

## 新しい準直交ランチョス法の収束性と精度評価について

梅 垣 悠† 野 寺 隆††

準直交ランチョス法は、ランチョスペクトルの直交性がある程度悪化しているにもかかわらず、固有値を正確に近似することができる算法である。しかし、この算法は固有ベクトルを精度よく求めることができなかった。これを改善するために、Stewart [SIAM J. Sci. Compt, 24, pp. 201-207] は再直交化を行った後、レーリー商を上 Hessenberg 行列へ調整することを示した。本稿では、この変換を利用した方法の固有値と固有ベクトルの収束性について考察する。

### Convergence behavior of New Semiorthogonal Lanczos method and its Validation

HARUKA UMEGAKI† and TAKASHI NODERA††

Semiorthogonal Lanczos method can accurately approximate of eigenvalues, in spite of the orthogonality among Lanczos vectors. But semiorthogonal Lanczos method may not approximate of eigenvectors. For this problem, Stewart [SIAM J. Sci. Compt, 24, pp. 201-207] proposed adjusting scheme that makes Rayleigh quotient into upper Hessenberg matrix after reorthogonalization. In this paper, we show convergence behavior of eigenvalue and eigenvectors in semiorthogonal Lanczos method with adjusting Rayleigh quotient.

#### 1. はじめに

ランチョス法は、理工学における科学技術計算の分野において生成される固有値問題

$Ax = \lambda x$ ,  $A$ : 対称  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$   $x \in \mathbb{R}^n$  (1) を解くための反復解法の1つである。ただし、行列  $A$  は対称である。

ランチョス法は、両端の固有値から内側に向かって数個の固有値は精度よく求まるが、ランチョス法の反復が進むたびに、ランチョスペクトルの直交性が丸め誤差の影響により悪化することが報告されている<sup>3)</sup>。

そこで直交性を改善するために、様々な方法が考えられている。その方法は、二つに分けることができる。1つは、直交性を完全に保つ方法で、反復の度に再直交化を行う完全再直交化ランチョス法、もう一つの方法は、ランチョスペクトルの直交性がある程度保つ方法で、ランチョスペクトルの準直交性を保つことから準直交ランチョス法と呼ばれている。準直交性を保つための方法に、SO(Selective Orthogonalization) や PRO(Part Orthogonalization) をあげることができる。筆者ら<sup>7)</sup> は、Stewart<sup>1)</sup> により提案された PRO

に、レーリー商を調整する方法の有効性についてを示したが、さらに本稿では数値実験により収束性を評価する。

2章ではランチョス法について簡単に述べる。3章では完全再直交化ランチョス法について述べ、4章では準直交ランチョス法について述べる。5章では新しい準直交ランチョス法について述べ、6章において、数値実験を通して新しい準直交ランチョスとその他のランチョス法との比較を行う。最後に、7章で結論と今後の課題について述べる。

#### 2. ランチョス法

ランチョス法は、大型疎の対称行列の固有値問題を解くために提案された手法で、対称行列  $A$  と  $\|u\|_2 = 1$  の非ゼロベクトルによって、クリロフ部分空間上に正規直交基底を構成する算法である。クリロフ部分空間とは、次のように構成する空間である。

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_m(A, u_1) &= \text{span}(u_1, u_2, \dots, u_m) \\ &= \text{span}(u_1, Au_1, \dots, A^{m-1}u_1) \end{aligned}$$

ただし、ベクトル列  $\{u_1, u_2, \dots, u_m\}$  はランチョスペクトルと呼ばれている。このランチョスペクトルは、 $m \geq 2$  とすると、次のように構成できる。

$$\begin{cases} \beta_1 u_2 = Au_1 - \alpha_1 u_1, \\ \beta_m u_{m+1} = Au_m - \alpha_m u_m - \beta_{m-1} u_{m-1} \end{cases} \quad (2)$$

