

フィルタ対角化法による固有値問題の近似対の改良

村上 弘^{1,a)}

概要：フィルタ対角化法を用いて、実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区間にあるものを近似して解く。フィルタにはレゾルベントから構成される線形作用素を用いる。するとフィルタの伝達率は各固有ベクトルに対してその固有値だけで決まる関数（伝達関数）になる。フィルタをうまく設計して、指定区間にある固有値に対しては伝達率は有界で一定の値以上となり、区間から離れた固有値に対しては微小となるようにする。

レゾルベントの作用は対応する連立1次方程式を解いて実現する。本報告では、連立1次方程式は行列分解を用いた直接法で解くことを想定している。その場合には問題が大規模になると行列分解の演算量や分解結果を保持する記憶量が計算を実施する上での制約になりがちである。行列分解のコストを減らすためにレゾルベントの数を減らせば、フィルタの遷移域の幅が広がるので、フィルタで処理するベクトルの数を増やすことが必要となるほかに、指定区間内での伝達率の最大最小比が増大するので伝達率の小さい近似固有対の精度が悪くなる。

そこで本報告では、伝達特性がそれほど良くなくても、単一のレゾルベントから構成されたフィルタを正規直交化と組み合わせることで数回反復して用いれば得られる近似固有対の精度の改良ができることを実験により示した。

キーワード：フィルタ対角化, 固有値問題, レゾルベント, 固有対, 改良, 正規直交化

Improvements of Approximate Pairs of Eigenproblem by Filter Diagonalization

HIROSHI MURAKAMI^{1,a)}

Abstract: We solve those approximate eigenpairs of a real symmetric-definite generalized eigenproblem whose eigenvalues are in a specified interval by using the filter diagonalization method. For the filter we use a linear operator constructed from resolvents. Then the filter's transfer rate for each eigenvector is a function (transfer function) of only its eigenvalue. We design the filter well so to make the transfer rate is bounded and above a certain value for those eigenvalues in the specified interval, also to make the transfer rate very small for those eigenvalues which are separated from the interval.

The action of a resolvent is realized by solving the corresponding simultaneous linear equations. In present report, the simultaneous linear equations is assumed to be solved by some direct method by using matrix factorization. Then, when the problem size will be larger, both amounts of arithmetic used to make matrix factors and also storage to keep the factors tend to restrict the calculation to perform. If we reduce the number of resolvents to reduce the cost of matrix decompositions, then transitionbands of the filter become wider which makes the number of vectors to be filtered to increase. Also the max-min ratio of transfer rate inside the interval increases, then accuracies of those approximate eigenpairs whose transfer rates are smaller are reduced.

In this report, by experiments we showed that, even though the transfer property is not so good, a filter composed of a single resolvent can be used to improve accuracies of approximate eigenpairs when it is used iteratively several times in combination with orthonormalizations.

Keywords: filter diagonalization, eigenproblem, resolvent, eigenpair, improvement, orthonormalization

1. はじめに

フィルタ対角化法で実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有対 (λ, \mathbf{v}) で固有値 λ が指定された区間にあるものを近似して求める (文献 [3], [4], [5], [8]). フィルタはレゾルベント $\mathcal{R}(\rho) \equiv (A - \rho B)^{-1}B$ を用いて構成するが、それにはたとえば以下のような種類がある.

- (1) (実数あるいは虚数をシフトとする) レゾルベントの線形結合の実部であるもの (式 (1)) (文献 [7], [8], [13], [15], [16], [17], [19]).

$$\mathcal{F} \equiv c_\infty I + \operatorname{Re} \sum_{j=1}^n c_j \mathcal{R}(\rho_j). \quad (1)$$

- (2) 実数 ρ をシフトとする単一のレゾルベント, その実多項式 P であるもの (式 (2)) (文献 [21], [22], [24], [33]).

$$\mathcal{F} \equiv P(\mathcal{R}(\rho)). \quad (2)$$

- (3) 虚数 ρ' をシフトとする単一のレゾルベント, その虚部の実多項式 P であるもの (式 (3)) (文献 [9], [18], [20], [21], [22], [24], [28], [33]).

$$\mathcal{F} \equiv P(\operatorname{Im}\mathcal{R}(\rho')). \quad (3)$$

- (4) 混合型 (「レゾルベントの線形結合の実部」の実多項式) であるもの (文献 [23], [25], [26], [27], [29], [30], [31]).

レゾルベント $\mathcal{R}(\rho)$ のベクトル \mathbf{x} への作用 $\mathbf{y} \leftarrow \mathcal{R}(\rho)\mathbf{x}$ は, シフト行列 $C(\rho) \equiv A - \rho B$ を係数とする連立 1 次方程式 $C(\rho)\mathbf{y} = B\mathbf{x}$ を解いて実現する (フィルタ計算の主要部).

大規模な連立 1 次方程式を直接法で解く場合には, 行列分解の演算量および特に分解結果を保持するための記憶量が制約になりがちである. レゾルベントの数が最少となるフィルタの構成法としては「実数シフトの単一のレゾルベントの実多項式」と「虚数シフトの単一のレゾルベントの虚部の実多項式」の 2 種類がある. しかしこれらは, レゾルベントのシフトや多項式を調整してもあまり良い伝達特性を得ることができない (たとえば急峻な遮断特性, 通過域での伝達率の均一性は実現が困難である).

レゾルベントの数を増して 2~4 にすれば特性をかなり改善できる (文献 [25], [26], [27], [29], [30], [31]). しかし分解の演算量と分解結果を保持する記憶量がレゾルベントの数に比例して増える. そこで「特性のあまり良くないフィルタ」をもちいて, それの 2~4 回の反復で近似対を改良することを試みる (反復に用いるフィルタが同一のものであれば, 行列分解は再利用できる). しかし単純にフィ

ルタの適用を反復すると, 「必要な固有ベクトル」相互の間の伝達率の不均一さが反復に伴って 2 乗, 3 乗とベキ乗で拡大し, 伝達率の異なる固有ベクトルが同じベクトルの中に混ざりあっていると伝達率が相対的に小さい固有ベクトルは丸めの影響によって情報の精度が減少もしくは消失してしまう. そこでこのような原因により生じる固有ベクトルの精度喪失を抑えるために, 固有ベクトルが混ざりあった形でベクトルの組に含まれている状態から伝達率の違いによりなるべく別のベクトルに含まれるように, フィルタを適用する前にならずベクトルの組に対し B -正規直交化を施すことにする. これは構造解析の分野において「直交化付き 同時逆反復法」と呼ばれている方法 (文献 [1], [2], [10], [11], [12]) の類似であるといえる (その原理は「直交化 (同時) 反復法」(Orthogonal Iteration) [6] である).

そこで本報告では, ランダムに選んだ初期ベクトルの組から始めて, 「 B -正規直交化後にフィルタを適用」を 2~4 回反復して近似固有対の改良を行うことを試みた. ベクトルの組に対する B -正規直交化には, B を計量とする特異値分解 (B -SVD) を用いた.

注意点としては, フィルタのベクトルの組への適用は任意に組を分割してそれらを並列に処理できるが, 直交化はベクトルの組が揃ってからでなければ開始できないため同期がそこで必要になるので並列分散処理用には不便となること, およびベクトルの組に対する直交化の操作は線形な作用ではないことが挙げられる.

2. 単一のレゾルベントを用いた簡易型のフィルタ

今回の実験に用いたフィルタは単一のレゾルベントの多項式型である. しかも設計を簡易にするため, 多項式としてチェビシェフ多項式を利用している. 用いるレゾルベントの数は 1 で最少であるが, そのかわり実現できる伝達特性はあまり良いものにはならない.

いま固有値が区間 $[a, b]$ にある固有対を求めるとする. 区間 $[a, b]$ が固有値分布の下端である場合には, シフト ρ を実数にとることができて, フィルタは以下の式 (4) になる.

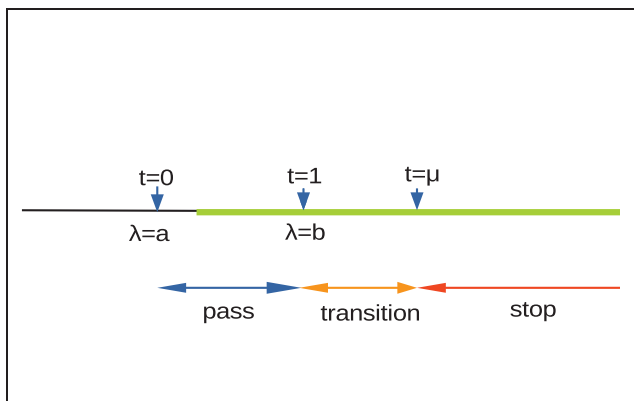
$$\mathcal{F} \equiv g_s T_n(2\gamma \mathcal{R}(\rho) - I). \quad (4)$$

シフト ρ' を虚数にとる場合には, 区間 $[a, b]$ の位置は自由に設定できて, フィルタは以下の式 (5) になる.

$$\mathcal{F} \equiv g_s T_n(2\gamma' \operatorname{Im} \mathcal{R}(\rho') - I). \quad (5)$$

ここで $T_n(x)$ は n 次の Chebyshev 多項式, I は恒等作用素である. そうして Im は複素ベクトルの虚部を与える作用素であり, γ や γ' は実数の定数である. そうして g_s は阻止域における伝達関数の大きさの上限になる.

¹ 首都大学東京数理科学専攻
Department of Mathematical Sciences, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Tokyo 192-0397, Japan
a) mrkmhrsh@tmu.ac.jp



通過域 $t \in [0, 1]$; 遷移域 $t \in (1, \mu)$; 阻止域 $t \in [\mu, \infty)$

図 1 固有値 λ と正規化座標 t の関係 (下端固有値用の場合)
緑の太線部分は固有値の存在可能な範囲

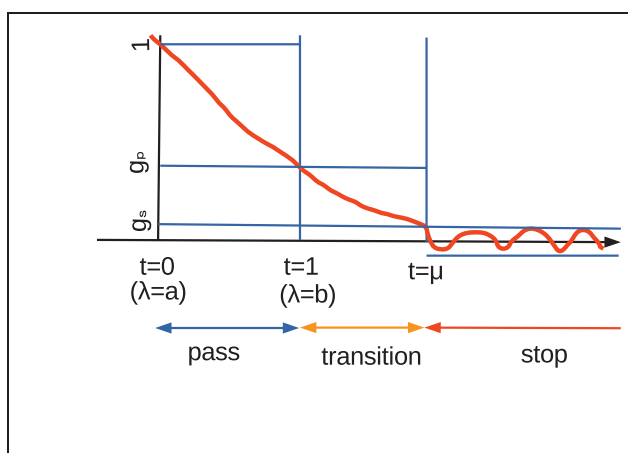


図 2 伝達関数 $g(t)$ の概形 (下端固有値用の場合)

3. 単一のレゾルベントを用いた簡易型のフィルタの設計

本章では、単一のレゾルベントの多項式型であって多項式としてチェビシェフ多項式を用いる簡易型のフィルタ、その設計法の例としてパラメタの3つ組 (n, μ, g_s) を指定する場合について示す (異なる指定方法、たとえば3つのパラメタとして (μ, g_s, g_p) を指定してそれに近いパラメタの組として実現することもできる)。ここで n は Chebyshev 多項式の次数であり、 μ は遷移域と阻止域の境界位置の規格化座標であり、 g_s は阻止域での伝達関数の大きさの上限値である。伝達関数の通過域における最大値は1で最小値は g_p である。以下に用いたフィルタの構成法を具体的に示す。

3.1 シフトに実数を用いる場合 (下端固有対用)

区間 $[a, b]$ が固有値分布の下端であり、 a は最小固有値 λ_{\min} 以下の値であるとする。そのとき与えられたパラメタの3つ組 (n, μ, g_s) から以下の式 (6) を用いて、レゾルベントのシフトである実数 ρ とレゾルベントの係数である実数 γ (および g_p) を計算する。

$$\begin{cases} \sigma \leftarrow \mu / \sinh \left(\frac{1}{2n} \cosh^{-1} \frac{1}{g_s} \right), \\ \rho \leftarrow a - (b - a) \sigma, \\ \gamma \leftarrow (b - a)(\sigma + \mu), \\ g_p \leftarrow g_s \cosh \left\{ 2n \sinh^{-1} \sqrt{(\mu - 1)/(1 + \sigma)} \right\}. \end{cases} \quad (6)$$

すると、フィルタ \mathcal{F} は以下の式 (7) により与えられる。

$$\mathcal{F} \equiv g_s T_n (2\gamma \mathcal{R}(\rho) - I). \quad (7)$$

いま固有値の座標 λ に対する正規化座標 t を、 $\lambda \in [a, b]$ を $t \in [0, 1]$ に移す線形変換 $t \equiv (\lambda - a)/(b - a)$ により定義する。そのとき、引数が t の伝達関数 $g(t)$ は以下の式 (8) で与えられ、引数が λ の伝達関数 $f(\lambda)$ は以下の式 (9) で与えられる。

$$g(t) = g_s T_n \left(2 \frac{\mu + \sigma}{t + \sigma} - 1 \right). \quad (8)$$

$$f(\lambda) = g_s T_n \left(2\gamma \frac{1}{\lambda - \rho} - 1 \right). \quad (9)$$

3.2 シフトに虚数を用いる場合 (中間固有対用)

シフトに虚数を用いる場合は、区間 $[a, b]$ の位置は自由に設定できる。与えられたパラメタの3つ組 (n, μ, g_s) から以下の式 (10) を用いて、レゾルベントのシフトである虚数 ρ' とレゾルベントの係数である実数 γ' (および g_p) を計算する。

$$\begin{cases} \sigma \leftarrow \mu / \sinh \left(\frac{1}{2n} \cosh^{-1} \frac{1}{g_s} \right), \\ \rho' \leftarrow \frac{a+b}{2} + \left(\frac{b-a}{2} \right) \sigma \sqrt{-1}, \\ \gamma' \leftarrow \left(\frac{b-a}{2} \right) \frac{\mu^2 + \sigma^2}{\sigma}, \\ g_p \leftarrow g_s \cosh \left\{ 2n \sinh^{-1} \sqrt{(\mu^2 - 1)/(1 + \sigma^2)} \right\}. \end{cases} \quad (10)$$

すると、フィルタ \mathcal{F} は以下の式 (11) で与えられる。

$$\mathcal{F} \equiv g_s T_n (2\gamma' \text{Im} \mathcal{R}(\rho') - I). \quad (11)$$

いま固有値の座標 λ に対する正規化座標 t を、 $\lambda \in [a, b]$ を $t \in [-1, 1]$ に移す線形変換 $\lambda \equiv (a + b)/2 + (b - a)t/2$ により定義する。そのとき引数 t の伝達関数 $g(t)$ は以下の式 (12) で与えられ、引数 λ の伝達関数 $f(\lambda)$ は以下の式 (13) で与えられる。

$$g(t) = g_s T_n \left(2 \frac{\mu^2 + \sigma^2}{t^2 + \sigma^2} - 1 \right). \quad (12)$$

$$f(\lambda) = g_s T_n \left(2\gamma' \text{Im} \frac{1}{\lambda - \rho'} - 1 \right). \quad (13)$$

4. フィルタ対角化法の概略

行列 A, B が実対称で B が正定値である一般固有値問題 $Av = \lambda Bv$ の固有対 (λ, \mathbf{v}) で固有値 λ が区間 $[a, b]$ にあるものを解く。固有値がその区間に入る固有ベクトルは良く通過させるが、区間から離れた固有ベクトルはできるだけ阻止するようにうまく特性を調整した線形作用素をフィルタとして用いる。そのようなフィルタは区間 $[a, b]$ 近傍に固有値を持つ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になる。フィルタを適用して得られたベクトルを十分多く集めてそれから分析により不変部分空間の近似の基底をうまく構成し、その基底に対して Rayleigh-Ritz 法を適用して必要な近似対を得る [14]。

5. 正規直交化付きフィルタ適用の反復による近似固有対の計算法

正規直交化付きでフィルタの適用を反復することにより改良された近似固有対を求める計算法を以下の図 3 に示す。話を簡単にするために同一のフィルタを IT 回 (2~4 回) 適用するものとする。毎回のフィルタ適用前に B -正規直交化の処理をベクトルの組に対して施す。 B -正規直交化には閾値付きの B -特異値分解 (B -SVD) を用いた。閾値をマシンイプシロンの 100 倍と設定して、閾値未満の特異値を持つ特異ベクトルを切断した。

(1) フィルタ \mathcal{F} の準備として、ここであらかじめ 1 回だけソフト行列 $C(\rho) \equiv A - \rho B$ を行列分解しておく；

(2) $Y^{(0)} \leftarrow$ (乱数から生成されたベクトル m 個の組)；

(3) for $i := 1, 2, \dots, \text{IT do}$
 $X^{(i)} \leftarrow (Y^{(i-1)})$ の B -正規直交化)；
 $Y^{(i)} \leftarrow \mathcal{F} X^{(i)}$ ；
enddo

注：途中の B -正規直交化においてベクトルの組 $Y^{(i-1)}$ の階数不足により $X^{(i)}$ の階数が切断を受けて低下したら、その後の $X^{(i)}$ や $Y^{(i)}$ のベクトルの数はその低下した階数へ変更する。

(4) 上記のステップ (3) で得られた最後の X と Y について、以下のようにする。
「必要な固有値全部を持つ不変部分空間」の近似空間の基底 Z を Y の列の線形結合で構成する (その際に X およびフィルタの伝達特性の値 g_s と g_p の情報も用いる) [14]。

(5) 基底 Z に Rayleigh-Ritz 法を適用して得られた Ritz 対を、元の一般固有値問題の近似対とする。

図 3 正規直交化付きフィルタ適用の反復による対角化の手順

6. 例題とした実対称定値一般固有値問題

例題として用いた実対称定値一般固有値問題 (14) は、1 辺の長さが π の立方体領域において、零ディリクレ境界条件を課した 3 次元ラプラシアン固有値方程式 (15) を有限要素法 (FEM) で離散化して得られたものである。

$$Av = \lambda Bv. \quad (14)$$

$$-\nabla^2 \phi(x, y, z) = \lambda \phi(x, y, z). \quad (15)$$

FEM の有限要素分割は、立方体の各辺方向を N_1+1, N_2+1, N_3+1 に等分割して得られる区間の直積である直方体とした (図 4)。

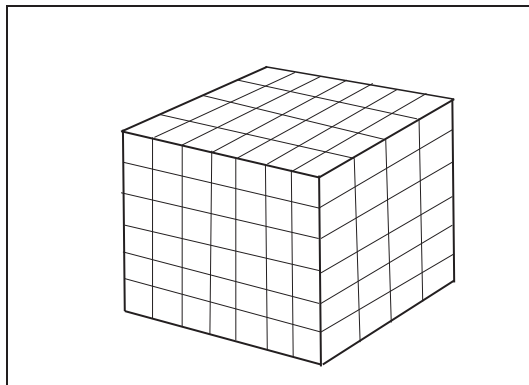


図 4 有限要素分割の概念図. $(N_1, N_2, N_3) = (3, 5, 6)$ の例

各有限要素内の展開の基底関数には各辺方向の 3 重線形関数を用いた。すると A と B の行列次数 N は $N_1 N_2 N_3$ となる。いま $N_1 \leq N_2 \leq N_3$ であるとして、 A や B の帯幅が小さくなるように基底関数に番号を付けると、半帯幅 w_L (対角要素を含まず) は $1 + N_1 + N_1 N_2$ になる。

離散化で得られた一般固有値問題にフィルタ対角化法を適用して、指定された区間 $[a, b]$ に固有値が含まれる固有対を近似して求める。

この例題の固有値は簡単な数式の計算により厳密値が求められる。そうしてある区間に含まれる固有値の数も、厳密値を作って区間に含まれるものを数えることにより求めることができる。

6.1 例題の固有値に対する厳密な値を与える式

1 辺の長さ π の立方体の各辺の方向を $N_1 + 1, N_2 + 1, N_3 + 1$ に等分割するとき、例題の 3 次元問題の固有値は以下の式 (16) で表された添字の組 (k_1, k_2, k_3) で識別される各方向ごとの 1 次元問題の固有値の和になる。

$$E_{(k_1, k_2, k_3)}^{[N_1, N_2, N_3]} = \mathcal{E}_{k_1}^{[N_1]} + \mathcal{E}_{k_2}^{[N_2]} + \mathcal{E}_{k_3}^{[N_3]}, \quad k_i = 1, 2, \dots, N_i \quad (16)$$

ここで各方向の 1 次元問題の固有値は以下の式 (17) で与えられる。ただし $\theta_k \equiv \pi k / (N + 1)$ である。

$$\mathcal{E}_k^{[N]} = \frac{6k^2 (\sin \theta_k / \theta_k)^2}{(1 + \cos \theta_k)(2 + \cos \theta_k)}, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (17)$$

7. 近似固有対の相対残差について

以下の式 (18) で近似対 (λ, \mathbf{v}) の相対残差 Θ を定義する. その値は固有ベクトル \mathbf{v} の規格化にはよらず, また行列 A と B に共通の非零定数を乗じてても不変である.

$$\Theta \equiv \frac{\|A\mathbf{v} - \lambda B\mathbf{v}\|}{\|\lambda B\mathbf{v}\|}. \quad (18)$$

今回はベクトルのノルム $\|\cdot\|$ にはユークリッドノルムを用いた. 相対残差 Θ が小さいほど, 得られた近似固有対の近似は良いものであるとする.

この相対残差 Θ を計算する手間は行列 A と B が疎であるほど少なくなる. さらに複数の近似固有対に対する相対残差を一度にまとめて計算するなら, 行列 A と B の記憶に対する走査回数をそれぞれ 1 回ずつにすることができる.

8. 実験とその結果の例について

実験とその結果の例については, 図表の量が多いため, すべての記述を末尾の付録へ移動した.

9. おわりに

実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有対で指定された区間に固有値があるものをフィルタ対角化法を用いて近似して求める. フィルタはレゾルベントを用いて構成する. レゾルベントを与える連立 1 次方程式を直接法で解く場合には, 大規模な問題では行列分解の計算量や特に分解結果の記憶量が計算を実施する上での制約になりがちである. そこでそれらの制約を緩和するために, レゾルベントの数が最少になるフィルタとして「単一のレゾルベントの多項式型のフィルタ」を用いると, その伝達特性はあまり良いものにはできないため, フィルタ対角化法で得られる近似固有対の相対残差をこれまで十分に小さくすることはできていなかった [33].

そこで今回の実験では「特性のあまり良くないフィルタ」を間に B -正規直交化を入れて 2~4 回反復することで近似固有対の改良を行うことを試みた. 用いたフィルタの特性の良さの程度にもよるが, (IEEE754 の 64bit の倍精度計算では) フィルタを 2 回, 3 回あるいは 4 回適用することで相対残差の十分小さい近似固有対が得られることを確かめた. つまり, 伝達特性をあまり良くすることができない単一のレゾルベントで構成されたフィルタを用いた場合でも, B -正規直交化付きでフィルタを数回反復することにより品質の良い近似固有対が得られる (得られた近似固有対の品質を相対残差を計算して確認する手間は, 固有値方程式の係数行列が疎であるほど少ない).

(本報告は前回の報告 [32] に対して, 新たな例題に対する計算結果の例を加えたほか, 四倍精度計算による計算結果の例も追加したものです.)

参考文献

- [1] Rutishauser, H. : Computational aspects of F. L. Bauer's simultaneous iteration method, *Numer. Math.*, Vol.13, No.1, pp.4-13 (1969).
- [2] Rutishauser, H. : Simultaneous Iteration Method for Symmetric Matrices, *Handbook for Automatic Computation*, Springer-Verlag, pp.284-302 (1971). (Reprinted from *Numer. Math.*, Vol.16, pp.205-223 (1970).)
- [3] Toledo, S. and Rabani, R. : Very Large Electronic Structure Calculations Using an Out-of-Core Filter-Diagonalization Method, *J. Comput. Phys.*, Vol.180, No.1, pp.256-269 (2002).
- [4] Polizzi, E. : A Density Matrix-based Algorithm for Solving Eigenvalue Problems, *Phys. Rev. B*, Vol.79, No.1, pp.115112-115117 (2009).
- [5] Galgon, M., Krämer, L. and Lang, B. : The FEAST Algorithm for Large Eigenvalue Problems, *PAMM- Proc. Appl. Math. Mech.*, Vol.11, pp.747-748 (2011).
- [6] Golub, G.H. and Van Loan, C.F.: *Matrix Computations*, 4th Ed., The John Hopkins Univ. Press (2013). (§8.2.4: 'Orthogonal Iteration').
- [7] Austin, A.P. and Trefethen, L.N. : Computing Eigenvalues of Real Symmetric Matrices with Rational Filters in Real Arithmetic, *SIAM J. Sci. Comput*, Vol.37, No.3, pp.A1365-A1387 (2015).
- [8] Güttel, S., Polizzi, E., Tang, P.T.P. and Viaud, G. : Zolotarev Quadrature Rules and Load Balancing for the FEAST Eigensolver, *SIAM J. Sci. Comput*, Vol.37, No.4, pp.A2100-A2122 (2015).
- [9] Murakami, H. : 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, pp.205-232 (2018).
- [10] 村田 健郎, 小国 力, 唐木 幸比古 : 「スーパーコンピュータ : 科学技術計算への適用」, 丸善 (1985). (§8.1:ベキ乗法一族, §8.3:レーリー・リッツつきの同時逆反復法, §8.5:一般固有値問題)
- [11] 村田 健郎, 三好 俊郎, ドンガラ, J.J., 長谷川 秀彦 : 「行列計算ソフトウェア: WS, スーパーコン, 並列計算機」, 丸善 (1991). (§11.2:ベキ乗法一族, §11.4:レーリー・リッツ法つきの同時逆反復法, §11.8:対称行列用の一般固有値問題)
- [12] 石上 裕之, 木村 欣司, 中村 佳正 : 再直交化付ブロック逆反復法による固有ベクトルの並列計算, *HPACS2014 論文集*, pp.65-75 (2013).
- [13] 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, pp.1-21 (2010).
- [14] 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, pp.1-14 (2011).
- [15] 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, pp.1-8 (2012).
- [16] 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*, pp.81-82 (2012).
- [17] 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, pp.57-72 (2014).
- [18] 村上 弘 : レゾルベントの多項式をフィルタとして用いた対角化法について, *情報処理学会研究報告*, Vol.2014-HPC-146, No.13, pp.1-4 (2014).
- [19] 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, *HPACS2015 シンポジウム論文集*, Vol.2015, pp.38-51 (2015).
- [20] 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, pp.1-16 (2015).
- [21] 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, pp.1-13 (2016).
- [22] 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, pp.1-27 (2016).
- [23] 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, pp.1-10 (2017).
- [24] 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, *数理解析研究所講義録*, No.2019, pp.96-112 (2017).
- [25] 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, pp.1-13 (2017).
- [26] 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, pp.1-32 (2017).
- [27] 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, pp.1-13 (2017).
- [28] 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, *数理解析研究所講義録*, No.2054, pp.168-181 (2017).
- [29] 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, pp.1-34 (2017).
- [30] 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, pp.1-21 (2018).
- [31] 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, pp.1-17 (2018).
- [32] 村上弘 : 「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」, *情報処理学会研究報告*, Vol.2018-HPC-167, No.29, pp.1-31 (2018).
- [33] 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)*, Vol.12, No.2, pp.1-26 (2019) (accepted).

