

フィルタ対角化法に与える初期ベクトルの改良の模索

村上 弘^{1,a)}

概要：フィルタ対角化法により一般固有値問題の固有対で指定区間に固有値があるものの近似を求める。その際にこれまで、「必要な固有ベクトル」に関する事前知識を持たないと仮定して、フィルタに与えるべき「必要な固有ベクトル」すべてを含むベクトルの組として、成分が一様乱数であるベクトルの組の正規直交化により得られるものを用いてきた。

しかし、その方法で生成されたベクトルの組が含む「必要な固有ベクトル」の割合は、行列次数の増加に伴い減少するので、そのことからフィルタを適用して得られたベクトルの組が含む「不要な固有ベクトル」の割合は増加する。それにより、精度の限られた数値計算では、フィルタ適用で得たベクトルの組を元にして構成される「必要な固有ベクトル」の張る不変部分空間の近似が悪くなり、近似固有対の精度も低下する。それ以外にも問題の規模が大きくなると、たとえばレゾルベントの作用を実現するための連立1次方程式の求解における丸め誤差の影響も増大する。(なお、直交化とフィルタを適用する組み合わせの処理を反復することで、近似不変部分空間とそれから得られる近似固有対の精度を段階的に向上できることは既に報告済みである [1][2].)

今回は、一様乱数を要素とするベクトルの組の正規直交化で得られたものに対して、さらに「必要な固有ベクトル」を含む割合を増すような処理を加える。ただしその処理の手間はあまり多くないものとする。そのような処理を加えて得られたベクトルの組に対してフィルタを適用する、という方法を模索する。

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

1. 単一のレゾルベントで構成されたフィルタ

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された区間 $[a, b]$ にあるものをフィルタを利用して近似する。

今回の実験に用いるフィルタは、複素数 z をシフトとするレゾルベント $\mathcal{R}(z) \equiv (A - zB)^{-1}B$ から構成される。レゾルベントの作用 $\mathbf{y} \leftarrow \mathcal{R}(z)\mathbf{x}$ はシフト行列 $C(z) \equiv A - zB$ を係数とする連立1次方程式 $C(z)\mathbf{y} = B\mathbf{x}$ を $\mathbf{y}$ について解くことで実現される。行列 $C(z)$ はシフト z が実数の場合は実対称であり、さらに z が最小固有値よりも小さければ正定値になる。シフト z が虚数の場合には $C(z)$ は複素対称で非特異である。係数が対称である線形方程式は改訂 Cholesky 分解 (LDL^T 分解) と前進後退代入で解くことにする。用いるレゾルベントを単一にすることで、解くべき問題が大規模である場合の行列分解の計算量と特に分解後の因子を保持するための記憶量を抑えることができる。

今回用いた単一のレゾルベントからなるフィルタは以

下の2種類である。なお、 g_s は阻止域での伝達関数の大きさの上限であり、 γ と γ' は実定数、 I は恒等作用素である。(1) $\mathcal{F} = g_s T_n(2\gamma\mathcal{R}(\rho) - I)$ 。これは下端側固有値用で、シフト ρ は最小固有値よりも小さい実数である。(2) $\mathcal{F} = g_s T_n(2\gamma'\text{Im}\mathcal{R}(\rho') - I)$ 。これは中間固有値用で、シフト ρ' は虚数である。

しかし、このような簡易構成のフィルタは伝達特性をあまり良くできない。たとえば、固有値が $[a, b]$ の範囲にある「必要な固有ベクトル」に対する伝達率の最大最小比 $1/g_p$ を小さくして1に近くすることは困難である。この比が大きければそれだけ、同じ1つのベクトルに線形結合の形で含まれている固有ベクトルのうちで伝達率が小さいものは(伝達率の大きい固有ベクトルに覆われて)数値丸めにより下位の桁の情報が落ちてしまうので、精度が低下する。

2. フィルタを用いた固有値の反復改良

フィルタの特性があまり良くなくても、以下の手順で B -正規直交化とフィルタの操作を併せたものを少数回 (IT 回) 反復することで段階的に固有対の近似を改良できる [1][2].

(1) いま Y を m 個のランダムな列ベクトルの組とする。

(2) 以下を $i = 1, \dots, \text{IT}$ と繰り返す：

Y を B -正規直交化して X とする；

¹ 東京都立大学 数理科学専攻
Department of Mathematical Sciences, Tokyo Metropolitan University, Hachioji, Tokyo 192-0397, Japan

^{a)} mrkmhrsh@tmu.ac.jp

X にフィルタを作用させて Y を作る。

(3) 伝達関数の形状を考慮して、最後の X と Y から近似固有対を構成する。

途中で m の値は、ステップ 2 の正規直交化で決定した階数により更新を受ける。通過域における伝達率の均一性の悪いフィルタを固有ベクトルの線形結合であるベクトルに適用すると、伝達率の小さい固有ベクトルはその下位の桁の情報を数値丸めにより失う。正規直交化はそのような傾向をなるべく防ぐために行っている。このようなベクトルの組の直交化を反復ごとに行う技法は、一般に「直交化反復 (orthogonal iteration)」と呼ばれる。

固有値が指定された範囲にある「必要な固有ベクトル」の割合はフィルタを用いることにより選択的に高めることができる。「必要な固有ベクトル」を含む割合が非常に高いベクトルの組は不変部分空間の近似基底になる。そのような近似基底の組に Rayleigh-Ritz 法を適用すれば、「必要な固有ベクトル」とその固有値の近似が求まる。直交化してフィルタを適用する操作を繰り返すことにより不変部分空間の近似基底の組を改良できる。「必要な固有ベクトル」の良い近似を与える事前の知識がなければ、最初はランダムなベクトルの組をフィルタに与える。そうすることにより、与えたベクトルの組にいくつかの「必要な固有ベクトル」がごく僅かしか含まれていないといった算法にとって不都合な状況をほぼ確実に避けることができる。つまりフィルタ対角化法は一種のランダム化アルゴリズムである。

「必要な固有ベクトル」が一様乱数から生成したベクトルの組に含まれる割合 (S/N 比) は固有値問題が大規模であるほど減るので、それに伴って得られる近似固有対の精度が悪くなる傾向がある。その傾向を避けるためにはたとえば、計算に用いる数値と演算の桁数を増やす、用いるフィルタの濃縮率を高める、直交化付きフィルタの適用回数を増やす、などがある。しかし今回はそれらとは異なる新しい方法を試みる。それは一様乱数を要素とするベクトルの組を正規直交化した後に何らかの手間の少ない処理を適用して「必要な固有ベクトル」の割合を増す。そうして得られたベクトルの組にフィルタを適用するという方法である。

3. 実験について

3.1 計算機システムの概要

実験に使用した計算機システムは、東大情報基盤センタ Oakbridge-CX (富士通 PRIMERGY CX 2550 M5 の 1 ノード 2CPU) である。CPU は Intel Xeon Platinum 8280 (Cascade-Lake) (2.7GHz, 28 コア) であり、ノードあたりの理論ピーク性能は 4.84TFLOPS (倍精度 FP64) で、メモリ容量は 196GiB DDR4 である。OS は CentOS 7.6 である。ソースコードは Fortran90 言語に OpenMP のディレクティブを入れて書いた。コンパイラは Intel fortran (バージョン 19.0.5.281) で、コンパイラオプションは `-fast`

`-xCORE-AVX512 -qopenmp -align array64byte` である。OpenMP のスレッド数は 56 (これは 2 つの CPU のコア数の合計である) とした。スレッドの割り当て方式の指定には `KMP_AFFINITY=balanced` を用いた。

計算に用いた数値と演算は IEEE 754 の倍精度 (FP64, 有効桁数 15.95) あるいは単精度 (FP32, 有効桁数 7.22) である。

3.2 例題とした一般固有値問題

例題とした実対称定値一般固有値問題 $A \mathbf{v} = \lambda B \mathbf{v}$ は、1 辺の長さが π の立方体の領域に零固定境界条件を課した 3 次元ラプラス固有値問題 $-\Delta \Psi(x, y, z) = \lambda \Psi(x, y, z)$ を有限要素法で離散化して得られるものである。立方体の各辺方向を $N_1 + 1$, $N_2 + 1$, $N_3 + 1$ の小区間に等分割したものを有限要素法の要素分割とした (図 1)。そうして各要素内の展開基底は 3 重線形関数とした。すると行列 A と B の次数は $N = N_1 N_2 N_3$ ($N_1 \leq N_2 \leq N_3$) であり、下帯幅は $w_L = 1 + N_1 + N_1 N_2$ にできる。このようにして生成された一般固有値問題に対して、固有値が区間 $[a, b]$ にある固有対の近似をフィルタ対角化法を用いて求めた。このテスト問題の固有値は簡単な数式の計算で求めることができる。さらにそのことを用いて任意の区間内の固有値の数も数え上げにより求めることができる。

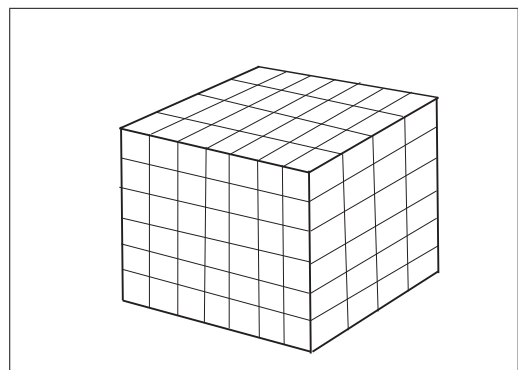


図 1 立方体の有限要素分割の概念。分割 $(N_1, N_2, N_3) = (3, 5, 6)$ の例。

3.3 フィルタの設計

下端側固有値の固有対を求めるためのフィルタは、実数シフトのレゾルベントの n 次 Chebyshev 多項式である。中間固有値の固有対を求めるためのフィルタは、虚数シフトのレゾルベントの虚部の n 次 Chebyshev 多項式である。

下端側と中間の固有値それぞれに対してフィルタを用意した。フィルタの伝達関数はパラメタの 3 つ組 (μ, g_s, n) で指定した。今回の例ではすべて $\mu = 1.5$, $g_s = 1E-5$, 次数 $n = 4$ とした。そのとき下端側固有値用の伝達関数では、 $g_p = 5.3E-4$, $g_s/g_p = 1.9E-2$ となり、中間固有値用の伝達関数では、 $g_p = 3.7E-3$ で $g_s/g_p = 2.7E-3$ となる。下端側固有値用と中間固有値用のフィルタの伝達関数 $g(t)$

の大きさの対数グラフをそれぞれ図 2 と図 3 に示す. ここで t は固有値の座標 λ の相対座標であり, 固有値の区間 $\lambda \in [a, b]$ が下端側のものであるときにはそれは $t \in [0, 1]$ に, 中間のものであるときにはそれは $t \in [-1, 1]$ にそれぞれ線形に対応する.

