Vol.2015-HPC-150 No.12
2015/8/4

ランダム行列と固有ベクトルのアンダーソン局在化

村上 弘[1,a)]

概要：大規模な行列が 3 重対角あるいは幅の狭い帯行列で，行列要素の値に乱雑性があると固有ベクトルに局在化が生じる．局在化したベクトルは，添字がある狭い区間の外部に在る要素の値は小さく無視できる．この現象は固体物性科学の分野では以前から「アンダーソン局在」として良く知られている．この現象の行列固有値問題の解法への応用を考察する．

キーワード：アンダーソン，局在化，ランダム行列，固有ベクトル

Random Matrices and Anderson's Localication of Eigenvectors

Hiroshi Murakami[1,a)]

Abstract: When a large size matrix is tridiagonal or narrow banded and also the matrix contain randomness in the elements, eigenvectors of the matrix are localized. Those elements of a localized vector are small and negligible in values whose induces are outside of a certain narrow interval.
This phenomenon has long been known well in the field of material science of solids as "Anderson's localization". We consider applications of this phenomenon to the solution method of matrix eigenproblems.

Keywords: Anderson, Localization, Random matrix, Eigenvector

1. はじめに

固体物性論の分野で Anderson P. W. による Anderson 転移（局在）の現象が知られている（1977 年の Nobel 物理学賞 [3]）．物性の理論研究には大規模行列の数値対角化がよく用いられている．しかし「数値解析，数値解法」分野ではこれまで Anderson 局在の現象と行列固有値計算の解法との関係性はあまり意識されていないように思える．

局在化の実験例を紹介し，固有値問題で局在化が生じている解の高速な計算法の可能性などについて検討考察をしてみたい．

2. 導入

大規模なベクトルが，ある狭い区間の外にある添字に対しては要素の値が微小で無視できるとき「ベクトル（状態）は局在化」していると言う．（グラフ上の隣接関係による距離で，ある点から少し離れた場所に対応する添字を持つベクトルの要素の値が微小で無視できる）．

Anderson モデルは隣接相互作用を持つ格子／ネットワークの...(省略)．スケーリング理論によると Anderson モデルでは，空間が 1 次元，2 次元の低次元系では（系の大きさが無限大の極限では）「ランダム性の程度によらず」にすべての固有状態が局在化する．そうして 3 次元系では非局在状態の発生はランダム性の程度に依存する（Anderson 転移）．

これを行列の固有値問題に対応して考えると，3 重対角行列は隣接相互作用モデルの 1 次元系の場合に相当し，行列が大規模になるとき要素にランダム性があれば固有ベクトルは局在化する（無限系に近い大規模な行列で局在化）．

局在化した固有ベクトルの要素の値は，局在の中心から添字が離れると（ある尺度で）指数関数的な減少をする．

数値解析の教科書では，ランダム性を持つ 3 重対角（帯）行列の固有ベクトルが局在化するという性質を取り上げた

[1] 首都大学東京・数理情報科学専攻
Department of Mathematics and Information Sciences, Tokyo Metropolitan University
[a)] mrkmhrsh@tmu.ac.jp

ものを見かけない．

実対称帯行列の典型例である 1 次元ラプラシアンの等間隔格子による 3 点差分近似による 3 重対角行列の場合は，固有ベクトルは添字に対し正弦波であり系全体に広がっているので，3 重対角あるいは帯である行列の固有ベクトルが局在化を起こすことは奇妙に思われるかもしれない．

もしもスケーリング理論を信じると，たとえばラプラシアンを差分近似して得られる対称 3 重対角行列に対して摂動をランダムに加えるとき，小さい摂動であっても行列次数 N を十分大きくしていくと固有ベクトルは必ず局在化を起こして正弦波として系全体には拡がらないことになる．このことは数値計算の丸め誤差があたかもランダムな摂動のようにみなせるとするならば，数値と演算の有効桁数を固定して計算の規模だけを拡大していくと，数値計算による解が数学的な解とは定性的に異なったもの（局在した波と正弦波）となる可能性を示唆する．（おそらく，行列次数 N が小さくても摂動が強ければ固有ベクトルは局在化するが，摂動が弱ければ局在化を起こすには大きな次数 N が必要となるのであろう．摂動が強ければ局在化領域は狭いが，摂動が弱ければ局在化領域が拡がる傾向になることも言えるのではないだろうか．）

3. 数値実験の例

3.1 局在化現象の例

次数 $N = 10,000$ の対称 3 重対角行列の要素を区間 $[-0.5, 0.5]$ の一様乱数で与えて，固有ベクトルの局在化の様子を観察してみる．固有ベクトル $\mathbf{v}$ の k 番目の要素の値を v_k としてそれが 2-ノルムで正規化された単位ベクトルとすると，k 番目の要素の値の 2-ノルムへの寄与を $\rho_k \equiv {v_k}^2$ とすると $1 = \sum_{k=1}^{N} \rho_k$ である．そこで ρ_k，k=$1, 2, \ldots, N$ は離散値 1 から N に対する分布の割合であるかのように考えることができる．そこで「分布の中心」を $c \equiv \sum_{k=1}^{N} k\, \rho_k$，「分布の半径」を $r \equiv \{\sum_{k=1}^{N} (k-c)^2\, \rho_k\}^{1/2}$ と定義する．固有ベクトルが局在化していれば，「分布の半径」r は次数 N に比べて小さい値となる．

次の**図 1**，**図 2**，**図 3** は，固有値分布の最小側，中央付近，最大側それぞれの場合について 7 個の固有値と対応する固有ベクトルについて 7 種類の色を用いて，横軸に要素の添字を，縦軸に要素の値をとって折れ線でグラフをプロットしたものである．ただし各ベクトルのプロットでは要素の大きさの最大値を 1 に規格化し，そのとき要素の値の大きさが閾値 $10\varepsilon_M \approx 10^{-15}$ 以下のところはプロットを省いている．各固有ベクトルはきわめて狭い範囲に局在化していて，グラフからはまるで縦線が並んでいるように見える．

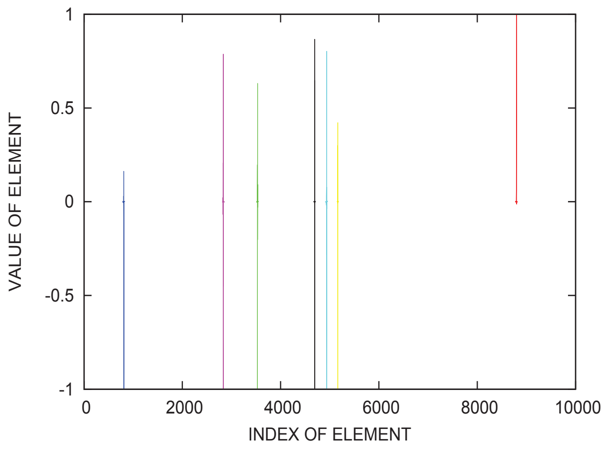

図 1　最小側 7 個の固有値の固有ベクトルの要素の値

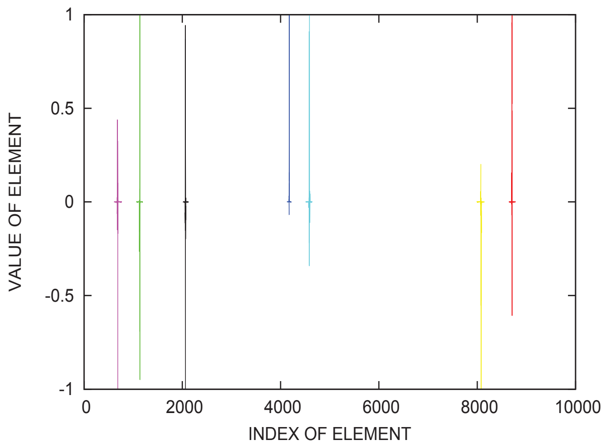

図 2　中央部 7 個の固有値の固有ベクトルの要素の値

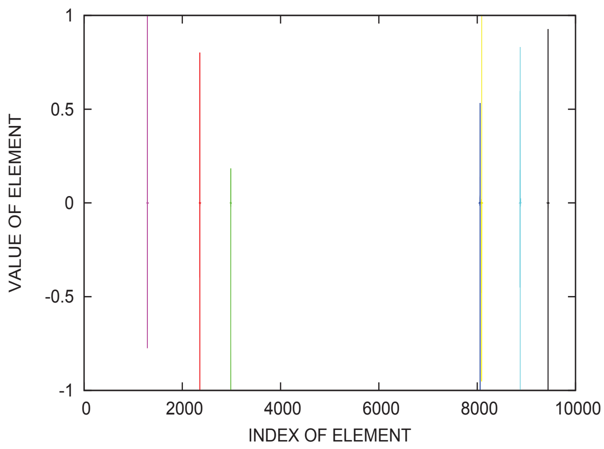

図 3　最大側 7 個の固有値の固有ベクトルの要素の値

次の**図 4** から**図 23** は，最大側固有値の固有ベクトル 20 個それぞれについて，横軸には要素の添字をとり，縦軸には要素の値をとってプロットしたグラフである．ただしベクトルは要素の大きさの最大値を 1 にスケールしてプロットし，スケールした値が閾値 $10\varepsilon_M \approx 10^{-15}$ 以下の要素は

プロットから省いている．局在化により閾値を越える値を持つ要素の添字は極めて狭い範囲に集中していることが確認できる．

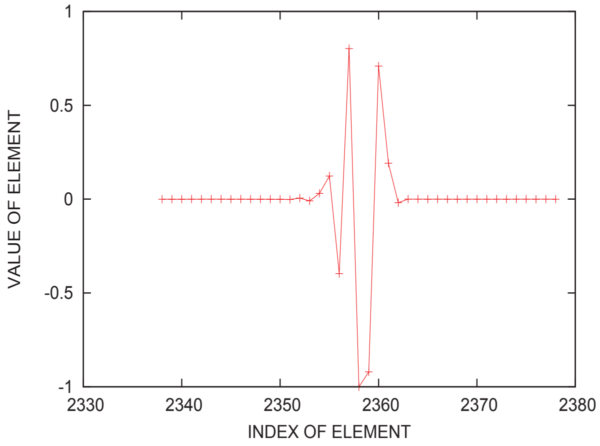

図 4　第 1 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=2,358.3，分布の半径 r=1.16

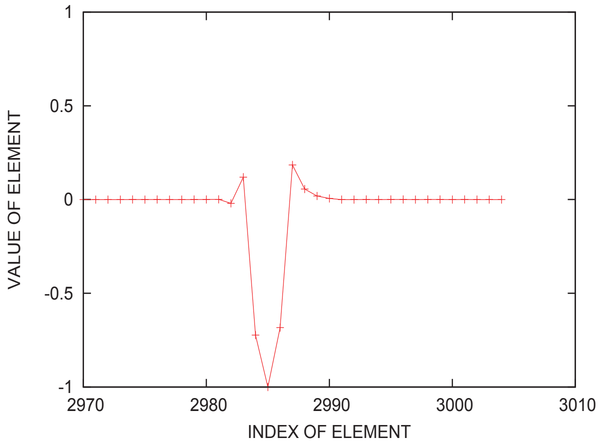

図 5　第 2 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=2,985.0，分布の半径 r=0.77

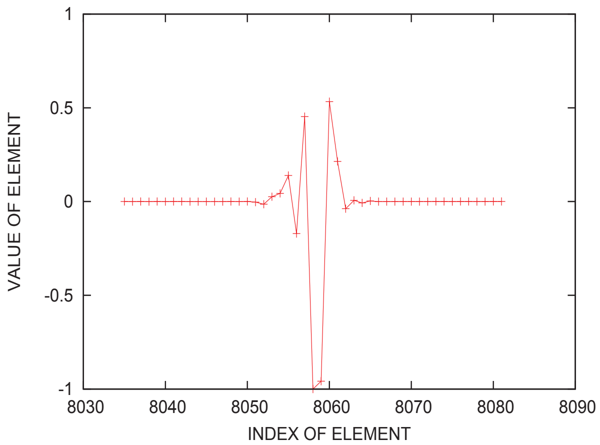

図 6　第 3 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=8,058.5，分布の半径 r=0.97

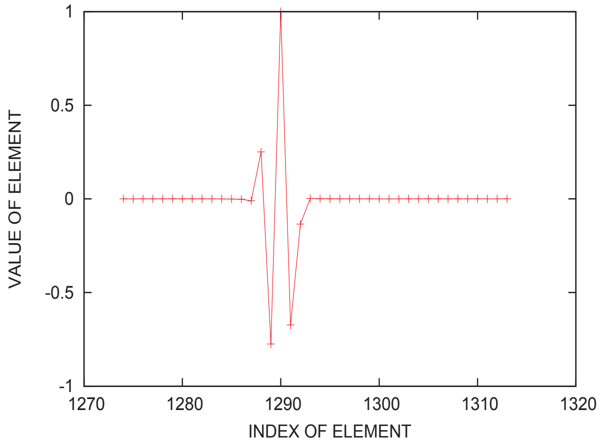

図 7　第 4 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=1,289.9，分布の半径 r=0.80

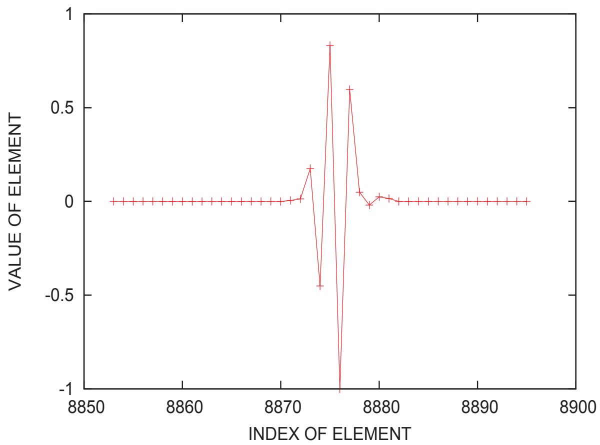

図 8　第 5 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=8,875.6，分布の半径 r=0.91

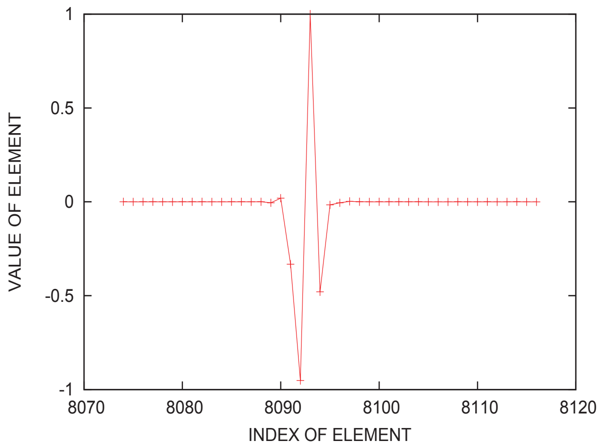

図 9　第 6 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=8,092.6，分布の半径 r=0.74

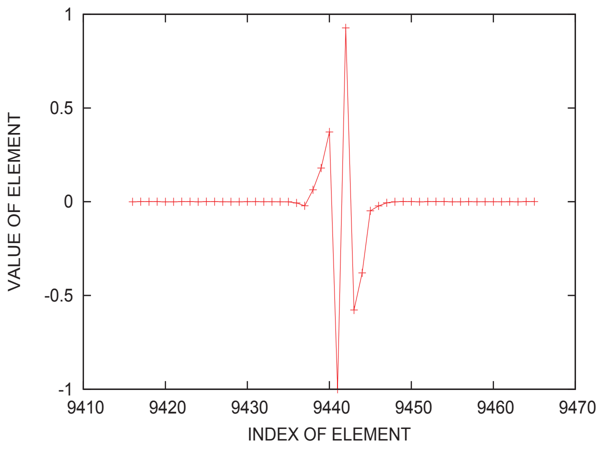

図 10 第 7 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=9,441.7，分布の半径 r=1.02

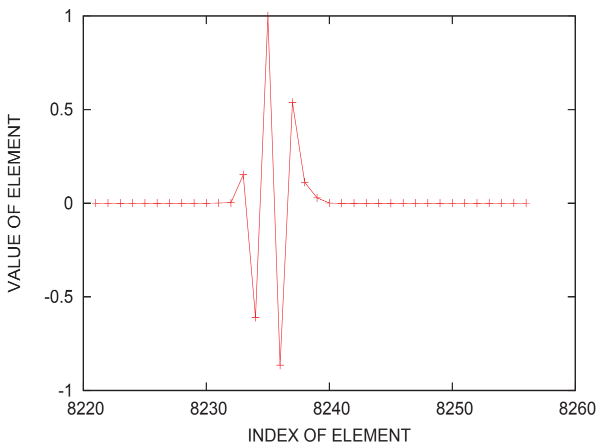

図 11 第 8 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=8,235.4，分布の半径 r=0.93

