

固有値問題の Lanczos 法について

慶大 工学部 高橋 秀俊

1. Lanczos 法の概観

固有値問題の Lanczos 法は Givens-Householder 法と共に、与えられた対称 (Hermite) 行列 A を直交 (unitary) 変換 U によって

$$\bar{A} = U^{-1} A U$$

のように変換して、 \bar{A} が 3 重対角行列になるようにする方法である。Lanczos 法では、適当に選んだ n 次元ベクトル (初期ベクトル) u_1 (ただし $u_1^2 = 1$) を出発値として、反復過程

$$(1.1) \quad \alpha_k = u_k \cdot A u_k$$

$$(1.2) \quad \bar{u}_{k+1} = A u_k - \alpha_k u_k - \beta_{k-1} u_{k-1} \quad (\text{ただし } u_0 = 0)$$

$$(1.3) \quad \beta_k = |\bar{u}_{k+1}|, \quad u_{k+1} = \bar{u}_{k+1} / \beta_k$$

によって $\alpha_k, \beta_k, u_{k+1}$ を $k=1, 2, \dots$ と求めて行く。そのとき直交関係 $u_i \cdot u_k = \delta_{ik} = \begin{cases} 1 & i=k \\ 0 & i \neq k \end{cases}$ が成り立つことが証明

できる。したがってこの過程はある $m \leq n$ で $\beta_m = 0$ となって終結し、そのとき u_1, \dots, u_m は m 次元空間の直交基底をつくり、

$$U = (u_1, u_2, \dots, u_m)$$

とすると

$$(2) \quad \bar{A} = U^T A U = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & & 0 \\ & \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & & 0 \\ & & & \ddots & \ddots & & & \\ 0 & & & & & & & \beta_{m-1} \\ & & & & & & & \beta_{m-1} \\ & & & & & & & \alpha_m \end{pmatrix}$$

となる。Aに縮重がなく、 u_1 が特別のものでなければ $m=n$ で U は正方行列となる。こうして得られた \bar{A} は Givens-Householder法で得られた \bar{A} と一致することも知られている*。一般には Lanczos 法は Householder 法にくらべて計算量の点で不利であるが、Aが疎(sparse)であるときは、 u_k から

* 正確には $u_1 = (1, 0, \dots, 0)$ としたときに一致する。それ以外の u_1 を用いたときは、それを $(1, 0, \dots, 0)$ に移すような Householder 変換を最初に行なってから G-H 法を行なった場合と一致する。これを実行するためには、Aの行列に対して第0列と第0行として u_1 とその転置とをつけ加えた行列に対して G-H 法を行なえばよい。

Au_k を求める計算が速くなるので有利になる。

以上は原理的な、つまり計算が誤差を伴わないとした場合についての話であるが、実際に有限な桁数の計算で反復(1.1)~(1.3)を実行すると、丸め誤差の累積(数値的不安定性)を生じて u_k の直交性が破れ、正しい α_k, β_k が得られない。また、その結果、反復過程が終結せず無限に続く。これに対する対策として、 u_k に対して Schmidt 直交化を毎回、または適当な間隔で行えば、以上の困難は解決されるが、この余分な計算(再直交化)の計算量は大きく、またそのために過去に得られた u_k を全部記憶するか、または2次記憶から取り出すために必要な記憶容量または転送時間を考えると、実用的でない。そこで、直交化なしの Lanczos 法(したがって直交性は保証されない)が重要な意味をもってくる。

