arXiv:2302.00355v1 [math.NA] 1 Feb 2023

改变离散内积时修改正交多项式与有理函数递推关系的算法

Marc Van Barel[a]、Niel Van Buggenhout[b,*]、Raf Vandebril[a]

[a]计算机科学系，鲁汶大学，鲁汶大学，*Celestijnenlaan 200A*，鲁汶，*3001*，比利时[b]
数学与物理学院，查理大学，*Sokolovsk´a 83*，布拉格，*186 75*，捷克共和国

摘要

通常，我们需要关于特定内积正交的多项式或有理函数。在实际数值算法中，并不构造这些多项式，而是计算相应的递推关系。此外，内积通常也会改为离散内积，即在特定节点处对加权函数求值后所得的有限和。对于某些应用而言，若能在向内积中添加或从中移除节点时，高效地更新递推关系，将十分有益。构造递推关系等价于计算具有指定谱性质的结构化矩阵（多项式情形）或矩阵束（有理函数情形）。因此，这一问题通常被称为求解逆特征值问题。在 Van Buggenhout 等人（2022年）的研究中，我们提出了在向内积中添加节点并高效更新递推关系的方法。为完善这项研究，本文将介绍在从内积中移除节点时高效降阶更新递推关系的方法。我们利用移除节点 与通过 *QR* 算法消去特征值 之间的联系，开发高效算法。我们将以完美移位策略为基础，分别针对多项式情形和有理函数情形开发算法

*通讯作者电子邮箱：marc.vanbarel@kuleuven.be（Marc Van Barel）、buggenhout@karlin.mff.cuni.cz（Niel Van Buggenhout）、raf.vandebril@kuleuven.be（Raf Vandebril）

投稿至《应用数值数学》的预印本 *2023*年*2*月*2*日

。数值实验验证了我们的方法。

关键词：正交有理函数、正交多项式、降阶、离散内积、QR 算法、完美移位策略

---

1. 引言

给定节点 $z_i \in \mathbb{C}$ 和权重 $w_i \in \mathbb{C}$，考虑以下有限离散内积：

$$\langle f, g \rangle_m := \sum_{i=1}^{m} |w_i|^2 \overline{g(z_i)} f(z_i). \tag{1}$$

本文将研究一列相对于该内积正交的多项式或具有指定极点的有理函数。这列正交函数由一个递推关系刻画，其中递推系数可汇集为一个矩阵：对于正交多项式，该矩阵为 Hessenberg矩阵，见 Bultheel 和 Van Barel（1997）；对于标准正交有理函数，则为海森堡铅笔，见 Van Buggenhout 等（2022）。构造一列相对于半正定内积正交的多项式或有理函数的方法，基于对相应递推矩阵或递推铅笔进行操作。通过不断添加节点，直至内积中的所有节点均已添加，从而计算该 Hessenberg矩阵或海森堡铅笔的方法（即更新问题），等价于求解一个逆特征值问题。对于标准正交多项式，当节点 z_i 为实数时，Gragg 和 Harrod（1984）提出了这样一种计算雅可比矩阵（即厄米特海森堡矩阵）的方法。这一算法可追溯至 Rutishauser（1963），其速度比处理一般节点 z_i 的方法快一个数量级。Reichel（1991）利用这一方法求解多项式最小二乘问题，其依据是解可以通过投影到一列与给定数据正交的多项式上而得到。当节点位于单位圆 $z_i \in \mathbb{C}$ 上时，可以构造另一种高效算法，得到酉海森堡矩阵，而非雅可比矩阵，见 Ammar 和 He（1995）；Ammar 等（1991）；Reichel 等（1991）。关于逆特征值问题的综述，参见 Boley 和 Golub（1987）。这些方法后来推广到了标准正交多项式向量，见 Bultheel 和 Van Barel（1995）；Van Barel 和 Bultheel（1995,

1994年，1992年，2001年）。对于具有指定极点的正交有理函数，近期有人提出了一种更新过程，其依据是将递推关系表示为海森堡铅笔，见 Van Buggenhout 等（2022）；Delvaux 和 Van Barel（2005）；Bultheel 等（2004，1999）。

除了向内积中添加节点，我们也可以移除节点，这称为降阶问题。由于其本质，降阶问题更难以数值稳定的方式处理，参见 Elhay 等（1991）。关于节点 z_i 位于单位圆上的正交多项式降阶问题，参见 Ammar 等（1992）。Mastronardi 和 Van Dooren（2018）关于从 Hessenberg矩阵中消去已知特征值的一项近期成果，为正交多项式提供了一种可靠的降阶过程。我们利用他们的成果，提出一种新颖的正交多项式降阶过程，并将其与另一种 QR 过程进行比较；后者最初由 Ammar 等（1991）针对酉 Hessenberg 矩阵提出。对于标准正交有理函数，我们采用海森堡铅笔表示，并提出上述方法的推广。将 QR 过程推广到海森堡铅笔，便是 Camps 等人（2019）提出的有理 QZ 方法。

本文的组织结构如下。第 2 节定义了关于离散内积的正交多项式和有理函数的逆特征值问题，以及降阶问题。对于多项式情形，需要构造一个满足特定谱性质的 Hessenberg矩阵；而对于有理情形，则需要构造一个 Hessenberg矩阵束。第 4 节基于第 3 节给出的理论，提出了三种解决多项式情形下降阶问题的方法。针对 Hessenberg矩阵的 RQ 算法，文中给出了隐式方法和显式方法（隐式矩阵方法和显式矩阵方法）。第三种方法基于与需要消去的特征值（完美位移）对应的特征向量（特征向量方法）。第 5 节通过若干数值实验展示了这三种方法。为解决正交有理函数的降阶问题，第 8 节基于第 6 节和第 7 节提出的理论，给出了两种数值方法。第 9 节介绍了数值实验。第 10 节将其应用于一种滑动窗口方案，该方案基于正交有理函数的更新与降阶过程来近似函数，并通过数值实验加以说明。

2. 问题（重新）表述

构造关于给定离散内积正交的多项式和有理函数的问题，可以转化为矩阵问题。本文将所有方法建立在相关矩阵问题之上：我们将考察内积中节点的增阶与降阶，如何与递推关系的矩阵或矩阵束的增阶与降阶相联系。

本文始终考虑的内积是有限离散内积:

$$\langle f, g\rangle_m := \sum_{i=1}^{m} |w_i|^2 \overline{g(z_i)} f(z_i), \tag{2}$$

其节点为 $z_i \in \mathbb{C}$，权重为 $w_i \in \mathbb{C}$。将范围限定为此类内积是很自然的，因为连续内积可以通过适当的求积公式近似，从而得到有限离散内积（Gautschi，2004，第90页）。节点和权重的选取当然取决于具体问题，并且可能随问题变化而改变，因此需要所提出的算法来高效地修改递推关系。

2.1. 正交多项式

我们用 $\mathcal{P}$ 表示多项式空间，用 $\mathcal{P}_\ell$ 表示次数不超过 ℓ 的多项式空间。离散标准正交多项式序列 $\{p_\ell\}_{\ell=0}^{m-1}$ 由次数条件 $p_\ell \in \mathcal{P}_\ell \backslash \mathcal{P}_{\ell-1}$ 和标准正交条件 $\langle p_i, p_j\rangle_m = \delta_{i,\ j}$ 表征，其中 $\delta_{i,\ j}$ 为克罗内克δ。

考虑以下逆特征值问题（问题 2.1）：给定特征值和部分特征向量信息，构造一个具有所需特征值和特征向量信息的结构化矩阵（Hessenberg形式）。

问题 2.1 (Hessenberg逆特征值问题 (HIEP))。给定 $Z =$对角矩阵$(z_1, \ldots, z_m)$，$w = \begin{bmatrix} w_1 & \ldots & w_m \end{bmatrix}^\top$，构造 Q，$H_m \in \mathbb{C}^{m\times m}$ 使得

$$ZQ = QH_m, \quad Q^H Q = I, \quad Qe_1 = w/\|w\|, \quad H_m \textit{ has Hessenberg structure.}$$

给定离散内积（2），构造其对应正交多项式的问题就归结为求解问题 2.1，其中特征值等于节点，w_i 则为权重。递推关系矩阵将是Hessenberg矩阵 H_m，参见 Bultheel 和 Van Barel（1997）。对于特定的节点选择，可以对

Hessenberg矩阵施加额外结构。例如，若 $z_i \in \mathbb{R}$，生成的矩阵就是雅可比矩阵；对于模为一的复节点，Hessenberg矩阵将是酉矩阵，参见 Gilewicz 和 Pindor（1997）；Gragg 和 Harrod（1984）；Watkins（1993）。本文讨论一般的无结构Hessenberg情形。

最近，Van Buggenhout 等人（2022年）提出了一种高效求解问题 2.1 的技术：通过逐个增量添加节点，并对现有的递推上 Hessenberg 矩阵进行增阶更新。Hessenberg 矩阵的降阶更新在问题 2.2 中进行了表述，其本质是从 Hessenberg 矩阵的谱中移除一个特征值。

问题 2.2（降阶更新 HIEP）。考虑问题 *2.1* 的解 $H_m \in \mathbb{C}^{m\times m}$，其节点为 $Z = diag（z_1、……、z_m）$，以及一个包含权重 $w = \begin{bmatrix} w_1 & \dots & w_m \end{bmatrix}^\top$ 的向量。给定一个节点 $\tilde{z} \in \{z_i\}_{i=1}^m$，不失一般性地假设 $\tilde{z} = z_j$。将新的节点矩阵记为 $Z = diag\ (\{z_i\}_{i=1,\ i\neq j}^m)$，并令 $\tilde{w} = \begin{bmatrix} w_1 & \dots w_{j-1} & w_{j+1} & \dots w_m \end{bmatrix}^\top$。求 *Hessenberg* 矩阵 $\tilde{H}_{m-1} \in \mathbb{C}^{(m-1)\times(m-1)}$，使得

$$\tilde{Z}\tilde{Q} = \tilde{Q}\tilde{H}_{m-1}, \quad \tilde{Q}^H\tilde{Q} = I \quad and \quad \tilde{Q}e_1 = \tilde{w}/\|\tilde{w}\|_2.$$

问题 2.2 的解，即 Hessenberg 矩阵 H_{m-1}，是满足内积条件的一列正交多项式的递推矩阵 $\{\tilde{p}_l\}_{l=1}^{m-1}$

$$\langle f, g\rangle_\sim := \sum_{i=1, i\neq j}^{m} |w_i|^2 \overline{g(z_i)} f(z_i).$$

用于求解问题 2.1 和问题 2.2 的算法，使我们能够高效地修改递推矩阵，使其与改变后的内积相匹配。需要注意的是，我们所处理的 Hessenberg 矩阵都是正规的。因此，它们可以酉对角化，且只有单特征值。这完全不构成限制，因为我们在逆特征值问题中考虑的矩阵天然满足这些条件。

2.2. 正交有理函数

有理函数 $r(z) \in \mathcal{R}$ 是两个多项式的比值，

$$r(z) = \frac{p(z)}{q(z)}, \quad p(z), q(z) \in \mathcal{P}.$$

我们关注的是具有指定极点的有理函数。给定一组极点 $\Xi = \{\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_k\}$，其中 $\xi_i \in \mathbb{C}\,(\mathbb{C} = \mathbb{C} \cup \infty)$：

$$r(z) = \frac{p(z)}{\pi(z)}, \quad p(z) \in \mathcal{P} \text{ and } \pi(z) = \prod_{\substack{i=1 \\ \xi_i \neq \infty}}^{k} (z - \xi_i). \tag{3}$$

由这些有理函数构成的空间记作 $\mathcal{R}^{\Xi}$，这是 $\mathcal{P}/\pi(z)$的简写：有限维空间 $\mathcal{R}_k^{\Xi}$ 定义为 $\text{span}\{1, r_1(z) \ldots, r_k(z)\}$，其中

$$r_\ell(z) = \frac{p_\ell(z)}{\pi_\ell(z;\Xi)}, \quad \pi_\ell(z;\Xi) := \prod_{\substack{i=1 \\ \xi_i \neq \infty}}^{\ell} (z - \xi_i), \quad p_\ell \in \mathcal{P}_\ell \backslash \mathcal{P}_{\ell-1}. \tag{4}$$

对于 $\mathcal{R}_k^{\Xi}$，极点集合 Ξ 必须至少包含 k 个极点 $\xi_i \in \mathbb{C}_\infty$。离散正交有理函数（ORFs）序列$\{r_\ell\}_{\ell=0}^{m-1}$ 由$r_\ell \in \mathcal{R}_\ell^{\Xi} \backslash \mathcal{R}_{\ell-1}^{\Xi}$ 和$\langle r_i, r_j \rangle_m = \delta_{i,j}$刻画。在多项式情形中，正交多项式的递推关系由一个Hessenberg矩阵表示；而在这里，用于生成正交有理函数的递推关系则存储在一个海森堡铅笔中。同样，矩阵束的特征值与内积的节点相关联，而权重则与特征向量的信息相关联；不过，极点是通过矩阵束中Hessenberg矩阵次对角元素的比值得到的。离散正交有理函数的递推关系构造可以表述为一个海森堡铅笔的逆特征值问题，参见 Van Buggenhout 等（2022）。

问题 2.3（上 Hessenberg 铅笔逆特征值问题（HPIEP））。给定 $Z = diag(z_1, \ldots, z_m)$、$w = \begin{bmatrix} w_1 & \ldots & w_m \end{bmatrix}^\top$ 和 $\Xi = \{\xi_1, \ldots, \xi_{m-1}\}$，其中 $\xi_i \in \mathbb{C} \backslash \{z_j\}_{j=1}^m$，构造 Q、$\overline{H}_m$、$K_m \in \mathbb{C}^{m \times m}$，使得 $(H_m$、$K_m)$ 为一个海森堡铅笔，满足如下条件。

$$ZQK_m = QH_m, \quad Q^H Q = I, \quad Qe_1 = w/\|w\|,$$

以及 $h_{i+1,\,i}/k_{i+1,\,i} = \xi_i$，其中 $h_{i,\,j}$ 和 $k_{i,\,j}$ 表示矩阵 H_m 和 K_m的各个元素。

ORF 的降阶问题与正交多项式的降阶类似。节点-权重对 $(\tilde{z},\ \tilde{w})$ 可以从内积 (2) 中移除，也可以

~ ~自由选择的极点 ξ。极点 ξ 可以是任意极点，也就是说，如果 $\tilde{z} = z_j$，那么我们~不必选择 $\xi = \xi_j$。这是因为空间 $\mathcal{R}^{\Xi}$ 的选择与内积 $\langle ., . \rangle_m$ 彼此无关。

