数理解析研究所講究録
第585巻 1986年 275-293

ランチョス法その後

筑波大 電子情報工学系 名取 亮
(Makoto Natori)

慶應義塾大 数理科学科 野寺 隆
(Takashi Nodera)

1．はじめに

髙橋・名取 [12] の論文のもとは，1970年11月に数理解析研究所の研究集会「数値計算のアルゴリズムの研究」で発表したもので，講究録は，翌1971年 4月に発行された。この研究は，1969年に東京大学大型センターで主催した「大次元行列の計算に関するシンポジウム」において，法政大学の瀬部先生がランチョス法による三重対角化を途中でやめても，最大・最小の固有値からいくつか（外側の固有値）は精度よく求まるという講演をされ，髙橋先生がそれに興味を持たれたのがきっかけであった。この論文では，（1）再直交化なしでも外側の固有値は正確に求まること，（2）直交性の崩れがどう伝播するかを調べ，直交性の崩れと固有値の収束が対応することを述べた。1971年，Paige がPh.D論文［5］でランチョス法の誤差解析を行い，その結果の一部が1972年と1976年に雑誌（ Paige [6, 7］）に発表された。その後， Parlett &Scott ［8］は，選択的直交化を提案し，Parlett [15] で，直交性の崩れをどうして検出するかを述べた。一方，Cullum& Willoughby［4］は，中間の固有値および固有ベクトルを求める時にも再直交化をせずに三重対角化を続行する方法を提案した。その場合，“偽の固有値”をどう見分けるかが，重要なポイントとなる。この方法に対して，髙橋 [14] は再直交化をおこなわないランチョス3重対角行列をどこで終了したらよいかという重要な問題点に対して，物理的な直感をもとにした重要なコメントを与えている。前者については，1980年のParlett ［2］の本に，後者については，Cullum&Willoughby［3］の本に詳しい。 近年，Parlett と彼のファミリーは，直交性の崩れに関する髙橋・名取 [12] の論文を拡張した様々な理論の展開を発表している。特に，Simon [10, 11] は，髙橋，名取 [12] の直交性の崩れに関する漸化式をモニターすることで，再直交化の時期を判断し，部分的に直交性が崩れていると思われるランチョス・ベクトルのみについて再直交化する部分的な再直交化を提案している。また，ランチョス法とCG法の直交性に関するデータフローを用いた物理的な解説

が高橋・野寺［13］にある。

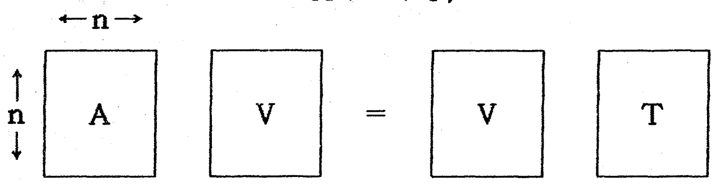
2．ランチョス法

固有値問題：

$$Ay=\lambda y, \tag{2.1}$$

に対するランチョス法は，n×nの対称行列Aを直交変換により

$$AV=VT, \tag{2.2}$$



のように変換して，3重対角行列Tを構成する方法である。即ち，適当なv_1から出発し

$$\left\{\begin{aligned} &\alpha_j=v_j^T A v_j, \\ &A v_j=\beta_{j-1} v_{j-1}+\alpha_j v_j+\beta_j v_{j+1}, \\ &\| v_j \|=1,\quad V^T V=I, \end{aligned}\right. \tag{2.3}$$

を満たすように，α_j，β_jを決定する方法である。

現在，最もよく用いられている対称なn×n行列Aに対する固有値問題のランチョスの算法は，Paige ［5,6］の論文の中で述べられているものである。

〔ランチョスの算法（Paige （1972）〕

（1）任意のベクトルv_1（$\| v_1 \|=1$）を選び$u_1=Av_1$を計算する。

（2）次の操作を繰り返し，α_jとβ_jを計算する。（j=1,2,3,…）

$$\alpha_j=u_j^T v_j, \tag{2.4a}$$

$$r_j=u_j-\alpha_j v_j, \tag{2.4b}$$

$$\beta_j=\| r_j \|, \tag{2.4c}$$

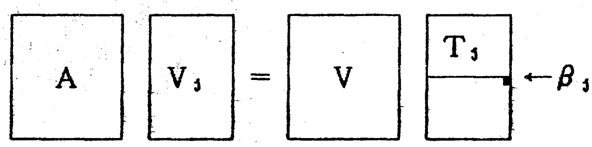
$$v_{j+1}=r_j/\beta_j, \tag{2.4d}$$

$$u_{j+1}=Av_{j+1}-\beta_j v_j. \tag{2.4e}$$

この（2）の操作をランチョス・ステップと呼び，これを1つの式で表すと

$$\beta_j v_{j+1}=Av_j-\alpha_j v_j-\beta_{j-1} v_{j-1} \tag{2.5}$$

となり，次のような行列形式で書くことができる。



$$= \boxed{V_j} \; \boxed{T_j} + \boxed{\;0\; \big| \; *} \leftarrow \beta_j \; v_{j+1}$$

$$A V_j - V_j T_j = \beta_j v_{j+1} e_j^T, \tag{2.6}$$

ただし，$V_j = (v_1, v_2, \cdots, v_j)$，$e_j^T = (0, 0, \cdots, 1)$，そして

$$T_j = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \cdot & \cdot \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \beta_{j-2} & \alpha_{j-1} & \beta_{j-1} \\ \cdot & \cdot & 0 & \beta_{j-1} & \alpha_j \end{bmatrix}. \tag{2.7}$$

ベクトルv_jは，正規直交ベクトルであるので，

$$V_j^T V_j = I_j \tag{2.8}$$

を満足する。ただし，I_jは$j \times j$の単位行列である。

この算法は，丸め誤差の影響を受けなければ，$\beta_j = 0$（$\exists j \leq n$）で終了することになる。三重対角行列T_jの固有値を$\{\theta_i\}_{i=1}^{j}$とし，その固有ベクトルを$\{s_i\}_{i=1}^{j}$としよう。T_jの固有値は，Ritz値とも呼ばれ，ベクトル$v_1, v_2, \cdots v_j$で張られた部分空間におけるAの固有値のRayleigh-Ritz 近似である。さらに，$y_i = V_j s_i$（$i = 1, 2, \cdots j$）をRitzベクトルと言う。

現在の電子計算機のように有限桁の計算でランチョス法を実行する場合，当然，丸め誤差のことを考えなければならないので，(2.6) と (2.8) 式は次のように修正される。

$$A V_j - V_j T_j = \beta_j v_{j+1} e_j^T + F_j \tag{2.9}$$

$$V_j^T V_j = I_j - H_j \tag{2.10}$$

ただし，F_jとH_jは，丸め誤差の行列である。ここで，(2.6) 式がほぼ満足されているにもかかわらず（$\| F_j \|$が小さい），ランチョス・ベクトル間の直交性が完全に崩れる場合があることも事実である（$\| H_j \| \geq 1$）。

Paige［6］は，実際にRitzベクトルを計算せずに，残差ノルム$\| A y_i - y_i \theta_i \|$を計算することで，jステップにおけるランチョス法の収束性をモニターすることを提案した。それは，次の事実に基づいている。

(2.6) 式に右からs_iを掛けると次の式が得られる。

$$A V_j s_i - V_j T_j s_i = \beta_j v_{j+1} e_j^T s_i \tag{2.11}$$

となり，Ritzベクトルの定義より，$y_i = V_j s_i$ を代入し，整理すると次の式が得られる。

$$A y_i - V_j s_i \theta_i = \beta_j \sigma_{ji} v_{j+1}$$

$$A y_i - y_i \theta_i = \beta_j \sigma_{ji} v_{j+1} \qquad (2.12)$$

ただし，σ_{ji} $(= e_j{}^T s_i)$ は，Ritz値 θ_i に対する固有ベクトル s_i の第 j 成分である。ここで，(2.12) 式のノルムをとれば，次のようになる。

$$\| A y_i - y_i \theta_i \| = \beta_j \; | \sigma_{ji} | \equiv \boxed{\beta_{ji}} \longleftarrow \text{小なら}\theta_i\text{は収束} \qquad (2.13)$$

