

# 特征值问题的 Davidson 型方法及其实现技术<sup>\*1)</sup>

戴小英 高兴誉

(中国科学院数学与系统科学研究院计算数学与科学工程计算研究所  
科学与工程计算国家重点实验室 北京 2719 信箱 100080)  
(中国科学院研究生院 北京 100080)

周爱辉

(中国科学院数学与系统科学研究院计算数学与科学工程计算研究所  
科学与工程计算国家重点实验室 北京 2719 信箱 100080)

## 摘 要

Davidson 方法及其变型是一类非常流行的求解大规模特征值问题的方法. 本文将从理论和实现两个角度, 综述了 Davidson 型方法, 包括 Jacobi-Davidson 方法的基本思想和发展概况.

**关键词:** 子空间方法, Davidson 方法, Jacobi-Davidson 方法, Ritz 值, 特征值

## THE DAVIDSON TYPE METHOD AND ITS IMPLEMENTATION

Dai Xiaoying Gao Xingyu

(LSEC, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing  
Academy of Mathematics and Systems Science  
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, P.O. Box 2719, China)  
(Graduate University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Zhou Aihui

(LSEC, Institute of Computational Mathematics and Scientific/Engineering Computing  
Academy of Mathematics and Systems Science  
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, P.O. Box 2719, China)

## Abstract

Davidson method together with its variants is considered as the most popular solution approaches to large scale eigenvalue problems. This survey is concerned with the Davidson type method and its application. Both theoretical and practical issues, including the state of art in this method, are addressed.

**Key words:** Subspace iteration, Davidson method, Jacobi-Davidson method, Ritz value, Eigenvalue

\* 2005 年 12 月 1 日收到.

1) 国家自然科学基金项目 10425105 和国家重点基础研究发展计划项目 2005CB321704 资助.

## §1. 引 言

当今科学和工程计算面临的基本问题之一是如何有效地求解大规模特征值问题. Davidson 方法及其变型便是一类非常有效的求解大规模特征值问题的方法. 为解决量子化学中的特征值问题, Davidson 方法于 1975 年应运而生<sup>[17, 18, 56, 103]</sup>. 最初, Davidson 方法是通过摄动方法得到的, 其主要思想是用一个包含着特征方向更多信息的向量扩充搜索子空间来提高效率. Davidson 方法后来演变成成为计算对角占优 Hermite 矩阵几个最小特征值的有效方法, 对角占优 Hermite 矩阵在量子化学中有着广泛的应用背景. 可惜的是, 对非对角占优的 Hermite 矩阵, Davidson 方法的表现不如人意, 而且精度很高的预条件子会导致收敛减慢甚至停滞<sup>[16, 69]</sup>. 这一点直到 Jacobi-Davidson 方法的出现才有了合理的解释.

十年前, Sleijpen 和 Van der Vorst 将 Jacobi 方法<sup>[42]</sup>的校正思想和 Davidson 方法的内外迭代模式相结合, 提出了 Jacobi-Davidson 方法<sup>[76]</sup>. 这一方法被认为是最好的特征值求解器之一, 特别是这一方法对求解中间特征值有优势. Jacobi-Davidson 方法的核心是通过解校正方程扩充搜索子空间. 校正方程的解将带来一个更有前途的近似特征方向. 良好的收敛性质使得我们只需少数的迭代与适中的精度求解内部系统, 从而克服了 Arnoldi-Lanczos 型方法的缺点. 另外, 通过投影得到的校正向量可以避免 Davidson 方法中可能的停滞, 允许应用高精度的预条件子. Davidson 方法与 Jacobi-Davidson 方法之间的差异看起来比较微妙, 但非常重要.

近年来, Jacobi-Davidson 方法与多水平和区域分解等技术相结合, 构造出了更加普适且具并行效力的预条件子. 同时, 在处理特殊的特征值问题中, Jacobi-Davidson 方法得到进一步的改进, 并由此发展出了一些很有意义的变型. 各种改进 Davidson 型方法的更多细节及其应用见文后所附参考文献.

本文以下结构是这样组成: 第 2 节介绍了 Davidson 方法、Jacobi-Davidson 方法以及它们的基本思想与主要变型. 第 3 节从优化的观点分析了 Davidson 型方法的效率. 第 4 节着重讨论了 Jacobi-Davidson 方法的实现技术, 包括重新开始策略、压缩技术、预优化、调和 Ritz 对等, 其中特别介绍了采用区域分解和多水平技术生成校正方程的预条件子. 第 5 节讨论了 Jacobi-Davidson 方法在 (非)Hermite 标准和广义特征值问题中的实现, 并且特别介绍了实施 Davidson 型方法求解电子结构计算中的特征值问题时需要注意的几个事项. 最后是相关注记.

## §2. Davidson 方法和 Jacobi-Davidson 方法

这一节主要介绍 Davidson 方法和 Jacobi-Davidson 方法, 包括它们的基本思想及相关变型.

### 2.1. Davidson 方法

Davidson 方法是一种子空间迭代方法, 所以我们首先介绍子空间迭代方法的基本构架. 给定一个  $n \times n$  的大型稀疏矩阵  $A$ , 我们要寻找一些感兴趣的特征对  $(\lambda, x)$ , 满足

$$Ax = \lambda x.$$

感兴趣的特征值通常只是谱的一部分, 比如最大或最小的几个特征值和相应的特征向量. 更一般的讲, 希望找到距离某个目标  $\tau$  很近的特征值. 早期的方法, 像乘幂法<sup>[30]</sup>, 每次在一个向量上进行迭代. 现在的大多数方法是构造一系列维数不断增加的子空间, 在极限意义下这个子空间将包含我们想要的特征向量. Arnoldi-Lanczos 型方法<sup>[4, 48, 69]</sup> 和 Davidson 方法<sup>[17, 16, 51, 54, 69]</sup> 都是典型的子空间方法. 子空间方法的每一步迭代由两个环节组成: 子空间提取和子空间扩张. 在提取阶段, 将特征值问题 (直交) 投影到测试空间上 (如果搜索空间和测试空间相同), 通过求解既约的特征值问题在搜索空间中产生一个近似特征向量. 在扩张阶段, 我们添加一个新的基向量, 以期扩张后的搜索子空间包含更多特征向量的信息. 扩张阶段是子空间方法的关键所在, 它将直接影响方法的效率. 为了描述这两个阶段, 我们需要引入下面的定义:

Ritz 值.  $\mathcal{V}_m$  是  $m$  维搜索空间,  $V_m$  是  $n \times m$  的矩阵, 其列向量构成  $\mathcal{V}_m$  的标准直交基. 如果如下的 Ritz-Galerkin 条件成立:

$$Au - \theta u \perp \mathcal{V}_m, \quad (1)$$

则称  $\theta$  和  $u$  分别为  $n \times n$  矩阵  $A$  关于  $\mathcal{V}_m$  的 Ritz 值和 Ritz 向量, 其中  $u \in \mathcal{V}_m, u \neq 0$ . 关系式 (1) 等价于一个既约的特征值问题

$$V_m^* A V_m s = \theta s. \quad (2)$$

对应的 Ritz 向量为  $u = V_m s$ . 从 (1) 可以看出  $r = Au - \theta u$  残量垂直于  $\mathcal{V}_m$ . Ritz 对  $(\theta, u)$  能否很好地估计特征对  $(\lambda, x)$  取决于特征向量  $x$  与  $\mathcal{V}_m$  的夹角. 如果  $A$  是正规的, 那么 Ritz 值是特征值的凸组合. 这至少在正规矩阵的情形解释了外部 Ritz 值的规则收敛. 关于对称矩阵 Ritz 值收敛行为的进一步讨论可参考 [67, 95].

当矩阵是 Hermite 的时候, Davidson 方法可以视为一种推广的 Lanczos 方法. 它把原特征值问题投影到一组维数不断增加的子空间上. Davidson 方法是预优化的 Lanczos 方法, 不同之处在于每次迭代后都需要正交化. 假设我们有一个  $k$  维子空间  $\mathcal{V}$ , 它的一个直交基是  $v_1, \dots, v_k$ . 矩阵  $A$  关于  $\mathcal{V}_m$  的 (最大) Ritz 值和 Ritz 向量分别为  $\theta_k$  和  $u_k$ . 计算残量  $r = Au_k - \theta_k u_k$ . 原始的 Davidson 方法<sup>[17]</sup> 通过  $(D - \theta_k I)t = r$  解得  $t$ , 其中  $D$  是  $A$  的对角部分. 然后将  $t$  与  $v_1, \dots, v_k$  做正交化得到  $v_{k+1}$ , 而  $v_{k+1}$  就是用来扩充空间的基向量. 更一般的方法是用预条件子  $M$  代替  $D$ . 以下是 Davidson 方法的基本算法<sup>[6]</sup>:

### 算法 1. Davidson 方法

1. 开始. 选择初始单位向量  $v_1$ .
2. 迭代. 直到收敛.
3. 内部循环. 对  $j = 1, \dots, m$  做:
  - 计算  $w := Av_j$ .
  - 计算  $H_j := V_j^T A V_j$  的最后一列  $V_j^T w$ .

- 计算  $H_j$  的最大的特征对  $(\theta, y)$ .
- 计算 Ritz 向量  $u := V_j y$  及相应的残量  $r := Au - \theta u$ .
- 检验是否收敛. 如果收敛, 返回.
- 计算  $t := M_j r$  (如果  $j = m$ , 跳过).
- 采用修正的 Gram-Schmidt 方法将  $t$  与  $V_j$  正交化:  $V_{j+1} := MGS([V_j, t])$  (如果  $j = m$ , 跳过).

4. 重新开始. 置  $v_1 := u$ , 跳转至第 3 步.

