

# Jacobi-Davidson 法とその性能評価

西田 晃<sup>†</sup> 小柳 義夫<sup>†</sup>

近年 Sleijpen, van der Vorst らによって提案された Jacobi-Davidson 法は、大規模疎行列の固有値解法としていくつかの新しい性質を持ち、注目を集めている。実際、従来の Lanczos/Arnoldi 系の解法が外部固有値の計算に適しているのに対し、Jacobi-Davidson 法にはそのような制約がない。本研究では、この手法の評価を行ない、大規模固有値解法としての有効性を検討する。

## The Jacobi-Davidson Method and its Evaluation

AKIRA NISHIDA<sup>†</sup> and YOSHIO OYANAGI<sup>†</sup>

The Jacobi-Davidson method, which has been recently proposed by Sleijpen and van der Vorst et al., is a hopeful alternative to Lanczos/Arnoldi approach, which is suitable for computing extreme eigenvalues of sparse general matrices. In this study, the characteristics and the performance of the Jacobi-Davidson method are investigated.

### 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、問題サイズ  $n$  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の解法であるといえるが、固有値間の分離が十分でない場合に、正確に固有値を計算することが難しいことが知られている。

Jacobi-Davidson 法は、このように比較的条件的悪い場合にも正確な固有値を計算できる<sup>7)</sup> 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。今回はこの手法の概要を紹介するとともに、他の固有値解法との関係について述べる。

### 2. Jacobi-Davidson 法

Jacobi-Davidson 法は、従来 Davidson 法<sup>5)</sup> として提案された手法に、Jacobi 法<sup>8)</sup> の考え方をを用いて改良を加えたものである。本節では、Davidson 法をもとに、Jacobi-Davidson 法の導出を行なう。

#### 2.1 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<sup>\*</sup> を求める。

次元  $k$  の部分空間  $\mathcal{K} = \text{span}\{v_1, \dots, v_k\}$  上で、行列  $A$  の Ritz 値  $\theta_k$  及び Ritz ベクトル  $u_k$  を考える。ここで  $v_1, \dots, v_k$  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。

$$M_k t = r, \quad M_k = D_A - \theta_k I \quad (1)$$

$D_A$  は  $A$  の対角成分である。さらに  $t$  を  $\mathcal{K}$  と直交化させて  $v_{k+1}$  を得る。  $V_{k+1} = [v_1, \dots, v_{k+1}]$  と置けば、新しい固有対  $(\theta_{k+1}, u_{k+1})$  は

$$H_{k+1} = V_{k+1}^* A V_{k+1} \quad (2)$$

について計算されることになるが、このことから、  $M_k = I$  の場合に、Davidson 法は Lanczos/Arnoldi 法と同一となることが分かる<sup>\*\*</sup>。

ところが、ここで

$$M_k^{-1} \approx (A - \theta_k I)^{-1} \quad (3)$$

を残差ベクトル  $r$  に対する前処理行列と考えれば分かるように、この方法では  $\theta_k$  に対応する近似固有ベクトル  $u_k$  の方向の成分を増幅させる結果となり、特に  $A$  が対角行列である場合には、新しい固有ベクトル成分を得ることができない。実際、この方法では極めて対角優位な行列の最大固有値を求める場合にしか顕著な効果が得られないことが知られている<sup>13)</sup>。

<sup>†</sup> 東京大学大学院理学系研究科情報科学専攻  
Division of Information Science, School of Science, the  
University of Tokyo

