

実対称定値一般固有値問題の フィルタ対角化法の数理

村上 弘^{†1}

フィルタ対角化法を用いて、大規模な実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の、指定区間に固有値がある固有対の近似を求める。フィルタ作用素としてレゾルベントの線形結合を用いる場合のフィルタ対角化法について数学的な解析を行った。

Mathematics of Filter Diagonalization Method to Solve Real Symmetric Definite Generalized Eigenproblems

HIROSHI MURAKAMI^{†1}

For a real symmetric definite generalized eigenproblem $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ of large size, the filter diagonalization method is used to solve approximations of those eigenpairs whose eigenvalues are in the specified interval. A mathematical analysis is made on the filter diagonalization method when a linear combination of resolvents is used as the filter operator.

1. はじめに

フィルタ対角化法⁷⁾⁻¹¹⁾では、大規模な実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有対で固有値が指定区間 $[a, b]$ にあるものだけを選択的に近似して求めることができる。

数学的な取扱いの容易さから、本論文中で用いるフィルタは異なるシフト量を持つレゾルベントの線形結合の形で表せるものに限定する。レゾルベントのシフト量と線形結合の係数はどちらも一般には複素数である。

フィルタ対角化法では、まず係数行列 A, B と区間 $[a, b]$ をもとにして帯域通過特性がう

まく調整されたフィルタを準備する。次に、十分多くの乱数ベクトルの組を B -正規直交化したものをフィルタへの入力ベクトルの組として用意して、それにフィルタを作用させてフィルタからの出力ベクトルの組を作る。そうしてその出力ベクトルの組を subspace 法に部分空間の基底として与えて近似固有対を求める。

しかしフィルタの性質の自然な帰結として、出力ベクトルの組は普通は数値的な階数が多く落ちていて極めて悪条件であるので、subspace 法に与える部分空間の基底として出力ベクトルの組をそのまま用いるのは数値的には適切ではない。そこで従来は、出力ベクトルの組に対して計量 B による特異値分解を行って閾値以上の特異値を持つ特異ベクトルだけを集める正則化 (regularization) の処理を適用し、得られた B -正規直交基底に対して subspace 法を適用していた。しかし閾値の決定法には根拠が見だしにくいことや、固有値は $[a, b]$ にあるが残差の大きい偽の固有対が現れてしまうなどの困難があった¹²⁾⁻¹⁴⁾。

そこで本論文でも紹介する方法¹²⁾⁻¹⁴⁾では、フィルタの入力ベクトルの組と出力ベクトルの組の両方とフィルタの伝達関数の値分布に関する性質を用いることで、出力ベクトルの組の張る空間の中から一種の正則化を行うことで B -正規直交基底を、固有値が $[a, b]$ (の近傍) にある不変部分空間の基底の近似となるように構成する。そのように構成された不変部分空間を近似する B -正規直交基底を subspace 法に与えると、固有値が $[a, b]$ (の近傍) にあるすべての近似固有対が安定に求まる。

2. フィルタとその伝達関数

フィルタ対角化法により通過帯域が $[a, b]$ のフィルタを利用して大規模な N 次の実対称定値一般固有値問題 (GEVP) : $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有対で固有値が区間 $[a, b]$ 内にあるものだけを求める。フィルタ作用素 \mathcal{F} は複素シフト量 τ のレゾルベント $\mathcal{R}(\tau) \equiv (A - \tau B)^{-1} B$ の線形結合 : $\mathcal{F} = c_\infty I + \sum_{p=1}^{2n} \gamma_p \mathcal{R}(\tau_p)$ であるとする。そのとき、固有値が λ の固有ベクトル \mathbf{v} に対して $\mathcal{F}\mathbf{v} = f(\lambda)\mathbf{v}$ が成立する。ここで、 $f(\lambda) = c_\infty + \sum_{p=1}^{2n} \gamma_p / (\lambda - \tau_p)$ は λ の有理関数で、固有値 λ の固有ベクトルのフィルタによる伝達率を与えるので伝達関数と呼ばれる。実対称定値一般固有値問題では、固有値と固有ベクトルは全て実数の範囲にとれるので、実ベクトルをフィルタに作用させた結果が実ベクトルとなるように、 \mathcal{F} は実演算子、 $f(\lambda)$ も実軸上で有界な実の有理関数とする。フィルタ \mathcal{F} あるいは伝達関数 $f(\lambda)$ の定義パラメタである次数 n 、複素シフト量 τ_p 、複素結合係数 γ_p 、実係数 c_∞ は、伝達関数の形状に対して課す制約条件を満たすように決める。

アナログ回路のフィルタの設計^{2),6)}において Butterworth, Chebyshev, inverse Cheby-

^{†1} 首都大学東京・数理情報科学専攻

Department of Mathematics and Information Sciences, Tokyo Metropolitan University

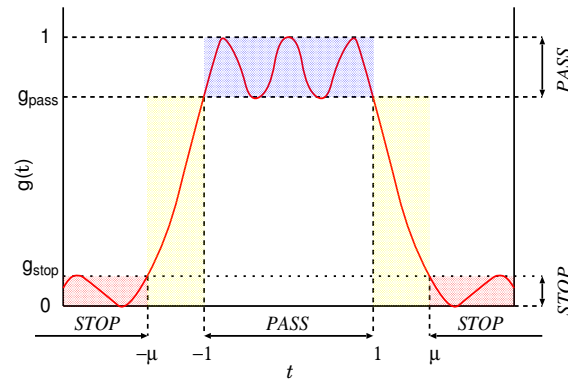


図1 フィルタの伝達関数 $g(t)$ の概形図.

shev, elliptic は典型的な 4 種類であるが、それらと同じ関数を伝達率特性を持つフィルタをレゾルベントの線形結合で構成できる¹¹⁾.

2.1 フィルタの設計

いま $\lambda \in [a, b]$ から $t \in [-1, 1]$ への線形変換で λ の正規化座標 t を定義する. そのとき $t \in [-1, 1]$ は通過帯域 (passband) に, $\mu \leq |t|$ は阻止帯域 (stopbands) に, 中間の $1 < |t| < \mu$ は遷移帯域 (transitionbands) にそれぞれ対応する. 但し, μ は 1 より (少し) 大きい値を持つパラメタである. フィルタの種類とは伝達関数 $f(\lambda) = g(t)$ の関数族の違いのことである.

伝達関数 $g(t)$ の値の分布に制約条件: i) 通過帯域における $g(t)$ の tight な最小値は g_{pass} で, 逆に $g(t)$ が g_{pass} 以上になるのは通過帯域に限る; ii) 阻止帯域における $g(t)$ の絶対値の上限値は g_{stop} である; を課す (図 1 参照). 条件 i) は $g(t) \geq g_{\text{pass}}$ であることと t が通過帯域 $[-1, 1]$ にあることが同値であることを意味している.

典型的な 4 種類のフィルタに対しては, 制約条件の 3 つ組 $(\mu, g_{\text{pass}}, g_{\text{stop}})$ を指定すると, 条件を満たせる次数 n の最小値が決まり, n をその値以上に設定すれば $g(t)$ が完全に決まる. (同様に制約条件の 3 つ組を $(\mu, g_{\text{pass}}, n)$ で与える場合は, 条件を満たせる g_{stop} の最小値が決まり, g_{stop} をその値以上に設定すれば $g(t)$ が完全に決まる. あるいは制約条件の 3 つ組を $(g_{\text{pass}}, g_{\text{stop}}, n)$ で与える場合は, 条件を満たせる μ の最小値が決まり, μ をその値以上に設定すれば $g(t)$ が完全に決まる.)

関数 $g(t)$ が決まると, 伝達関数 $f(\lambda) = g(t)$ の複素極の位置と極の係数から, 通過帯域

が $\lambda \in [a, b]$ であるフィルタ F のパラメタが完全に決まる.

フィルタの設計法の数学的な詳細は文献 11) に既に記述したので省略する.

