

行列固有値問題のフィルタを用いた近似固有対の精度改善法

Accuracy Improvement of Approximate Eigenpairs of Matrix Eigenproblems by Using Filters

村上弘¹⁾
Hiroshi Murakami

¹⁾東京都立大学（〒192-0397 東京都八王子市南大沢 1-1 理学部 8 号館 6 階数理科学事務室気付, E-mail: mrkmhrsh@tmu.ac.jp)

By using a filter, we approximate a part of eigenpairs of a matrix eigenproblem. The filter is applied to a set of randomly generated vectors to make another set of vectors which contains required eigenvectors rich, and from the span of the set of vectors the required approximate eigenpairs are extracted well. However, if the characteristics of the filter are not good, or if the amount of the required eigenvectors contained in the set of initial random vectors is very little, then the accuracy of the approximate eigenpairs obtained will be poor. Therefore, we study some method to improve the accuracy of the approximate eigenpairs to be solved.

Key Words : Eigenproblem, Eigenpairs, Filter, Improvement, Preconditioning

1. はじめに

実対称定値の一般固有値問題に対して、固有値が指定された狭い区間に入る固有対の近似をフィルタを用いて求める。ランダムに生成されたベクトルの組に対してフィルタを適用して、必要な固有ベクトルを豊富に含むベクトルの組を作り、そのベクトルの組の張る空間から必要な固有対の近似をうまく取り出す。フィルタの特性が良くなかったり、あるいは最初のランダムなベクトルの組に含まれている必要な固有ベクトルの量が少ないとそれだけ近似固有対の精度は悪くなる。そこで本論文ではフィルタを利用した前処理により必要な固有対の近似精度を改善する方法について検討する。

2. 準備

実対称定値（行列 A と B が実対称で B が正定値）の一般固有値問題 $\mathbf{Av} = \lambda B\mathbf{v}$ の固有対でその固有値が指定された区間 $[a, b]$ にあるものの数が数百程度以下の場合に、フィルタを利用してそれらの近似を一斉に求める。そのために通常は以下のような方法で計算を行う。

1. 固有値が $[a, b]$ にある必要な固有ベクトルは良く伝達するが不要なものは強く減衰させる性質を持つように構成された線形作用素をフィルタ \mathcal{F} とする。
2. 十分多くのランダムなベクトルを生成してベクトルの組 Y とする。
3. ベクトルの組 Y に B -正規直交化を施してベクトルの組 X を作る ($X^T BX = I$ となる)。
4. ベクトルの組 X にフィルタを適用して $Y \equiv \mathcal{F}X$ を作る。フィルタの持つ性質から、 Y は不要な固有ベクトルをほとんど含まないベクトルの組になる。
5. Y の線形結合をうまく構成して、固有値が区間 $[a, b]$ にある固有ベクトル全体で張られた不変部分空間を良く近似する空間の基底 \mathcal{V} を作る。
6. 基底 \mathcal{V} に Rayleigh-Ritz 法を適用することにより必要な固有対の近似を一斉に得る。

必要な固有ベクトルに対するフィルタの伝達率の大きさが不均一であるほど、必要な固有対の近似の精度が

不均一となる傾向が生じるが、ベクトルの組 Y に対して「 B -正規直交化に続いてフィルタを適用する」という上記のステップ 3 と 4 の操作を繰り返すことで必要な固有対全体の近似の精度や近似の不均一さも改善できる（このことは既知である）。たとえば B -正規直交化を間にはさんで同じフィルタを 2 回適用する場合には、ランダムに生成したベクトルの組を B -正規直交化したベクトルの組と比べて 1 回目のフィルタを適用して得られたベクトルの組の含む不要な固有ベクトルの量は減少するが、それを再び B -正規直交化して 2 回目のフィルタを適用すると得られたベクトルの組の含む不要な固有ベクトルの量はさらに減少するので、それが張る部分空間は不变部分空間のより良い近似となる。

フィルタを計 2 回適用する場合に、最初に適用するものを前処理用のフィルタとして、2 回目に適用するものを本来のフィルタとすると、前処理を行わない場合と行う場合とでは操作はそれぞれ以下のようになる。

前処理を行わない場合： 乱数ベクトルの組 Y から B -正規直交化により m 個のベクトルの組 X を作る。その X に（本来の）フィルタを適用して Y を作る。

前処理を行う場合： 乱数ベクトルの組 Y から B -正規直交化により m 個のベクトルの組 X を作る。その X に前処理用のフィルタを適用して Y を作る。さらにそのベクトルの組 Y から（閾値切断付き） B -正規直交化により m' 個のベクトルの組 X を作る。その X に本来のフィルタを適用して Y を作る。しかも前処理用と本来の 2 つのフィルタは違うものでも構わない。

今回用いるフィルタの構成はレゾルベントの線形結合 \mathcal{L} に Chebyshev 多項式を合成したものである。Chebyshev の 3 項漸化式に基づいて多項式の次数が n 次であるフィルタを適用する計算は、ベクトルの組に対する \mathcal{L} の作用を n 回順次に繰り返して適用することになる。