<sup>\*</sup> 以下単に最大固有値と書く。

<sup>\*\*</sup> Davidson 法は一種の加速付 Lanczos/Arnoldi 法と考えることができる。

```

input a starting vector  $v$  and a tolerance  $\epsilon$ ;
compute  $u_1 = v_1 = v / \|v\|_2$ ;
 $w_1 = Av_1$ ,  $\theta = h_{1,1} = w_1^* v_1$ ,  $r = w_1 - \theta v_1$ ;
for  $k = 2, \dots$ 
  solve approximately a  $z \perp u$  from
     $(I - uu^*)(A - \theta I)(I - uu^*)z = -r$ ;
  for  $j = 1, \dots, k - 1$ 
     $z = z - (z^* v_j) v_j$ ;
   $v_k = z / \|z\|_2$ ,  $w_k = Av_k$ ;
  for  $j = 1, \dots, k$ 
     $h_{j,k} = w_k^* v_j$ ;
  compute the largest eigenpair  $(\theta, y)$ 
  of the matrix  $H_k$  with  $\|y\| = 1$ ;
  compute the Ritz vector  $u = Vy$ 
  and  $\tilde{u} = Au = Wy$ ;
   $r = \tilde{u} - \theta u$ ;
  stop if  $\|r\|_2 \leq \epsilon$ ;

```

図1 JD法による最大固有値の計算

## 2.2 Jacobi-Davidson 法

したがって、ここでは  $u_k$  の直交補空間から更新のための成分を取り出すことを考える<sup>\*</sup>。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

$$A_P = (I - u_k u_k^*) A (I - u_k u_k^*) \quad (4)$$

で表されるが、これは

$$A_P = A_P + u_k u_k^* A + A u_k u_k^* - \theta_k u_k u_k^* \quad (5)$$

と書き直すことができる。修正ベクトル  $z$  は

$$A(z + u_k) = \lambda(z + u_k), \quad z \perp u_k \quad (6)$$

を満たすので、ここに (5) を代入すれば

$$(A_P - \lambda I)z = -r + (\lambda - \theta_k - u_k^* A z) u_k \quad (7)$$

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

$$(A_P - \lambda I)z = -r \quad (8)$$

の計算に帰着されることが分かる。実際には  $\lambda$  の値を知ることにはできないが、(8) は厳密に解く必要がないため、ここでは代わりに  $\theta_k$  を用いて

$$(I - u_k u_k^*)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^*)z = -r \quad (9)$$

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  $\theta_{k+1}$  となる。具体的なアルゴリズムを図 1 に示す。