预条件矩阵  $M_j$  通常是  $(A - \theta I)^{-1}$  的近似. 我们已经提到, 最简单最一般的预条件子是  $(D - \theta I)^{-1}$ , 其中  $D$  是  $A$  的对角部分, 即所谓的 Jacobi 预条件子. 当  $A$  近乎一个对角矩阵时,  $A$  的特征向量几乎组成一个单位矩阵, 这时 Jacobi 预条件子才有效. 这种情形经常出现在量子化学的计算中, 从而解释了为什么 Davidson 方法在量子化学中取得了巨大成功 [69]. 应该注意到, 如果不采用预优化, 即对所有  $j$ ,  $M_j = I$ , 那么算法 1 产生的  $v_j$  与 Lanczos 方法是相同的. 当然, 我们可以在 Davidson 方法中应用更复杂的预条件子 [16, 51, 53, 54]. 同时也注意到  $(A - \theta I)^{-1}$  将  $r$  映射到  $u$ , 这似乎意味着精度很高的预条件子可能导致收敛变慢甚至停滞. 显然, 这是对预条件子的错误解释. 注意到, Davidson 方法可看成是一种 Newton 法, 因而它的快速收敛性得到自然的解释 (见下一小节). 关于 Davidson 方法收敛性分析和数值试验可参见 [52, 53, 61, 85].

另外值得一提的是, 块方法更适于寻找一簇彼此靠得很近的特征值. 在块方法中, 我们将同时计算  $H_j$  的几个特征对. 相应的, 每次迭代后将同时增加几个基向量来扩充子空间.

## 2.2. Jacobi-Davidson 方法

顾名思义, Jacobi-Davidson 方法是 Jacobi 方法和 Davidson 方法的组合. 为了更好地介绍 Jacobi-Davidson 方法, 让我们回顾一下 Jacobi 方法的主要思想.

已知  $(\theta, u)$  是对特征对  $(\lambda, x)$  的估计, 我们希望寻找一个垂直于  $u$  的向量  $t$ , 满足

$$A(u + t) = \lambda(u + t). \quad (3)$$

假定  $\tilde{\lambda}$  是当前可以得到的对特征值  $\lambda$  的最好估计. 实际中, 当近似特征对  $(\theta, u)$  足够好时, 可选取  $\tilde{\lambda} = \theta$ . 估计的好坏程度可以通过计算残量的模来检验. 然而, 当迭代刚开始的时候, 如果想找与某个目标  $\tau$  很近的特征值, 则最好选取  $\tilde{\lambda} = \tau$ . 我们将方程 (3) 重新写成

$$(A - \tilde{\lambda}I)t = -r + (\lambda - \tilde{\lambda})u + (\lambda - \tilde{\lambda})t, \quad (4)$$

其中  $r = Au - \tilde{\lambda}u$ . 我们认为  $\|t\|$  和  $|\lambda - \tilde{\lambda}|$  可以很小, 所以舍去右端最后一项. 事实上, 在渐近阶段 (收敛接近特征对的时候), 这一项等同一个二阶误差项 ( $\mathcal{O}(\|t\|^2)$ ) [36]. 对 Hermite 矩阵, 它甚至是一个三阶误差项. 右端的第二项是一个一阶误差项. 如果将它也舍去, 那么我们发现 Jacobi 校正方程正是 Davidson 方法的内部线性方程. Jacobi [42] 用  $u + v$  更新  $u$ , 其中  $v$  是  $t$  垂直于  $u$  的分量, 即  $v = t - (u^*t)u$ . Jacobi 方法没有利用 Ritz 对, 是一种直接

的校正迭代方法. 从这个角度看, Davidson 方法是 Jacobi 方法的子空间加速. 关于 Jacobi 方法的更多细节可参考 [30, 76].

在处理 (4) 右端第二项时, 我们与其舍弃不如做投影. 同时, 希望保持残量  $r = Au - \tilde{\lambda}u$  的信息. 因为  $r \perp u$ , 如果在 (4) 两端左乘直交投影算子  $I - u^*u$ , 那么前面两个要求都能满足. 这时有  $(I - u^*u)(A - \tilde{\lambda}I)t = -r$ . 注意到  $t \perp u$ , 我们得到了 Jacobi-Davidson 方法的校正方程

$$(I - u^*u)(A - \tilde{\lambda}I)(I - u^*u)t = -r, \quad t \perp r. \quad (5)$$

从这个形式可以清楚地看到  $A - \tilde{\lambda}I$  被限制在  $u$  的直交补空间中. 它和 Krylov 子空间方法有着本质差别. Krylov 子空间方法用一个算子的幂方作用在初始向量上张成搜索子空间, 或者说它是乘幂法的子空间加速. Jacobi-Davidson 方法的子空间结构与 Krylov 子空间完全不同. 精确求解校正方程, 有

$$t = -u + \alpha(A - \tilde{\lambda}I)^{-1}u, \quad (6)$$

其中  $\alpha = (u^*(A - \tilde{\lambda}I)^{-1}u)^{-1}$ , 保证了  $t \perp u$ . 我们用这个解扩张搜索子空间, 注意到  $u$  已经在搜索空间中了, 所以有效的扩张向量是  $(A - \tilde{\lambda}I)^{-1}u$ . 当  $\tilde{\lambda} = \tau$ , 它就是平移逆迭代的迭代向量 ([69] 第 4 章). 当  $\tilde{\lambda} = \tau$ , 它就是 Rayleigh 商迭代 (RQI) 的迭代向量 ([69] 第 4 章). Jacobi-Davidson 方法在精确求解的意义下是平移反幂方法或 RQI 的子空间加速. 当然这取决于我们所处的阶段 (Ritz 对是否已经给出特征对一个较好的估计). 所谓子空间加速, 就是说不直接采用  $(A - \tilde{\lambda}I)^{-1}u$  作为近似特征向量, 而是在由它扩张后的搜索空间中寻找一个更好的近似.

逆迭代和 RQI 的组合使用会是非常有效的 [89]. RQI 的渐近收敛速度是二次的, 对正规矩阵是三次收敛 [66, 67]. 关于 RQI 的性质和更普适的 RQI 方法可参考 [20, 59, 62, 66, 67]. 尽管如此, 在渐近收敛之前, 迭代的走向是很难控制的. 这促使我们在初始阶段选取  $\tilde{\lambda} = \tau$ , 因为平移逆迭代无条件收敛到距离  $\tau$  最近的特征值. Jacobi-Davidson 方法正是用逆迭代或 RQI 方向的垂直分量来扩充搜索空间, 确保了子空间扩张的效率和良好的收敛性.

Jacobi-Davidson 方法的核心是近似求解校正方程. 关于 (预优的)Krylov 子空间方法可参考 [6, 71, 98]. 事实上, 正如 [79] 所指, 内部系统 (5) 无需精确求解. 我们在推导校正方程的过程中舍去了一个二阶项, 这意味着精确求解的 Jacobi-Davidson 方法是一种 Newton 法 [78], 所以近似求解校正方程的 Jacobi-Davidson 方法是加速的不精确 Newton 法 [26].

在本小节的最后, 我们给出 Jacobi-Davidson 方法的一个基本算法 [76].

### 算法 2. Jacobi-Davidson 方法

1. 开始. 选择初始非零向量  $v$ .

- 计算  $v_1 = v/\|v\|_2$ ,  $w_1 = Av_1$ ,  $h_{11} = v_1^*w_1$ ,  
置  $V_1 = [v_1]$ ,  $W_1 = [w_1]$ ,  $H_1 = [h_{11}]$ ,  
 $u = v_1$ ,  $\theta = h_{11}$ , 计算  $r = w_1 - \theta u$ .

2. 迭代. 直到收敛.

3. 内部循环. 对  $k = 1, \dots, m - 1$  做:

- 近似求解  $t \perp u$ ,  $(I - u^*u)(A - \theta I)(I - u^*u)t = -r$ .
- 采用修正的 Gram-Schmidt 方法将  $t$  与  $V_k$  正交化, 然后用  $t$  扩张  $V_k$  生成  $V_{k+1}$ .
- 计算  $w_{k+1} = Av_{k+1}$ , 然后用  $w_{k+1}$  扩充  $W_k$  生成  $W_{k+1}$ .
- 计算  $H_{k+1} := V_{k+1}^*AV_{k+1}$  的最后一列  $V_{k+1}^*w_{k+1}$  和  $H_{k+1}$  的最后一行  $v_{k+1}^*W_k$  (仅当  $A \neq A^*$  时).
- 计算  $H_{k+1}$  的最大特征对  $(\theta, s)$  ( $\|s\|_2 = 1$ ).
- 计算 Ritz 向量  $u := V_{k+1}s$ , 计算  $\hat{u} := Au (= W_{k+1}s)$  和对应的残量  $r := \hat{u} - \theta u$ .
- 检测是否收敛, 如果收敛, 算法终止.

4. 置  $V_1 = [u]$ ,  $W_1 = [\hat{u}]$ ,  $H_1 = [\theta]$ , 跳转至第 3 步.

### 2.3. 其他变型

在处理一些特殊的特征值问题的过程中, Jacobi-Davidson 方法得到了进一步发展, 产生了几种有用且有趣的变型. 这些特殊的特征值问题有: 约束特征值问题 [99]、多项式特征值问题 [77, 6, 99, 39]、非线性特征值问题 [13]、奇异值问题 [34] 以及多参数特征值问题 [35, 37] 等. 这些讨论说明 Jacobi-Davidson 方法对复杂的特征值问题也是非常有效的. 比如对于多参数特征值问题, 即使是中等规模的矩阵, Jacobi-Davidson 方法是首选方法.

电磁模拟中常常遇到复对称矩阵, 即  $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ,  $A^T = A$ . 在 [3] 中, 作者讨论了 Jacobi-Davidson 方法一种针对复对称矩阵的变型. 双边的 Jacobi-Davidson 方法特别适用于求解左特征向量和估计特征值的条件数 [38, 83]. 交替的 Jacobi-Davidson 方法可以看作标准的 Jacobi-Davidson 方法和双边 Jacobi-Davidson 方法的组合 [38]. 在 [104] 中讨论的 Jacobi-Davidson 方法利用了实矩阵的特征值、特征向量是以共轭对的形式出现这个事实.