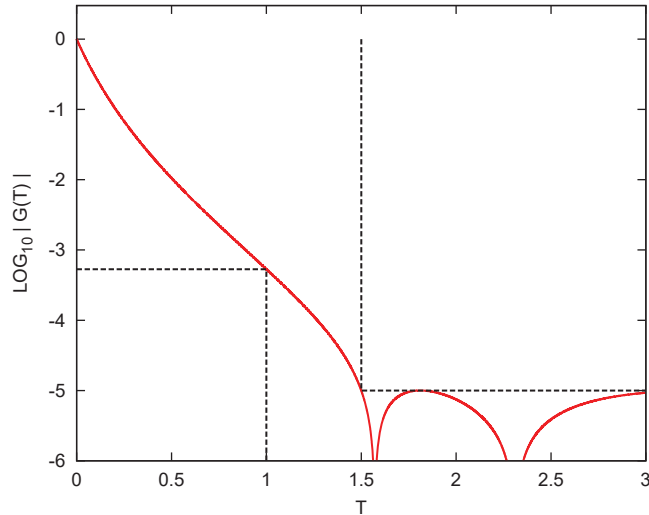


図 2 下端側固有値用の伝達関数の大きさ $|g(t)|$ の対数 ($\mu = 1.5$, $g_s = 1E-5$, $n = 4$)

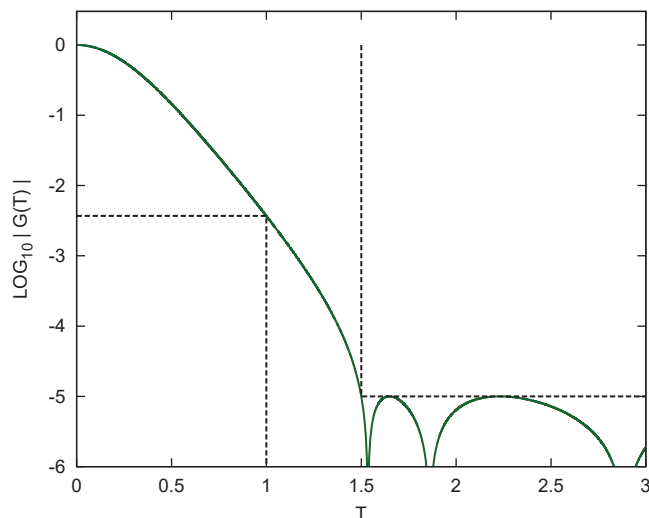


図 3 中間固有値用の伝達関数の大きさ $|g(t)|$ の対数 ($\mu = 1.5$, $g_s = 1E-5$, $n = 4$) (グラフは右半分)

3.4 近似固有対の相対残差による評価

計算で求められた近似固有対 $(\lambda, \mathbf{v})$ の品質評価には, 式 (1) で与えられる相対残差 Θ を用いた. この Θ の値はベクトル $\mathbf{v}$ の規格化には依らず, また行列 A と B に共通の定数を乗じて不変である. その幾何学的な意味としては, N -次元ユークリッド空間の中で 2 つのベクトル $A\mathbf{v}$ と $\lambda B\mathbf{v}$ が挟む角の大きさを ϕ とするときに, 不等式 (2) が成り立つことがある. そこで相対残差 Θ の値が小さい近似固有対ほどその品質が良いと判断する.

$$\Theta(\lambda, \mathbf{v}) \equiv \frac{\|A\mathbf{v} - \lambda B\mathbf{v}\|_2}{\|\lambda B\mathbf{v}\|_2}. \quad (1)$$

$$\sin \phi \leq \Theta(\lambda, \mathbf{v}). \quad (2)$$

4. 実験 1: レゾルベントの反復適用による初期ベクトルの組の構成

実験 1 では立方体領域の有限要素法による要素分割を $(N_1, N_2, N_3) = (20, 30, 40)$ とした. そのとき行列 A と B の次数は $N = 24,000$ であり, 下帯幅は $w_L = 621$ である.

固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対の数は 378 である. それらを求める場合に用いたフィルタは, 実数シフトのレゾルベントの Chebyshev 多項式であり, そのパラメタの 3 つ組として $\mu = 1.5$, $g_s = 1E-5$, 次数 $n = 4$ を指定した. そうしてこの場合に最初にフィルタに与えるベクトルの数は $m = 800$ とした (なお, 固有値がフィルタの通過域と遷移域の合併区間 $[0, 150]$ にある固有対の数は 700 である).

また, 固有値が中間の区間 $[100, 200]$ にある固有対の数は 684 である. それらを求める場合に用いたフィルタは, 虚数シフトのレゾルベントの虚部の Chebyshev 多項式であり, そのパラメタの 3 つ組もまた $\mu = 1.5$, $g_s = 1E-5$, 次数 $n = 4$ と指定した. そうしてこの場合に最初にフィルタに与えるベクトルの数は $m = 1,300$ とした (なお, 固有値がフィルタの通過域と遷移域の合併区間 $(75, 225)$ にある固有対の数は 1,019 である).

初期ベクトルを作るために用いた「レゾルベント」は, フィルタの内部で用いたものと同一とした. 実験 1 では初期ベクトルの組は以下の方法で作成する. まず成分が $(-1, 1)$ 上の一様乱数からなるベクトルを m 個用意し, そうして下端側の固有対の近似を求める場合には先に B -正規直交化を行ってから実数シフトのレゾルベントを適用する操作を, あるいは中間の固有対の近似を求める場合には先に B -正規直交化を行ってから虚数シフトのレゾルベントを適用した結果の虚部をとる操作を, どちらの場合も k 回繰り返す. こうして作成されたベクトルの組は, 回数 k を増せばそれだけ, 固有値が指定区間から離れた「不要な固有ベクトル」を含む割合が減少したものになる (これも直交化とレゾルベントを組み合わせた一種のフィルタ操作である).

4.1 実験 1a: 下端側固有対を求めた例 (倍精度計算, $m = 800$)

固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 378 個を求める実験で, 初期ベクトルの数は $m = 800$ とし, 倍精度で計算を行った場合を示す. 図 4 の 2 つの折れ線グラフ (IT=1 と IT=2) はそれぞれフィルタを 1 回あるいは 2 回適用した場合である. 乱数ベクトルを元にして直交化とレゾルベントの組み合わせを k 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうちで, 固有値が指定区間に

あるものについての最大の相対残差をプロットした。そうして図 5 と図 6 はフィルタの適用回数がそれぞれ 1 回と 2 回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、 k が 0 から 8 までの各場合について線を変えて描いたものである。どちらの図でも、 k が増すにつれてグラフの線が下がるが、その下がりかたは固有値が小さいものほど速い。

4.2 実験 1b：下端側固有対を求めた例（単精度計算， $m = 800$ ）

固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 378 個を求める実験で、初期ベクトルの数は $m = 800$ とし、単精度で計算を行った場合を示す。図 7 の 2 つの折れ線グラフ（IT=1 と IT=2）はそれぞれフィルタを 1 回あるいは 2 回適用した場合である。乱数ベクトルを元にして直交化とレゾルベントの組み合わせを k 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうちで、固有値が指定区間にあるものについての最大の相対残差をプロットした。そうして図 8 と図 9 はフィルタの適用回数がそれぞれ 1 回と 2 回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、 k が 0 から 8 までの各場合について線を変えて描いたものである。どちらの図でも、 k を増すにつれてグラフの線は下がるが、その下がりかたは固有値が小さいものほど速く、相対残差の改良が単精度計算での限界に達した後はそれ以上は下らない。

4.3 実験 1c：中間固有対を求めた例（倍精度計算， $m = 1,300$ ）

固有値が中間の区間 $[100, 200]$ にある固有対 684 個を求める実験で、初期ベクトルの数を $m = 1,300$ とし、倍精度で計算を行った場合を示す。図 10 の 2 つの折れ線グラフ（IT=1 と IT=2）はそれぞれフィルタを 1 回あるいは 2 回適用した場合である。乱数ベクトルを元にして直交化とレゾルベントの組み合わせを k 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうちで、固有値が指定区間にあるものについての最大の相対残差をプロットした。そうして図 11 と図 12 はフィルタの適用回数がそれぞれ 1 回と 2 回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、 k が 0 から 8 までの各場合について線を変えて描いたものである。どちらの図でも、 k が増すにつれてグラフの線は下がるが、その下がりかたは固有値が区間の中央に近いほど速い。

4.4 実験 1d：中間固有対を求めた例（単精度計算， $m = 1,300$ ）

固有値が中間の区間 $[100, 200]$ にある固有対 684 個を求

める実験で、初期ベクトルの数を $m = 1,300$ とし、単精度で計算を行った場合を示す。図 13 の 2 つの折れ線グラフ（IT=1 と IT=2）はそれぞれフィルタを 1 回あるいは 2 回適用した場合である。乱数ベクトルを元にして直交化とレゾルベントの組み合わせを k 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうちで、固有値が指定区間にあるものについての最大の相対残差をプロットした。そうして図 14 と図 15 はフィルタの適用回数がそれぞれ 1 回と 2 回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、 k が 0 から 8 までの各場合について線を変えて描いたものである。どちらの図でも、 k が増すにつれてグラフの線が下がるが、その下がりかたは固有値が区間の中央付近であるほど速い。この単精度計算による実験の例では、フィルタを 2 回適用する場合には、 k は 1 でほぼ十分なことが図からわかる。

4.5 実験 1 の考察：レゾルベントの反復適用による構成

実験結果から、初期ベクトルを作るための前処理として正規直交化とレゾルベントの作用の組み合わせを k 回適用して「不要な固有ベクトル」の割合を減らす方法は上手く機能することがわかる。たとえば、図 5 や図 8 のグラフで $k = 0$ の場合、つまりレゾルベントを前処理に使わない場合には、区間の右側の固有値が 90 を越えている固有対は落ちているが、 k が 1 以上の場合にはそうになっていない。最大の相対残差も、 k とともに単調に減少する様子がグラフから読み取れる。

n 次のフィルタはその適用 1 回につき内部でレゾルベントの適用が n 回ある。もしも今の場合のようにフィルタの次数が $n = 4$ ならば、フィルタを適用する前にレゾルベントをたとえば $k = 4$ 回適用するよりも次数 $n = 4$ のフィルタの適用回数 IT を 1 回増やした方が良いであろう。

最大相対残差のグラフから、レゾルベントの適用回数 k が 1 や 2 の程度でも近似固有対の精度を向上する効果があることがわかる。しかしできればレゾルベントを適用するよりも少ない手間で、初期ベクトルの組が「不要な固有ベクトル」を含む割合を低下できる方法が望まれる。そのような方法の試みを次節で述べる。

5. 実験 2：平滑化の反復適用による初期ベクトルの組の構成

実験 2 では有限要素法の立方体領域の要素分割は実験 1 と同じく $(N_1, N_2, N_3) = (20, 30, 40)$ にした。行列 A と B の次数は $N = 24,000$ であり、下帯幅は $w_L = 621$ であり、実験 2 の固有値問題は実験 1 のものと同一になる。以下の実験例で扱うのは、下端側の固有値の固有対を求める問題だけとする（問題が中間固有値の固有対を求める場合は、今後の課題である）。

固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対の数は 378 であ

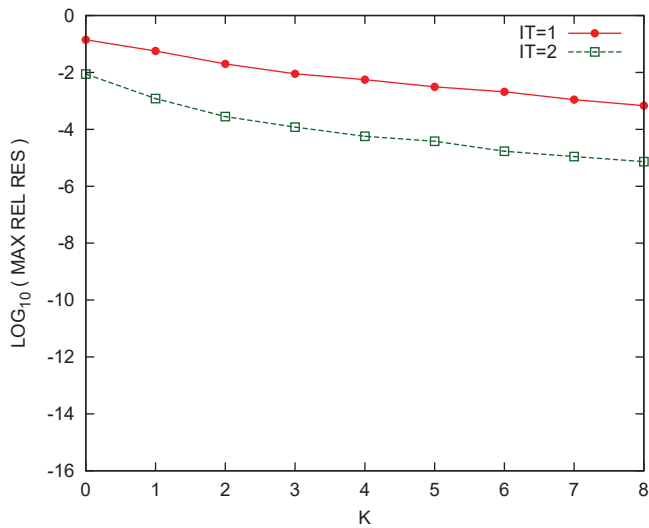


図 4 実験 1a: 繰り返し回数 k と下端側固有対の最大相対残差, (倍精度計算, $m = 800$)

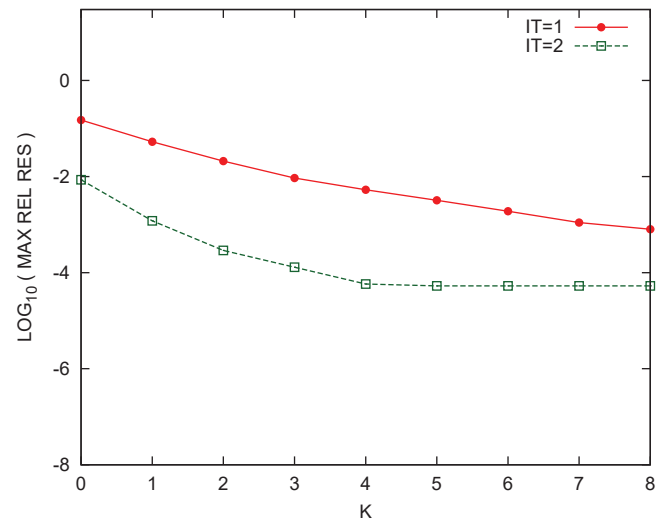


図 7 実験 1b: 繰り返し回数 k と下端側固有対の最大相対残差, (単精度計算, $m = 800$)

