

## 大次元の Sparse Matrix の固有値問題

東大 理・物理 高橋 秀俊  
東大 大型計算機 名取 亮  
センター

電子計算機の高速化，大容量化につれて，非常に大きな行列の固有値問題を扱う機会がふえてきた。特に有限要素法による構造解析や微分方程式の数値解などに出てくる行列は実対称でしかも sparse matrix であることが多い。その上に、必要な固有値は絶対値の大きい方あるいは小さい方から数個だけである。瀬部と Nachamkin<sup>(1)</sup> は、Lanczos 法による三重対角化を、ある所で打切って、その縮小された三重対角行列の固有値を計算することによって、絶対値の大きい順に数個の固有値を精度よく求められることを指摘し、原子核の shell model にそれを応用した。Lanczos 法では、誤差の集積によってベクトルの直交性が失われるために、途中で再直交化が必要となる。ところが実際は再直交化を行は

(1) T. Sebe & J. Nachamkin; *Annals of Phys.* 51, 100 (1969)



従って、計算に誤差が含まれなければ (3) 式から、

$$c_i \cdot c_j = 0 \quad (i \neq j)$$

となり、 $c_i$  は互いに直交するベクトルとなる筈である。

また、列ベクトル  $c_i$  をならべた行列

$$C = (c_1, c_2, \dots, c_N)$$

を考えると、

$$(5) \quad B = C^T A C$$

となり、

$$(6) \quad B u = \lambda u$$

とすると、

$$(7) \quad w = C u$$

の関係がある。

$B$  の固有値は、次の方程式の根となる。

$$(8) \quad \begin{vmatrix} \alpha_1 - \lambda & \beta_1 & & & \\ & \beta_1 & \alpha_2 - \lambda & \beta_2 & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \beta_{N-1} & \alpha_N - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$i$  次の左上小行列式を  $f_i(\lambda)$  とすると、

$$\left\{ \begin{array}{l} f_0(\lambda) = 1 \\ f_1(\lambda) = \alpha_1 - \lambda \\ \dots \end{array} \right.$$

$$(9) \quad \left\{ \begin{array}{l} f_i(\lambda) = (\alpha_i - \lambda) f_{i-1}(\lambda) - \beta_{i-1}^2 f_{i-2}(\lambda) \\ \text{-----} \\ f_N(\lambda) = (\alpha_N - \lambda) f_{N-1}(\lambda) - \beta_{N-1}^2 f_{N-2}(\lambda) \end{array} \right.$$

と作り,  $f_i(\lambda)$  は Sturm 関数列となる。従って  $f_m(\lambda) = 0$  の根, 即ち三重対角行列を  $m$  次で切ったものの固有値を, 大きい順に  $\eta_1^{(m)}, \eta_2^{(m)}, \dots, \eta_m^{(m)}$  とすると,

$$(10) \quad \eta_{i+1}^{(m)} < \eta_i^{(m-1)} < \eta_i^{(m)}$$

なる関係がある。真の固有値を大きい順に  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$  とすると,

$$(11) \quad \left\{ \begin{array}{l} \eta_1^{(1)} < \eta_1^{(2)} < \dots < \eta_1^{(m)} < \dots < \lambda_1 \\ \eta_2^{(2)} < \dots < \eta_2^{(m)} < \dots < \lambda_2 \\ \text{-----} \\ \lambda_N < \dots < \eta_m^{(m)} < \dots < \eta_2^{(2)} < \eta_1^{(1)} \\ \lambda_{N-1} < \dots < \eta_{m-1}^{(m)} < \dots < \eta_1^{(2)} \\ \text{-----} \end{array} \right.$$

とすると, 両端に近い固有値は, 適当な  $m$  で切った行列の固有値で近似することができる。

真の固有ベクトル  $w$  を基底ベクトル  $e_i$  で展開すると,

$$(12) \quad w = \sum_{i=1}^N u_i e_i$$

これを (1) に代入して (3) を用いると,

$$(13) \quad \beta_{i-1} u_{i-1} + \alpha_i u_i + \beta_i u_{i+1} = \lambda u_i$$

とより,

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}$$

は,  $B$  の固有ベクトルである。もし,  $i > m$  について,  $u_i$  が無視できる程小さくなっていれば, ベクトル  $u$  は  $m$  個の  $C_i$  で表わされることになり, 三重対角化を  $m$  次で打切っても正しい固有値, 固有ベクトルが求まることを示している。

さて, ここで (3) 式の関係を用いたが,  $C_i$  の間の直交性は直接用いていないことに注意しよう。但し, (12) の展開ができることは仮定した。従って, 再直交化の手続きをしないでも, (12) の展開が可能である限りは, 正しい結果が得られる筈である。再直交化が省略できれば, 特に *sparse matrix* の場合, 計算量を大幅に減らすことができる。また  $C_i$  を記憶する必要がないから, 記憶容量も少なくて済む。

次に,  $C_i$  の間の直交性がどのようにくずれてゆくかをみるために, (3) から

$$(14) \quad A C_i = \beta_{i-1} C_{i-1} + \alpha_i C_i + \beta_i C_{i+1}$$

$$(15) \quad A C_j = \beta_{j-1} C_{j-1} + \alpha_j C_j + \beta_j C_{j+1}$$

$$(14) \cdot C_j - (15) \cdot C_i \quad \text{を } \tau < \eta$$

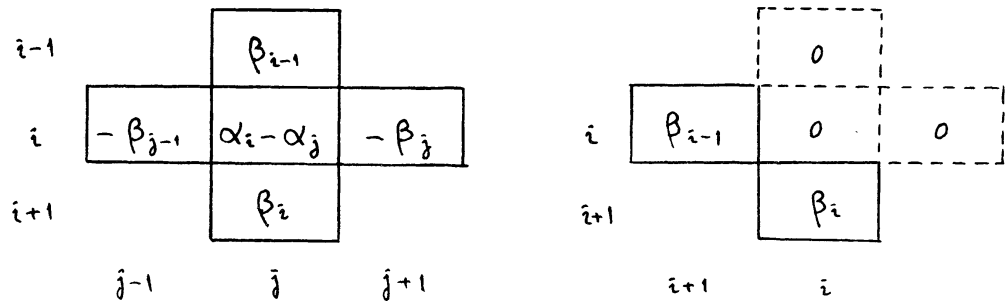
$$Z_{ij} = C_i \cdot C_j$$

とすると,

$$(16) \quad 0 = \beta_{i-1} z_{i-1,j} + \alpha_i z_{ij} + \beta_i z_{i+1,j} \\ - \beta_{j-1} z_{i,j-1} - \alpha_j z_{ij} - \beta_j z_{i,j+1}$$

