

固有値計算のための dqds 法の Totally Nonnegative な Hessenberg 行列への拡張について

山本有作

神戸大学大学院システム情報学研究科 計算科学専攻

1 はじめに

対称正定値 3 重対角行列の固有値を高速・高精度に求めるアルゴリズムとして, Fernando と Parlett により提案された dqds (differential quotient-difference with shift) 法 [2] がある. このアルゴリズムは数学的には LR 法と等価であるが, 対象とする 3 重対角行列が正則な上 2 重対角行列 B により $T = B^T B$ と陰的に定義されていることを前提とし, 各ステップでの $T^{(n)}$ を陽的に作らずに $B^{(n)}$ の要素のみを用いて計算を進める. dqds 法は, $B^T B$ の任意の固有値を小さい相対誤差で計算できるという優れた特徴を持ち, かつ, 原点シフトの導入により, 極めて高速なアルゴリズムになっている. そこで, これらの優れた特徴を保ちつつ, より広いクラスの行列に dqds 法を拡張できれば興味深い.

我々は最近, Totally Nonnegative (TN), すなわち任意の小行列式の値が非負である, ある帯行列に対して, dqds 法のシフトなし版である dqd (differential qd) 法を素直に拡張できることを指摘した [12][13]. 以下, このアルゴリズムを multiple dqd 法と呼ぶ. [13] では, multiple dqd 法が大域的収束性を持つとともに, TN 帯行列の任意の固有値を小さい相対誤差で計算できることを示している. しかし, シフトを導入していないため, multiple dqd 法の収束次数は 1 次に留まっていた.

そこで本稿では, multiple dqd 法にシフトを導入する方法を紹介する [14]. また, シフトを導入したアルゴリズムについて, 変数の正值性や大域的収束性などの基本的な性質を示す.

最近, 可積分系である離散ハングリーロトカ・ボルテラ (dhLV) 系, および離散ハングリー戸田 (dhToda) 方程式を用いた固有値計算法が福田らにより提案されている [3][4][5]. 本稿では, これらの方法とシフト付き multiple dqd 法との関係についても論じ, ある条件下では両者が等価となることを示す. また, この関係の可積分系研究への応用について述べる.

2 TN 行列向けのシフト付き LR 法

q_k ($k = 1, \dots, m$), c_{ik} ($i = 1, \dots, M$, $k = 1, \dots, m-1$) を正の実数とし, $m \times m$ 下 2 重対角行列 L と $m \times m$ 上 2 重対角行列 $R_1, \dots, R_M$ を次式で定義する.

$$L = \begin{pmatrix} q_1 & & & & \\ 1 & q_2 & & & \\ & 1 & q_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & q_m \end{pmatrix}, \quad R_i = \begin{pmatrix} 1 & c_{i1} & & & \\ & 1 & c_{i2} & & \\ & & 1 & \ddots & \\ & & & \ddots & c_{i,m-1} \\ & & & & 1 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

本稿では, これらを用いて

$$A = LR_1 R_2 \cdots R_M \quad (2)$$

と書ける行列を対象とする. A は下帯幅 1, 上帯幅 M の帯行列, すなわち Hessenberg 行列であり, 正則で, かつ Totally Nonnegative となることが知られている [7]. さらに, 既約な TN 行列であることから, 全ての固有値は実で正, かつ固有値は単根のみであることも言える.

multiple dqd 法にシフトを導入する準備として、この行列の固有値を、シフト付き LR 法で求めることを考える。ただし、式 (2) に対応して、LR 法を 1 段適用して得られる行列 $\hat{A}$ も、下 2 重対角行列と上 2 重対角行列の積として表すことにする。シフトを s とすると、反復式は次のようになる。

$$LR_1R_2\cdots R_M - sI = L^{(0)}R^{(0)}, \quad (3)$$

$$\hat{A} = R^{(0)}L^{(0)} + sI, \quad (4)$$

$$\hat{A} = \hat{L}\hat{R}_1\hat{R}_2\cdots\hat{R}_M. \quad (5)$$

ただし、 $\hat{L}$ は下側副対角要素が 1 の $m \times m$ 下 2 重対角行列、 $\hat{R}_1, \dots, \hat{R}_M$ は対角要素が 1 の上 2 重対角行列である。式 (3), (4), (5) はそれぞれ左辺の行列を生成して LU 分解する操作、 $L^{(0)}$ と $R^{(0)}$ とを逆順に掛けて左辺の行列を生成する操作、行列 $\hat{A}$ の 2 重対角行列への分解を表す。式 (3), (5) では、それぞれ左辺が LU 分解可能と仮定している。なお、積 $\hat{R}_1\hat{R}_2\cdots\hat{R}_M$ は一意のだが、各 $\hat{R}_i$ は一意でない。