付 録

A.1 正規直交化付きフィルタ適用の反復の実験例

A.1.1 計算機システムとプログラミング環境

CPUはIntel Corei7-5960X (8コア, クロック3.0GHz, L3 キャッシュ20MiB, AVX2 拡張命令セット)で, Hyper-Thread 機能や Turbo-Boost 機能は BIOS のメニューでオフにしてある. 主記憶はDDR4-2133MHz (PC4-17000)でクアドチャネル, 16GiB のモジュールを8個使用して合計の主記憶容量は128GiBである. OSはCentOS 7 for x86_64 (64bit版)である.

プログラムはFortran90とOpenMPディレクティブを入れてコーディングをし, コンパイラはIntel Fortran v15.0.0 for x86_64で, コンパイラのオプションに"-fast-openmp"を指定してOpenMPによる8スレッド並列で実行した.

A.1.2 実験に用いたフィルタについて

フィルタはその伝達特性をパラメタの3つ組(n, μ, g_s)を用いて指定した. 簡単のために, 以下の各実験例ではすべて $\mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$ とした. そうして1つの反復の中では毎回同一のフィルタを繰り返し用いた.

下端固有対用フィルタ

下端固有対用のフィルタは, シフトが実数である単一のレゾルベントの多項式で, 多項式として n 次のチェビシェフ多項式を用いた簡易型のものを用いた. 伝達関数の形状を代表するパラメタの値は $\mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$, そうして g_p については以下の表A.1のようになる. 下端固有対用フィルタの固有値の正規化座標 t を引数とする伝達関数の大きさ $|g(t)|$ のグラフを図A.1に示す.

中間固有対用フィルタ

中間固有対用のフィルタは, シフトが虚数である単一のレゾルベントの虚部の多項式で, 多項式として n 次のチェビシェフ多項式を用いた簡易型とした. 伝達関数の形状を代表するパラメタの値は $\mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$, そうして g_p については以下の表A.2のようになる. 中間固有対用フィルタの固有値の正規化座標 t を引数とする伝達関数の大きさ $|g(t)|$ のグラフを図A.2に示す.

表 A.1 下端固有対用フィルタの g_p の値 ($\mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$)

n	g_p
8	8.79884×10^{-9}
10	4.20592×10^{-8}
15	4.17183×10^{-7}
20	1.21554×10^{-6}

表 A.2 中間固有対用フィルタの g_p の値 ($\mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$)

n	g_p
8	5.90737×10^{-7}
10	4.20226×10^{-6}
15	5.55703×10^{-5}
20	1.63167×10^{-4}

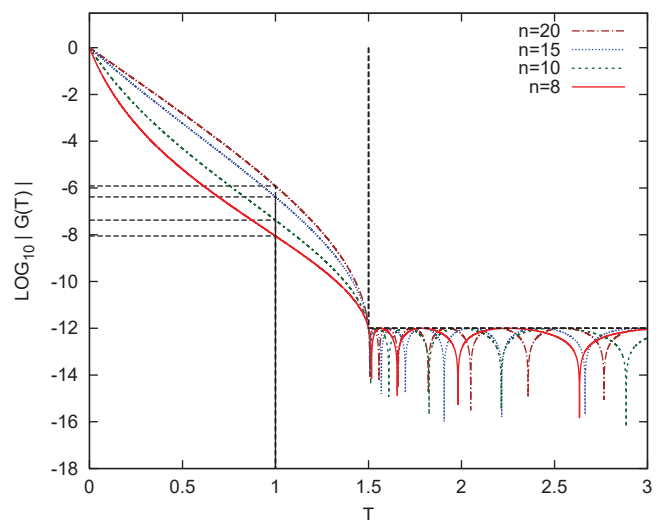


図 A.1 下端固有対用のフィルタの伝達関数の大きさ $|g(t)|$ ($\mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$)

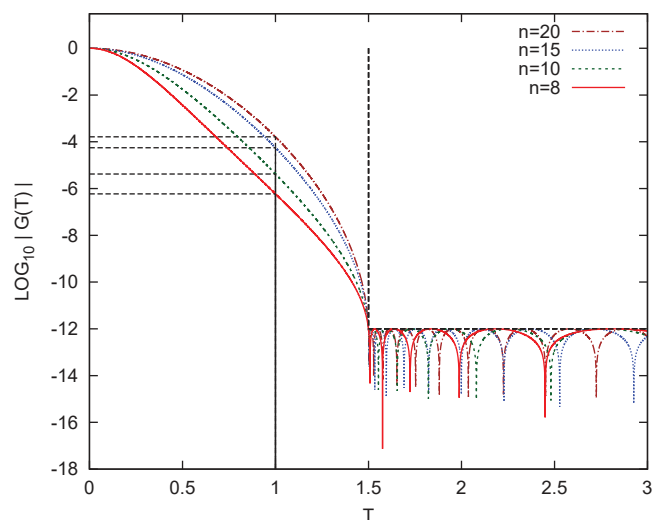


図 A.2 中間固有対用フィルタの伝達関数の大きさ $|g(t)|$ ($\mu = 1.5, g_s = 10^{-12}$, 右半分)

A.1.3 例題 R1：下端固有対を求めた例その1

この例題では FEM の要素分割を $(N_1, N_2, N_3) = (20, 30, 40)$ とした。それから導かれる一般固有値問題は係数行列 A と B の次数 N が 24,000 で下帯幅 w_L が 621 の小規模な固有値問題である。この問題の固有対で固有値が区間 $[a, b] = [0, 30]$ にあるもの（下端固有対）をすべて求める。そのような固有対は全部で 54 個ある。そうして固有値が通過域と遷移域を合併した区間 $[0, 45]$ にある固有対は全部で 106 個あるので、フィルタを適用するベクトルの数 m は 106 よりも多くすることが望ましい。

A.1.3.1 例題 R1：フィルタの次数 n が 8 の場合

フィルタの次数 n を 8 とする。図 A-3、図 A-4、図 A-5、図 A-6 にそれぞれ、ベクトルの数 m を 80, 100, 120, 140 とした各場合について、反復回数 IT を 1 から 4 まで変えながら、近似固有対の相対残差の分布をグラフにプロットしたものを示す。これらのグラフから、 m が 100 未満の場合と 100 以上の場合とでは反復に対する挙動の違いが見て取れる。ベクトルの数 m が 120 以上の場合には、相対残差の分布は反復 4 回目で最大 10^{-13} 程度以下に収まり、近似対の改良は完了している。

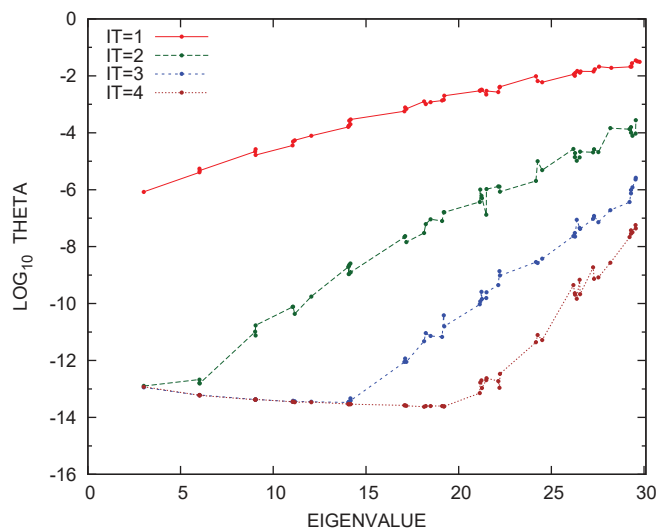


図 A-3 例題 R1：相対残差 ($n = 8, m = 80$) ($m > 106$ が望ましい)

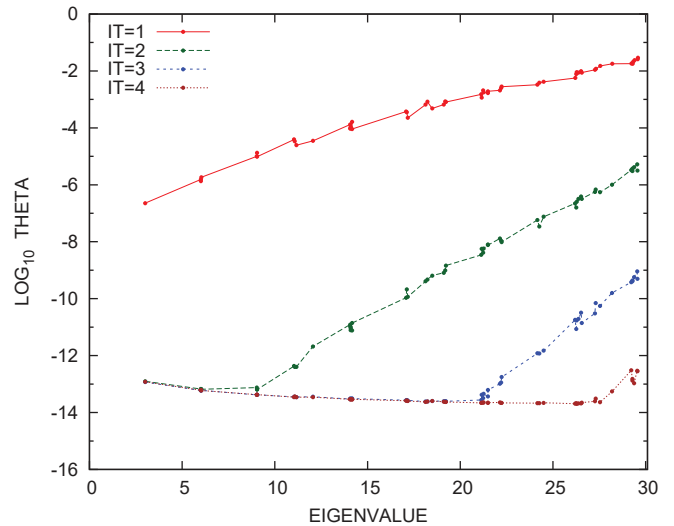


図 A-4 例題 R1：相対残差 ($n = 8, m = 100$) ($m > 106$ が望ましい)

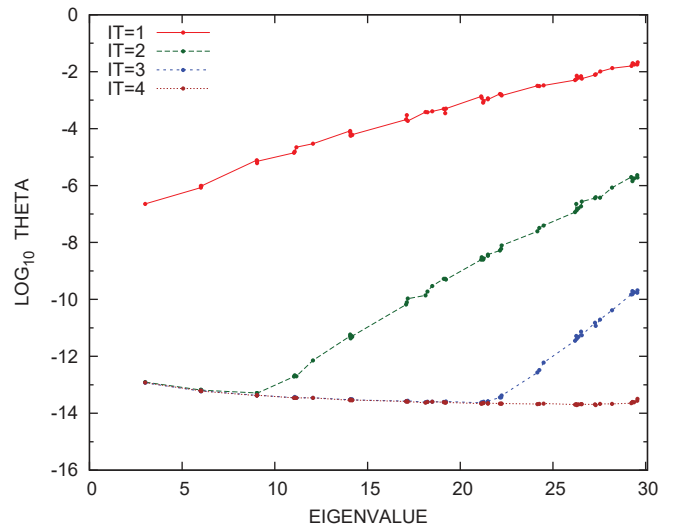


図 A-5 例題 R1：相対残差 ($n = 8, m = 120$)

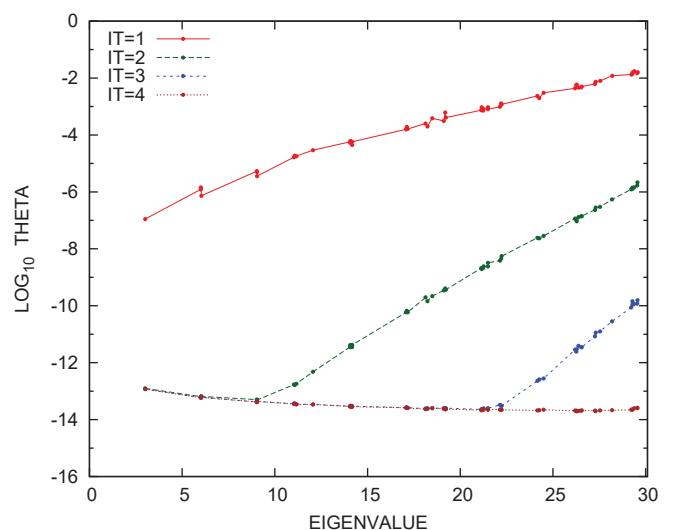


図 A-6 例題 R1：相対残差 ($n = 8, m = 140$)

A.1.3.2 例題 R1：フィルタの次数 n が 10 の場合

フィルタの次数 n を 10 とする。図 A.7 と図 A.8 にそれぞれ、ベクトルの数 m が 100 と 150 の各場合について、反復回数 IT を 1 から 4 までについて、近似固有対の相対残差 θ の分布をグラフにプロットしたものを示す。これらのグラフから、近似対の改良はどちらの場合にも反復 4 回目で完了していることがわかる。

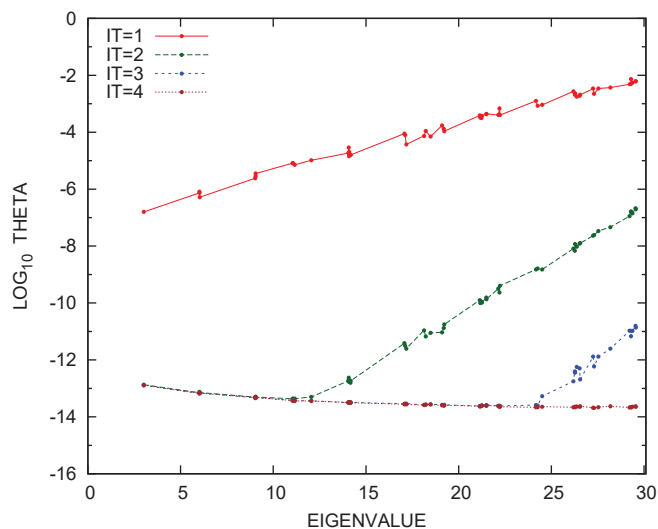


図 A.7 例題 R1：相対残差 ($n = 10, m = 100$) ($m > 106$ が望ましい)

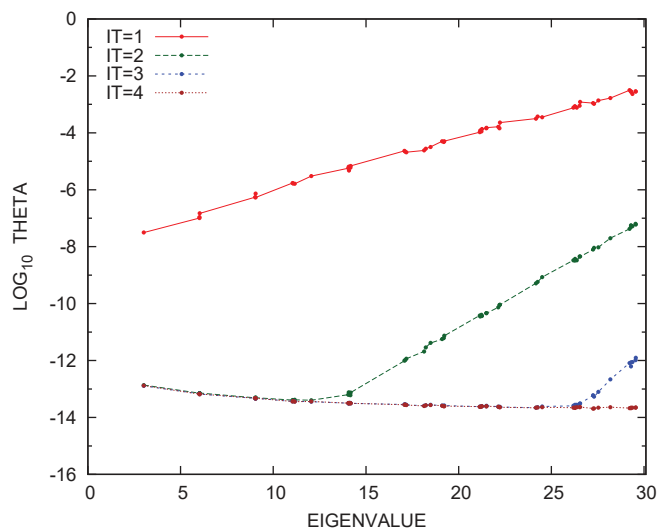


図 A.8 例題 R1：相対残差 ($n = 10, m = 150$)

A.1.3.3 例題 R1：フィルタの次数 n が 15 の場合

ここではフィルタの次数 n を 15 とする。図 A.9 と図 A.10 にそれぞれ、ベクトルの数 m を 100 と 150 とした各場合について、反復回数 IT が 1 から 4 までについて、近似固有対に対する相対残差 θ の分布をグラフにプロットしたものを示す。これらのグラフから、近似対の改良は、ベクトルの数 m が 100 の場合には反復 3 回目ではほぼ完了、反復 4 回目で完全に完了、そうして m が 150 の場合には反復 3 回目で完了で、完了したときの相対残差の最大値は約 3×10^{-13} であることがわかる。

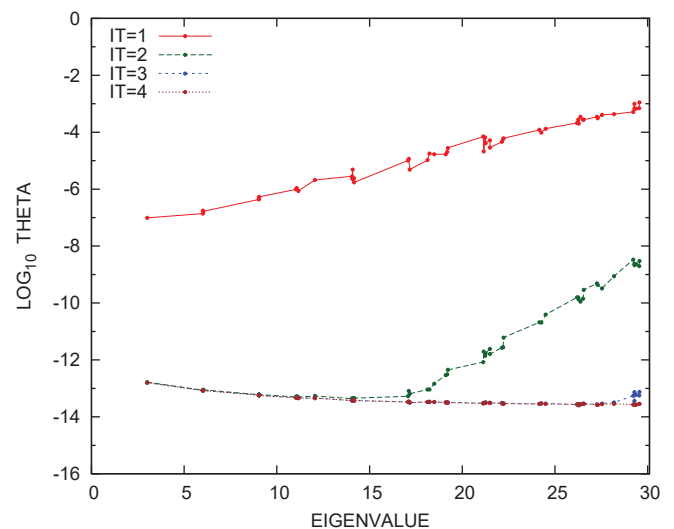


図 A.9 例題 R1：相対残差 ($n = 15, m = 100$) ($m > 106$ が望ましい)

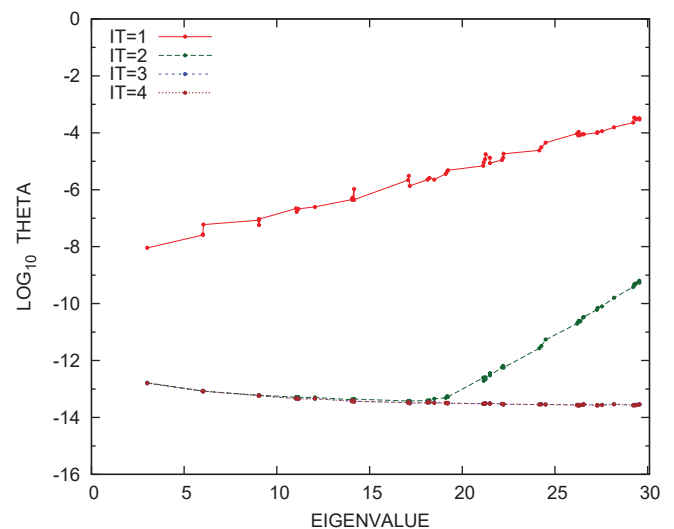


図 A.10 例題 R1：相対残差 ($n = 15, m = 150$)

A.1.3.4 例題 R1：相対残差の最大値

図 A-3, 図 A-4, 図 A-5, 図 A-6 はそれぞれフィルタの次数 n が 8, 10, 15, 20 の各場合に対してベクトルの数 m と反復回数 IT に対する相対残差の最大値を表にしたものである。

表 A-3 例題 R1：相対残差の最大値 ($n = 8$)

IT	$m = 80$	$m = 100$	$m = 120$	$m = 140$
1	3.5E-02	2.9E-02	2.1E-02	1.7E-02
2	2.8E-04	5.3E-06	2.3E-06	2.2E-06
3	2.6E-06	9.0E-10	2.1E-10	1.6E-10
4	5.8E-08	3.0E-13	1.2E-13	1.2E-13

表 A-4 例題 R1：相対残差の最大値 ($n = 10$)

IT	$m = 80$	$m = 100$	$m = 120$	$m = 140$
1	1.1E-02	7.3E-03	4.8E-03	3.3E-03
2	1.0E-04	2.1E-07	9.6E-08	7.6E-08
3	4.5E-07	1.6E-11	2.3E-12	1.3E-12
4	1.3E-08	1.3E-13	1.3E-13	1.3E-13

表 A-5 例題 R1：相対残差の最大値 ($n = 15$)

IT	$m = 80$	$m = 100$	$m = 120$	$m = 140$
1	4.8E-03	1.1E-03	8.5E-04	4.3E-04
2	3.4E-05	3.3E-09	8.8E-10	6.8E-10
3	6.2E-08	1.6E-13	1.6E-13	1.6E-13
4	3.5E-10	1.6E-13	1.6E-13	1.6E-13

表 A-6 例題 R1：相対残差の最大値 ($n = 20$)

IT	$m = 80$	$m = 100$	$m = 120$	$m = 140$
1	2.6E-03	5.5E-04	2.4E-04	1.4E-04
2	9.3E-06	5.0E-10	1.3E-10	1.1E-10
3	5.9E-08	2.0E-13	1.9E-13	2.0E-13
4	8.0E-11	1.9E-13	2.0E-13	1.9E-13

図 A-11, 図 A-12, 図 A-13 はそれぞれ、フィルタの次数 n が 8, 10, 15 の各場合について、横軸に反復回数 IT を 1 から 4 までとり、縦軸に指定した区間に固有値を持つ近似固有対の相対残差の最大値をとって、ベクトルの数 m を 80, 100, 120, 140 と変えてグラフにプロットしたものである。これら 3 つの図から、ベクトルの数 m が 100 未満の場合と 100 以上の場合とでは反復回数 IT の増加にともなう相対残差の最大値の減少の様子がかなり異なっていること、そうしてベクトルの数 m が 100 と 120 とでは違いは小さく、 m が 120 と 140 の場合はほぼ一致していることがわかる。

これらのグラフから、フィルタの次数 n が 15 のとき m が 100 以上であれば、近似対の改良は反復 3 回目で完了して、相対残差の最大値は約 10^{-13} である。

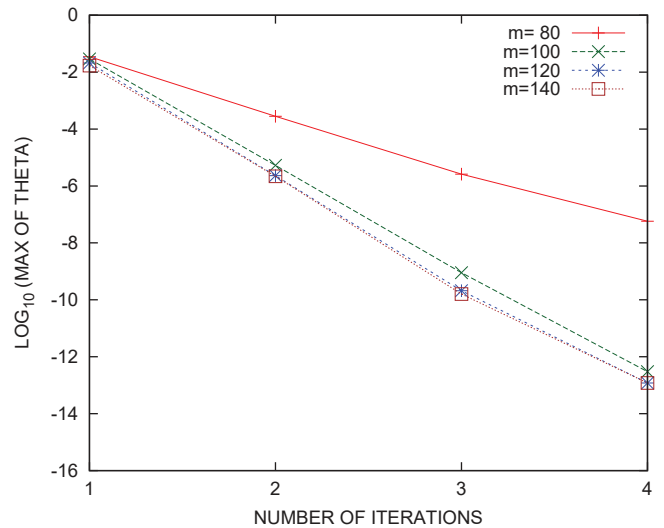


図 A-11 例題 R1：相対残差の最大値 ($n = 8$) ($m > 106$ が望ましい)

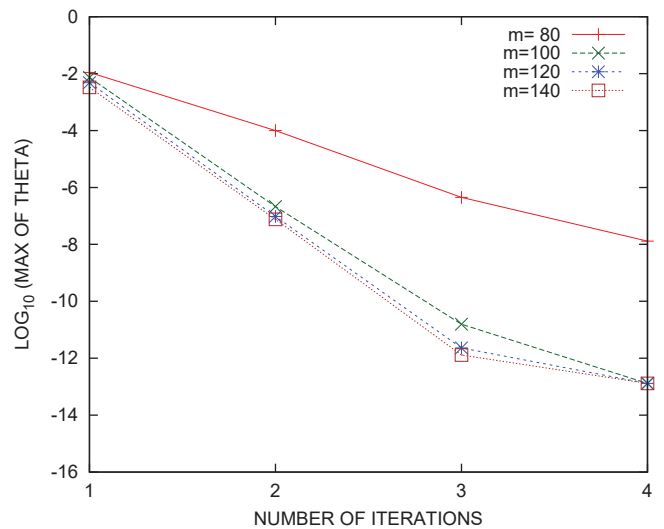


図 A-12 例題 R1：相対残差の最大値 ($n = 10$) ($m > 106$ が望ましい)

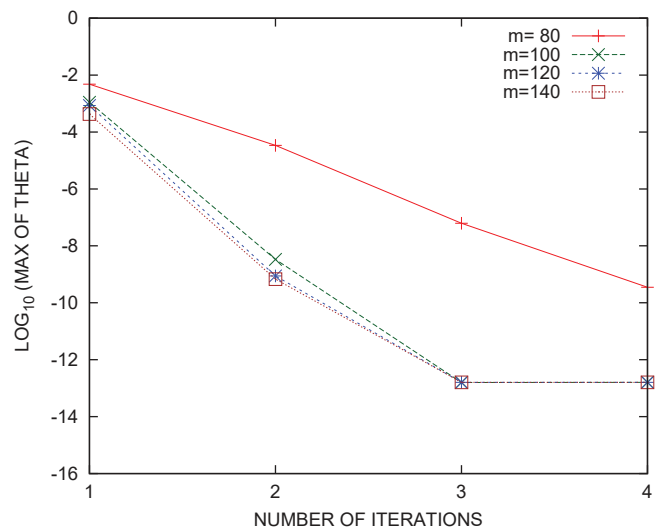


図 A-13 例題 R1：相対残差の最大値 ($n = 15$) ($m > 106$ が望ましい)

