigenvectors by the refined Arnoldi method and an implicitly restarted refined Arnoldi algorithm. *Linear Algebra Appl.*, 287:191–214, 1998.

[245] Z. Jia. A refined iterative algorithm based on the block Arnoldi process for large unsymmetric eigenproblems. *Linear Algebra Appl.*, 270:171–189, 1998.

[246] Z. Jia and G. W. Stewart. An analysis of the Rayleigh-Ritz method for approximating eigenspaces. Technical Report TR–4015, Department of Computer Science, University of Maryland, College Park, 1999.

[247] Z. Jia and G. W. Stewart. On the convergence of Ritz values, Ritz vectors and refined Ritz vectors. Technical Report TR–3986, Department of Computer Science, University of Maryland, College Park, 1999.

[248] P. Johansson. Stratigraph users' guide. version 1.1. Technical Report UMINF-99.11, Department of Computing Science, Umeå University, Umeå, Sweden, 1999.

[249] M. T. Jones and M. L. Patrick. The Lanczos algorithm for the generalized symmetric eigenproblem on shared-memory architectures. *Appl. Numer. Math.*, 12:377–389, 1993.

[250] B. Kågström. How to compute the Jordan normal form — the choice between similarity transformations and methods using the chain relations. Technical Report UMINF-91.81, Department of Numerical Analysis, Institute of Information Processing, University of Umeå, Umeå, Sweden, 1981.

[251] B. Kågström. RGSVD—an algorithm for computing the Kronecker canonical form and reducing subspaces of singular $A - \lambda B$ pencils. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7(1):185–211, 1986.

[252] B. Kågström and A. Ruhe. ALGORITHM 560: An algorithm for the numerical computation of the Jordan normal form of a complex matrix [F2]. *ACM Trans. Math. Software*, 6(3):437–443, 1980.

[253] B. Kågström and A. Ruhe. An algorithm for the numerical computation of the Jordan normal form of a complex matrix. *ACM Trans. Math. Software*, 6(3):389–419, 1980.

[254] B. Kågström and P. Wiberg. Extracting partial canonical structure for large scale eigenvalue problems. Technical Report UMINF-98.13, Department of Computing Science, Umeå University, Umeå, Sweden, 1998. Submitted to *Numerical Algorithms*.

[255] W. Kahan. Accurate eigenvalues of a symmetric tridiagonal matrix. Technical Report CS41, Computer Science Department, Stanford University, Stanford, CA, 1966 (revised June 1968).

[256] W. Kahan, B. N. Parlett, and E. Jiang. Residual bounds on approximate eigensystems of nonnormal matrices. *SIAM J. Numer. Anal.*, 19:470–484, 1982.

[257] T. Kailath and A.H. Sayed, editors. *Fast Reliable Algorithms for Matrices with Structure*. SIAM, Philadelphia, 1999.

[258] W. Karush. An iterative method for finding characteristics vectors of a symmetric matrix. *Pacific J. Math.*, 1:233–248, 1951.

[259] G. Karypis and V. Kumar. Metis, Version 4.0. University of Minnesota/Army HPC Research Center, Mineeapolis, 1998.

[260] H. M. Kim and R. R. Craig, Jr. Structural dynamics analysis using an unsymmetric block Lanczos algorithm. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 26:2305–2318, 1988.

[261] H. M. Kim and R. R. Craig, Jr. Computational enhancement of an unsymmetric block Lanczos algorithm. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 30:1083–1089, 1990.

[262] S. Kim and A. Chronopoulos. An efficient nonsymmetric Lanczos method on parallel vector computers. *J. Comput. Appl. Math.*, 42:357–374, 1992.

[263] D. R. Kincaid, J. R. Respess, D. M. Young, and R. G. Grimes. Algorithm 586 – ITPACK 2C: A Fortran package for solving large sparse linear systems by adaptive accelerated iterative methods. *ACM Trans. Math. Software*, 8(3):302–322, 1982.

[264] A. V. Knyazev. Computation of eigenvalues and eigenvectors for mesh problems: Algorithms and error estimates. Dept. of Numerical Math., USSR Academy of Sciences, Moscow, 1986. (In Russian.)

[265] A. V. Knyazev. Convergence rate estimates for iterative methods for mesh symmetric eigenvalue problem. *Soviet J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 2(5):371–396, 1987.

[266] A. V. Knyazev. A preconditioned conjugate gradient method for eigenvalue problems and its implementation in a subspace. In *International Ser. Numerical Mathematics, v.* 96*, Eigenwertaufgaben in Natur- und Ingenieurwissenschaften und ihre numerische Behandlung, Oberwolfach,* 1990, pages 143–154, Birkhauser, Basel, 1991.

[267] A. V. Knyazev. New estimates for Ritz vectors. *Math. Comp.*, 66(219):985–995, 1997.

[268] A. V. Knyazev. Preconditioned eigensolvers - an oxymoron? *Electron. Trans. Numer. Anal.*, 7:104–123, 1998.

[269] A. V. Knyazev. Toward the optimal preconditioned eigensolver: Locally optimal block preconditioned conjugate gradient method. Technical Report UCD-CCM 149, Center for Computational Mathematics, University of Colorado, Denver, 2000. Available at `http://www-math.cudenver.edu/ccmreports/rep149.ps.gz`.

