Jacobi-Davidson 法による大規模行列の固有値

2L−7

徳永 正典　久保田 光一
中央大学大学院理工学研究科

1 はじめに

近年，H. A. Vorst らは大規模 (対称) 行列の固有値算出アルゴリズム "Jacobi-Davidson 法 (以下 JD 法)" を提案した [3]．このアルゴリズムは，QR 法 [1] などが直接適用できないような大規模行列に対して適用可能な，部分空間法の部類に属する．本稿では JD 法を約5万次元の疎エルミート行列に適用した結果を示す．

2 アルゴリズム

JD 法は部分空間法の一種である．ここでは n 次エルミート行列 A の固有値を求めることを考え，k 次元の部分空間 span$\{V\}$ に射影した固有値問題

$$(V^*AV-\theta I)s=0 \tag{1}$$

の解を求める部分 (Davidson 部)，および，探索空間を拡張するための方程式

$$\begin{cases}(I-uu^*)(A-\theta I)(I-uu^*)z=-r\\ u^*z=0\end{cases} \tag{2}$$

を解く部分 (Jacobi 部) の2つにわけて考える．

[JD 法の基本アルゴリズム]

エルミート行列の固有値の中で絶対値が最大の固有値 θ とそれに対応した固有ベクトル u を求める．

入力：初期ベクトル v．**出力**：絶対値が最大の固有値 θ とその固有ベクトル u．

1. **スタート**：
   - $k\leftarrow 0,\ z\leftarrow v,\ V_0\leftarrow []$.
2. **反復**: 以下を収束するまで繰り返す．
   (i) z を V_k に対して直交化し，それを V_k に加えて V_{k+1} に拡張する．
   (ii) $W_{k+1}\leftarrow AV_{k+1}$ を計算する．
   (iii) $H_{k+1}\leftarrow V_{k+1}^*W_{k+1}(=V_{k+1}^*AV_{k+1})$.
   (iv) H_{k+1} の最大固有値のペア (θ,s) を (s を正規化して) 計算する．
   (v) $u\leftarrow V_{k+1}s$.
   (vi) $\hat{u}\leftarrow Au(=W_{k+1}s)$ と残差ベクトル $r=\hat{u}-\theta u$ を計算する．
   (vii) 収束条件を満足したら終了する．
   (viii) $t^*u=0$,　(3)
   $(I-uu^*)(A-\theta I)(I-uu^*)t=-r$　(4)
   を (近似的に) 解く．
   (ix) $z\leftarrow t$.

□

いわゆる Davidson 法 [2] は式 (3), (4) の代わりに

$$(A-\theta I)t=-r \tag{5}$$

とおいたものである．ここでは式 (4) の近似解法として，$(A-\theta I)$ の代わりにその近似行列 $M(\simeq A-\theta I)$ を用いるものを考える：

$$(I-uu^*)\,M\,(I-uu^*)t=-r \quad \textbf{(近似 JD 法)}, \tag{6}$$

$$M\,t=-r \quad \textbf{(近似 Davidson 法)}. \tag{7}$$

H. A. Vorst らは，式 (6) の解法のひとつとして，

$$\tilde{t}=\varepsilon M^{-1}u_k-M^{-1}r, \tag{8}$$

$$\varepsilon=\frac{u_k^*M^{-1}r}{u_k^*M^{-1}u_k}$$

を提案している ($\varepsilon=0$ とすると式 (7) に対応)．

3 計算機実験

式 (4) の係数行列は特異行列なので解法として GMRES や BiCGStab などが用いられる．ここではあえて単純な共役勾配法を用い，そのふるまいを観察する．

計算には Linux 上で GNU Octave を用い倍精度演算により計算を行った．ノルムには，残差ベクトル r の 2-ノルムを使用した．

3.1 予備実験

108 次のエルミート行列の絶対値が最大の固有値を求める．式 (4) などの解法として，内部ループの反復回数を3回以下に固定した共役勾配法を用いて収束の違いを比較した．式 (4), (5), (6), (7) の左辺の係数行列を $B_{\mathrm{JD1}}, B_{\mathrm{D1}}, B_{\mathrm{JD2}}, B_{\mathrm{D2}}$ と表わし，$M=\mathrm{diag}(A-\theta I)$ を用いた：

$$B_{\mathrm{JD1}}=(I-uu^*)\,(A-\theta I)\,(I-uu^*), \tag{4'}$$

$$B_{\mathrm{D1}}\ =(A-\theta I), \tag{5'}$$

$$B_{\mathrm{JD2}}=(I-uu^*)\quad M\quad (I-uu^*), \tag{6'}$$

$$B_{\mathrm{D2}}\ =\quad M. \tag{7'}$$

Eigenvalues of Large Matrices by means of Jacobi-Davidson Method
Masanori TOKUNAGA and Koichi KUBOTA
Graduate School of Science and Engineering,
Chuo University
1-13-27 Kasuga, Bunkyo-ku, Tokyo 112, Japan

共役勾配法の初期値には要素がすべて 1 のベクトルを正規化したベクトル $v_1 = (1,\cdots,1)^T/\sqrt{100}$と $v_2 = \tilde{t}$ (式 (8)) の 2 種類を用いた．