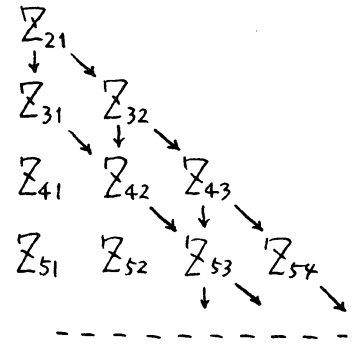
特に  $i=j$  の場合は (14) より,

$$(16') \quad 0 = \beta_{i-1} z_{i,i-1} + \beta_i z_{i+1,i}$$



そうすると, (16) (16') の関係式

によって右図のように,  $z_{21}$  から出発してすべての  $z_{ij}$  が決定されることがわかる。  $z_{21} = 0$  であれば, すべての  $z_{ij}$  は 0 となる筈である。しかし, この差分方程式が



不安定なら, どこかで混入した誤差により,  $z_{ij}$  は大きくなる

ことがある。これが直交化のくずれる原因である。

最後に, 基底ベクトル  $C_i$  を固有ベクトル  $w_i$  で展開したときの係数についてしらべてみよう。



$$(22) \quad a_i^2 P_{N-1}(\lambda_i) P'_N(\lambda_i) = \sum_{r=1}^N a_i^2 P_{r-1}^2(\lambda_i)$$

(17)式より.

$$(23) \quad \begin{cases} c_1 \cdot w_i = a_i \\ c_N \cdot w_i = a_i P_{N-1}(\lambda_i) \end{cases}$$

また,

$$w_i = \sum_{r=1}^N a_i P_{r-1}(\lambda_i) c_r, \quad \|w_i\| = 1$$

より

$$(24) \quad \sum_{r=1}^N a_i^2 P_{r-1}^2(\lambda_i) = 1$$

故に,

$$(25) \quad (c_1 \cdot w_i) \cdot (c_N \cdot w_i) = 1 / P'_N(\lambda_i)$$

の関係式が得られる。

$\lambda_i$  の分布が両端で特に密集していない場合には, 両端に近い  $\lambda_i$  に対しては,  $|P'_N(\lambda_i)|$  が大きくなるから (25) 式の左辺は小さくなる。従って, 初期ベクトル  $c_1$  が  $w_i$  の成分をある程度含んでいれば,  $c_N$  の方に含まれる  $w_i$  の成分は小さくなることわかる。

### ○ 数値例

例として, へりを固定した長方形の膜の振動を考え,  $6 \times 8$  の mesh に切った 48 次元のものと,  $30 \times 40$  の mesh に切った 1200 次元の二つの行列の固有値を計算した。結果は以下に示す通りである。



## 三重対角化した結果 (48次元)

LANCZOS(WITHOUT REORTHOGONALIZATION)

HOUSEHOLDER

| LANCZOS(WITHOUT REORTHOGONALIZATION) |              | HOUSEHOLDER  |               |
|--------------------------------------|--------------|--------------|---------------|
| DIAGONAL                             | SUBDIAGONAL  | DIAGONAL     | SUBDIAGONAL   |
| 4.000000E+00                         | 1.414214E+00 | 4.000000E+00 | 1.414214E+00  |
| 4.000001E+00                         | 1.732051E+00 | 4.000000E+00 | -1.732051E+00 |
| 3.999998E+00                         | 1.825742E+00 | 3.999999E+00 | -1.825742E+00 |
| 4.000001E+00                         | 1.888562E+00 | 4.000000E+00 | -1.888562E+00 |
| 4.000000E+00                         | 1.915749E+00 | 3.999998E+00 | -1.915748E+00 |
| 4.000001E+00                         | 1.937872E+00 | 4.000001E+00 | -1.937871E+00 |
| 3.999998E+00                         | 1.934458E+00 | 4.000000E+00 | -1.934458E+00 |
| 4.000002E+00                         | 1.889747E+00 | 4.000000E+00 | 1.889747E+00  |
| 3.999998E+00                         | 1.843321E+00 | 3.999999E+00 | 1.843321E+00  |
| 4.000002E+00                         | 1.873586E+00 | 3.999999E+00 | -1.873586E+00 |
| 3.999998E+00                         | 1.838728E+00 | 4.000000E+00 | 1.838728E+00  |
| 4.000003E+00                         | 1.659040E+00 | 4.000000E+00 | 1.659040E+00  |
| 3.999997E+00                         | 1.217594E+00 | 4.000000E+00 | 1.217594E+00  |
| 4.000003E+00                         | 1.973373E+00 | 4.000001E+00 | 1.973373E+00  |
| 3.999997E+00                         | 1.878230E+00 | 4.000000E+00 | -1.878230E+00 |
| 4.000003E+00                         | 1.463889E+00 | 4.000000E+00 | 1.463888E+00  |
| 3.999998E+00                         | 1.519630E+00 | 3.999998E+00 | -1.519629E+00 |
| 4.000002E+00                         | 1.140742E+00 | 4.000000E+00 | 1.140743E+00  |
| 3.999998E+00                         | 1.067176E+00 | 4.000002E+00 | 1.067177E+00  |
| 4.000003E+00                         | 1.305346E+00 | 3.999994E+00 | -1.305348E+00 |
| 4.000001E+00                         | 1.617717E+00 | 3.999999E+00 | 1.617719E+00  |
| 4.000002E+00                         | 1.526242E+00 | 3.999998E+00 | 1.526241E+00  |
| 3.999998E+00                         | 1.498522E+00 | 4.000000E+00 | -1.498521E+00 |
| 4.000000E+00                         | 1.366102E+00 | 4.000003E+00 | -1.366099E+00 |
| 3.999997E+00                         | 1.435218E+00 | 4.000000E+00 | 1.435214E+00  |
| 3.999994E+00                         | 1.180351E+00 | 4.000002E+00 | 1.180352E+00  |
| 3.999444E+00                         | 1.052756E+00 | 4.000000E+00 | 1.052594E+00  |
| 3.999447E+00                         | 8.904228E-01 | 3.999999E+00 | -8.884126E-01 |
| 3.991672E+00                         | 1.502141E+00 | 3.999993E+00 | 1.506050E+00  |
| 3.968910E+00                         | 1.413686E+00 | 4.000004E+00 | 1.348690E+00  |
| 3.858179E+00                         | 1.127813E+00 | 4.000003E+00 | 5.351572E-01  |
| 2.779574E+00                         | 2.775581E+00 | 3.999998E+00 | -6.640934E-01 |
| 4.937764E+00                         | 1.781944E+00 | 4.000002E+00 | -5.515540E-01 |
| 4.443043E+00                         | 7.641195E-01 | 3.999997E+00 | -6.046606E-01 |
| 4.021240E+00                         | 5.615246E-01 | 3.999983E+00 | 1.246342E+00  |
| 4.011138E+00                         | 6.307467E-01 | 4.000023E+00 | -3.028367E-01 |
| 4.278211E+00                         | 1.928603E+00 | 4.000010E+00 | -5.613124E-01 |
| 4.255165E+00                         | 1.946874E+00 | 3.999997E+00 | 3.499276E-01  |
| 3.932198E+00                         | 2.118672E+00 | 4.000031E+00 | -8.480351E-01 |
| 3.586044E+00                         | 5.621394E-01 | 4.000016E+00 | -1.063814E+00 |
| 4.029265E+00                         | 1.745546E+00 | 3.999965E+00 | -5.259830E-01 |
| 4.007033E+00                         | 2.500694E+00 | 4.000007E+00 | 2.168391E-01  |
| 3.909033E+00                         | 1.011672E+00 | 4.000156E+00 | 7.507744E-01  |
| 3.992062E+00                         | 3.408262E-01 | 3.999833E+00 | 1.594780E-01  |
| 3.986802E+00                         | 6.595773E-01 | 3.999995E+00 | 1.080562E-01  |
| 3.773190E+00                         | 1.446481E+00 | 3.999996E+00 | -1.658415E-01 |
| 3.527251E+00                         | 1.615268E+00 | 3.999996E+00 | 2.017293E-01  |
| 3.512711E+00                         | 0.000000E-40 | 4.000012E+00 | 0.000000E-40  |