## §3. 优化观点下的 Davidson 型方法

我们已经知道, Jacobi-Davidson 方法是 Rayleigh-Ritz 过程的子空间加速, 它的核心是通过求解校正方程扩张子空间. 现在, 让我们从优化的视角来看特征值问题 [106]. 回顾 Newton 法:

$$\min_x f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n,$$

其中假定  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  二次连续可微. 在第  $k$  步, 得到一个近似极小点  $x_k$ . 解 Newton 校正方程

$$[\nabla^2 f(x_k)]\delta x_k = -\nabla f(x_k). \quad (7)$$

第  $k+1$  步得到新的近似极小点  $x_{k+1} := x_k + \alpha_k \delta x_k$ , 其中  $\alpha_k$  是线搜索步长. 为了保证全局收敛, 它通常满足 Armijo-Goldstein 或 (严格的) Wolf 条件 [22]. 标准特征值问题和优化

问题之间是由 Rayleigh 商

$$R(x) = \frac{x^*Ax}{x^*x}, \quad \forall x \neq 0 \quad (8)$$

联系起来的. 对 Hermite 矩阵  $A$ ,  $\min_x R(x)$  和  $\max_x R(x)$  分别是  $A$  的最小和最大特征值. 对于一般的矩阵  $A$ , Rayleigh 商定义了一个域 [31, 40]

$$\mathcal{F}(A) := \{R(x) : x \in C^n \setminus \{0\}\}.$$

如果  $A$  是正规的, 那么  $\mathcal{F}(A)$  构成谱集的凸包.  $\mathcal{F}$  一般包含着  $A$  的谱. 借助恰当的子空间, 我们可以通过 Rayleigh 商找到  $A$  的特征值. 用这种观点重新审视 Arnoldi-Lanczos 型方法, 发现每一步迭代的搜索空间都包含残量  $r_k = Ax_k - \lambda_k x_k$ . 对于对称问题,  $r_k$  是 (7) 在  $x_k$  处的梯度方向. 对于非对称问题, 情况可能不同, 因为  $R(x)$  未必可微 [66]. 由  $x_k$  扩充的子空间却可能包含了  $R(x)$  最速下降或上升方向, 这正是子空间方法的优势所在.

最初, Davidson 是通过  $R(x_k)$  的微商导出了校正方程 [17]

$$\left. \frac{\partial R(x_k)}{\partial x_{k(i)}} \right|_{x_{k(i)} + \delta x_{k(i)}} = 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (9)$$

其中  $x_{k(i)}$  是  $x_k$  的第  $i$  个分量. 由 (9) 式, 有  $\delta x_{k(i)} = (\lambda_k - a_{ii})^{-1}(Ax_k - \lambda_k x_k)_{(i)}$ . 在 [19] 中, Davidson 将这个公式与 Newton 法联系起来. 正如在 2.2 节中提到的, Jacobi-Davidson 方法是加速的不精确 Newton 法.

局部二次收敛性使得 Newton 法对于设计快速算法是非常有吸引力的. 考虑 Hermite 的情形 (这不是为了记号的简单), 我们有

$$\nabla R(x) = \frac{2}{x^*x}(Ax - R(x)x).$$

式 (8) 的 Hesse 阵是

$$\nabla^2 R(x) = \frac{2}{x^*x}(Ax - R(x)I) - \frac{4}{(x^*x)^2}(Axx^* + xx^*A^* - 2R(x)xx^*).$$

假设  $x$  已经单位化, 记  $R(x)$  为  $\lambda$ , 那么 Newton 方程 (7) 可以写成

$$[(A - \lambda I) - 2(Axx^* + xx^*A^* - 2\lambda xx^*)]t = -r, \quad (10)$$

其中  $r = Ax - \lambda x$ . 同时我们把 Jacobi-Davidson 校正方程 (5) 重写为

$$(I - xx^*)(A - \lambda I)(I - xx^*)t = [(A - \lambda I) - (Axx^* + xx^*A - 2\lambda xx^*)]t = -r.$$

根据  $A$  是 Hermite 的假设, 式 (10) 等价于

$$(I - 2xx^*)(A - \lambda I)(I - 2xx^*)t = -r. \quad (11)$$

如果我们要求  $t$  垂直于  $x$ , 再结合子空间方法的构架, 就设计出另一种采用 Newton 方向的算法. 这种算法也是在  $t \perp x$  的要求下近似求解校正方程 (11). 文献 [106] 提出了一种更一般的校正方程

$$(I - \beta xx^*)(A - \lambda I)(I - \gamma xx^*)t = -r, \quad \forall \beta \neq 0. \quad (12)$$

若在  $t \perp x$  的约束下求解 (12), 那么由  $t$  扩充的子空间就包含了 RQI 方向. 精确解可以通过 (6) 表示. 这说明结合校正方程 (12) 的子空间方法应该保持了 RQI 的良好收敛性. 同时, 也要注意, 置  $\beta = 1$  对保证方法的效率是很关键的.

在对称特征值问题中, 应用 Newton 法极小化 Rayleigh 商得到了如下的一类校正方程<sup>[105]</sup>:

- 约束 Newton(Constrained Newton (CN)) 方程

$$[A - \tilde{\lambda}I - 2\tilde{\lambda}uu^T(A + A^T)]t = r. \quad (13)$$

- (正规化的) 增广 Newton(Augmented Newton (AN)) 方程

$$\begin{pmatrix} A - \tilde{\lambda}I & -u \\ -u^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

- 扩充的 Newton(Inflated Newton (IN)) 方程

$$(A - \tilde{\lambda}I + \sigma uu^T)t = r, \quad (15)$$

这里  $\sigma$  是可自由选取的待定参数.

IN 方程首先由 Galick 提出<sup>[28]</sup>, [24] 讨论了  $\sigma$  的选取. 在精确求解的意义下, 上述方程都等价于 RQI 校正方程. 因为相对简单的形式和接近收敛时可以控制的条件数, IN 方程更加受到青睐<sup>[105]</sup>. 在 [105] 中, 作者还通过数值实验考察了上述三种方程作为校正方程的潜力. 文献 [24] 给出了一个超过百万自由度的实际问题, 两水平多重网格预优化的 Jacobi-Davidson 方法和 IN 方法在其求解过程中都有很好的表现.

## §4. Jacobi-Davidson 方法的实现技术

第 2 节讲述了 Davidson 型方法的主要思想, 然而要真正有效地实现 Davidson 型方法还需要一些实用的技术. 在这一节中, 我们将从实用的层面集中讨论 Jacobi-Davidson 方法, 介绍其基本的实现技术.

### 4.1. 重开始

较之单个向量的迭代, 子空间方法的主要优点是有更好的收敛性质和更快的收敛速度. 我们从优化的角度不难理解这一点. 事实上, 单个方向上的极小点不会比包含这个方向的子空间的极小点来得更好. 子空间方法的第二个优势是能处理一簇靠得很近的特征值, 这时需要通过子空间方法来计算这一簇特征值对应的不变子空间.

我们也必须意识到: 子空间的维数在增加, 这些优势是靠不断增加的存储量和计算开销换来的, 所以重开始策略是不可或缺的. 一个显然的办法是以最新的估计作为初始重新开始, 但这样可能会丢掉有价值的信息, 从而降低收敛速度. 一个更好的办法是用与目标  $\tau$  靠得最近的几个 Ritz 值对应的 Ritz 向量重新开始. 当搜索空间的维数达到一个给定的上界  $maxdim$  时, 就用  $mindim$  个估计得最好的近似特征向量作为搜索空间的基. 实验表明不要用太少的向量重开始. 一般地, 根据 [36] 的建议, 可取

$$5 \leq mindim \leq 10, \quad 20 \leq maxdim \leq 30.$$



基于 Davidson 方法和共轭梯度法 (CG) 构造子空间的相似性, Saad 和 Stathopoulos 在 Davidson 方法中实施了 (动态的) 厚重开始策略 [56, 83, 84, 86].

Jacobi-Davidson 方法可以视作加速的不精确 Newton 法, 有很好的局部二次收敛性质. 所以如果选取一个合理的近似特征向量作初始将大大减少迭代次数. Sleijpen 的 JDQR 和 JDQZ 程序 [44] 在开始 Jacobi-Davidson 过程之前, 首先生成一个  $mindim$  维的 Krylov 子空间. 尽管如此, 用一个随机产生的向量开始不失为一个好办法, 除非我们掌握了所需特征向量的信息.

#### 4.2. 压缩

当一个 Ritz 值很靠近一个特征值, 这个搜索空间也包含着邻近特征对的丰富信息. 这是因为我们在每一步都计算了与想要的特征值靠得最近的几个 Ritz 值和相应的 Ritz 向量. 我们可以利用这些信息计算下一个特征对. 为避免已经算得的特征向量的影响, 显式地要求新的估计垂直于已经算得的特征量.

用  $\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_{k-1}$  表示已经算得的特征向量, 并假设它们彼此正交.  $\tilde{x}_j$  构成矩阵  $\tilde{X}_{k-1}$  的列向量. 为寻找下一个特征向量  $\tilde{x}_k$ , 对压缩矩阵实施 Jacobi-Davidson 方法

$$(I - \tilde{X}_{k-1}\tilde{X}_{k-1}^*)A(I - \tilde{X}_{k-1}\tilde{X}_{k-1}^*).$$

相应的校正方程为

$$P_j(I - \tilde{X}_{k-1}\tilde{X}_{k-1}^*)A(I - \tilde{X}_{k-1}\tilde{X}_{k-1}^*)P_j t_j = -r_j, \quad (16)$$

其中  $P_j \equiv (I - u_j u_j^*)$ . 在  $t_j$  垂直于  $u_j$  的要求下近似求解 (16). 数值试验表明: 对校正方程进行显式压缩效果显著, 而没有必要对既约特征值问题进行显式压缩 [27].

一般来说, 非 Hermite 矩阵没有标准正交特征基底, 所以对非 Hermite 矩阵的压缩要复杂一些, 这会在下一节讨论. 另外, 有一点值得注意: 我们不能反复使用压缩技术求多个特征对, 尤其处理非 Hermite 的情形 [69]. 压缩矩阵将累积误差, 对于坏条件数的特征值, 这可能是灾难性的. 这也致使计算精度要高于实际需要, 带来更大的计算开销. 替代的方案是采用块方法同时计算一簇特征值和相应特征向量. 所不同的是, 块方法的每次迭代是用一组校正方程的解去扩张搜索空间. [14] 的算法 3.2 给出了块 Jacobi-Davidson 算法.

#### 4.3. 预优化

接近渐近收敛阶段,  $\tilde{\lambda}$  较好的估计了特征值  $\lambda$ ,  $A - \tilde{\lambda}I$  的奇异性不可避免. 如 [67, 68] 所讨论的,  $A - \tilde{\lambda}I$  的病态并不能阻止正确计算特征方向. 因为系统 (5) 条件数很坏, 近乎奇异, 所以即使希望通过次数不多的迭代达到一个低精度, 预优化也是必需的.