2.2 レゾルベントの作用の計算法

フィルタの作用を構成するためには, N 次元ベクトルの m 個の組 X に複素シフト τ のレゾルベント $\mathcal{R}(\tau) = (A - \tau B)^{-1} B$ を作用させる計算が必要である. それは $C = A - \tau B$ とおけば, 連立 1 次方程式の組 $CZ = BX$ をベクトルの組 Z について解くことに帰着する. A, B の実対称性から C は複素対称行列である.

もしも A, B が帯行列でその半帯幅が h の場合には, C も半帯幅 h となり, 連立 1 次方程式は帯行列専用の行ピボット交換付きの LU 分解法を用いて安定に解くことができる. その場合の LU 分解の L の下半帯幅は h で, U の上半帯幅は $2h$ 以下となる.

行列 C は複素シフト量 τ が実数でなければ必ず正則なので, 行ピボット交換を省いた計算 (その場合の LU 分解の L の下帯幅と U の上帯幅は共に h となる) が行えて, 計算量と記憶量が節約できる可能性もあるが, 数値的な精度が落ちる可能性が考えられる. また C の対称性 $C^T = C$ を利用する修正 Cholesky 法 $C = LDL^T$ やそれに対角ピボット交換を加えた方法を用いる場合には, たとえ C が正則であっても対角ピボットに零もしくは絶対値の小さい値が現れて計算が不安定になる可能性があり, 数値安定性のためには対称性を保ってピボット選択を行いながら帯幅の増加を抑える非常に複雑な処理を行う必要が生じる. そのため現状では C の対称性を使わないで, 帯行列に対する行ピボット交換付きの LU 分解を用いている.

固有ベクトルを逆反復法を用いて改良する計算では, 近似固有値 λ に対して実対称行列 $C = A - \lambda B$ を係数とする連立 1 次方程式を解くが, これも現状では C の対称性を使わないで, 帯行列に対する行ピボット交換付きの LU 分解を用いて解いている.

実対称定値一般固有値問題の係数の実対称行列 A, B が帯行列ではなくて一般的な疎行列の場合にも, 複素シフト量 τ のレゾルベント $\mathcal{R}(\tau)$ をベクトルの組 X に作用させる計算は, 同様に $C = A - \tau B$ とおいて, 複素対称な疎行列 C を係数とする連立 1 次方程式の組 $CZ = BX$ をベクトルの組 Z について解くことに帰着される (固有対の改良に用いる逆反復法の場合にはシフト量 τ は実数で C は実対称行列となる). 行列 C の疎性を利用できる連立 1 次方程式の組に対する標準的な解法としては, たとえば複数個のベクトルの組に対する (ブロック) Krylov 部分空間法の系統の反復解法, あるいはそれに不完全 LU 分解などの前処理を加えたものなどがあげられる. 係数の疎行列 A, B の非零要素の分布が一般的な状況でのフィルタ対角化法による固有値解法の実験は今後の課題である. またたとえば

(振動解析のような) 行列 A, B が自己随伴な楕円型偏微分方程式の有限要素法による離散化近似で生じたものである場合には, その問題の構造に密着した高速解法であるマルチグリッド法や領域分割法の適用なども検討すべきであろう。

3. フィルタと入力ベクトルの組, 出力ベクトルの組

フィルタに与える入力ベクトルの組 $X = (\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(m)})$ には (特別な理由がなければ) 乱数から作った m 個の N 次元ベクトルを計量 B で正規直交化したものを用いる。 X は $N \times m$ 行列とみなせて, $X^T B X = I_m$ である。ただし I_m は m 次の単位行列を表す。

フィルタからの出力ベクトルの組 $Y = (\mathbf{y}^{(1)}, \mathbf{y}^{(2)}, \dots, \mathbf{y}^{(m)})$ はフィルタ \mathcal{F} を X の各ベクトルに対して $\mathbf{y}^{(k)} = \mathcal{F} \mathbf{x}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots, m$ と適用したもので, $N \times m$ 行列とみなせる。行列形式で書けば $Y = \mathcal{F} X$ である。

4. 入力ベクトルの個数 m を決める方法の考察

算法の説明中で「入力ベクトルの個数 m を十分大きくとる」と記述していることについて, 少し詳しく考察をしてみる。

フィルタの通過帯域 $[a, b]$ の両側の遷移帯域を加えて広げた区間を $[a', b']$ とする。これは阻止帯域以外の区間である。以下では, (重複を含めて) 固有値が $[a, b]$ にある固有対の個数を \mathcal{N} とし, 固有値が $[a', b']$ にある固有対の個数を \mathcal{N}' とする。

m 個の B -正規直交ベクトルを入力ベクトルの組 X とし, X にフィルタを作用させて得られる出力ベクトルの組を Y とする。いま阻止帯域に於けるフィルタの伝達率の絶対値の上限 g_{stop} が数値的に微小であって零とみなせるという近似が十分良く成りたてば, Y の計量 B での数値的な階数は \mathcal{N}' を超えない。

フィルタの伝達率の最大値は 1 (恒等演算子の項を省く場合には 1 より僅かに小さい) に規格化しているので, 阻止帯域での伝達率の大きさの上限値 g_{stop} が浮動小数点数のマシンイプシロン (IEEE 754 の倍精度 64bit 浮動小数点数では 2.22×10^{-16}) の程度の 10^{-15} や 10^{-14} などであれば丸め誤差と同程度でほぼ零と見なせる。またマシンイプシロンよりもある程度大きな値 10^{-12} や 10^{-8} 等でも, 最初からその程度の演算精度で計算をしたと思えば, 零に近い値であると見なせよう。

もしも $m < \mathcal{N}'$ であれば, 固有値が $[a', b']$ にある固有ベクトルの \mathcal{N}' 個すべては, Y の m 個のベクトルの線形結合で表すことができない。よって求めたい固有値が $[a, b]$ にある固有ベクトルもうまく近似できないか, あるいは近似の精度が十分に出ない可能性がある。

乱数ベクトルから B -正規直交化で作った X は, ふつうは一般的 (generic) な状況にあるので, $\mathcal{N}' \leq m$ であれば Y の計量 B での数値的階数はちょうど \mathcal{N}' になる。実際には m の値をちょうど \mathcal{N}' にせず, 少し大きい値とするのがよい。その理由は, 乱数を用いて一般的 (generic) な状況を作り出してはいるが, その数値的な generic の程度 (一種の条件数) があまり良くない状況が生じる確率をなるべく下げるためである。

固有値がフィルタの遷移帯域にある固有対が多く存在していて (伝達関数の振る舞いが急峻であっても固有値分布が遷移帯域に密集していればそのような状況に遭遇する), $\mathcal{N}' \leq m$ とはならず $\mathcal{N} \leq m < \mathcal{N}'$ である場合には, 区間 $[a', b']$ にある固有値 λ を重複を含めて考え, それらの固有値に対応する伝達率 $f(\lambda)$ をその絶対値の減少順に並べたときに, 第 $m+1$ 番目の伝達率が (伝達関数の最大値 1 に比べて) 「数値的に微小で零と見なせる」かどうかによって, 近似対の精度が左右される。

以上の考察に従うと, フィルタにより阻止帯域に固有値がある固有ベクトルはほぼ完全に除去されているとみなせるならば, 阻止帯域以外の $[a', b']$ に固有値がある固有対の個数である \mathcal{N}' よりも少し大きい値を m とすればよいことになる。

実際に入力ベクトルの個数 m の決め方としては, たとえば以下のような方法が考えられる。

- (1) 何らかの根拠か経験に基づいて, \mathcal{N}' の値かその上限値が既知の場合には, それに基づいて $\mathcal{N}' < m$ を満たす少し大きめの m を設定する。そうしてこの m の値を用いても以降の計算に必要な記憶量や演算量が過大にはならないと判断したら計算を進める (過大になる場合には, 元の区間 $[a, b]$ を分割して扱うことを検討する)。
- (2) \mathcal{N}' の値について予備知識が無いが, 推定値に誤差が伴う場合には, 入力ベクトルの個数 m の値を (それに伴い必要となる記憶量や演算量が過大とはならない範囲で) 様子を見ながら少しずつ段階的に増やして計算を行うことができる (増やす場合に計算を最初から完全にやり直すのではなくて, m を増やす前の部分の X の列は保ちながら, X に新たな列を追加して, 追加した後の X 全体が B -正規直交性を保つように作る。そうして X の追加部分の列にだけあたりにフィルタ \mathcal{F} を作用させて Y の追加部分の列を作る。このように処理を追加的に行うことが可能である)。一般的な状況にある X にフィルタを作用させて得た Y が十分な数値的階数低下を起さなかった場合や, 得られた近似固有対の残差が十分に小さくない場合には, m を増やす (m を増やし続けてついにある限界を超えたら, 区間 $[a, b]$ の再分割を検討する)。
- (3) 実対称定値一般固有値問題の指定区間に固有値がある固有対の個数は Sylvester の

