前処理付 Jacobi-Davidson 法の数値特性
Numerical Characteristics of the Precondioned Jacobi-Davidson Methods

東京大学大学院情報理工学系研究科
西田 晃　　小柳 義夫
NISHIDA Akira and OYANAGI Yoshio
Department of Computer Science, The University of Tokyo

Abstract

The Jacobi-Davidson method, which was recently proposed by Sleijpen and van der Vorst [9], is a promising alternative to the Lanczos/Arnoldi approach. In fact, the Lanczos/Arnoldi approach is suitable for computing extreme eigenvalues of general sparse matrices, whereas the Jacobi-Davidson method does not have such restrictions. In this presentation, the characteristics of the Jacobi-Davidson method and its preconditioners will be surveyed and evaluated by numerical experiments.

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 [1] 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 [8, 9] 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 [4] をもとに, Jacobi 法 [6] 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 [5, 9] 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, 前処理付 Jacobi-Davidson 法の実装結果と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

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

[1] 以下単に最大固有値と書く.

input a starting vector v and a tolerance ϵ;
compute $u_1 = v_1 = v/ \parallel v \parallel_2$;
$w_1 = Av_1,\ \theta = h_{1,1} = w_1^* v_1,\ r = w_1 - \theta v_1$;
for $k = 2, ...$
　solve approximately a $z \perp u$ from
　　$(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)z = -r$;
　for $j = 1, ..., k-1$
　　$z = z - (z^* v_j)v_j$;
　$v_k = z/ \parallel z \parallel_2,\ w_k = Av_k$;
　for $j = 1, ..., k$
　　$h_{j,k} = w_k^* v_j$;
　compute the largest eigenpair (θ, y)
　of the matrix H_k with $\parallel y \parallel = 1$;
　compute the Ritz vector $u = Vy$
　and $\tilde{u} = Au = Wy$;
　$r = \tilde{u} - \theta u$;
　stop if $\parallel r \parallel_2 \leq \epsilon$;

図 1: JD 法による最大固有値の計算

を満たすので, ここに 式 (4) を代入すれば

$$(A_P - \lambda I)z = -r + (\lambda - \theta_k - u_k^* Az)u_k \qquad (6)$$

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

$$(A_P - \lambda I)z = -r \qquad (7)$$

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

$$(I - u_k u_k^*)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^*)z = -r \qquad (8)$$

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. 具体的なアルゴリズムを図 1 に示す. 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　前処理

Jacobi-Davidson 法においては, 反復法による (8) の計算を効率的に行なう必要がある.　そこで以下では Jacobi-Davidson 法の前処理について考える [10]. 式 (8) の近似解を $\tilde{z}$ とする. このとき, $\tilde{z} \perp u_k$ より,

$$(A - \theta_k I)\tilde{z} - \alpha u_k = -r \qquad (9)$$

solve $\bar{u}$ from $M_k \bar{u} = u$;
compute $\tilde{r} \equiv \tilde{M}_k^{-1} r$ as:
　solve x from $M_k x = r$;
　$\tilde{r} = x - \frac{u^* x}{u^* \bar{u}} \bar{u}$;
solve approximately $\tilde{M}_k^{-1} \tilde{A} z = -\tilde{r}$
with $z_0 = 0$;

図 2: 左前処理を用いた修正方程式の計算部分

が成り立つので, $A - \theta_k I$ を M_k で近似すれば,

$$\tilde{z} = -M_k^{-1} r + \alpha M_k^{-1} u_k \qquad (10)$$

と表すことができる. この場合にも近似解は u_k と直交する空間に限定されるので, 実際には近似演算子として

$$\tilde{M}_k = (I - u_k u_k^*) M_k (I - u_k u_k^*) \qquad (11)$$

を用いる必要がある. 左前処理では, 演算子として $\tilde{M}_k^{-1}\tilde{A}$ ($\tilde{A} = (I - u_k u_k^*)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^*)$) を用いる. この場合, 反復ベクトル y に対して $\tilde{y} = (A - \theta_k I)y$ と置くと, $y \perp u_k$ より

$$\begin{aligned} \tilde{A}y &= (I - u_k u_k^*)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^*)y & (12)\\ &= (I - u_k u_k^*)(A - \theta_k I)y & (13)\\ &= (I - u_k u_k^*)\tilde{y} & (14) \end{aligned}$$