このシフト付き LR 法に対して、次の定理が成り立つ [14]。

定理 1 s が A の最小固有値より小さければ、TN 行列に対するシフト付き LR 法の 1 反復 (3), (4), (5) は破綻なく実行できる。さらに、 $\hat{L}$ の対角要素と $\hat{R}_1, \dots, \hat{R}_M$ の上側副対角要素は正の実数となる。

証明 $C \equiv A - sI$ とおき、 C の最初の k 行・ k 列からなる首座小行列を $C_{1:k}^{1:k}$ と表すことにする。同様に、 A の首座小行列を $A_{1:k}^{1:k}$ と表す。 $A_{1:k}^{1:k}$ は TN 行列であるから、その固有値はすべて非負の実数であることに注意する。さらに、TN 行列の首座小行列の固有値に関する分離不等式 [8] より、 $A_{1:k}^{1:k}$ の最小固有値は A の最小固有値以上である。これより、 $C_{1:k}^{1:k} = A_{1:k}^{1:k} - sI_k$ の固有値はすべて正であることがわかる。したがって、 $|C_{1:k}^{1:k}| > 0$ ($1 \leq k \leq m$) である。このとき、よく知られているように、式 (3) の左辺は LU 分解可能である [10]。また、LU 分解の各因子の要素を小行列式で表す公式 [10][11] より、 $L^{(0)}$ の対角要素は

$$q_k^{(0)} = \frac{|C_{1:k}^{1:k}|}{|C_{1:k-1}^{1:k-1}|} > 0 \quad (6)$$

と書ける ($R^{(0)}$ の対角要素が 1 となるように LU 分解を定義していることに注意)。ただし、 $|C_{1:0}^{1:0}| = 1$ と定義した。また、式 (3) の左辺はヘッセンベルグ行列で下側副対角要素が 1 であるから、 $L^{(0)}$ は下 2 重対角行列で、下側副対角要素は明らかに 1 である。

さて、 $\hat{A} = (L^{(0)})^{-1}(L^{(0)}R^{(0)} + sI)L^{(0)}$ と式 (3) より、式 (4), (5) は次のように書き換えられることに注意する。

$$(L^{(0)})^{-1}LR_1R_2\cdots R_ML^{(0)} = \hat{L}\hat{R}_1\hat{R}_2\cdots\hat{R}_M. \quad (7)$$

ここで、左辺から右辺の $\hat{L}, \hat{R}_1, \hat{R}_2, \dots, \hat{R}_M$ を求める計算を、次のようなステップに分けて書いてみる。

$$R_M L^{(0)} = L^{(1)} \hat{R}_M, \quad (8)$$

$$R_{M-1} L^{(1)} = L^{(2)} \hat{R}_{M-1}, \quad (9)$$

$$\vdots$$

$$R_1 L^{(M-1)} = L^{(M)} \hat{R}_1, \quad (10)$$

$$\hat{L} = (L^{(0)})^{-1} L L^{(M)}. \quad (11)$$

ここで、式 (8) ~ (10) は左辺の LU 分解として右辺の行列を計算することを意味する。また、式 (11) は右辺により行列 $\hat{L}$ を定義している。これがすべて実行でき、 $\hat{R}_M, \hat{R}_{M-1}, \dots, \hat{R}_1, \hat{L}$ がすべて式 (1) の形の要素が正の 2 重対角行列として求まれば、シフト付き LR 法の 1 反復が破綻なく実行できることになる。

そこで、まず式 (8) について考えると、 R_M は定義より対角要素が 1、上側副対角要素がすべて正の上 2 重対角行列であり、 $L^{(0)}$ は、上で示したように、対角要素がすべて正、下側副対角要素がすべて 1 の下 2 重

