

離散可積分系の観点からのdqds法の拡張について

前田, 一貴
京都大学情報学研究科

辻本, 諭
京都大学情報学研究科

<https://doi.org/10.15017/27183>

出版情報 : 応用力学研究所研究集会報告. 24A0-S3 (23), pp.144-149, 2013-03. 九州大学応用力学研究
所
バージョン :
権利関係 :

応用力学研究所研究集会報告 No.24AO-S3

「非線形波動研究の最前線 — 構造と現象の多様性 —」 (研究代表者 太田 泰広)

共催 九州大学グローバル COE プログラム

「マス・フォア・インダストリ教育研究拠点」

Reports of RIAM Symposium No.24AO-S3

Frontiers of nonlinear wave science — various phenomena and structures

Proceedings of a symposium held at Chikushi Campus, Kyushu University,
Kasuga, Fukuoka, Japan, November 1 - 3, 2012

Co-organized by

Kyushu University Global COE Program

Education and Research Hub for Mathematics - for - Industry

Article No. 23 (pp. 144 - 149)

離散可積分系の観点からの dqds 法の 拡張について

前田 一貴 (MAEDA Kazuki), 辻本 諭 (TSUJIMOTO
Satoshi)

(Received 15 January 2013; accepted 5 February 2013)



Research Institute for Applied Mechanics
Kyushu University
March, 2013

離散可積分系の観点からの dqds 法の拡張について

京都大学大学院情報学研究科 前田一貴 (MAEDA Kazuki)

京都大学大学院情報学研究科 辻本 諭 (TSUJIMOTO Satoshi)

概要 行列の標準固有値計算アルゴリズムである dqds 法を、離散可積分系の観点から拡張することを考える。得られたアルゴリズムは行列の一般化固有値を計算するアルゴリズムとなっていることを明らかにする。

1 はじめに

本稿では、 R_{II} 格子 [5] と呼ばれている非自励離散可積分系の漸近挙動を考察する。 R_{II} 格子は離散 2 次元戸田階層から簡約化操作により導出でき [6]、Hankel 行列式で書ける解を持つ。特に（非周期）有限格子境界条件を課した場合、 R_{II} 格子の Lax 対の波動関数として現れる R_{II} 多項式 [3] を用いることで初期値問題を解くことができ、ある変数が $t \rightarrow +\infty$ で最高次の多項式の根へと収束していくことが示される。この議論においては、 R_{II} 多項式が直交多項式を拡張したある種の直交性を持つことが鍵となっている。

この結果を、本研究では一般化固有値問題へと応用することを考える。背景として、dqds 法 [2] と非自励離散戸田格子の関係がある。dqds 法は三重対角行列の固有値を反復計算によって求める手法であり、その高速・高精度性でよく知られているものである。 R_{II} 格子を考えることで、dqds 法のある意味で拡張とみなせる三重対角行列束向けの一般化固有値計算アルゴリズムを構成することができ、従来法よりも高速・高精度なものとなることが期待される。本稿で提案する数値解法の実用化に向けたより詳細な研究が今後の課題となっている。

2 R_{II} 格子

モニック型の R_{II} 格子は次で与えられる：

$$\begin{aligned} \kappa_{t+n+1} q_n^{(t+1)} + \lambda_n e_n^{(t+1)} \frac{1 + q_n^{(t+1)}}{1 + q_{n-1}^{(t+1)}} - s^{(t+1)} (1 + q_n^{(t+1)}) (1 + e_n^{(t+1)}) \\ = \kappa_{t+n} q_n^{(t)} \frac{1 + e_{n+1}^{(t)}}{1 + e_n^{(t)}} + \lambda_{n+1} e_{n+1}^{(t)} - s^{(t)} (1 + q_n^{(t)}) (1 + e_{n+1}^{(t)}), \end{aligned} \quad (2.1a)$$

$$q_{n-1}^{(t+1)} e_n^{(t+1)} \frac{1 + q_n^{(t+1)}}{1 + q_{n-1}^{(t+1)}} = q_n^{(t)} e_n^{(t)} \frac{1 + e_{n+1}^{(t)}}{1 + e_n^{(t)}}. \quad (2.1b)$$