ただし、

† 慶應義塾大学大学院理工学研究科

Graduate School of Science and Technology, Keio University

†† 慶應義塾大学理工学部

Faculty of Science and Technology, Keio University

```

01:  $u_1$  is an initial guess
02: for  $m = 1, 2, \dots$ 
03:    $v = A * u_m$ 
04:   if ( $m \neq 1$ )
05:      $v = v - \beta_{m-1} * u_{m-1}$ 
06:      $T[m-1, m] = T[m, m-1] = \beta_{m-1}$ 
07:   end if
08:    $\alpha_m = u_m^T * v$ 
09:    $T[m, m] = \alpha_m$ 
11:    $v = v - \alpha_m * u_m$ 
12:   if ( $m \neq 1$ )
13:      $v = v - (u_{m-1}^T * v) * u_{m-1}$ 
14:      $v = v - (u_m^T * v) * u_m$ 
15:      $\beta_m = \|v\|_2$ 
16:      $u_{m+1} = v / \beta_m$ 
17:   compute eigenvalues and eigenvectors  $T_m$ 
18:   compute residual norm
19: end for

```

図1 ランチョス法

$$\alpha_m = u_m^T A u_m,$$

$$\beta_m = 1 / \|A u_m - \alpha_m u_m - \beta_{m-1} u_{m-1}\|_2.$$
 このランチョロスベクトルから作られる行列を  $U_m = [u_1, u_2, \dots, u_m]$  とする。ここで、 $e_m$  は次元  $m$  の単位行列の  $m$  列目の成分とする。式 (2) の漸化式を行列で表すと、次のようになる。

$$A U_m = U_m T_m + \beta_m u_{m+1} e_m^T \quad (3)$$
 ただし、 $T_m$  は次の 3 重対角行列になる。

$$T_m = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & \beta_{m-2} & \alpha_{m-1} & \beta_{m-1} & \\ & & & & \beta_{m-1} & \alpha_m & \end{pmatrix} \quad (4)$$

Stewart<sup>1)</sup> は、上記の  $T_m$  をレーリー商と呼んでいる。ここで、ランチョロス法のアルゴリズムを図 1 に示す。

ランチョロス法において、行列  $A$  の固有組を  $(\lambda, x)$  とした時、行列  $T_m$  の固有組  $(\theta_T, w_T)$  を用いて、 $\lambda \doteq \theta_T$ 、 $x \doteq U_m w_T$  で近似を行う。ただし、固有組とは、固有値及び固有ベクトルの対の事である。 $\theta_T$  は Ritz 値、 $U_m w_T$  を Ritz ベクトルと呼ばれている。 $T_m$  の固有組の計算には、CLAPACK<sup>2)</sup> のルーチン dstebz を、その固有ベクトルの計算には dstein を用いることにする。

ランチョロス法において、丸め誤差の影響によりランチョロスベクトルの直交性が悪化することが問題であった。そこで次に、これを改善するために反復のたびに再直化を行う完全再直化ランチョロス法について述べる。

```

01:  $u_1$  is an initial guess
02: for  $m = 1, 2, \dots$ 
03:    $v = A * u_m$ 
04:   if ( $m \neq 1$ )
05:      $v = v - \beta_{m-1} * u_{m-1}$ 
06:      $\hat{T}_{m-1, m} = \hat{T}_{m, m-1} = \beta_{m-1}$ 
07:   end if
08:    $\alpha_m = u_m^T v$ 
09:    $\hat{T}_{m, m} = \alpha_m$ 
11:    $v = v - \alpha_m * u_m$ 
12:    $\rho_1 = \|v\|_2$ 
13:   for  $j = 1$  to  $m$ 
14:      $x_j = u_j^T v$ 
15:      $v = v - x_j * u_m$ 
16:   end for  $j$ 
17:    $\rho_2 = \|v\|_2$ 
   if necessary orthogonalize  $v$  again
18:   if ( $\rho_2 < 1/\sqrt{2}\rho_1$ )
19:     for  $j = 1$  to  $m$ 
20:        $x_j = u_j^T v$ 
21:        $v = v - x_j * u_m$ 
22:     end for  $j$ 
23:   end if
24:    $\beta_m = \|v\|_2$ 
25:    $u_{m+1} = v / \beta_m$ 
27:   compute eigenvalues and eigenvectors  $\hat{T}_m$ 
28:   compute residual norm
29: end for