问题 2.4 (降阶 HPIEP)。考虑$(H_m, K_m) \in \mathbb{C}^{m\times m} \times \mathbb{C}^{m\times m}$，这是问题 *2.3* 的解，其节点为 $Z = \mathbf{diag}(z_1, \ldots, z_m)$，且有一个包含权重 $w = \begin{bmatrix} w_1 & \ldots & w_m \end{bmatrix}^\top$ 的向量。给定一个节点 $\tilde{z} \in \{z_i\}_{i=1}^m$，不失一般性，假设 ~ ~$\tilde{z} = z_j$，再给定一个极点 $\xi \in \Xi$，假设该极点为 $\xi = \xi_\ell$。~将新的节点矩阵记为 $Z =$**diag**$(\{z_i\}_{i=1, i\neq j}^m)$，权重记为 $\tilde{w} = \begin{bmatrix} w_1 & \ldots w_{j-1} & w_{j+1} & \ldots w_m \end{bmatrix}^\top$，极点集合记为 $\tilde{\Xi} = \{\xi_1, \ldots, \xi_{\ell-1}, \xi_{\ell+1}, \ldots, \xi_{m-1}\}$。求海森堡铅笔$(\tilde{H}_{m-1}, \tilde{K}_{m-1}) \in \mathbb{C}^{(m-1)\times(m-1)} \times \mathbb{C}^{(m-1)\times(m-1)}$，使得

$$\tilde{Z}\tilde{Q}\tilde{K}_{m-1} = \tilde{Q}\tilde{H}_{m-1}, \quad \tilde{Q}^H\tilde{Q} = I, \quad \tilde{Q}e_1 = \tilde{w}/\|\tilde{w}\|_2,$$

~ ~ ~和 $h_{i+1,}$ $_i/k_{i+1,\ i} = \xi_i$。

~ ~由此得到的海森堡矩阵束（H_{m-1}， K_{m-1}）构成了正交有理函数的递推关~ ~系 $\{\tilde{r}_\ell\}_{\ell=0}^{m-2}$，满足 $\tilde{r}_\ell \in \mathcal{R}_\ell^{\Xi} \backslash \mathcal{R}_{\ell-1}^{\Xi}$ 和 $\langle \tilde{r}_i, \tilde{r}_j \rangle_\sim = \delta_{i,\ j}$。需要指出的是，次对角线上的极点顺序并非固定。我们可以在不失一般性的前提下重新排列这些极点；这不会影响递推关系所表示的正交有理函数张成的整个空间，但单个正交有理函数以及子空间当然可能有所不同。还需再次指出，我们所考虑的矩阵束具有特殊形式，称为正规海森堡矩阵束。正如问题 2.3 中所述，它允许进行特殊酉分解。关于正规矩阵束的更多性质，另见 Lemonnier 和 Van Dooren（2006）。

3. 操作 Hessenberg特征值分解

解决这些矩阵问题需要我们对相关 Hessenberg矩阵或矩阵束的特征值分解进行操作。本节介绍适用于 Hessenberg 情形的基本概念和算法。我们使用适当矩阵。适当性意味着递推关系不会中断。换言之：给定指定的内积，我们可以构造一组完整的正交多项式。此外，我们所用的 Hessenberg矩阵在构造时就是正规的，因此可以酉对角化。

在接下来的章节中，我们将说明如何稳定地修改 Hessenberg矩阵，以移除不需要的节点。由此得到一个新的适当矩阵，为修改后的内积提供递推关系。

基本原理如下。我们沿用问题 2.2 中的记号。假设我们有问题 2.1 的一个解，即 $ZQ = QH_m$，其中 Q 是酉矩阵，且 $Qe_1 = w/\|w\|_2$。我们构造酉矩阵 [1] $\hat{Q}$，并对 H_m 执行变换：$\hat{Q}QQ^HZQ\hat{Q}^H = \hat{Q}H_m\hat{Q}^H = \tilde{H}_m$。对 $\hat{Q}QQ^H$ 的行进行若干次置换后，我们可以将该等式写成

$$\begin{bmatrix} 1 & \\ & \tilde{Q}^H \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{z} & \\ & \tilde{Z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \\ & \tilde{Q} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{z} & \\ & \tilde{H}_{m-1} \end{bmatrix}. \tag{5}$$

在实际实现中不会执行该置换；我们只是加入它，以说明置换后的 $\hat{Q}QQ^H$ 具有这样的结构，从而可以轻松消去 Q ； H_m 会自动具有正确的形式。提取末尾的 $(m-1) \times (m-1)$ 主子矩阵，即可得到所需的解 $\tilde{}$，条件是 Q 满足对权重 $\tilde{}$ 向量的要求，也就是说， Q 的第一个向量必须是 $\tilde{w}$ 的倍数。以数值方式执行此操作会带来三项挑战：

1. 式 (5) 必须具有正确的分块形式，即分块对角形式，其中 $\tilde{z}$ 可以被识别并移除。$\tilde{}$2. 矩阵 H_{m-1} 必须为 Hessenberg形式。$\tilde{}$3. 所需的权重向量必须等于 Q的第一列。

*3.1. Hessenberg*矩阵的 *QR* 和 *RQ* 算法

要消去一个特征值，我们将在适当的 Hessenberg矩阵上运行 QR 算法的一个变体。注意，我们假设该 Hessenberg矩阵是正规矩阵，且仅有单特征值。本段描述的是显式 QR 版本。后文将基于定理 3.3讨论另外两种数值特性不同的变体。

定义 3.1（正规 Hessenberg矩阵）。 若 *Hessenberg*矩阵 $H \in \mathbb{C}^{m\times m}$ 的所有次对角线元素均不为零，即$h_{i+1,\,i} \neq 0$ 对 $i = 1$、2、.....、$m-1$均成立，则称其为正规 矩阵。

[1]这里特意将厄米共轭放在另一侧，以便与我们将在后文介绍的 RQ 算法联系起来。

QR 算法是计算中等规模稠密矩阵特征值的首选方法。这是一个迭代过程，每一步都由一个移位决定。与移位最接近的特征值随后会被推至矩阵的右下角，经过足够多次迭代后即可将其移除（消去）。重复这一过程，直到找到所有特征值。

我们不采用带移位的 QR 步，而是采用完美移位 RQ 步。QR 收敛于右下角，RQ 收敛于左上角；而完美移位意味着移位与某个特征值重合。因此，我们可以预期经过单步计算，结果便会收敛到左上角。

对于 Hessenberg矩阵 H，带移位 λ 的 RQ 步 H按如下方式进行：计算 $H-\lambda I=RQ$ 的 RQ 分解，并构造一个新的 Hessenberg˜ 矩阵 $H=QR+\lambda I$。本质上，这是对 H施加 Q的相似变换： $\tilde{H}=\hat{}QH\hat{}Q^H$。对于 Hessenberg矩阵，只需执行一次采用完美移位的 RQ 步，就能得到与该移位（特征值）λ对应的特征向量，这正是降阶算法所需要的。这里讨论的定理及其证明源自 Watkins（1982）；我们重述其中的部分内容，以便在后文进一步运用这些论证。

引理 3.1. 设 $H\in\mathbb{C}^{m\times m}$ 是一个具有互异特征值的正规 *Hessenberg*矩阵，其中一个特征值记为 $\lambda\in\mathbb{C}$。那么， $H-\lambda I$ 的 *RQ*分解中出现的 Q 的第一行ˆ揭示了对应于 λ 的特征向量。

证明。 移位后的 Hessenberg矩阵 $H-\lambda I$ 是奇异的。因此，RQ分解中的上三角矩阵 $R\in\mathbb{C}^{m\times m}$

$$H-\lambda I=\hat{R}\hat{Q}$$

也必定是奇异的，因此，对角线元素 $r_{i,i}$ 必须满足$r_{i,i}=0$，其中 i 取某个值。由于 $H-\lambda I$ 是 Hessenberg矩阵，其最后 $m-1$ 行线性无关。又由于酉矩阵 Q 的各行也线性无关,因此 R 中对应的各行也必定线性无关。由此可知，唯一的可能是 $r_{1,1}=0$。 □

由引理 3.1 可知，采用完美位移执行单次 RQ 步可得到如下分解

$$H-\lambda I=\begin{bmatrix}0 & \times\\ & \hat{R}_{m-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{q}^H\\ \hat{Q}_{m-1}\end{bmatrix} \tag{6}$$

其中 $\hat{}\ Q_{m-1}^H \hat{} Q_{m-1} = I$、$\hat{} Q_{m-1} \hat{} q = 0$ 和 $H \hat{} q = \lambda \hat{} q$。符号 $\times$ 表示一些任意的非关键元素，在此处即为一个行向量。最后一个等式表明，$\hat{} q$ 是与特征值 λ 对应的 H 的右特征向量。

$\hat{}$ $\hat{}$**定理 3.2 (**利用完美移位 RQ 隔离特征值**)**。设 R, Q 是对仅具有单特征值的正规 H 施加 ***RQ*** 步后得到的因子，其中该矩阵以其一个特征值 λ 作为移位。则酉相似变换 $\hat{} QH \hat{} Q^H$ 可隔离特征值 λ，从而实现降阶。

证明。此证明出自 Watkins（1982）的论文。设 Q, Z 是正规矩阵 H 的特征值分解因子，即 $H = Q^H ZQ, Q^H Q = I$ 和 $Z =$diag$(\{z_i\})$。根据引理 3.1，更确切地说，根据式 (6)，有 $\hat{} q = q_j$，其中 j 为某个值。现在，利用特征向量的正交性可得

$$\begin{aligned} \hat{q}^H Q^H &= \hat{q}^H \begin{bmatrix} | & & | & | & | & & | \\ q_1 & \cdots & q_{j-1} & q_j & q_{j+1} & \cdots & q_m \\ | & & | & | & | & & | \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & \ldots & 0 & \alpha & 0 & \ldots & 0 \end{bmatrix} \\ &= \alpha e_j^\top, \end{aligned}$$

其中 $\alpha = \hat{} q^H q_j \neq 0$。采用上述记号：$\hat{}\ Q := \begin{bmatrix} q^H \\ \hat{} Q_{m-1} \end{bmatrix} \hat{}$，可得

$$\begin{aligned} \hat{Q}_{m-1} Q^H &= \hat{Q}_{m-1} \begin{bmatrix} | & & | & | & | & & | \\ q_1 & \cdots & q_{j-1} & q_j & q_{j+1} & \cdots & q_m \\ | & & | & | & | & & | \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} | & & | & | & | & & | \\ \times & \ldots & \times & 0 & \times & \ldots & \times \\ | & & | & | & | & & | \end{bmatrix} \end{aligned}$$

这就分离出了与特征向量 $\hat{} q$ 对应的特征值 λ：

$$\hat{Q} H \hat{Q}^H = \hat{Q} Q^H Z Q \hat{Q}^H = \begin{bmatrix} \lambda & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \widetilde{H}_{m-1} \end{bmatrix}, \tag{7}$$

其中，$\widetilde{H}_{m-1} \in \mathbb{C}^{(m-1)\times(m-1)}$ 是一个谱为 $\sigma(H)\backslash\{\lambda\}$的不可约海森堡矩阵。由于矩阵 R 和 Q的结构，矩阵 H_{m-1} 必须是不可约的；也就是说，R 的末尾 $m-1$个对角线元素必须非零，并且 Q 也具有适当的海森堡形式。 □

将交换第 j 行和第1行的置换 P 代入公式7，可得:

$$(\hat{Q}Q^HP)(PZP)(PQ\hat{Q}^H) = \begin{bmatrix} 1 & \\ & \tilde{Q}^H \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{z} & \\ & \tilde{Z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \\ & \tilde{Q} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \widetilde{H}_{m-1} \end{bmatrix},$$

这样，我们就可以消去所需的子矩阵，从而得到问题 2.2 的解。

我们注意到，后一个定理比公式 6 中直接得出的结果更强，因为上面一行也为零。同样值得注意的是，矩阵 Q 的结构也很重要，我们后面还会用到这一点。当 H 是一个适当的 Hessenberg矩阵时，QR 分解中的 Q 因子也将是适当的 Hessenberg矩阵。在计算 RQ 分解时，不难验证酉因子 Q 也将是上 Hessenberg。

3.2. 为什么选择 *RQ* 算法而不是 *QR* 算法

对适当的 Hessenberg矩阵H_m 应用完美移位的 QR 步时，完美位移 $\tilde{z}$ 将出现在位置（m, m）。假设 Hessen- berg 矩阵 H_m 是问题 2.1 的一个解，即 $H_m = Q^HZQ$ ，并且我们希望在执行这一步 QR 步后得到问题 2.2 的一个解。假设 QR 算法的相似变换由 $\hat{Q}$ 确定。我们得到如下形式:

$$\hat{Q}^HH_m\hat{Q} = \begin{bmatrix} \widetilde{H}_{m-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \tilde{z} \end{bmatrix}.$$

$\hat{}$ 经过此变换后，新的特征向量矩阵等于 QQ ，可以通过消去来获得降阶问题的解。$\hat{}$ 然而，考虑到矩阵 Q 是上 Hessenberg 矩阵，我们发现第一列不再满足权重条件:

$$\hat{Q}^HQ^Hw = \hat{Q}^H\|w\|_2e_1 = \begin{bmatrix} \times & \times & & & & \\ \times & \times & \times & & & \\ \times & \times & \times & \times & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \times \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times \\ \times \\ \times \\ \vdots \\ \times \\ \times \end{bmatrix}.$$

因此，权重条件不再成立，而且所得的 Hessenberg $\tilde{}$矩阵（降阶后） H_{m-1} 不是降阶 IEP 的解，正如

Ammar 等（1992）所指出的那样。不过，如果改用 RQ分解，ˆ ˆ ˆ则 $H_m - \tilde{z}I = RQ$ 中的酉因子 Q 再次成为上 Hessenberg。现在，用于从 H_m 中分离特征值 $\tilde{z}$ 的酉相似变换略有不同，厄米共轭的位置有所变化。我们得到：

$$\hat{Q}H\hat{Q}^H = \begin{bmatrix} \tilde{z} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \widetilde{H}_{m-1} \end{bmatrix},$$

~ ~其中， H_{m-1} 仍是一个 Hessenberg矩阵，其谱为 $\sigma(H_{m-1}) = \sigma(H_m) \setminus \{\tilde{z}\}$，因此可能是降阶 IEP 的一个解。我们来看看这种情况下的权重条件。注意，现在我们从右侧将特征基Q 乘以下 Hessenberg 矩阵 ˆ Q^H，因此

$$\hat{Q}Q^H w = \hat{Q}\|w\|_2 e_1 = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & & \times & \times \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \times \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times \\ \times \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{8}$$

将矩阵 ˆ $QH_m\hat{Q}^H$ 消去以得到 $\widetilde{H}_{m-1}$，会省略 ˆ $QQ^H w$的第一个元素，从而得到 $\|\tilde{w}\|_2 e_1$，其中 $e_1 \in \mathbb{C}^{m-1}$。这验证了~ H_{m-1} 是降阶问题的一个解。

3.3. 理论等价陈述

上述完美移位 RQ 步骤可以通过三种不同方式实现，参见 Mastronardi 和 Van Dooren（2018）。这些变体基于定理 3.3。陈述该定理之前，我们首先需要定义一种核心变换。

定义 3.2 (核心变换**)。** 核心变换 $C_i \in \mathbb{C}^{m\times m}$是一种如下形式的酉矩阵

$$C_i = \begin{bmatrix} I_{i-1} & & & \\ & \times & \times & \\ & \times & \times & \\ & & & I_{m-i-1} \end{bmatrix}, \tag{9}$$

其中， I_k 表示大小为 $k \times k$ 的单位矩阵。

核心变换本质上是 2×2 矩阵，因为它们唯一的活动部分是一个 2×2 对角块。 C_i 中的参数 i 表示活动块在对角线上的位置，而 $\mathfrak{C}_i$ 表示所有这类核心变换组成的类。