ただし $n, t \in \mathbb{Z}$ は独立変数、 $q_n^{(t)}, e_n^{(t)}$ は従属変数、 $\kappa_{t+n}, \lambda_n, s^{(t)}$ はパラメータである。 $\kappa_{t+n} q_n^{(t)}, \lambda_n e_n^{(t)}$ をそれぞれ $q_n^{(t)}, e_n^{(t)}$ と置き直し、 $q_n^{(t)}, e_n^{(t)}$ が十分 0 に近ければ、 R_{II} 格子 (2.1) のフローは非自励離散戸田格子

$$\begin{aligned} q_n^{(t+1)} + e_n^{(t+1)} - s^{(t+1)} &= q_n^{(t)} + e_{n+1}^{(t)} - s^{(t)}, \\ q_{n-1}^{(t+1)} e_n^{(t+1)} &= q_n^{(t)} e_n^{(t)} \end{aligned}$$

のフローに漸近していく。

R_{II} 格子は離散 2 次元戸田階層から簡約化操作により導出でき、モニック型の場合の Lax 対は x をスペクトルパラメータとして

$$(x - s^{(t)}) (1 + q_n^{(t)}) \varphi_n^{(t+1)}(x) = \varphi_{n+1}^{(t)}(x) + q_n^{(t)} (x - \kappa_{t+n}) \varphi_n^{(t)}(x), \quad (2.2a)$$

$$(1 + e_n^{(t)}) \varphi_n^{(t)}(x) = \varphi_n^{(t+1)}(x) + e_n^{(t)} (x - \lambda_n) \varphi_{n-1}^{(t+1)}(x) \quad (2.2b)$$

次の多項式を導入する：

$$K_k^{(t)}(x) := \prod_{j=t}^{t+k-1} (x - \kappa_j), \quad K_k(x) := K_k^{(0)} = \prod_{j=0}^{k-1} (x - \kappa_j), \quad L_l(x) := \prod_{j=1}^l (x - \lambda_j).$$

そして、 $\mathcal{D}(\mathcal{L}^{(t)})$ を有理関数 $\frac{x^m}{K_k^{(t)}(x)L_l(x)}$, $m = 0, 1, 2, \dots; k, l = 0, 1, \dots, N$, で張られる線型空間とする。このとき、 \mathbf{R}_{II} 多項式 $\{\varphi_n^{(t)}(x)\}_{n=0}^N$ に対応して、以下に示すように線型汎関数 $\mathcal{L}^{(t)} : \mathcal{D}(\mathcal{L}^{(t)}) \rightarrow \mathbb{C}$ で次の直交関係式を満たすものが存在する：

$$\mathcal{L}^{(t)} \left[\frac{x^m \varphi_n^{(t)}(x)}{K_n^{(t)}(x)L_n(x)} \right] = h_n^{(t)} \delta_{m,n}, \quad h_n^{(t)} \neq 0, \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad m = 0, 1, \dots, n, \quad (3.2a)$$

$$\mathcal{L}^{(t)} \left[\frac{x^m \varphi_N^{(t)}(x)}{K_N^{(t)}(x)L_N(x)} \right] = 0, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (3.2b)$$

ただし、 $\delta_{m,n}$ は Kronecker のデルタである。直交定数 $\{h_n^{(t)}\}_{n=0}^{N-1}$ は、任意に選ぶことができる定数 $H^{(0)} \neq 0$ の自由度を除いて、次のように一意に定まる：

$$\begin{aligned} h_0^{(t)} &= (1 + w_1^{(t)} + w_1^{(t)} w_2^{(t)} + \dots + w_1^{(t)} w_2^{(t)} \dots w_{N-1}^{(t)}) H^{(t)}, \\ h_1^{(t)} &= (w_1^{(t)} + w_1^{(t)} w_2^{(t)} + \dots + w_1^{(t)} w_2^{(t)} \dots w_{N-1}^{(t)}) H^{(t)}, \\ &\vdots \\ h_{N-1}^{(t)} &= w_1^{(t)} w_2^{(t)} \dots w_{N-1}^{(t)} H^{(t)}. \end{aligned}$$

ただし、

$$H^{(t+1)} = q_0^{(t)} \frac{1 + e_1^{(t)}}{1 + q_0^{(t)}} H^{(t)}.$$

なお、 \mathbf{R}_{II} 多項式 $\{\varphi_n^{(t)}(x)\}_{n=0}^N$ を用いて構成されるある 2 つの有理関数列が、この線型汎関数 $\mathcal{L}^{(t)}$ について双直交することが知られている [1, 7].