A.1.4 例題 R2：下端固有対を求めた例その2

この例題 R2 の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、係数行列 A と B の次数 N は 24,000 で下帯幅 w_L は 621 の小規模な問題である。この問題の固有対で区間 $[a, b] = [0, 100]$ に固有値があるもの（下端固有対）をすべて求める。そのような固有対は全部で 378 個ある。そして固有値が通過域と遷移域を合併した区間 $[a, b'] = [0, 150]$ にある固有対は全部で 700 個あるので、フィルタを適用するベクトルの数 m は 700 よりも多くすることが望ましい。

A.1.4.1 例題 R2：フィルタの次数 n が 8 の場合

フィルタの次数 n を 8 とする。図 A-14、図 A-15、図 A-16、図 A-17 はそれぞれ、フィルタを適用するベクトルの数 m を 500, 600, 700, 800 とした各場合についての、正規直交化付きフィルタ適用の反復回数 IT を 1 から 4 まで変えて、得られた近似固有対の相対残差をプロットしたグラフである。

まず m が 500 の場合（図 A-14）には反復 4 回目でも 60 より大きい固有値を持つ近似対については相対残差 θ はまだ十分には小さくなっていない。さらに m が 600 の場合（図 A-15）にも反復 4 回目でも固有値が 80 よりも大きい近似対についてはまだ相対残差が十分小さくなっていない。そして m が 700 と 800 の場合に（図 A-16 と図 A-17）、相対残差の指定区間 $[0, 100]$ における最大値は反復 4 回目で 10^{-13} 程度以下になっている。

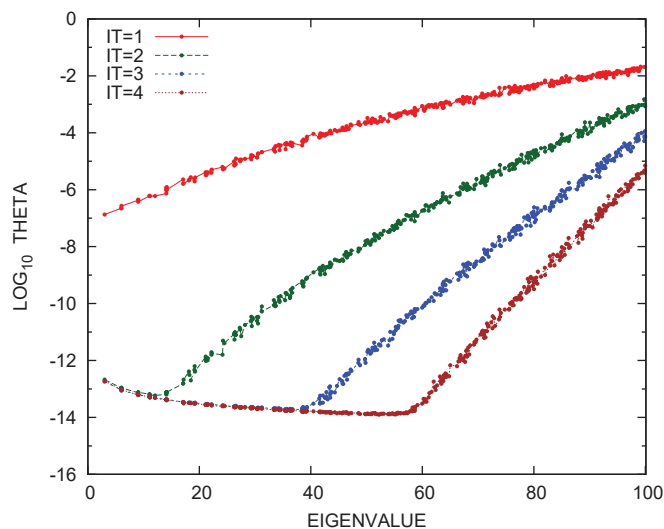


図 A-14 例題 R2：相対残差 ($n = 8, m = 500$) ($m > 700$ が望ましい)

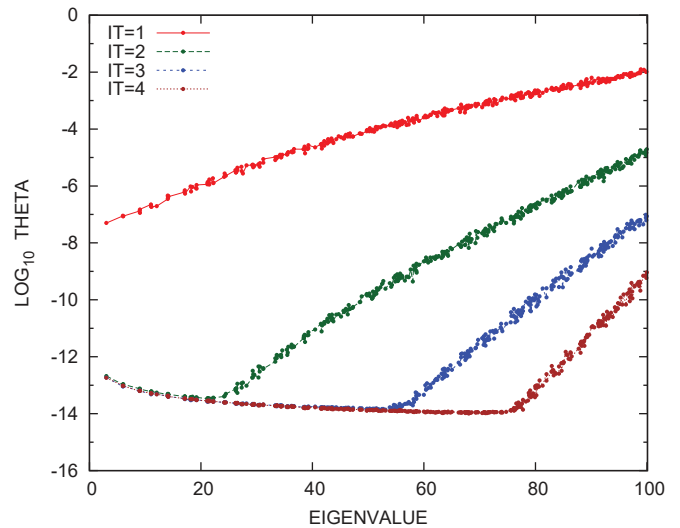


図 A-15 例題 R2：相対残差 ($n = 8, m = 600$) ($m > 700$ が望ましい)

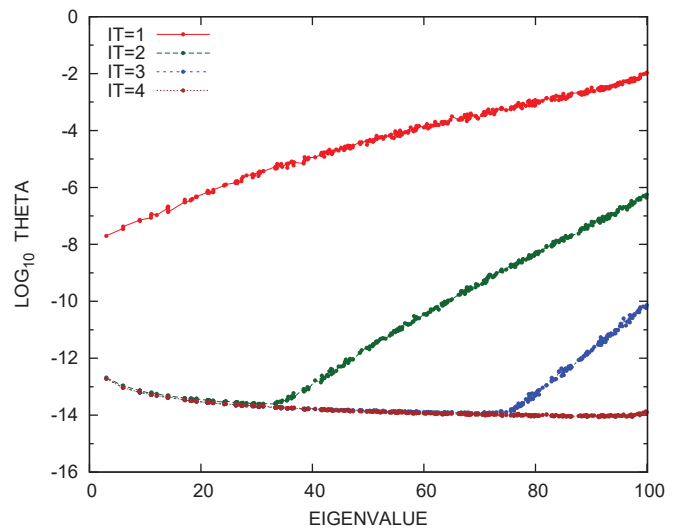


図 A-16 例題 R2：相対残差 ($n = 8, m = 700$) ($m > 700$ が望ましい)

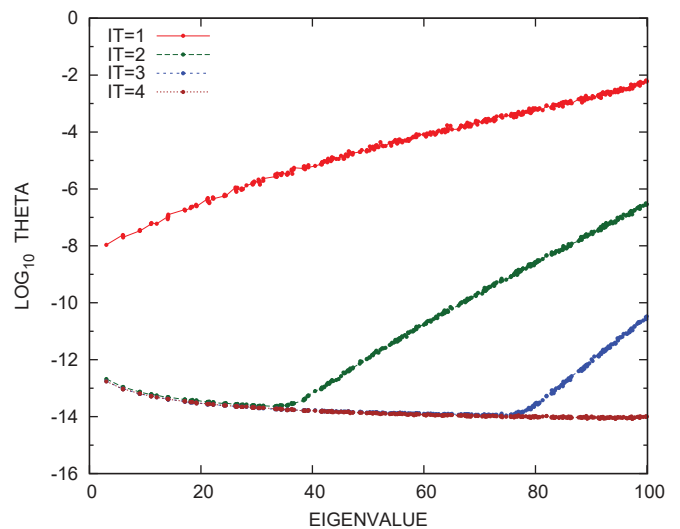


図 A-17 例題 R2：相対残差 ($n = 8, m = 800$)

A.1.4.2 例題 R2：ベクトルの数 m が 700 の場合

フィルタを適用するベクトルの数 m を 700 とした (m は 700 よりもある程度多くすることが望ましいのであるが)。そのとき図 A-16, 図 A-18, 図 A-19, 図 A-20 はそれぞれ, フィルタの次数 n をそれぞれ 8, 10, 15, 20 とした各場合について, 正規直交化付きフィルタ適用の反復回数 IT を 1 から 4 まで変えて, 得られた近似固有対の相対残差 Θ の値をプロットしたグラフである。

これらのグラフから, 近似対の改良は次数 n が 8 と 10 のときは反復 4 回目で完了でそのときの相対残差の最大値が約 3×10^{-13} であり, n が 15 と 20 のときは反復 3 回目で完了でそのときの相対残差の最大値が約 3×10^{-13} であることが読み取れる。

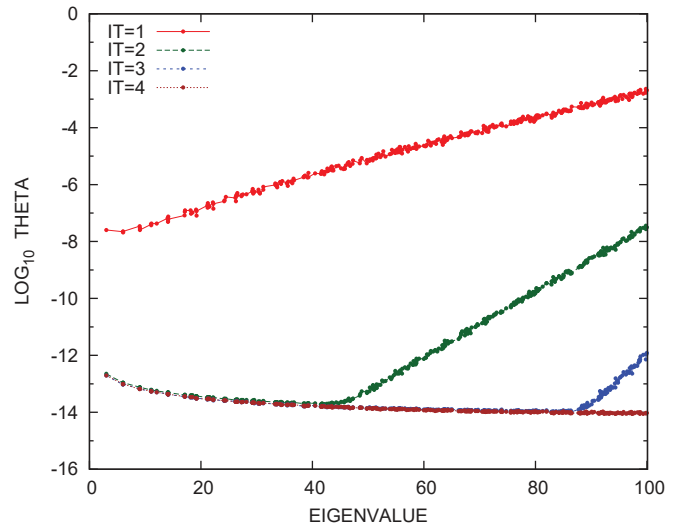


図 A-18 例題 R2：相対残差 ($n = 10, m = 700$) ($m > 700$ が望ましい)

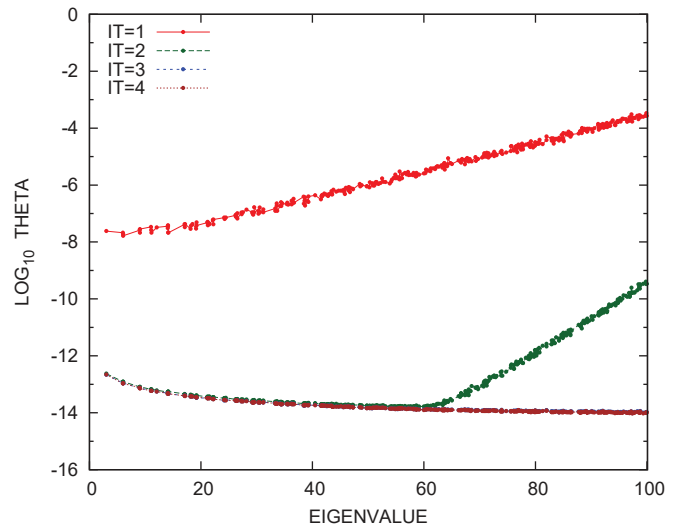


図 A-19 例題 R2：相対残差 ($n = 15, m = 700$) ($m > 700$ が望ましい)

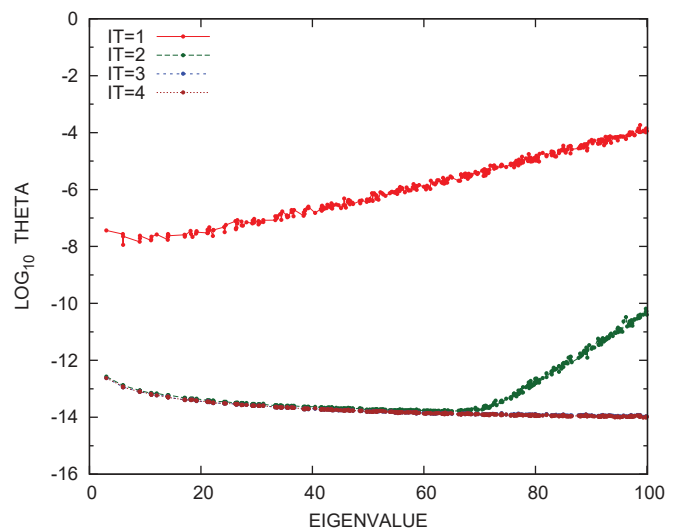


図 A-20 例題 R2：相対残差 ($n = 20, m = 700$) ($m > 700$ が望ましい)

A.1.4.3 例題 R2：フィルタの次数 n が 10 の場合

フィルタの次数 n を 10 とする。図 A-21, 図 A-22, 図 A-23 はそれぞれ、フィルタを適用するベクトルの数 m が 500, 700, 750 の各場合について、正規直交化付きフィルタ適用の反復回数 IT を 1 から 4 まで変えて、得られた近似固有対に対する相対残差 θ の値をプロットしたグラフである。

これらのグラフから、ベクトルの数 m が 500 の場合には固有値が 60 より大きい近似対の残差は反復 4 回目でもまだ十分小さくなっていないこと、それに対して m が 700 と 750 の場合には反復 4 回目で近似固有対の改良が完了して相対残差の最大値は約 3×10^{-13} となったことが読み取れる。

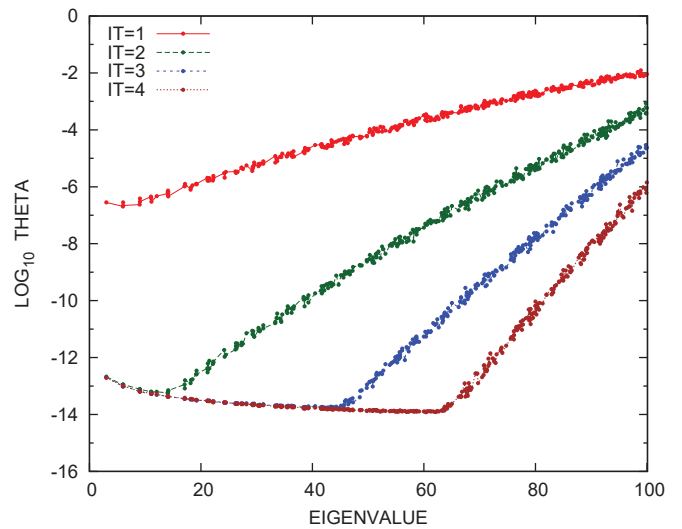


図 A-21 例題 R2：相対残差 ($n = 10, m = 500$) ($m > 700$ が望ましい)

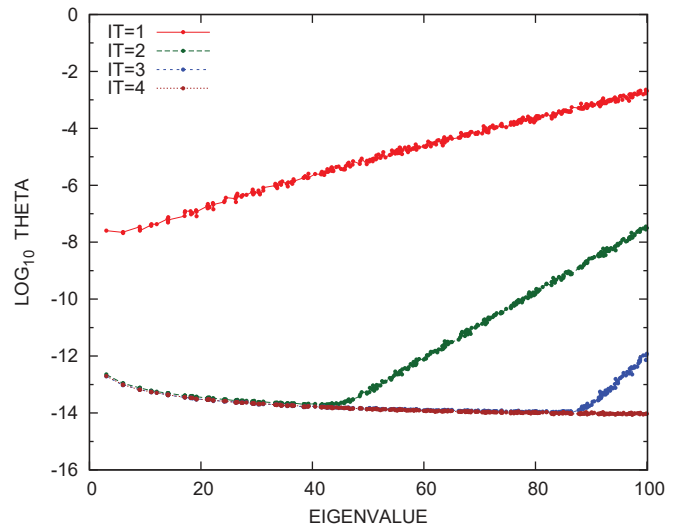


図 A-22 例題 R2：相対残差 ($n = 10, m = 700$) ($m > 700$ が望ましい)

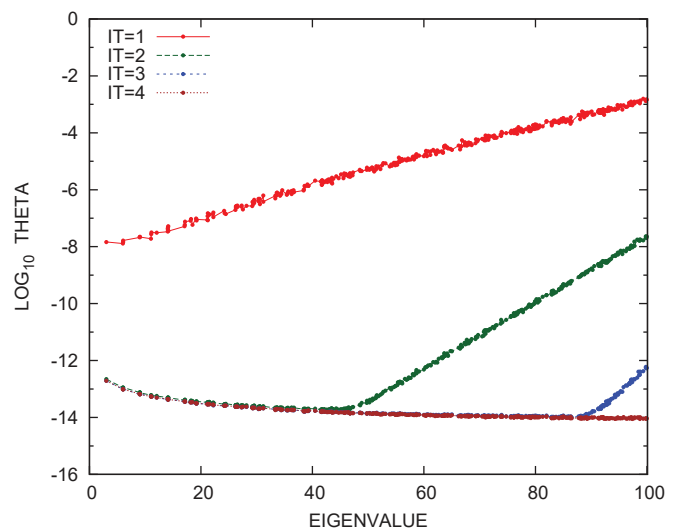


図 A-23 例題 R2：相対残差 ($n = 10, m = 750$)

A.1.4.4 例題 R2：フィルタの次数 n が 15 の場合

フィルタの次数 n を 15 とする。図 A-24, 図 A-25, 図 A-26 はそれぞれ、フィルタを適用するベクトルの数 m を 500, 700, 750 とした各場合について、正規直交化付きフィルタ適用の反復回数 IT を 1 から 4 まで変えて、得られた近似固有対の相対残差 θ の分布をプロットしたグラフである。

これらのグラフから、ベクトルの数 m が 500 の場合には固有値が 70 を越えた近似対の残差は反復 4 回目でもまだ十分小さくなっていないこと、それに対して m が 700 と 750 の場合には近似対の改良は反復 3 回目ですべて完了して相対残差の最大値は約 3×10^{-13} となったことがわかる。

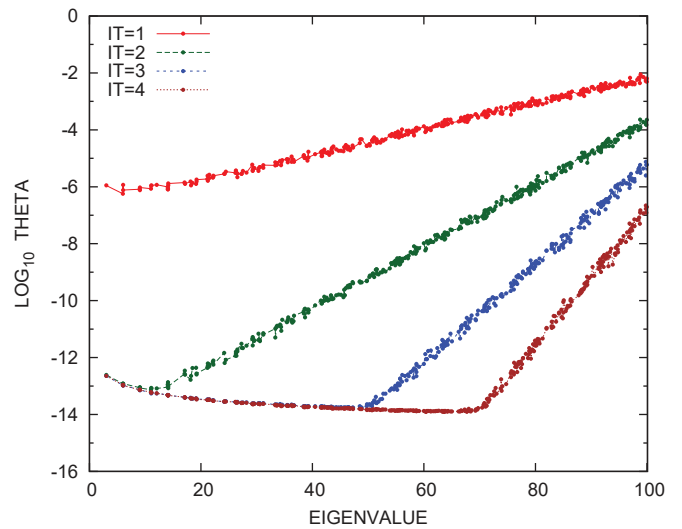


図 A-24 例題 R2：相対残差 ($n = 15, m = 500$) ($m > 700$ が望ましい)

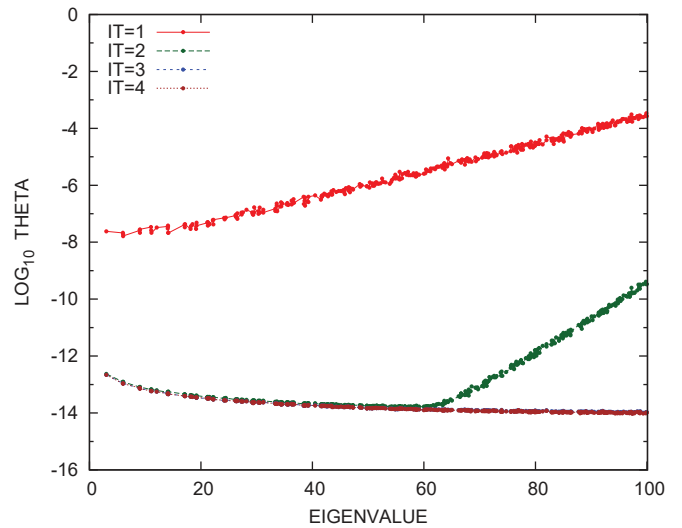


図 A-25 例題 R2：相対残差 ($n = 15, m = 700$) ($m > 700$ が望ましい)

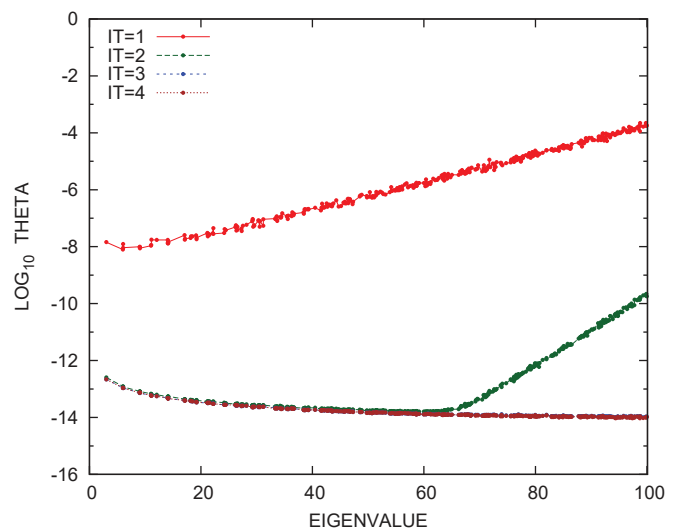


図 A-26 例題 R2：相対残差 ($n = 15, m = 750$)

A.1.4.5 例題 R2：相対残差の最大値

表 A-7, 表 A-8, 表 A-9, 表 A-10 はそれぞれフィルタの次数 n が 8, 10, 15, 20 の各場合について, ベクトルの数 m と反復回数 IT に対する相対残差の最大値を表にしたものである.

表 A-7 例題 R2：相対残差の最大値 ($n = 8$)

IT	$m = 500$	$m = 600$	$m = 700$	$m = 800$
1	2.1E-02	1.2E-02	1.1E-02	6.5E-03
2	1.5E-03	2.0E-05	5.6E-07	3.1E-07
3	1.1E-04	9.8E-08	7.4E-11	3.4E-11
4	7.1E-06	9.2E-10	1.9E-13	1.7E-13

表 A-8 例題 R2：相対残差の最大値 ($n = 10$)

IT	$m = 500$	$m = 600$	$m = 700$	$m = 800$
1	1.2E-02	4.8E-03	2.3E-03	1.4E-03
2	8.7E-04	3.8E-06	3.6E-08	1.8E-08
3	2.9E-05	1.4E-08	1.2E-12	4.5E-13
4	1.4E-06	8.0E-11	2.0E-13	1.9E-13

表 A-9 例題 R2：相対残差の最大値 ($n = 15$)

IT	$m = 500$	$m = 600$	$m = 700$	$m = 800$
1	9.0E-03	1.2E-03	3.4E-04	1.5E-04
2	2.3E-04	4.8E-07	4.0E-10	1.6E-10
3	7.5E-06	7.7E-10	2.2E-13	2.2E-13
4	2.2E-07	8.3E-13	2.2E-13	2.2E-13

表 A-10 例題 R2：相対残差の最大値 ($n = 20$)

IT	$m = 500$	$m = 600$	$m = 700$	$m = 800$
1	6.4E-03	6.6E-04	1.9E-04	5.5E-05
2	1.7E-04	2.3E-07	6.5E-11	2.1E-11
3	5.2E-06	3.3E-10	2.4E-13	2.4E-13
4	1.5E-07	2.4E-13	2.4E-13	2.4E-13

図 A-27, 図 A-28, 図 A-29 はそれぞれ, フィルタの次数 n が 8, 10, 15 の各場合について, 横軸に反復回数 IT を 1 から 4 までとり, 縦軸に指定した区間に固有値を持つ近似対の相対残差の最大値をとって, ベクトルの数 m を 500, 600, 700, 800 と変えてプロットしたグラフである. これら 3 つの図から, ベクトルの数 m が 700 未満の場合と 700 以上の場合とでは反復回数 IT の増加にともなう相対残差の最大値の減少の様子が異なっていること, そうして m が 700 と 800 の場合の相対残差の最大値の振る舞いはほぼ同じであることがわかる.

これらのグラフから, ベクトルの数 m が 700 以上の場合には, 近似固有対の改良はフィルタの次数 n が 8 では反復 4 回目まで進んでいるが, n が 10 では反復 3 回目ですらほとんど完了して反復 4 回目で完了し, n が 15 では反復 3 回目で完了している. そうして完了したときの相対残差の最大値は約 3×10^{-13} であることが読み取れる.