采用压缩技术和块方法, 我们将面对形如 (16) 得校正方程. 对 (16) 进行预优的迭代求解比较复杂, 但这个过程可以转化为下述一系列相对简单的操作. 假设  $K$  是  $A - \theta_j I$  左预条件子. 矩阵  $\tilde{Q}$  由  $\tilde{X}_{k-1}$  和  $u_j$  张成, 其中  $u_j$  是第  $k$  列. 预条件子  $K$  被限制在  $\tilde{Q}$  的垂直补空间, 即用

$$\tilde{K} \equiv (I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)K(I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)$$

作为校正方程的预条件子.

我们对校正方程 (16) 使用左预优化的 Krylov 迭代法, 初始向量  $t_0 = 0$ . 因为初始向量垂直于  $\tilde{Q}$ , Krylov 迭代法产生的所有迭代向量也都垂直于  $\tilde{Q}$ . 要计算  $z \equiv \tilde{K}^{-1}\tilde{A}v$ , 其中向量  $v$  由 Krylov 迭代法产生, 而

$$\tilde{A} \equiv (I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)(A - \theta_j I)(I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*).$$

为此我们分两步做. 首先计算

$$\tilde{A}v = (I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)(A - \theta_j I)(I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)v = (I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)y,$$

其中  $y \equiv (A - \theta_j I)v$  (注意到  $\tilde{Q}^*v = 0$ ). 第二步, 要在  $z \perp \tilde{Q}$  的约束下从方程

$$\tilde{K}z = (I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)y$$

解得  $z$ . 因为  $\tilde{Q}^* \perp z = 0$ , 所以  $z$  满足  $Kz = y - \tilde{Q}\tilde{\alpha}$ , 或者  $z = K^{-1}y - K^{-1}\tilde{Q}\tilde{\alpha}$ . 约束  $\tilde{Q}^* \perp z = 0$  确定

$$\tilde{\alpha} = (\tilde{Q}^*K^{-1}\tilde{Q})^{-1}\tilde{Q}^*K^{-1}y.$$

由  $K\hat{y} = y$  解得  $\hat{y} = K^{-1}y$ , 并由  $K\hat{Q} = \tilde{Q}$  解得  $\hat{Q} = K^{-1}\tilde{Q}$ . 注意到  $K\hat{Q} = \tilde{Q}$  在对 (16) 迭代求解的过程中只要求解一次. 上述过程被描述为如下算法 (参见 [6] 算法 4.6):

**算法 3.** 压缩校正方程的近似求解

对系数矩阵

$$\tilde{A} \equiv (I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)(A - \theta I)(I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*),$$

采用左预条件子  $\tilde{K} \equiv (I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)K(I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)$ .

1. 由  $K\hat{A} = \tilde{Q}$  求解  $\hat{Q}$

计算  $C = \tilde{Q}^*\hat{Q}$

做分解  $C = LU$

计算  $\tilde{r} \equiv \tilde{K}^{-1}r$  如下:

- 由  $K\hat{r} = r$  解得  $\hat{r}$
- $\tilde{\gamma} = \tilde{Q}^*\hat{r}$   
由  $L\tilde{\beta} = \tilde{\gamma}$  解得  $\tilde{\beta}$   
由  $U\tilde{\alpha} = \tilde{\beta}$  解得  $\tilde{\alpha}$
- $\tilde{r} = \hat{r} - \hat{Q}\tilde{\alpha}$

2. 应用 Krylov 迭代法, 初始向量  $t_0 = 0$ , 系数矩阵  $\tilde{K}^{-1}\tilde{A}$ , 右端项  $-\tilde{r}$ . 对给定的  $v$ , 计算  $z = \tilde{K}^{-1}\tilde{A}v$  如下:

- $y = (A - \theta I)v$
- 由  $K\hat{y} = y$  解得  $\hat{y}$

- $\vec{\gamma} = \tilde{Q}^* \hat{y}$   
由  $L\vec{\beta} = \vec{\gamma}$  解得  $\beta$   
由  $U\vec{\alpha} = \vec{\beta}$  解得  $\alpha$
- $z = \hat{y} - \hat{Q}\vec{\alpha}$

如果在迭代过程中  $K$  保持不变,  $\hat{Q}$ , 算法 4 中的矩阵  $C$  及其 LU 分解就可以继承下来, 从而节省计算开销. 关于细节, 请参考 [79].

另外, 近似解要垂直于  $\tilde{Q}$  列向量张成的子空间. 如果选取垂直于  $\tilde{Q}$  的向量作为初始, 比如取  $t_0 = 0$ , 那么这个要求将自动满足. 因为只需要在适中的精度下求解校正方程, 可以设置一个不太小的相对误差界. 在 [6] 中作者建议把第  $j$  次迭代内部系统求解的相对精度设置为  $2^{-j}$ . [58, 102] 中还提出了其他一些内迭代的终止准则. 我们还可以为 Krylov 迭代法设置最大迭代次数. 关于校正方程迭代求解的实现和相应的伪代码, 可参考 [6, 9].

#### 4.4. 特殊的预条件子

如前所述, 求解校正方程是关键, 预优化必不可少. 于是人们开始思考如何构造更有效力的校正方程预条件子. 本小节中, 我们将关注三类特殊的预条件子生成技术: 多水平、区域分解 (DDM) 和近似逆. 首先比较详细地介绍多水平方法, 但是, 这仍然要在对一个似是而非的问题有进一步认识之后才能进行. 关于具体的技术和使用的细节, 将以参考文献的方式给出.

以广义特征值问题  $Ax = \lambda Bx$  为例, 它的校正方程是

$$(I - pp^*)(A - \tilde{\lambda}B)(I - uu^*)t = -r, \quad t \perp u, \quad (17)$$

其中  $p = Bu/\|Bu\|_2$ . 值得一提的是, 投影算子不仅有效地扩张了子空间, 而且改进了系统的条件数. 条件数对于迭代法的数值稳定性和收敛速度都是至关重要的.

特征值  $\lambda$  是未知的, 所以  $A - \tilde{\lambda}B$  的好的预条件子可以被认为是  $A - \lambda B$  的一个好的预条件子.  $A - \lambda B$  的奇异性会对预条件子产生影响. 坏条件数正是在想要求解的特征方向上产生的, 这也是预条件子对特征向量的计算起促进作用的原因. 事实上, 坏条件数把估计中特征方向的分量放大了. 不幸的是, 坏条件数破坏数值稳定性, 降低了特征值计算中预条件子效力. 假定通过块不完全分解 (ILU) 的办法得到了  $A - \lambda B$  的一个好的预条件子, 那么由于  $A - \lambda B$  的病态, 分解因子的某个对角块将会有相对较小的奇异值. 多水平 ILU 类型的预条件子, 如 NGILU (nested grids ILU)<sup>[94]</sup>, ILUM (multi-elimination ILU)<sup>[70]</sup>, MRILU (matrix renumbering incomplete LU-decomposition)<sup>[15]</sup>, MLILU (multilevel ILU)<sup>[7]</sup>. 可以在保持分解因子稀疏性的同时, 将病态的对角块推到矩阵右下方. 我们可以利用这一点, 结合投影算子, 避免数值的不稳定.

如果  $\tilde{\lambda}$  是一个目标或是对某个特征值  $\lambda$  一个很好的估计, 那么  $A - \tilde{\lambda}B$  的块 LU 分解会产生一个病态的对角块. 重排和划分技术可以为我们提供  $A - \tilde{\lambda}B$  的一个良态的对角块  $A_1$ , 而且  $A_1$  的阶数很接近  $A - \tilde{\lambda}B$  的阶数

$$A - \tilde{\lambda}B = \begin{pmatrix} A_1 & E_u \\ E_l & A_2 \end{pmatrix}. \quad (18)$$

良态部分的 Schur 补是一个低维的病态矩阵. 预条件子  $K$  可以通过良态对角块的不完全 LU 分解  $K_1$  得到

$$K = \begin{pmatrix} K_1 & E_u \\ E_l & A_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_1 & 0 \\ E_l & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & K_1^{-1}E_u \\ 0 & \tilde{A}_2 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

其中 Schur 补  $\tilde{A}_2 \equiv A_2 - E_l K_1^{-1} E_u$ . 仅当  $\tilde{A}_2$  的维数远小于  $n$  时, 才可能精确求解预优化系统. 否则, 对  $\tilde{A}_2$  应用重排、分划技术直到第  $k$  步, 我们得到一个低维的 Schur 补  $\tilde{A}_{k+1}$ , 或者再也无法得到一个维数相对较大的良态部分.

虽然预条件子  $K$  可能是坏条件数的, 但是它的投影  $(I - pp^*)K(I - uu^*)$  确未必如此. 为了说明这一点, 我们用  $K$  代替  $A - \tilde{\lambda}B$ , 将 (17) 写成等价的增广系统<sup>[77]</sup>

$$\begin{pmatrix} K & p \\ u^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (20)$$

下面将看到, 式 (20) 的系数矩阵是良态的这个论述有些似是而非. 更详细的讨论和更多的定性结果, 请参考 [80].

考虑一个极端情形, 假设 0 是  $K$  的单特征值, 相应的左右特征向量分别为  $p$  和  $u$ . 单特征值蕴含着  $u^*p \neq 0$ , 且  $\begin{pmatrix} K & p \end{pmatrix}$  的秩为  $n$ . 它的核空间由  $\begin{pmatrix} u^T & 0 \end{pmatrix}^T$  张成, 但它与增广系数矩阵最后一行的乘积不为零, 从而 (20) 的系数矩阵非奇异. 可以证明, 只要 0 是  $K$  的好条件数的特征值, 增广矩阵是良态的. 另一方面, 如果  $u$  并不接近某个特征向量, 那么增广矩阵可能病态<sup>[105]</sup>. 在开始 Jacobi-Davidson 方法之前, 基于多水平的 ILU 预条件子可以给出所求特征向量较好的估计<sup>[82]</sup>. 在 Jacobi-Davidson 方法中, 采用这样的估计作为初始向量可能避免坏条件数.

