

# フィルタ対角化法による近似固有対の精度の改良について

村上 弘<sup>1,a)</sup>

**概要:** 対称定値一般固有値問題の固有対で固有値が指定された範囲にあるものをフィルタ対角化法で解くとする。フィルタには、指定範囲の固有値を持つ固有ベクトルを良く通過させるがそれ以外の固有ベクトルは強く阻止するように調整された線形作用素を用いる。するとフィルタは必要な固有ベクトルで張られた不変部分空間への近似射影作用素である。十分多くの乱数ベクトルを生成して、フィルタでそれらを濾過する。そうして濾過されたベクトルから線形結合をうまく構成することで、必要な固有ベクトルすべてで張られる不変部分空間の基底の近似が得られる。その基底にレイリ・リッツ法を適用して必要な固有対の近似を得る。このような方法により得られる近似固有対の精度の改良を試みる。

**キーワード:** フィルタ対角化, 固有値問題, レゾルベント, 改良

## On Improvements on Approximations of Eigenpairs by Filter Diagonalization Method

**Abstract:** We are to solve those eigenpairs of a symmetric definite generalized eigenproblem whose eigenvalues are in a specified interval by using the filter diagonalization method. For the filter, a linear operator is used which passes those eigenvectors whose eigenvalues are in the specified interval but stops others. Then the filter is an approximate projector to the space spanned by all eigenvectors required. Sufficient many random vectors are generated and filtered. From the set of filtered vectors, linear combinations are constructed well so to obtain a set of approximate basis of the invariant subspace spanned by all required eigenvectors. To the set of approximate basis, the Rayleigh-Ritz procedure is applied to obtain approximate eigenpairs which are required. We try to improve accuracies of approximate eigenpairs obtained by this method.

**Keywords:** filter diagonalization, eigenproblem, resolvent, improvement

### 1. はじめに

実対称定値一般固有値問題  $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$  の固有対  $(\lambda, \mathbf{v})$  で固有値が指定された区間にあるものの近似をフィルタ対角化法により求めるものとする (問題の実対称を複素エルミートにしてもほぼ同様の扱いができるが、今回はそれについての記述は省く)。フィルタの構成には一般固有値問題の係数行列を用いて定義されるレゾルベント  $\mathcal{R}(\rho) \equiv (A - \rho B)^{-1}B$  を用いることができる。ここでレゾルベントのシフト  $\rho$  は一般には複素数である。フィルタ  $\mathcal{F}$  の構成には、(シフトが実数あるいは虚数の) レゾルベントの線形結合の実部によるもの  $\mathcal{F} = c_\infty I + \text{Re} \sum_{j=1}^n c_j \mathcal{R}(\rho_j)$  や、あるいはシフ

ト  $\rho$  が実数の単一のレゾルベントの実多項式  $P$  によるもの  $\mathcal{F} = P(\mathcal{R}(\rho))$  や、シフト  $\rho$  が虚数の単一のレゾルベントの虚部の実多項式によるもの  $\mathcal{F} = P(\text{Im}\mathcal{R}(\rho))$  や、あるいはそれらの混合型とみなせるがレゾルベントの線形結合の実部の作用を考えてその実多項式を用いるもの、などいろいろなものがある。

レゾルベントの作用を用いてフィルタを構成する場合には、与えられたベクトル  $\mathbf{x}$  に対するレゾルベント  $\mathcal{R}(\rho)$  の作用  $\mathbf{y} \leftarrow \mathcal{R}(\rho)\mathbf{x}$  を実現するには、シフト  $\rho$  の (複素対称な) 行列  $C(\rho) \equiv (A - \rho B)$  を係数とする連立 1 次方程式  $C(\rho)\mathbf{y} = B\mathbf{x}$  を  $\mathbf{y}$  について解くことが必要で、その計算作業がフィルタ対角化法のほとんどを占める。もしもその連立 1 次方程式を直接法で解くことにするならば、係数  $C(\rho)$  の行列分解に費やす演算量と分解結果を保持するための記憶量が、計算を実施する上での制約要因となりうる。そのため、フィルタの構成に用いるレゾルベントの数をなるべく

<sup>1</sup> 首都大学東京・数理情報科学専攻  
Department of Mathematics and Information Sciences,  
Tokyo Metropolitan University

a) mrkmhrsh@tmu.ac.jp

く少なくしたいが、レゾルベントの数が最少となるフィルタの構成である「実数シフトの単一のレゾルベントの作用の実多項式」あるいは「虚数シフトの単一のレゾルベントの虚部の作用の実多項式」は、その伝達特性を理想フィルタの特性に近づけるのには（数値的な精度からくる）困難があり、レゾルベントのシフトや多項式を調整してみても得られる伝達特性はあまり良いものにはできない（例えば通過から阻止へ急峻に変化する遮断特性を得ることが困難である）。構成に用いるレゾルベントの数を少数2~4程度にまで増すことによりフィルタの伝達特性を大幅に改善する方法は既に得られたが、レゾルベントの作用を与える連立1次方程式を直接法で解くのであるから、行列分解に費やす演算量と分解結果を保持するための記憶量は用いるレゾルベントの数に比例して増えることになる。

そこで今回は、あまり特性が良くないが「単一のレゾルベントの多項式型」であるフィルタを用意して、それを少数2~4回繰り返して適用することにより近似解を改良する方法を試みた（共通するレゾルベントから構成されたフィルタを繰り返して適用する場合は、そのレゾルベントに対応する行列分解を最初に1度だけ行ない、後は分解結果を引き継いで利用すればよく、同じ行列の分解を繰り返す必要はない）。ただしフィルタの処理を単に繰り返すのではなく、次段のフィルタを適用する前にベクトルの組に対するB-正規直交化と閾値に基づいた切断の操作を加える（するとこの方法は構造解析分野の固有値問題の計算で「同時逆反復法」と呼ばれる手法と類似したものになる）。

もしも正規直交化の操作を加えずにフィルタの適用だけを繰り返せば、必要な固有ベクトルに対する伝達率の大きさの最大最小比が適用の繰り返しの数と共に1乗、2乗、3乗となって拡大し、数値丸めにより伝達率が相対的に小さい固有ベクトルに対する有効な情報の精度が低下する。そこで次段のフィルタを適用する前に適切なB-正規直交化の処理を行なうことにより、そのような不均一さの拡大傾向の抑制を狙う（正規直交化処理の後にさらにレイリ・リッツ法の処理を加えることも可能であるが、今回は省く。）

このような考えに基づいた、B-再直交化の処理を中間にはさんでフィルタを少数2~4段重ねて適用することによる近似固有対の精度の改良を幾つかの例に対して実験してみても有望な手法であると判断したので、今回はそれについて報告する。

実験ではB-正規直交化には、計量Bの特異値分解（B-SVD）を用いたが、たとえば列選択付きの計量Bの（修正）グラム・シュミット型の算法なども用いることができよう。

正規直交化の処理は、対象とするベクトルの組が揃ってからでないと開始できないので、その時点での同期を要求することが、フィルタ対角化の計算を並列分散化して行なう場合には不利である。途中で正規直交化を行わずに

フィルタの処理だけを繰り返して行なう場合には、各段のフィルタの処理ではベクトルの組を任意に分割して並列に処理できるが、正規直交化の処理を途中で挿入した場合には、分割したそれぞれのベクトルの組に対するフィルタの処理がすべて完了するまで待って、それから正規直交化の処理を開始する必要がある。またベクトルの組に対する正規直交化の適用は線形的作用素ではないので、各段のフィルタの処理は線形であっても、複数段のフィルタの処理で途中で正規直交化の処理を加えたものは線形的作用素ではなくなることに注意する。

## 2. 反復に用いるフィルタについて

今回の実験で用いたフィルタは、単一のレゾルベントで構成されたものに限定した。そのようなフィルタでは用いるレゾルベントの数は1で最少であるが、伝達特性をあまり良いものにすることができない。

固有値を求める実数の区間  $[a, b]$  が固有値分布の下端である場合には、うまく選んだ実数  $\rho$  をレゾルベントのシフトとして、以下の式 (1) で表わされる（チェビシェフ多項式を用いた）簡易型のものをフィルタとして採用した。

$$\mathcal{F} = g_s T_n(2\gamma \mathcal{R}(\rho) - I). \quad (1)$$

また実区間  $[a, b]$  が固有値の分布に対して一般の位置にある場合には、うまく選んだ虚数  $\rho'$  をレゾルベントのシフトとして、以下の形の式 (2) で表わされる簡易型のものをフィルタとして採用した。

$$\mathcal{F} = g_s T_n(2\gamma' \text{Im} \mathcal{R}(\rho') - I). \quad (2)$$

ただし  $T_n(x)$  は  $x$  の  $n$  次の第1種チェビシェフ多項式  $T_0(x) = 1$ ,  $T_1(x) = x$ ,  $T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x)$ , ( $k \geq 2$ ) であり、 $I$  は恒等演算子、 $\text{Im}$  はベクトルの虚部を取り出す演算子、 $\gamma$  や  $\gamma'$  は実数の定数、また  $g_s$  も実数の定数で、それはフィルタの阻止域に於ける伝達率の大きさの上限である。

### 2.1 フィルタの設計

今回用いるすべてのフィルタは3つのパラメタ  $n$ ,  $\mu$ ,  $g_s$  を指定して決定した（フィルタを決定するためのパラメタの与え方はこれ以外にもあるが、今回の実験ではこのようにした）。ここで  $n$  はチェビシェフ多項式の次数であり、 $\mu$  は規格化座標  $t$  による遷移域  $t \in (1, \mu)$  と阻止域  $t \in [\mu, \infty)$  の境界の位置であり、 $g_s$  は阻止域に於けるフィルタの伝達率の大きさの上限値である。なお通過域  $\lambda \in [a, b]$  に於けるフィルタの伝達率の最小値を  $g_p$  とする。以下に3つのパラメタを指定した場合のフィルタの構成法を示す。

#### 2.1.1 レゾルベントのシフトに実数を用いる場合

求めたい固有対の固有値が区間  $[a, b]$  にあり、単一のレゾルベントのシフトに実数を用いる場合には、以下の式 (3)

を用いて与えられた3つのパラメタ  $n$ ,  $\mu$ ,  $g_s$  からフィルタを構成するためのシフト  $\rho$  とレゾルベントの係数  $\gamma$  (および  $g_p$ ) を求める. ただし区間  $[a, b]$  は固有値分布の下端にあることが必要で,  $a$  は最小固有値以下であることが必要である.

$$\begin{cases} \sigma & \leftarrow \mu / \sinh\left(\frac{1}{2n} \cosh^{-1} \frac{1}{g_s}\right), \\ \rho & \leftarrow a - (b - a)\sigma, \\ \gamma & \leftarrow (b - a)(\sigma + \mu), \\ g_p & \leftarrow g_s \cosh\left(2n \sinh^{-1} \sqrt{\frac{\mu-1}{1+\sigma}}\right), \end{cases} \quad (3)$$

すると, フィルタ  $\mathcal{F}$  は求めた  $\rho$  と  $\gamma$  を用いて実数シフト  $\rho$  のレゾルベント  $\mathcal{R}(\rho)$  を用いた以下の式 (4) で表される.

$$\mathcal{F} = g_s T_n(2\gamma \mathcal{R}(\rho) - I). \quad (4)$$

$\lambda \in [a, b]$  と  $t \in [0, 1]$  の間の線形関係  $t = (\lambda - a)/(b - a)$  を用いて  $\lambda$  に対して定義される正規化座標  $t$  を用いると, このフィルタの伝達関数  $g(t)$  は以下の式 (5) である.

$$g(t) = g_s T_n\left(2 \frac{\mu + \sigma}{t + \sigma} - 1\right). \quad (5)$$

あるいは引数が  $\lambda$  の伝達関数  $f(\lambda)$  は以下の式 (6) である.

$$f(\lambda) = g_s T_n\left(2\gamma \frac{1}{\lambda - \rho} - 1\right). \quad (6)$$

### 2.1.2 レゾルベントのシフトに虚数を用いる場合

求めたい固有対の固有値が区間  $[a, b]$  にあり, 虚数を単一のレゾルベントのシフトに用いる場合には, 以下の式 (7) を用いて与えられた3つのパラメタ  $n$ ,  $\mu$ ,  $g_s$  からフィルタを構成するためのシフト  $\rho'$  とレゾルベントの係数  $\gamma'$  (および  $g_p$ ) を求める. シフトが虚数の場合には区間  $[a, b]$  の位置を任意に設定できる.

$$\begin{cases} \sigma & \leftarrow \mu / \sinh\left(\frac{1}{2n} \cosh^{-1} \frac{1}{g_s}\right), \\ \rho' & \leftarrow \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \sigma \sqrt{-1}, \\ \gamma' & \leftarrow \frac{b-a}{2} \cdot \frac{\mu^2 + \sigma^2}{\sigma}, \\ g_p & \leftarrow g_s \cosh\left(2n \sinh^{-1} \sqrt{\frac{\mu^2 - 1}{1 + \sigma^2}}\right). \end{cases} \quad (7)$$

すると, フィルタ  $\mathcal{F}$  は計算された  $\rho'$  と  $\gamma'$  を用いて虚数シフト  $\rho'$  のレゾルベント  $\mathcal{R}(\rho')$  を用いた以下の式 (8) で表される.

$$\mathcal{F} = g_s T_n(2\gamma' \text{Im} \mathcal{R}(\rho') - I). \quad (8)$$

なお  $\lambda \in [a, b]$  と  $t \in [-1, 1]$  の間の線形変換  $\lambda = (a + b)/2 + t(b - a)/2$  により定義される  $\lambda$  に対する正規化座標  $t$  を用いると, このフィルタの伝達関数  $g(t)$  は以下の式 (9) となる.

$$g(t) = g_s T_n\left(2 \frac{\mu^2 + \sigma^2}{t^2 + \sigma^2} - 1\right). \quad (9)$$

あるいは引数が  $\lambda$  の伝達関数  $f(\lambda)$  は以下の式 (10) となる.

$$f(\lambda) = g_s T_n\left(2\gamma' \text{Im} \frac{1}{\lambda - \rho'} - 1\right). \quad (10)$$

## 3. フィルタを反復適用する対角化法の概要

今回は簡単化のために, 同じフィルタを IT 回 (2~4 回) 繰り返して適用する (IT=1 の場合はフィルタの適用は 1 回である). ただしベクトルの組に対して各段のフィルタ適用の前に  $B$ -正規直交化を施している. 今回の実験では  $B$ -正規直交化の手段として閾値付きの  $B$ -特異値分解 ( $B$ -SVD) を用いて, 閾値には (相対値ではなくて絶対値をもって) マシンイプシロン の 100 倍に設定している. 閾値以下の特異値に対する特異ベクトルは切断される (省かれる).

今回の正規直交化付きでフィルタを反復して用いる対角化法の概要は以下のようになる.

- (1) まず固有値が区間  $[a, b]$  近傍の固有ベクトルは良く通過させるが,  $[a, b]$  から離れた固有ベクトルは強く阻止する性質を持つように調整された線形作用素をフィルタ  $\mathcal{F}$  として用意する. フィルタで用いるレゾルベント (今回は 1 つ) の作用を与える連立 1 次方程式の係数の行列分解を構成しておく.
- (2) フィルタに最初に適用するベクトルの組  $X$  を作るために, まずランダムな  $N$  次ベクトル  $m$  個の組を生成して, それを元にして  $B$ -正規直交化により  $m$  個の  $B$ -正規直交ベクトルの組  $X$  ( $N \times m$  行列) を作る ( $X^T B X = I$ ).
- (3) 作成した組  $X$  にフィルタ  $\mathcal{F}$  を作用させて, ベクトルの組  $Y \leftarrow \mathcal{F} X$  ( $N \times m$  行列) を作る.
- (4) フィルタ適用を複数回行なう場合 (IT > 1) には, まず組  $Y$  を  $B$ -正規直交化したものを組  $X$  に設定し直して, それから再び  $Y \leftarrow \mathcal{F} X$  を作る, この処理を  $i=2, 3, \dots, \text{IT}$  と繰り返す. ただし  $B$ -正規直交化の段階で (閾値による判定で) 有効階数の低下を検出したら, その低下した有効階数を新たな  $m$  (組  $X$  や  $Y$  の列の数=ベクトルの個数) として設定し直して計算を続ける.
- (5) 得られた  $Y$  の列の適切な線形結合の組により 「 $[a, b]$  近傍にある固有値すべてに対応する不変部分空間」を近似する空間の基底をうまく構成する (その構成には  $X, Y$  およびフィルタの伝達関数の特性を参照して決めるのが良い. このときの  $X$  と  $Y$  は一番最後にフィルタを適用した時の  $X$  と  $Y$  である).
- (6) 構成された「不変部分空間を近似する空間の基底」に対してレイリ・リッツ法を適用し, 得られたリッツ対を元の一般固有値問題の近似対とする.

## 4. 実験について

### 4.1 実対称定値一般固有値問題のテスト例題

今回の実験の例題として採り上げた実対称定値一般固有値問題  $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$  は, 1 辺の長さが  $\pi$  の 3 次元立方体領域に於いて零-ディリクレ境界条件を課した 3 次元ラプラス

作用素の固有値問題  $-\nabla^2 \Psi(x, y, z) = \lambda \Psi(x, y, z)$  を有限要素法で離散化近似することで得られるものである。有限要素法の要素分割は、立方体領域の各辺方向をそれぞれ個数  $N_1 + 1, N_2 + 1, N_3 + 1$  の小区間に等間隔に分割して、それらの3方向の小区間の直積である直方体を有限要素とした(図1)。

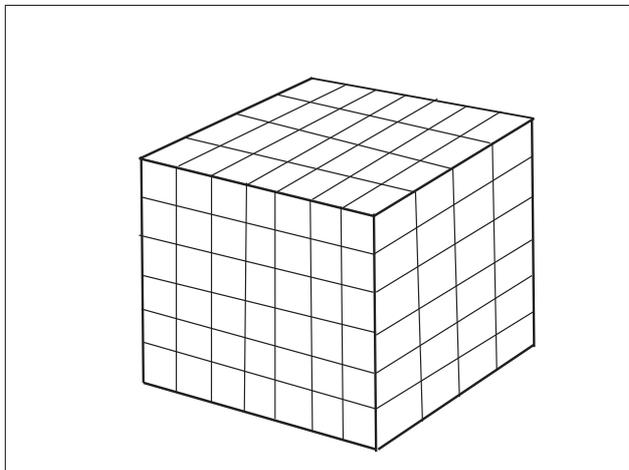


図1 立方体のFEM分割の概念. 分割例  $(N_1, N_2, N_3) = (3, 5, 6)$ .

そうして各有限要素の内部に於ける展開基底には各辺方向の3重線形関数を用いた。この有限要素法の離散化で得られる行列  $A$  と  $B$  の次数は  $N = N_1 N_2 N_3$  であり、行列の帯幅をなるべく小さくするように ( $N_1 \leq N_2 \leq N_3$  であるとして) 基底関数に番号を適切に付けると、各行列の(対角線を含まない)半帯幅(下帯幅)は  $w_L = 1 + N_1 + N_1 N_2$  になる。

今の場合に、辺に沿った3方向の1次元FEMの展開基底である区線形関数はそれぞれ  $N_1$  個,  $N_2$  個,  $N_3$  個あり、3方向の区線形関数に対してその頂上の位置の増加順につけた順番をそれぞれ  $i_1, i_2, i_3$  とする ( $1 \leq i_k \leq N_k, k=1, 2, 3$ )。すると3次元FEMの展開基底である3重線形関数は各方向の展開基底の積なので3重添字  $(i_1, i_2, i_3)$  により指定できる。そうして3重線形関数に対してその3重添字から決まる  $i_1 + N_1(i_2 - 1) + N_1 N_2(i_3 - 1)$  の値により番号付けを行い、それに基づいて3次元FEMの係数行列  $A$  や  $B$  を組み立てている。

こうして得られる実対称定値一般固有値問題に対して、フィルタ対角化法を適用して区間  $[a, b]$  に固有値  $\lambda$  が含まれる固有対の近似を求める。このテスト例題の一般固有値問題では、固有値の厳密な値は簡単な数式を計算して求められる(次節4.2)。またそのことを用いると、固有値が区間  $[a, b]$  にある固有対の正しい数も固有値の厳密な値を生成列挙して区間内にあるものを数えることで容易に求められる。

#### 4.2 テスト例題の固有値の厳密な値を与える式

区間  $[0, \pi]$  に於ける零-ディリクレ境界条件の1次元ラプラシアン(ただし符号が逆のもの  $-\nabla^2$ ) を有限要素法で離散化して得られる行列の一般固有値問題の固有値の全体は、有限要素を区間  $[0, \pi]$  を  $N + 1$  等分して幅  $h = \pi / (N + 1)$  の各小区間とし、有限要素法の基底関数をそれら各区内での区線形関数とする場合には、 $\theta_k \equiv hk$  とおくと以下の式(11)で与えられる。

$$E_k^{\{N\}} = \frac{k^2 \left( \frac{\sin \theta_k}{\theta_k} \right)^2}{(1 + \cos \theta_k)(2 + \cos \theta_k)}, \quad k=1, 2, \dots, N. \quad (11)$$

そうして3次元立方体領域  $[0, \pi]^3$  の場合に、有限要素法による零-ディリクレ境界条件による3次元ラプラシアン ( $-\nabla^2$ ) の離散化を、3次元有限要素を各方向の区間をそれぞれ  $N_1 + 1, N_2 + 1, N_3 + 1$  に等分割したものの直積である直方体とし、そうして各有限要素内の3次元の基底関数に各方向に対する1次元の場合の基底関数(区線形関数)の直積(3重線形関数)を採用すれば、その固有値の値は各方向の1次元問題の固有値の和の形として、添字の組  $(k_1, k_2, k_3)$  で識別されて以下の式により与えられる。

$$E_{(k_1, k_2, k_3)}^{\{N_1, N_2, N_3\}} = E_{k_1}^{\{N_1\}} + E_{k_2}^{\{N_2\}} + E_{k_3}^{\{N_3\}}, \quad k_i=1, 2, \dots, N_i \quad (12)$$

#### 4.3 近似固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ の品質評価に用いる「相対残差」 $\Theta$ の値について

今回の各実験例では、得られた各近似固有対  $(\lambda, \mathbf{v})$  の品質を評価する方法として、以下の式(13)で表わされる「相対残差」 $\Theta$  の値を用いた。

$$\Theta \equiv \frac{\|A\mathbf{v} - \lambda B\mathbf{v}\|}{\|\lambda B\mathbf{v}\|} = \frac{\|\mathbf{r}\|}{\|\lambda B\mathbf{v}\|}. \quad (13)$$

今回の実験では、この  $\Theta$  の式の中で2箇所現れているベクトルに対するノルム  $\|\cdot\|$  としてベクトルの成分だけから容易に計算できる2-ノルム(ユークリッド・ノルム)を採用した。この  $\Theta$  の値は、ベクトル  $\mathbf{v}$  の規格化には依らず、また行列  $A$  と  $B$  が共通の定数でスケールされた場合にも不変である。この  $\Theta$  の値が小さいほど、近似固有対の品質が良いと判断することにする。

ベクトルのノルムとして2-ノルムを用いた場合の「相対残差」 $\Theta$  の値の幾何学的な意味は、いま  $N$  次元ユークリッド空間内の2つのベクトル  $A\mathbf{v}$  と  $\lambda B\mathbf{v}$  がはさむ角を  $\theta$  とするとき、 $\Theta = 2 \sin(\theta/2)$  であり、 $\theta$  が微小角のときには  $\Theta \approx \theta$  である。

この  $\Theta$  の値を求める計算の主要部は、ベクトル  $\mathbf{v}$  に対して行列  $A$  や  $B$  を乗じる処理であるので、もしも  $A$  と  $B$  が非零要素の少ない疎行列であればそれだけ計算が容易になること、さらに複数のベクトルを一度にまとめて  $A$  や  $B$

に乗じて計算することにより、行列  $A$  と  $B$  の全体への記憶参照をそれぞれ 1 回ずつにでき、極めて効率的に計算できる。

## 5. 数値実験の具体例

数値実験の具体的な例については図が多いため付録 A.1 に記述を移した。

## 6. おわりに

対称定値一般固有値問題の固有対で固有値が指定された範囲にあるものをフィルタ対角化法で解くものとする。それに用いるフィルタはレゾルベントを用いて構成されるものとして、レゾルベントの作用を与える連立 1 次方程式を直接法を用いて解くのであれば、行列分解の計算量や分解結果を保持するための記憶量が計算を行なう上で制約要因になりがちであろう。そこで行列分解の数を最少にする単一のレゾルベントの多項式型のフィルタの利用が考えられる。しかしそのようなフィルタは、使用する数値及び演算の精度の限界から、フィルタの伝達特性をあまり良いものにすることができず、得られる近似固有対の品質もあまり良くなかった。

今回、あまり特性が良くないフィルタを数段繰り返して適用して、各段のフィルタを適用する前に（特異値分解による）正規直交化の処理を行なう方法を試みた。実験結果からは、そのようなフィルタの適用を（使用するフィルタの特性の程度にも依るが）2 回あるいは 3 回、または 4 回繰り返すことで、近似固有対の品質の目安である「相対残差」 $\theta$  の値を減少させ十分小さくできることを確認した。つまりあまり特性の良くないフィルタを用いても必要な近似固有対を反復的に改良して精度を一様に高めることができる（近似固有対の精度を確認するための「相対残差」 $\theta$  の値は、比較的少ない手間ですべて計算が可能である）。

今回の実験では簡単化のために各段のフィルタには同一のものを用いたが、全体で 1 つのレゾルベントだけを用いる場合であっても、フィルタの構成にはある程度の自由度があるので、各段ごとに用いるフィルタを違うものにする手法なども考えられる。

## 参考文献

- [1] Richard W. Daniels : *Approximation Methods for Electronic Filter Design*, McGraw-Hill, 1974.
- [2] Miroslav D. Lutovac, Dejan V. Tošić, Brian L. Evans : *Filter Design for Signal Processing*, §12.8, Prentice Hall, 2001.
- [3] Sivan Toledo and Eran Rabani : “Very Large Electronic Structure Calculations Using an Out-of-Core Filter-Diagonalization Method”, *J. Comput. Phys.*, Vol.180, No.1 (2002), pp.256–269.
- [4] Eric Polizzi : “A Density Matrix-based Algorithm for Solving Eigenvalue Problems”, *Phys. Rev. B*, Vol.79, No.1 (2009), pp.115112(6pages).

