

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⁽¹⁾ は、Lanczos 法による三重対角化を、ある所で打ち切って、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、途中で再直文化が必要となる。ところが実際は再直文化を行な

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

わなくとも、必要とする固有値は、ほとんど変らない精度で求められることを見出した。再直交化を行わないために計算量および記憶容量を大幅に減らすことができる。

今、 A を $N \times N$ の sparse matrix とし、その固有値、固有ベクトルをそれぞれ λ , w とすると、

$$(1) \quad Aw = \lambda w$$

A を三重対角化した行列 B を、

$$(2) \quad B = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_{N-2} & \alpha_{N-1} & \beta_{N-1} \\ & & & \beta_{N-1} & \alpha_N \end{bmatrix}$$

とすると、Lanczos 法の手続きは次のようになる。まず任意の初期ベクトル c_1 から始めて、

$$(3) \quad \begin{cases} Ac_1 = \alpha_1 c_1 + \beta_1 c_2 \\ Ac_2 = \beta_1 c_1 + \alpha_2 c_2 + \beta_2 c_3 \\ \text{-----} \\ Ac_i = \beta_{i-1} c_{i-1} + \alpha_i c_i + \beta_i c_{i+1} \\ \text{-----} \\ Ac_N = \beta_{N-1} c_{N-1} + \alpha_N c_N \end{cases}$$

ここで

$$(4) \quad \alpha_i = c_i^T A c_i$$

であり、 β_i は c_i の規格化条件から定められる。

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。

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

i 次の左上小行列式を $f_i(\lambda)$ とすると、

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

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

となり, $f_i(\lambda)$ 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,

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

とあって, 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,

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

となり,

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

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, 再直交化の手続をしなくても, (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

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

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

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

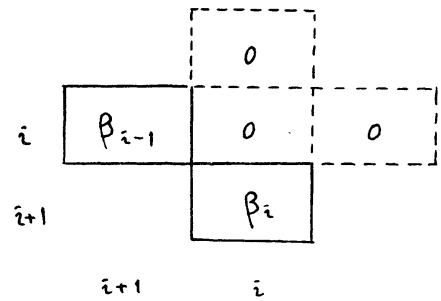
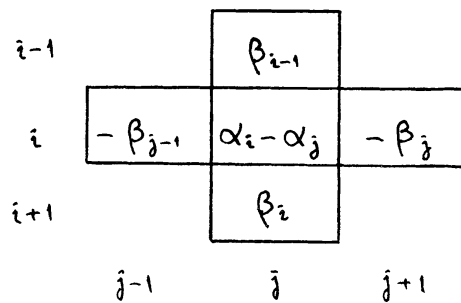
$$Z_{ij} = C_i \cdot C_j$$

とすると,

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

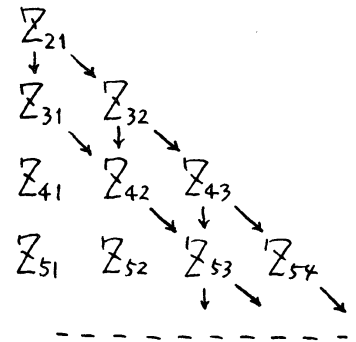
特に $i=j$ の場合は (14) より,

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



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。

$$(17) \quad \begin{cases} C_1 = \sum_i a_i w_i \\ C_2 = P_1(A) C_1 = \sum_i a_i P_1(\lambda_i) w_i \\ \quad \quad \quad \text{----} \\ C_N = P_{N-1}(A) C_1 = \sum_i a_i P_{N-1}(\lambda_i) w_i \end{cases}$$

これを (3) 式に代入すると,

$$(18) \quad \beta_m P_m(\lambda) = (\lambda - \alpha_m) P_{m-1}(\lambda) - \beta_{m-1} P_{m-2}(\lambda)$$

つまり, これが $P_m(\lambda)$ を定める漸化式である。 P_m と f_m との関係は,

$$P_m(\lambda) = (-1)^m f_m(\lambda) / \beta_1 \beta_2 \cdots \beta_{m-1}$$

(18) 式を λ で微分して,

$$(19) \quad \beta_m P'_m(\lambda) = (\lambda - \alpha_m) P'_{m-1}(\lambda) + P_{m-1}(\lambda) - \beta_{m-1} P'_{m-2}(\lambda)$$

$$(19) \times P_{m-1} - (18) \times P'_{m-1} \quad ;$$

$$(20) \quad \begin{aligned} \beta_m (P'_m P_{m-1} - P'_{m-1} P_m) &= P_{m-1}^2 + \beta_{m-1} (P'_{m-1} P_{m-2} - P'_{m-2} P_{m-1}) \\ &= \sum_{r=1}^m P_{r-1}^2(\lambda) \end{aligned}$$

ここで $m=N$, $\lambda=\lambda_i$ とすると

$$\beta_N (P'_N(\lambda_i) P_{N-1} - P'_{N-1}(\lambda_i) P_N(\lambda_i)) = \sum_{r=1}^N P_{r-1}^2(\lambda_i)$$