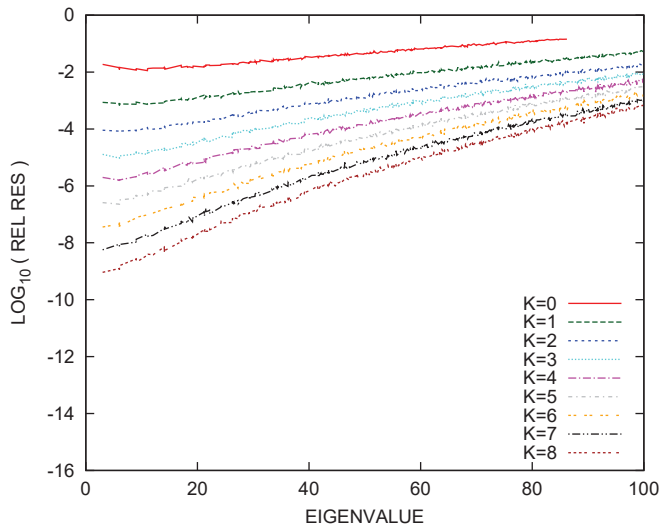


図 5 実験 1a: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 1 回 (倍精度計算, $m = 800$)

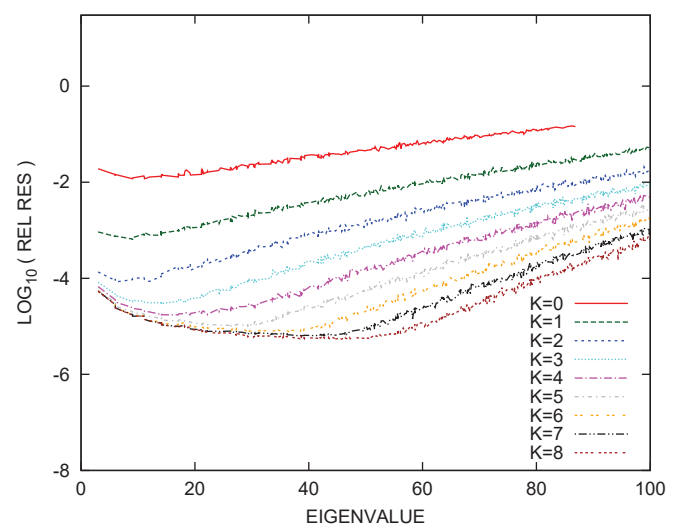


図 8 実験 1b: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 1 回 (単精度計算, $m = 800$)

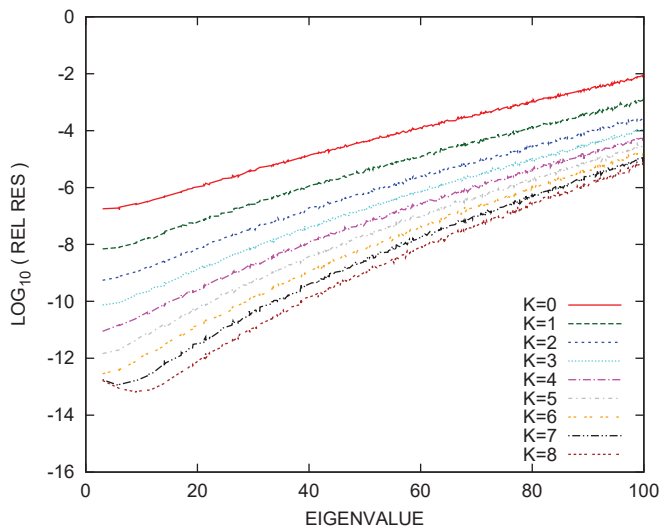


図 6 実験 1a: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 2 回 (倍精度計算, $m = 800$)

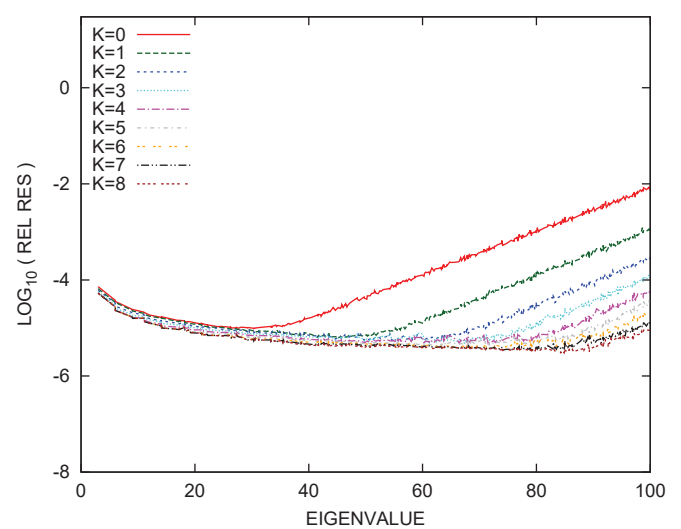


図 9 実験 1b: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 2 回 (単精度計算, $m = 800$)

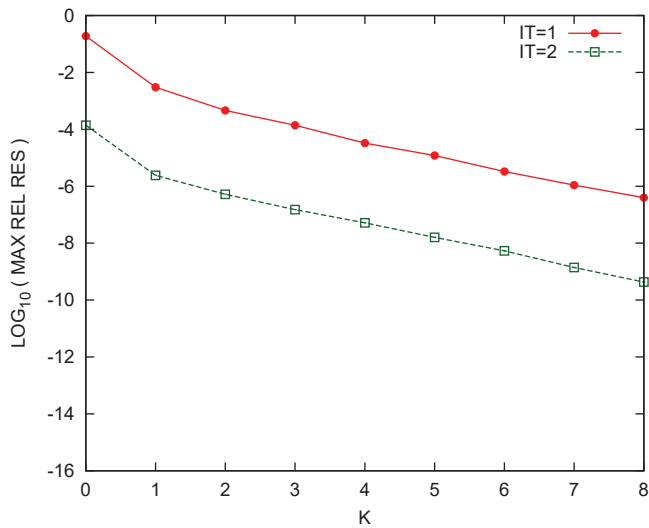


図 10 実験 1c：繰り返し回数 k と中間固有対の最大相対残差，(倍精度計算， $m = 1,300$)

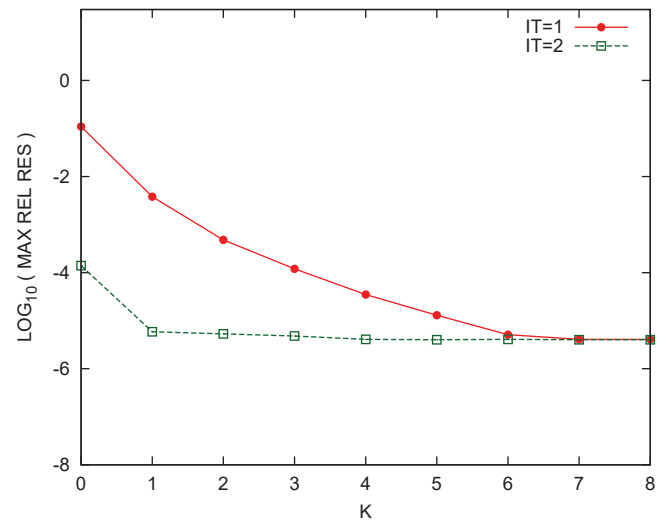


図 13 実験 1d：繰り返し回数 k と中間固有対の最大相対残差，(単精度計算， $m = 1,300$)

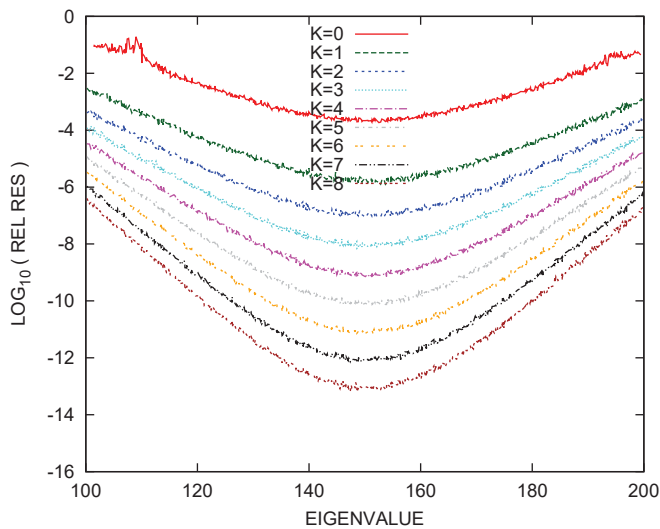


図 11 実験 1c：中間固有対の固有値と相対残差，フィルタの適用 1 回 (倍精度計算， $m = 1,300$)

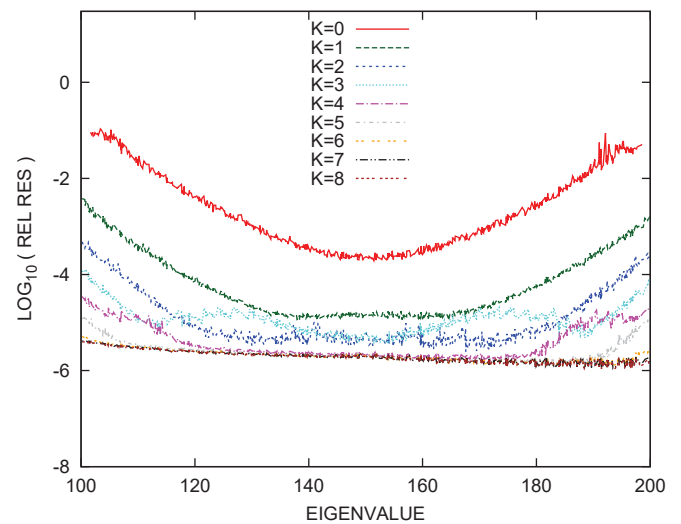


図 14 実験 1d：中間固有対の固有値と相対残差，フィルタの適用 1 回 (単精度計算， $m = 1,300$)

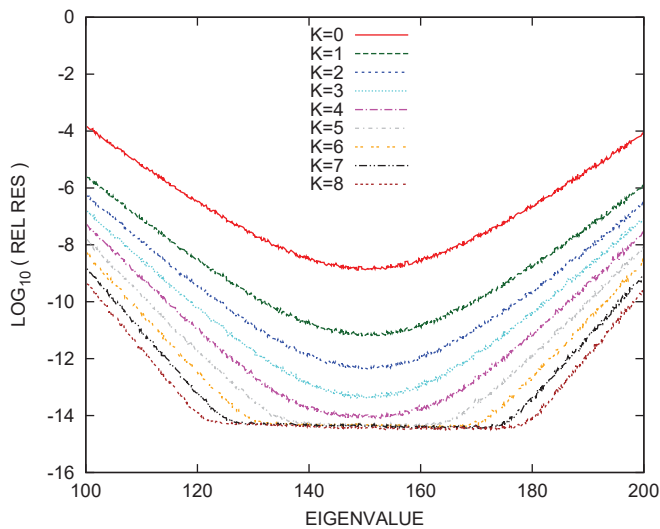


図 12 実験 1c：中間固有対の固有値と相対残差，フィルタの適用 2 回 (倍精度計算， $m = 1,300$)

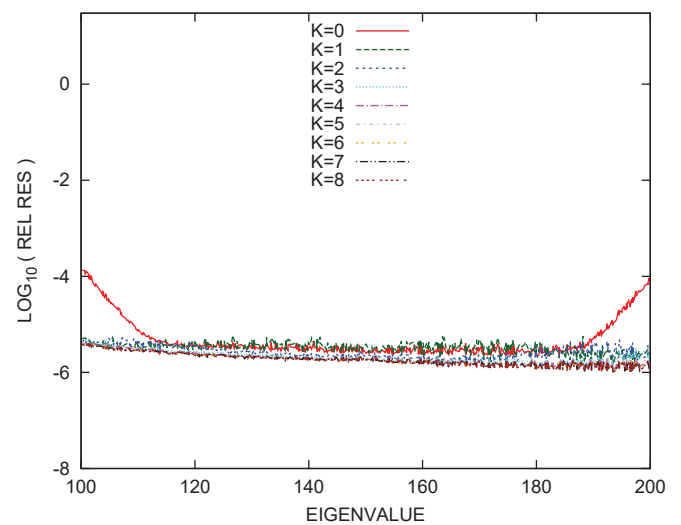


図 15 実験 1d：中間固有対の固有値と相対残差，フィルタの適用 2 回 (単精度計算， $m = 1,300$)

る。そうしてそれらを求める場合に用いたフィルタも実験 1 と同じもので、実数シフトのレゾルベントの Chebyshev 多項式であり、そのパラメタの 3 つは $\mu = 1.5$, $g_s = 1E-5$, 次数 $n = 4$ と指定した。そうしてフィルタに最初に与えるベクトルの数は $m = 800$ とした (なお、固有値がフィルタの通過域と遷移域の合併区間 $[0, 150]$ にある固有対の数は 700 である)。