2. 直交化なしの Lanczos アルゴリズム

直交化なしの Lanczos アルゴリズムとは、結局は初期値 $u_0 = 0$, 適当な u_1 から出発して

$$(3) \quad Au_k = \beta_k u_{k+1} + \alpha_k u_k + \beta_{k-1} u_{k-1}$$

が満たされ、かつ u_k が 局所的に(隣同士で)直交するように、 α_k, β_k を定めに行くことである。そしてそれを m 段で打ち切ったとすると、

$$(4) \quad A U_m = U_m \bar{A}_m + R_m$$

$$\text{ただし } U_m = (u_1, u_2, \dots, u_m)$$

となる。 \bar{A}_m は (2) の形の 3 重対角行列を頭 m 行 m 列で打ち切ったものである。 R_m は打ち切りのための残余項で

$$R_m = (0, 0, \dots, 0, \beta_m u_{m+1})$$

と書ける。したがって \bar{A}_m は A と完全に相似ではない。

ここで A の固有値方程式

$$A x - \lambda x = 0$$

において

$$(5) \quad x = U_m \bar{x}$$

と置いて (4) を用いると、容易に

$$A x - \lambda x = U_m (\bar{A} \bar{x} - \lambda \bar{x}) + R_m \bar{x} = 0$$

が得られる。すなわち、もし残余項が 0 であるなら、 \bar{A} に対する固有値はそのまま A の固有値であり、 u_k の直交性は特に必要とされないことがわかる。更に、 R_m は 0 でなくても、

$$R_m \bar{x} = \beta_m \bar{x}_m u_{m+1} = 0$$

つまり $\bar{x}_m = 0$ であれば、 \bar{A} に対する固有値問題が正しい固有値を与えることがわかる。実際には、後にわかるように $\bar{x}_m = 0$ ということはあり得ないが、 \bar{x}_m が $|X|$ にくらべて無視できるほど小さければ、実際上は正確な固有値、そして固有ベクトルが得られるのである。

経験によれば、偏微分方程式から差分法、有限要素法などで得られた大型固有値方程式に対しては、最大、最小の固有値に対しては n よりもはるかに小さい m において既に $\bar{\alpha}_m \approx 0$ が成立する。したがってそのような問題においては反復過程も m 段あたりで打ち切ってよいから、計算量は更に大幅に減少し、Lanczos 法の有利さが増す。1例を示せば、膜の振動の問題で、1500 元の方程式に対して、 $m=50$ で最大、最小の固有値は 10^{-7} の相対誤差で得られた。

3. すべての固有値を求めること

上述のように、固有値スペクトルの中の両端に近い部分は $m \ll n$ の m で打ち切っても、よい近似値が得られるが、中間の固有値は $m \approx n$ のあたりまで打ち切ったのでは正しく得られないことが、経験的に知られている。この点が、直交化なし Lanczos 法で直交性が破れたための直接的な帰結である。

直交性の破れによるもう一つの問題は、端の方の固有値が m を大きくした場合、重複して、見掛け上多重根としてあらわれることである。“見掛け上” と言った意味は、3重対角行列では理論上は固有値の縮重はおこり得ないからである。この多重根は正確には極めて近接した根であって、それらの固

有ベクトル \bar{x} はもちろん互に異なるが, $x = U_m \bar{x}$ によって真の固有ベクトルに戻すと, 通常は同じベクトルになってしまう. u_k が直交せず, 線形独立性さえ保証されないことが, この結果を生んだのである. しかし, この重複根の問題は固有値を求める目的にはあまり大きい支障にはならない.

さて, それでは直交化なし Lanczos 法で中間の大きさの固有値や固有ベクトルを求めることは不可能だろうか. J. Culcum と R. A. Willoughby⁽¹⁾ はこれが可能であることを実例によって示した. 彼等によれば, n を越えて $m \simeq cn$, $c = 2 \sim 5$ のあたりまで Lanczos プロセスを押し進めて得た大きな 3 重対角行列について固有値問題を解くことによって, 実際上すべての固有値が得られることを幾つかの実例で示した.

しかし, また幾つかの問題点がある. それは

1. m を十分大きくすれば必ずすべての固有値が得られるという理論的な保証がない.
2. m をどのくらいに取ればよいか, 事前に知ることはできない.
3. 3 重対角化行列から求めた固有値には, 多くのにせ (spurious) 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.
4. 見かけ上の重複根と真の近接根との区別が難しい.