今回のフィルタの構成方式自体は前処理用も本来のものと同じである。レゾルベントの線形結合 \mathcal{L} は共通であるが、Chebyshev 多項式の次数を本来のフィルタでは n とするが前処理用のものでは ν とする。そうして

通常は $\nu < n$ とする。すると近似固有対に対して要求される精度を達成できる次数 ν をうまく選べるのであれば、次数 n のフィルタを単純に 2 回用いるよりは必要な計算の手間を減らせるという利点が生じる。

3. フィルタの構成

シフトが ρ のレゾルベントの定義を $\mathcal{R}(\rho) \equiv (A - \rho B)^{-1} B$ とする。シフトが相異なる K 個のレゾルベント $\mathcal{R}(\rho_j)$ の線形結合を \mathcal{L} として、フィルタ \mathcal{F} は \mathcal{L} の n 次 Chebyshev 多項式の定数 g_s 倍であるとする（式(1))。

$$\begin{cases} \mathcal{F} = g_s T_n(\mathcal{L}), \\ \mathcal{L} = c_\infty I + \sum_{j=1}^K \gamma_j \mathcal{R}(\rho_j). \end{cases} \quad (1)$$

レゾルベントの線形結合 \mathcal{L} が実作用素となるように、定数 c_∞ は実数とし、虚数のシフトは複素共役対を為して現れ、シフトが複素共役であるレゾルベントについての結合係数は複素共役であり、シフトが実数のレゾルベントの結合係数は実数とする。

いま扱っている一般固有値問題の任意の固有対 (λ, \mathbf{v}) に対しては $\mathcal{F}\mathbf{v} = f(\lambda)\mathbf{v}$ が成立する。ここで $f(\lambda)$ はフィルタ \mathcal{F} の伝達関数と呼ばれる実関数で、フィルタ \mathcal{F} の式(1)に対応して実有理関数 $y(\lambda)$ の n 次 Chebyshev 多項式の定数 g_s 倍である（式(2))。逆に式(2)の形の伝達関数に対応して式(1)の構成を持つフィルタが決まる。

$$\begin{cases} f(\lambda) \equiv g_s T_n(y(\lambda)), \\ y(\lambda) \equiv c_\infty + \sum_{j=1}^K \gamma_j / (\lambda - \rho_j). \end{cases} \quad (2)$$

下端の固有対を求める場合には、区間 $[a, b]$ の幅を $\mu (> 1)$ 倍に拡げた区間を $[a, b']$ として、伝達関数 $f(\lambda)$ が以下の条件(3)を満たすように結合係数 γ_j とシフト ρ_j , $j=1, 2, \dots, K$, 実数 c_∞ , および Chebyshev 多項式の次数 n をうまく選ぶ。ここで μ , g_s , g_p は、伝達関数 $f(\lambda)$ のグラフの形状を代表する 3 つの形状パラメタで、 $0 < g_s \ll g_p < 1$ を満たす。

$$\begin{cases} \text{通過域 } \lambda \in [a, b] \text{ で } g_p \leq f(\lambda) \leq 1, \\ \text{遷移域 } \lambda \in (b, b') \text{ で } g_s < f(\lambda) < g_p, \\ \text{阻止域 } \lambda \in [b', \infty) \text{ で } |f(\lambda)| \leq g_s. \end{cases} \quad (3)$$

求めたい固有値の区間 $\lambda \in [a, b]$ と単位区間 $t \in [0, 1]$ を同じ向きに対応させる λ から t への線形変換を用いて固有値の座標 λ に対応する正規化座標 t を定義する。そうして正規化座標 t を引数とする伝達関数を $g(t) \equiv f(t)$ により定義する（そのグラフの例を図 1 に示す）。

(1) フィルタのベクトルの組への作用

フィルタ \mathcal{F} をベクトルの組 X に適用する計算 $\mathcal{F}X = g_s T_n(\mathcal{L})X$ では、まず $X^{(j)} \equiv T_j(\mathcal{L})X$ とおいて 3 項漸化式(4)を用いて順番に $X^{(j)}$, $j=1, \dots, n$ を計算すれば、 $\mathcal{F}X$ は $g_s X^{(n)}$ に等しい。

$$\begin{cases} X^{(0)} = X, \quad X^{(1)} = \mathcal{L}X, \\ X^{(\ell)} = 2\mathcal{L}X^{(\ell-1)} - X^{(\ell-2)}, \quad (\ell \geq 2). \end{cases} \quad (4)$$