增广系统的条件数得到了改进, 这促使我们构造  $K$  的增广矩阵, 从而精确求解投影预优方程

$$(I - pp^*)K(I - uu^*)t = -r, \quad t \perp u. \quad (21)$$

如上所述, 利用多水平 ILU 技术, 得到  $A - \tilde{\lambda}B$  的形如 (19) 的预条件子  $K$ .  $K_1$  是良态的, 其阶数几乎等于全空间的维数, 且以  $K_1$  作为系数矩阵的系统可以有效求解.  $u^* = \begin{pmatrix} u_1^* & u_2^* \end{pmatrix}$ ,  $p^* = \begin{pmatrix} p_1^* & p_2^* \end{pmatrix}$ ,  $\tilde{u}_2^* \equiv u_2^* - u_1^* K_1^{-1} E_u$ ,  $\tilde{p}_2^* \equiv p_2^* - p_1^* K_1^{-1} E_u$ ,  $\beta \equiv -u_1^* K_1^{-1} p_1$ , 有

$$\begin{pmatrix} K_1 & E_u & p_1 \\ E_l & A_2 & p_2 \\ u_1^* & u_2^* & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K_1 & 0 & 0 \\ E_l & I & 0 \\ u_1^* & 0^* & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & K_1^{-1}E_u & K^{-1}p_1 \\ 0 & \tilde{A}_2 & \tilde{p}_2 \\ 0^* & \tilde{u}_2^* & \beta \end{pmatrix}. \quad (22)$$

当  $\tilde{\lambda}$  接近  $\lambda$  时,  $K$  也是  $A - \lambda B$  一个不错的预条件子, (22) 的左端通常是良态的. 由于  $K_1$  是良态的, (22) 中 LU 分解的 L- 因子是良态的, 从而 U- 因子也是良态的. 虽然  $\tilde{A}_2$  是病态的, 但增广矩阵

$$\begin{pmatrix} \tilde{A}_2 & \tilde{p}_2 \\ \tilde{u}_2^* & \beta \end{pmatrix}$$

可以是良态的. 又因为这个矩阵的阶数很低, 所以该系统可以精确求解. 利用改进的特征值估计, [82] 提出一种更新  $K$  的方案. 它基于算子逆的 Neumann 级数的一阶展开, 相比于采用重排、分划技术构造  $K$ , 只增加了相对很小的工作量. 关于特征值问题的多水平预优化技术的更多细节和数值示例, 请参考 [80, 82].

另一种特殊的预优化方法是把区域分解技术 (DDM) 与 Jacobi-Davidson 方法相结合. 在 [92] 中首先提出了增广矩阵的概念, 为偏微分方程区域分解的公式化铺平了道路. 基本思想是将网格分解成无交叠的子网格, 沿交界面引入额外的格点 (未知量) 扩大子网格. 这种方法人为造成了很小的格点交叠. 在 [90, 91] 中, 改进后的方法通过在交界面引入额外的格点将每个离散化方程限制在一个扩充的子网格上. 这样无须对方程进行调整. 内部边界的离散边界条件就是新增加的方程. 在 [29] 中, 这种改进的方案被应用到 Jacobi-Davidson 方法中, 用表示人工内部边界条件的耦合矩阵扩张了原有的校正方程. 通过选取耦合矩阵的参数 (即选取不同的边界条件), 可以显著改善校正方程的条件数. 参数的选取依赖于所处理的偏微分方程. 这种方法在对流扩散方程的求解中取得了成功 [29].

从并行实现的角度看, 近似逆预条件是颇有吸引力的. 文献 [12] 考察了 Jacobi-Davidson 分别与块 Jacobi 预条件子 [71], IC(0) [50], AINV [11] 和 FSAI [47] 相结合的表现. 并行实现 IC(0) 预优化需要复杂的技术, 例如图的染色 [45, 46]、图的分划与排列 [1, 41] 等. 而近似逆预优化技术 (如 AINV 和 FSAI) 的并行实现要简单许多. 文献 [10] 是一篇全面的、关于 (稀疏) 近似逆的综述性文章, 值得一读.

#### 4.5. 求解中间特征值

在子空间提取阶段, 希望得到较好的近似特征对  $(\theta, u)$ . 对于外部特征值, 我们用 Ritz 对作近似, 但对于中间特征值, Ritz 对可能是很糟糕的近似. 事实上, Ritz 值会单调收敛到外部特征值, 即使 Ritz 值与某中间特征值靠得很近, 它也可能在迭代过程中跑向某个外部特征值. 一旦发生这种情况, 相应的 Ritz 向量只包含所求特征方向很少的信息.

注意到 Ritz-Galerkin 条件 (1) 并未蕴含残量模的信息. 对一个近似的特征值, 比如 Ritz 值  $\theta$  或目标  $\tau$ , 求解

$$\hat{s} = \arg \min_{\|s\|=1} \|(AV - \theta V)s\|,$$

得到修正的 Ritz 向量  $\hat{u} \equiv V_m \hat{s}$  通常给出一个更好的估计. 再通过这个向量的 Rayleigh 商又可以确定一个新的近似特征值. 关于结合这种修正方案的 Jacobi-Davidson 方法, 可参考 [21].

第二种方法是采用调和 Ritz 对. 注意到离目标  $\tau$  最近的特征值是  $(A - \tau I)^{-1}$  模最大的特征值, 因此我们引入调和 Ritz 对.

调和 Ritz 对. 关于平移  $\tau$  的调和 Ritz 对  $(\tilde{\theta}, \tilde{u})$  满足如下 Petrov-Galerkin 条件:

$$(A - \tilde{\theta} I)\tilde{u} \perp (A - \tau I)V_m, \quad (23)$$

其中  $u \in \mathcal{V}_m \setminus \{0\}$ . Petrov-Galerkin 条件是为了避免计算中出现  $A - \tau I$  的逆. 令  $W_m \equiv (A - \tau I)V_m$ , 相应的矩阵  $W_m \equiv (A - \tau I)V_m$ . 这样 (23) 被写成

$$W_m^* W_m s - \theta W_m^* V_m s = 0. \quad (24)$$

出于稳定性的考虑, 标准直交化  $W_m$  的列向量, 从而 (24) 可以进一步简化, 并看到调和 Ritz 值是矩阵  $W_m^* V_m$  特征值的倒数.

可以证明, 在 Hermite 的情形, 调和 Ritz 值单调收敛到离  $\tau$  最近 (不等于  $\tau$ ) 的特征值 [65]. 对于离  $\tau$  最近的调和 Ritz 值, 相应的调和 Ritz 向量关于  $(A - \tau I)^{-1}$  极大化了 Rayleigh 商. 这表明调和 Ritz 向量包含了所求特征向量的丰富信息, 是重新开始基向量的最佳候选. 关于调和 Ritz 值的应用, 可参阅 [81].

## §5. 典型特征值问题的求解

本节中, 我们将讨论如何应用 Jacobi-Davidson 方法求解几种典型的特征值问题.

### 5.1. 标准 Hermite 特征值问题

我们可以采用第 4 节的实用技术给出一个完整的求解标准 Hermite 特征值问题的 Jacobi-Davidson 算法 (参见 [6] 算法 4.7).

**算法 4.** 求解最靠近  $\tau$  的  $k_{max}$  个中间特征值的 Jacobi-Davidson 算法

$$(1) \quad t = v_0, k = 0, m = 0, \tilde{X} = []$$

当  $k < k_{max}$

$$(2) \quad w = (A - \tau I)t$$

对  $i = 1, \dots, m$

$$\gamma = w_i^* w, w = w - \gamma w_i, t = t - \gamma v_i$$

$$m = m + 1, w_m = w / \|w\|_2, v_m = t / \|t\|_2$$

$$(3) \quad \text{对 } i = 1, \dots, m$$

$$M_{i,m} = w_i^* v_m$$

$$(4) \quad \text{计算 } m \text{ 阶 Hermite 矩阵 } M$$

的特征分解  $MS = S\tilde{\Theta}$ .

将特征对排序, 使得  $\tilde{\theta}_1 \geq \tilde{\theta}_2 \dots$

$$\tilde{u} = V s_1, \mu = \|\tilde{u}\|_2, u = \tilde{u} / \mu, \vartheta = \tilde{\theta}_1 / \mu^2$$

$$\tilde{w} = W s_1, r = \tilde{w} / \mu - \vartheta u$$

$$(5) \quad \text{当 } \|r\|_2 \leq \epsilon$$

$$k = k + 1, \tilde{X} = [\tilde{X}, u], \tilde{\lambda}_k = \vartheta + \tau$$

如果  $k = k_{max}$ , 终止

$$(6) \quad m = m - 1, M = 0$$

对  $i = 1, \dots, m$

$$v_i = V s_{i+1}, w_i = W s_{i+1}$$

$$M_{i,i} = \tilde{\theta}_{i+1}, s_i = e_i, \tilde{\theta}_i = \tilde{\theta}_{i+1}$$

$$\mu = \|v_1\|_2, \vartheta = \tilde{\theta}_1 / \mu^2, u = v_1 / \mu, r = w_1 / \mu - \vartheta u$$

$$(7) \quad \text{如果 } m \geq m_{max}, \text{ 那么}$$

$$M = 0$$

对  $i = 2, \dots, m_{min}$

$$\begin{aligned}
 v_i &= V s_i, w_i = W s_i, M_{i,i} = \tilde{\theta}_i \\
 w_1 &= \tilde{w}, v_1 = \tilde{u}, M_{1,1} = \tilde{\theta}_1, m = m_{min} \\
 (8) \quad \theta &= \vartheta + \tau, \tilde{Q} = [\tilde{X}, u] \\
 &\text{近似求解 } t (\perp \tilde{Q}): \\
 &(I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)(A - \theta I)(I - \tilde{Q}\tilde{Q}^*)t = -r
 \end{aligned}$$

为实施这个算法, 我们需要给定初始向量  $v_0$ , 误差界  $\epsilon$ , 目标  $\tau$ , 所求特征值的个数  $k_{max}$ .  $m_{max}$  表示搜索子空间的最大维数. 一旦搜索空间的维数超过  $m_{max}$ , 选取  $m_{min}$  维子空间重新开始. 计算得到的特征对  $(\theta_j, u_j) (\|u_j\|_2 = 1)$  满足  $\|Au_j - \theta_j u_j\|_2 \leq j\epsilon$ , 其中  $u_j$  是  $\tilde{X}$  的第  $j$  列. 算法 4 的 (2) 是通过修正的 Gram-Schmidt 方法进行正交化的, [6] 的算法 4.4 提供了一种稳定性更好的正交化方法. 本文算法 4 的 (4) 是计算  $V s_1$  的 Rayleigh 商  $\vartheta$ . 如果是求解外部特征值的, 算法 4 可以描述得简单一些 [6].