いま我々が扱っている固有値問題 $A\mathbf{x} = \lambda B\mathbf{x}$ は立方体領域の上のラプラシアン固有値の有限要素法による離散化である。シフトが z のレゾルベント $R(z)$ のベクトル $\mathbf{x}$ への作用 $\mathbf{y} = R(z)\mathbf{x}$ は、連立 1 次方程式 $(A - zB)\mathbf{y} = B\mathbf{x}$ の解 $\mathbf{y}$ を解いて求める。しかしフィルタに与える前の初期ベクトルを作るだけの目的であれば、この方程式をそれほど正確に解く必要はなく、 $\mathbf{y}$ の方が $\mathbf{x}$ に比べて固有値が z から離れている固有ベクトルを含む割合を十分少なくできればよい。また後で正規化を行うので、ベクトルのノルムがある程度変化してもかまわない。

そこで方程式 $(A - zB)\mathbf{y} = \mathbf{0}$ を反復法により初期値 $\mathbf{x}$ から開始して解くという近似を考える。この方程式の真の解は z が固有値でなければ零ベクトルであるが、反復法を少数回適用して得られる近似解は零にはならない。反復法が残差を減少させる性質のものであれば、近似解が含む固有ベクトルの割合はその固有値が z から遠いものほど速く減少することが期待できる。今回は、方程式 $(A - zB)\mathbf{y} = \mathbf{0}$ に対して初期値 $\mathbf{x}$ から始めて (線形方程式に対する) Jacobi 反復法を行った。そうして簡単のために $z = 0$ とした。これは今の問題の場合には 3 次元格子点上で定義された関数の振る舞いを平滑化する操作に相当する。また本来は A や B は有限要素法で離散化された固有値問題の行列であるのだが、今回は簡単化のために、平滑化に用いた行列は同じラプラス固有値問題を差分法で (7 点中心差分に基づいて) 離散化して得られるもので置き換えて計算をした。

各方向 ν の格子点間隔は $h_\nu = \pi/(N_\nu + 1)$, $\nu = 1, 2, 3$ であり、ラプラシアン $\Delta = \nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2$ の差分近似は格子点での値を添字の組 (i, j, k) を用いて表すと式 (3) で与えられる。

$$\begin{aligned} & \frac{x_{i-1,j,k} - 2x_{i,j,k} + x_{i+1,j,k}}{h_1^2} + \frac{x_{i,j-1,k} - 2x_{i,j,k} + x_{i,j+1,k}}{h_2^2} \\ & + \frac{x_{i,j,k-1} - 2x_{i,j,k} + x_{i,j,k+1}}{h_3^2}. \end{aligned} \quad (3)$$

すると、 $c_\nu = h_\nu^{-2}/(2h_1^{-2} + 2h_2^{-2} + 2h_3^{-2})$, $\nu = 1, 2, 3$ とおくと、Jacobi 法の反復 1 回は、式 (4) を添字 i, j, k を $N_1 \times N_2 \times N_3$ 通りについて、零固定境界条件も考慮に入れて計算することである。これは周囲 6 点の値の正の重み付きの平均値である。この平滑化の操作を繰り返すには、まず $\mathbf{x}$ から $\mathbf{y}$ を作り、次に $\mathbf{y}$ と $\mathbf{x}$ の立場を入れ替えて繰り返す。平滑化を繰り返すに従ってベクトルの組の線形独立性が低下するので、その傾向を防ぐために今回の実験で

は平滑化を 10 回行うごとに有限要素法の行列 B をベクトル同士の内積の重みとする正規直交変換を施している。

$$\begin{aligned} y_{i,j,k} & \leftarrow c_1 \times (x_{i-1,j,k} + x_{i+1,j,k}) \\ & + c_2 \times (x_{i,j-1,k} + x_{i,j+1,k}) \\ & + c_3 \times (x_{i,j,k-1} + x_{i,j,k+1}). \end{aligned} \quad (4)$$

初期ベクトルの組を平滑化を繰り返して作成した場合の実験例を以下に示す。

5.1 実験 2a：下端側固有対を求めた例 (倍精度計算, $m = 800$)

固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 378 個を求める実験で、計算を倍精度で行い、初期ベクトルの数は $m = 800$ とした場合を示す。図 16 の 2 つの折れ線グラフ (IT=1, IT=2) はそれぞれフィルタを 1 回あるいは 2 回適用した場合である。乱数ベクトルを元にして平滑化を ℓ 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうちで、固有値が指定区間にあるものについての最大相対残差をプロットした。そうして図 17 と図 18 はフィルタの適用回数がそれぞれ 1 回と 2 回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、平滑化の回数 ℓ を 0, 10, 20, 40, 80, 160, 320, 640, 1280 とした各場合について線を変えて描いたものである。

5.2 実験 2b：下端側固有対を求めた例 (倍精度計算, $m = 1, 200$)

固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 378 個を求める実験で、計算を倍精度で行い、初期ベクトルの数は $m = 1, 200$ とした場合を示す。図 19 の 2 つの折れ線グラフ (IT=1, IT=2) はそれぞれフィルタを 1 回あるいは 2 回適用した場合である。乱数ベクトルを元にして平滑化を ℓ 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうちで、固有値が指定区間にあるものについての最大相対残差をプロットした。そうして図 20 と図 21 はフィルタの適用回数がそれぞれ 1 回と 2 回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、平滑化の回数 ℓ を 0, 10, 20, 40, 80, 160, 320, 640, 1280 とした各場合について線を変えて描いたものである。

5.3 実験 2c：下端側固有対を求めた例 (単精度計算, $m = 800$)

固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 378 個を求める実験で、計算を単精度で行い、初期ベクトルの数は $m = 800$ とした場合を示す。図 22 の 2 つの折れ線グラフ (IT=1, IT=2) はそれぞれフィルタを 1 回あるいは 2 回適用した場合である。乱数ベクトルを元にして平滑化を ℓ 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうち

で、固有値が指定区間にあるものについての最大相対残差をプロットした。そうして図 23 と図 24 はフィルタの適用回数がそれぞれ 1 回と 2 回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、平滑化の回数 ℓ を 0, 10, 20, 40, 80, 160, 320, 640, 1280 とした各場合について線を変えて描いたものである。

5.4 実験 2d：下端側固有対を求めた例（単精度計算， $m = 1,200$ ）

固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 378 個を求める実験で、計算を単精度で行い、初期ベクトルの数は $m = 1,200$ とした場合を示す。図 25 の 2 つの折れ線グラフ（IT=1, IT=2）はそれぞれフィルタを 1 回あるいは 2 回適用した場合である。乱数ベクトルを元にして平滑化を ℓ 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうちで、固有値が指定区間にあるものについての最大相対残差をプロットした。そうして図 26 と図 27 はフィルタの適用回数がそれぞれ 1 回と 2 回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、平滑化の回数 ℓ を 0, 10, 20, 40, 80, 160, 320, 640, 1280 とした各場合について線を変えて描いたものである。

5.5 実験 2 の考察：平滑化の反復適用による構成

気になる点は、計算が倍精度の場合も単精度の場合も、初期ベクトルの数が $m = 800$ の場合には、固有値が 70 から 80 を越える固有対については、平滑化の回数 ℓ を 80 を越えて増しても相対残差が減らない傾向を示したことである。そのことは、図 16 や図 22 で、IT=2 の場合の最大相対残差のグラフが最初は減少しているがそれから増加に転じていることからわかる。しかし初期ベクトルの数を増やして $m = 1,200$ にした場合には、平滑化の回数 ℓ を増すと最大相対残差は単調に減少している。

つまり平滑化の回数 ℓ を非常に多くした場合の挙動に少し奇妙なところがある。その原因は、有限要素法から導かれた一般固有値問題の係数行列を差分法から導かれたもので代用して平滑化の処理を構成していることにあるのかもしれない。そこで平滑化の処理を差分法ではなく元の有限要素法の行列に基づいて行うようにして結果を比較することが考えられるが、それは今後の課題とする。また他の可能性としては、いま我々は平滑化処理を 10 回行うたびにベクトルの組に対して B -正規直交化を施しているが、その直交化の処理の中で（ピボット選択なしの）Cholesky 分解を用いていることが原因であるかもしれない。そこでこれを別のより安定な方法（ピボット交換付きの Cholesky 分解や Jacobi 法を用いた SVD など）に差し替えて結果を比較することも考えられるが、それも今後の課題とする。

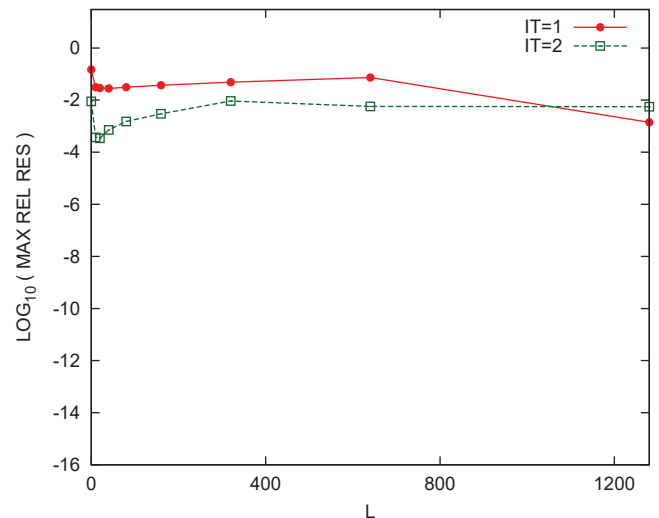


図 16 実験 2a：平滑化回数 ℓ と下端側固有対の最大相対残差，（倍精度計算， $m = 800$ ）

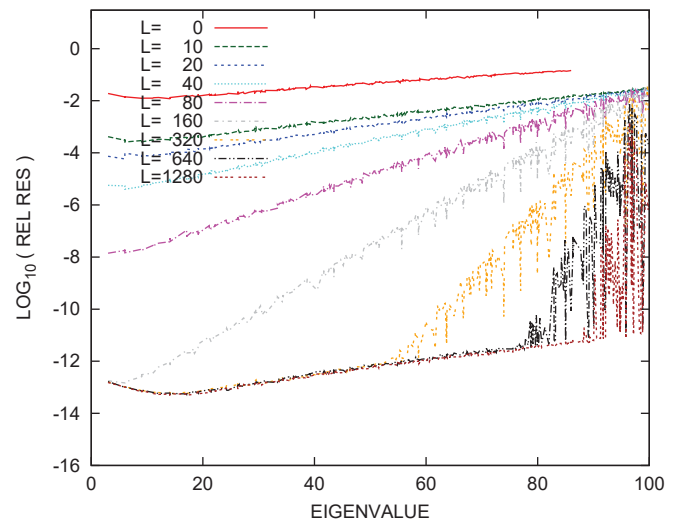


図 17 実験 2a：下端側固有対の固有値と相対残差，フィルタの適用 1 回（倍精度計算， $m = 800$ ）

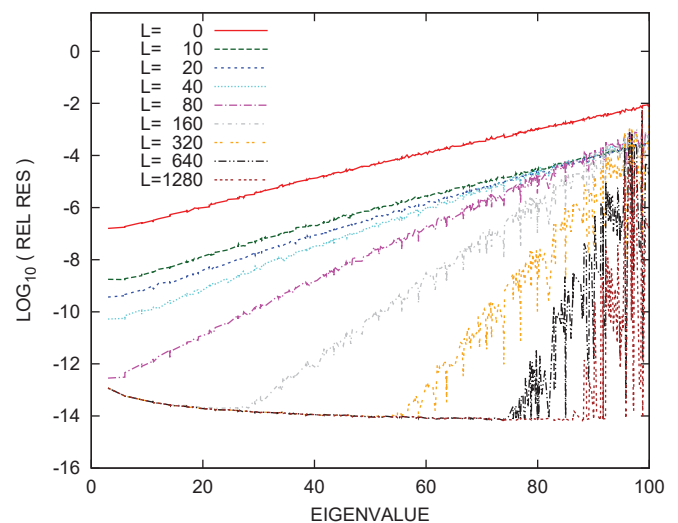


図 18 実験 2a：下端側固有対の固有値と相対残差，フィルタの適用 2 回（倍精度計算， $m = 800$ ）

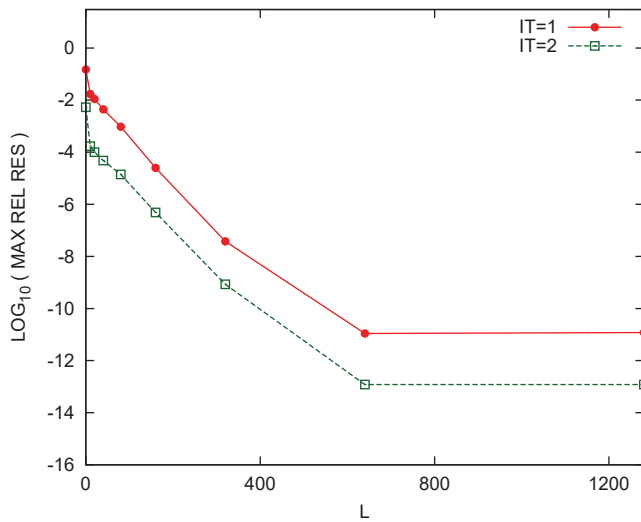


図 19 実験 2b: 平滑化回数 ℓ と下端側固有対の最大相対残差, (倍精度計算, $m = 1, 200$)

