Resumen

El problema polinómico de valores propios aparece en muchas áreas de la computación científica y técnica. Puede verse como una generalización del problema lineal de valores propios en el que la ecuación $P(\lambda)x = 0$, que define el problema, involucra un polinomio $P(\lambda)$, de grado d, en el parámetro λ del autovalor, y $d+1$ coeficientes matriciales. A su vez, el problema polinómico de valores propios es un caso particular del problema no lineal de valores propios, $T(\lambda)x = 0$, en el que T es una función matricial no lineal. Estos problemas aparecen en diversas áreas de aplicación como acústica, mecánica de fluidos, análisis de estructuras, o fotónica.

Esta tesis se centra en el estudio de métodos para la resolución numérica del problema polinómico de valores propios, así como la adaptación de dichos métodos al caso más general no lineal. Principalmente, se consideran métodos de proyección, que son apropiados para el caso de matrices dispersas de gran dimensión cuando se requiere solo un pequeño porcentaje de los valores y vectores propios. Los algoritmos se estudian desde el punto de vista de la computación de altas prestaciones, teniendo en consideración aspectos como la eficiencia (computacional y de memoria) y la computación paralela.

SLEPc, Scalable Library for Eigenvalue Problem Computations, es una biblioteca software para la resolución de problemas de valores propios de gran dimensión en paralelo. Es de propósito general y puede usarse para problemas estándares y generalizados, simétricos y no simétricos, con aritmética real o compleja. Como fruto de esta tesis, se han desarrollado diversos solvers para problemas polinómicos y no lineales, los cuales se han incluido en las últimas versiones de este software.

Por un lado, se abordan métodos basados en la linealización del problema polinómico, que resuelven un problema lineal equivalente de dimensión varias veces la del inicial. Entre ellos se destaca el método TOAR, que representa la base del subespacio de búsqueda de una forma eficiente en términos de memoria, y es adecuado para manejar el aumento de dimensión del problema lineal. La tesis también propone variantes específicas para el caso particular de matrices simétricas. En todos estos métodos se consideran diversos aspectos para dotar a las implementaciones de robustez y flexibilidad, tales como transformaciones espectrales, escalado, y técnicas de extracción.

Además de los métodos de linealización, se proponen métodos de tipo Newton, como el método de Jacobi-Davidson con deflación y el método de Newton para pares invariantes. Por sus características, este último no suele utilizarse como un método en sí mismo sino como técnica de refinamiento de las soluciones obtenidas con otro método.

Los métodos anteriores pueden aplicarse a la resolución del problema no lineal, utilizando técnicas como la interpolación polinómica o racional, siendo necesario en algunos casos adaptar los algoritmos. La tesis cubre también estos casos.

Para todos los algoritmos considerados se han realizado implementaciones paralelas en SLEPc, y se ha estudiado su comportamiento numérico y sus prestaciones paralelas en problemas procedentes de aplicaciones reales.