

無限コンパクト複素対称三重対角行列の固有値問題

筑波大学 電子・情報工学系 池辺八洲彦 (Yasuhiko Ikebe)

浅井信吉 (Nibuyoshi Asai)

原田稔 (Minoru Harada)

高梨宏一 (Kouichi Takanashi)

菊池靖 (Yasushi Kikuchi)

蔡東生 (DongSheng Cai)

無限複素対称三重対角行列 A の単純固有値の近似計算問題を考える. ただし A は複素ヒルベルト空間 l^2 内でコンパクト作用素を表すものとする. コンパクト性を保証するための必要十分条件は, よく知られているように, 上位対角成分, 主対角成分, 下位対角成分が, いずれも 0 に収束することである. 近似固有値としては n 次主座小行列 ($n = 1, 2, \dots$) の適当な固有値をとる. 特殊関数への応用を考慮して, 固有ベクトルの成分の挙動に関するいくつかの条件をつけ加えた結果, 不等式ではなく, 等式の形で一般的な誤差評価式を導くことができた. これは数値解析において珍しい例に属する. その応用例として, 正則クーロン波動関数の零点, 極大点, 極小点, ベッセル関数の零点の計算問題を論ずる.

定理 1[3, Theorem 1.4]: 複素対称三重対角行列

$$(1) \quad A = \begin{bmatrix} d_1 & f_2 & & 0 \\ f_2 & d_2 & f_3 & \\ & f_3 & d_3 & \ddots \\ 0 & & \ddots & \ddots \end{bmatrix},$$

ただし $d_k \rightarrow 0, f_k \rightarrow 0 (k \rightarrow \infty), f_k \neq 0 (k = 2, 3, \dots)$,

が与えられているものとする. そして $\tilde{A}_n$ を A の n 次主座小行列とし, $A_n = \begin{bmatrix} \tilde{A}_n & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ ($n = 1, 2, \dots$) とする. また λ を A の単純固有値とし, $\lambda_n \rightarrow \lambda$ を満たす $\tilde{A}_n$ の固有値の列 $\{\lambda_n\}$ をとる. (λ_n の存在は, 前述の仮定と [4, Theorem 18.1] により保証される.) ここで次の仮定を置く.

- a. $x = [x^{(1)}, x^{(2)}, \dots]^T$ を λ に対応する固有ベクトルとすると $x^T x \neq 0$
- b. 十分大きな全ての n ($n \geq n_0$) に対して $x^{(n)} \neq 0$ かつ $x^{(n+1)}/x^{(n)}$ が有界である.

以上に述べた仮定のもとで、次の評価式が成り立つ.

$$(2) \quad \lambda - \lambda_n = \frac{f_{n+1} x^{(n)} x^{(n+1)}}{x^T x} (1 + o(1)) \quad (n \rightarrow \infty)$$

コメント : [3, Theorem 1.4] 中では条件 $\|A_n - A\| \rightarrow 0$ が陽に仮定されているが、実は、この条件は常に成立することを示すことができる. ゆえにこの条件は上の定理の仮定から削除してある.

A が無限実対称三重対角行列であるときは、固有ベクトルからなる正規直交基底の存在性 [5, p.228] よりこの誤差評価式を導びけることはよく知られている. 本定理の意義は、実行列の場合に導くことができたこの誤差評価式を、別のアプローチで複素行列の場合にも導き出せることを示したところにある.

応用例 1: 非負整数 L と実数 η が与えられているときの正則クーロン波動関数 $F_L(\eta, \rho)$ の零点計算問題を考える. この問題は以下に示す無限コンパクト実対称三重対角行列 $T_{L, \eta}$ の固有値問題として再定式化される. すなわち $\rho \neq 0$ が $F_L(\eta, \rho)$ の零点であるための必要十分条件は、 $1/\rho$ が $T_{L, \eta}$ の固有値であることである [1].