[270] A. V. Knyazev and A. L. Skorokhodov. Preconditioned iterative methods in subspace for solving linear systems with indefinite coefficient matrices and eigenvalue problems. *Soviet J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 4(4):283–310, 1989.

[271] A. V. Knyazev and A. L. Skorokhodov. The preconditioned gradient-type iterative methods in a subspace for partial generalized symmetric eigenvalue problem. *Soviet Math. Dokl.*, 45(2):474–478, 1993.

[272] A. V. Knyazev and A. L. Skorokhodov. The preconditioned gradient-type iterative methods in a subspace for partial generalized symmetric eigenvalue problem. *SIAM J. Numer. Anal.*, 31(4):1226–1239, 1994.

[273] S. Kobayashi and K. Nomizu. *Foundations of Differential Geometry.* Wiley, New York, 1969.

[274] L. Komzsik. *MSC/NASTRAN Numerical Methods User's Guide, Version* 70.5. The MacNeal-Schwendler Corporation, Los Angeles, 1998.

[275] N. Kosugi. Modification of the Liu-Davidson method for obtaning one or simultaneously several eigensolutions of a large real symmetric matrix. *J. Comput. Phys.*, 55(3):426–436, 1984.

[276] L. Kronecker. *Algebraische Reduction der Schaaren Bilinearer Formen.* S. B. Akad., Berlin, 1890.

[277] V. N. Kublanovskaja. On an application to the solution of the generalized latent value problem for λ-matrices. *SIAM J. Numer. Anal.*, 7:532–537, 1970.

[278] V. N. Kublanovskaya. On a method of solving the complete eigenvalue problem for a degenerate matrix (in Russian). *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.*, 6:611–620, 1966. USSR Comput. Math. Phys., 6(4):1–16, 1968.

[279] V. N. Kublanovskaya. An approach to solving the spectral problem of $A - \lambda B$. In B. Kågström and A. Ruhe, editors, *Matrix Pencils*, Lecture Notes in Mathematics, Vol. 973, pages 17–29. Springer-Verlag, Berlin, 1983.

[280] V. N. Kublanovskaya. AB-algorithm and its modifications for the spectral problem of linear pencils of matrices. *Numer. Math.*, 43:329–342, 1984.

[281] K. Kundert. Sparse matrix techniques. In Albert Ruehli, editor, *Circuit Analysis, Simulation and Design.* North-Holland, Amsterdam, 1986. Software available at `http://www.netlib.org/sparse`.

[282] Yu. A. Kuznetsov. Iterative methods in subspaces for eigenvalue problems. In A. V. Balakrishinan, A. A. Dorodnitsyn, and J. L. Lions, editors, *Vistas in Applied Math., Numerical Analysis, Atmospheric Sciences, Immunology*, pages 96–113. Optimization Software, New York, 1986.

[283] Y.-L. Lai, K.-Y. Lin, and W.-W. Lin. An inexact inverse iteration for large sparse eigenvalue problems. *Numer. Linear Algebra Appl.*, 4:425–437, 1997.

[284] P. Lancaster. *Lambda-Matrices and Vibrating Systems.* Pergamon Press, Oxford, UK, 1966.

[285] C. Lanczos. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 45:255–282, 1950.

[286] C. Lanczos. Solution of systems of linear equations by minimized iterations. *J. Res. Nat. Bur. Standards*, 49:33–53, 1952.

[287] A. Laub. Invariant subspace methods for the numerical solution of Riccati equations. In S. Bittanti A. Laub, and J. C. Willems, editors, *Riccati Equations.* Springer-Verlag, New York, 1990.

[288] C. Lawson, R. Hanson, D. Kincaid, and F. Krogh. Basic linear algebra subprograms for FORTRAN usage. *ACM Trans. Math. Software*, 5:308–325, 1979.

[289] R. B. Lehoucq. *Analysis and Implementation of an Implicitly Restarted Arnoldi Iteration.* Ph.D. thesis, Rice University, Houston, TX, 1995.

[290] R. B. Lehoucq and K. J. Maschhoff. Implementation of an implicitly restarted block Arnoldi method. Preprint MCS-P649-0297, Argonne National Laboratory, Argonne, IL, 1997.

[291] R. B. Lehoucq and K. Meerbergen. Using generalized Cayley transformations within an inexact rational Krylov sequence method. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20(1):131–148, 1998.

[292] R. B. Lehoucq and J. A. Scott. An evaluation of software for computing eigenvalues of sparse nonsymmetric matrices. Technical Report MCS-P547-1195, Argonne National Laboratory, Argonne, IL, 1995.

[293] R. B. Lehoucq and J. A. Scott. Implicitly restarted Arnoldi methods and eigenvalues of the discretized Navier-Stokes equations. Technical Report SAND97-2712J, Sandia National Laboratory, Albuquerque, NM, 1997.

[294] R. B. Lehoucq and D. C. Sorensen. Deflation techniques within an implicitly restarted Arnoldi iteration. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 17:789–821, 1996.