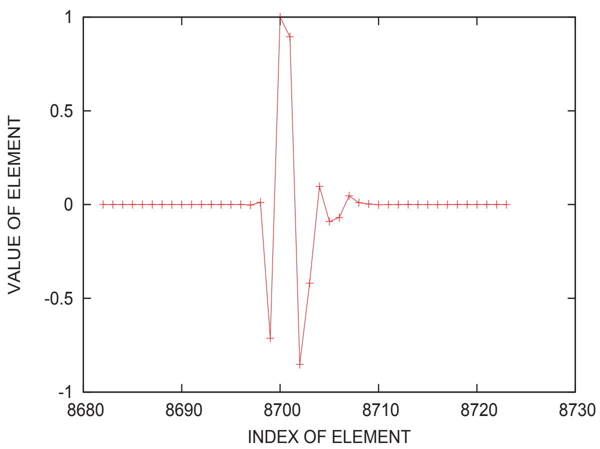

図 12 第 9 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=8,700.7，分布の半径 r=1.20

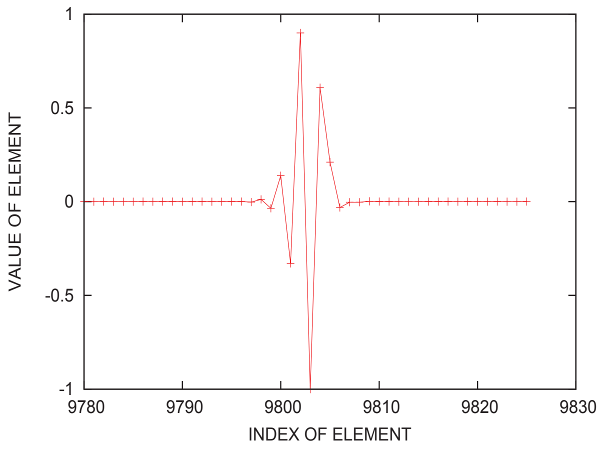

図 13 第 10 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=9,802.7，分布の半径 r=0.88

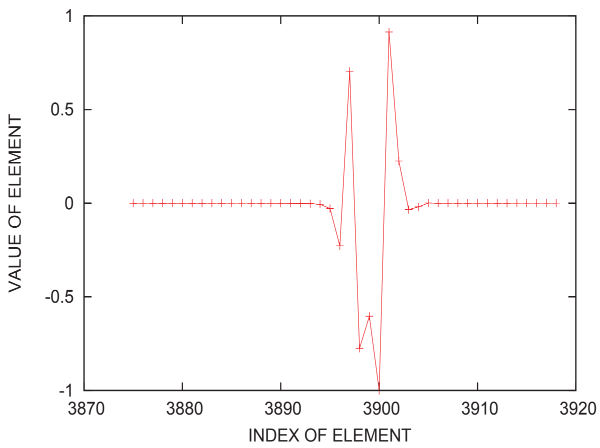

図 14 第 11 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=3,899.3，分布の半径 r=1.49

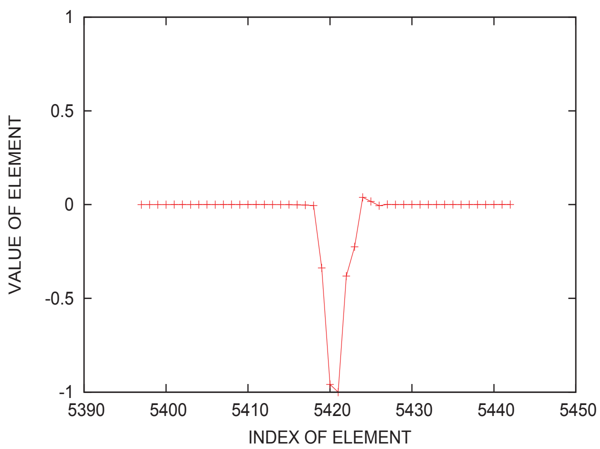

図 15 第 12 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=5,420.6，分布の半径 r=0.79

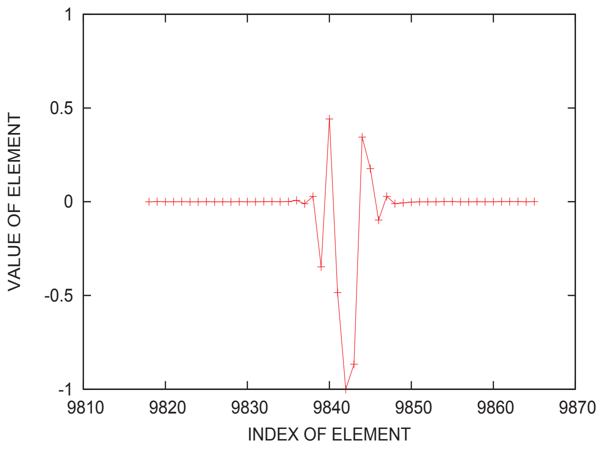

図 16 第 13 固有ベクトルの要素の値（N=10, 000，h=1）．分布の中心 c=9, 842.1，分布の半径 r=1.24

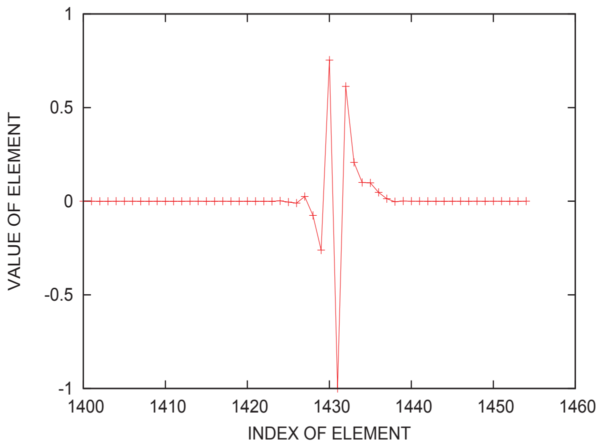

図 17 第 14 固有ベクトルの要素の値（N=10, 000，h=1）．分布の中心 c=1, 430.9，分布の半径 r=0.91

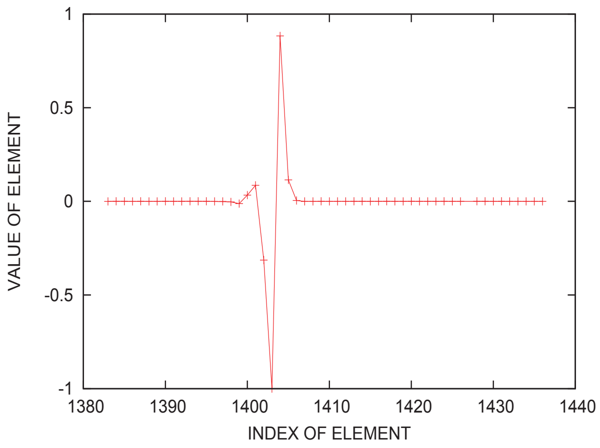

図 18 第 15 固有ベクトルの要素の値（N=10, 000，h=1）．分布の中心 c=1, 403.4，分布の半径 r=0.62

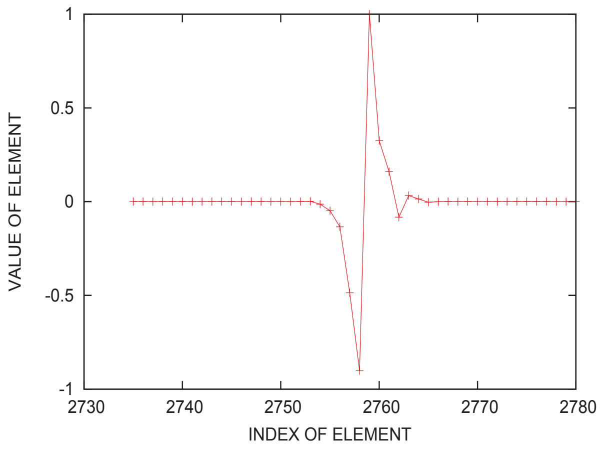

図 19 第 16 固有ベクトルの要素の値（N=10, 000，h=1）．分布の中心 c=2, 758.5，分布の半径 r=0.86

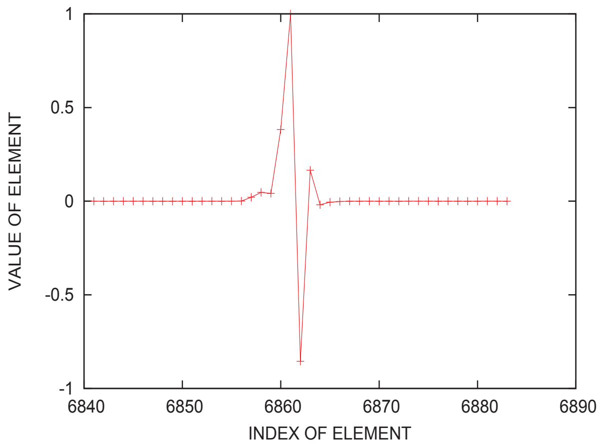

図 20 第 17 固有ベクトルの要素の値（N=10, 000，h=1）．分布の中心 c=6, 861.3，分布の半径 r=0.65

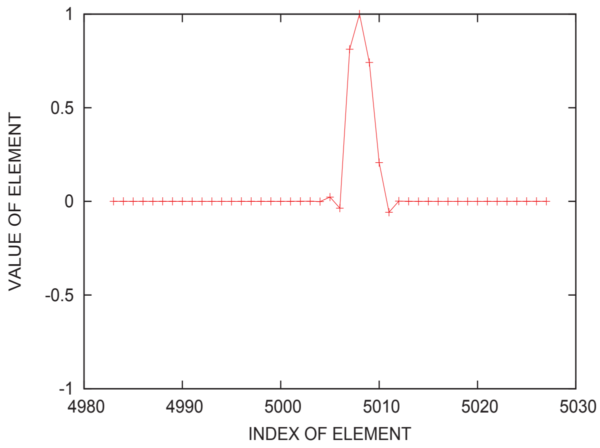

図 21 第 18 固有ベクトルの要素の値（N=10, 000，h=1）．分布の中心 c=5, 008.0，分布の半径 r=0.79

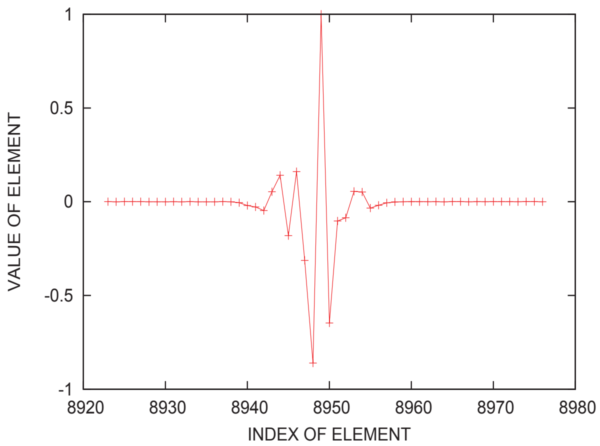

図 22 第 19 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=8,948.7，分布の半径 r=1.15

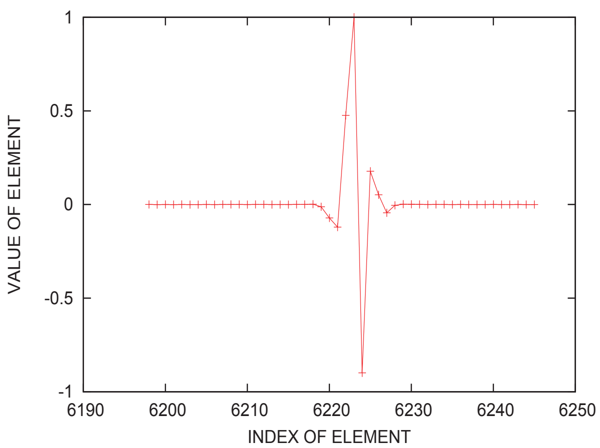

図 23 第 20 固有ベクトルの要素の値（N=10,000，h=1）．分布の中心 c=6,223.3，分布の半径 r=0.74

次の**図 24** から**図 43** は，上記と同じ最大側固有値の固有ベクトル 20 個それぞれについて，横軸には要素の添字をとり，今度は縦軸を要素の値の大きさの「対数」でプロットしたグラフである．局在の中央から添字の位置が離れるときに要素の値が指数関数的に減少していることがわかる．

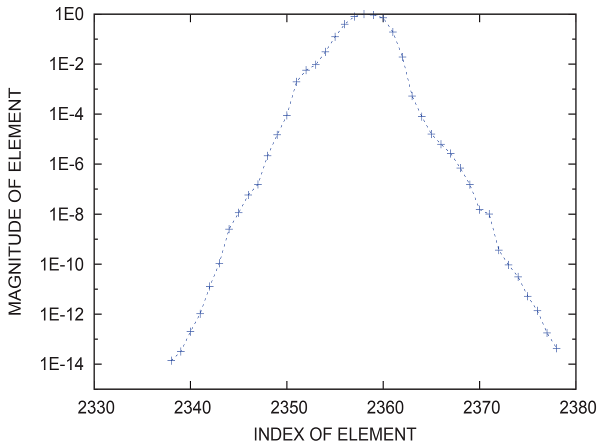

図 24 第 1 固有ベクトルの要素（大きさの対数）分布の中心 c=2,358.3，分布の半径 r=1.16

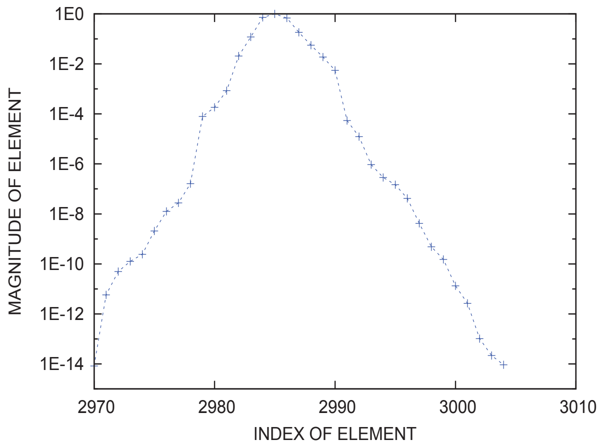

図 25 第 2 固有ベクトルの要素（大きさの対数）分布の中心 c=2,985.0，分布の半径 r=0.77

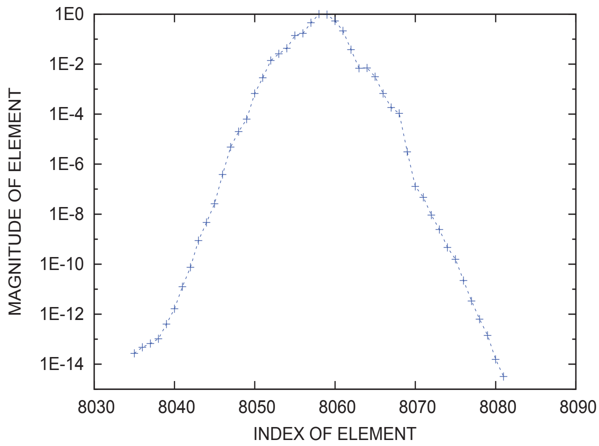

図 26 第 3 固有ベクトルの要素（大きさの対数）分布の中心 c=8,058.5，分布の半径 r=0.97

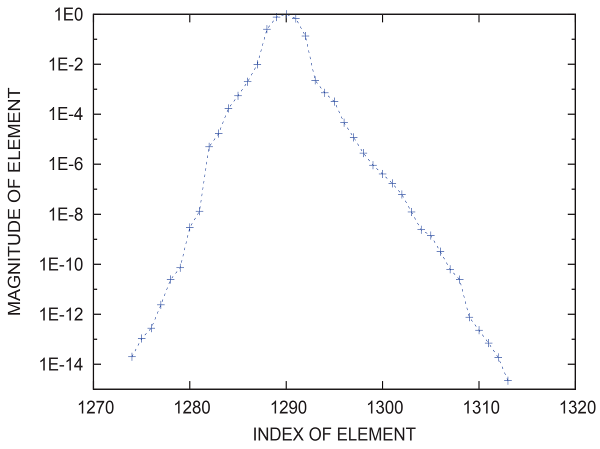

図 27 第 4 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=1, 289.9，分布の半径 r=0.80