$$(3) \quad T_{L, \eta} = \begin{bmatrix} -\eta d_{L+1} & e_{L+1} & & 0 \\ e_{L+1} & -\eta d_{L+2} & e_{L+2} & \\ & e_{L+2} & -\eta d_{L+3} & \ddots \\ 0 & & \ddots & \ddots \end{bmatrix},$$

$$d_k = \frac{1}{k(k+1)} \rightarrow 0,$$

$$e_k = \frac{1}{k+1} \sqrt{\frac{(k+1)^2 + \eta^2}{(2k+1)(2k+3)}} \rightarrow 0.$$

また、固有ベクトル $\varphi(\rho)$ の形は定数倍を除いて一意に定まり、 $\varphi(\rho) = [W_{L+1}, W_{L+2}, \dots]^T \in l^2$, $W_k = \sqrt{2k+1} F_k(\eta, \rho)$ で与えられる [2].

定理 1 を適用するために, (1) $A \equiv T_{L,\eta}$ の固有値が全て単純である (すなわち, どの固有値に対しても固有ベクトルは定数倍を除いて一意に定まり, かつ二階一般固有ベクトルは存在しない), (2) 定理 1 中の条件 (a), (b) を満足する, ことを示すことができる. 定理 1 をこの問題に適用すると, $\lambda = 1/\rho$, $\lambda_n = 1/\rho_n$ であるので, 相対誤差の予測値として次式が得られる,

$$(4) \quad \frac{\rho_n - \rho}{\rho} = \rho \cdot (\lambda - \lambda_n)(1 + o(1)) \\ = \rho \cdot \frac{1}{\varphi^T \varphi} \cdot \frac{\sqrt{(L+n+1)^2 + \eta^2}}{L+n+1} F_{L+n}(\rho) F_{L+n+1}(\rho)(1 + o(1))$$

表 1, 2 は $F_5(5, \rho)$ の零点のうち, 原点から数えて 1 番目と 5 番目の零点に対する近似値の収束について, 相対誤差の実測値と予測値を比較したものである.

応用例 2: $F_L(\eta, \rho)$ の極大, 極小点 ρ を求める問題は, $F_L(\eta, \rho)$ の 1 階微分の零点を求めればよい. $F_L(\eta, \rho)$ の零点計算と同様に, 下に示す無限コンパクト実対称三重対角行列 $\tilde{T}_{L,\eta}$ の固有値問題として再定式化される. すなわち, ρ が $F_L(\eta, \rho)$ の極大または極小点であるための必要十分条件は, $1/\rho$ が $\tilde{T}_{L,\eta}$ の固有値であることである [2].

$$(5) \quad \tilde{T}_{L,\eta} = \left[\begin{array}{c|ccc} \frac{-\eta}{(L+1)^2} & \sqrt{\frac{2L+1}{L+1}} e_L & 0 & \cdots \\ \hline \sqrt{\frac{2L+1}{L+1}} e_L & & & \\ 0 & & T_{L,\eta} & \\ \vdots & & & \end{array} \right]$$

この場合にも固有ベクトル $\tilde{\varphi}(\rho)$ の形は定数倍を除いて一意に定まり,

$$(6) \quad \tilde{\varphi}(\rho) = \left[\sqrt{\frac{L+1}{2L+1}} W_L, W_{L+1}, W_{L+2}, \dots \right]^T = \left[\sqrt{\frac{L+1}{2L+1}} W_L \mid \varphi(\rho)^T \right]^T \in l^2$$

である [2].

$A \equiv \tilde{T}_{L,\eta}$ が応用例 1 のときと同様の条件を満足することを示すことができるので, 定理 1 をこの問題に適用することができる. $\lambda = 1/\rho$, $\lambda_n = 1/\rho_n$ であるので, 近似極大, 極小点 ρ_n

の相対誤差の予測値として次式が得られる.

$$(7) \quad \frac{\rho_n - \rho}{\rho} = \rho \cdot (\lambda - \lambda_n)(1 + o(1)) \\ = \rho \cdot \frac{1}{\tilde{\varphi}^T \tilde{\varphi}} \cdot \frac{\sqrt{(L+n)^2 + \eta^2}}{L+n} F_{L+n-1}(\eta, \rho) F_{L+n}(\eta, \rho) (1 + o(1))$$

表 3, 4 は $dF_5(5, \rho)/d\rho$ の零点のうち, 原点から数えて 1 番目と 5 番目の零点に対する近似値の収束について, 相対誤差の実測値と予測値を比較したものである.