- [5] Martin Galgon, Lukas Krämer and Brunno Lang : “The FEAST Algorithm for Large Eigenvalue Problems”, *PAMM· Proc. Appl. Math. Mech.*, Vol.11 (2011), pp.747–748.
- [6] Anthony P. Austin and Lloyd N. Trefethen : “Computing Eigenvalues of Real Symmetric Matrices with Rational Filters in Real Arithmetic”, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.37, No.3 (2015), pp.A1365–A1387.
- [7] Stefan Güttel, Eric Polizzi, Ping Tak Peter Tang and Gautier Viaud : “Zolotarev Quadrature Rules and Load Balancing for the FEAST Eigensolver”, *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol.37, No.4 (2015), pp.A2100–A2122.
- [8] Hiroshi Murakami : “Filter Diagonalization Method by Using a Polynomial of a Resolvent as the Filter for a Real Symmetric-Definite Generalized Eigenproblem”, in *proceedings of EPASA2015*, Springer, LNCSE-117 (2018), pp.205–232.
- [9] 村上弘 : 固有値が指定された区間内にある固有対を解くための対称固有値問題用のフィルタの設計, *情報処理学会論文誌：コンピューティングシステム (ACS31)*, Vol.3, No.3 (2010), pp.1–21.
- [10] 村上弘 : 対称一般固有値問題のフィルタ作用素を用いた不変部分空間の近似構成, *情報処理学会論文誌：コンピューティングシステム (ACS35)*, Vol.4, No.4 (2011), pp.1–14.
- [11] 村上弘 : レゾルベントを用いたフィルタによる固有値問題の解法について, *情報処理学会研究報告*, Vol.2012-HPC-133, No.22 (2012), pp.1–8.
- [12] 村上弘 : 実対称定値一般固有値問題の最小側固有値を持つ固有対に対する実数シフトのレゾルベントを組み合わせたフィルタによる解法, *先進的計算基盤システムシンポジウム論文集 2012* (2012), pp.81–82.
- [13] 村上弘 : Hermite 対称定値一般固有値問題のフィルタ対角化法について, *情報処理学会研究報告*, Vol.2012-HPC-134, No.1 (2012), pp.1–8.
- [14] 村上弘 : レゾルベントの線形結合をフィルタに用いたエルミート定値一般固有値問題のフィルタ対角化法, *情報処理学会論文誌：コンピューティングシステム (ACS45)*, Vol.7, No.1 (2014), pp.57–72.
- [15] 村上弘 : レゾルベントの多項式をフィルタとして用いる対角化法について, *情報処理学会研究報告*, Vol.2014-HPC-146, No.13 (2014), pp.1–4.
- [16] 村上弘 : 実数シフトのレゾルベントを組み合わせたフィルタによる実対称定値一般固有値問題の下端付近の固有値を持つ固有対の解法, *HPCS2015 シンポジウム論文集*, Vol.2015 (2015), pp.38–51.
- [17] 村上弘 : 一つのレゾルベントから構成されたフィルタを用いた実対称定値一般固有値問題に対するフィルタ対角化法の実験, *情報処理学会研究報告*, Vol.2015-HPC-149, No.7 (2015), pp.1–16.
- [18] 村上弘 : 実数シフトのレゾルベントの多項式をフィルタに用いた実対称定値一般固有値問題の下端付近の固有値を持つ固有対の解法, *日本応用数理学会 2015 年度年会予稿集 (統合版)* (2015), pp.442–443.
- [19] 村上弘 : 固有値問題の解法に用いるレゾルベントの多項式型のフィルタの設計, *情報処理学会研究報告*, Vol.2016-HPC-153, No.38 (2016 年 3 月), pp.1–13.
- [20] 村上弘 : 虚数シフトのレゾルベントの多項式の実部をフィルタに用いた実対称定値一般固有値問題の中間固有対の解法, *HPCS2016 シンポジウム論文集 (ポスタ発表論文)* (2016 年 6 月), p.49(全 1 頁).
- [21] 村上弘 : 実対称定値一般固有値問題の最小側固有対を解くための実数シフトのレゾルベントの多項式によるフィルタの簡易な設計法, *情報処理学会研究報告集*, Vol.2016-HPC-155, No.44 (2016), pp.1–27.
- [22] 村上弘 : レゾルベントの多項式をフィルタに用いた対称

付 録

- 定値一般固有値問題のフィルタ対角化法, **日本応用数理学会 2016 年度年会予稿集** (2016 年 9 月) 2 頁分.
- [23] 村上弘: レゾルベントの多項式によるフィルタを用いた実対称定値一般固有値問題の解法, **情報処理学会研究報告**, Vol.2016-HPC-157, No.4 (2016 年 12 月), pp.1-15.
- [24] 村上弘: 実対称定値一般固有値問題を解くためのレゾルベントの多項式型フィルタの設計について, **情報処理学会研究報告**, Vol.2017-HPC-158, No.7 (2017 年 3 月), pp.1-10.
- [25] 村上弘: チェビシェフ展開形で表わされたレゾルベントの多項式によるフィルタの伝達特性の調整, **数理解析研究所講究録**, No.2019 (2017 年 4 月), pp.96-112.
- [26] 村上弘: 実対称定値一般固有値問題を解くための少数のレゾルベントの多項式を用いたフィルタの設計法, **情報処理学会研究報告**, Vol.2017-HPC-159, No.4 (2017 年 4 月), pp.1-13.
- [27] 村上弘: 実対称定値一般固有値問題を解くための少数のレゾルベントで構成されたフィルタの設計法, **ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS) 論文集**, Vol.2017 (2017 年 5 月), p.3(全 1 頁).
- [28] 村上弘: 少数のレゾルベントから構成されたフィルタを用いた実対称定値一般固有値問題の解法, **情報処理学会研究報告**, Vol.2017-HPC-160, No.32, (2017 年 7 月), pp.1-32.
- [29] 村上弘: 実対称定値一般固有値問題の近似解法に用いる単数または少数のレゾルベントによるフィルタ, **第 46 回数値解析シンポジウム (NAS2017) 講演予稿集** (2017 年 8 月 (改訂版)), pp.123-126.
- [30] 村上弘: 少数のレゾルベントにより構成されたフィルタによる実対称定値一般固有値問題の解法の実験, **日本応用数理学会 2017 年度年会予稿集** (2017 年 9 月), pp.259-260.
- [31] 村上弘: 少数のレゾルベントで構成された多項式型フィルタによる対称定値一般固有値問題の解法, **情報処理学会研究報告**, Vol.2017-HPC-161, No.7 (2017 年 9 月), pp.1-13.
- [32] 村上弘: レゾルベントの多項式によるフィルタの伝達特性の調整, **数理解析研究所講究録**, No.2054(2017 年 10 月), pp.168-181.
- [33] 村上弘: 少数のレゾルベントから構成されたフィルタを用いた対称定値一般固有値問題の解法, **情報処理学会研究報告**, Vol.2017-HPC-162, No.21(2017 年 12 月), pp.1-34.
- [34] 村上弘: 実対称定値一般固有値問題の解法で用いる少数のレゾルベントで構成されたフィルタ, **日本数式処理学会誌「数式処理」 Bull. JSSAC**, Vol.24, No.2, (2018 年 5 月), pp.63-66.
- [35] 村上弘: 少数のレゾルベントを用いた多項式型の簡易フィルタによる一般固有値問題の解法, **第 47 回数値解析シンポジウム (NAS2018) 講演予稿集** (2018 年 6 月), pp.35-39.
- [36] 村上弘: 少数のレゾルベントの多項式型フィルタを用いた一般固有値問題の解法, **情報処理学会研究報告**, Vol.2018-HPC-165, No.15 (2018 年 7 月), pp.1-21.
- [37] 村上弘: 少数のレゾルベントの線形結合の多項式をフィルタとして用いた一般固有値問題の解法, **日本応用数理学会 2018 年度年会 講演予稿集** (2018 年 9 月), pp.311-312.
- [38] 村上弘: フィルタにレゾルベントの線形結合の多項式を用いた複素エルミート定値一般固有値問題の解法, **情報処理学会研究報告**, Vol.2018-HPC-166, No.10 (2018 年 9 月), pp.1-17.
- [39] 村上弘: 単一のレゾルベントのチェビシェフ多項式による実対称定値一般固有値問題の解法用の簡易型フィルタ, **情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム (ACS64)**, 採択済, (2019 年発行予定).

## A.1 フィルタの再直交化付き反復適用の実験例

### A.1.1 例題 R1：シフトが実数の単一のレゾルベントからなるフィルタの適用例その1

解くべき実対称定値一般固有値問題  $Av = \lambda Bv$  は、立方体領域に於ける零-ディリクレ境界条件の（符号が逆の）3次元のラプラス演算子の固有値問題  $-\nabla^2 \Psi = \lambda \Psi$  を有限要素法により離散化して得られるもので、有限要素分割は  $(N_1, N_2, N_3) = (20, 30, 40)$  とした場合である。行列  $A$  と  $B$  の次数  $N$  は 24,000 で、下帯幅  $w_L$  は 621 である。

この例題 R1 では固有値が下端の区間  $[a, b] = [0, 30]$  にある固有対を求める。固有値がその区間（フィルタの通過域）にある固有対の正しい数は 54 であり、 $\mu = 1.5$  に対応する遷移域に通過域を併せた区間  $[0, 45]$  の中に固有値が含まれる固有対の正しい数は 106 である。このため必要な不変部分空間の良い基底を作るためには、本来はフィルタで濾過するランダムなベクトルの数  $m$  は 106 よりも多くすることが望ましい。

簡単化のために適用を複数回行なうフィルタはすべて同一にしている。フィルタはシフトが実数の単一のレゾルベントの作用の  $n$  次多項式で、その多項式として第 1 種チェビシェフ多項式で表わされる簡易型のものを採用した。固有値の区間  $\lambda \in [a, b]$  を線形変換で標準区間  $t \in [0, 1]$  に対応させて定義される  $\lambda$  に対する正規化座標  $t$  について、フィルタの通過域は  $t \in [0, 1]$ 、遷移域は  $t \in (1, \mu)$ 、阻止域は  $t \in [\mu, \infty)$  となる。フィルタの伝達率の阻止域に於ける大きさの最大値は  $g_s$  であり、通過域に於ける最大値は 1 に規格化されていて、通過域に於ける最小値は  $g_p$  であるとする。フィルタは次数  $n$ 、遷移域の端（阻止域の端）の正規化座標での値  $\mu$ 、伝達率の阻止域での大きさの最大値  $g_s$  の 3 つ組  $(n, \mu, g_s)$  を指定した。それにより  $\mathcal{F} = g_s T_n(2\gamma \mathcal{R}(\rho) - I)$  の形の（簡易型）多項式フィルタの実数シフト  $\rho$  の値と実数係数の  $\gamma$  が決まり、また  $g_p$  の値も決まる。

#### A.1.1.1 例題 R1：フィルタの次数 $n$ が 8 の場合

フィルタを決定する 3 つのパラメタを次数  $n$  を 8、 $\mu$  を 1.5、 $g_s$  を  $10^{-12}$  と指定して最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 80 から 20 刻みで 140 まで変えた 4 通りの場合について得られた結果を図 A.1 から図 A.4 までに示す。各図中で、フィルタの適用回数 IT を 1 から 4 まで変えた各場合のグラフをプロットしている。固有値が区間の右端付近の近似固有対についての「相対残差」 $\theta$  の値はフィルタの反復に伴って減少し、最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  が多いほど反復に伴う減少が良くなっていることがわかる。（ $m$  が 140 の場合には、この次数  $n$  が 8 であるフィルタを 4 回適用した段階で既にもう固有値が区間の近似対の「相対残差」 $\theta$  の値は一様に  $10^{-12}$  程度にまで減少している）。

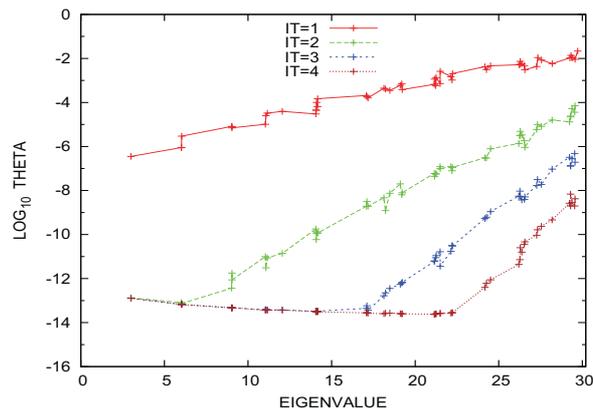


図 A.1 例題 R1： $n = 8$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-12}$ ， $m = 80$

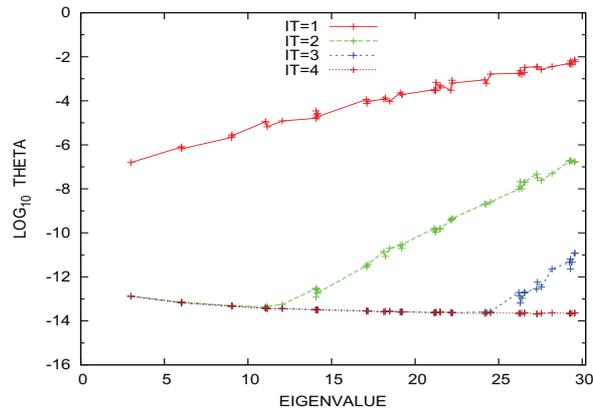


図 A.2 例題 R1： $n = 8$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-12}$ ， $m = 100$

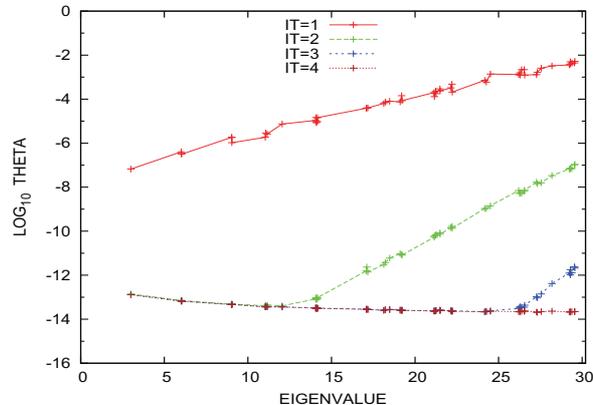


図 A.3 例題 R1： $n = 8$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-12}$ ， $m = 120$

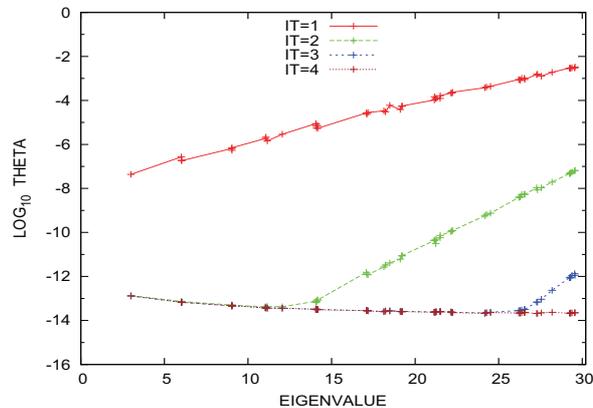


図 A.4 例題 R1： $n = 8$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-12}$ ， $m = 140$

**A.1.1.2 例題 R1：フィルタの次数  $n$  が 10 の場合**

最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 100 とし、フィルタ指定の 3 つのパラメタを次数  $n$  を 10 とし、 $\mu$  を 1.5 とし、 $g_s$  は  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  と 3 通りに指定して得られたそれぞれの計算結果を図 A-5, 図 A-6, 図 A-7 に示す。各図の中では、フィルタを適用した回数 IT を 1 から 4 までのそれぞれの場合について、近似対の固有値が区間  $[a, b]$  に入るものだけについて、横軸には固有値の値を、縦軸には「相対残差」 $\Theta$  の値を対数目盛でグラフにプロットしている。結果のグラフから、次数  $n$  が 10 で  $\mu$  が 1.5

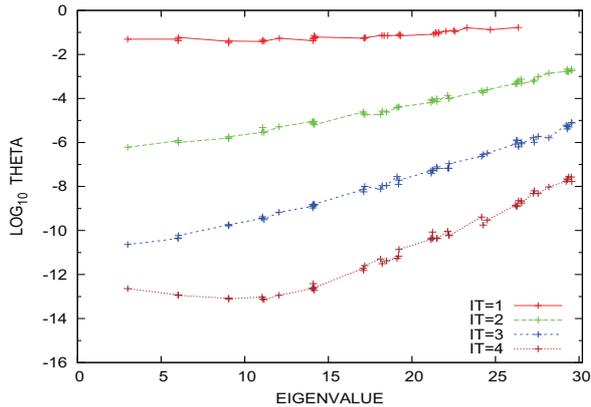


図 A-5 例題 R1 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-5}$ ,  $m = 100$

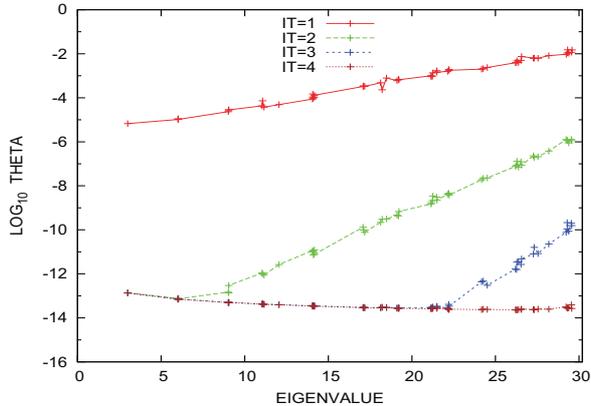


図 A-6 例題 R1 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-10}$ ,  $m = 100$

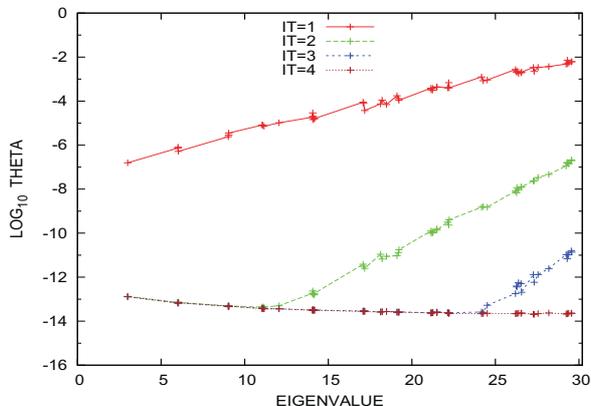


図 A-7 例題 R1 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 100$

のフィルタをたとえば 3 回適用して得られる近似対の「相

対残差」 $\Theta$  の値は  $g_s$  が  $10^{-10}$  の場合は  $10^{-10}$  程度以下、 $g_s$  が  $10^{-12}$  の場合は  $10^{-11}$  程度以下で、フィルタの適用回数が増すにつれて近似対の品質は高まっている。

同様に、ランダムなベクトルの個数  $m$  を増やして 150 とし、フィルタを指定する 3 つのパラメタの組み合わせは同じにとって得られた計算結果を図 A-8, 図 A-9, 図 A-10 に示す。この場合についてもフィルタを合計 3 回適用して

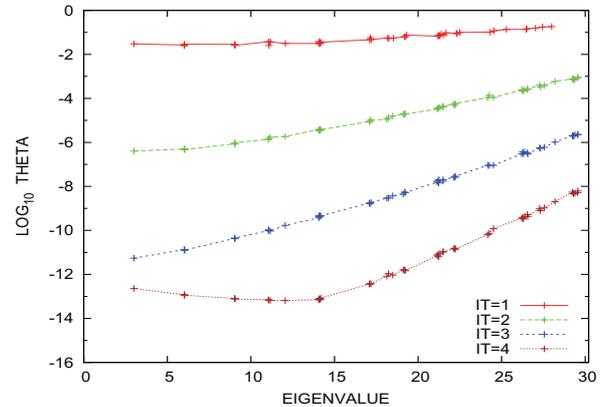


図 A-8 例題 R1 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-5}$ ,  $m = 150$

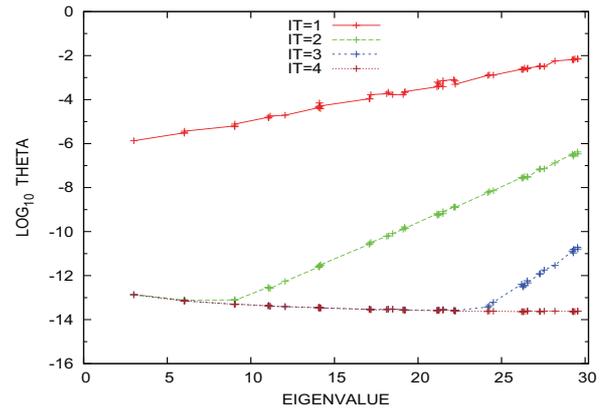


図 A-9 例題 R1 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-10}$ ,  $m = 150$