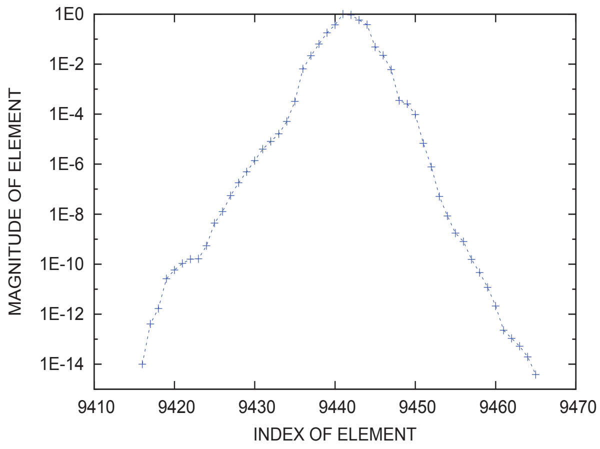

図 30 第 7 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=9, 441.7，分布の半径 r=1.02

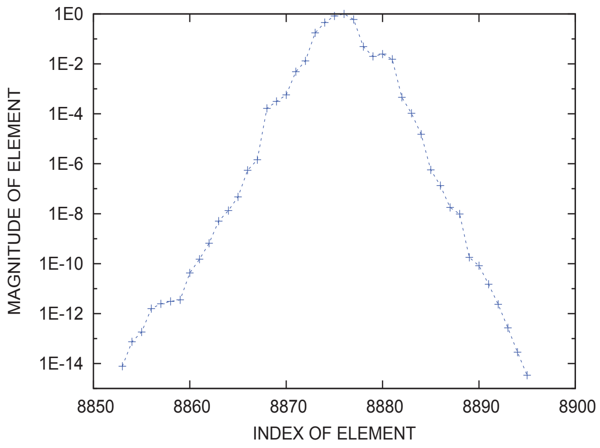

図 28 第 5 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=8, 875.6，分布の半径 r=0.91

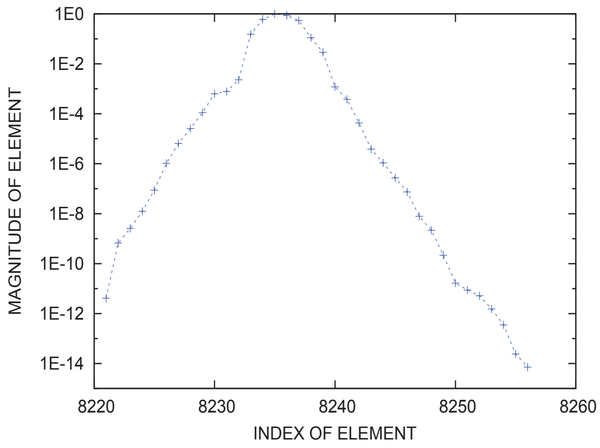

図 31 第 8 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=8, 235.4，分布の半径 r=0.93

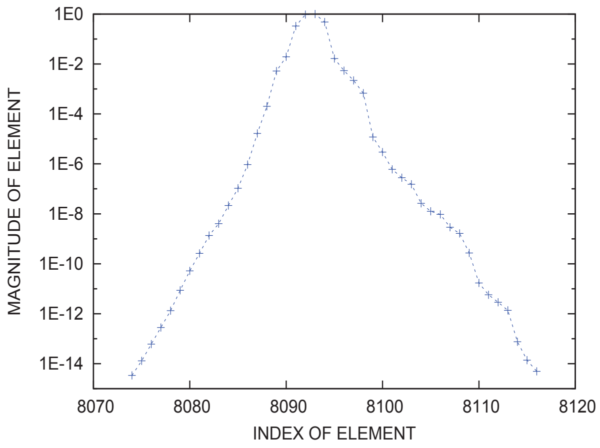

図 29 第 6 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=8, 092.6，分布の半径 r=0.74

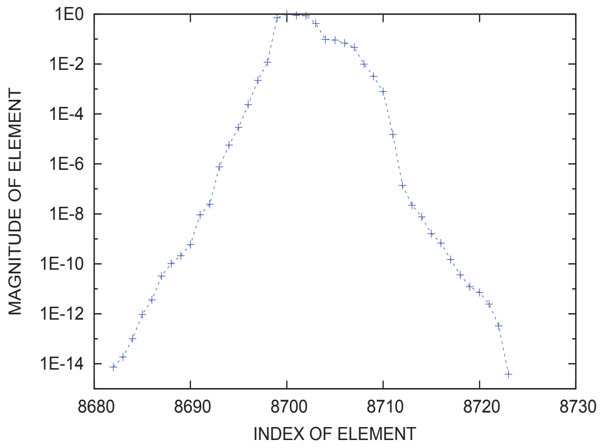

図 32 第 9 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=8, 700.7，分布の半径 r=1.20

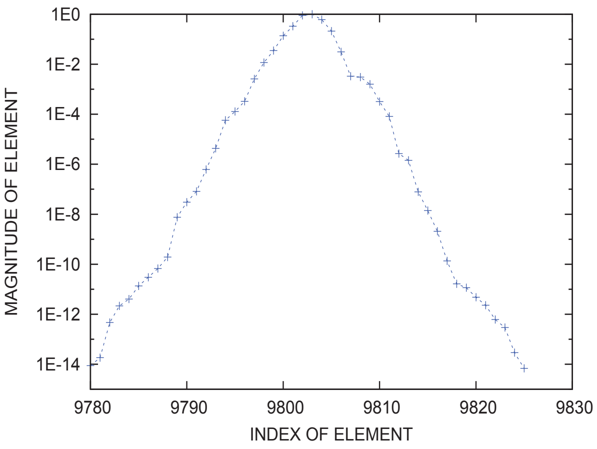

図 33　第 10 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=9, 802.7，分布の半径 r=0.88

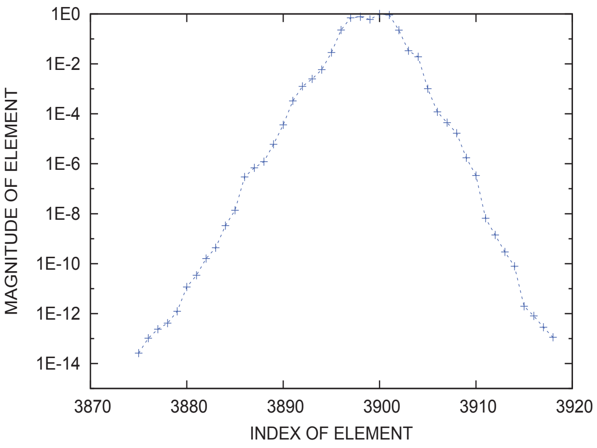

図 34　第 11 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=3, 899.3，分布の半径 r=1.49

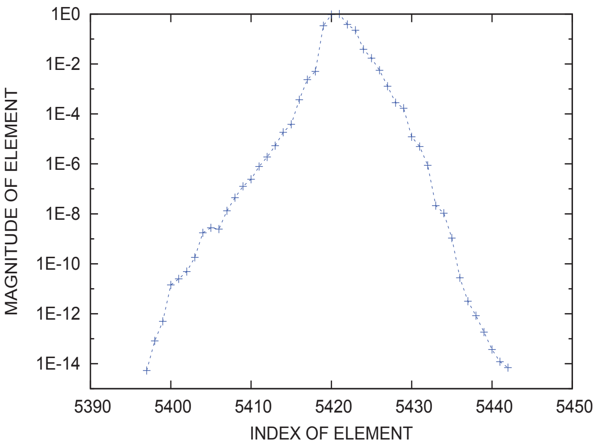

図 35　第 12 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=5, 420.6，分布の半径 r=0.79

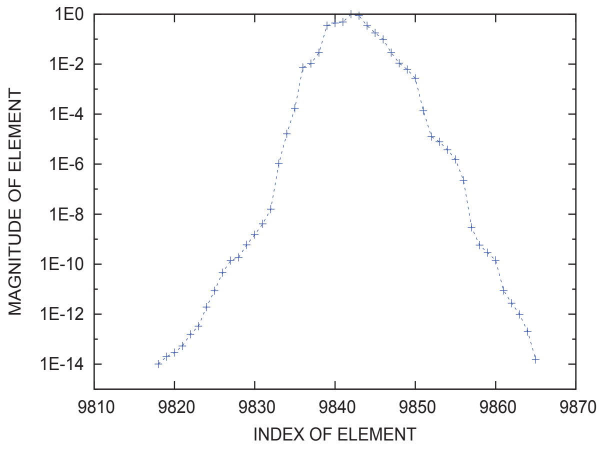

図 36　第 13 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=9, 842.1，分布の半径 r=1.24

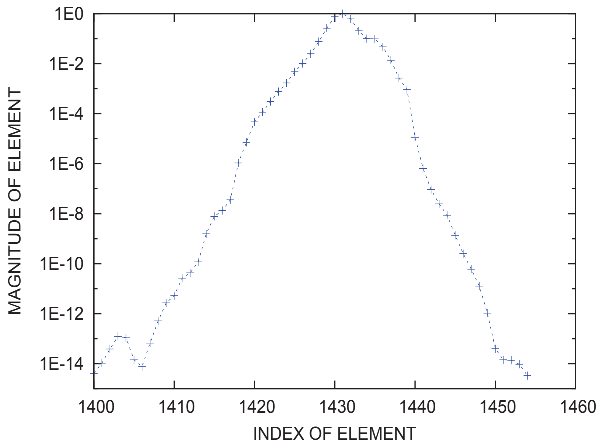

図 37　第 14 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=1, 430.9，分布の半径 r=0.91

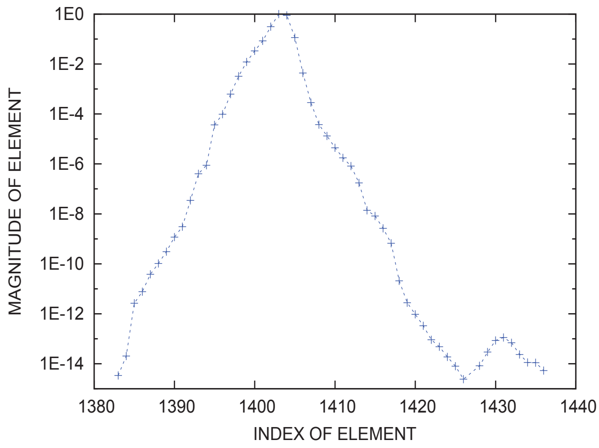

図 38　第 15 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=1, 403.4，分布の半径 r=0.62

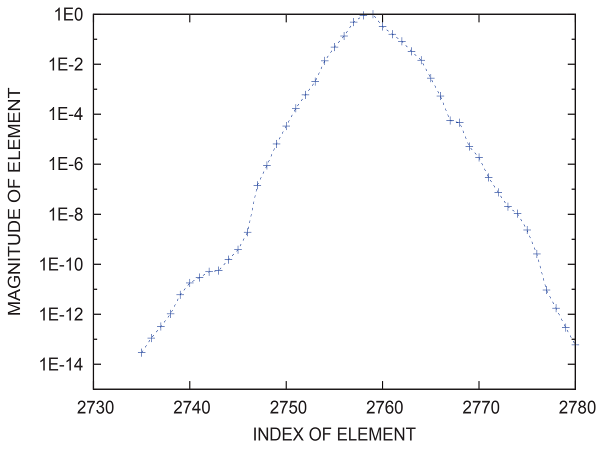

図 39 第 16 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=2, 758.5，分布の半径 r=0.86

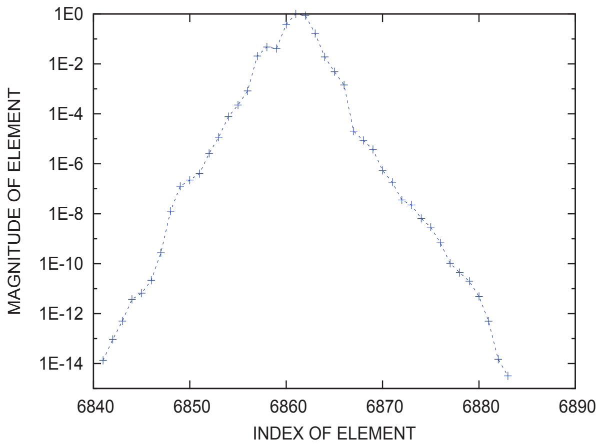

図 40 第 17 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=6, 861.3，分布の半径 r=0.65

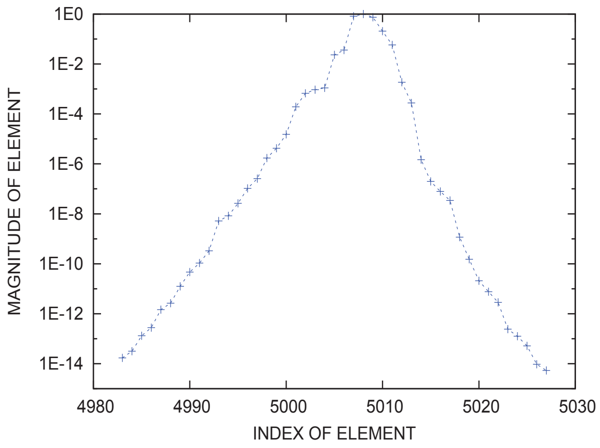

図 41 第 18 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=5, 008.0，分布の半径 r=0.79

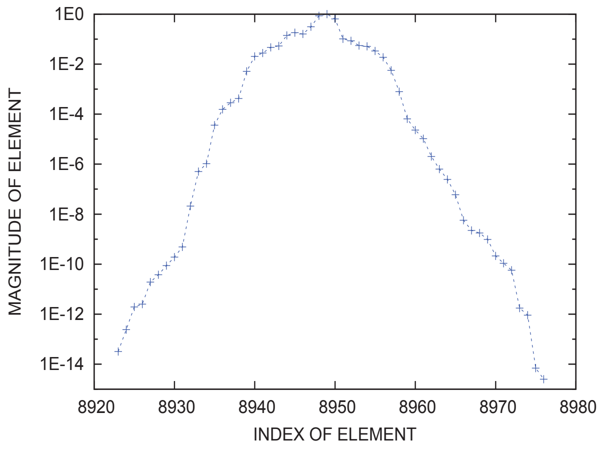

図 42 第 19 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=8, 948.7，分布の半径 r=1.15

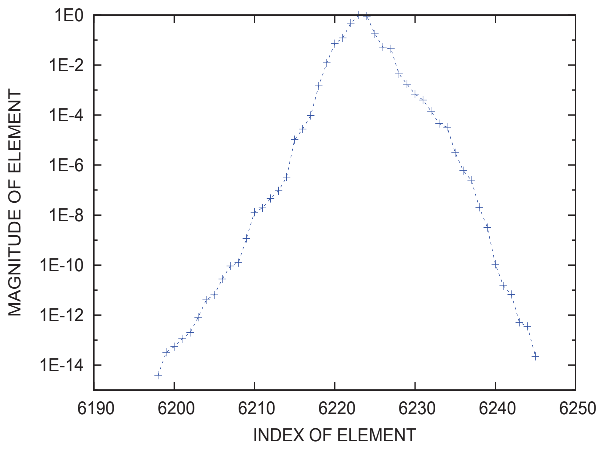

図 43 第 20 固有ベクトルの要素（大きさの対数）
分布の中心 c=6, 223.3，分布の半径 r=0.74

この例では固有値が最大側から第 4, 636 番目の固有ベクトルが「分布の半径」が $r = 11.04$ で最大であった（**図 92** 参照）．そのベクトルを添字の番号を横軸に，要素の値を縦軸にとってプロットしたグラフが**図 44** で，要素の値の大きさの「対数」で縦軸をプロットしたグラフが**図 45** である．

