Jacobi-Davidson 法の数値特性

西田 晃，小柳 義夫 (東京大学)

1 はじめに

大規模疎行列の固有値計算アルゴリズムとしては, 従来 Lanczos/Arnoldi 系の解法を用いるのが一般的であった. 比較的小規模な行列においては, 全固有値を求める QR 法を用いることができるが, 問題の大きさ n に対して $\mathcal{O}(n^3)$ の計算量を要するため, この方法では規模の大きな問題を扱うことができない. このため, リスタートを用いた反復 Lanczos/Arnoldi 法は, 特に疎行列を扱う場合に最も実際的な解法であるといえるが, 固有値が近接している場合, 正確な計算が難しいことが知られている. Jacobi-Davidson 法 [2] は, 量子化学において対角化に用いられることの多い Davidson 法をもとに, Jacobi 法の考え方を用いて構成された解法であるが, 比較的条件の悪い場合にも正確に固有値を計算できる [1, 2] ことから, Lanczos/Arnoldi 法に代わる有力なアルゴリズムとして注目されている. 本稿ではこの手法の概要を紹介するとともに, その数値特性について述べる.

2 Jacobi-Davidson 法

Davidson 法では, 以下のような手続きで絶対値最大の固有値[1] を求める. 次元 k の部分空間 $\mathcal{K} = \mathrm{span}\{v_1, ..., v_k\}$ 上で, 行列 A の近似固有対, すなわち Ritz 対 (θ_k, u_k) を考える. ここで $v_1, ..., v_k$ は正規直交基底とする. u_k を更新するためには $\mathcal{K}$ の次元を拡張する必要があるが, Davidson 法では残差 $r = Au_k - \theta_k u_k$ について修正方程式と呼ばれる以下のような方程式を解く.

$$M_k t = r, \quad M_k = D_A - \theta_k I \tag{1}$$

D_A は A の対角成分である. さらに t を $\mathcal{K}$ と直交化して v_{k+1} を得る. $V_{k+1} = [v_1, ..., v_{k+1}]$ と置けば, 新しい Ritz 対 (θ_{k+1}, u_{k+1}) は行列

$$H_{k+1} = V_{k+1}^* A V_{k+1} \tag{2}$$

の固有対として計算される.

これに対して, Jacobi-Davidson 法では u_k の直交補空間から更新のための成分を取り出す. 以下では u_k は正規化されているものと仮定する. 固有値問題 $Ax = \lambda x$ を, 以下のように u_k の直交補空間 $u_k^\perp$ 上に射影する. 行列 A の $u_k^\perp$ への直交射影は

$$A_P = (I - u_k u_k^*) A (I - u_k u_k^*) \tag{3}$$

で表されるが, これは

$$A = A_P + u_k u_k^* A + A u_k u_k^* - \theta_k u_k u_k^* \tag{4}$$

と書き直すことができる. 修正ベクトル z は

$$A(z + u_k) = \lambda(z + u_k), \quad z \perp u_k \tag{5}$$

を満たすので, ここに 式 (4) を代入すれば

$$(A_P - \lambda I) z = -r + (\lambda - \theta_k - u_k^* A z) u_k \tag{6}$$

となる. $A_P z \perp u_k$, $z \perp u_k$, $r \perp u_k$ より u_k の係数は 0 でなければならないので, 問題は

$$(A_P - \lambda I) z = -r \tag{7}$$

の計算に帰着されることが分かる. 実際には λ の値を知ることはできないが, 式 (7) は厳密に解く必要がないため, ここでは代わりに θ_k を用いて

$$(I - u_k u_k^*)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^*) z = -r \tag{8}$$

を解く. 得られたベクトルを V_k に対して直交化し, v_{k+1} とする. $H_{k+1} = V_{k+1}^* A V_{k+1}$ の最大固有値が次ステップの Ritz 値 θ_{k+1} となる. 同様の要領で, 減次を用いて複数の固有値を求めることができる.

3 Jacobi-Davidson 法の数値特性

以下では, 上記アルゴリズムの実装手法について検討する. 評価には, Intel Pentium III Xeon (550MHz, 16KB data cache, 512KB L2 cache) の 4-way SMP (450NX chipset, 768MB main memory) を用いた. OS には Solaris 7, またコンパイラには PGI Fortran を用いた. PGI Fortran は, OpenMP による並列処理をサポートしている.