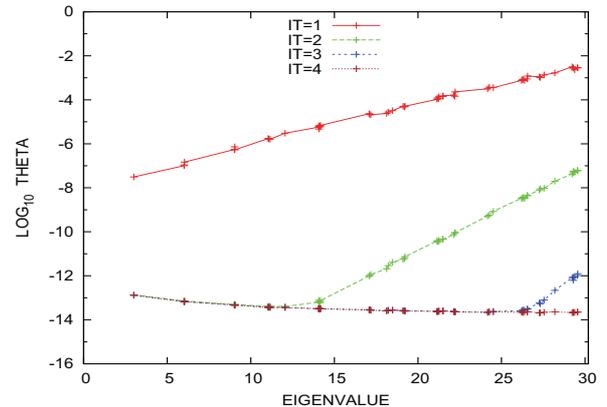


図 A-10 例題 R1 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 150$

得られる近似対の「相対残差」 $\Theta$  の値は  $g_s$  が  $10^{-10}$  の場合には  $10^{-11}$  程度以下であり、 $g_s$  が  $10^{-12}$  の場合には  $10^{-12}$  程度以下であり、フィルタの適用回数が増すにつれて近似対が改良されている。

A.1.1.3 例題 R1：フィルタの次数  $n$  が 15 の場合

最初に与えるランダムなベクトルの個数  $m$  を 100 として、フィルタを指定する 3 つのパラメタを次数  $n$  を増やして 15 とし、 $\mu$  を 1.5 として、 $g_s$  を  $10^{-5}$ 、 $10^{-10}$ 、 $10^{-12}$  の 3 通りに変えて、得られた 3 通りについての計算結果を図 A.11、図 A.12、図 A.13 に示す。結果のグラフか

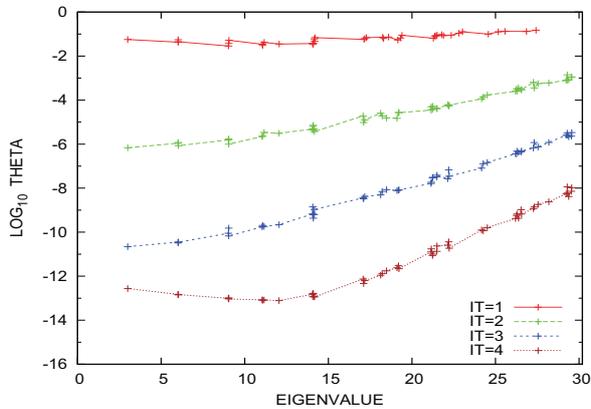


図 A.11 例題 R1： $n = 15$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-5}$ ， $m = 100$

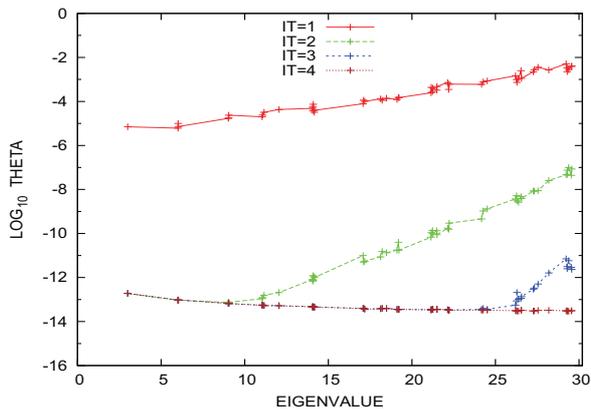


図 A.12 例題 R1： $n = 15$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-10}$ ， $m = 100$

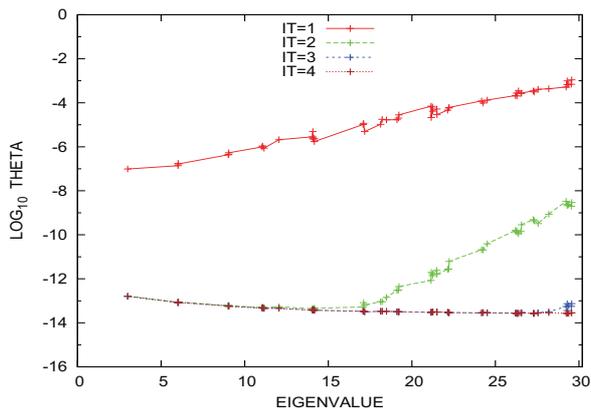


図 A.13 例題 R1： $n = 15$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-12}$ ， $m = 100$

ら、フィルタをたとえば合計 3 回適用して得られる近似対の「相対残差」 $\theta$  の値は  $g_s$  が  $10^{-10}$  の場合は  $10^{-11}$  程度以下であり、 $g_s$  が  $10^{-12}$  の場合は  $10^{-12}$  程度以下であり、フィルタの適用回数の増加につれて近似対の精度は高まっている。

次に、最初に与えるランダムなベクトルの個数  $m$  を増やして 150 として、フィルタを指定する 3 つのパラメタの組み合わせは同じにとり得られた同様の計算結果を図 A.14、図 A.15、図 A.16 に示す。この場合について

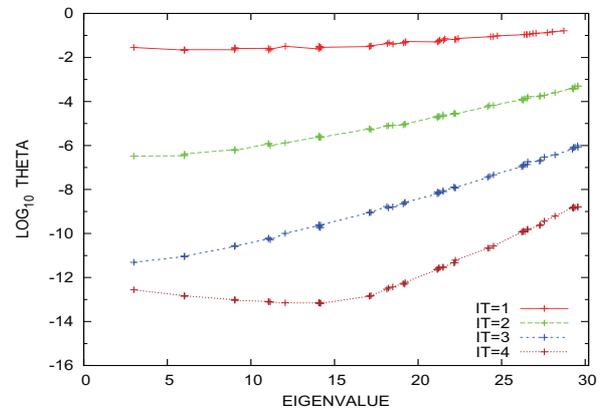


図 A.14 例題 R1： $n = 15$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-5}$ ， $m = 150$

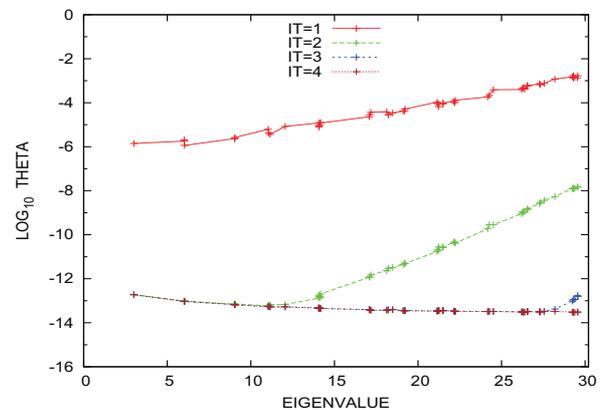


図 A.15 例題 R1： $n = 15$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-10}$ ， $m = 150$

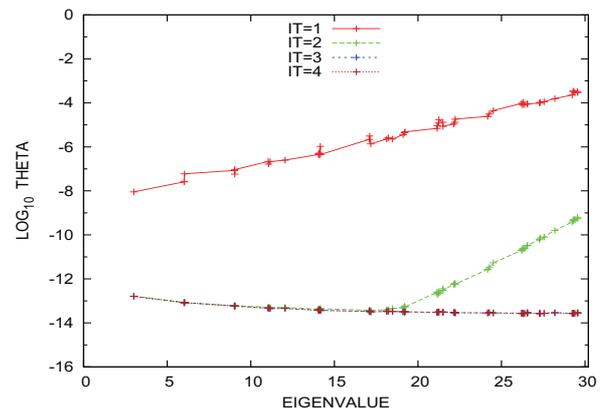


図 A.16 例題 R1： $n = 15$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-12}$ ， $m = 150$

もフィルタを合計 3 回適用して得られる近似対の「相対残差」 $\theta$  の値は  $g_s$  が  $10^{-10}$  の場合には  $3 \times 10^{-13}$  程度以下であり、 $g_s$  が  $10^{-12}$  の場合には  $10^{-13}$  程度以下で、フィルタの適用回数と共に近似対が改良されている。

A.1.1.4 例題 R1：フィルタの次数  $n$  が 20 の場合

最初に与えるランダムなベクトルの個数  $m$  を 100 として、フィルタを指定する 3 つのパラメタを次数  $n$  を増やして 20 とし、 $\mu$  を 1.5 として、 $g_s$  を  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  の 3 通りに変えて、得られた 3 通りについての計算結果を図 A-17, 図 A-18, 図 A-19 に示す。このフィルタの次

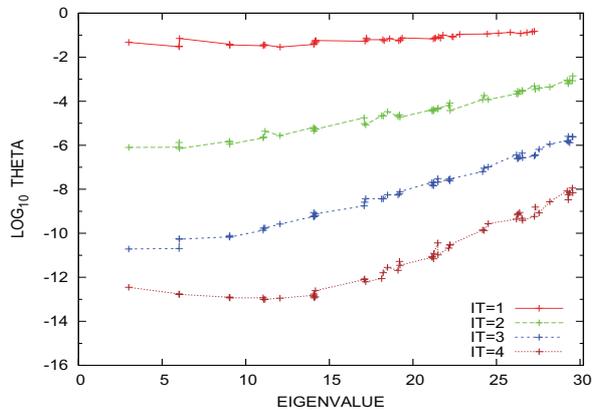


図 A-17 例題 R1： $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-5}$ ,  $m = 100$

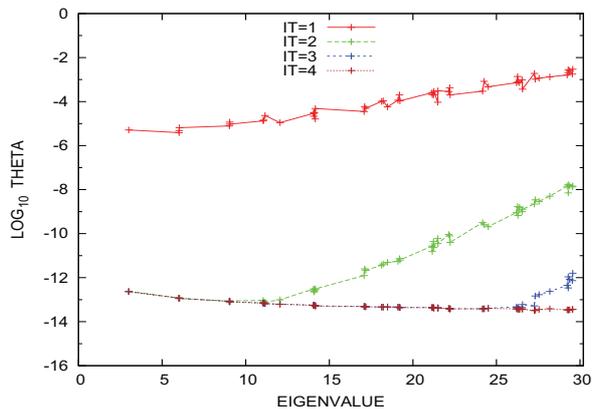


図 A-18 例題 R1： $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-10}$ ,  $m = 100$

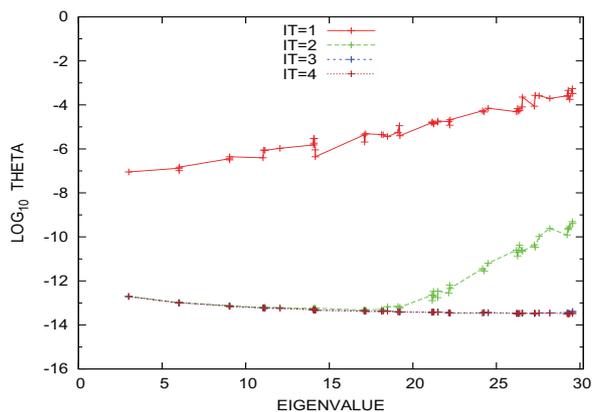


図 A-19 例題 R1： $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 100$

数  $n$  が 20 のときの結果のグラフから、得られた近似対の精度はフィルタの次数  $n$  が 15 のときとほとんど変わらないことが分かる。

同様に最初に与えるランダムなベクトルの個数  $m$  を増やして 150 として、フィルタを指定する 3 つのパラメタを次数  $n$  を 20 とし、 $\mu$  を 1.5 として、 $g_s$  を  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  の 3 通りに変えて、得られた 3 通りについての計算結果を図 A-20, 図 A-21, 図 A-22 に示す。このフィル

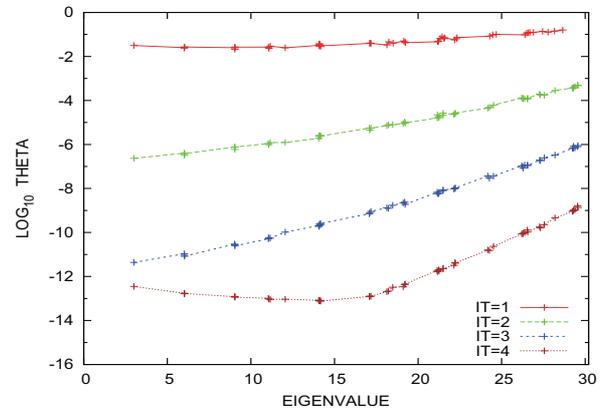


図 A-20 例題 R1： $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-5}$ ,  $m = 150$

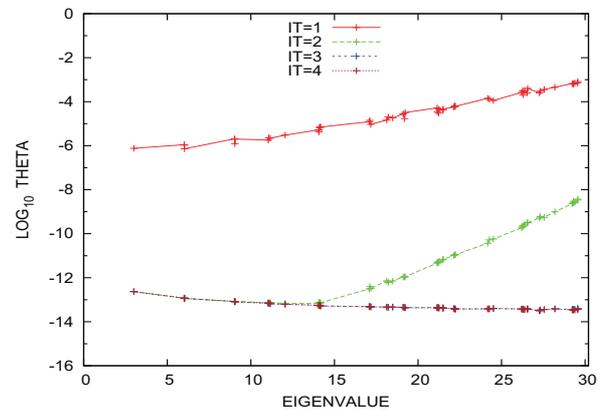


図 A-21 例題 R1： $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-10}$ ,  $m = 150$

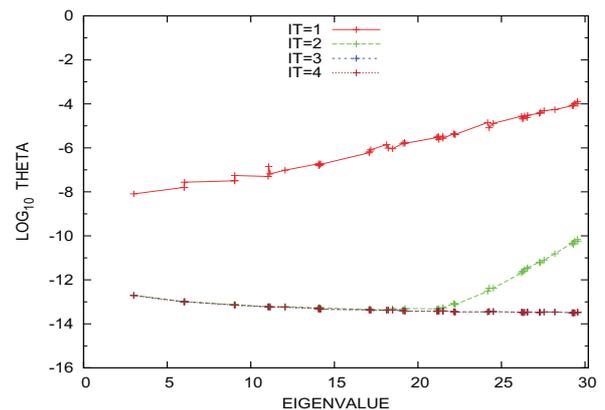


図 A-22 例題 R1： $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 150$

タの次数  $n$  が 20 のときの結果のグラフから、得られた近似対の精度はフィルタの次数  $n$  が 15 のときとほとんど変わらないことが分かる。

A.1.2 例題 R1 (結果のグラフの描き方を変えた場合)

A.1.2.1 例題 R1: フィルタの次数  $n$  が 10 の場合

フィルタに最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 100 として、フィルタを指定する 3つのパラメタについては次数  $n$  を 10 とし、 $\mu$  を 1.5 として、そうして  $g_s$  については (各図の中で) 5通りの値  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$ ,  $10^{-14}$  とした。フィルタの適用回数 IT を 1, 2, 3 とした各場合についての結果を図 A.23, 図 A.24, 図 A.25 に示す。

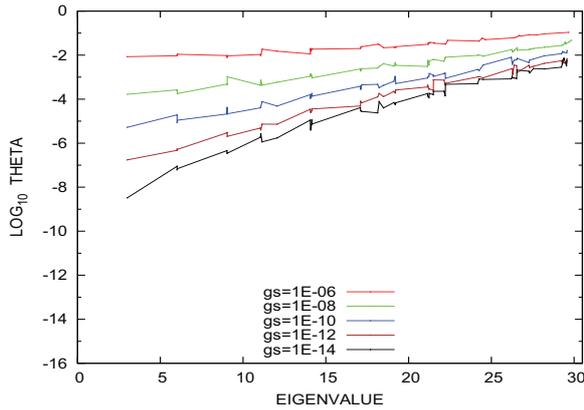


図 A.23 例題 R1:  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 100$ , IT=1

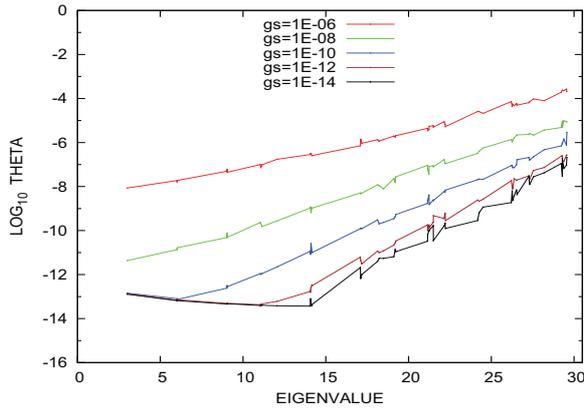


図 A.24 例題 R1:  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 100$ , IT=2

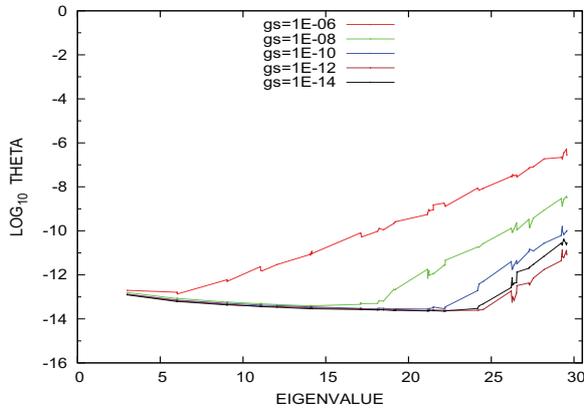


図 A.25 例題 R1:  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 100$ , IT=3

次にフィルタに最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 150 として、フィルタを指定する 3つのパラメタについては次数  $n$  を 10 とし、 $\mu$  を 1.5 として、そうして  $g_s$  については (各図の中で) 5通りの値  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$ ,  $10^{-14}$  とした。フィルタの適用回数 IT を 1, 2, 3 とした各場合についての結果を図 A.26, 図 A.27, 図 A.28 に示す。

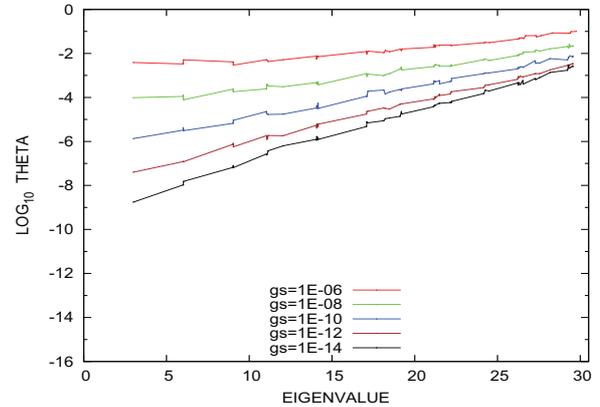


図 A.26 例題 R1:  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=1

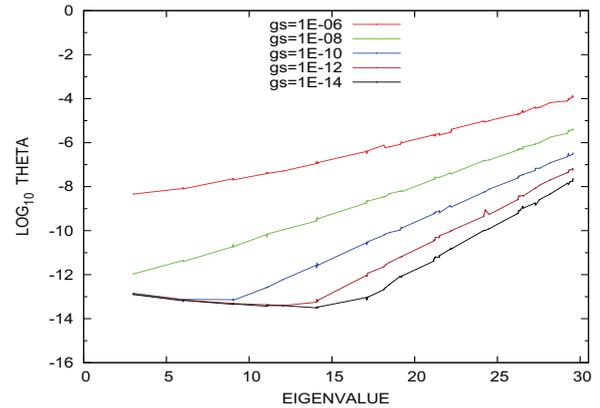


図 A.27 例題 R1:  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=2

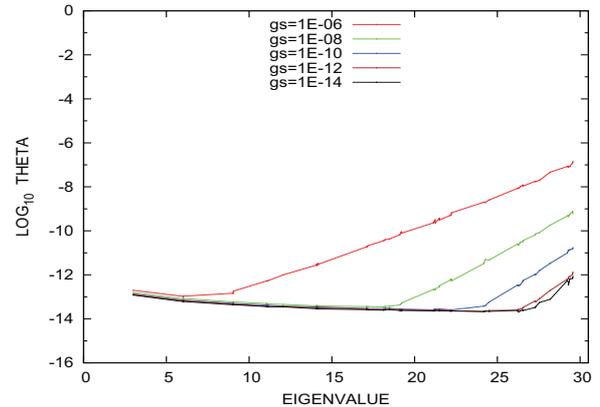


図 A.28 例題 R1:  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=3

**A.1.2.2 例題 R1：フィルタの次数  $n$  が 15 の場合**

フィルタに最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 100 として、フィルタを指定する 3 つのパラメタについては次数  $n$  を 15 とし、 $\mu$  を 1.5 として、そうして  $g_s$  については (各図の中で) 5 通りの値  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$ ,  $10^{-14}$  とした。フィルタの適用回数 IT を 1, 2, 3 とした各場合についての結果を図 A-29, 図 A-30, 図 A-31 に示す。

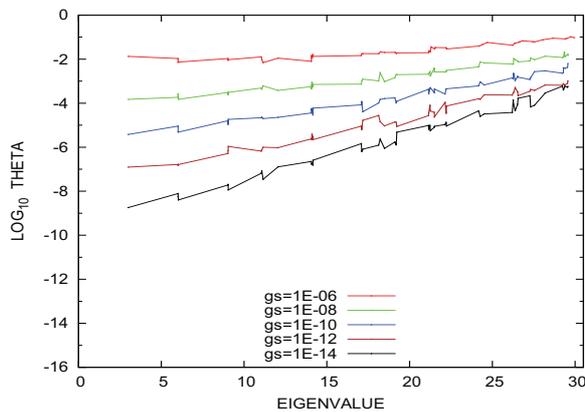


図 A-29 例題 R1 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 100$ , IT=1

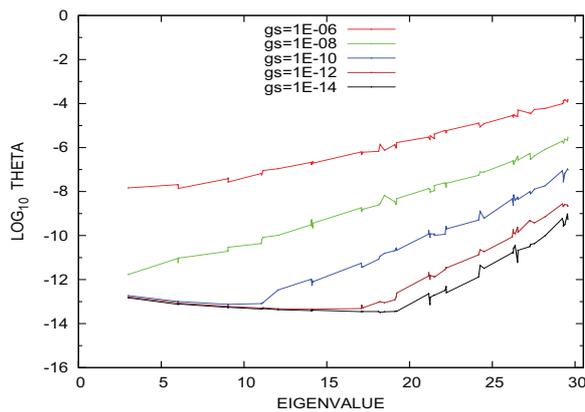


図 A-30 例題 R1 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 100$ , IT=2

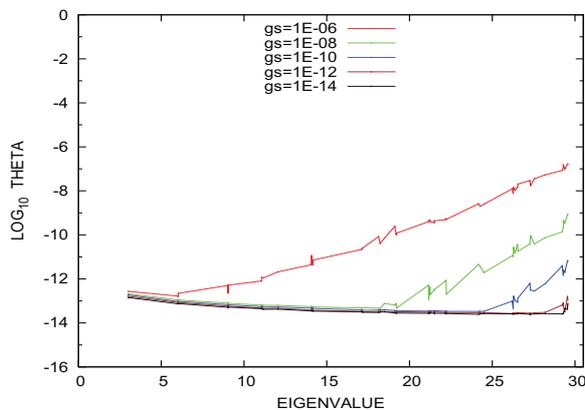


図 A-31 例題 R1 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 100$ , IT=3

フィルタに最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 150 として、フィルタを指定する 3 つのパラメタについては次数  $n$  を 15 とし、 $\mu$  を 1.5 として、そうして  $g_s$  については (各図の中で) 5 通りの値  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$ ,  $10^{-14}$  とした。フィルタの適用回数 IT を 1, 2, 3 とした各場合についての結果を図 A-32, 図 A-33, 図 A-34 に示す。