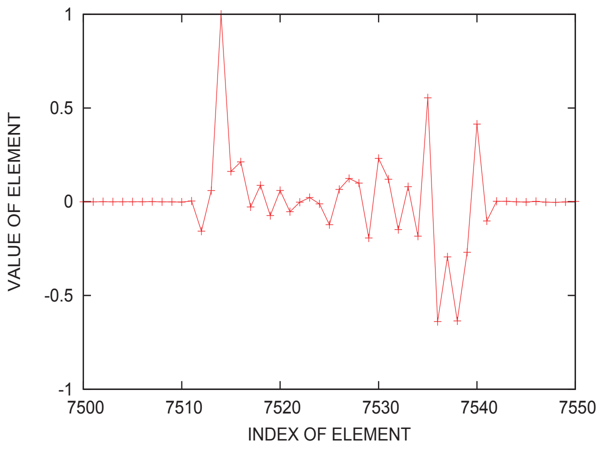

図 44 「分布の半径」が最大の固有ベクトル 2 個

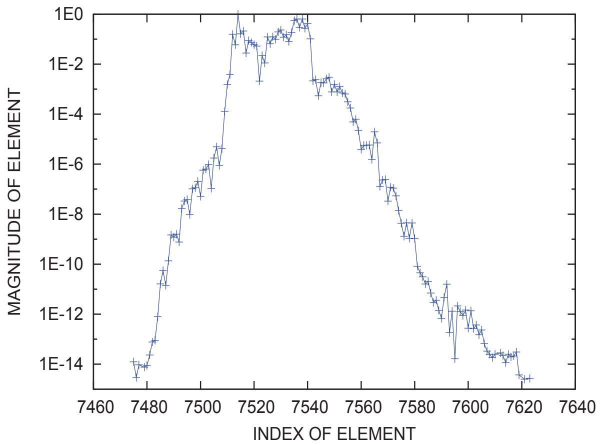

図 45 「分布の半径」が最大の固有ベクトル 2 個（縦軸対数）

図 46 から**図 49** は，次数 $N = 10,000$ で半帯幅が $h = 1$，2，4，8 のそれぞれの場合について，横軸に固有ベクトルの「分布の中心」の位置順につけた番号をとり，縦軸には要素の絶対値が最大のものに対する比が「閾値」以上である添字の区間をとってプロットしたグラフである（ここの閾値は 10^{-12} と設定した）．帯幅が増すとき固有ベクトルの局在領域の幅が拡がる様子がわかる．

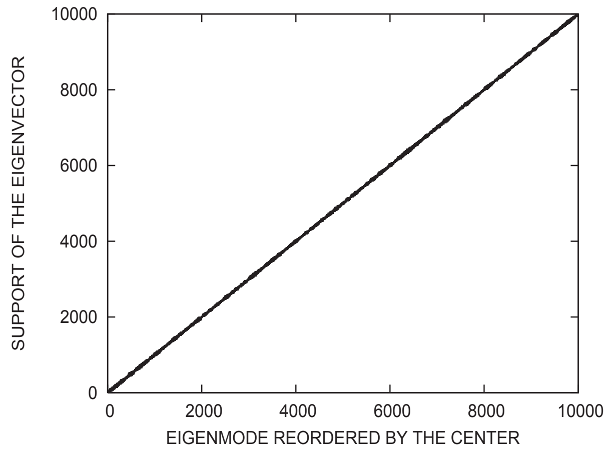

図 46 固有ベクトルの「分布の中心」に対する台；N=10, 000，h=1

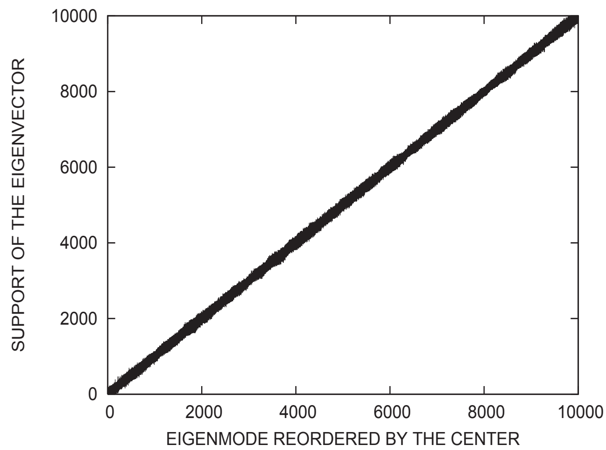

図 47 固有ベクトルの「分布の中心」に対する台；N=10, 000，h=2

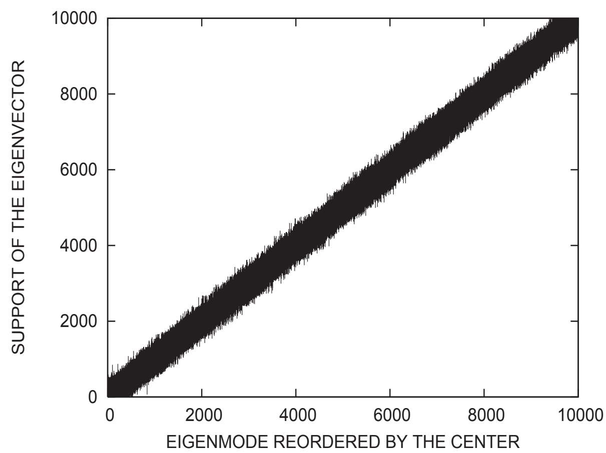

図 48 固有ベクトルの「分布の中心」に対する台；N=10, 000，h=4

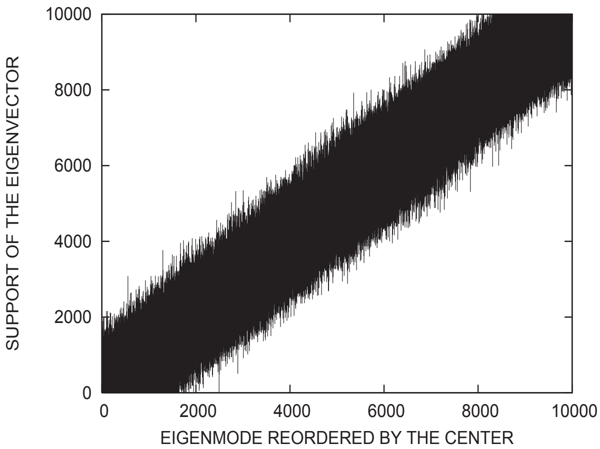

図 49　固有ベクトルの「分布の中心」に対する台；N=10,000，h=8

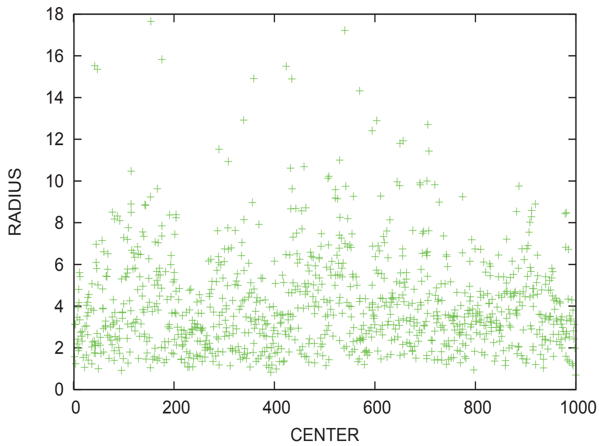

図 51　分布の中心と分布の半径; N=1,000，h=2

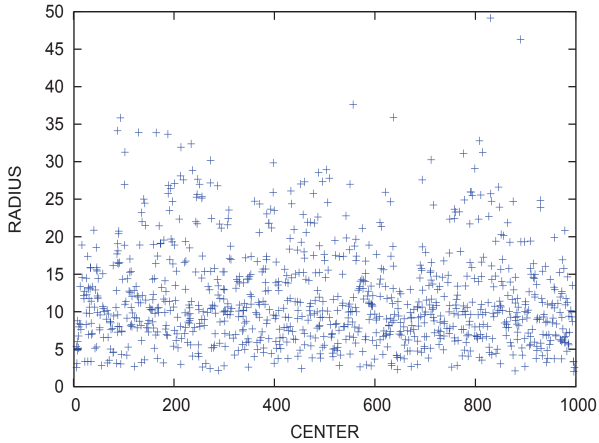

図 52　分布の中心と分布の半径; N=1,000，h=4

3.2　帯幅と局在化

次数 N の対称帯行列 B を各要素が区間 $[-0.5, 0.5]$ で一様な乱数とするとき，半帯幅 h を変えて固有ベクトルの局在化の状況を観察してみる．

3.2.1　行列次数が $N = 1,000$ の場合

行列次数が $N = 1,000$ の場合に，半帯幅を $h = 1$，2，4，8 としたそれぞれの場合について，すべての固有ベクトルに対して横軸を「分布の中心」に縦軸を「分布の半径」とするグラフを**図 50** から**図 53** に示す．各図から「分布の半径」の最大値は，$h = 1$ のとき 7.5 程度，$h = 2$ のとき 18 程度，$h = 4$ のとき 50 程度，$h = 8$ のとき 190 程度であることがわかる．

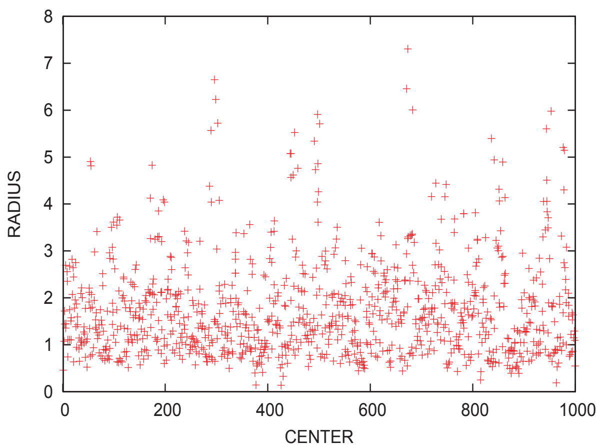

図 50　分布の中心と分布の半径; N=1,000，h=1

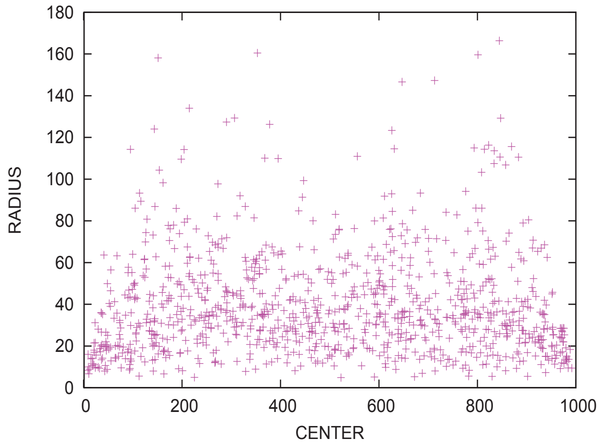

図 53　分布の中心と分布の半径; N=1,000，h=8

同様に，$h = 1$，2，4，8 としたそれぞれの場合について，すべての固有ベクトルに対する「分布の半径」とその累積度数をプロットしたグラフを**図 54** から**図 57** に示す．さらにそれらを 1 枚の図にまとめたものが**図 58** であり，

Vol.2015-HPC-150 No.12
2015/8/4

横軸の「分布の半径」を対数でプロットした図が**図 59** である．

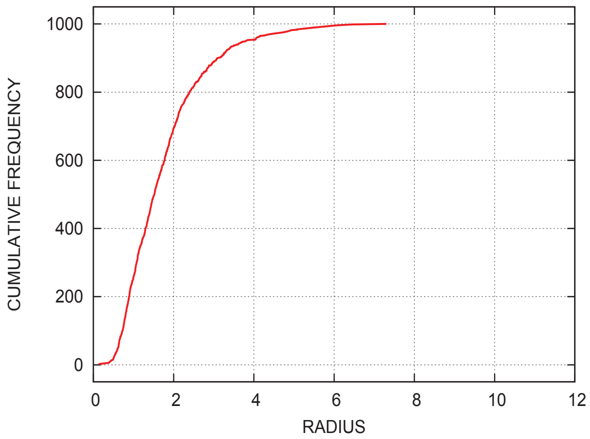

図 54 「分布の半径」とその累積度数; $N=1,000$, $h=1$

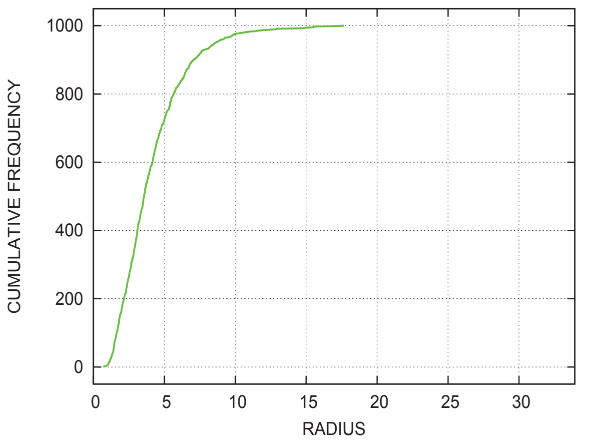

図 55 「分布の半径」とその累積度数; $N=1,000$, $h=2$

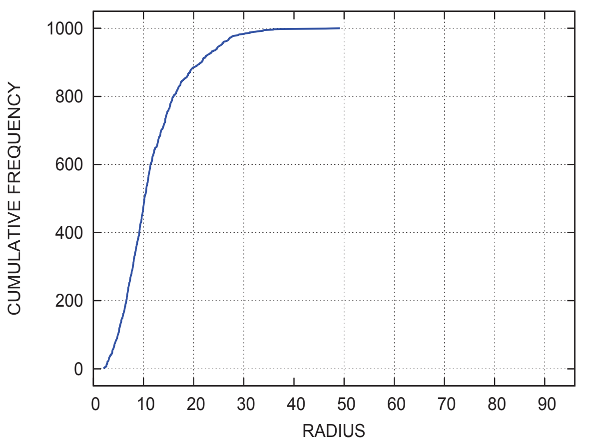

図 56 「分布の半径」とその累積度数; $N=1,000$, $h=4$

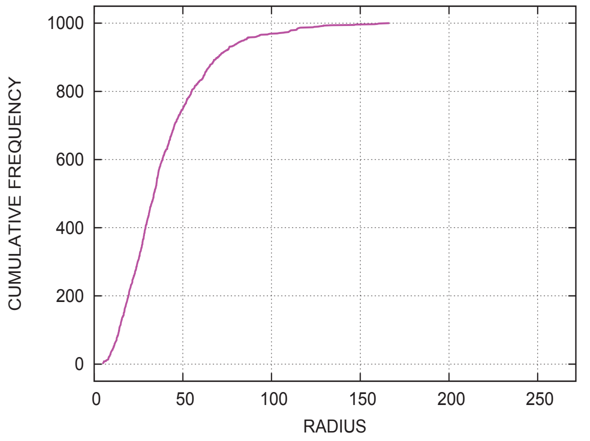

図 57 「分布の半径」とその累積度数; $N=1,000$, $h=8$

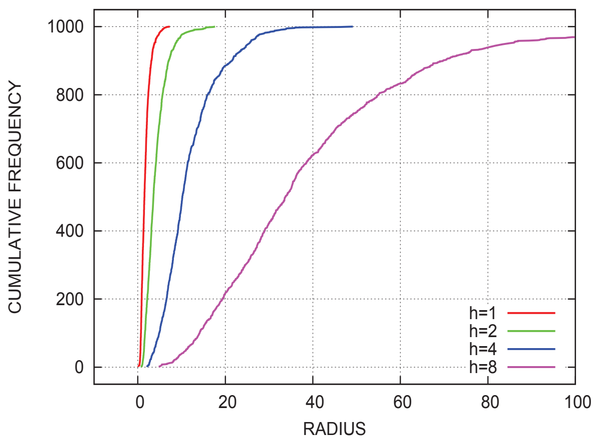

図 58 「分布の半径」とその累積度数; $N=1,000$, $h=1$, 2, 4, 8

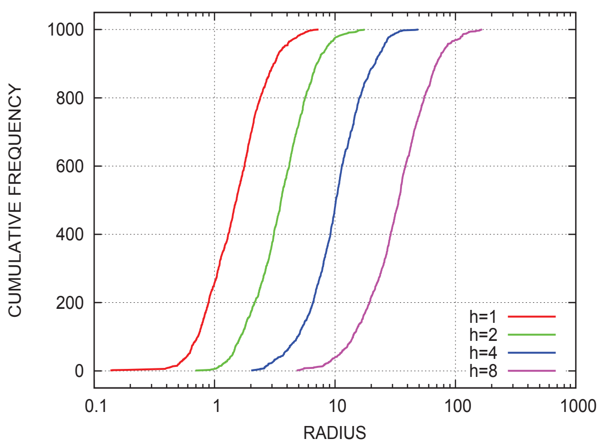

図 59 「分布の半径」(対数) とその累積度数; $N=1,000$, $h=1$, 2, 4, 8

固有ベクトルを固有値の順に並べてみると，固有値が最大と最小の付近では固有ベクトルの「分布の半径」が小さくなる傾向のあることが**図 60** から**図 63** からわかる．

