3D−5

# Jacobi-Davidson 法による大規模エルミート行列の固有値計算

三ッ堀 裕之 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, 大規模固有値問題に対して H. A. van der Vorst らは Jacobi-Davidson 法 (以下 JD 法) を提案した [1]. JD 法の効用の確認のための数値実験もいくつか行われている [2, 3]. 本稿では徳永等の実験 [2] に対し追加実験を行い, 約 5 万次元の疎エルミート行列の固有値計算において, JD 法内部で用いる反復解法のための前処理行列の種類による JD 法の収束性の違いを報告する.

## 2 アルゴリズム

JD 法は部分空間反復法の一種であり, 与えられた近似固有ベクトルに関する直交補空間を探索する Jacobi のアプローチと近似固有ベクトルが構築された空間を拡張する Davidson の手法 [4] の結合として提案された [1].

以下に JD 法の基本アルゴリズムを示す.

**入力:** 初期ベクトル $v$, リスタートするまでの反復回数 $m$.

**出力:** 絶対値が最大の固有値 $\theta$ とその固有ベクトル $u$.

**1 スタート:** 初期ベクトル $v$ を選択する.

(i) $v_1 = v/\|v\|_2$, $w_1 = Av_1$, $h_{11} = v_1^* w_1$.

(ii) $V_1 = [v_1]$, $W_1 = [w_1]$, $H_1 = [h_{11}]$.

(iii) $u = v_1$, $\theta = h_{11}$, $r = w_1 - \theta u$.

**2 反復:** $k = 1, 2, \ldots, m-1$ の間以下を反復する.

(i) $t \perp u$, $(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)t = -r$ を近似的に解く.

(ii) $V_k$ に対して $t$ を直交化したベクトルを $v_{k+1}$ とし, これを $V_k$ の最終列の右に追加して $V_{k+1}$ とする.

(iii) $w_{k+1} = Av_{k+1}$ を計算し, このベクトルを $W_k$ の最終列の右に追加して $W_{k+1}$ とする.

(iv) $V_{k+1}^* w_{k+1}$ とその共役転置を $H_{k+1}$ の最終列, 最終行とする.

(v) $H_{k+1}$ の最大固有値と固有ベクトルのペア $(\theta, s)$ を求め, $s$ を正規化する.

(vi) $u = V_{k+1}s$, $\hat{u} = Au$, $r = \hat{u} - \theta u$. を計算する.

(vii) 収束条件を満たしていれば終了する.

**3 リスタート:** $V_1 = [u]$, $W_1 = [\hat{u}]$, $H_1 = [\theta]$ をセットし 2 へ戻る.

このアルゴリズムで重要なところは 2(i) の $(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)t = -r$ から $t$ を求める部分である. van der Vorst らは Generalized Minimum Residual (GMRES) [5] 等の反復法を数ステップ実行して近似解を求めることを提案している. この部分の反復を以降 “内部反復” と呼ぶことにする. 一方, アルゴリズムの 2 の $k$ に関する反復を, 内部反復に対して “外部反復” と呼ぶことにする.

## 3 前処理

van der Vorst らは 2(i) の $(A - \theta I)$ を近似する適当な行列 $M$ を用いて

$$M_d = (I - uu^*)M(I - uu^*) \qquad (1)$$

を定義し, これを $(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)$ の近似行列とし, GMRES 等の反復解法の前処理行列として用いることを提案している [1]. 反復法内で $M_d z = y$ $(z \perp u)$ の近似解を求めるには $z = M^{-1}y - \alpha M^{-1}u$ とすれば良い (ここで $\alpha = u^*M^{-1}y/u^*M^{-1}u$).

## 4 数値実験

ここでは数値実験の方法について説明する.

幾つかの異なる近似行列 $M$ を JD 法内で用いる反復法に適用し, JD 法の収束性について調べる. 近似行列としては $A - \theta I$ の対角成分を取出した行列 $M_D$, $A - \theta I$ を不完全 LU 分解した行列 $M_{LDU}$ を用いる. また, 前処理行列を用いない時の収束性についても調べる (図中ではこれを $N_A$ と記した).

収束性の指標には $\|r\|_2$ を用いる.

ここで用いる不完全 LU 分解 は $B = A - \theta I$ として $B = L_B + D_B + U_B$ のように行列を下三角部分, 対角部分, 上三角部分に分割し, $M_{LDU} =$

*Numerical Computation of Eigenvalues for Large Helmite Matrices by means of Jacobi-Davidson Method, Hiroyuki MITUBORI and Koichi KUBOTA, Graduate School of Science and Engineering, Chuo University 1-13-27 Kasuga, Bunkyo-ku, Tokyo 112-8551, Japan.

