

文章编号:1005-3085(2009)05-0922-07

求解大型矩阵特征值问题的并行精化 Davidson 方法

王顺绪^{1,2}, 戴 华¹

(1- 南京航空航天大学理学院, 南京 210016; 2- 淮海工学院数理系, 连云港 222005)

摘 要: 针对共享主存的并行计算环境和微机网络并行计算环境, 本文给出了求解大型稀疏对称矩阵的部分极端特征对的并行精化 Davidson 方法, 分析了该法的内在并行性。各处理器利用矩阵的行块和投影子空间的正交基所组成矩阵的行块进行运算, 结合重新启动策略求解矩阵多个特征对的近似值, 并用以计算某型号机翼的固有频率, 在微机网络并行计算环境和拥有共享主存并行计算环境 IBM-P650 上进行了数值试验。

关键词: 并行计算; 特征值问题; Davidson 方法; 精化方法

分类号: AMS(2000) 65F15; 65Y05

中图分类号: O241; O246

文献标识码: A

1 引言

在科学和工程技术领域中, 经常需要计算大型稀疏对称矩阵的若干个特征对。解决这一问题的有效方法是正交投影方法, 包括子空间迭代法, Lanczos 方法, Arnoldi 方法, Davidson 方法和 Jacobi-Davidson 方法^[1,2]。为进一步提高 Lanczos 方法和 Davidson 方法的可靠性, Underwood 提出了块 Lanczos 方法^[3], 戴等提出了预处理块 Lanczos 方法^[4], Crouzeix 等人提出了块 Davidson 方法^[5,6]。

用正交投影方法计算特征值问题

$$Ax = \lambda x \quad (1)$$

的部分特征对时, Ritz 向量 \tilde{x}_i 可能收敛很慢甚至发散, 针对这一问题, 贾提出了保留 Ritz 值 $\tilde{\lambda}_i$, 用满足

$$\|(A - \tilde{\lambda}_i I)\tilde{x}_i\|_2 = \min_{x \in V_i, \|x\|_2=1} \|(A - \tilde{\lambda}_i I)x\|_2 \quad (2)$$

的精化向量 \hat{x}_i 代替 Ritz 向量 \tilde{x}_i 的精化思想^[7-12], 并继而指出

$$\|(A - \tilde{\lambda}_i I)\hat{x}_i\|_2 = \sigma_{\min}(AV_i - \tilde{\lambda}_i V_i), \quad (3)$$

其中 $\hat{x}_i = V_i \hat{z}_i$, \hat{z}_i 是矩阵 $(A - \tilde{\lambda}_i I)V_i$ 的最小奇异值 σ_{\min} 对应的右奇异向量, 且 $\|\hat{z}_i\|_2 = 1$ 。即

$$V_i^T (A - \tilde{\lambda}_i I)^H (A - \tilde{\lambda}_i I) V_i \hat{z}_i = \sigma_{\min}^2 \hat{z}_i, \quad (4)$$

不难证明 $\hat{x}_i = V_i \hat{z}_i$ 是对应于 Ritz 值的使本次迭代的残量范数 $\|(A - \tilde{\lambda}_i I)\hat{x}_i\|_2$ 最小的向量, 此时的残量范数为 σ_{\min} , 特征值的近似可取为 $\hat{\lambda}_i = \hat{x}_i^H A \hat{x}_i$ 。

大型矩阵特征值问题的计算是一项很耗时的工作, 尽管人们采用多种方法降低计算量, 但终因串行思想的限制难以有更大的提高, 采用并行计算是一条必由之路。多年来, 很多科技工

收稿日期: 2007-11-13. 作者简介: 王顺绪 (1962年11月生), 男, 博士, 副教授, 研究方向: 数值代数。

作者对特征值问题的并行计算进行了大量的研究。Balle 和 Cullum、Nool 和 Van der Ploeg 分别讨论了并行 Lanczos 方法和并行 Jacobi-Davidson 方法^[13,14], 取得了满意的效果。为提高求解大型矩阵特征值问题块 Davidson 方法的计算效率, 本文提出并行精化块 Davidson 方法, 并分别在微机网络并行环境和并行计算机 IBM-P650 上进行了数值试验。