## 三重対角行列を途中で切った時の固有値 (48次元)

## EIGENVALUES 16

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.681062E+00 | 7.320609E+00 | 6.987264E+00 | 6.706710E+00 |
| 6.153138E+00 | 5.516836E+00 | 4.866556E+00 | 4.265162E+00 |
| 3.734840E+00 | 3.133444E+00 | 2.483164E+00 | 1.846863E+00 |
| 1.293291E+00 | 1.012737E+00 | 6.793917E-01 | 3.189389E-01 |

## EIGENVALUES 20

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.681323E+00 | 7.333982E+00 | 7.125655E+00 | 6.787259E+00 |
| 6.263640E+00 | 6.011622E+00 | 5.522776E+00 | 5.096196E+00 |
| 4.734301E+00 | 4.201540E+00 | 3.798462E+00 | 3.265700E+00 |
| 2.903805E+00 | 2.477225E+00 | 1.988379E+00 | 1.736350E+00 |
| 1.212742E+00 | 8.743452E-01 | 6.660186E-01 | 3.186772E-01 |

## EIGENVALUES 24

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.681323E+00 | 7.334026E+00 | 7.126329E+00 | 6.789206E+00 |
| 6.670863E+00 | 6.260526E+00 | 6.021737E+00 | 5.604297E+00 |
| 5.412550E+00 | 4.915250E+00 | 4.619456E+00 | 4.173720E+00 |
| 3.826281E+00 | 3.380544E+00 | 3.084751E+00 | 2.587451E+00 |
| 2.395704E+00 | 1.978264E+00 | 1.739475E+00 | 1.329159E+00 |
| 1.210794E+00 | 8.736712E-01 | 6.659741E-01 | 3.186770E-01 |

## EIGENVALUES 28

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.681323E+00 | 7.334027E+00 | 7.126366E+00 | 6.801515E+00 |
| 6.778742E+00 | 6.304654E+00 | 6.211902E+00 | 5.986254E+00 |
| 5.599125E+00 | 5.444200E+00 | 5.042244E+00 | 4.798843E+00 |
| 4.498585E+00 | 4.151853E+00 | 3.848069E+00 | 3.501273E+00 |
| 3.201066E+00 | 2.957630E+00 | 2.555744E+00 | 2.400809E+00 |
| 2.013732E+00 | 1.788079E+00 | 1.695333E+00 | 1.221257E+00 |
| 1.198484E+00 | 8.736351E-01 | 6.659734E-01 | 3.186770E-01 |

## EIGENVALUES 32

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.681323E+00 | 7.334027E+00 | 7.126366E+00 | 6.801954E+00 |
| 6.779081E+00 | 6.332763E+00 | 6.260241E+00 | 6.173055E+00 |
| 5.979919E+00 | 5.597814E+00 | 5.448279E+00 | 5.085939E+00 |
| 4.846093E+00 | 4.611617E+00 | 4.312428E+00 | 4.086435E+00 |
| 3.818017E+00 | 3.484193E+00 | 3.206958E+00 | 2.986045E+00 |
| 2.620973E+00 | 2.476635E+00 | 2.311731E+00 | 2.009427E+00 |
| 1.786993E+00 | 1.696138E+00 | 1.466193E+00 | 1.220824E+00 |
| 1.197933E+00 | 8.736351E-01 | 6.659734E-01 | 3.186770E-01 |

## EIGENVALUES 36

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.681323E+00 | 7.681267E+00 | 7.334027E+00 | 7.126366E+00 |
| 6.801938E+00 | 6.779069E+00 | 6.324426E+00 | 6.246974E+00 |
| 6.149213E+00 | 5.977125E+00 | 5.594165E+00 | 5.445542E+00 |
| 5.090152E+00 | 4.917049E+00 | 4.800634E+00 | 4.563387E+00 |
| 4.272189E+00 | 4.104833E+00 | 3.898906E+00 | 3.730364E+00 |
| 3.437476E+00 | 3.200618E+00 | 3.085228E+00 | 2.910099E+00 |
| 2.554464E+00 | 2.405840E+00 | 2.022876E+00 | 1.850743E+00 |
| 1.753028E+00 | 1.675576E+00 | 1.220932E+00 | 1.198062E+00 |
| 8.736351E-01 | 6.659734E-01 | 3.186885E-01 | 3.186770E-01 |