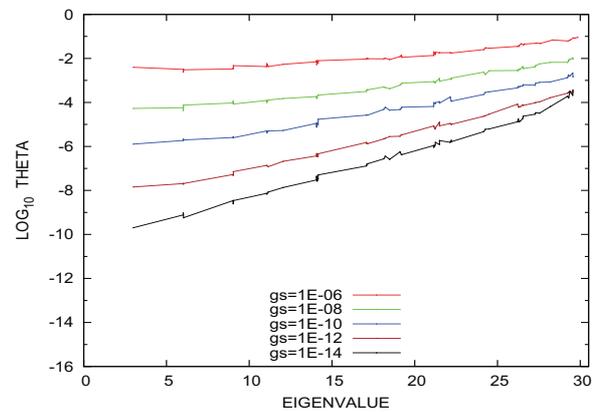


図 A-32 例題 R1 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=1

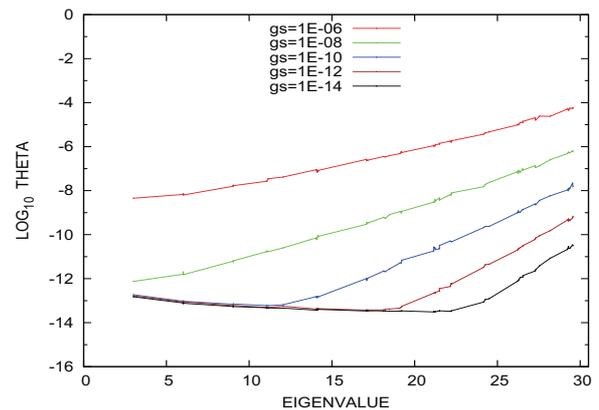


図 A-33 例題 R1 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=2

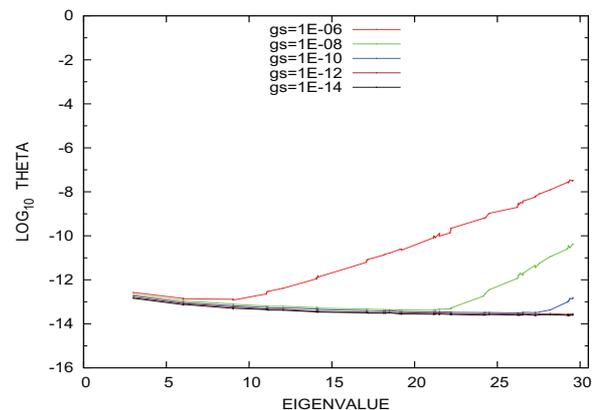


図 A-34 例題 R1 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=3

**A.1.2.3 例題 R1：フィルタの次数  $n$  が 20 の場合**

フィルタに最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 100 として、フィルタを指定する 3 つのパラメタについては次数  $n$  を 20 とし、 $\mu$  を 1.5 として、そうして  $g_s$  については (各図の中で) 5 通りの値  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$ ,  $10^{-14}$  とした。フィルタの適用回数 IT を 1, 2, 3 とした各場合についての結果を図 A-35, 図 A-36, 図 A-37 に示す。

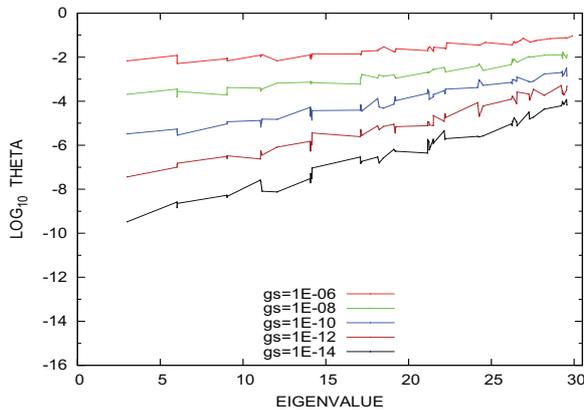


図 A-35 例題 R1 :  $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 100$ , IT=1

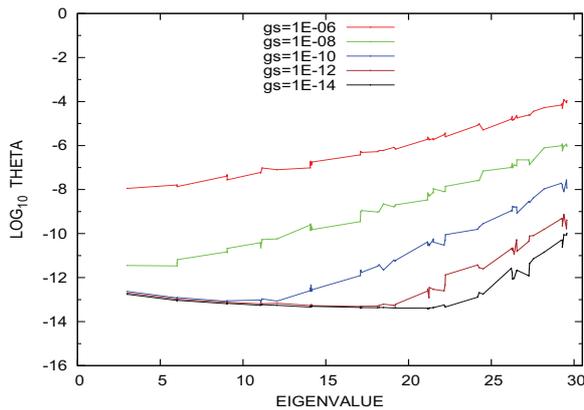


図 A-36 例題 R1 :  $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 100$ , IT=2

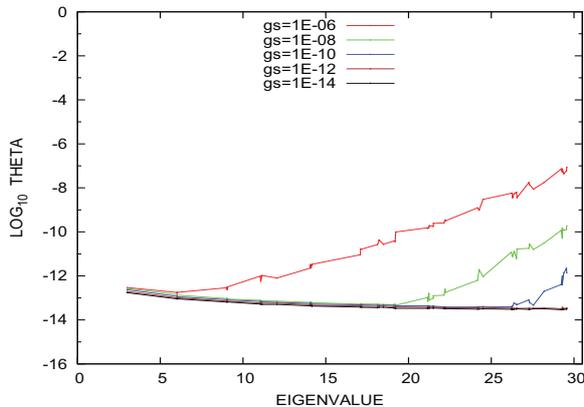


図 A-37 例題 R1 :  $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 100$ , IT=3

フィルタに最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 150 として、フィルタを指定する 3 つのパラメタについては次数  $n$  を 20 とし、 $\mu$  を 1.5 として、そうして  $g_s$  については (各図の中で) 5 通りの値  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$ ,  $10^{-14}$  とした。フィルタの適用回数 IT を 1, 2, 3 とした各場合についての結果を図 A-38, 図 A-39, 図 A-40 に示す。

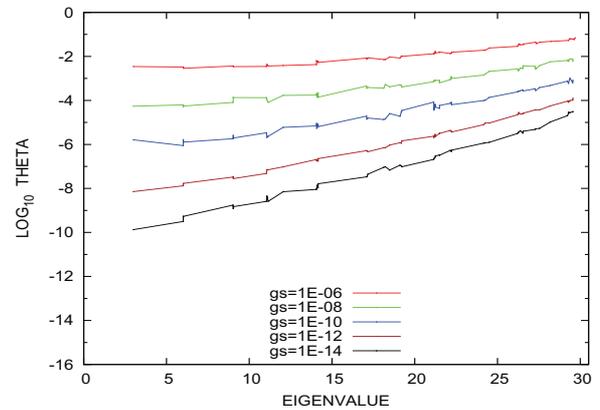


図 A-38 例題 R1 :  $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=1

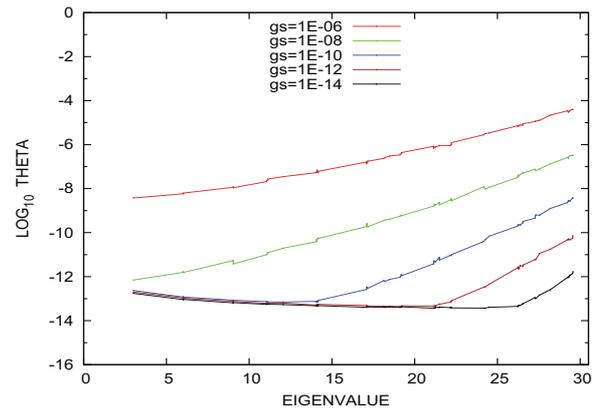


図 A-39 例題 R1 :  $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=2

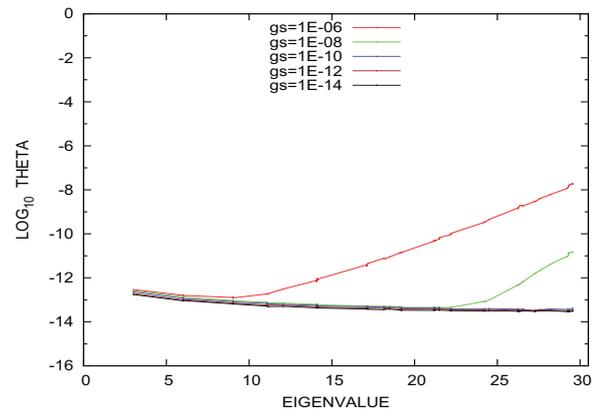


図 A-40 例題 R1 :  $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=3

### A.1.3 例題 R2：シフトが実数の単一のレゾルベントからなるフィルタの適用例その 2

この例題 R2 が扱う実対称定値一般固有値問題の係数行列  $A$  と  $B$  は例題 R1 と同じものであり、次数  $N$  は 24,000、下帯幅  $w_L$  は 621 である。ただし求める固有対の固有値が属する区間を  $[a, b] = [0, 100]$  とする。この区間は固有値分布の下端なので、シフトが実数の単一のレゾルベントからなるフィルタが適用できる。

この区間（通過域）に対応する固有対の正しい数は 378 であり、 $\mu = 1.5$  と対応する遷移域に通過域を併せた区間  $[0, 150]$  の中に含まれる固有値を持つ固有対の正しい数は 700 である。

#### A.1.3.1 例題 R2：フィルタの次数 $n$ が 8 の場合

フィルタのパラメタとして  $n$  を 8、 $\mu$  を 1.5、 $g_s$  を  $10^{-12}$  と設定した。最初にフィルタに与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 500, 600, 700, 800 と変えた 4 通りそれぞれの場合に得られた結果の近似対の「相対残差」 $\theta$  の値を図 A-41, 図 A-42, 図 A-43, 図 A-44 に示す。各図の中で、フィルタを適用した回数 IT が 1 から 4 までについてグラフにプロットしてある。グラフから  $m$  が 700 の場合と 800 の場合の結果には違いがほとんどないことがわかる。それぞれの場合について、フィルタの適用回数 IT を増すにつれて、得られる近似対の品質が向上していくことがわかる。適用回数 IT が 3 の場合について  $m$  が 500, 600, 700 に対して「相対残差」 $\theta$  の値の最大値は  $10^{-4}$ ,  $10^{-7}$ ,  $10^{-10}$  程度と改善されるが、 $m$  を 800 にしてもそれ以上は良くならない。

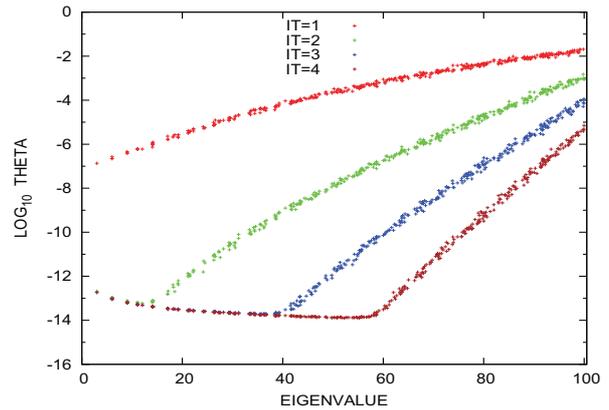


図 A-41 例題 R2： $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 500$

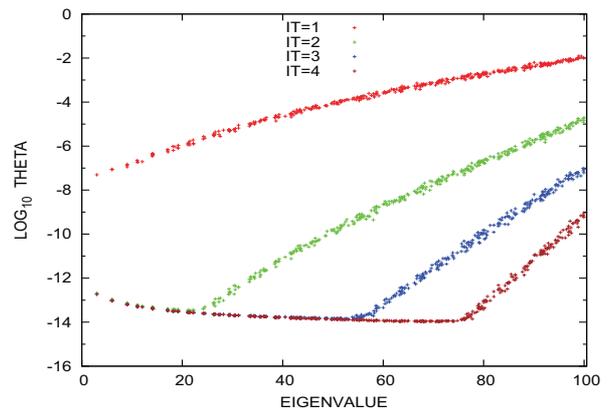


図 A-42 例題 R2： $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 600$

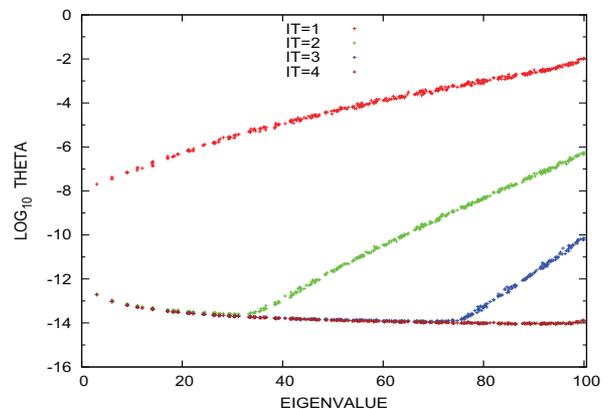


図 A-43 例題 R2： $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 700$

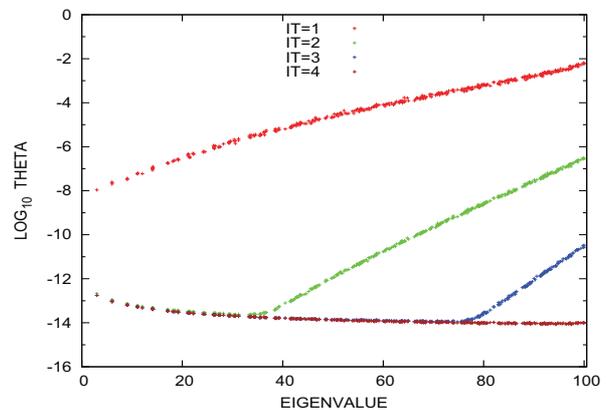


図 A-44 例題 R2： $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 800$

今回は最初にフィルタに与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 700 にして、フィルタの次数  $n$  を 10, 15, 20, 30 と 4 通りに変えて他のパラメタは  $\mu$  を 1.5,  $g_s$  を  $10^{-12}$  に設定した。4 通りの各場合に得られた結果の近似対の「相対残差」 $\Theta$  の値を図 A.45, 図 A.46, 図 A.47, 図 A.48 に示す。各図の中で、フィルタを適用した回数 IT が 1 から 4 までについてグラフにプロットしてある。それぞれの場合について、次数  $n$  を増すにつれて得られる近似対の品質が向上している。適用回数 IT が 2 の場合については、次数  $n$  が 10, 15, 20, 30 のそれぞれに対して「相対残差」 $\Theta$  の値の最大値は  $10^{-7}$  程度,  $10^{-9}$  程度,  $10^{-10}$  程度,  $10^{-11}$  程度と改善されている。IT が 3 の場合には、次数  $n$  を 10 から 15 に増すと「相対残差」 $\Theta$  の値の最大値は減少して改善されるが、さらに  $n$  を増やして 20 以上にしても「相対残差」 $\Theta$  の値は減少しない。

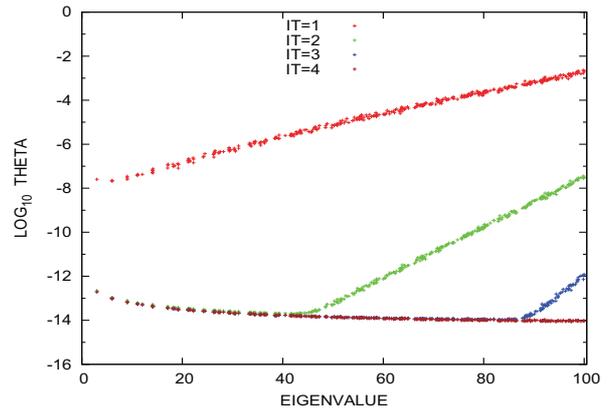


図 A.45 例題 R2 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 700$

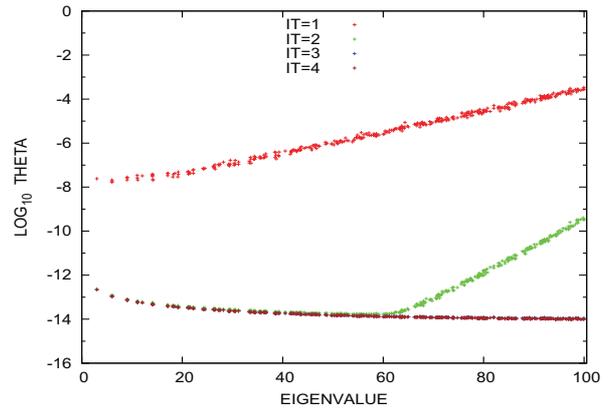


図 A.46 例題 R2 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 700$

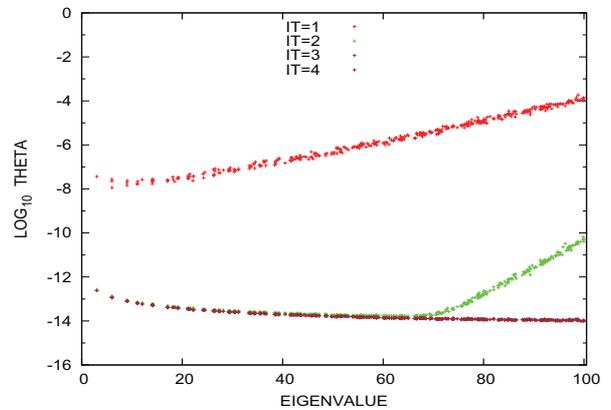


図 A.47 例題 R2 :  $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 700$

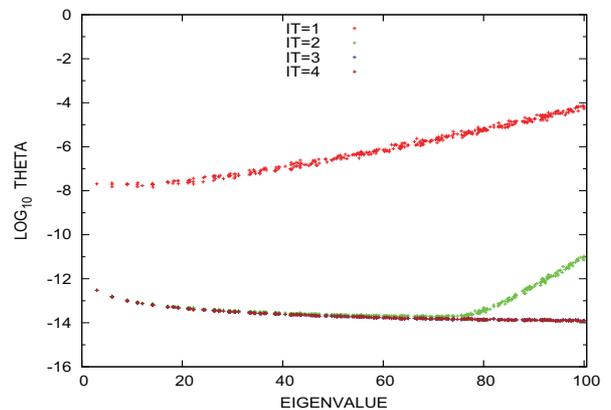


図 A.48 例題 R2 :  $n = 30$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 700$

**A.1.3.2 例題 R2：フィルタの次数  $n$  が 10 の場合**

ランダムなベクトルの数  $m$  を 500 とし、フィルタは次数  $n$  を 10,  $\mu$  を 1.5 とし,  $g_s$  が  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  の 3 通りの結果を図 A-49, 図 A-50, 図 A-51 に示す. 各図の中でフィルタ適用回数 IT が 1 から 4 までのグラフをプロットした.

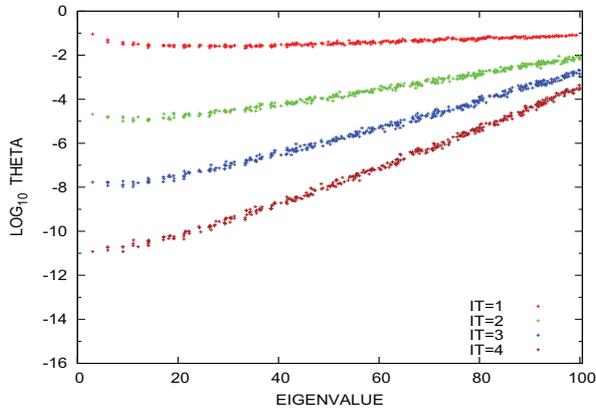


図 A-49 例題 R2 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-5}$ ,  $m = 500$

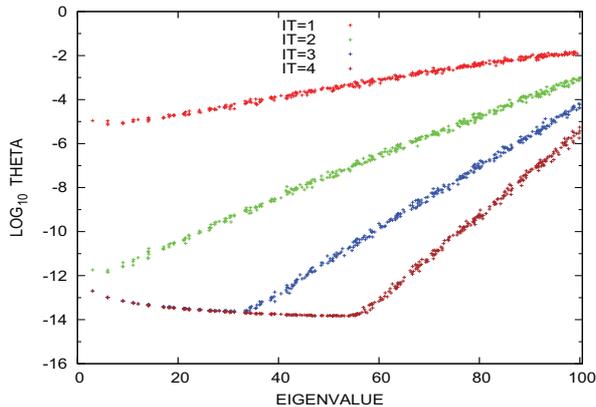


図 A-50 例題 R2 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-10}$ ,  $m = 500$

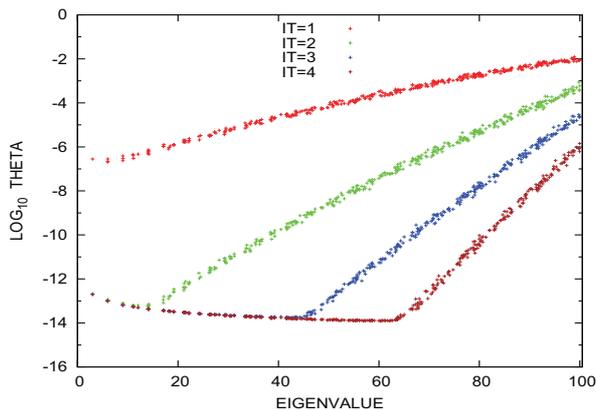


図 A-51 例題 R2 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 500$

同様に、ランダムなベクトルの数  $m$  を 700 とし、フィルタを次数  $n$  を 10 とし,  $\mu$  を 1.5 とし,  $g_s$  を  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  の 3 通りにとった各場合に対する計算結果をそれぞれ図 A-52, 図 A-53, 図 A-54 に示す.

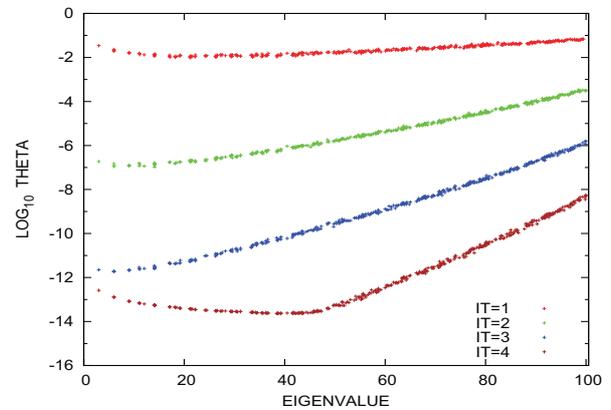


図 A-52 例題 R2 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-5}$ ,  $m = 700$

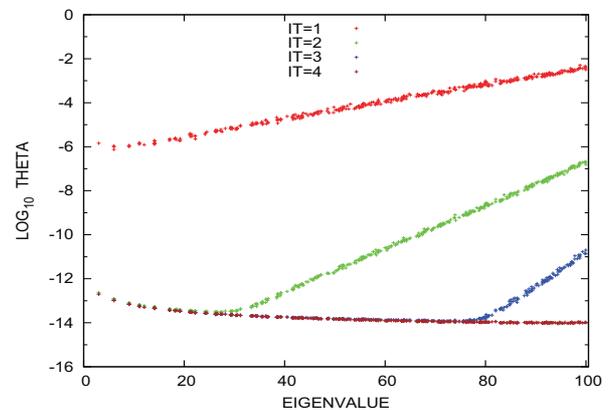


図 A-53 例題 R2 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-10}$ ,  $m = 700$

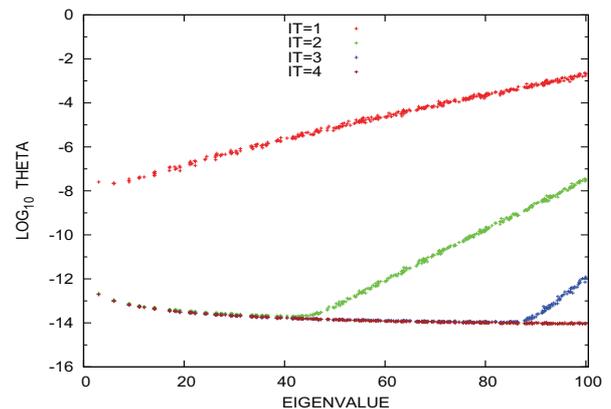


図 A-54 例題 R2 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 700$

ベクトルの数  $m$  は 500 では不足であるが,  $m$  が 700 であれば良い結果が得られている, たとえば  $n$  が 10 で  $\mu$  が 1.5 のとき,  $g_s$  が  $10^{-10}$  の場合にフィルタの適用を 2 回, 3 回とすると, 「相対残差」 $\theta$  の値はどれも  $10^{-6}$  以下,  $10^{-11}$  以下となっている.  $g_s$  が  $10^{-12}$  の場合も同様にフィルタの適用を 2 回, 3 回とすると, 「相対残差」 $\theta$  の値はどれも  $10^{-7}$  以下,  $10^{-12}$  以下となっている.