4. 多項式の次数だけを変えたフィルタによる前処理

(1) 同じフィルタを 2 回繰り返す計算の場合

レゾルベントの線形結合 \mathcal{L} の n 次 Chebyshev 多項式のフィルタは式(1)で与えられる。B-正規直交化を間に

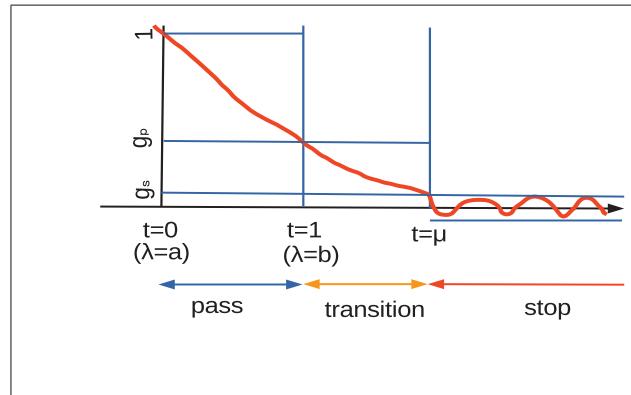


図-1 伝達関数 $g(t) \equiv f(\lambda)$ の概形

はさんで同じフィルタ \mathcal{F} を 2 回適用する計算は式(5)になる。

$$\begin{cases} X \leftarrow \text{ランダムな } B-\text{正規直交ベクトル } m \text{ 個の組}; \\ Y \leftarrow g_s T_n(\mathcal{L})X; \quad * 1 \text{ 回目の } n \text{ 次のフィルタ} \\ X \leftarrow Y \text{ の (閾値切断付きの) } B-\text{正規直交化}; \\ Y \leftarrow g_s T_n(\mathcal{L})X. \quad * 2 \text{ 回目の } n \text{ 次のフィルタ} \end{cases} \quad (5)$$

すると作用素 \mathcal{L} の適用回数が 2 倍に増えて $2n$ になる。しかし我々は作用素 \mathcal{L} の適用回数を 2 倍にまで増やさずにある程度の近似の向上を得たいとする。

(2) 次数を変えたフィルタによる前処理

両方のフィルタでレゾルベントの組 \mathcal{L} は共通にするが、Chebyshev 多項式の次数を ν ($\nu < n$) に変えた前処理用のフィルタをランダムな B -正規直交ベクトルの組に先に適用して、その結果に B -正規直交化を施してから多項式の次数が n である本来のフィルタを適用すると、レゾルベントの線形結合 \mathcal{L} の適用回数は合計で $\nu + n$ になる。

$$\begin{cases} X \leftarrow \text{ランダムな } B-\text{正規直交ベクトル } m \text{ 個の組}; \\ Y \leftarrow \tilde{g}_s T_\nu(\mathcal{L})X; \quad * \text{ 前処理の } \nu \text{ 次のフィルタ} \\ X \leftarrow Y \text{ の (閾値切断付きの) } B-\text{正規直交化}; \\ Y \leftarrow g_s T_n(\mathcal{L})X. \quad * \text{ 本来の } n \text{ 次のフィルタ} \end{cases} \quad (6)$$

ここで \tilde{g}_s は ν 次のフィルタの最大伝達率を 1 に規格化するための定数で、式(7)で計算できる。

$$\tilde{g}_s \equiv 1 / \cosh \left(\frac{\nu}{n} \cosh^{-1} \frac{1}{g_s} \right). \quad (7)$$

5. 数値実験

(1) 例題の設定と固有対の近似精度の評価法

例題にする行列の対称定値一般固有値問題 $A\mathbf{v} = \lambda B\mathbf{v}$ は、1 辺の長さ π の立方体に零境界条件を課した 3 次元ラプラス作用素 $-\Delta$ の固有値問題を有限要素法で離散化して導かれるものである。有限要素法の要素は立方体の各辺方向を N_1+1 , N_2+1 , N_3+1 に等分した辺を持つ直方体とし、要素内の基底関数には 3 重線形関数を用いた。以下の例題では $(N_1, N_2, N_3) = (40, 50, 60)$ としたので、係数の行列 A と B は共に次数 N は 120,000 で半帶幅 w_h は 2,041 である。計算で使用したすべての

数値と演算は倍精度（IEEE 754, binary64）である。求めた近似固有対 (λ, \mathbf{v}) の精度の評価には相対残差の大きさである $\Theta \equiv \|A\mathbf{v} - \lambda B\mathbf{v}\|_2 / \|\lambda B\mathbf{v}\|_2$ の値を用いた。

(2) 実験に用いた計算機環境

使用した計算機は東大情報基盤センター Oakbridge-CX の 1 ノードである。ノードは Dual CPU で CPU は Intel Xeon Platinum 8280(CascadeLake)(2.7GHz)。CPU のコア数は 28 (ノードあたり 56) である。CPU の L3 キャッシュのサイズは 38.5MiB であり、拡張命令セットは AVX-512 である。ノードあたりの理論ピーク性能は 4.84TFLOPS(倍精度)で、主記憶 DDR4 メモリの容量は 192GiB、メモリバンド幅は 281.6GB/s である。プログラムは Fortran90 で記述して、コンパイラは intelifort、バージョン"19.1.3.304 20200925"を使用した。計算は 1 ノード上で、OpenMP 並列化でノード内のコア数に等しい 56 スレッドで実行した。正定値実対称な帶行列の分解と複数右辺の前進後退代入計算には intel MKL ライブラリに含まれる Lapack のルーチンを用いた。