慣性律を用いて求めることができる（古くから固有値を2分法などの区間縮小法で求めるのにも用いられている⁴⁾）。係数の実対称行列 A, B に対して、実数のシフト λ を与えて実対称行列 $C = A - \lambda B$ を作り、たとえば修正 Cholesky 法により $C = LDL^T$ と分解ができたならば、区間 $[a', b']$ に固有値がある固有対の個数 \mathcal{N}' はシフト $\lambda = a', b'$ で得られた対角行列 D の符号数の差として求められる。ただし区間の両端のシフトにおいて C の修正 Cholesky 法による分解が破綻せずに行けると仮定する（分解中に破綻が生じる可能性もあるが、固有対の個数の上限値が求まれば良いとして、もしも破綻が起きたらその端点のシフト量を区間を少し広げる方向に移動してみて破綻が生じなければそれにより求めた符号数の差が個数の上限になる。但し数値安定性については検討を要する）。この方法はたとえば A, B が幅の狭い帯行列などであれば高速に実行しうる（数値安定性を保証するために修正 Cholesky 法の代わりに Bunch-Kaufman の算法^{3),5)} などを用いる場合には、帯幅の非常な増大が発生する困難が生じうる）。

5. Subspace 法に与える基底の組の構成

フィルタからの出力ベクトルの組 Y が張る空間は、固有値が $[a, b]$ の近傍にある固有ベクトルで張られた不変部分空間を近似する。そこで Y の張る空間内で元の GEVP の近似対を subspace 法を用いて求める。しかしフィルタの性質から自然に、 Y は通常は数値的階数が多く落ちた行列となる。するとそのような数値的條件の悪い基底に適用すると subspace 法で得られる結果は不安定になる。

そこで数値的安定化のために一種の正則化処理 (regularization) を施して、 Y の張る空間内から数値的な線形独立性が高い基底 Z （線形独立性が最も高いのは B -正規直交の場合）を選び出す。そうして、 Z を部分空間の基底として subspace 法を用いて元の GEVP : $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の近似固有対を求める。

5.1 従来の SVD による正則化処理

$N \times m$ 行列である Y を計量 B で特異値分解する（すなわち、 $Y = U\Sigma V^T$, $U^T B U = I_m$, $V^T V = I_m$ となる $N \times m$ の B -正規直交である特異ベクトルの組 U 、非負である特異値が減少順に並んだ m 次の対角行列 Σ , m 次の直交行列 V を求める）。そうして、特異値が閾値よりも大きい特異ベクトル r ($\leq m$) 個だけを集めた組 Z を作ると、 Z は B -正規直交基底である。

Y の計量 B での特異値分解で得られる特異ベクトルは、 Y の張る空間を計量 B でよく

説明する軸ではあるが、元の GEVP の行列 A を参照せずに構成されるので、一般には各特異ベクトルは通過帯域 $[a, b]$ 近傍に固有値がある固有ベクトルの線形結合である。

切断の閾値を大きくとると、 Z に含まれる基底ベクトルの個数が減り部分空間の自由度が減るので、subspace 法の近似度は全体的に下がる。しかし閾値を過度に小さくとると、特異値の小さいベクトル（丸め誤差の占める割合が多く有効精度が落ちている）も基底 Z に参加して、subspace 法で得られる近似対には固有値は通過帯域 $[a, b]$ にあっても残差の大きい「偽の固有対」が多数出現するようになる。切断の閾値をいかに設定するべきかについては、現状では明確な基準を作れていない。

5.2 性質の良い正則化処理

フィルタ作用素 \mathcal{F} がレゾルベントの線形結合の場合には、元の GEVP : $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有対 (λ, \mathbf{v}) のベクトル \mathbf{v} は同時に \mathcal{F} の固有ベクトルにもなり、 $\mathcal{F}\mathbf{v} = f(\lambda)\mathbf{v}$ を満たす。ここで $f(\lambda)$ は伝達関数である。逆命題「 \mathcal{F} の固有ベクトルは元の GEVP の固有ベクトルである」は成り立たないが、「 \mathcal{F} の（任意の）不変部分空間は元の GEVP の不変部分空間である」は成り立つ。

この性質をうまく利用することで、不変部分空間 $\mathcal{I}_{[a,b]^*}$ （固有値が $[a, b]$ （の近傍）にある元の GEVP の不変部分空間）を Y の張る空間内で近似した空間の B -正規直交基底として Z を構成できる。このように構成された組 Z を subspace 法の部分空間の基底として用いると、元の GEVP の固有値が $[a, b]$ （の近傍）にあるすべての固有対の近似を一斉に求めることができる。

Z の構成法は、まず後述の方法（節 5.3）を用いて組 Y の張る空間内で \mathcal{F} の近似対 (ϕ, \mathbf{v}) を解く。ベクトル \mathbf{v} は B -正規直交となるようにする。それらの近似対のうちで、 ϕ の値が $[g_{\text{pass}}, 1]$ （の近傍）にあるものを選んで、ベクトル \mathbf{v} を並べた組 Z を作る（ $[g_{\text{pass}}, 1]$ は通過帯域での伝達関数の値域である）。

5.3 \mathcal{F} の近似固有対の解法

組 Y が張る部分空間内における \mathcal{F} の近似対 (ϕ, \mathbf{v}) は、以下の方法を用いて求めている。固有値方程式 $\mathcal{F}\mathbf{v} = \phi\mathbf{v}$ に対して $\mathbf{v} = Y\mathbf{u}$ とおいて両辺に左から $X^T B$ を乗じると、次数 m の小規模な GEVP : $\alpha\mathbf{u} = \phi\beta\mathbf{u}$ を得る。ここで $\alpha = X^T B \mathcal{F} Y$, $\beta = X^T B Y$ である。いま、 \mathcal{F} がレゾルベントの線形結合であることから関係 $B\mathcal{F} = \mathcal{F}^T B$ が導けて、それにより $\alpha = Y^T B Y$ であることが分かるので α は半正定値対称である。同様に $\beta = X^T B \mathcal{F} X = Y^T B X = \beta^T$ により β も対称である。

典型的な 4 種類のフィルタでは $f(\lambda)$ は非負の実関数になることから β は半正定値になる

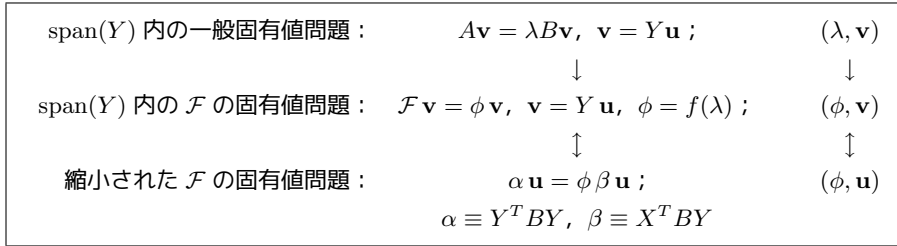


図 2 対応関係の図

(ただし、フィルタの係数 c_∞ は、次数 n が偶数でフィルタの種類が inverse Chebyshev あるいは elliptic の場合にだけ零ではない正の値を持つが、その大きさが微小である場合に零とみなして省略する近似を入れる場合には、 β は微小な大きさの負の固有値を持ち得る)。