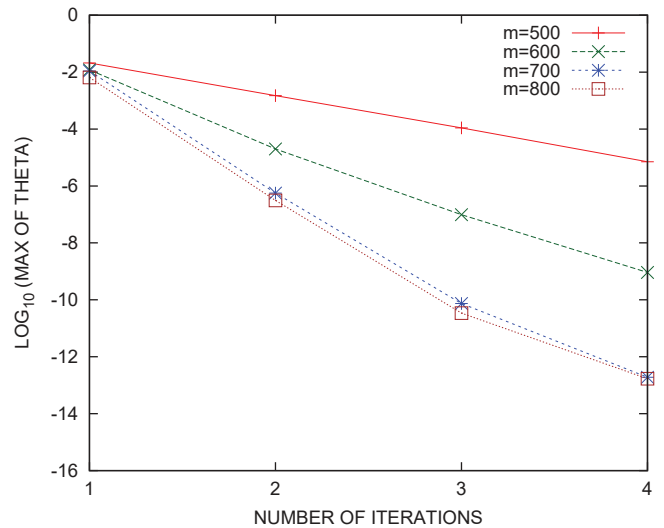


図 A-27 例題 R2：相対残差の最大値 ($n = 8$) ($m > 700$ が望ましい)

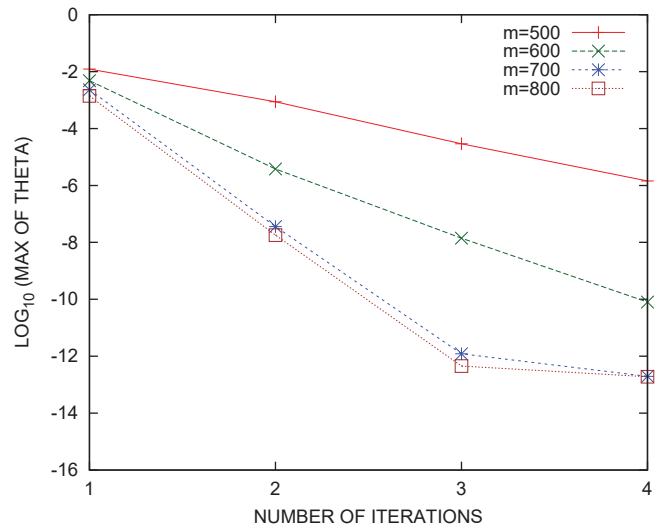


図 A-28 例題 R2：相対残差の最大値 ($n = 10$) ($m > 700$ が望ましい)

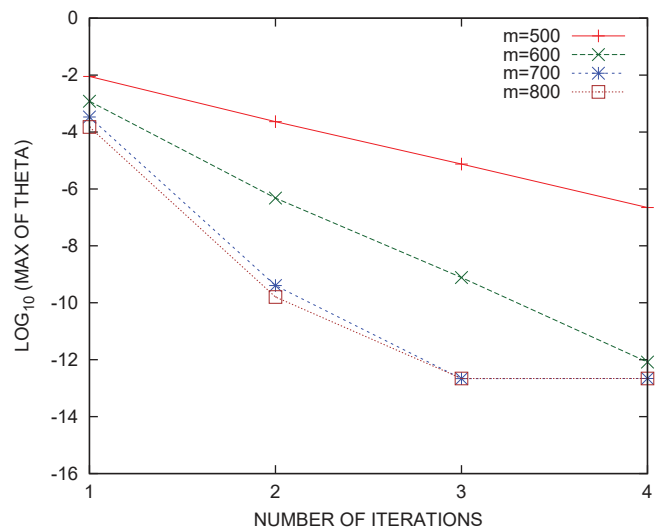


図 A-29 例題 R2：相対残差の最大値 ($n = 15$) ($m > 700$ が望ましい)

A.1.5 例題 R3：下端固有対を求めた例その3

この例題 R3 では FEM の要素分割を $(N_1, N_2, N_3) = (90, 100, 110)$ とした。それから導かれる一般固有値問題の係数行列 A と B の次数 N は 990,000 で下帯幅 w_L は 9,091 であり、これは大規模な問題である。この問題の固有対で区間 $[a, b] = [0, 30]$ に固有値があるもの（下端固有対）をすべて求める。そのような固有対は全部で 54 個ある。そうして固有値が通過域と遷移域を合併した区間 $[a, b] = [0, 45]$ にある固有対は全部で 108 個あるので、フィルタを適用するベクトルの数 m は 108 よりも多くすることが望ましい。

図 A-30 はベクトルの数 m を 120 とした場合の、得られた近似固有対に対する相対残差のグラフである。使用した下端固有対用のフィルタのパラメタの組は $(n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12})$ である。このグラフから、近似固有対の改良は反復とともに進み、反復 4 回目で完了したことが読み取れる。完了したときの相対残差の最大値は約 3×10^{-12} である。

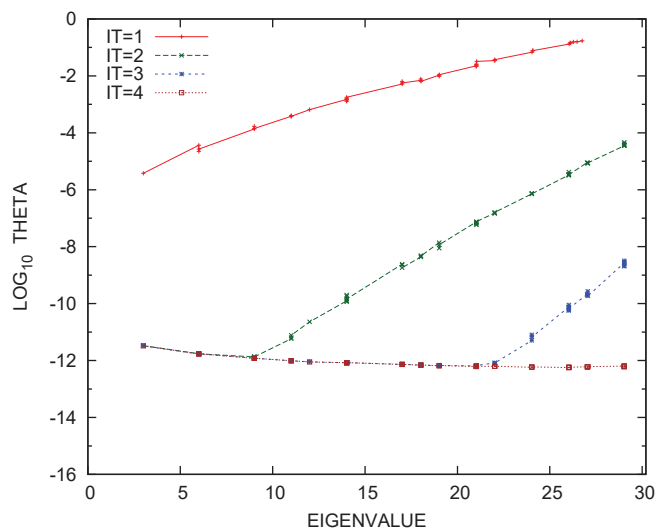


図 A-30 例題 R3：相対残差 ($n = 8, m = 120$)

A.1.6 例題 R4：下端固有対を求めた例その4

例題 R4 では FEM の要素分割を $(N_1, N_2, N_3) = (60, 70, 80)$ とした。それから生じる一般固有値問題の係数行列 A と B の次数 N は 336,000 で下帯幅 w_L は 4,261 であり、これは中規模な問題である。この問題の固有対で区間 $[a, b] = [0, 100]$ に固有値があるもの（下端固有対）をすべて求める。そのような固有対は全部で 408 個ある。そうして固有値が通過域と遷移域を合併した区間 $[a, b] = [0, 150]$ にある固有対は全部で 769 個あるので、フィルタを適用するベクトルの数 m は 769 よりも多くすることが望ましい。

図 A-31 にベクトルの数 m を 800 とした場合の近似固有対に対する相対残差の分布のグラフを示す。用いた下端固有対用のフィルタのパラメタの組は $(n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12})$ である。近似対の改良は反復 4 回目で完了したことが読み取れる。完了したときの相対残差の最大値が約 10^{-12} であったことが読み取れる。

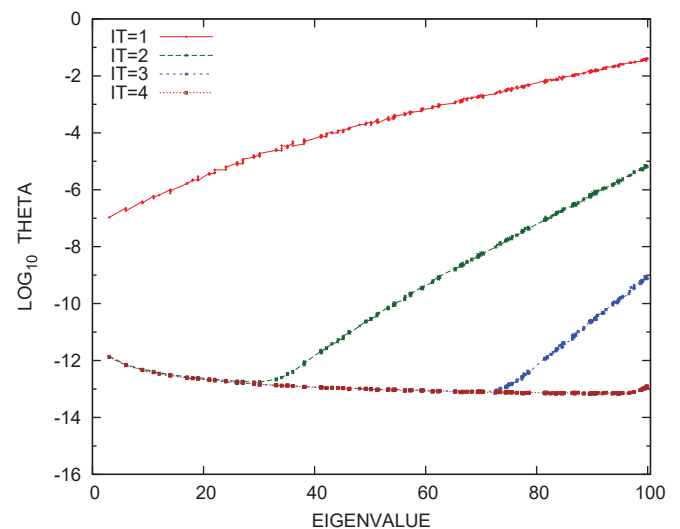


図 A-31 例題 R4：相対残差 ($n = 8, m = 800$)

A.1.7 例題 R5：下端固有対を求めた例その 5

この例題 R5 では FEM の要素分割を $(N_1, N_2, N_3) = (60, 70, 80)$ とした。これは例題 R4 と同じ分割なので一般固有値問題の係数行列も例題 R4 と同じになる。係数行列 A と B の次数 N は 336,000 で下帯幅 w_L は 4,261 の中規模な問題である。この問題の固有対で区間 $[a, b] = [0, 50]$ に固有値があるもの（下端固有対）をすべて求める。そのような固有対は全部で 127 個ある。そうして固有値が通過域と遷移域を合併した区間 $[a, b'] = [0, 75]$ にある固有対は全部で 256 個あるので、フィルタを適用するベクトルの数 m は 256 よりも多くすることが望ましい。

図 A-32 はベクトルの数 m が 300 の場合に、近似固有対の相対残差の分布を反復回数 IT ごとにプロットしたグラフである。下端固有対用のフィルタのパラメタの組は $(n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12})$ とした。

このグラフから近似対の改良は反復 4 回目で完了し、そのときの相対残差の最大値は 10^{-12} 程度であることが読み取れる。

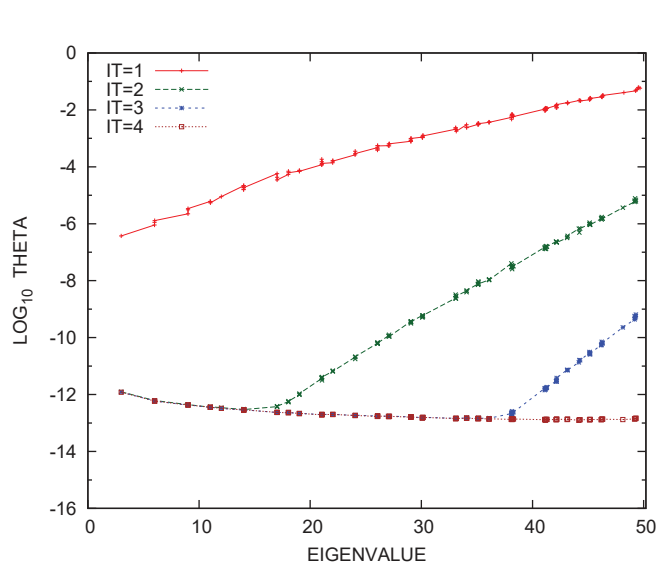


図 A-32 例題 R5：相対残差 ($n = 8, m = 300$)

A.1.8 例題 C1：中間固有対を求めた例その 1

この例題 C1 では FEM の要素分割を $(N_1, N_2, N_3) = (20, 30, 40)$ とした。これは例題 R1, 例題 R2 と同じ一般固有値問題を与え、係数行列 A と B の次数 N は 24,000 で下帯幅 w_L は 621 の小規模な問題である。この問題の固有対で区間 $[a, b] = [300, 310]$ に固有値があるもの（中間固有対）をすべて求める。そのような固有対は全部で 90 個ある。そうして固有値が通過域と遷移域を合併した区間 $[a', b'] = [297.5, 312.5]$ にある固有対は全部で 125 個あるので、フィルタで濾過するベクトルの数 m は 125 よりも多くすることが望ましい。

A.1.8.1 例題 C1：フィルタの次数 n が 8 の場合

フィルタの次数 n を 8 とする。図 A-33, 図 A-34, 図 A-35, 図 A-36 はそれぞれ、フィルタを適用するベクトルの数 m を 100, 110, 120, 130 とした各場合について、フィルタの反復回数 IT を 1 から 4 まで変えて、得られた近似対の相対残差の分布をプロットしたグラフである。

これらのグラフから、ベクトルの数 m が 120 未満（不足している）の場合と 120 以上の場合とでは指定区間の両端付近に固有値がある近似対の相対残差は挙動が異なることがわかる。またベクトルの数 m が 120 以上の場合については反復 3 回目で近似固有対の改良が完了して、相対残差の最大値が 10^{-14} 程度になったことがわかる。

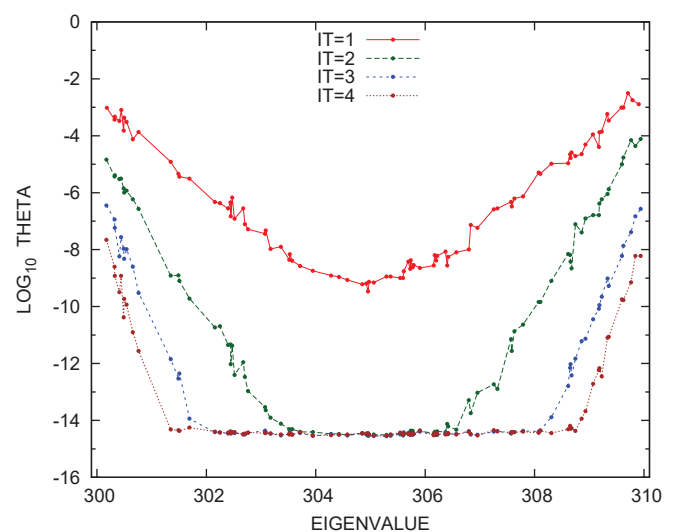


図 A-33 例題 C1：相対残差 ($n = 8, m = 100$) ($m > 125$ が望ましい)

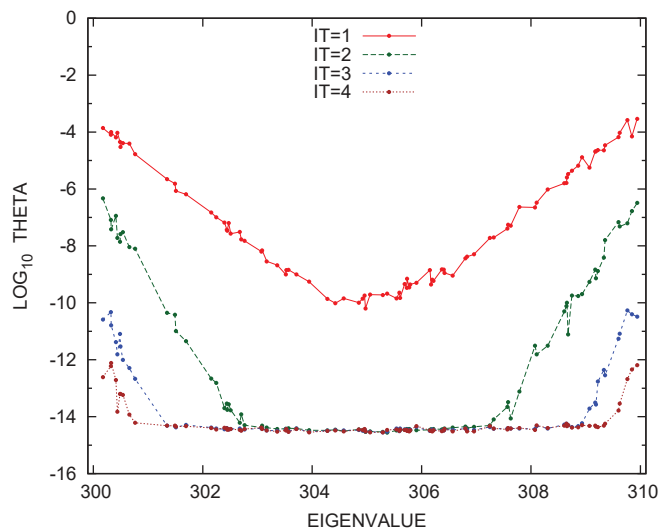


図 A-34 例題 C1：相対残差 ($n = 8, m = 110$) ($m > 125$ が望ましい)

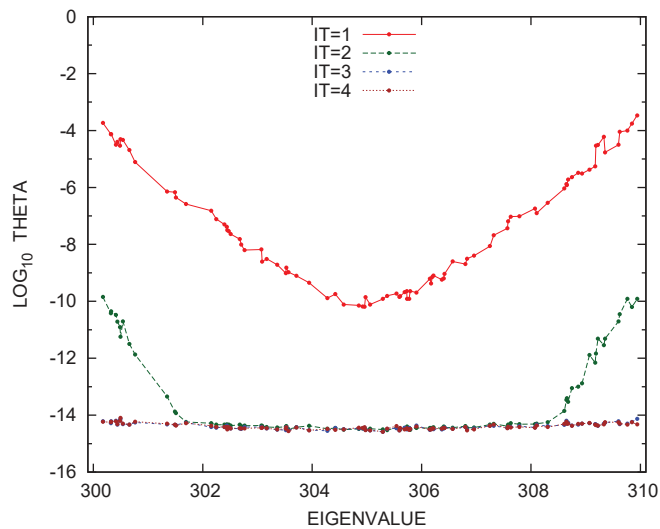


図 A-35 例題 C1：相対残差 ($n = 8, m = 120$) ($m > 125$ が望ましい)

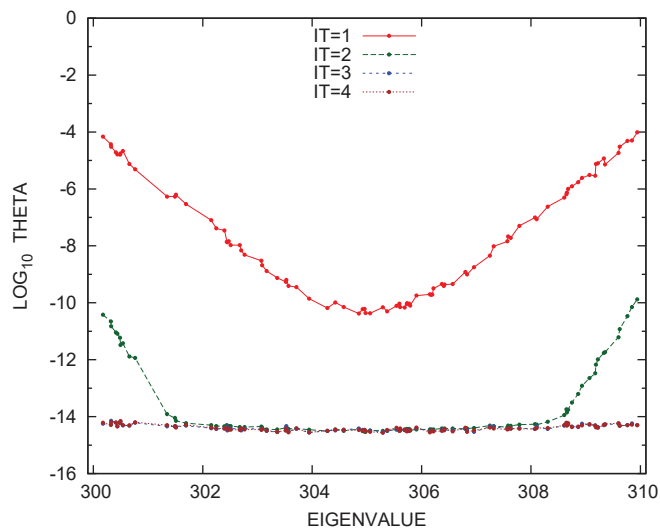


図 A-36 例題 C1：相対残差 ($n = 8, m = 130$) ($m > 125$ が望ましい)

A.1.8.2 例題 C1：ベクトルの数 m が 150 の場合

ベクトルの数 m を十分な数である 150 とする。図 A-37 と図 A-38 はそれぞれ、フィルタの次数 n が 10 と 15 の各場合について、フィルタ適用の反復回数 IT を 1 から 4 まで変えて、得られた近似固有対の相対残差の分布をプロットしたグラフである。

これらのグラフから、フィルタの次数 n が 10 のときは反復 3 回目で、 n が 15 のときは反復 2 回目で近似固有対の改良が完了して、区間全体での相対残差の最大値は 10^{-14} 程度になったことがわかる。

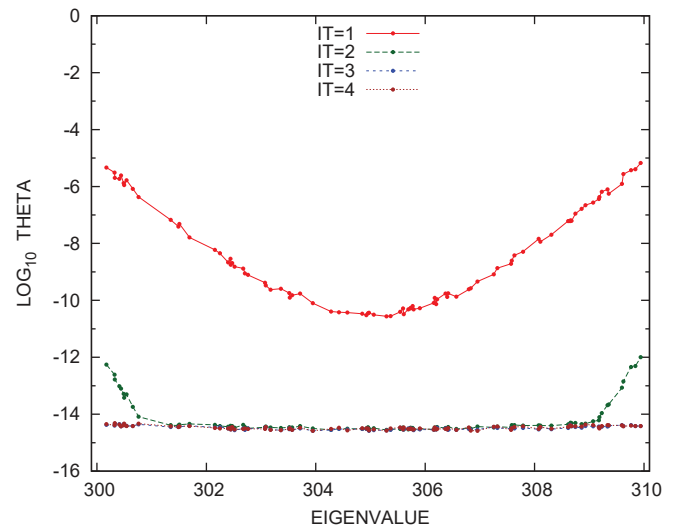


図 A-37 例題 C1：相対残差 ($n = 10, m = 150$)

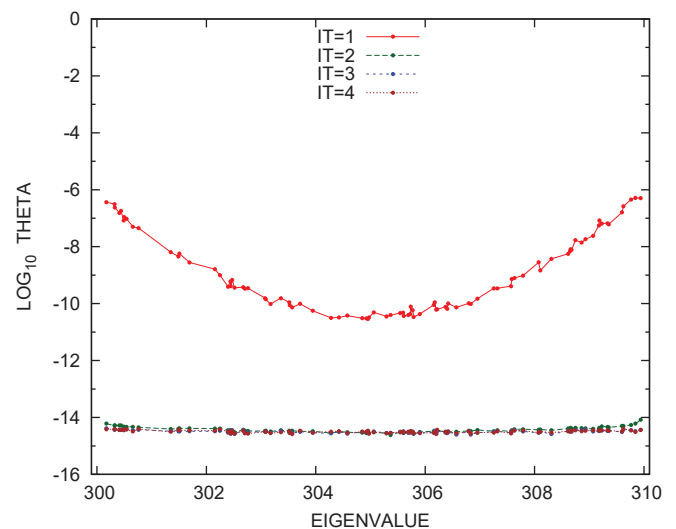


図 A-38 例題 C1：相対残差 ($n = 15, m = 150$)

A.1.8.3 例題 C1：相対残差の最大値

図 A-11, 図 A-12, 図 A-13 はそれぞれ, フィルタの次数 n が 8, 10, 15 の各場合について, ベクトルの数 m と反復回数 IT に対する相対残差の最大値を表にしたものである。

表 A-11 例題 C1：最大残差 ($n = 8$)

IT	$m=100$	$m=110$	$m=120$	$m=130$	$m=140$	$m=150$
1	3.2E-03	2.9E-04	3.4E-04	9.6E-05	7.8E-05	4.4E-05
2	7.7E-05	4.7E-07	1.4E-10	1.3E-10	8.9E-11	5.2E-11
3	3.6E-07	5.4E-11	7.4E-15	7.2E-15	7.6E-15	8.1E-15
4	2.2E-08	7.6E-13	8.0E-15	7.0E-15	7.2E-15	7.1E-15

表 A-12 例題 C1：最大残差 ($n = 10$)

IT	$m=100$	$m=110$	$m=120$	$m=130$	$m=140$	$m=150$
1	2.3E-03	1.3E-04	3.0E-05	2.1E-05	1.1E-05	6.8E-06
2	2.5E-05	4.3E-07	1.1E-11	3.0E-12	1.5E-12	1.0E-12
3	7.2E-07	4.5E-11	4.8E-15	4.8E-15	4.7E-15	4.6E-15
4	3.0E-09	1.1E-13	5.1E-15	4.4E-15	4.7E-15	4.8E-15

表 A-13 例題 C1：最大残差 ($n = 15$)

IT	$m=100$	$m=110$	$m=120$	$m=130$	$m=140$	$m=150$
1	1.9E-03	2.8E-05	4.9E-06	3.6E-06	1.2E-06	5.2E-07
2	4.5E-05	4.8E-08	1.7E-13	1.3E-14	8.2E-15	8.3E-15
3	8.3E-08	3.2E-11	3.9E-15	4.0E-15	4.0E-15	4.2E-15
4	1.7E-08	1.7E-14	4.4E-15	3.9E-15	4.0E-15	4.0E-15

図 A-39, 図 A-40, 図 A-41 はそれぞれ, フィルタの次数 n が 8, 10, 15 の各場合について, 横軸に反復回数 IT を 1 から 4 までとり, 縦軸に指定した区間に固有値を持つ近似固有対の相対残差の最大値をとって, ベクトルの数 m を 100 から 10 刻みで 150 まで変えてプロットしたグラフである。これらのグラフから, ベクトルの数 m が 120 未満の場合と 120 以上の場合とでは反復回数 IT の増加にともなう相対残差の最大値の減少の様子がかなり異なっていること, そうして m が 120, 130, 140, 150 の場合には相対残差の最大値の振る舞いにあまり違いがない様子がわかる。

またこれらのグラフから, ベクトルの数 m が 120 以上の場合に, 近似固有対の改良はフィルタの次数 n が 8 と 10 のときは反復 3 回目で, n が 15 のときは m が 120 の場合には反復 3 回目で, m が 130 以上の場合には反復 2 回目でそれぞれ完了して、そのとき相対残差の最大値は 10^{-14} であることが読み取れる。

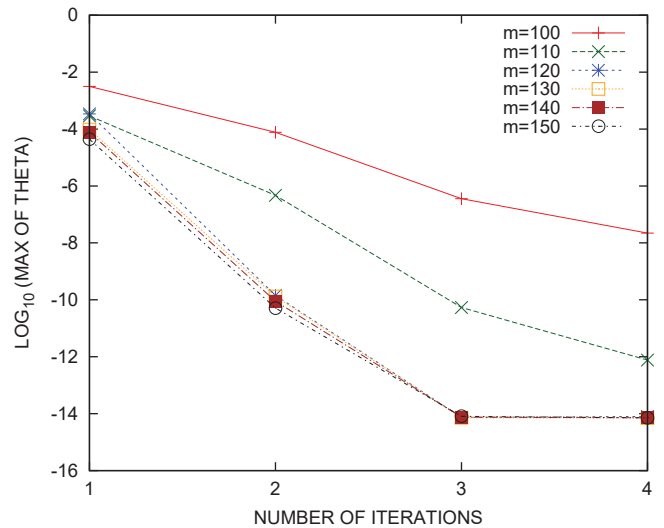


図 A-39 例題 C1：相対残差の最大値 ($n = 8$) ($m > 125$ が望ましい)

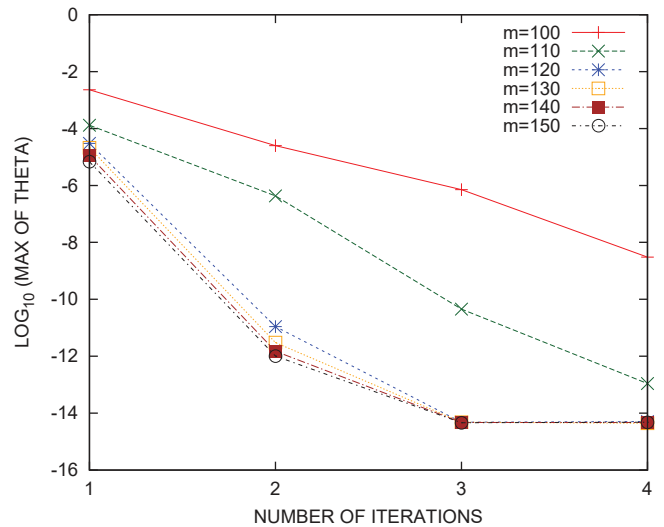


図 A-40 例題 C1：相対残差の最大値 ($n = 10$) ($m > 125$ が望ましい)

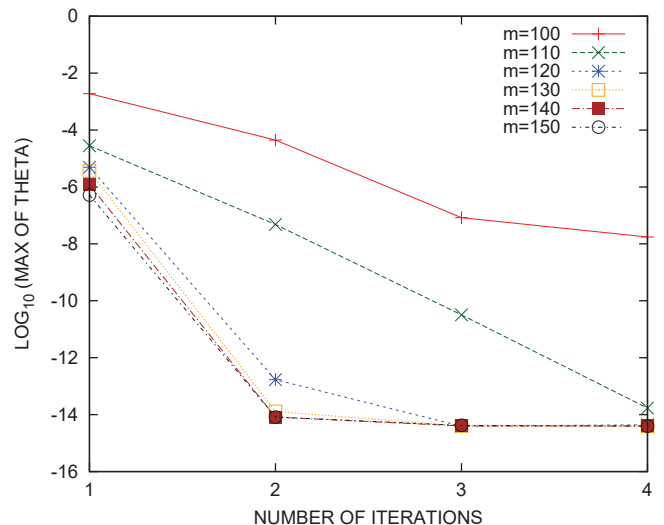


図 A-41 例題 C1：相対残差の最大値 ($n = 15$) ($m > 125$ が望ましい)