$\varphi_N^{(t)}(x)$ の零点 (行列束 $(A^{(t)}, B^{(t)})$ の固有値) を x_0, x_1, \dots, x_{N-1} とし ($n = N$ のスペクトル変換 (3.1) からわかるようにこれらは時間 t に依存しない), これらが全て単純である (相異なる) と仮定する。このとき、 $f(x) \in \mathcal{D}(\mathcal{L}^{(t)})$ に対して

$$\mathcal{L}^{(t)}[f(x)] = \sum_{i=0}^{N-1} c_i^{(t)} f(x_i), \quad c_i^{(t)} := \frac{h_{N-1}^{(t)} K_{N-1}^{(t)}(x_i) L_{N-1}(x_i)}{\varphi_{N-1}^{(t)}(x_i) \varphi_N^{(t)'}(x_i)}, \quad i = 0, 1, \dots, N-1,$$

で $\mathcal{L}^{(t)}$ を定めれば、直交関係式 (3.2) が満たされることが示される。ただし、 $\varphi_N^{(t)'}(x)$ は $\varphi_N^{(t)}(x)$ の導関数である。これより、 $\mathcal{L}^{(t)}$ のモーメントを

$$\mu_m^{k,l,t} := \mathcal{L}^{(t)} \left[\frac{x^m}{K_k^{(t)}(x)L_l(x)} \right]$$

で定めれば、

$$\mu_m^{k,l,t} = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{c_i^{(t)} x_i^m}{K_k^{(t)}(x_i) L_l(x_i)}$$

が得られる。このモーメントを用いると、 \mathbf{R}_{II} 多項式は次のように行列式を用いて表される：

$$\varphi_n^{(t)}(x) = \frac{1}{\tau_n^{n,n,t}} \begin{vmatrix} \mu_0^{n,n,t} & \mu_1^{n,n,t} & \dots & \mu_{n-1}^{n,n,t} & \mu_n^{n,n,t} \\ \mu_1^{n,n,t} & \mu_2^{n,n,t} & \dots & \mu_n^{n,n,t} & \mu_{n+1}^{n,n,t} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \mu_{n-1}^{n,n,t} & \mu_n^{n,n,t} & \dots & \mu_{2n-2}^{n,n,t} & \mu_{2n-1}^{n,n,t} \\ 1 & x & \dots & x^{n-1} & x^n \end{vmatrix}, \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad (3.3a)$$

$$\tau_{-1}^{k,l,t} := 0, \quad \tau_0^{k,l,t} := 1, \quad \tau_n^{k,l,t} := |\mu_{i+j}^{k,l,t}|_{0 \leq i, j \leq n-1} = \begin{vmatrix} \mu_0^{k,l,t} & \mu_1^{k,l,t} & \cdots & \mu_{n-1}^{k,l,t} \\ \mu_1^{k,l,t} & \mu_2^{k,l,t} & \cdots & \mu_n^{k,l,t} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mu_{n-1}^{k,l,t} & \mu_n^{k,l,t} & \cdots & \mu_{2n-2}^{k,l,t} \end{vmatrix}, \quad n = 1, 2, \dots, N. \quad (3.3b)$$

ここで、スペクトル変換 (2.2a) より、線型汎関数の時間発展を

$$\mathcal{L}^{(t+1)}[f(x)] = \mathcal{L}^{(t)} \left[\frac{x - s^{(t)}}{x - \kappa_t} f(x) \right]$$

により定めることができる。したがって、モーメントの関係式

$$\mu_m^{k,l,t+1} = \mu_{m+1}^{k+1,l,t} - s^{(t)} \mu_m^{k+1,l,t}$$

が成り立ち、これよりモーメントの $c_i := c_i^{(0)}$ を用いた表示として

$$\mu_m^{k,l,t} = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{c_i x_i^m \prod_{j=0}^{t-1} (x_i - s^{(j)})}{K_{t+k}(x_i) L_l(x_i)} \quad (3.4)$$

を得ることもできる。

4 Hankel 行列式解とその漸近挙動

R_{II} 多項式の行列式表示 (3.3) とスペクトル変換 (2.2a), (2.2b), およびモーメントの関係式

$$\mu_m^{k,l,t} = \mu_{m+1}^{k+1,l,t} - \kappa_k \mu_m^{k+1,l,t} = \mu_{m+1}^{k,l+1,t} - \lambda_{l+1} \mu_m^{k,l+1,t}$$