定理 3.3（Mastronardi 和 Van Dooren（2018）中的定理 2.1）。 设 $H\in\mathbb{C}^{m\times m}$ 为一个适当的*Hessenberg*矩阵，且 $\lambda\in\sigma(H)$ 为互异特征值之一。则有以下结论：

1. H 有一个对应于 λ的归一化特征向量 x

$$Hx=\lambda x,\quad \|x\|_2=1$$

该特征向量在模为一的缩放意义下唯一，且 $e_m^\top x\neq0$。

2. 存在一个本质上唯一的 $\{C_i\}_{i=1}^{m-1}$ 、 $C_i\in\mathfrak{C}_i$ 序列，使其构成矩阵

$$\hat{Q}:=C_1C_2\dots C_{m-1}$$

并将数对（H、 x） 变换为一个相似的数对

$$(\hat{H},\hat{x}):=(\hat{Q}H\hat{Q}^H,\hat{Q}x)$$

with

$$\hat{x}=\alpha e_1,\quad |\alpha|=1,\quad \hat{H}e_1=\lambda e_1\ \textit{and}\ \hat{H}\ \textit{is a Hessenberg matrix.}$$

3. *Hessenberg*矩阵 $H-\lambda I$ 具有*RQ*分解

$$H-\lambda I=\hat{R}\hat{Q},$$

其中， $e_1^\top\hat{}Re_1=0$ 与 $\hat{}$ Q 本质上是同一个矩阵，该矩阵将 x变换为$\hat{}$ x。

该证明由 Mastronardi 和 Van Dooren（2018）提出，完全建立在矩阵结构之上。另一种获得所需结果的方法是考察 Krylov 子空间及其相关的隐式Q定理，这一点在他们的评注中也有提及。对于正交有理函数的降阶，需要一个类似的定理，但其证明将建立在有理Krylov子空间之上。

4. 多项式降阶的数值算法

根据定理 3.3，计算并执行相似变换有三种方案。从数学上看，它们是等价的，但数值表现各不相同。

- 通过 RQ 分解计算 Q ，并利用 Q执行相似变换。这称为显式算法。

- 通过特征向量分解计算 Q ，并利用 Q执行相似变换。本文将其称为特征向量方法。

- 通过 RQ 分解计算第一个核心变换 C_1，再计算其余核心变换以恢复海森堡结构。这称为隐式算法。

许多教科书都介绍了显式和隐式 QR 算法，Watkins（2007）是详尽的参考资料。由 Mastronardi 和 Van Dooren（2018）提出的特征向量方法基于定理 3.3 中的陈述 2，以准确消去某个特定特征值。他们的方法能够更准确地分离给定特征值，前提是特征向量的计算具有足够高的精度。

我们比较三种方法，分别称为显式矩阵方法、特征向量方法和隐式矩阵方法。在第 3 节开头，我们提到了各种数值挑战。这三种算法的表现各不相同，我们通过数值研究来确定哪种方法最适用于降阶情形。

4.1. 显式矩阵方法

Ammar 等（1992）使用显式版本对酉矩阵进行降阶，这种方法相当直接。计算 RQ分解：$\hat{}\,\hat{}H_m - \tilde{z}I = RQ$，在精确算术下可得式 (6)，且定理 3.2 有效。计算降阶矩阵 H_{m-1}，它是 $\hat{}\ QH\hat{}Q^H = \hat{}Q\,\hat{}R + \tilde{z}I$ 的 $(m-1) \times (m-1)$ 末尾主子矩阵。更准确地说，我们得到：

对于 $\tilde{\epsilon}, \epsilon_z$ 和 ϵ_i，其元素的量级为机器精度，

$$\hat{Q}\hat{R} + \tilde{z}I = \begin{bmatrix} \tilde{z}+\epsilon_z & \epsilon_1 & \epsilon_2 & \dots & \epsilon_{m-2} & \epsilon_{m-1} \\ \tilde{\epsilon} & \times & \times & \dots & \times & \times \\ & \times & \times & \dots & \times & \times \\ & & \times & \dots & \times & \times \\ & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & \times & \times \end{bmatrix}. \tag{10}$$

公式 $\hat{Q}\hat{R}$ 优于 $\hat{Q}H_m\hat{Q}^H$，适用于数值计算，因为 $\hat{Q}\hat{R}$ 具有精确的Hessenberg结构，而 $\hat{Q}H_m\hat{Q}^H$ 的第二次对角线上会因舍入误差出现较小的元素。因此，只剩下一个数值问题，即变换后的矩阵缺少块对角结构：我们特意加入了一个 $\tilde{\epsilon}$，以强调数值误差。如果 $\tilde{\epsilon}$ 过大，就会遇到问题，无法将该问题拆分为两个子问题。我们可以通过执行显式 RQ 方法的第二步来解决这个问题；遗憾的是，我们将看到，第二步不仅会使工作量加倍，还会扰动权重向量的目标结构，因此需要付出更多工作才能恢复该结构。所得 Hessenberg矩阵的形式如公式 10 所示，执行变换 Q（其元素为 $\hat{q}_{ij}$）对权重向量的影响如下：

$$\hat{Q}\begin{bmatrix} \|w\|_2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \|w\|_2\,\hat{q}_{1,1} \\ \|w\|_2\,\hat{q}_{2,1} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

如前面公式 8 中所述，这将得到问题 2.2 的预期解，因为消去右下角矩阵时，第一个元素将被省略。

然而，假设公式 10 中的元素 $\tilde{\epsilon}$ 不够小，因此需要再执行一步显式 QR 算法，以减小该元素[2]的大小。为简单起见，我们将额外的

[2]请注意，这通常是实际 QR 算法中的情况。要实现收敛，需要多个步骤。

^^ 相似变换记为由矩阵 Q 执行。将 Q 中的元素记为 $\hat{q}_{ij}$，则有：

$$\hat{\hat{Q}}\hat{Q}\begin{bmatrix}\|w\|_2\\0\\0\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\|w\|_2\,\hat{q}_{1,1}\hat{\hat{q}}_{11}+\|w\|_2\,\hat{q}_{2,1}\hat{\hat{q}}_{12}\\\|w\|_2\,\hat{q}_{1,1}\hat{\hat{q}}_{21}+\|w\|_2\,\hat{q}_{2,1}\hat{\hat{q}}_{22}\\\|w\|_2\,\hat{q}_{2,1}\hat{\hat{q}}_{23}\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix}. \tag{11}$$

如果得到的 Hessenberg 元素足够小，我们就可以消去 Hessenberg矩阵右下角的部分。遗憾的是，消去 (11) 后，右端项中的向量将有两个非零元素，而不是一个。

让我们更仔细地考察这些矩阵的结构。执行两次变换并完成降阶后，我们得到 $\tilde{Q}^H\tilde{Z}\tilde{Q}=\tilde{H}_{m-1}$，但遗憾的是，我们发现 $\tilde{Q}^H\tilde{w}\neq\|\tilde{w}\|_2e_1$。因此，我们需要一个步骤，或另一个酉相似变换 $\tilde{C}$，使得 $\tilde{Q}^H\tilde{Z}\tilde{Q}=C^H\tilde{Q}^H\tilde{Z}\tilde{Q}C=\tilde{H}_{m-1}$，从而$C^H\tilde{Q}^H\tilde{w}=\|\tilde{w}\|_2e_1$。

此过程与 Van Buggenhout 等（2022年）已介绍的海森伯格更新过程非常相似。下面从较高层次概述该算法。向量 $\tilde{Q}^H\tilde{w}$ 有两个首项非零元素。一次旋转 C_1^H 即可将 $\tilde{Q}^H\tilde{w}$ 变换为 e_1的倍数。我们得到 $C_1^H\tilde{Q}^H\tilde{w}=\|\tilde{w}\|_2e_1$。执行相似变换 $C_1^H\tilde{Q}^H\tilde{Z}\tilde{Q}C_1$会扰乱海森堡结构：引入了元素 $\otimes$

$$K_1=C_1^H\tilde{Q}^H\tilde{Z}\tilde{Q}C_1=\begin{bmatrix}\times&\times&\times&\times&\cdots&\times\\\times&\times&\times&\times&\cdots&\times\\\otimes&\times&\times&\times&\cdots&\times\\&&\times&\times&\cdots&\times\\&&&\ddots&&\vdots\end{bmatrix}.$$

酉变换 C_2 被构造为作用于第 2 行和第 3 行，并通过从左侧作用消去 $\otimes$ 元素，即 $C_2^HC_1^H\tilde{Q}^H\tilde{Z}\tilde{Q}C_1$再次呈 Hessenberg 形式。此外，$C_2^HC_1^H\tilde{Q}^H\tilde{w}=\|\tilde{w}\|_2e_1$ 仍然成立，因为 C_2

作用于第 2 行和第 3 行。但是，执行相似变换还要求在矩阵 K_1 的右侧乘以 C_2 。由此得到如下结构

$$K_2 = C_2^H C_1^H \tilde{Q}^H \tilde{Z} \tilde{Q} C_1 C_2 = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \cdots & \times \\ \times & \times & \times & \times & \cdots & \times \\ & \times & \times & \times & \cdots & \times \\ & \otimes & \times & \times & \cdots & \times \\ & & & \ddots & & \vdots \end{bmatrix}.$$

显然，这一过程可以继续，直到用 $\otimes$标记的鼓包从矩阵中滑出。要完全恢复结构，我们需要 $m-2$ 相似变换~。记 $C = C_1 \cdots C_{m-2}$ 和 $H_{m-1} = K_{m-2}$，即可看出我们已经解决了问题 2.2。

4.2. 隐式矩阵方法

为启动隐式方法，我们计算 $H_m - \lambda I$的末行。由于海森堡结构，向量 $e_m^T(H_m - \lambda I) = v^T$ 只有两个非零元素，分别位于 $m-1$ 和 m。为了计算 RQ分解 $H_m - \lambda I$，必须构造一个旋转 $C_{m-1} \in \mathfrak{C}_{m-1}$，使得 $v^T C_{m-1} = \|v\|_2 e_m^T$。

接下来，对 H_m执行与 C_{m-1} 相对应的相似变换。最终得到 $C_{m-1} H_m C_{m-1}^H$。所得矩阵不再严格具有 Hessenberg 形式。它在末行的第二次对角线上受到扰动。

$$\begin{bmatrix} \ddots & & & & & \vdots \\ & \times & \times & \times & \times & \times \\ & & \times & \times & \times & \times \\ & & & \times & \times & \times \\ & & & \otimes & \times & \times \end{bmatrix}.$$

现在，我们的目标是恢复 Hessenberg 矩阵的结构，方法与第 4.1 节类似，但不同之处在于，我们现在向上追赶，而不是向下追赶。定理 3.3 随后证明，恢复 Hessenberg 结构后，我们就执行了一次 RQ 步。根据构造，Hessenberg 矩阵在数值上具有 Hessenberg 形式。因此，唯一的数值问题与显式 QR 方法中的问题相同：非对角元素可能不够小，无法形成块对角结构。不过，我们可以像显式 RQ 情形中那样采用完全相同的技巧，即再执行一步隐式算法，然后恢复权重向量的结构。

4.3. 特征向量方法

Mastronardi 和 Van Dooren（2018）提出了一种替代方法，用于执行完美移位 RQ 步，从而更准确地构造相似变换中所执行的旋转。这使得能够在单步中更准确地分离给定的特征值。回想一下，在显式和隐式算法中，通常需要执行两步，然后再通过一个过程恢复酉变换与权重向量之间的联系。

特征向量方法包括三个步骤。假设我们有一个数$\tilde{z}$，它足够接近矩阵 H_m 的某个特征值（理论上，在我们的设定中它应当是精确的）。第一步是计算单位特征向量x，使得 $(H_m - \tilde{z}I)x$ 足够小，即

$$\|(H_m - \tilde{z}I)x\|_2 \approx \epsilon_{\text{mach}}\|H_m - \tilde{z}I\|_2. \tag{12}$$

在我们的设定中，可以根据递推关系矩阵 H_m 和权重向量 w计算特征向量 x。Golub 和 Welsch（1969）等人描述了矩阵 H_m 的特征向量x 与在相应特征值 $\tilde{z}$ 处求值的正交多项式 $\{p_j\}_{j=0}^{m-1}$ 序列之间的关系。若 $\tilde{z} = z_j$ 且w_j为相应的权重，则 $x = \bar{w}_j \begin{bmatrix} p_0(z_j) & p_1(z_j) \dots & p_{m-1}(z_j) \end{bmatrix}^H$，并且可以通过运行 Hessenberg矩阵 H_m给出的递推关系，在 $z = z_j$ 处计算多项式 $p_j(z)$。之后，如果不满足条件 (12)，更确切地说，我们将使用 $\|(H_m - \tilde{z}I)x\|_2 \leq 3\epsilon_{\text{mach}}\|H_m - \tilde{z}I\|_2$，则可以通过执行若干步迭代改进来提高 x 的精度。第二步使用特征向量 x 来计算满足以下条件的特征向量 $\dot{x}$

$$\left\| \begin{bmatrix} \hat{\epsilon}_1 & \hat{\epsilon}_2 & \dots & \hat{\epsilon}_m \end{bmatrix} \right\|_2 \leq \epsilon_{\text{mach}}\|H_m\|_{\text{F}}, \tag{13}$$

其中 $\hat{\epsilon}_i = \frac{e_i^\top ((H_m - \tilde{z}I)\dot{x})}{\left\| \begin{bmatrix} \dot{x}_{i-1} & \dot{x}_i & \dots & \dot{x}_m \end{bmatrix} \right\|_2}$，并采用约定 $\dot{x}_0 := 0$。(13) 条件是衡量特征向量 $\dot{x}$ 精度的一种方式，它对末尾元素赋予更高的重要性。这是必要的，因为完美 RQ 移位要求特征向量的末尾元素尤其精确。有关详情以及如何获得这样的特征向量，请参阅 Mastronardi 和 Van Dooren（2018）。在第三步，即完美 RQ 步中，执行酉相似变换。通过一系列旋转将特征向量 $\dot{x}$ 变换为 $e_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}^\top$，即计算 $C_i \in \mathfrak{C}_i$，使得

满足 $\prod_{i=m-1}^{1} C_i x = e_1$。令 $\hat{Q} = \prod_{i=1}^{m-1} C_i$，则根据定理 3.3，接下来只需执行带有 Q 的酉相似变换，即可得到

$$\hat{Q} H_m \hat{Q}^H = \begin{bmatrix} \tilde{z} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \widetilde{H}_{m-1} \end{bmatrix}.$$

5. 数值实验

使用三种数值算法求解问题 2.2，并根据四个度量指标对其进行比较。从问题 2.1 的一个解 $(H_m,\ Q)$ 开始，ℓ 节点逐一降阶，每次降阶后得到问题 2.2 的解 H_{m-1}，H_{m-2}、……、$H_{m-\ell}$。四个度量指标衡量 H_{m-k} 表示一列正交多项式的准确程度。为了计算这些度量指标，我们还需要计算每个降阶步骤中的酉矩阵。将这些矩阵记为 Q_{m-1}，Q_{m-2}、……、$Q_{m-\ell}$。需要强调的是，在三种数值算法中均不需要计算 Q 和 Q_{m-k}，它们的唯一用途是计算以下度量指标。记 Z 为经过适当重新定义的节点矩阵，即 Z 其中省略了经过降阶的节点。