```

図2 完全再直化ランチョロス法

### 3. 完全再直化ランチョロス法

完全再直化ランチョロス法は、反復の度にランチョロスベクトルの再直化を行い、ランチョロスベクトルの直交性を完全に保つ方法である<sup>5)</sup>。再直化には、修正グラムシュミット法を用いる。この時、式 (3) は下記の用になる。

$$A \hat{U}_m = \hat{U}_m \hat{T}_m + \hat{\beta}_m \hat{u}_{m+1} e_m^T \quad (5)$$
 ただし、 $\hat{U}_m$  は直交性を完全に保っているランチョロスベクトルを列に持つ行列、 $\hat{T}_m$  は三重対角行列、 $\hat{\beta}_m \hat{u}_m$  は  $\beta_m u_{m+1}$  を再直化したベクトルである。ここで、完全再直化ランチョロス法のアルゴリズムを図 2 に示す。

$\hat{T}_m$  の固有組  $(\theta_{\hat{T}}, w_{\hat{T}})$  を用いて、 $\lambda \doteq \theta_{\hat{T}}$ 、 $x \doteq U_m w_{\hat{T}}$  で近似を行う。 $T_m$  と同じルーチンを使用して、 $\hat{T}_m$  の固有組を計算した。

この方法は、行列  $A$  の固有組を正確に近似することができるが、反復の度に再直化を行うので、計算量が大変多くなってしまふ。固有値を正確に近似する

```

01:  $u_1$  is an initial guess
02: for  $m = 1, 2, \dots$ 
03:    $v = A * u_m$ 
04:   if ( $m \neq 1$ )
05:      $v = v - \beta_{m-1} * u_{m-1}$ 
06:      $H_{m-1,m} = H_{m,m-1} = \beta_{m-1}$ 
07:   end if
08:    $\alpha_m = u_m^T v$ 
09:    $H_{m,m} = \alpha_m$ 
10:    $v = v - \alpha_m * u_m$ 
11:   if ( $m \neq 1$ )
12:      $v = v - (u_{m-1}^T v) * u_{m-1}$ 
13:   end if
14:    $v = v - (u_m^T v) * u_m$ 
15:    $\beta_m = \|v\|_2$ 
16:    $u_{m+1} = v / \beta_m$ 
17:   if(semiorthogonality is violated)
18:     reorthogonalize  $u_m$  and  $v$ . adjust  $H$ 
19:      $\beta_m = \|v\|_2$ 
20:      $u_{m+1} = v / \beta_m$ 
21:   end if
22:   compute eigenvalues and eigenvectors  $H$ 
23:   compute residual norm
24: end for

```

図 3 新しい準直交ランチョス法

ためには、直交性を完全に保つ必要はなく準直交性を保てばいいことが報告されている<sup>3)</sup>。次に、準直交ランチョス法について述べる。

#### 4. 準直交ランチョス法

まず、ランチョスペクトルの直交性のレベルを表す  $\kappa_m$  を定義する。

定義 1.  $m$  反復回目におけるランチョスペクトルの直交性のレベルを次のように定義をする。

$$\kappa_m = \max_{\substack{1 \leq i, j \leq m \\ i \neq j}} |u_i^T u_j|$$

準直交ランチョス法は、 $m$  反復回目において、 $\kappa_m \leq \sqrt{\epsilon M}$  を保つ方法である<sup>3)</sup>。 $\kappa_m \leq \sqrt{\epsilon M}$  が保たれている時、ランチョスペクトルの準直交性が保たれているという。 $m$  反復回目において、ランチョスペクトルの準直交性を保つために

$$|u_i^T u_{m+1}| \geq \sqrt{\epsilon M} \quad (1 \leq i \leq m)$$

を満たした時に、 $\beta_m u_{m+1}$  及び  $u_m$  を修正グラムシュミット法を用いて再直交化を行う必要がある<sup>5)</sup>。