## 2.3 前処理

Jacobi-Davidson 法においては、反復法による (9) 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。

```

solve  $\tilde{u}$  from  $M_k \tilde{u} = u$ ;
compute  $\tilde{r} \equiv \tilde{M}_k^{-1} r$  as:
  solve  $x$  from  $M_k x = r$ ;
   $\tilde{r} = x - \frac{u^* x}{u^* \tilde{u}} \tilde{u}$ ;
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

(9) の近似解を  $\tilde{z}$  とする。このとき、  $\tilde{z} \perp u_k$  より、

$$(A - \theta_k I)\tilde{z} - \alpha u_k = -r \quad (10)$$

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

$$\tilde{z} = -M_k^{-1} r + \alpha M_k^{-1} u_k \quad (11)$$

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

$$\tilde{M}_k = (I - u_k u_k^*) M_k (I - u_k u_k^*) \quad (12)$$

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

$$\tilde{A}y = (I - u_k u_k^*)(A - \theta_k I)(I - u_k u_k^*)y \quad (13)$$

$$= (I - u_k u_k^*)(A - \theta_k I)y \quad (14)$$

$$= (I - u_k u_k^*)\tilde{y} \quad (15)$$

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

$$\tilde{M}_k \hat{y} = (I - u_k u_k^*)\tilde{y} \quad (16)$$

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

$$M_k \hat{y} = \tilde{y} - \alpha u_k \quad (17)$$

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

$$\hat{y} = \tilde{y} - \alpha \tilde{u} \quad (18)$$

より  $\hat{y}$  の直交条件を用いて

$$\alpha = \frac{u_k^* \tilde{y}}{u_k^* \tilde{u}} \quad (19)$$

を得る。以上をまとめたものを図 2 に示す。

## 3. 複素固有値の計算

### 3.1 JDQR

次に、減次を用いて複数の固有値を求めることを考える。行列  $A$  の部分 Schur 形を

$$A Q_k = Q_k R_k, \quad k \leq n \quad (20)$$

とする。ここで  $Q_k$  は  $n \times k$  正規直交行列、  $R_k$  は  $k \times k$  上三角行列である。このとき  $R_k$  の固有対を  $(x, \lambda)$  とすると、  $A$  の固有対は  $(Q_k x, \lambda)$  となる。部分 Schur 形は以下のように計算する。

- (1) 正規直交基底  $V_i = [v_1, \dots, v_i]$  に対して、射影行列  $M = V_i^* A V_i$  を求め、QR 法により Schur 形  $M = US$ ,  $U^* U = I$  を計算する。  $\tau$  に近い固有値を求める場合、  $|s_{i,i} - \tau|$  が昇順に並ぶよう  $S$  の列を交換すると、  $s_1, s_2, \dots$  の順に、必要な固有

<sup>\*</sup> この手法は Jacobi's orthogonal component correction (JOCC) と呼ばれ、Davidson 法もこれに含まれる<sup>8),13)</sup>。

値に近い近似固有ベクトルが並ぶ。この過程で、記憶容量に応じてリスタートを行なうこともできる。

(2) 次に部分空間の拡張を行なう。既に  $k$  次の部分 Shur 形が得られているとすると、

$$A[Q_k, q] = [Q_k, q] \begin{bmatrix} R_k & s \\ & \lambda \end{bmatrix}, \quad (21)$$

$$Q_k^* q = 0 \quad (22)$$

$$\begin{aligned} &\text{となるベクトル } q \text{ を定めればよいが、このとき} \\ &(I - A_k Q_k^*)(A - \lambda I)(I - Q_k Q_k^*) = 0 \end{aligned} \quad (23)$$

が成り立つ。  $q$  は

$$\hat{A} = (I - A_k Q_k^*)A(I - Q_k Q_k^*) \quad (24)$$

の固有ベクトルであるので、  $\hat{A}$  に対する Jacobi-Davidson 法により計算することができる。以上アルゴリズムは JDQR 法と呼ばれている。

### 3.2 前処理

$A - \theta I$  に対する前処理行列  $M_k$  が既に得られていると仮定する。  $\tilde{Q}_{k-1}$  を  $u$  により拡張したものを  $\tilde{Q}$  とおく。  $M_k$  は  $\tilde{Q}$  の次元に制限されるので、実際には