2 精化块 Davidson 方法

设 A 是 n 阶稀疏对称矩阵, Davidson 方法利用 Galerkin-Ritz 投影技术, 计算矩阵的 Ritz 值和 Ritz 向量, 使用预处理技术拓广投影子空间 V 的基^[1], 在新的迭代步中, Davidson 方法充分利用已经获得的信息扩充新的子空间, 因而在很少的迭代步内得到满足精度要求的解。Davidson 方法通常和重新开始技术结合使用。

算法 1 (块 Davidson 方法^[5])

- 1) 选取正整数 m 和 l , 列正交规范矩阵 $V_1 = [v_1, v_2, \dots, v_l]$, 精度 ε ;
- 2) 对 $k = 1, 2, \dots$, 执行以下各步; 3) $W_k = AV_k$; 4) $H_k = V_k^T W_k$;
- 5) 计算 H_k 的 l 个最大(或最小)特征对 $(\tilde{\lambda}_{k,i}, y_{k,i})$, $i = 1, \dots, l$;
- 6) 计算 Ritz 向量 $\tilde{x}_{k,i} = V_k y_{k,i}$, $i = 1, \dots, l$;
- 7) 计算残量 $r_{k,i} = (\tilde{\lambda}_{k,i}I - A)\tilde{x}_{k,i}$, $i = 1, \dots, l$;
- 8) 收敛性检查, 若 $\|r_{k,i}\|_2 < \varepsilon$, $i = 1, \dots, l$, 则停止, 否则转 9);
- 9) 求解校正方程 $C_{k,i}t_{k,i} = r_{k,i}$, $i = 1, \dots, l$;
- 10) 若 $\dim(V_k) + l \leq m$, 则 $V_{k+1} = \text{MGS}(V_k, t_{k,1}, t_{k,2}, \dots, t_{k,l})$, 转 3), 否则转 11);
- 11) $V_1 = \text{MGS}(\tilde{x}_{k,1}, \dots, \tilde{x}_{k,l}, t_{k,1}, t_{k,2}, \dots, t_{k,l})$, 转 2) 重新开始。

算法 1 中的 MGS 代表修正的 Gram-Schmidt 正交化过程, 其数值稳定性优于经典的 Gram-Schmidt 正交化过程, 假设 $V_k = (v_1, \dots, v_s)$ 列正交规范, $v_j = t_{k,j-s}$, $j = s+1, \dots, s+l$, 则算法 1 中的 $V_{k+1} = \text{MGS}(V_k, t_{k,1}, t_{k,2}, \dots, t_{k,l})$ 的过程如下。

```

for  $i = 1$  to  $l$  do
    for  $j = s+1$  to  $s+l$  do
         $v_j = v_j - (v_j, v_i)v_i$ 
    endfor
endfor
for  $i = s+1$  to  $s+l$  do
     $v_i = v_i / \|v_i\|_2$ 
    for  $j = i+1$  to  $s+l$  do
         $v_j = v_j - (v_j, v_i)v_i$ 
    endfor
endfor

```

第 k 次迭代的预处理矩阵 $C_{k,i}$ 是 $\tilde{\lambda}_{k,i}I - A$ 的近似, 当 $C_{k,i}$ 接近 $\tilde{\lambda}_{k,i}I - A$ 时, 校正方程 $C_{k,i}t_{k,i} = r_{k,i}$ ($i = 1, \dots, l$) 的解 $t_{k,i}$ 接近 $\tilde{x}_{k,i}$ ($i = 1, \dots, l$), 在这种情况下将 $t_{k,i}$ ($i = 1, \dots, l$) 加入到基中会使新的基底线性相关, 为克服这个缺点, 可使用 Olsen 预处理^[15], 此时校正方程为

$$C_{k,i}t_{k,i} = r_{k,i} + \varepsilon_i \tilde{x}_{k,i}, t_{k,i} \perp \tilde{x}_{k,i}, \quad i = 1, \dots, l, \quad (5)$$