対角行列である。よって、式 (8) の LU 分解は differential qd 法によって行うことができ、結果の $L^{(1)}, \hat{R}_M$ もそれぞれ $\hat{L}, R_M$ と同じ性質を持つ行列となる。これより、式 (9) も differential qd 法によって行うことができ、結果の $L^{(2)}, \hat{R}_{M-1}$ も同じ性質を持つことがわかる。これを繰り返すことにより、 $\hat{R}_M, \hat{R}_{M-1}, \dots, \hat{R}_1$ はすべて対角要素が 1、上側副対角要素が正の上 2 重対角行列、 $\hat{L}^{(M)}$ は対角要素が正、下側副対角要素が 1 の下 2 重対角行列であることがわかる。

次に、 $R^{(0)}$ の対角要素と $L^{(0)}$ の下側副対角要素が 1 であることに注意すると、 $\hat{A}$ は下側副対角要素が 1 のヘッセンベルグ行列であることがわかる。したがって、その LU 分解の下三角因子である $\hat{L}$ は、下側副対角要素が 1 の下 2 重対角行列である。さらに、 $\hat{L}$ の対角要素 $\hat{q}_k$ は、式 (11) の両辺の対角要素を比べて、

$$\hat{q}_k = \frac{q_k q_k^{(M)}}{q_k^{(0)}} > 0 \quad (12)$$

と得られる。これより、 $\hat{L}$ も式 (1) の形の 2 重対角行列で、全要素が正であることがわかる。

以上より、2 重対角行列への分解は破綻なく実行でき、定理の条件を満たす $\hat{L}, \hat{R}_1, \hat{R}_2, \dots, \hat{R}_M$ が得られることがわかった。(証明終)

定理より、 $\hat{A}$ も TN 行列となるため、シフト付き LR 法を繰り返し実行できる。したがって、LR 法の収束性に関する一般論より、大域的収束性が保証される。なお、定理 1 は、dqds 法の変数の正値性に関する定理 [1] の拡張となっている。

3 シフト付き multiple dqd 法

前節のアルゴリズムでは、式 (3) の計算で、積 $A = LR_1 R_2 \cdots R_M$ を陽的に求めていた。しかし、一般に、 $L, R_1, \dots, R_M$ の要素に微小な相対誤差が入った場合、固有値の摂動も相対誤差の意味で微小であるのに対し、 A の要素に微小な相対誤差が入ると、固有値には大きな相対誤差が入りうるということが知られている [7]。

そこで、 A を陽に計算しない方法を考える。いま、もし $L^{(0)}$ が与えられたとすると、定理 1 の証明で述べたように、 $\hat{L}, \hat{R}_1, \hat{R}_2, \dots, \hat{R}_M$ は次のような LR 変換 (RL の形の積の LU 分解) の繰り返しで計算できる。

$$R_M L^{(0)} = L^{(1)} \hat{R}_M, \quad (13)$$

$$R_{M-1} L^{(1)} = L^{(2)} \hat{R}_{M-1}, \quad (14)$$

$$\vdots$$

$$R_1 L^{(M-1)} = L^{(M)} \hat{R}_1, \quad (15)$$

$$LL^{(M)} = L^{(0)} \hat{L}. \quad (16)$$

ただし、式 (16) は、式 (11) を書き直した式であり、LL 変換と呼ぶことにする。

以上では、 $L^{(0)}$ が (式 (3) を用いて計算するなどして) 与えられていると仮定したが、実は、 $L^{(0)}$ の (1, 1) 要素 $q_1^{(0)}$ のみを式 (3) 両辺の (1, 1) 要素の比較から

$$q_1^{(0)} = q_1 - s \quad (17)$$

と求めれば、残りの要素、および $L^{(i)}, \hat{R}_i$ の要素は、式 (13) ~ (15)、(16) を順番に使うことで、1 要素ずつ順に求められる。したがって、シフト付き LR 法の 1 ステップは、 A を陽に作らずに計算できる。以下、式 (13) ~ (16) を行列要素について具体的に書き下すことにより、このことを示す。式 (13) ~ (15) において、下側副対角要素は両辺とも 1 であることに注意し、両辺の第 $(k-1, k)$ 要素どうし、第 (k, k) 要素どうしを等置すると次の式が得られる。

$$\hat{c}_{M, k-1} = \frac{e_{M, k-1} q_k^{(0)}}{q_{k-1}^{(1)}} \quad (2 \leq k \leq m). \quad (18)$$