1. 正交性误差 用于衡量由 Q_{m-k} 表示的基的正交性：

$$\mathrm{err_o} := \|\tilde{Q}_{m-k}^H \tilde{Q}_{m-k} - I\|_2. \tag{14}$$

2. 递推误差 是衡量矩阵递推关系 H_{m-k} 中递推系数精度的指标：

$$\mathrm{err_r} := \frac{\|\tilde{Z}\tilde{Q}_{m-k} - \tilde{Q}_{m-k}\tilde{H}_{m-k}\|_2}{\max\left(\|\tilde{Z}\tilde{Q}_{m-k}\|_2, \|\tilde{Q}_{m-k}\tilde{H}_{m-k}\|_2\right)}.$$

3. 权重误差 用于比较给定的权重向量 $\tilde{w}/\|\tilde{w}\|_2$ 与权重 $Q_{m-k}e_1$：

$$\mathrm{err_w} := \|\|\tilde{w}\|_2 \tilde{Q}_{m-k} e_1 - \tilde{w}\|_2 \tag{15}$$

4. 节点误差用于量化矩阵的递推关系 H_{m-k} 的特征值与 Z中的对角元素有多接近。设 $\tilde{H}_{m-k}$ 的特征值为 $\{\lambda_j\}_{j=1}^{m-k}$，并按与$e_j^\top \tilde{Z} e_j \approx \lambda_j$对应的顺序排列，则节点误差定义为：

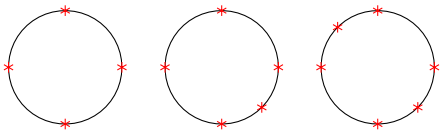
$$\mathrm{err_{node}} = \max_j |e_j^\top \tilde{Z} e_j - \lambda_j|. \tag{16}$$

正交性误差和递推误差分别表明由 Q_{m-k} 和 H_{m-k}表示的正交多项式的质量、其正交性以及递推系数的质量。通过权重误差和节点误差，将 H_{m-k} 和 Q_{m-k}中编码的内积（即以 H_{m-k} 的特征值为节点、以 Q_{m-k}的第一列为权重的离散内积）与由给定节点和权重定义的内积进行比较。

矩阵方法按照第 4 节中的描述实现。对于执行 2 步的矩阵方法，在鼓包追赶过程中被（数值上）消去的元素 $\otimes$ 会被显式置为零。这一点很重要，因为这能保证最终得到的矩阵具有海森堡结构，因此表示一个正交多项式序列。
通过追踪公式12和公式13中的两个条件，可以更详细地研究特征向量方法的行为。本节余下部分将数值算法应用于三个实验。我们将考察以下方法：执行 1 步的显式矩阵方法（$*$）、执行 1 步（$\circ$）和 2 步（$\circ$）的隐式矩阵方法，以及最多进行 n_{IR} 次迭代改进的特征向量方法（$+$）。

5.1. 单位圆

这里重现了 Van Buggenhout 等（2022）在增阶更新逆特征值问题背景下进行的一项实验。考虑在单位圆 $\{z_j\}_{j=1}^{m}$上等距选取的 m个节点；选取时采用平衡方式，即每次都选择一个与其他节点尽可能远的节点。图 11 展示了 $m = 4$、5 和 6 个节点的情形。我们从一个



Fig图 1：在圆上按 m 平衡顺序放置等距节点 $*$，对应 $m = 4$，5 和 6。

可用解 H_m，$Q_m \in \mathbb{C}^{m\times m}$ 是通过对矩阵 diag(z_1，…，z_m) 和向量 $w = \frac{1}{\sqrt{m}}\begin{bmatrix}1 & \dots & 1\end{bmatrix}^{\top}$ 应用 Arnoldi迭代得到的。我们按照~~反~~向平衡顺序逐个删去 $m/2$ 个节点，从而保留单位圆上的 $m/2$ 个等距节点。对于 $m = 500$、$n_{\mathrm{IR}} = 1$，$\sim H_{m-k}$ 的度量指标如图2所示。度量指标 $\mathrm{err}_{\mathrm{node}}$ 在所有方法中都非常相似，表明所有方法对节点的保留效果同样良好。

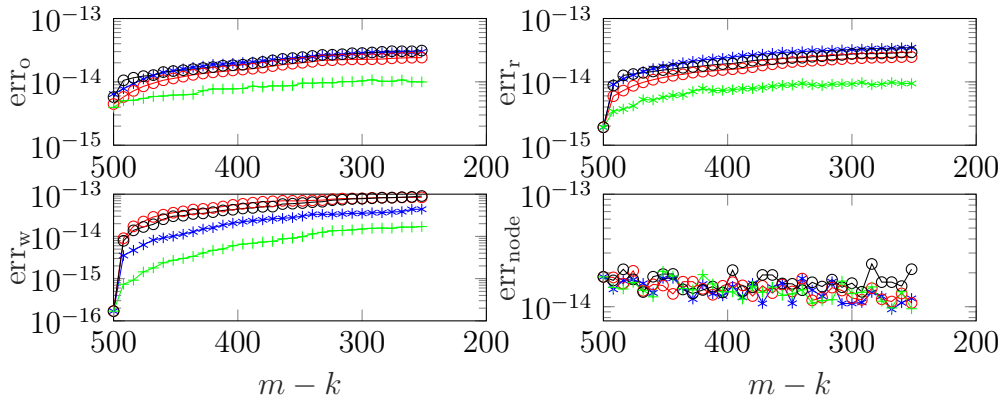


图2：采用 $m = 500$， $n_{\mathrm{IR}} = 1$ 和降阶的平衡顺序进行的单位圆实验。显式矩阵方法的度量指标：$*$，隐式矩阵方法：1步 $\circ$，2步 $\circ$，以及采用$n_{\mathrm{IR}} = 1$的特征向量方法： $+$。

比较其他三个度量指标时，可以清楚地看出，特征向量方法表现最佳。图3左侧显示，给定的特征向量中有一些与满足条件 (12) 相差甚远；然而，对于几乎所有这些给定的特征向量，我们都成功地构造出了满足条件 (13) 的特征向量 $\dot{x}$，如图右侧所示。

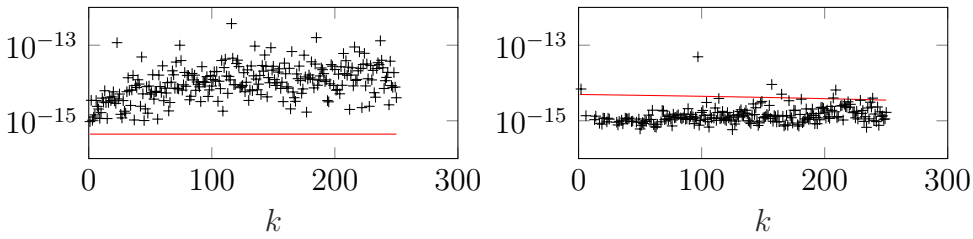


图3：采用 $m = 500$， $n_{\mathrm{IR}} = 1$ 和降阶的平衡顺序进行的单位圆实验。条件(12)和(13)，左侧为 $+$ ，右侧为–。

比较图~2 中所示的度量指标时，两步隐式方法的表现并不优于一步隐式方法。然而，它生成的系数矩阵 $H_{m/2}$ 具有更准确的矩阵性质：也就是说，对于位于单位圆上的节点，所得的海森堡系数矩阵是酉矩阵。在表 1 中，我们比较生成的

矩阵 $\tilde{H}_{m/2}$ 与酉矩阵的接近程度，具体通过量 $\|\tilde{H}_{m/2}^H \tilde{H}_{m/2} - I\|_2$ 来衡量。与执行一步 RQ 步相比，隐式矩阵方法执行两步 RQ 步骤时有明显改进。

	显式	隐式	两步隐式	特征向量
$\|\tilde{H}_{m/2}^H \tilde{H}_{m/2} - I\|_2$	2.79e-14	3。44e-14	1.59e-14	1。63e-14

表 1：度量 $\|\tilde{H}_{m/2}^H \tilde{H}_{m/2} - I\|_2$ 通过四种方法对酉 Hessenberg 矩阵 H_m 的 250 个节点进行降阶后，所得 Hessenberg矩阵 $H_{m/2}$ 的正交性。

5.2. 切比雪夫节点

在接下来的实验中，我们使用一个已知其解析形式的递推矩阵 $H_m \in \mathbb{R}^{m\times m}$。具体而言，对于权重 $w_j = 1, j = 1, \ldots, m$ 和切比雪夫节点 $\{z_j\}_{j=1}^m$（即第一类切比雪夫多项式 $z_j = \cos\left(\frac{\pi(j-1/2)}{m}\right)$ 的根），该矩阵为

$$H_m = \begin{bmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & & & & \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/2 & & & \\ & 1/2 & 0 & 1/2 & & \\ & & 1/2 & 0 & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & 1/2 \\ & & & & 1/2 & 0 \end{bmatrix}.$$

从内积中降阶去除一半的节点。降阶节点有两种选取方式：平衡和不平衡。平衡选择是将 z_j 解释为单位圆上半圆上的一个点的实部，然后按照上述实验所述的相同方式进行降阶。不平衡选择之所以不平衡，是因为单位圆上彼此接近的节点会被连续降阶。

对于 $m = 500$、$n_{\mathrm{IR}} = 1$ 和平衡选择，图4比较了四种方法；同样，特征向量方法表现最佳。

由于所有节点均为实数，所得 Hessenberg矩阵必定是三对角矩阵。在表 2 中，矩阵 $H_{m/2}$ 经过

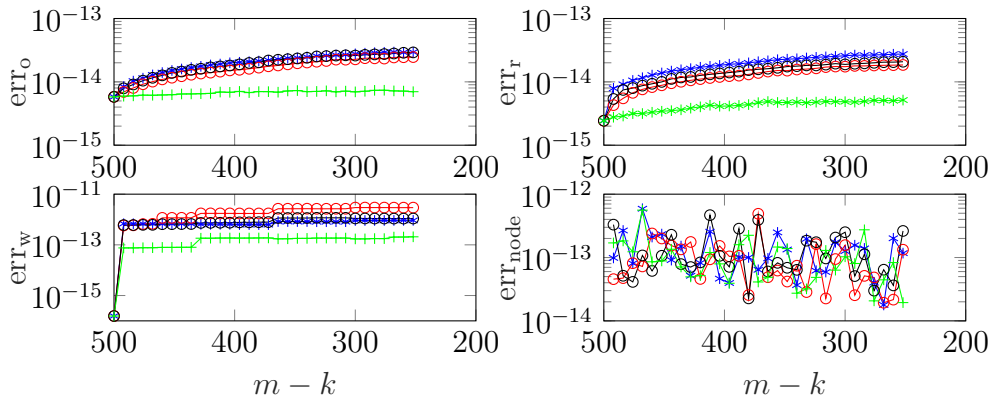


图4：切比雪夫实验，使用 $m = 500$ 和平衡降阶顺序。比较显式矩阵方法的度量指标：$*$、隐式矩阵方法：1 步 $\circ$、2 步 $\circ$，以及特征向量方法（ $n_{\mathrm{IR}} = 1$）： $+$。

	显式	隐式	隐式 2 步	特征向量
$\|\mathtt{triu}(\tilde{H}_{m/2},2)\|_2$	1。46e$-$14	1。40e$-$15	3.69e$-$16	2。13e$-$15

表 2：采用节点的平衡选择进行 $m/2$ 步降阶后的切比雪夫实验，参数为 $m = 500$，降阶后为 $n_{\mathrm{IR}} = 1$ ˜。通过计算矩阵 $H_{m/2}$ 去掉对角线以及第一条次对角线和超对角线后的二范数，展示其接近三对角矩阵的程度。

省略其对角线、第一条次对角线和超对角线，用于量化˜与三对角矩阵的接近程度。H_{m-k} 接近

在下一个实验中，我们选择 $m = 200$、 $n_{\mathrm{IR}} = 1$ 和非平衡顺序。图 5 展示了在 $k = 69$ 处特征向量方法失效，并且在 $k = 57$处度量指标 $\mathrm{err_r}$ 和 $\mathrm{err_w}$出现精度损失。

在图 6 的索引 $k = 57$处，我们看到给定的特征向量仅精确到 10^{-9} ，因此会导致不准确的 $\dot{x}$，不满足 (13)。这会导致特征向量方法在几步之后失效。为了提高给定特征向量 x 的精度，我们允许进行 $n_{\mathrm{IR}} = 2$步迭代改进；特征向量方法的相应量如图 7 所示。现在，初始特征向量的计算精度更高，达到 10^{-11} 或更高，这似乎足以让特征向量方法成功地降阶一半的节点。这意味着，允许更多的迭代改进步数可以提高特征向量方法的稳健性。图 8 所示的度量指标表明，

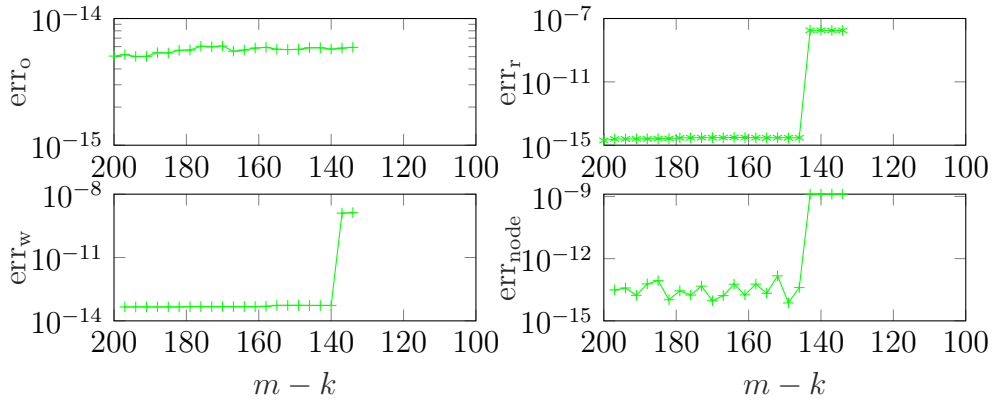


图 5：切比雪夫实验， $m = 200$ 且采用不平衡的降阶顺序。特征向量方法的度量指标为 $n_{\mathrm{IR}} = 1$: $+$。在 $k = 69$ 处发生失效。

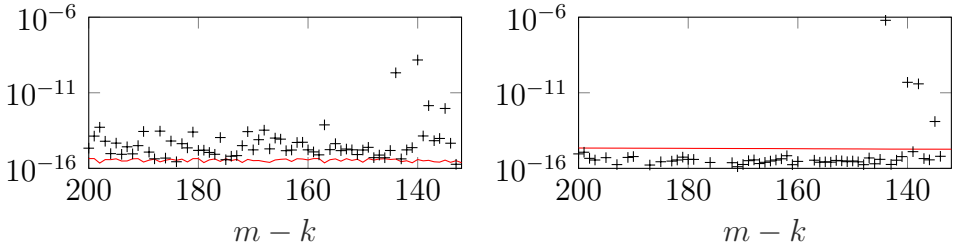


图 6：切比雪夫实验， $m = 200$， $n_{\mathrm{IR}} = 1$ 且采用不平衡的降阶顺序。条件 (12) 和 (13) 中，左侧为 $+$，右侧为 $-$。

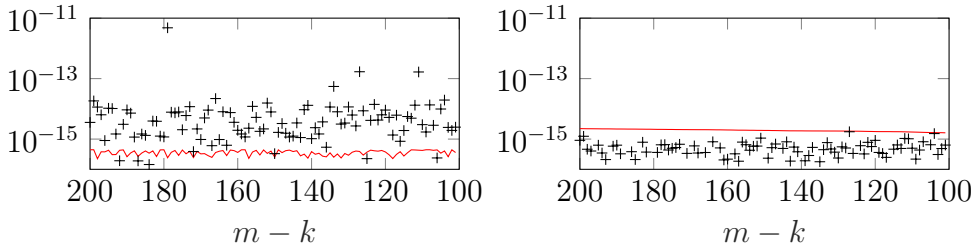


图 7：切比雪夫实验， $m = 200$、 $n_{\mathrm{IR}} = 2$，且采用不平衡的降阶顺序。条件 (12) 和 (13) 中，左侧为 $+$，右侧为 $-$.