[295] R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen, and C. Yang. *ARPACK Users' Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems with Implicitly Restarted Arnoldi Methods.* SIAM, Phildelphia, 1998.

[296] A. S. Lewis and M. L. Overton. Eigenvalue optimization. In A. Iserles, editor, *Acta Numerica, Volume* 5, pages 149–190. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1996.

[297] C.-K. Li and R. Mathias. The Lidskii-Mirsky-Wielandt theorem – additive and multiplicative versions. *Numer. Math.*, 81:377–413, 1999.

[298] H. Li, P. Aitchison, and A. Woodbury. Methods for overcoming breakdown problems in the unsymmetric Lanczos reduction method. *Internat. J. Numer. Methods Engrg.*, 42:389–408, 1998.

[299] R.-C. Li. On perturbations of matrix pencils with real spectra. *Math. Comp.*, 62:231–265, 1994.

[300] R.-C. Li. Relative perturbation theory III: More bounds on eigenvalue variation. *Linear Algebra Appl.*, 266:337–345, 1997.

[301] R. C. Li. Relative perturbation theory I: Eigenvalue and singular value variations. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 19:956–982, 1998.

[302] R. C. Li. Relative perturbation theory II: Eigenspace and singular subspace variations. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20:471–492, 1999.

[303] R. C. Li. Relative perturbation theory IV: $\sin 2\theta$ theorems. *Linear Algebra Appl.*, 311:45–60, 2000.

[304] T.-Y. Li and Z. Zeng. The Laguerre iteration in solving the symmetric tridiagonal eigenproblem, revisited. *SIAM J. Sci. Comput.*, 15:1145–1173, 1994.

[305] T.-Y. Li and Z. Zeng. Homotopy continuation algorithm for the real nonsymmetric eigenproblem: Further development and implementation. *SIAM J. Sci. Comput.*, 20:1627–1651, 1999.

[306] X. S. Li and J. W. Demmel. A scalable sparse direct solver using static pivoting. In *Proceedings of the Ninth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, SIAM, Philadelphia, 1999. Software available at `http://www.nersc.gov/~xiaoye/SuperLU`.

[307] W.-W. Lin, V. Mehrmann, and H. Xu. Canonical forms for Hamiltonian and symplectic matrices and pencils. *Linear Algebra Appl.*, 301/303:469–533, 1999.

[308] R. Lucas. Private communication, 2000. Contact `rflucas@lbl.gov`.

[309] S. H. Lui and G. H. Golub. Homotopy method for the numerical solution of the eigenvalue problem of self-adjoint partial differential operators. *Numer. Algorithms*, 10(3-4):363–378, 1995.

[310] S. H. Lui, H. B. Keller, and T. W. C. Kwok. Homotopy method for the large, sparse, real nonsymmetric eigenvalue problem. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 18(2):312–333, 1997.

[311] J.-C. Luo. Solving eigenvalue problems by implicit decomposition. *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 7(2):113–145, 1991.

[312] J.-C. Luo. A domain decomposition method for eigenvalue problems. In *Fifth International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations* (*Norfolk, VA*, 1991), pages 306–321. SIAM, Philadelphia, 1992.

[313] N. Mackey. Hamilton and Jacobi meet again - quaternions and the eigenvalue problem. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 16:421–435, 1995.

[314] S. Yu. Maliassov. On the Schwarz alternating method for eigenvalue problems. *Russian J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 13(1):45–56, 1998.

[315] J. Mandel and S. McCormick. A multilevel variational method for $A\mathbf{u} = \lambda B\mathbf{u}$ on composite grids. *J. Comput. Phys.*, 80(2):442–452, 1989.

[316] T. Manteuffel. The Tchebyshev iteration for nonsymmetric linear systems. *Numer. Math.*, 28:307–327, 1977.

[317] R. Mathias. Accurate eigensystem computations by Jacobi methods. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 16:977–1003, 1995.

[318] The MathWorks. *Partial Differential Equation Toolbox User's Guide*, The MathWorks, Natick, MA, 1995.

[319] The MathWorks. *MATLAB User's Guide*, The MathWorks, Natick, MA, 1996.

[320] S. F. McCormick. A mesh refinement method for $Ax = \lambda Bx$. *Math. Comp.*, 36(154):485–498, 1981.

[321] S. F. McCormick. *Multilevel Projection Methods for Partial Differential Equations*. SIAM, Philadelphia, 1992.

[322] K. Meerbergen. The rational Lanczos method for Hermitian eigenvalue problems. Technical Report RAL-TR-1999-025, Rutherford Appleton Laboratory, Chilton, UK, 1999. Available at `http://www.numerical.rl.ac.uk/reports/reports.html`.

[323] K. Meerbergen and D. Roose. The restarted Arnoldi method applied to iterative linear system solvers for the computation of rightmost eigenvalues. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 18:1–20, 1997.

[324] K. Meerbergen, A. Spence, and D. Roose. Shift-invert and Cayley transforms for detection of rightmost eigenvalues of nonsymmetric matrices. *BIT*, 34:409–423, 1994.