フィルタの性質から自然に、通常は Y の特異値には微小な値が多くなり、係数 α, β は共に悪条件となる。そのことを考慮して、固有値方程式 $\alpha u = \phi \beta u$ は以下 (節 5.4) の特別な方法を用いて丁寧に解く。

5.4 固有値方程式 $\alpha u = \phi \beta u$ の解法

Y が積の形で α の表式中に 2 回、 β には 1 回、それぞれ入っているので、 α よりも β の方が行列の数値的な条件が良い。そこで絶対値の小さな固有値、固有ベクトルに対しても計算精度が高い Rutishauser の Jacobi 法¹⁾ を用いて、まず β を固有値分解して、固有値を減少順に (負のものは後に) 並べて $\beta = Q^T D Q$ とする

直交変換 $u \equiv Q w$ により $G \equiv Q \alpha Q^T$ とおくと、方程式は $G w = \phi D w$ となる。

きわめて小さい閾値 (たとえば $100 \epsilon_{\text{MAC}}$) を ϵ と置き、値が ϵ 未満の D の対角要素と対応する行と列を G, D, w から省くことで切断された固有値方程式 $\hat{G} \hat{w} = \phi \hat{D} \hat{w}$ を得る。さらに、変換 $\hat{w} \equiv \hat{D}^{1/2} z$ により $H \equiv \hat{D}^{-1/2} \hat{G} \hat{D}^{-1/2}$ とおいて得られる標準固有値問題： $H z = \phi z$ を Jacobi 法で解く。

その固有対 (ϕ, z) のベクトル z から逆変換により対応する \hat{w} を得て、切断された行の自由度に零を補って w を得て、さらに u を得て、 $v = Yu$ を得る。

(注：Jacobi 法で解けば z は正規直交系になり、 u は β -正規直交系になる。そのとき $v^{(i)} = (1/\sqrt{\phi^{(i)}}) \cdot Y u^{(i)}$ と規格化すると、 $v^{(i)}$ が B -正規直交となる。)

5.5 固有値方程式 $\alpha u = \phi \beta u$ の固有ベクトル展開を用いた考察

縮小された固有値方程式 $\alpha u = \phi \beta u$ についての理解を深めるために、以下で固有ベクトル

展開を用いた分析を試みる。

いま元の固有値問題の固有対にその伝達率 $\phi = f(\lambda)$ が広義単調減少順となるように番号を付けておいたとする。そうして第 j 番目の固有ベクトルを第 j 列に並べた N 次の正方行列を V とする。固有ベクトルは B -正規直交系にとるものとして $V^T B V = I_N$ 、ここで I_N は N 次単位行列である。また元の固有値問題の固有値を固有ベクトルの順番に対角に並べた N 次対角行列を Λ とすれば $AV = B V \Lambda$ が成り立つ。さらに第 j 番目の固有ベクトルの伝達率 $\phi^{(j)}$ を第 j 対角要素に並べた N 次対角行列を Φ とおくと $\mathcal{F}V = V\Phi$ である。フィルタへの m 個の入力ベクトルの組 X は $N \times m$ 行列で、 X は B -正規直交化されているので $X^T B X = I_m$ である。 X の固有ベクトル展開係数を表す $N \times m$ 行列 C が存在して $X = VC$ と書いて、 X の B -正規直交性から $C^T C = I_m$ で、 C はフルランクである。 $Y = \mathcal{F}X = \mathcal{F}VC = V\Phi C$ である。

「縮小された \mathcal{F} の固有値問題」の係数である m 次対称行列は $\alpha = Y^T B Y = C^T \Phi^2 C$ 、 $\beta = X^T B X = C^T \Phi C$ と書ける。いま、 m が十分に大きくて、第 $m+1$ 番目以降の伝達率 $\phi^{(j)}$ の大きさがフィルタの伝達特性によって小さい無視できる値となると仮定する (たとえば伝達関数の大きさの阻止帯域での上限値 g_{stop} が小さく無視できる値であると見なせるならば、通過帯域および遷移帯域に固有値がある固有対の合計の個数よりも m を大きくとればよい)。そのとき、行列 Φ をその m 次の首位行列 $\hat{\Phi}$ までで切断する近似を行う。それに対応して C をその最初の m 行目までで切断した m 次正方行列 \hat{C} を用いると、 $\alpha \approx \hat{C}^T \hat{\Phi}^2 \hat{C}$ 、 $\beta \approx \hat{C}^T \hat{\Phi} \hat{C}$ と近似できる。さらに \hat{C} の条件はあまり悪くないと仮定する (乱数を用いて作った X に由来しているので、通常は \hat{C} の条件はあまり悪くない。もしもそうでなければ乱数ベクトルをとり直すかあるいは個数 m を増やせば改善が期待できる)。すると「縮小された \mathcal{F} の固有値問題」 $\alpha u = \phi \beta u$ は、この Φ の切断近似の下で $\hat{C} u = w$ とおくと、対角行列を係数とする一般固有値問題 $\hat{\Phi}^2 w = \phi \hat{\Phi} w$ となり、その第 j 番目の固有値は $\hat{\Phi}$ の第 j 対角要素の値である $\phi^{(j)}$ になることが分かる。ただし、 C や \hat{C} は既知量ではないので、なんらかの数値的方法で固有値方程式 $\alpha u = \phi \beta u$ を直接解いて近似解を求めることになる。その際には固有値 ϕ が微小な値を持つ近似解は丸め誤差の影響から良い精度では求められないであろう。しかし今の場合には固有値 ϕ が $[g_{\text{pass}}, 1]$ (の近傍) であるような固有対 (ϕ, u) だけを解けばよくて、実際のフィルタの設計の際には g_{pass} に (たとえば 0.5 程度の) 微小ではない値を設定するので、数値計算上の困難の程度は少ない。

付 記

いま同様に元の固有値問題 $Av = \lambda Bv$ を $v \in \text{span}(Y)$ に制限する近似で得られる方

程式 $AY\mathbf{u} = \lambda BY\mathbf{u}$ の残差と X との通常の内積から生じる方程式は、小さい次数 m の行列 $\gamma = X^T AY$, $\beta = X^T BY$ を係数とする対称一般固有値問題 $\gamma\mathbf{u} = \lambda\beta\mathbf{u}$ になる ($\gamma = C^T \Lambda \Phi C$ が示せるので γ は対称である)。 Φ の切断近似の下で、 $\hat{C}\mathbf{u} = \mathbf{w}$ とおくと、対角行列を係数とする一般固有値問題 $\hat{\Lambda}\hat{\Phi}\mathbf{w} = \lambda\hat{\Phi}\mathbf{w}$ になり、その第 j 番目の固有値は「数学的には」元の固有値問題の固有値 $\lambda^{(j)}$ になることが分かる。ただし、 C や \hat{C} は既知量ではないので、実際には何らかの数値的な方法で対称一般固有値問題 $\gamma\mathbf{u} = \lambda\beta\mathbf{u}$ を直接解くことになる。その場合には $\phi^{(j)}$ の値が微小である場合には対応する $\lambda^{(j)}$ の近似値の精度もそれだけ丸め誤差の影響により失われる可能性がある（実際には、 $\gamma\mathbf{u} = \lambda\beta\mathbf{u}$ を単に解いただけでは得られた各近似固有解 (λ, \mathbf{u}) の j との対応も、対応する $\phi^{(j)}$ の値も分からない）。極端な場合には、近似固有値 λ は元の固有値問題の固有値から大きく離れた値になる可能性もある。

6. 数値実験例

以下の例題で実験に用いた計算機の CPU は intel Core i7-920 である。

一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ の B -正規化されている近似固有対 (λ, \mathbf{v}) に対する残差ベクトル $\mathbf{r} = (A - \lambda B)\mathbf{v}$ のノルムを $\Delta = \sqrt{\mathbf{r}^T B^{-1} \mathbf{r}}$ で計算した。

ベクトルの組にレゾルベントを作用させる計算には、対称帯行列を係数とする連立 1 次方程式を帯 LU 分解を用いて解いた（帯幅内の要素もほとんどは零なので、将来は反復法などを用いれば高速にあるいはより大規模な問題も解ける可能性がある）。