(3) 固有値が分布の下端にある固有対を求めた例

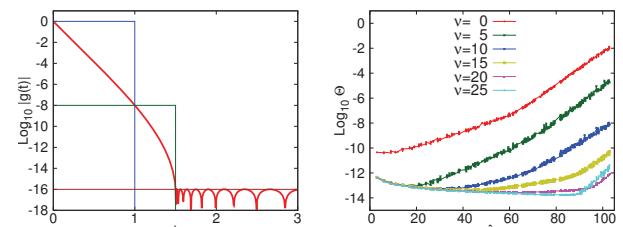
ここでは例題の一般固有値問題の固有対で固有値が固有値分布の下端の区間 $\lambda \in [3, 103]$ に含まれるものを探した。そのような固有対の正しい数は 422 である。なお最初に生成する乱数ベクトルの数 m は 850 とした。

実験に用いた 5 通りのフィルタそれぞれについて、フィルタ名、使用した実シフトのレゾルベントの数 K 、Chebyshev 多項式の次数 n 、フィルタの伝達特性を与える 3 つの形状パラメタ μ , g_p , g_s を表 1 に示す。これらのフィルタの使用するレゾルベントはすべてシフトが実数である（これらのフィルタ F-1R, F-2R, F-3R-a, F-3R-b, F-4R は文献 [1] の中の対応する名称はそれぞれ Ex1-4, Ex2-1, Ex3-I-1, Ex3-I-5, Ex4-I-1 であり、具体的に構成するための数値も詳しく示してある）。

表-1 固有値が下端の固有対を求めるために用いたフィルタ

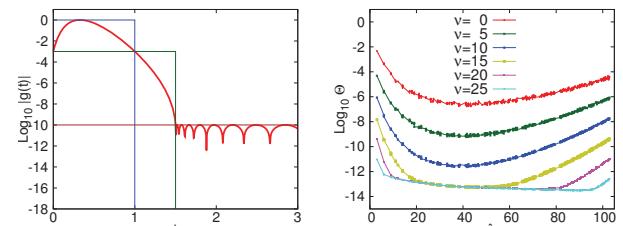
フィルタ名	K	n	μ	g_p	g_s
F-1R	1	25	1.5	1E-8	1E-16
F-2R	2	23	1.5	1E-3	1E-10
F-3R-a	3	20	1.5	1E-3	1.1E-10
F-3R-b	3	20	1.5	1E-3	1.2E-12
F-4R	4	23	1.5	1E-2	1E-12

5 通りのフィルタを前処理付きで適用した実験結果をそれぞれ、図 2 から図 6 までの 5 枚の図に示す。各左側の図は正規化座標 t を引数として Chebyshev 多項式の次数が n である本来のフィルタの伝達関数の大きさ $|g(t)|$ を対数でプロットしたものである。そして各右側の図は、得られた各近似固有対について横軸に固有値をとり、縦軸には相対残差の大きさ Θ の対数値をとってプロットしたグラフを前処理用フィルタの次数 v のそれについて描いたものである。前処理用のフィルタの Chebyshev 多項式の次数 v を 5 刻みで 25 まで変えて実験をした。ただし $v = 0$ は前処理をしない場合である。前処理用の次数 v を増やすとそれに応じて各近似固有対の相対残差が減少する様子が見てとれる。