## EIGENVALUES 40

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.681323E+00 | 7.681322E+00 | 7.334027E+00 | 7.297788E+00 |
| 7.126366E+00 | 6.801938E+00 | 6.779069E+00 | 6.324428E+00 |
| 6.246980E+00 | 6.149234E+00 | 5.977131E+00 | 5.594254E+00 |
| 5.446192E+00 | 5.398301E+00 | 5.086192E+00 | 4.893043E+00 |
| 4.786971E+00 | 4.558114E+00 | 4.264887E+00 | 4.099546E+00 |
| 3.900582E+00 | 3.735197E+00 | 3.441927E+00 | 3.213140E+00 |
| 3.107110E+00 | 2.913842E+00 | 2.604369E+00 | 2.553844E+00 |
| 2.405748E+00 | 2.022870E+00 | 1.850767E+00 | 1.753021E+00 |
| 1.675573E+00 | 1.220932E+00 | 1.198062E+00 | 8.736351E-01 |
| 7.614826E-01 | 6.659734E-01 | 3.186777E-01 | 3.186770E-01 |

## EIGENVALUES 44

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.681323E+00 | 7.681323E+00 | 7.334027E+00 | 7.333898E+00 |
| 7.126366E+00 | 7.125109E+00 | 6.801938E+00 | 6.779069E+00 |
| 6.324428E+00 | 6.246980E+00 | 6.149235E+00 | 5.977131E+00 |
| 5.594275E+00 | 5.450316E+00 | 5.439469E+00 | 5.087023E+00 |
| 4.899084E+00 | 4.792558E+00 | 4.572306E+00 | 4.525718E+00 |
| 4.262425E+00 | 4.098339E+00 | 3.901657E+00 | 3.737572E+00 |
| 3.474161E+00 | 3.427647E+00 | 3.207440E+00 | 3.100914E+00 |
| 2.912978E+00 | 2.560529E+00 | 2.549683E+00 | 2.405725E+00 |
| 2.022870E+00 | 1.850766E+00 | 1.753021E+00 | 1.675573E+00 |
| 1.220932E+00 | 1.198062E+00 | 8.747085E-01 | 8.736351E-01 |
| 6.663845E-01 | 6.659734E-01 | 3.186775E-01 | 3.186770E-01 |

## EIGENVALUES 48

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.681323E+00 | 7.681323E+00 | 7.334027E+00 | 7.334027E+00 |
| 7.126366E+00 | 7.126360E+00 | 6.801938E+00 | 6.779069E+00 |
| 6.324428E+00 | 6.246980E+00 | 6.149235E+00 | 5.977131E+00 |
| 5.819953E+00 | 5.594276E+00 | 5.450587E+00 | 5.439811E+00 |
| 5.087056E+00 | 4.899795E+00 | 4.793964E+00 | 4.651176E+00 |
| 4.556073E+00 | 4.278172E+00 | 4.232684E+00 | 4.095122E+00 |
| 3.900554E+00 | 3.737217E+00 | 3.508630E+00 | 3.436662E+00 |
| 3.224137E+00 | 3.195072E+00 | 3.099290E+00 | 2.912928E+00 |
| 2.560069E+00 | 2.549308E+00 | 2.405725E+00 | 2.022870E+00 |
| 1.850766E+00 | 1.753021E+00 | 1.675573E+00 | 1.371629E+00 |
| 1.220932E+00 | 1.198062E+00 | 8.736351E-01 | 8.736278E-01 |
| 6.659734E-01 | 6.659696E-01 | 3.186775E-01 | 3.186770E-01 |

## TRUE EIGENVALUES

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.681323E+00 | 7.334026E+00 | 7.126366E+00 | 6.801938E+00 |
| 6.779069E+00 | 6.324428E+00 | 6.246980E+00 | 6.149234E+00 |
| 5.977131E+00 | 5.594276E+00 | 5.454641E+00 | 5.445042E+00 |
| 5.434344E+00 | 5.087048E+00 | 4.899684E+00 | 4.801938E+00 |
| 4.792338E+00 | 4.632406E+00 | 4.554958E+00 | 4.285110E+00 |
| 4.269849E+00 | 4.246980E+00 | 4.097746E+00 | 4.077448E+00 |
| 3.922553E+00 | 3.902255E+00 | 3.753021E+00 | 3.730151E+00 |
| 3.714891E+00 | 3.445042E+00 | 3.367595E+00 | 3.207663E+00 |
| 3.198062E+00 | 3.100317E+00 | 2.912953E+00 | 2.565657E+00 |
| 2.554958E+00 | 2.545359E+00 | 2.405725E+00 | 2.022870E+00 |
| 1.850766E+00 | 1.753021E+00 | 1.675573E+00 | 1.220932E+00 |
| 1.198062E+00 | 8.736353E-01 | 6.659737E-01 | 3.186772E-01 |