6.1 例題 1：二次元有限要素法

表 1 例題 1：二次元有限要素法：経過時間（秒）の内訳

	4 スレッド
フィルタ対角化全体	6.599
- 乱数ベクトル生成	0.022
- B -正規直変化	0.061
- フィルタの適用	6.328
- 不変部分空間の基底作成	0.099
- Subspace 法	0.089
Rayleigh 商逆反復 2 回分	6.217

二次元ラプラス作用素の零ディリクレ境界条件の固有値問題 $-\Delta\Psi(x, y) = \lambda\Psi(x, y)$ を正方形領域 $[0, \pi] \times [0, \pi]$ 上で二次元の有限要素法により離散化した。有限要素法の要素内基底

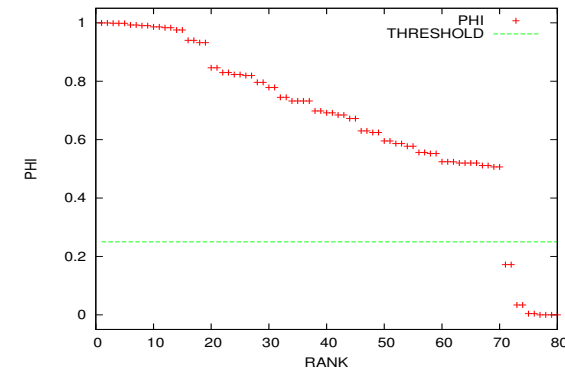


図 3 例題 1：二次元有限要素法： ϕ の値の分布

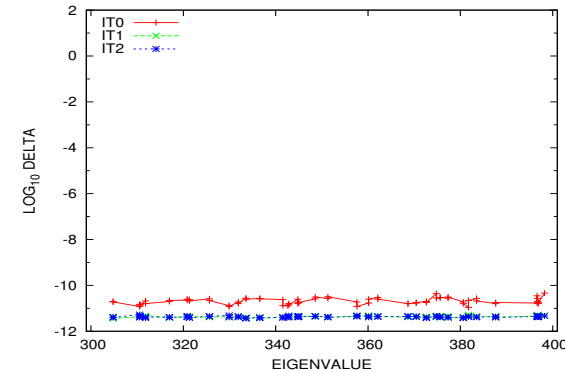


図 4 例題 1：二次元有限要素法：近似対の残差のノルム

関数は各次元方向の線形要素の直積とした。各辺を $100 + 1$ 等分すると $N = 100^2 = 10000$ 次の実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ が得られる。係数の行列 A, B は対称帯行列でその下帯幅は 101 になる。フィルタは elliptic とし、伝達関数の形状を $g_{\text{pass}} = 0.5$, $g_{\text{stop}} = 1E-14$, $\mu = 1.1$ と設定して、それから決まる最小の次数 $n = 16$ のフィルタを用いた。この固有値問題では区間 $[300, 400]$ に固有値がある真の固有対は 70 個である。乱数をもとにして作った $m = 100$ 個の B -正規直交ベクトルの組をフィルタへの入力ベクトルの組 X として用いて計算を行った。フィルタからの出力の組 Y から本論文でも説明した方法を用いて不変部分空間の近似基底となる B -正規直交基底 Z を構成して subspace 法に与えた実験の例を示す。

β の固有値の閾値 $2.2E-14$ による切断で次元が 80 に低下。グラフ (図 3) にフィルタ作用素の固有値 ϕ の分布を減少順に示す。 $\phi^{(70)}=0.5066895$, $\phi^{(71)}=0.1718655$ であるので、ちょうど 70 番目までが通過帯域に対応する。 ϕ の閾値 0.25 の設定で、真の固有対の個数と同じ 70 個の基底を得た。その 70 個の基底に subspace 法を適用して得られた近似対で固有値が [300, 400] にあるものは 70 個であった。図 4 中の折れ線グラフ IT0 は、得られた近似対のうち固有値が [300, 400] にあるものについて、横軸に近似対の固有値、縦軸に近似対の残差のノルム Δ の値をプロットしたものである。このグラフからフィルタ対角化法による近似対の残差のノルムの大きさは $1E-11$ から $1E-10$ 程度で、近似固有値は少なくとも 12 桁程度の相対精度があるのがわかる。同じ図中の折れ線グラフ IT1, IT2 は、フィルタ対角化法で得られた固有対から Rayleigh 商逆反復によりそれぞれ 1 回、2 回改良を加えて得られた近似対に対する残差のノルムを縦軸にプロットしたものである。

1CPU での OpenMP による 4 スレッド計算の経過時間は、フィルタ対角化に 6.60 秒、2 回の逆反復に 6.22 秒であった (表 1)。この例題では有限要素法で離散化された固有値問題は固有値の厳密な値を解析式により計算できる。フィルタ対角化法だけで得た近似固有値の誤差を (表 4-表 5) に示す。求めた近似固有値の真値からの誤差の大きさの最大値は $8.5E-13$ であることが分かる。

6.2 例題 2：三次元有限要素法

表 2 例題 2：三次元有限要素法：経過時間 (秒) の内訳

	4 スレッド
フィルタ対角化全体	239.43
- 乱数ベクトル生成	0.05
- 正規直交化	1.03
- フィルタの適用	236.50
- 不変部分空間の基底作成	1.12
- Subspace 法	0.74
Rayleigh 商逆反復 2 回分	1368.79

三次元のラプラス作用素の零ディリクレ境界値条件の固有値問題 $-\Delta\Phi(x, y, z) = \lambda\Phi(x, y, z)$ を立方体領域 $[0, \pi] \times [0, \pi] \times [0, \pi]$ で三次元の有限要素法で離散化した。要素内基底関数は各方向の区分線形関数の直積とした。空間を各方向に $25+1$ 等分すると、 $N = 25 \times 25 \times 25 = 15625$ 次元の実対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ になる。係数の対称行列 A, B の下帯幅は $25^2 + 25 + 1 = 651$ となる。この固有値問題の $[0, 30]$ に固有値

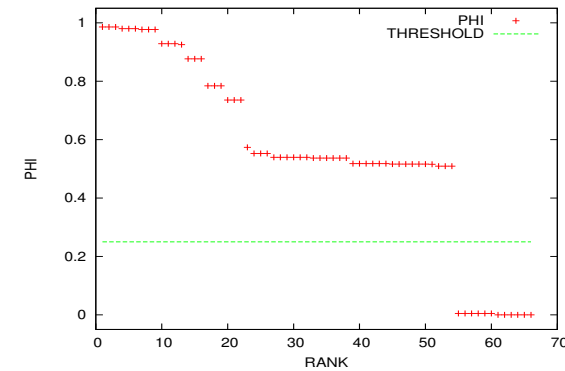


図 5 例題 2：三次元有限要素法： ϕ の値の分布

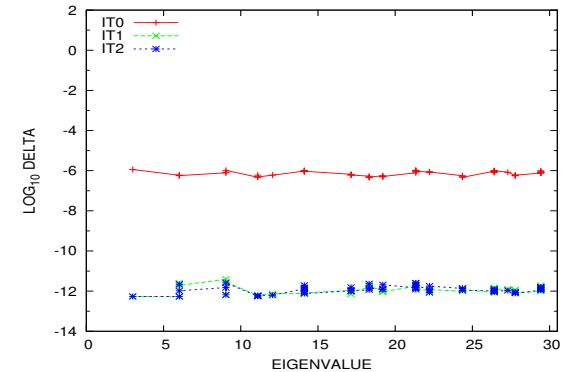


図 6 例題 2：三次元有限要素法：近似対の残差のノルム

がある固有対を求めた。フィルタは elliptic で、伝達関数の形状は $g_{\text{pass}}=0.5$, $g_{\text{stop}}=1E-8$, $\mu=1.3$ とし、それから決まる最小のフィルタの次数 $n=8$ を採用した。乱数を元にして作った $m=150$ 個の B -正規直交ベクトルの組をフィルタへの入力ベクトルの組 X として用いて計算を行った。フィルタからの出力の組 Y から本論文で説明した方法により不変部分空間の近似基底となる B -正規直交基底 Z を構成して、subspace 法に与える実験の例を示す。