$$q_k^{(1)} = e_{M,k} + q_k^{(0)} - \hat{e}_{M,k-1} \quad (1 \leq k \leq m), \quad (19)$$

$$\hat{e}_{M-1,k-1} = \frac{e_{M-1,k-1} q_k^{(1)}}{q_{k-1}^{(2)}} \quad (2 \leq k \leq m), \quad (20)$$

$$q_k^{(2)} = e_{M-1,k} + q_k^{(1)} - \hat{e}_{M-1,k-1} \quad (1 \leq k \leq m), \quad (21)$$

⋮

$$\hat{e}_{1,k-1} = \frac{e_{1,k-1} q_k^{(M-1)}}{q_{k-1}^{(M)}} \quad (2 \leq k \leq m), \quad (22)$$

$$q_k^{(M)} = e_{1,k} + q_k^{(M-1)} - \hat{e}_{1,k-1} \quad (1 \leq k \leq m). \quad (23)$$

ただし,

$$\hat{e}_{M,0} = \hat{e}_{M-1,0} = \cdots = \hat{e}_{1,0} = 0 \quad (24)$$

と定義する. さらに, 式 (16) において, 両辺は下 3 重対角行列であるが, 第 $(k+2, k)$ 要素は両辺とも 1 であることに注意し, 両辺の第 (k, k) 要素どうし, 第 $(k+1, k)$ 要素どうしを等置すると次の式が得られる.

$$\hat{q}_k = \frac{q_k q_k^{(M)}}{q_k^{(0)}} \quad (1 \leq k \leq m), \quad (25)$$

$$q_{k+1}^{(0)} = q_{k+1} + q_k^{(M)} - \hat{q}_k \quad (1 \leq k \leq m-1). \quad (26)$$

式 (18) ~ (23), (25), (26) より, 初期条件が (17) のように与えられれば, 後はこれらの漸化式のみを用いて $\hat{R}_M, L^{(1)}, \dots, \hat{R}_1, L^{(M)}, \hat{L}, L^{(0)}$ を 1 要素ずつ計算していけることがわかる.

さらに, 式 (13) ~ (15) は dqd 法を使うことで減算なしで実行でき, 式 (16) は高精度なアルゴリズムとして知られる dstqds 法 [9] の変型版を用いて実行できる. このアルゴリズムを, シフト付き **multiple dqd 法** と呼ぶ. シフト付き multiple dqd 法の 1 ステップを Algorithm 1 に示す.

[Algorithm 1: shifted multiple dqd algorithm]

```

1:  $d_1^{(0)} = -s$ 
2:  $q_1^{(0)} = d_1^{(0)} + q_1$ 
3:  $d_1^{(1)} = q_1^{(0)}$ 
4:  $q_1^{(1)} = d_1^{(1)} + e_{M,1}$ 
5:  $d_1^{(2)} = q_1^{(1)}$ 
6:  $q_1^{(2)} = d_1^{(2)} + e_{M-1,1}$ 
7:  $\vdots$ 
8:  $d_1^{(M)} = q_1^{(M-1)}$ 
9:  $q_1^{(M)} = d_1^{(M)} + e_{1,1}$ 
10: for  $k = 2, m$  do
11:  $\hat{q}_{k-1} = q_{k-1} q_{k-1}^{(M)} / q_{k-1}^{(0)}$ 
12:  $d_k^{(0)} = d_{k-1}^{(0)} q_{k-1}^{(M)} / q_{k-1}^{(0)}$ 

```

```

13:  $q_k^{(0)} = d_k^{(0)} + q_k$ 
14:  $\hat{e}_{M,k-1} = e_{M,k-1} q_k^{(0)} / q_{k-1}^{(1)}$ 
15:  $d_k^{(1)} = q_k^{(0)} d_{k-1}^{(1)} / q_{k-1}^{(1)}$ 
16:  $q_k^{(1)} = d_k^{(1)} + e_{M,k}$ 
17:  $\hat{e}_{M-1,k-1} = e_{M-1,k-1} q_k^{(1)} / q_{k-1}^{(2)}$ 
18:  $d_k^{(2)} = q_k^{(1)} d_{k-1}^{(2)} / q_{k-1}^{(2)}$ 
19:  $q_k^{(2)} = d_k^{(2)} + e_{M-1,k}$ 
20:  $\vdots$ 
21:  $\hat{e}_{1,k-1} = e_{1,k-1} q_k^{(M-1)} / q_{k-1}^{(M)}$ 
22:  $d_k^{(M)} = q_k^{(M-1)} d_{k-1}^{(M)} / q_{k-1}^{(M)}$ 
23:  $q_k^{(M)} = d_k^{(M)} + e_{1,k}$ 
24: end for
25:  $\hat{q}_m = q_m q_m^{(M)} / q_m^{(0)}$ 