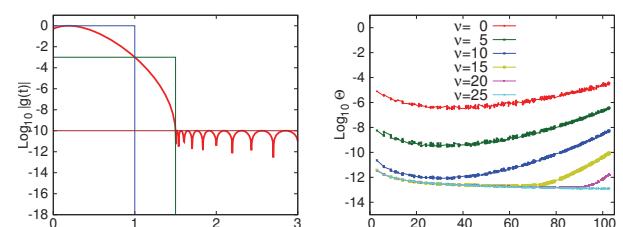
伝達関数の大きさ $|g(t)|$ の対数 相対残差の大きさ Θ の対数

図-2 フィルタ F-1R を前処理付きで適用した例



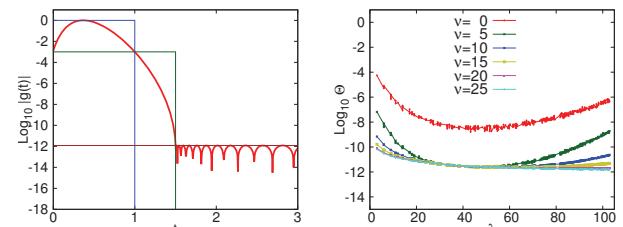
伝達関数の大きさ $|g(t)|$ の対数 相対残差の大きさ Θ の対数

図-3 フィルタ F-2R を前処理付きで適用した例



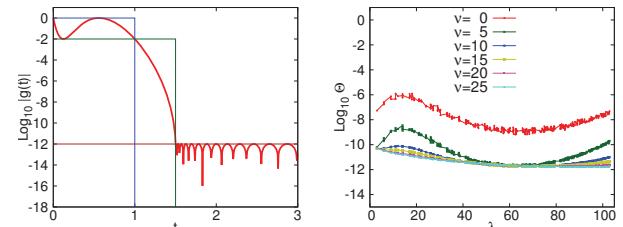
伝達関数の大きさ $|g(t)|$ の対数 相対残差の大きさ Θ の対数

図-4 フィルタ F-3R-a を前処理付きで適用した例



伝達関数の大きさ $|g(t)|$ の対数 相対残差の大きさ Θ の対数

図-5 フィルタ F-3R-b を前処理付きで適用した例



伝達関数の大きさ $|g(t)|$ の対数 相対残差の大きさ Θ の対数

図-6 フィルタ F-4R を前処理付きで適用した例

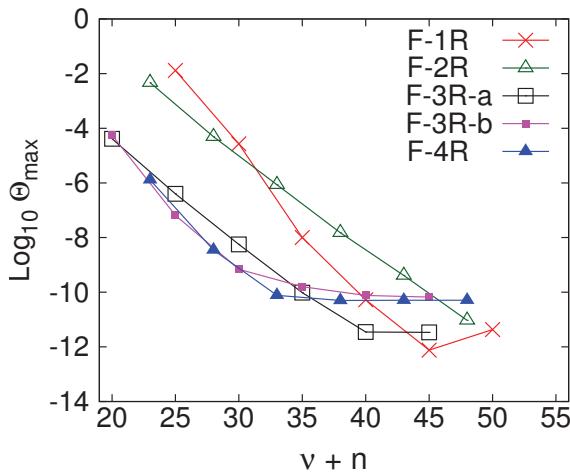


図-7 次数の和に対する相対残差の大きさの最大値の対数

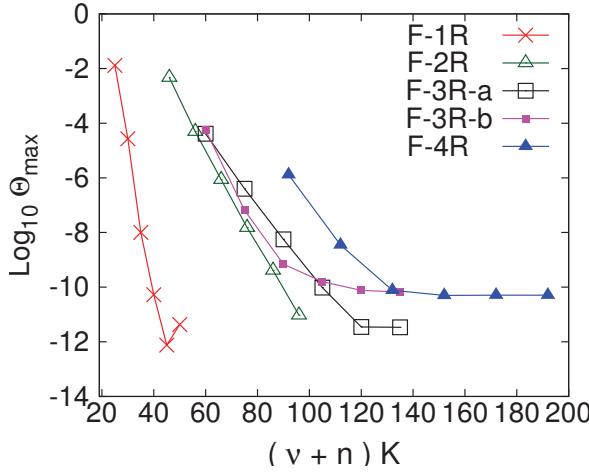


図-8 次数の和とレゾルベントの数の積に対する相対残差の大きさの最大値の対数

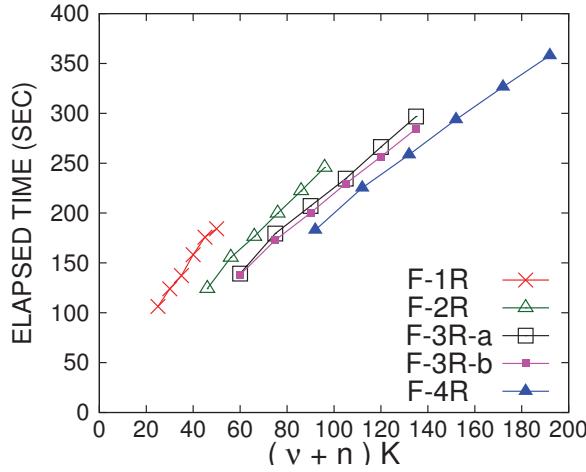


図-9 次数の和とレゾルベントの数の積に対する対角化完了までの経過時間 (秒)

図7は、5通りの各フィルタを用いた結果をそれぞれ、横軸には前処理と本来のフィルタのChebyshev多項式の次数の和 $v+n$ をとり、縦軸には求めた近似固有対すべてについての相対残差の大きさの最大値を対数でプロットしたものである。また図8は、5通りの各フィルタを用いた結果をそれぞれ、横軸には多項式の

次数の和にレゾルベントの数 K を乗じた値 $(v+n)K$ をとり、縦軸には求めた近似固有対全体について相対残差の大きさの最大値を対数でプロットしたものである。もしも K 個のレゾルベントを作用させる計算を完全に並列に処理できるのであれば、計算の主要部の経過時間は $v+n$ に比例するが、そうではなくてレゾルベントの作用を与えるための K 個の行列分解やレゾルベントの適用で複数右辺に対する行列分解の因子を用いた前進後退代入の計算を K 個のレゾルベントについて順次に行うのであれば、経過時間あるいは全体の計算の手間はほぼ $(v+n)K$ に比例することになる。どちらの場合も、フィルタの計算効率はグラフが下側にあるものほど良いことになる。そのため、 K 個のレゾルベントについての処理を順次に行う場合は、図8にある5通りのフィルタのうちで最も計算効率が良いのはレゾルベント1つで構成されたF-1Rということになる。

図9は5通りのフィルタのそれについて、前処理の次数 v を0から25まで5刻みで選んで、横軸には $(v+n)K$ の値を、縦軸には対角化が終了するまでの経過時間をとってプロットしたグラフを描いたものである。対角化が完了するまでの全体の経過時間には、たとえばランダムな m 個のベクトルの生成、 m 個のベクトルの B -正規直交化、フィルタ処理を終えてから近似固有対を抽出するまでの処理などのレゾルベントの個数 K には依らないものが含まれるので、これらのグラフは図中で1つの直線には乗らずに、レゾルベントの数 K が多いフィルタほど対応するグラフが下側にきている。ベクトル m 個の組にフィルタを適用する計算の手間は m に比例するが、ベクトルの組の B -正規直交化の手間は m の2乗に比例するので、同じレゾルベントの組を使う場合、 m が大きくなるほど計算中で B -正規直交化の占める割合が増える。Rayleigh-Ritz法もその中で次数 m の行列を作る手間が m の2乗に比例し、また小さい m 次行列の完全対角化には m の3乗の定数倍の手間がかかるなど、レゾルベントを逐次に処理する場合には行列次数 N と半帯幅 w_h やベクトルの数 m が一定ならば経過時間は $(v+n)K$ に比例する、という単純な見積りは m が大きいければそれだけされることになる。