特征向量方法仍然是首选方法。

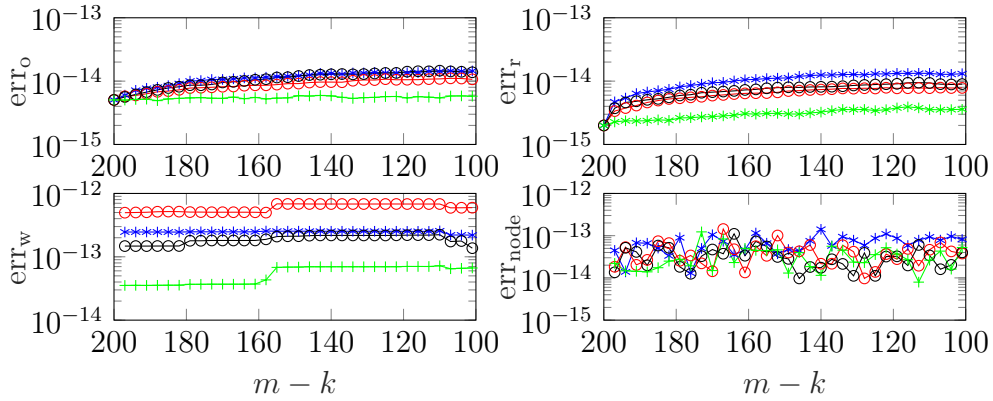


图 8：切比雪夫实验，采用 $m = 200$ 和不平衡的降阶顺序。比较显式矩阵方法的度量指标： $*$，隐式矩阵方法：1 步 $\circ$，2 步 $\circ$，以及特征向量方法（采用 $n_{\mathrm{IR}} = 2$）： $+$。

5.3. 等距点

在许多实际应用中，数据是在等距节点上测得的。对于使用这些数据建立的最小二乘问题，相关内积的节点也是等距的。我们取 m 等距节点 $\{z_j\}_{j=1}^m$，其中$z_j = j/m$，并对 $m/2$ 节点进行降阶。实验设置为 $m = 250$ 和$w = \frac{1}{\sqrt{m}}\begin{bmatrix}1 & \dots & 1\end{bmatrix}^\top$，降阶时选择以下节点：所有偶数索引的节点均按照在剩余索引中最小值与最大值交替的顺序进行降阶，即顺序为：2，m，4，$m-2$，6，$m-4$，..... （这些是初始 m 节点集合中的索引）。为了通过特征向量方法获得足够精确的特征向量，必须允许更多次迭代改进 $n_{\mathrm{IR}} = 10$，并在再次检查条件 (12) 之前执行 $b = 5$ 次迭代细化。对于 $b = 1$，某些特征向量 x的计算精度不足，导致失效。研究这一现象以及如何恰当选择 b 是未来研究的课题，但这表明特征向量方法对给定的特征向量很敏感。图 9 展示了四种降阶方法的度量指标；对于本文采用的度量指标，特征向量方法的结果最佳。不过，必须足够精确地计算给定的特征向量。

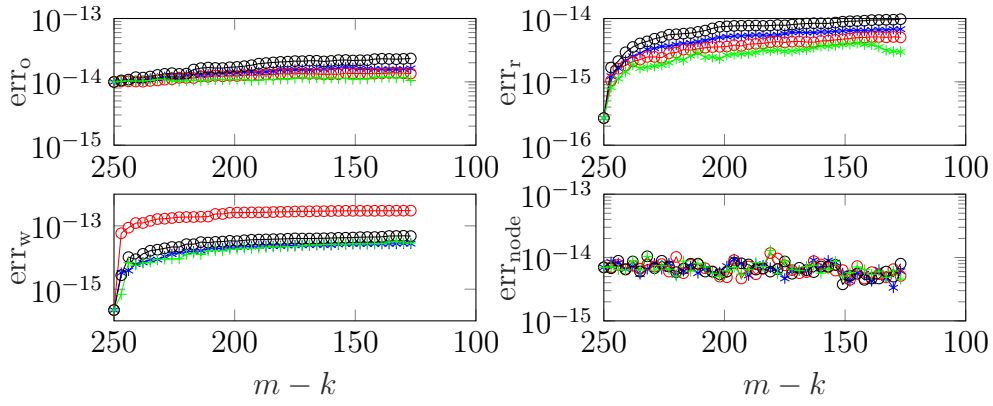


图 9：等距节点实验，其中 $m = 250$。显式矩阵方法的度量指标：$*$，隐式矩阵方法：1 步 $\circ$，2 步 $\circ$，以及特征向量方法，其中，$n_{\mathrm{IR}} = 10$ 和 $b = 5$：$+$。

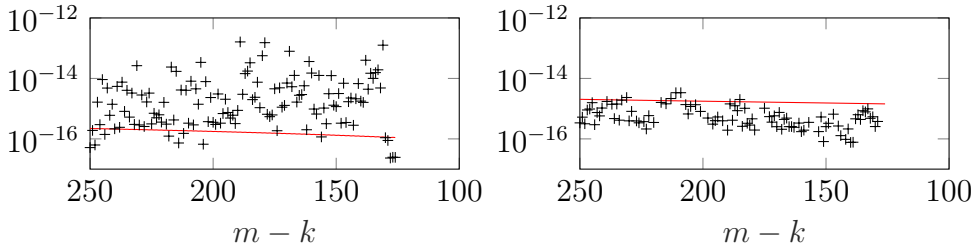


图 10：等距节点实验，其中 $m = 250$，$n_{\mathrm{IR}} = 10$ 和 $b = 5$。条件 (12) 和 (13)，左侧 $+$和右侧 $-$。

6. QR 和 Krylov

在多项式情形下，我们可以利用显式的 RQ (QR) 算法以及相关分解的结构，定位所需的特征向量，并给出关于结构保持的定理。对于有理 RQ (QR) 情形，问题则更为复杂，显式版本也无法直接获得。为了推导关键定理，我们将借助 Krylov 子空间。通常，QR 算法中 Krylov 子空间之间的联系会得到解释，因此本节将遵循经典约定，改用 QR 算法而非 RQ 算法。不过，RQ 与 QR 密切相关：只需将所操作的矩阵上下翻转并左右翻转即可。也就是说，假设我们要对 H执行 RQ 步。考虑上 Hessenberg 矩阵 $F = JH^TJ$，其中 J的

反向恒等式。利用 $F = QR$ 的 QR 分解，我们可以得到 $H =(JR^TJ)$ (JQ^TJ) 的 RQ 分解。因此，我们将在此推导的 QR 理论可直接用于 RQ。

我们首先讨论多项式情形。更多细节可参阅 Watkins 的著作（2008年、1982年、2011年）。假设对 Hessenberg矩阵 H 执行了一次显式 QR 步，即 $\hat{}_H = \hat{}Q^H H\, \hat{}Q$。这给出相关方程 $HQ = QH$；对于不可约 Hessenberg H，该方程与一个 Krylov 子空间 $\mathcal{K}(H,\ q_1)$ 一一对应。更确切地说，Q 的列张成该 Krylov 子空间，并且与执行和显式 QR 算法相关的相似变换时所得的列完全相同。我们有（见 Watkins（2008年））

$$\operatorname{span}\{q_1, \ldots, q_j\} = \mathcal{K}_j(H, q_1), \quad \text{for } j = 1, \ldots, n.$$

由于 $q_1 =(H - \tilde{z}I)e_1$，对于 $j = 1,\ \ldots,\ n$，我们得到：

$$\begin{aligned} \operatorname{span}\{q_1, \ldots, q_j\} &= \mathcal{K}_j(H, (H - \tilde{z}I)e_1) \\ &= (H - \tilde{z}I)\mathcal{K}_j(H, e_1) = (H - \tilde{z}I)\operatorname{span}\{e_1, \ldots, e_j\}. \end{aligned}$$

根据 H 的未约化海森堡结构，我们可以推断，当 $\tilde{z}$ 等于 H 的一个特征值时，特征向量必定为 q_n。考虑到 QR 与 RQ 之间的联系，我们可以看出，在 RQ 算法中，特征向量必须位于顶行。

在 RQZ 算法中，也可以采用类似的策略来定位左特征向量和右特征向量。相关细节、定理和证明可见 Camps 等人（2019）。RQZ 方法对应的显式 QR 方法基于有理 Krylov 子空间。我们需要考虑两个有理 Krylov 子空间，而列向量张成这些 Krylov 子空间的正交矩阵 Q 和 Z 决定了等价变换。可以进行与多项式情形相同的推理：当我们使用一个等于特征值的移位时，可以分别在 Q 和 Z 的最后一列中找到左特征向量和右特征向量。

7. 操作广义特征值分解

假设我们已经解决了问题 2.3，并得到了分解 $ZQK_m = QH_m$。本节将说明如何修改该分解以解决问题 2.4。为此，我们计算两个酉矩阵 R and S，将矩阵束 ($H_m,\ K_m$) 变换为新的矩阵束

$(\hat{H},\ \hat{K}) = (RH_mS^H,\ RK_mS^H)$。由此得到方程

$$Z(QR^H)(RK_mS^H) = (QR^H)(RH_mS^H),$$

或者类似地，在对 Z 进行若干次对角置换并对 QR^H中的行进行[3]后：

$$\begin{bmatrix} \tilde{z} & \\ & \tilde{Z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \\ & \tilde{Q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{k} & \\ & \tilde{K}_{m-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \\ & \tilde{Q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{h} & \\ & \tilde{H}_{m-1} \end{bmatrix},$$

$\tilde{}$ $\tilde{}$其中 $h/k = \tilde{z}$。从该方程中提取右下角（$m-1$）×（$m-1$）块，应能得到降阶问题所需的解。当然，权重的约束也仍需满足。

我们讨论构造 R 和 S这两种变换的方法。一种是基于海森堡铅笔结构的隐式方法，另一种是基于左特征向量和右特征向量的方法。我们不讨论显式方法。

7.1. 海森堡铅笔与有理 *RQ* 方法

正规的 Hessenberg矩阵可推广为正规的 Hessenberg 铅笔，其含义是这里同样不会发生失效。在数学上，我们得到如下定义。

定义 7.1（正规 Hessenberg 铅笔）。 若 ***Hessenberg*** 铅笔 $(H, K) \in \mathbb{C}^{m\times m} \times \mathbb{C}^{m\times m}$ 称为正规，则其所有次对角元素不同时为零，即 $|h_{\ell+1,\ \ell}| + |k_{\ell+1,\ \ell}| \neq 0$ 对于 $\ell = 1$、2、.....、$m-1$。此外， H 和 K 的第一列必须线性无关， H 和 K的最后几行也必须线性无关。

定义 7.2 (正规海森堡铅笔**)**。 若海森堡矩阵束(H, K) 满足 H 和 K 可同时酉对角化，即存在酉矩阵 R和 S，使得 R^HHS和 R^HKS均为对角矩阵，则称其为正规矩阵束。

与多项式情形一样，实现完美移位有理 QZ 步有多种方法。证明这些方法等价所需的关键定理，将左特征向量和右特征向量与等价变换中的列联系起来；这些列实际上就是特征向量。

[3]我们指出，添加这些置换只是为了直观展示所涉及矩阵的分块结构 QR^H

在多项式情形中，我们可以立即提取特征向量在酉矩阵 Q 中的位置，参见引理 3.1；该酉矩阵执行相似变换。对于显式的有理 RQ 步，我们需要着重研究有理 Krylov 子空间，以构造酉矩阵 R 和 S，这些矩阵决定了等价变换，详见上一节。在有理 QZ 方法的两种实现中都需要特征向量：既可以通过隐式追赶获得，也可以直接使用特征向量。

因此，我们可以得出以下定理，证明正规适当 Hessenberg 矩阵束的降阶。

定理 7.1 (完美移位后向 RQZ 的降阶)。 设(H, K) 是一个 $m \times m$ 正规 *Hessenberg* 矩阵束。设 $\tilde{z} \in \mathbb{C}$ 是(H, K) 的一个特征值，且满足 $\tilde{z} \notin \Xi$。考虑一个右特征向量$\hat{s}$和一个左特征向量$\hat{r}$。执行等价变换，其中 R 和 S满足 $Re_1 = \hat{r}$且$\hat{S}e_1 = \hat{s}$，得到矩阵束$\hat{R}^H(H, K)\hat{S}$，从而将特征值 $\tilde{z}$隔离在左上角。

证明。 设 R, S 是对正规矩阵束（H, K）进行对角化的酉因子。也就是说，$H = RZ_HS^H, K = RZ_KS^H$，且 Z_H和 Z_K均为对角矩阵。假设$\hat{r}$ 和$\hat{s}$ 对应于（H, K）中的特征值 z_j，并将相关的$\hat{}$ $\hat{}$特征向量记为 r_j 和 s_j。设 R 和 S 具有如下形式： $R := \begin{bmatrix} \hat{r} \\ \hat{R}_{m-1} \end{bmatrix}\hat{}$，且$\hat{S} := \begin{bmatrix} \hat{s} \\ \hat{S}_{m-1} \end{bmatrix}\hat{}$。

利用特征向量的正交性，我们得到

$$\begin{aligned} \hat{r}^H R &= \hat{r}^H \begin{bmatrix} | & & | & | & | & & | \\ r_1 & \dots & r_{j-1} & r_j & r_{j+1} & \dots & r_m \\ | & & | & | & | & & | \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & \alpha & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \\ &= \alpha e_j^\top, \end{aligned}$$

其中 $\alpha = \hat{r}^H r_j \neq 0$。对于将 $\hat{s}$ 应用于 S，也可以作出类似的陈述。因此，我们得到

$$\hat{R}H\hat{S}^H = \hat{R}RZ_HS^H\hat{S}^H = \begin{bmatrix} \lambda_H & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \widetilde{Z}_{m-1} \end{bmatrix}.$$

对矩阵 K 也可以作类似的推导。因此，我们得到一个$\widetilde{\quad}$ $\widetilde{\quad}$新的不可约 Hessenberg 铅笔（H_{m-1}, K_{m-1}），其谱为 σ（H, K）$\backslash\{\lambda\}$。

□

根据构造，在实际算法中，我们对 R 和 S 使用酉海森堡矩阵；矩阵束（R, S）必须是不可约的。下面针对矩阵束情形，给出一个与定理 3.3 类似的定理。

定理 7.2。设 $(H, K) \in \mathbb{C}^{m\times m}$ 是一个正规 *Hessenberg* 铅笔，且 $\lambda \in \sigma(H)$。则以下结论成立：