を用いると、有限格子境界条件 $e_0^{(t)} = e_N^{(t)} = 0$ を課した R_{II} 格子の初期値問題に対して、Hankel 行列式解

$$q_n^{(t)} = (s^{(t)} - \kappa_{t+n})^{-1} \frac{\tau_n^{n,n,t} \tau_{n+1}^{n,n+1,t+1}}{\tau_n^{n-1,n,t+1} \tau_{n+1}^{n+1,n+1,t}}, \quad e_n^{(t)} = (s^{(t)} - \kappa_{t+n}) \frac{\tau_{n-1}^{n-1,n-1,t+1} \tau_{n+1}^{n+1,n,t}}{\tau_n^{n,n-1,t} \tau_n^{n,n,t+1}} \quad (4.1)$$

を与えることができる。このように解が Hankel 行列式を用いて書けることは、 R_{II} 格子が離散 2 次元戸田階層から簡約化により導出できることの帰結である。モーメントの表示 (3.4) を Hankel 行列式 $\tau_n^{k,l,t}$ の各成分に代入し、Cauchy-Binet の公式で展開することで

$$\tau_n^{k,l,t} = |\mu_{i+j}^{k,l,t}|_{0 \leq i, j \leq n-1} = \sum_{0 \leq r_0 < r_1 < \cdots < r_{n-1} \leq N-1} \left(\prod_{i=0}^{n-1} \frac{c_{r_i} \prod_{j=0}^{t-1} (x_{r_i} - s^{(j)})}{K_{t+k}(x_{r_i}) L_l(x_{r_i})} \right) \left(\prod_{0 \leq \alpha < \beta \leq n-1} (x_{r_\beta} - x_{r_\alpha})^2 \right) \quad (4.2)$$

を得る。そこで、仮定として、 $(A^{(t)}, B^{(t)})$ の固有値 x_0, x_1, \dots, x_{N-1} は全て実数で、添字が $x_0 > x_1 > \cdots > x_{N-1}$ となるように付けられており、全ての時刻 t でパラメータを $s^{(t)} < x_{N-1}$, および $\kappa_{t+N-1} \ll x_{N-1}$ となるように選んだとする。すると、(4.2) を Hankel 行列式解 (4.1) に代入することで、十分大きな t での漸近挙動として

$$q_n^{(t)} = \frac{x_n - s^{(t)}}{s^{(t)} - \kappa_{t+n}} + O \left(\max \left\{ \frac{\prod_{j=0}^t (x_n - s^{(j)})}{\prod_{j=0}^{t-1} (x_{n-1} - s^{(j)})} \frac{\prod_{j=0}^{t+n-1} (x_{n-1} - \kappa_j)}{\prod_{j=0}^{t+n-1} (x_n - \kappa_j)}, \frac{\prod_{j=0}^t (x_{n+1} - s^{(j)})}{\prod_{j=0}^{t-1} (x_n - s^{(j)})} \frac{\prod_{j=0}^{t+n-1} (x_n - \kappa_j)}{\prod_{j=0}^{t+n-1} (x_{n+1} - \kappa_j)} \right\} \right),$$

$$e_n^{(t)} = O \left(\frac{\prod_{j=0}^{t-1} (x_n - s^{(j)})}{\prod_{j=0}^t (x_{n-1} - s^{(j)})} \frac{\prod_{j=0}^{t+n-1} (x_{n-1} - \kappa_j)}{\prod_{j=0}^{t+n} (x_n - \kappa_j)} \right)$$

が得られる。これより、仮定の下で $q_n^{(t)} \rightarrow \frac{x_n - s^{(t)}}{s^{(t)} - \kappa_{t+n}}$, $e_n^{(t)} \rightarrow 0$, $t \rightarrow +\infty$, がわかる。特に $(A^{(t)}, B^{(t)})$ の成分で見れば、 $v_n^{(t)} \rightarrow x_n$, $w_n^{(t)} \rightarrow 0$ である。