由 $t_{k,i}^T \tilde{x}_{k,i} = 0$ 得到

$$\varepsilon_i = -\tilde{x}_{k,i}^T C_{k,i}^{-1} r_{k,i} / \tilde{x}_{k,i}^T C_{k,i}^{-1} \tilde{x}_{k,i}, \quad i = 1, \dots, l, \quad (6)$$

这样经过 MGS 过程后得到的子空间的基标准正交。

将精化思想应用于块 Davidson 方法, 就 $\tilde{\lambda}_{k,i}$ 而言,

$$V_i^T (A - \tilde{\lambda}_{k,i} I)^T (A - \tilde{\lambda}_{k,i} I) V_i = W_k^T W_k - 2\tilde{\lambda}_{k,i} H_k + \tilde{\lambda}_{k,i}^2 I,$$

假设

$$S_{k,i} = W_k^T W_k - 2\tilde{\lambda}_{k,i} H_k + \tilde{\lambda}_{k,i}^2 I, \quad i = 1, \dots, l, \quad (7)$$

得到精化块 Davidson 方法, 以算法 2 表示。

算法 2 (精化块 Davidson 方法)

- 1) 选取正整数 m 和 l , 列正交规范矩阵 $V_1 = [v_1, v_2, \dots, v_l]$, 精度 ε ;
- 2) 对 $k = 1, 2, \dots$, 执行以下各步; 3) $W_k = AV_k$; 4) $H_k = V_k^T W_k$;
- 5) 计算 H_k 的 l 个最大(或最小)特征对 $(\tilde{\lambda}_{k,i}, y_{k,i})$, $i = 1, \dots, l$;
- 6) 计算 Ritz 向量 $\tilde{x}_{k,i} = V_k y_{k,i}$, $i = 1, \dots, l$;
- 7) 计算残量 $r_{k,i} = (\tilde{\lambda}_{k,i} I - A)\tilde{x}_{k,i}$, $i = 1, \dots, l$;
- 8) 收敛性检查, 若 $\|r_{k,i}\|_2 < \varepsilon$, $i = 1, \dots, l$, 则停止, 否则转 9);
- 9) 若 $\dim(V_k) + l \leq m$, 求解 $C_{k,i} t_{k,i} = r_{k,i}$, $i = 1, \dots, l$, $V_{k+1} = \text{MGS}(V_k, t_{k,1}, \dots, t_{k,l})$, 转 3);
- 10) 若 $\dim(V_k) + l > m$ 计算 $S_{k,i} = W_k^T W_k - 2\tilde{\lambda}_{k,i} H_k + \tilde{\lambda}_{k,i}^2 I$, $i = 1, \dots, l$ 的最小特征对 $(\sigma_{1,i}^2, \hat{z}_i)$, $i = 1, \dots, l$;
- 11) 计算精化向量 $\hat{x}_{k,i} = V_k \hat{z}_i$, $i = 1, \dots, l$;
- 12) $V_1 = [\hat{x}_{k,1}, \dots, \hat{x}_{k,l}]$, 转 2)。

3 并行精化块 Davidson 方法

3.1 精化块 Davidson 方法的并行计算

将 n 阶方阵 A 按行划分, 使得各处理机平均分配 A 的行数, 若 n 不是处理机数 p 的整数倍, 则前面的处理机比后面的多拥有一行。假设处理机 P_i 中存放矩阵的部分为 A_i , A_i 共有 m_i 行, 假设这 m_i 行是从 A 的第 i_1 行到 A 的第 $i_1 + m_1 - 1$ 行, 根据算法 2 得到并行精化块 Davidson 算法。

算法 3 (并行精化块 Davidson 方法)