実際の計算において、準直交性を保つためには、 $u_i^T u_{m+1}$  の計算を直接行うと、多くの計算時間が必要となるので、この値を漸化式で求める方法<sup>5)</sup>を用いるものとする。

```

01: if (semiorthogonality is violated)
02:    $\rho = \|v\|_2$ 
03:   reorthogonalize  $u_m$  and  $v$ 
04:   for  $j = 1$  to  $m - 1$ 
05:      $w[j] = u_j^T u_m$ 
06:      $u_m = u_m - w_j * u_j$ 
07:      $x[j] = u_j^T v$ 
08:      $v = v - x_j * u_m$ 
09:   end for  $j$ 
10:    $\eta = u_m^T v$ 
11:    $v = v - \eta * u_m$ 
12:   if necessary orthogonalize  $v$  again
13:   if ( $\|x\|_2 \geq \sqrt{n \epsilon M} * \rho$ )
14:     for  $j = 1$  to  $m - 1$ 
15:        $t = u_j^T v$ 
16:        $v = v - t * u_j$ 
17:        $x_j = x_j + t$ 
18:     end for  $j$ 
19:      $t = u_m^T v$ 
20:      $v = v - t * u_m$ 
21:      $\eta = \eta + t$ 
22:   end if
23:   adjust H
24:    $H_{1:m-1,m-1} = H_{1:m-1,m-1} + H_{m-1,m} * w$ 
25:    $H_{1:m-1,m} = H_{1:m-1,m} - H_{1:m-1,1:m-1} * w$ 
26:      $-(\beta_{m-1} * w_{m-1} - H_{m,m}) * w + x$ 
27:    $H_{m,m} = H_{m,m} + \eta - \beta_{m-1} * w_{m-1}$ 
28: end if

```

図 4 再直交化とレーリー商を調整するアルゴリズム

この時、式 (3) は下記のように書き表せる。

$$A \tilde{U}_m = \tilde{U}_m \tilde{T}_m + \tilde{\beta}_m \tilde{u}_{m+1} e_m^T \quad (6)$$

ただし、 $\tilde{U}_m$  は準直交性を保っているランチョスペクトルを列に持つ行列、 $\tilde{T}_m$  は三重対角行列、 $\tilde{\beta}_m \tilde{u}_{m+1}$  は  $\beta_m u_{m+1}$  を再直交化したベクトルとする。

$\tilde{T}_m$  の固有組を  $(\theta_{\tilde{T}}, w_{\tilde{T}})$  とすると、 $\lambda \equiv \theta_{\tilde{T}}$ 、 $x \equiv U_m w_{\tilde{T}}$  で近似を行うことになる。 $T_m$  や  $\hat{T}_m$  と同じルーチンを使用して、 $\tilde{T}_m$  の固有組を求める。

Simon<sup>3)</sup> は、準直交ランチョス法の Ritz 値は行列  $A$  の固有値を正確に近似していることを示した。しかし、Stewart<sup>1)</sup> は Ritz ベクトルは  $A$  の固有ベクトルを正確に近似してはいることを示した。これを改善するために、Stewart<sup>1)</sup> は準直交ランチョス法において、再直交化を行った後、レーリー商を調整する方法を提案した<sup>1)</sup>。以降、この方法を新しい準直交ランチョス法と呼ぶ。次に、新しい準直交ランチョス法について述べる。

#### 5. 新準直交ランチョス法

新しい準直交ランチョス法において、ランチョスペ

クトルを再直交化した後、レーリー商は上 Hessenberg 行列に変換されることになる。ここで、「再直交化された後その変換が可能かどうか」について述べる。

$u_m$  を再直交化したベクトルを  $\tilde{u}_m$ ,  $v = \beta_m u_{m+1}$  とする。さらに  $v$  を再直交化したベクトルを  $\tilde{v}$  とする。再直交化したベクトルは、それぞれ次式のようになる。

$$\begin{aligned}\tilde{u}_m &= u_m - U_{m-1}w, x = (u_1^T v, \dots, u_{m-1}^T v)^T, \\ \tilde{v} &= v - U_{m-1}x - \eta \tilde{u}_m, \eta = \tilde{u}_m^T v, \\ w &= (u_1^T u_m, \dots, u_{m-1}^T u_m)^T.\end{aligned}\quad (7)$$