**A.1.3.3 例題 R2：フィルタの次数  $n$  が 15 の場合**

ランダムなベクトルの数  $m$  を 500 とし、フィルタは次数  $n$  を 15,  $\mu$  を 1.5 とし,  $g_s$  が  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  の 3 通りの結果を図 A-55, 図 A-56, 図 A-57 に示す. 各図の中でフィルタ適用回数 IT が 1 から 4 までのグラフをプロットした.

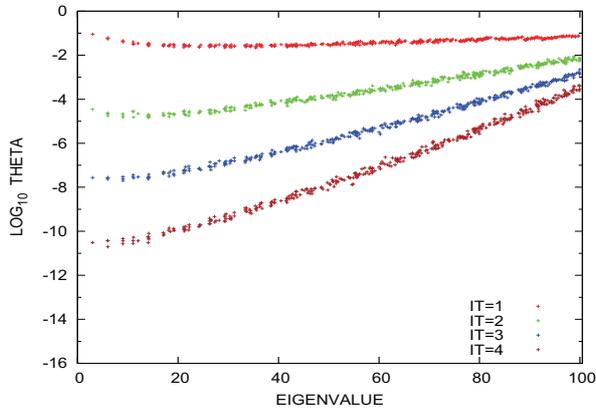


図 A-55 例題 R2 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-5}$ ,  $m = 500$

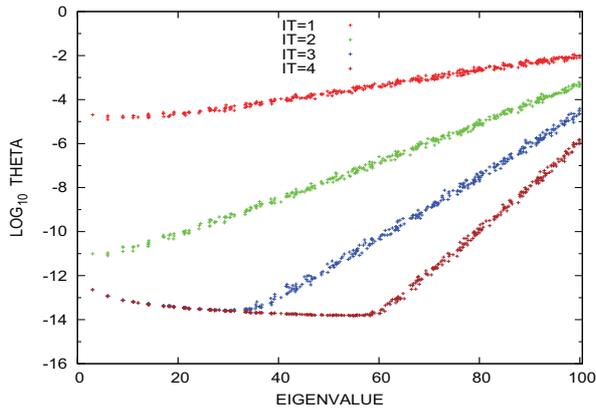


図 A-56 例題 R2 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-10}$ ,  $m = 500$

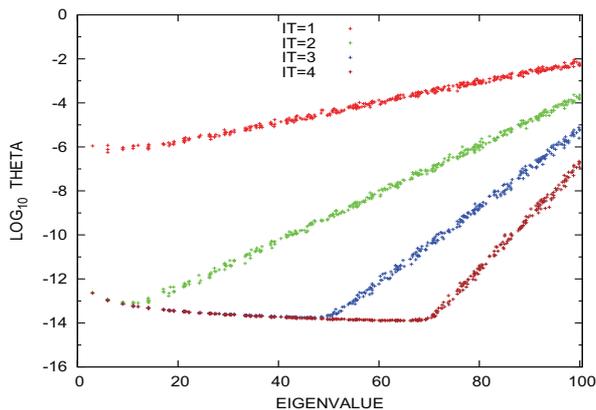


図 A-57 例題 R2 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 500$

同様に, ランダムなベクトルの数  $m$  を 700 とし, フィルタを次数  $n$  を 15 とし,  $\mu$  を 1.5 とし,  $g_s$  を  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  の 3 通りにとった各場合に対する計算結果をそれぞれ図 A-58, 図 A-59, 図 A-60 に示す.

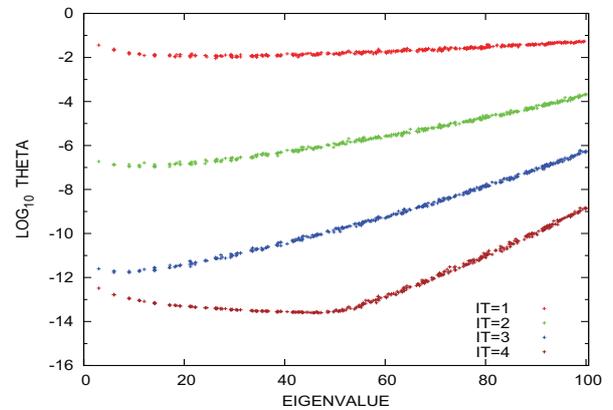


図 A-58 例題 R2 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-5}$ ,  $m = 700$

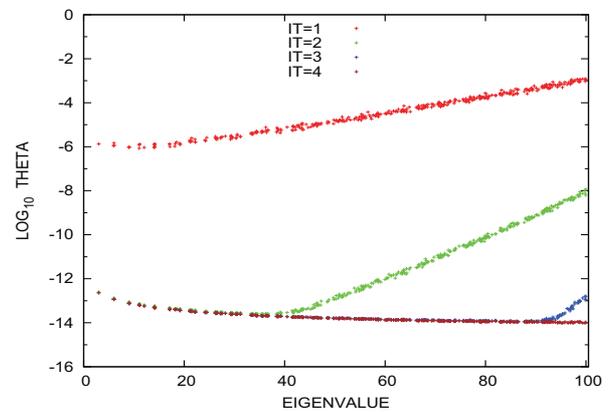


図 A-59 例題 R2 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-10}$ ,  $m = 700$

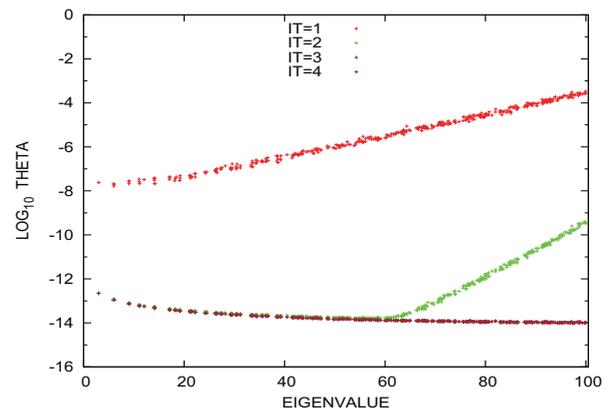


図 A-60 例題 R2 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 700$

ベクトルの数  $m$  は 500 では不足であるが,  $m$  が 700 であれば良い結果が得られている, たとえば  $n$  が 15 で  $\mu$  が 1.5 のとき,  $g_s$  が  $10^{-10}$  の場合に, フィルタの適用を 2 回にすると, 「相対残差」 $\theta$  の値はどれも  $10^{-8}$  以下であり, フィルタの適用を 3 回にすると, 「相対残差」 $\theta$  の値はどれも  $10^{-12}$  以下となっている.  $g_s$  が  $10^{-12}$  の場合も同様である.

A.1.4 例題 R2 (結果のグラフの描き方を変えた場合)

A.1.4.1 例題 R2: フィルタの次数  $n$  が 10 の場合

フィルタに最初与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 500 とした場合 (この数は不十分である) について, フィルタを決める 3 つのパラメタのうち次数  $n$  を 10 とし,  $\mu$  を 1.5 とする. フィルタを適用する回数 IT を 1, 2, 3 とした 3 通りの各場合について, それぞれ得られた結果を図 A-61, 図 A-62, 図 A-63 に示す. 各図の中で,  $g_s$  の値を  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$ ,  $10^{-14}$  とした 5 通りの各場合についてグラフをプロットした.

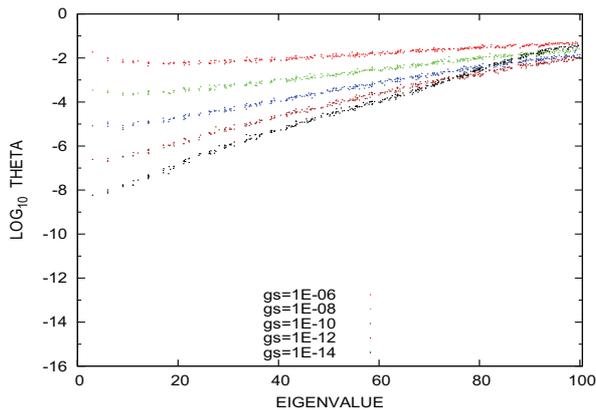


図 A-61 例題 R2:  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 500$ , IT=1

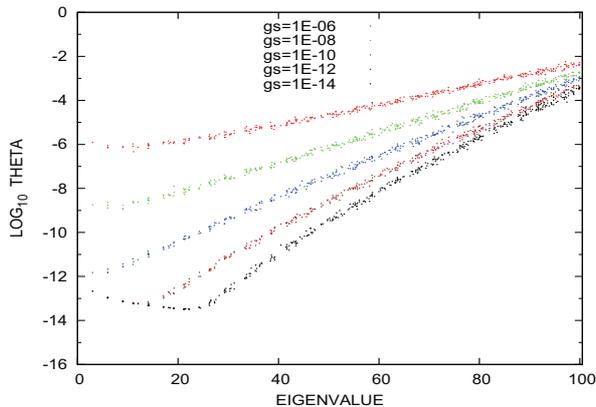


図 A-62 例題 R2:  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 500$ , IT=2

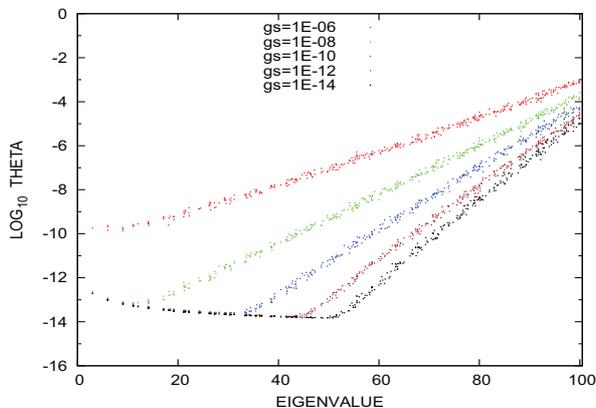


図 A-63 例題 R2:  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 500$ , IT=3

同様のことをランダムなベクトルの数  $m$  を増やして 700

とした場合 (この数はぎりぎり程度である) に, フィルタの適用回数 IT を 1, 2, 3 とした 3 通りの各場合について得られた結果を図 A-64, 図 A-65, 図 A-66 に示す. ラ

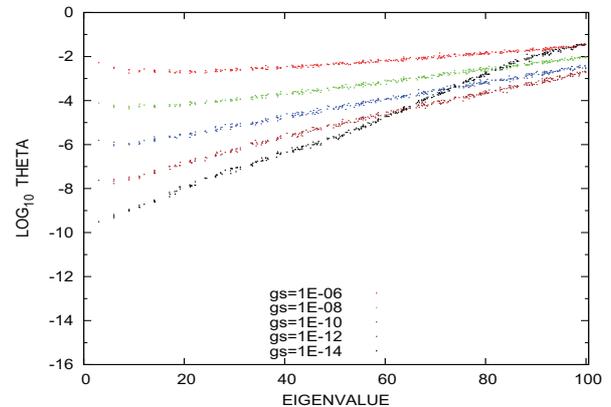


図 A-64 例題 R2:  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 700$ , IT=1

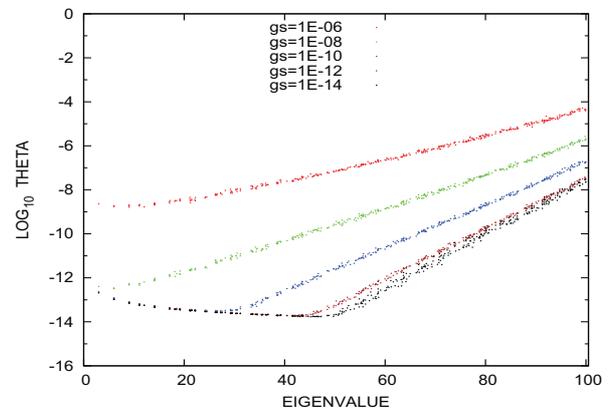


図 A-65 例題 R2:  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 700$ , IT=2

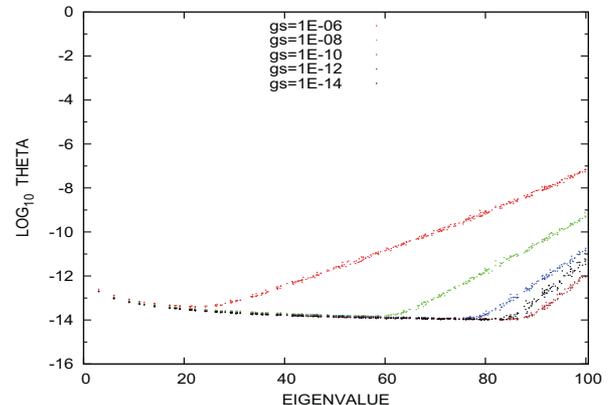


図 A-66 例題 R2:  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 700$ , IT=3

ンダムなベクトルの数  $m$  が 700 の場合に,  $n$  が 10 で  $\mu$  が 1.5 のフィルタを 3 回適用することで,  $g_s$  が  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  のそれぞれに対して「相対残差」 $\theta$  の値は  $10^{-7}$  以下,  $10^{-9}$  以下,  $10^{-11}$  以下,  $10^{-12}$  以下などになっている.

**A.1.4.2 例題 R2：フィルタの次数  $n$  が 15 の場合**

フィルタに最初与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 500 とした場合（この数は実際には十分ではない）について、フィルタを決める 3 つのパラメタのうち次数  $n$  を 15 とし、 $\mu$  を 1.5 とする。フィルタを適用する回数 IT を 1, 2, 3 とした 3 通りの各場合について、それぞれ得られた結果を 図 A-67, 図 A-68, 図 A-69 に示す。各図の中で、 $g_s$  の値を  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$ ,  $10^{-14}$  とした 5 通りの各場合についてグラフをプロットした。

同様のことをランダムなベクトルの数  $m$  を増やして 700 とした場合（この数はぎりぎりである）に、フィルタの適用回数 IT を 1, 2, 3 とした 3 通りの各場合について得られた結果を 図 A-70, 図 A-71, 図 A-72 に示す。ランダムなベクトルの数  $m$  を 700 にした場合に、 $n$  が 15 で  $\mu$  が 1.5 のフィルタを 3 回適用することで、 $g_s$  の値が  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  のそれぞれに対して、「相対残差」 $\theta$  の値は  $10^{-8}$  以下、 $10^{-10}$  以下、 $10^{-12}$  以下、 $10^{-12}$  以下などとなっている。

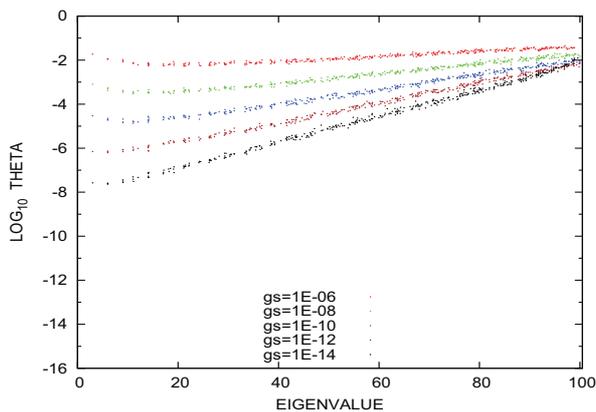


図 A-67 例題 R2： $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 500$ , IT=1

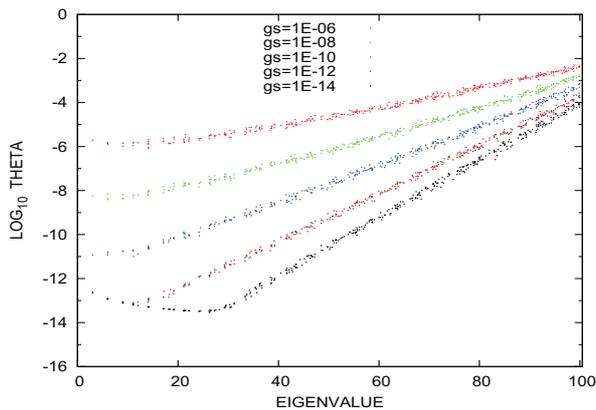


図 A-68 例題 R2： $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 500$ , IT=2

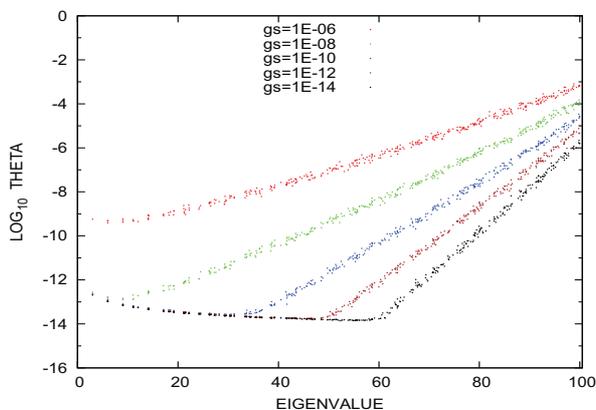


図 A-69 例題 R2： $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 500$ , IT=3

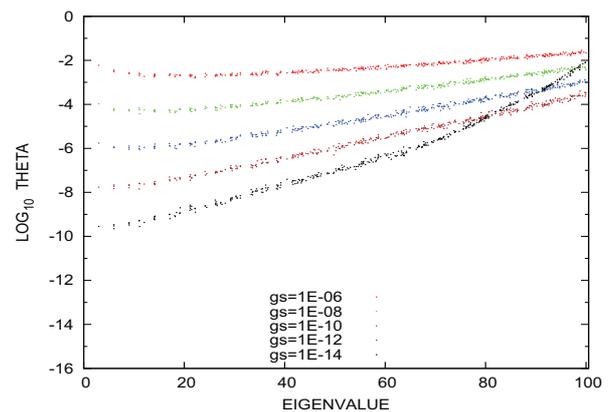


図 A-70 例題 R2： $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 700$ , IT=1

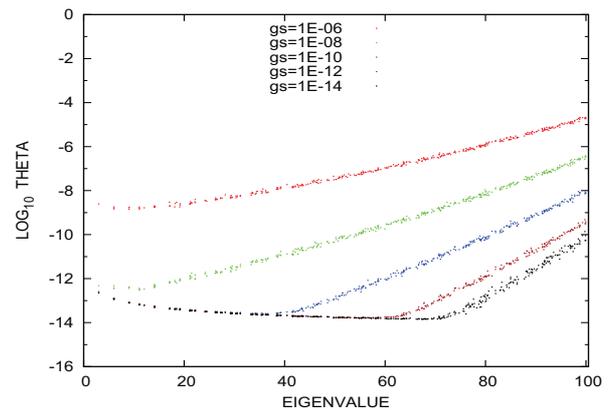


図 A-71 例題 R2： $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 700$ , IT=2

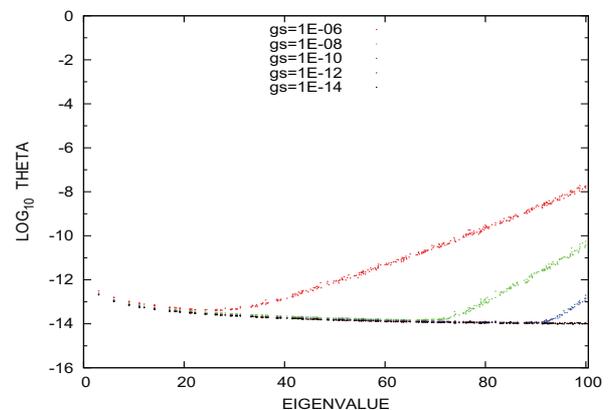


図 A-72 例題 R2： $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 700$ , IT=3

### A.1.5 例題 C1：シフトが虚数の単一のレゾルベントからなるフィルタの適用例その1

行列の一般固有値問題  $Av = \lambda Bv$  は、立方体領域の有限要素法による有限要素分割を  $(N_1, N_2, N_3) = (20, 30, 40)$  とした場合に得られるもので、行列  $A$  と  $B$  の次数  $N$  は 24,000、下帯幅  $w_L$  は 621 である。その固有値問題の区間  $[a, b] = [300, 310]$  に固有値がある固有対を求めた（この区間（通過域）に対応する固有対の正しい数は 90 である。またフィルタの通過域と遷移域を合わせた区間  $[297.5, 312.5]$  に入る固有対の正しい数は 125 である）。

適用を複数回行なうフィルタは簡単化のためにすべて同一にしている。フィルタはシフトが虚数の単一のレゾルベントの作用の虚部の  $n$  次多項式で、その多項式として第 1 種チェビシェフ多項式で表わされる簡易型のものを採用した。固有値の区間  $\lambda \in [a, b]$  を線形変換により標準区間  $t \in [-1, 1]$  に移して定義される正規化座標  $t$  について、フィルタの通過域は  $t \in [-1, 1]$  であり、遷移域は  $|t| \in (1, \mu)$ 、阻止域は  $|t| \geq \mu$  となる。フィルタの伝達率の阻止域に於ける大きさの最大値は  $g_s$  であり、通過域に於ける最大値は 1 に規格化されていて、通過域に於ける最小値は  $g_p$  であるとする。フィルタは次数  $n$ 、遷移域の端（阻止域の端）の正規化座標での値  $\mu$ 、伝達率の阻止域での大きさの最大値  $g_s$  の 3 つ組  $(n, \mu, g_s)$  を指定して決めた。それにより、 $\mathcal{F} = g_s T_n(2\gamma' \text{Im} \mathcal{R}(\rho') - I)$  の形の（簡易型の）フィルタの虚数シフト  $\rho'$  の値と実数係数の  $\gamma'$  が決まり、また  $g_p$  の値も決まる。

#### A.1.5.1 例題 C1：フィルタの次数 $n$ が 8 の場合

まずフィルタを指定する 3 つのパラメタを次数  $n$  を 8 に、 $\mu$  を 1.5 に、 $g_s$  を  $10^{-12}$  にして、最初に与えるランダムなベクトルの個数  $m$  を 100 から 10 刻みで 130 まで変えた 4 通りの場合を計算した結果を図 A.73 から図 A.76 までに示す。各図の中では、フィルタ適用回数 IT が 1 から 4 までのそれぞれの場合について、近似対の固有値が区間  $[a, b]$  に入るものだけについて、横軸には固有値の値を、縦軸には「相対残差」 $\theta$  の値を対数目盛でグラフにプロットしている。

フィルタの通過域である区間  $[300, 310]$  に固有値が含まれる固有対の正しい数は 90 であるが、それと通過域と遷移域を併せた区間  $[297.5, 312.5]$  に含まれる固有対の正しい数は 125 なので、このフィルタを用いて精度の良い不変部分空間の基底を得るためにはランダムなベクトルの数  $m$  は（事前には分からないが）125 よりも多くすることが望ましい。

これらの 4 枚の図からフィルタでろ過するランダムベクトルの数  $m$  が 120 あるいは 130 の場合には、次数  $n$  が 8 のフィルタを 3 回適用することで、求めた近似対の「相対残差」 $\theta$  の値が一様に  $10^{-14}$  程度となったことがわかる。