これら 2 つの応用例に現れた行列は, 無限実対称三重対角行列であり, 必ずしも複素にまで拡張した本定理を適用しなくても, それぞれ同じ誤差評価式が得られる. しかし, 次のベッセル関数 $J_m(z)$, (m : 実数) の零点計算に現れる行列は無限複素対称三重対角行列であり, 本定理でなければ誤差評価のできない例である.

応用例 3[3]: ベッセル関数 $J_m(z)$ の零点計算を考える. ここに $-\infty < m < \infty$, $m \neq -1, -2, \dots$ である. この問題は下の無限コンパクト複素対称三重対角行列 A の固有値問題として再定式化される. すなわち z が $J_m(z)$ の零点であるための必要十分条件は, $4/z^2$ が A の固有値であることである [1].

$$(8) \quad A = \begin{bmatrix} d_1 & f_2 & & 0 \\ f_2 & d_2 & f_3 & \\ & f_3 & d_3 & \ddots \\ 0 & & \ddots & \ddots \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} d_k &= \frac{2}{(\alpha_k - 1)(\alpha_k + 1)}, \quad k = 1, 2, \dots \\ f_k &= \frac{1}{(\alpha_k - 1)\sqrt{(\alpha_k - 2)}\sqrt{\alpha_k}}, \quad k = 2, 3, \dots \\ \alpha_k &= m + 2k, \quad k = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

ここに A は $m > -2$ のとき実行列であるが, $m < -2$ のときは f_j ($j = \lceil -m/2 \rceil$) が複素数になり, 複素行列になる. この場合も固有ベクトル x は定数倍を除いて一意に定まり,

$$(9) \quad x = [\sqrt{m+2}J_{m+2}(z), \sqrt{m+4}J_{m+4}(z), \dots]^T \in l^2$$

である. A が先の 2 例と同様の条件を満たすことを示すことができるので, 定理をこの問題に適用することができる. $\lambda = 4/z^2$, $\lambda_n = 4/z_n^2$ であるので, 近似零点の相対誤差の予測値としては次式が得られ, 数値的にもその精密さは [3] 中で確かめられている.

$$(10) \quad \frac{z_n - z}{z} = \frac{z^2}{8} \cdot (\lambda - \lambda_n)(1 + o(1)) = \frac{J_{m+2n}(z)J_{m+2n+2}(z)}{2J_{m+1}^2(z)(m+2n+1)}(1 + o(1))$$

表 5, 6 は $J_{-7.25}(z)$ の零点の原点に 1 番近いものと $J_{-9.25}(z)$ の零点のうち原点から 5 番目の零点に対する近似値の収束について, 相対誤差の実測値と予測値を比較したものである. また [3] 中では $J_0(z) - iJ_1(z)$ の零点計算についても, 無限複素対称三重対角行列の固有値問題として再定式化を行い, この定理を適用した結果, 非常に精密な誤差評価式が得られている.

応用例に対する考察: 応用例 3 では近似零点の相対誤差の予測値と実測値は, その値が 2 ~ 3 桁も一致していることを数値的に確認できるが, 応用例 1, 2 ではそれほどには一致していない. このことについて考察する. 近似固有値の誤差評価式は, $\lambda - \lambda_n = (\lambda - \mu_n) + (\mu_n - \lambda_n)$ と分解して, 右辺の第 1 項と第 2 項を別々に評価し, n を十分大きくとれば第 2 項は第 1 項にくらべて無視できるほど小さくなることを示すために $\left| \frac{\mu_n - \lambda}{\lambda - \mu_n} \right|$ の上限を考える:

$$(11) \quad \left| \frac{\mu_n - \lambda}{\lambda - \mu_n} \right| \leq \frac{|f_{n+1}x^{(n+1)}|}{|x^{(n)}|} \|(A - \lambda I)^{-1}\|_S (1 + o(1)).$$