[325] V. Mehrmann and D. Watkins. Structure-preserving methods for computing eigenpairs of large sparse skew-Hamiltonian/Hamiltonian pencils. Technical Report SFB393/00-02, Technische Universitaet Chemnitz, Germany, 2000.

[326] J. Meijerink and H. A. van der Vorst. An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M-matrix. *Math. Comp.*, 31:148–162, 1977.

[327] G. Meurant. *Computer solution of large linear systems.* North-Holland, Amsterdam, 1999.

[328] C. B. Moler and G. W. Stewart. An algorithm for generalized matrix eigenvalue problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 10:241–256, 1973.

[329] R. B. Morgan. Davidson's method and preconditioning for generalized eigenvalue problems. *J. Comput. Phys.*, 89:241–245, 1990.

[330] R. B. Morgan. Theory for preconditioning eigenvalue problems. In *Proceedings of the Copper Mountain Conference on Iterative Methods*, 1990.

[331] R. B. Morgan. Computing interior eigenvalues of large matrices. *Linear Algebra Appl.*, 154/156:289–309, 1991.

[332] R. B. Morgan. Generalisations of Davidson's method for computing eigenvalues of large nonsymmetric matrices. *J. Comput. Phys.*, 101:287–291, 1992.

[333] R. B. Morgan. On restarting the Arnoldi method for large nonsymmetric eigenvalue problems. *Math. Comp.*, 65:1213–1230, 1996.

[334] R. B. Morgan. Implicitly restarted GMRES and Arnoldi methods for nonsymmetric systems of equations. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 21:1112–1135, 2000.

[335] R. B. Morgan and D. S. Scott. Generalizations of Davidson's method for computing eigenvalues of sparse symmetric matrices. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7:817–825, 1986.

[336] R. B. Morgan and D. S. Scott. Preconditioning the Lanczos algorithm for sparse symmetric eigenvalue problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 14:585–593, 1993.

[337] R. B. Morgan and M. Zeng. Harmonic projection methods for large non-symmetric eigenvalue problems. *Numer. Linear Algebra Appl.*, 5:33–55, 1998.

[338] S. G. Nash and A. Sofer. *Linear and Nonlinear Programming.* McGraw-Hill, New York, 1995.

[339] E. G. Ng and B. W. Peyton. Block sparse Cholesky algorithms on advanced uniprocessor computers. *SIAM J. Sci. Comput.*, 14(5):1034–1056, 1993.

[340] B. Nour-Omid, B. N. Parlett, T. Ericsson, and P. S. Jensen. How to implement the spectral transformation. *Math. Comp.*, 48:663–673, 1987.

[341] S. Oliveira. A convergence proof of an iterative subspace method for eigenvalues problems. In *Foundations of Computational Mathematics* (*Rio de Janeiro*, 1997), pages 316–325. Springer-Verlag, Berlin, 1997.

[342] S. Oliveira. On the convergence rate of a preconditioned subspace eigensolver. *Computing*, 63(3):219–231, 1999.

[343] W. E. Olmstead, W. E. Davis, S. H. Rosenblat, and W. L. Kath. Bifurcation with memory. *SIAM J. Appl. Math.*, 40:171–188, 1986.

[344] J. Olsen, P. Jørgensen, and J. Simons. Passing the one-billion limit in full configuration-interaction (FCI) calculations. *Chem. Phys. Lett.*, 169:463–472, 1990.

[345] T.C. Oppe, W. Joubert, and D. Kincaid. NSPCG's user's guide: A package for solving large linear systems by various iterative methods. Technical report, University of Texas, Austin, TX, 1988.

[346] E. E. Osborne. On pre-conditioning of matrices. *J. Assoc. Comput. Mach.*, 7:338–345, 1960.

[347] C. C. Paige. *The Computation of Eigenvalues and Eigenvectors of Very Large Sparse Matrices.* Ph.D. thesis, London University, London, England, 1971.

[348] C. C. Paige. Properties of numerical algorithms related to computing controllability. *IEEE Trans. Automat. Control*, AC-26(1):130–138, 1981.

[349] C. C. Paige, B. N. Parlett, and H. A. van der Vorst. Approximate solutions and eigenvalue bounds from Krylov subspaces. *Numer. Linear Algebra Appl.*, 2:115–133, 1995.

[350] C. C. Paige and M. A. Saunders. Solution of sparse indefinite systems of linear equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 12:617–629, 1975.

[351] C. C. Paige and M. A. Saunders. LSQR: An algorithm for sparse linear equations and sparse least squares. *ACM Trans. Math. Software*, 8:43–71, 1982.

[352] C. C. Paige and C. F. Van Loan. A Schur decomposition for Hamiltonian matrices. *Linear Algebra Appl.*, 14:11–32, 1981.

[353] B. N. Parlett. *The Symmetric Eigenvalue Problem.* Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1980. Reprinted as Classics in Applied Mathematics 20, SIAM, Philadelphia, 1997.

[354] B. N. Parlett. Reduction to tridiagonal form and minimal realizations. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 13(2):567–593, 1992.

[355] B. N. Parlett. The new qd algorithms. In *Acta Numerica*, pages 459–491. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1995.

[356] B. N. Parlett. Invariant subspaces for tightly clustered eigenvalues of tridiagonals. *BIT*, 36:542–562, 1996.