式(7)を  $u_m$  と  $v$  に関して解き、式(3)に代入すると次式が得られる。

$$\begin{aligned}A(U_{m-1}, \tilde{u}_m) &= (U_{m-1}, \tilde{u}_m)T_m + U_{m-1}w e_m^T T_m \\ &\quad + \tilde{v} e_m^T + (U_{m-1}x + \eta \tilde{u}_m) e_m^T \\ &\quad - AU_{m-1}w e_m^T\end{aligned}\quad (8)$$

次に、 $AU_{m-1}$  を書き直す。式(3)より

$$AU_{m-1} = U_{m-1}T_{m-1} + \beta_{m-1}u_m e_{m-1}^T \quad (9)$$

となり、式(7)の  $u_m$  を代入し、左から  $w$  をかけると次式のようになる。

$$\begin{aligned}AU_{m-1}w &= U_{m-1}(T_{m-1} + \beta_{m-1}w e_{m-1}^T)w \\ &\quad + \beta_{m-1}\tilde{u}_m e_{m-1}^T w\end{aligned}\quad (10)$$

また、式(8)の  $U_{m-1}w e_m^T T_m$  は、次のように書くことができる。

$$\begin{aligned}U_{m-1}w e_m^T T_m &= t_{m,m-1}U_{m-1}w e_{m-1}^T \\ &\quad + t_{m,m}U_{m-1}w e_m^T\end{aligned}\quad (11)$$

式(10)と式(11)を式(8)に代入し整理すると、次のようになる。

$$\begin{aligned}A(U_{m-1}, \tilde{u}_m) &= (U_{m-1}, 0)(T_m + t_{m,m-1}w e_{m-1}^T \\ &\quad + (x + t_{m,m}w - \beta_{m-1}w e_{m-1}^T \\ &\quad - T_{m-1}w) e_m^T) + \tilde{u}_m (e_m^T T_m \\ &\quad + (\eta - \beta_{m-1}e_{m-1}^T w) e_m^T) \\ &\quad + \tilde{v} e_m\end{aligned}\quad (12)$$

ここで、次の成分を持つような行列  $H_m$  を定義する。

$$\begin{cases} h_{1:m-1, m-1} = t_{1:m-1, m-1} + t_{m, m-1}w \\ h_{1:m-1, m} = t_{1:m-1, m} - T_{m-1}w \\ \quad - \beta_{m-1}w e_{m-1}^T + t_{m, m} + x \\ h_{m, m} = t_{m, m} - \beta_{m-1}e_{m-1}^T w + \eta \\ h_{m, m-1} = t_{m, m-1} \end{cases} \quad (13)$$

式(12)は、式(13)の行列  $H_m$  を用いることによって、次式が成立する。

$$A(U_{m-1}, \tilde{u}_m) = (U_{m-1}, \tilde{u}_m)H_m + \tilde{v} e_m^T \quad (14)$$

上記で定義した  $H_m$  は上 Hessenberg 行列であるので、式(14)は再直交化を行った後、レーリー商は上 Hessenberg 行列への変換が可能であることを示している。

新しい準直交ランチョス法において、行列  $A$  を求める場合、 $H_m$  の固有組を  $(\theta_H 1, w_H)$  とすると、 $\lambda \doteq \theta_H$ ,

$x \doteq U_m w_H$  で近似を行う。 $H_m$  の固有値の計算には、CLAPACK<sup>2)</sup> のルーチン `dhseqr` を、その固有ベクトルの計算には `dhsein` を用いることにする。

ここで、新しい準直交ランチョス法のアルゴリズムについて述べる。新しい準直交ランチョス法において、準直交性が保たれている場合のアルゴリズムを図3に示す。さらに、図4において、準直交性が崩れた場合に行う再直交化とレーリー商を調整するアルゴリズムを示す。準直交ランチョス法のアルゴリズムは、図4の21~23を除いたものである。