$$\tilde{M}_k = (I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)P_k(I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*) \quad (25)$$

を用いなければならない。この場合も、以下のように簡単に前処理を行なうことができる。

修正方程式の計算において、反復の初期ベクトルは  $\tilde{Q}_k$  の空間内にあるので、全反復ベクトルはこの中に含まれる。したがって、  $v$  を反復法から得られるベクトルとすると、この部分空間内でベクトル  $z = M_k^{-1}\tilde{A}_k v$  を計算する必要がある。

これは以下のように行なう。  $\tilde{Q}^* v = 0$  より、  $y = (A - \theta I)v$  と置けば

$$\tilde{A} = (I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)(A - \theta I)(I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)v \quad (26)$$

$$= (I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)y \quad (27)$$

と書ける。左前処理の場合、

$$\tilde{M}_k u = (I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)y \quad (28)$$

を満たす  $z \perp \tilde{Q}$  を計算する。  $\tilde{Q}^* z = 0$  より、  $z$  は  $M_k z = y - \tilde{Q}\gamma$ 、すなわち  $z = M_k^{-1}y - M_k^{-1}\tilde{Q}\gamma$  を満たす。  $\gamma$  については、  $\tilde{Q}^* z = 0$  より

$$\gamma = (\tilde{Q}^* M_k^{-1} \tilde{Q})^{-1} \tilde{Q}^* M_k^{-1} y \quad (29)$$

から計算できる。

### 4. 内部固有値の計算

実際には、上の方法では  $\tau$  より大きな絶対値を持つ固有値 (内部固有値) を安定に計算することができない。これは、Ritz 値が主にスペクトルの外部にある固有値に関する情報を含んでいるためであるが、Jacobi-Davidson 法では、以下に述べる調和 Ritz 値を用いることで、この問題に対処している。

対称行列  $A$  に関する固有値問題において、Lanczos 過程では、Krylov 部分空間  $V_{i+1} = [v_1, \dots, v_{i+1}]$  を導

く。Lanczos 過程から

$$AV_i = V_{i+1}T_{i+1,i} \quad (30)$$

と書くことができる。  $(i+1) \times i$  行列のうち、第  $i+1$  行を除いた部分を  $T_{i,i}$  とする。このとき、

$$V_i^* AAV_i = T_{i+1,i}^* V_{i+1}^* V_{i+1} T_{i+1,i} \quad (31)$$

$$= T_{i+1,i}^* T_{i+1,i} \equiv M_i \quad (32)$$

と置くと、  $M_i$  は対称正定値であることから、  $M_i = U_i^* U_i$  と Cholesky 分解すれば、

$$U_i^{-*} V_i^* AAV_i U_i^{-1} = I \quad (33)$$

を得るので、  $AV_i U_i^{-1}$  は直交行列であることが分かる。これは  $AK_i(A, v_1)$  についての正規直交基底を生成する。  $A^{-1}$  を  $AK_i(A, v_1)$  に制限する射影は

$$U_i^{-*} (AV_i)^* A^{-1} AV_i U_i^{-1} \quad (34)$$

$$= U_i^{-*} (AV_i)^* V_i U_i^{-1} \quad (35)$$

$$= U_i^{-*} T_{i,i}^* U_i^{-1} \quad (36)$$

となるので、  $A^{-1}$  の固有ベクトルの近似は、

$$U_i^{-*} T_{i,i} U_i^{-1} t = \theta t \quad (37)$$

または

$$M_i^{-1} T_{i,i} s = \theta s \quad (38)$$

から求められる。実際には

$$T_{i,i}^{-1} M_i s = \theta^{-1} s \equiv \tilde{\theta} s \quad (39)$$

を解く必要があるが、これは

$$T_{i,i} + t_{i+1,i}^2 T_{i,i}^{-1} e_i e_i^* \quad (40)$$

から計算することができる。  $\tilde{\theta}$  を  $A$  の調和 Ritz 値 (harmonic Ritz value) という。

## 5. 一般化固有値問題

### 5.1 アルゴリズム

次に一般化固有値問題

$$Ax - \lambda Bx = 0 \quad (41)$$

の場合を考える。以下では Petrov-Galerkin 法によって近似最大固有対を計算する。

探索空間  $\text{span}\{v_1, \dots, v_k\}$  上の近似固有対  $(\theta, y)$  は、試験部分空間  $\text{span}\{w_1, \dots, w_k\}$  に対して以下の関係を満たすものとする。