[357] B. N. Parlett and H. C. Chen. Use of indefinite pencils for computing damped natural modes. *Linear Algebra Appl.*, 140:53–88, 1990.

[358] B. N. Parlett and I. S. Dhillon. Fernando's solution to Wilkinson's problem: an application of double factorization. *Linear Algebra Appl.*, 267:247–279, 1997.

[359] B. N. Parlett and J. Le. Forward instability of tridiagonal QR. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 14:279–316, 1993. 316.

[360] B. N. Parlett and O. A. Marques. An implementation of the dqds algorithm (positive case). *Linear Algebra Appl.*, 309:217–259, 2000.

[361] B. N. Parlett and C. Reinsch. Balancing a matrix for calculation of eigenvalues and eigenvectors. *Numer. Math.*, 13:293–304, 1969.

[362] B. N. Parlett and Y. Saad. Complex shift and invert strategies for real matrices. *Linear Algebra Appl.*, 88/89:575–595, 1987.

[363] B. N. Parlett and D. Scott. The Lanczos algorithm with selective orthogonalization. *Math. Comput.*, 33:217–238, 1979.

[364] B. N. Parlett, D. R. Taylor, and Z. S. Liu. A look-ahead Lanczos algorithm for nonsymmetric matrices. *Math. Comp.*, 44:105–124, 1985.

[365] W. V. Petryshyn. On the eigenvalue problem $Tu - \lambda Su = 0$ with unbounded and non-symmetric operators T and S. *Philos. Trans. Roy. Soc. Math. Phys. Sci.*, 262:413–458, 1968.

[366] B. G. Pfrommer, J. Demmel, and H. Simon. Unconstrained energy functionals for electronic structure calculations. *J. Comput. Phys.*, 150(1):287–298, 1999.

[367] A. Pokrzywa. On perturbations and the equivalence orbit of a matrix pencil. *Linear Algebra Appl.*, 82:99–121, 1986.

[368] E. Polak. *Computational Methods in Optimization.* Academic Press, New York, 1971.

[369] C. Pommerell. *Solution of Large Unsymmetric Systems of Linear Equations.* Ph.D. thesis, Swiss Federal Institute of Technology, Zürich, Switzerland, 1992.

[370] E. Rothberg. *Exploiting the Memory Hierarchy in Sequential and Parallel Sparse Cholesky Factorization.* Ph.D. thesis, Dept. of Computer Science, Stanford University, Stanford, CA, 1992.

[371] A. Ruhe. An algorithm for numerical determination of the structure of a general matrix. *BIT*, 10:196–216, 1970.

[372] A. Ruhe. Algorithms for the nonlinear eigenvalue problem. *SIAM J. Numer. Anal.*, 10:674–689, 1973.

[373] A. Ruhe. SOR-methods for the eigenvalue problem with large sparse matrices. *Math. Comp.*, 28:695–710, 1974.

[374] A. Ruhe. Iterative eigenvalue algorithms based on convergent splittings. *J. Comput. Phys.*, 19:110–120, 1975.

[375] A. Ruhe. Implementation aspects of band Lanczos algorithms for computation of eigenvalues of large sparse symmetric matrices. *Math. Comp.*, 33:680–687, 1979.

[376] A. Ruhe. The rational Krylov algorithm for nonsymmetric eigenvalue problems, III: Complex shifts for real matrices. *BIT*, 34:165–176, 1994.

[377] A. Ruhe. Eigenvalue algorithms with several factorizations – a unified theory yet? Technical Report 1998:11, Department of Mathematics, Chalmers University of Technology, Göteborg, Sweden, 1998.

[378] A. Ruhe. Rational Krylov: A practical algorithm for large sparse nonsymmetric matrix pencils. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(5):1535–1551, 1998.

[379] A. Ruhe and D. Skoogh. Rational Krylov algorithms for eigenvalue computation and model reduction. In B. Kågström, J. Dongarra, E. Elmroth, and J. Waśniewski, editors, *Applied Parallel Computing. Large Scale Scientific and Industrial Problems.*, volume 1541 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 491–502, 1998.

[380] A. Ruhe and T. Wiberg. The method of conjugate gradients used in inverse iteration. *BIT*, 12:543–554, 1972.

[381] H. Rutishauser. Computational aspects of F. L. Bauer's simultaneous iteration method. *Numer. Math.*, 13:4–13, 1969.

[382] H. Rutishauser. Simultaneous iteration method for symmetric matrices. *Numer. Math.*, 16:205–223, 1970. Also in [458, pp. 284–301].

[383] Y. Saad. Chebyshev acceleration techniques for solving nonsymmetric eigenvalue problems. *Math. Comp.*, 42(166):567–588, 1984.

[384] Y. Saad. Least squares polynomials in the complex plane and their use for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 24(1):155–169, 1987.

[385] Y. Saad. Numerical solution of large nonsymmetric eigenvalue problems. *Comp. Phys. Comm.*, 53:71–90, 1989.

[386] Y. Saad. SPARSKIT: A basic tool-kit for sparse matrix computation, version 2, 1994. Software available at `http://www.cs.umn.edu/~saad`

[387] Y. Saad. *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems.* Halsted Press, New York, 1992.