ランチョス法は，通常，(2.9) 式を満足するが，幸いなことに，実際の計算では，$\| F_j \|$ は常に小さい場合が多い。よって，β_{ji} は小さな3重対角行列を解くことによって計算することが可能で，その計算量も少なく，Ritzベクトルの残差ノルムを正確に予測できる。しかし，ランチョス法が生成するランチョス・ベクトル間の線形独立性の崩れが，$\| y \| << 1$ となるRitzベクトルを生成する。こんな場合に，固有値の正確な予測に β_{ji} を利用できない恐れがある。Paige ［7］の解析によれば，$\| y \| << 1$ は，行列Aの同じ固有値を近似するすべてのRitz値が集積している場合にのみ起こる。しかし，その集積したRitz値のなかで，少なくとも1つ $\| y \| \fallingdotseq 1$ となるRitzベクトルが存在するならば，そのようなRitz値の集積は，常に計算機の演算精度まで収束するのである。即ち，Paige ［6］の最も重要な事柄は，次のような収束性と直交性の崩れの関係を見つけたことであった。

$$\begin{bmatrix} \text{Ritz値} \\ \text{Ritzベクトル} \end{bmatrix} \text{の収束} \quad \Longleftrightarrow \quad \begin{bmatrix} \text{ランチョス・ベクトルの} \\ \text{直交性の崩れ} \end{bmatrix}$$

ここで，実際の計算で零となる $V_j{}^T v_{j+1}$ をモニターすることは，興味のあることである。v_{j+1} に関してRitzベクトルとの内積を考えると次のようになる。

$$S_j{}^T V_j{}^T v_{j+1} = Y_j{}^T v_{j+1} \qquad (2.14)$$

Paige [5,7] によれば，

$$| y_i{}^T \beta_j v_{j+1} | \cdot | \sigma_{ji} | = \gamma_{ji} \qquad (2.15)$$

ただし，$\gamma_{ji} \fallingdotseq \varepsilon \| A \|$ である。また，(2.15) 式は，次式のように書き直すことができる。

$$y_i{}^T v_{j+1} = \gamma_{ji} / \beta_{ji} \qquad (2.16)$$

ただし，β_{ji} は演算の精度 ε に対する y_i の残差ノルムであることは明らかである。よ

って，直交性は，Ritzベクトルの収束する方向でのみ崩れることになる。即ち，$y_i{}^T v_{j+1}$ の値が大のとき，v_{j+1} と v_1，v_2，…，v_j の直交性が崩れることになる。また，Ritzベクトルの線形独立性が崩れるのは，第2のRitzベクトルが最初のものに平行に現れた場合にのみ起こることになる。即ち，第2のRitzベクトルは，（$\beta_{j\ i}$ をほぼ $\sqrt{\varepsilon}\,\|A\|$ 程度に）最初のRitzベクトルを固有ベクトルから摂動させるが，その後，この2つのベクトルは第3のRitzベクトルのコピーが出現するまでともに収束することになる（$\beta_{j\ i} \fallingdotseq \varepsilon\,\|A\|$）。よって，ランチョス法は，望ましい全ての固有値が収束するまで，即ち線形独立性の崩れを過ぎるまで反復を行うのが望ましいことになる。しかし，この方法で十分精度の良い固有値を計算することができるが，残念なことに偽の固有値が現れることになり，これを見分ける必要が生まれてくる。上記の結果をまとめると次のようになる。

（i）外側の固有値は，（経験的に言って）小さな j（$\sim 2\sqrt{n}$）で収束する。

（ii）更に続けると，ランチョス・ベクトルv_j 間の直交性が崩れるため，収束した固有値が重複して現れる。

（iii）偽の固有値が現れる。

3．直交性の崩れ

高橋，名取［12］は，ランチョス法が生成するランチョス・ベクトルの直交性の崩れの伝播に関して，重要な漸化式を与えたが，近年，Simon ［10］はそれについて次のような詳しい解析をおこなった。

$\omega_{i\ k} = v_i{}^T v_k$　とおけば，$\omega_{i\ k}$ は，次の漸化式を満足する。

$$
\begin{aligned}
&\omega_{k\ k} = 1, \quad k = 1, \cdots, j \\
&\omega_{k\ k-1} = \phi_k, \quad k = 2, \cdots, j \qquad\qquad (3.1) \\
&\omega_{j+1\ k} = 1/\beta_j \cdot [\ \beta_k\,\omega_{j\ k+1} + (\alpha_k - \alpha_j)\,\omega_{j\ k} \\
&\qquad\qquad + \beta_{k+1}\,\omega_{j\ k-1} - \beta_{j-1}\,\omega_{j-1\ k}\ ] + \phi_{j\ k}, \quad 1 \leq k \leq j
\end{aligned}
$$

ただし，$\omega_{j\ k+1} = \omega_{k+1\ j}$，$\omega_{k\ 0} = 0$．また，$\phi_k$，$\phi_{j\ k}$ は，ある適当な乱数である。Simon ［10］の統計的な解析によれば，ϕ_k，$\phi_{j\ k}$ は次式のようになる。

$$
\begin{aligned}
&\phi_k = \varepsilon\, n \frac{\beta_1}{\beta_j} \Psi, \quad \Psi \in N\,(0,\ 0.6) \\
& \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad (3.2) \\
&\phi_{j\ k} = \varepsilon\,(\beta_k + \beta_j)\,\Phi, \quad \Phi \in N\,(0,\ 0.3)
\end{aligned}
$$

ただし，Nは正規乱数である。

また，再直交化を行った後では，$v_{j+1}{}^T v_j$ は，零にリセットされるので，これら上記の値は丸め誤差のレベルになると推測され，

$$\omega_{j+1\ k} \in N(0,\ 1.5)\ \varepsilon$$

となる。

4. 再直交化

ランチョス法の算法を続けていくと，当然のことながらランチョス・ベクトル間の直交性が崩れてゆくことになる。そこで，以前から行われてきたのは，計算した全てのランチョス・ベクトルをグラム・シュミット法によって，再直交化し，各々のベクトルの間の直交性を保持することであった。しかし，この操作には，多大なる計算時間を必要とし，また，過去に計算したランチョス・ベクトルを全て記憶しなければならず，あまり良い方法とは言えない。近年の研究によれば，この操作を全てのベクトルについて行う必要はないことも明らかにされてきた。4.1 節では，再直交化法の中で，準直交化（semiorthogonalization ）といわれるものについて述べることにする（Simon [11] ）。

また一方では，ランチョス・ベクトルの間の直交性が崩れても，再直交化などを全然考えず，３重対角化をどんどん続行する方法もある。この操作で，行列Ａの全固有値を計算することも可能であるが，３重対角行列T_j の次数が大きくなればなる程，端の固有値が何重にも重複して現れたり，偽の固有値が多数現れることになる。よって，得られた固有値の中から，正しい固有値を見つけ出す操作を必要とする。この手法について4.2 節で述べることにする。

4.1 再直交化あり

再直交化法の目的は，ランチョス・ベクトルの間の直交関係を保つことになる。即ち，各々のベクトルの間の直交性の崩れをある程度までに抑えることにある。ｊステップでのランチョス・ベクトルの間の直交性のレベルを次のように定義する。

$$\kappa_j = \max_{1 \leq k \leq j-1} |v_j{}^T v_k|$$

もし生成されたランチョス・ベクトルに対して，$\kappa_j \fallingdotseq \varepsilon$（演算の精度）を保つためには完全再直交化を行う以外に方法はない。

（１）完全再直交化：FOR (Full Reorthogonalization)

$$r_j' \equiv \beta_j' v_{j+1}' = A v_j - \alpha_j v_j - \beta_{j-1} v_{j-1} - f_j' \qquad (4.2a)$$

$$r_j \leftarrow r_j' - \sum_{k=1}^{j} (r_j'{}^T v_k) v_k$$

これは，各ランチョス・ステップにおいて以前の v_j 全てに対して新しい v'_{j+1} を直交化させる方法である。明らかに，この方法によれば，ランチョス・ベクトル間の直交性の崩れを丸め誤差のレベルに抑えることができる。しかし，完全再直交化法の計算量はステップが進むに従って，膨大なものになるのであまりおすすめできる手法ではない。

Parlett and Scott ［8］は，各々のランチョス・ベクトルに $\kappa_j \fallingdotseq \varepsilon$ が成立していなくても，第2のRitzベクトルのコピーが現れる前に $\kappa_j = \sqrt{\varepsilon}$ の準直交性が成立していれば，正しい固有値が得られることを報告している。よって，次にあげる2つの算法が得られることになる。

（2）部分的直交化：PRO （Partial Reorthogonalization —Simon （1984））

この方法は，Simon ［10］により提案された方法で，言うなれば，（1）の手法のように再直交化を全てのランチョス・ベクトルについて行うのでなく，直交性が崩れていると思われるランチョス・ベクトルを（3.1）式の漸化式で $\omega_{j+1\ k}$ をモニターすることで見つけ，それに対して次の手順で部分的に再直交化するものである。

（i）ランチョスの算法を実行する。

$$r'_j \equiv \beta'_j v'_{j+1} = A v_j - \alpha_j v_j - \beta_{j-1} v_{j-1} - f'_j \qquad (4.3)$$