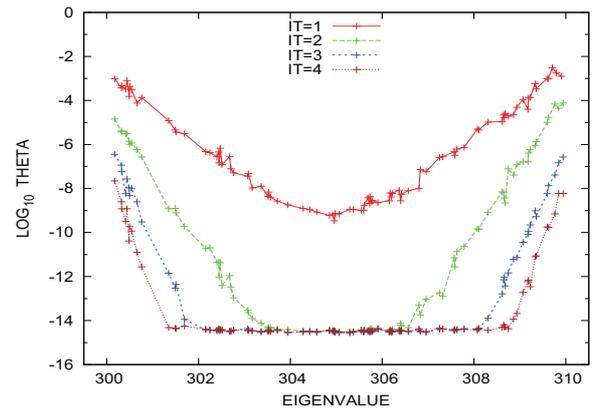


図 A.73 例題 C1： $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 100$

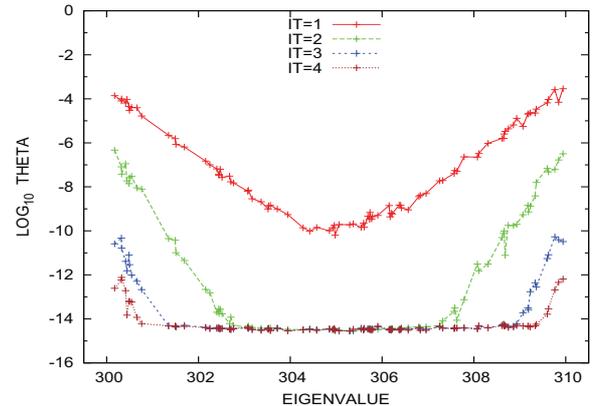


図 A.74 例題 C1： $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 110$

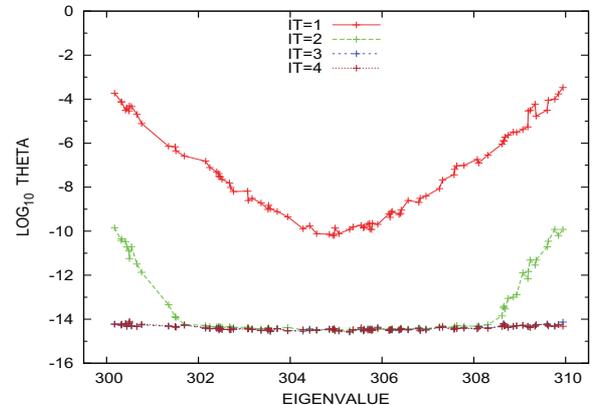


図 A.75 例題 C1： $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 120$

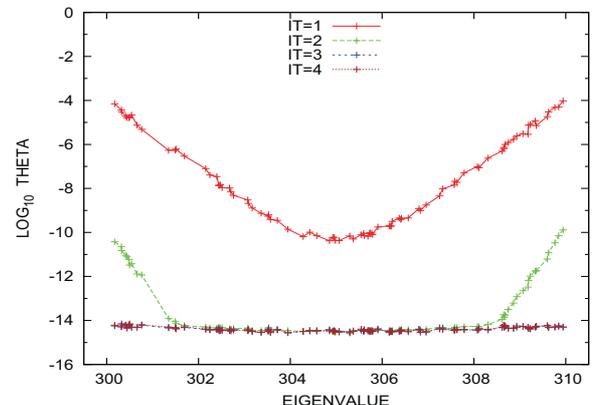


図 A.76 例題 C1： $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 130$

### A.1.5.2 例題 C1：フィルタの次数 $n$ が 10 の場合

フィルタに最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 150 とし、フィルタを決めるパラメタのうち次数  $n$  を 10 に、 $\mu$  を 1.5 として、 $g_s$  の値を 3 通り  $10^{-5}$ 、 $10^{-10}$ 、 $10^{-12}$  にとった各場合についての計算結果を図 A-77、図 A-78、図 A-79 に示す。各図の中ではフィルタの適用回数 IT を 1 から 4 までについての結果をグラフにプロットしている。横軸は近似対の固有値で、縦軸は近似対の「相対残差」 $\Theta$  の値（対数目盛）である。

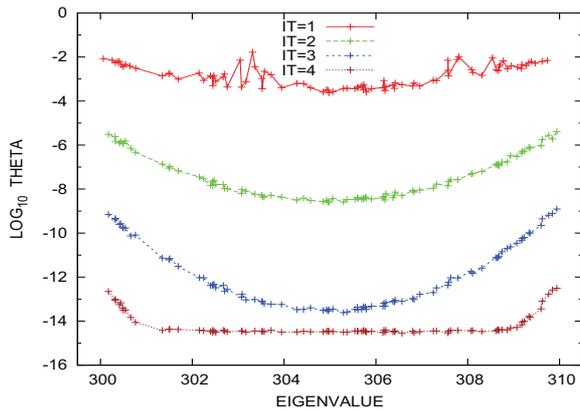


図 A-77 例題 C1： $n = 10$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-5}$ ， $m = 150$

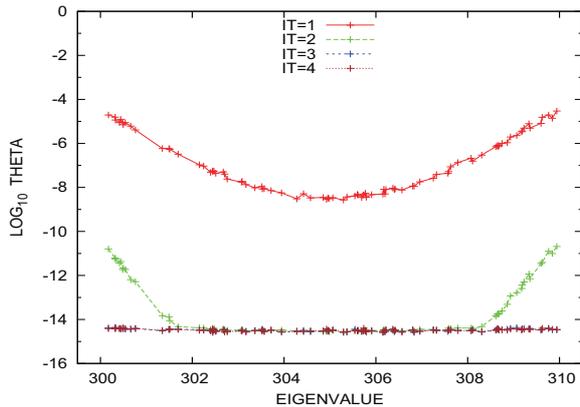


図 A-78 例題 C1： $n = 10$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-10}$ ， $m = 150$

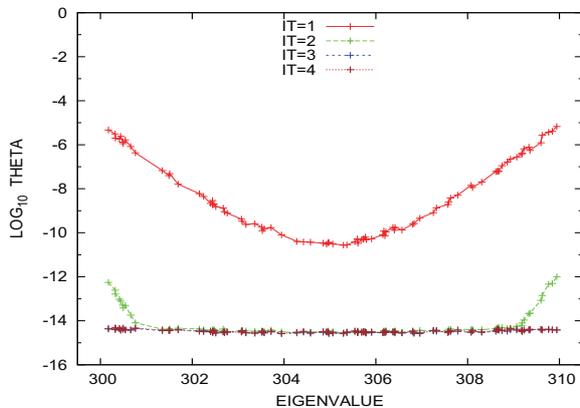


図 A-79 例題 C1： $n = 10$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-12}$ ， $m = 150$

フィルタを 2 回適用する場合は、 $g_s$  が  $10^{-10}$  の場合は「相対残差」 $\Theta$  の値は  $10^{-11}$  程度以下に、 $g_s$  が  $10^{-12}$  の場

合は「相対残差」 $\Theta$  の値は  $10^{-12}$  以下にできており、適用 1 回の場合の結果を大幅に改良できていることがわかる。

### A.1.5.3 例題 C1：フィルタの次数 $n$ が 15 の場合

またさらに、ランダムなベクトルの数  $m$  は 150 とし、フィルタの次数  $n$  を 15 とした場合についての同様の計算結果をそれぞれ、図 A-80、図 A-81、図 A-82 に示す。

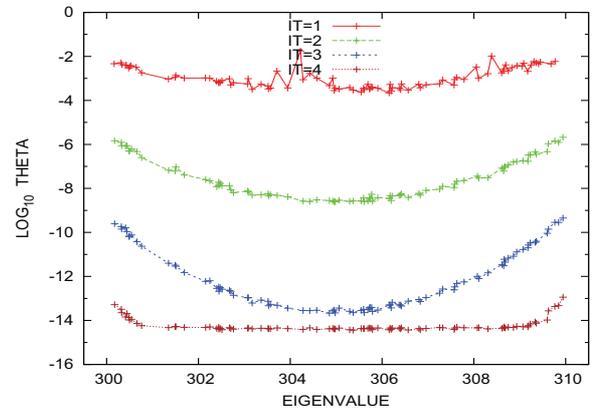


図 A-80 例題 C1： $n = 15$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-5}$ ， $m = 150$

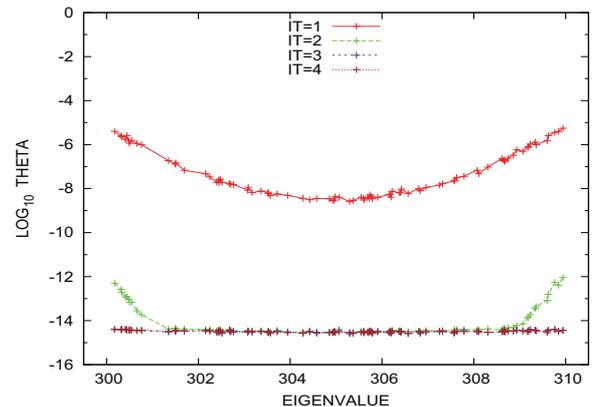


図 A-81 例題 C1： $n = 15$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-10}$ ， $m = 150$

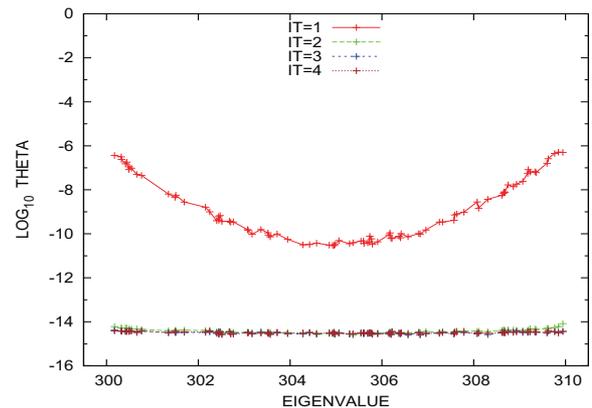


図 A-82 例題 C1： $n = 15$ ， $\mu = 1.5$ ， $g_s = 10^{-12}$ ， $m = 150$

フィルタを 2 回適用する場合は、 $g_s$  が  $10^{-10}$  の場合は「相対残差」 $\Theta$  の値は  $10^{-12}$  以下に、 $g_s$  が  $10^{-12}$  の場合は「相対残差」 $\Theta$  の値は  $10^{-14}$  以下になっており、適用 1 回だけの場合の結果を大幅に改良できていることがわかる。

A.1.6 例題 C1 (結果のグラフの描き方を変えた場合)

A.1.6.1 例題 C1 : フィルタの次数  $n$  が 10 の場合

フィルタに最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 150 として、フィルタを指定する 3 つのパラメタについては次数  $n$  を 10 とし、 $\mu$  を 1.5 として、そうして  $g_s$  については (各図の中で) 5 通りの値  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$ ,  $10^{-14}$  とした。フィルタの適用回数 IT を 1, 2, 3 とした各場合についての結果を図 A-83, 図 A-84, 図 A-85 に示す。フィルタの適用を 1 回から 2 回に、さらに 3 回とすることで、得られる近似固有対の「相対残差」 $\theta$  の値をうまく減少できていることが確認できる。

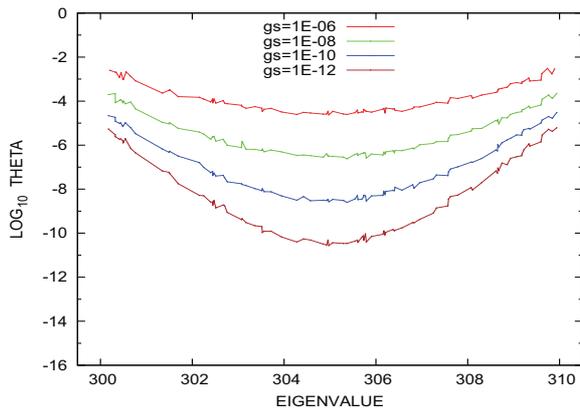


図 A-83 例題 C1 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=1

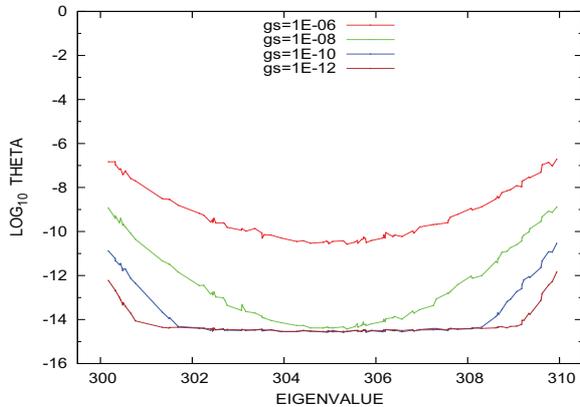


図 A-84 例題 C1 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=2

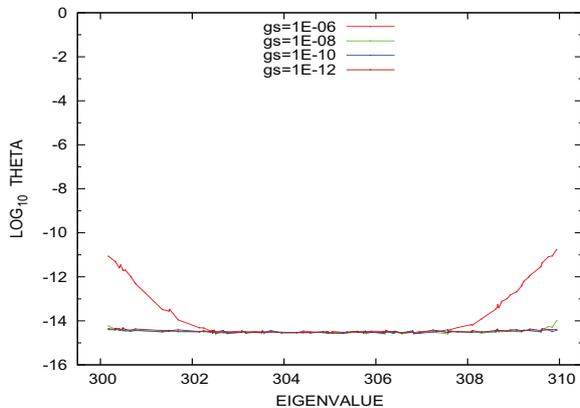


図 A-85 例題 C1 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=3

A.1.6.2 例題 C1 : フィルタの次数  $n$  が 15 の場合

また同様に、ベクトルの数  $m$  を 150 として、フィルタの次数  $n$  を 15 に増して、フィルタの適用回数 IT を 1, 2, 3 とした各場合についての同様の計算結果を図 A-86, 図 A-87, 図 A-88 に示す。フィルタの適用を 1 回から 2 回に、さらに 3 回とすることで、得られる近似固有対の「相対残差」 $\theta$  の値をうまく減少できていることが確認できる。

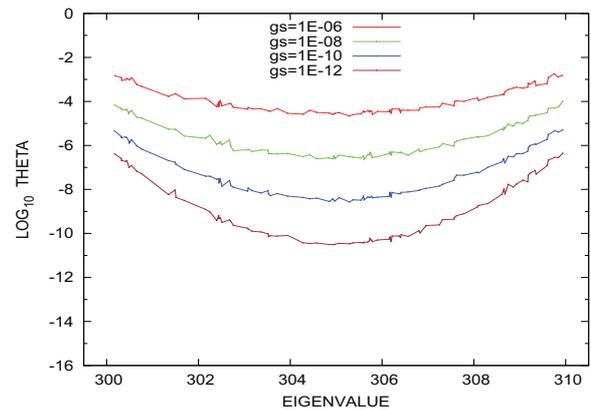


図 A-86 例題 C1 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=1

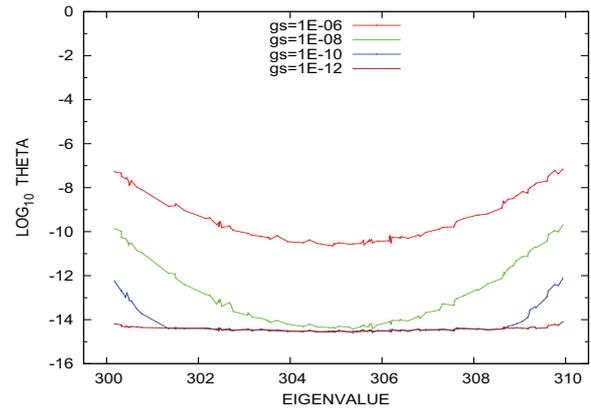


図 A-87 例題 C1 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=2

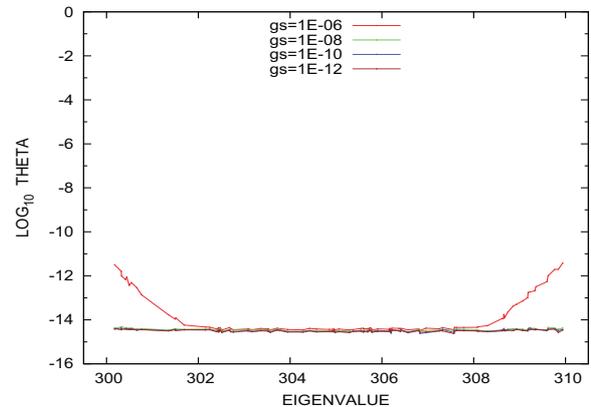


図 A-88 例題 C1 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ , IT=3

### A.1.7 例題 C2：シフトが虚数の単一のレゾルベントからなるフィルタの適用例その 2

例題 C2 は必要な固有対の固有値の区間  $[a, b]$  を  $[1000, 1010]$  とする場合であるこの区間（通過域）に対応する固有対の正しい数は 92 であり、また  $\mu$  が 1.5 に対応する遷移域と通過域を併せた区間  $[997.5, 1012.5]$  に含まれる固有値を持つ固有対の正しい数は 145 である。

#### A.1.7.1 例題 C2：フィルタの次数 $n$ が 8 の場合

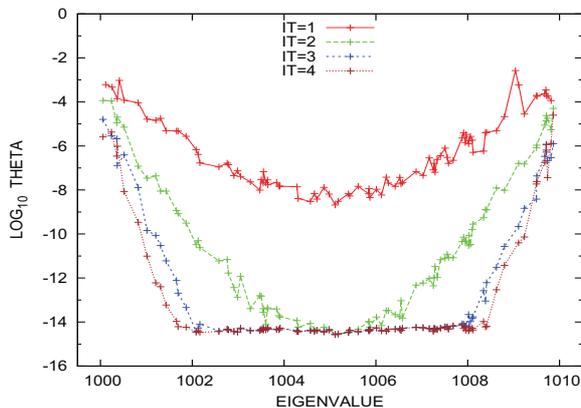


図 A.89 例題 C2： $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 100$

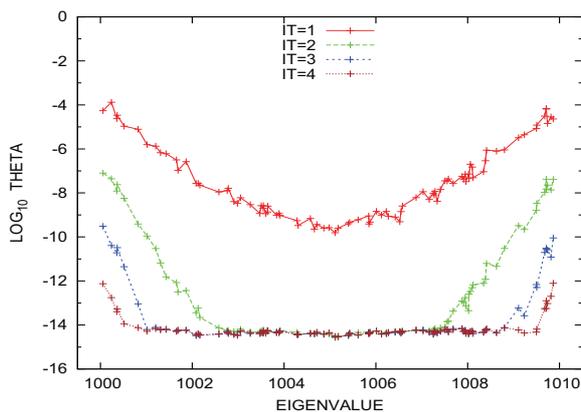


図 A.90 例題 C2： $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 120$

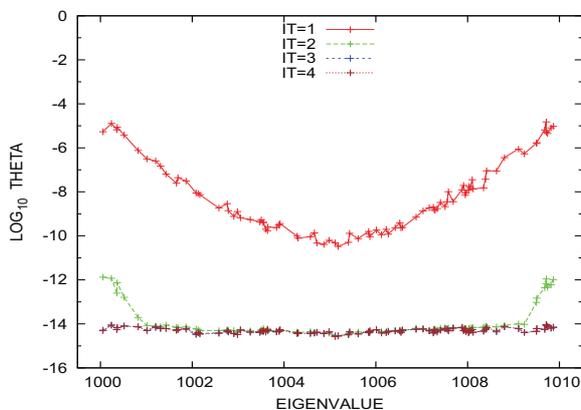


図 A.91 例題 C2： $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 140$

フィルタを決定する 3 つのパラメタを次数  $n$  を 8,  $\mu$  を 1.5,  $g_s$  を  $10^{-12}$  と指定して、最初に与えるランダムなベ

クトルの数  $m$  を 100, 120, 140 の 3 通りに選んだ各場合について得られた計算結果を図 A.89, 図 A.90, 図 A.91 に示す. 各図の中で, フィルタの適用回数 IT を 1 から 4 まで変えた各場合のグラフをプロットしている.

ベクトルの数  $m$  が 100 の場合には固有値が区間の両端付近にある近似固有対の「相対残差」 $\Theta$  の値はフィルタを反復適用しても十分に減少しないが,  $m$  が増すに従って反復により良く減少するようになってきていることがわかる. ( $m$  が 150 の場合には, この次数  $n$  が 8 であるフィルタを 3 回適用した段階で既にもう固有値が区間内の近似対の「相対残差」 $\Theta$  の値は一様に  $10^{-14}$  程度にまで減少しており, フィルタをさらに適用しても改善していない).