A.1.9 例題 C2：中間固有対を求めた例その2

この例題 C2 の FEM の要素分割は $(N_1, N_2, N_3) = (20, 30, 40)$ とした。これも例題 R1, 例題 R2, 例題 C1 と同じ分割であるので、それらと同じ一般固有値問題となる。係数行列 A と B の次数 N は 24,000 で下帯幅 w_L は 621 の小規模な問題である。その問題の固有対で区間 $[a, b] = [1000, 1010]$ に固有値があるもの（中間固有対）をすべて求めるものとする。そのような固有対は全部で 92 個ある。そうして固有値が通過域と遷移域を合併した区間 $[a', b'] = [997.5, 1012.5]$ にある固有対は全部で 145 個あるので、フィルタを適用するベクトルの数 m は 145 よりも多くすることが望ましい。

A.1.9.1 例題 C2：フィルタの次数 n が 8 の場合

フィルタの次数 n を 8 とする。図 A-42, 図 A-43, 図 A-44, 図 A-45 はそれぞれ、フィルタを適用するベクトルの数 m を 100, 120, 140, 160 とした各場合について、反復回数 IT を 1 から 4 まで変えて、得られた近似固有対の相対残差の分布をプロットしたグラフである。

これらのグラフから、ベクトルの数 m が 140 未満の場合と 140 以上の場合とでは、反復にともなう相対残差の減少の様子が違うことがわかる。

これらのグラフから、ベクトルの数 m が 140 以上の場合には、反復 3 回目まで近似固有対の改良は完了して、区間全体での相対残差の最大値が 10^{-14} 程度になったことが読み取れる。

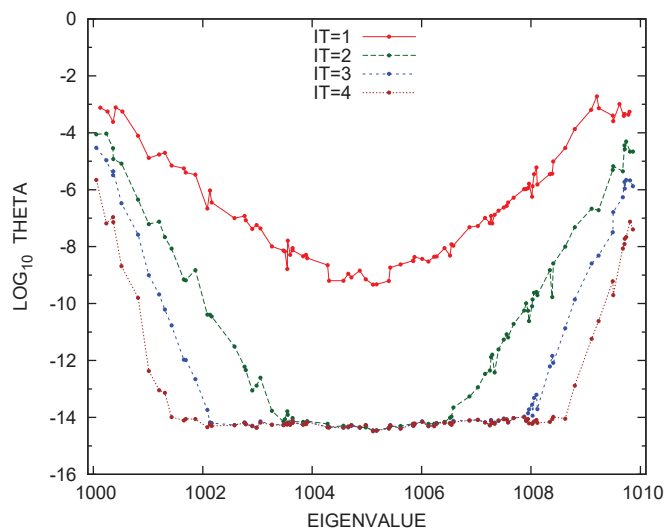


図 A-42 例題 C2：相対残差 ($n = 8, m = 100$) ($m > 145$ が望ましい)

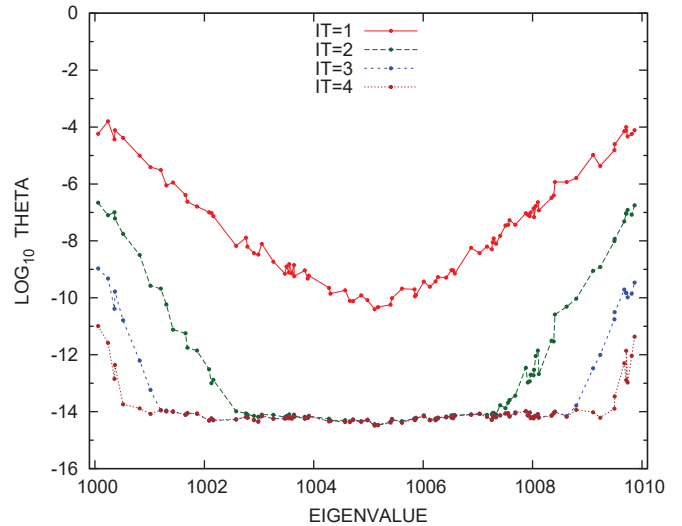


図 A-43 例題 C2：相対残差 ($n = 8, m = 120$) ($m > 145$ が望ましい)

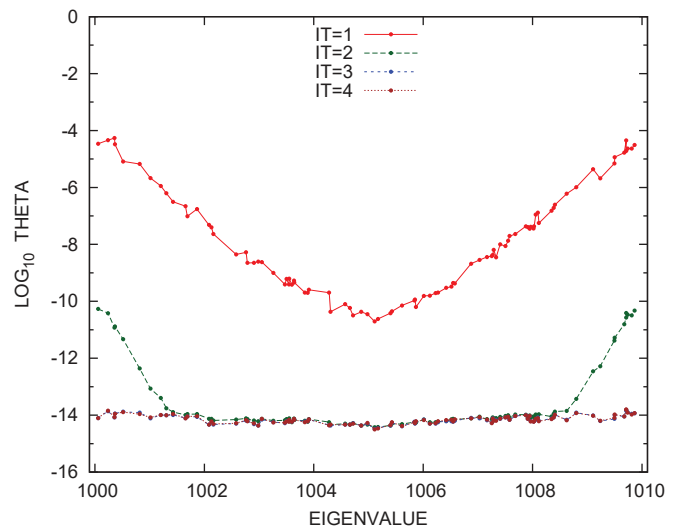


図 A-44 例題 C2：相対残差 ($n = 8, m = 140$) ($m > 145$ が望ましい)

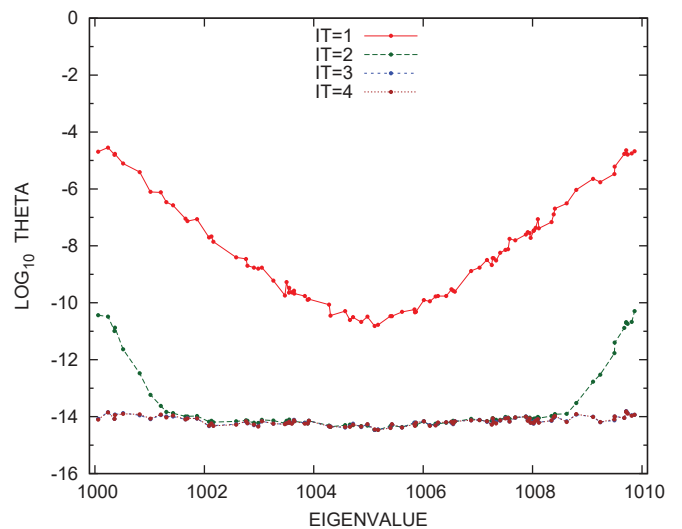


図 A-45 例題 C2：相対残差 ($n = 8, m = 160$) ($m > 145$ が望ましい)

A.1.9.2 例題 C2：ベクトルの数 m が 150 の場合

フィルタを適用するベクトルの数 m を 150 とする。

図 A.46 と図 A.47 はそれぞれ、フィルタの次数 n が 10 と 15 の各場合について、反復回数 IT を 1 から 4 まで変えながら、得られた近似固有対の相対残差の分布をプロットしたグラフである。

フィルタの次数 n が 10 の場合には、反復 2 回目では相対残差の最大値がまだ 10^{-12} 程度あるが、反復 3 回目で改良は完了して相対残差の最大値は 10^{-14} 程度になっている。

フィルタの次数 n が 15 の場合には、反復 2 回目で改良は完了して、相対残差の最大値は 10^{-14} 程度になっている。

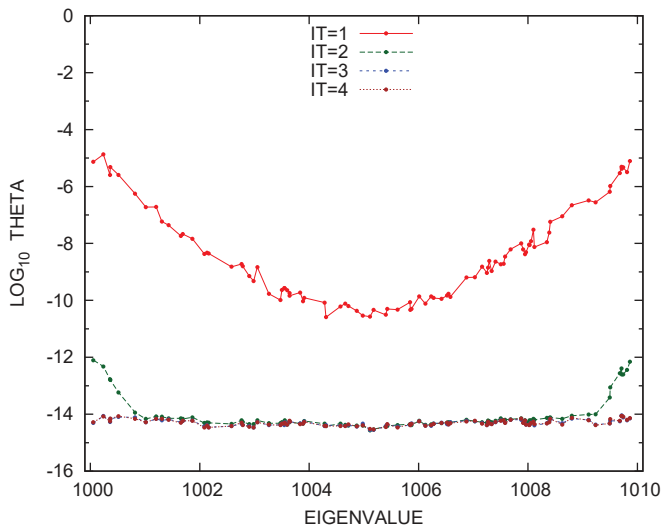


図 A.46 例題 C2：相対残差 ($n = 10, m = 150$)

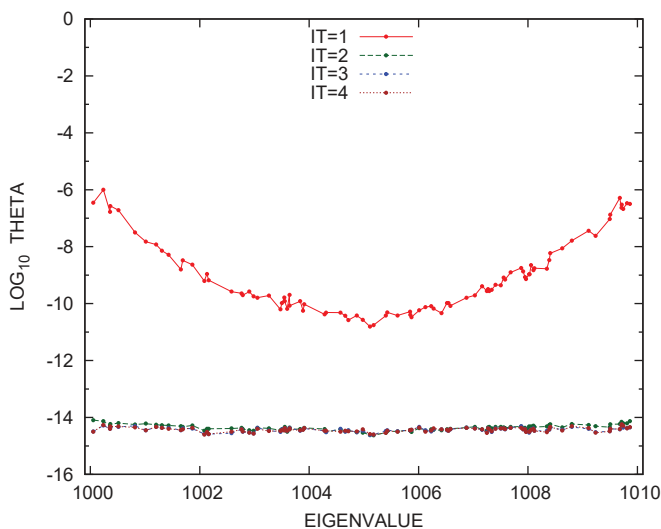


図 A.47 例題 C2：相対残差 ($n = 15, m = 150$)

A.1.9.3 例題 C2：相対残差の最大値

図 A-14, 図 A-15, 図 A-16 はそれぞれ, フィルタの次数 n が 8, 10, 15 の各場合について, ベクトルの数 m と反復回数 IT に対する相対残差の最大値を表にしたものである.

表 A-14 例題 C2：最大残差 ($n = 8$)

IT	$m=100$	$m=110$	$m=120$	$m=130$	$m=140$	$m=150$
1	1.9E-03	4.5E-04	1.6E-04	9.4E-05	5.5E-05	4.3E-05
2	9.4E-05	2.6E-06	2.2E-07	3.2E-09	5.4E-11	3.7E-11
3	3.0E-05	6.4E-08	1.1E-09	6.2E-12	1.5E-14	1.5E-14
4	2.2E-06	1.2E-09	1.0E-11	1.5E-14	1.6E-14	1.5E-14

表 A-15 例題 C2：最大残差 ($n = 10$)

IT	$m=100$	$m=110$	$m=120$	$m=130$	$m=140$	$m=150$
1	1.7E-03	2.0E-04	8.0E-05	2.0E-05	1.6E-05	1.3E-05
2	1.7E-04	9.6E-07	7.2E-08	1.0E-09	1.6E-12	7.9E-13
3	1.8E-05	8.3E-09	1.3E-10	2.9E-13	8.9E-15	9.1E-15
4	1.0E-06	8.6E-10	1.7E-12	9.3E-15	9.4E-15	8.7E-15

表 A-16 例題 C2：最大残差 ($n = 15$)

IT	$m=100$	$m=110$	$m=120$	$m=130$	$m=140$	$m=150$
1	1.1E-03	1.6E-04	4.8E-05	6.7E-06	1.8E-06	1.0E-06
2	1.1E-04	6.8E-07	3.8E-08	9.6E-11	1.9E-14	8.0E-15
3	5.5E-06	4.4E-09	1.9E-10	9.2E-15	5.8E-15	5.6E-15
4	1.9E-06	1.4E-10	1.3E-13	5.7E-15	5.5E-15	5.8E-15

図 A-48, 図 A-49, 図 A-50 はそれぞれ, フィルタの次数 n が 8, 10, 15 の各場合について, 横軸に反復回数 IT を 1 から 4 までとり, 縦軸に指定した区間に固有値を持つ近似固有対の相対残差の最大値をとって, ベクトルの数 m を 100 から 10 刻みで 150 まで変えてプロットしたグラフである. これらのグラフから, ベクトルの数 m が 140 未満の場合と 140 以上の場合とでは反復回数 IT の増加に伴う相対残差の最大値の減少の様子がかかなり違うこと, そうして m が 140 と 150 の場合はほとんど違いがない様子がわかる.

さらにこれらのグラフから, ベクトルの数 m が 140 以上のときに, 近似固有対の改良はフィルタの次数 n が 8 と 10 のときには反復 3 回目で完了し, n が 15 のときには反復 2 回目でほぼ完了したことがわかる.

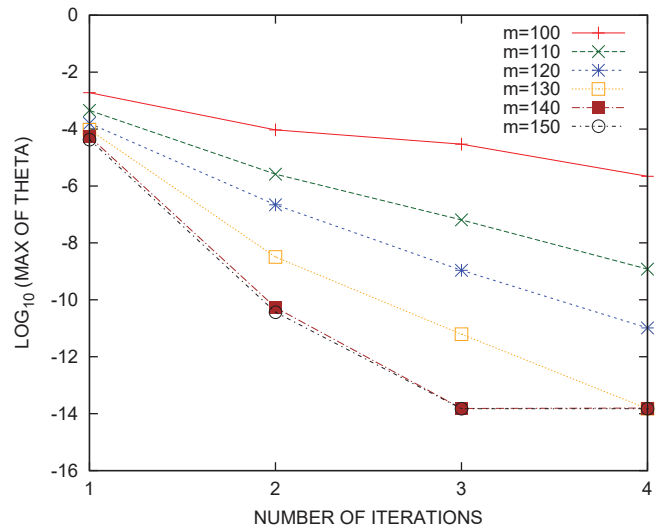


図 A-48 例題 C2：相対残差の最大値 ($n = 8$) ($m > 145$ が望ましい)

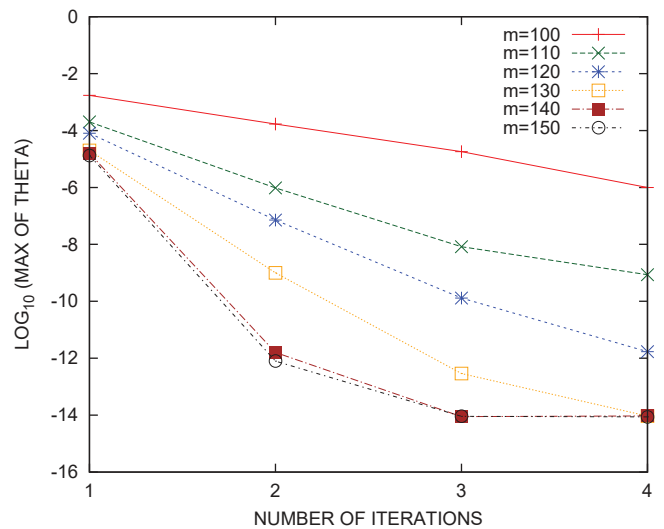


図 A-49 例題 C2：相対残差の最大値 ($n = 10$) ($m > 145$ が望ましい)

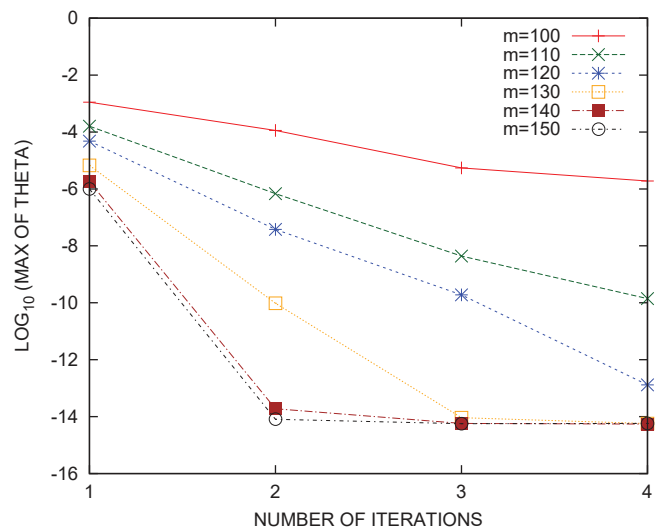


図 A-50 例題 C2：相対残差の最大値 ($n = 15$) ($m > 145$ が望ましい)

A.1.10 例題 C3：中間固有対を求めた例その3

この例題 C3 では FEM の要素分割を $(N_1, N_2, N_3) = (50, 60, 70)$ とした。それから生じる一般固有値問題の係数行列 A と B の次数 N は 210,000 で下帯幅 w_L は 3,051 であり、これは中規模な問題である。この問題の固有対で区間 $[a, b] = [100, 200]$ に固有値があるもの（中間固有対）をすべて求める。そのような固有対は全部で 801 個ある。そうして固有値が通過域と遷移域を合併した区間 $[a', b'] = [75, 225]$ にある固有対は全部で 1,192 個あるので、フィルタを適用するベクトルの数 m は 1,192 よりも多くすることが望ましい。

A.1.10.1 例題 C3：フィルタの次数 n が 8 の場合

フィルタの次数 n を 8 とする。図 A-51, 図 A-52, 図 A-53, 図 A-54 はそれぞれ、フィルタを適用するベクトルの数 m が 1000, 1100, 1200, 1300 の各場合についてのもので、フィルタの反復回数 IT を 1 から 4 までについて、得られた近似固有対の相対残差の分布をプロットしたグラフである。

これらのグラフから、ベクトルの数 m が 1200 未満と 1200 以上とでは反復に対する相対残差の分布の減少の違いが見てとれる。

これらのグラフから、近似固有対の改良は m が 1200 以上の場合には反復 3 回目で完了して、そのときの相対残差の最大値は 10^{-13} 程度になったことがわかる。

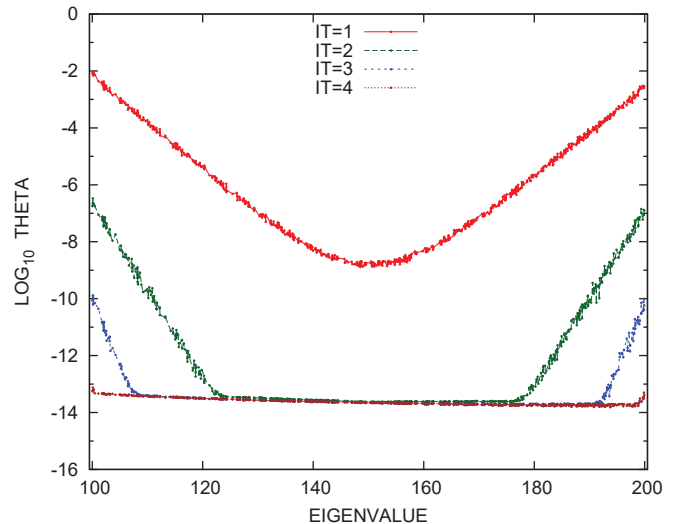


図 A-52 例題 C3：各近似対の相対残差 ($n = 8, m = 1100$)
($m > 1192$ であることが望ましい)

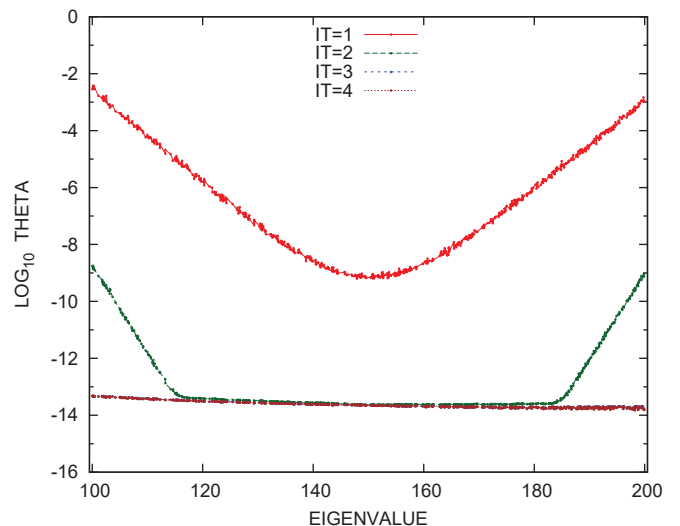


図 A-53 例題 C3：各近似対の相対残差 ($n = 8, m = 1200$)

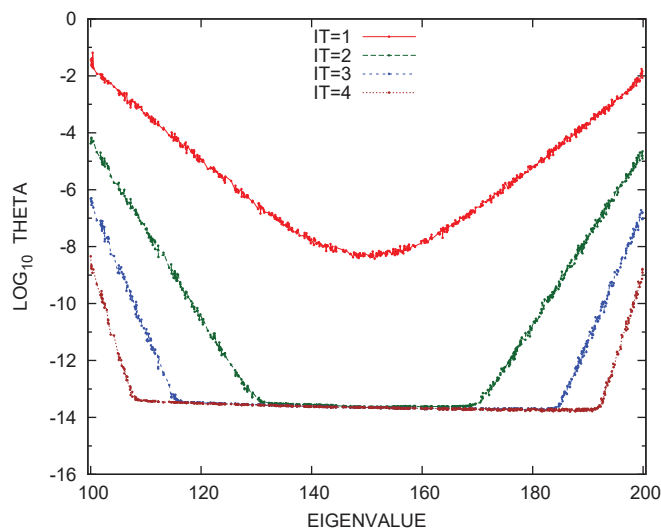


図 A-51 例題 C3：各近似対の相対残差 ($n = 8, m = 1000$)
($m > 1192$ であることが望ましい)

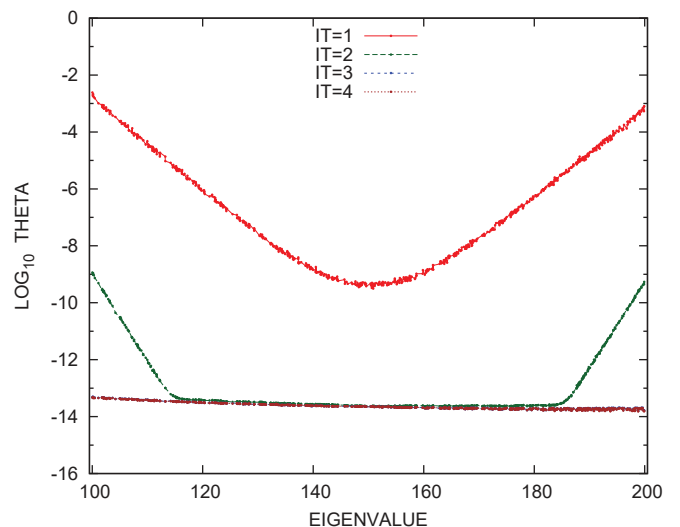


図 A-54 例題 C3：各近似対の相対残差 ($n = 8, m = 1300$)

A.1.10.2 例題 C3：ベクトルの数 m が 1200 の場合

ベクトルの数 m を 1200 とした場合である。図 A-55, 図 A-56, 図 A-57 はそれぞれ, フィルタの次数 n が 8, 10, 15 の各場合についてのもので, フィルタの反復回数 IT を 1 から 4 まで変えて, 得られた近似固有対の相対残差の分布をプロットしたグラフである。

これらのグラフから, 近似固有対の改良はフィルタの次数 n が 8 と 10 の場合には反復 3 回目で完了で, そのときの相対残差の最大値は 10^{-13} 程度以下であったこと, また次数 n が 15 の場合には反復 2 回目でほぼ完了で, そのときの相対残差の最大値は 10^{-13} 程度となったことが読み取れる。

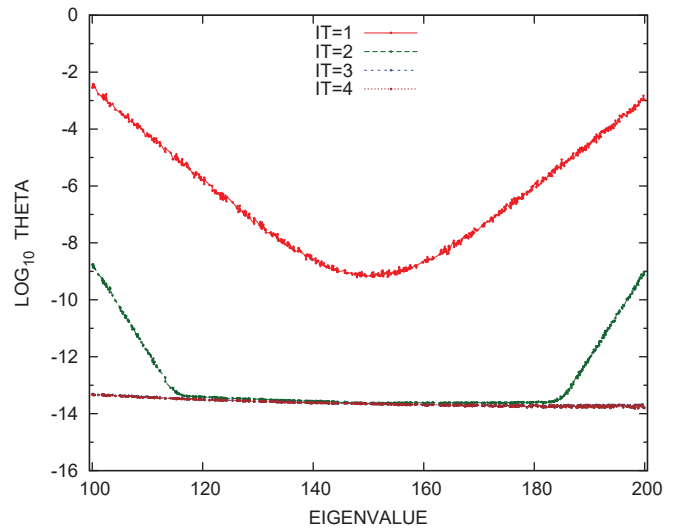


図 A-55 例題 C3：相対残差 ($n = 8, m = 1200$)

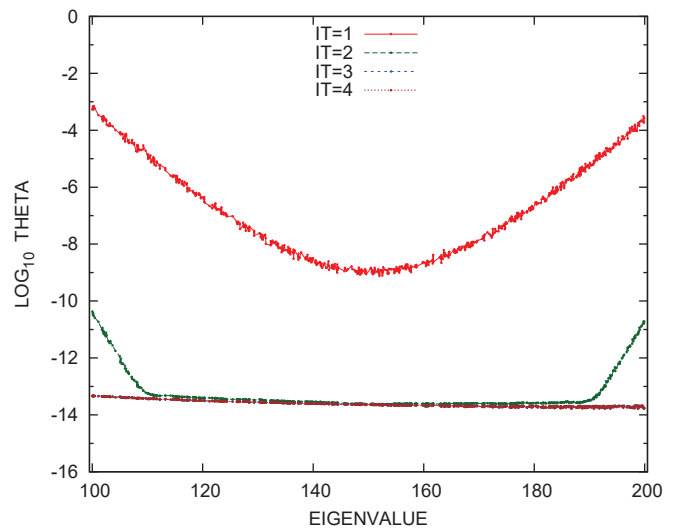


図 A-56 例題 C3：相対残差 ($n = 10, m = 1200$)