## 三重対角行列の固有ベクトル (48次元)

## EIGENVECTORS

| 1             | 2             | 3             | 4             |
|---------------|---------------|---------------|---------------|
| -3.739253E-02 | 7.027486E-02  | -6.737924E-02 | -9.468240E-02 |
| -9.733604E-02 | 1.656739E-01  | -1.489535E-01 | -1.875912E-01 |
| 1.763484E-01  | -2.615265E-01 | 2.138472E-01  | 2.261584E-01  |
| -2.632378E-01 | 3.204073E-01  | -2.248782E-01 | -1.691170E-01 |
| 3.426399E-01  | -3.128128E-01 | 1.655341E-01  | 3.227252E-02  |
| -3.989188E-01 | 2.285362E-01  | -4.845311E-02 | 1.195159E-01  |
| 4.190867E-01  | -8.394501E-02 | -8.547503E-02 | -2.047101E-01 |
| -3.979098E-01 | -8.426075E-02 | 1.866786E-01  | 1.767825E-01  |
| -3.461461E-01 | -2.345900E-01 | 2.213405E-01  | 5.256284E-02  |
| -2.833619E-01 | -3.379216E-01 | 1.840245E-01  | -1.013369E-01 |
| 2.162102E-01  | 3.705274E-01  | -8.930792E-02 | 2.032625E-01  |
| 1.441413E-01  | 3.275216E-01  | 3.566406E-02  | 2.064827E-01  |
| 8.021435E-02  | 2.475324E-01  | 1.661876E-01  | 1.234492E-01  |
| 4.612270E-02  | 2.315288E-01  | 3.781187E-01  | 2.737994E-03  |
| 3.654858E-02  | 2.384390E-01  | 4.965039E-01  | -7.228193E-02 |
| -2.317599E-02 | -1.799935E-01 | -4.291719E-01 | 1.107067E-01  |
| -1.138862E-02 | -1.040105E-01 | -2.795290E-01 | 1.191560E-01  |
| 5.263227E-03  | 5.480523E-02  | 1.616516E-01  | -1.130577E-01 |
| 1.813861E-03  | 2.162153E-02  | 7.065681E-02  | -1.189641E-01 |
| 6.310210E-04  | 8.965699E-03  | 3.419849E-02  | -1.914960E-01 |
| -2.966914E-04 | -5.223078E-03 | -2.414211E-02 | 3.137898E-01  |
| -1.659837E-04 | -3.529982E-03 | -1.906147E-02 | 3.889740E-01  |
| -8.588172E-05 | -2.175006E-03 | -1.345657E-02 | 3.814977E-01  |
| 4.192611E-05  | 1.243842E-03  | 8.660374E-03  | -3.171559E-01 |
| -1.877452E-05 | -6.498110E-04 | -5.058568E-03 | 2.320239E-01  |
| -8.249532E-06 | -3.255784E-04 | -2.775893E-03 | 1.510925E-01  |
| -2.900635E-06 | -1.295131E-04 | -1.201628E-03 | 7.654415E-02  |
| -8.939683E-07 | -4.513541E-05 | -4.562559E-04 | 3.432717E-02  |
| 2.676639E-07  | 1.593634E-05  | 1.818932E-04  | -1.757374E-02 |
| 1.269188E-07  | 8.654035E-06  | 1.084441E-04  | -1.244576E-02 |
| 4.753735E-08  | 3.597398E-06  | 4.826543E-05  | -6.232167E-03 |
| 7.148738E-09  | 6.020198E-07  | 8.666042E-06  | -1.264389E-03 |
| -1.320112E-09 | -1.234241E-07 | -1.902802E-06 | 3.125350E-04  |
| 2.040375E-10  | 2.123232E-08  | 3.513472E-07  | -6.532579E-05 |
| -3.776316E-11 | -4.475848E-09 | -8.094244E-08 | 1.762821E-05  |
| -1.281129E-11 | -1.684342E-09 | -3.258439E-08 | 7.938021E-06  |
| 1.121355E-12  | 1.594679E-10  | 3.262975E-09  | -8.944903E-07 |
| -9.841708E-14 | -2.344483E-11 | -5.939097E-10 | 1.823812E-07  |
| 3.594605E-14  | -4.207044E-13 | -7.250635E-11 | 2.552675E-08  |
| 2.868666E-14  | 1.890879E-12  | 2.235068E-11  | -9.083431E-09 |
| 3.976509E-14  | 1.697939E-12  | -7.798645E-12 | 3.575581E-09  |
| 6.883123E-14  | 3.499333E-12  | 1.368222E-12  | -6.754018E-10 |
| 9.951302E-14  | 5.163965E-12  | 1.662998E-13  | -5.609417E-11 |
| 9.155903E-14  | 4.740109E-12  | 8.666123E-14  | -1.491783E-11 |
| 7.015786E-14  | 3.506111E-12  | 4.678143E-14  | -7.073250E-13 |
| 5.869557E-14  | 2.871528E-12  | 3.680423E-14  | 8.869347E-14  |
| 6.716351E-14  | 3.335931E-12  | 4.316895E-14  | 1.483156E-13  |
| 6.646105E-14  | 3.297105E-12  | 4.263224E-14  | 1.444129E-13  |