```

以上では式 (2) のように書ける行列に対してアルゴリズムを導出した. 一方, $\bar{L}_i$ ($i = 1, \dots, M$) を対角要素が正で下側副対角要素が 1 の下 2 重対角行列, $\bar{R}$ を対角要素が 1 で上側副対角要素が正の上 2 重対角行列とすると, これらを用いて

$$\bar{A} = \bar{L}_1 \bar{L}_2 \cdots \bar{L}_M \bar{R} \quad (27)$$

と書ける行列に対しても、類似の方法でシフト付き multiple dqd 法を構成できる。なお、 A と $\bar{A}$ とは単なる転置の関係にはなっていないことに注意する。 $L, R_1, \dots, R_M$ に対してシフト s のシフト付き multiple dqd 法を適用して $\hat{L}, \hat{R}_1, \dots, \hat{R}_M$ を得る写像を $\phi_s^{(1)}$ 、 $\bar{L}_1, \dots, \bar{L}_M, \bar{R}$ に対してシフト s のシフト付き multiple dqd 法を適用して $\bar{\hat{L}}_1, \dots, \bar{\hat{L}}_M, \bar{\hat{R}}$ を得る写像を $\phi_s^{(2)}$ とする。このとき、 M 個の下 2 重対角行列と 1 個の上 2 重対角行列の集合から 1 個の下 2 重対角行列と M 個の上 2 重対角行列の集合への写像 ψ で、前述の条件を満たす任意の $\bar{L}_1, \dots, \bar{L}_M, \bar{R}$ に対して

$$\psi \left(\phi_s^{(2)} (\bar{L}_1, \dots, \bar{L}_M, \bar{R}) \right) = \phi_1^{(s)} (\psi (\bar{L}_1, \dots, \bar{L}_M, \bar{R})) \quad (28)$$

が成り立つような写像が存在することが示せる [6][15].

4 dhLV アルゴリズム, dhToda アルゴリズムとの関係

式 (13) ~ (15), (16) は、変数の書き換えを行うと、実は離散ハングリーロトカ・ボルテラ系 (dhLV 系) による固有値計算アルゴリズム [3][4] の漸化式と等価であることが示せる。以下、これを示す。

まず、変数名を次のように書き換える。

$$\bar{U}_{(k-1)(M+1)+1}^{(n)} = q_k, \quad (29)$$

$$\bar{U}_{(k-1)(M+1)+i+1}^{(n)} = c_{M-i+1,k}, \quad (30)$$

$$\bar{U}_{(k-1)(M+1)+1}^{(n+1)} = \hat{q}_k, \quad (31)$$

$$\bar{U}_{(k-1)(M+1)+i+1}^{(n+1)} = \hat{c}_{M-i+1,k}, \quad (32)$$

$$\bar{V}_{(k-1)(M+1)+1}^{(n)} = q_k^{(0)}, \quad (33)$$

$$\bar{V}_{(k-1)(M+1)+i+1}^{(n)} = q_k^{(i)}, \quad (34)$$

$$\frac{1}{\delta^{(n)}} = -s. \quad (35)$$

すると、式 (18) ~ (23), (25), (26) は次のようになる。

$$\bar{U}_{(k-2)(M+1)+2}^{(n+1)} = \frac{\bar{U}_{(k-2)(M+1)+2}^{(n)} \bar{V}_{(k-1)(M+1)+1}^{(n)}}{\bar{V}_{(k-2)(M+1)+2}^{(n)}}, \quad (36)$$

$$\bar{V}_{(k-1)(M+1)+2}^{(n)} = \bar{U}_{(k-1)(M+1)+2}^{(n)} + \bar{V}_{(k-1)(M+1)+1}^{(n)} - \bar{U}_{(k-2)(M+1)+2}^{(n+1)}, \quad (37)$$