1. (H, K) 存在规范化左、右特征向量 $\hat{}r$ 和 $\hat{}s$，对应于 λ

$$H\hat{s} = \lambda K\hat{s}, \quad \|\hat{s}\|_2 = 1, \quad \hat{r}^H H = \lambda \hat{r}^H K, \quad \|\hat{r}\|_2 = 1,$$

它们在模为一的缩放意义下唯一，且 $e_m^\top \hat{}s \neq 0$，以及 $e_m^\top \hat{}r \neq 0$。

2. 存在本质唯一的 $\{R_i\}_{i=1}^{m-1}$ 和 $\{S_i\}_{i=1}^{m-1}$ 序列，使 $R_i, S_i \in \mathfrak{C}_i$构成矩阵

$$\hat{R} := R_1 R_2 \dots R_{m-1} \ and \ \hat{S} := S_1 S_2 \dots S_{m-1}$$

使得 $(\hat{}H, \hat{}K) = \hat{}R(H, K)\hat{}S^H$ 是一个正规 *Hessenberg* 铅笔，且 $\hat{}\hat{}Re_1 = \hat{}r$ 以及 $Se_1 = \hat{}s$。

8. 有理函数降阶的数值算法

对于具有指定极点的有理函数，逆特征值问题中的结构化矩阵是一个海森堡矩阵束（H_m，K_m）$\in \mathbb{C}^{m\times m}$。相应的逆特征值问题见问题 2.3。在此问题中，海森堡矩阵束的次对角元素之间的比值限制 $\overline{\frac{h_{i+1,\,k_{i+1}}}{}}_{i} = \xi_i \in \mathbb{C}, i = 1,\ 2,\ \dots,\ m-1$，建立了它与极点为 $\Xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{m-1}\}$ 的有理函数之间的联系。为简便起见，我们将（H，K）的第 i 个次对角元素同时称为 $h_{i+1,\,i}$ 和$k_{i+1,\,i}$，并将其称为矩阵束的第 i 个极点位置。如果 $\overline{\frac{h_{i+1,\,k_{i+1}}}{}}_{i,\,i} = \xi$，我们就说 ξ 出现在极点位置 i。如果我们使用 Camps 等人（2019）的 RQZ 算法，而不是 RQ 步，则可以推广第 4 节中的过程。

然而，对于有理情形，我们没有显式矩阵方法。在多项式情形中，由于 Krylov 子空间与 Hessenberg矩阵的各列密切相关，因此很容易构造 Krylov 子空间的正交基。而在有理情形中，构造有理 Krylov 子空间在计算和数值上都不适宜，但执行显式 RQZ 步又明确要求其基。因此，我们将只关注隐式矩阵方法和特征向量方法。

8.1. 隐式矩阵方法

首先，我们介绍 RQZ 步：在这一步中，我们必须朝相反方向进行追赶（Camps 等人（2019）），该过程主要由两个操作构成。第一个操作是极点交换，发生在矩阵束的中部（H_m，K_m）。第二个操作是用任意给定的极点修改第一个或最后一个极点。这两个过程主要针对 2×2 矩阵，因此我们将以 2×2 矩阵为例介绍它们，并在描述整个过程时指出相关的子矩阵。

交换极点是指交换两个相邻极点位置上的极点，即将位于极点位置 i 的 ξ_i 与位于位置 $i+1$ 的 ξ_{i+1} 互换，使得 ξ_i 现在位于极点位置 $i+1$，而 ξ_{i+1} 位于位置 i。引理 8.1 表明，交换极点只需使用酉变换 2×2 即可完成。

引理 8.1（极点交换，Camps 等人（2019）；Berljafa 和 G¨uttel（2015））。设 $H=\begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} \\ & h_{2,2} \end{bmatrix}$ 和 $K=\begin{bmatrix} k_{1,1} & k_{1,2} \\ & k_{2,2} \end{bmatrix}$ 并令 $\xi_1 = h_{1,1}/k_{1,1}$，和 $\xi_2 = h_{2,2}/k_{2,2}$。则可以构造 R_1，$S_1 \in \mathfrak{C}_1$ 使得

$$R_1 H S_1^H = R_1 \begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} \\ & h_{2,2} \end{bmatrix} S_1^H = \begin{bmatrix} \tilde{h}_{1,1} & \tilde{h}_{1,2} \\ & \tilde{h}_{2,2} \end{bmatrix},$$
$$R_1 K S_1^H = R_1 \begin{bmatrix} k_{1,1} & k_{1,2} \\ & k_{2,2} \end{bmatrix} S_1^H = \begin{bmatrix} \tilde{k}_{1,1} & \tilde{k}_{1,2} \\ & \tilde{k}_{2,2} \end{bmatrix},$$

其中 $\tilde{h}_{2,2}/\tilde{k}_{2,2} = \xi_1$ 和 $\tilde{h}_{1,1}/\tilde{k}_{1,1} = \xi_2$，也就是说，矩阵对角线上的极点被交换了。

为了将引理 8.1 应用于海森堡铅笔，必须将大小为 2×2 的平面旋转嵌入单位矩阵中，使其作用于正确的子矩阵。因此，次对角线上的特定极点将被交换。

可以改变第一个或最后一个极点位置上的极点，也就是说，极点位置 1 或 $m-1$。引理 8.2 指出，可以通过酉相似变换来改变极点。我们只针对最后一个极点表述该引理；第一个极点也可以用类似的方法改变。

引理 8.2（更改最后一个极点，Camps 等人（2019）；Berljafa 和 G¨uttel（2015））。设 $(H,K) \in \mathbb{C}^m$ 是一个极点为

$\Xi = \{\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_{m-1}\}$，其中 $\overline{\xi}_i \in \mathbb{C}$ 出现在极点位置 i。设 $\xi_{m-1} = \frac{h}{k} \notin \sigma(H, K)$ 为给定极点，并设 $\xi_{m-1} = \frac{h}{k}$。

构造一个酉变换 $S \in \mathfrak{C}_1$ 使得[4]

$$x^T S^H = \alpha e_m^T, \quad for \quad x^T = \tilde{\gamma} e_m^T (\tilde{k}H - \tilde{h}K)^{-1}(kH - hK),$$

对于常数 γ。那么矩阵束 (HS^H, KS^H) 在最后一个极点位置上有 $\tilde{\xi}_{m-1}$，而位置 1 到 $m-2$ 上的极点与 (H, K) 在对应位置上的极点相同。

设 $Z = \mathrm{diag}(z_1, \ldots, z_m)$、$w = \begin{bmatrix} w_1 & \ldots & w_m \end{bmatrix}^\top$ 和 $\Xi = \{\xi_1, \ldots, \xi_{m-1}\}$，并假设我们已有 HPIEP (H_m, K_m) 的一个解，使得 $ZQ_m K_m = Q_m H_m$，其中 Q_m 为酉矩阵，且极点出现在矩阵束的次对角线上。现在，我们想要对这个解进行降阶：我们希望移除一个节点 z。

1. 隐式 RQZ 方法通过向后追赶来初始化：将最后一个极点，即次对角线上第 $(m-1)$ 个位置的极点，替换为 $\tilde{z} = h/k$，如引理 8.2 所述。
2. 接下来，我们不断交换该极点，使其逐渐移至矩阵顶部。我们使用引理 8.1 中的酉变换。

最后，在精确的理论设置下，所得矩阵束（H，K）具有如下结构

$$\left(\begin{bmatrix} h & & & & & & \\ & \times & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & \times & \ldots & \times & \times \\ & & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & & \times & \times \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} k & & & & & & \\ & \times & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ & \times & \times & \times & \ldots & \times & \times \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & \times & \ldots & \times & \times \\ & & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & & \times & \times \end{bmatrix} \right),$$

其中 $\frac{h}{k} = \tilde{z}$ 等于待降阶的节点。

仔细考察该算法可知，将被消去的极点始终是最后一个位置上的极点，也就是次对角线上的第 $(m-1)$ 个位置，

[4]请注意，当 k 和 $\tilde{k}$ 均非零时，$x^T = \tilde{\gamma} e_m^T (H - \tilde{\xi}_1 K)^{-1}(H - \xi_1 K)$，其中 $\tilde{\gamma}$ 为缩放因子。

因为它将被 $\tilde{z}$ 替换。然而，如果希望保留该极点并移除另一个极点，可以利用引理 8.1 将想要移除的极点移至位置 $(m-1)$，然后启动隐式算法。假设单次隐式步骤无法达到足够的精度，也就是说，无法立即消去所需的节点。在这种情况下，可以像多项式情形那样考虑再进行一次追赶步骤。因此，权重向量将不再正确，需要进行结构恢复变换。

8.2. 特征向量方法

将特征向量方法推广到 Hessenberg 矩阵束的降阶（H_m， K_m），需要计算左特征向量和右特征向量。我们遵循定理 7.1，采用与第 4.3 节中 Hessenberg 矩阵情形相同的三个步骤。假设我们有一个数 $\tilde{z}$，它足够接近矩阵束（H_m， K_m）的某个特征值。首先，我们对左特征向量执行全部三个步骤，然后再对右特征向量执行。第一步是将由（H_m， K_m）生成的正交有理函数序列在给定特征值 $\tilde{z}$处求值，从而得到左特征向量 r。该特征向量应满足

$$\|r^H\left(H_m-\tilde{z}K_m\right)\|_2 \approx \epsilon_{\text{mach}}\|H_m-\tilde{z}K_m\|_2, \tag{17}$$

如果不满足这一条件，可以使用迭代改进来提高 r 的精度。第二步是从 r 出发，计算左特征向量 $\dot{r}$，使其末尾元素具有特别高的精度，即

$$\left\|\begin{bmatrix}\hat{\epsilon}_1 & \hat{\epsilon}_2 & \dots & \hat{\epsilon}_m\end{bmatrix}\right\|_2 \le \epsilon_{\text{mach}}\min\left(\|H_m\|_{\text{F}},\|K_m\|_{\text{F}}\right), \tag{18}$$

其中 $\hat{\epsilon}_i = \frac{e_i^\top\left(\dot{r}^H\left(H_m-\tilde{z}K_m\right)\right)}{\left\|\begin{bmatrix}\dot{r}_{i-1} & \dot{r}_i & \dots & \dot{r}_m\end{bmatrix}\right\|_2}$ 且 $\dot{r}_0 := 0$。该向量的求法与 Hessenberg矩阵 情况相同，只需做简单调整，以考虑到现在处理的是矩阵束。第三步中，使用矩阵 R执行酉相似变换，将 $\dot{r}$ 约化为 $R^H\dot{r}=e_1$。所得矩阵束为 $\left(R^HH_m,\ R^HK_m\right)$。

对右特征向量 s重复同样的三个步骤，但这次应用于矩阵束 $\left(R^HH_m,\ R^HK_m\right)$。右特征向量 s 的计算方法必须不同于左特征向量，因为它与正交有理函数序列没有关联。只要所得特征向量满足

$$\|\left(R^HH_m-\tilde{z}R^HK_m\right)s\|_2 \approx \epsilon_{\text{mach}}\|R^HH_m-\tilde{z}R^HK_m\|_2. \tag{19}$$

计算出满足以下条件的 $\dot{s}$ 后，对于 $\hat{\epsilon}_i = \frac{e_i^\top((R^H H_m - \tilde{z} R^H K_m)\dot{s})}{\left\|\begin{bmatrix}\dot{s}_{i-1} & \dot{s}_i & \dots & \dot{s}_m\end{bmatrix}\right\|_2}$ 和 $\dot{s}_0 := 0$,

$$\left\|\begin{bmatrix}\hat{\epsilon}_1 & \hat{\epsilon}_2 & \dots & \hat{\epsilon}_m\end{bmatrix}\right\|_2 \le \epsilon_{\text{mach}} \min\left(\|R^H H_m\|_{\text{F}}, \|R^H K_m - \|_{\text{F}}\right), \tag{20}$$

计算得到将 $\dot{s}$ 约化为 $S^H \dot{s} = e_1$ 的矩阵 S。对矩阵束施加相应的酉相似变换后得到 $(R^H H_m S,\ R^H K_m S)$；根据定理 7.1，这使得可以消去 $\tilde{z}$。这里也会消去一个特定的极点。如果希望消去另一个极点，则需要先将其移至右下角。需要注意的是，先处理左特征向量、再处理右特征向量，只是实现此方法的一种可能方式。确定最稳定的变体属于未来研究的范畴，超出了本文的讨论范围。

9. 数值实验

我们进行了两次数值实验，以比较用于求解问题 2.4 的隐式矩阵方法和特征向量方法。第一次实验采用与第 4 节相同的设置，第二次实验采用滑动窗口。在这两种方法中，酉矩阵 Q 仅用于计算这些度量指标，并不用于方法本身。多项式情形下的正交性误差 (14) 和权重误差 (15) 的度量指标可直接应用于有理情形。对于节点误差 (16)，特征值 λ_j 现在是矩阵束 $(H_{m-k},\ K_{m-k})$ 的特征值。此外，我们还使用以下两个度量指标，其中 Z 表示经过适当重新定义的节点矩阵，

1. 矩阵束（H_{m-k}，K_{m-k}）的递推误差：

$$\text{err}_{\text{r}} := \frac{\|\tilde{Z}\tilde{Q}_{m-k}\tilde{K}_{m-k} - \tilde{Q}_{m-k}\tilde{H}_{m-k}\|_2}{\max\left(\|\tilde{Z}\tilde{Q}_{m-k}\tilde{K}_{m-k}\|_2, \|\tilde{Q}_{m-k}\tilde{H}_{m-k}\|_2\right)}. \tag{21}$$

2. 极点误差 用于量化矩阵束 $(\tilde{H}_{m-k}, \tilde{K}_{m-k})$ 中出现的极点与给定极点 $\{\tilde{\xi}_j\}_{j=1}^{m-k-1}$ 之间的精度。令 $\tilde{h}_{i,j}$ 和 $\tilde{k}_{i,j}$ 分别表示 H_{m-k} 和 K_{m-k}的第 (i,j) 个元素，则极点误差定义为

$$\text{err}_{\text{p}} = \max_j \left(\begin{cases} \left| \frac{\frac{\tilde{h}_{j+1,j}}{\tilde{k}_{j+1,j}} - \tilde{\xi}_j}{\tilde{\xi}_j} \right|, & \text{if } \tilde{\xi}_j \in \mathbb{C}, \\ \left| \frac{\tilde{k}_{j+1,j}}{\tilde{h}_{j+1,j}} \right|, & \text{if } \tilde{\xi}_j, \text{ if infinite} \end{cases} \right). \tag{22}$$

对于特征向量方法，我们将考察左特征向量的两个条件 (17) 和 (18)，以及右特征向量的两个条件 (19) 和 (20)。在这两个实验中，我们都从矩阵束 (H_m, K_m) 开始，该矩阵束是通过 Van Buggenhout 等（2022）提出的更新过程获得的问题 2.3 的解。

9.1. 单位圆

在单位圆上以平衡的方式选取 m 节点 $\{z_j\}_{j=1}^m$，如第 5.1 节所述，权重为 $w = \frac{1}{\sqrt{m}}\begin{bmatrix}1 & 1 & \dots & 1\end{bmatrix}^\top$。极点分别选在半径为 $1-\delta$ 的较小圆和半径为 $1+\delta$的较大圆上，其中 $0 < \delta < 1$。它们成对出现：一个极点位于较小圆上的某个角度处，另一个极点位于较大圆上的相同角度处。这些极点对按照与节点相同的平衡顺序添加。实验按照与