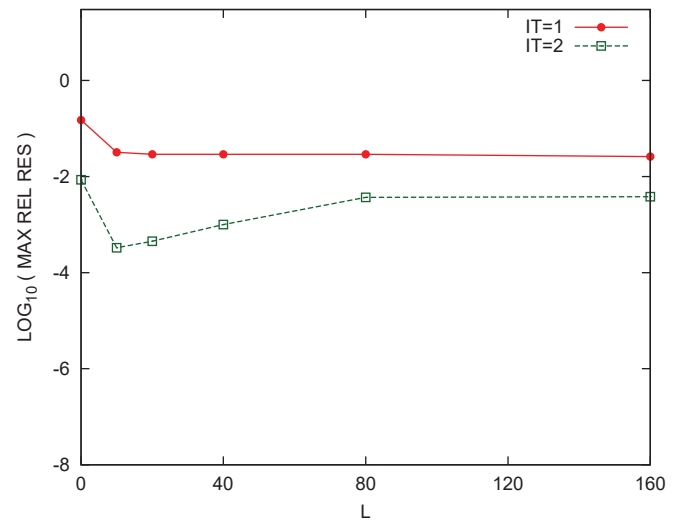


図 22 実験 2c: 平滑化回数 ℓ と下端側固有対の最大相対残差, (単精度計算, $m = 800$)

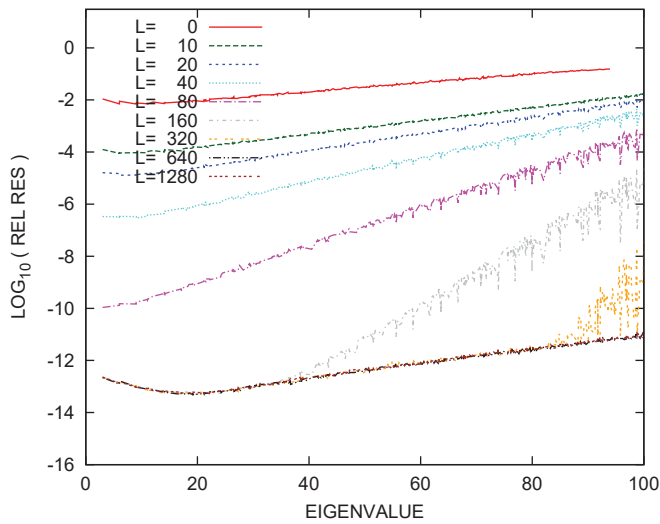


図 20 実験 2b: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 1 回 (倍精度計算, $m = 1, 200$)

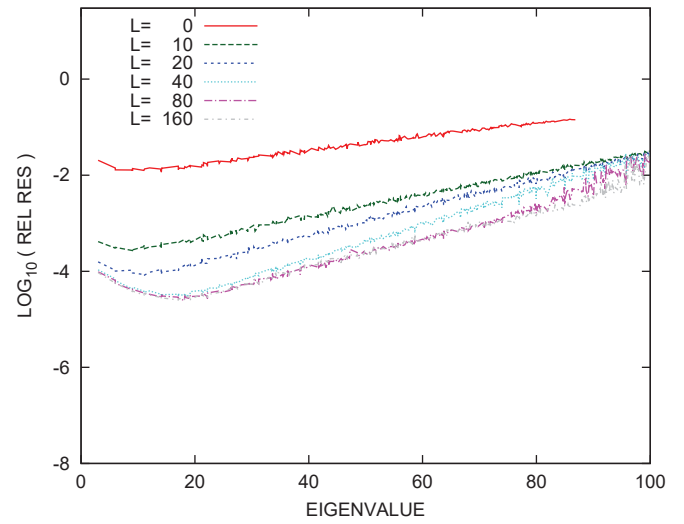


図 23 実験 2c: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 1 回 (単精度計算, $m = 800$)

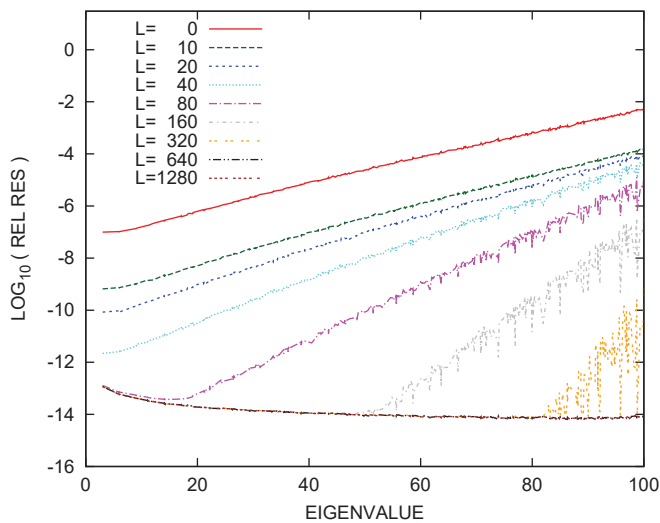


図 21 実験 2b: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 2 回 (倍精度計算, $m = 1, 200$)

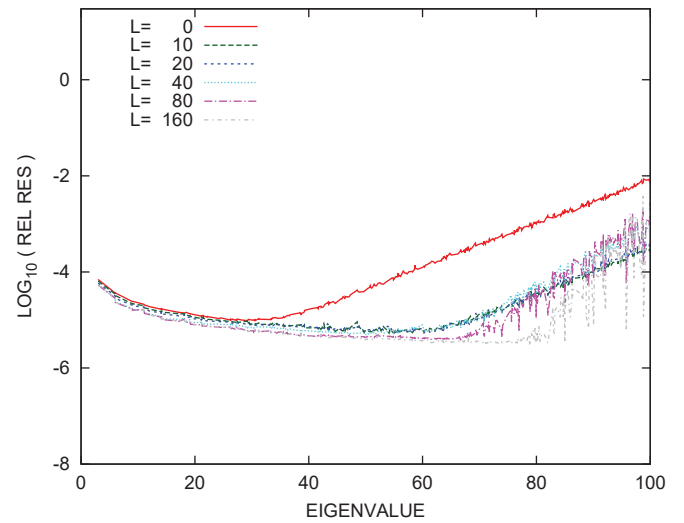


図 24 実験 2c: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 2 回 (単精度計算, $m = 800$)

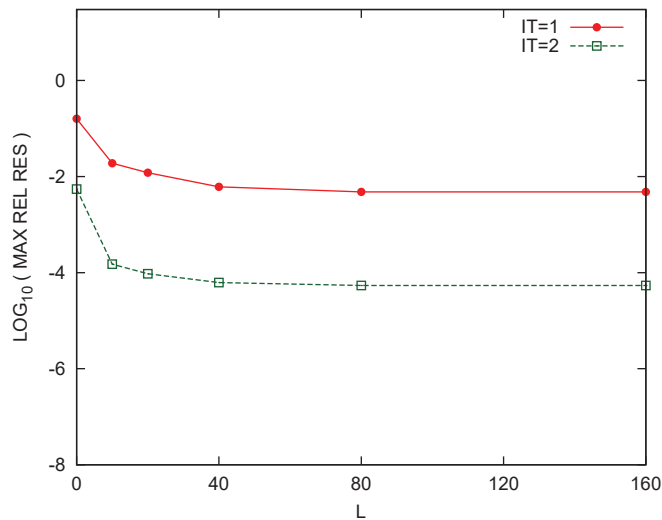


図 25 実験 2d：平滑化回数 ℓ と下端側固有対の最大相対残差，(単精度計算， $m = 1, 200$)

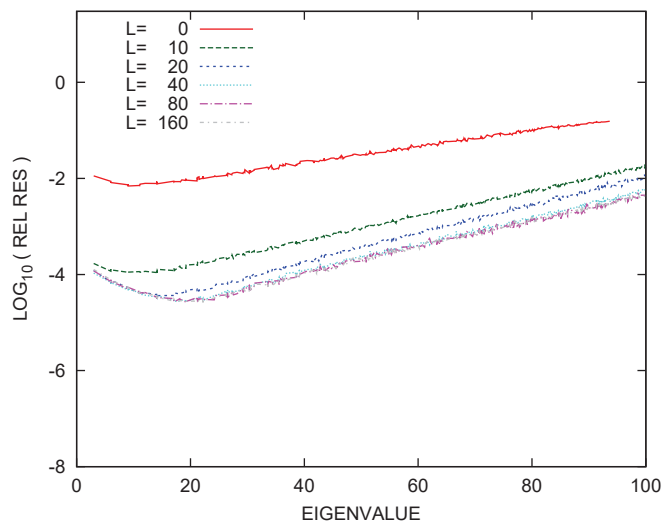


図 26 実験 2d：下端側固有対の固有値と相対残差，フィルタの適用 1 回 (単精度計算， $m = 1, 200$)

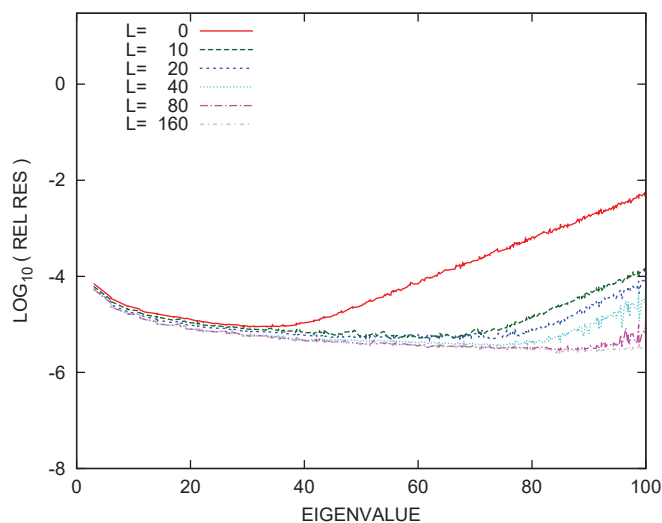


図 27 実験 2d：下端側固有対の固有値と相対残差，フィルタの適用 2 回 (単精度計算， $m = 1, 200$)

6. おわりに

領域が 3 次元立方体でその表面で零固定境界条件を課したラプラス固有値問題を考えて、その有限要素法離散化で導かれる一般固有値問題の固有対で固有値が指定区間にあるものをフィルタを用いて近似する問題を扱った。フィルタの構成を単一のレゾルベントの Chebyshev 多項式にすることで、大規模問題に対する必要な記憶量を抑える。しかしそのような簡易構成のフィルタは伝達特性をあまり良くできないので、直交化と組み合わせで反復する。

今回は、フィルタに与えるベクトルの組の生成法について検討した。ランダムに生成されたベクトルの組に対してレゾルベントを繰り返し適用することで「必要な固有ベクトル」を含む割合を高めるという方法はうまく機能した。そのような処理を施せばそうでない場合よりも近似固有対の精度が向上することを確認した。しかしこの方法は、レゾルベントを繰り返し適用するので、その回数 k が後に続くフィルタの次数 n に比べて少ない場合にだけ意味がある。たとえばフィルタの次数が 4 程度と小さい場合には、フィルタを適用するベクトルの組を生成するためにレゾルベントを 4 回適用するよりも 4 次のフィルタの適用を 1 回多くした方が得になると思われる。

今回扱った有限要素法による離散化で生じる問題では、係数行列の疎性を十分に生かして Jacobi 反復による解の平滑化が容易に行える。この平滑化はベクトルの組へ適用すると、固有値の絶対値が小さい固有ベクトルを含む割合が増すので、一種の低域通過フィルタになる。そこでフィルタに与える初期ベクトルの組の構成法として、ランダムな成分のベクトルの組に対して平滑化を繰り返す。それにより固有値が下端側の固有ベクトルを含む割合を増やすと、フィルタの適用で得られる近似固有対の精度が良くなることを確認した。しかしこのような簡単な処理による初期ベクトルの調整が、はたして要素分割が不規則な場合の有限要素法から生じる問題や一般的な疎行列の固有値問題についても有効かどうかについては、今後さらなる検討が必要である。

なお、中間の固有値を持つ固有対を求める場合については、今回の実験 2 と同様にうまく係数行列の疎性を十分利用してフィルタに与えるベクトルの組を改良する方法についてはまだ示せていない。それは今後の課題とする。

参考文献

- [1] 村上 弘：フィルタの反復適用による実対称定値一般固有値問題の近似対の改良，**情報処理学会論文誌：コンピューティングシステム (ACS)**, Vol.12, No.3 (ACS65), pp.14-33 (2019).
- [2] Hiroshi Murakami: "Single-Precision Calculation of Iterative Refinement of Eigenpairs of a Real Symmetric-Definite Generalized Eigenproblem by Using a Filter Composed of a Single Resolvent", **Proceeding of HPC Asia 2021 Companion**, pp.11-20 (2021).