5. もとの問題で個々の固有値が何重に縮重しているかを別途に知り得る場合以外は、一般に、異なる固有値が全部で何個あるかを事前に知り得ないから、実際に得られた正しい固有値が、もとの問題のすべての固有値であるという確証が得られない。

Cullum & Willoughby は、3. の問題に対しては、 n 個の固有値を弁別する方法を与えた。また 4. の問題に対しては、高精度計算によって近接根と見做り上重設根とを区別した。

彼等の方法は、とにかく大きい重対角行列をまず作って、QR法のような方法でいきなり全固有値を求め、その中から正しいものを拾い出すという方法である。そのため大部分の固有値は2重、3重など、多いのは何十回も重複してあらわれ、そのほかにも n 個の固有値もまじる。ところが実際には、必要な次元数 m は個々の固有値によって異なり、そしてそれぞれ固有値に対して、それに適合した m を選ぶならば、すべて重複なしの単根として得られる筈であって、また、 n 個の固有値もあらわれない筈なのである。つまり、何かの方法で、個々の固有値について、あらかじめ必要な m の値を動的に定めることができれば、無駄な計算を排除し、かつ n 個の根を見分ける必要もなくして、全体を更に能率化できるわけである。

しかし以上の目標を達成するためには, Lanczos 法で得られる 3 重対角行列とその固有解の性質をもっと明確にする必要がある. そしてそれには厳密な数学的解析も必要であろうが, 以下にのべるのは, むしろ物理的直観をもとにして, この問題を考えるための指針のようなものである.

4. 鎖状線形物理系としての 3 重対角化行列

行列 A から定まる方程式

$$Ax - \lambda x = y$$

は一つの線形物理系の外力 y に対する応答をきめる方程式と考えることができる. たとえば, 多数の鍾をたがいにばねをつないだ系であり, ここで x の成分 x_1, \dots, x_n は各の鍾の変位, y の成分 y_1, \dots, y_n はそれぞれの鍾にはたらく外力である. ここで外力はすべて $e^{i\omega t}$ のように変わる周期的な力であり, また鍾の質量はみな等しいものとする. そして

$$\lambda = -\omega^2$$

である.

このような物理的モデルを考えたとき, 行列 A を Lanczos 法で 3 重対角化することは, この線形系を u_1 であらわされる駆動点 (駆動モード) から見て 1 次元化 することである. すなわち, 外力 u_1 で系を駆動したときの変位 x は

$$Ax - \lambda x = u_1$$

を解いて得られるが、そのとき

$$Z(\lambda) = x \cdot u_1$$

によって定義される $Z(\lambda)$ を、駆動点 u_1 に対する系の インピーダンス と呼ぶことにする。さて、これを (5) によって変換すると

$$(6) \quad \bar{A}\bar{x} - \lambda\bar{x} = e_1 = (1, 0, 0, \dots, 0)$$

そしてこれに対応してインピーダンスは

$$(7) \quad Z(\lambda) = \bar{x} \cdot e_1 = \bar{x}_1$$

となる。つまり 1次元化した系の入力端から見たインピーダンスが $Z(\lambda)$ となるということである。これが“1次元化”の意味である

(6) を成分に分けて書くと

$$(8.1) \quad (\alpha_1 - \lambda)\bar{x}_1 + \beta_1\bar{x}_2 = 1$$

$$(8.2) \quad \beta_{k-1}\bar{x}_{k-1} + (\alpha_k - \lambda)\bar{x}_k + \beta_k\bar{x}_{k+1} = 0 \quad (k=2, 3, \dots, n)$$

実際には $Z(\lambda)$ を求めるには、 x_n を基準にして方程式 (8.2) を逆方向に漸化式として x_{n-1}, x_{n-2}, \dots と順に求めて行けばよい (後退法)。その結果はまた連分数の形で

$$(9) \quad Z(\lambda) = \frac{1}{\alpha_1 - \lambda} - \frac{\beta_1^2}{\alpha_2 - \lambda} - \frac{\beta_2^2}{\alpha_3 - \lambda} - \dots - \frac{\beta_{n-1}^2}{\alpha_n - \lambda}$$