$$\bar{U}_{(k-2)(M+1)+3}^{(n+1)} = \frac{\bar{U}_{(k-2)(M+1)+3}^{(n)} \bar{V}_{(k-1)(M+1)+2}^{(n)}}{\bar{V}_{(k-2)(M+1)+3}^{(n)}}, \quad (38)$$

$$\bar{V}_{(k-1)(M+1)+3}^{(n)} = \bar{U}_{(k-1)(M+1)+3}^{(n)} + \bar{V}_{(k-1)(M+1)+2}^{(n)} - \bar{U}_{(k-2)(M+1)+3}^{(n+1)}, \quad (39)$$

$\vdots$

$$\bar{U}_{(k-1)(M+1)}^{(n+1)} = \frac{\bar{U}_{(k-1)(M+1)}^{(n)} \bar{V}_{(k-1)(M+1)+M}^{(n)}}{\bar{V}_{(k-1)(M+1)}^{(n)}}, \quad (40)$$

$$\bar{V}_{k(M+1)}^{(n)} = \bar{U}_{k(M+1)}^{(n)} + \bar{V}_{(k-1)(M+1)+M}^{(n)} - \bar{U}_{(k-1)(M+1)}^{(n+1)}, \quad (41)$$

$$\bar{U}_{(k-1)(M+1)+1}^{(n+1)} = \frac{\bar{U}_{(k-1)(M+1)+1}^{(n)} \bar{V}_{k(M+1)}^{(n)}}{\bar{V}_{(k-1)(M+1)+1}^{(n)}}, \quad (42)$$

$$\bar{V}_{k(M+1)+1}^{(n)} = \bar{U}_{k(M+1)+1}^{(n)} + \bar{V}_{k(M+1)}^{(n)} - \bar{U}_{(k-1)(M+1)+1}^{(n+1)}. \quad (43)$$

ただし、式 (36) ~ (43) における k の範囲は、それぞれ式 (18) ~ (26) (式 (24) は除く) における k の範囲

と同じである。また、式 (17), (24) に対応して、

$$\bar{V}_1^{(n)} = q_1 + \frac{1}{\delta^{(n)}}, \quad (44)$$

$$\bar{U}_{-M+1}^{(n+1)} = \bar{U}_{-M+2}^{(n+1)} = \cdots = \bar{U}_0^{(n+1)} = 0 \quad (45)$$

と定義する。

ここでさらに書き換えを行う。式 (36), (38), (40), (42) は同じ式で k をずらしたものに過ぎず、式 (37), (39), (41), (43) も同様であることに注意してこれらの式をまとめ、さらに後者の式の右辺第 3 項に前者の式を代入すると、

$$\bar{V}_k^{(n)} = \bar{U}_k^{(n)} + \bar{V}_{k-1}^{(n)} - \frac{\bar{U}_{k-M-1}^{(n)} \bar{V}_{k-1}^{(n)}}{\bar{V}_{k-M-1}^{(n)}}, \quad (46)$$

$$\bar{U}_k^{(n+1)} = \frac{\bar{U}_k^{(n)} \bar{V}_{k+M}^{(n)}}{\bar{V}_k^{(n)}}. \quad (47)$$

ここで、

$$\bar{V}_{-M}^{(n)} = \bar{V}_{-M+1}^{(n)} = \cdots = \bar{V}_0^{(n)} = \frac{1}{\delta^{(n)}}, \quad (48)$$

$$\bar{U}_{-M}^{(n)} = \bar{U}_{-M+1}^{(n)} = \cdots = \bar{U}_0^{(n)} = 0 \quad (49)$$

とおくと、式 (44), (45) と等価な条件が得られる。 k の範囲は、式 (46) が $1 \leq k \leq m(M+1)$ 、式 (47) が $1 \leq k \leq (m-1)(M+1)+1$ である。式 (46) ~ (49) は [3] で与えられた dhLV 系による固有値計算アルゴリズムにおいて、 $V_k^{(n)} = \delta^{(n)} \bar{V}_k^{(n)}$ 、 $U_k^{(n)} = \bar{U}_k^{(n)}$ 、 $U_k^{(n+1)} = \bar{U}_k^{(n+1)}$ とした式と同じである。したがって、前節のアルゴリズムは dhLV 系による固有値計算アルゴリズムと等価である。ただし、dhLV 系では $\delta^{(n)}$ は差分間隔という意味を持ち、正に取るのが自然であるのに対し、シフト付き multiple dqd 法では収束加速のために $s = -1/\delta^{(n)}$ を正に取っている点が大きく異なる。後者の場合にも、 s を A の最小固有値より小さく取れば、変数の正値性が保たれることを保証するのが定理 1 である。