5 一般化固有値計算アルゴリズム

前節の結果を利用して、与えられた行列束 $(A^{(0)}, B^{(0)})$ の一般化固有値を計算する方法を提案する。まず、与えられた行列束の成分から、初期時刻 $t = 0$ の変数の値を次で計算する：

$$e_0^{(0)} := 0, \quad \tilde{e}_n^{(0)} := \frac{w_n^{(0)}}{q_{n-1}^{(0)}}, \quad e_n^{(0)} := \tilde{e}_n^{(0)} \frac{1 + q_{n-1}^{(0)}}{1 + q_n^{(0)}}, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad e_N^{(0)} := 0, \quad (5.1a)$$

$$q_n^{(0)} := \frac{v_n^{(0)} - s^{(0)}(1 + w_n^{(0)}) - (s^{(0)} - \lambda_n)\tilde{e}_n^{(0)}}{s^{(0)} - \kappa_n}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (5.1b)$$

そして、 $t = 0, 1, 2, \dots$ について順に、ある補助変数 $d_n^{(t+1)}$ を導入することにより得られる dqds 法の漸化式に似た次の形の式で時間発展を計算する：

$$d_0^{(t+1)} := (s^{(t)} - \kappa_t)q_0^{(t)} - (s^{(t+1)} - s^{(t)}), \quad d_n^{(t+1)} := d_{n-1}^{(t+1)} \frac{q_n^{(t)}}{q_{n-1}^{(t+1)}} - (s^{(t+1)} - s^{(t)})(1 + q_n^{(t)}), \quad (5.2a)$$

$$n = 1, 2, \dots, N-1,$$

$$q_n^{(t+1)} := \frac{(s^{(t+1)} - \lambda_{n+1})e_{n+1}^{(t)} + d_n^{(t+1)}(1 + e_{n+1}^{(t)})}{s^{(t+1)} - \kappa_{t+n+1}}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad (5.2b)$$

$$e_0^{(t+1)} := 0, \quad e_n^{(t+1)} := e_n^{(t)} \frac{q_n^{(t)}}{q_{n-1}^{(t+1)}} \frac{1 + q_{n-1}^{(t+1)}}{1 + q_n^{(t+1)}} \frac{1 + e_{n+1}^{(t)}}{1 + e_n^{(t)}}, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad e_N^{(t+1)} := 0. \quad (5.2c)$$

ここで導入した $d_n^{(t+1)}$ は、dqds 法の場合と同様に漸化式から減算を除去する役割を果たしており、これにより高精度計算が可能となることが期待される。また、これは箱玉系を考えるうえでも有用な役割を果たしていた [4]。

以下では簡単な数値例により、実際に R_{II} 格子を用いて三重対角行列束の一般化固有値が計算できることを確認する。入力の行列束 $(A^{(0)}, B^{(0)})$ として 6 次の三重対角行列束

$$A^{(0)} = \begin{pmatrix} 10 & -1 & & & & \\ -1 & 10 & -1 & & & \\ & -1 & 10 & -1 & & \\ & & -1 & 10 & -1 & \\ & & & -1 & 10 & -1 \\ & & & & -1 & 10 \end{pmatrix}, \quad B^{(0)} = \begin{pmatrix} 6 & 1 & & & & \\ 1 & 5 & 1 & & & \\ & 1 & 4 & 1 & & \\ & & 1 & 3 & 1 & \\ & & & 1 & 2 & 1 \\ & & & & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

を与え、これをモニック化 ($\det(B_n)$ が $\varphi_n^{(0)}(x)$ の最高次係数になるので、これで $\varphi_n^{(0)}(x)$ を割る) した後、初期値の $q_n^{(0)}, e_n^{(0)}$ を (5.1) で計算し、 R_{II} 格子の反復計算 (5.2) を行うプログラムを Python 3.2.3 で書き、Intel Core i5 760 2.80 GHz マシンの Linux 3.6.6 (x86_64) 環境上で実行した。図 1 がその結果で、反復計算の経

表 1: R_{II} 格子による計算結果と GNU Octave の qz(A, B) の結果との比較。

QZ (Octave)	R_{II} 格子
44.17963155383303	44.17963155383306
5.94913474626031	5.94913474626025
3.44425405187032	3.44425405186801
2.42003434517876	2.42003434518057
1.77202800727841	1.77202800727841
1.28203771442731	1.28203771442731