評価は, 固有値が既知である以下の実対称行列を用いて行った. $n = N^2$ 次 5 重対角行列

$$A = \begin{pmatrix} T_N & -I & & O \\ -I & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I \\ O & & -I & T_N \end{pmatrix}, \tag{9}$$

[1] 以下単に最大固有値と書く.

$$T_N = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & O \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ O & & -1 & 4 \end{pmatrix} \quad (10)$$

の固有値は, 解析的に

$$4 - 2(\cos(k\pi/(N+1)) + \cos(j\pi/(N+1)), \quad (11)$$

$$j, k = 1, ..., N \quad (12)$$

で与えられる. ここでは, 残差の許容範囲を 10^{-8} として, A の最大固有値を計算した. 探索空間の基底数は 15 までとし, 標準 Petrov 空間上で反復ベクトルを生成する. 修正方程式の計算には BiCGSTAB(4), また基底数が 10 以下の場合には GMRES を用いた.

256^2 次の場合について, 逐次で最大固有値を 5 個まで求めた場合の各ルーチンの実行時間は内訳は表1の通りである.

表 1: $n = 256^2$ での実行結果

Function	Calls	Time(s)	Time(%)
zgemv	10246	319	33.40
zdotc	12615	150	15.77
zaxpy	8163	116	12.14
jdqz	1	109	11.50
jdqzmv	3479	54	5.74
zxpay	4193	54	5.68
dznrm2	5402	52	5.50
amul	3540	47	5.00
bmul	3540	31	3.26
zcgstabl	41	12	1.33
zmgs	369	3	0.32
...			

この結果から, 個々の関数についてみると, 計算時間の大部分を zgemv, zdotc, zaxpy などの Level 1, 2 BLAS ルーチンが占めていることが分かる.

4 前処理

前節の例から, Jacobi-Davidson 法において修正方程式の求解に要する計算量が大きいことが分かるが, 適当な前処理を行なうことにより, この計算量を削減することができる.

ここでは行列形式のみを利用する解法として, 高い並列性を持つことが知られている Jacobi 前処理を適用することを考える. Jacobi 法では, 係数行列は対角優位性を満たせばよく, 修正方程式の計算においても高い収束性を示すと予想される.

問題サイズ 128^2 での適用結果を図 1に示す. 横軸は修正方程式の計算回数, 縦軸は残差を対数で示した. 前処理には, 並列化した Jacobi 法を用い, Jacobi 法の反復回数は総計算時間が最小となる 150 回とした.

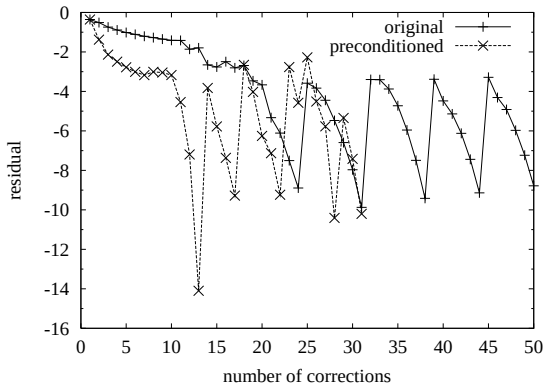

図 1: $n = 128^2$ での Jacobi 前処理の効果

この例では, 前処理を用いた場合の修正回数は, 前処理を行なわない場合の修正回数の約 50% であり, 計算時間についても約 50% である. 解法全体において反復解法の占める割合は大きく, またこの部分の並列化効率はそれほど高くない. Jacobi 前処理の並列化効率がほぼ 100% であることを考慮すると, 前処理を行なうことにより, Jacobi-Davidson 法の並列化効率は大きく向上するものと期待される. 詳細な数値計算結果は講演の際に示す.

5 むすび

本稿では, Jacobi-Davidson 法の数値特性についてその概要を述べるとともに, 前処理の適用とその評価結果についても報告した. 本手法は比較的新しい解法であるため, 特性については明らかになっていない点も多い. 今後, 大規模固有値解法に対する有力な解法の一つとして様々な評価を行なっていく必要がある.

参考文献

[1] D. R. Fokkema, G. L. G. Sleijpen, and H. A. van der Vorst. Jacobi-Davidson style QR and QZ algorithms for the partial reduction of matrix pencils. Technical Report 941, Department of Mathematics, Utrecht University, 1996.

[2] G. L. G. Sleijpen and H. A. van der Vorst. A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problems. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 17, No. 2, pp. 401–425, 1996.