とあらわされる。つまり、3重対角化はインピーダンス $Z(\lambda)$

を連分数に展開することであるともいえる。

(9)式が成り立つのは, Lanczos法を正確に, 丸め誤差なしに実行した場合に限られることを注意しておこう. 直交化なしのLanczos法で求めた α_k, β_k の系列は無限に続き, したがって得られる連分数も無限連分数であるが, その値は A 自身に対する $Z(\lambda)$ と等しくはならない. 関係(7)が成り立つためには変換行列 U が直交行列であることが必要だからである.

しかし, こうして無限連分数から得た $Z(\lambda)$ の極, すなわち3重対角行列の固有値は, 真の $Z(\lambda)$ の極, つまり真の固有値と一致する.

5. 3重対角化行列の固有ベクトル

実際の3重対角化方程式の固有値問題の解——固有ベクトル——について考える.

行列 A が偏微分方程式の離散化で得られたものである場合は, 3重対角化行列に対応する物理系は, 通常はある程度一様な鎖状構造であり, したがって λ の値によって, 鎖に沿って波が伝播する場合(伝播帯)と波とならず減衰する場合(減衰帯)とがある. 一般には, ある区間 $\lambda_1 < \lambda < \lambda_2$ が伝播帯でその外側は減衰帯である. 実際には伝播帯と減衰帯の

状況は空間的にも変り、定まった λ に対して伝播域と減衰域が存在する。

λ が固有値の一つに一致した場合、固有ベクトル \bar{x} の成分 x_i の様子は、 x_i が大きい値をとる領域が鎖に沿っていくつか存在し、その間の部分では x_i は小さい。 x_i の大きい部分は伝播域でその間は減衰域である。 x_i が大きくなるそれを

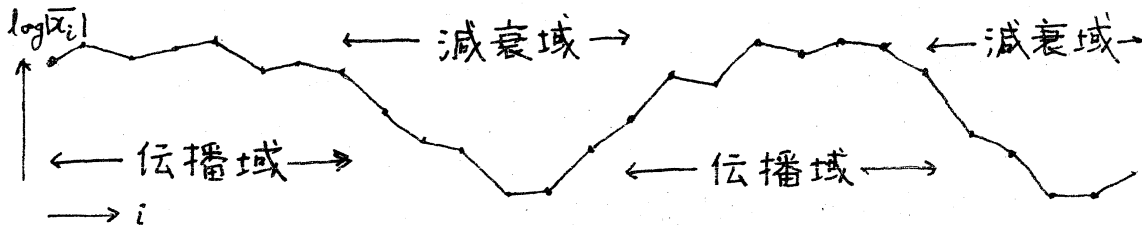


図1. 鎖状線形系の固有ベクトルの概念図

れの領域は、同じ固有値 λ に対する固有ベクトル(モード)になっている。すなわち \bar{A} における多重固有値に対応する。それらは(縮重のない場合)(5)により \bar{x} になおせば同一のベクトルになってしまう。これらのモードはそれらの間に存在する減衰域(x_i が小さくなる部分)を介して僅かに結合しているので、正確にはごく微小の差をもったいくつかの固有値が存在する。一般に、中間に近い固有値に属するモードは、両端に近い固有値に属するモードよりも幅が大きい。したがって定った打ち切り長 m に対して、重複度が少ない。

固有値問題を解くに当たっては、目的とする固有値に対して、そのモードを唯一つ含むぐらいに打ち切り長 m を小さくす

るのが有利である。一般に、鎖の遠端 (\bar{x}_m) が伝播域に属しているとき、 n 位の固有値が得られる。 \bar{x}_i が小さくないところで打ち切ったことになるからである。したがって、適当な打ち切り点 \bar{x}_m は、入り口 (\bar{x}_1) から見て行って、最初に出逢った減衰域の中に選ぶべきである。 m がそれより小さいと固有値は不正確であり、それより大きくすると重複固有値や n 位の固有値を得る。