## EIGENVECTORS

| 5             | 6             | 7             | 8             |
|---------------|---------------|---------------|---------------|
| 1.266306E-01  | -8.402012E-02 | -1.706093E-01 | 1.076679E-01  |
| 2.488415E-01  | -1.380970E-01 | -2.710732E-01 | 1.636270E-01  |
| -2.958716E-01 | 1.167251E-01  | 2.123598E-01  | -1.151278E-01 |
| 2.142918E-01  | -1.759731E-02 | -4.193106E-03 | -1.970355E-02 |
| -2.930610E-02 | -9.118381E-02 | -2.003070E-01 | 1.337214E-01  |
| -1.687380E-01 | 1.279834E-01  | 2.390738E-01  | -1.305952E-01 |
| 2.709557E-01  | -6.336983E-02 | -7.918772E-02 | 1.264428E-02  |
| -2.202227E-01 | -5.206459E-02 | -1.475147E-01 | 1.167775E-01  |
| -4.649378E-02 | -1.289097E-01 | -2.564619E-01 | 1.457561E-01  |
| 1.556733E-01  | -1.091793E-01 | -1.613931E-01 | 5.022687E-02  |
| -2.766511E-01 | 8.623771E-03  | -5.876127E-02 | 8.578515E-02  |
| -2.595083E-01 | -1.003473E-01 | -2.362608E-01 | 1.514508E-01  |
| -1.280891E-01 | -1.501511E-01 | -2.548625E-01 | 1.011233E-01  |
| 6.124064E-02  | -1.499147E-01 | -1.484113E-01 | -2.786251E-02 |
| 1.652766E-01  | -8.393875E-02 | -1.173526E-02 | -9.273975E-02 |
| -1.802039E-01 | -5.362926E-02 | -1.418900E-01 | 7.684702E-02  |
| -1.300451E-01 | -1.928519E-01 | -2.328494E-01 | -6.164622E-03 |
| 6.423023E-02  | 2.433246E-01  | 2.076145E-01  | 8.274692E-02  |
| -1.676116E-02 | 2.389028E-01  | 9.876074E-02  | 1.476884E-01  |
| -1.123062E-01 | 2.602575E-01  | -1.398239E-02 | 2.089848E-01  |
| 2.253959E-01  | -2.681273E-01 | 1.048099E-01  | -2.233495E-01 |
| 2.965854E-01  | -1.752565E-01 | 1.342963E-01  | -1.281016E-01 |
| 3.011347E-01  | 1.728667E-02  | 8.662347E-02  | 5.634509E-02  |
| -2.563949E-01 | -2.053127E-01 | 6.891721E-03  | -2.112855E-01 |
| 1.912610E-01  | 3.303781E-01  | -1.063558E-01 | 2.705973E-01  |
| 1.262992E-01  | 3.396443E-01  | -1.599515E-01 | 2.041110E-01  |
| 6.480674E-02  | 2.671405E-01  | -1.751744E-01 | 4.262938E-02  |
| 2.947700E-02  | 2.090602E-01  | -1.945835E-01 | -1.418384E-01 |
| -1.542464E-02 | -2.304727E-01 | 2.845950E-01  | 3.936409E-01  |
| -1.107432E-02 | -2.323872E-01 | 3.098239E-01  | 4.780837E-01  |
| -5.595029E-03 | -1.431482E-01 | 1.983796E-01  | 3.222898E-01  |
| -1.145700E-03 | -3.609955E-02 | 5.212990E-02  | 8.948496E-02  |
| 2.857465E-04  | 1.099851E-02  | -1.651976E-02 | -2.988835E-02 |
| -6.029556E-05 | -2.885927E-03 | 4.533383E-03  | 8.721951E-03  |
| 1.647377E-05  | 1.061525E-03  | -1.777677E-03 | -3.738401E-03 |
| 7.480813E-06  | 5.796548E-04  | -1.005563E-03 | -2.215246E-03 |
| -8.505183E-07 | -8.033683E-05 | 1.448420E-04  | 3.358431E-04  |
| 1.749014E-07  | 1.994522E-05  | -3.729481E-05 | -9.075944E-05 |
| 2.473974E-08  | 3.621352E-06  | -7.141886E-06 | -1.872011E-05 |
| -8.902724E-09 | -1.695768E-06 | 3.534019E-06  | 9.992636E-06  |
| 3.535359E-09  | 8.184034E-07  | -1.771209E-06 | -5.265048E-06 |
| -6.735457E-10 | -1.870098E-07 | 4.190094E-07  | 1.303649E-06  |
| -5.670405E-11 | -1.948785E-08 | 4.554947E-08  | 1.499346E-07  |
| -1.536490E-11 | -6.322681E-09 | 1.529554E-08  | 5.266259E-08  |
| -8.798090E-13 | -4.337672E-10 | 1.088277E-09  | 3.918116E-09  |
| -3.169887E-14 | -1.951598E-11 | 5.274421E-11  | 1.985440E-10  |
| 5.394467E-15  | 2.464233E-12  | -3.752192E-12 | -1.492630E-11 |
| 3.429456E-15  | 1.112921E-12  | -1.917100E-13 | -9.577439E-13 |

$C_i$  の間の直交性のくずれる様子 (48次元)

