

# ランダム性のある行列と固有ベクトルの局在化について

村上 弘<sup>1,a)</sup>

**概要:** ランダム性を持つ隣接相互作用から導かれる実対称 3 重対角行列の固有ベクトルに生じる局在化現象について実験と考察をしてみる。

**キーワード:** 固有ベクトル, 局在化, ランダム行列

## On Localizations of Eigenvectors of a Matrix with Randomness

HIROSHI MURAKAMI<sup>1,a)</sup>

**Abstract:** We try to make some experiments and considerations on the localization phenomena of eigenvectors of a real symmetric tridiagonal matrix which is derived from interactions between neighbor sites with randomness.

**Keywords:** eigenvector, localization, random matrix

### 1. はじめに

低次元の空間内に離散点が分布していて、隣接（近接）する点の間にだけ相互作用が働くとする。簡単のため相互作用は作用反作用的であるとする。各離散点につけた番号を添字とする実対称行列で系全体の相互作用を表現するものを考える。そのとき相互作用の強さにランダム性がある、系の規模が十分大きくなる時対応する行列の固有ベクトルは局在化する傾向を持つ。ここでベクトルの局在化とは、元の空間では距離が近い狭い範囲の離散点の集団に対応する比較的少ない個数のベクトルの要素だけが強い値を持ち、その範囲から離れた離散点に対応するベクトルの要素は値が急減少していることとする。

今回は系が 1 次元の場合に限って、この隣接ネットワークに対するランダム行列の固有ベクトルの局在化について実験と若干の考察を行なう。いま離散点が  $N$  個あり、各点はその左右の点とだけ相互作用を持つとする。相互作用は実数であるとして、離散点に座標の順に番号を付けてそれ

を行列の添字にすると、相互作用を表わす行列  $A$  は  $N$  次の実対称 3 重対角形になる。そうして主対角要素  $\alpha_j = a_{j,j}$  と副対角要素  $\beta_j = a_{j+1,j} = a_{j,j+1}$  がランダム性を持つものとする。行列  $A$  の  $N$  個の固有対（すべて実にとれる）を  $(\lambda^{(p)}, \mathbf{v}^{(p)})$ ,  $p=1, 2, \dots, N$  とする。固有ベクトルは 2 乗ノルムが 1 と正規化されているとする。固有ベクトルが局在化していれば、ベクトルの要素の相対的な強度は、添字の値がある幅の狭い区間に含まれるときだけ大きくて、添字の値がその区間から離れると急減少する。

#### 1.1 ベクトルの「中心」と「半径」、局在区間の幅

固有ベクトルの局在化の状況を調べるために、ベクトルの要素の値の分布の中心位置の指標として、(いま固有ベクトルは正規化されていて  $\sum_{j=1}^N v_j^2 = 1$  なので) 要素の値の 2 乗  $w_j = v_j^2$  を重みとする添字の値  $j$  の平均値

$$\mu = \sum_{j=1}^N j w_j$$

をとる。それをここではベクトルの要素の 2 乗の分布の「中心」、あるいは単に「中心」(center)と呼ぶことにする。またベクトルの要素の値の分布の広がり的大小さを与える

<sup>1</sup> 首都大学東京・数理情報科学専攻  
Department of Mathematics and Information Sciences,  
Tokyo Metropolitan University

<sup>a)</sup> mrkmhrsh@tmu.ac.jp

指標として、同じ重み  $w_j$  による「中心」からの添字の値の分散の値

$$\sigma^2 = \sum_{j=1}^N (j - \mu)^2 w_j$$

をとり、その平方根である標準偏差  $\sigma$  を、ここではベクトルの要素分布の「半径」、あるいは単に「半径」(radius)と呼ぶことにする。

注：局在化の様子を調べるのには、重みとしてたとえば要素の絶対値の相対比  $w_j = |v_j| / \sum_{\ell=1}^N |v_\ell|$  を (要素の値の2乗である重み  $w_j = v_j^2$  のかわりに) 用いてもよくて、どちらでも結果の傾向は同様になる。

1次元空間の離散化で得られた  $N$  次のベクトル  $\mathbf{v}$  の局在区間は、ある小さい正の値  $\epsilon$  を閾値とすると、 $|v_j| > \epsilon$  を満たす添字  $j$  をすべて含む最小の閉区間のこととする。そうして「局在区間の幅」を局在区間に含まれる添字の値の個数 (添字の最大値から最小値を引いて1を加えた値) のことであるとする。局在区間およびその「幅」は閾値  $\epsilon$  に依存して決まる。以下の実験の中では閾値  $\epsilon$  の値を  $10^{-6}$  に設定している。

## 2. ランダムな実対称3重対角行列の実験例

$N$  次の実対称3重対角行列  $A$  が要素の値にランダム性を持つ場合の例について、数値実験をしてみた (3重対角行列の固有対をすべて求めるのには、Lapackの倍精度ルーチンDSTEQRでインテル社のMath Kernelライブラリにも含まれているものを用いた。これは固有値をQR反復法を用いて解いている。)

### 2.1 主対角要素がランダムで副対角要素が一定の場合

いま  $\{r_j\}$  を区間  $[-1, 1]$  上の一様分布乱数列として、行列  $A$  は実対称3重対角行列で、主対角要素をランダムな値  $a_{j,j} = 2 + r_j$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  と設定し、副対角要素の値は一定の値  $a_{j+1,j} = a_{j,j+1} = -1$ ,  $j=1, 2, \dots, N-1$  に設定した。

次数  $N$  が1,000, 3,000, 10,000, 30,000の各場合について、それぞれ同じ乱数の列を用いて行列要素を生成して、その固有対をすべて求め、固有ベクトルの要素の(2乗の)値の分布を調べた。次数  $N$  の各場合について、結果の例を図1, 図2, 図3, 図4に、それぞれ4段に重ねたグラフで示している。

- 最上段のグラフは、横軸に固有値の昇順の順位をとり、縦軸に固有ベクトルの「半径」をとってプロットしたものである。
- 上から2段目のグラフは、横軸に固有値の値をとり、縦軸に固有ベクトルの「半径」をとってプロットしたものである。
- 上から3段目のグラフは、横軸に固有ベクトルの「中

心」をとり、縦軸に固有ベクトルの「半径」をとってプロットしたものである。

- 最下段のグラフは、横軸に固有値の昇順の順位をとり、縦軸に固有ベクトルの「局在区間の幅」をとってプロットしたものである。

固有ベクトルの局在区間の幅(要素の分布の幅)は、固有値の上限と下限の付近で非常に狭いが、固有値分布の中央付近では広がっている。その幅の最大値は、 $N=1,000$  のとき1,000程度で、 $N=3,000$  のとき1,200程度で、 $N=10,000$  のとき1,200程度で、 $N=30,000$  のとき1,300程度である。この傾向が続くならば、 $N$  が大きくなると、 $N$  に比べて局在区間の幅が相対的に狭くなっていくと思われる。

$N=1,000$ ,  $N=3,000$ ,  $N=10,000$ ,  $N=30,000$  のそれぞれの場合について固有値の下端側から6個のベクトルについて、横軸に要素の添字  $j$  をとり、縦軸には要素の大きさ  $|v_j|$  の対数をとってプロットしたグラフを図25に示す。固有ベクトルの要素の値の分布が非常に狭い幅の区間に局在化していることが見てとれる。

$N=30,000$  の場合について、固有値の昇順で第10,001番から第10,006のベクトルについて、横軸に要素の添字  $j$  をとり、縦軸には要素の大きさ  $|v_j|$  の対数をとってプロットしたグラフを図31に示す。固有ベクトルの要素の値の分布が狭い幅の区間に局在化していることが見てとれる。

### 2.2 主対角要素が零で副対角要素がランダムの場合

いま  $\{r_j\}$  を区間  $[-1, 1]$  上の一様分布乱数列として、実対称3重対角行列  $A$  を主対角要素の値はすべて一定値である零に設定し、副対角要素はランダムな値  $a_{j+1,j} = a_{j,j+1} = -1 + (1/2)r_j$ ,  $j=1, 2, \dots, N-1$  に設定した。

次数  $N$  が1,000, 3,000, 10,000, 30,000の各場合について、それぞれ同じ乱数の列を用いて行列要素を生成して、その固有対をすべて求めて、固有ベクトルの要素の(2乗の)値の分布を調べた。この場合も上と同様に結果の例をそれぞれ4段に重ねたグラフで次数  $N$  の各場合について、図5, 図6, 図7, 図8に示している。

この例では、行列の性質(対角要素が零の実対称3重対角行列)から固有値は必ず正負に対称に現れる( $\lambda$ が固有値なら $-\lambda$ も固有値である)。固有ベクトルの局在区間の幅(要素の分布の幅)は、固有値の上限下限付近で非常に小さいが、固有値分布の中央付近の狭い範囲では(固有値が零の付近)では  $N$  を増加させても広いままである。その幅の最大値は、 $N=1,000$  のとき1,000程度で、 $N=3,000$  のときほぼ3,000程度で、 $N=10,000$  のとき4,200程度で、 $N=30,000$  のとき11,000程度である。固有値分布の中央付近以外では、局在区間の幅は  $N$  との相対比が減少していく傾向を持っている。

$N=1,000$ ,  $N=3,000$ ,  $N=10,000$ ,  $N=30,000$  のそれぞれ

れの場合について固有値の下端側から6個のベクトルについて、横軸に要素の添字  $j$  をとり、縦軸には要素の大きさ  $|v_j|$  の対数をとってプロットしたグラフを図 26 に示す。固有ベクトルの要素の値の分布が非常に狭い幅の区間に局在化していることが見てとれる。

$N=30,000$  の場合について、固有値の昇順で第 10,001 番から第 10,006 のベクトルについて、横軸に要素の添字  $j$  をとり、縦軸には要素の大きさ  $|v_j|$  の対数をとってプロットしたグラフを図 32 に示す。固有ベクトルの要素の値の分布が狭い幅の区間に局在化していることが見てとれる。

### 2.3 主対角要素と副対角要素がすべてランダムの場合

いま  $\{r_j\}$  と  $\{s_j\}$  をそれぞれ区間  $[-1, 1]$  上の独立な一様分布乱数として、実対称 3 重対角行列  $A$  を、主対角要素をランダムな値  $a_{j,j} = 2r_j$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  に設定し、副対角要素もランダムな値  $a_{j+1,j} = a_{j,j+1} = -(1 + s_j)$ ,  $j=1, 2, \dots, N-1$  に設定した。

次数  $N$  が 1,000, 3,000, 10,000, 30,000 の各場合について、それぞれ同じ乱数の列を用いて行列要素を生成して、その固有対をすべて求めて、固有ベクトルの要素の (2 乗の) 値の分布を調べた。この場合も上と同様に結果の例をそれぞれ 4 段に重ねたグラフで次数  $N$  の各場合について、図 9, 図 10, 図 11, 図 12 に示している。

固有ベクトルの局在区間の幅 (要素の分布の幅) は固有値分布の両端付近では狭くなる傾向を示す。その幅の最大値は、 $N=1,000$  のとき 80 程度、 $N=3,000$  のとき 80 程度、 $N=10,000$  のとき 100 程度、 $N=30,000$  のとき 110 程度、とほぼ一定の値を示している。このため、局在区間の幅の  $N$  に対する比は減少し、固有ベクトルはどれも局在性が著しい。

$N=1,000$ ,  $N=3,000$ ,  $N=10,000$ ,  $N=30,000$  のそれぞれの場合について固有値の下端側から 6 個のベクトルについて、横軸に要素の添字  $j$  をとり、縦軸には要素の大きさ  $|v_j|$  の対数をとってプロットしたグラフを図 27 に示す。固有ベクトルの要素の値の分布が非常に狭い幅の区間に局在化していることが見てとれる。

$N=30,000$  の場合について、固有値の昇順で第 10,001 番から第 10,006 のベクトルについて、横軸に要素の添字  $j$  をとり、縦軸には要素の大きさ  $|v_j|$  の対数をとってプロットしたグラフを図 33 に示す。固有ベクトルの要素の値の分布が非常に狭い幅の区間に局在化していることが見てとれる。

## 3. ランダム性を持たせた連成系の実験例

いま直線上に順に  $N$  個の質量  $m_j$  の質点  $P_j$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  があり、さらに固定されていて動かない仮想的な質点  $P_0$  と  $P_{N+1}$  がそれぞれ  $P_0$  は  $P_1$  の前に、 $P_{N+1}$  は  $P_N$  の後にあると考える。仮想的な質点も含めて、 $j=0, 1, 2, \dots, N$  に

対して (正值の) バネ定数  $k_{j+1}$  を持つバネにより隣り合う質点  $P_j$  と  $P_{j+1}$  の間が連結されているとする。各質点の平衡位置からの変位を  $x_j$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  とする。仮想的な質点は固定されていて変位  $x_0$  と  $x_{N+1}$  は常に零とする。

すると、これら  $N$  個の質点の運動方程式は、

$$-m_j \frac{d^2 x_j}{dt^2} = -k_j x_{j-1} + (k_j + k_{j+1}) x_j - k_{j+1} x_{j+1}, \quad j=1, 2, \dots, N$$

となる (ただし上式で  $j=1$  のときは  $x_0=0$  で、 $j=N$  のときは  $x_{N+1}=0$  である)。

いま  $M$  を対角行列でその第  $j$  番目の対角要素は  $m_j$  であるとし、 $K$  を対称 3 重対角行列でその第  $j$  番目の対角要素は  $\alpha_j = k_j + k_{j+1}$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  で、第  $j$  行目の下副対角要素は  $\beta_j = -k_{j+1}$ ,  $j=1, 2, \dots, N-1$  であるとする ( $K$  は正定値行列である)。

$$K = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{N-1} & \\ & & & \beta_{N-1} & \alpha_N & \end{bmatrix}$$

するとこのバネ連成系の運動方程式 (常微分方程式) は、行列形で

$$M \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -K \mathbf{x}$$

と書ける。さらにいま  $\mathbf{y} = M^{1/2} \mathbf{x}$ ,  $A = M^{-1/2} K M^{-1/2}$  とおくと、 $A$  は正定値対称 3 重対角行列で第  $j$  番目の対角要素は  $\alpha_j/m_j$ 、第  $j$  列目の下副対角要素は  $\beta_j/\sqrt{m_j m_{j+1}}$  となる。

そうして  $\mathbf{y}$  についての常微分方程式は

$$\frac{d^2 \mathbf{y}}{dt^2} = -A \mathbf{y}$$

となる。行列  $A$  の固有対を  $(\lambda^{(q)}, \mathbf{v}^{(q)})$  とすると、固有値はすべて正の実数で、 $\mathbf{y}$  の常微分方程式の一般解は  $c^{(q)}, \phi^{(q)}$  を任意の実定数として、

$$\mathbf{y} = \sum_{q=1}^N c^{(q)} \cos \{(\lambda^{(q)})^{1/2} t + \phi^{(q)}\} \mathbf{v}^{(q)}$$

と書ける。

バネ定数および質点の質量の分布をそれぞれ与えて行列  $A$  を作り、その固有対を数値的にすべて求めて、固有ベクトルの局在化の様子を実験で調べてみた。

### 3.1 実験: バネ定数がランダムで質量が一定の場合の例

いま  $\{r_j\}$  を区間  $[-1, 1]$  上の一様分布乱数列として、バネ定数をランダムな値  $k_j = 1 + (1/2)r_j$ ,  $j=1, 2, \dots, N+1$  とし、質量は一定の値  $m_j = 1$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  とした。