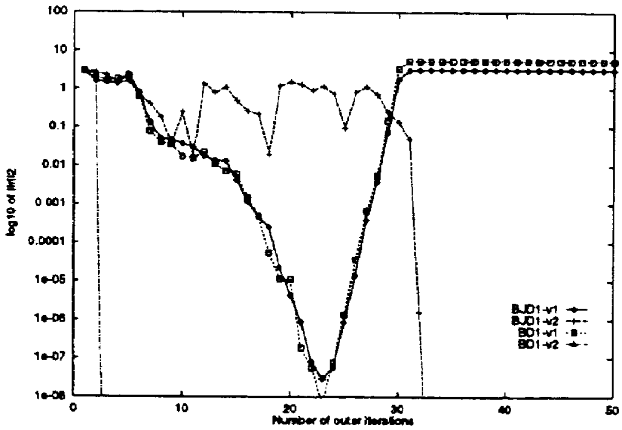

図 1. $(A-\theta I)$ を用いた近似における収束の違い

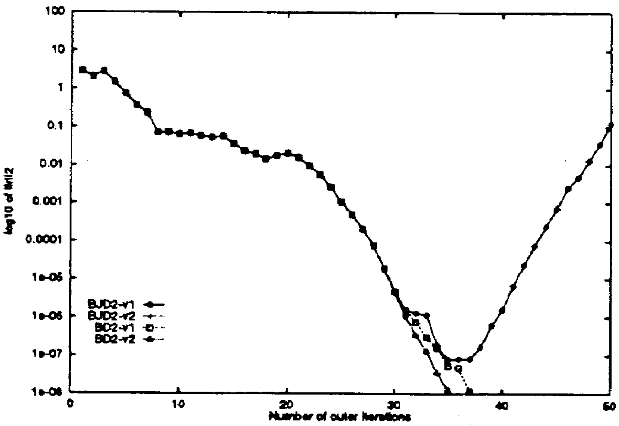

図 2. M を用いた近似における収束の違い

3.2 共役勾配法の反復回数による収束の違い

§ 3.1 と同じ行列に対し，式 (4) の解法の共役勾配法の反復回数をそれぞれ 1, 3, 10 回以下に固定し，絶対値が最大の固有値を算出した (図 3)．共役勾配法の初期値には $v = (1,\cdots,1)^T/\sqrt{108}$を用いた． 反復の初期段階では残差ノルムは単調に減少せず不安定な挙動を示すが，ある程度以上繰り返すと単調に減少する傾向を示した．

3.3 大規模行列の実験

51490 次の疎エルミート行列に対して絶対値が最大の固有値を，内部ループの反復回数 5 回に固定した共役勾配法を用いて計算した．共役勾配法の初期値には $v = (1,\cdots,1)^T/\sqrt{51490}$を用いた．計算には，RS/6000 上で XL-FORTRAN を使用した．

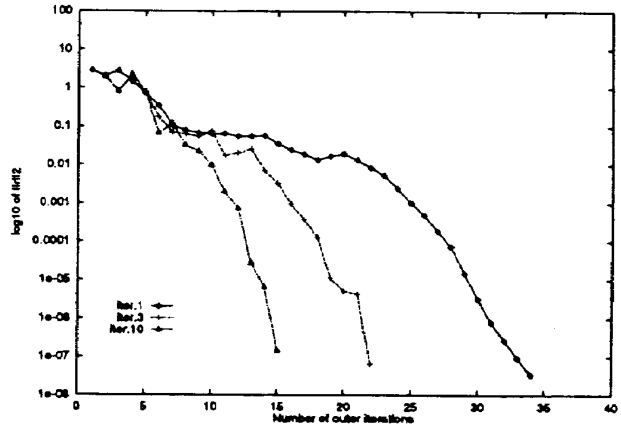

図 3. 反復回数による収束の違い

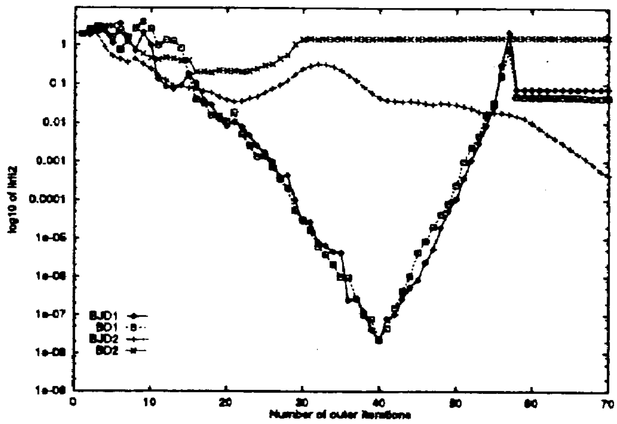

図 4. 反復回数による収束の違い

4 まとめ

正定値対称でない係数行列の方程式に単純な共役勾配法を用いたが，今回の実験では効果的であった．

参考文献

[1] F. Chatelin (伊理 正夫，伊理 由美 訳): 行列の固有値. シュプリンガー・フェアラーク東京, 1993.

[2] M. Sadkane, M. Crouzeix, and B. Philippe: The Davidson method. *SIAM Journal of Scientific Computing*, Vol. 53 (1994), pp. 62–76.

[3] G. L. G. Sleijpen and H. A. van der Vorst: A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problems. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Vol. 17 (1996), pp. 401–425.