## 6. 数値実験

ランチョス法、準直交ランチョス法、新しい準直交ランチョス法、完全再直交化ランチョス法の固有組の収束状況などを、数値実験を行い比較する。実験は、以下の環境で行った。また、 $n$  を行列の次数とする。

計算機: HP Proliant LP 140

OS: Red Hat Linux 9.0

CPU: Intel Xeon 3.2GHz

メモリ: 4.0GB

計算精度: 倍精度

プログラム言語: C 言語

マシーンプシロン:  $2.220446 \times 10^{-16}$

反復回数: 200 回

初期ランチョスベクトル:  $u_1 = (1/\sqrt{n}, \dots, 1/\sqrt{n})$

収束判定条件:  $\|Ax - \lambda x\|_2 / |\lambda| \leq 1.0 \times 10^{-12}$

再直交化条件:  $\sqrt{\epsilon_M}$

### 6.1 実験内容

#### 6.1.1 ランチョスベクトルの直交性比較

4つの方法のランチョスベクトルの直交性を比較するために下記のようなパラメーターを定義し、比較を行うことにする。

$$v_m = |u_1^T u_m| \quad (m \geq 2)$$

#### 6.1.2 固有組の収束状況の比較

4つの方法において、収束判定条件を満たす固有組の数の比較を行った。ここで、固有組の数の数え方について述べる前に、重複固有値の定義を行う。

定義 2.  $\theta_i, \theta_j \in \mathbb{R}$ .

$$|\theta_i - \theta_j| / |\theta_j| \leq 1.0 \times 10^{-12}$$

が成り立つ時、 $\theta_i$  と  $\theta_j$  は重複していると定義する。

次に、ランチョス法以外の固有組の数え方について述べる。

- 1)  $\hat{T}_m, \tilde{T}_m, H_m$  の重複固有値を1つ固有値としてみなす。
  - 2) それぞれの固有値に対する、固有ベクトルを求める。
  - 3) 残差ノルムを計算し、収束判定条件を満たしている固有組の数を数える。
- ランチョス法の場合には、ランチョスベクトルの直交

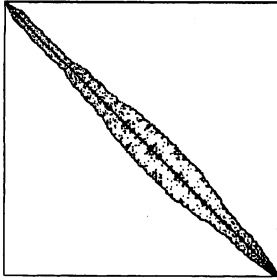


図5 非零要素の分布

性の悪化から重複固有値や擬似固有値が現れることが報告されている<sup>4)</sup>。まず、正しい固有値を選ぶ方法<sup>4)</sup>について述べる。今、 $m$  反復回目として  $T_m$  及び  $\bar{T}_m$  から第1行第1列を除いた  $\bar{T}_m$  の固有値を求める。そして、

- 1)  $T_m$  の重複固有値は正しい固有値とみなす。
- 2)  $T_m$  の単純固有値で、 $\bar{T}_m$  の固有値と重複していないものは「正しい」とみなす。
- 3)  $T_m$  の単純固有値で、 $\bar{T}_m$  の固有値と重複しているものは「擬似」とみなす。

という規則で、判別を行う。そして、重複している固有値を1つの固有値とみなし、固有値が全て重複しないようにする。そして、それぞれの固有値に対する固有ベクトルを求め、残差ノルムを計算し、収束判定条件を満たしている固有組の数を数える。

### 6.1.3 固有値分布の比較

完全再直交化ランチョス法とその他の方法において、収束判定条件を満たしている固有値の分布の比較を行った。

## 7. 数値例

数値例として、MatrixMarket<sup>6)</sup> から対称正定値である bcsstk18 を使用した。この行列の情報は以下のようにになっている。ただし、図6の固有値分布は、CLAPCK<sup>2)</sup> の関数 dsyev で求めたものである。