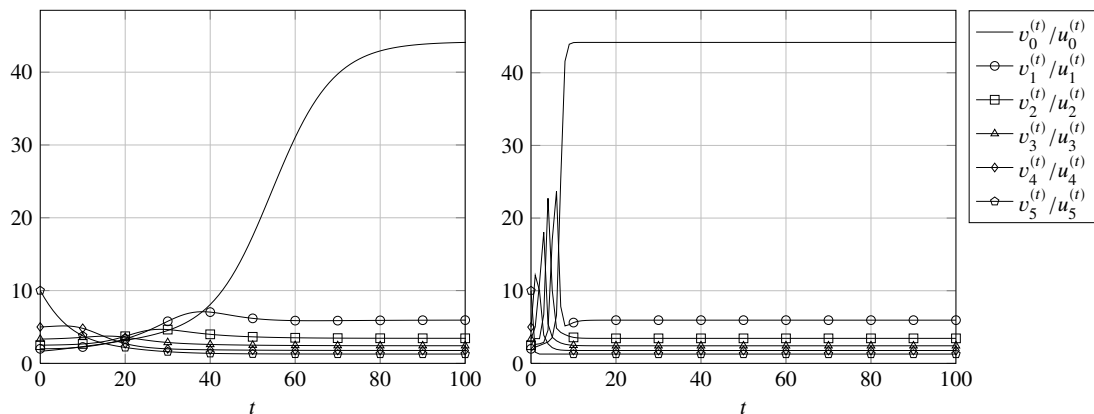


図 1: R_{II} 格子を用いた一般化固有値計算の例. $A^{(t)}$ と $B^{(t)}$ の対角成分の比 $v_n^{(t)}/u_n^{(t)}$ をプロットしている. 左図: $s^{(t)} = 0, \alpha_{t+5} = -1, t \geq 0$. 右図: $s^{(t)} = 1.282, \alpha_{t+5} = -10000, t \geq 0$.

過 ($A^{(t)}$ と $B^{(t)}$ の対角成分の比 $v_n^{(t)}/u_n^{(t)}$) をプロットしたものである. ただし, $u_n^{(t)} = 1 + w_n^{(t)}$. 左図と右図ではパラメータの設定が異なり, 左図では $v_0^{(t)}/u_0^{(t)}$ の値が $t = 100$ 程度でもまだ収束していないのに対し, $s^{(t)}$ の値を最小固有値付近に選んだ右図では $t = 20$ 程度までで速やかに収束していることが見てとれる. 後者のパラメータの場合, 全ての n について $|w_n^{(t)}| < 1.0 \times 10^{-16}$ となることを停止条件としたところ, $t = 48$ で計算が停止した. 表 1 が最終的に求まった値を, GNU Octave 3.6.3 の `qz(A, B)` (QZ 法と呼ばれる手法を用いて行列束の固有値を計算する関数) の結果とともに示したものである. これより, 確かに R_{II} 格子の反復計算によって問題の固有値が計算できていることが確認できる.

謝辞 本研究は科研費 (特別研究員奨励費 23 · 4105) の助成を受けたものである.

参考文献

- [1] M. S. Derevyagin and A. S. Zhedanov, *An operator approach to multipoint Padé approximations*, J. Approx. Theory, **157** (2009), 70–88.
- [2] K. V. Fernando and B. N. Parlett, *Accurate singular values and differential qd algorithms*, Numer. Math. **67** (1994), 191–229.
- [3] M. E. H. Ismail and D. R. Masson, *Generalized orthogonality and continued fractions*, J. Approx. Theory, **83** (1995), 1–40.
- [4] 前田一貴, 辻本諭, R_{II} 格子と対応する箱玉系について, 応用力学研究所研究集会報告「非線形波動研究の進展 –現象と数理の相互作用–」, vol. 23AO-S7, 2012, pp. 60–67.
- [5] V. Spiridonov and A. Zhedanov, *Spectral transformation chains and some new biorthogonal rational functions*, Comm. Math. Phys. **210** (2000), 49–83.
- [6] S. Tsujimoto, *Determinant solutions of the nonautonomous discrete Toda equation associated with the deautonomized discrete KP hierarchy*, J. Syst. Sci. Complex. **23** (2010), 153–176.
- [7] A. Zhedanov, *Biorthogonal rational functions and the generalized eigenvalue problem*, J. Approx. Theory, **101** (1999), 303–329.