6. 3重対角化固有値問題の解法

3重対角形の固有値問題を解く方法はいろいろ知られているが、われわれの目的には、方程式

$$(10) \quad \beta_{k-1} \bar{x}_{k-1} + (\alpha_k - \lambda) \bar{x}_k + \beta_k \bar{x}_{k+1} = 0 \quad k=(1, 2, \dots, m)$$

を、初期条件

$$(11) \quad \bar{x}_0 = 0, \quad \bar{x}_1 = 1$$

から出発して端から計算して \bar{x}_{m+1} を求め、その結果にもとづいて、たとえば Newton 法によって λ を改良して、

$$\bar{x}_{m+1}(\lambda) = 0$$

となる λ を求めるという方法が適している。その際必要な微係数は、(10) を λ で微分して得られる

$$(12) \quad \beta_{k-1} \frac{d\bar{x}_{k-1}}{d\lambda} + (\alpha_k - \lambda) \frac{d\bar{x}_k}{d\lambda} + \beta_k \frac{d\bar{x}_{k+1}}{d\lambda} = \bar{x}_k$$

によって計算できる。こうして固有値と同時に、(変換された)

固有ベクトル \bar{x} も得られる。

なお, Newton法適用の際, $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_{m+1}$ が Sturm 系列であることを利用して, “暴走”を防ぐことができる。すなわち Newton 法で得た新しい λ に対して計算した \bar{x}_k の系列の \bar{x}_m までの符号変化の数が, 所望の数と一致しないときは, その λ は所望の領域を逸脱したものととして棄て, 補正値をたとえば半分減らすようにする。このように Newton 法と“二分法”とを適当に組み合わせることにより, 安定かつ能率のよい解法が得られる。

ここで, 打ち切り長 m をどうして定めるかが問題である。 λ が正しいためには, $\bar{x}_{m+1} = 0$ と同時に $\bar{x}_m \simeq 0$ が要求されるが, これは正しい λ が見つかった後ではじめてわかることであり, 一方正しい λ は m が定まらなければ定まらないので, この条件から直接 m を定めるのは困難である。ところで, 固有値の収束の条件は \bar{x}_m が鎖状系の減衰域にあることであったことを思い出そう。減衰域とは漸化式 (10) が不安定となる領域である。そこで λ が固有値でないとき, または初期条件が (11) と違うとき (10) が漸化式として不安定になれば, そのあたりで打ち切ればよい。この条件が λ の値にあまり敏感でないのも好都合である。

そこで m を定めるつぎの方法が生まれる。(10) と同じ形

の漸化式

$$(13) \quad \beta_k v_{k+1} = -(\alpha_k - \lambda)v_k - \beta_{k-1}v_{k-1}$$

を $v_1 = 0, v_2 = 1$ から出発して計算する. そして適宜に選んだ大きい正数 R に対して $|\beta_k v_{k+1}| > R$ となったら, その k を m としてそこで打ち切る.

なお v_k と \bar{x}_k との間には関係

$$\beta_k (\bar{x}_k v_{k+1} - v_k \bar{x}_{k+1}) = \beta_1$$

が成り立つことが容易にわかる. そこで, $|\bar{x}_m| < \varepsilon, |\bar{x}_{m+1}| < \varepsilon$ が共に成り立つなら

$$\beta_m (|v_m| + |v_{m+1}|) > \beta_1 \varepsilon^{-1}$$

である. これから, 定数 R として $\beta_1 \varepsilon^{-1}$ を採用すればよいことがわかる. ここで ε は演算の精度である.

v_{m+1} は λ に敏感でないと言っても, やはり λ の関数であるから, λ を探索する間に変化する. しかし Sturm 指数を使っているので, 途中で m を変更することは望ましくない. そこで, はじめに設定した λ に対して m を一旦定めたら, 良い方向, つまり $|v_{m+1}|$ が大きくなる方向への変化がおこっても m はそのままにしておく方がよい. しかし悪い方向, つまり $|v_{m+1}|$ が限界値を下回るような状況では, もう一度 m を (もっと大きく) 定めなおす. そのときは Sturm 指数の標準値もあらたに定める必要がある.