**A.1.7.2 例題 C2：フィルタの次数  $n$  が 10 の場合**

最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 150 として、フィルタのパラメタについて次数  $n$  を 10,  $\mu$  を 1.5,  $g_s$  を  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  とした 3 通りの場合についての結果を図 A-92, 図 A-93, 図 A-94 のグラフに示す。

フィルタの適用回数を 1 回から 2 回に増すと、「相対残差」 $\theta$  の値が非常に改善されることがわかる。たとえば  $g_s$  が  $10^{-10}$  の場合には、フィルタの適用 1 回 (IT=1) の場合に「相対残差」 $\theta$  の値は  $10^{-4}$  程度以下であったが、適用 2 回 (IT=2) にすると「相対残差」 $\theta$  の値は  $10^{-12}$  程度以下となっている。

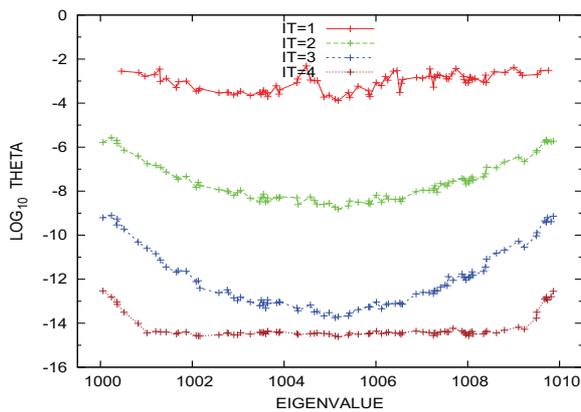


図 A-92 例題 C2： $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-5}$ ,  $m = 150$

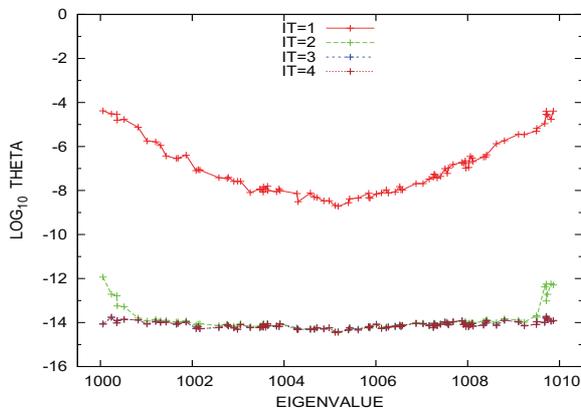


図 A-93 例題 C2： $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-10}$ ,  $m = 150$

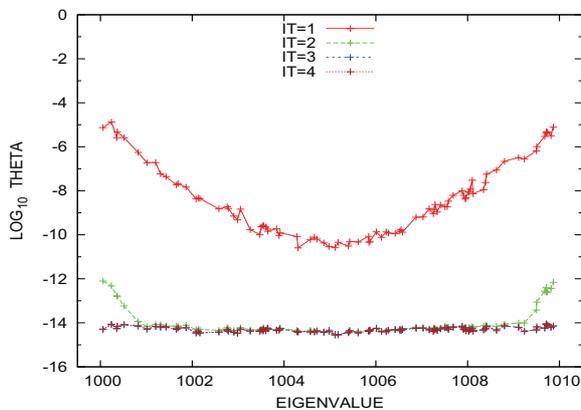


図 A-94 例題 C2： $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 150$

**A.1.7.3 例題 C2：フィルタの次数  $n$  が 15 の場合**

最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 150 とした場合で、今度は次数  $n$  を増やして 15 とし、 $\mu$  を 1.5 として  $g_s$  を  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  とした 3 通りの場合について図 A-95, 図 A-96, 図 A-97 のグラフに示す。

フィルタの適用回数を 1 回から 2 回にすることで、「相対残差」 $\theta$  の値が非常に良く改善していることがわかる。たとえば  $g_s$  が  $10^{-10}$  の場合には、フィルタの適用が 1 回 (IT が 1) の場合に「相対残差」 $\theta$  の値は  $10^{-5}$  程度以下であったが、適用を 2 回 (IT が 2) にすると「相対残差」 $\theta$  の値は  $10^{-12}$  程度以下になっている。

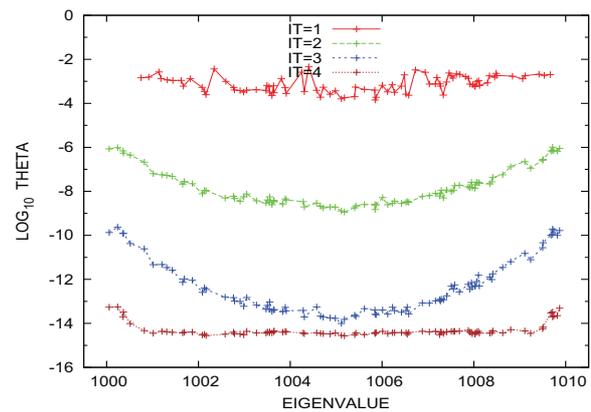


図 A-95 例題 C2： $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-5}$ ,  $m = 150$

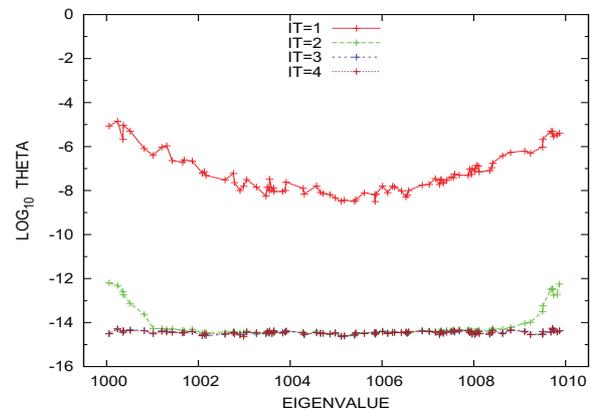


図 A-96 例題 C2： $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-10}$ ,  $m = 150$

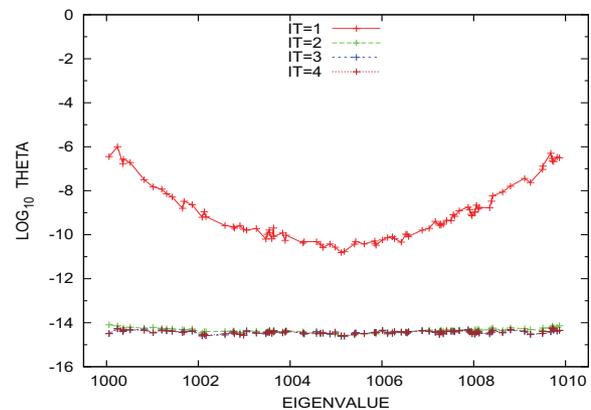


図 A-97 例題 C2： $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 150$

A.1.8 例題 C2 (結果のグラフの描き方を変えた場合)

A.1.8.1 例題 C2: フィルタの次数  $n$  が 10 の場合

最初に与えるランダムなベクトルの数  $m$  を 150 にして、フィルタを決める 3 つのパラメアのうち  $n$  を 10 に、 $\mu$  を 1.5 にして、フィルタを適用する回数  $IT$  をそれぞれ 1, 2, 3 とした 3 通りの場合についての結果を図 A-98, 図 A-99, 図 A-100 に示す (各図の中ではフィルタのパラメタ  $g_s$  の値を  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  と 4 通りに変えたそれぞれの場合についてのグラフがプロットされている)。

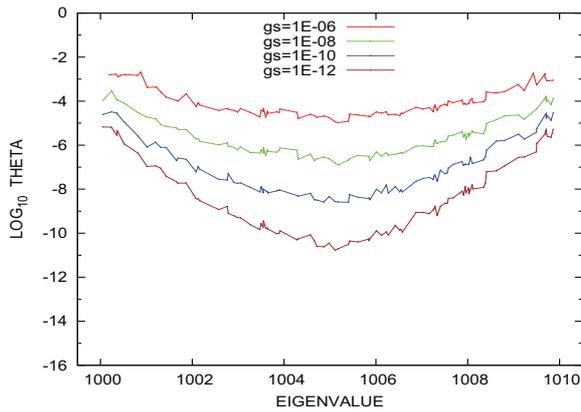


図 A-98 例題 C2 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ ,  $IT=1$

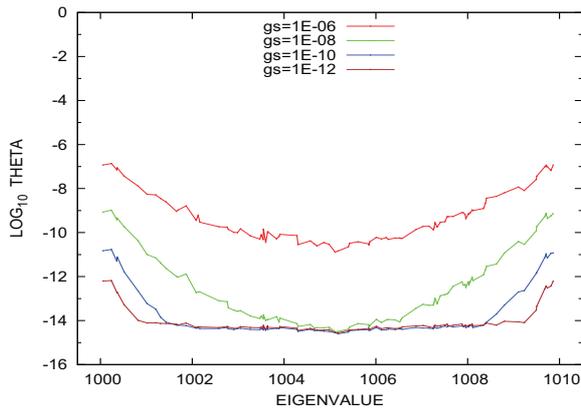


図 A-99 例題 C2 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ ,  $IT=2$

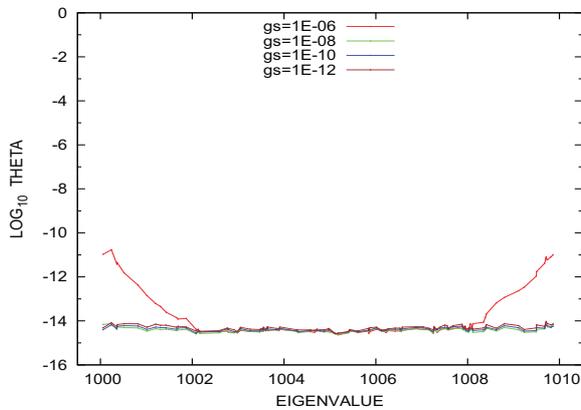


図 A-100 例題 C2 :  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ ,  $IT=3$

A.1.8.2 例題 C2: フィルタの次数  $n$  が 15 の場合

ランダムなベクトルの数  $m$  を 150 にして、フィルタを決める 3 つのパラメアのうち  $n$  を 15 に、 $\mu$  を 1.5 にして、フィルタを適用する回数  $IT$  をそれぞれ 1, 2, 3 とした 3 通りの場合についての結果をそれぞれ図 A-101, 図 A-102, 図 A-103 に示す (各図の中ではフィルタのパラメタ  $g_s$  の値を  $10^{-6}$ ,  $10^{-8}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  と 4 通りに変えたそれぞれの場合についてのグラフがプロットされている)。

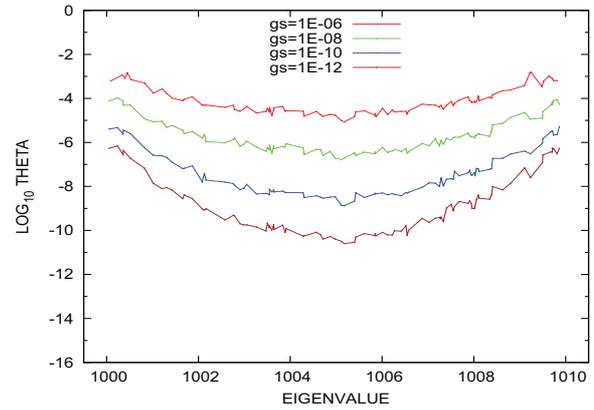


図 A-101 例題 C2 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ ,  $IT=1$

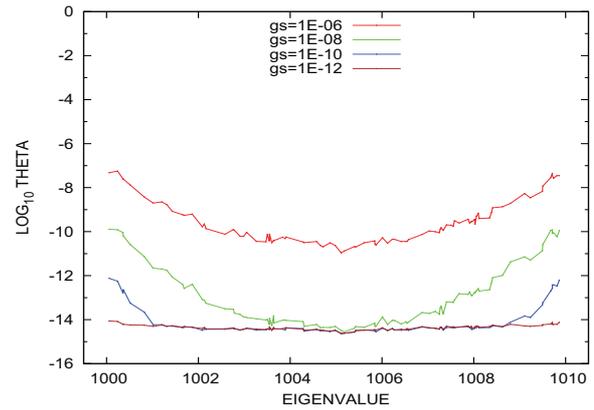


図 A-102 例題 C2 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ ,  $IT=2$

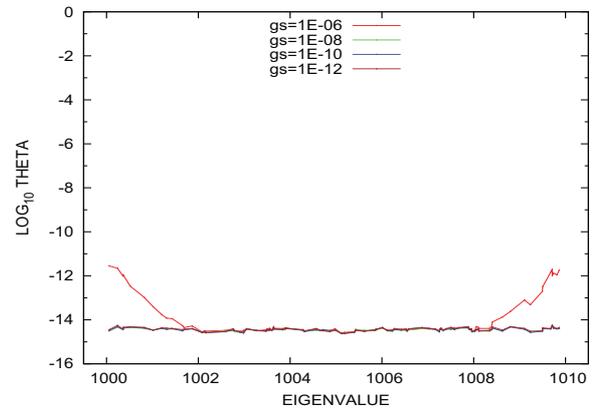


図 A-103 例題 C2 :  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $m = 150$ ,  $IT=3$

## A.2 各実験に使用したフィルタの特性

### A.2.1 例題 R1：シフトが実数の単一のレゾルベントからなるフィルタの適用例その1

単一のレゾルベントのシフトを実数にとって、フィルタの通過域は固有値の区間  $[a, b] = [0, 30]$  にした場合である。

#### A.2.1.0.1 例題 R1：フィルタの次数 $n$ が 8 の場合

フィルタを決定する3つのパラメタを次数  $n$  を 8,  $\mu$  を 1.5,  $g_s$  を  $10^{-12}$  と指定したときの、正規化座標  $t$  に対する、フィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を図 A・104 のグラフに示す。このとき  $g_p$  の値は  $8.80 \times 10^{-9}$  である。

#### A.2.1.0.2 例題 R1：フィルタの次数 $n$ が 10 の場合

フィルタを決定する3つのパラメタは次数  $n$  は 10,  $\mu$  は 1.5 で,  $g_s$  は  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  の3通りに指定した各場合のフィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を図 A・105 に示す。各場合に対する  $g_p$  の値はそれぞれ  $3.34 \times 10^{-3}$ ,  $1.69 \times 10^{-6}$ ,  $4.21 \times 10^{-8}$  である。

#### A.2.1.0.3 例題 R1：フィルタの次数 $n$ が 15 の場合

フィルタを決定する3つのパラメタは次数  $n$  が 15 とし,  $\mu$  が 1.5,  $g_s$  を  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  の3通りに指定したそれぞれの場合のフィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を図 A・106 に示す。各場合に対する  $g_p$  の値はそれぞれ  $4.47 \times 10^{-3}$ ,  $8.25 \times 10^{-6}$ ,  $4.17 \times 10^{-7}$  である。

#### A.2.1.0.4 例題 R1：フィルタの次数 $n$ が 20 の場合

フィルタを決定する3つのパラメタは次数  $n$  が 20 とし,  $\mu$  が 1.5,  $g_s$  を  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  の3通りに指定したそれぞれの場合のフィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を図 A・107 に示す。各場合に対する  $g_p$  の値はそれぞれ  $4.98 \times 10^{-3}$ ,  $1.63 \times 10^{-5}$ ,  $1.22 \times 10^{-6}$  である。

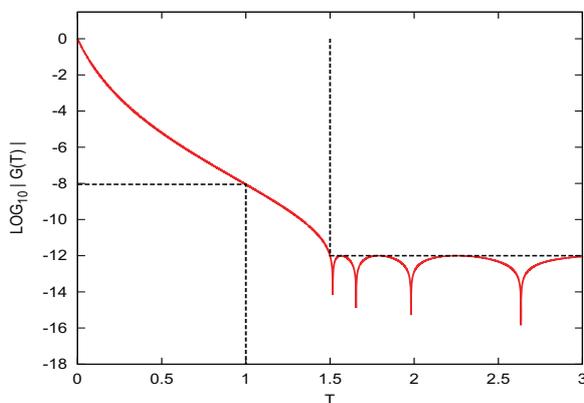


図 A・104 例題 R1：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$

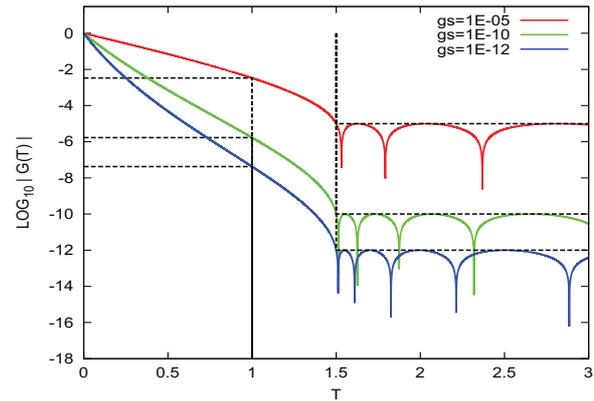


図 A・105 例題 R1：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$

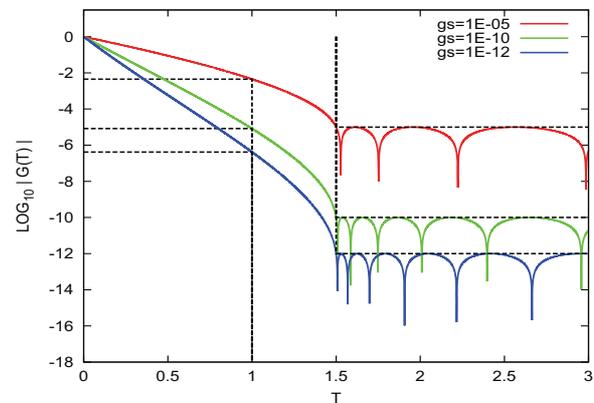


図 A・106 例題 R1：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$

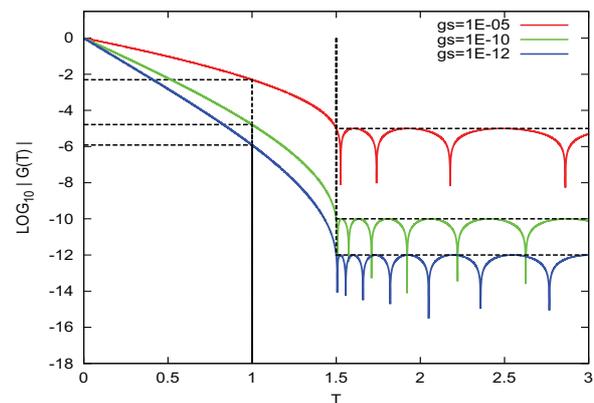


図 A・107 例題 R1：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 20$ ,  $\mu = 1.5$

**A.2.2 例題 R2：シフトが実数の単一のレゾルベントからなるフィルタの適用例その 2**

単一のレゾルベントのシフトを実数にとって、フィルタの通過域は固有値の区間  $[a, b] = [0, 100]$  にした場合である。

**A.2.2.0.5 例題 R2：フィルタの次数  $n$  が 8 の場合**

フィルタのパラメタとして  $n$  を 8,  $\mu$  を 1.5,  $g_s$  を  $10^{-12}$  と設定した。そのときの正規化座標  $t$  に対する、フィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を図 A-108 のグラフに示す。  $g_p$  の値は  $8.80 \times 10^{-9}$  である。

**A.2.2.0.6 例題 R2：フィルタの次数  $n$  が 10 の場合**

フィルタを決定する 3 つのパラメタは次数  $n$  は 10,  $\mu$  は 1.5 で,  $g_s$  は  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  の 3 通りに指定したそれぞれの場合のフィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を図 A-109 に示す。各場合に対する  $g_p$  の値はそれぞれ  $3.34 \times 10^{-3}$ ,  $1.69 \times 10^{-6}$ ,  $4.21 \times 10^{-8}$  である。

**A.2.2.0.7 例題 R2：フィルタの次数  $n$  が 15 の場合**

フィルタを決定する 3 つのパラメタは次数  $n$  が 15 とし,  $\mu$  が 1.5,  $g_s$  を  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  の 3 通りに指定したそれぞれの場合のフィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を図 A-110 に示す。各場合に対する  $g_p$  の値はそれぞれ  $4.47 \times 10^{-3}$ ,  $8.25 \times 10^{-6}$ ,  $4.17 \times 10^{-7}$  である。

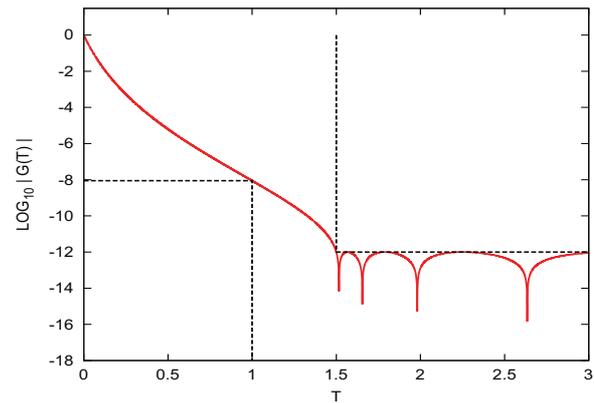


図 A-108 例題 R2：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$

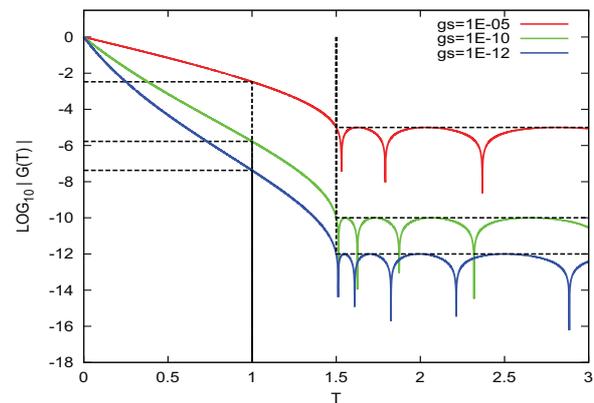


図 A-109 例題 R2：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$

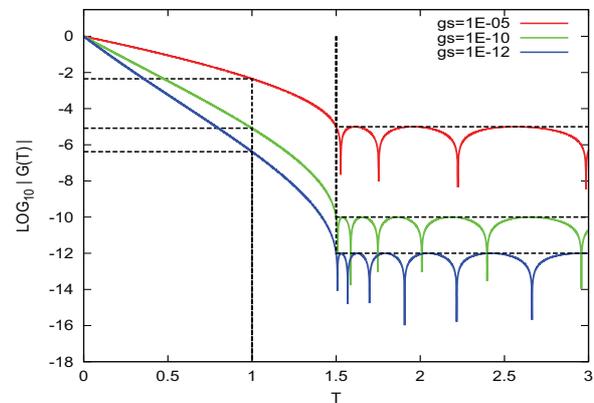


図 A-110 例題 R2：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$

**A.2.3 例題 C1：シフトが虚数の単一のレゾルベントからなるフィルタの適用例その 1**

単一のレゾルベントのシフトを虚数にとって、フィルタの通過域は固有値の区間  $[a, b] = [300, 310]$  にした場合である。

**A.2.3.0.8 例題 C1：フィルタの次数  $n$  が 8 の場合**

フィルタを決定する 3つのパラメタを次数  $n$  を 8,  $\mu$  を 1.5,  $g_s$  を  $10^{-12}$  と指定したときの、正規化座標  $t$  に対する、フィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を偶関数であるからその右半分  $t \geq 0$  についてだけを図 A-111 のグラフに示す。  $g_p$  の値は  $5.91 \times 10^{-7}$  である。

**A.2.3.0.9 例題 C1：フィルタの次数  $n$  が 10 の場合**

フィルタを決める 3つのパラメタを、次数  $n$  を 10 に、 $\mu$  を 1.5 として、 $g_s$  の値を 3通り  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  にとった各場合についてのフィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を偶関数であるからその右半分  $t \geq 0$  についてだけを図 A-112 に示す。各場合に対する  $g_p$  の値はそれぞれ  $2.74 \times 10^{-2}$ ,  $9.33 \times 10^{-5}$ ,  $4.20 \times 10^{-6}$  である。

**A.2.3.0.10 例題 C1：フィルタの次数  $n$  が 15 の場合**

フィルタを決める 3つのパラメタを、次数  $n$  を 15 に、 $\mu$  を 1.5 として、 $g_s$  の値を 3通り  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  にとった各場合についてのフィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を偶関数であるからその右半分  $t \geq 0$  についてだけを図 A-113 に示す。各場合に対する  $g_p$  の値はそれぞれ  $3.58 \times 10^{-2}$ ,  $5.02 \times 10^{-4}$ ,  $5.56 \times 10^{-5}$  である。

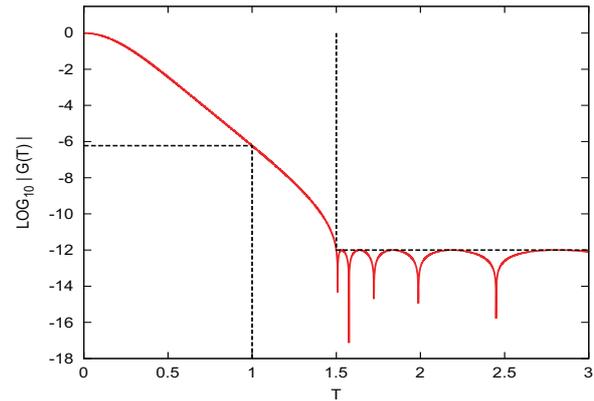


図 A-111 例題 C1：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$

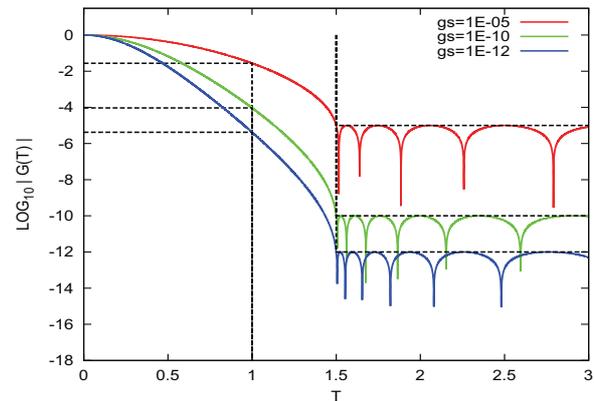


図 A-112 例題 C1：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$

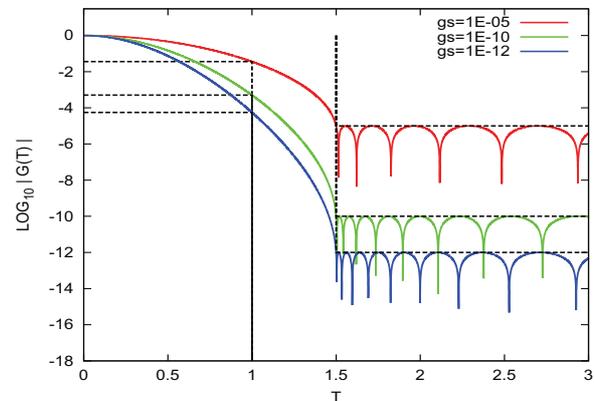


図 A-113 例題 C1：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$

**A.2.4 例題 C2：シフトが虚数の単一のレゾルベントからなるフィルタの適用例その 2**

単一のレゾルベントのシフトを虚数にとって、フィルタの通過域は固有値の区間  $[a, b] = [1000, 1010]$  とした場合である。

**A.2.4.0.11 例題 C2：フィルタの次数  $n$  が 8 の場合**

フィルタを決定する 3つのパラメタを次数  $n$  を 8,  $\mu$  を 1.5,  $g_s$  を  $10^{-12}$  と指定したときの、正規化座標  $t$  に対する、フィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を偶関数であるからその右半分  $t \geq 0$  についてだけを図 A-114 のグラフに示す。  $g_p$  の値は  $5.91 \times 10^{-7}$  である。