(4) 固有値が分布の内側にある固有対を求めた例

こんどは例題の一般固有値問題の固有対で固有値が固有値分布の内側の区間 $\lambda \in [2000, 2020]$ にあるものを求める。そのような固有対の正しい数は429である。

フィルタで使用する K 個のレゾルベントはすべてシフトが虚数であり、複素対称性を利用してシフトの虚部が正であるもの $K' = K/2$ 個だけを用いてフィルタの作用を実現する。実験に用いた6通りのフィルタそれぞれについて、本論文でのフィルタ名、使用するレゾルベントの数 $K' = K/2$ 、Chebyshev多項式の次数 n 、伝達関数の3つの形状パラメタ ξ , g_p , g_s を表2に掲げる (ξ の定義は、通過域 $\lambda \in [a, b]$ を標準区間 $t \in [-1, 1]$ に対応させる線形変換により λ に対応する正規化座標 t を定義するとき、阻止域の端の位置が $t = \pm \xi$ である)。

フィルタの特性が $\xi = 2.0$ の場合には、阻止域は $\lambda \in (-\infty, 1990] \cup [2030, +\infty)$ であり、最初に生成する乱数ベクトルの数 m を900とした。またフィルタの遮断

表-2 固有値が内側の固有対を求めるために用いたフィルタ

フィルタ名	K'	n	ξ	g_p	g_s
F-1C	1	12	2.0	1E-3	5.49E-11
F-2C	2	4	2.0	1E-3	1.92E-13
F-3C	3	3	2.0	1E-1	1.30E-13
F-1C-s	1	14	1.5	1E-4	1.72E-10
F-2C-s	2	6	1.5	1E-2	1.11E-12
F-3C-s	3	3	1.5	1E-1	7.96E-11

特性がより先鋭な $\xi = 1.5$ の場合には、阻止域は $\lambda \in (-\infty, 1990] \cup [2025, +\infty)$ であり、 m は 700 とした。

フィルタを前処理付きで適用した 6 通りの実験の結果を $\xi = 2.0$ の場合は図 10 から図 12 の 3 枚の図に、 $\xi = 1.5$ の場合は図 13 から図 15 の 3 枚の図にそれぞれ示す。それら 6 枚それぞれの左側は Chebyshev 多項式の次数が n である本来のフィルタの伝達関数の大きさを正規化座標 t を引数として表した $|g(t)|$ の対数プロットであり、右側は横軸には得られた各近似固有対の固有値をとり、縦軸には相対残差の大きさ Θ の対数値をとってプロットしたグラフを前処理用フィルタの次数 v を変えた各場合について描いたものである。前処理用のフィルタに用いた Chebyshev 多項式の次数 v は F-1C と F-1C-s の場合には（煩雑になるのを避けて）2 刻みでプロットしている。ただし $v = 0$ は前処理を行わない場合である。前処理用のフィルタの v を増やすとそれにともなって各近似固有対の相対残差が減少していく様子が見てとれる。図 13 の右側で $v = 0$ の場合の赤い折れ線グラフに鋭い縦線が 4 箇所あるのは、相対残差の大きい偽の近似固有対が 4 つ混入したためである。

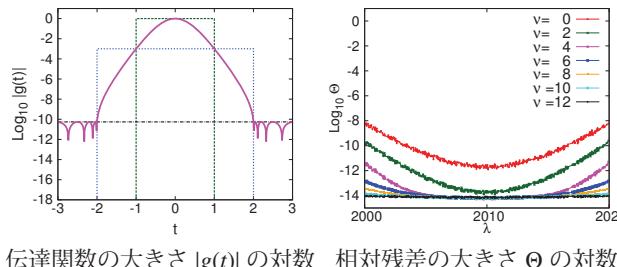


図-10 フィルタ F-1C を前処理付きで適用した例

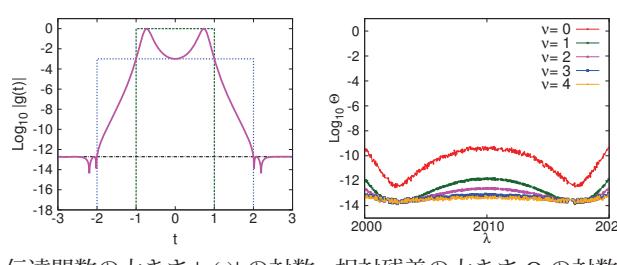


図-11 フィルタ F-2C を前処理付きで適用した例

図 16 は $\xi = 2.0$ の場合について、図 17 は $\xi = 1.5$ の場合について、それぞれ 3 通りのフィルタを用いた結果を、横軸には前処理用と本来のフィルタの Chebyshev 多項式の次数の和である $v+n$ をとり、縦軸には近似固