その場合の連成系の行列  $A$  は (正定値の) 実対称 3 重対

角行列で、対角要素は  $a_{j,j} = k_j + k_{j+1}$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  で、副対角要素は  $a_{j+1,j} = a_{j,j+1} = -k_{j+1}$ ,  $j=1, 2, \dots, N-1$  となる。

次数  $N$  が 1,000, 3,000, 10,000, 30,000 の各場合について、それぞれ同じ乱数の列を用いて行列要素を生成して、その固有対をすべて求めて、固有ベクトルの要素の (2 乗の) 値の分布を調べた。この場合も前と同様に結果の例をそれぞれ 4 段に重ねたグラフで次数  $N$  の各場合について、**図 13**, **図 14**, **図 15**, **図 16** に示している。

問題の性質から固有値は必ず正であり、グラフからは固有値の範囲は 0 から 5.5 ぐらいの範囲にあることがわかる。固有値が下端付近では、固有ベクトルの要素の分布の「半径」も「局在区間の幅」も大きくて、次数  $N$  を大きくしても局在化がまったく起きていないが、例えば固有値が 2 以上のところでは、固有値が大きくなるにつれて「半径」も「幅」も減少して固有ベクトルの局在性が高くなっていくことがわかる。

$N=1,000$ ,  $N=3,000$ ,  $N=10,000$ ,  $N=30,000$  のそれぞれの場合について固有値の下端側から 6 個のベクトルについて、横軸に要素の添字  $j$  をとり、縦軸には要素の大きさ  $|v_j|$  の対数をとってプロットしたグラフを**図 28** に示す。固有ベクトルの要素の値の分布が局在化しておらず、ほぼ 1 次元ラプラシアン固有関数のように広がっていることがみてとれる。

$N=30,000$  の場合について、固有値の昇順で第 10,001 番から第 10,006 のベクトルについて、横軸に要素の添字  $j$  をとり、縦軸には要素の大きさ  $|v_j|$  の対数をとってプロットしたグラフを**図 34** に示す。固有ベクトルの要素の値の分布が比較的狭い幅の区間に局在化していることが見てとれる。

### 3.2 実験：質量がランダムでバネ定数が一定の場合の例

いま  $\{r_j\}$  を区間  $[-1, 1]$  上の一様分布乱数列として、質量をランダムな値  $m_j = 1 + (1/2)r_j$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  とし、バネ定数は一定の値  $k_j = 1$ ,  $j=1, 2, \dots, N+1$  とした。

その場合の連成系の行列  $A$  は (正定値の) 実対称 3 重対角行列で、対角要素は  $a_{j,j} = 2/m_j$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  となり、副対角要素は  $a_{j+1,j} = a_{j,j+1} = -1/\sqrt{m_j m_{j+1}}$ ,  $j=1, 2, \dots, N-1$  となる。

次数  $N$  が 1,000, 3,000, 10,000, 30,000 の各場合について、それぞれ同じ乱数の列を用いて行列要素を生成して、その固有対をすべて求めて、固有ベクトルの要素の (2 乗の) 値の分布を調べた。この場合も前と同様に結果の例をそれぞれ 4 段に重ねたグラフで次数  $N$  の各場合について、**図 17**, **図 18**, **図 19**, **図 20** に示している。

問題の性質から固有値は必ず正で、グラフからは固有値の範囲は 0 から 7 の範囲にあることがわかる。固有値が下端付近では、固有ベクトルの要素の分布の「半径」も「局

在区間の幅」も大きくて、次数  $N$  を大きくしても局在化がまったく起きていないが、例えば固有値が 2 以上のところでは固有値が大きくなるにつれて「半径」も「幅」も減少して固有ベクトルの局在性が高くなっていくことがわかる。

$N=1,000$ ,  $N=3,000$ ,  $N=10,000$ ,  $N=30,000$  のそれぞれの場合について固有値の下端側から 6 個のベクトルについて、横軸に要素の添字  $j$  をとり、縦軸には要素の大きさ  $|v_j|$  の対数をとってプロットしたグラフを**図 29** に示す。固有ベクトルの要素の値の分布が局在化しておらず、ほぼ 1 次元ラプラシアンの固有関数のように広がっていることがみてとれる。

$N=30,000$  の場合について、固有値の昇順で第 10,001 番から第 10,006 のベクトルについて、横軸に要素の添字  $j$  をとり、縦軸には要素の大きさ  $|v_j|$  の対数をとってプロットしたグラフを**図 35** に示す。固有ベクトルの要素の値の分布が比較的幅のある区間に局在化していることが見てとれる。

### 3.3 実験：バネ定数も質量もランダムな場合の例

いま  $\{r_j\}$  と  $\{s_j\}$  をそれぞれ区間  $[-1, 1]$  上の独立な一様分布乱数列として、バネ定数をランダムな値  $k_j = 1 + (1/2)r_j$ ,  $j=1, 2, \dots, N+1$  とし、質量もランダムな値  $m_j = 1 + (1/2)s_j$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  とした。

その場合の連成系の行列  $A$  は (正定値な) 実対称 3 重対角行列で、対角要素は  $a_{j,j} = (k_j + k_{j+1})/m_j$ ,  $j=1, 2, \dots, N$  となり、副対角要素は  $a_{j+1,j} = a_{j,j+1} = -k_{j+1}/\sqrt{m_j m_{j+1}}$ ,  $j=1, 2, \dots, N-1$  となる。

次数  $N$  が 1,000, 3,000, 10,000, 30,000 の各場合について、それぞれ同じ乱数の列を用いて行列要素を生成して、その固有対をすべて求めて、固有ベクトルの要素の (2 乗の) 値の分布を調べた。この場合も前と同様に結果の例をそれぞれ 4 段に重ねたグラフで次数  $N$  の各場合について、**図 21**, **図 22**, **図 23**, **図 24** に示している。

グラフからは固有値の範囲は 0 から 9 の範囲にあることがわかる。固有値が下端付近では、固有ベクトルの要素の分布の「半径」も「局在区間の幅」も大きくて、次数  $N$  を大きくしても局在化がまったく起きていないが、例えば固有値が 2 以上のところでは固有値が大きくなるにつれて「半径」も「幅」も減少して固有ベクトルの局在性が高くなっていくことがわかる。

$N=1,000$ ,  $N=3,000$ ,  $N=10,000$ ,  $N=30,000$  のそれぞれの場合について固有値の下端側から 6 個のベクトルについて、横軸に要素の添字  $j$  をとり、縦軸には要素の大きさ  $|v_j|$  の対数をとってプロットしたグラフを**図 30** に示す。固有ベクトルの要素の値の分布が局在化しておらず、ほぼ 1 次元ラプラシアンの固有関数のように広がっていることがみてとれる。

$N=30,000$  の場合について、固有値の昇順で第 10,001 番から第 10,006 のベクトルについて、横軸に要素の添字  $j$  をとり、縦軸には要素の大きさ  $|v_j|$  の対数をとってプロットしたグラフを図 36 に示す。固有ベクトルの要素の値の分布が幅の狭い区間に局在化していることが見てとれる。

#### 4. 局在化している固有ベクトルによる展開

いま固有ベクトル  $\mathbf{v}^{(p)}$  が局在化していて、区間  $[1, N]$  に比べて狭い区間  $I^{(p)}$  に含まれる添字を持つ要素だけが無視できない大きさを持つとする。そのとき区間  $I^{(p)}$  を固有ベクトル  $\mathbf{v}^{(p)}$  の局在区間（空間が多次元ならば局在領域）と呼ぶことにする。規格化された固有ベクトルの局在区間は、要素の値の大きさを無視する閾値に依存する（要素の値の大きさは局在区間の外部では閾値以下になる）。

固有ベクトルの 2 乗ノルムが 1 に正規化されていれば、与えられたベクトル  $\mathbf{x}$  の固有ベクトル展開

$$\mathbf{x} = \sum_{p=1}^N c^{(p)} \mathbf{v}^{(p)}$$

に於いて、固有ベクトルの正規直交性により展開係数は内積を用いて

$$c^{(p)} = (\mathbf{v}^{(p)}, \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \mathbf{v}_j^{(p)} \mathbf{x}_j$$

と計算できる。そのとき固有ベクトル  $\mathbf{v}^{(p)}$  が局在化していれば、内積計算で積和を計算する添字  $j$  の範囲を全区間  $[1, N]$  から固有ベクトル  $\mathbf{v}^{(p)}$  の局在区間  $I^{(p)}$  に置き換えて

$$c^{(p)} \approx \sum_{j \in I^{(p)}} \mathbf{v}_j^{(p)} \mathbf{x}_j$$

と近似ができる。この近似を採用すると、局在区間の幅  $|I^{(p)}|$ （区間に入る添字の個数）が小さければ、積和の回数が減って演算量が減らせるし、さらに固有ベクトル  $\mathbf{v}^{(p)}$  は添字が局在区間に入る要素だけを保持すれば良いので、作業に必要な記憶量も削減できる。

##### 4.1 ベクトルが疎な固有ベクトル展開を持つ場合

与えられたベクトル  $\mathbf{x}$  が少数  $m$  個 ( $m \ll N$ ) の既知の固有ベクトルを用いてそれらの線形結合として表わされる場合について考えてみる（数学的には近似をしなくても、 $m$  個の線形結合係数に対する連立 1 次方程式を解けば線形結合の係数を求められるが、計算量が一般的には  $O(m^3)$  となるので、より効率の良い計算方法を求めたい。）

それら  $m$  個の特定の固有ベクトルを（固有対の番号を付け替えて） $\mathbf{v}^{(1)}, \mathbf{v}^{(2)}, \dots, \mathbf{v}^{(m)}$  とする。そのとき固有ベクトルの展開係数  $c^{(p)}$ ,  $p=1, 2, \dots, m$  は

$$c^{(p)} \approx \sum_{j \in I^{(p)}} \mathbf{v}_j^{(p)} \mathbf{x}_j$$

と近似できて、番号  $p$  の異なる  $m$  通りの計算は並列に行なえる（このやり方で  $m$  個の係数をすべて求める演算量は、積和の回数が各区間の幅の和  $\sum_{p=1}^m |I^{(p)}|$  になる）。

このとき、ある第  $p$  番目の局在区間  $I^{(p)}$  が他の  $m-1$  個の固有ベクトルの局在区間と重なりがなければ、 $c^{(p)}$  の近似値の計算は更に簡略化できる。実際に  $\mathbf{x}$  が  $m$  個の固有ベクトルの線形結合であるならば、

$$\mathbf{x} = c^{(1)} \mathbf{v}^{(1)} + c^{(2)} \mathbf{v}^{(2)} + \dots + c^{(m)} \mathbf{v}^{(m)}$$

であるが、いま添字  $j$  が第  $p$  番目の固有ベクトルの局在区間  $I^{(p)}$  に含まれるならば、他の固有ベクトルの局在区間は添字  $j$  を含まないので、近似として

$$\mathbf{x}_j \approx c^{(p)} \mathbf{v}_j^{(p)}$$

が成り立つとすれば、

$$c^{(p)} \approx \mathbf{x}_j / \mathbf{v}_j^{(p)}$$

により、展開係数  $c^{(p)}$  の近似値を除算 1 回で計算できる。ただしなるべく良い近似が得られるように、添字  $j = j^{(p)}$  として  $|\mathbf{v}_j^{(p)}|$  の値を最大にするものを選ぶ。各固有ベクトルについて、そのような良い添字を調べて準備しておくことができる。  $m$  個の固有ベクトルの局在区間がどれも互いに重なりを持たなければ、 $m$  個の展開係数を求めるためのこの近似法による演算量は除算  $m$  回となる。

（これは連立 1 次方程式の係数行列の対角要素が優越的な場合の対角近似である。また、このようにして係数の近似値を得た後で、一種の残差反復で近似の改良を行なうことが考えられる。）

局在区間に重なりのある固有ベクトルの組が存在する場合についての処理の考察は省略する。

**注：**異なる固有ベクトルの局在区間は一般には重なりを持ちうる（もしも  $N$  個の固有ベクトルについて、どの相異なる 2 つのベクトルにも局在区間に重なりがないとすると、それらの局在区間の幅は 1 以上だからすべての局在区間の幅は 1 になるが、それは一般的な状況ではない）。しかし  $N$  に比べて極めて少数である  $m$  個の固有ベクトルを選んだときに、それらの局在区間の幅がどれも  $N$  に比べて極めて小さければ、それら  $m$  個のうちの相異なる 2 つの固有ベクトルの局在区間が重なりを持つことは稀であろうと思われる。  $m$  個の固有ベクトルが具体的に与えられれば、それらの間の局在区間の重なり合いの状況は容易に調べられる。

#### 5. おわりに

3 重対角行列の要素にランダム性を持たせた場合の固有値の要素の値の分布について、局在化の傾向をいくつかの例について実験してみた（乱数性を入れた実験は、乱数の

列に依って得られる結果は異なる)。

バネによる連成系の振動を表わす三重対角行列は、下端付近の固有値に対する固有ベクトルが局在化しないことが実験により分かった。

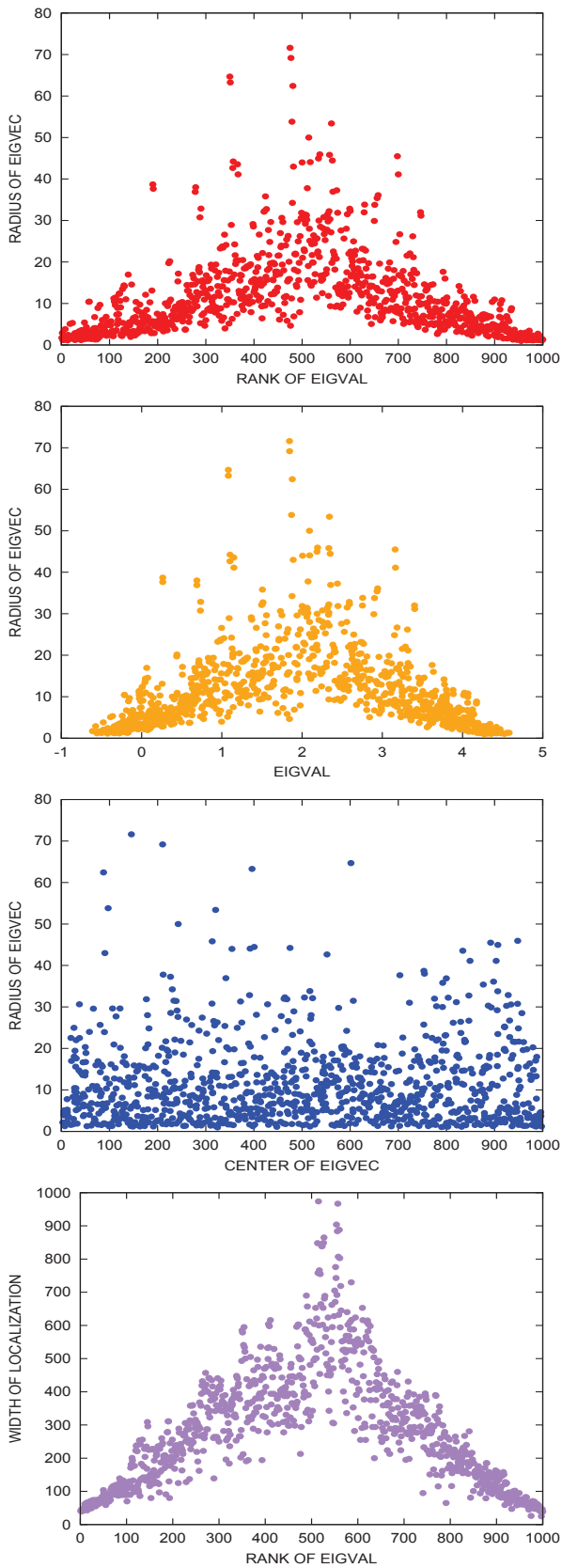


図 1 対称 3 重対角行列 (主対角がランダムで副対角は一定) ( $N=1,000$ )