後退法 上のようにして \bar{x}_{m+1} のほかに v_{m+1} を計算するのは計算の手間を2倍にするが、つぎのように後退法を使うと、一つの漸化式で両方が求まる。すなわち、初期値 $w_{m+1}=0$, $w_m=1$ から出発して、漸化式

$$\beta_{k-1} w_{k-1} = -(\alpha_k - \lambda) w_k - \beta_k w_{k+1}$$

を逆に k が減る方向に計算する。すると

$$\beta_1 w_1 = \beta_m v_{m+1}$$

$$\beta_0 w_0 = \beta_m \bar{x}_{m+1}$$

である。このことは $A - \lambda I$ の小行列式

$$\Delta_m^j = \begin{vmatrix} \alpha_{j+1} - \lambda & \beta_{j+1} & & & 0 \\ \beta_{j+1} & \alpha_{j+2} - \lambda & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \beta_{m-1} \\ 0 & & & \beta_{m-1} & \alpha_m - \lambda \end{vmatrix}$$

を考えると、

$$\Delta_m^0 = \beta_1 \beta_2 \cdots \beta_m \bar{x}_{m+1} = \beta_{m-1} \beta_{m-2} \cdots \beta_1 \beta_0 w_0$$

$$\Delta_m^1 = \beta_2 \beta_3 \cdots \beta_m v_{m+1} = \beta_{m-1} \beta_{m-2} \cdots \beta_2 \beta_1 w_1$$

であることから直ちにわかる。

後退法は w_m から出発するから m を定めるのには使えない。そこで m を定めるときには前進法を用い、あとは λ を変えながら後退法で \bar{x}_{m+1} をしらべ、同時に v_{m+1} を監視する。 \bar{x}_{m+1} の微係数も、(12) に似た漸化式で後退的に計算できる。

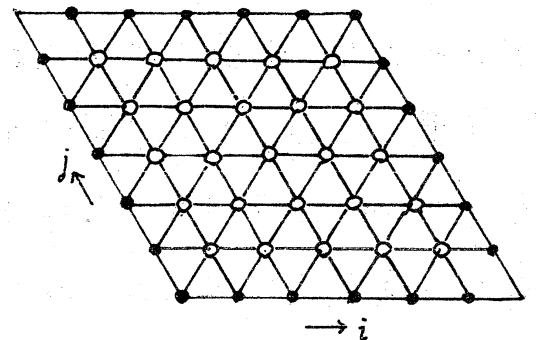
この方法でやれば、3重対角化行列をいつも必要最小限のところまで打ち切って計算できる。したがって、3重対角化のプログラムを固有値を求めるプログラムと一体化することにより、固有値計算の方で打ち切り長 m を大きくする要求が出る度毎に、必要なところまで3重対角化を続行するようにして、計算量の主要部分を占める3重対角化演算を最小限におさえることができる。

7 数値例

つぎに例として、鋭頂角 60° の菱形膜(周辺固定)の固有振動を、三角メッシュによる差分近似(つまり有限要素法)で求める問題を扱う。すなわち、方程式は

$$u(i, j-1) + u(i, j+1) + u(i-1, j) + u(i+1, j) \\ + u(i-1, j-1) + u(i+1, j+1) = \lambda u(i, j)$$

である。計算は 6×6 、すなわち内点数 25 の場合についておこなったので、決して大次元ではないが、それでも Lanczos 法のおもな特徴は、よくあらわれていると思われる。



この場合、固有値は当然 25 個あるが、問題の対称性と三角ナッシュの特殊性によって、2重縮重が 3 組、4重縮重が 1 組あって、相異なる固有値は 19 個である。そして 19 個が全部得られている。しかしこの成功は初期ベクトル u_1 の選び方に依存するもので、問題のもつ対称性に合致した対称性をもつようなベクトルを初期ベクトルに採用すると全部の固有値は得られない。だから全部の固有値を一回の Lanczos プロセスで得るためには、わざと対称性を悪くした初期ベクトルを用いる必要がある。以下の例では