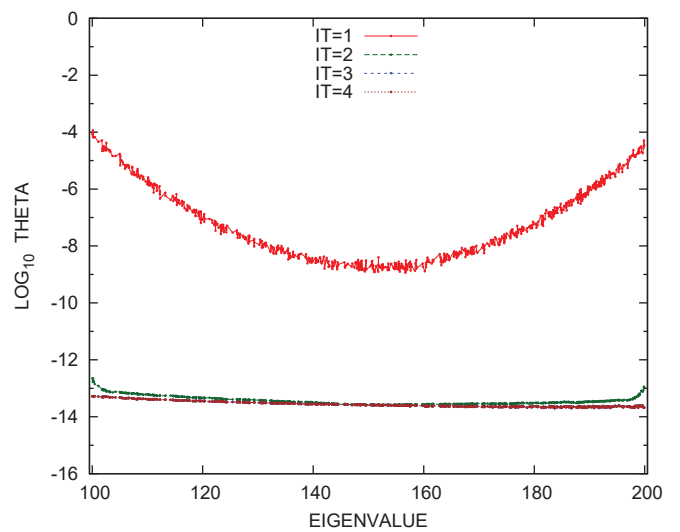


図 A-57 例題 C3：相対残差 ($n = 15, m = 1200$)

A.1.10.3 例題 C3：相対残差の最大値

図 A-17, 図 A-18, 図 A-19, 図 A-20 はそれぞれ、フィルタの次数 n が 8, 10, 15, 20 の各場合について、ベクトルの数 m と反復回数 IT に対する相対残差の最大値を表にしたものである。

表 A-17 例題 C3：相対残差の最大値 ($n = 8$)

IT	$m = 1000$	$m = 1100$	$m = 1200$	$m = 1300$
1	6.5E-02	9.0E-03	3.8E-03	2.4E-03
2	6.7E-05	3.3E-07	1.8E-09	1.2E-09
3	5.1E-07	1.3E-10	5.0E-14	5.0E-14
4	4.6E-09	7.4E-14	4.9E-14	4.8E-14

表 A-18 例題 C3：相対残差の最大値 ($n = 10$)

IT	$m = 1000$	$m = 1100$	$m = 1200$	$m = 1300$
1	1.8E-02	2.4E-03	7.2E-04	3.1E-04
2	2.4E-05	5.1E-08	4.4E-11	1.9E-11
3	1.4E-07	1.1E-11	4.8E-14	4.8E-14
4	4.5E-10	4.8E-14	4.7E-14	4.7E-14

表 A-19 例題 C3：相対残差の最大値 ($n = 15$)

IT	$m = 1000$	$m = 1100$	$m = 1200$	$m = 1300$
1	1.1E-02	8.7E-04	1.2E-04	1.8E-05
2	1.4E-05	1.1E-08	2.3E-13	1.2E-13
3	3.2E-08	5.1E-13	5.3E-14	5.3E-14
4	1.5E-10	5.3E-14	5.3E-14	5.3E-14

表 A-20 例題 C3：相対残差の最大値 ($n = 20$)

IT	$m = 1000$	$m = 1100$	$m = 1200$	$m = 1300$
1	1.0E-02	4.4E-04	3.8E-05	7.0E-06
2	1.7E-05	6.7E-09	1.0E-13	9.9E-14
3	3.8E-08	4.5E-13	6.4E-14	6.4E-14
4	1.3E-10	6.4E-14	6.4E-14	6.4E-14

図 A-58, 図 A-59, 図 A-60 はそれぞれ、フィルタの次数 n が 8, 10, 15 の各場合について、横軸に反復回数 IT を 1 から 4 までとり、縦軸に指定した区間に固有値を持つ近似固有対の相対残差の最大値をとって、ベクトルの数 m を 1000 から 100 刻みで 1300 まで変えてプロットしたグラフである。これらのグラフから、ベクトルの数 m が 1200 未満の場合と 1200 以上の場合とでは反復回数 IT の増加に伴う相対残差の最大値の減少の様子がかなり違ってること、そして m が 1200 と 1300 の場合の結果にはほとんど違いがない様子がわかる。

これらのグラフから、 m が 1200 以上の場合に、近似固有対の改良はフィルタの次数 n が 8 と 10 のときには反復 3 回目で完了で相対残差の最大値は 10^{-13} より小さいこと、 n が 15 のときには反復 2 回目でほぼ完了で相対残差の最大値は 10^{-13} 程度であることがわかる。

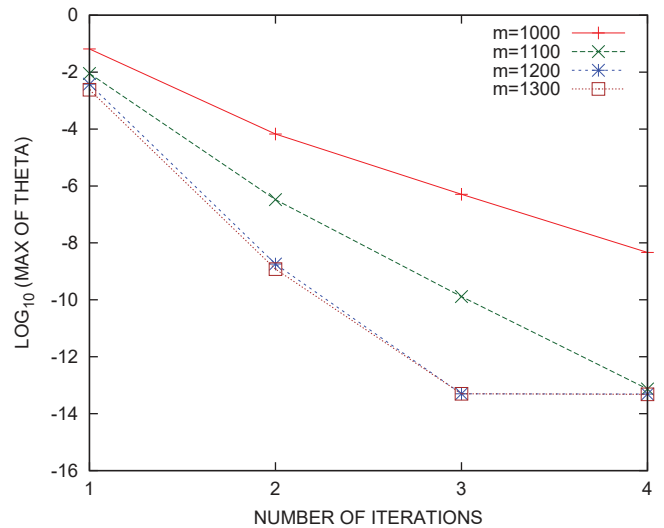


図 A-58 例題 C3：相対残差の最大値 ($n = 8$) ($m > 1192$ が望ましい)

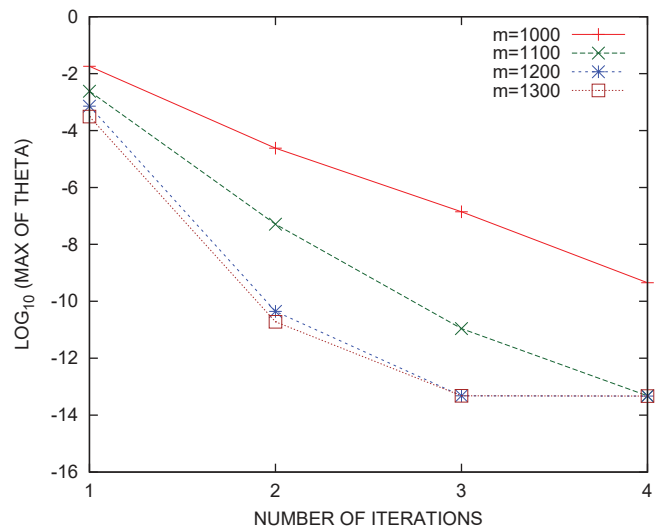


図 A-59 例題 C3：相対残差の最大値 ($n = 10$) ($m > 1192$ が望ましい)

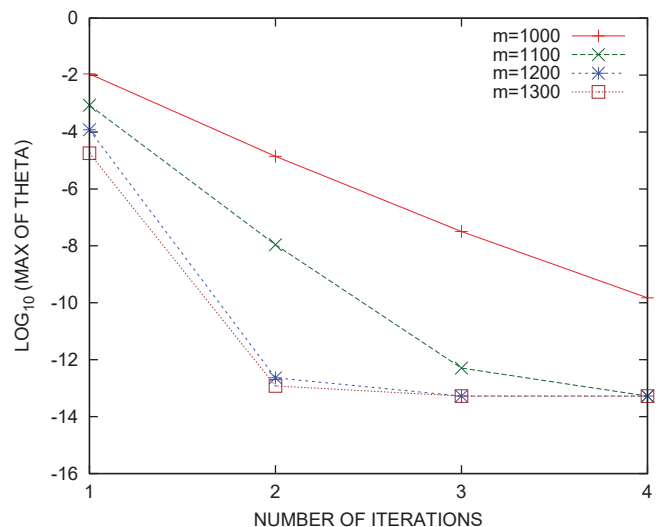


図 A-60 例題 C3：相対残差の最大値 ($n = 15$) ($m > 1192$ が望ましい)

A.1.11 例題 C4：中間固有対を求めた例その 4

この例題 C4 の一般固有値問題は例題 R4, 例題 R5 と同じものである。行列 A と B の次数 N は 336,000 で下帯幅 w_L は 4,261 の中規模な問題である。この問題の固有値が区間 $[a, b] = [250, 260]$ にある固有対 (中間固有対) をすべて求める。そのような固有対は全部で 105 個ある。そして固有値が通過域と遷移域を合併した区間 $[a', b'] = [247.5, 262.5]$ にある固有対は全部で 169 個あるので、フィルタを適用するベクトルの数 m は 169 よりも多くすることが望ましい。

フィルタの次数 n を 8 とする。図 A-61 と図 A-62 はそれぞれ、ベクトルの数 m が 150 と 200 の場合についてのものであり、フィルタの反復回数 IT を 1 から 4 まで変えて、得られた近似固有対の相対残差の分布をプロットしたグラフである。中間固有対用のフィルタのパラメタの組は $(n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12})$ である。図 A-62 のグラフから m が 200 の場合は近似固有対の改良は反復 3 回目で完了して、相対残差の最大値は約 3×10^{-14} である。

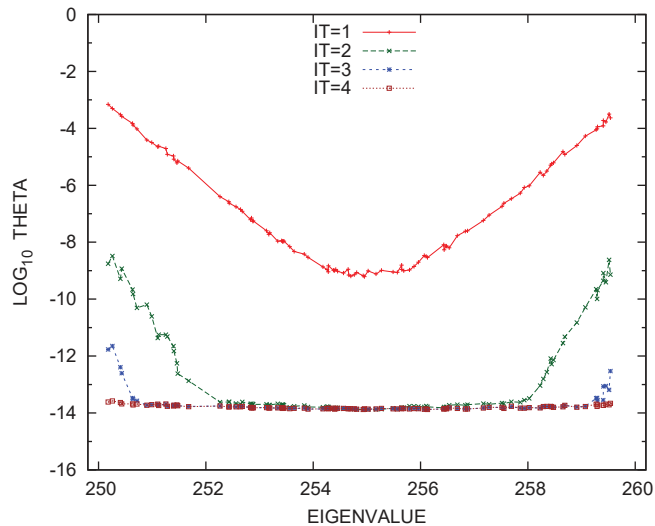


図 A-61 例題 C4：相対残差 ($n = 8, m = 150$) ($m > 169$ が望ましい)

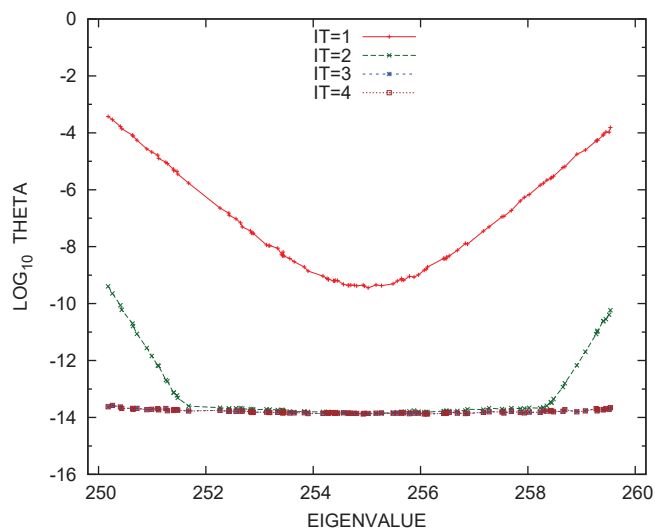


図 A-62 例題 C4：相対残差 ($n = 8, m = 200$)

A.1.12 例題 C5：中間固有対を求めた例その 5

この例題 C5 の FEM の要素分割は $(N_1, N_2, N_3) = (60, 70, 80)$ であり、例題 R4, 例題 R5, 例題 C4 と同じなのでそれらと同じ一般固有値問題になる。係数行列の次数 N は 336,000 で下帯幅 w_L は 4,261 であり、中規模な問題である。この問題の固有値が区間 $[a, b] = [300, 350]$ にある固有対 (中間固有対) をすべて求める。そのような固有対は全部で 592 個ある。そして固有値が通過域と遷移域を合併した区間 $[a', b'] = [287.5, 362.5]$ にある固有対は全部で 904 個あるので、フィルタを適用するベクトルの数 m は 904 よりも多くすることが望ましい。

図 A-63 にベクトルの数 m が 1000 の場合の近似固有対に対する相対残差のグラフを示す。使用した中間固有対用のフィルタのパラメタの組は $(n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12})$ である。このグラフから、近似対の改良は反復 3 回目で完了して、そのときの相対残差の最大値は約 3×10^{-14} であることがわかる。

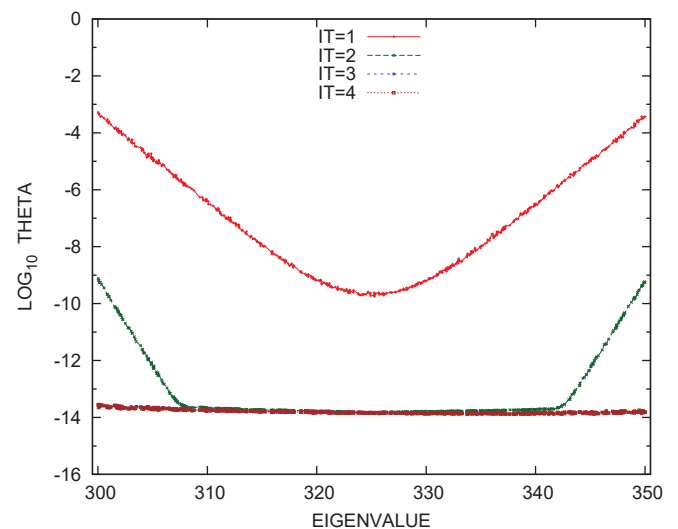


図 A-63 例題 C5：相対残差 ($n = 8, m = 1000$)

A.1.13 例題 C6：中間固有対を求めた例その 6

この例題 C6 では FEM の要素分割を $(N_1, N_2, N_3) = (40, 50, 500)$ とし、一般固有値問題は係数行列 A と B の次数 N が 1,000,000 で下帯幅 w_L が 2,041 の大規模な問題である。この問題の固有対で区間 $[a, b] = [0, 30]$ に固有値があるものをすべて求める（これは下端固有対だが中間固有対としても扱える）。そのような固有対は全部で 54 個ある。そうして固有値が通過域と遷移域を合併した区間 $[a', b'] = [-7.5, 37.5]$ にある固有対は全部で 78 個あるので、フィルタを適用するベクトルの数 m は 78 よりも多くするのが良い。

図 A.64 と図 A.65 はそれぞれ、ベクトルの数 m が 80 と 100 の各場合に、フィルタの反復回数を 1 から 4 まで変えて、得られた近似固有対に対する相対残差のグラフである。使用した中間固有対用のフィルタのパラメタの組は $(n = 8, \mu = 1.5, g_s = 10^{-12})$ である。これらのグラフから、近似対の改良はベクトルの数 m が 80 と 100 のどちらの場合にも反復 3 回目で完了して、相対残差の最大値は約 3×10^{-11} になったことがわかる。

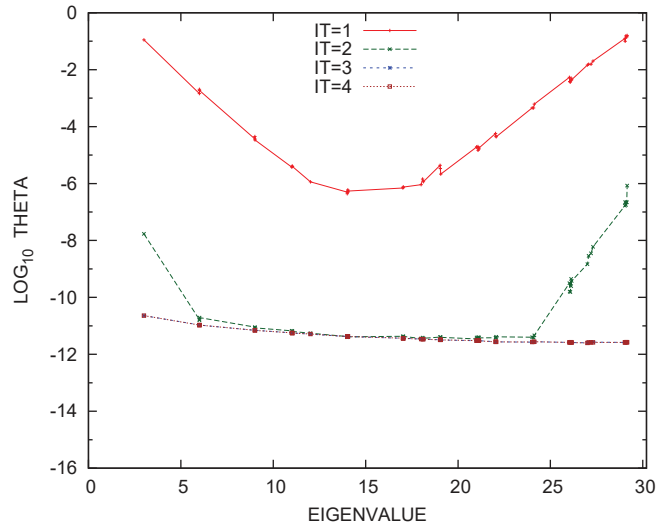


図 A.64 例題 C6：各近似対の相対残差 ($n = 8, m = 80$)

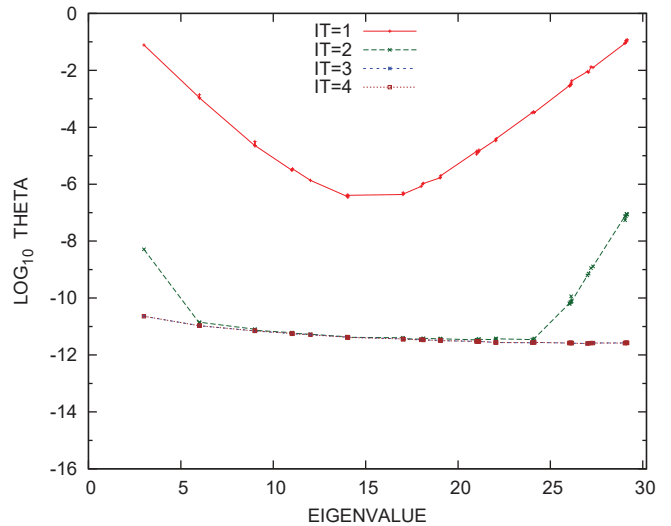


図 A.65 例題 C6：各近似対の相対残差 ($n = 8, m = 100$)

A.2 四倍精度計算による実験例

ここまでの計算結果の例は実数も複素数も数値と演算はすべて IEEE754 規格の倍精度浮動小数点数 (2 進 64bit) を用いて行ったものである。

本章では、使用する数値と演算をすべて IEEE 規格の倍精度 64 ビットから (Intel Fortran がサポートしている) IEEE 規格の四倍精度 128 ビットに変更して、前の章で倍精度で計算した例題の一部 (例題 R1, 例題 R2, 例題 C1, 例題 C2) に対して四倍精度で同様に計算を行い、それにより得られた実験結果について紹介する。

A.2.1 例題 R1-Q : 例題 R1 の四倍精度計算による例

この例題 R1-Q では例題 R1 と同様に、FEM の要素分割 $(N_1, N_2, N_3) = (20, 30, 40)$ から導かれる係数行列の次数 N が 24,000 で下帯幅 w_L が 621 の小規模な一般固有値問題について、固有値が区間 $[0, 45]$ にある全部で 54 個の下端固有対を四倍精度計算で求めた。

A.2.1.1 例題 R1-Q : フィルタの次数 n が 10 の場合

下端固有対用のフィルタの次数 n を 10 とした場合に、図 A-66 と図 A-67 はそれぞれ、フィルタを適用するベクトルの数 m を 100 と 150 にした各場合について、反復回数 IT を 1 から 8 まで変えながら、近似固有対の相対残差 Δ の分布をプロットしたグラフである。

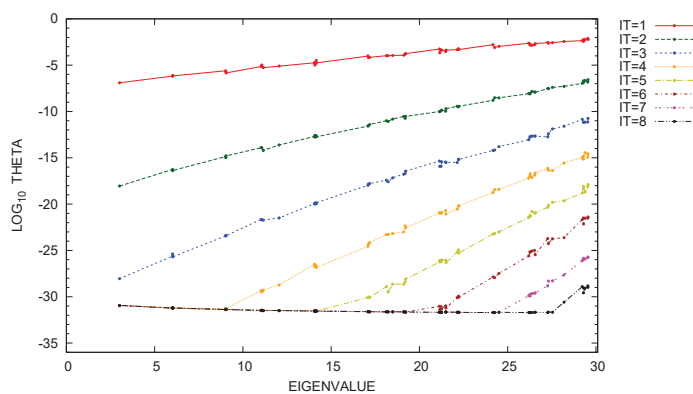


図 A-66 例題 R1-Q : 相対残差 ($n = 10, m = 100$) ($m > 106$ が望ましい)

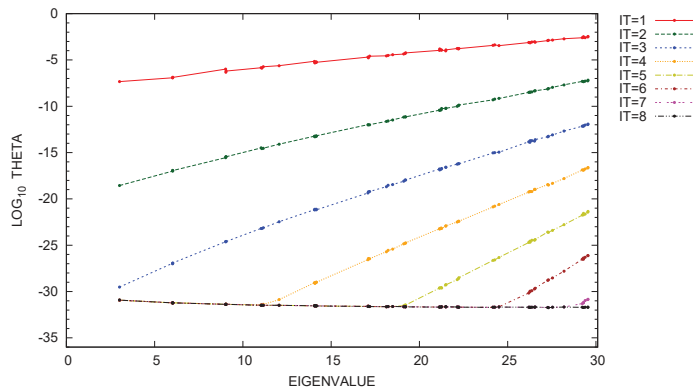


図 A-67 例題 R1-Q : 相対残差 ($n = 10, m = 150$)

A.2.1.2 例題 R1-Q : 相対残差の最大値

表 A-21 はフィルタの次数 n が 10 の場合についてベクトルの数 m と反復回数 IT に対する近似対の相対残差の最大値を表にしたものである。

表 A-21 例題 R1-Q : 相対残差の最大値 ($n = 10$)

IT	$m=100$	$m=110$	$m=120$	$m=130$	$m=140$	$m=150$
1	7.6E-03	5.5E-03	5.2E-03	3.9E-03	3.3E-03	3.3E-03
2	2.6E-07	1.2E-07	1.1E-07	8.1E-08	7.7E-08	6.7E-08
3	1.9E-11	4.5E-12	2.0E-12	1.4E-12	1.3E-12	1.2E-12
4	3.6E-15	7.4E-17	4.2E-17	3.4E-17	2.9E-17	2.5E-17
5	1.3E-18	2.8E-21	7.5E-22	5.8E-22	4.9E-22	4.4E-22
6	3.9E-22	4.0E-26	1.5E-26	1.0E-26	8.3E-27	7.6E-27
7	1.9E-26	5.1E-31	2.8E-31	2.1E-31	2.0E-31	1.5E-31
8	1.4E-29	1.2E-31	1.1E-31	1.1E-31	1.2E-31	1.2E-31

図 A-68 は次数 n が 10 のフィルタに適用するベクトルの数 m を 100 から 10 刻みで 150 まで変えながら、横軸に反復回数 IT を、縦軸に求めた近似固有対に対する相対残差の最大値をグラフにプロットしたものである。フィルタに適用するベクトルの数 m が 110 未満の場合と 110 以上の場合とでは、反復による近似対の残差の改良の様子に違いが見られる。

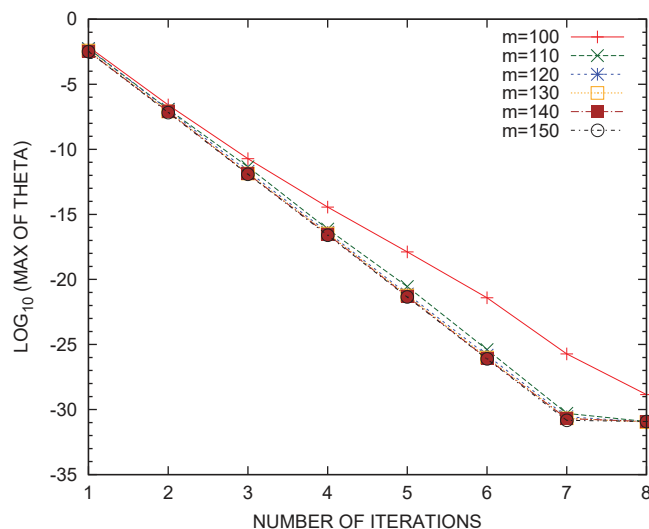


図 A-68 例題 R1-Q : 相対残差の最大値 ($n = 10$) ($m > 106$ が望ましい)

A.2.2 例題 R2-Q：例題 R2 の四倍精度計算による例

この例題 R2-Q では例題 R2 と同様に、例題 R1 と同じ FEM の要素分割 $(N_1, N_2, N_3) = (20, 30, 40)$ から導かれた係数行列の次数 N が 24,000 で下帯幅 w_L が 621 の小規模な一般固有値問題について、固有値が区間 $[0, 100]$ にある全部で 378 個の下端固有対を四倍精度計算で求めた。

A.2.2.1 例題 R2-Q：フィルタの次数 n が 10 の場合

フィルタの次数 n を 10 とした場合に、図 A-69 と図 A-70 はそれぞれ、フィルタに適用したベクトルの数 m を 500 と 700 とした各場合について、反復回数 IT を 1 から 6 まで変えながら、近似固有対に対する相対残差 Δ の分布をグラフにプロットしたものである。ベクトルの数 m は 700 よりもある程度多くすることが望ましいので、 m が 500 の場合は反復に伴う相対残差の改良が悪く、反復回数 IT が 6 の段階においても固有値が 40 以上の近似対に対する相対残差はまだ大きい。 m が 700 の場合は、固有値が 80 以下の近似対については反復回数 IT が 6 の段階ですでに相対残差の改良は完了しているが、それ以外の近似対についてはまだ改良を受ける余地が残っていることが見てとれる。