$Z_{21} = 10^{-10}$  としたときの  $Z_{ij}$  ( $= C_i \cdot C_j$ ) の値

|    | 1        | 2        | 3        | 4        | 5        | 6        |
|----|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| 2  | 1.0E-10  |          |          |          |          |          |
| 3  | 0.0E-40  | -8.2E-11 |          |          |          |          |
| 4  | -1.6E-10 | -4.3E-17 | 7.7E-11  |          |          |          |
| 5  | -7.2E-17 | 3.2E-11  | -5.9E-17 | -7.5E-11 |          |          |
| 6  | 1.8E-10  | -2.5E-17 | -1.2E-10 | -1.3E-16 | 7.4E-11  |          |
| 7  | -3.5E-17 | -7.0E-12 | 3.0E-17  | 3.4E-11  | -2.5E-16 | -7.3E-11 |
| 8  | -1.8E-10 | 2.6E-17  | 1.4E-10  | -9.7E-17 | -1.1E-10 | -2.9E-16 |
| 9  | 9.0E-18  | 1.8E-12  | -1.4E-16 | -7.7E-12 | -1.4E-17 | 3.5E-11  |
| 10 | 1.9E-10  | -1.5E-16 | -1.5E-10 | -5.5E-17 | 1.4E-10  | 3.4E-17  |
| 11 | 2.5E-17  | -7.3E-13 | -9.4E-17 | 2.6E-12  | -8.0E-17 | -7.5E-12 |
| 12 | -1.9E-10 | 8.1E-17  | 1.6E-10  | -1.2E-16 | -1.5E-10 | -2.5E-16 |
| 13 | 4.1E-17  | 1.1E-12  | -3.4E-17 | -8.8E-13 | -1.2E-16 | -3.6E-13 |
| 14 | 2.7E-10  | -1.1E-16 | -2.2E-10 | -7.4E-17 | 2.1E-10  | -3.5E-16 |
| 15 | -2.3E-16 | 1.2E-13  | 6.5E-17  | -3.4E-12 | -6.8E-16 | -2.4E-12 |
| 16 | -2.8E-10 | 6.7E-19  | 2.2E-10  | -5.4E-16 | -2.2E-10 | -7.1E-16 |
| 17 | 3.0E-16  | -5.0E-12 | -9.1E-16 | -1.6E-12 | -3.9E-16 | -1.1E-12 |
| 18 | 2.7E-10  | -7.6E-16 | -2.2E-10 | -1.1E-15 | 2.1E-10  | -1.7E-15 |
| 19 | -1.3E-15 | -4.7E-12 | -1.5E-15 | -8.2E-12 | -4.6E-15 | 9.7E-12  |
| 20 | -2.9E-10 | -3.3E-15 | 2.2E-10  | -9.4E-15 | -2.2E-10 | -1.5E-14 |
| 21 | -3.8E-15 | -2.1E-11 | -1.6E-14 | -9.8E-12 | -3.3E-14 | -2.5E-10 |
| 22 | 2.2E-10  | -1.7E-14 | -2.1E-10 | -4.8E-14 | -1.3E-10 | -7.6E-14 |
| 23 | -1.2E-14 | -1.6E-11 | -6.1E-14 | -4.0E-10 | -1.2E-13 | -8.2E-10 |
| 24 | -2.3E-10 | -6.2E-14 | -2.9E-10 | -1.3E-13 | -1.4E-09 | -1.8E-13 |
| 25 | -8.6E-14 | -6.0E-10 | -2.3E-13 | -1.9E-09 | -5.0E-13 | -3.3E-09 |
| 26 | -3.7E-10 | -2.0E-13 | -2.9E-09 | -5.0E-13 | -5.6E-09 | -6.8E-13 |
| 27 | 5.1E-15  | -4.0E-09 | 3.0E-13  | -1.1E-08 | 8.0E-13  | -1.8E-08 |
| 28 | -4.9E-09 | 9.1E-14  | -2.2E-08 | 7.6E-13  | -4.6E-08 | 2.0E-12  |
| 29 | -9.1E-12 | -4.7E-08 | -4.1E-11 | -1.3E-07 | -8.2E-11 | -2.1E-07 |
| 30 | -4.1E-08 | -9.9E-11 | -2.0E-07 | -2.7E-10 | -4.0E-07 | -4.3E-10 |
| 31 | -8.1E-11 | -2.5E-07 | -3.9E-10 | -6.8E-07 | -7.8E-10 | -1.1E-06 |
| 32 | -5.5E-07 | -9.9E-10 | -2.6E-06 | -2.7E-09 | -5.2E-06 | -4.2E-09 |
| 33 | -1.8E-10 | -7.8E-06 | -8.2E-10 | -2.2E-05 | -1.5E-09 | -3.4E-05 |
| 34 | -1.9E-05 | 1.3E-08  | -9.3E-05 | 3.6E-08  | -1.8E-04 | 5.7E-08  |
| 35 | 2.2E-07  | -3.0E-04 | 1.0E-06  | -8.4E-04 | 2.1E-06  | -1.3E-03 |
| 36 | -3.4E-04 | 7.1E-06  | -1.6E-03 | 1.9E-05  | -3.2E-03 | 3.0E-05  |
| 37 | 1.4E-06  | -9.5E-03 | 6.7E-06  | -2.6E-02 | 1.3E-05  | -4.0E-02 |
| 38 | -2.4E-02 | -1.2E-04 | -1.1E-01 | -3.4E-04 | -2.2E-01 | -5.3E-04 |
| 39 | -3.7E-05 | -6.4E-01 | -1.7E-04 | -1.7E+00 | -3.4E-04 | -2.7E+00 |
| 40 | -1.1E+00 | 5.5E-03  | -5.0E+00 | 1.5E-02  | -9.8E+00 | 2.3E-02  |
| 41 | 1.7E-02  | -9.0E+00 | 8.0E-02  | -2.5E+01 | 1.6E-01  | -3.8E+01 |
| 42 | -2.2E+01 | -1.6E-02 | -1.0E+02 | -4.4E-02 | -2.1E+02 | -6.7E-02 |
| 43 | 6.5E-02  | -9.2E+02 | 3.1E-01  | -2.5E+03 | 6.1E-01  | -3.8E+03 |
| 44 | -1.7E+03 | 1.6E+01  | -8.2E+03 | 4.3E+01  | -1.6E+04 | 6.6E+01  |
| 45 | -1.1E+01 | -1.1E+05 | -5.1E+01 | -3.0E+05 | -9.9E+01 | -4.5E+05 |
| 46 | -1.4E+06 | 7.2E+03  | -6.7E+06 | 2.0E+04  | -1.3E+07 | 3.0E+04  |
| 47 | -1.8E+04 | -8.0E+07 | -8.6E+04 | -2.2E+08 | -1.7E+05 | -3.3E+08 |
| 48 | -5.7E+08 | 2.2E+06  | -2.7E+09 | 6.0E+06  | -5.3E+09 | 9.1E+06  |

## 48次元行列についての計算時間と精度

| 打切った<br>次元数 | 計算時間<br>(秒) | 4桁以上正確な<br>固有値の個数 | 7桁まで正確な<br>固有値の個数 |
|-------------|-------------|-------------------|-------------------|
| 16          | 0.556       | 1                 | 0                 |
| 20          | 0.801       | 2                 | 1                 |
| 24          | 1.139       | 3                 | 2                 |
| 28          | 1.510       | 5                 | 3                 |
| 32          | 1.890       | 5                 | 3                 |
| 36          | 2.379       | 10                | 6                 |
| 40          | 2.757       | 10                | 9                 |
| 44          | 3.171       | 10                | 9                 |
| 48          | 3.645       | 10                | 10                |

三重対角化(48次元まで)に要する時間

再直交化なしのLanczos法 --- 0.330 秒

Householder法 ----- 1.304 秒

(注) 計算時間は、HITAC 5020E によるものである。

計算は単精度(10進約7桁)で行った。



## 三重対角行列を途中で切った時の固有値 (1200次元)

## EIGENVALUES 50

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.979438E+00 | 7.945601E+00 | 7.898290E+00 | 7.838076E+00 |
| 7.764627E+00 | 7.677313E+00 | 7.576087E+00 | 7.461557E+00 |
| 7.334570E+00 | 7.195877E+00 | 7.046027E+00 | 6.885442E+00 |
| 6.714561E+00 | 6.533927E+00 | 6.344196E+00 | 6.146093E+00 |
| 5.940381E+00 | 5.727842E+00 | 5.509275E+00 | 5.285499E+00 |
| 5.057348E+00 | 4.825681E+00 | 4.591374E+00 | 4.355324E+00 |
| 4.118447E+00 | 3.881552E+00 | 3.644678E+00 | 3.408627E+00 |
| 3.174320E+00 | 2.942653E+00 | 2.714502E+00 | 2.490725E+00 |

## EIGENVALUES 100

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.983871E+00 | 7.966297E+00 | 7.953120E+00 | 7.936152E+00 |
| 7.905320E+00 | 7.886107E+00 | 7.859521E+00 | 7.821275E+00 |
| 7.796692E+00 | 7.756628E+00 | 7.711367E+00 | 7.678590E+00 |
| 7.623764E+00 | 7.568158E+00 | 7.523831E+00 | 7.462747E+00 |
| 7.392778E+00 | 7.337746E+00 | 7.272200E+00 | 7.189516E+00 |
| 7.120242E+00 | 7.051835E+00 | 6.962836E+00 | 6.875787E+00 |
| 6.803711E+00 | 6.712053E+00 | 6.611206E+00 | 6.526758E+00 |
| 6.438013E+00 | 6.328957E+00 | 6.226829E+00 | 6.138838E+00 |

