

3. 局所的原点移動量 z を求める場合

QR法で対角化する場合、収束の加速のためにQR変換のループの中で原点移動を行なうのが常であるが、局所的原点移動量 z としていかなる値を用いるかが問題である²⁾。EISPACKでは、右下の 2×2 小行列の固有値のうち d_0 に代数的に近い値 D_2 を用いているが、HOQRVWでは、 D_2 を初期値にしてニュートン法で求めた、右下 3×3 小行列の固有値 N_3 を用いている。別府らは³⁾、 N_3 を初期値にして無平方根QR法で部分対角化して求めた、右下 20×20 小行列の固有値 Q_{20} もしくは $N \times N$ 行列の固有値 Q_N を用いるとQR法の収束がかなり加速される事を見いだした(c.f.表2)。ニュートン法で求めた、右下 20×20 小行列の固有値 N_{20} もしくは $N \times N$ 行列の固有値 N_N を用いた場合の結果は、講演時に報告したい。

表2. 三重対角行列の完全対角化に要したCPU時間(秒単位)

| z の値 | F 行列 | B 行列 | R 行列 | H 行列 |
|------|-------|-------|-------|-------|
| D 2 | 0.365 | 0.524 | 0.710 | 0.590 |
| N 3 | 0.348 | 0.468 | 0.661 | 0.520 |
| Q 20 | 0.337 | 0.377 | 0.485 | 0.414 |
| Q N | 0.335 | 0.374 | 0.393 | 0.388 |

by FACOM-VP-200 [VP=OFF,OPT(3)] on Nov,1990

4. 大域的原点移動量 g を求める場合

もし代数的最小固有値 e_1 と代数的最大固有値 e_n が分かれば、どちらかを大域的原点移動量 g に用いて、三重対角行列 T を $T' = T - gI$ のごとく定値化して、QR法での部分対角化(一部の固有解のみを求めること)をうまく行なう事が可能になる²⁾。 e_1 と e_n を、二分割法・井阪法⁴⁾・ニュートン法で求めた場合の結果は、講演時に報告したい。

謝辞：電算機を利用させていただいた名大・東大・分子研の計算センターに深謝する。

参考文献：

- 1) Y. Beppu & I. Ninomiya, "NICER---- Fast Eigenvalue Routines", Comput. Phys. Commun. Vol. 23(1981)123.
- 2) 別府良孝, "スーパーコンピュータに適した固有値ルーチン", bit 臨時増刊(名取 亮・野寺 隆 編)共立出版(1987)
- 3) 別府良孝・竹内聖彦, "低次元代数方程式の諸解法の比較 ——固有値問題を意識して", 京都大学数理解析研究所講究録(1991)印刷中
- 4) 井阪秀高, "方程式の全根を求める方法", 情報処理学会第41回全国大会講演論文集1(1990)51.