$u(1,1) = u(1,2) = 1/\sqrt{2}$, 他は 0 を初期ベクトルとして用いた。

(しかし本来から言えば、問題に対称性があるときは、それを積極的に利用して群論的に問題を簡約し、方程式の元数を少くして解くのが本筋であろう。)

こうして得られた 19 個の固有値を表 1 に示す。括弧内に示した

[表 1]

	λ	ν / m
	5.00819	0 / 14
	4	1 / 16
	3.37368	2 / 16
	2.98742	4 / 18
(2)	1.87939	6 / 21
	1.46223	7 / 21
	.771996	13 / 29
	.767216	14 / 29
	1.79912E-07	13 / 25
(2)	-0.347297	17 / 30
	-0.364052	15 / 26
	-0.834298	16 / 25
	-1.23826	17 / 25
	-1.27003	20 / 28
(2)	-1.53209	21 / 28
	-1.63797	21 / 27
(4)	-2	19 / 22
	-2.50682	20 / 22
	-2.51931	20 / 21

縮重度は解析的に求めた解から得られたもので、Lanczos 法からは縮重度は知り得ない。右の欄に示した数字は、斜線の右が打ち切り長 m 、斜線の左はそのときの Sturm 指数（符号変化の数）である。Sturm 指数が $m-1$ に等しくなったらそれが最後の、つまり最小の固有値である。

表 2 には、いくつかの固有値に対して、それに到達するまでの探索の経過を示した。ここで、第 2 欄の Sturm 指数 ν が動いている間は Newton 法が機能せず、もっぱら二分探索が [表 2]

λ	ν	ν_0/m
(1)		
6	0	0 / 11
5.25	0	0 / 13
4.71481	1	0 / 13
5.08981	0	0 / 13
4.96672	0	0 / 14
4.99627	0	0 / 14
5.00723	0	0 / 14
5.00819	0	0 / 14
5.00819	0	0 / 14
(2)		
5.00819	0	1 / 14
4.25819	1	1 / 15
3.88319	2	1 / 15
4.07069	1	1 / 15
3.97694	2	1 / 15
4.02382	1	1 / 15
4.00038	1	1 / 16
3.99999	1	1 / 16
4	1	1 / 16
(3)		
4	1	2 / 16
3.25	2	2 / 16
3.33577	2	2 / 16
3.37074	2	2 / 16
3.37367	2	2 / 16
3.37368	2	2 / 16

λ	ν	ν_0/m
(7)		
1.46223	6	7 / 20
.712233	8	7 / 20
1.08723	6	7 / 20
.899733	9	9 / 22
.863427	9	9 / 22
.813566	9	9 / 22
.775868	11	11 / 25
.768947	12	11 / 25
.862697	11	11 / 25
.812753	11	11 / 25
.775539	11	11 / 25
.769038	12	11 / 25
.815913	11	11 / 25
.776867	11	11 / 25
.768758	12	11 / 25
.792195	11	11 / 25
.76978	12	11 / 25
.781499	11	11 / 25
.77564	11	11 / 25
.77271	13	13 / 29
.771312	14	13 / 29
.772777	13	13 / 29
.772044	13	13 / 29
.771991	13	13 / 29
.771996	13	13 / 29

おこなわれている。 ν が一定して Newton 法が正常にはたらきはじめると、あとはたちまち収束することがわかる。第7固有値 $\lambda = 0.771996$ の場合は最も手間取った例である。第3欄の打ち切り長 m が途中で変っているのは (13) による ν_{m+1} が小さすぎたために打ち切り点を先へのばしたところであって、ここで前進法が使われる。それ以外のところはすべて後退法で計算される。