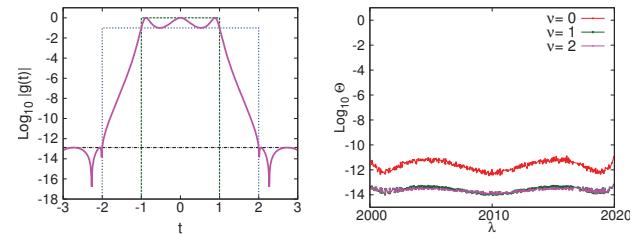
伝達関数の大きさ $|g(t)|$ の対数 相対残差の大きさ Θ の対数

図-12 フィルタ F-3C を前処理付きで適用した例

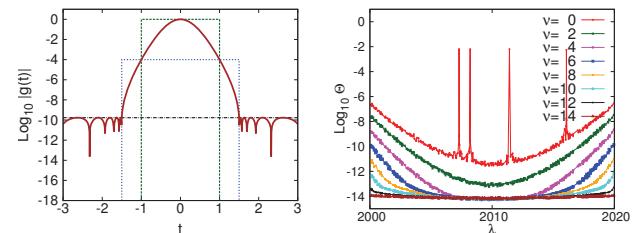
伝達関数の大きさ $|g(t)|$ の対数 相対残差の大きさ Θ の対数

図-13 フィルタ F-1C-s を前処理付きで適用した例

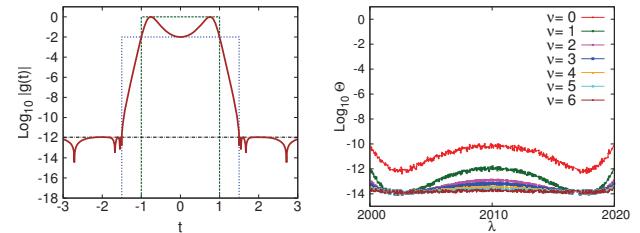
伝達関数の大きさ $|g(t)|$ の対数 相対残差の大きさ Θ の対数

図-14 フィルタ F-2C-s を前処理付きで適用した例

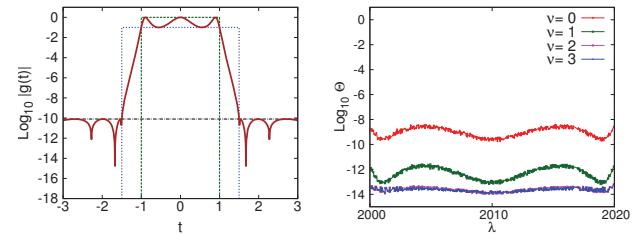
伝達関数の大きさ $|g(t)|$ の対数 相対残差の大きさ Θ の対数

図-15 フィルタ F-3C-s を前処理付きで適用した例

有効全体についての相対残差の大きさの最大値 Θ_{max} を対数でプロットして折れ線で描いたものである。同様に図 18 は $\xi = 2.0$ の場合について、図 19 は $\xi = 1.5$ の場合について、それぞれ 3 通りのフィルタを用いた結果を、横軸には多項式の次数の和と使用したレゾルベントの数の積である $(v+n)K'$ をとり、縦軸には求めた近似固有対全体についての相対残差の大きさの最大値 Θ_{max} を対数でプロットして折れ線で描いたものである。

もしも使用するレゾルベント K' 個についてレゾルベントを準備するための行列分解やレゾルベントの作用を実現する行列分解因子を用いた複数右辺の前進後退代入の計算を完全に並行して行えるのならば、主要部であるフィルタ処理の経過時間は $v+n$ に比例することになる。あるいは K' 個のレゾルベントについて順次

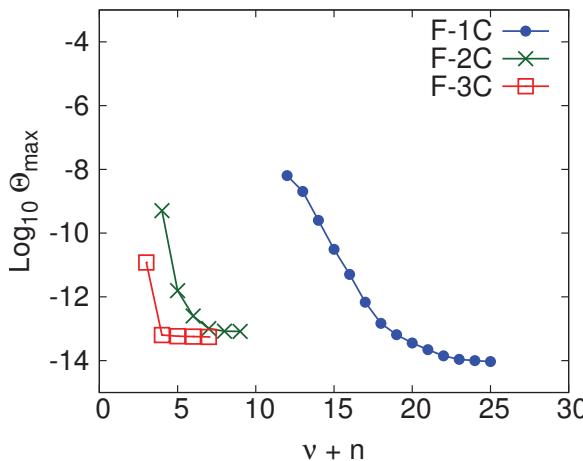


図-16 次数の和に対する相対残差の大きさの最大値の対数
($\xi = 2.0$ のフィルタ 3通り)