[388] Y. Saad. *Iterative Methods for Linear Systems.* PWS Publishing, Boston, 1996.

[389] Y. Saad and M. H. Schultz. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7:856–869, 1986.

[390] M. Sadkane. Block-Arnoldi and Davidson methods for unsymmetric large eigenvalue problems. *Numer. Math.*, 64:195–211, 1993.

[391] M. Sadkane. A block Arnoldi-Chebyshev method for computing the leading eigenpairs of large sparse unsymmetric matrices. *Numer. Math.*, 64:181–193, 1993.

[392] A. H. Sameh and J. A. Wisniewski. A trace minimization algorithm for the generalized eigenvalue problem. *SIAM J. Numer. Anal.*, 19:1243–1259, 1982.

[393] B. A. Samokish. The steepest descent method for an eigenvalue problem with semi-bounded operators. *Izv. Vuzov Math.*, 5:105–114, 1958. (In Russian.)

[394] G. V. Savinov. Investigation of the convergence of a generalized method of conjugate gradients for determining the extremal eigenvalues of a matrix. *Zap. Nauchn. Sem. Leningrad. Otdel. Mat. Inst. Steklov. (LOMI)*, 111:145–150, 1981. (In Russian.)

[395] O. Schenk, K. Gärtner, and W. Fichtner. Efficient sparse LU factorization with left–right looking strategy on shared memory multiprocessors. *BIT*, 40(1):158–176, 2000.

[396] W. H. A. Schilders. Personal communication, September 1997.

[397] D. S. Scott. Solving sparse symmetric generalised eigenvalue problems without factorisation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 18:102–110, 1981.

[398] J. A. Scott. An Arnoldi code for computing selected eigenvalues of sparse unsymmetric matrices. *ACM Trans. Math. Software*, 21:432–475, 1995.

[399] N. S. Sehmi. A Newtonian procedure for the solution of the Kron characteristic value problem. *J. Sound Vibration*, 100(3):409–421, 1985.

[400] N. S. Sehmi. *Large order structural eigenanalysis techniques.* Ellis Horwood Series: Mathematics and Its Applications. Ellis Horwood, Chichester, UK, 1989.

[401] V. A. Shishov. A method for partitioning a high order matrix into blocks in order to find its eigenvalues. *USSR Comput. Math. and Math. Phys.*, 1(1):186–190, 1961.

[402] H. Simon. Analysis of the symmetric Lanczos algorithm with reorthogonalization methods. *Linear Algebra Appl.*, 61:101–132, 1984.

[403] H. Simon. The Lanczos algorithm with partial reorthogonalization. *Math. Comp.*, 42:115–142, 1984.

[404] A. Simpson and B. Tabarrok. On Kron's eigenvalue procedure and related methods of frequency analysis. *Quart. J. Mech. Appl. Math.*, 21:1–39, 1968.

[405] J. P. Singh, W.-D. Webber, and A. Gupta. Splash. Stanford parallel applications for shared-memory. *Computer Architecture News*, 20(1):5–44, 1992. Software available at `http://www-flash.stanford.edu/apps/SPLASH`.

[406] I. Slapnicar. *Accurate Symmetric Reduction by a Jacobi Method.* Ph.D. thesis, Fernuniversität Gesamthochschule Hagen, Germany, 1992.

[407] I. Slapnicar. Accurate computation of singular values and eigenvalues of symmetric matrices. *Math. Commun.*, 1:153–168, 1996.

[408] G. L. G. Sleijpen, G. L. Booten, D. R. Fokkema, and H. A. van der Vorst. Jacobi Davidson type methods for generalized eigenproblems and polynomial eigenproblems. *BIT*, 36:595–633, 1996.

[409] G. L. G. Sleijpen and D. R. Fokkema. Bi-CGSTAB(ℓ) methods for linear equations involving matrices with complex spectrum. *Electron. Trans. Numer. Anal.*, 1:11–32, 1993.

[410] G. L. G. Sleijpen, D. R. Fokkema, and H. A van der Vorst. BiCGSTAB(ℓ) and other hybrid Bi-CG methods. *Numer. Algorithms*, 7:75–109, 1994.

[411] G. L. G. Sleijpen and H. A. van der Vorst. A Jacobi–Davidson iteration method for linear eigenvalue problems. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 17:401–425, 1996.

[412] G. L. G. Sleijpen, H. A. van der Vorst, and E. Meijerink. Efficient expansion of subspaces in the Jacobi-Davidson method for standard and generalized eigenproblems. *Electron. Trans. Numer. Anal.*, 7:75–89, 1998.

[413] G. L. G. Sleijpen, H. A. van der Vorst, and M. B. van Gijzen. Quadratic eigenproblems are no problem. *SIAM News*, 29:8–9, 1996.

[414] P. Smit and M. H. C. Paardekooper. The effects of inexact linear solvers in algorithms for symmetric eigenvalue problems. *Linear Algebra Appl.*, 287:337–357, 1998.

[415] B. F. Smith, P. E. Bjørstad, and W. D. Gropp. *Domain decomposition.* Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1996.