となるので, $\tilde{M}_k^{-1}\tilde{A}y = \hat{y}$ は

$$\tilde{M}_k \hat{y} = (I - u_k u_k^*)\tilde{y} \qquad (15)$$

を解くことによって求めることができる. 実際には, $\hat{y}$ と u_k との直交性から

$$M_k \hat{y} = \tilde{y} - \alpha u_k \qquad (16)$$

と書けるので, $M_k \bar{y} = \tilde{y}$, $M_k \bar{u} = u_k$ とすれば

$$\hat{y} = \bar{y} - \alpha \bar{u} \qquad (17)$$

より $\hat{y}$ の直交条件を用いて

$$\alpha = \frac{u_k^* \bar{y}}{u_k^* \bar{u}} \qquad (18)$$

を得る. 以上をまとめたものを図 2 に示す.

4　実装と性能評価

Jacobi-Davidson 法の特性を評価するため, 本研究では上記アルゴリズムの実装手法について検討し

た． プログラムに関しては，Fokkema, van Gijzen [5] らによる JDQZ ルーチンをベースとした．JDQZ は複素行列及び一般化固有値問題に対応している．反復解法の記述には Templates [2]，また線形演算には BLAS, LAPACK を用いているため，実装に当たってはこれらのライブラリを必要とする．

評価に使用した環境は，Intel Pentium III Xeon (550MHz, 512KB L2 cache) を 4 要素搭載した Dell Computer 社製対称型マルチプロセッサ PowerEdge 6300 (450NX chipset, 768MB main memory) 上の Solaris 7 で，コンパイラには Portland Group 社の PGI Fortran を用いた．

まず，固有値が既知である実対称行列を用いて計算量に関する評価を行なった． 対角要素 2，副対角要素 -1 の n 次 3 重対角行列 A_1，及び $n = N^2$ 次 5 重対角行列

$$A_2 = \begin{pmatrix} T_N & -I & & O \\ -I & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I \\ O & & -I & T_N \end{pmatrix}, \qquad (19)$$

$$T_N = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & O \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ O & & -1 & 4 \end{pmatrix} \qquad (20)$$

の固有値は，それぞれ解析的に $2-2\cos[k\pi/(n+1)]$, $k = 1, ..., n$, $4-2(\cos(k\pi/(N+1))+\cos(j\pi/(N+1))$, $j, k = 1, ..., N$ で与えられる．ここでは，残差の許容範囲を 10^{-8} として，A_1, A_2 の最大固有値を計算した．探索空間の基底数は 10–15 の範囲とし，標準 Petrov 空間上で反復ベクトルを生成した．修正方程式の計算には BiCGSTAB(4) を用いた．

表 1: Jacobi-Davidson 法による最大固有値の計算時間

Size	Time(s)	
n	A_1	A_2
32^2	2	1
64^2	50	12
128^2	4328	60
256^2	—	396

まず，問題サイズと計算時間の関係を表 1に示す．表 2 は 256^2 次の A_1 について計算した場合のプロファイラによる解析結果であるが，BiCGSTAB の計算時間が全体の約 85% を占めている．A_1, A_2 の条件数はそれぞれ

$$\frac{4}{2-2\cos\left(\frac{\pi}{n+1}\right)} \approx \frac{4}{\pi^2}n^2, \qquad (21)$$

$$\frac{8}{4-4\cos\left(\frac{\pi}{N+1}\right)} \approx \frac{4}{\pi^2}N^2 \qquad (22)$$

で見積もることができるので，A_1 の場合の収束が遅い原因は反復解法の収束の遅れにあると考えられるが，このように，Jacobi-Davidson 法においては修正方程式の計算の高速化が不可欠であることが分かる．

表 2: A_1, $n = 128^2$ での実行結果

Function	Calls	Cost(s)	Time(%)
`jdqz`	1	4328	100.00
`zcgstabl`	990	3659	84.55
`zgemv`	298096	1064	24.59
`zdotc`	344829	794	18.35
`zaxpy`	230778	719	16.63
...			