（ii）$v'^{T}_{j+1} v_k$ （$k=1, 2, \cdots, j$）に対して，$\omega_{j+1\ k}$ を（3.1）の漸化式を利用して計算する。

（iii）$\omega_{j+1\ k}$ からの情報に基づいて，$L(j) = \{k \mid 1 \leqq k \leqq j,\ \omega_{j+1\ k} > \sqrt{\varepsilon}\}$ を決定し，再直交化する。

$$r_j \leftarrow r'_j - \sum_{k \in L(j)} (r'^{T}_j v_k) v_k \qquad (4.4)$$

（3）選択的直交化：SO（Selective Orthogonalization — Parllet&Scott （1979））

（i）ランチョスの算法を実行する。

$$r'_j \equiv \beta'_j v'_{j+1} = A v_j - \alpha_j v_j - \beta_{j-1} v_{j-1} - f'_j \qquad (4.5)$$

（ii）$L(j) = \{k \mid 1 \leqq k \leqq j,\ \beta_{j\ k} < \sqrt{\varepsilon}\}$ を決定する。

（iii）$L(j)$ に対して，$y_k^{(j)} = V_j s_k$ を計算し，次のランチョス・ベクトルを計算する。ただし，$L(j) = \phi$ のときは，この計算は行わない。

$$r_j \leftarrow r'_j - \sum_{k \in L(j)} (r'^{T}_j y_k^{(j)}) y_k^{(j)} \qquad (4.6)$$

この手法は，（2.16）式の情報を利用することなく，繰り返し現れるRitzベクトルのコピーを抑制する手法として，収束したRitzベクトルとのみ直交化する方法である。（2.16）

式が，この方法の必要とする考え方の理論的な正当性を与えている。

4.2 再直交化なし

再直交化を行わないで，求めたい固有値が全て求まれば最良なことなのであるが，ランチョス・ベクトルの直交性の崩れから，両端の固有値が重複したり，偽の固有値が現れたりしてなかなかうまく求まらないこともよく知られている。しかし，Cullum&Willoughby［4］は，再直交化を行わなくても全ての固有値と固有ベクトルが求まることをいくつかの実例で示した。その方法は，3重対角化を行列の次元よりもさらに続行し，より大きなT_j（j＞＞n）を作り，ＱＲ法やＱＬ法を用いて全部の固有値を計算し，正しい固有値を判別するというものである。しかし，この方法には，下記の問題点があることを高橋［14］は指摘している。

（i）j を十分に大きくすれば，必ず全ての固有値が求まるという保証がない。

（ii）j をどの程度にとればよいか事前に知ることができない。

（iii）3 重対角化した行列T_jの固有値には，多くの偽の固有値が含まれているのでそれらを見分けて取り除く必要がある。

（iv）見掛け上の重根と真の近接根との区別が難しい。

（v）異なる固有値が全部で何個あるかを事前に知ることができないから，実際に3重対角化によって得られた行列T_jの固有値がもとの行列Aの全ての固有値であるという保証が得られない。

（iii）と（iv）の問題点に関して，Cullum&Willoughby［4］は，高精度計算を用いて繰り返し現れる固有値や，偽の固有値を見分ける方法を提案した。しかし，この方法の最大の難点は，ランチョス3重対角化をどこで終了させるかという点にある。経験的に，ｊ＝ｃｎ（ｃ＝2～5）と言われているが，固有値が縮重しているような場合には，ｊ≧10ｎという場合もあり，ｎが十分大きい場合には，この時の3重対角行列の固有値の計算には，膨大な計算時間を必要とする。この点に関して，高橋［14］は，適切なｊを決定する算法と物理的な考察を与えている。また，Parlett &Reid［9］は，Tracking法（T_jの次数を増やしながら，Ritz値の収束していく状況を追跡し，収束したRitz値を取り出す。）を採用し，このような問題解決の指針を与えている。また，高橋，名取［12］も同様な計算方法を採用して，固有値および固有ベクトルを計算している。

4.2.1 偽の固有値の判別（Cullum&Willoughby (1981)

偽の固有値の判別は，次のようにする。

（1）T_j ：j×jの3重対角行列，

及び，

$\overline{T}_2$ ： T_j から第1行，第1列を除いた（j－1）×（j－1）の行列，

を作り，高精度計算によって，各々の固有値を計算する。

（2）下記の表に従って，T_j と $\overline{T}_2$ を比較して，偽の固有値を取り除き正しい固有値を見つける。

表3.1　　偽の固有値の判定法

Case	判定	T_j の固有値の重複	$\overline{T}_2$ の固有値
(1)	Accept	Yes	Yes
(2)	＜Reject＞	No	Yes
(3)	Accept	No	No

(1)　T_j の重複固有値は，「本物」，$\overline{T}_2$ の固有値にもなっている。

(2)　T_j の単純固有値で，$\overline{T}_2$ の固有値でもあるものは「偽物」。

(3)　T_j の単純固有値で，$\overline{T}_2$ の固有値でないものは「本物」。

実際の数値例でこの操作を示すと下記のようになる。下線部の固有値が偽固有値として取り除かれることになる。

	判定	T_j	$\overline{T}_2$
k=65	<ACCEPT>	1.070513330620176	1.070513330620176
k=66	@REPEAT@	1.070513330620177	1.070513330620178
k=67	@REPEAT@	1.070513330620180	1.075799503043244
k=68	<ACCEPT>	1.081014052771011	1.081014052771011
k=69	@REPEAT@	1.081014052771012	1.081014052771015
k=70	@REPEAT@	1.081014052771015	1.085871332159758
k=71	<ACCEPT>	1.191508321545976	1.191508321545976
k=72	@REPEAT@	1.191508321545976	1.191508325318810
k=73	*REJECT*	1.191508325318809	1.192025261968861
K=74	<ACCEPT>	1.224174788449782	1.224174788449783
K=75	@REPEAT@	1.224174788449784	1.224174887505310
K=76	*REJECT*	1.224174887505309	1.232450808242045
K=77	<ACCEPT>	1.258024362423952	1.258024362423951
K=78	@REPEAT@	1.258024362423954	1.258026924223992
K=79	*REJECT*	1.258026924223993	1.260866993725309

5.数値例

ランチョス法の有効性を示す為に，

（1）「再直交化を行うランチョス法」では，選択的直交化法，

（2）「再直交化を行わないランチョス法」については，Cullum&Willoughby［4］の偽の固有値を見分ける判定法，

を用いた数値例について述べる。

（例1）ランチョス法に選択的直交化法を利用した場合の数値例

次のような6次元（n＝6）の対角行列Aを考える。

$$A = \mathrm{diag}\ (0,\ 0.0025,\ 0.0005,\ 0.00075,\ 0.001,\ 10),$$

$$v_1 = 6^{-1/2}\ (1,\ 1,\ 1,\ 1,\ 1,\ 1)$$ ：初期値，

ε ＝10E-16（演算の精度）．

表5.1 は，ランチョス法により3 重対角化した行列T_7 の各成分と$\| I - V_j{}^T V_j \|$を計算したものである。また，表5.2 は各反復におけるT_j の固有値（Ritz値）と，再直交化するための判定条件となる$\beta_{j\,i}$ およびRitzベクトルのノルムを示したものである。この表から，$\beta_{4\,4}$ が$\beta_{4\,4} < \sqrt{\varepsilon}$の条件を満足するので，第4 の固有値$\theta_4$ （＝9.999999999999965,この場合にはT_j の最大固有値）に対するRitzベクトルを計算し，これとr_j' を直交化し，次のランチョス・ステップを続行する。即ち，j＝4で選択的な直交化を行い，更に2回のランチョス・ステップを続行し，T_6 （Ritz値）を計算すると，次の結果が得られることになる。

表5.3 選択的直交化を j＝4 で行ったT_6 の固有値

j	θ	固有値
6	1	0.1978295315785178E-14
	2	0.2500000000019150E-03
	3	0.5000000000019653E-03
	4	0.7500000000018928E-03
	5	0.1000000000001820E-02
	6	9.999999999999965

このように選択的直交化を行った場合と，そうでない場合のランチョス・ベクトルの間の直交性をみてみると，表5.4 と表5.5 のようになる。これらの事柄から，ランチョス・ベクトルの直交性の崩れは，固有値10に対する第2のRitzベクトルのコピーが現れたことによることが分る。また，j＝4で選択的な直交化を行ない，ランチョス3重対角化を行ったものは，全てのランチョス・ベクトルに対してある程度の直交性が保持されているこ