[416] S. T. Smith. Optimization techniques on Riemannian manifolds. *Fields Inst. Commun.*, 3:113–146, 1994.

[417] E. Snapper and R. Troyer. *Metric Affine Geometry.* Academic Press, New York, 1971.

[418] P. Sonneveld. CGS: A fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 10:36–52, 1989.

[419] D. C. Sorensen. Implicit application of polynomial filters in a k-step Arnoldi method. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 13:357–385, 1992.

[420] D. C. Sorensen. Deflation for implicitly restarted Arnoldi methods. Technical Report TR98-12, Department of Computational and Applied Mathematics, Rice University, Houston, TX, 1998.

[421] A. Stathopoulos, Y. Saad, and K. Wu. Dynamic thick restarting of the Davidson, and the implicitly restarted Arnoldi methods. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19:227–245, 1998.

[422] G. W. Stewart. Simultaneous iteration for computing invariant subspaces of non-Hermitian matrices. *Numer. Math.*, 25:123–136, 1976.

[423] G. W. Stewart. Perturbation bounds for the definite generalized eigenvalue problem. *Linear Algebra Appl.*, 23:69–86, 1979.

[424] G. W. Stewart. Computing the CS decomposition of a partitioned orthogonal matrix. *Numer. Math.*, 40:297–306, 1982.

[425] G. W. Stewart and J.-G. Sun. *Matrix Perturbation Theory.* Academic Press, New York, 1990.

[426] W. J. Stewart and A. Jennings. Algorithm 570: LOPSI a simultaneous iteration method for real matrices. *ACM Trans. Math. Software*, 7:230–232, 1981.

[427] W. J. Stewart and A. Jennings. A simultaneous iteration algorithm for real matrices. *ACM Trans. Math. Software*, 7:184–198, 1981.

[428] I. Štich, R. Car, M. Parrinello, and S. Baroni. Conjugate gradient minimization of the energy functional: A new method for electronic structure calculation. *Phys. Rev. B.*, 39:4997–5004, 1989.

[429] E. Suetomi and H. Sekimoto. Conjugate gradient like methods and their application to eigenvalue problems for neutron diffusion equation. *Annals of Nuclear Energy*, 18(4):205, 1991.

[430] J.-G. Sun. Perturbation bounds for eigenspaces of a definite matrix pair. *Numer. Math.*, 41:321–343, 1983.

[431] J. G. Sun. Stability and accuracy: Perturbation analysis of algebraic eigenproblems. Technical Report UMINF 98.07, Department of Computing Science, Umeå University, Umeå, Sweden, 1998.

[432] J. G. Sun. Perturbation analysis of quadratic eigenvalue problems. *BIT*, 1999, submitted.

[433] D. B. Szyld and O. B. Widlund. Applications of conjugate gradient type methods to eigenvalue calculations. In *Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations*, III (*Proc. Third IMACS Internat. Sympos., Lehigh Univ., Bethlehem, Pa.*, 1979), pages 167–173. IMACS, New Brunswick, NJ, 1979.

[434] D. R. Taylor. *Analysis of the Look-Ahead Lanczos Algorithm.* Ph.D. thesis, University of California, Berkeley, 1982.

[435] F. Tisseur. Backward error and condition of polynomial eigenvalue problems. *Linear Algebra Appl.*, 309:339–361, 2000.

[436] F. Tisseur. Stability of structured Hamiltonian eigensolvers. Numerical Analysis Report No. 357, Manchester Centre for Computational Mathematics, Manchester, UK, February 2000.

[437] F. Tisseur and N. J. Higham. Structured pseudospectra for polynomial eigenvalue problems, with applications. Numerical Analysis Report No. 359, Manchester Centre for Computational Mathematics, Manchester, UK, 2000.

[438] S. Toledo. Improving instruction-level parallelism in sparse matrix-vector multiplication using reordering, blocking, and prefetching. In *Proceedings of the Eighth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing.* SIAM, Philadelphia, 1997.

[439] S. Toledo. Improving the memory-system performance of sparse-matrix vector multiplication. *IBM J. Res. Develop.*, 41(6):711–726, 1997.

[440] L. N. Trefethen. Computation of pseudospectra. In A. Iserles, editor, *Acta Numerica*, Volume 8, pages 247–295. Cambridge University Press, Cambridge, MA, 1999.

[441] L. N. Trefethen. Spectra and pseudospectra: The behavior of non-normal matrices and operators. In J. Levesley, M. Ainsworth, and M. Marletta, editors, *The Graduate Student's Guide to Numerical Analysis*, Volume 26. Springer-Verlag, Berlin, 2000.

[442] C. Trefftz, C. C. Huang, P. K. Mckinley, T.-Y. Li, and Z. Zeng. A scalable eigenvalue solver for symmetric tridiagonal matrices. *Parallel Computing*, 21:1213–1240, 1995.

[443] H. van der Veen and C. Vuik. Bi-Lanczos with partial orthogonalization. *Computers and Structures*, 56:605–613, 1995.

[444] H. A. van der Vorst. A generalized Lanczos scheme. *Math. Comp.*, 39:559–561, 1982.