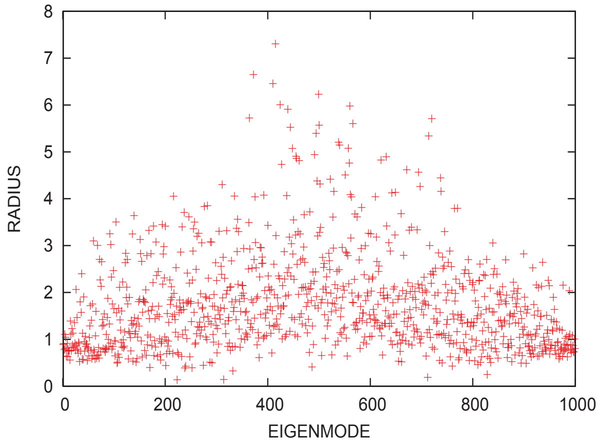

図 60 固有値の順に並べた「分布の半径」; N=1, 000, h=1

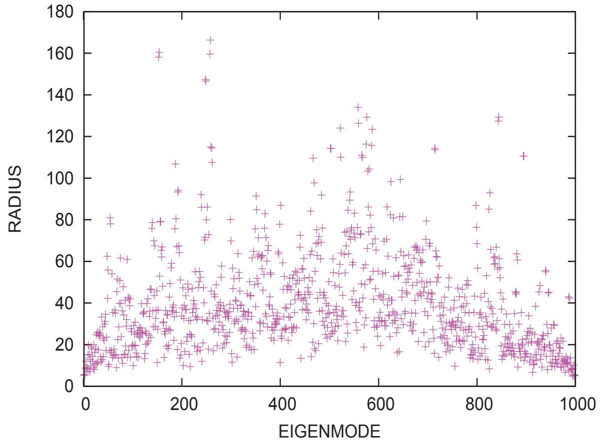

図 63 固有値の順に並べた「分布の半径」; N=1, 000, h=8

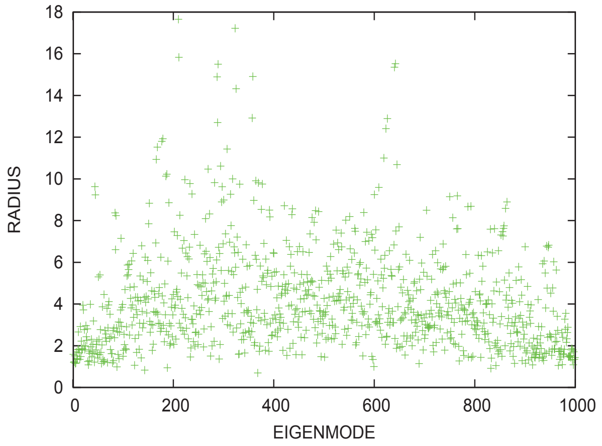

図 61 固有値の順に並べた「分布の半径」; N=1, 000, h=2

3.2.2 行列次数が $N = 3,000$ の場合

行列次数が $N = 3,000$ の場合に，半帯幅を $h = 1$，2，4，8 としたそれぞれの場合について，すべての固有ベクトルに対して横軸を「分布の中心」に縦軸を「分布の半径」とするグラフを**図 64** から**図 67** に示す．各図から「分布の半径」の最大値は，$h = 1$ のとき 7.5 程度，$h = 2$ のとき 30 程度，$h = 4$ のとき 65 程度，$h = 8$ のとき 230 程度であることがわかる．

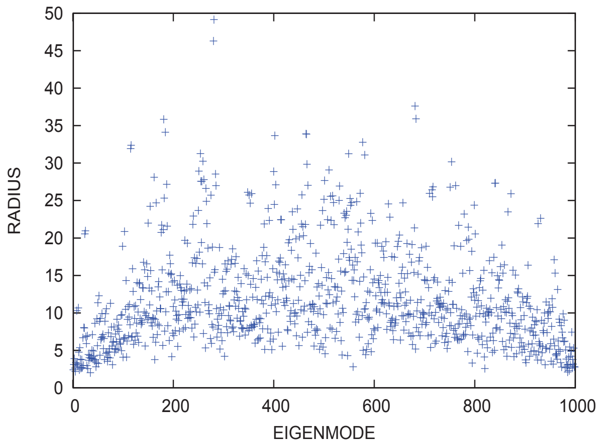

図 62 固有値の順に並べた「分布の半径」; N=1, 000, h=4

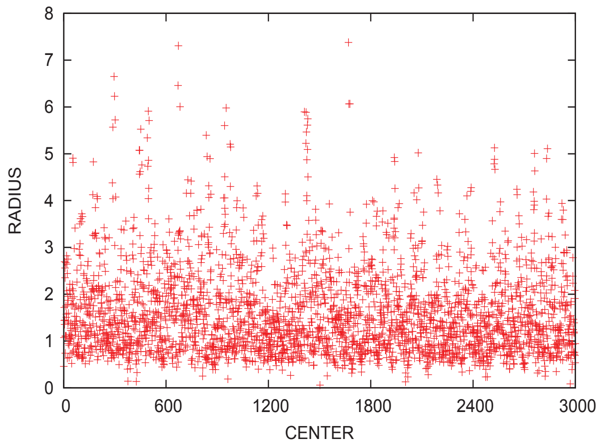

図 64 分布の中心と分布の半径; N=3, 000, h=1

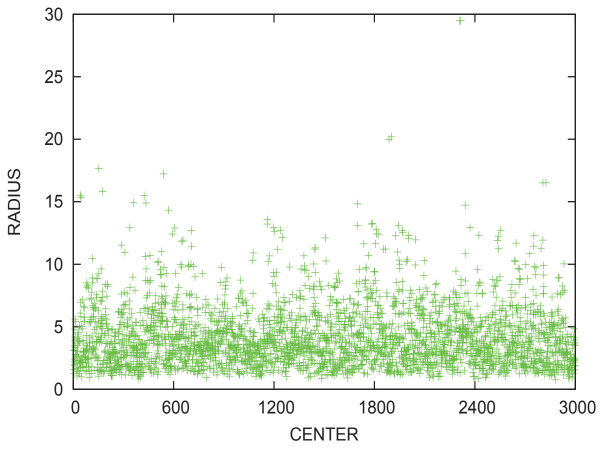

図 65　分布の中心と分布の半径; N=3,000，h=2

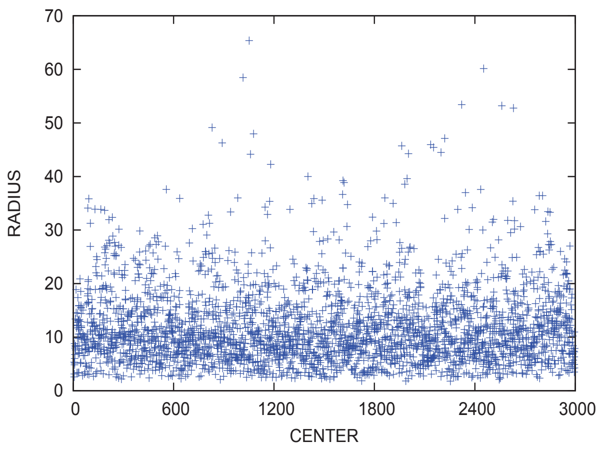

図 66　分布の中心と分布の半径; N=3,000，h=4

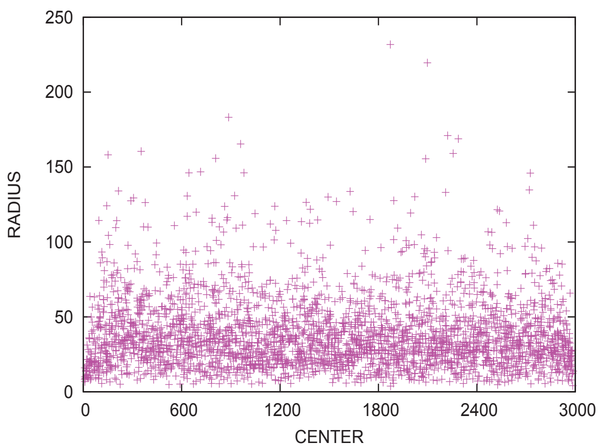

図 67　分布の中心と分布の半径; N=3,000，h=8

同様に，h = 1，2，4，8 としたそれぞれの場合について，すべての固有ベクトルに対する「分布の半径」とその累積度数をプロットしたグラフを**図 68** から**図 71** に示す．さらにそれらを 1 枚の図にまとめたものが**図 72** であり，横軸の「分布の半径」を対数でプロットした図が**図 73** である．

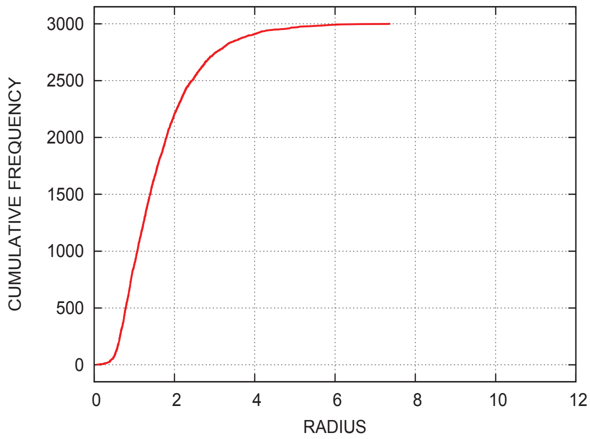

図 68　「分布の半径」とその累積度数; N=3,000，h=1

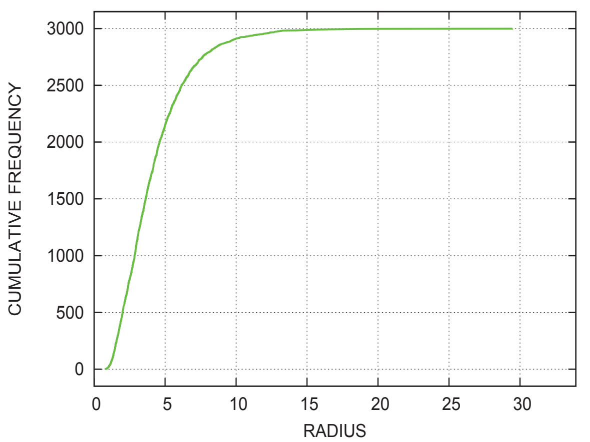

図 69　「分布の半径」とその累積度数; N=3,000，h=2

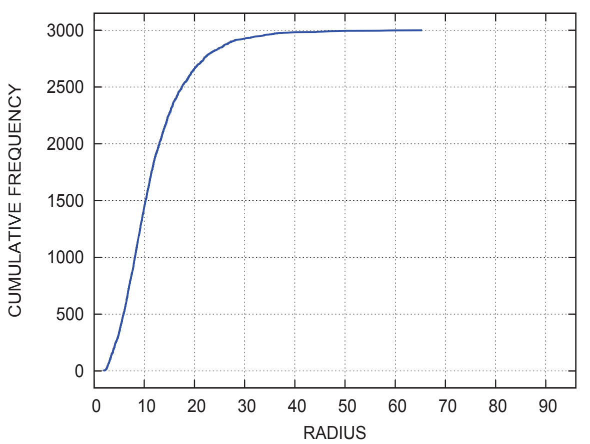

図 70　「分布の半径」とその累積度数; N=3,000，h=4

Vol.2015-HPC-150 No.12
2015/8/4

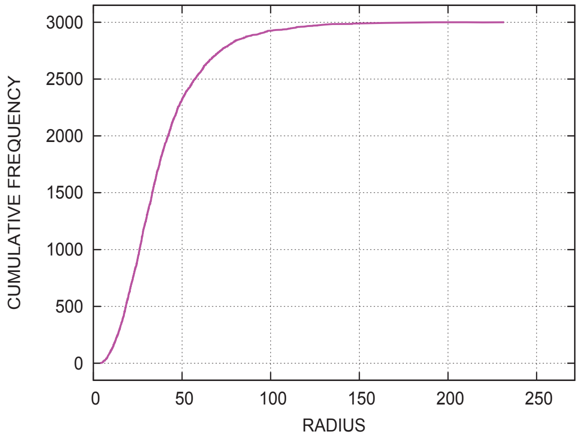

図 71　「分布の半径」とその累積度数; N=3,000, h=8

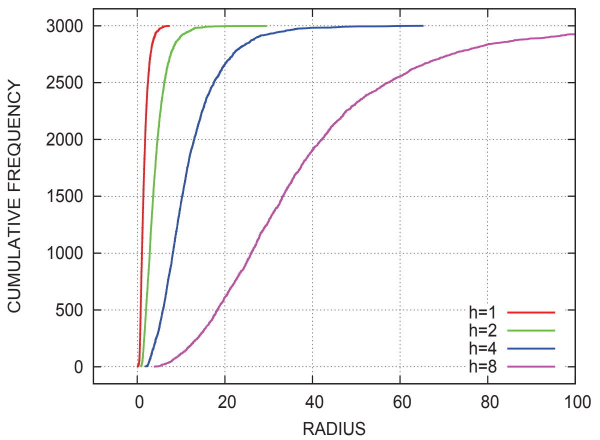

図 72　「分布の半径」とその累積度数; N=3,000, h=1, 2, 4, 8

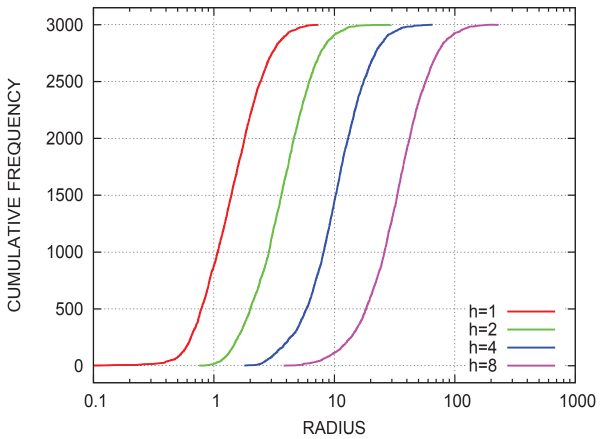

図 73　「分布の半径」(対数) とその累積度数; N=3,000, h=1, 2, 4, 8

ここまで,「分布の半径」の対数を横軸に累積度数を縦軸にとったグラフは h が違っても相似的な形をしていて,「分布の半径」の累積頻度は半帯幅の約 3/2 乗にほぼ比例していた．しかし N を固定したまま半帯幅 h をさらに増やして $h = 5$, 10, 20, 40, 80 とすると, **図 74** から**図 78** のグラフにみるように「分布の半径」は増大して最大値は $h = 5$ では 100 程度, $h = 10$ では 250 程度, $h = 20$ では 850 程度, $h = 40$ では 1,100 程度, $h = 80$ では 1100 程度となりしだいに $N = 3,000$ に対して「分布の半径」が小さいとはいえなくなる．