表 5.1　3重対角行列T_jの要素

A＝diag(0, 0.00025, 0.0005, 0.00075, 0.001, 10.) $v_1 = 6^{-1/2}$ (1, 1, 1, 1, 1, 1)			
j	α_j	β_j	$\lVert I - V_j^T V_j \rVert$
1	1.667083333333333	3.72659363747748	0.
2	8.333416579162292	0.8660253965848979E-03	0.69E-17
3	0.5000700034993815E-03	0.2958039902115344E-03	0.68E-13
4	0.5000046430893902E-03	0.2535462769028216E-03	0.20E-08 ←
5	0.5000398050625197E-03	0.6136791911709209E-03	0.77E-04
6	9.051718071527039	2.929693876937098	1.26
7	0.9487819015256840	0.2263664586082772E-15	0.41

表5.2　Ritzベクトルからの情報

j	i	θ_i	β_{ji}	$\lVert y_i \rVert$
3	1	0.1464378593296902E-03	0.1792801E-03	1.000000000000147
	2	0.8535446398046466E-03	0.1792883E-03	0.9999999999998148
	3	9.999999999999965	0.2004557E-07	1.000000000000002
4	1	0.3902013007893531E-04	0.1150416E-03	0.9999999999996549
	2	0.4999924366006440E-03	0.1944611E-03	1.000000000000060
	3	0.9609745755441913E-03	0.1150478E-03	1.000000000000133
	4	9.999999999999965	0.5929862E-12 ←	1.000000000000002
5	1	0.6211135460530229E-05	0.798397	0.9999999999991327
	2	0.3184727833117499E-03	1.911407	1.000000000000676
	3	0.6815501604137788E-03	1.911585	0.9999999999996056
	4	0.9937928681004200E-03	0.798565	1.000000000000716
	5	9.999999999999965	0.173483E-12	1.000000000000002
6	1	0.6208045170576507E-05	0.418277E-20	0.9999999999990801
	2	0.3184550714314634E-03	0.100137E-20	1.0000000000000626
	3	0.6815324460819470E-03	0.100141E-20	0.9999999999995643
	4	0.9937897767053343E-03	0.418339E-20	1.000000000000693
	5	9.051718113134897	0.226366E-15	0.9999999999999603
	6	9.999999999999965	0.302652E-20	1.000000000000002
7	1	0.1875214351600081E-14	0.328829	0.9999999999985274
	2	0.2500000000001565E-03	1.327053	1.000000000000837
	3	0.4999999999980795E-03	1.990683	0.9999999999999537
	4	0.7500000000001318E-03	1.327188	0.9999999999994851
	5	0.1000000000001723E-02	0.331813	1.000000000001152
	6	9.999999999999965	0.898493	0.9999999999999372
	7	9.999999999999965	0.446167	1.0000000000000002

表5.4　$V_6{}^T V_6$ （再直交化なし）

$$
\begin{bmatrix}
1.0 & -0.6E-17 & 0.1E-13 & -0.6E-09 & -0.2E-04 & -0.3 \\
-0.6E-17 & 1.0 & -0.5E-13 & -0.1E-08 & -0.5E-04 & -0.9 \\
0.1E-13 & -0.5E-13 & 1.0 & 0.7E-14 & -0.4E-08 & -0.7E-04 \\
-0.6E-09 & -0.1E-08 & 0.7E-14 & 1.0 & 0.5E-14 & -0.2E-08 \\
-0.2E-04 & 0.5E-04 & -0.4E-08 & 0.5E-14 & 1.0 & -0.2E-14 \\
-0.3 & -0.9 & -0.7E-04 & -0.2E-08 & -0.2E-14 & 1.0
\end{bmatrix}
$$

表5.5　$V_6{}^T V_6$ （選択的直交化 $j=4$ ）

$$
\begin{bmatrix}
1.0 & -0.6E-17 & 0.1E-13 & -0.6E-09 & -0.2E-12 & 0.8E-09 \\
-0.6E-17 & 1.0 & -0.5E-13 & -0.1E-08 & 0.9E-13 & 0.2E-08 \\
0.1E-13 & -0.5E-13 & 1.0 & 0.7E-14 & -0.3E-13 & 0.5E-12 \\
-0.6E-09 & -0.1E-08 & 0.7E-14 & 1.0 & 0.5E-13 & -0.6E-13 \\
-0.2E-12 & 0.9E-13 & -0.3E-13 & 0.5E-13 & 1.0 & -0.5E-14 \\
-0.8E-09 & 0.2E-08 & 0.5E-12 & -0.6E-13 & -0.5E-14 & 1.0
\end{bmatrix}
$$

とがわかる。

（例２）長方形領域上での２次元ラプラス方程式の境界値問題：$\nabla^2 u=0$ を５点差分近似した行列の固有値問題を考える。ただし，離散化行列Ａは，次のようになる。

$$
A = \underbrace{\begin{bmatrix}
B & -I & & & \\
-I & B & -I & & \\
 & -I & B & -I & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots \\
 & & -I & B & -I \\
 & & & -I & B
\end{bmatrix}}_{nb} \Bigg\} nb \qquad (5.1)
$$

$$B = \underbrace{\left.\begin{bmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & -1 & 4 & -1 & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{bmatrix}\right\} b}_{b} \qquad (5.2)$$

この行列の正しい固有値は，次のようになる。

$$\lambda_{ij} = 4\,(\,\sin^2 \pi i \,/\, 2\,(nb+1) + \sin^2 \pi j \,/\, 2\,(b+1)\,) \qquad (5.3)$$
$$i = 1,\ 2,\ \cdots,\ nb,\quad j = 1,\ 2,\ \cdots,\ b$$

今，$n=200$　($nb=10$，$b=20$) の場合を考えることにする。3重対角化を $j=200$ で打ち切ってT_j　($j=200$) の固有値を計算すると，その結果は次のようになる。

表5.6　T_j　($j=200$) の固有値

固有値の精度	個数
5桁～ 9桁	14個
10桁～15桁	75個

ここで，さらに3重対角化を続行して，$j=2n$ (＝400)，$3n$ (＝600) とランチョス法の反復を行い，前節の表3.1 に従って，真の固有値（重複固有値も含む）と偽の固有値を判定すると，表5.7 及び表5.8 のような結果が得られることになる。また，表5.9 は再直交化を全然行わず，3重対角化をマトリックスの次元の2倍行い，Cullum&Willoughby ［4］の判定法により全ての固有値を計算したものである。重複固有値や偽の固有値がたくさん現れるが，真の固有値は全て含まれており，この方法の有効性をしめしている。

固有値問題に対するランチョス法について，歴史的な背景を踏まえて，最近の話題を取り上げた。現在までの解析で，ランチョス法の全ての問題点が解決されたわけではない。例えば，再直交化の時期，Ritzベクトルの計算の時期，即ちモニタリングの問題点，ランチョス・ベクトルの記憶容量など，いろいろ存在するのである。また，再直交化を全然行わないランチョス法でも，どこまで3重対角化すると求めたい固有値が本当に現れるという理論的な保証がないし，3重対角行列を大きくすればするほど，その固有値を計算する計算時間が膨大なものになってしまうのである。ようやく問題解決の緒の一歩手前にたど

表5.7　n＝200,　T_j　(j＝2 n) 固有値の数

6	6	5	5	4	0	4	0	4	4	4	3	0	3	0
3	3	3	3	3	3	3	2	0	2	0	2	0	2	2
0	2	0	2	0	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
2	2	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1
0	1	0	1	1	0	1	0	1	0	1	0	1	1	0
1	0	1	0	1	1	1	0	1	1	0	1	0	1	1
1	1	1	1	0	1	0	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1
0	1	1	1	1	1	1	0	1	0	1	0	1	1	1
1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	1	0	1	0
1	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0
1	0	1	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
0	2	0	2	2	0	2	0	2	0	2	0	2	0	2
3	3	3	3	3	3	0	3	0	3	4	4	4	0	4
0	4	5	5	6	6									

表5.8　n＝200,　T_j　(j＝3 n) の固有値の数

9	0	9	8	7	6	0	6	0	6	0	6	5	0	5
0	5	5	5	5	4	0	4	4	4	4	4	0	3	0
3	0	3	4	0	3	0	3	0	3	3	3	3	3	3
0	2	0	2	0	2	3	3	0	2	0	2	0	2	0
2	0	2	2	0	2	0	2	0	2	2	2	2	0	2
0	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
2	2	2	2	0	1	1	0	1	0	1	0	1	0	1
0	1	2	0	1	1	0	1	0	1	1	0	1	1	0
1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	1	1
1	1	1	0	1	1	1	0	1	1	1	0	1	1	1
0	1	1	1	1	1	1	0	1	1	0	1	0	1	0
1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	1	1	0	1
0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	1	0	1
0	1	0	1	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
2	2	2	2	2	0	2	0	2	0	2	2	2	2	0
2	0	2	2	0	2	0	2	0	2	0	2	0	2	3
3	0	2	0	2	3	3	3	3	3	3	3	0	3	0
3	0	3	0	3	0	3	4	4	4	4	4	0	4	4
0	5	5	5	5	5	0	5	0	6	6	0	6	0	6
0	7	0	8	8	0	9								

表の中の数字は，固有値の重複を表しており，0 は偽の固有値の存在をしめしている。

りついたと言えるのかもしれない。しかし，ランチョス法は，現実の大型行列計算で重要な役割をはたしていることも事実である。

〔参考文献〕

[1] C.Lanczos, An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators, J. Res. Nat. Bur. Standards 45：255-282 (1950).