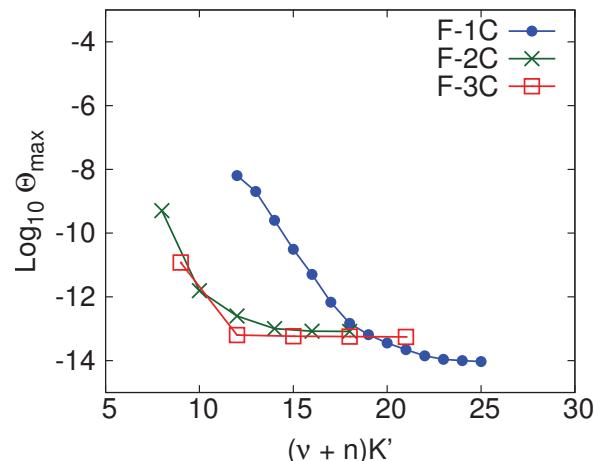


図-18 次数の和とレゾルベントの数の積に対する相対残差の大きさの最大値の対数
($\xi = 2.0$ のフィルタ 3通り)

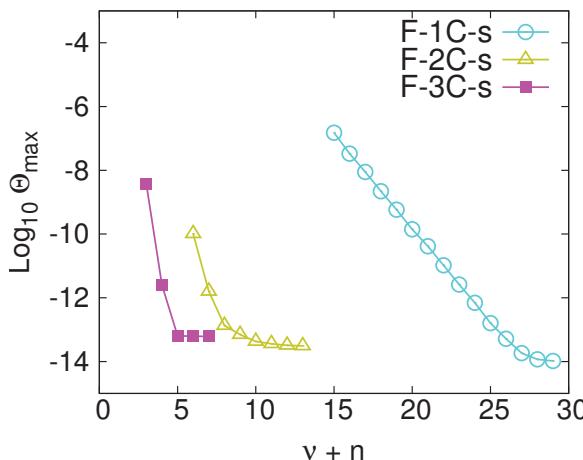


図-17 次数の和に対する相対残差の大きさの最大値の対数
($\xi = 1.5$ のフィルタ 3通り)

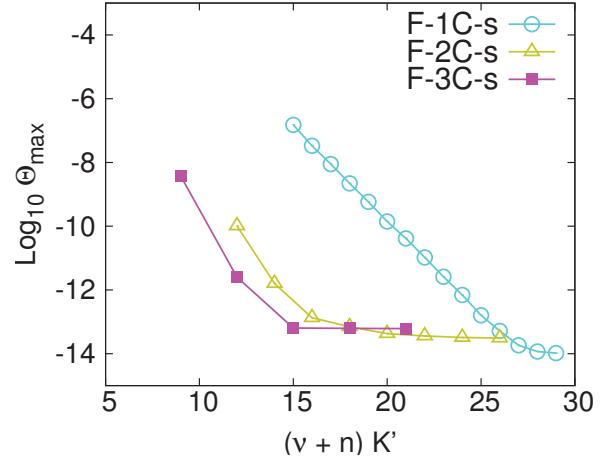


図-19 次数の和とレゾルベントの数の積に対する相対残差の大きさの最大値の対数
($\xi = 1.5$ のフィルタ 3通り)

に計算を行うのであれば、主要部の経過時間あるいは計算の手間は $(v+n)K'$ に比例する。いずれの場合も、計算効率の良いフィルタほどグラフが下側にくるので、いまの場合には K' 個のレゾルベントのための処理を完全並行に行える場合と順次に行う場合のどちらも、計算効率が最も良いフィルタは $\xi = 2.0$ では F-3C であり、 $\xi = 1.5$ では F-3C-s であり、レゾルベントを 3つ用いたものであるという結果になった。固有値分布の一般的な位置に固有値がある固有対を求めるためにシフトが虚数のレゾルベントだけで構成された今回のフィルタ 3通りによる比較では、レゾルベントの数 K' が 1, 2, 3 と増すほど計算効率が良いことがわかる。ただし行列分解因子を格納するための記憶量はレゾルベントの数 K' に比例するので、計算の制約が記憶量である場合には使用するレゾルベントの数を抑えなければならない。

6. まとめ

フィルタをレゾルベントの線形結合の Chebyshev 多項式とする場合には、その多項式の次数を下げたものを前処理用のフィルタとして利用できる。

乱数で生成したベクトルの組を B -正規直交化したも

のに対して本来のフィルタを直接適用せずに、まず前に前処理用のフィルタを適用してその結果を B -正規直交化したものを作り、それに対して本来のフィルタを適用すれば得られる近似固有対の精度を向上できる。近似固有対の精度は前処理用のフィルタの多項式の次数を増すほど良くなる。

前処理用と本来のフィルタの多項式の次数の和を一定とする場合には、本来のフィルタだけで行うよりも、前処理に手間の一部をかける方が結果の精度が向上して効率的であろう。また、近似固有対への精度要求を前処理を採用することにより満たせるのならば、性能の悪い単一のレゾルベントで構成されたフィルタでも、記憶容量が制約である場合には有用な計算手段になる。

参考文献

- [1] 村上弘: チェビシェフ多項式と極がすべて実数である低次有理関数の合成により実対称定值一般固有値問題の少数の下側固有対を解くためのフィルタの伝達関数を構成する方法, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム(ACS), Vol.15, No.3 (ACS78), pp.1–28, 2022.