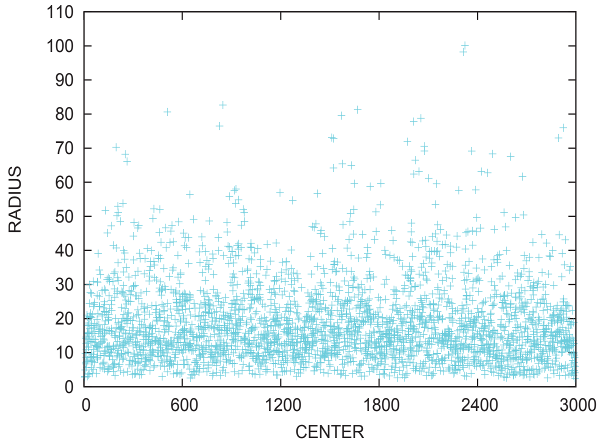

図 74　分布の中心と分布の半径; N=3,000, h=5

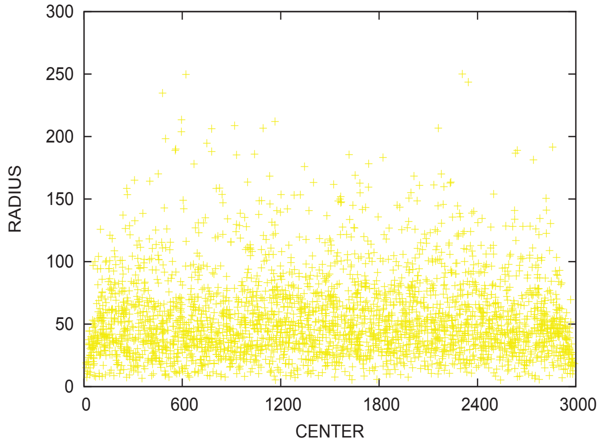

図 75　分布の中心と分布の半径; N=3,000, h=10

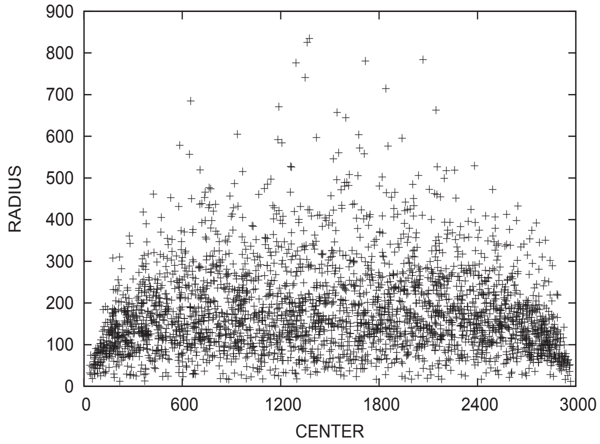

図 76　分布の中心と分布の半径; N=3,000, h=20

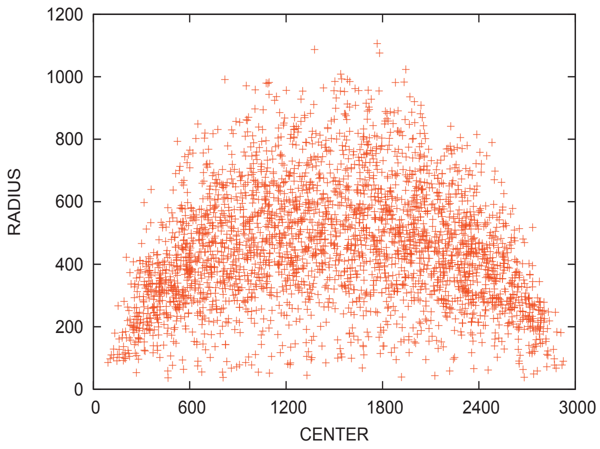

図 77　分布の中心と分布の半径; $N=3,000$, $h=40$

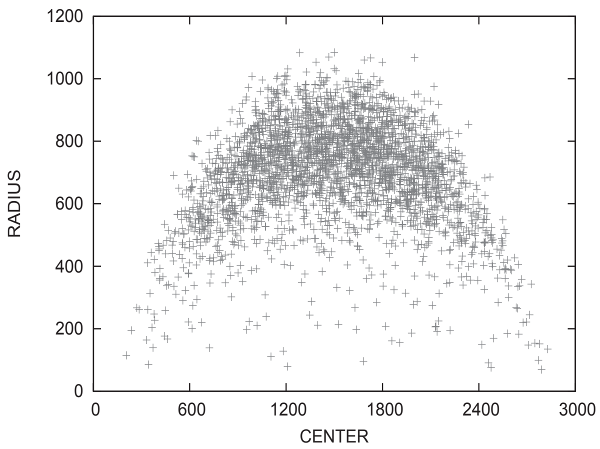

図 78　分布の中心と分布の半径; $N=3,000$, $h=80$

$h=5$, 10, 20, 40, 80 に対する「分布の半径の」累積度数のグラフを**図 79** から**図 83** に示す．それらを 1 枚にまとめたグラフを**図 84** にその横軸を対数プロットにしたグラフを**図 85** に示す．半帯幅 h が小さかった図 73 の場合とは異なり，図 85 ではグラフの形状が h に依存して変化していて相似的ではないことがわかる．

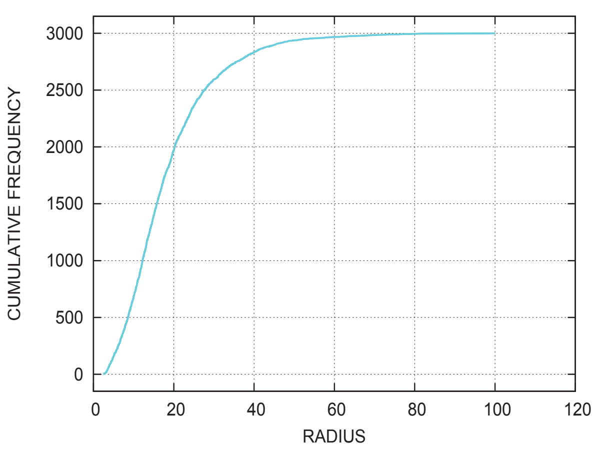

図 79　「分布の半径」とその累積度数; $N=3,000$, $h=5$

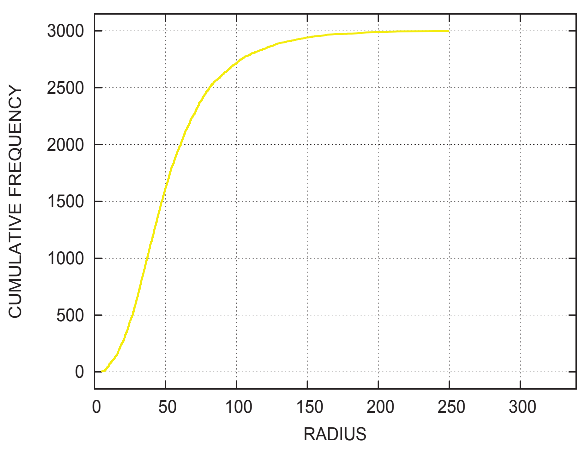

図 80　「分布の半径」とその累積度数; $N=3,000$, $h=10$

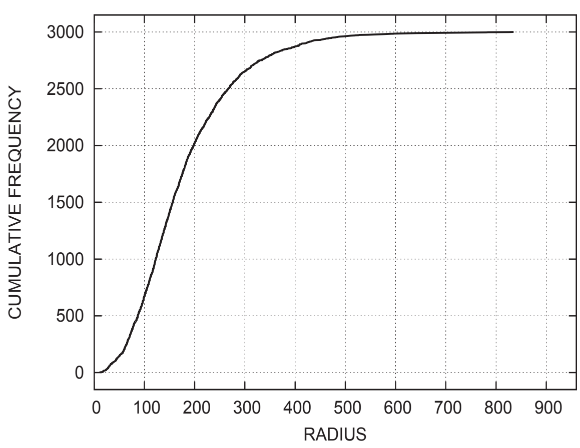

図 81　「分布の半径」とその累積度数; $N=3,000$, $h=20$

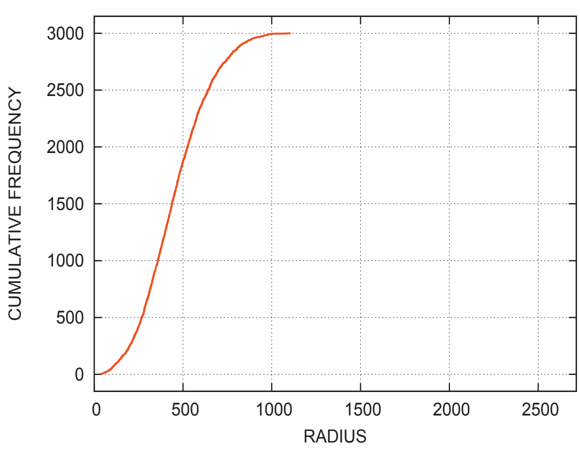

図 82　「分布の半径」とその累積度数; $N=3,000$, $h=40$

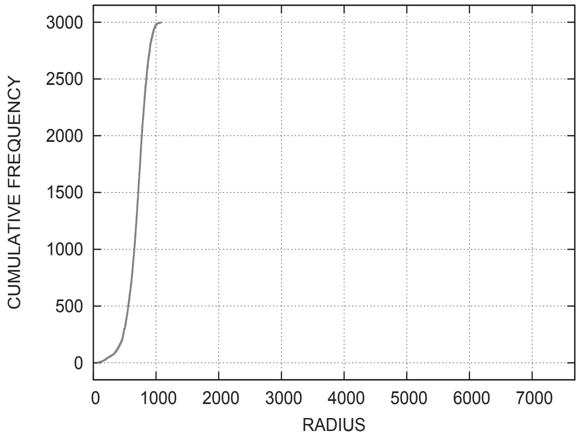

図 83 「分布の半径」とその累積度数; N=3, 000, h=80

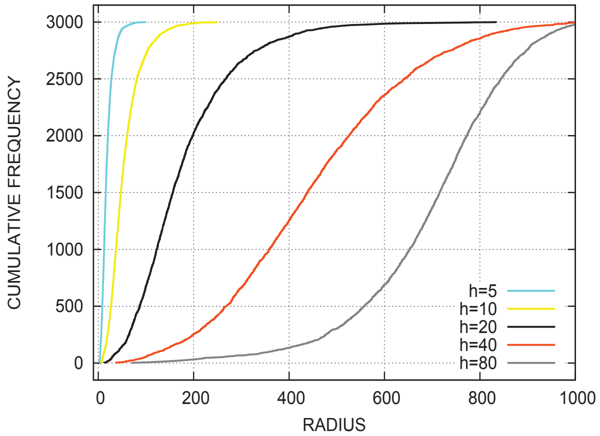

図 84 「分布の半径」とその累積度数; N=3, 000, h=5, 10, 20, 40, 80

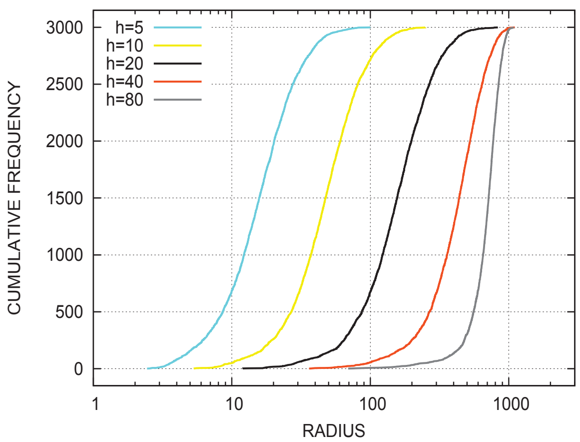

図 85 「分布の半径」(対数)とその累積度数; N=3, 000, h=5, 10, 20, 40, 80

3.2.3 行列次数が $N = 10,000$ の場合

行列次数を $N = 10,000$ として，半帯幅を $h = 1$，2，4，8 としたそれぞれの場合について，すべての固有ベクトルに対して「分布の半径」とその累積度数をプロットしたグラフを**図 86** から**図 89** に示す．さらにそれらを 1 枚の図にまとめたものが**図 90** であり，横軸の「分布の半径」を対数でプロットしたグラフが**図 91** である．

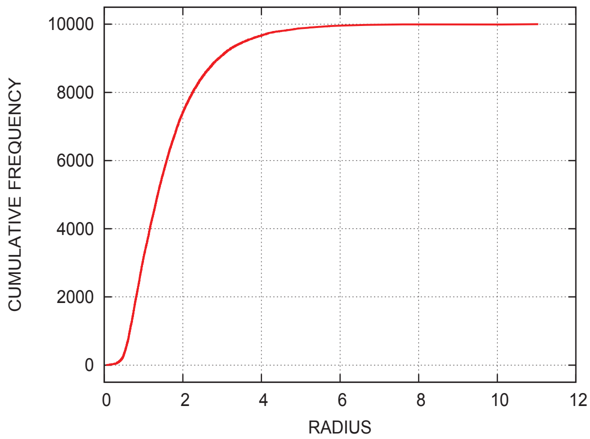

図 86 「分布の半径」とその累積度数; N=10, 000, h=1

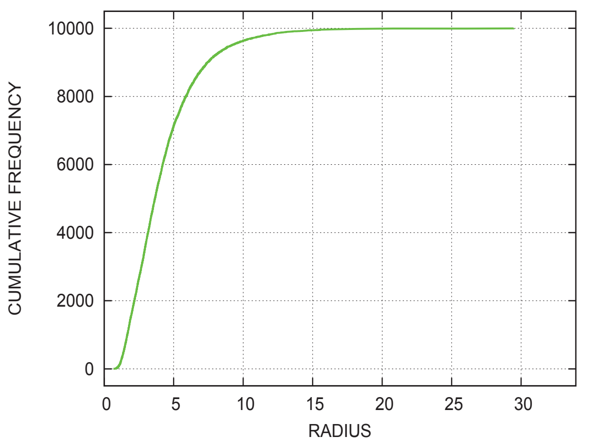

図 87 「分布の半径」とその累積度数; N=10, 000, h=2

Vol.2015-HPC-150 No.12
2015/8/4

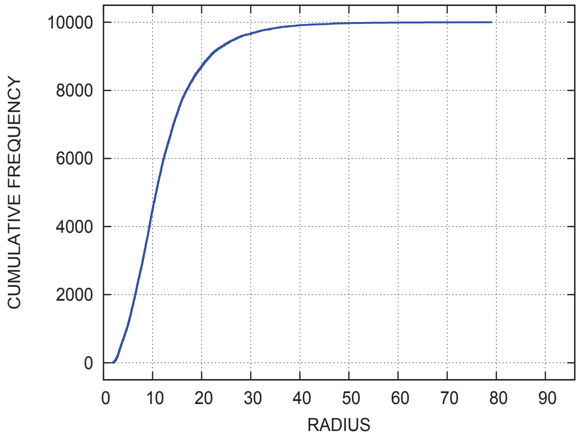

図 88　「分布の半径」とその累積度数; N=10,000，h=4

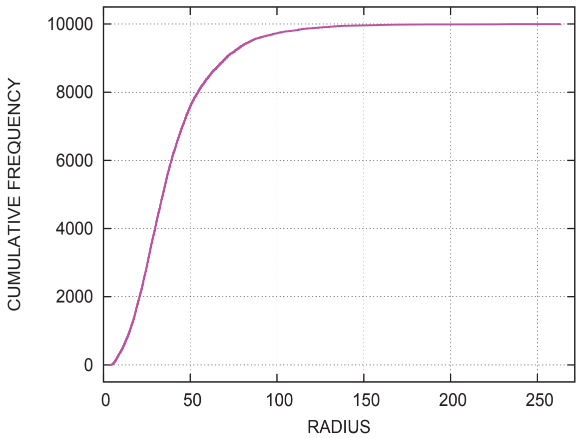

図 89　「分布の半径」とその累積度数; N=10,000，h=8

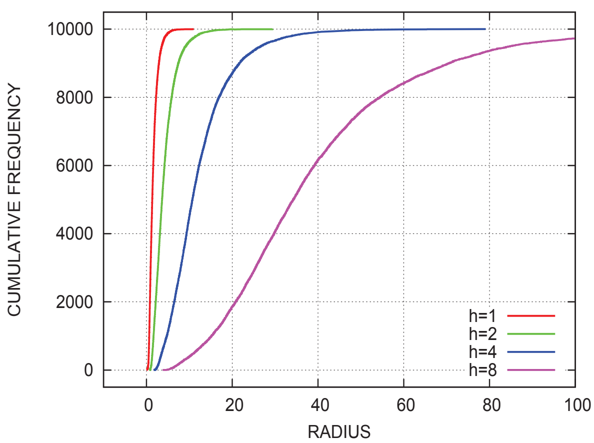

図 90　「分布の半径」とその累積度数; N=10,000，h=1，2，4，8

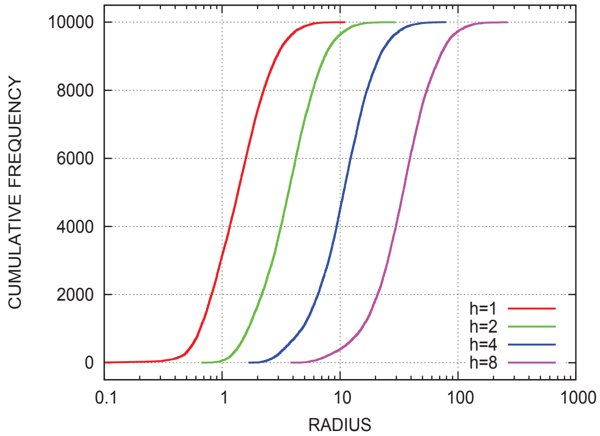

図 91　「分布の半径」（対数）とその累積度数; N=10,000，h=1，2，4，8

同様に，次数 $N = 10,000$ で半帯幅 $h = 1$，2，4，8 に対して縦軸にすべての固有ベクトルの固有値を減少順に並べて付けた順番を，縦軸に「分布の半径」をとってプロットしたものをそれぞれ図 92 から**図 95** に示す．各図から「分布の半径」の最大値は $h = 1$ では 11 程度，$h = 2$ では 30 程度，$h = 4$ では 80 程度，$h = 8$ では 260 程度であることがわかる．