- 1) 选取正整数 m 和 l , 列正交规范矩阵 $V_1 = [v_1, v_2, \dots, v_l]$, 精度 ε ;
- 2) 对 $k = 1, 2, \dots$, 执行以下各步; 3) P_i 计算 $W_{k,i} = A_i V_k$;
- 4) P_i 计算 $H_{k,i} = V_{k,i}^T W_{k,i}$; 5) P_i 中 $H_k = \sum_{j=1}^p H_{k,j}$;
- 6) P_i 计算 H_k 的 l 个最大(或最小)特征对 $(\tilde{\lambda}_{k,j}, y_{k,j})$, $j = 1, \dots, l$;
- 7) 并行计算 Ritz 向量 $\tilde{x}_{k,j} = V_k y_{k,j}$, $j = 1, \dots, l$;
- 8) 并行计算残量 $r_{k,j} = (\tilde{\lambda}_{k,j} I - A)\tilde{x}_{k,j}$, $j = 1, \dots, l$;
- 9) 收敛性检查, 若 $\|r_{k,j}\|_2 < \varepsilon$, $j = 1, \dots, l$, 则停止, 否则转 10);
- 10) 若 $\dim(V_k) + l \leq m$, 解 $C_{k,j} t_{k,j} = r_{k,j}$, $j = 1, \dots, l$, $V_{k+1} = \text{MGS}(V_k, t_{k,1}, \dots, t_{k,l})$, 转 3);

11) 若 $\dim(V_k) + l > m$ 则 P_i 计算矩阵 $W_{k,i}^T W_{k,i}$, 得到 $W_k^T W_k$, 从而

$$S_{k,j} = W_k^T W_k - 2\tilde{\lambda}_{k,j} H_k + \tilde{\lambda}_{k,j}^2 I, \quad j = 1, \dots, l,$$

计算 $S_{k,j} (j = 1, \dots, l)$ 的最小特征对 $(\sigma_{1,j}^2, \hat{z}_j)$, $j = 1, \dots, l$;

12) 并行计算精化向量 $\hat{x}_{k,j} = V_k \hat{z}_j$, $j = 1, \dots, l$;

13) $V_1 = [\hat{x}_{k,1}, \dots, \hat{x}_{k,l}]$, 转 2)。

3.2 并行特性分析及数据分配

算法 3 的计算过程主要是矩阵和向量乘, 因此具有良好的并行性, 其中 6) 计算低阶矩阵 H_k 的特征对及 11) 中最小奇异对的运算量较小, 各处理机可分别从事该过程的计算。

$W_k = AV_k$ 及 $H_k = V_k^T W_k$ 的并行计算。 P_i 中 $W_{k,i} = A_i V_k$, 从而 P_i 可以独立计算 W_k 的 m_i 行。假设 $V_k^T = (V_{k,1}^T, \dots, V_{k,p}^T)^T$, 其中各子块的规模同 A 的行分块, 因此各处理机可以独立计算 V_k^T 的列子块和 W_k 的行子块的乘积, 处理机 P_i 计算 $H_{k,i} = V_{k,i}^T W_{k,i}$, 整体求和或主节点机求和得到

$$H_k = \sum_{j=1}^p H_{k,j},$$

各节点机(或主节点机)计算 H_k 的全部特征对, 确定 H_k 的 l 个特征值 $\tilde{\lambda}_{k,j} (j = 1, \dots, l)$, 若由主节点机计算, 必须将结果发送给各子进程。

$W_k^T W_k$ 的并行计算。 P_i 计算 $W_{k,i}^T W_{k,i}$, 得到

$$S_{k,j} = W_k^T W_k - 2\tilde{\lambda}_{k,j} H_k + \tilde{\lambda}_{k,j}^2 I, \quad j = 1, \dots, l,$$

主节点机或各节点机同时计算 $S_{k,j}$ 的最小特征对 $(\sigma_{1,j}^2, \hat{z}_j)$, $j = 1, \dots, l$ 。

Ritz 向量 $\tilde{x}_{k,j} (j = 1, \dots, l)$ 的并行计算。假设

$$Y_k = (y_{k,1}, \dots, y_{k,l}), \quad X_k = (\tilde{x}_{k,1}, \dots, \tilde{x}_{k,l}),$$