$$AV_k y - \theta BV_k y \perp \{w_1, \dots, w_k\} \quad (42)$$

$V_k, W_k$  を前節と同様に定義し、  $(\theta_k, y_k)$  を  $k$  次元一般化固有値問題

$$W_k^* AV_k y_k - \theta_k W_k^* BV_k y_k = 0 \quad (43)$$

の解とする。このとき、  $A$  の固有対は  $(\theta_k, u_k \equiv V_k y_k)$  で近似される。  $u_k$  は Petrov ベクトル、  $\theta_k$  は Petrov 値と呼ばれる。  $u$  が固有ベクトルに収束するにつれて  $Au \approx \lambda Bu$  となることから、  $W_k$  の取り方としては、  $AV_k$  と  $BV_k$  の線形結合とするのがよい。残差を  $r = -(A - \theta_k B)u_k$  と定義すると、探索空間は、

$$(I - q_k q_k^*)(A - \theta_k B)(I - u_k u_k^*)z = -r \quad (44)$$

の解  $z \perp u_k$  により拡張される。ここで Petrov ベクトル  $u_k$ 、試験ベクトル  $q_k$  とも正規化されているものとする。一般化固有値問題に対する Jacobi-Davidson 法の

choose a starting vectors  $v$  and  $w$ ;  
set  $V = [v]$ ,  $W = [w]$ ,  $k = 0$ ;  
for  $k = 0, \dots$   
  compute eigenpairs  $(y, \theta)$  of the  
  projected eigenproblem  
   $W^*AVy - \theta W^*BVy = 0$   
  of dimension  $k + 1$ ;  
  select a solution  $y$  and associated  
  Petrov value  $\theta$ ;  
  compute the Petrov vector  $u = Vy$   
  and the residual  $r = Au - \theta Bu$ ;  
  stop if  $u$  and  $\theta$  are accurate enough;  
  select a  $w$  in  $\text{span}\{W\}$  and select  
   $\tilde{u} \perp u$  and  $\tilde{w} \perp w$ ;  
  compute an approximate solution  
   $z \perp \tilde{u}$  of the correction equation  
   $(I - \frac{\tilde{u}\tilde{w}^*}{\tilde{w}^*\tilde{u}})(A - \theta B)z = -r$ ;  
  if  $k$  is too large:  
  select an  $l < k$ , select  $k \times l$   
  matrices  $R_V, R_W$  and compute  
   $V = VR_V, W = WR_W, k = l$ ;  
  select a  $v \in \text{span}\{V, z\} \setminus \text{span}\{V\}$   
  and  $V = [V \ v]$ ;  
  select  $\tilde{v} \notin \text{span}\{W\}$  and  $W = [W, \tilde{v}]$ ;

図3 一般化固有値問題への JD 法の適用

アルゴリズムを図3にまとめる。

## 5.2 前処理

一般化固有値問題においても、標準固有値問題と同様な方法で前処理を行なうことができる。

$M_k$  を  $A - \theta_k B$  の近似とする。この場合も、実際には  
 $\tilde{M}_k \equiv (I - q_k q_k^*) M_k (I - u_k u_k^*)$  (45)

を用いる必要がある。 $y \perp q_k$  に関する系

$$z \perp u_k, \quad \tilde{M}_k z = y$$
 (46)

の解  $z$  は、 $\tilde{y} \equiv M_k^{-1} y$ ,  $\tilde{q} \equiv M_k^{-1} q_k$  と置けば、

$$z = \tilde{y} - \tilde{q} \left( \frac{1}{\mu} u_k^* \tilde{y} \right)$$
 (47)

と書ける。 $z$  は

$$z \perp q_k, \quad \tilde{M}_k z = (I - q_k q_k^*) y$$
 (48)

を満たす。ベクトル  $v$  に対する前処理は

$$y = (I - q_k q_k^*) (A - \theta_k B) (I - u_k u_k^*) v$$
 (49)

のように表される。その後 (47) を行なうことになるが、 $v$  が  $u_k$  と直交している場合には、これは  $y = (A - \theta_k B)v$  と同値である。したがって、 $u_k$  に直交な初期ベクトルを選べば、これに  $(A - \theta_k B)$  自身を作用させ、前処理 (47) を行なえばよいことが分かる。

## 5.3 JDQZ

一般化固有値問題の場合、減次による複数固有値の計算は以下に行なう。

ここでは、問題  $(\beta A - \alpha B)q = 0$  に関して、部分一般