要强调的是, 算法 4 只适用于标准 Hermite 特征值问题. 对于非 Hermite 或广义的特征值问题, 校正方程和压缩技术是不同的. 相应的算法, 请参阅 [6]. 尽管如此, 算法 4 涵盖了串行实现 Jacobi-Davidson 方法的主要子过程, 并且清楚地说明了这种方法的构架.

## 5.2. 广义 Hermite 特征值问题

我们考虑应用 Jacobi-Davidson 方法求解广义特征值问题

$$Ax = \lambda Bx, \quad (25)$$

其中  $A, B$  均是 Hermite 矩阵, 且  $B$  正定. 类似于求解 (25) 的 Lanczos 方法 [96], 我们采用搜索空间的  $B$ -直交基底  $v_1, \dots, v_m$ . 它们构成了矩阵  $V_m$  的列向量. 这时 Ritz-Galerkin 条件可以写成

$$V_m^* A V_m s - \theta V_m^* B V_m s = 0. \quad (26)$$

因为  $V_m$  的  $B$ -直交性, 上式简化为

$$V_m^* A V_m s - \theta s = 0.$$

这样就得到了关于 Ritz 向量  $u_j \equiv V_m s_j$  和 Ritz 值  $\theta_j$  的既约特征值问题. 假定 Ritz 向量是关于  $B$ -内积单位化的.

容易看出, 残量  $r_j \equiv Au_j - \theta_j u_j$  垂直于  $V_m$ , 从而垂直于  $u_j$ . 在  $t_j \perp Bu_j$  的约束下, 校正方程被改写为

$$(I - Bu_j u_j^*)(A - \theta_j B)(I - u_j u_j^* B)t_j = -r_j. \quad (27)$$

算子

$$(I - Bu_j u_j^*)(A - \theta_j B)(I - u_j u_j^* B)$$

将  $(Bu_j)^\perp$  映到  $(u_j)^\perp$ . 如果想通过 Krylov 方法得到一个从  $(Bu_j)^\perp$  到  $(u_j)^\perp$  的映射, 就必须进行预优化.

类似于单个 Hermite 矩阵,  $A - \lambda B$  有一个  $B$ -直交的特征基底, 所以有

$$AQ_k = Z_k D_k, \quad (28)$$

其中  $Z_k = BQ_k$ .  $Q_k$  是  $B$ -直交的, 而对角阵  $D_k$  的对角元是  $k$  个计算得到的特征值. 采用斜投影进行压缩

$$(I - Z_k Q_k^*)(A - \lambda B)(I - Q_k Z_k^*).$$

容易验证, 压缩后的  $B$  在空间  $(Bu_j)^\perp$  上保持正定性. 我们可以方便的计算  $B$ -内积, 因为压缩前后的  $B$  在  $(Bu_j)^\perp$  中是相同的.

如果  $B$  的条件数很坏, 那么内积  $x^* B y$  可能严重扭曲, 这时推荐使用将在 5.4 节中介绍的 QZ 算法.

### 5.3. 标准非 Hermite 特征值问题

如果处理非 Hermite 的矩阵, 压缩技术会变得更加复杂, 因为非 Hermite 的矩阵一般没有标准直交的特征基底. 退而求其次, 我们利用 Schur 分解

$$AQ_k = Q_k R_k$$

进行压缩, 其中  $Q_k$  是  $n \times k$  的酉矩阵,  $R_k$  是  $k \times k$  得上三角矩阵. 修改后的方法称为 JDQR. 文献 [6] 的算法 7.1 提供了 JDQR 算法的模板, [44] 中有算法的 Matlab 实现. 关于计算排序 Schur 分解的方法, 可参考 [5, 100, 101] 和 [25] 的第 6B 章.

如果使用调和 Ritz 值, 则既约特征值问题化为

$$W_m^* A V_m s_j - \theta_j W_m^* s_j = 0,$$

其中  $W_m \equiv (A - \tau I) V_m$ ,  $\tau$  是平移量. 因为  $A$  是非 Hermite 的, 所以需要应用 QZ 算法求解上述既约特征值问题.

### 5.4. 广义非 Hermite 特征值问题

令  $\lambda = \alpha/\beta$ , 广义特征值问题  $Ax = \lambda Bx$  等价于

$$(\beta A - \alpha B)x = 0. \quad (29)$$

用  $(\alpha, \beta)$  表示矩阵对  $(A, B)$  的广义特征值, 这样避免了  $\lambda = \alpha/\beta$  可能引起的溢出. 从稳定性的角度考虑, 我们希望通过正交变换计算  $A - \lambda B$  的 Schur 向量, 而不是特征向量. 矩阵对  $(A, B)$  的  $k$  阶广义 Schur 形式可以写成如下的分解:

$$AQ_k = Z_k R_k^A, \quad BQ_k = Z_k R_k^B, \quad (30)$$

其中  $Q_k$  和  $Z_k$  是酉矩阵,  $R_k^A$  和  $R_k^B$  是上三角矩阵.  $Q_k$  的列向量  $q_i$  就是所谓的广义 Schur 向量,  $((\alpha_i, \beta_i), q_i)$  是广义 Schur 对, 其中  $(\alpha_i, \beta_i) = (R_k^A(i, i), R_k^B(i, i))$ . 可以验证, 如果  $((\alpha, \beta), y)$  是  $(R_k^A, R_k^B)$  的广义特征对, 那么  $((\alpha, \beta), Q_k y)$  是  $(A, B)$  的广义特征对. 对 (29) 修改 Jacobi-Davidson 方法, 根据 (30), 有

$$\beta_i A q_i - \alpha_i B q_i \perp z_i,$$

从而可以通过 Petrov-Galerkin 条件得到既约系统. 设  $V$  是搜索子空间, 式 (30) 还表明测试子空间  $W$  就是  $\nu_0 A V + \mu_0 B V$ . 事实上,  $\text{span}(Z_k) = \text{span}(AQ_k) = \text{span}(BQ_k)$ . 改变权



重  $\nu_0$  和  $\mu_0$  可以影响 Petrov 值的收敛. 如果我们要求解靠近目标  $\tau$  的特征值和对应特征向量, 选取

$$\nu_0 = \frac{1}{\sqrt{1+|\tau|^2}}, \quad \mu_0 = -\frac{\tau}{\sqrt{1+|\tau|^2}} \quad (31)$$

是非常有效的 [27], 特别是计算  $A - \lambda B$  的中间特征值. Petrov-Galerkin 条件下的既约系统为

$$(\eta W^* AV - \zeta W^* BV)s = 0. \quad (32)$$

应用 QZ 算法 [55] 计算  $\eta W^* AV - \zeta W^* BV$  的广义 Schur 分解, 得到  $m \times m$  正交矩阵  $S^R$  和  $S^L$ ,  $m \times m$  上三角阵  $T^A$  和  $T^B$ , 并有如下关系:

$$(S^L)^*(W^* AV)S^R = T^A, \quad (S^L)^*(W^* BV)S^R = T^B. \quad (33)$$

通过排序可以使  $S^R$  的第 1 列,  $T^A, T^B(1, 1)$  位置上的元素就是我们想要的 Petrov 解 [27]. 关于重排的广义 Schur 分解的算法, 请参考 [25, 100, 101]. 我们还可以近似计算广义 Schur 分解, 用  $VS^R$  近似  $Q_k$ , 用  $WS^L$  近似  $Z_k$ . 在子空间扩张阶段, 对于  $\eta A - \zeta B$  的 Jacobi-Davidson 校正方程写成

$$\left(I - \frac{pp^*}{p^*p}\right)(\eta A - \zeta B)(I - uu^*)t = -r, \quad (34)$$

其中  $r \equiv \eta Au - \zeta Bu$ ,  $p \equiv \nu_0 Au + \mu_0 Bu$ . 文献 [77] 中定理 3.2 表明: 如果精确求解 (34), 那么广义特征值的收敛是二次的. 上述修改的 Jacobi-Davidson 方法被称为 JDQR. [44] 中给出了它的 Matlab 实现.

### 5.5. 电子结构计算中的特征值问题

密度泛函理论 (DFT) 是现代电子结构计算的理论支柱. 基于这一理论, 电子结构的模拟通常可通过求解 Kohn-Sham 方程来实现. 而 Kohn-Sham 方程是一类非线性特征值问题. 由于 Kohn-Sham 方程是非线性的, 故需要从一个初始的密度泛函开始进行自洽迭代 (SCF). 离散化得到的是一个广义的代数特征值问题. 计算这个广义特征值问题大约占用了自洽迭代总时间的 80%. 除了其庞大的规模, 我们在处理这个广义特征值问题时还面临着其他困难: 比如, 需要求解的特征向量的数目与系统中原子的数目成比例, 而原子的数目成百上千甚至更多 (这同时带来一个额外的问题: 如何保持特征向量的正交性). 又如, 随着矩阵阶数的增加, 特征值的分离度下降, 导致收敛减慢.

Davidson 型方法在电子结构计算中的表现是非常成功的 [8, 23, 74, 88]. 要使 Davidson 型方法取得成功, 我们在计算的诸多过程中必须小心谨慎.

为了计算几百个特征值, 我们必须采用压缩技术. 这涉及到容许误差界和目标向量 (近似特征向量) 的选取. 在决定一个近似特征向量是否收敛时, 我们要谨慎, 因为接受一个精度较差的估计可能阻碍其他特征向量的计算. 另一方面, 在自洽迭代中, 较高的计算精度是没有必要的, 所以随着收敛的近特征向量越来越多, 应该逐步放宽容许误差界 [73]. 我们从基向量中选取目标向量, 而且最好同时选定几个目标向量, 即所谓的块方法 [49]. 谨慎地选择收敛的特征对可以提高方法的效率, 减小丢失特征对的可能.