付 録

A.1 実験3：平滑化操作の反復適用による構成 (その2) 実験2よりも大きい問題

この実験3のフィルタに与える初期ベクトルの組を作成する方法は、実験2の場合と同じである。実験2との違いは、実験3ではラプラス固有値問題の有限要素法による離散化で、立方体の要素分割の方式を $(N_1, N_2, N_3) = (50, 60, 70)$ と実験2の場合よりも細かくして問題の規模を大きくしたことである。それにより行列の次数は $N = 210,000$ で、下帯幅は $w_L = 3,051$ になる。そうして固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 402 個を求める。実験2と同様に、中間固有値の固有対を求める問題は扱っていない。(なお、固有値がフィルタの通過域と遷移域の合併区間 $[0, 150]$ にある固有対の数は 764 である)。

フィルタの構成はシフトが実数のレゾルベントの Chebyshev 多項式であり、そのパラメタの3つ組は実験2のものと同じく $(\mu = 1.5, g_s = 1E-5, n = 4)$ と設定した。そのとき $g_p = 5.3E-4, g_s/g_p = 1.9E-2$ である。このパラメタの設定は本来は単精度での計算用を想定したものである。

実験3a：下端側固有対を求めた例 (倍精度計算, $m = 800$)

固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 402 個を求める実験で、計算を倍精度で計算を行い、初期ベクトルの数は $m = 800$ とした場合を示す。図 A.1 の2つの折れ線グラフ (IT=1, IT=2) はそれぞれフィルタを1回あるいは2回適用した場合である。これは乱数ベクトルの組に平滑化の処理を ℓ 回適用して初期ベクトルの組を作り、それをフィルタに与えて得られた近似固有対のうちで、固有値が指定した区間 $[0, 100]$ にあるものについて最大の相対残差をプロットしたものである。そうして、図 A.2 と図 A.3 はフィルタの適用回数がそれぞれ1回と2回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、平滑化の回数 ℓ を 0, 10, 20, 40, 80, 160, 320, 640, 1280 としたそれぞれの場合について線を変えて描いたものである。

実験3b：下端側固有対を求めた例 (倍精度計算, $m = 1,000$)

同様に、固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 402 個を求める実験で、計算を倍精度で計算を行い、初期ベクトルの数は $m = 1,000$ とした場合を示す。図 A.4 の2つの折れ線グラフ (IT=1, IT=2) はそれぞれフィルタを1回あるいは2回適用した場合である。乱数ベクトルを元にして、平滑化を ℓ 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうちで、固有値が指定区間にあるものについての最大の相対残差をプロットした。そうして、

図 A.5 と図 A.6 はフィルタの適用回数がそれぞれ1回と2回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、平滑化の回数 ℓ を 0, 10, 20, 40, 80, 160, 320, 640, 1280 としたそれぞれの場合について線を変えて描いたものである。

実験3c：下端側固有対を求めた例 (倍精度計算, $m = 1,200$)

同様に、固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 402 個を求める実験で、計算を倍精度で計算を行い、初期ベクトルの数は $m = 1,200$ とした場合を示す。図 A.7 の2つの折れ線グラフ (IT=1, IT=2) はそれぞれフィルタを1回あるいは2回適用した場合である。乱数ベクトルを元にして、平滑化を ℓ 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうちで、固有値が指定区間にあるものについての最大の相対残差をプロットした。そうして、図 A.8 と図 A.9 はフィルタの適用回数がそれぞれ1回と2回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、平滑化の回数 ℓ を 0, 10, 20, 40, 80, 160, 320, 640, 1280 としたそれぞれの場合について線を変えて描いたものである。

実験3d：下端側固有対を求めた例 (単精度計算, $m = 800$)

固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 402 個を求める実験で、計算を単精度で計算を行い、初期ベクトルの数は $m = 800$ とした場合を示す。図 A.10 の2つの折れ線グラフ (IT=1, IT=2) はそれぞれフィルタを1回あるいは2回適用した場合である。乱数ベクトルを元にして、平滑化を ℓ 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうちで、固有値が指定区間にあるものについての最大の相対残差をプロットした。そうして、図 A.11 と図 A.12 はフィルタの適用回数がそれぞれ1回と2回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、平滑化の回数 ℓ を 0, 10, 20, 40, 80, 160, 320, 640, 1280 としたそれぞれの場合について線を変えて描いたものである。

実験3e：下端側固有対を求めた例 (単精度計算, $m = 1,000$)

同様に、固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 402 個を求める実験で、計算を単精度で計算を行い、初期ベクトルの数は $m = 1,000$ とした場合を示す。図 A.13 の2つの折れ線グラフ (IT=1, IT=2) はそれぞれフィルタを1回あるいは2回適用した場合である。乱数ベクトルを元にして、平滑化を ℓ 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうちで、固有値が指定区間にあ

るものについての最大の相対残差をプロットした。そうして、図 A・14 と図 A・15 はフィルタの適用回数がそれぞれ 1 回と 2 回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、平滑化の回数 ℓ を 0, 10, 20, 40, 80, 160, 320, 640, 1280 としたそれぞれの場合について線を変えて描いたものである。

実験 3f: 下端側固有対を求めた例 (単精度計算, $m = 1, 200$)

同様に、固有値が下端の区間 $[0, 100]$ にある固有対 402 個を求める実験で、計算を単精度で計算を行い、初期ベクトルの数は $m = 1, 200$ とした場合を示す。図 A・16 の 2 つの折れ線グラフ (IT=1, IT=2) はそれぞれフィルタを 1 回あるいは 2 回適用した場合である。乱数ベクトルを元にして、平滑化を ℓ 回適用して作成した初期ベクトルを用いて得られた近似固有対のうちで、固有値が指定区間にあるものについての最大の相対残差をプロットした。そうして、図 A・17 と図 A・18 はフィルタの適用回数がそれぞれ 1 回と 2 回の場合について、各近似固有対について固有値を横軸に、相対残差の対数を縦軸にとってプロットした折れ線グラフを、平滑化の回数 ℓ を 0, 10, 20, 40, 80, 160, 320, 640, 1280 としたそれぞれの場合について線を変えて描いたものである。

実験 3 の考察：平滑化の反復適用による構成 (その 2)

やはり気になる点は、計算が倍精度でも単精度でも、 $m = 800$ の場合には平滑化の回数 ℓ を多くしても相対残差が減らない傾向を示したことである。そのことは、図 A・1 や図 A・10 で IT=2 の場合の最大相対残差のグラフが最初は減少した後に増加に転じていることにも反映されている。初期ベクトルの数を増やして $m = 1, 000$ にした場合の図 A・4 や図 A・13 IT=2 の場合の最大相対残差のグラフは平滑化の回数 $\ell = 40$, $\ell = 80$ のあたりでわずかに増加あるいは停滞する様子を見せているが、そこから先では減少している。しかし初期ベクトルの数をさらに増やして $m = 1, 200$ にした場合の図 A・7 や図 A・16 の IT=2 の場合の最大相対残差のグラフは平滑化の回数 ℓ を増すにつれて相対残差は単調に減少している。

やはり実験 2 の場合と同様に、平滑化の回数 ℓ を非常に多くした場合の挙動には少しおかしなところがあり、その原因の究明は今後の課題である。

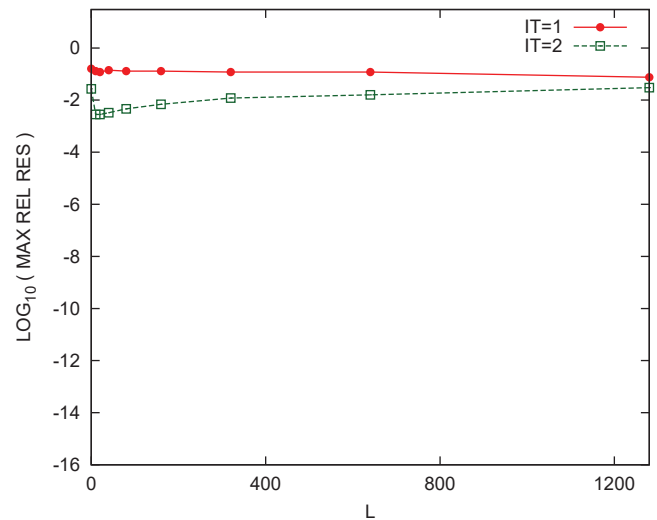


図 A・1 実験 3a: 平滑化回数 ℓ と下端側固有対の最大相対残差, (倍精度計算, $m = 800$ 個)

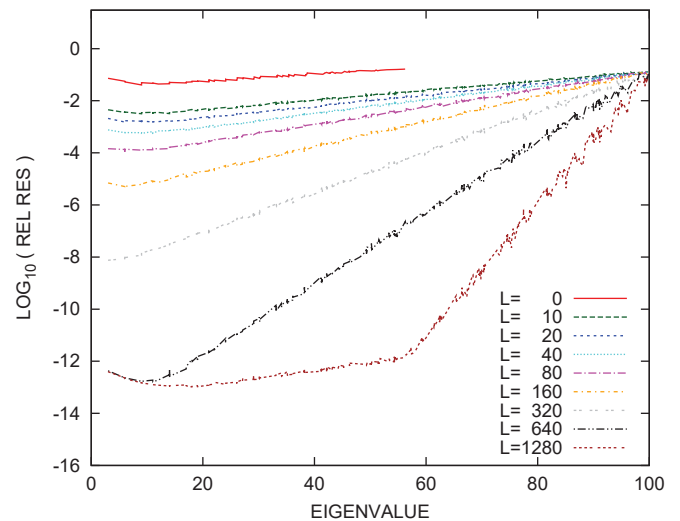


図 A・2 実験 3a: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 1 回 (倍精度計算, $m = 800$)

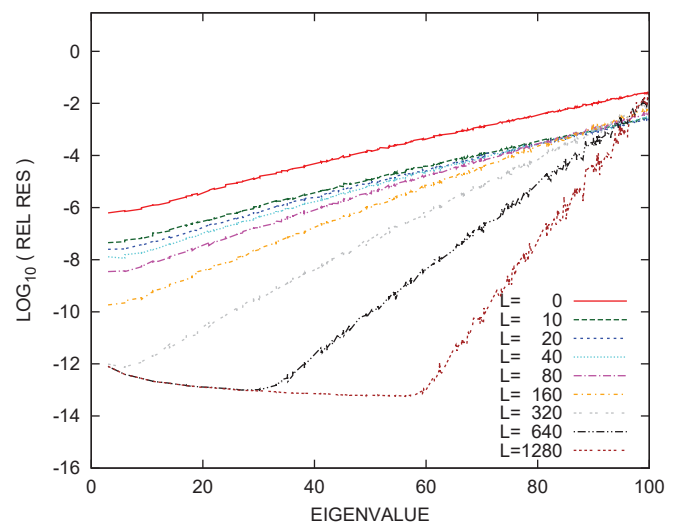


図 A・3 実験 3a: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 2 回 (倍精度計算, $m = 800$)