斜線の左側の数字はここでは Sturm 指数 ν の目標値 ν_0 である。実際の Sturm 指数 ν が ν_0 に一致しないときには二分探索をおこなう。なお m が変わったときは、それに伴って ν_0 も変わることになる。

表は、漸化式の解、つまりベクトル w, \bar{x} などの成分の大きさを、対数グラフ的に表示したものである。すなわち、 w_i, \bar{x}_i などの2進浮動小数点表示の仮数部上8ビットの数を、指数部の値に相当する桁数だけ右へずらして印字してある。ここに示したのは最大固有値 $\lambda \doteq 5.00819$ の場合である。

二つの図はそれぞれ w_i (後退法の解)、 \bar{x}_i (前進法の解) を示し、それらは λ が固有値に等しければいずれもそれに対応する固有ベクトルを与えるはずであるが、実際両者は定数因子を除いてほぼ一致している(ただし上下は反転)。しか

しこのことは λ が(3重対角化された)固有値問題の解に正確に一致したときにはじめて成立することである。 λ が不正確であると(それは固有値としては十分受け容れられる正確さであっても)、 w の方は一応妥当な固有ベクトルを与えるが、 \bar{x} の方は甚だしく違ったものになる。したがって、前進法で正しい固有ベクトルを得ようと思ったら、漸化式(10)の計算はすべて倍精度計算をする必要がある。

[表3]

$\lambda = 5.0081922$				
13		128		
12		167		
11		136		後
10		197		退
9		225		法
8		246		
7		219		
6		197		
5		153		
4		128		
3		138		
2		209		
1		195		
	$-1.112399710336831D-04$			
		$\log w_i$		
		$\log \bar{x}_i$		
$\lambda = 5.0081922$				
1		128		
2		137		
3		181		
4		169		前
5		280		進
6		129		法
7		143		
8		161		
9		147		
10		129		
11		179		
12		219		
13		161		
	$-1.112399730751529D-04$			

表4は、打ち切り点をずらすと先へのぼしたときの固有ベクトルの様子を、表3と同じ形式で示したものである。固有ベクトルは、本来は同じベクトルを表現している数個(ここでは3個)のセグメントから成っていることがわかる。各セグメントはそれぞれで完全な一つの固有ベクトルをあらわし、したがって定まった形をもっているが、その符号や相対的な大きさは、 λ の値の微少な変化に敏感に依存する。表4には

3種の λ に対する固有ベクトルを示す.

[表 4]

$\lambda = 5.00819225$	$\lambda = 5.0081922$	$\lambda = 5.00819217$
1	1	1
2	2	2
3	3	3
4	4	4
5	5	5
6	6	6
7	7	7
8	8	8
9	9	9
10	10	10
11	11	11
12	12	12
13	13	13
14	14	14
15	15	15
16	16	16
17	17	17
18	18	18
19	19	19
20	20	20
21	21	21
22	22	22
23	23	23
24	24	24
25	25	25
26	26	26
27	27	27
28	28	28
29	29	29
30	30	30
31	31	31

137	137	137
181	181	181
168	168	168
200	200	200
129	129	129
143	143	143
161	161	161
147	147	147
129	129	129
179	179	179
225	219	215
128	161	208
133	-137	-187
176	-153	-136
215	-189	-167
133	-233	-207
191	-167	-148
170	-149	-132
159	-139	-247
151	-132	-234
188	-164	-143
-180	158	168
-206	181	192
-132	232	246
-164	144	152
-173	152	161
-148	130	137
-133	234	248
-142	250	132
-244	213	223
-162	138	141

→ $\log \bar{x}_i $	→ $\log \bar{x}_i $	→ $\log \bar{x}_i $
---------------------	---------------------	---------------------

[文献]

- (1) Cullum, J. and R. A. Willoughby: Lanczos and the Computation in Specified Intervals of the Spectrum of Large, Sparse, Real Symmetric Matrices. Sparse Matrix Proceedings 1978, ed. I. Duff and G. W. Stewart. Philadelphia: SIAM Publ.