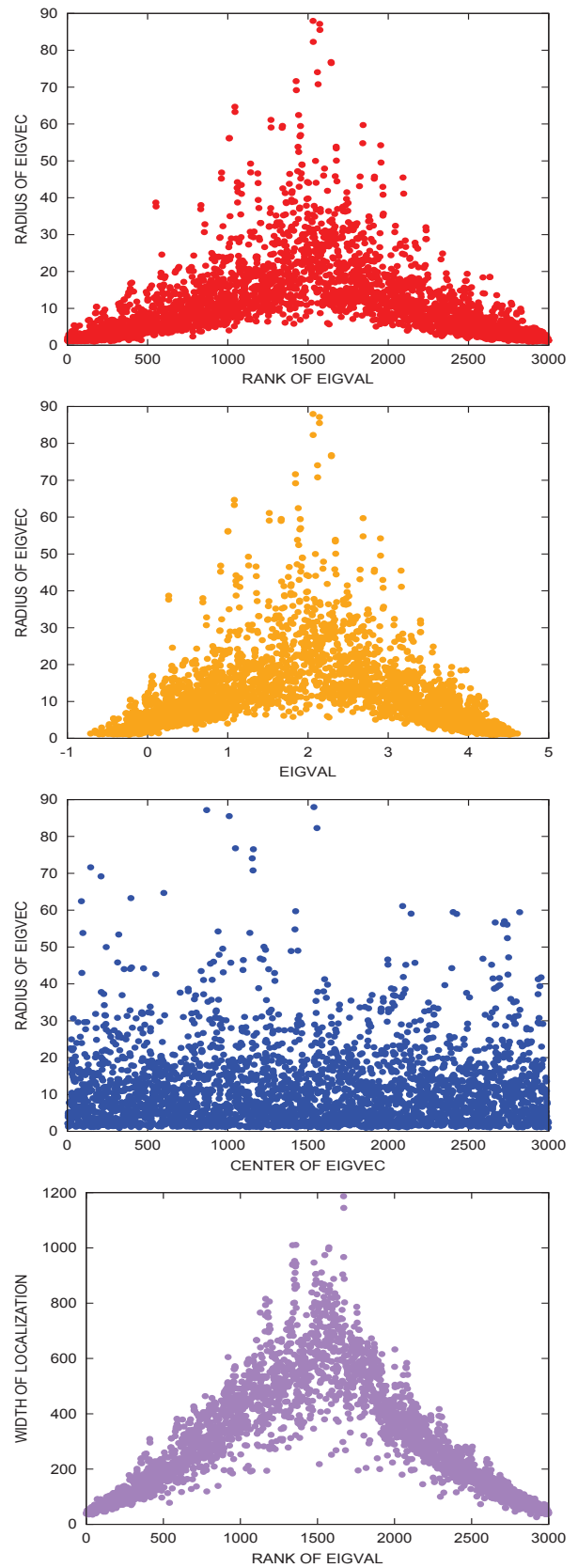


図 2 対称 3 重対角行列 (主対角がランダムで副対角は一定) ( $N=3,000$ )

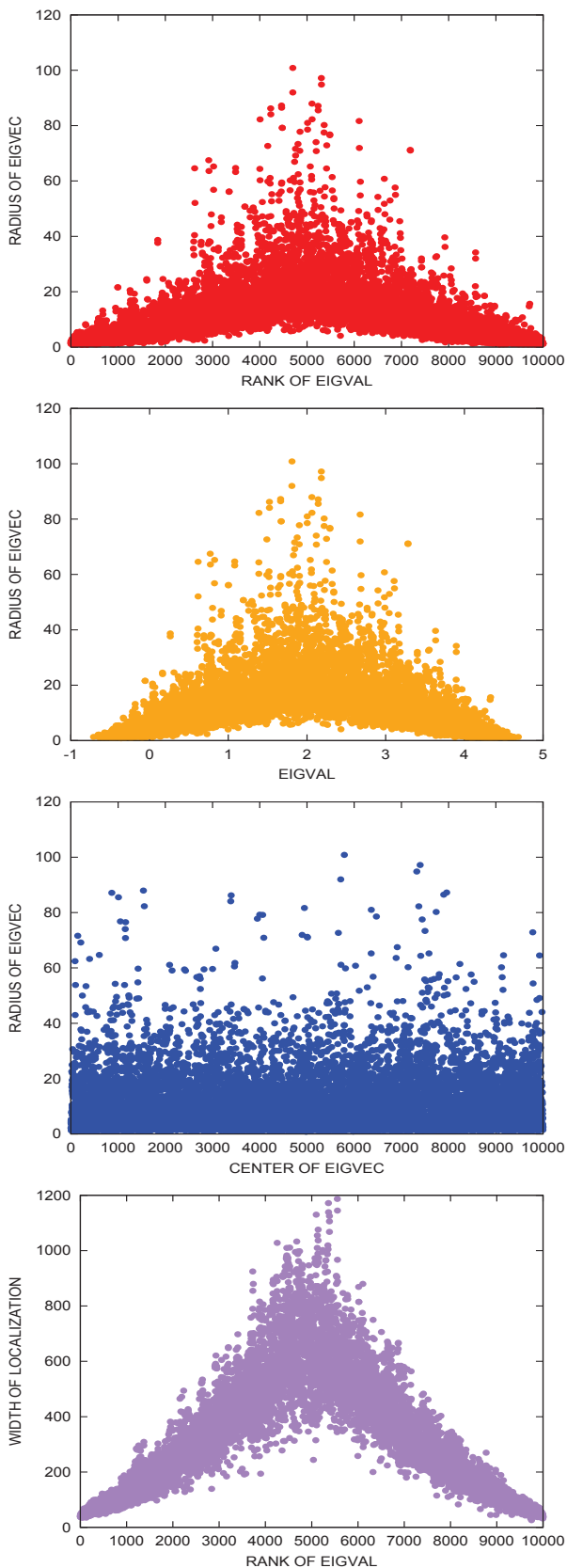


図 3 対称 3 重対角行列 (主対角がランダムで副対角は一定) ( $N=10,000$ )

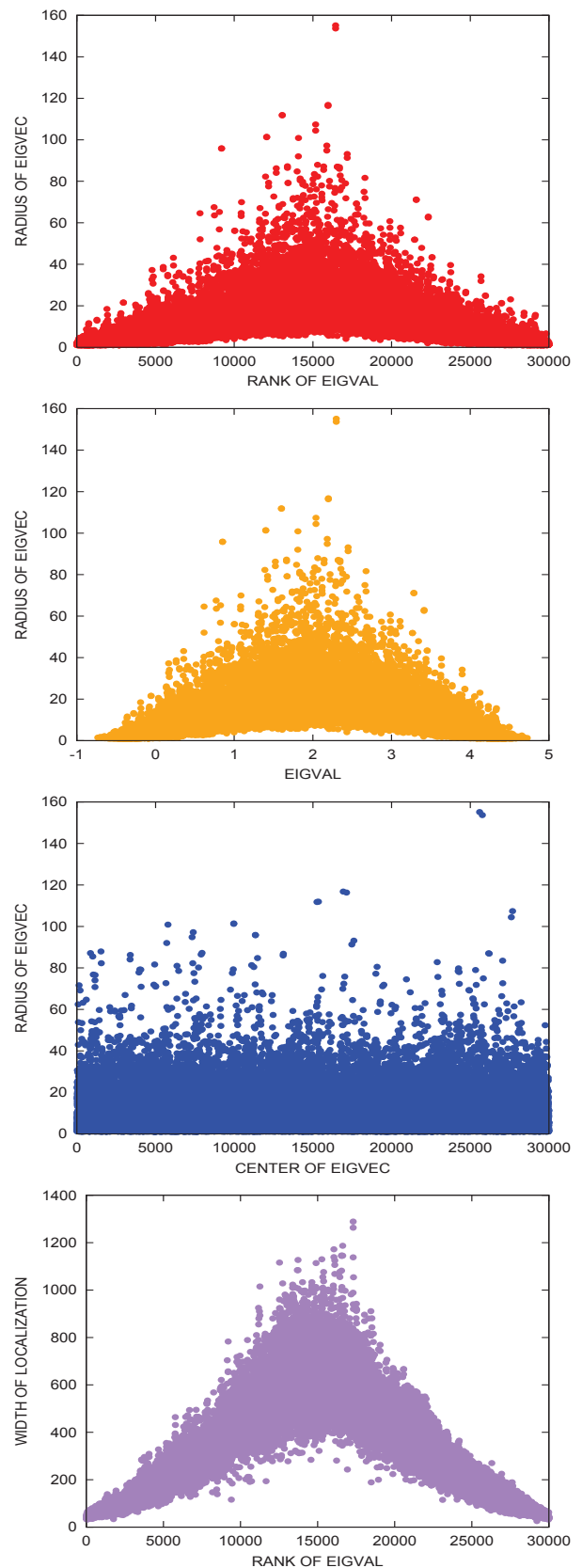


図 4 対称 3 重対角行列 (主対角がランダムで副対角は一定) ( $N=30,000$ )



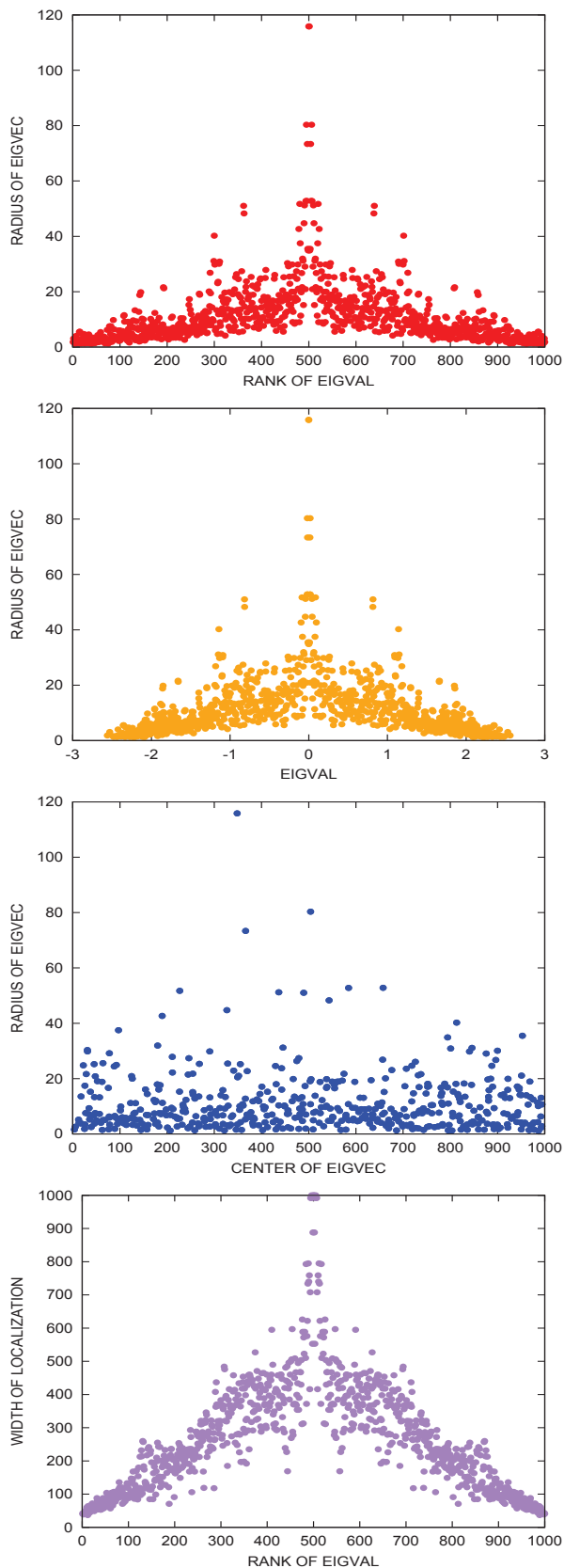


図 5 対称 3 重対角行列 (主対角が零で副対角はランダム) ( $N=1,000$ )

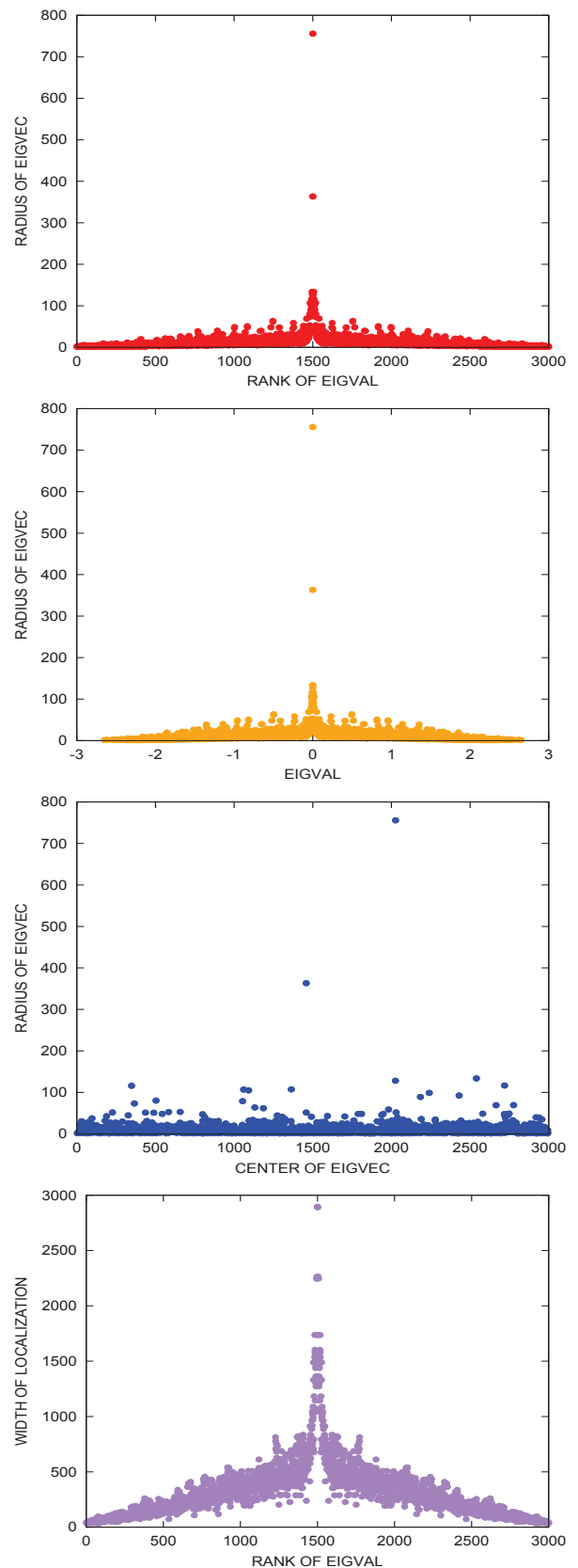


図 6 対称 3 重対角行列 (主対角が零で副対角はランダム) ( $N=3,000$ )