$(D_B + L_B)D_B^{-1}(D_B + U_B)$ という行列にしたものである [5].

2(i) を解く反復解法として GMRES を採用し, その内部反復の回数を変化させる.

### 4.1 予備実験

51480 次元の疎エルミート行列に対する数値実験を行う前に, 108 次元の疎エルミート行列 (図 1) に対し同様の実験を行い, それを予備実験とする. 本稿ではこの予備実験で得られたデータを掲載する.

ここでは GMRES の内部反復回数の上限を 5 回と 25 回にして実験を行った.

JD 法の初期ベクトルに $v = (1, 1, \ldots, 1)^t$, GMRES の初期ベクトルに $v = (0, 0, \ldots, 0)^t$ を用いた.

それぞれの反復回数の上限に対して得られたデータを以下に掲載する (図 2, 3). 図中の横軸は JD 法における外部反復回数を示す (§2).

JD 法は 2(vii) で収束条件を満たしたとき終了とするが, ここでは収束条件を設定せず, 外部反復回数が一定の回数になるまで繰返した. この予備実験では 100 回としたがある程度で変化がなくなるため図では 20 回以降を省略とした.

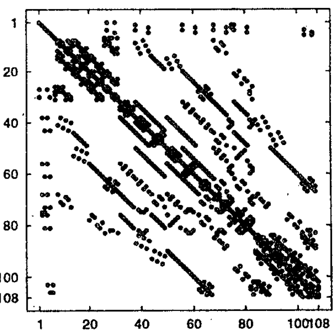

図 1　108 次元の疎エルミート行列

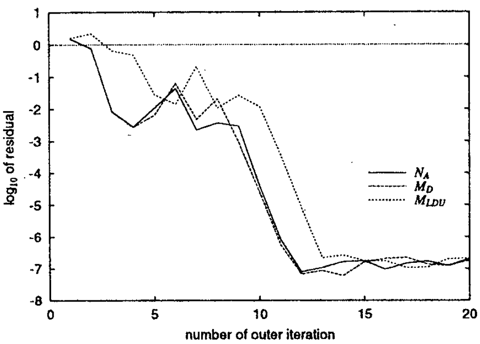


図 2　内部反復回数が 5 回

### 4.2 予備実験結果

計算は Pentium II (300MH), 64M byte の LINUX 上で C 言語による倍精度演算で行った. また, コンパイラは egcs–1.1 を最適化なしで用いた. 計算時間は前処理行列にはあまり関係なく, 図 2 では 15 秒前後, 図 3 では 23 秒前後であった.

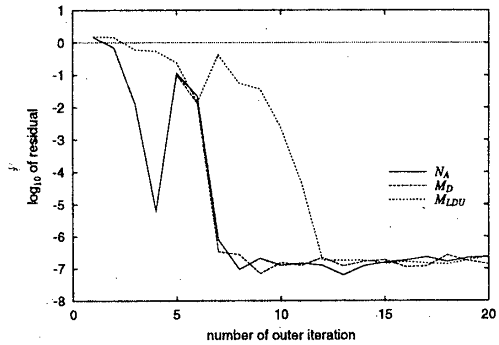


図 3　内部反復回数が 25 回

この予備実験では求まった固有値は第 2 固有値である. これは JD 法の初期ベクトルの成分をすべて 1 にしたものを用いたこと, 収束性を見ることが目的であるため外部反復回数を制限したことが原因と考えられる.

## 5 まとめ

JD 法で用いる反復法内に幾つかの前処理行列を適用し, その収束の違いを観察した.

発表当日には 51480 次元の疎エルミート行列に対して行った結果を発表する.

## 参考文献

[1] 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, No. 2, pp. 401–425 (1996).

[2] 徳永正典, 久保田光一: Jacobi-Davidson 法による大規模行列の固有値, 情報処理学会第 56 回全国大会 (平成 10 年前期) 講演論文集 CD-ROM (1998).

[3] 西田晃, 小柳義夫: Jacobi-Davidson 法とその性能評価, 情報処理学会研究報告 98-HPC-74, Vol. 98, No. 115, pp. 13–18 (1998).

[4] M. Sadkane, M. Crauzeix and B. Philippe: The Davidson method, *SIAM Journal of Scientific Computing*, Vol. 15, pp. 62–76 (1994).

[5] 長谷川里美, 長谷川秀彦, 藤野 清次訳: 反復法 Templates, 朝倉書店 (1996).