Der FEAST-Algorithmus

Eigenpaarfilterung am Beispiel des
FEAST-Algorithmus

Thorsten Matthias Lucke
Betreuer

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science

Department Name
Technische Universität Berlin
4. April 2017

Dedicatio

For anyone.

Declaratio

Hiermit erkläre ich, dass ich alles von Wikipedia abgeschrieben habe, so wie sich das gehört für eine großartige arbeit.

Recognitio

Thanks to anyone.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Introductio

Das Lösen von Eigenwertproblemen ist eine Standarddisziplin in der numerischen linearen Algebra. Gleichungen der Gestalt

$$Ax = \lambda Bx \tag{1.1}$$

begegnet man in ganz unterschiedlichen Kontexten. So sind sie beispielsweise bei der Bestimmung von Eigenfrequenzen oder dem Ermitteln von Fixpunkten beim Rotieren eines Fußballs[1] ebenso wie beim Untersuchen des PageRanks einer Website von Bedeutung. Entsprechend strotz der Kanon von angebotenen numerischen Lösungsmethoden von Vielfalt und Virtuosität.

Nun mag der Fall eintreten, da es notwendig wird, lediglich eine Teilmenge aus der Menge aller Eigenpaare zu untersuchen.
Geeignetes Beispiel finden.

Wie soll nun aber der eifrige Numeriker die gewünschte Menge an Eigenpaaren finden?

Man könnte zunächst versuchen sämtliche Eigenpaare zu berechnen, die das Problem hergibt und händisch die gewünschte Teilmenge auswählen. Bei einem Problem dieser Größenordnung dürfte der Rechenknecht allerdings eine ordentliche Weile beschäftigt sein und das Leben ist fürwahr zu knapp, um auf das Terminieren von Algorithmen zu warten.

Viel eleganter lässt sich dieses Problem mit einem Verfahren lösen, welches in dem von *Eric Polizzi* geschriebenen Paper „Density-matrix-based algorithm for solving eigenvalue problems“ [Pol09] vorgestellt wird. Speziell ist dieser mit *FEAST* abgekürzte Algorithmus darauf ausgelegt, Probleme der Art (1.1) für eine hermitesche Matrix A und eine hermite-

[1] Hier wird auf den bekannten *Satz vom Fußball* angespielt. Dieser besagt, dass auf einem Fußball zwei Punkte existieren, die zu Spielbeginn und zur Halbzeit an der gleichen Stelle liegen – informell formuliert.

sche, positiv definite Matrix B zu lösen.[2]

Die vorliegende Arbeit wird die grundlegenden mathematischen Ideen dieses Algorithmus' vorstellen. Es werden Möglichkeiten der Implementation präsentiert und neben einer naiven Implementation in *MATLAB* auch effizientere Umsetzungen besprochen – etwa vermöge der von *Mario Berljafa* und *Stefan Güttel* entwickelten „*Rational Krylov Toolbox for MATLAB*" [Ber16].

1.1 Grundlagen

Um das Lesen dieser Arbeit mehr zu einer Freude denn zu einer Schikane zu machen, soll dieser Abschnitt einige Grundlagen der linearen Algebra und der Funktionentheorie bereitstellen. Obschon sich der Autor bemüht hat, in der Literatur gängige Notation zu benutzen, bittet er den verständnissvollen Leser bei Unklarheiten im Anhang „Notationen" nachzuschlagen.

Den Anfang machen Definitionen und Resultaten aus der Matrizentheorie. Eine Matrix $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ wird als *hermitesch* bezeichnet, falls sie die Identität $A = A^H$ erfüllt. Sie ist *positiv definit*, sofern für alle Vektoren $x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ die Abschätzung

$$x^H Ax > 0$$

gilt. Folglich werden wir eine Matrix *hermitesch positiv definit (HPD)* nennen, wenn sie sowohl hermitesch als auch positiv definit ist.

Ist A eine solche HPD-Matrix und sind $x, y \in \mathbb{C}^n$, so werden wir anstelle von $x^H Ay$ die Notation $\langle x, y\rangle_A$ verwenden. Im Falle $A = I_n$ schreiben wir kurz $\langle x, y\rangle$.

[2]Die Definitionen dieser Begriffe werden im anschließenden Abschnitt wiederholt.

Kapitel 2

Mal sehen

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Nam dui ligula, fringilla a, euismod sodales, sollicitudin vel, wisi. Morbi auctor lorem non justo. Nam lacus libero, pretium at, lobortis vitae, ultricies et, tellus. Donec aliquet, tortor sed accumsan bibendum, erat ligula aliquet magna, vitae ornare odio metus a mi. Morbi ac orci et nisl hendrerit mollis. Suspendisse ut massa. Cras nec ante. Pellentesque a nulla. Cum sociis natoque penatibus et magnis dis parturient montes, nascetur ridiculus mus. Aliquam tincidunt urna. Nulla ullamcorper vestibulum turpis. Pellentesque cursus luctus mauris.

Nulla malesuada porttitor diam. Donec felis erat, congue non, volutpat at, tincidunt tristique, libero. Vivamus viverra fermentum felis. Donec nonummy pellentesque ante. Phasellus adipiscing semper elit. Proin fermentum massa ac quam. Sed diam turpis, molestie vitae, placerat a, molestie nec, leo. Maecenas lacinia. Nam ipsum ligula, eleifend at, accumsan nec, suscipit a, ipsum. Morbi blandit ligula feugiat magna. Nunc eleifend consequat lorem. Sed lacinia nulla vitae enim. Pellentesque tincidunt purus vel magna. Integer non enim. Praesent euismod nunc eu purus. Donec bibendum quam in tellus. Nullam cursus pulvinar lectus. Donec et mi. Nam vulputate metus eu enim. Vestibulum pellentesque felis eu massa.

Quisque ullamcorper placerat ipsum. Cras nibh. Morbi vel justo vitae lacus tincidunt ultrices. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. In hac habitasse platea dic-

tumst. Integer tempus convallis augue. Etiam facilisis. Nunc elementum fermentum wisi. Aenean placerat. Ut imperdiet, enim sed gravida sollicitudin, felis odio placerat quam, ac pulvinar elit purus eget enim. Nunc vitae tortor. Proin tempus nibh sit amet nisl. Vivamus quis tortor vitae risus porta vehicula.
[Bar15] [Lie13]

Kapitel 3

Conclusio

Finale

Anhang A

yolo

Sed commodo posuere pede. Mauris ut est. Ut quis purus. Sed ac odio. Sed vehicula hendrerit sem. Duis non odio. Morbi ut dui. Sed accumsan risus eget odio. In hac habitasse platea dictumst. Pellentesque non elit. Fusce sed justo eu urna porta tincidunt. Mauris felis odio, sollicitudin sed, volutpat a, ornare ac, erat. Morbi quis dolor. Donec pellentesque, erat ac sagittis semper, nunc dui lobortis purus, quis congue purus metus ultricies tellus. Proin et quam. Class aptent taciti sociosqu ad litora torquent per conubia nostra, per inceptos hymenaeos. Praesent sapien turpis, fermentum vel, eleifend faucibus, vehicula eu, lacus.

Literatur

[Bar15] Marc van Barel. “Designing rational filter functions for solving eigenvalue problems by contour integration.” In: (2015).

[Ber16] Mario Berljafa. “Rational Krylov Toolbox for MATLAB.” In: (2016).

[Lie13] Jörg Liesen. *Krylov Subspace Methods. Principles and Analysis.* 2013.

[Pol09] Eric Polizzi. “Density-matrix-based algorithm for solving eigenvalue problems.” In: (2009).