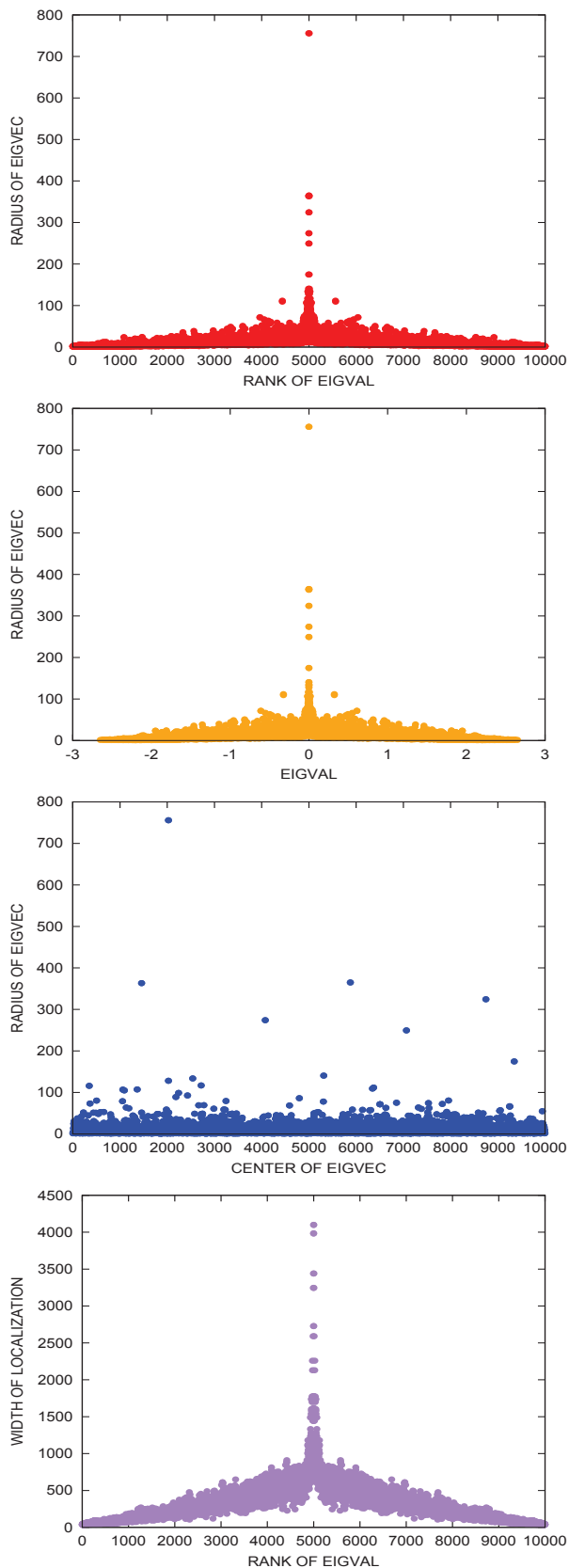


図 7 対称 3 重対角行列 (主対角が零で副対角はランダム)  
( $N=10,000$ )

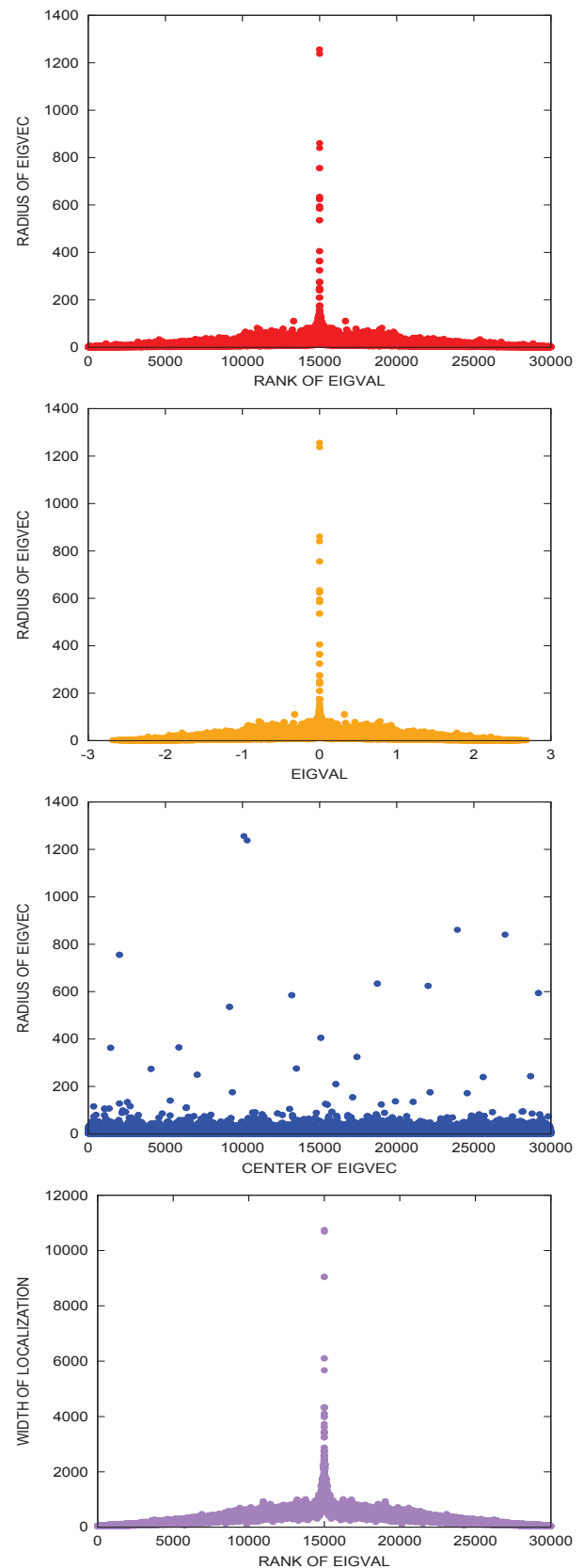


図 8 対称 3 重対角行列 (主対角が零で副対角はランダム)  
( $N=30,000$ )

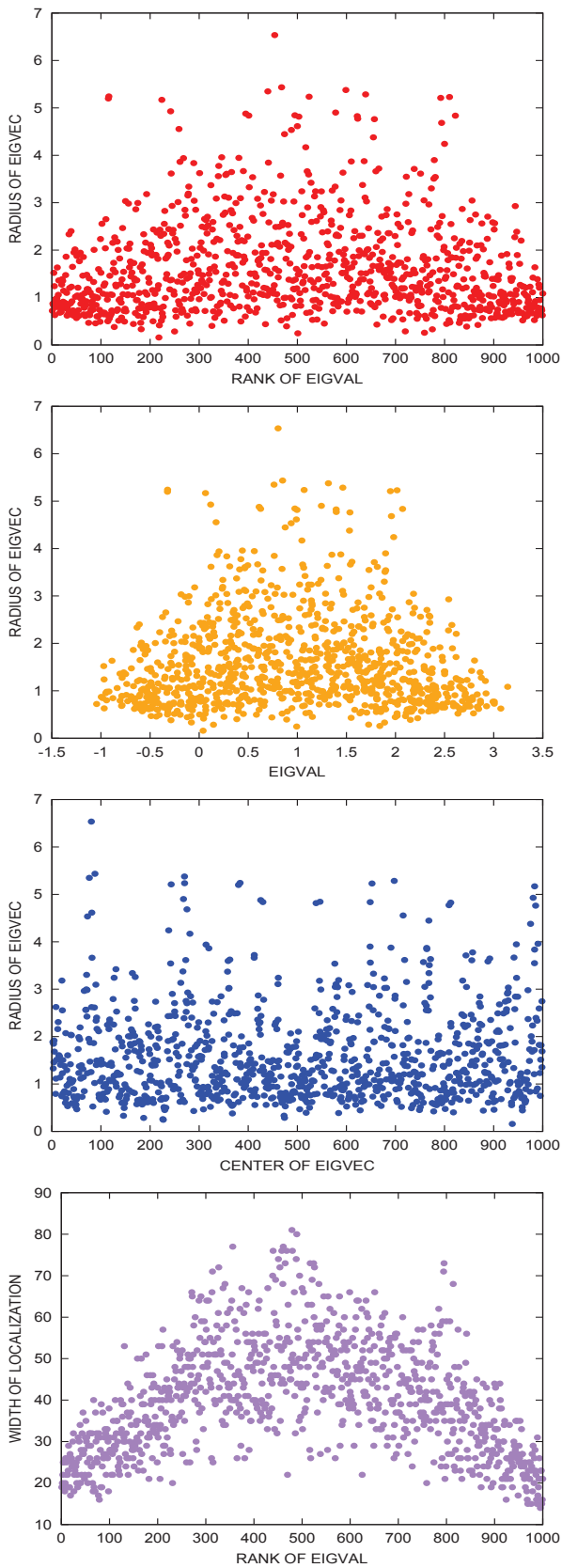


図 9 対称 3 重対角行列 (全ての要素がランダム) ( $N=1,000$ )

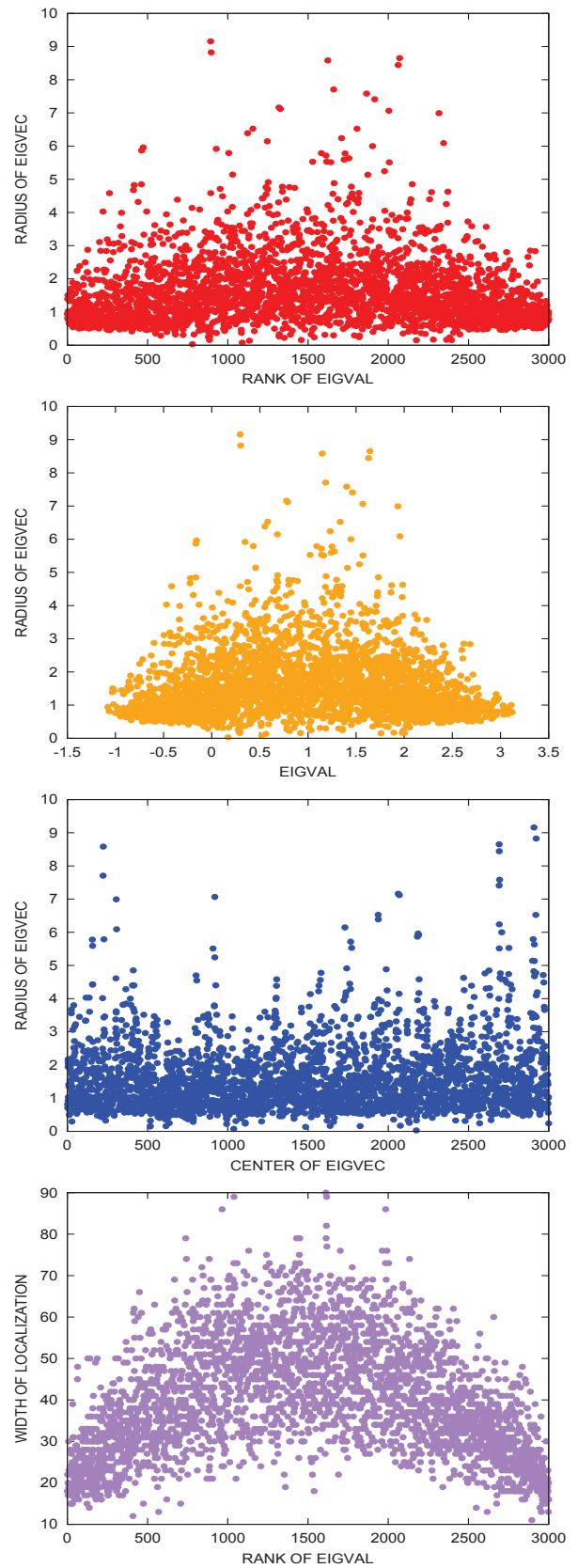


図 10 対称 3 重対角行列 (全ての要素がランダム) ( $N=3,000$ )

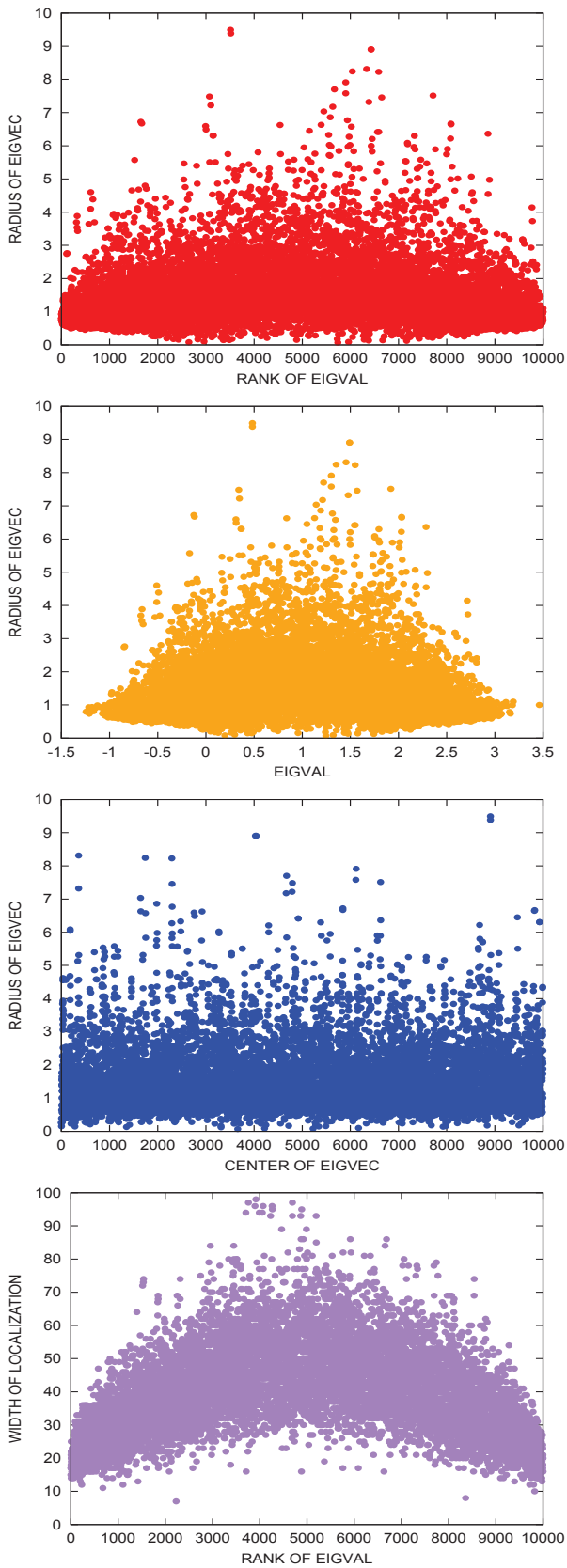


図 11 対称 3 重対角行列 (全ての要素がランダム) ( $N=10,000$ )