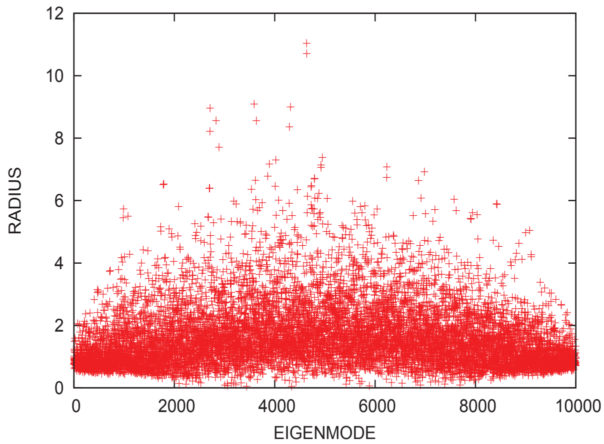

図 92　固有値の順に並べた「分布の半径」; N=10,000，h=1

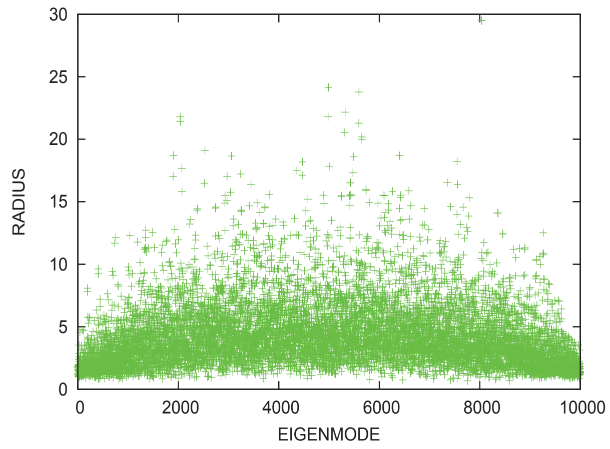

図 93 固有値の順に並べた「分布の半径」; N=10,000, h=2

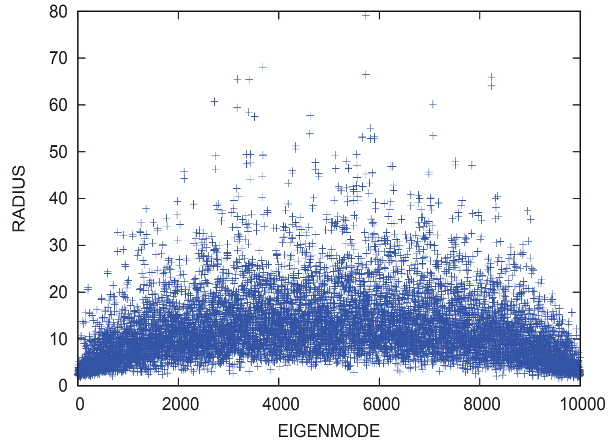

図 94 固有値の順に並べた「分布の半径」; N=10,000, h=4

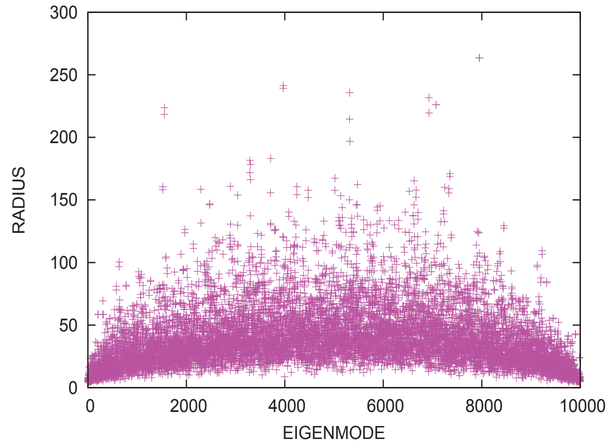

図 95 固有値の順に並べた「分布の半径」; N=10,000, h=8

3.2.4 行列次数が $N = 30,000$ の場合

行列次数を $N = 30,000$ として，半帯幅を $h = 1$，2，4，8 としたそれぞれの場合について，すべての固有ベクトルに対して「分布の半径」とその累積度数をプロットしたグラフを**図 96** から**図 99** に示す．さらにそれらを 1 枚の図にまとめたものが**図 100** であり，横軸の「分布の半径」を対数でプロットしたグラフが**図 101** である．

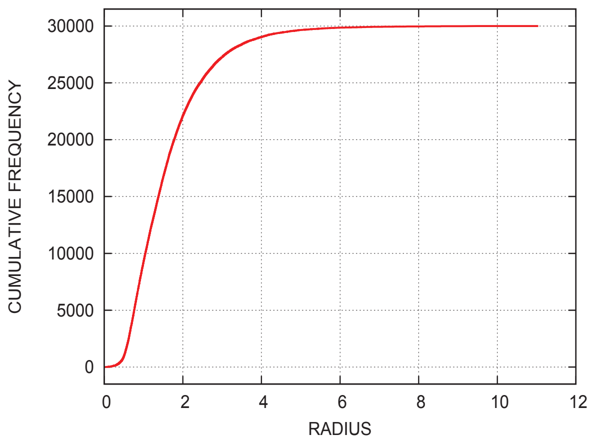

図 96 「分布の半径」とその累積度数; N=30,000, h=1

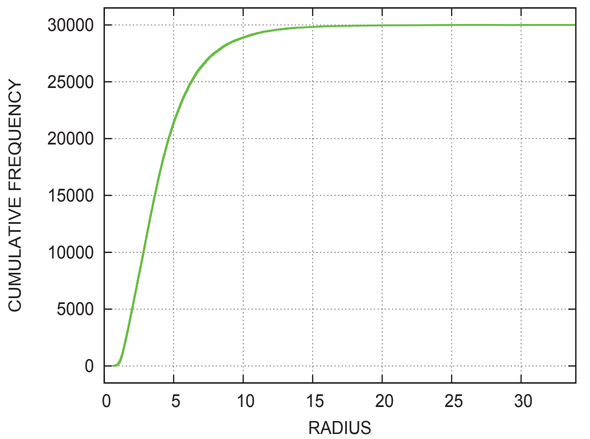

図 97 「分布の半径」とその累積度数; N=30,000, h=2

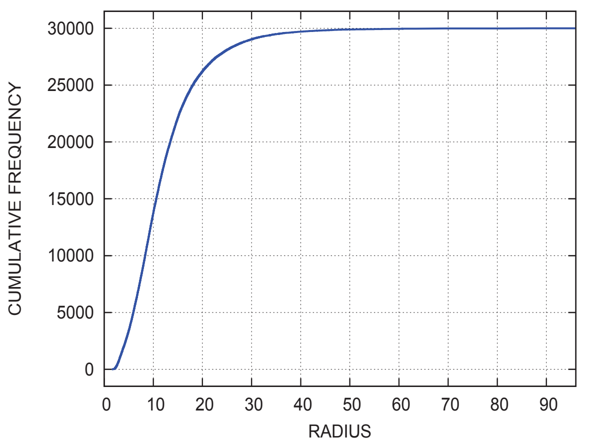

図 98 「分布の半径」とその累積度数; N=30,000, h=4

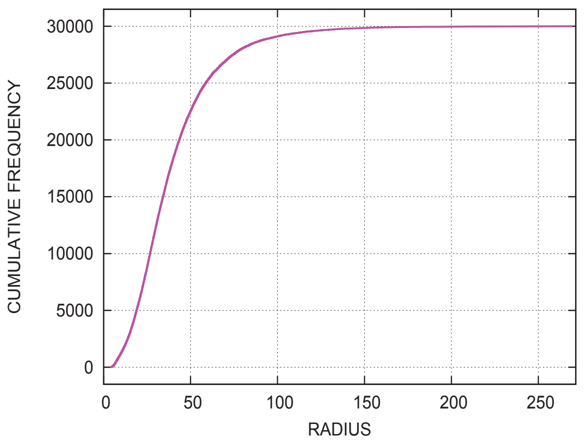

図 99 「分布の半径」とその累積度数; N=30,000，h=8

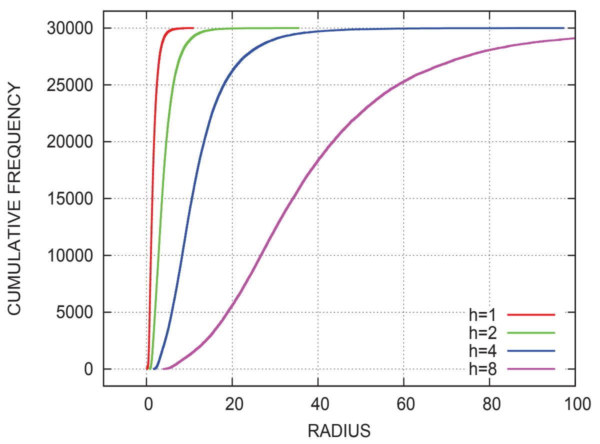

図 100 「分布の半径」とその累積度数; N=30,000，h=1，2，4，8

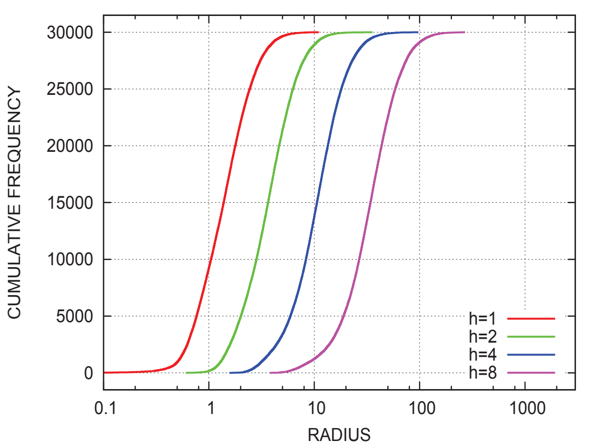

図 101 「分布の半径」（対数）とその累積度数; N=30,000，h=1，2，4，8

3.2.5 行列次数が $N = 100,000$ の場合

行列次数を $N = 100,000$ として，半帯幅を $h = 1$，2，4，8 としたそれぞれの場合について，すべての固有ベクトルに対して「分布の半径」とその累積度数をプロットしたグラフを**図 102** から**図 105** に示す．さらにそれらを 1 枚の図にまとめたものが**図 106** であり，横軸の「分布の半径」を対数でプロットしたグラフが**図 107** である．

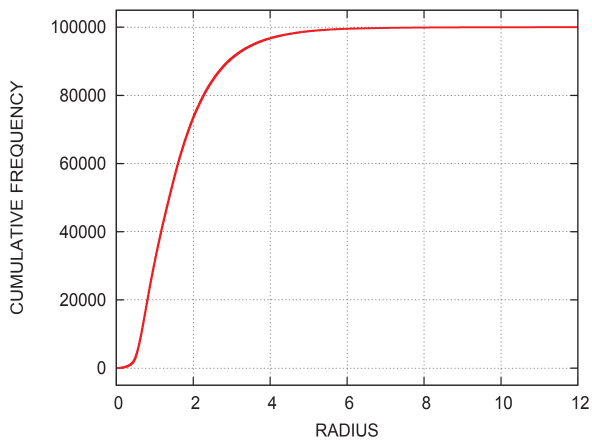

図 102 「分布の半径」とその累積度数; N=100,000，h=1

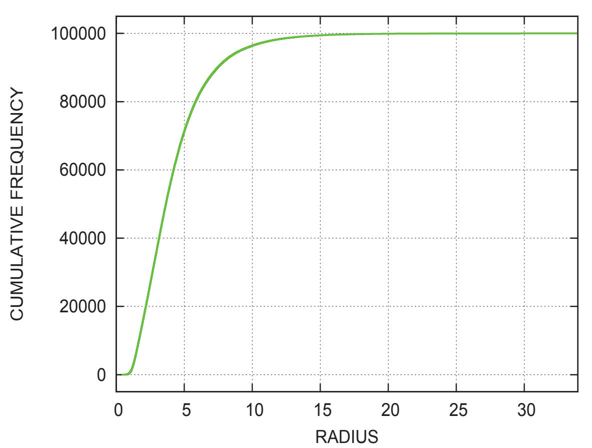

図 103 「分布の半径」とその累積度数; N=100,000，h=2

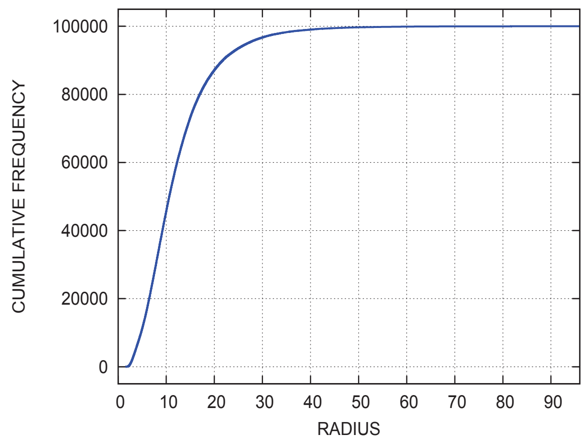

図 104　「分布の半径」とその累積度数; N=100,000，h=4

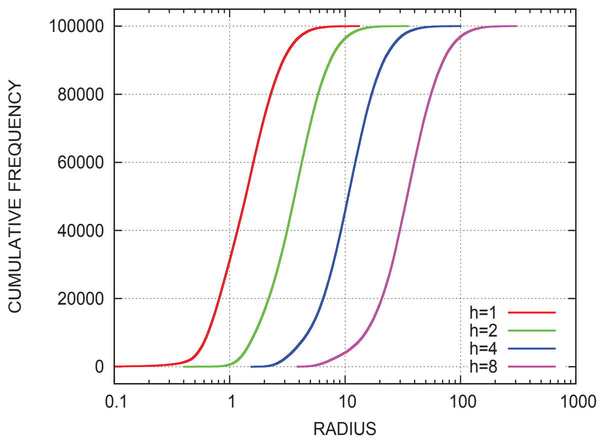

図 107　「分布の半径」(対数) とその累積度数; N=100,000，h=1，2，4，8

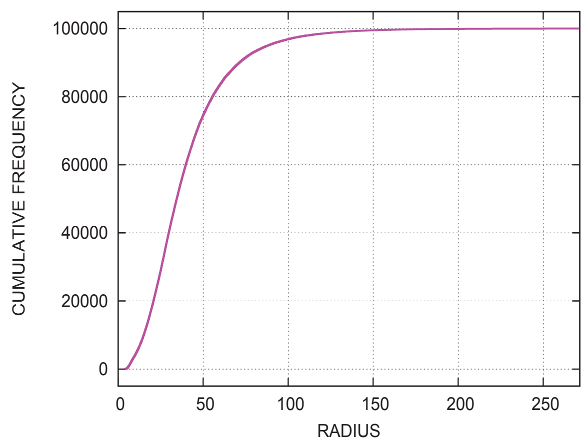

図 105　「分布の半径」とその累積度数; N=100,000，h=8

3.2.6　行列次数が $N = 300,000$ の場合

行列次数を $N = 300,000$ として，半帯幅を $h = 1$，2，4 としたそれぞれの場合について，すべての固有ベクトルに対して「分布の半径」とその累積度数をプロットしたグラフを**図 108** から**図 110** に示す．さらにそれらを 1 枚の図にまとめたものが**図 111** であり，横軸の「分布の半径」を対数でプロットしたグラフが**図 112** である．