因为涉及所有收敛的特征向量和基向量, 正交化过程变得非常昂贵. 一种处理方案是采用有选择的重正交化(可参考 [6] 算法 4.4). 当一个向量的模小于某个预先给定的下界时, 对它重新实施正交化. 这种方法比完全的重正交化节省工作量, 同时保证了足够的精度 [73]. 另一种方案是使用非正交基底. 在 [8] 中, 作者提出了采用非正交基底的块 Davidson 型算法. 我们首先选取一个良态的初始基底. 在使用子空间方法求解一个特征对的过程中, 只迭代少数几次. 由于子空间的维数增加很小, 所以(投影)特征值问题的条件数不会变得太坏. 这种考虑主要基于这样的事实: 在自洽迭代中, 特征向量不需要在很高的精度下收敛. 实际上, 对于许多物理的测试问题, 正交化并没有减少迭代次数.

## §6. 注 记

如果以标准的方式初始化(只用少数几个规范的向量作为初始的搜索子空间), 并采用简单的对角预优化, 那么 Davidson 方法与 Jacobi-Davidson 方法差别很小. 在 [60] 中, 作者通过理论分析和数值实验说明: 对于近对角矩阵, 以标准方式初始化的 Davidson 方法收敛很快, 即使采用 Jacobi-Davidson 方法, 也得不到什么改观.

对于不接近对角的矩阵并且对角预优化得不到好的预条件子一类问题, Jacobi-Davidson 方法可能带来明显的改观. 最近的分析充分证明了这样的结论. 采用越好的预条件子, Jacobi-Davidson 方法的收敛越快 [59, 63, 75, 93].

## 参 考 文 献

- [1] E.C. Anderson and Y. Saad, Solving sparse triangular systems on parallel computers, *Int. J. High Speed Comput.*, 1(1989) 73-96.
- [2] P. Arbenz and R. Geus, A comparison of solvers for large eigenvalue problems occurring in the design of resonant cavities, *Numer. Linear Algebra Appl.*, 6(1999) 3-16.
- [3] P. Arbenz and M.E. Hochstenbach, A Jacobi-Davidson method for solving complex symmetric eigenvalue problems, *SIAM J. Sci. Comput.* 25(2004) 1655-1673.
- [4] W.E. Arnoldi, The principle of minimized iteration in the solution of the matrix eigenvalue problem, *Quart. Appl. Math.*, 9(1951) 17-29.
- [5] Z.J. Bai and J.W. Demmel, On swapping diagonal blocks in real Schur form, *Linear Algebra Appl.*, 186(1993) 73-95.
- [6] Z.J. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe, and H.A. Van Der Vorst, *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems: A Practical Guide*, SIAM, Philadelphia, PA, 2000.
- [7] R.E. Bank and C. Wagner, Multilevel ILU decomposition, *Numer. Math.*, 82(1999) 543-574.
- [8] C. Bendtsen, O.H. Nielsen, and L.B. Hansen, Solving large nonlinear generalied eigenvalue problems from Density Functional Theory calculations in parallel, *Applied Numerical Math.*, 37 (2001) 189-199.
- [9] R. Barrett, M. Berry, T. Chan, J.D. emmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and H.A. Van Der Vorst, *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*, SIAM, Philadelphia, PA, 1994.

- [10] M. Benzi, Preconditioning techniques for large linear systems: A survey, *J. Comput. Phys.*, 182(2002) 418-477.
- [11] M. Benzi, C.D. Meyer, and M. Tuma, A sparse approximate inverse preconditioner for the conjugate gradient method, *SIAM J. Sci. Comput.*, 17(1996) 1135-1149.
- [12] L. Bergamaschi, G. Pini, and F. Sartoretto, Computational experience with sequential and parallel, preconditioned Jacobi-Davidson for large, sparse symmetric matrices, *J. Comput. Phys.*, 188(2003) 318-331.
- [13] T. Betcke and H.A. Voss, A Jacobi-Davidson type projection method for nonlinear eigenvalue problems, Preprint, Section of Mathematics, TU Hamburg-Harburg, 2002.
- [14] 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, Technical Report NM-R9414, Mathematisch Centrum, Centrum voor Eiskunde en Informatica, Amsterdam, 1994.
- [15] E.F.F. Botta and F.W. Wubs, Matrix renumbering ILU: An effective algebraic multilevel ILU preconditioner for sparse matrices, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 20(1999) 1007-1026.
- [16] M. Crouzex, B. Philippe, and M. Sadkane, The Davidson method, *SIAM J. Sci. Comput.*, 15(1994) 62-76.
- [17] E.R. Davidson, The iterative calculation of a few of the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real-symmetric matrices, *J. Comput. Phys.*, 17(1975) 87-94.
- [18] E.R. Davidson, Matrix eigenvector methods in quantum mechanics, in: *Methods in Computational Molecular Physics*, G.H.F. Diercksen and S. Wilson, eds., Reidel, Boston, USA, 1983, 95-113.
- [19] E.R. Davidson, Monster matrices: their eigenvalues and eigenvectors, *Computers in Physics*, 7(1993) 519-522.
- [20] A. Dax, The orthogonal Rayleigh quotient iteration method, *Linear Algebra and its Applications*, 358(2003) 23-43.
- [21] E. De Sturler, Improving the convergence of the Jacobi-Davidson algorithm, Preprint, Department of Computer Science, University of Illinois at Urbana-Champaign, 2002.
- [22] J.E. Dennis and R. Schnabel, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations*, Prentice-Hall, 1983; updated reprint, *SIAM classics in Applied Mathematics*, 16, 1996.
- [23] D. Feller and E.R. Davidson, An approximation to frozen natural orbitals through the use of the Hartree-Fock exchange potential, *J Chemical Physics*, 74(1981) 3977-3979.
- [24] Y.T. Feng, An integrated Davidson and multigrid solution approach for very large scale symmetric eigenvalue problems, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190(2001) 3543-3563.
- [25] D.R. Fokkema, Subspace methods for linear, nonlinear, and eigenproblems, Ph.D. thesis, Utrecht University, Utrecht, 1996.
- [26] D.R. Fokkema, G.L.G. Sleijpen, and H.A. Van Der Vorst, Accelerated inexact Newton schemes for large systems of nonlinear equations, *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(1998) 657-674.
- [27] 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, *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(1998) 94-125.
- [28] A.T. Galick, Effective solution of large sparse eigenvalue problems in microelectronic simulation, Ph.D. Thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1993.

- [29] M. Genseberger, G.L.G. Sleijpen, and H.A. Van der Vorst, Using domain decomposition in the Jacobi-Davidson method, Preprint 1164, Department of Mathematics, University of Utrecht, October 2000. Available online at <http://www.math.uu.nl/publications/Preprints/index.shtml.en>.
- [30] G.H. Golub and C.F. Van Loan, Matrix Computations, 2nd ed., The John Hopkins University Press, Baltimore and London, 1989.
- [31] A. Greenbaum, Iterations Methods for Solving Linear Systems, SIAM, Frontiers in Applied Mathematics, Vol. 17, 1997.
- [32] M.E. Hochstenbach, A Jacobi-Davidson type SVD method, SIAM J. Sci. Comput., 23(2001) 606-628.
- [33] M.E. Hochstenbach, Harmonic and refined extraction methods for the singular value problem, with application in least squares problems, Preprint 1263, Dept. Math., University Utrecht, Utrecht, the Netherlands, December 2002. Revised version October 2004. Accepted for publication in BIT.
- [34] M.E. Hochstenbach, A Jacobi-Davidson type method for the generalized singular value problem, Preprint, Department of Mathematics, Case Western Reserve University, Cleveland, Ohio, USA, September 2004, preprint.
- [35] M.E. Hochstenbach, T. Košir, and B. Plestenjak, A Jacobi-Davidson type method for general two-parameter eigenvalue problem, to appear in SIAM J. Matrix Anal. Appl.
- [36] M.E. Hochstenbach and Y. Notay, The Jacobi-Davidson method, preprint.
- [37] M.E. Hochstenbach and B. Plestenjak, A Jacobi-Davidson type method for a right definite two-parameter eigenvalue problem, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 24(2002) 392-410.
- [38] M.E. Hochstenbach and G.L.G. Sleijpen, Two-sided and alternating Jacobi-Davidson, Linear Algebra Appl., 358(2003) 145-172.
- [39] M.E. Hochstenbach and G.L.G. Sleijpen, Harmonic and refined extraction methods for the polynomial eigenvalue problem, Preprint, Department of Mathematics, Case Western Reserve University, Cleveland, Ohio, USA, September 2004, preprint.
- [40] R.A. Horn and C.R. Johnson, Topics in Matrix Analysis, Cambridge University Press, 1991.
- [41] D. Hysom and A. Pothen, A scalable parallel algorithm for incomplete factor preconditioning, SIAM J. Sci. Comput., 22(2001) 2194-2215.
- [42] C.G.J. Jacobi, Ueber eine neue Auflösungsart der bei der Methode der kleinsten Quadrate vorkommende linearen Gleichungen, Astronom. Nachr., (1845) 297-306.
- [43] JDCG code, available via <http://homepages.ulb.ac.be/~ynotay>.
- [44] JDQR and JDQZ codes, available via <http://homepages.ulb.ac.be/sleijpen>.
- [45] M.T. Jones and P.E. Plassman, Solution of large, sparse systems of linear equations in massively parallel applications, Proceeding of Supercomputing '92, IEEE Computer Society Press, Silver Spring, MD, 1992, 551-560.
- [46] M.T. Jones and P.E. Plassman, Scalable iterative solution of sparse linear systems, in: G.J. George, J.W.H. Liu (eds.), Graph Theory and Sparse Matrix Computation, IMA Volumes on Mathematics and its Applications, Vol. 56, Springer, Berlin, 1993, 229-245.
- [47] L.Yu. Kolotilina and A.Yu. Yerebin, Factorized sparse approximate inverse preconditioning I. Theory, SIAM J. Matrix Anal. Appl., 14(1993) 45-58.