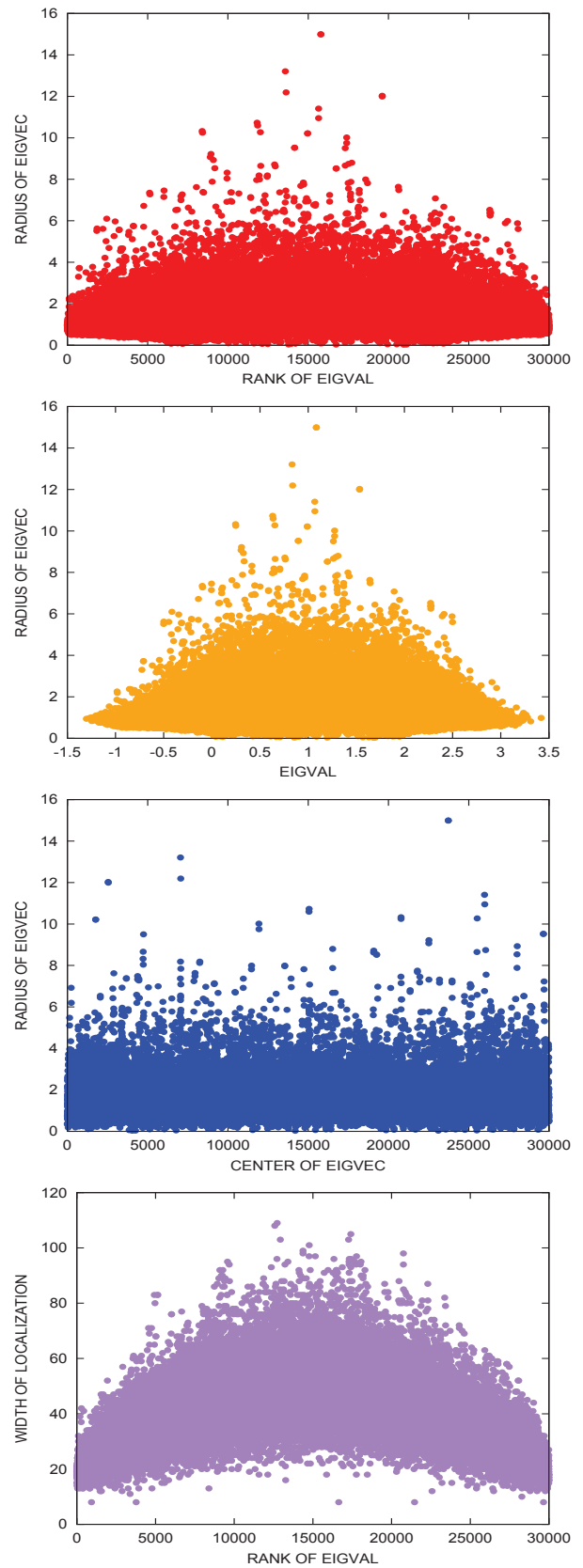


図 12 対称 3 重対角行列 (全ての要素がランダム) ( $N=30,000$ )

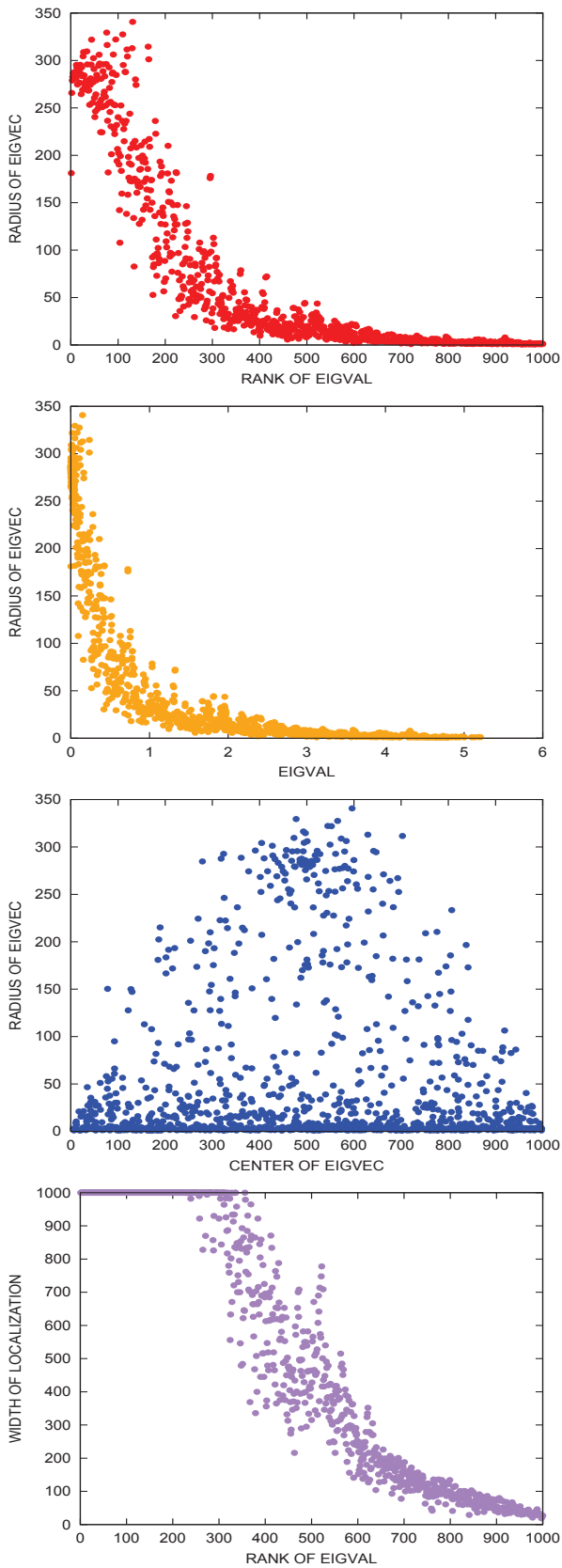


図 13 連成系 (バネ定数がランダムで質量は一定) ( $N=1,000$ )

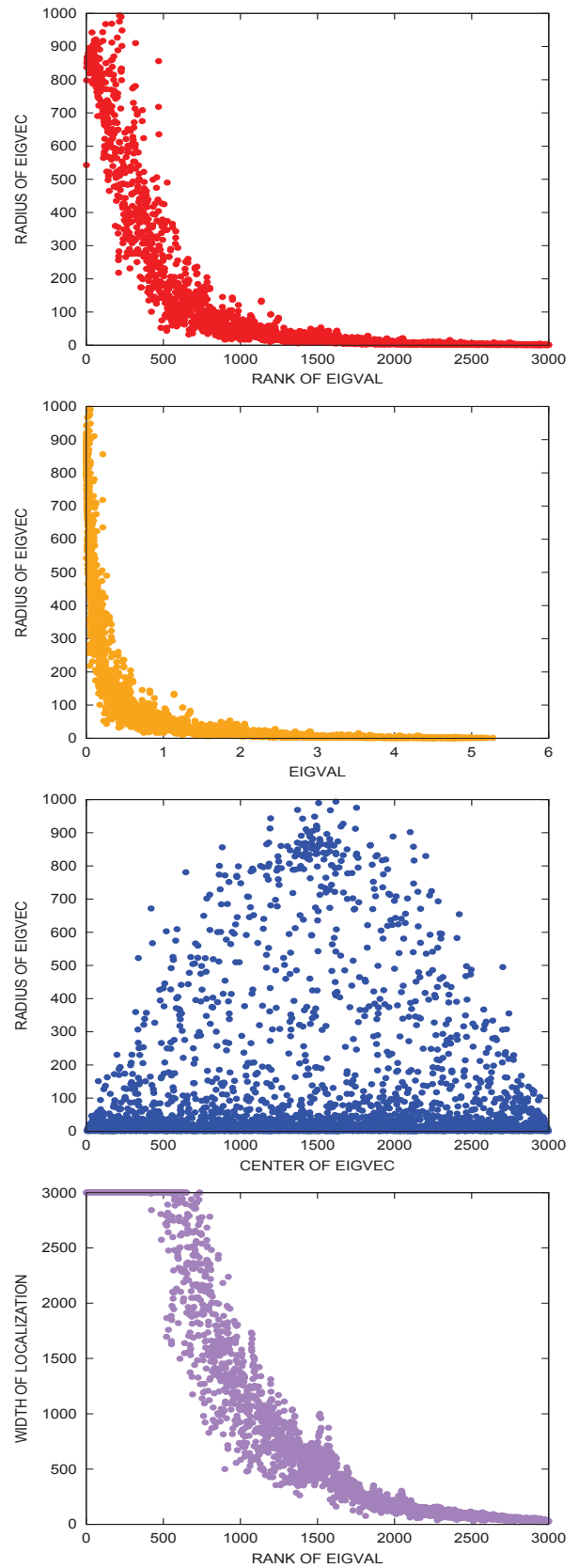


図 14 連成系 (バネ定数がランダムで質量は一定) ( $N=3,000$ )

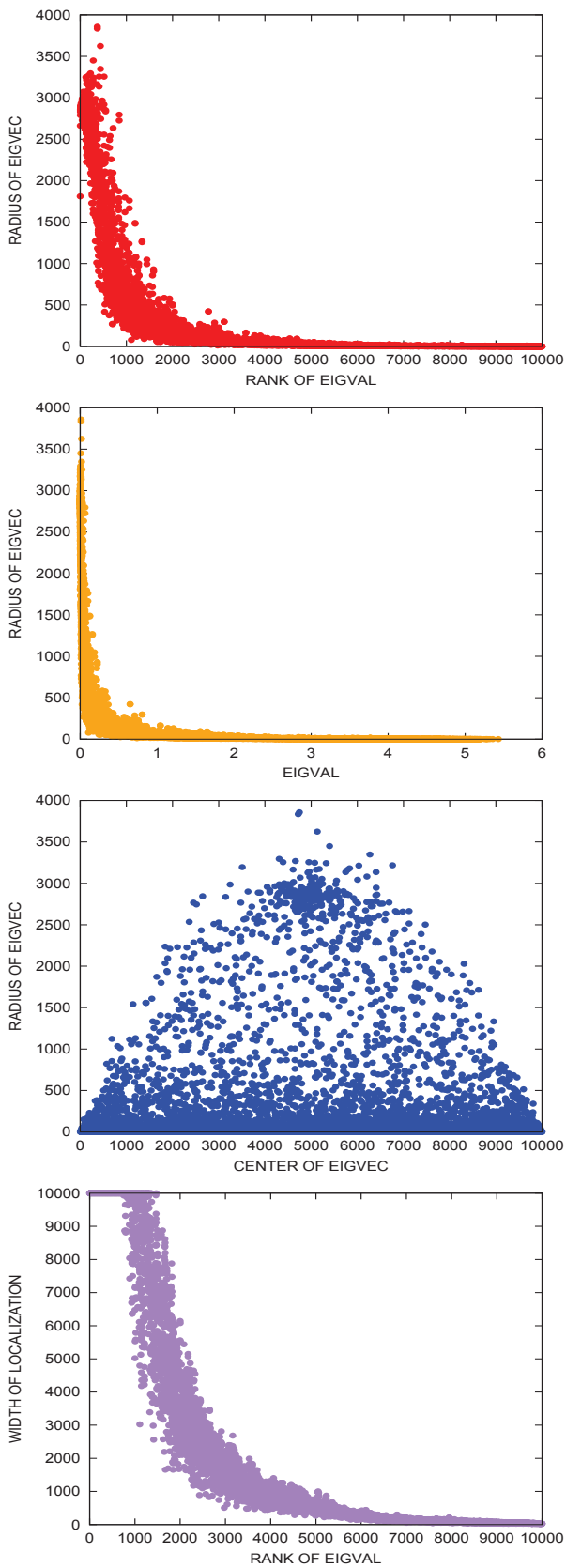


図 15 連成系 (バネ定数がランダムで質量は一定) ( $N=10,000$ )

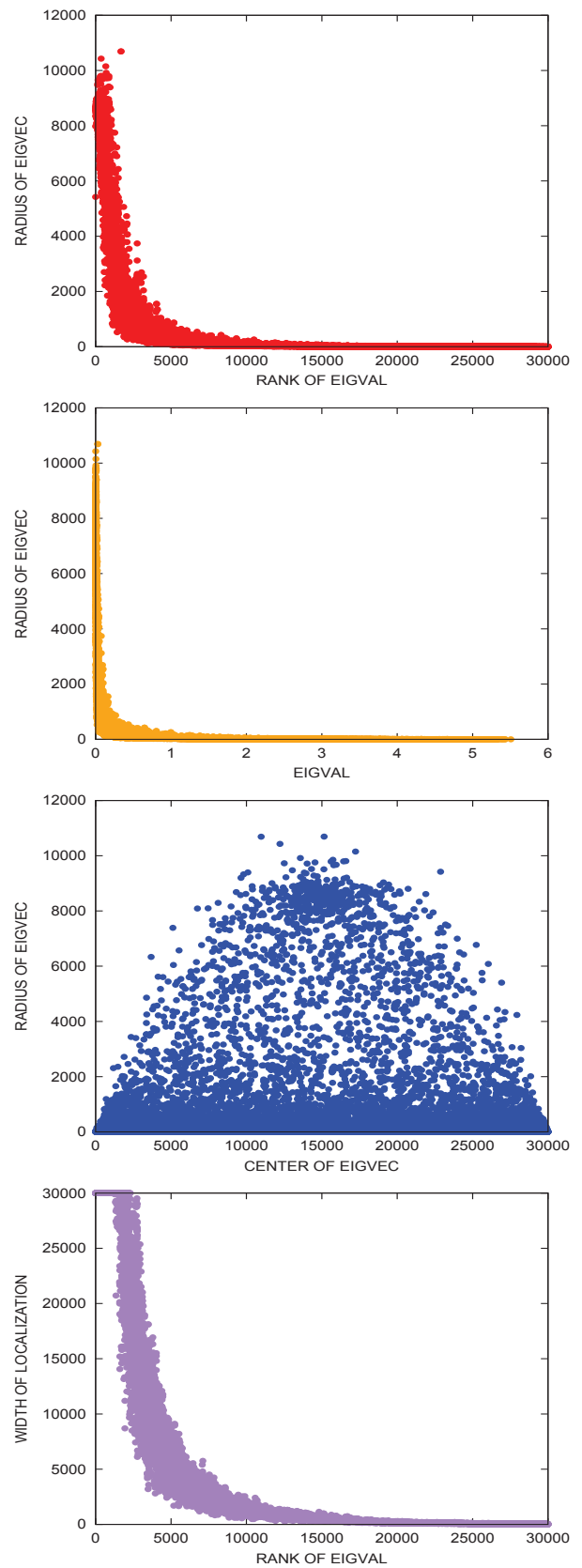


図 16 連成系 (バネ定数がランダムで質量は一定) ( $N=30,000$ )