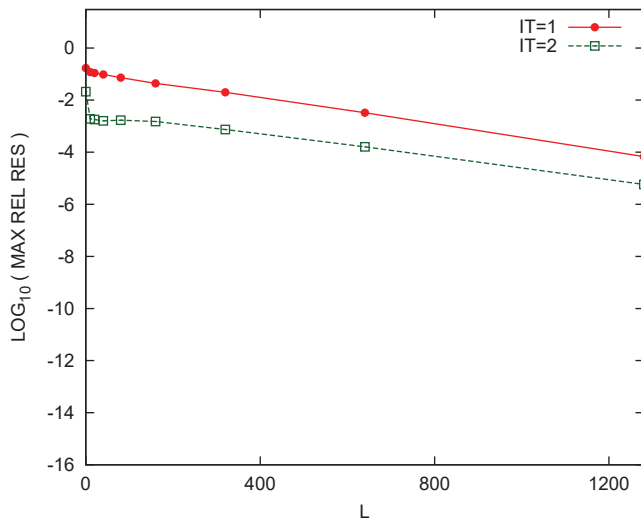


図 A-4 実験 3b: 平滑化回数 ℓ と下端側固有対の最大相対残差, (倍精度計算, $m = 1,000$ 個)

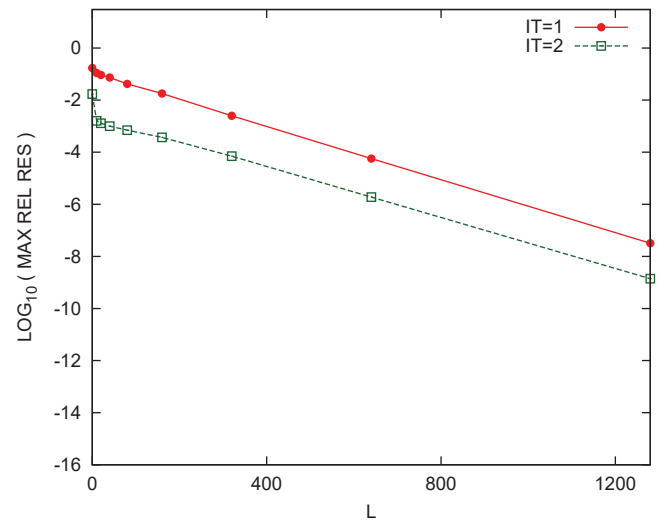


図 A-7 実験 3c: 平滑化回数 ℓ と下端側固有対の最大相対残差, (倍精度計算, $m = 1,200$ 個)

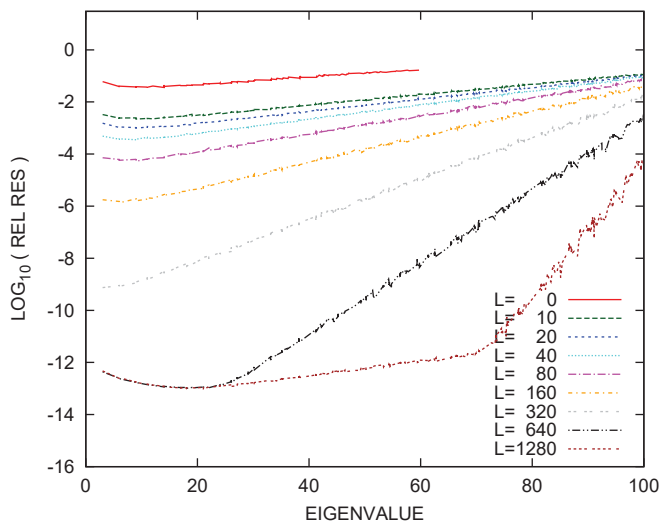


図 A-5 実験 3b: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 1 回 (倍精度計算, $m = 1,000$)

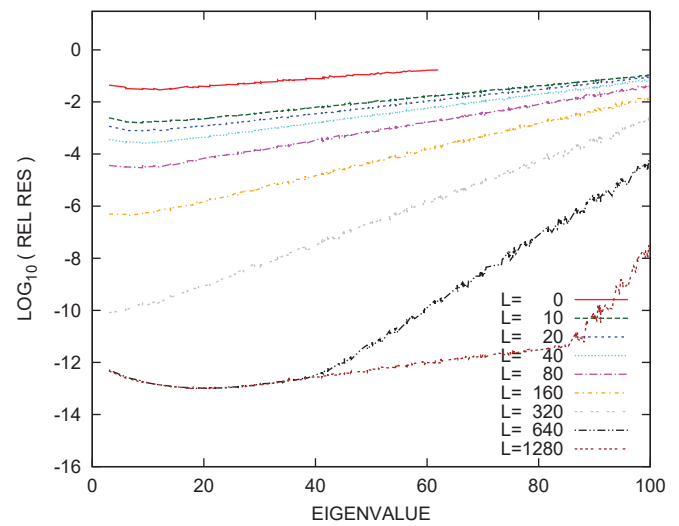


図 A-8 実験 3c: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 1 回 (倍精度計算, $m = 1,200$)

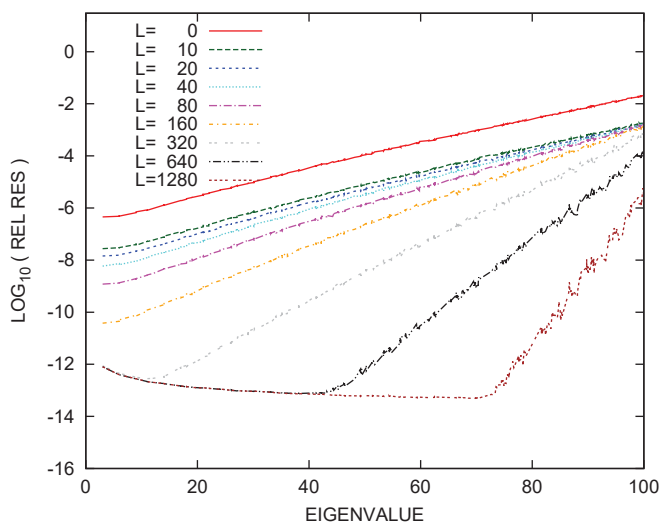


図 A-6 実験 3b: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 2 回 (倍精度計算, $m = 1,000$)

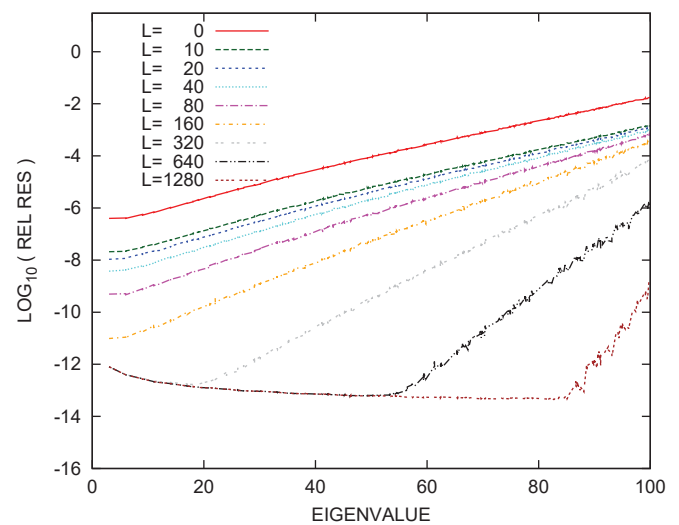


図 A-9 実験 3c: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 2 回 (倍精度計算, $m = 1,200$)

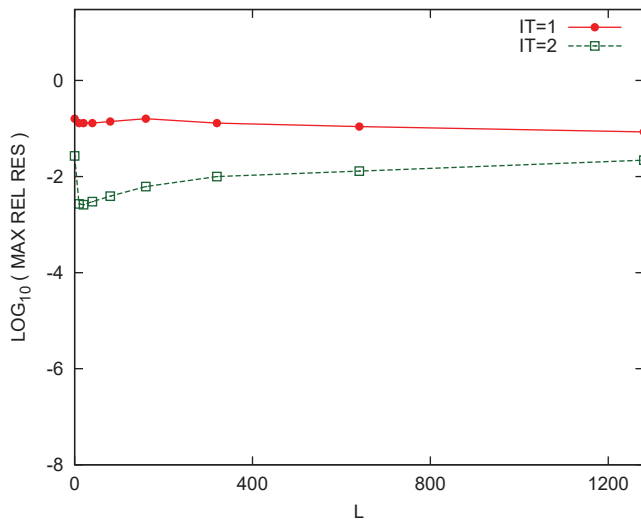


図 A-10 実験 3d: 平滑化回数 ℓ と下端側固有対の最大相対残差, (単精度計算, $m = 800$ 個)

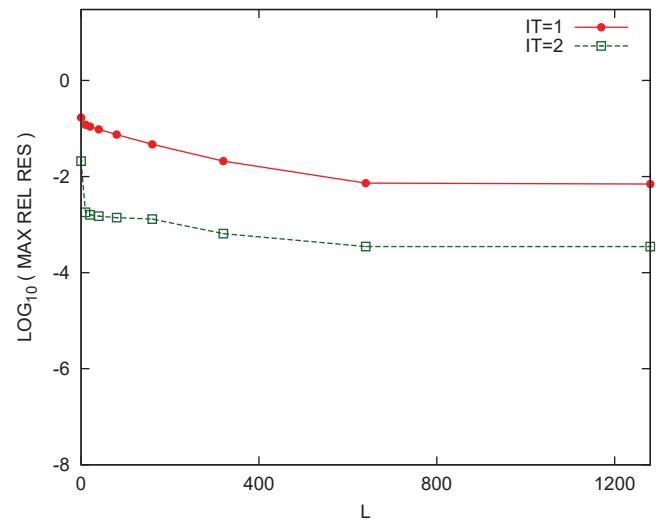


図 A-13 実験 3e: 平滑化回数 ℓ と下端側固有対の最大相対残差, (単精度計算, $m = 1,000$ 個)

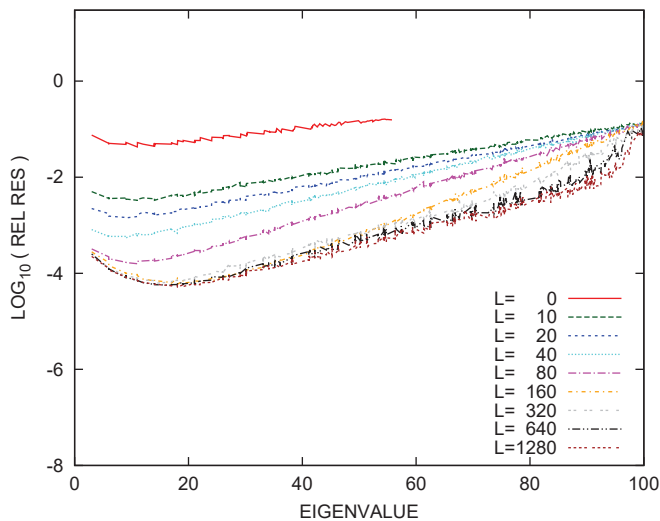


図 A-11 実験 3d: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 1 回 (単精度計算, $m = 800$)

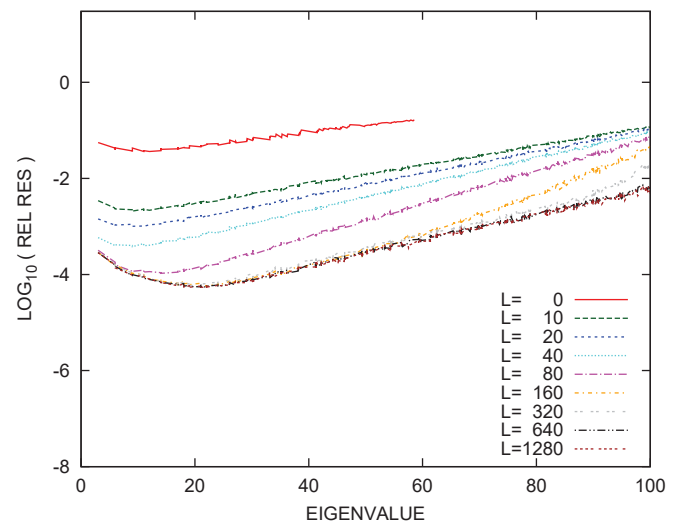


図 A-14 実験 3e: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 1 回 (単精度計算, $m = 1,000$)