するとこの右辺は定理の条件から確かに 0 に収束する. しかし $|f_{n+1}|$ の 0 への収束がおそく, $\left| \frac{x^{(n+1)}}{x^{(n)}} \right|$ が小さくなく, また, $\|(A - \lambda I)^{-1}\|_S$ が大きいといった理由により全体として (11) の収束がおそいということが考えられ, そのような場合, 計算結果を出力した n の範囲では $\mu_n - \lambda_n$ を無視できない可能性がある. そこで応用例 1 の場合に実際に $\frac{\mu_n - \lambda_n}{\lambda - \mu_n}$ を計算した (表 7). $\mu_n - \lambda_n$ は $\lambda - \mu_n$ にくらべ, 1 割程度の大きさであるところも見られるが, その大きさは順に小さくなっていることが分かる. 実際, 近似零点が 4 倍精度いっぱいの精度まで収束する間に, 相対誤差の予測値は実測値に確かに近づいている.

まとめ

1. 無限コンパクト複素対称三重対角行列 A の近似固有値に対する誤差評価式を理論的に導き出すことができた.
2. この誤差評価式の精密さは応用例からも確認できた.

参考文献

- [1] J. Grad and E. Zakrajšek, Method for Evaluation of Zeros of Bessel Functions, *J. Inst. Maths. Applics*, 11:57–72 (1973).
- [2] Y. Ikebe, The Zeros of Regular Coulomb Wave Functions and of Their Derivatives, *Math. Comp.*, 29:878–887 (1975).
- [3] Y. Ikebe, Y. Kikuchi, I. Fujishiro, N. Asai, K. Takanashi and M. Harada, The Eigenvalue Problem for Infinite Compact Complex Symmetric Matrices with Application to the Numerical Computation of Complex Zeors of $J_0(z) - iJ_1(z) = 0$ and of Bessel Functions $J_m(z)$ of Any Real Order m . To appear.
- [4] M. A. Krasnosel'skii, G. M. Vainikko, P. P. Zabreiko, Ya. B. Rutitskii and V. Ya. Stetsenko, *Approximate Solution of Operator Equations*, Wolters-Noordhoff, Groningen, 1972. English Translation.
- [5] F. Riesz, B. Sz. Nagy, Functional Analysis, Frederick Ungar Publishing Co., 1955. English Translation.
- [6] G. N. Watoson, *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*, Cambridge Univ. Press, 1944.

表 1: $F_5(5.0, \rho)$ の 1 番目の零点の収束状況

真の零点 = 18.00546022945859742416159206211768

行列の次数	近似零点	相対誤差	
		実測値	予測値
20	18.00546023079404008016286706808850	0.742E-10	0.845E-10
21	18.00546022960947550842959750248847	0.838E-11	0.945E-11
22	18.00546022947442243383869958757627	0.879E-12	0.982E-12
23	18.00546022946014264085983915509521	0.858E-13	0.951E-13
24	18.00546022945873824873186946433151	0.782E-14	0.861E-14
25	18.00546022945860943143556284530519	0.667E-15	0.729E-15
26	18.00546022945859838410948728091500	0.533E-16	0.579E-16
27	18.00546022945859749626961295527100	0.400E-17	0.433E-17
28	18.00546022945859742926064505625907	0.283E-18	0.305E-18
29	18.00546022945859742450164821282215	0.189E-19	0.202E-19
30	18.00546022945859742418301627141995	0.119E-20	0.127E-20
31	18.00546022945859742416286922724038	0.709E-22	0.754E-22
32	18.00546022945859742416166421161588	0.401E-23	0.425E-23
33	18.00546022945859742416159593009371	0.215E-24	0.227E-24
34	18.00546022945859742416159225917203	0.109E-25	0.115E-25
35	18.00546022945859742416159207167005	0.531E-27	0.558E-27
36	18.00546022945859742416159206255900	0.245E-28	0.257E-28
37	18.00546022945859742416159206213741	0.110E-29	0.113E-29