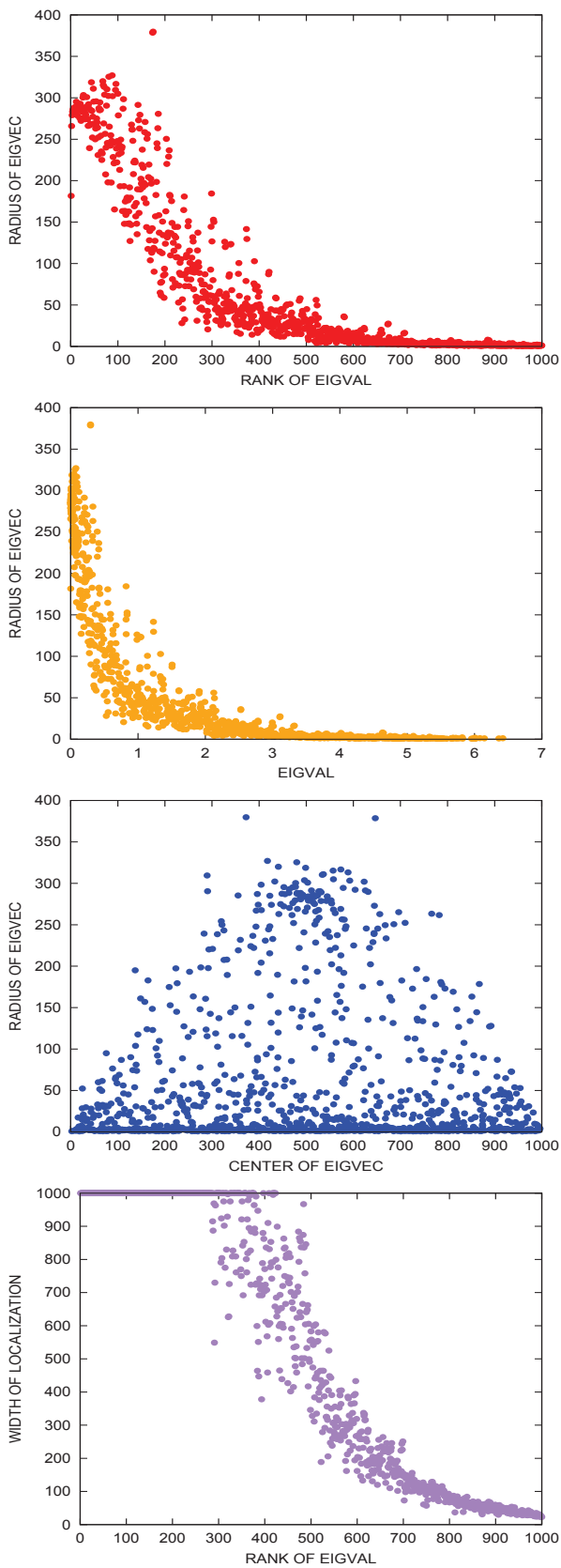


図 17 連成系 (バネ定数が一定で質量はランダム) ( $N=1,000$ )

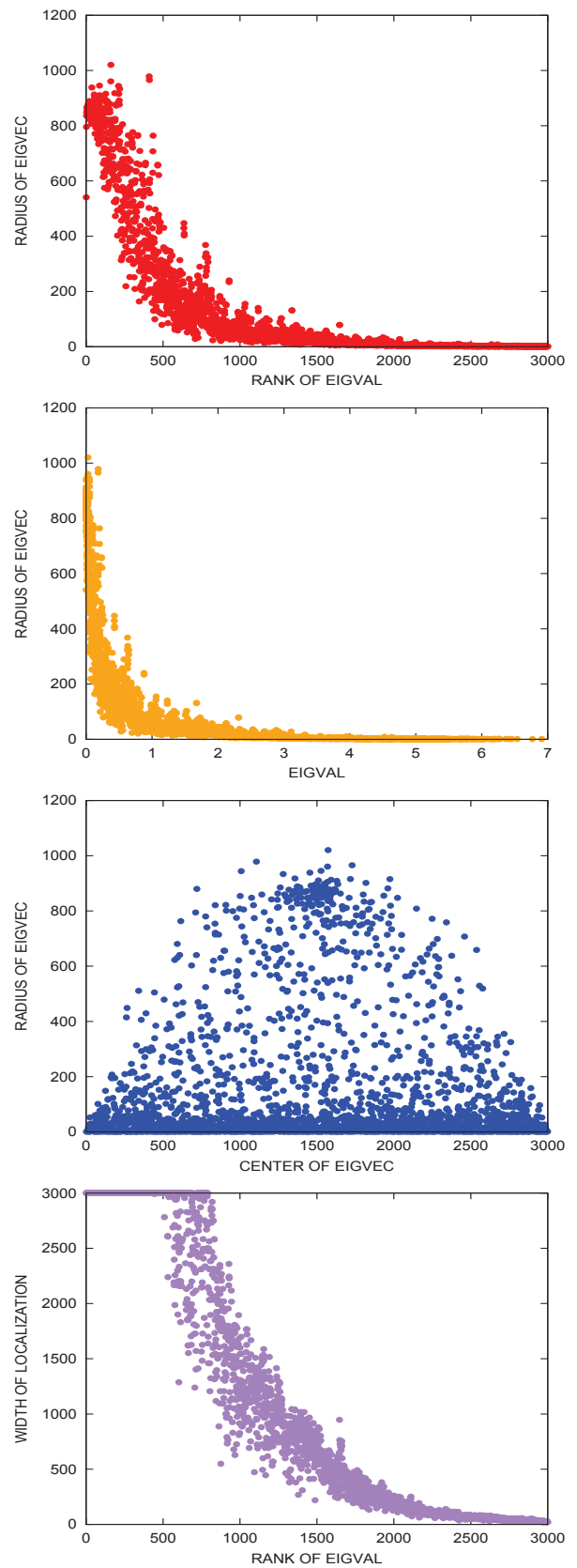


図 18 連成系 (バネ定数が一定で質量はランダム) ( $N=3,000$ )

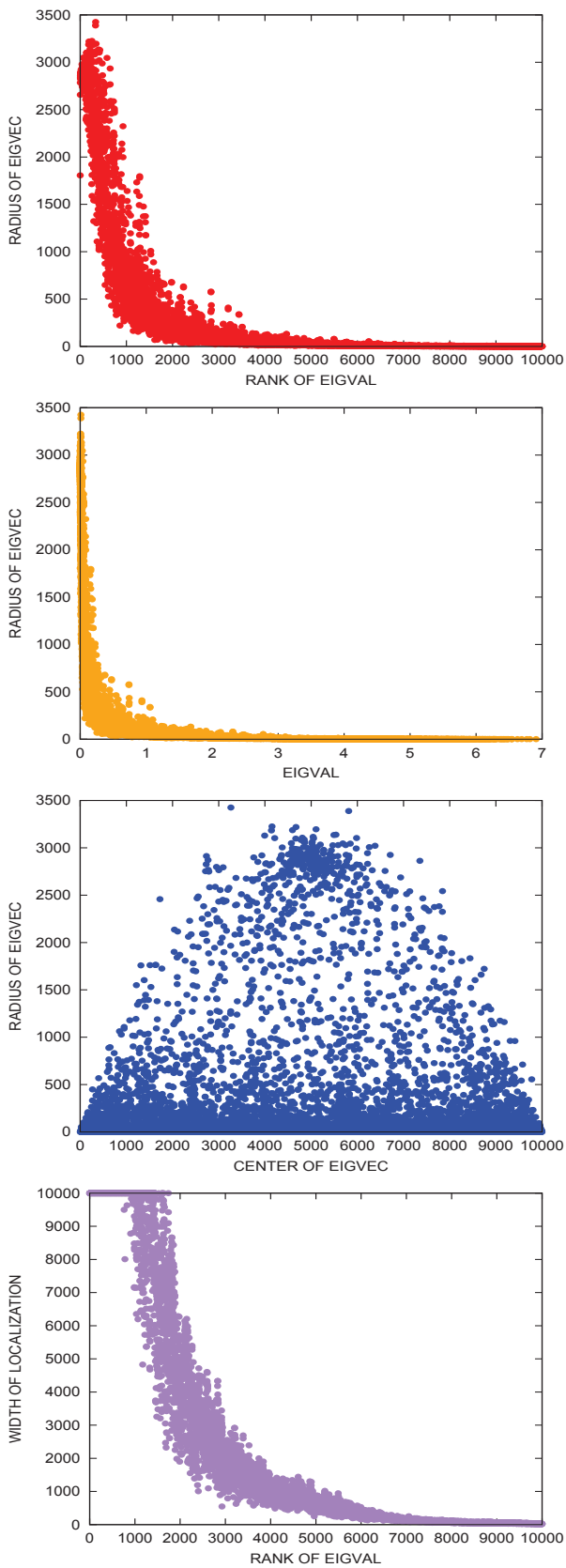


図 19 連成系 (バネ定数が一定で質量はランダム) ( $N=10,000$ )

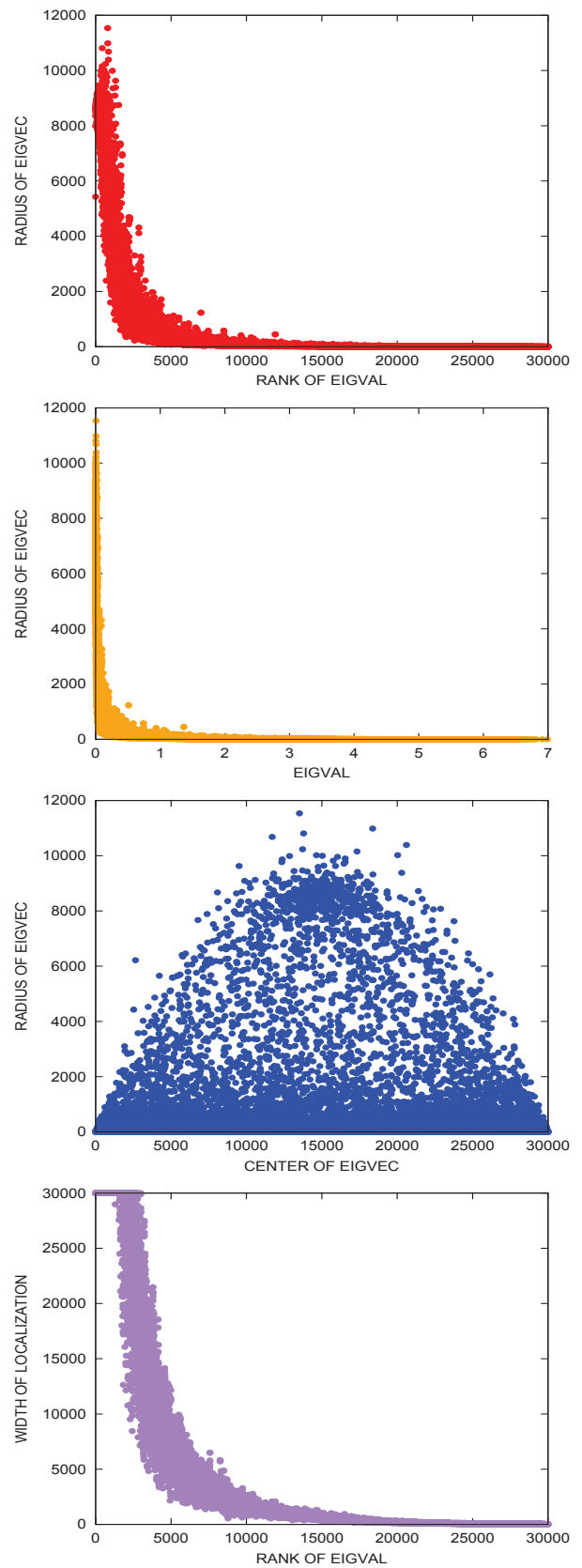


図 20 連成系 (バネ定数が一定で質量はランダム) ( $N=30,000$ )



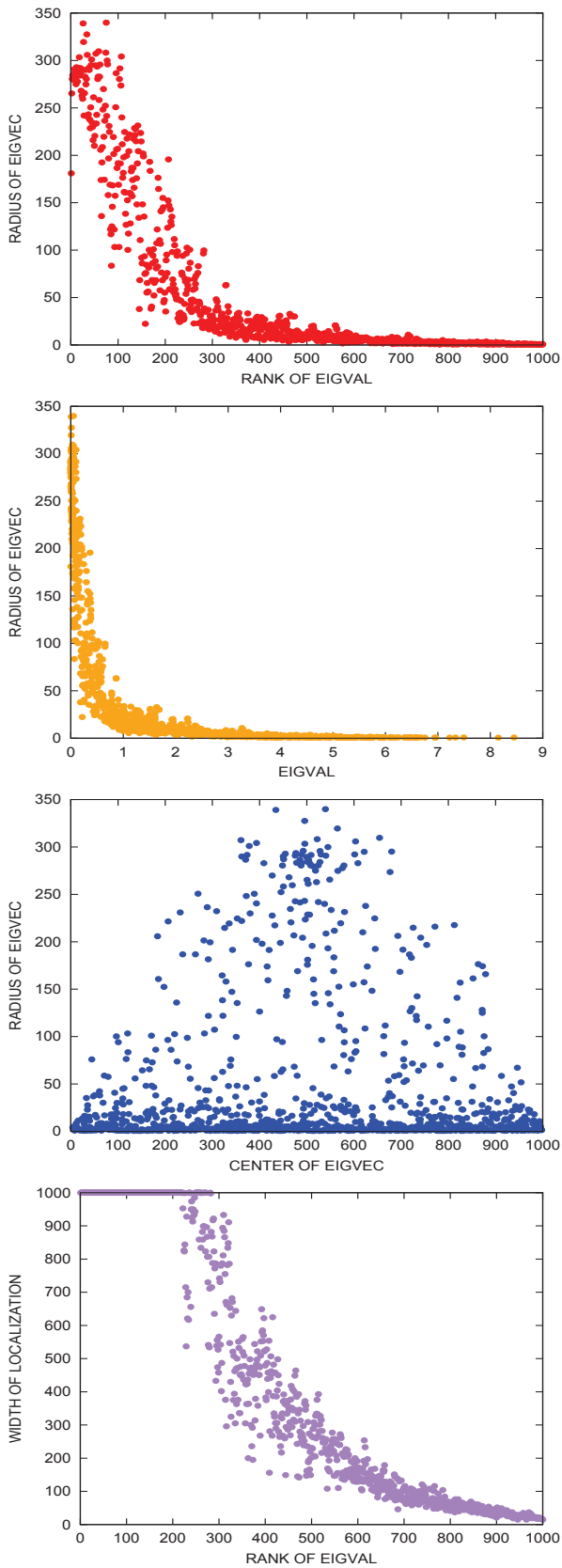


図 21 連成系 (質量もバネ定数もランダム) ( $N=1,000$ )

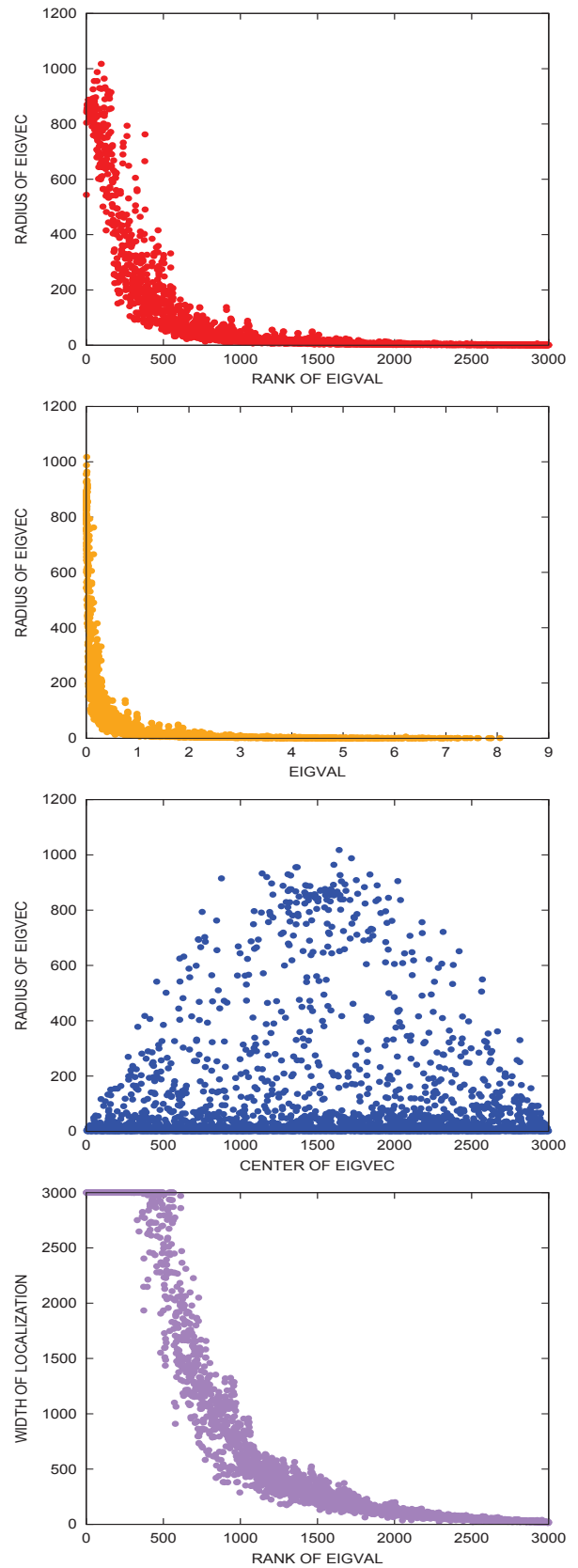


図 22 連成系 (質量もバネ定数もランダム) ( $N=3,000$ )