化 Shur 形  $AQ_{k-1} = Z_{k-1}S_{k-1}$ ,  $BQ_{k-1} = Z_{k-1}T_k$  が得られていることを仮定する。(51)と同様に、適当な  $q, z$  を用いて、これを

$$A[Q_{k-1}, q] = [Z_{k-1}, z] \begin{bmatrix} S_{k-1} & s \\ \alpha & \end{bmatrix},$$
 (50)

$$B[Z_{k-1}, z] = [Q_{k-1}, q] \begin{bmatrix} T_k & t \\ \beta & \end{bmatrix}$$
 (51)

に拡張することを考える。この関係から、 $u \equiv Z_{k-1}^*(\beta A - \alpha B)q$  とすれば、一般化 Shur 対  $(q, \langle \alpha, \beta \rangle)$  について

$$Q_{k-1}^* q = 0, \quad (\beta A - \alpha B)q - Z_{k-1}u = 0$$
 (52)

を満たすことが分かるので、

$$Q_{k-1}^* q = 0,$$
 (53)

$$(I - Z_{k-1}Z_{k-1}^*)(\beta A - \alpha B)q = 0$$
 (54)

が得られる。以上から、 $(q, \langle \alpha, \beta \rangle)$  について

$$Q_{k-1}^* q = 0, \quad (I - Z_{k-1}Z_{k-1}^*)(\beta A - \alpha B)(I - Q_{k-1}Q_{k-1}^*)q = 0$$
 (56)

が成り立つので、Shur 対  $(q, \langle \alpha, \beta \rangle)$  は、減次された行列の対

$$\begin{aligned} & ((I - Z_{k-1}Z_{k-1}^*)A(I - Q_{k-1}Q_{k-1}^*), \\ & (I - Z_{k-1}Z_{k-1}^*)B(I - Q_{k-1}Q_{k-1}^*)) \end{aligned}$$
 (57)

の固有対になっていることが分かる。JDQZ では、一般化固有値問題に対する Jacobi-Davidson 法を用いてこの固有値問題を解く。

## 5.4 調和 Petrov 値

$\tau$  に近い固有値を求める場合、調和 Petrov 対  $(\theta, u) = V_k s$  は、 $W_k$  を  $W_k \equiv (A - \tau B)V_k$  となるよう (または  $(A - \tau B)V_k$  と直交するよう) 取れば、(43) の解から計算できる。

## 6. 他の手法との関係

### 6.1 Lanczos/Arnoldi 法

Jacobi-Davidson 法は加速付 Lanczos/Arnoldi 法と考えることができ、Ritz/Petrov 値を用いた場合の性質は、Lanczos/Arnoldi 系の解法と同様である。(11)において  $\tilde{z} = -r$ , すなわち  $\alpha = 0$ ,  $M = I$  である場合には、Jacobi-Davidson 法は Arnoldi 法と同等なアルゴリズムとなる。

このことから、Lanczos/Arnoldi 法と同様に、リスタート時の加速法を考えることができる。実際には、陰的リスタートを用いた Arnoldi 法<sup>9),10)</sup> は、Jacobi-Davidson 法において、修正方程式の計算に前処理なしの1ステップの GMRES 法を用いた場合と同一のアルゴリズムとなる<sup>9)</sup> ことから、一般に Lanczos/Arnoldi 法での加速<sup>10)</sup> は、Jacobi-Davidson 法における反復解法の計算に帰着されることが分かる。この意味で、Jacobi-Davidson 法は現時点で最良の固有値解法であるといえる。

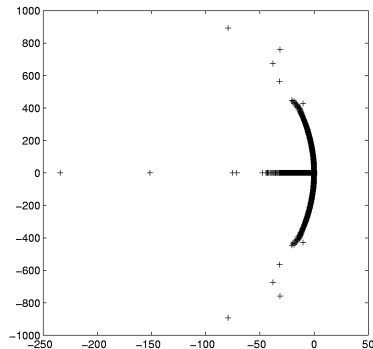


図4 MHD1280 の固有値分布

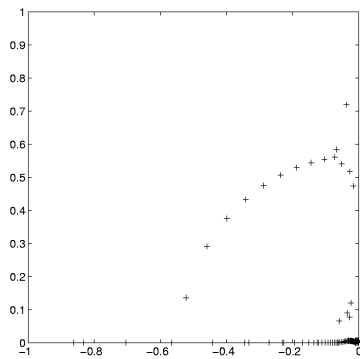


図5 MHD1280 の固有値の一部 (Alfvén part)

## 6.2 非対称 Lanczos 法

非対称 Lanczos 法<sup>4)</sup> については, Bai らにより, ABLE (Adaptive Block Lanczos Method)<sup>1)</sup> などの手法が提案されている. 図 4, 5 のような固有値分布を持つ一般化固有値問題<sup>\*</sup>では, Jacobi-Davidson 法とほぼ同等の精度で固有値を計算できる. ただしブレイクダウンの回避はアダプティブに行なう必要がある.

## 7. まとめと今後の課題

今回は, アルゴリズムを中心に Jacobi-Davidson 法についての概要を述べた. 本手法は比較的新しい解法であるため, Lanczos/Arnoldi 法との比較評価については, まだ十分な結果が報告されていない.

現時点では予備的評価の段階であるが, 今後はこれらのアルゴリズムを中心に, 大規模非対称固有値問題に対する最適な手法を調べていく予定である.

## 参考文献

- 1) Z. BAI, D. DAY, AND Q. YE, *ABLE: An adaptive block Lanczos method for non-Hermitian eigenvalue problems*, Tech. Report 95-04, De-

partment of Mathematics, University of Kentucky, 1995.

- 2) A. BASERMANN AND B. STEFFEN, *Preconditioned Solvers for Large Eigenvalue Problems on Massively Parallel Computers and Workstation Clusters*, Parallel Computing, (1998), pp. 565–572.