一方、前節最後に述べた $\bar{A}$ に対するシフト付き multiple dqd 法は、離散ハングリー戸田方程式 (dhToda 方程式) による固有値計算アルゴリズム [5] にシフトを導入したものと等価になる。そこで、式 (28) を用いると、dhToda 系のある状態から 1 ステップ分の時間発展を行い、それを ψ によって dhLV 系に写像して得られる状態は、dhToda 系の同じ状態を ψ によって dhLV 系に写像し、それを 1 ステップ分時間発展させて得られる状態と同じになることがわかる。これは、写像 ψ が dhToda 系から dhLV 系への Bäcklund 変換であることを意味する [6][15]。このような Bäcklund 変換は、これまで知られていなかったものであり、可積分系の研究においても有用であると期待される。

References

- [1] K. Aishima, T. Matsuo, K. Murota and M. Sugihara: On convergence of the dqds algorithm for singular value computation, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 30, No. 2, pp. 522-537 (2008).
- [2] K. Fernando and B. N. Parlett: Accurate singular values and differential qd algorithms, *Numerische Mathematik*, Vol. 67, No. 2, pp. 191-229 (1994).
- [3] 福田亜希子, 石渡恵美子, 岩崎雅史, 中村佳正: 離散ハングリーロトカ・ボルテラ系による固有多項式の数値的因数分解, 日本応用数理学会論文誌, Vol. 18, No. 3, pp. 409-425 (2009).
- [4] A. Fukuda, E. Ishiwata, M. Iwasaki and Y. Nakamura: The discrete hungry Lotka-Volterra system and a new algorithm for computing matrix eigenvalues, *Inverse Problems*, Vol. 25, pp. 1-17 (2009).
- [5] A. Fukuda, E. Ishiwata, Y. Yamamoto, M. Iwasaki and Y. Nakamura: The discrete hungry integrable systems and their related algorithms, submitted.

- [6] A. Fukuda, Y. Yamamoto, E. Ishiwata, M. Iwasaki and Y. Nakamura: A Bäcklund transformation between two integrable discrete hungry systems, to appear in *Physics Letters A*.
- [7] P. Koev: Accurate eigenvalues and SVDs of totally nonnegative matrices, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, Vol. 27, No. 1, pp. 1–23 (2005).
- [8] C. -K. Li and R. Mathias: Interlacing inequalities for totally nonnegative matrices, *Linear Algebra Appl.*, Vol. 341, No. 1, pp. 35–44 (2002).
- [9] B. N. Parlett: The new qd algorithms, *Acta Numerica*, 1995, pp. 459–491.
- [10] 杉原正顯, 室田一雄, 線形計算の数理, 岩波書店, 2009.
- [11] J. H. Wilkinson, *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Oxford University Press, 1965.
- [12] 山本有作, 深谷猛: Totally Nonnegative な帯行列に対する qd 法, 第 38 回数値解析シンポジウム予稿集, 2009, pp. 83–86.
- [13] Y. Yamamoto and T. Fukaya: Differential qd algorithm for totally nonnegative band matrices: convergence properties and error analysis, to appear in *JSIAM Letters*, Vol. 1, pp. 56–59 (2009).
- [14] Y. Yamamoto and T. Fukaya: Differential qd algorithm for totally nonnegative Hessenberg matrices: introduction of origin shifts and relationship with the discrete hungry Lotka-Volterra system, *JSIAM Letters*, Vol. 2, pp. 69–72 (2010).
- [15] Y. Yamamoto, A. Fukuda, M. Iwasaki, E. Ishiwata and Y. Nakamura: On a variable transformation between two integrable systems: the discrete hungry Toda equation and the discrete hungry Lotka-Volterra system, *Proceedings of ICNAAM 2010*, pp. 2045–2048, 2010.