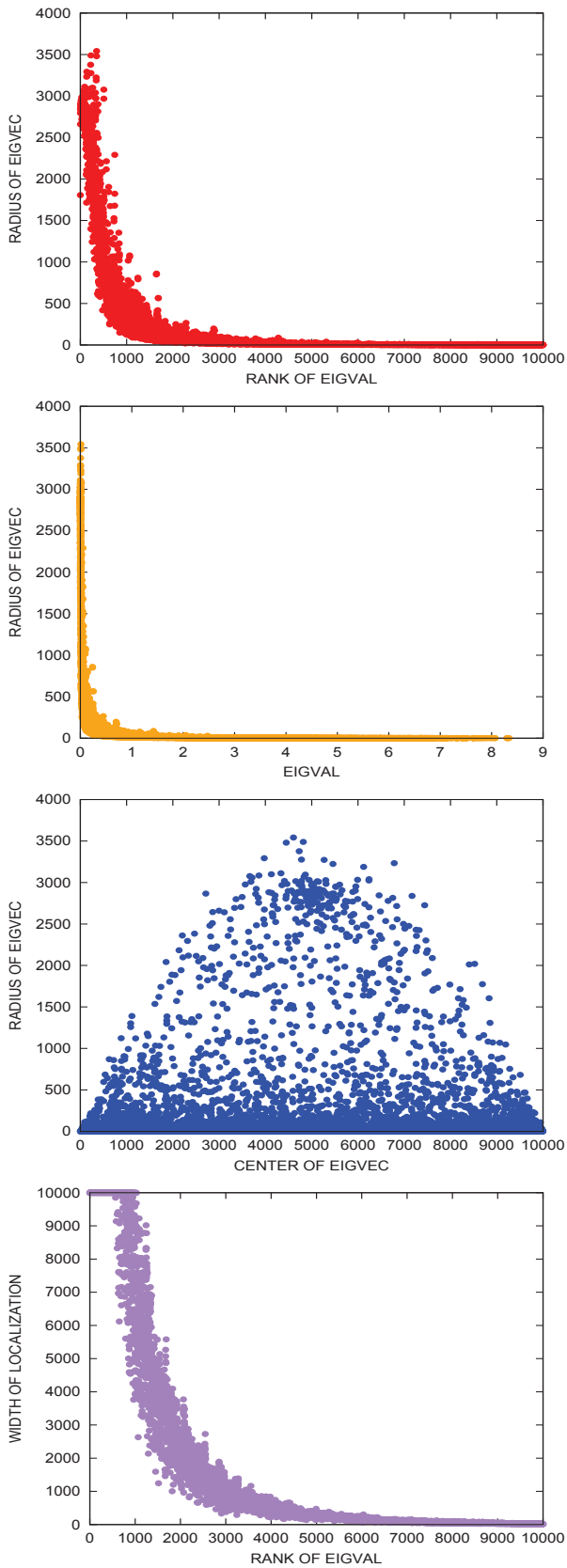


図 23 連成系 (質量もバネ定数もランダム) ( $N=10,000$ )

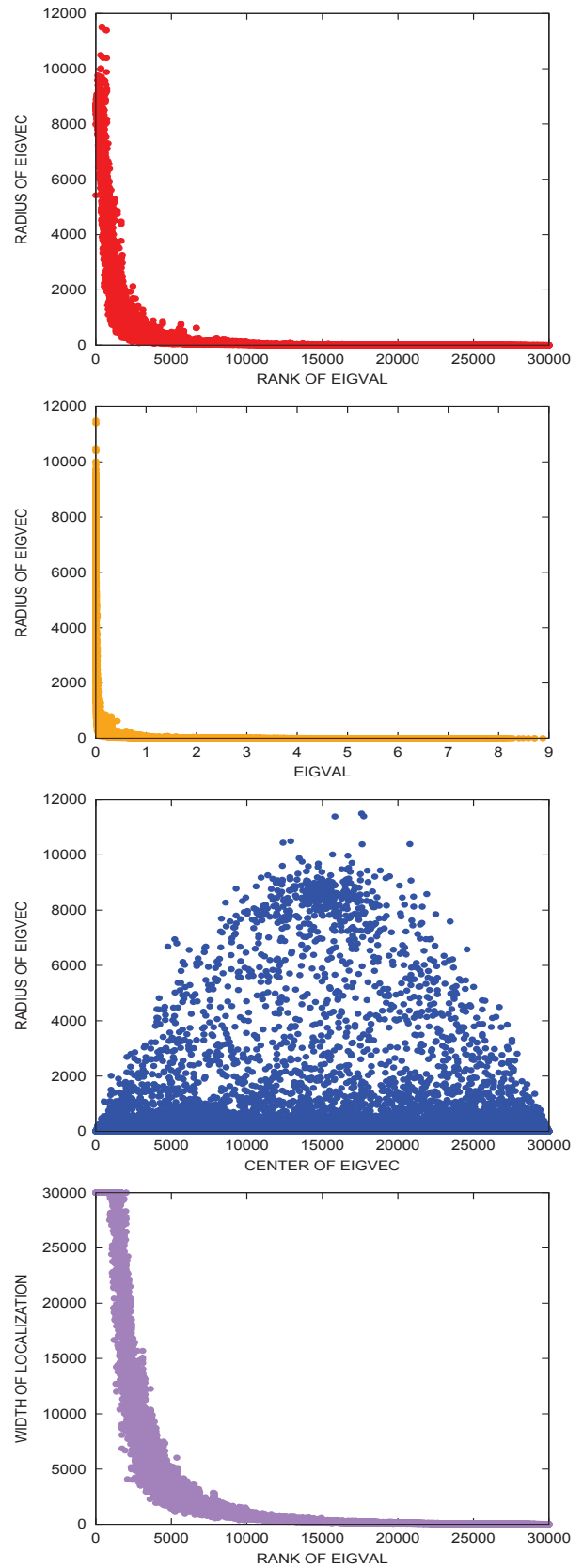


図 24 連成系 (質量もバネ定数もランダム) ( $N=30,000$ )

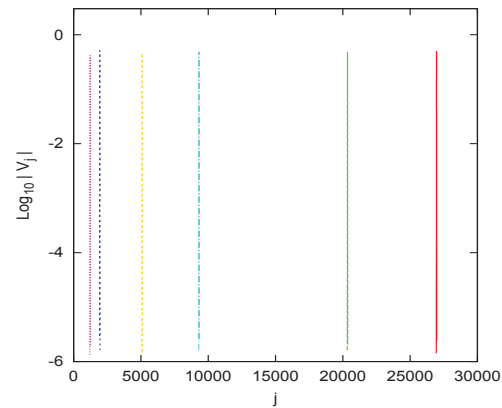
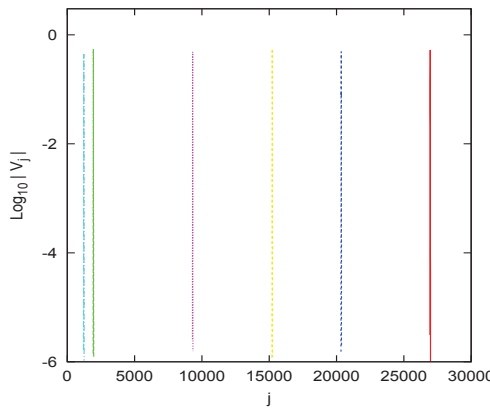
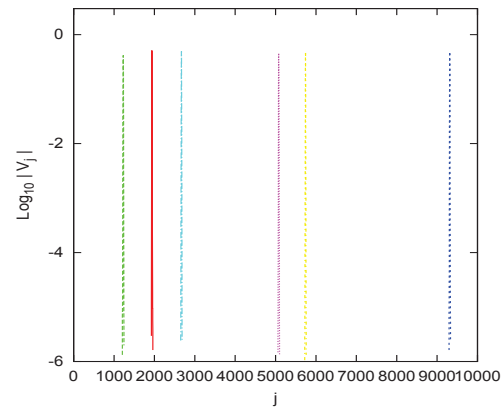
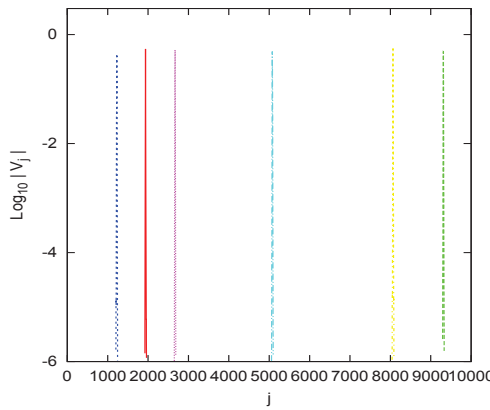
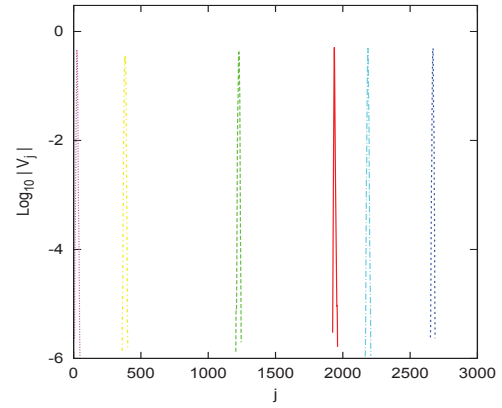
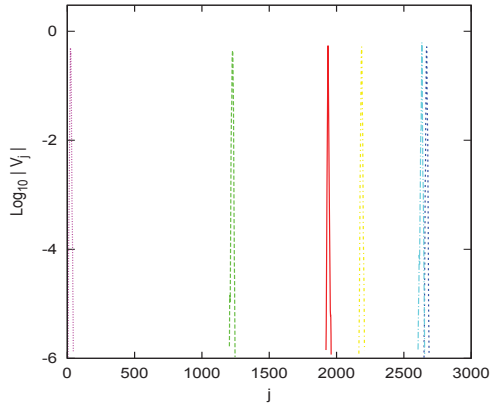
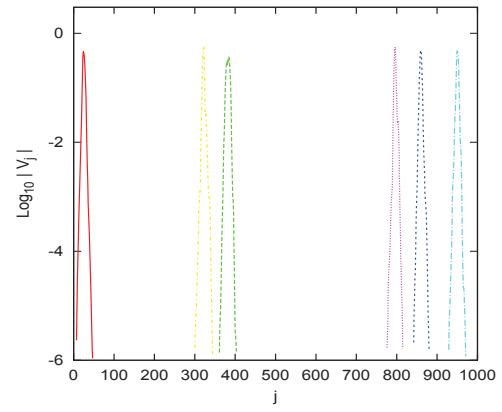
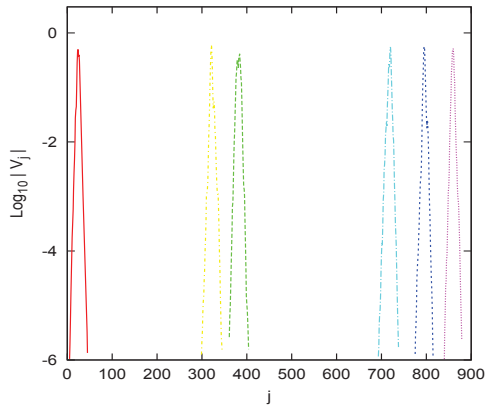


図 25 対称 3 重対角行列 (主対角がランダムで副対角は一定)  
 上から  $N=1,000$ ,  $N=3,000$ ,  $N=10,000$ ,  $N=30,000$

図 26 対称 3 重対角行列 (主対角が零で副対角はランダム)  
 上から  $N=1,000$ ,  $N=3,000$ ,  $N=10,000$ ,  $N=30,000$

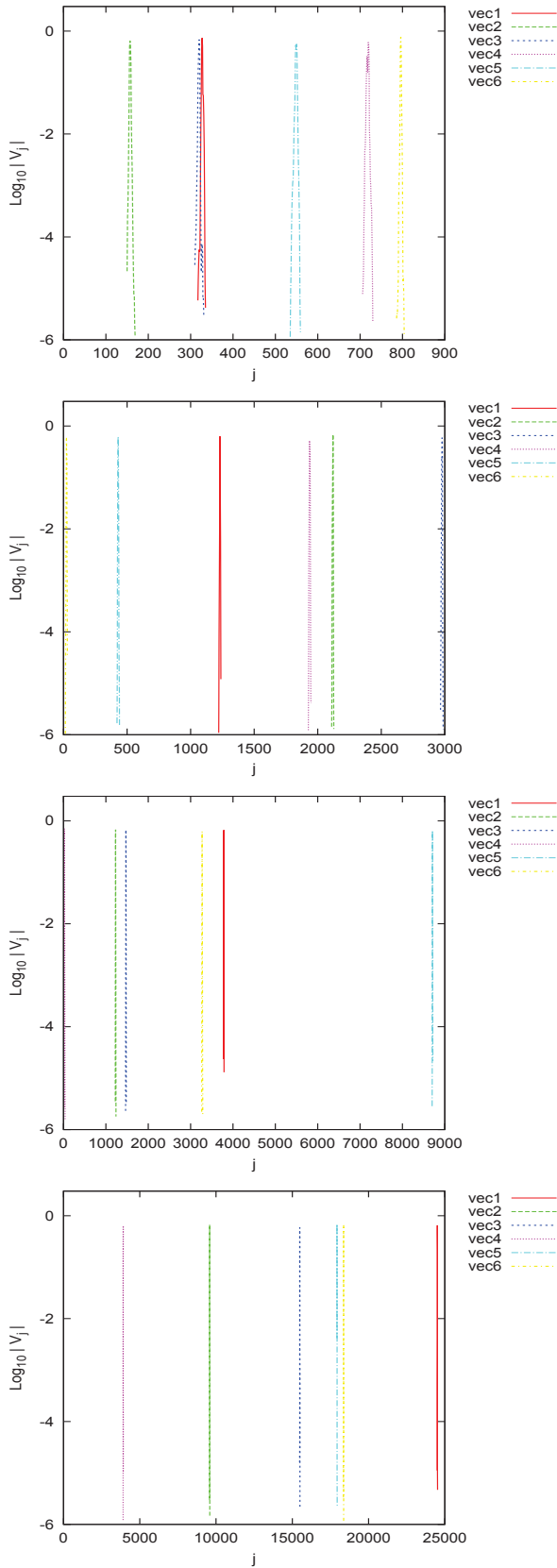


図 27 対称 3 重対角行列 (全ての要素がランダム)  
 上から  $N=1,000$ ,  $N=3,000$ ,  $N=10,000$ ,  $N=30,000$