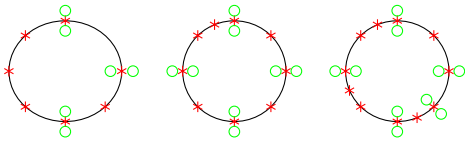


图 11：平衡顺序选取 m 等距节点 $*$ 在半径为 1 的圆上，以及$m-1$ 极点 $\circ$ 成对出现在半径为 $(1-\delta)$ 和 $(1+\delta)$ 的圆上，其中 $m = 7$，9 和 11。

将它们相加。图 12 显示了 $\delta = 0.1$、$m = 201$ 和 $n_{\mathrm{IR}} = 1$ 的度量指标。两种方法的表现都令人满意；对于特征向量方法，$\tilde{}$ $\tilde{}$ 度量指标显示，解的退化速度更快（H_{m-k}，K_{m-k}），而矩阵方法则较慢。

9.2. 实数轴

对于以下实数轴上节点的实验，我们改变实验设置，采用滑动窗口。从问题 2.3 的一个解 (H_m，K_m)，Q 开始，其中 $\{z_j\}_{j=1}^m$，$\{\xi_j\}_{j=1}^{m-1}$。然后删除前两个节点和极点，即通过两次求解问题 2.4，得到逆特征值问题的一个中间解，其中 $\{z_j\}_{j=3}^m$，$\{\xi_j\}_{j=3}^{m-1}$。紧接着，更新两个新节点和极点，得到 $\{z_j\}_{j=3}^{m+2}$，$\{\xi_j\}_{j=3}^{m+1}$ 对应的解 ($\tilde{H}_m^{(1)}$，$\tilde{K}_m^{(1)}$)，$\tilde{Q}^{(1)}$。如图13所示

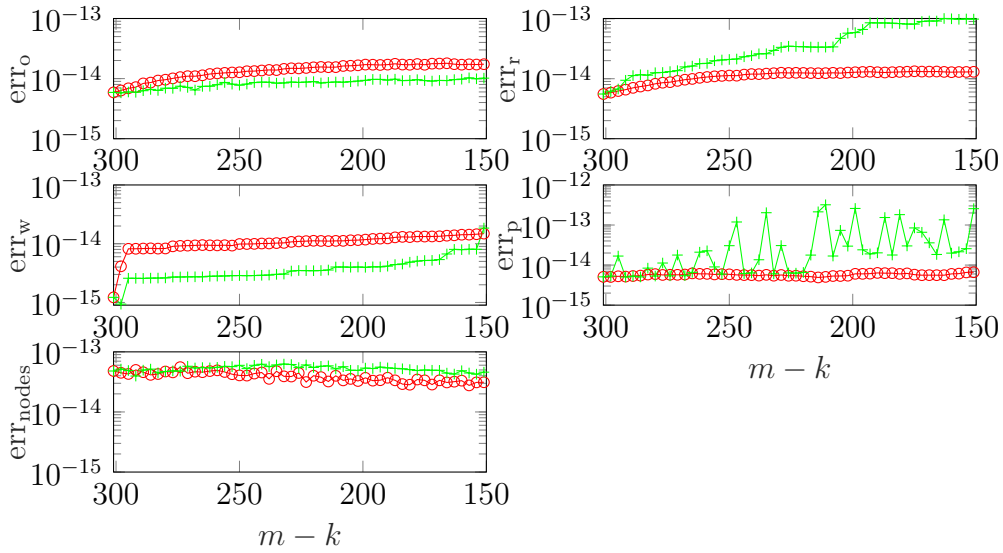


图 12：比较矩阵方法 ∘ 与特征向量方法 +在单位圆实验中的度量指标，其中 $\delta = 0.1$、$m = 201$ 和 $n_{\mathrm{IR}} = 1$。

对于区间 $[a, b]$ 内的等距节点 $\{x_j\}_{j=1}^{m}$ 和极点

$$\xi_j = \begin{cases} a + (j - 1/2)\Delta x + \delta\imath, & \text{if } j \text{ odd}, \\ a + (j - 3/2)\Delta x - \delta\imath, & \text{if } j \text{ even}. \end{cases} \tag{23}$$

此过程重复 ℓ 次，在第 k 次得到解（$\tilde{H}_m^{(k)}$、$\tilde{K}_m^{(k)}$），$\tilde{Q}^{(k)}$ 其大小为 $m \times m$。我们不再计算˜ ˜（H_{m-k}、K_{m-k}）的度量指标，因为其大小会随着 k 的增加而减小；现在，我们针对 k 的多个取值，计算大小为 $m \times m$ 的（$\tilde{H}_m^{(k)}$、$\tilde{K}_m^{(k)}$）的度量指标。

图14展示了 $m = 201$、$[a, b] = [0, 2\pi]$、$\delta = 0.1$ 和 $\ell = 100$的度量指标。隐式矩阵方法表现出色，误差仅略有增长。特征向量方法在 $n_{\mathrm{IR}} = 1$下的误差增长更快。为了解释这一现象，我们来看看图15所示的量。随着 k 增大（滑动距离变远），这些量表明特征向量 $\hat{r}$ 和 $\hat{s}$ 的精度持续下降，导致 $\dot{r}$和 $\dot{s}$ 不准确，进而使计算所得矩阵束的质量下降。增大 n_{IR} 并未改善结果，这暗示精度快速下降另有原因，例如条件性。进一步探讨这一问题超出了本文的范围。

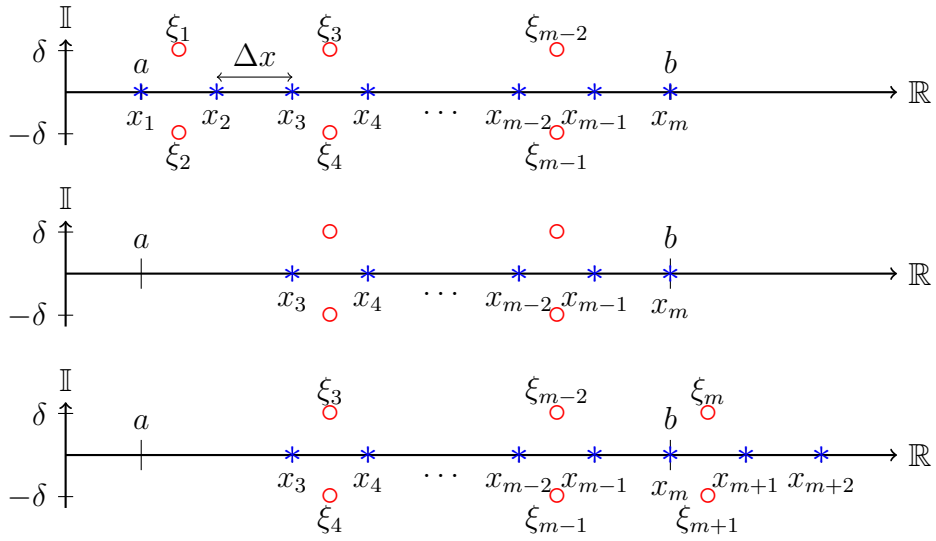


图13：在实数轴上的实验中，复平面展示了一个单步操作。顶部图示显示初始设置，m 等距节点 $\{x_j\}_{j=1}^m$ $*$ 位于 $[a,b]$ 和$m-1$ 极点 $\{\xi_j\}_{j=1}^{m-1}$ （23）。中部图示显示降阶设置：移除前两个节点和前两个极点。底部图示显示增阶更新设置：根据公式（23）添加两个等距节点 $x_{m+1}=b+\Delta x$ 和 $x_{m+2}=b+2\Delta x$ 以及极点 ξ_m 和 ξ_{m+1}。

10. 滑动窗口方案

本文提出的降阶方法与增阶更新方法相结合（例如 Ammar 等（1992）；Van Buggenhout 等（2022）），其一项重要应用是用于数据或函数逼近的滑动窗口方案。考虑一个感兴趣的未知函数 $f(x)$，它仅在一组节点 $\{z_j\}_{j=1}^m$ 处已知，且这些节点具有相应的权重 $\{w_j\}_{j=1}^m$，即我们拥有数据 $\{w_j,z_j,f(z_j)\}_{j=1}^m$。根据这些数据，我们希望在多项式空间 $\mathcal{P}_n$ 或有理函数空间 $\mathcal{R}_n^\Xi$中获得一个次数受限为 $n<m$的逼近 $g(x)$，使其最小二乘准则达到最小。

$$\sum_{j=1}^{m}|w_j|^2|g(z_j)-f_j|^2.$$

Forsythe（1957）得出结论：在计算机上求解 $\mathcal{P}_n$（或 $\mathcal{R}_n^\Xi$）中的最小二乘问题，最佳方法是将其表示为一组基，这组基由相对于给定数据正交的多项式（或有理函数）构成。也就是说，

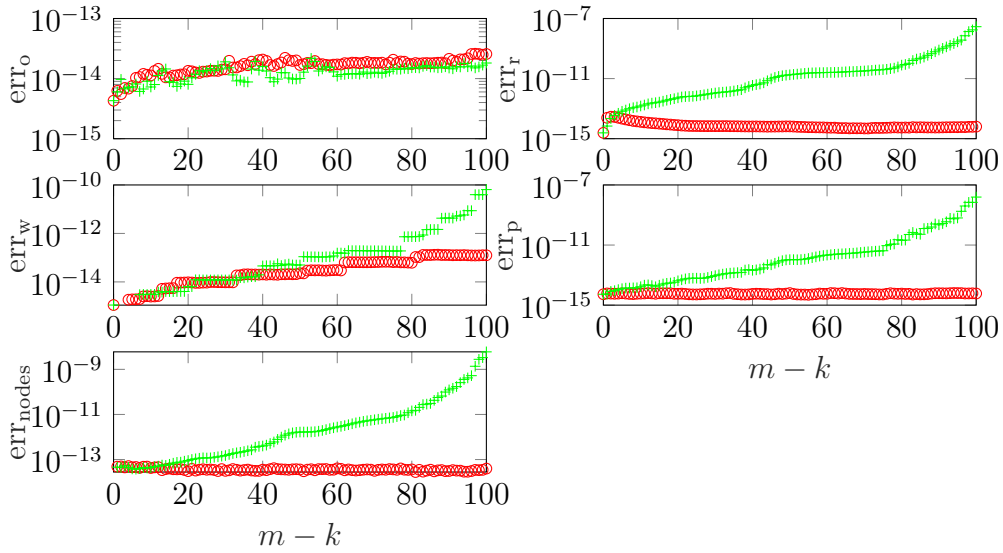


图14：实数轴上的滑动窗口实验度量指标。初始节点集是位于 $[0,\pi]$ 且用于极点的 $\delta = 0.1$ 等距节点集。按照图13所述，窗口滑动了 $\ell = 100$ 次。

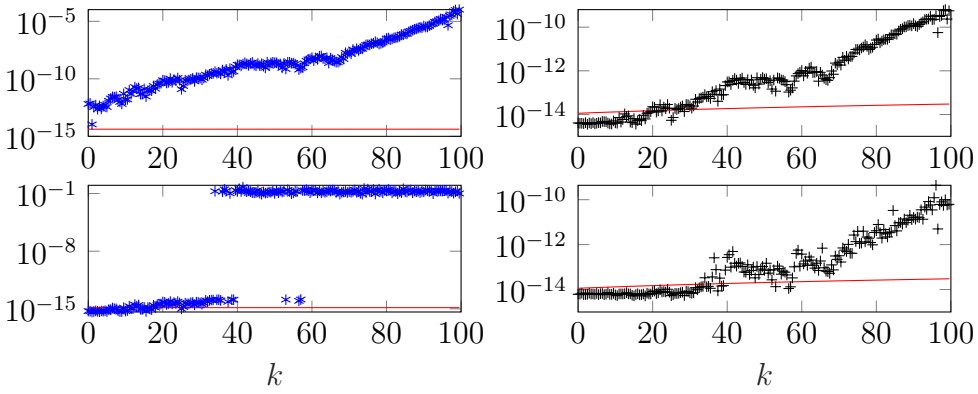


图15：将特征向量方法应用于实数轴上的滑动窗口实验所得的量，其中 $m = 201$ 等距节点位于 $[0,\pi]$，$\delta = 0.1$ 和 $\ell = 100$。左上：(17)，右上：(18)，左下：(19)，右下：(20)。这些不等式的左侧用 $*$ 表示，右侧用 $-$表示。

内积 $\langle p,q\rangle := \sum_{k=1}^{m} |w_k|^2 p(z_j)q(z_j)$。令 $\{r_0(z)\ r_1(z)\ldots,r_{n-1}(z)\}$表示一列相对于该内积正交的有理函数（或多项式）。它们的递推系数可通过以下方式获得：

求解问题 2.3（或问题 2.1），以及 $\mathcal{R}_n^{\Xi}$ 的正交归一基 $Q_n \in \mathbb{C}^{m\times n}$。那么，解 $g(z) \in \operatorname{span}\{r_0(z)\ r_1(z).....,\ r_{n-1}(z)\} = \mathcal{R}_n^{\Xi}$为

$$g(z) = \sum_{d=0}^{n-1} \alpha_d r_d(z), \quad \text{with} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_{n-1} \end{bmatrix} = Q_n^H \begin{bmatrix} w_1 f_1 \\ w_2 f_2 \\ \vdots \\ w_m f_m \end{bmatrix}.$$

请注意，无需显式构造 Q_n；形成 Q_n 的变换可以直接应用于含有数据的向量。这种逼近的误差用 $\|f(x) - g(x)\|_\infty$ 量化，可通过在具有 $10m$ 等距节点的区间上计算这些函数来估计。

我们用函数 $f(x) = (\cos^2 x + 1)^{-1}$ 来说明滑动窗口方案。该函数的奇点为 $\varphi_j = \arccos(\pm\imath) + j\pi,\ j \in \mathbb{Z}$，因此可以选取其中一部分作为有理函数空间的极点。假设我们已知区间 $[0, \alpha\pi]$ 内 $m = 201$ 个等距点$\{x_j\}_{j=1}^m$ 处的函数值 $\{f_j\}_{j=1}^m$，且所有 j 的权重均为 $w_j = 1$。计算得到两个最小二乘逼近函数：$p(x) \in \mathcal{P}_{65}$ 和 $r(x) \in \mathcal{R}_{25}^{\Xi}$，其中$\Xi = \{\varphi_j\}_{j=-6}^{2\alpha+5} \cup \{\infty\}_{j=1}^{12-2\alpha}$。这种极点选取方式对应于取实部 $\operatorname{Re}(\varphi_j)$ 位于区间 $[0, \alpha\pi]$ 内的所有奇点，以及该区间左右两侧最靠近区间的前三对奇点。其余极点取为无穷远点（即多项式）。对于 $\alpha = 1$，两个逼近函数在整个区间内都具有较高精度，误差如图 16 所示。请注意，多项式逼近函数在区间端点附近出现峰值；在等距点上进行多项式插值时，出现这种情况是意料之中的。