- 3) J. G. L. BOOTEN, H. A. VAN DER VORST, P. M. MEIJER, AND H. J. J. TE RIELE, *A preconditioned Jacobi-Davidson method for solving large generalized eigenvalue problems*, Tech. Report NM-R9414, Department of Numerical Mathematics, CWI, 1994.
- 4) J. CULLUM AND R. A. WILLOUGHBY, *A practical procedure for computing eigenvalues of large nonsymmetric matrices*, in Large Scale Eigenvalue Problems, J. Cullum and R. A. Willoughby, eds., North-Holland, pp. 193–240.
- 5) E. R. DAVIDSON, *The iterative calculation of a few of the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real symmetric matrices*, J. Comp. Phys., 17 (1975), pp. 87–94.
- 6) J. J. DONGARRA, I. S. DUFF, D. C. SORENSEN, AND H. A. VAN DER VORST, *Numerical Linear Algebra for High Performance Computers*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 1998.
- 7) D. R. FOKKEMA, G. L. G. SLEIJPEN, AND H. A. VANDER VORST, *Jacobi-Davidson style QR and QZ algorithms for the partial reduction of matrix pencils*, Tech. Report 941, Department of Mathematics, Utrecht University, 1996.
- 8) C. G. J. JACOBI, *Ueber ein leichtes Verfahren, die in der Theorie der Säcularstörungen vorkommenden Gleichungen numerisch aufzulösen*, Journal für die reine und angewandte Mathematik, (1846), pp. 51–94.
- 9) R. LEHOUCQ, *ARPACK User's Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems with Implicitly Restarted Arnoldi Methods*, Society for Industrial & Applied Mathematics, 1998.
- 10) A. NISHIDA, *Polynomial Acceleration for Large Nonsymmetric Eigenproblems*, PhD thesis, the University of Tokyo, Tokyo, Mar. 1998.
- 11) G. L. G. SLEIJPEN, J. G. L. BOOTEN, D. R. FOKKEMA, AND H. A. VAN DER VORST, *Jacobi-davidson type methods for generalized eigenproblems and polynomial eigenproblems*, BIT, 36 (1996), pp. 595–633.
- 12) 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*, tech. report, Department of Mathematics, Utrecht University, 1995.

<sup>\*</sup> 電磁流体力学で扱われる.<sup>3)</sup>

- 13) G.L.G. SLEIJPEN AND H.A. VANDER VORST, *A jacobi-davidson iteration method for linear eigenvalue problems*, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 17 (1996), pp. 401–425.
- 14) G.L.G. SLEIJPEN, H.A. VANDER VORST, AND E. MEIJERINK, *Efficient expansion of subspaces in the jacobi-davidson method for standard and generalized eigenproblems*, Tech. Report 1047, Department of Mathematics, Utrecht University, 1998.
- 15) H.A. VANDER VORST, *Jacobi-Davidson Methods for Symmetric Eigenproblems*, in Proceedings of Copper Mountain Conference on Iterative Methods, vol. I, Copper Mountain, USA, Apr. 1998.