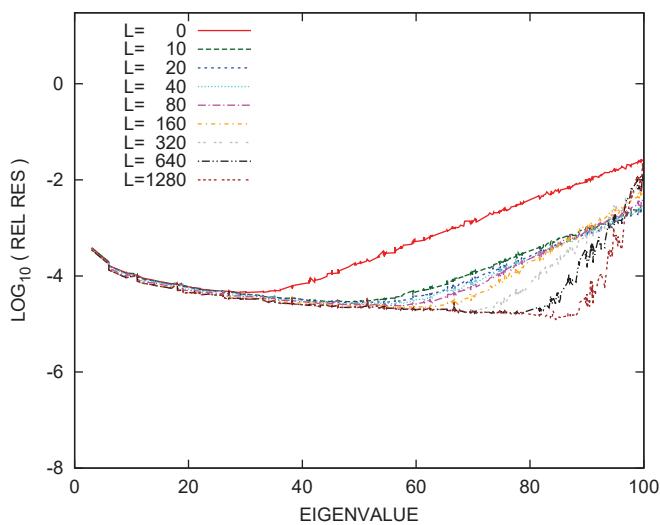


図 A-12 実験 3d: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 2 回 (単精度計算, $m = 800$)

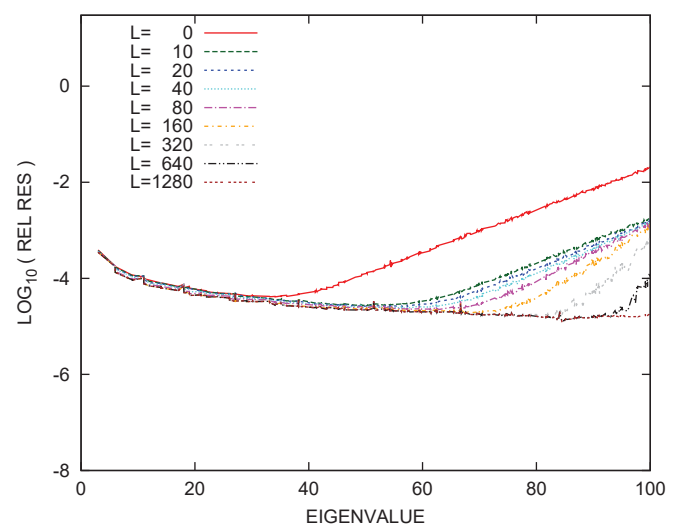


図 A-15 実験 3e: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 2 回 (単精度計算, $m = 1,000$)

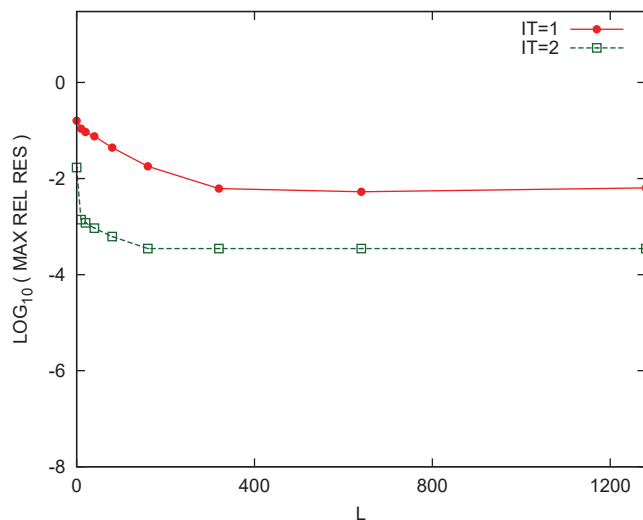


図 A.16 実験 3f: 平滑化回数 ℓ と下端側固有対の最大相対残差, (単精度計算, $m = 1,200$)

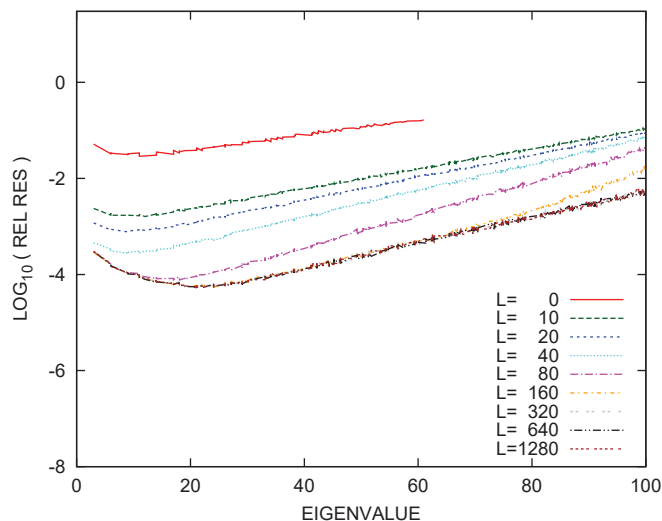


図 A.17 実験 3f: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 1 回 (単精度計算, $m = 1,200$)

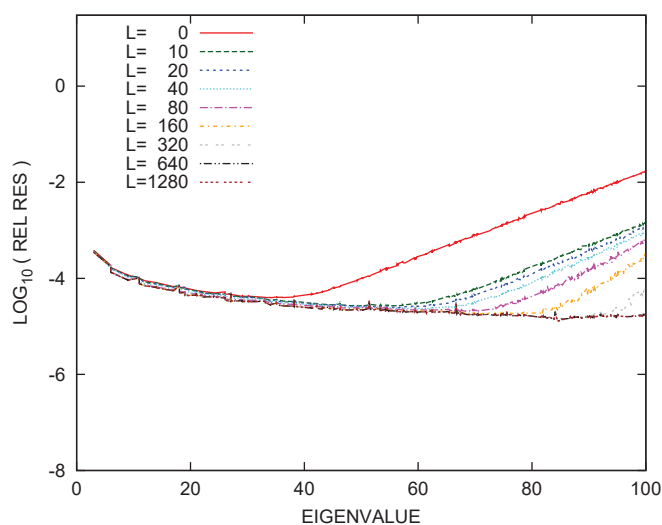


図 A.18 実験 3f: 下端側固有対の固有値と相対残差, フィルタの適用 2 回 (単精度計算, $m = 1,200$)

A.2 得られた近似固有対の数について

実験 1 の各場合

実験 1 では下端側あるいは中間の固有値を持つ固有対をそれぞれに対応した型のフィルタを用いて求めた。フィルタに与える初期ベクトルの組の作成には、 B -正規直交化とレゾルベントの組み合わせを k 回繰り返し適用した。

実験 1a では、固有値が下端側の区間 $[0, 100]$ にある固有対を倍精度計算により初期ベクトルの数を $m = 800$ として求めた。近似固有対のうち固有値が $[0, 100]$ にあるものの数を表 A.1 に示す。正しい固有対の数は 378 である。

実験 1b では、固有値が中間の区間 $[100, 200]$ にある固有対を倍精度計算により初期ベクトルの数を $m = 1,300$ として求めた。近似固有対のうち固有値が $[100, 200]$ にあるものの数を表 A.2 に示す。正しい固有対の数は 684 である。

実験 1c は単精度計算により実験 1a と同じ内容のものを求めたものである。近似固有対のうち固有値が $[0, 100]$ にあるものの数を表 A.3 に示す。

実験 1d は単精度計算により実験 1b と同じ内容のものを求めたものである。近似固有対のうち固有値が $[100, 200]$ にあるものの数を表 A.4 に示す。

実験 2 の各場合

実験 2 では下端側の区間 $[0, 100]$ に固有値を持つ固有対を求めた。正しい固有対の数は 378 である。初期ベクトルを作る際に平滑化を適用した回数が ℓ であり、平滑化 10 回ごとに B -正規直交化を施している。初期ベクトルの組に対してフィルタを適用した回数が IT である。

実験 2a と実験 2b は倍精度計算による結果であり、使用した初期ベクトルの数 m はそれぞれ 800 と 1,200 である。求めた近似固有対のうち固有値が $[0, 100]$ にあるものの数をそれぞれ表 A.5 と表 A.6 に示す。

実験 2c と実験 2d は単精度計算による結果であり、使用した初期ベクトルの数 m はそれぞれ 800 と 1,200 である。求めた近似固有対のうち固有値が $[0, 100]$ にあるものの数をそれぞれ表 A.7 と表 A.8 に示す。

表 A-1 実験 1a: 下端側の近似固有対の数 ($m = 800$, 倍精度計算)

k	IT=1	IT=2
0	275	378
1	374	378
2	377	378
3	378	378
4	378	378
5	378	378
6	378	378
7	378	378
8	378	378

表 A-5 実験 2a: 近似固有対の数 ($m = 800$, 倍精度計算)

ℓ	IT=1	IT=2
0	274	378
10	376	378
20	376	378
40	376	378
80	376	378
160	377	378
320	377	378
640	376	377
1280	376	377

表 A-2 実験 1b: 中間の近似固有対の数 ($m = 1,300$, 倍精度計算)

k	IT=1	IT=2
0	689	684
1	684	684
2	684	684
3	684	684
4	684	684
5	684	684
6	684	684
7	684	684
8	684	684

表 A-6 実験 2b: 近似固有対の数 ($m = 1,200$, 倍精度計算)

ℓ	IT=1	IT=2
0	317	378
10	378	378
20	378	378
40	378	378
80	378	378
160	378	378
320	378	378
640	378	378
1280	378	378

表 A-3 実験 1c: 下端側の近似固有対の数 ($m = 800$, 単精度計算)

k	IT=1	IT=2
0	276	378
1	374	378
2	376	378
3	378	378
4	378	378
5	378	378
6	378	378
7	378	378
8	378	378

表 A-7 実験 2c: 近似固有対の数 ($m = 800$, 単精度計算)

ℓ	IT=1	IT=2
0	276	378
10	377	378
20	376	378
40	375	378
80	377	378
160	376	378
320	377	377
640	376	377
1280	375	377

表 A-4 実験 1d: 中間の近似固有対の数 ($m = 1,300$, 単精度計算)

k	IT=1	IT=2
0	681	684
1	684	684
2	684	684
3	684	684
4	684	684
5	684	684
6	684	684
7	684	684
8	684	684

表 A-8 実験 2d: 近似固有対の数 ($m = 1,200$, 単精度計算)

ℓ	IT=1	IT=2
0	317	378
10	378	378
20	378	378
40	377	378
80	378	378
160	378	378
320	378	378
640	377	378
1280	378	378

実験 3 の各場合

実験 3 では固有値が下端側の区間 $[0, 100]$ にある固有対を求めた。その正しい数は 402 である。初期ベクトルを作る過程で平滑化を適用した回数は ℓ であり、平滑化の適用 10 回ごとに B -正規直交化を施した。用意した初期ベクトルの組に対してフィルタを適用した回数が IT である。

実験 3a, 実験 3b, 実験 3c はどれも倍精度計算による結果であり、使用した初期ベクトルの数 m はそれぞれ 800, 1,000, 1,200 である。求めた近似固有対のうちで固有値が $[0, 100]$ にあるものの数をそれぞれ表 A・9, 表 A・10, 表 A・11 に示す。

実験 3d, 実験 3e, 実験 3f はそれぞれ実験 3a, 実験 3b, 実験 3c の内容を単精度計算により行ったものである。求めた近似固有対のうちで固有値が $[0, 100]$ にあるものの数をそれぞれ表 A・12, 表 A・13, 表 A・14 に示す。

表 A・9 実験 3a: 近似固有対の数 ($m = 800$, 倍精度計算)

ℓ	IT=1	IT=2
0	141	402
10	390	402
20	396	402
40	398	402
80	398	402
160	397	402
320	398	402
640	398	402
1280	399	402

表 A・12 実験 3d: 近似固有対の数 ($m = 800$, 単精度計算)

ℓ	IT=1	IT=2
0	139	402
10	391	402
20	398	402
40	400	402
80	399	402
160	398	402
320	399	402
640	398	402
1280	399	402

表 A・10 実験 3b: 近似固有対の数 ($m = 1,000$, 倍精度計算)

ℓ	IT=1	IT=2
0	156	402
10	395	402
20	400	402
40	400	402
80	401	402
160	402	402
320	402	402
640	402	402
1280	402	402

表 A・13 実験 3e: 近似固有対の数 ($m = 1,000$, 単精度計算)

ℓ	IT=1	IT=2
0	156	402
10	397	402
20	401	402
40	401	402
80	402	402
160	403	402
320	403	402
640	403	402
1280	403	402

表 A・11 実験 3c: 近似固有対の数 ($m = 1,200$, 倍精度計算)

ℓ	IT=1	IT=2
0	169	402
10	399	402
20	400	402
40	401	402
80	402	402
160	402	402
320	402	402
640	402	402
1280	402	402

表 A・14 実験 3f: 近似固有対の数 ($m = 1,200$, 単精度計算)

ℓ	IT=1	IT=2
0	170	402
10	400	402
20	401	402
40	401	402
80	404	402
160	404	402
320	403	402
640	404	402
1280	403	402