- 次元 : 11948
- 非ゼロ要素数 : 149090
- $\|A\|_2 = 4.3 \times 10^{10}$

### 7.1 結果と考察

数値例の数値結果を表1と図7~図11に示す。表1を見てみると、準直交ランチョス法は、3組の固有組しか収束していないが、新しい準直交ランチョス法を見ると40組の固有組が収束していることが分かる。つまり、これはレーリー商を調整することにより、Ritzベクトルを固有ベクトルに収束させる事ができた事を示している。また、新しい準直交ランチョス法は、収束した固有組数に関して、完全再直交化ランチョス法と全く同じだが、レーリー商もしくは調整されたレー

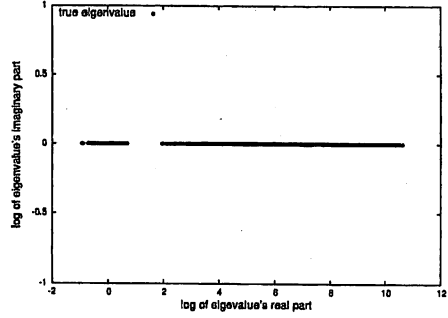


図6 固有値分布

リー商を作る時間を比べてみると、ほぼ半分位の時間で、調整されたレーリー商を作ることができた。しかし、調整されたレーリー商の固有組の計算時間を見てみると、上 Hessenberg 行列の固有組を求めるため他のレーリー商の固有組を求める時間より、多く時間がかかってしまった。よって、全体の計算時間で見てみると、完全再直交化ランチョス法が一番計算時間が短かった。

図7を見ると、ランチョス法は反復が進むにつれ、 $\nu_m$  の値が大きくなり、直交性が悪化していつていることが分かる。準直交及び新しい準直交ランチョス法を見てみると、二つの線は重なっており、再直交化基準値  $\sqrt{\epsilon_M}$  より下回っていることが分かる。完全再直交化ランチョス法は、 $\nu_m$  が  $10^{-15}$  以下になっている。

次に、図8より、反復が進んでも準直交ランチョス法の収束した固有組の数は停滞しているが、新しい準直交ランチョス法は、完全再直交化ランチョス法と同じように、その数を増やしている。図9~図11を見てみると、完全再直交化ランチョス法と新しい準直交ランチョス法で得られた点は全て重なっていたが、それ以外の方法と新しい準直交ランチョス法で得られたものを比較してみると、重なっている所が少なかった。

## 8. 結論の今後の課題

本稿では、ランチョス法、準直交ランチョス法、新しい準直交ランチョス法、完全再直交化ランチョス法の固有組の収束性について比較を行った。新しい準直交ランチョス法は、準直交ランチョス法と同じ位の時間で、調整されたレーリー商を作ることができ、なおかつ完全再直交化ランチョス法と同じような収束をする。しかし、上 Hessenberg 行列の固有組を求めなければいけないので、全体の計算時間を考えると時間がかかってしまう。また、完全再直交化ランチョス法の方が、プログラムは単純になり、レーリー商は三重対角行列になるので、この方法が良いと考えられる。対称問題を、さらに非対称問題にして考えたので、計算時間がかかってしまった事から、非対称ランチョス法

表 1 数値例の結果

method	I	S	C	Ltime	Etime	Total
lanczos	200	—	12	0.39	9.00	9.39
semilan	200	20	3	1.20	5.39	6.59
newsemilan	200	20	40	1.25	8.30	9.55
fulllan	200	40	200	3.71	5.33	9.04

I:反復回数, S:再直交化回数, C:収束した固有組の数

Ltime:レーリー商及び適応されたレーリー商の構成時間 (sec)

Etime:レーリー商及び適応されたレーリー商の固有組計算時間 (sec)