次に，256^2 次の A_2 について，逐次で実行した場合の解析結果を表 3に示す． 最大固有値は 5 個まで求めた．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．なお，`zgemv` は行列 - ベクトル積，`zdotc` はベクトル内積，また `zaxpy`, `zxpay` はベクトル和を計算するための関数である．

表 3: A_2, $n = 256^2$ 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
...			

5 前処理

式 (10) において，前処理行列 M_k の取り方により，いくつかの方法が考えられる．$M_k = I$ と取る

場合は,

$$\tilde{z} = -r + \alpha u_k = -Au_k + (\theta_k + \alpha)u_k \qquad (23)$$

であることから, 右辺第 1 項より Arnoldi 法と同値である. また, $M_k = A - \theta_k I$ と取る場合は,

$$\tilde{z} = -u_k + \alpha(A - \theta_k I)^{-1}u_k \qquad (24)$$

であることから, 右辺第 2 項よりシフト付逆反復法と同値である. $M_k = \mathrm{diag}(A)$ とする場合もこれに含まれる.

一方, 式 (8) を近似的に解く場合は, 係数行列 $B = (I - u_k u_k^*)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^*)$ に関して方程式 $B\tilde{z} = -r$ を近似的に解くことになる. 実装方式については, QMR 法やブロック ILU 分解による前処理の実装例が報告されているが [3, 7], 一般行列に対する Jacobi-Davidson 法の前処理としては,

1. 問題の物理的性質を仮定しないこと
2. 演算量が小さいこと
3. 並列性の高い解法であること

の各条件を満たす必要がある. そこで, 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ブロック Jacobi 前処理法を適用することを考える. ブロック Jacobi 法では, 係数行列はブロック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姓を示すと予想される. この場合のアルゴリズムは以下のように構成される.

solve $\bar{u}$ from $M_k\bar{u} = u$;
compute $\tilde{r} \equiv \tilde{M}_k^{-1}r$ as:
    solve x approximately from $M_k x = r$
    by the block Jacobi method;
    $\tilde{r} = x - \frac{u^*x}{u^*\bar{u}}\bar{u}$;
apply BiCGSTAB to solve $\tilde{M}_k^{-1}\tilde{A}z = -\tilde{r}$
approximately with $z_0 = 0$ as:
    solve x' from $M_k x' = (A - \theta_k I)z$;
    $y' \equiv \tilde{M}_k^{-1}\tilde{A}z = x' - \frac{u^*x}{u^*\bar{u}}\bar{u}$;

図 3: Jacobi 前処理を用いた修正方程式の計算部分

具体的な数値計算結果については講演の際に示す.

6 まとめと今後の課題

本稿では, アルゴリズムを中心に, 前処理付 Jacobi-Davidson 法とその実装方式及び数値特性について検討した. 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] Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe, and H. van der Vorst, editors. *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems : A Practical Guide*. SIAM, 2000.

[2] R. Barrett, M. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and H. van der Vorst. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*. SIAM, 1994.

[3] A. Basermann. Parallel Jacobi-Davidson Methods with Iterative Preconditioning for the Solution of Large Sparse Hermitian Eigenproblems. In *Proceedings of the Ninth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing*, CD-ROM, SIAM, Philadelphia, 1999.

[4] E. R. Davidson. The iterative calculation of a few of the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real symmetric matrices. *J. Comp. Phys.*, Vol. 17, pp. 87–94, 1975.

[5] 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.

[6] C. G. J. Jacobi. Über ein leichtes Verfahren, die in der Theorie der Säcularstörungen vorkommenden Gleichungen numerisch aufzulösen. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, pp. 51–94, 1846.

[7] M. Nool and A. van der Ploeg. A parallel Jacobi-Davidson-Type method for solving large generalized eigenvalue problems in magnetohydrodynamics. *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 22, No. 1, pp. 95–112, 2000.

[8] G. L. G. Sleijpen and H. A. van der Vorst. The Jacobi-Davidson method for eigenvalue problems and its relation with accelerated inexact Newton schemes. Technical report, Department of Mathematics, Utrecht University, 1995.

[9] 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.

[10] G. L. G. Sleijpen, H. A. van der Vorst, and E. Meijerink. Efficient expansion of subspaces in the Jacobi-Davidson method for standard and generalized eigenproblems. Technical Report 1047, Department of Mathematics, Utrecht University, 1998.