β の固有値の閾値 $2.2E-14$ による切断により次元は 66 に低下。グラフ (図 5) に ϕ の値の分布を減少順に示す。 $\phi^{(54)}=0.5091599$, $\phi^{(55)}=0.0047391$ であるので、54 番目までが通過帯域に対応している。 ϕ の閾値 0.25 の設定で、真の固有対の個数と同じ 54 個の基底を

得た。その 54 個の基底に subspace 法を適用して得られた近似対で固有値が $[0,30]$ にあるものは 54 個であった。図 6 中の折れ線グラフ IT0 は、得られた近似対のうちで固有値が $[0,30]$ にあるものについて、横軸に近似対の固有値、縦軸に近似対の残差のノルム Δ の値をプロットしたものである。このグラフからフィルタ対角化法による近似対の残差のノルムの大きさは $1E-6$ 程度で、得られた近似固有値は少なくとも 6 桁から 7 桁程度の相対精度があるのがわかる。同じ図中の折れ線グラフ IT1, IT2 は、フィルタ対角化法で得られた固有対から Rayleigh 商逆反復によりそれぞれ 1 回、2 回改良を加えて得られた近似対に対する残差のノルムを縦軸にプロットしたものである。

1CPU での OpenMP による 4 スレッド計算の経過時間は、フィルタ対角化に 239.4 秒、2 回の逆反復に 1368.8 秒であった (表 2)。この例題では有限要素法で離散化された固有値問題は固有値の厳密な値を解析式により計算できる。フィルタ対角化法だけで得た近似固有値の誤差を (表 6-表 7) に示す。求めた近似固有値の真値からの誤差の大きさの最大値が $8.2E-14$ であったことが分かる。

6.3 例題 3：三次元中心差分法

表 3 例題 3：三次元中心差分法：経過時間 (秒) の内訳。

	4 スレッド
フィルタ対角化全体	213.91
- 乱数ベクトル生成	0.05
- 正規直交化	0.06
- フィルタの適用	212.85
- 不変部分空間の基底作成	0.16
- Subspace 法	0.78
Rayleigh 商逆反復 2 回分	1391.92

三次元ラプラス作用素の零ディリクレ境界値条件の固有値問題 $-\Delta\Phi(x, y, z) = \lambda\Phi(x, y, z)$ を立方体領域 $[0, \pi] \times [0, \pi] \times [0, \pi]$ 上で三次元の中心差分法を用いて離散化した。空間を各方向に $25+1$ 等分すると、 $N = 25 \times 25 \times 25 = 15625$ 次元の実対称標準固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ が得られる。係数の対称行列 A の下帯幅は $25^2 = 625$ になる。この固有値問題の区間 $[0, 30]$ に固有値がある固有対を求めた。フィルタは elliptic で、伝達関数の形状パラメタは $g_{\text{pass}} = 0.5$, $g_{\text{stop}} = 1E-8$, $\mu = 1.3$ として、それらから決まる最小の次数 $n=8$ のフィルタを用いた。乱数を元にして作った $m=150$ 個の正規直交ベクトルの組 X を入力ベクトルの組として計算を行った。フィルタからの出力の組 Y から本論文でも説明した方法により不変部分空間を近

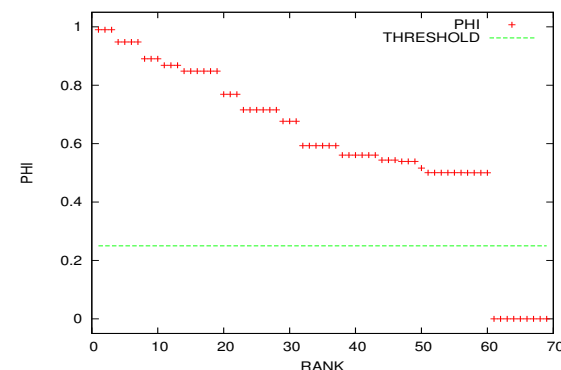


図 7 例題 3：三次元中心差分法： ϕ の値の分布

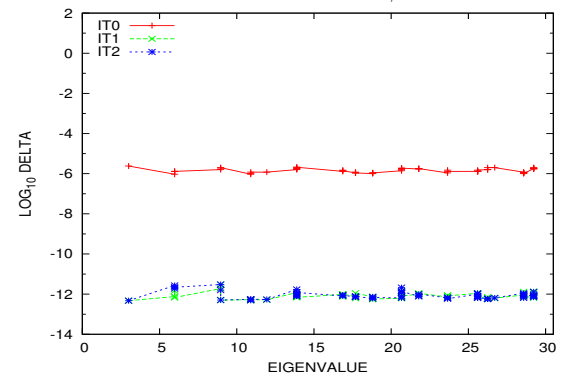


図 8 例題 3：三次元中心差分法：近似対の残差のノルム

似する正規直交基底 Z を構成し、それに subspace 法を適用した実験の例を示す。

β の固有値の閾値 $2.2E-14$ による切断で次元が 69 に低下。グラフ (図 7) に ϕ の分布を減少順に示す。 $\phi^{(60)} = 0.5000229$, $\phi^{(61)} = 0.0000273$ で、60 番目までが通過帯域に対応。 ϕ の閾値 0.25 の設定で、真の固有対の個数と同じ 60 個の基底を得た。その 60 個の基底に subspace 法を適用して得られた近似対で固有値が $[0,30]$ にあるものは 60 個であった。図 8 中の折れ線グラフ IT0 は、得られた近似対のうちで固有値が $[0,30]$ にあるものについて、横軸に近似対の固有値、縦軸に近似対の残差のノルム Δ の値をプロットしたものである。このグラフからフィルタ対角化法による近似対の残差のノルムの大きさは $1E-6$ 程度で、近

似固有値の相対精度は少なくとも 6 桁から 7 桁程度あることがわかる。同じ図中の折れ線 IT1, IT2 のグラフはフィルタ対角化法で得られた固有対から Rayleigh 商逆反復によりそれぞれ 1 回, 2 回改良を加えて得られた近似対に対する残差のノルムのプロットである。

1CPU での OpenMP による 4 スレッド計算の経過時間は, フィルタ対角化に 213.9 秒, 2 回の逆反復に 1391.9 秒であった (表 3)。この例題でも中心差分法で離散化された固有値問題は固有値の厳密な値を解析式により計算できる。フィルタ対角化法だけで得た近似固有値の誤差を (表 8-表 9) に示す。求めた近似固有値の真値からの誤差の大きさの最大値は $1.3E-13$ であったことが分かる。

7. ま と め

フィルタ対角化法では, 通過帯域 $[a, b]$ のフィルタ \mathcal{F} を用意して, 乱数から生成した十分多くの m 個の B -正規直交ベクトルの組 X を作る。そして X を入力ベクトルの組として \mathcal{F} を X に作用させて出力ベクトルの組 Y を作る。適切な Y の線形結合により部分空間の基底の組 Z を構成して, Z を subspace 法に与えることで近似固有対を求める。

本論文で取り上げた方法では, Y の張る空間内において不変部分空間 $\mathcal{I}_{[a,b]^*}$ (固有値が $[a, b]$ (の近傍) にある元の GEVP の不変部分空間) の B -正規直交である近似基底 Z を構成する。そして基底 Z に subspace 法を適用して固有値が $[a, b]$ (の近傍) にある元の GEVP の近似固有対をすべて求める。

通過帯域 $[a, b]$ のフィルタ \mathcal{F} としてレゾルベントの線形結合を用いる場合は, GEVP の固有対 (λ, \mathbf{v}) に対応して, 作用素 \mathcal{F} は固有対 (ϕ, \mathbf{v}) を持つ。但し, $\phi = f(\lambda)$ はベクトル \mathbf{v} のフィルタによる伝達率で, f は伝達関数である。この性質を利用すると, subspace 法に与えるための不変部分空間 $\mathcal{I}_{[a,b]^*}$ の近似空間の基底 Z が構成できる。