表 2: $F_5(5.0, \rho)$ の 5 番目の零点の収束状況

真の零点 = 34.83493631442577902935805434310459

行列の次数	近似零点	相対誤差	
		実測値	予測値
30	34.83730861107096816158747213625496	0.364E-02	0.665E-02
31	34.83565522906775659965516059547662	0.156E-02	0.270E-02
32	34.83513760134949377436739676433101	0.607E-03	0.991E-03
33	34.83498863820246794305881540245866	0.215E-03	0.333E-03
34	34.83494899623791873834637725982513	0.695E-04	0.103E-03
35	34.83493919087585993065538886678591	0.206E-04	0.292E-04
36	34.83493692692108386176943669445102	0.562E-05	0.773E-05
37	34.83493643720436973773535717575194	0.142E-05	0.190E-05
38	34.83493633765219443626204652749278	0.335E-06	0.438E-06
39	34.83493631858140088896936111790874	0.736E-07	0.944E-07
40	34.83493631513038695813960667551966	0.152E-07	0.191E-07
41	34.83493631453920272019437229538459	0.294E-08	0.364E-08
42	34.83493631444314211994465287477573	0.536E-09	0.656E-09
43	34.83493631442831056350489565511447	0.924E-10	0.112E-09
44	34.83493631442613106938745668344667	0.151E-10	0.180E-10
45	34.83493631442582578426909333965810	0.233E-11	0.275E-11
46	34.83493631442578496717923455559438	0.342E-12	0.401E-12
47	34.83493631442577975128940354771141	0.477E-13	0.555E-13
48	34.83493631442577911347969524384054	0.635E-14	0.732E-14
49	34.83493631442577903876199016725139	0.806E-15	0.923E-15
50	34.83493631442577903036759580095655	0.976E-16	0.111E-15
51	34.83493631442577902946222644042411	0.113E-16	0.128E-16
52	34.83493631442577902936839554892647	0.126E-17	0.141E-17
53	34.83493631442577902935904277002608	0.134E-18	0.149E-18
54	34.83493631442577902935814537958340	0.136E-19	0.152E-19
55	34.83493631442577902935806242869744	0.133E-20	0.148E-20
56	34.83493631442577902935805503612698	0.126E-21	0.139E-21
57	34.83493631442577902935805440046553	0.114E-22	0.125E-22
58	34.83493631442577902935805434769197	0.992E-24	0.109E-23
59	34.83493631442577902935805434345943	0.834E-25	0.910E-25

表 3: $dF_5(5.0, \rho)/d\rho$ の 1 番目の零点の収束状況 $dF_5(5.0, \rho)/d\rho$ の 1 番目の零点の収束状況

真の零点 = 14.82785710220326646242871600729115

行列の次数	近似零点	相対誤差	
		実測値	予測値
15	14.82785727224139272696073331595522	0.115E-07	0.132E-07
16	14.82785712288852660458875283838734	0.140E-08	0.159E-08
17	14.82785710449984587445301689194688	0.155E-09	0.174E-09
18	14.82785710243691097048876500168807	0.158E-10	0.175E-10
19	14.82785710222512777162789431575818	0.147E-11	0.163E-11
20	14.82785710220515403230963092733724	0.127E-12	0.139E-12
21	14.82785710220341732458626997172656	0.102E-13	0.111E-13
22	14.82785710220327765553231616864633	0.755E-15	0.815E-15
23	14.82785710220326723540516359607588	0.521E-16	0.560E-16
24	14.82785710220326651223681648103782	0.336E-17	0.359E-17
25	14.82785710220326646543031249938329	0.202E-18	0.215E-18
26	14.82785710220326646259825094371959	0.114E-19	0.121E-19
27	14.82785710220326646243770887376126	0.606E-21	0.640E-21
28	14.82785710220326646242916484929810	0.303E-22	0.319E-22
29	14.82785710220326646242873712375859	0.142E-23	0.149E-23
30	14.82785710220326646242871694531386	0.633E-25	0.662E-25