$\beta_N = 1$ と仮定すると,

$$(21) \quad P_N(\lambda) = (-1)^N f_N(\lambda) / \beta_1 \beta_2 \cdots \beta_{N-1}$$

つまり, $P_N(\lambda_i) = 0$ だから

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

両辺に a_i^2 をかけ,

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

(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。

λ_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 λ_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がわかる。

○ 数値例

例として, ヘリを固定した長方形の膜の振動を考え, 6×8 の mesh に切った 48 次元のものと, 30×40 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。

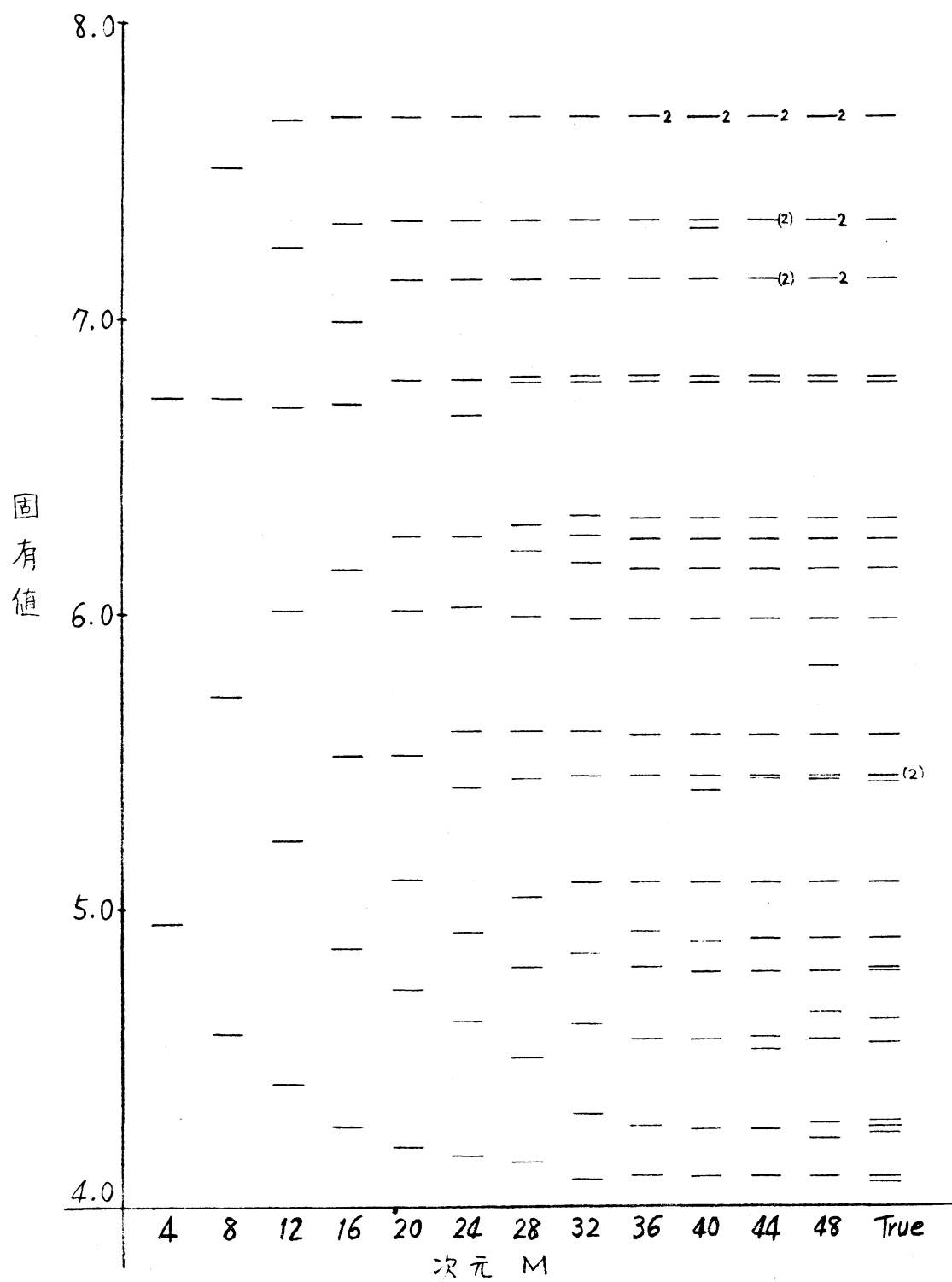
三重対角化した結果 (48次元)

LANCZOS(WITHOUT REORTHOGONALIZATION)

HOUSEHOLDER

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
3.999944E+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	1.521415E+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+00	4.000012E+00	0.000000E+00

三重対角行列を途中で切った時の固有値 (48次元)



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	1.329139E+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	-6.164672E-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 次元数	計算時間 (秒)	4桁以上正確な 固有値の個数	7桁まで正確な 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	7.844745E+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 次元数	計算時間 (秒)	5桁以上正確な 固有値の個数	7桁まで正確な 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。