**A.2.4.0.12 例題 C2：フィルタの次数  $n$  が 10 の場合**

フィルタを決める 3つのパラメタを、次数  $n$  を 10 に、 $\mu$  を 1.5 として、 $g_s$  の値を 3通り  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  にとった各場合についてのフィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を偶関数であるからその右半分  $t \geq 0$  についてだけを図 A-115 に示す。各場合に対する  $g_p$  の値はそれぞれ  $2.74 \times 10^{-2}$ ,  $9.33 \times 10^{-5}$ ,  $4.20 \times 10^{-6}$  である。

**A.2.4.0.13 例題 C2：フィルタの次数  $n$  が 15 の場合**

フィルタを決める 3つのパラメタを、次数  $n$  を 15 に、 $\mu$  を 1.5 として、 $g_s$  の値を 3通り  $10^{-5}$ ,  $10^{-10}$ ,  $10^{-12}$  にとった各場合についてのフィルタの伝達率の大きさ  $|g(t)|$  を偶関数であるからその右半分  $t \geq 0$  についてだけを図 A-116 に示す。各場合に対する  $g_p$  の値はそれぞれ  $3.58 \times 10^{-2}$ ,  $5.02 \times 10^{-4}$ ,  $5.56 \times 10^{-5}$  である。

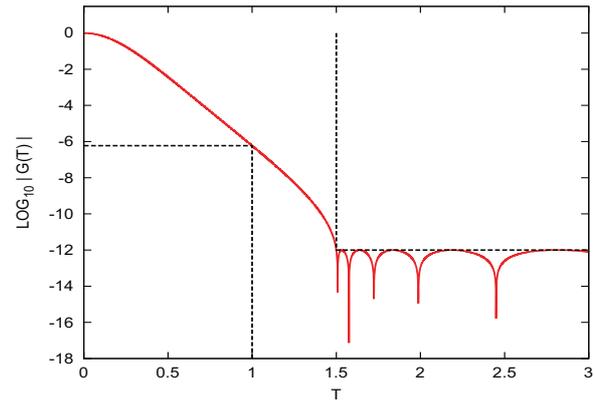


図 A-114 例題 C2：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$

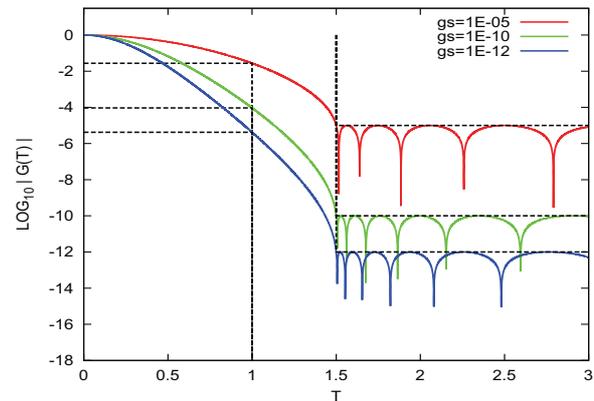


図 A-115 例題 C2：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 10$ ,  $\mu = 1.5$

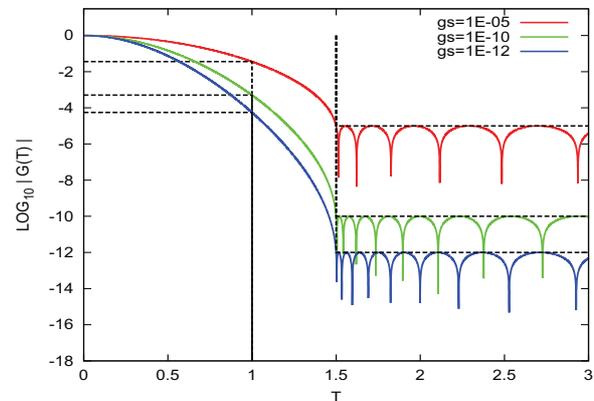


図 A-116 例題 C2：フィルタの伝達率の大きさ  $n = 15$ ,  $\mu = 1.5$

### A.3 各実験で得られた近似固有対の「相対残差」 $\Theta$ の最大値

#### A.3.1 例題 R1 の各場合に対する最大の相対残差

例題 R1 で扱った各計算例のそれぞれについて、得られた全ての近似固有対の相対残差  $\Theta$  の値の最大のを以下の各表表 A.1, 表 A.2, 表 A.3, 表 A.4, 表 A.5 に示す。

表 A.1 例題 R1 :  $\Theta$  の最大値 ( $n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$ )

IT	$m = 80$	$m = 100$	$m = 120$	$m = 140$
1	2.18E-02	7.40E-03	5.28E-03	3.33E-03
2	7.12E-05	1.93E-07	1.09E-07	6.57E-08
3	4.83E-07	1.20E-11	2.44E-12	1.34E-12
4	6.88E-09	1.29E-13	1.29E-13	1.31E-13

表 A.2 例題 R1 :  $\Theta$  の最大値 ( $n = 10, \mu = 1.5$ )

IT	$g_s = 10^{-5}$		$g_s = 10^{-10}$		$g_s = 10^{-12}$	
	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$
1	1.66E-01	1.84E-01	1.52E-02	7.29E-03	7.29E-03	3.14E-03
2	2.14E-03	9.18E-04	1.29E-06	4.18E-07	2.12E-07	6.26E-08
3	8.15E-06	2.30E-06	2.13E-10	1.94E-11	1.57E-11	1.24E-12
4	2.76E-08	6.18E-09	1.36E-13	1.35E-13	1.30E-13	1.32E-13

表 A.3 例題 R1 :  $\Theta$  の最大値 ( $n = 15, \mu = 1.5$ )

IT	$g_s = 10^{-5}$		$g_s = 10^{-10}$		$g_s = 10^{-12}$	
	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$
1	1.49E-01	1.63E-01	5.16E-03	1.73E-03	1.11E-03	3.44E-04
2	1.42E-03	5.10E-04	1.00E-07	1.52E-08	3.34E-09	6.38E-10
3	3.38E-06	9.92E-07	7.09E-12	1.87E-13	1.59E-13	1.60E-13
4	1.16E-08	1.64E-09	1.88E-13	1.89E-13	1.61E-13	1.60E-13

表 A.4 例題 R1 :  $\Theta$  の最大値 ( $n = 20, \mu = 1.5$ )

IT	$g_s = 10^{-5}$		$g_s = 10^{-10}$		$g_s = 10^{-12}$	
	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$
1	1.51E-01	1.59E-01	2.97E-03	8.27E-04	5.47E-04	1.29E-04
2	1.41E-03	4.97E-04	1.68E-08	3.74E-09	4.96E-10	6.87E-11
3	2.55E-06	8.98E-07	1.60E-12	2.32E-13	1.95E-13	1.95E-13
4	1.15E-08	1.61E-09	2.32E-13	2.33E-13	1.94E-13	1.94E-13

表 A.5 例題 R1 :  $\Theta$  の最大値 ( $n = 30, \mu = 1.5$ )

IT	$g_s = 10^{-5}$		$g_s = 10^{-10}$		$g_s = 10^{-12}$	
	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$
1	1.37E-01	1.64E-01	2.24E-03	4.43E-04	4.24E-04	5.61E-05
2	9.77E-04	3.69E-04	1.03E-08	1.76E-09	1.07E-10	1.03E-11
3	2.88E-06	6.63E-07	3.80E-13	2.81E-13	2.68E-13	2.68E-13
4	1.18E-08	1.06E-09	2.83E-13	2.81E-13	2.67E-13	2.69E-13

#### A.3.2 例題 R2 の各場合に対する最大の相対残差

例題 R2 で扱った各計算例のそれぞれについて、得られた全ての近似固有対の相対残差  $\Theta$  の値の最大のを以下の各表表 A.6, 表 A.7, 表 A.8, 表 A.9, 表 A.10 に示す。

表 A.6 例題 R2 :  $\Theta$  の最大値 ( $n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$ )

IT	$m = 500$	$m = 600$	$m = 700$	$m = 800$
1	2.08E-02	1.24E-02	1.06E-02	6.51E-03
2	1.49E-03	1.96E-05	5.59E-07	3.12E-07
3	1.13E-04	9.80E-08	7.35E-11	3.35E-11
4	7.13E-06	9.19E-10	1.88E-13	1.74E-13

表 A.7 例題 R2 :  $\Theta$  の最大値 ( $n = 10, \mu = 1.5$ )

IT	$g_s = 10^{-5}$		$g_s = 10^{-10}$		$g_s = 10^{-12}$	
	$m = 500$	$m = 700$	$m = 500$	$m = 700$	$m = 500$	$m = 700$
1	9.15E-02	6.88E-02	1.50E-02	5.06E-03	1.23E-02	2.31E-03
2	9.10E-03	3.40E-04	9.31E-04	2.10E-07	8.73E-04	3.59E-08
3	2.12E-03	1.60E-06	6.65E-05	1.99E-11	2.91E-05	1.22E-12
4	4.37E-04	5.62E-09	5.56E-06	1.99E-13	1.44E-06	1.96E-13

表 A.8 例題 R2 :  $\Theta$  の最大値 ( $n = 15, \mu = 1.5$ )

IT	$g_s = 10^{-5}$		$g_s = 10^{-10}$		$g_s = 10^{-12}$	
	$m = 500$	$m = 700$	$m = 500$	$m = 700$	$m = 500$	$m = 700$
1	8.94E-02	5.53E-02	1.11E-02	1.20E-03	8.95E-03	3.38E-04
2	9.11E-03	2.15E-04	6.20E-04	1.17E-08	2.32E-04	4.04E-10
3	2.23E-03	6.03E-07	3.90E-05	2.27E-13	7.49E-06	2.17E-13
4	4.20E-04	1.48E-09	1.54E-06	2.32E-13	2.22E-07	2.20E-13

表 A.9 例題 R2 :  $\Theta$  の最大値 ( $n = 20, \mu = 1.5$ )

IT	$g_s = 10^{-5}$		$g_s = 10^{-10}$		$g_s = 10^{-12}$	
	$m = 500$	$m = 700$	$m = 500$	$m = 700$	$m = 500$	$m = 700$
1	1.14E-01	5.23E-02	9.80E-03	7.14E-04	6.41E-03	1.86E-04
2	7.94E-03	1.68E-04	5.92E-04	3.82E-09	1.73E-04	6.54E-11
3	1.79E-03	4.47E-07	3.73E-05	2.56E-13	5.17E-06	2.42E-13
4	3.70E-04	8.97E-10	1.44E-06	2.60E-13	1.46E-07	2.40E-13

表 A.10 例題 R2 :  $\Theta$  の最大値 ( $n = 30, \mu = 1.5$ )

IT	$g_s = 10^{-5}$		$g_s = 10^{-10}$		$g_s = 10^{-12}$	
	$m = 500$	$m = 700$	$m = 500$	$m = 700$	$m = 500$	$m = 700$
1	1.03E-01	5.34E-02	9.70E-03	5.57E-04	5.23E-03	7.55E-05
2	8.76E-03	1.54E-04	4.76E-04	8.51E-10	1.47E-04	1.05E-11
3	1.74E-03	3.62E-07	1.83E-05	3.42E-13	3.55E-06	2.93E-13
4	3.80E-04	7.42E-10	9.37E-07	3.39E-13	1.32E-07	2.98E-13

**A.3.3 例題 C1 の各場合に対する最大の相対残差**

例題 C1 で扱った各計算例のそれぞれについて、得られた全ての近似固有対の相対残差  $\theta$  の値の最大のものを以下の各表表 A.11, 表 A.12, 表 A.13 に示す。

表 A.11 例題 C1 :  $\theta$  の最大値 ( $n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$ )

IT	$m = 100$	$m = 110$	$m = 120$	$m = 130$
1	3.15E-03	2.89E-04	3.42E-04	9.62E-05
2	7.72E-05	4.68E-07	1.44E-10	1.31E-10
3	3.58E-07	5.36E-11	7.43E-15	7.19E-15
4	2.22E-08	7.63E-13	8.00E-15	7.04E-15

**A.3.4 例題 C2 の各場合に対する最大の相対残差**

例題 C2 で扱った各計算例のそれぞれについて、得られた全ての近似固有対の相対残差  $\theta$  の値の最大のものを以下の各表表 A.14, 表 A.15, 表 A.16 に示す。

表 A.14 例題 C2 :  $\theta$  の最大値 ( $n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$ )

IT	$m = 100$	$m = 120$	$m = 140$
1	2.67E-03	1.32E-04	1.53E-05
2	1.16E-04	7.99E-08	1.33E-12
3	1.61E-05	3.05E-10	9.22E-15
4	2.52E-05	7.89E-13	9.32E-15

表 A.12 例題 C1 :  $\theta$  の最大値 ( $n = 10, \mu = 1.5$ )

IT	$g_s = 10^{-5}$		$g_s = 10^{-10}$		$g_s = 10^{-12}$	
	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$
1	1.08E-02	1.65E-02	3.27E-03	2.97E-05	2.30E-03	6.78E-06
2	2.31E-03	4.09E-06	4.73E-04	2.07E-11	2.52E-05	1.01E-12
3	2.46E-04	1.25E-09	5.10E-06	4.35E-15	7.15E-07	4.61E-15
4	2.83E-04	3.14E-13	6.02E-08	4.22E-15	3.03E-09	4.82E-15

表 A.15 例題 C2 :  $\theta$  の最大値 ( $n = 10, \mu = 1.5$ )

IT	$g_s = 10^{-5}$		$g_s = 10^{-10}$		$g_s = 10^{-12}$	
	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$
1	2.55E-03	4.89E-03	2.32E-03	4.18E-05	1.72E-03	1.34E-05
2	9.98E-04	2.68E-06	2.12E-04	1.17E-12	1.70E-04	7.94E-13
3	4.48E-04	7.89E-10	5.35E-06	1.94E-14	1.81E-05	9.06E-15
4	5.16E-03	2.93E-13	1.09E-05	1.82E-14	1.00E-06	8.71E-15

表 A.13 例題 C1 :  $\theta$  の最大値 ( $n = 15, \mu = 1.5$ )

IT	$g_s = 10^{-5}$		$g_s = 10^{-10}$		$g_s = 10^{-12}$	
	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$
1	1.24E-02	1.76E-02	4.09E-03	5.57E-06	1.90E-03	5.15E-07
2	3.06E-03	2.13E-06	1.42E-04	9.08E-13	4.46E-05	8.28E-15
3	6.40E-04	4.57E-10	1.10E-05	4.15E-15	8.29E-08	4.18E-15
4	1.04E-04	1.15E-13	2.44E-08	4.18E-15	1.74E-08	3.98E-15

表 A.16 例題 C2 :  $\theta$  の最大値 ( $n = 15, \mu = 1.5$ )

IT	$g_s = 10^{-5}$		$g_s = 10^{-10}$		$g_s = 10^{-12}$	
	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$	$m = 100$	$m = 150$
1	3.17E-03	4.61E-03	1.50E-03	1.42E-05	1.12E-03	9.96E-07
2	2.87E-03	1.03E-06	2.12E-04	6.39E-13	1.13E-04	8.03E-15
3	3.10E-03	2.38E-10	7.40E-06	5.26E-15	5.47E-06	5.63E-15
4	1.76E-03	5.63E-14	1.68E-06	5.59E-15	1.90E-06	5.75E-15

## 訂正 (一部の図と表の差し替え)

予稿の投稿後に、計算結果の取り違えにより、一部の図のグラフと表の値に正しくないものを入れてしまったことが判明いたしました。お詫びしてここにその訂正について記述させていただきます。

- 例題 R1 に於いて  $n = 8$  の場合に対するものであるとした節 A.1.1.1 (本文第 7 頁) の 4 枚の図 (図 A.1 から図 A.4)、およびそれらに対応する節 A.3.1 (本文第 30 頁) に掲げた表 A.1 は、実際には誤って  $n = 10$  の場合のものを載せておりました。そこで訂正として  $n = 8$  の場合に対する正しい図と表を以下に掲げさせていただきます。
- 同様に、例題 C2 に於いて  $n = 8$  の場合に対するものであるとした節 A.1.7.1 (本文第 23 頁) の 3 枚の図 (図 A.114 から図 A.116)、およびそれらに対応する節 A.3.4 (本文第 31 頁) に掲げた表 A.14 もまた、実際には誤って  $n = 10$  の場合のものを載せておりました。そこで訂正として  $n = 8$  の場合に対する正しい図と表を以下に掲げさせていただきます。

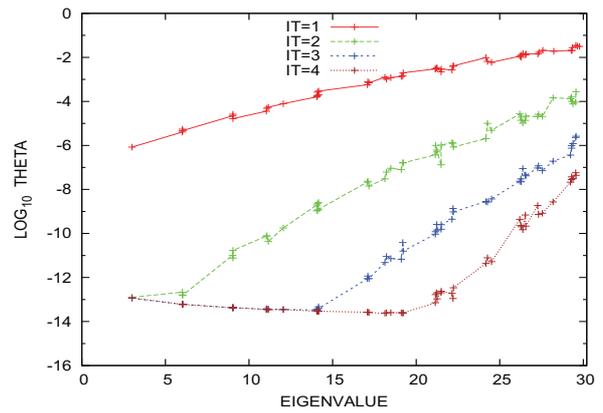


図 A.1 例題 R1 :  $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 80$

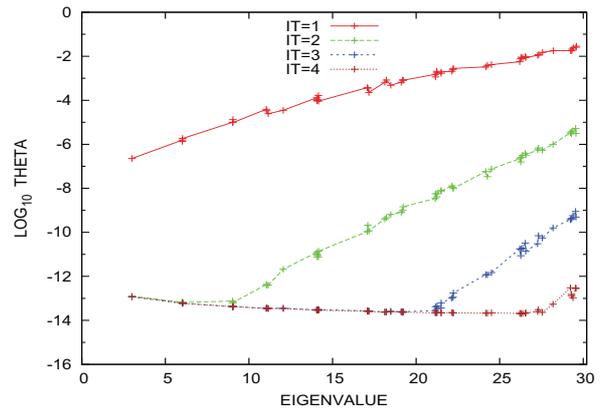


図 A.2 例題 R1 :  $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 100$

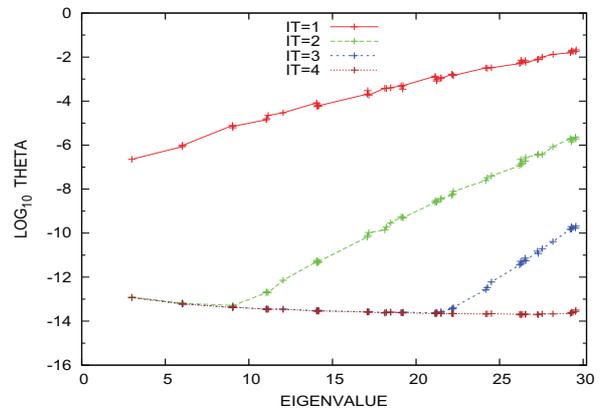


図 A.3 例題 R1 :  $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 120$

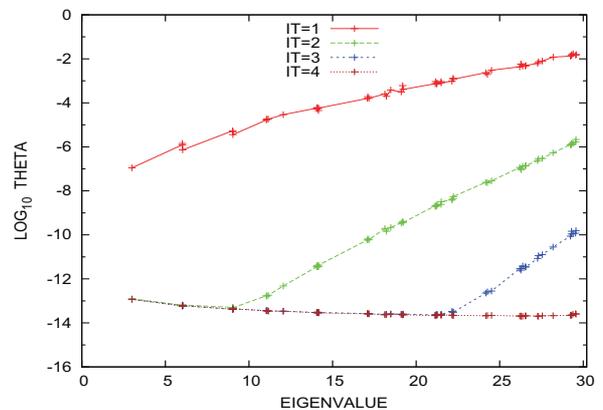


図 A.4 例題 R1 :  $n = 8$ ,  $\mu = 1.5$ ,  $g_s = 10^{-12}$ ,  $m = 140$

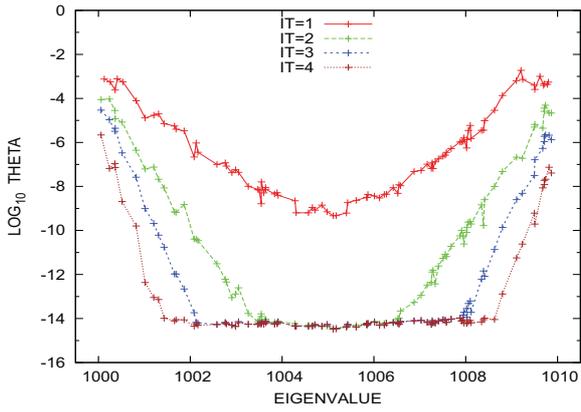


図 A.114 例題 C2 :  $n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12}, m = 100$

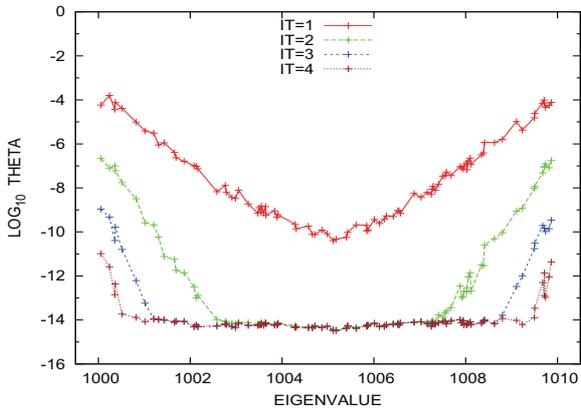


図 A.115 例題 C2 :  $n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12}, m = 120$

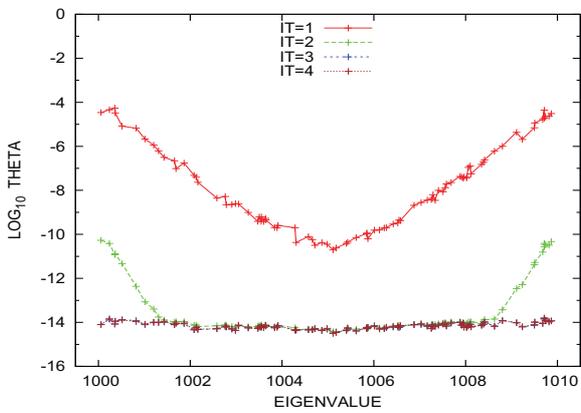


図 A.116 例題 C2 :  $n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12}, m = 140$

表 A.1 例題 R1 :  $\Theta$  の最大値 ( $n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$ )

IT	$m = 80$	$m = 100$	$m = 120$	$m = 140$
1	3.53E-02	2.87E-02	2.12E-02	1.74E-02
2	2.77E-04	5.26E-06	2.30E-06	2.16E-06
3	2.64E-06	8.97E-10	2.10E-10	1.56E-10
4	5.77E-08	3.03E-13	1.18E-13	1.17E-13

表 A.14 例題 C2 :  $\Theta$  の最大値 ( $n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$ )

IT	$m = 100$	$m = 120$	$m = 140$
1	1.89E-03	1.58E-04	5.46E-05
2	9.38E-05	2.18E-07	5.38E-11
3	2.95E-05	1.09E-09	1.52E-14
4	2.20E-06	1.03E-11	1.57E-14