将 X_k 行分块, 行分块的情况同 A 的行分块, 那么 $X_k = (X_{k,1}^T, \dots, X_{k,p}^T)^T$, 则

$$X_{k,i} = V_{k,i} Y_k, \quad i = 1, \dots, p,$$

也即处理机 P_i 独立计算 $X_{k,i}$, 同样的方法用于并行计算精化向量 $\hat{x}_{k,j}$, $j = 1, \dots, l$ 。

残量 $r_{k,j} = \tilde{\lambda}_{k,j} \tilde{x}_{k,j} - W_k y_{k,j} (j = 1, \dots, l)$ 的并行计算。假设 $R_k = (r_{k,1}, \dots, r_{k,l})$, 同 X_k 一样, 将 R_k 行分块, 即 $R_k = (R_{k,1}^T, \dots, R_{k,p}^T)^T$, 由于

$$R_k = X_k \text{diag}(\tilde{\lambda}_{k,1}, \dots, \tilde{\lambda}_{k,l}) - W_k Y_k,$$

所以 $R_{k,i} = X_{k,i} \text{diag}(\tilde{\lambda}_{k,1}, \dots, \tilde{\lambda}_{k,l}) - W_{k,i} Y_k$, $R_{k,i}$ 的计算是独立的。

$C_{k,j} t_{k,j} = r_{k,j} (j = 1, \dots, l)$ 的并行求解。 $C_{k,j} = (\tilde{\lambda}_{k,j} I - M_A)$, 若取 M_A 为 A 的对角阵即 $M_A = D_A$, P_i 中 $t_{k,j}$ 的计算过程为

$$(t_{k,j})_s = (r_{k,j})_s / (\tilde{\lambda}_{k,j} - a_{s,s}), \quad s = i_1, \dots, i_1 + m_i - 1, \quad j = 1, \dots, l,$$

假设 $T_k = (t_{k,1}, \dots, t_{k,l})$, 则 P_i 中含有 T_k 的一个行数为 m_i 的行块。

经过上述各步, 各结点机中可得到 V_{k+1} 的相应行块, 然后进行相应的正交化过程。

3.3 正交化过程的并行计算

算法3中 V_{k+1} 各列的正交化过程,采用行分块的形式, P_i 负责 V_{k+1} 的 m_i 行的运算。 V_{k+1} 各列向量的范数以及各向量和其后面向量内积的计算,则由各处理机分别负担一部分,为减少通讯,将经典的Gram-Schmidt (CGS)正交化过程和MGS过程相结合,记为CMGS过程。CMGS过程的一部分环节使用CGS过程,另一部份使用MGS过程。当 $m - \dim(V_k) \geq l$ 时,使用并行CGS方法,对处理机中的 $t_{k,j}(j = 1, \dots, l)$ 相应的部分进行正交修正,该过程只需一次整体求和,然后对修正过的 $t_{k,j}(j = 1, \dots, l)$ 自身进行MGS标准正交化过程。

4 数值试验及结论

假设 p 代表节点机的数量, t_p 代表使用 p 个节点机计算的时间(单位:秒), $S_p = t_1/t_p$ 表示加速比, η 表并行效率(以百分比表示),迭代精度 $\varepsilon = 10^{-6}$ 。数值试验在IBM-P650和微机网络并行计算环境上进行,微机网络并行环境由安装MPI的PII300微机组成,内存64M。IBM-P650是拥有8个1.45 GHz的Power4 CPU、16GB内存、FastT磁盘阵列的并行计算机,在IBM-P650并行机上用Fortran编译器编制使用共享内存进行通信的MPI程序。

算例1 n 阶矩阵 $A = (a_{ij})$ 的元素定义为 $i = j$ 时 $a_{ij} = i$, $|i - j| \leq w$ 并且 $i \neq j$ 时 $a_{ij} = \Delta^{|i-j|}$,其它情况 $a_{ij} = 0$ 。 w 为 A 的半带宽。本算例取 $n = 7000$, $w = 262$, $\Delta = 0.75^{[16]}$,在两种并行环境下,使用精化块Davidson方法和非精化块Davidson方法并行计算 A 的5个最小特征对,结果见表1-3。