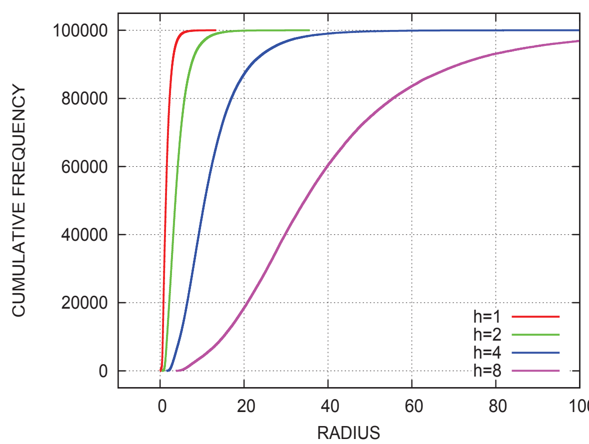

図 106　「分布の半径」とその累積度数; N=100,000，h=1，2，4，8

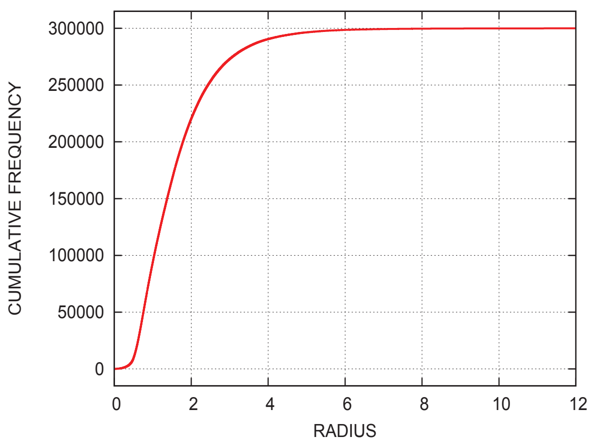

図 108　「分布の半径」とその累積度数; N=300,000，h=1

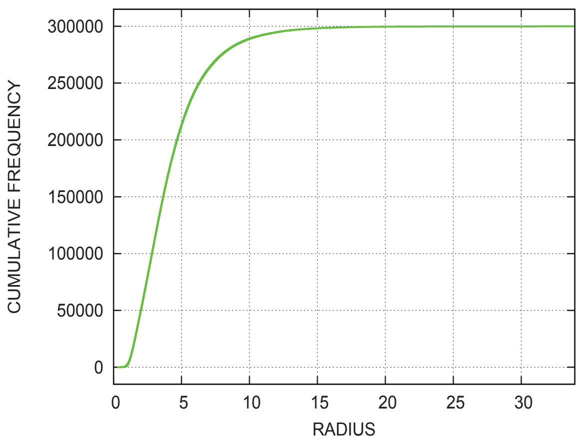

図 109 「分布の半径」とその累積度数; N=300, 000, h=2

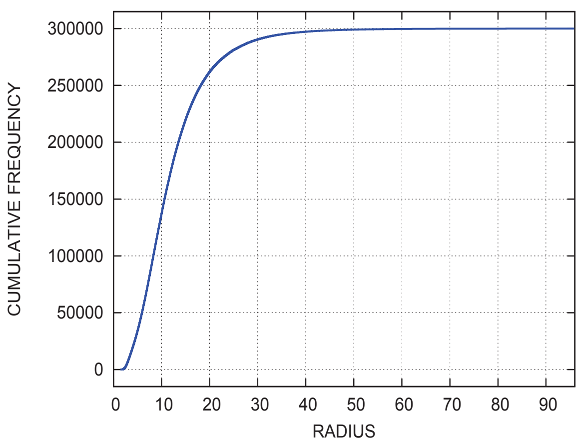

図 110 「分布の半径」とその累積度数; N=300, 000, h=4

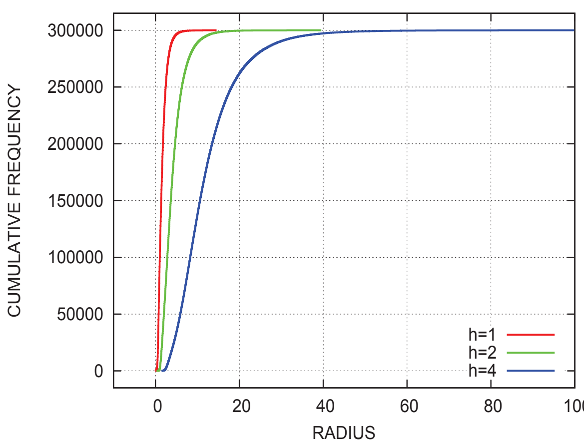

図 111 「分布の半径」とその累積度数; N=300, 000, h=1, 2, 4, 8

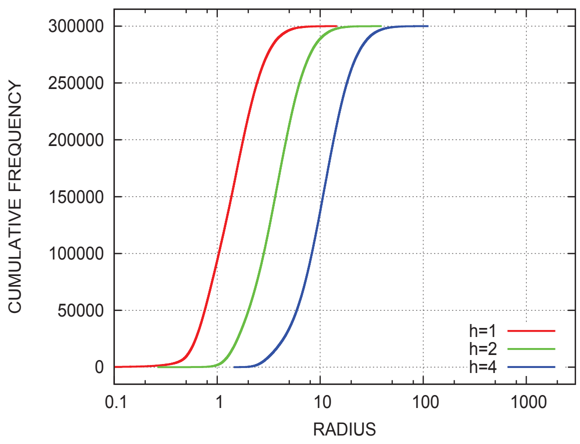

図 112 「分布の半径」(対数) とその累積度数; N=300, 000, h=1, 2, 4

3.3 帯固有値問題の解法について

次数 N で半帯幅 h の対称帯行列 B の近似固有対をすべて求めるのには，村田の方法（文献 [18]）を用いた（この方法は本来は，必要な範囲の固有値を持つごく一部の固有対だけを求めるためのものである）．具体的には以下のようにした．

(1) 帯行列 B を村田ハウスホルダ法で対称 3 重対角行列 T に変換する（TRIDIA）．

(2) T のすべての固有値をスツルム 2 分法で精密に求める（BISECT）．

(3) 求めた固有値の分だけ B を対角シフトした帯行列から片側ピボット選択付き帯 LU 分解による逆反復法で固有ベクトルを求める．その際に固有値の近接度による選択的再直交化付き逆反復法を行う（INVITR）．ただし，次数 N が 1 万を越えた場合には主記憶容量の制約と計算時間が長くなることから選択的再直交化の部分を省略した．

実験に用いた計算機システムの諸元は以下のものである（**表 1**）．ただし計算には CPU コア 2 個のうちの 1 個だけを用いた．

表 1 Intel Core2 Duo E6600 のシステムの諸元

CPU：Intel Core2 Duo E6600 2.4GHz
（2 コア，最外キャッシュ L2 は 4Mbytes）
コアあたり SSSE3 でピーク性能 9.6GFLOPS（DP）
主記憶：2Gbytes（Dual-Channel，PC2-6400）
OS：Fedora 7 for x86_64
コンパイラ：Intel Fortran version 10.0 for Linux

この計算機システムは現時点ではかなり古いもの（CPU は 2006 年第 3 四半期に発表）であるが，その 8 年後の以下の諸元を持つ比較的最近（CPU は 2014 年第 3 四半期に発表）のシステム（**表 2**）を用いて同様に 1 コアだけ用いてみたところ，2 倍から 3 倍程度高速に計算できた．

表 2 Intel Corei7-5960X のシステムの諸元

CPU：Corei7-5960X 3.0GHz （8 コア，最外キャッシュ L3 は 20MB， Turbo-boost，Hyper-Thread オフ） コアあたり AVX2 でピーク性能 48GFLOPS（DP）
主記憶：64Gbytes（Quad-Channel，PC4-12800）
OS：CentOS 7.0 for x86_64
コンパイラ：Intel Fortran version 15.0.0 for Linux

両システムの 1 コアあたりの倍精度演算の理論上限性能はそれぞれ 9.6GFLOPS と 48GFLOPS（AVX2 が使える場合．AVX までなら 24GFLOPS，SSE4.2 では 12GFLOPS）で最大約 5 倍（AVX2 が使える演算の場合）の向上であり，電気信号レベルでのメモリシステムの最大転送速度はそれぞれ 12.8GB/sec と 51.2GB/sec で約 4 倍の向上であるから，同じソースコードでの 2 倍から 3 倍程度の速度向上は妥当な範囲であろう．

表 1 のシステムで CPU の 1 コアだけを用いてランダムな要素を持つ対称帯行列のすべての固有対を求めた場合の経過時間の測定値の例を**表 3** から**表 8** に示す．

表 3 経過時間（秒）:（次数 N=1,000，半帯幅 h）

h	TRIDIA	BISECT	INVITR 再直交化有り
1	—	0.69	0.11
2	0.066	0.67	0.16
4	0.058	0.65	0.24
8	0.068	0.64	0.42

表 4 経過時間（秒）:（次数 N=3,000，半帯幅 h）

h	TRIDIA	BISECT	INVITR 再直交化有り
1	—	5.95	1.36
2	0.60	5.80	2.28
4	0.53	5.64	4.18
5	0.53	5.56	3.75
8	0.57	5.49	27.63
10	0.64	5.45	21.34
20	0.81	5.40	59.87
40	1.11	5.40	90.15
80	2.19	5.42	174.45

表 5 経過時間（秒）:（次数 N=10,000，半帯幅 h）

h	TRIDIA	BISECT	INVITR 再直交化有り
1	—	63.0	1,837
2	6.42	61.2	2,043
4	5.68	59.4	2,171
8	6.61	57.9	2,312

表 6 経過時間（秒）:（次数 N=30,000，半帯幅 h）

h	TRIDIA	BISECT	INVITR 再直交化無し
1	—	546	143
2	57.4	530	218
4	50.1	511	364
8	63.3	498	862

表 7 経過時間（秒）:（次数 N=100,000，半帯幅 h）

h	TRIDIA	BISECT	INVITR 再直交化無し
1	—	5,747	1,558
2	648	5,558	2,415
4	585	5,415	5,009
8	936	5,288	7,864

表 8 経過時間（秒）:（次数 N=300,000，半帯幅 h）

h	TRIDIA	BISECT	INVITR 再直交化無し
1	—	49,357	16,178
2	5,820	47,593	21,152
4	5,273	46,241	34,864

4. いくつかの考察

要素の値を区間 $[-0.5, 0.5]$ の一様な乱数にした実験例からは，行列の次数 N を一定にして半帯幅 h を増加させたとき，局在化した領域は拡がるが固有ベクトルの「分布の半径」r は h に比例するのではなくて h の約 3/2 乗に比例する傾向がみられた．

今回はまだ確認していないが，半帯幅 h 一定で行列次数 N を十分に大きくすると，それは近接相互作用を持つ 1 次元的な系の離散化に相当するから，行列要素がランダム性を含むと固有ベクトルはみな局在化するはずである．（これは一見奇妙に思える．例えば 1 次元の等間隔格子上のラプラシアンの差分近似は対称 3 重対角行列を与えるが，それに対称でランダムな摂動を加えると，いくら摂動が弱くても格子点数を十分大きくすれば，固有ベクトルはすべて局在化して固有ベクトルは正弦波的ではなくなる．）

次数 N を有限で止めると，局在化の起きる状況は行列要素に含まれるランダム性の強さにも依存するであろう．含まれるランダム性が強いほど局在化しやすいであろう．また固有ベクトルに強く局在化しているものとそうでないものが混ざるであろう．次数 N が十分大きくない，または行列要素に含まれるランダム性が弱いと　固有ベクトルの「分布の半径」は N に対して小さくなくて局在化していないとされるかもしくは局在化が弱い／不完全であるとなる

のであろうか．「N の大きさ」，「半帯幅 h」，「行列要素のランダム性の強さ」，「局在長」の間の関係を解明することが望ましい（あるいはこのことは既に解明がされているかもしれない）．

4.1 固有値問題解法の性能評価への影響

ランダム性を含む行列は固有値が互いに近接をしていない傾向があり，さらに固有ベクトルにも局在化の傾向がある．既存の固有値問題を解く算法の中には，固有値が近接していないと都合が良いものや固有ベクトルが局在化していると有利になるものがある．もしも固有値が近接していたり固有ベクトルが局在化していることで算法の計算量や収束性や丸め誤差の近似解への影響が変わるのなら，ランダムな行列を例題として得られた性能の測定値（計算時間，反復回数，計算誤差など）は，ランダム性を持たない場合の性能の予測や参考値としてはあまり適切ではない可能性がある．

局在化しているベクトルは，大きさが微小な要素を零で置き換えて近似したり，微小な大きさの要素は数値を表現する有効桁数を減らすなどにより記憶に必要な量が圧縮できる可能性や，計算を反復法などで行う場合には部分的に低精度で計算することで実質的な演算量が低減できる可能性もある．

局在化しているベクトル同士の内積の計算は一般的なベクトル同士の場合よりも得られる結果の精度が高くなるし，総和の中から相対的に微小で無視できる値を省くことで計算量も減らせる．

近似対を逆反復法で求めて改良する場合に，固有値が近接している組に対して近似固有ベクトルの再直交化処理を加えることで精度を維持しようとする計算では，固有ベクトルが局在化していると，相互の局在化領域に重なりがなければ，最初からほとんど直交しているので直交化処理を省けて有利になることがある．

4.2 局在化された固有解の近似的解法

局在化している固有ベクトルの近似値は少ない計算量で求めることができる．局在化領域を含む領域の外部に対する添字を持つ要素の値をすべて零と置いて近似すれば，元の固有値問題に比べて小規模の固有値問題が得られる．小規模の固有値問題を解いて得られた固有ベクトルから最初に仮定した局在性を満たしているものを選択する．得られた近似対 $(\widetilde{\lambda}, \widetilde{\mathbf{x}})$ が元の固有値問題 $B\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ の十分に良い近似対であるかを調べるには，元の方程式の残差ベクトル $(B - \widetilde{\lambda}\mathbf{I})\widetilde{\mathbf{x}}$ を求めれば良いが，$\widetilde{\mathbf{x}}$ の非零要素の添字の範囲は狭いので行列ベクトル積は高速に計算できる．

5. 終わりに

今後，固有値問題の計算がますます大規模化していくとき，固有ベクトルが局在化する現象が重要になる場合が増えるであろうと思われます．

参考文献

[1] MACHIDA, Manabu:“Note on Anderson Localization”, 資料”2003 年度宮下研夏の勉強会”, URL(http://hatano-lab.iis.u-tokyo.ac.jp/machida/doc/localization_02.pdf)
[2] Junko Yamasaki:“A New algorithm of Analyzing the Anderson Localization”, (MASTER THESIS), URL(http://hatano-lab.iis.u-tokyo.ac.jp/guidance/thesis /shuron2001/thesis_yamasaki.pdf)
[3] P.W. Anderson:“Absence of Diffusion in Certain Random Lattices”, *Phys. Rev.*, **109** (1958), pp.1492–1505.
[4] 福山 秀敏:「アンダーソン局在」, 物理学最前線 2, 共立出版 (1983).
[5] 川畑 有郷:「アンダーソン局在のスケーリング理論」, 物理学最前線 13, 共立出版 (1985).
[6] 長岡 洋介, 安藤 恒也, 高山 一:「局在・量子ホール効果・密度波」, 1 章 1 節–2 節, 現代の物理学 18, 岩波書店 (1993).
[7] 大槻 東巳:「不規則電子系の金属-絶縁体転移」, 現代物理学最前線 2, 共立出版 (2000), pp.75–142.
[8] 小野 嘉之:「金属絶縁体転移」, 5 章–6 章, 朝倉物性物理シリーズ 1, 朝倉書店 (2002).
[9] 川畑 有郷:「固体物理学」, 6 章 4 節, [物理の考え方 3], 朝倉書店 (2007)
[10] 小谷 眞一:「ランダム・ポテンシャルの問題」, **数学**, **38**, 岩波書店 (1986), pp.53–61.
[11] 氷上 忍:「ランダム・ポテンシャルの問題に対する補足」, **数学**, **38**, 岩波書店 (1986), pp.61–65.
[12] 小谷 眞一: (論説)「ランダム・ポテンシャルの問題 II」, **数学**, **38**, 岩波書店 (1986), pp.193–201.
[13] 第 14 回日本数学会彌永賞（小谷 眞一），「ランダムなポテンシャルをもつ Schrödinger 作用素のスペクトル理論」, **数学**, **38**, 岩波書店 (1986), p.265.
[14] 福島 正俊:「ランダム Schrödinger 作用素に関する小谷理論」, **数学**, **38**, 岩波書店 (1986), pp.266–269.
[15] 小沢 真:「ランダム媒質のスペクトル」, **数学**, **44**, 岩波書店 (1992), pp.306–319.
[16] 永尾 太郎:「ランダム行列の基礎」, 東京大学出版会 (2005).
[17] Martin R.S. and Wilkinson J.H.: “Solution of symmetric and unsymmetric band equations and the calculations of eigenvectors of band matrices”, *Numer. Math.*,**9** (1967), pp.279–301 .
[18] 村田 健郎, 小国 力, 唐木 幸比古: 「スーパーコンピュータ 科学技術計算への適用」, 丸善 (1985).
[19] 小国 力 編, 村田 健郎, 三好 俊郎, ドンガラ J.J., 長谷川 秀彦 共著: 「行列計算ソフトウェア - WS, スーパーコン, 並列計算機 - 」, 丸善 (1991).
[20] 村上弘:「固有値解析とアンダーソン局在」, 情報処理学会研究報告, 2007-HPC-112, No.7 (2007 年 9 月), pp.33–35.