[2] B.N.Parlett, The Symmetric Eigenvalue Problem, Prentice-Hall (1980).

[3] J.K.Cullum&R.A.Willoughby, Lanczos Algorithm for Large Symmetric Eigenvalue Computations, I, II, Birkhauser (1985).

[4] J.K.Cullum&R.A.Willoughby, Computing Eigenvalues of Very Large Symmetric Matrices-An Implementation of a Lanczos Algorithm with No Reorthogonalization, J.Comp. Phys. 44, pp.329-358 (1981).

[5] C.C.Paige, The computation of eigenvalues and eigenvectors of very large sparse matrices, Ph.D. Thesis, Univ. of London (1971).

[6] C.C.Paige, Computational Variants of the Lanczos Method for the Eigenproblem, J. Inst. Math. Appl. 10, p.373-381 (1972).

[7] C.C.Paige, Error analysis of the Lanczos method for eigenproblem, J. Inst. Maths. Applics. 18, pp.341-349 (1976).

[8] B.N.Parlett &D.S.Scott, The Lanczos Algorithm with Selective Orthogonalization, Math. Comp. 33, pp.217-238 (1979).

[9] B.N.Parlett &J.K.Reid, Tracking the Progress of the Lanczos Algorithm for Large Symmetric Eigenproblems, IMA J. Num. Anal. 1, pp.135-155 (1981).

[10] H.D.Simon, The Lanczos Algorithm with Partial Reorthogonalization, Math. Comp. 42, pp.115-142 (1984).

[11] H.D.Simon, Analysis of the Symmetric Lanczos Algorithm with Reorthogonalization Methods, Linear Alg. and its Applications 61, pp.101-131 (1984).

[12] H.Takahasi&M.Natori, Eigenvalue Problem of Large Sparse Matrices, Rep. Comp. Center, University of Tokyo, 4, pp.129-148 (1972).

[13] 高橋，野寺，行列問題に対するLanczos 法と共役勾配法，京都大学数理解析研究所講究録 373, pp.117-132 (1979).

[14] 高橋，固有値問題のLanczos 法について，京都大学数理解析研究所講究録422, pp.119-139 (1981).

[15] B.N.Parlett, Two Monitoring Schemes for the Lanczos Algorithm, Computing Methods in Applied Sciences and Engineering V, North-Holland, pp.27-34 (1982).

表5.9 （その1） n ＝ 200, T_j （j＝2 n）の全ての固有値の真偽の判定

K=	1	<ACCEPT>	0.1033524003207532	0.1033524003207528	1
K=	2	@REPEAT@	0.1033524003207552	0.1033524003207533	1
K=	3	@REPEAT@	0.1033524003207557	0.1033524003207540	1
K=	4	@REPEAT@	0.1033524003207566	0.1033524003207584	1
K=	5	@REPEAT@	0.1033524003207578	0.1033524003207588	1
K=	6	@REPEAT@	0.1033524003207592	0.1034485470822909	1
K=	7	<ACCEPT>	0.1698684411987306	0.1698684411987286	2
K=	8	@REPEAT@	0.1698684411987307	0.1698684411987289	2
K=	9	@REPEAT@	0.1698684411987316	0.1698684411987314	2
K=	10	@REPEAT@	0.1698684411987321	0.1698684411987325	2
K=	11	@REPEAT@	0.1698684411987325	0.1698684411987360	2
K=	12	@REPEAT@	0.1698684411987330	0.1702340284018201	2
K=	13	<ACCEPT>	0.2790763169661725	0.2790763169661726	3
K=	14	@REPEAT@	0.2790763169661741	0.2790763169661728	3
K=	15	@REPEAT@	0.2790763169661743	0.2790763169661748	3
K=	16	@REPEAT@	0.2790763169661760	0.2790763169661780	3
K=	17	@REPEAT@	0.2790763169661772	0.2798247093839899	3
K=	18	<ACCEPT>	0.3398312818873862	0.3398312818873845	4
K=	19	@REPEAT@	0.3398312818873871	0.3398312818873882	4
K=	20	@REPEAT@	0.3398312818873884	0.3398312818873901	4
K=	21	@REPEAT@	0.3398312818873895	0.3398312818873917	4
K=	22	@REPEAT@	0.3398312818873902	0.3401458131820150	4
K=	23	<ACCEPT>	0.4063473227653630	0.4063473227653616	5
K=	24	@REPEAT@	0.4063473227653632	0.4063473227653617	5
K=	25	@REPEAT@	0.4063473227653636	0.4063473227653627	5
K=	26	@REPEAT@	0.4063473227653647	0.4074900409166083	5
K=	27	*REJECT*	0.4078118955840938	0.4078118955840913	0
K=	28	<ACCEPT>	0.4285365041390211	0.4285365041390205	6
K=	29	@REPEAT@	0.4285365041390216	0.4285365041390223	6
K=	30	@REPEAT@	0.4285365041390230	0.4285365041390250	6
K=	31	@REPEAT@	0.4285365041390253	0.4297698118526971	6
K=	32	*REJECT*	0.4450524788258219	0.4450524788258220	0
K=	33	<ACCEPT>	0.5155551985328068	0.5155551985328034	7
K=	34	@REPEAT@	0.5155551985328072	0.5155551985328075	7
K=	35	@REPEAT@	0.5155551985328075	0.5155551985328088	7
K=	36	@REPEAT@	0.5155551985328113	0.5180592089699878	7
K=	37	<ACCEPT>	0.6149103091113588	0.6149103091113580	8
K=	38	@REPEAT@	0.6149103091113588	0.6149103091113607	8
K=	39	@REPEAT@	0.6149103091113605	0.6149103091113638	8
K=	40	@REPEAT@	0.6149103091113654	0.6164224031802031	8
K=	41	<ACCEPT>	0.6650153857056542	0.6650153857056520	9
K=	42	@REPEAT@	0.6650153857056544	0.6650153857056557	9
K=	43	@REPEAT@	0.6650153857056558	0.6650153857057894	9
K=	44	@REPEAT@	0.6650153857057872	0.6689976566456361	9
K=	45	<ACCEPT>	0.7126168796591790	0.7126168796591775	10
K=	46	@REPEAT@	0.7126168796591796	0.7126168796591807	10
K=	47	@REPEAT@	0.7126168796591819	0.7126170113486254	10
K=	48	*REJECT*	0.7126170113486265	0.7131701746780476	0
K=	49	<ACCEPT>	0.7791329205371543	0.7791329205371525	11
K=	50	@REPEAT@	0.7791329205371553	0.7791329205371564	11
K=	51	@REPEAT@	0.7791329205371569	0.7810110804020544	11
K=	52	*REJECT*	0.8301916504791453	0.8301916504791448	0
K=	53	<ACCEPT>	0.8340344490535444	0.8340344490535427	12
K=	54	@REPEAT@	0.8340344490535448	0.8340344490535474	12
K=	55	@REPEAT@	0.8340344490535478	0.8354671121627089	12
K=	56	<ACCEPT>	0.8513891906779903	0.8513891906779903	13
K=	57	@REPEAT@	0.8513891906779915	0.8513891906779943	13
K=	58	@REPEAT@	0.8513891906779944	0.8566938328803929	13
K=	59	<ACCEPT>	0.8883407963045975	0.8883407963045967	14
K=	60	@REPEAT@	0.8883407963045996	0.8883407963046007	14
K=	61	@REPEAT@	0.8883407963046009	0.8933062702882597	14
K=	62	<ACCEPT>	1.037800983477447	1.037800983477444	15
K=	63	@REPEAT@	1.037800983477447	1.037800983477447	15
K=	64	@REPEAT@	1.037800983477448	1.043170768107312	15
K=	65	<ACCEPT>	1.070513330620177	1.070513330620176	16
K=	66	@REPEAT@	1.070513330620178	1.070513330620201	16
K=	67	@REPEAT@	1.070513330620202	1.075799503043245	16
K=	68	<ACCEPT>	1.081014052771011	1.081014052771010	17
K=	69	@REPEAT@	1.081014052771013	1.081014052771106	17
K=	70	@REPEAT@	1.081014052771105	1.085871332159758	17
K=	71	<ACCEPT>	1.191508321545977	1.191508321545976	18
K=	72	@REPEAT@	1.191508321545977	1.191508321592664	18
K=	73	@REPEAT@	1.191508321592665	1.192025261968860	18
K=	74	<ACCEPT>	1.224174788449782	1.224174788449784	19
K=	75	@REPEAT@	1.224174788449784	1.224175019384406	19
K=	76	*REJECT*	1.224175019384408	1.232450808242045	0
K=	77	<ACCEPT>	1.258024362423952	1.258024362423950	20
K=	78	@REPEAT@	1.258024362423953	1.258024695654166	20
K=	79	*REJECT*	1.258024695654167	1.260866993725309	0
K=	80	<ACCEPT>	1.317492934337645	1.317492934337644	21
K=	81	@REPEAT@	1.317492934337645	1.317534123563266	21
K=	82	*REJECT*	1.317534123563266	1.324213736650059	0
K=	83	<ACCEPT>	1.350332004038223	1.350332004038222	22
K=	84	@REPEAT@	1.350332004038223	1.352375354726144	22
K=	85	<ACCEPT>	1.367232238191395	1.367232238191395	23
K=	86	@REPEAT@	1.367232238191396	1.368124584937289	23
K=	87	*REJECT*	1.368124584937288	1.373413223708567	0
K=	88	<ACCEPT>	1.443298928391967	1.443298928391968	24
K=	89	@REPEAT@	1.443298928391967	1.443299236291179	24
K=	90	*REJECT*	1.443299236291178	1.454850231629745	0
K=	91	<ACCEPT>	1.516692425364241	1.516692425364243	25
K=	92	@REPEAT@	1.516692425364244	1.525544738164677	25
K=	93	*REJECT*	1.534206596458270	1.534206596458270	0
K=	94	<ACCEPT>	1.586810885604851	1.586810885604854	26
K=	95	@REPEAT@	1.586810885604854	1.594760297312039	26
K=	96	<ACCEPT>	1.635972184858381	1.635972184858383	27
K=	97	@REPEAT@	1.635972184858384	1.638117894827421	27
K=	98	<ACCEPT>	1.690278532109434	1.690278532109438	28
K=	99	@REPEAT@	1.690278532109439	1.695687877243526	28
K=	100	<ACCEPT>	1.703066230336579	1.703066230336582	29