表 4: $dF_5(5.0, \rho)/d\rho$ の 5 番目の零点の収束状況

$dF_5(5.0, \rho)/d\rho$ の 5 番目の零点の収束状況
 真の零点 = 32.92248394450433713822754973548144

行列の次数	近似零点	相対誤差	
		実測値	予測値
30	32.92316165832926489542045390135262	0.206E-04	0.292E-04
31	32.92266900246179595061606909070301	0.562E-05	0.773E-05
32	32.92253076034774801286373930613642	0.142E-05	0.190E-05
33	32.92249496530952578957355860292131	0.335E-06	0.438E-06
34	32.92248636783911329605516390290883	0.736E-07	0.944E-07
35	32.92248444386386432002720949984369	0.152E-07	0.191E-07
36	32.92248404121067800043561343463996	0.294E-08	0.364E-08
37	32.92248396215002120495844263993237	0.536E-09	0.656E-09
38	32.92248394754487281338948241402623	0.924E-10	0.112E-09
39	32.92248394500010922363502370124667	0.151E-10	0.180E-10
40	32.92248394458097584748952144478187	0.233E-11	0.275E-11
41	32.92248394451558825086992461445481	0.342E-12	0.401E-12
42	32.92248394450590827323237925361033	0.477E-13	0.555E-13
43	32.92248394450454613607879707816778	0.635E-14	0.732E-14
44	32.92248394450436365838099429784369	0.806E-15	0.923E-15
45	32.92248394450434035242727250771787	0.976E-16	0.111E-15
46	32.92248394450433751075163327726835	0.113E-16	0.128E-16
47	32.92248394450433717956193510742099	0.126E-17	0.141E-17
48	32.92248394450433714262303855280446	0.134E-18	0.149E-18
49	32.92248394450433713867596354048104	0.136E-19	0.152E-19
50	32.92248394450433713827147772111459	0.133E-20	0.148E-20
51	32.92248394450433713823168580112888	0.126E-21	0.139E-21
52	32.92248394450433713822792435578704	0.114E-22	0.125E-22
53	32.92248394450433713822758240246830	0.992E-24	0.109E-23
54	32.92248394450433713822755248008975	0.834E-25	0.910E-25
55	32.92248394450433713822754995782736	0.675E-26	0.735E-26
56	32.92248394450433713822754975286216	0.528E-27	0.573E-27
57	32.92248394450433713822754973679351	0.399E-28	0.431E-28
58	32.92248394450433713822754973557718	0.291E-29	0.313E-29
59	32.92248394450433713822754973548804	0.201E-30	0.220E-30

表 7: $F_5(5.0, \rho)$ の 1 番目の零点の第 1 項と第 2 項の比

相対誤差		$(\mu_n - \lambda_n)/(\lambda - \mu_n)$
実測値	予測値	
0.742E-10	0.845E-10	-0.122E+00
0.838E-11	0.945E-11	-0.112E+00
0.879E-12	0.982E-12	-0.104E+00
0.858E-13	0.951E-13	-0.976E-01
0.782E-14	0.861E-14	-0.911E-01
0.667E-15	0.729E-15	-0.852E-01
0.533E-16	0.579E-16	-0.799E-01
0.400E-17	0.433E-17	-0.751E-01
0.283E-18	0.305E-18	-0.707E-01
0.189E-19	0.202E-19	-0.666E-01
0.119E-20	0.127E-20	-0.630E-01
0.709E-22	0.754E-22	-0.596E-01
0.401E-23	0.425E-23	-0.564E-01
0.215E-24	0.227E-24	-0.536E-01
0.109E-25	0.115E-25	-0.509E-01
0.531E-27	0.558E-27	-0.484E-01
0.245E-28	0.257E-28	-0.449E-01
0.110E-29	0.113E-29	-0.115E-01