total:全ての計算時間

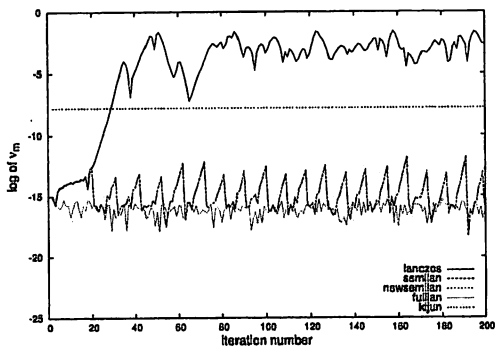


図 7  $\nu_m$  の変化

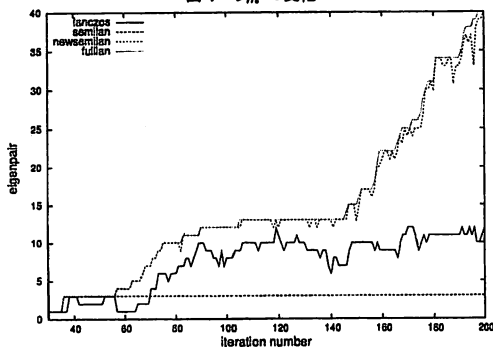


図 8 固有組の収束状況

に対してレーリー商を適用することを行ってみる事が考えられる。また、レーリー商を調整するとなぜ Ritz ベクトルが収束するのかを数学的に証明することも今後の課題である。

### 参考文献

- 1) G. W. Stewart, *Adjusting the Rayleigh Quotient in Semiorthogonal Lanczos Method*, SIAM J. Sci. Comp. Vol. 24, pp. 201–207, (2002).
- 2) E. Anderson et al., *Lapack Users Guide*, SIAM, Philadelphia (1992), (小国 (訳) 行列演算パッケージ LAPACK 利用の手引き, 丸善, (1996)).
- 3) H. D. Simon, *Analysis of Symmetric Lanczos Algorithm with Reorthogonalization*, Linear Al-

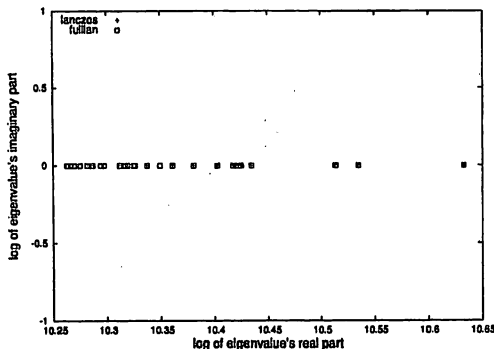


図 9 固有値分布の比較:ランチョス法 vs 完全再直交化ランチョス法

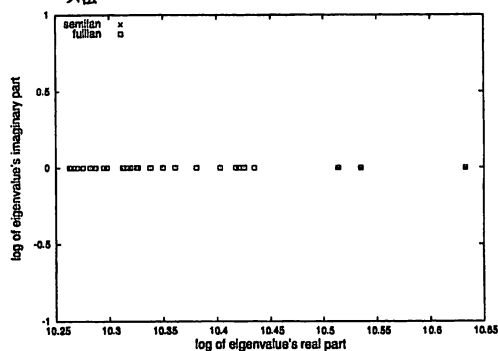


図 10 固有値分布の比較:準直交ランチョス法 vs 完全再直交化ランチョス法

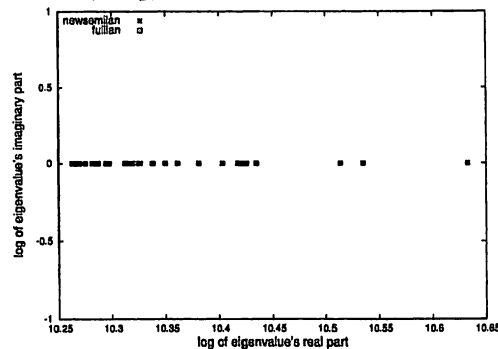


図 11 固有値分布の比較:新しい準直交ランチョス法 vs 完全再直交化ランチョス法

gebra Appl. Vol. 61, pp. 101–132, (1984).

- 4) 名取, 「数値解析とその応用」, コロナ社, (1990).
- 5) Z. Bai, et al., *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems: A practical Guide*, SIAM, (2000).
- 6) MatrixMarket <http://math.nist.gov/MatrixMarket/>
- 7) 梅垣, 野寺: 「準直交ランチョス法による大規模固有値問題の解法」 情報研報. Vol. 2005, No. 57, pp. 7–12 (2005).