表1: 算例1的前5个最小特征值

k	λ_k
1	$-4.0931326 \times 10^{-2}$
2	0.5804710
3	1.0164097
4	1.7284262
5	2.2801648

表2: 微机并行环境下并行计算算例1的情况

并行精化块Davidson方法				并行块Davidson方法			
p	t	S_p	η	p	t	S_p	η
1	22.45	1	100	1	304.13	1	100
2	14.48	1.55	77.5	2	187.1	1.63	81

表3: IBM-P650上并行计算算例1的情况

并行精化块Davidson方法				并行块Davidson方法			
p	t	S_p	η	p	t	S_p	η
1	6.28	1	100	1	103.38	1	100
2	3.88	1.62	81	2	60.46	1.71	85.5
4	2.33	2.7	67.4	4	37.32	2.77	69.3
8	1.43	4.39	54.9	8	22.19	4.66	58.2

算例 2 使用并行精化块 Davidson 方法和非精化块 Davidson 方法, 并行计算如图 1 所示机翼的前 10 阶频率^[17]。假设 K 和 M 代表结构的刚度矩阵和质量矩阵, λ 是特征值问题 $Kx = \lambda Mx$ 的特征值, 则结构相应的固有频率 $f = \sqrt{\lambda}/2\pi$, 将广义特征值问题转变成 $By = \tilde{\lambda}y$, 其中 $B = L^{-1}ML^{-T}$, $K = LL^T$, $\tilde{\lambda} = 1/\lambda$, 校正方程 $t_{k,i} = C_{k,i}^{-1}r_{k,i}$ 中 $C_{k,i}^{-1}$ 取 $(\tilde{\lambda}_{k,i} - B)^{-1}$ 的近似

$$C_{k,i}^{-1} = \frac{1}{\tilde{\lambda}_{k,i}} \left(I + \frac{1}{\tilde{\lambda}_{k,i}} B \right).$$

在 IBM-P650 上的计算情况如表 4 所示。

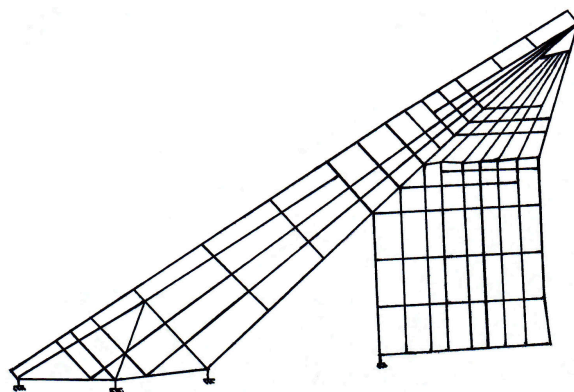


图 1: 某型号机翼的上翼面

表 4: IBM-P650 上并行计算算例 2 的情况

并行精化块 Davidson 方法				并行块 Davidson 方法			
p	t	S_p	η	p	t	S_p	η
1	8.27	1	100	1	7.63	1	100
2	4.48	1.85	92.3	2	4.08	1.87	93.5
4	2.53	3.27	81.7	4	2.30	3.32	82.9
8	1.58	5.23	65.4	8	1.43	5.34	66.7

计算结果表明, 算例 1 中非精化方法和精化方法的迭代次数分别为 101 次和 6 次, 精化方法比非精化方法迭代次数减少了许多, 节省了计算时间; 算例 2 的预处理矩阵的修正效果非常好, 两种方法的迭代次数都是 5 次, 精化方法的运行时间比非精化的稍多, 加速比稍低, 这是由于在本算例中两种方法都重新启动一次, 精化方法需要额外计算 $S_{k,j}$ ($j = 1, \dots, l$) 及其相应的最小特征对 $(\sigma_{1,j}^2, \hat{z}_j)$ ($j = 1, \dots, l$), 增加了计算量和相应的通讯开销。精化方法的迭代次数不会超过非精化方法的迭代次数, 其减少计算时间的原因在于其可能减少迭代步。由于涉及到的运算基本上都是矩阵向量乘, 并行计算的效果是明显的。