A.2.2.2 例題 R2-Q：相対残差の最大値

表 A-22 はフィルタの次数 n が 10 の場合についてベクトルの数 m と反復回数 IT に対する近似対の相対残差の最大値を表にしたものである。

表 A-22 例題 R2-Q：相対残差の最大値 ($n = 10$)

IT	$m = 500$	$m = 600$	$m = 700$	$m = 750$
1	1.2E-02	4.5E-03	2.2E-03	1.6E-03
2	5.6E-04	4.1E-06	4.3E-08	2.5E-08
3	2.3E-05	1.5E-08	1.4E-12	5.2E-13
4	1.1E-06	5.2E-11	3.9E-17	1.3E-17
5	6.8E-08	1.3E-13	1.0E-21	3.3E-22
6	2.9E-09	3.1E-16	2.1E-26	7.4E-27
7	2.7E-10	1.3E-18	9.5E-31	1.8E-31
8	1.5E-11	7.2E-21	1.7E-31	1.7E-31

図 A-71 は、横軸に反復回数を 1 から 8 までとり、縦軸には近似固有対の相対残差の最大値をグラフにプロットしたものである。このグラフから、ベクトルの数 m が 700 以上である場合は反復 7 回目で既に残差の改良が（四倍精度の数値の範囲では）完了していること、 m が 700 未満である 500 や 600 の場合には、反復に伴う改良の進行が遅いことがわかる。

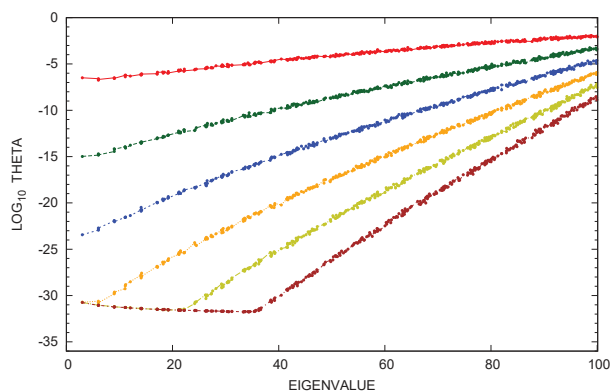


図 A-69 例題 R2-Q：相対残差 ($n = 10, m = 500$) ($m > 700$ が望ましい)

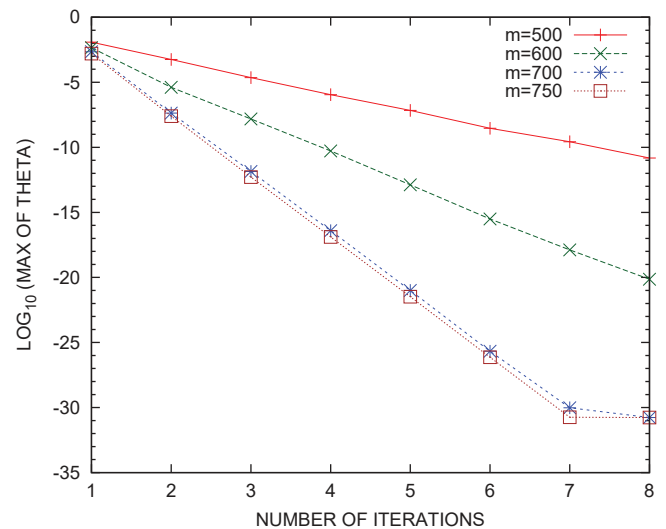


図 A-71 例題 R2-Q：相対残差の最大値 ($n = 10$) ($m > 700$ が望ましい)

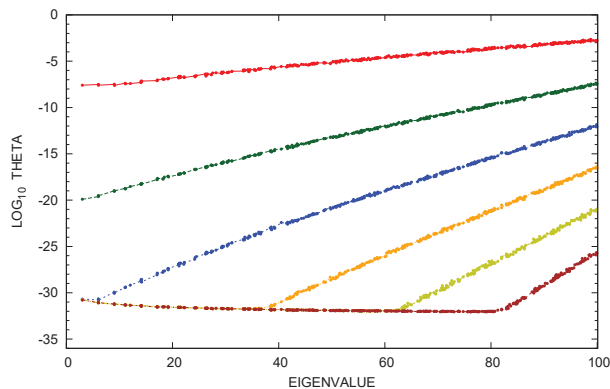


図 A-70 例題 R2-Q：相対残差 ($n = 10, m = 700$) ($m > 700$ が望ましい)

A.2.3 例題 C1-Q : 例題 C1 の四倍精度計算による例

この例題 C1-Q では例題 C1 と同様に、例題 R1, 例題 R2 と同一の小規模な一般固有値問題について、固有値が区間 $[300, 310]$ にある全部で 90 個の中間固有対を四倍精度計算で求めた。

A.2.3.1 例題 C1-Q : フィルタの次数 n が 8 の場合

図 A.72 から図 A.77 まではそれぞれ、フィルタを適用するベクトルの数 m を 100 から 10 刻みで 150 まで変えた各場合についてのもので、フィルタの次数 n を 8 として、反復回数 IT を 1 から 6 まで変えながら、近似固有対の相対残差の分布をプロットしたグラフである。

これらのグラフから、ベクトルの数 m が 130 未満と 130 以上とでは相対残差の減少の振る舞いの様子がかなり異なり、近似固有対の改良は m が 130 以上では反復 6 回目で完了してそのときの相対残差の最大値は 10^{-32} 程度になっている。

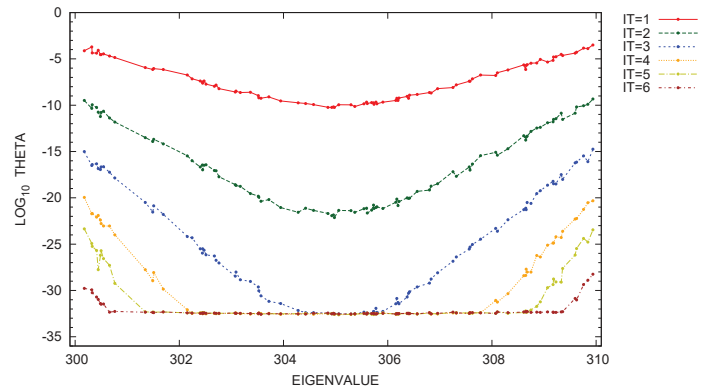


図 A.74 例題 C1-Q : 相対残差 ($n = 8, m = 120$) ($m > 125$ が望ましい)

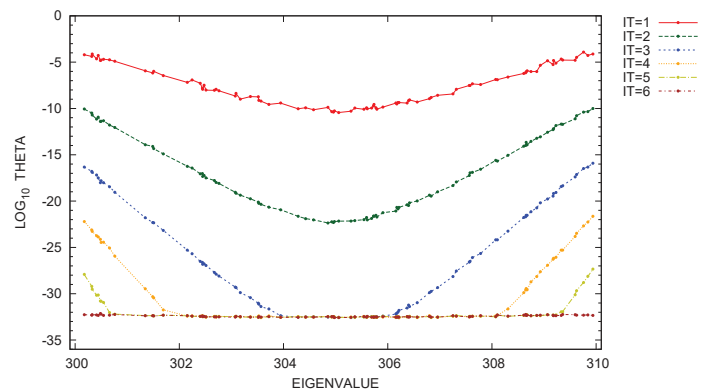


図 A.75 例題 C1-Q : 相対残差 ($n = 8, m = 130$)

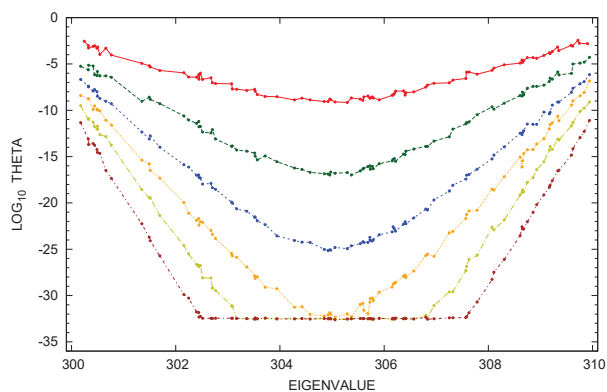


図 A.72 例題 C1-Q : 相対残差 ($n = 8, m = 100$) ($m > 125$ が望ましい)

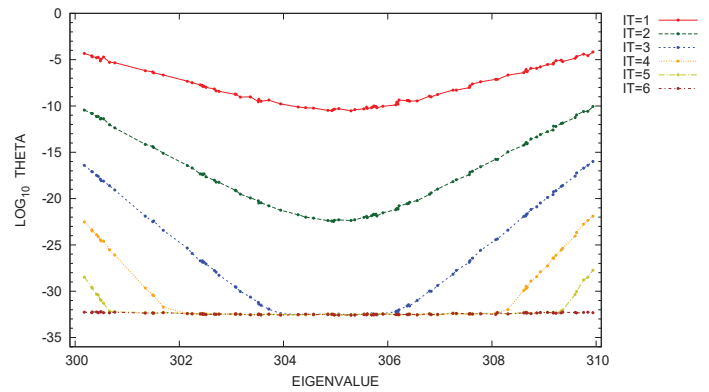


図 A.76 例題 C1-Q : 相対残差 ($n = 8, m = 140$)

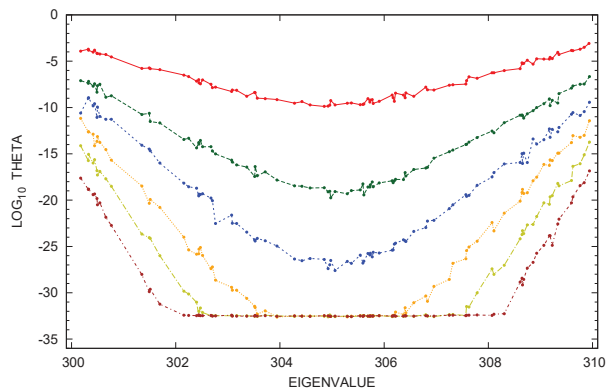


図 A.73 例題 C1-Q : 相対残差 ($n = 8, m = 110$) ($m > 125$ が望ましい)

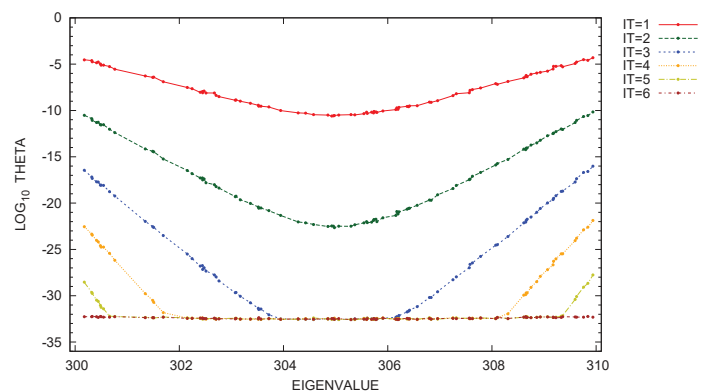


図 A.77 例題 C1-Q : 相対残差 ($n = 8, m = 150$)

A.2.3.2 例題 C1-Q: フィルタの次数 n が 10 の場合

図 A.78 から図 A.83 まではそれぞれ、フィルタを適用するベクトルの数 m を 100 から 10 刻みで 150 まで変えた各場合についてのもので、今度はフィルタの次数 n を 10 にして、反復回数 IT を 1 から 6 まで変えながら、近似固有対の相対残差の分布をプロットしたグラフである。

これらのグラフから、ベクトルの数 m が 130 未満と 130 以上とでは相対残差の減少の振る舞いの様子が異なり、近似固有対の改良は m が 130 以上では反復 5 回目で完了してそのときの相対残差の最大値は 10^{-32} 程度になっている (m が 130 のときには相対残差の最大値は 10^{-31} 程度)。

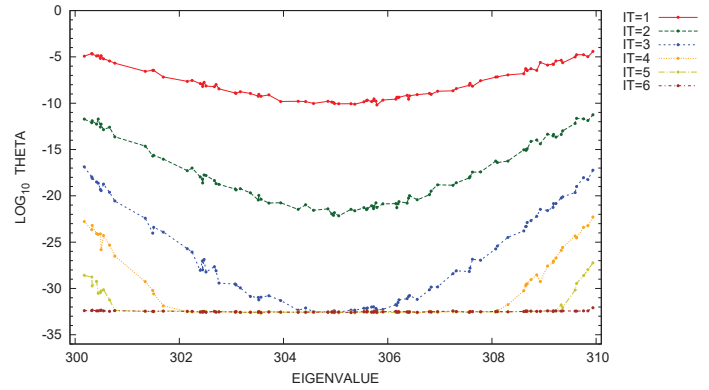


図 A.80 例題 C1-Q: 相対残差 ($n = 10, m = 120$) ($m > 125$ が望ましい)

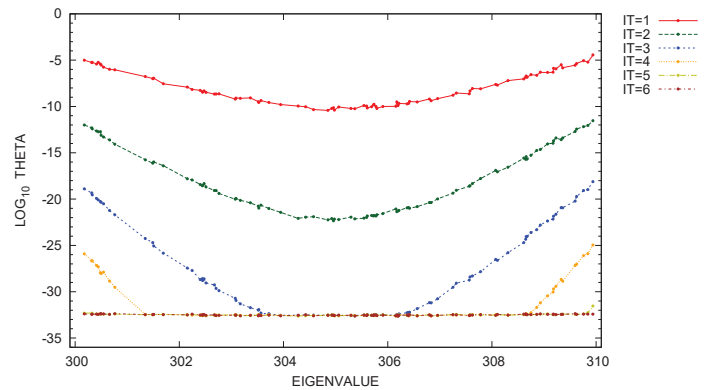


図 A.81 例題 C1-Q: 相対残差 ($n = 10, m = 130$)

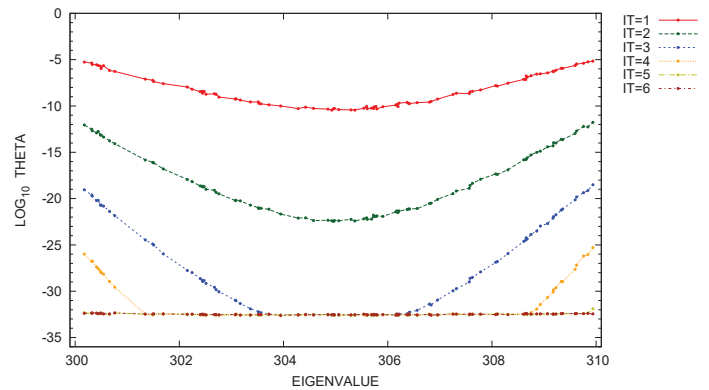


図 A.82 例題 C1-Q: 相対残差 ($n = 10, m = 140$)

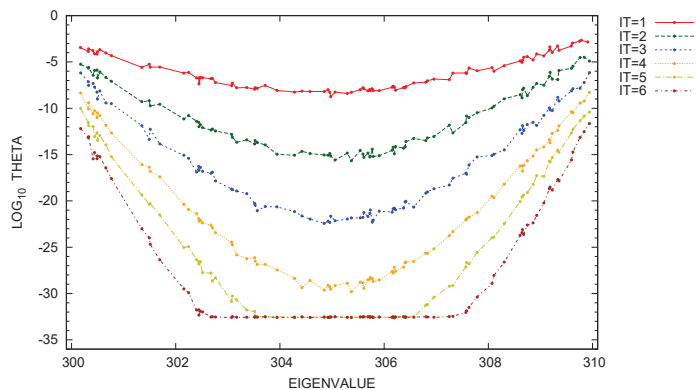


図 A.78 例題 C1-Q: 相対残差 ($n = 10, m = 100$) ($m > 125$ が望ましい)

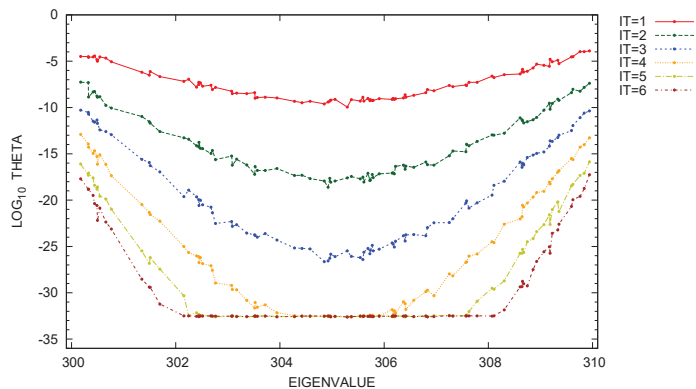


図 A.79 例題 C1-Q: 相対残差 ($n = 10, m = 110$) ($m > 125$ が望ましい)

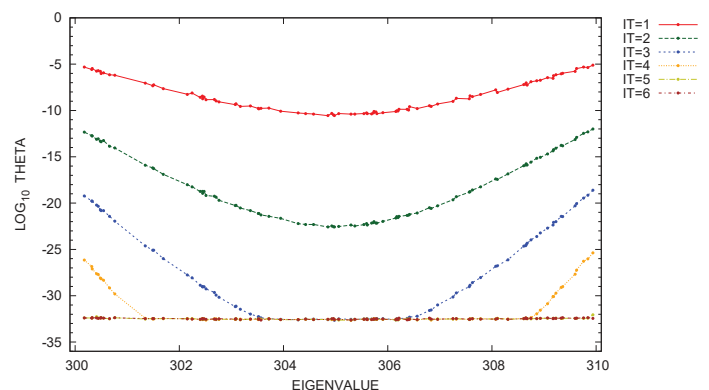


図 A.83 例題 C1-Q: 相対残差 ($n = 10, m = 150$)

A.2.3.3 例題 C1-Q：フィルタの次数 n が 15 の場合

図 A.84 から図 A.89 まではそれぞれ、フィルタを適用するベクトルの数 m を 100 から 10 刻みで 150 まで変えた各場合についてのもので、今度はフィルタの次数 n を 15 にして、反復回数 IT を 1 から 6 まで変えながら、近似固有対の相対残差の分布をプロットしたグラフである。

これらのグラフから、ベクトルの数 m が 130 未満と 130 以上とでは相対残差の減少の振る舞いの様子がかなり異なり、近似固有対の改良は m が 130 以上では反復 5 回目で完了してそのときの相対残差の最大値は 10^{-32} 程度になっている（反復 4 回目でもすでに相対残差の最大値は 10^{-30} 程度となっている）。

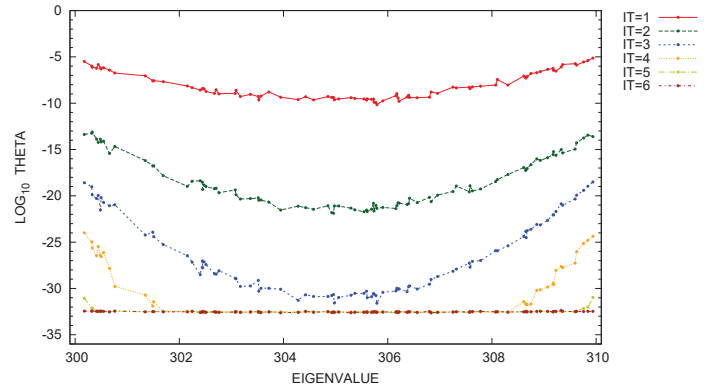


図 A.86 例題 C1-Q：相対残差 ($n = 15, m = 120$) ($m > 125$ が望ましい)

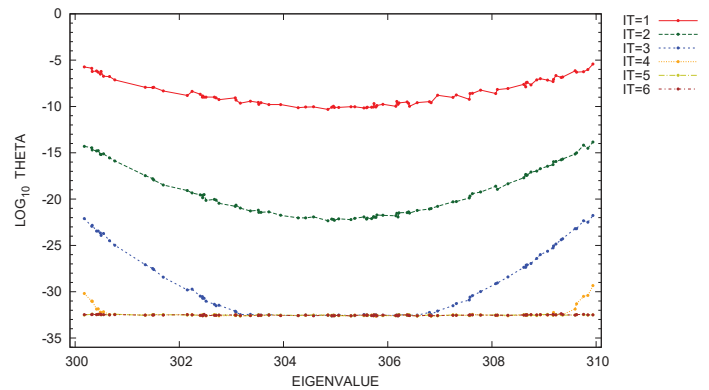


図 A.87 例題 C1-Q：相対残差 ($n = 15, m = 130$)

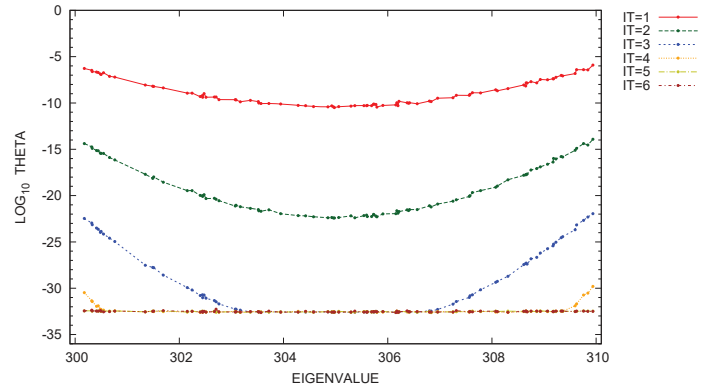


図 A.88 例題 C1-Q：相対残差 ($n = 15, m = 140$)

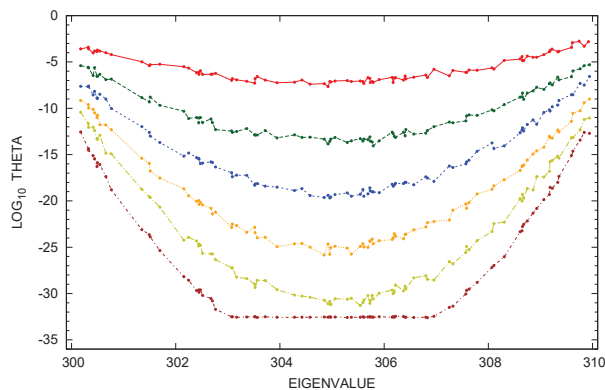


図 A.84 例題 C1-Q：相対残差 ($n = 15, m = 100$) ($m > 125$ が望ましい)

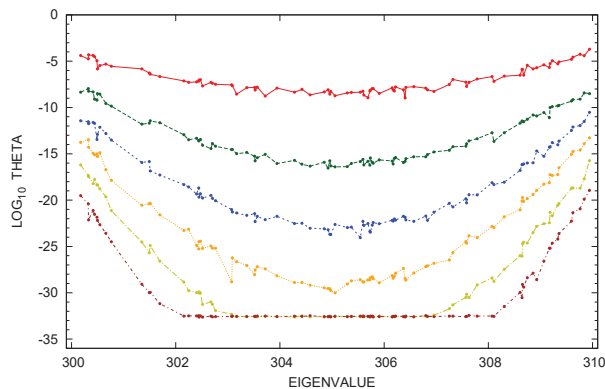


図 A.85 例題 C1-Q：相対残差 ($n = 15, m = 110$) ($m > 125$ が望ましい)

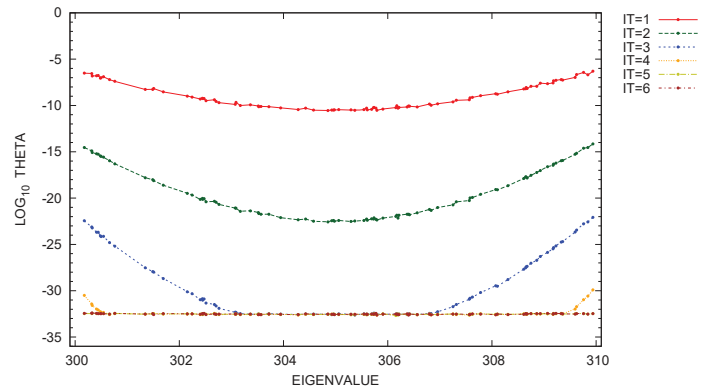


図 A.89 例題 C1-Q：相対残差 ($n = 15, m = 150$)

A.2.3.4 例題 C1-Q：相対残差の最大値

表 A-23, 表 A-24, 表 A-25 はそれぞれ, フィルタの次数 n を 8, 10, 15 とした各場合について, ベクトルの数 m と反復回数 IT について, 近似固有対の相対残差の最大値を表にしたものである。

表 A-23 例題 C1-Q：相対残差の最大値 ($n = 8$)

IT	$m=100$	$m=110$	$m=120$	$m=130$	$m=140$	$m=150$
1	3.6E-03	8.3E-04	3.2E-04	1.3E-04	6.5E-05	5.0E-05
2	5.1E-05	2.2E-07	4.7E-10	9.7E-11	8.7E-11	7.0E-11
3	7.2E-07	1.1E-09	1.8E-15	1.2E-16	1.0E-16	9.5E-17
4	1.5E-07	6.5E-12	1.1E-20	2.3E-22	1.3E-22	1.3E-22
5	7.7E-10	1.8E-14	4.6E-24	4.5E-28	1.9E-28	1.8E-28
6	7.8E-12	1.4E-17	5.6E-29	7.2E-33	5.9E-33	5.8E-33
7	2.4E-13	3.6E-20	6.6E-33	6.2E-33	6.5E-33	6.6E-33
8	1.5E-14	5.2E-22	5.9E-33	6.3E-33	6.3E-33	6.4E-33