表5.9 （その２） n ＝ 200，T_j （ｊ＝２ｎ）の全ての固有値の真偽の判定

K= 101	@REPEAT@	1.703066230336584	1.723446020705355	29
K= 102	<ACCEPT>	1.737708671003177	1.737708671003179	30
K= 103	@REPEAT@	1.737708671003182	1.739393681939005	30
K= 104	<ACCEPT>	1.804224711881151	1.804224711881155	31
K= 105	@REPEAT@	1.804224711881155	1.806833991574665	31
K= 106	<ACCEPT>	1.872451066425012	1.872451066425016	32
K= 107	@REPEAT@	1.872451066425016	1.878166398006413	32
K= 108	<ACCEPT>	1.913432587648595	1.913432587648607	33
K= 109	@REPEAT@	1.913432587648606	1.915125487629506	33
K= 110	<ACCEPT>	1.922190370278763	1.922190370278835	34
K= 111	@REPEAT@	1.922190370278835	1.929544545184507	34
K= 112	<ACCEPT>	1.931553865598161	1.931553865601150	35
K= 113	@REPEAT@	1.931553865601149	1.938548545120591	35
K= 114	<ACCEPT>	1.959596483376643	1.959596483376647	36
K= 115	@REPEAT@	1.959596483376648	1.983623947602635	36
K= 116	<ACCEPT>	2.062892774821442	2.062892774821448	37
K= 117	@REPEAT@	2.062892774821448	2.072721479454945	37
K= 118	<ACCEPT>	2.168032747164793	2.168032747901346	38
K= 119	*REJECT*	2.168032747901344	2.168384410404985	0
K= 120	<ACCEPT>	2.169169973996230	2.169169974873137	39
K= 121	*REJECT*	2.169169974873136	2.189421891916278	0
K= 122	<ACCEPT>	2.230474239943857	2.230474268185344	40
K= 123	*REJECT*	2.230474268185343	2.231461129921267	0
K= 124	<ACCEPT>	2.245236664196804	2.245252025326688	41
K= 125	*REJECT*	2.245252025326687	2.247370925456172	0
K= 126	<ACCEPT>	2.249266579793780	2.249273913106153	42
K= 127	*REJECT*	2.249273913106152	2.283731919134739	0
K= 128	<ACCEPT>	2.306968024096317	2.306968048861740	43
K= 129	*REJECT*	2.306968048861740	2.308352749499978	0
K= 130	<ACCEPT>	2.373484064974292	2.373484066673525	44
K= 131	*REJECT*	2.373484066673525	2.375563250312481	0
K= 132	<ACCEPT>	2.438487925263440	2.438542296389807	45
K= 133	*REJECT*	2.438542296389807	2.447621809487719	0
K= 134	<ACCEPT>	2.466953121510491	2.467412169553449	46
K= 135	<ACCEPT>	2.468390719735967	2.479479681232905	47
K= 136	*REJECT*	2.479857667840452	2.479857667840454	0
K= 137	<ACCEPT>	2.482691940741736	2.501925715423243	48
K= 138	*REJECT*	2.518127564969465	2.518127564969466	0
K= 139	<ACCEPT>	2.526055920683638	2.527599289583394	49
K= 140	*REJECT*	2.540768481659698	2.540768481659698	0
K= 141	<ACCEPT>	2.540818344936584	2.567143242903963	50
K= 142	*REJECT*	2.632152111695508	2.632152111695507	0
K= 143	<ACCEPT>	2.632152127914583	2.640877179268983	51
K= 144	<ACCEPT>	2.715370323453433	2.715822550774547	52
K= 145	*REJECT*	2.715822550774547	2.719199439291719	0
K= 146	<ACCEPT>	2.724128106083601	2.746529798584300	53
K= 147	*REJECT*	2.746529798584299	2.748615415593773	0
K= 148	<ACCEPT>	2.762534802250270	2.763232643764027	54
K= 149	*REJECT*	2.763232643764025	2.776775660271786	0
K= 150	<ACCEPT>	2.811696101503801	2.812367947755419	55
K= 151	<ACCEPT>	2.818525932886921	2.826925709528876	56
K= 152	<ACCEPT>	2.839738719282281	2.842538682938221	57
K= 153	*REJECT*	2.842538682938221	2.852667200957388	0
K= 154	<ACCEPT>	2.853168373553521	2.871639370442197	58
K= 155	<ACCEPT>	2.919684414431495	2.919745618960958	59
K= 156	*REJECT*	2.919745618960959	2.921812549810270	0
K= 157	<ACCEPT>	2.984688274720642	2.987477063252054	60
K= 158	*REJECT*	2.987477063252054	2.995807212574642	0
K= 159	<ACCEPT>	3.019709786823382	3.026222898278990	61
K= 160	<ACCEPT>	3.028892290198941	3.031709407678833	62
K= 161	<ACCEPT>	3.037650072829108	3.045654961753822	63
K= 162	<ACCEPT>	3.048174983070433	3.076979910812303	64
K= 163	<ACCEPT>	3.081014052771010	3.093227135003115	65
K= 164	<ACCEPT>	3.135320400022061	3.137449454413345	66
K= 165	*REJECT*	3.137449454413345	3.154210098195927	0
K= 166	<ACCEPT>	3.178352477371786	3.178415407473560	67
K= 167	*REJECT*	3.178415407473560	3.189674498634320	0
K= 168	<ACCEPT>	3.270328455540804	3.277048245823865	68
K= 169	<ACCEPT>	3.284629676546575	3.299832138489934	69
K= 170	<ACCEPT>	3.317492934337644	3.317733950911694	70
K= 171	<ACCEPT>	3.318630161169079	3.327561948703280	71
K= 172	<ACCEPT>	3.327993656488479	3.331911821942729	72
K= 173	<ACCEPT>	3.332059815440320	3.351426453360526	73
K= 174	<ACCEPT>	3.364726282344124	3.388577325316423	74
K= 175	<ACCEPT>	3.398575856318294	3.401427970774620	75
K= 176	<ACCEPT>	3.420960580842223	3.448416240189999	76
K= 177	<ACCEPT>	3.507783732085736	3.509810987754608	77
K= 178	<ACCEPT>	3.547117796430665	3.547285091700465	78
K= 179	<ACCEPT>	3.553947627813784	3.558310593100436	79
K= 180	<ACCEPT>	3.564472538055113	3.564702612228221	80
K= 181	<ACCEPT>	3.565910136280586	3.578401400725835	81
K= 182	<ACCEPT>	3.583850422286310	3.601418075625534	82
K= 183	<ACCEPT>	3.614211841908859	3.649496360445438	83
K= 184	<ACCEPT>	3.657243919258585	3.672925633408724	84
K= 185	<ACCEPT>	3.690278532109433	3.704617792880687	85
K= 186	<ACCEPT>	3.704845413212113	3.723031144358196	86
K= 187	<ACCEPT>	3.733491601403000	3.736218158164792	87
K= 188	<ACCEPT>	3.771361454090087	3.771946802653274	88
K= 189	<ACCEPT>	3.783596677997294	3.786594518763758	89
K= 190	<ACCEPT>	3.830830026003777	3.833599647638875	90
K= 191	<ACCEPT>	3.839587808633946	3.842709557855027	91
K= 192	<ACCEPT>	3.843617724230925	3.854262708731257	92
K= 193	<ACCEPT>	3.864830510626282	3.879619609576923	93
K= 194	<ACCEPT>	3.880569329857531	3.882725655676047	94
K= 195	<ACCEPT>	3.882951788575851	3.889407103394010	95
K= 196	<ACCEPT>	3.899852022729020	3.929335440539181	96
K= 197	<ACCEPT>	3.937258135826901	3.941308938827720	97
K= 198	<ACCEPT>	3.941324294778746	3.966154537180591	98
K= 199	<ACCEPT>	3.969970482969632	3.991234418615942	99
K= 200	<ACCEPT>	3.992159664343293	4.000000000000004	100