## EIGENVALUES 150

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.983871E+00 | 7.966300E+00 | 7.953192E+00 | 7.937147E+00 |
| 7.935634E+00 | 7.909934E+00 | 7.905809E+00 | 7.895648E+00 |
| 7.883447E+00 | 7.863098E+00 | 7.849654E+00 | 7.819713E+00 |
| 7.811490E+00 | 7.781330E+00 | 7.754756E+00 | 7.733853E+00 |
| 7.697213E+00 | 7.668707E+00 | 7.634017E+00 | 7.605728E+00 |
| 7.571865E+00 | 7.544031E+00 | 7.493366E+00 | 7.461039E+00 |
| 7.422920E+00 | 7.374980E+00 | 7.334014E+00 | 7.287416E+00 |
| 7.238388E+00 | 7.182890E+00 | 7.146413E+00 | 7.084673E+00 |

## EIGENVALUES 200

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.983871E+00 | 7.983871E+00 | 7.966300E+00 | 7.966268E+00 |
| 7.953192E+00 | 7.937130E+00 | 7.935621E+00 | 7.906451E+00 |
| 7.902410E+00 | 7.896531E+00 | 7.884840E+00 | 7.865850E+00 |
| 7.855654E+00 | 7.844602E+00 | 7.831698E+00 | 7.814614E+00 |
| 7.785105E+00 | 7.773705E+00 | 7.761395E+00 | 7.745688E+00 |
| 7.723695E+00 | 7.698375E+00 | 7.684196E+00 | 7.656798E+00 |
| 7.629745E+00 | 7.609845E+00 | 7.593400E+00 | 7.555435E+00 |
| 7.541648E+00 | 7.498270E+00 | 7.470161E+00 | 7.443930E+00 |

## EIGENVALUES 250

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.983871E+00 | 7.983871E+00 | 7.979027E+00 | 7.966300E+00 |
| 7.966300E+00 | 7.953192E+00 | 7.953188E+00 | 7.937130E+00 |
| 7.935621E+00 | 7.927541E+00 | 7.906451E+00 | 7.902411E+00 |
| 7.896532E+00 | 7.884840E+00 | 7.865853E+00 | 7.855670E+00 |
| 7.844744E+00 | 7.832047E+00 | 7.815003E+00 | 7.814097E+00 |
| 7.785238E+00 | 7.781523E+00 | 7.763185E+00 | 7.750157E+00 |
| 7.743711E+00 | 7.724574E+00 | 7.702663E+00 | 7.694293E+00 |
| 7.678197E+00 | 7.655341E+00 | 7.629263E+00 | 7.613949E+00 |

## EIGENVALUES 300

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.983871E+00 | 7.983871E+00 | 7.983871E+00 | 7.966300E+00 |
| 7.966300E+00 | 7.965684E+00 | 7.953192E+00 | 7.953192E+00 |
| 7.937130E+00 | 7.935625E+00 | 7.935621E+00 | 7.906667E+00 |
| 7.906451E+00 | 7.902411E+00 | 7.896532E+00 | 7.884840E+00 |
| 7.873828E+00 | 7.865853E+00 | 7.855670E+00 | 7.844744E+00 |
| 7.832047E+00 | 7.815042E+00 | 7.814150E+00 | 7.811080E+00 |
| 7.785306E+00 | 7.782065E+00 | 7.763282E+00 | 7.751327E+00 |
| 7.744497E+00 | 7.725329E+00 | 7.710367E+00 | 7.700906E+00 |

## TRUE EIGENVALUES

|              |              |              |              |
|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 7.983871E+00 | 7.966300E+00 | 7.953192E+00 | 7.937130E+00 |
| 7.935621E+00 | 7.906451E+00 | 7.902411E+00 | 7.896532E+00 |
| 7.884840E+00 | 7.865853E+00 | 7.855670E+00 | 7.844744E+00 |
| 7.832047E+00 | 7.815072E+00 | 7.814477E+00 | 7.814066E+00 |
| 7.785307E+00 | 7.782070E+00 | 7.763284E+00 | 7.751391E+00 |
| 7.744709E+00 | 7.742826E+00 | 7.725255E+00 | 7.708879E+00 |
| 7.700610E+00 | 7.696085E+00 | 7.692922E+00 | 7.678200E+00 |
| 7.655487E+00 | 7.635659E+00 | 7.630247E+00 | 7.627419E+00 |
| 7.625598E+00 | 7.618089E+00 | 7.603699E+00 | 7.594919E+00 |
| 7.588919E+00 | 7.557055E+00 | 7.548321E+00 | 7.544138E+00 |
| 7.541025E+00 | 7.532718E+00 | 7.511648E+00 | 7.502039E+00 |
| 7.496532E+00 | 7.494078E+00 | 7.473775E+00 | 7.467834E+00 |
| 7.464908E+00 | 7.451258E+00 | 7.433859E+00 | 7.430782E+00 |
| 7.424310E+00 | 7.400104E+00 | 7.384553E+00 | 7.380895E+00 |
| 7.372521E+00 | 7.372066E+00 | 7.360667E+00 | 7.354495E+00 |
| 7.349322E+00 | 7.325325E+00 | 7.320391E+00 | 7.309848E+00 |

## 1200次元行列についての計算時間と精度

| 打切った<br>次元数 | 計算時間<br>(秒) | 5桁以上正確な<br>固有値の個数 | 7桁まで正確な<br>固有値の個数 |
|-------------|-------------|-------------------|-------------------|
| 50          | 2.779       | 0                 | 0                 |
| 100         | 4.978       | 3                 | 1                 |
| 150         | 6.915       | 5                 | 3                 |
| 200         | 8.520       | 11                | 9                 |
| 250         | 9.924       | 14                | 13                |
| 300         | 10.561      | 14                | 13                |

300次元まで三重対角化する計算時間

再直交化なしのLanczos法 --- 52.294 秒

(注) 固有値は, 32個ずつ計算した。