- [48] C. Lanczos, An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators, *J. Res. Nat. Bur. Stand.*, 45(1950) 255-282.
- [49] B. Liu, in: *Numerical Algorithms in Chemistry: Algebraic Methods*, eds. C. Moler and I. Shavitt, LBL-8158 Lawrence Berkeley Laboratory, 1978.
- [50] J.A. Meijerink and H.A. Van Der Vorst, An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M-matrix, *Math. Comput.*, 31(1977) 148-162.
- [51] R.B. Morgan, Computing interior eigenvalues of large matrices, *Linear Algebra Appl.*, 154/156 (1991) 289-309.
- [52] R.B. Morgan, Generalization of Davidson's method for computing eigenvalues of large nonsymmetric matrices, *J. Comput. Phys.*, 101(1992) 287-291.
- [53] R.B. Morgan and D.S. Scott, Generalizations of Davidson's method for computing eigenvalues of sparse symmetric matrices, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7(1986) 817-825.
- [54] R.B. Morgan, Preconditioning the Lanczos algorithm for sparse symmetric eigenvalue problems, *SIAM J. Sci. Comput.*, 14(1993) 585-593.
- [55] C.B. Moler and G.W. Stewart, An algorithm for generalized matrix eigenvalue problems, *SIAM J. Numer. Anal.*, 10(1973) 241-256.
- [56] C.W. Murray, S.C. Racine, and E.R. Davidson, Improved algorithm for the lowest eigenvalues and associated eigenvalues and associated eigenvectors, *J. Comput. Phys.*, 103(1992) 382-389.
- [57] Y. Notay, Optimal order preconditioning of finite difference matrices, *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(2000) 1991-2007.
- [58] Y. Notay, Combination of Jacobi-Davidson and conjugate gradients for the partial symmetric eigenproblem, *Numer. Lin. Alg. Appl.*, 9(2002) 21-44.
- [59] Y. Notay, Convergence analysis of inexact Rayleigh quotient iteration, *SIAM J. Matrix Anal. and Appl.*, 24(2003) 637-644.
- [60] Y. Notay, Is Jacobi-Davidson faster than Davidson?, *SIAM J. Matrix Anal. and Appl.*, 26(2005) 522-543.
- [61] J. Olsen, P. Jørgensen, and J. Simons, Passing the one-billion limit in full configuration-iteration (FCI) calculations, *Chemical Physics Letters*, 169(1990) 463-472.
- [62] A.M. Ostrowski, On the convergence of the Rayleigh quotient iteration for the computation of characteristic roots and vectors., *Arch. Rational Meth. Anal.*, Vol. 1-4, 1958/59, 233-241, 423-428, 325-340, 341-347, 472-481, 153-165.
- [63] E. Ovgchinnikov, Convergence estimates for the generalized Davidson method for symmetric eigenvalue problems I: The preconditioning aspect, *SIAM J. Numer. Anal.*, 41 (2003) 258-271.
- [64] C.C. Paige and M.A. Saunders, Solution of sparse indefinite systems of linear equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, 12(1975) 617-629.
- [65] C.C. Paige, B.N. Parlett, and H.A. Van Der Vorst, Approximate solutions and eigenvalue bounds from Krylov subspaces, *Numer. Lin. Alg. Appl.*, 2(1995) 115-133.
- [66] B.N. Parlett, The Rayleigh quotient iteration and some generalization for nonnormal matrices, *Math. Comput.*, 28(1974) 679-693.
- [67] B.N. Parlett, *The Symmetric Eigenvalue Problem*, SIAM, Philadelphia, 1998. Corrected reprint of the 1980 original.

- [68] G. Peters and J.H. Wilkinson, Inverse iteration, ill-conditioned equations and Newton's method, *SIAM Review*, 21(1979) 339-360.
- [69] Y. Saad, Numerical methods for large eigenvalue problems, Manchester University Press, Manchester, UK, 1992.
- [70] Y. Saad, ILUM: a multi-elimination ILU preconditioner for general sparse matrices, *SIAM J. Sci. Comput.*, 17(1996) 830-847.
- [71] Y. Saad, Iterative Methods for Sparse Linear Systems, SIAM, Philadelphia, second ed., 2003.
- [72] Y. Saad and M.H. Schultz, GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving non-symmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 7(1986) 856-869.
- [73] Y. Saad, A. Stathopoulos, J. Chelikowsky, K. Wu, Ögüt, Solution of large eigenvalue problems in electronic structure calculations, *BIT*, 36:3(1996) 563-578.
- [74] M.D. Segall, R. Shah, C.J. Pickard, and M.C. Payne, Population analysis of plane-wave electronic structure calculations of bulk materials, *Phys. Rev. B*, 54(1996) 16317-16320.
- [75] V.SIMONCINI and L.ELDEN, Inexact Rayleigh quotient-type methods for eigenvalue computations, *BIT*, 42(2002) 159-182.
- [76] G.L.G. Sleijpen and H.A. Van Der Vorst, A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problems, *SIAM J. Matrix Anal. Applic.*, 17(1996) 401-425.
- [77] G.L.G. Sleijpen, 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) 595-633.
- [78] G.L.G. Sleijpen and H.A. Van der Vorst, The Jacobi-Davidson method for linear eigenvalue problems and its relation with accelerated inexact Newton schemes, in: *Iterative Methods in Linear Algebra II*, New Brunswick, NJ, U.S.A., 1996, S.D.Margenov and P.S.Vassilevski (eds.), Vol 3 of IMACS Series in Computational and Applied Mathematics, IMACS, 377-389.
- [79] 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, *Electron. Trans. Numer. Anal.*, 1(1998) 75-89.
- [80] G.L.G. Sleijpen and F.W. Wubs, Effective preconditioning techniques for eigenvalue problems, Preprint 1117, Department of Mathematics, University of Utrecht, August 1999. Available online at <http://www.math.uu.nl/publications/Preprints/index.shtml.en>.
- [81] G.L.G. Sleijpen and J. Van der Eshof, On the use of harmonic Ritz pairs in approximating internal eigenpairs, Preprint 1184, Department of Mathematics, University of Utrecht, April 2001. Available online at <http://www.math.uu.nl/publications/Preprints/index.shtml.en>.
- [82] G.L.G. Sleijpen and F.W. Wubs, Exploiting multilevel preconditioning techniques in eigenvalue computations, *SIAM J. Sci. Comput.*, 4(2003) 1249-1272.
- [83] A. Stathopoulos, A case for a biorthogonal Jacobi-Davidson method: restarting and correction equation, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 24(2002) 238-259.
- [84] A. Stathopoulos and Y. Saad, Restarting techniques for the (Jacobi-)Davidson symmetric eigenvalue methods, *Electron. Trans. Numer. Anal.* (1998) 163-181.
- [85] A. Stathopoulos, Y. Saad, and C.F. Fischer, Robust preconditioning of large, sparse, symmetric eigenvalue problems, *J. Comput. Appl. Math.*, 64(1995) 197-215.
- [86] A. Stathopoulos, K. Wu, and Y. Saad, Dynamics thick restarting of the Davidson, and the implicitly restarted Arnoldi methods, *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(1998) 227-245.

- [87] M. Streiff, A. Witzig, and W. Fichtner, Computing optical modes for VCSEL device simulation, *IEEE Proc. Optoelectron.*, 149(2002) 166-173.
- [88] P.G. Szalay and R.J. Bartlett, Approximately extensive modifications of the multireference configuration interaction method: A theoretical and practical analysis, *J. Chemical Phys.*, 103(1995) 3600-3612.
- [89] D.B. Szyld, Criteria for combining inverse and Rayleigh quotient iteration, *SIAM J. Numer. Anal.*, 25(1988) 1369-1375.
- [90] K.H. Tan, Local coupling in domain decomposition, PhD. Thesis, Utrecht University, Utrecht, The Netherlands, 1995.
- [91] K.H. Tan and M.J.A. Borsboom, On generalized Schwarz coupling applied to advection-dominated problems, in: *Domain decomposition methods in scientific and engineering computing* (University Park, PA, 1993), *Amer. Math. Soc.*, Providence, RI, 1994, 125-130.
- [92] W.P. Tang, Generalized schwarz splittings, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 13(1992) 573-595.
- [93] J. Van der Eshof, The convergence of Jacobi-Davidson iterations for Hermitian eigenproblems, *Numer. Linear Algebra Appl.*, 9 (2002) 1249-1272.
- [94] A. Van Der Ploeg, E.F.F. Botta, and F.W. Wubs, Nested grids ILU-decomposition (NGILU), *J. Comput. Appl. Math.*, 66(1996) 515-526.
- [95] A. Van der Sluis and H.A. Van Der Vorst, The convergence behavior of Ritz values in the presence of close eigenvalues, *Linear Algebra Appl.*, 88/89(1987) 651-694.
- [96] H.A. Van der Vorst, A generalized Lanczos scheme, *Math. Comput.*, 39(1982) 559-561.
- [97] H.A. Van der Vorst, Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 13(1992) 631-644.
- [98] H.A. Van der Vorst, *Iterative Krylov Methods for Large Linear Systems*, Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [99] H.A. Van der Vorst, Computational methods for large eigenvalue problems, in: *Handbook of Numerical Analysis*, Vol. VIII, North-Holland, Amsterdam, 2002, 3-179.
- [100] P. Van Dooren, A generalized Lanczos scheme, *Math. Comput.*, 39(1982) 559-561.
- [101] P. Van Dooren, Algorithm 590, DUSBSP and EXCHQZ: FORTRAN subroutines for computing deflating subspace with specified spectrum, *ACM Trans. Math. Softw.*, 8(1982) 376-382.
- [102] J. Van den Eshof, The convergence of Jacobi-Davidson iterations for Hermitian eigenproblems, *Numer. Linear Algebra Appl.*, 9(2002) 163-179.
- [103] J.H. Van Lenthe and P. Pulay, A space-saving modification of Davidson's eigenvector algorithm, *J. Comput. Chem.*, 11(1990) 1164-1168.
- [104] T. Van Noorden, Computing a partial real ordered generalized Schur form using the Jacobi-Davidson method, Preprint 1307, Department of Mathematics, Utrecht University, September 2004.
- [105] K. Wu, Y. Saad, and A. Stahopoulos, Inexact Newton preconditioning techniques for large symmetric eigenvalue problems, *Electron. Trans. Numer. Anal.*, 7(1998) 202-214.
- [106] Y. Zhou, Eigenvalue computation from the optimization perspectives: on Jacobi-Davidson, IIGD, RQI and Newton updates, arXiv:math. NA/0402164 v1, 10 Feb 2004.