表5.9 （その３） n ＝ 200, T_j （ j ＝ ２ n ）の全ての固有値の真偽の判定

K= 201	<ACCEPT>	4.007840335656720	4.008765581384072	101
K= 202	<ACCEPT>	4.030029517030377	4.033845462819418	102
K= 203	<ACCEPT>	4.058675705221270	4.058691061172298	103
K= 204	<ACCEPT>	4.062741864173107	4.070664559460827	104
K= 205	<ACCEPT>	4.100147977270986	4.110592896605997	105
K= 206	<ACCEPT>	4.117048211424164	4.117274344323971	106
K= 207	<ACCEPT>	4.119430670142482	4.120380390423091	107
K= 208	<ACCEPT>	4.135169489373725	4.145737291268751	108
K= 209	<ACCEPT>	4.156382275769088	4.157290442144989	109
K= 210	<ACCEPT>	4.160412191366063	4.166400352361138	110
K= 211	<ACCEPT>	4.169169973996232	4.213405481236250	111
K= 212	<ACCEPT>	4.216403322002713	4.228053197346739	112
K= 213	<ACCEPT>	4.228638545909924	4.263781841835217	113
K= 214	<ACCEPT>	4.266508398597010	4.276968855641809	114
K= 215	<ACCEPT>	4.295154586787900	4.295382207119328	115
K= 216	<ACCEPT>	4.309721467890573	4.327074366591283	116
K= 217	<ACCEPT>	4.342756080741423	4.350503639554569	117
K= 218	<ACCEPT>	4.385788158091147	4.398581924374471	118
K= 219	<ACCEPT>	4.416149577713698	4.421598599274174	119
K= 220	<ACCEPT>	4.434089863719422	4.435297387771796	120
K= 221	<ACCEPT>	4.435527461944902	4.441689406899574	121
K= 222	<ACCEPT>	4.446052372186222	4.452714908299547	122
K= 223	<ACCEPT>	4.452882203569347	4.490189012245399	123
K= 224	<ACCEPT>	4.492216267914271	4.551583759810003	124
K= 225	<ACCEPT>	4.579039419157783	4.598572029225388	125
K= 226	<ACCEPT>	4.601424143681715	4.611422674683582	126
K= 227	<ACCEPT>	4.635273717655883	4.648573546639479	127
K= 228	<ACCEPT>	4.667940184559691	4.668088178057283	128
K= 229	<ACCEPT>	4.672006343511532	4.672438051296731	129
K= 230	<ACCEPT>	4.681369838830927	4.682266049088320	130
K= 231	<ACCEPT>	4.682507065662366	4.700167861510072	131
K= 232	<ACCEPT>	4.715370323453433	4.722951754176144	132
K= 233	<ACCEPT>	4.729671544459201	4.810325501365684	133
K= 234	*REJECT*	4.819264713215426	4.819264713215428	0
K= 235	<ACCEPT>	4.821647522628219	4.845789901804075	134
K= 236	*REJECT*	4.856222792266288	4.856222792266290	0
K= 237	<ACCEPT>	4.864679599977943	4.906772864996887	135
K= 238	<ACCEPT>	4.918985947228998	4.923020089187703	136
K= 239	<ACCEPT>	4.951825016929575	4.954345038246188	137
K= 240	<ACCEPT>	4.962349927170899	4.968290592321177	138
K= 241	<ACCEPT>	4.971107709801068	4.973777101721020	139
K= 242	<ACCEPT>	4.980290213176624	5.004192787425362	140
K= 243	*REJECT*	5.007712290472531	5.007712290472534	0
K= 244	<ACCEPT>	5.015311725279363	5.074799807463592	141
K= 245	*REJECT*	5.074799807463591	5.078187450189736	0
K= 246	<ACCEPT>	5.080315585568511	5.107704735481298	142
K= 247	*REJECT*	5.107704735481293	5.128360629557806	0
K= 248	<ACCEPT>	5.146831626446486	5.147332799042622	143
K= 249	<ACCEPT>	5.160261280717723	5.173074290471130	144
K= 250	<ACCEPT>	5.181474067113084	5.187632052244591	145
K= 251	<ACCEPT>	5.188303898496207	5.206457474158807	146
K= 252	*REJECT*	5.206457474158803	5.223224339728217	0
K= 253	<ACCEPT>	5.237465197749734	5.238178175449491	147
K= 254	*REJECT*	5.238178175449488	5.251384584406230	0
K= 255	<ACCEPT>	5.275871893916403	5.278423948886548	148
K= 256	*REJECT*	5.278423948886543	5.280800560708288	0
K= 257	<ACCEPT>	5.284629676546572	5.359122820731020	149
K= 258	*REJECT*	5.367847861408313	5.367847861408315	0
K= 259	<ACCEPT>	5.367847872085421	5.432856757096037	150
K= 260	*REJECT*	5.459180567474556	5.459180567474562	0
K= 261	<ACCEPT>	5.459181655063421	5.472400710416613	151
K= 262	<ACCEPT>	5.473944079316369	5.473962777737389	152
K= 263	*REJECT*	5.473962777737386	5.498074284576758	0
K= 264	<ACCEPT>	5.517308059258269	5.519884943828759	153
K= 265	*REJECT*	5.519884943828753	5.520520318767102	0
K= 266	<ACCEPT>	5.531609280264039	5.532587830446559	154
K= 267	<ACCEPT>	5.533046878489515	5.552378190512284	155
K= 268	*REJECT*	5.561502867454569	5.561502867454573	0
K= 269	<ACCEPT>	5.561512074736564	5.624436749687523	156
K= 270	*REJECT*	5.626515924342679	5.626515924342683	0
K= 271	<ACCEPT>	5.626515935025713	5.691647250500027	157
K= 272	*REJECT*	5.693031975518129	5.693031975518133	0
K= 273	<ACCEPT>	5.693031975903688	5.716268080865261	158
K= 274	*REJECT*	5.750730776563390	5.750730776563395	0
K= 275	<ACCEPT>	5.750733420206223	5.752629074543835	159
K= 276	*REJECT*	5.754760762387539	5.754760762387543	0
K= 277	<ACCEPT>	5.754763335803199	5.768538870078738	160
K= 278	*REJECT*	5.769525705244525	5.769525705244530	0
K= 279	<ACCEPT>	5.769525760056148	5.810578108083723	161
K= 280	*REJECT*	5.830830023437294	5.830830023437297	0
K= 281	<ACCEPT>	5.830830026003775	5.831615589595022	162
K= 282	*REJECT*	5.831967211730810	5.831967211730812	0
K= 283	<ACCEPT>	5.831967252835213	5.927278520545057	163
K= 284	<ACCEPT>	5.937107225178560	5.937107225178565	164
K= 285	@REPEAT@	5.937107225178565	6.016376052397366	164
K= 286	<ACCEPT>	6.040403516623361	6.040403516623364	165
K= 287	@REPEAT@	6.040403516623362	6.061451454879411	165
K= 288	<ACCEPT>	6.068446134401841	6.068446134401847	166
K= 289	@REPEAT@	6.068446134401842	6.070455454815498	166
K= 290	<ACCEPT>	6.077809629721223	6.077809629721229	167
K= 291	@REPEAT@	6.077809629721239	6.084874512370500	167
K= 292	<ACCEPT>	6.086567412351407	6.086567412351412	168
K= 293	@REPEAT@	6.086567412351408	6.121833601993589	168
K= 294	<ACCEPT>	6.127548933574990	6.127548933574996	169
K= 295	@REPEAT@	6.127548933574991	6.193166008425336	169
K= 296	<ACCEPT>	6.195775288118851	6.195775288118855	170
K= 297	@REPEAT@	6.195775288118853	6.260606318060999	170
K= 298	<ACCEPT>	6.262291328996826	6.262291328996830	171
K= 299	@REPEAT@	6.262291328996828	6.276553979294646	171
K= 300	<ACCEPT>	6.296933769663424	6.296933769663429	172