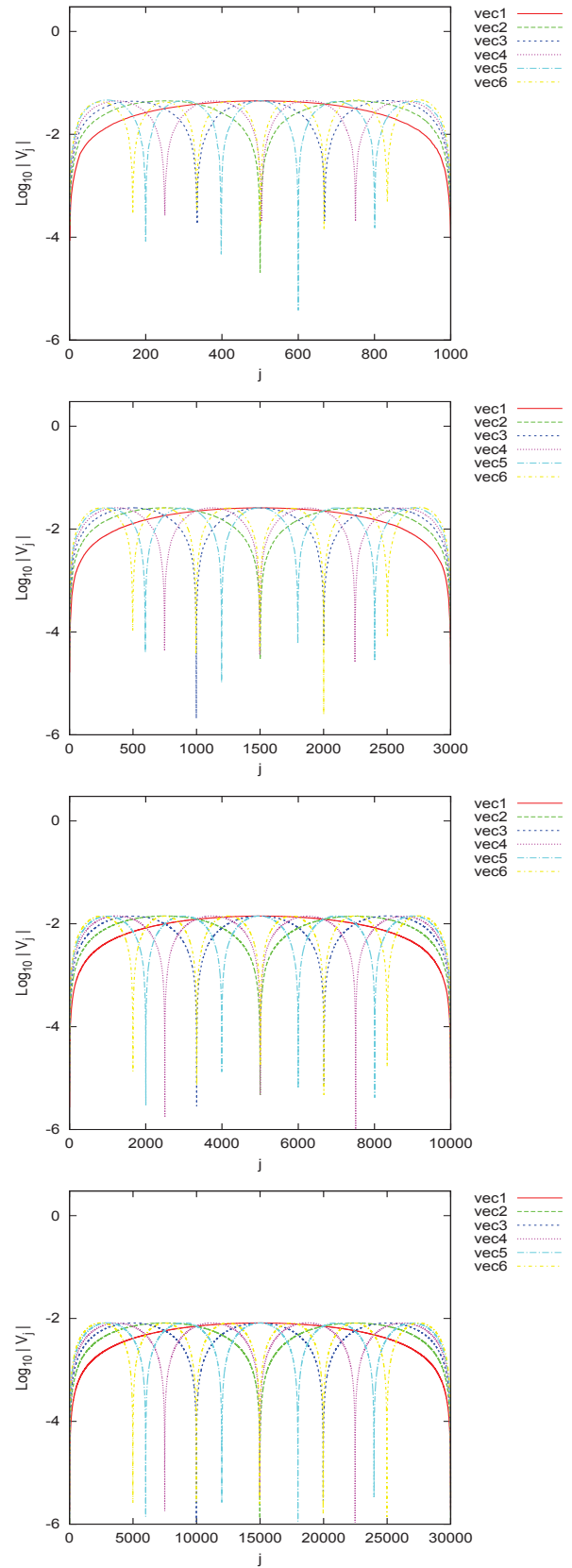


図 28 連成系 (バネ定数がランダムで質量は一定)  
 上から  $N=1,000$ ,  $N=3,000$ ,  $N=10,000$ ,  $N=30,000$

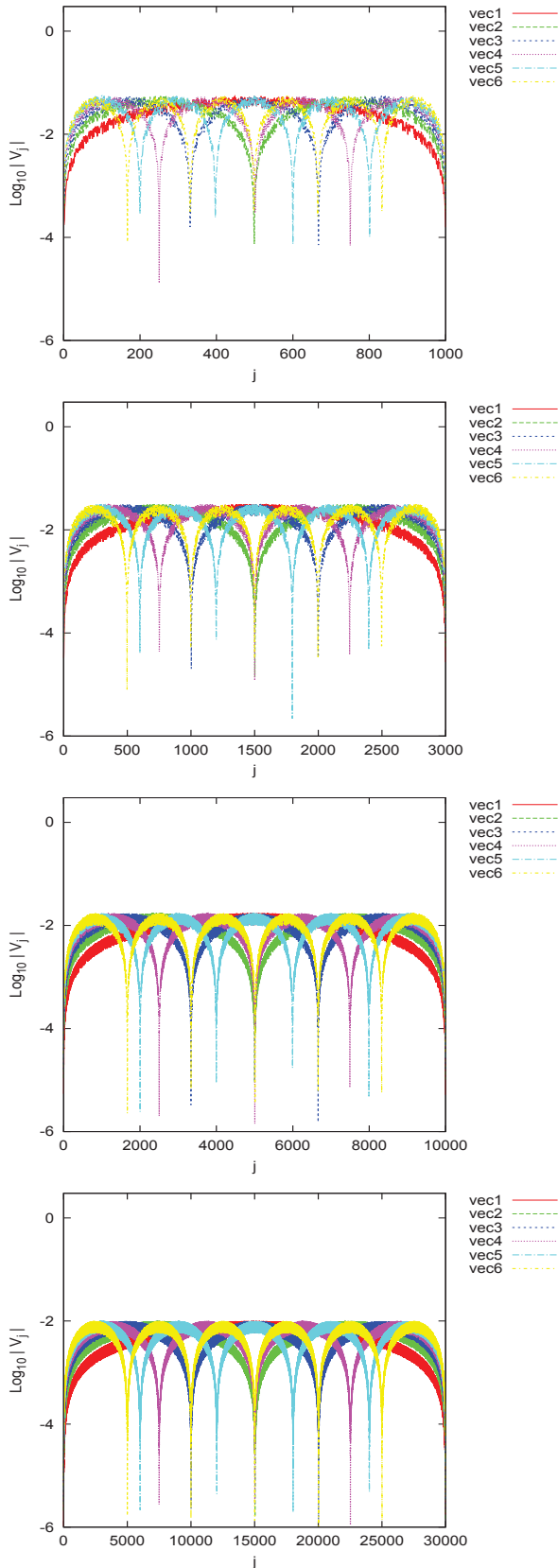


図 29 連成系 (バネ定数が一定で質量はランダム)  
 上から  $N=1,000$ ,  $N=3,000$ ,  $N=10,000$ ,  $N=30,000$

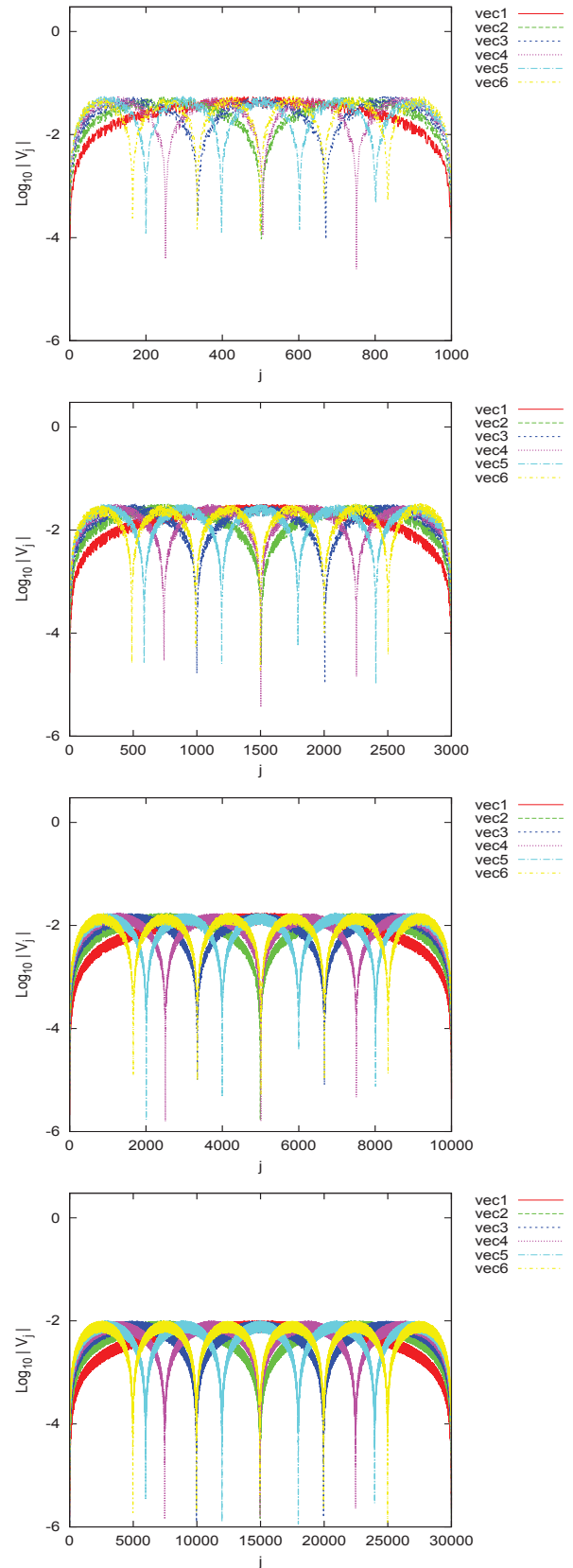


図 30 連成系 (質量もバネ定数もランダム)  
 上から  $N=1,000$ ,  $N=3,000$ ,  $N=10,000$ ,  $N=30,000$

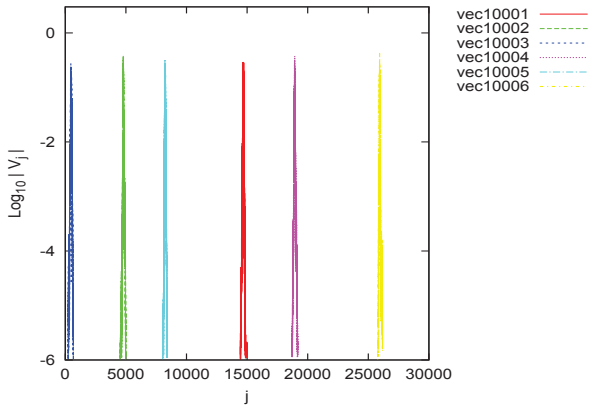


図 31 対称 3 重対角行列 (主対角がランダムで副対角は一定)  
 $N=30,000$  で 10,001 番から 10,006 番の固有ベクトル

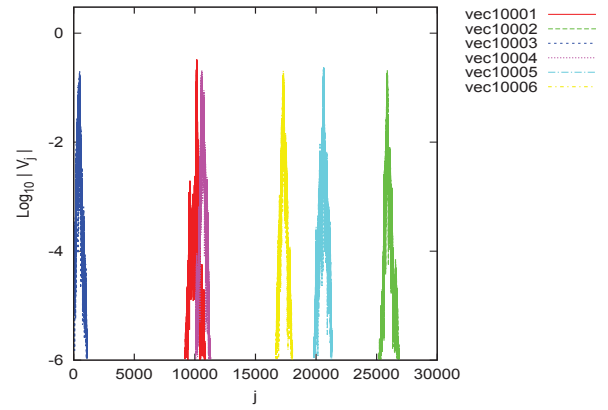


図 34 連成系 (バネ定数がランダムで質量は一定)  
 $N=30,000$  で 10,001 番から 10,006 番の固有ベクトル

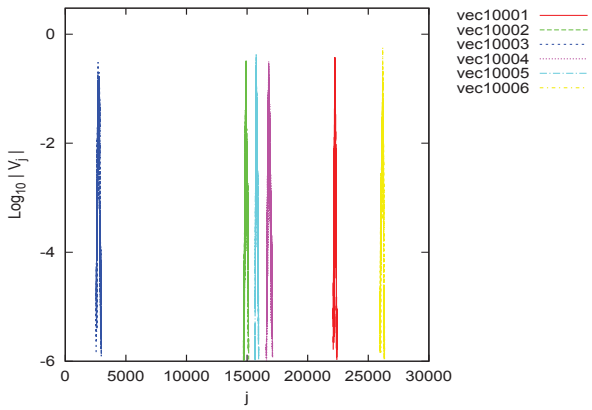


図 32 対称 3 重対角行列 (主対角が零で副対角はランダム)  
 $N=30,000$  で 10,001 番から 10,006 番の固有ベクトル

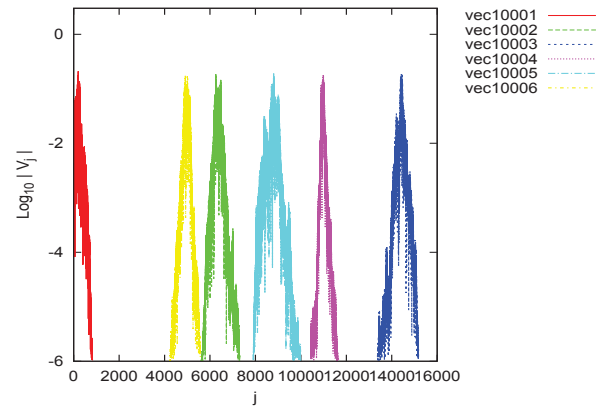


図 35 連成系 (バネ定数が一定で質量はランダム)  
 $N=30,000$  で 10,001 番から 10,006 番の固有ベクトル

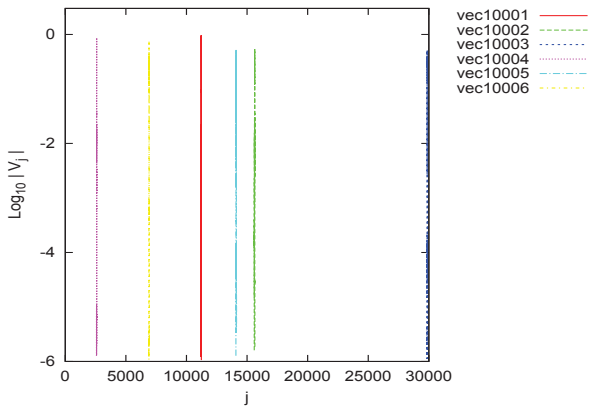


図 33 対称 3 重対角行列 (全ての要素がランダム)  
 $N=30,000$  で 10,001 番から 10,006 番の固有ベクトル

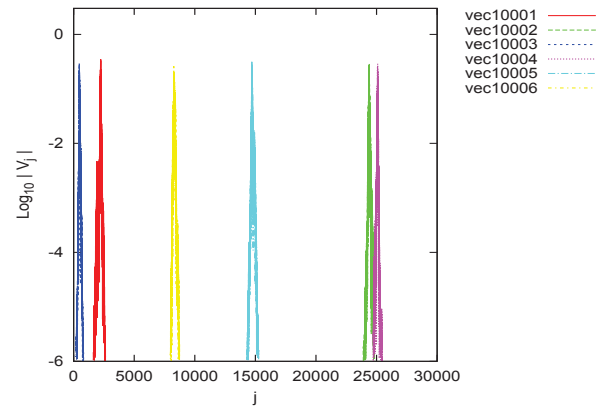


図 36 連成系 (質量もバネ定数もランダム)  
 $N=30,000$  で 10,001 番から 10,006 番の固有ベクトル