\mathcal{F} の固有値方程式 $\mathcal{F}\mathbf{v} = \phi\mathbf{v}$ を Y の張る空間内に \mathbf{v} を制限して解いた近似対 (ϕ, \mathbf{v}) のうちで, ϕ の値が (通過帯域に対する伝達関数の値域である) $[g_{\text{pass}}, 1]$ (の近傍) にあるベクトル \mathbf{v} だけを集めて (計量 B で正規化して) 基底の組 Z とする。

数値実験では, subspace 法に与える B -正規直交基底の構成として従来の特異値の閾値による切断を加えた特異値分解を用いる方法に比べると, 不変部分空間の近似基底を構成する方法はかなり優れている。特にフィルタの特性が急峻ではなく, 固有値が広い遷移帯域に多数分布している場合であっても, 入力ベクトルの個数をそれに対応して十分に多くとるならば, この方法は固有値が通過帯域 (の近傍) にある不変部分空間の基底の近似を適切に構成できる。

参 考 文 献

- 1) Rutishauser, H.: The Jacobi Method for Real Symmetric Matrices, *Numerische Mathematik*, Vol.9, No.1 (1966), pp.1–10.
- 2) Daniels, R.W.: *Approximation Methods for Electronic Filter Design*, McGraw-Hill, 1974.
- 3) Bunch, J.R. and Kaufman, L.: Some Stable Methods for Calculating Inertia and Solving Symmetric Linear Systems, *Math. Comp.*, Vol.31, No.137 (1977), pp.163–179.
- 4) 小国 力 (編), 村田 健郎, 三好 俊郎, ドンガラ, J.J., 長谷川 秀彦 (著): 行列計算ソフトウェア, 丸善 (1991)
- 5) Jones, M.T. and Patrick, M.L.: Bunch-Kaufman Factorization for Real Symmetric Indefinite Banded Matrices, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol.14 (1993), pp.553–559.
- 6) Lutovac, M.D., Tošić, D.Y. and Evans, B.L.: *Filter Design for Signal Processing*, §12.8, Prentice Hall, 2001.
- 7) Toledo, S. and Rabani, E.: Very Large Electronic Structure Calculations Using an Out-of-Core Filter-Diagonalization Method, *J. Comput. Phys.*, Vol.180, No.1 (2002), pp.256–269.
- 8) Sakurai, T. and Sugiura, H.: A Projection Method for Generalized Eigenvalue Problems Using Numerical Integration, *J. Comp. Appl. Math.*, Vol.159 (2003), pp.119–128.
- 9) 村上 弘: レゾルベントの線形結合によるフィルタ対角化法, 情報処理学会論文誌: コンピューティングシステム, Vol.49, No.SIG2 (ACS21) (2008), pp.66–87.
- 10) Polizzi, E.: Density-Matrix-Based Algorithm for Solving Eigenvalue Problems, *Phys. Rev. B*, Vol.79, No.11 (2009), p.115112[6pages].
- 11) 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.
- 12) 村上 弘: フィルタで濾過されたベクトルの組から不変部分空間の直交基底の組を近似構成するフィルタ対角化法, 情報処理学会研究報告, Vol.2011-HPC-129, No.1 (2011), pp.1–8.
- 13) 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, 先進的計算基盤システムシンポジウム *SACSIS2011* 論文集 (電子版のみ), (2011), pp.332–339.
- 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 (2011), pp.1–14 (発行予定) .

表 4 例題 1：二次元有限要素法で離散化した固有値の厳密解と数値解の誤差

解の番号	厳密解	固有モード	近似解の誤差
1	304.8013953800366	(3,17)	5.1E-13
2	304.8013953800366	(17, 3)	3.4E-13
3	310.5202786054813	(7,16)	0.0E+00
4	310.5202786054813	(16, 7)	-1.7E-13
5	310.6409936673166	(9,15)	-2.8E-13
6	310.6409936673166	(15, 9)	0.0E+00
7	311.8155136906585	(4,17)	-5.1E-13
8	311.8155136906585	(17, 4)	0.0E+00
9	316.9946140062469	(12,13)	0.0E+00
10	316.9946140062469	(13,12)	4.0E-13
11	320.8452946231918	(5,17)	-2.3E-13
12	320.8452946231918	(17, 5)	-2.3E-13
13	321.3015193770345	(11,14)	-5.7E-14
14	321.3015193770345	(14,11)	4.0E-13
15	325.6573127546298	(8,16)	6.3E-13
16	325.6573127546298	(16, 8)	-5.1E-13
17	329.9194704359988	(10,15)	-4.0E-13
18	329.9194704359988	(15,10)	2.3E-13
19	331.8994751057301	(6,17)	5.7E-14
20	331.8994751057301	(17, 6)	5.7E-14
21	333.5493470550138	(1,18)	-5.1E-13
22	333.5493470550138	(18, 1)	0.0E+00
23	336.5505566105386	(2,18)	4.0E-13
24	336.5505566105386	(18, 2)	6.8E-13
25	341.5557990357763	(3,18)	2.8E-13
26	341.5557990357763	(18, 3)	-4.0E-13
27	342.6301980614534	(13,13)	8.5E-13
28	342.8567495664678	(9,16)	3.4E-13
29	342.8567495664678	(16, 9)	3.4E-13
30	344.7960367119849	(12,14)	-3.4E-13
31	344.7960367119849	(14,12)	5.7E-14
32	344.9887505139084	(7,17)	5.7E-14
33	344.9887505139084	(17, 7)	-3.4E-13
34	348.5699173463982	(4,18)	5.1E-13
35	348.5699173463982	(18, 4)	2.8E-13

表 5 例題 1：二次元有限要素法で離散化した固有値の厳密解と数値解の誤差 (続き)

解の番号	厳密解	固有モード	近似解の誤差
36	351.2956326035471	(11,15)	1.7E-13
37	351.2956326035471	(15,11)	0.0E+00
38	357.5996982789316	(5,18)	-2.3E-13
39	357.5996982789316	(18, 5)	5.1E-13
40	360.1257846630568	(8,17)	-4.0E-13
41	360.1257846630568	(17, 8)	3.4E-13
42	362.1352263351501	(10,16)	2.8E-13
43	362.1352263351501	(16,10)	2.3E-13
44	368.6538787614698	(6,18)	-1.1E-13
45	368.6538787614698	(18, 6)	-1.1E-13
46	370.4316207671915	(13,14)	2.3E-13
47	370.4316207671915	(14,13)	2.3E-13
48	372.6250618456789	(1,19)	2.3E-13
49	372.6250618456789	(19, 1)	-5.1E-13
50	374.7901499384976	(12,15)	-5.1E-13
51	374.7901499384976	(15,12)	1.7E-13
52	375.6262714012037	(2,19)	0.0E+00
53	375.6262714012037	(19, 2)	1.7E-13
54	377.3252214748949	(9,17)	0.0E+00
55	377.3252214748949	(17, 9)	-4.0E-13
56	380.6315138264414	(3,19)	1.1E-13
57	380.6315138264414	(19, 3)	5.1E-13
58	381.7431541696481	(7,18)	1.1E-13
59	381.7431541696481	(18, 7)	2.8E-13
60	383.5113885026984	(11,16)	2.8E-13
61	383.5113885026984	(16,11)	8.0E-13
62	387.6456321370633	(4,19)	-5.7E-14
63	387.6456321370633	(19, 4)	0.0E+00
64	396.6036982435771	(10,17)	-3.4E-13
65	396.6036982435771	(17,10)	-2.3E-13
66	396.6754130695966	(5,19)	1.1E-13
67	396.6754130695966	(19, 5)	0.0E+00
68	396.8801883187966	(8,18)	2.8E-13
69	396.8801883187966	(18, 8)	5.7E-14
70	398.2330434729295	(14,14)	-5.1E-13