[445] H. A. van der Vorst. Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of non-symmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 13:631–644, 1992.

[446] P. Van Dooren. The computation of Kronecker's canonical form of a singular pencil. *Linear Algebra Appl.*, 27:103–141, 1979.

[447] P. Van Dooren. The generalized eigenstructure problem in linear system theory. *IEEE Trans. Automat. Control*, AC-26(1):111–129, 1981.

[448] P. Van Dooren. A generalized eigenvalue approach for solving Ricatti equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2:121–135, 1981.

[449] P. Van Dooren. Algorithm 590, DUSBSP and EXCHQZ: FORTRAN subroutines for computing deflating subspaces with specified spectrum. *ACM Trans. Math. Software*, 8:376–382, 1982.

[450] P. Van Dooren. Reducing subspaces: Computational aspects and applications in linear systems theory. In *Proceedings of the* 5*th Int. Conf. on Analysis and Optimization of Systems*, 1982, Lecture Notes on Control and Information Sciences. Volume 44. Springer-Verlag, New York, 1983.

[451] P. Van Dooren. Reducing subspaces: Definitions, properties and algorithms. In B. Kågström and A. Ruhe, editors, *Matrix Pencils*, Lecture Notes in Mathematics, Volume 973, pages 58–73. Springer-Verlag, Berlin, 1983.

[452] C. F. Van Loan. A symplectic method for approximating all the eigenvalues of a Hamiltonian matrix. *Linear Algebra Appl.*, 61:233–251, 1984.

[453] C. F. Van Loan. *Computational Frameworks for the Fast Fourier Transform.* SIAM, Philadelphia, 1992.

[454] E. L. Wachspress. *Iterative solution of elliptic systems, and applications to the neutron diffusion equations of reactor physics.* Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1966.

[455] H. F. Walker. Implementation of the GMRES method using Householder transformations. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 9:152–163, 1988.

[456] W. Waterhouse. The codimension of singular matrix pairs. *Linear Algebra Appl.*, 57:227–245, 1984.

[457] J. H. Wilkinson. *The Algebraic Eigenvalue Problem.* Clarendon Press, Oxford, UK, 1965.

[458] J. H. Wilkinson and C. Reinsch. *Handbook for Automatic Computation. Vol.* II, *Linear Algebra.* Springer-Verlag, New York, 1971.

[459] Y.-C. Wong. Differential geometry of Grassmann manifolds. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, 57:589–594, 1967.

[460] M. Wonham. *Linear Multivariable Control Theory: A Geometric Approach.* Springer-Verlag, New York, second edition, 1979.

[461] K. Wu, Y. Saad, and A. Stathopoulos. Inexact Newton preconditioning techniques for eigenvalue problems. Technical Report Technical Report LBNL-41382, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA, 1998. Also published as Minnesota Super Computer Centre report number UMSI 98-10, Minneapolis.

[462] K. Wu and H. D. Simon. A parallel Lanczos method for symmetric generalized eigenvalue problems. Technical Report LBNL-41284, National Energy Research Scientific Computing Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA, 1997. Software available at `http://www.nersc.gov/research/SIMON/planso.html`.

[463] K. Wu and H. D. Simon. Dynamic restarting schemes for eigenvalue problems. Technical Report LBNL-42982, National Energy Research Scientific Computing Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA, 1999.

[464] H. Yang. Conjugate gradient methods for the Rayleigh quotient minimization of generalized eigenvalue problems. *Computing*, 51(1):79–94, 1993.

[465] Q. Ye. A breakdown-free variation of the nonsymmetric Lanczos algorithms. *Math. Comp.*, 62:179–207, 1994.

[466] H. Zha and H. Simon. On updating problems in latent semantic indexing. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21:782–791, 1999.

[467] H. Zha and Z. Zhang. On matrices with low-rank-plus-shift structures: partial SVD and latent semantic indexing. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 21:522–280, 1999.

[468] T. Zhang, G. H. Golub, and K. H. Law. Subspace iterative methods for eigenvalue problems. *Linear Algebra Appl.*, 294(1-3):239–258, 1999.

[469] T. Zhang, K. H. Law, and G. H. Golub. On the homotopy method for perturbed symmetric generalized eigenvalue problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(5):1625–1645, 1998.

[470] S. Zhou and H. Dai. *Dai Shu Te Zheng Zhi Fan Wen Ti (The Algebraic Inverse Eigenvalue Problems).* Henan Science and Technology Press, Zhengzhou, China, 1991. (In Chinese.)

[471] Z. Zlatev, J. Waśniewski, P. C. Hansen, and Tz. Ostromsky. PARASPAR: A package for the solution of large linear algebraic equations on parallel computers with shared memory. Technical Report 95-10, Technical University of Denmark, Lyngby, September 1995.

[472] P. I. Davies, N. J. Higham, and F. Tisseur. Analysis of the Cholesky Method with Iterative Refinement for Solving the Symmetric Definite Generalized Eigenproblem. Manchester Centre for Computational Mathematics, Manchester, England, Numerical Analysis Report 360, 2000.

[473] D. J. Higham and N. J. Higham. Structured backward error and condition of generalized eigenvalue problems. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20:493–512, 1998.