表5.9 （その4）　n ＝ 200，T_J　（j＝2n）の全ての固有値の真偽の判定

K= 301	@REPEAT@	6.296933769663426	6.304312122756477	172
K= 302	<ACCEPT>	6.309721467890568	6.309721467890572	173
K= 303	@REPEAT@	6.309721467890571	6.361882105172581	173
K= 304	<ACCEPT>	6.364027815141622	6.364027815141626	174
K= 305	@REPEAT@	6.364027815141624	6.405239702687962	174
K= 306	<ACCEPT>	6.413189114395150	6.413189114395155	175
K= 307	@REPEAT@	6.413189114395153	6.474455261835322	175
K= 308	*REJECT*	6.475606533761817	6.475606533761822	0
K= 309	<ACCEPT>	6.483307574635759	6.483307574635764	176
K= 310	@REPEAT@	6.483307574635763	6.545149768370254	176
K= 311	*REJECT*	6.556696712682805	6.556696712682808	0
K= 312	<ACCEPT>	6.556701071608033	6.556701071608037	177
K= 313	@REPEAT@	6.556701071608035	6.626586776291432	177
K= 314	<ACCEPT>	6.632767761808606	6.632767761808612	178
K= 315	@REPEAT@	6.632767761808610	6.638625184736983	178
K= 316	*REJECT*	6.638625184736982	6.647624645273858	0
K= 317	<ACCEPT>	6.649667995961782	6.649667995961785	179
K= 318	@REPEAT@	6.649667995961784	6.675788263349940	179
K= 319	*REJECT*	6.682090402758383	6.682090402758385	0
K= 320	<ACCEPT>	6.682507065662361	6.682507065662362	180
K= 321	@REPEAT@	6.682507065662361	6.739133006274691	180
K= 322	*REJECT*	6.741973073601514	6.741973073601515	0
K= 323	<ACCEPT>	6.741975637576051	6.741975637576055	181
K= 324	@REPEAT@	6.741975637576054	6.767549191757953	181
K= 325	*REJECT*	6.775805927757058	6.775805927757059	0
K= 326	<ACCEPT>	6.775825211550219	6.775825211550222	182
K= 327	@REPEAT@	6.775825211550222	6.807974738031140	182
K= 328	*REJECT*	6.808491608681261	6.808491608681262	0
K= 329	<ACCEPT>	6.808491678454026	6.808491678454029	183
K= 330	@REPEAT@	6.808491678454029	6.914128667840241	183
K= 331	<ACCEPT>	6.918985947227594	6.918985947227595	184
K= 332	@REPEAT@	6.918985947228992	6.918985947228993	184
K= 333	@REPEAT@	6.918985947228993	6.924200496956754	184
K= 334	<ACCEPT>	6.929486669379802	6.929486669379804	185
K= 335	@REPEAT@	6.929486669379827	6.929486669379829	185
K= 336	@REPEAT@	6.929486669379829	6.956829231892686	185
K= 337	<ACCEPT>	6.962199016522558	6.962199016522558	186
K= 338	@REPEAT@	6.962199016522560	6.962199016522562	186
K= 339	@REPEAT@	6.962199016522560	7.106693729711737	186
K= 340	<ACCEPT>	7.111659203695405	7.111659203695404	187
K= 341	@REPEAT@	7.111659203695407	7.111659203695407	187
K= 342	@REPEAT@	7.111659203695409	7.143306167119605	187
K= 343	<ACCEPT>	7.148610809322012	7.148610809322012	188
K= 344	@REPEAT@	7.148610809322015	7.148610809322014	188
K= 345	@REPEAT@	7.148610809322015	7.164532887837289	188
K= 346	<ACCEPT>	7.165965550946458	7.165965550946457	189
K= 347	@REPEAT@	7.165965550946462	7.165965550946461	189
K= 348	@REPEAT@	7.165965550946462	7.218988919597942	189
K= 349	*REJECT*	7.220767800285423	7.220767800285423	0
K= 350	<ACCEPT>	7.220867079462850	7.220867079462847	190
K= 351	@REPEAT@	7.220867079462851	7.220867079462851	190
K= 352	@REPEAT@	7.220867079462852	7.286829825321950	190
K= 353	*REJECT*	7.287383119848311	7.287383119848310	0
K= 354	<ACCEPT>	7.287383120340824	7.287383120340823	191
K= 355	@REPEAT@	7.287383120340825	7.287383120340825	191
K= 356	@REPEAT@	7.287383120340826	7.331002343354361	191
K= 357	<ACCEPT>	7.334984614294232	7.334984614294233	192
K= 358	@REPEAT@	7.334984614294349	7.334984614294346	192
K= 359	@REPEAT@	7.334984614294350	7.334984614294350	192
K= 360	@REPEAT@	7.334984614294352	7.383577596819793	192
K= 361	<ACCEPT>	7.385089690888645	7.385089690888642	193
K= 362	@REPEAT@	7.385089690888645	7.385089690888644	193
K= 363	@REPEAT@	7.385089690888645	7.385089690888645	193
K= 364	@REPEAT@	7.385089690888648	7.481940791030009	193
K= 365	<ACCEPT>	7.484444801467197	7.484444801467197	194
K= 366	@REPEAT@	7.484444801467198	7.484444801467197	194
K= 367	@REPEAT@	7.484444801467199	7.484444801467200	194
K= 368	@REPEAT@	7.484444801467201	7.570230188147299	194
K= 369	*REJECT*	7.570300459079656	7.570300459079655	0
K= 370	<ACCEPT>	7.571463495860982	7.571463495860979	195
K= 371	@REPEAT@	7.571463495860982	7.571463495860982	195
K= 372	@REPEAT@	7.571463495860984	7.571463495860984	195
K= 373	@REPEAT@	7.571463495860985	7.592509959083387	195
K= 374	*REJECT*	7.592693592722018	7.592693592722019	0
K= 375	<ACCEPT>	7.593652677234641	7.593652677234639	196
K= 376	@REPEAT@	7.593652677234641	7.593652677234640	196
K= 377	@REPEAT@	7.593652677234642	7.593652677234642	196
K= 378	@REPEAT@	7.593652677234642	7.659854186817982	196
K= 379	<ACCEPT>	7.660168718112616	7.660168718112614	197
K= 380	@REPEAT@	7.660168718112617	7.660168718112615	197
K= 381	@REPEAT@	7.660168718112618	7.660168718112615	197
K= 382	@REPEAT@	7.660168718112619	7.660168718112618	197
K= 383	@REPEAT@	7.660168718112619	7.720175290616007	197
K= 384	<ACCEPT>	7.720923683033829	7.720923683033827	198
K= 385	@REPEAT@	7.720923683033830	7.720923683033829	198
K= 386	@REPEAT@	7.720923683033830	7.720923683033829	198
K= 387	@REPEAT@	7.720923683033831	7.720923683033832	198
K= 388	@REPEAT@	7.720923683033832	7.829765971598175	198
K= 389	<ACCEPT>	7.830131558801272	7.830131558801270	199
K= 390	@REPEAT@	7.830131558801273	7.830131558801271	199
K= 391	@REPEAT@	7.830131558801273	7.830131558801271	199
K= 392	@REPEAT@	7.830131558801274	7.830131558801272	199
K= 393	@REPEAT@	7.830131558801275	7.830131558801273	199
K= 394	@REPEAT@	7.830131558801275	7.896551452917705	199
K= 395	<ACCEPT>	7.896647599679248	7.896647599679246	200
K= 396	@REPEAT@	7.896647599679249	7.896647599679246	200
K= 397	@REPEAT@	7.896647599679249	7.896647599679246	200
K= 398	@REPEAT@	7.896647599679249	7.896647599679249	200
K= 399	@REPEAT@	7.896647599679250	7.896647599679250	200
K= 400	@REPEAT@	7.896647599679250	0.000000000000000	200