表 6 例題 2 : 三次元有限要素法で離散化した固有値の厳密解と数値解の誤差

解の番号	厳密解	固有モード	近似解の誤差
1	3.003651775330770	(1, 1, 1)	2.3E-14
2	6.021938860886062	(1, 2, 1)	1.8E-14
3	6.021938860886062	(2, 1, 1)	1.7E-14
4	6.021938860886063	(1, 1, 2)	1.5E-14
5	9.040225946441357	(1, 2, 2)	2.5E-14
6	9.040225946441357	(2, 1, 2)	2.0E-14
7	9.040225946441357	(2, 2, 1)	1.8E-14
8	11.10141032283029	(1, 1, 3)	1.1E-14
9	11.10141032283029	(1, 3, 1)	1.1E-14
10	11.10141032283029	(3, 1, 1)	0.0E+00
11	12.05851303199665	(2, 2, 2)	8.9E-15
12	14.11969740838558	(1, 2, 3)	2.0E-14
13	14.11969740838558	(1, 3, 2)	4.1E-14
14	14.11969740838558	(2, 1, 3)	2.0E-14
15	14.11969740838558	(2, 3, 1)	-2.0E-14
16	14.11969740838558	(3, 1, 2)	-1.1E-14
17	14.11969740838558	(3, 2, 1)	2.0E-14
18	17.13798449394087	(2, 2, 3)	1.1E-14
19	17.13798449394087	(2, 3, 2)	0.0E+00
20	17.13798449394087	(3, 2, 2)	2.1E-14
21	18.31626663233460	(1, 1, 4)	1.1E-14
22	18.31626663233460	(1, 4, 1)	1.1E-14
23	18.31626663233460	(4, 1, 1)	2.1E-14
24	19.19916887032980	(3, 3, 1)	3.2E-14
25	19.19916887032981	(1, 3, 3)	0.0E+00
26	19.19916887032981	(3, 1, 3)	1.1E-14
27	21.33455371788989	(1, 2, 4)	1.1E-14
28	21.33455371788989	(1, 4, 2)	2.1E-14
29	21.33455371788989	(2, 1, 4)	1.1E-14
30	21.33455371788989	(2, 4, 1)	2.1E-14
31	21.33455371788989	(4, 1, 2)	5.0E-14
32	21.33455371788989	(4, 2, 1)	3.2E-14
33	22.21745595588510	(2, 3, 3)	5.0E-14
34	22.21745595588510	(3, 2, 3)	7.1E-14
35	22.21745595588510	(3, 3, 2)	3.9E-14

表 7 例題 2 : 三次元有限要素法で離散化した固有値の厳密解と数値解の誤差 (続き)

解の番号	厳密解	固有モード	近似解の誤差
36	24.35284080344518	(2, 2, 4)	3.2E-14
37	24.35284080344518	(2, 4, 2)	0.0E+00
38	24.35284080344518	(4, 2, 2)	0.0E+00
39	26.41402517983411	(1, 4, 3)	1.1E-14
40	26.41402517983411	(3, 4, 1)	5.0E-14
41	26.41402517983411	(4, 1, 3)	6.0E-14
42	26.41402517983411	(4, 3, 1)	1.1E-14
43	26.41402517983412	(1, 3, 4)	3.2E-14
44	26.41402517983412	(3, 1, 4)	-2.1E-14
45	27.29692741782932	(3, 3, 3)	7.1E-14
46	27.77173660948493	(1, 1, 5)	8.2E-14
47	27.77173660948493	(1, 5, 1)	0.0E+00
48	27.77173660948493	(5, 1, 1)	-1.8E-14
49	29.43231226538941	(2, 3, 4)	2.1E-14
50	29.43231226538941	(2, 4, 3)	5.0E-14
51	29.43231226538941	(3, 2, 4)	-2.8E-14
52	29.43231226538941	(3, 4, 2)	-7.1E-14
53	29.43231226538941	(4, 2, 3)	0.0E+00
54	29.43231226538941	(4, 3, 2)	7.1E-14

表 8 例題 3 : 三次元中心差分法で離散化した固有値の厳密解と数値解の誤差

解の番号	厳密解	固有モード	近似解の誤差
1	2.996351774244256	(1, 1, 1)	9.6E-14
2	5.978139029800155	(1, 1, 2)	3.3E-14
3	5.978139029800156	(1, 2, 1)	4.6E-14
4	5.978139029800156	(2, 1, 1)	5.3E-14
5	8.959926285356055	(1, 2, 2)	4.1E-14
6	8.959926285356055	(2, 1, 2)	4.6E-14
7	8.959926285356055	(2, 2, 1)	9.1E-14
8	10.89944844357771	(1, 1, 3)	5.2E-14
9	10.89944844357771	(1, 3, 1)	4.1E-14
10	10.89944844357771	(3, 1, 1)	6.0E-14
11	11.94171354091195	(2, 2, 2)	4.1E-14
12	13.88123569913361	(1, 2, 3)	4.1E-14
13	13.88123569913361	(1, 3, 2)	8.0E-14
14	13.88123569913361	(2, 1, 3)	6.0E-14
15	13.88123569913361	(2, 3, 1)	6.0E-14
16	13.88123569913361	(3, 1, 2)	9.1E-14
17	13.88123569913361	(3, 2, 1)	9.1E-14
18	16.86302295468951	(2, 2, 3)	2.1E-14
19	16.86302295468951	(2, 3, 2)	6.0E-14
20	16.86302295468951	(3, 2, 2)	7.1E-14
21	17.68851624250037	(1, 1, 4)	7.1E-14
22	17.68851624250037	(1, 4, 1)	9.9E-14
23	17.68851624250037	(4, 1, 1)	7.1E-14
24	18.80254511291117	(1, 3, 3)	8.2E-14
25	18.80254511291117	(3, 1, 3)	4.3E-14
26	18.80254511291117	(3, 3, 1)	4.3E-14
27	20.67030349805627	(1, 2, 4)	7.8E-14
28	20.67030349805627	(1, 4, 2)	1.1E-14
29	20.67030349805627	(2, 1, 4)	1.1E-13
30	20.67030349805627	(2, 4, 1)	7.8E-14
31	20.67030349805627	(4, 1, 2)	7.1E-14
32	20.67030349805627	(4, 2, 1)	7.8E-14
33	21.78433236846707	(2, 3, 3)	8.2E-14
34	21.78433236846707	(3, 2, 3)	9.2E-14
35	21.78433236846707	(3, 3, 2)	9.2E-14

表 9 例題 3 : 三次元中心差分法で離散化した固有値の厳密解と数値解の誤差 (続き)

解の番号	厳密解	固有モード	近似解の誤差
36	23.65209075361217	(2, 2, 4)	7.8E-14
37	23.65209075361217	(2, 4, 2)	5.0E-14
38	23.65209075361217	(4, 2, 2)	7.8E-14
39	25.59161291183383	(1, 3, 4)	1.1E-13
40	25.59161291183383	(1, 4, 3)	5.0E-14
41	25.59161291183383	(3, 1, 4)	-1.1E-14
42	25.59161291183383	(3, 4, 1)	5.0E-14
43	25.59161291183383	(4, 1, 3)	1.8E-14
44	25.59161291183383	(4, 3, 1)	6.0E-14
45	26.24634253041053	(1, 1, 5)	6.0E-14
46	26.24634253041053	(1, 5, 1)	1.1E-14
47	26.24634253041053	(5, 1, 1)	9.9E-14
48	26.70564178224463	(3, 3, 3)	3.9E-14
49	28.57340016738973	(2, 3, 4)	2.8E-14
50	28.57340016738973	(2, 4, 3)	8.9E-14
51	28.57340016738973	(3, 2, 4)	3.9E-14
52	28.57340016738973	(3, 4, 2)	-2.1E-14
53	28.57340016738973	(4, 2, 3)	1.8E-14
54	28.57340016738973	(4, 3, 2)	5.0E-14
55	29.22812978596643	(1, 2, 5)	7.8E-14
56	29.22812978596643	(1, 5, 2)	7.1E-14
57	29.22812978596643	(2, 1, 5)	2.8E-14
58	29.22812978596643	(2, 5, 1)	5.0E-14
59	29.22812978596643	(5, 1, 2)	1.2E-13
60	29.22812978596643	(5, 2, 1)	8.9E-14