参考文献:

- [1] Davidson E R. The iterative calculation of a few lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real-symmetric matrices[J]. *Journal of Computational Physics*, 1975, 17(1): 87-94
- [2] Sleijpen G L G, Van der Vorst H A. A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problem[J]. *SIAM J Matrix Anal Appl*, 1996, 17(2): 401-425
- [3] Underwood R. An Iterative Block Lanczos Method for the Solution of Large Sparse Symmetric Eigenproblems[D]. Stanford: Stanford University, 1975
- [4] Dai H, Lancaster P. Preconditioned block Lanczos algorithm for solving symmetric eigenvalue problems[J]. *Journal of Computational Mathematics*, 2000, 18: 365-374
- [5] Crouzeix M, Philippe B, Sadkane M. The Davidson method[J]. *SIAM J Sci Comput*, 1994, 15(1): 62-76
- [6] Sadkane M, Sidje R B. Implementation of a variable block Davidson method with deflation for solving large sparse eigenproblems[J]. *Numerical Algorithms*, 1999, 20: 217-240
- [7] Jia Z X. Refined iterative algorithm based on Arnoldi's process for large unsymmetric eigenproblems[J]. *Linear Algebra and its Applications*, 1997, 259: 1-23
- [8] Jia Z X. A refined subspace iteration algorithm for large sparse eigenproblems[J]. *Applied Numerical Mathematics*, 2000, 32(1): 35-52
- [9] Jia Z X. An analysis of the Rayleigh-Ritz method for approximating eigenspaces[J]. *Mathematics of Computation*, 2000, 70(234): 637-647
- [10] 贾仲孝, 张萍. 计算大规模矩阵最大最小奇异值和奇异向量的两个精化 Lanczos 算法[J]. *计算数学*, 2003, 25(3): 293-304
- [11] Jia Z X, Sun Y Q. A refined residual iteration method[J]. *Numerical Mathematics a Journal of Chinese Universities*, 2004, 26(2): 146-155
- [12] Jia Z X. Composite orthogonal projection methods for large matrix eigenproblems[J]. *Science in China(A)*, 1999, 42(6): 577-585
- [13] Balle S, Cullum J. A parallel algorithm for computing eigenvalues of very large real symmetric matrices on message passing architectures[J]. *Applied Numerical Mathematics*, 1999, 30(2): 341-365
- [14] Nool M, Van der Ploeg A. A parallel Jacobi-Davidson-type method for solving large generalized eigenvalue problems in magnetohydrodynamics[J]. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2000, 22(1): 95-112
- [15] Olsen J, Jorgensen P, Simons J. Passing the one-billion limit in full configuration-interaction (FCI) calculations[J]. *Chemical Physics Letters*, 1990, 169(6): 463-472
- [16] Shepard R, Wagner A F, Tilson J L, et al. The subspace projected approximate matrix (SPAM) modification of the Davidson method[J]. *Journal of Computational Physics*, 2001, 172(2): 472-514
- [17] 王顺绪. 微机网络并行环境下杆壳组合结构动力特性并行计算[J]. *计算力学学报*, 2005, 22(1): 38-41

Parallel Refined Davidson Method for Solving the Large Scale Eigenproblem

WANG Shun-xu^{1,2}, DAI Hua¹

(1- College of Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016;

2- Department of Mathematics and Physics, Huaihai Institute of Technology, Lianyungang 222005)

Abstract: A parallel refined Davidson method is presented for large sparse symmetric eigenvalue problems, its implementation on PC network parallel systems and shared memory computer systems, as well as the parallelism are analyzed. The rows of the matrix are distributed to each processor, and the individual processors run the program by using the orthogonal basis of projection subspace and the rows of the matrix. Combine with the restarting scheme, the method can solve several eigenvalues and its associated eigenvectors of the matrix, and the method is successfully used for computing the frequency of a plane wing. The numerical experiments are done on the PC network parallel system and shared memory parallel system IBM-P650.

Keywords: parallel computing; eigenvalue problem; Davidson method; refined method