表 A-24 例題 C1-Q：相対残差の最大値 ($n = 10$)

IT	$m=100$	$m=110$	$m=120$	$m=130$	$m=140$	$m=150$
1	2.2E-03	1.3E-04	3.9E-05	3.6E-05	7.0E-06	7.8E-06
2	3.2E-05	5.4E-08	5.6E-12	2.9E-12	1.7E-12	1.0E-12
3	7.0E-07	5.3E-11	1.3E-17	7.8E-19	3.2E-19	2.4E-19
4	5.3E-09	1.2E-13	5.1E-23	1.1E-25	5.0E-26	4.3E-26
5	9.4E-11	1.4E-16	5.8E-28	2.8E-32	1.2E-32	8.8E-33
6	2.3E-12	5.4E-18	8.1E-33	4.3E-33	4.6E-33	4.4E-33
7	3.6E-14	5.0E-22	4.7E-33	4.3E-33	4.4E-33	4.3E-33
8	8.8E-16	1.4E-24	4.3E-33	4.5E-33	4.5E-33	4.4E-33

表 A-25 例題 C1-Q：相対残差の最大値 ($n = 15$)

IT	$m=100$	$m=110$	$m=120$	$m=130$	$m=140$	$m=150$
1	1.7E-03	2.0E-04	7.3E-06	3.7E-06	1.2E-06	5.0E-07
2	4.8E-06	1.1E-08	7.5E-14	1.4E-14	1.2E-14	7.1E-15
3	2.7E-07	3.0E-11	3.2E-19	1.7E-22	1.1E-22	8.2E-23
4	9.8E-10	5.5E-14	9.9E-25	4.6E-30	1.6E-30	1.2E-30
5	3.7E-11	1.9E-16	1.0E-31	3.8E-33	3.7E-33	3.8E-33
6	2.9E-13	1.2E-19	4.1E-33	4.3E-33	5.4E-33	3.8E-33
7	2.7E-15	2.5E-22	3.9E-33	3.8E-33	3.7E-33	3.7E-33
8	5.2E-17	1.9E-25	3.9E-33	3.8E-33	3.7E-33	3.7E-33

図 A-90, 図 A-91, 図 A-92 はそれぞれ, フィルタの次数 n を 8, 10, 15 とした各場合についてのもの, 横軸には反復回数を 1 から 8 までとり, 縦軸には近似固有対の相対残差の最大値をとって, ベクトルの数 m を 100 から 10 刻みで 150 まで変えながら, プロットしたグラフである。

これらのグラフから, ベクトルの数 m が 130 以上の場合には, 近似固有対の改良はフィルタの次数 n が 8 のときには反復 6 回目, n が 10 と 15 のときには反復 5 回目でそれぞれ完了したことがわかる。

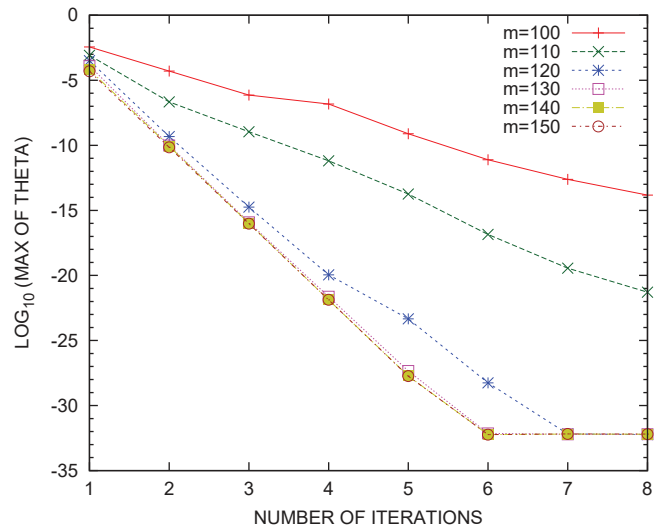


図 A-90 例題 C1-Q：相対残差の最大値 ($n = 8$) ($m > 125$ が望ましい)

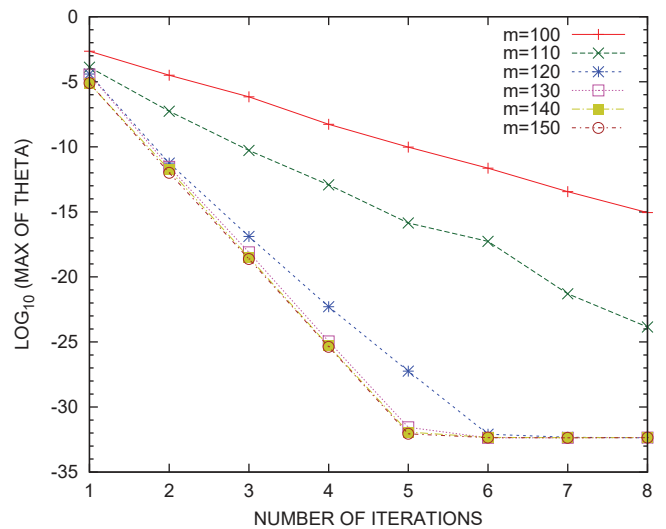


図 A-91 例題 C1-Q：相対残差の最大値 ($n = 10$) ($m > 125$ が望ましい)

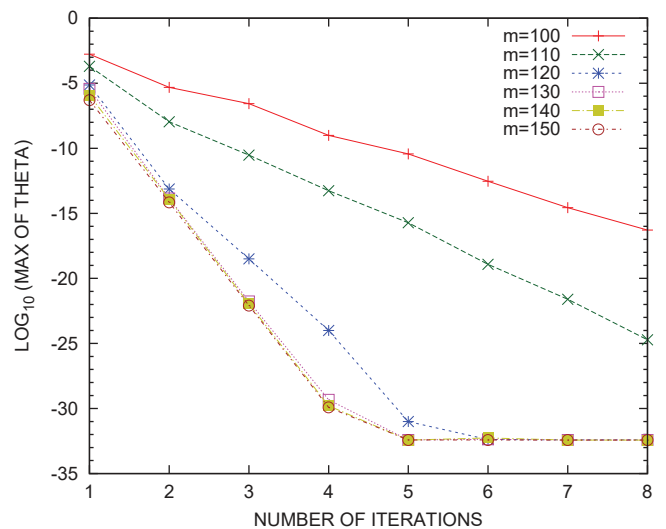


図 A-92 例題 C1-Q：相対残差の最大値 ($n = 15$) ($m > 125$ が望ましい)

A.2.4 例題 C2-Q：例題 C2 の四倍精度計算による例

この例題 C2-Q では例題 C2 と同様に、例題 R1, 例題 R2, 例題 C1 と同一の小規模な一般固有値問題（行列次数 N が 24,000, 下帯幅 w_L が 621）について、固有値が区間 $[1000, 1010]$ にある全部で 92 個の中間固有対を四倍精度計算で求めた。

A.2.4.1 例題 C2-Q：フィルタの次数 n が 10 の場合

図 A-93 から図 A-98 まではそれぞれ、フィルタを適用するベクトルの数 m を 100 から 10 刻みで 150 まで変えた各場合についてのもので、フィルタの次数 n を 10 とし、反復回数 IT を 1 から 6 まで変えて、近似固有対の相対残差の分布をプロットしたグラフである。

これらのグラフから、ベクトルの数 m が 140 未満と 140 以上とでは相対残差の減少の振る舞いの方がかなり異なり、近似固有対の改良は m が 140 では反復 6 回目で、 m が 150 では反復 5 回目でそれぞれ完了してそのときの相対残差の最大値は 10^{-32} 程度になっている (m が 140 のとき反復 5 回目では相対残差の最大値は約 2×10^{-30})。

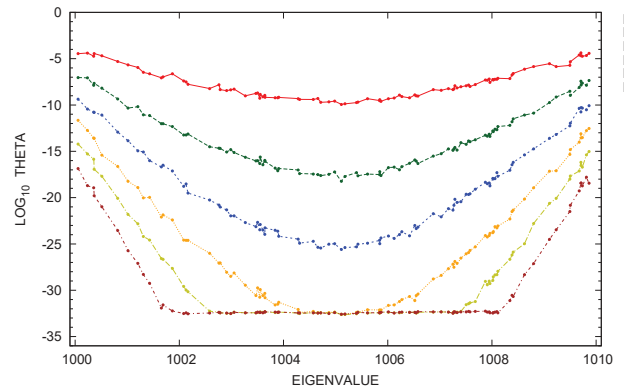


図 A-95 例題 C2-Q：相対残差 ($n = 10, m = 120$) ($m > 145$ が望ましい)

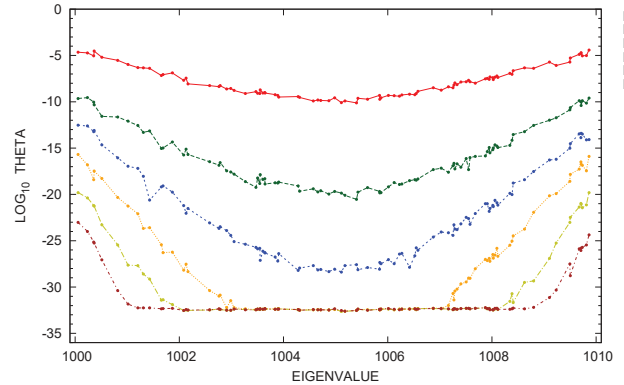


図 A-96 例題 C2-Q：相対残差 ($n = 10, m = 130$) ($m > 145$ が望ましい)

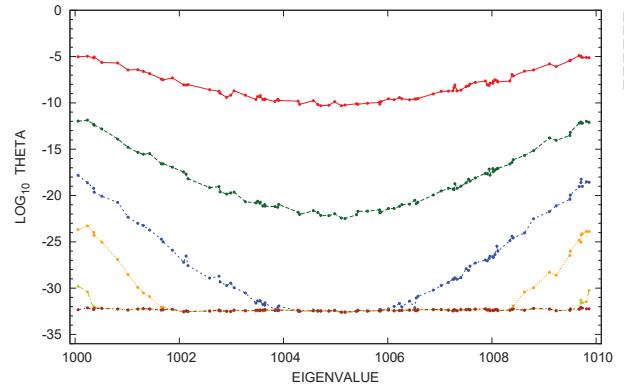


図 A-97 例題 C2-Q：相対残差 ($n = 10, m = 140$) ($m > 145$ が望ましい)

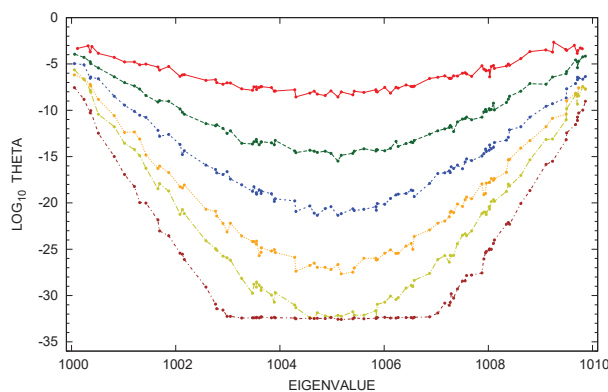


図 A-93 例題 C2-Q：相対残差 ($n = 10, m = 100$) ($m > 145$ が望ましい)

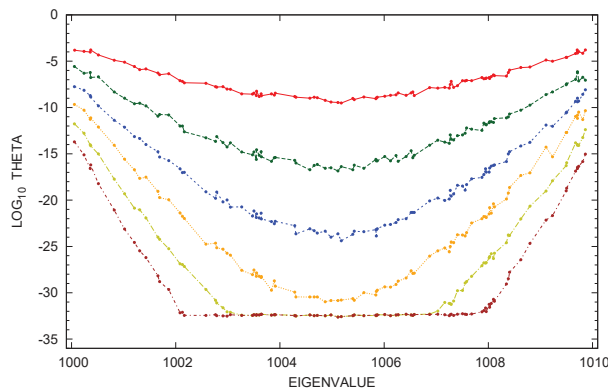


図 A-94 例題 C2-Q：相対残差 ($n = 10, m = 110$) ($m > 145$ が望ましい)

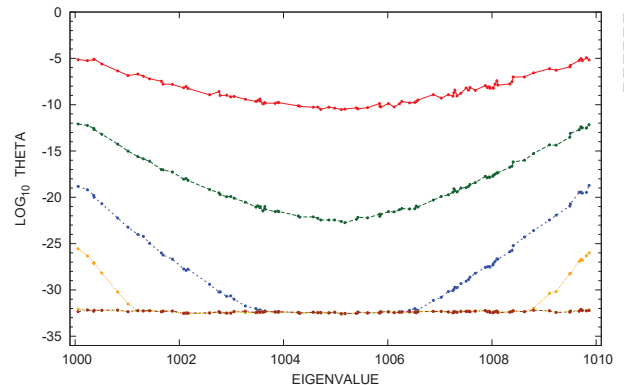


図 A-98 例題 C2-Q：相対残差 ($n = 10, m = 150$)

A.2.4.2 例題 C2-Q：フィルタの次数 n が 15 の場合

図 A-99 から図 A-104 まではそれぞれ、フィルタを適用するベクトルの数 m を 100 から 10 刻みで 150 まで変えた各場合についてのもの、今度はフィルタの次数 n を 15 とし、反復回数 IT を 1 から 6 まで変えて、近似固有対の相対残差の分布をプロットしたグラフである。

これらのグラフから、ベクトルの数 m が 140 未満と 140 以上とでは相対残差の減少の振る舞い様子がかなり異なり、近似固有対の改良は m が 140 以上では反復 5 回目で完了してそのときの相対残差の最大値は 10^{-32} 程度になっている（反復 4 回目では改良はまだ完全には完了しておらずに、 m が 140 のときは相対残差の最大値は 10^{-26} 程度、 m が 150 のときは相対残差の最大値は 10^{-30} 程度となっている）。

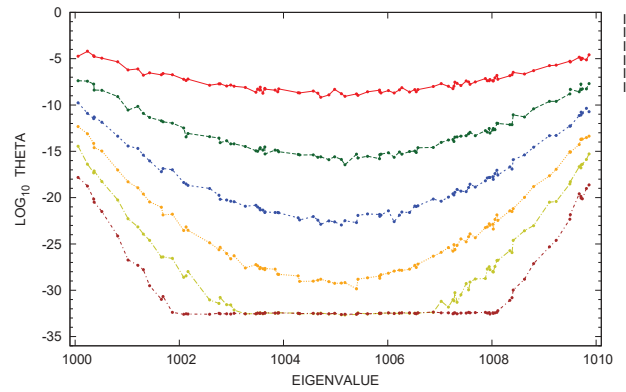


図 A-101 例題 C2-Q：相対残差 ($n = 15, m = 120$) ($m > 145$ が望ましい)

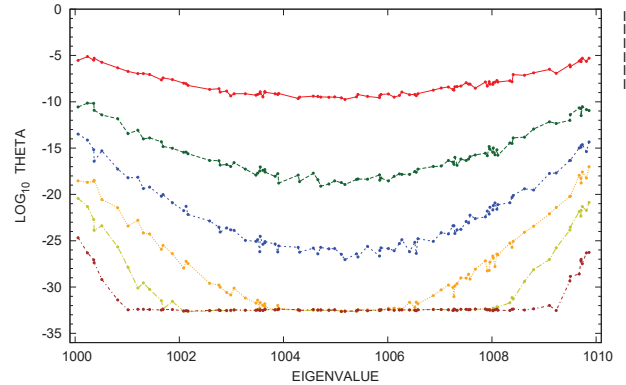


図 A-102 例題 C2-Q：相対残差 ($n = 15, m = 130$) ($m > 145$ が望ましい)

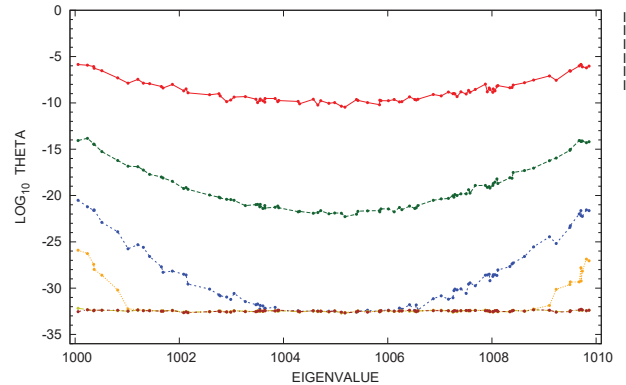


図 A-103 例題 C2-Q：相対残差 ($n = 15, m = 140$) ($m > 145$ が望ましい)

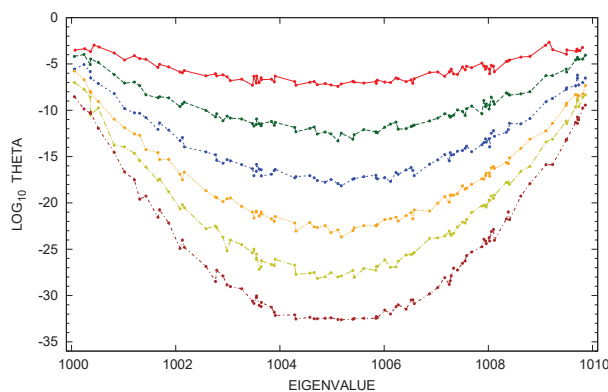


図 A-99 例題 C2-Q：相対残差 ($n = 15, m = 100$) ($m > 145$ が望ましい)

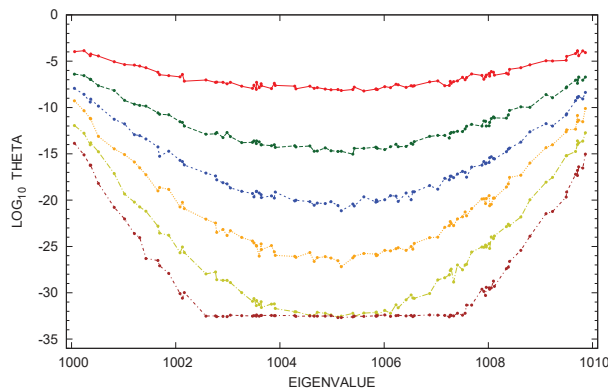


図 A-100 例題 C2-Q：相対残差 ($n = 15, m = 110$) ($m > 145$ が望ましい)

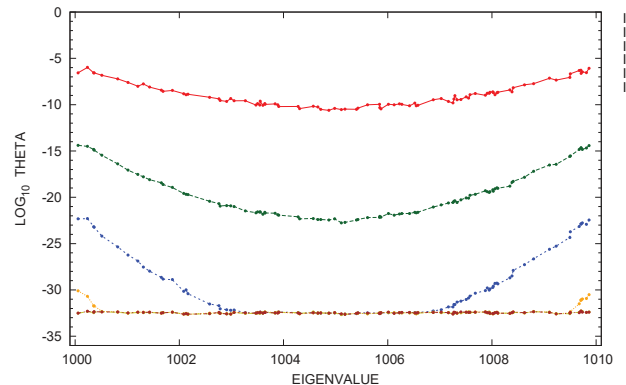


図 A-104 例題 C2-Q：相対残差 ($n = 15, m = 150$)

A.2.4.3 例題 C2-Q：相対残差の最大値

表 A-26 と表 A-27 はそれぞれフィルタの次数 n を 10 と 15 とした各場合について、ベクトルの数 m と反復回数 IT について、近似固有対の相対残差の最大値を表にしたものである。

表 A-26 例題 C2-Q：相対残差の最大値 ($n = 10$)

IT	$m=100$	$m=110$	$m=120$	$m=130$	$m=140$	$m=150$
1	2.2E-03	1.7E-04	4.2E-05	4.0E-05	1.3E-05	1.1E-05
2	1.2E-04	2.6E-06	9.2E-08	2.8E-10	1.3E-12	8.1E-13
3	1.1E-05	1.8E-08	4.2E-10	3.0E-13	1.5E-18	1.9E-19
4	6.8E-07	2.1E-10	2.2E-12	2.0E-16	5.2E-24	2.7E-26
5	2.4E-06	1.7E-12	6.0E-15	1.6E-20	1.7E-30	8.5E-33
6	2.8E-08	2.0E-14	1.4E-17	9.5E-24	8.0E-33	7.8E-33
7	7.7E-09	2.6E-16	7.5E-20	6.1E-27	7.9E-33	8.1E-33
8	1.2E-09	4.0E-18	1.6E-21	1.5E-30	7.9E-33	7.8E-33

表 A-27 例題 C2-Q：相対残差の最大値 ($n = 15$)

IT	$m=100$	$m=110$	$m=120$	$m=130$	$m=140$	$m=150$
1	2.1E-03	1.4E-04	6.3E-05	7.6E-06	1.4E-06	1.1E-06
2	1.0E-04	4.0E-07	4.2E-08	7.2E-11	1.5E-14	4.1E-15
3	8.8E-06	1.1E-08	1.7E-10	3.4E-14	3.1E-21	4.9E-23
4	1.7E-06	5.2E-10	4.5E-13	9.6E-18	1.2E-26	8.0E-31
5	1.0E-07	1.2E-12	3.6E-15	3.8E-21	6.8E-33	5.3E-33
6	2.9E-09	1.4E-14	1.5E-18	2.2E-25	5.1E-33	4.9E-33
7	5.8E-09	3.5E-17	2.0E-21	2.3E-29	5.1E-33	5.3E-33
8	1.0E-10	1.3E-18	1.3E-23	1.3E-32	5.0E-33	5.4E-33

図 A-105 と図 A-106 はそれぞれフィルタの次数 n を 10 と 15 とした各場合について、ベクトルの数 m を 100 から 10 刻みで 150 まで変えながら、横軸には反復回数を 1 から 8 までとり、縦軸には近似固有対の相対残差の最大値をグラフにプロットしたものである。

フィルタの次数 n が 10 のとき図 A-105 のグラフから、ベクトルの数 m が 140 未満と 140 以上とでは相対残差の減少の振る舞いのがかなり異なり、近似固有対の改良は m が 140 では反復 6 回目、 m が 150 では反復 5 回目でそれぞれ完了している、そのときの相対残差の最大値は 10^{-32} 程度になっている (m が 140 のとき反復 5 回目では相対残差の最大値は約 2×10^{-30})。

次数 n が 15 のときのグラフ図 A-106 から、ベクトルの数 m が 140 未満と 140 以上とでは相対残差の減少の振る舞いのがかなり異なり、近似固有対の改良は m が 140 以上では反復 5 回目で完了してそのときの相対残差の最大値は 10^{-32} 程度になっている (改良は反復 4 回目ではまだ完全には完了してなくて、 m が 140 のときは相対残差の最大値は 10^{-26} 程度、 m が 150 のときは相対残差の最大値は 10^{-30} 程度となっている)。

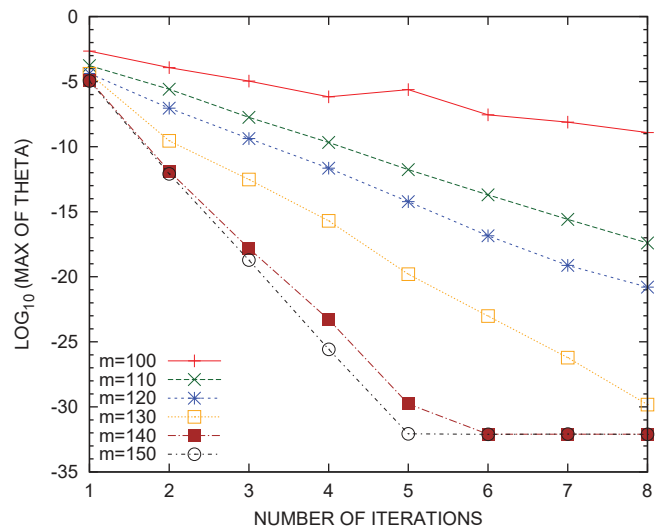


図 A-105 例題 C2-Q：相対残差の最大値 ($n = 10$) ($m > 145$ が望ましい)

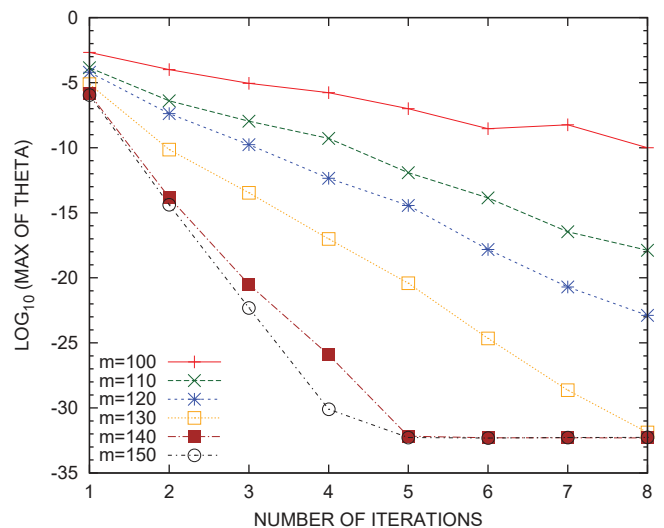


図 A-106 例題 C2-Q：相対残差の最大値 ($n = 15$) ($m > 145$ が望ましい)