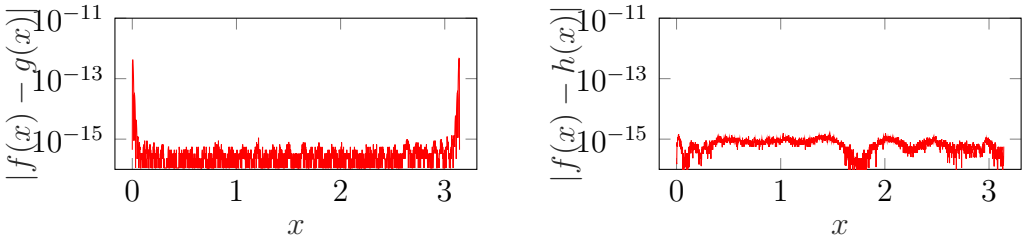


图 16：使用 $[0, \pi]$ 中的 $m = 201$ 等距节点时，最小二乘逼近函数 $g(x) \in \mathcal{P}_{65}$ 和 $h(x) \in \mathcal{R}_{25}^{\Xi}$ 相对于 $f(x) = (\cos^2 x + 1)^{-1}$ 的误差。

从这些逼近函数出发，我们计算出一系列逼近函数，使其以 $\ell = 100$ 个等距步长在区间 $[0, \pi]$ 至 $[\pi, 2\pi]$ 上滑动。在每一步中

$k = 1$，2，……，ℓ 前两个节点 $x_{2(k-1)}$ 和 $x_{2(k-1)+1}$ 会被降阶，并在区间右侧更新两个新节点，其含义与图13中的描述相同。当对于某个 j，$\mathrm{Re}(\xi_j) \in \left[x_{(2(k-1))}, x_{(2(k-1)+1)}\right]$ 时，第一对极点会被右侧的一对新极点取代，思路与图13中的设置相同。该实验的度量指标如图17所示，结果表明增量与减量更新执行得令人满意。有理函数的度量指标 $\mathrm{err_f}$ 在最初从 $k = 0$ 到 $k = 1$增加100倍后，总体仅略有上升，增幅为10倍。对于多项式逼近，该度量指标仅增加了5倍。

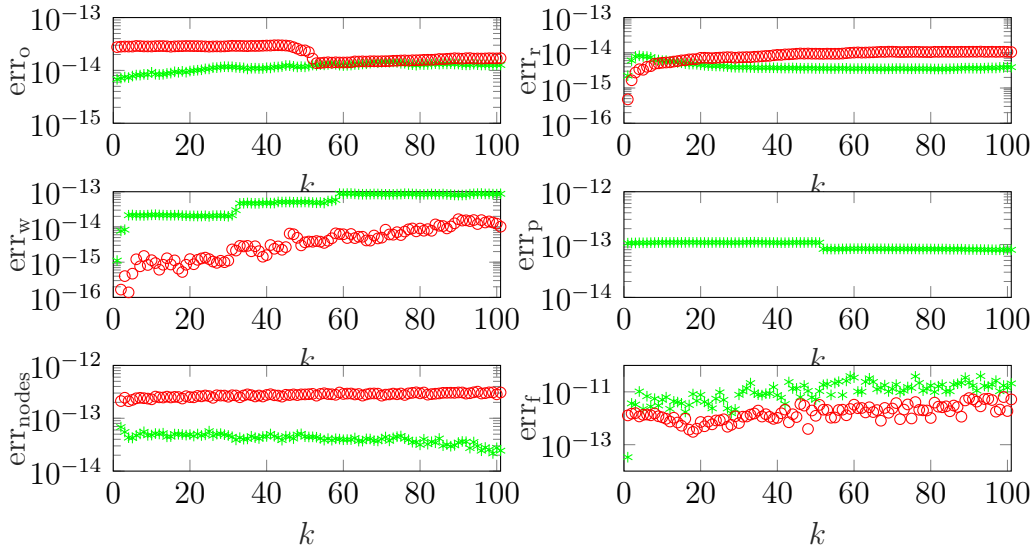


图17：滑动窗口的度量指标 $m = 201$ 等距节点，位于 $[0, \pi]$ 至 m 等距节点，位于 $[\pi, 2\pi]$。最小二乘逼近函数的度量指标 $\mathrm{err_f}$，对应 $g(x) \in \mathcal{P}_{65}$ 和 $h \in \mathcal{R}^{\Xi}_{25}$至 $f(x) = (\cos^2 x + 1)^{-1}$ 在此滑动窗口中的表现。对于采用特征向量方法作为降阶过程的多项式空间 $\circ$ 以及采用隐式矩阵方法作为降阶过程的有理函数空间 $*$。

当函数 $f(x)$ 在关注区间附近有更多奇点时，有理函数的优势便显现出来。对于 $\alpha = 6$，还有 5 对奇点会显著影响 $f(x)$ 的逼近。在不改变空间大小的情况下，我们在这个更大的区间上搜索 $f(x)$ 的逼近函数。对于该逼近，多项式空间保持

不变，即 $\mathcal{P}_{65}$；有理函数空间的维数也仍为 25，但现在有 24 个极点，而 $\alpha = 1$ 有 14 个极点。这些空间中逼近函数的误差如图18所示：多项式逼近仅在区间中部达到 10^{-3} 的精度，在靠近端点处误差则很大。有理函数逼近仍能达到 10^{-10} 量级的精度。图19展示了两种方法的度量指标，增量与减量更新均准确完成。对于度量指标 $\mathrm{err}_{\mathrm{f}}$（对应 $h(x)$），我们观察到，除振荡外，该指标几乎没有增加。这些振荡是所选空间在每一步 k 对区间上的函数 $f(x)$ 进行逼近时，其逼近质量所致，因此并非线性代数问题导致。对于多项式逼近，这一度量指标表现很差且一直如此，但这同样是逼近质量所致。在窗口滑动过程中，$g(x)$ 的误差整体形状保持不变：10^{-4} 位于中部，并在靠近端点处出现峰值。

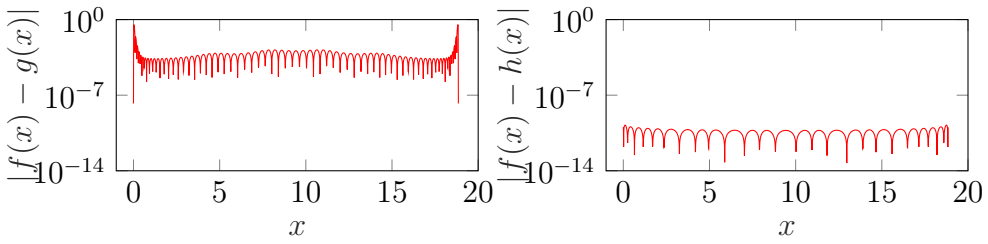


图18：使用 $[0, 6\pi]$中的 $m = 201$ 等距节点得到的 $f(x) = (\cos^2 x + 1)^{-1}$ 的最小二乘逼近函数 $g(x) \in \mathcal{P}_{65}$ 和 $h \in \mathcal{R}_{25}^{\Xi}$ 的误差。

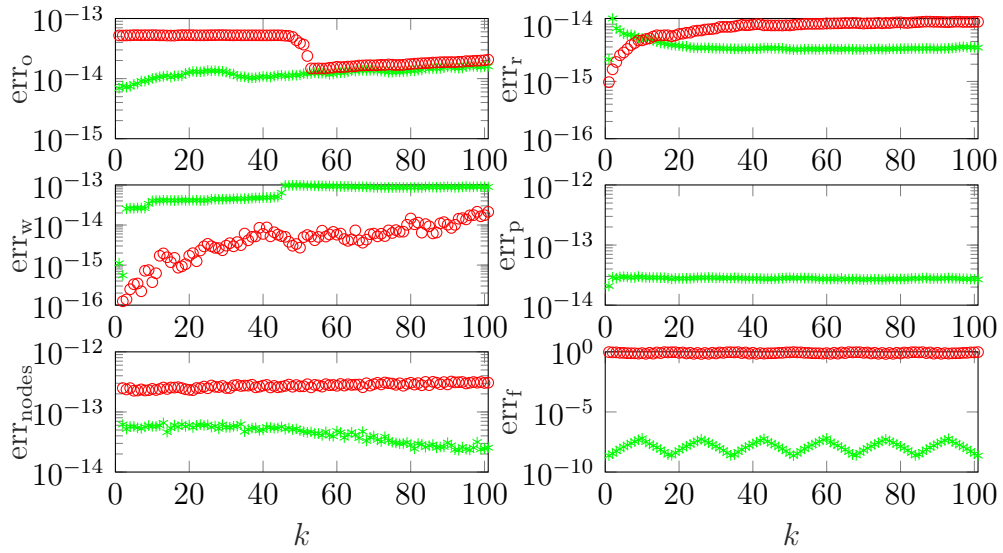


图19：滑动窗口的度量指标： $m = 201$ 等距节点位于 $[0, 6\pi]$ 至 m等距节点位于 $[6\pi, 12\pi]$。最小二乘逼近函数的度量指标 $\mathrm{err_f}$ $g(x) \in \mathcal{P}_{65}$ 以及$h \in \mathcal{R}_{25}^{\Xi}$ 至 $f(x) = (\cos^2 x + 1)^{-1}$ 在此滑动窗口中的表现。对于采用特征向量方法作为降阶过程的多项式空间，以及采用隐式矩阵方法作为降阶过程的有理函数空间 ∘ ∗。

致谢

第一作者的研究部分由鲁汶大学研究委员会、C1项目 C14/17/073（数值线性代数与多项式计算）以及弗拉芒科学研究基金会（比利时）的EOS项目编号30468160 资助；第二作者的研究由查理大学研究计划编号PRIMUS/21/SCI/009 资助；第三作者的研究部分由鲁汶大学研究委员会（比利时）的 C16/21/002项目（Manifactor：流形映射的因子分析）以及弗拉芒科学研究基金会（比利时）的 G0A9923N项目（用于大规模在线时间序列聚类升阶和降阶的低秩张量近似技术）资助；第一作者和第三作者的研究还部分由弗拉芒科学研究基金会（比利时）的 G0B0123N项目（受修正矩启发的有理Krylov与正交有理函数的短递推关系）资助。

参考文献

Ammar, G.S., Gragg, W.B., Reichel, L., 1991. 根据谱数据构造酉 Hessenberg 矩阵，载于：Golub, G.H., Van Dooren, P.（编），《数值线性代数、数字信号处理与并行算法》，Springer-Verlag，柏林，德国，第385–395页。Ammar, G.S., Gragg, W.B., Reichel, L., 1992. Szegő 多项式的降阶及数据拟合应用。《线性代数及其应用》172，315–336。Ammar, G.S., He, C., 1995. 关于酉 Hessenberg 矩阵的逆特征值问题。《线性代数及其应用》218，263–271。Berljafa, M., G¨üttel, S., 2015. 广义有理 Krylov 分解及其在有理逼近中的应用。《SIAM 矩阵分析与应用杂志》36，894–916。Boley, D.L., Golub, G.H., 1987. 矩阵逆特征值问题综述。《逆问题》3，595–622。Bultheel, A., Gonz´alez-Vera, P., Hendriksen, E., Nj˚astad, O., 1999.《正交有理函数》。第5卷，剑桥应用与计算数学专著丛书。剑桥大学出版社，剑桥，英国。Bultheel, A., Van Barel, M., 1995. 向量正交多项式与最小二乘逼近。《SIAM 矩阵分析与应用杂志》16，863–885。Bultheel, A., Van Barel, M., 1997.《线性代数、有理逼近与正交多项式》。第6卷，计算数学研究丛书。North-Holland, Elsevier Science B.V.，阿姆斯特丹，荷兰。Bultheel, A., Van Barel, M., Van gucht, P., 2004. 离散最小二乘有理逼近中的正交基函数。《计算与应用数学杂志》164–165，175–194。Camps, D., Meerbergen, K., Vandebril, R., 2019. 有理 QZ 方法。《SIAM 矩阵分析与应用杂志》40，943–972。

Delvaux, S., Van Barel, M., 2005. 正交归一有理函数向量. Numerische Mathematik 100, 409–440. Elhay, S., Golub, G.H., Kautsky, J., 1991. 正交多项式的增阶更新与降阶更新及其在数据拟合中的应用. SIAM 矩阵分析与应用杂志 12, 327–353. Forsythe, G.E., 1957. 用数字计算机生成和使用正交多项式进行数据拟合. 工业与应用数学学会杂志 5, 74–88. Gautschi, W., 2004. 正交多项式的计算与逼近. 数值数学与科学计算，牛津大学出版社. Gilewicz, J., Pindor, M., 1997. Pad´e 逼近函数与噪声：几何级数的一个案例. 计算与应用数学杂志 87, 199–214. Golub, G.H., Welsch, J.H., 1969. 高斯求积公式的计算. 计算数学 23, 221–230. Gragg, W.B., Harrod, W.J., 1984. 根据谱数据数值稳定地重构雅可比矩阵. Numerische Mathematik 44, 317–335. Lemonnier, D., Van Dooren, P., 2006. 正则矩阵铅笔的平衡化. SIAM 矩阵分析与应用杂志 28, 253–263. Mastronardi, N., Van Dooren, P., 2018. 采用完美位移的 QR 步. SIAM 矩阵分析与应用杂志 39, 1591–1615. Reichel, L., 1991. 类范德蒙矩阵的快速 QR 分解与多项式最小二乘逼近. SIAM 矩阵分析与应用杂志 12, 552–564. Reichel, L., Ammar, G.S., Gragg, W.B., 1991. 利用三角多项式进行离散最小二乘逼近. 计算数学 57, 273–289. Rutishauser, H., 1963. 关于雅可比旋转模式，载于：Metropolis, N.C., Taub, A.H., Todd, J., Tompkins, C.B.（编），《实验算术》，

《高速计算与数学》，应用数学研讨会论文集，美国数学学会，罗得岛州普罗维登斯。第 219–239 页。Van Barel, M., Bultheel, A., 1992. 离散最小二乘有理逼近的并行算法. Numerische Mathematik 63, 99–121. Van Barel, M., Bultheel, A., 1994. 单位圆上的离散线性化最小二乘逼近. 计算与应用数学杂志 50, 545–563. Van Barel, M., Bultheel, A., 1995. 离散内积下的标准正交多项式向量与最小二乘逼近. 数值分析电子汇刊 3, 1–23. Van Barel, M., Bultheel, A., 2001. 标准正交多项式向量的增阶更新与降阶更新及其应用，载于：Olshevsky, V.（编），《数学、计算机科学与工程中的结构化矩阵 II》。美国数学学会，罗得岛州普罗维登斯，美国。第 281 卷《当代数学》，第 145–162 页。Van Buggenhout, N., Van Barel, M., Vandebril, R., 2022年. 利用结构化矩阵程序生成正交有理函数. Numerical Algorithms 89, 551–582. Watkins, D.S., 1982 年 . 理解该 QR 算法. 《SIAM 评论》24, 427–440. Watkins, D.S., 1993年. 关于特征值问题的一些见解. 《SIAM 评论》35, 430–471. Watkins, D.S., 2007年. 《矩阵特征值问题：GR 与 Krylov 子空间方法》。工业与应用数学学会，费城，美国。Watkins, D.S., 2008年. QR 算法再探. 《SIAM 评论》50, 133–145. Watkins, D.S., 2011年. Francis 算法. 《美国数学月刊》118, 387–403.