

dqds 法の一般化固有値問題への拡張について

京都大学大学院情報学研究科 前田一貴[†]

Kazuki Maeda

Graduate School of Informatics, Kyoto University

概要

三重対角行列の固有値計算アルゴリズムである dqds 法を, 三重対角行列束の一般化固有値問題の場合へと拡張することを提案する. 提案アルゴリズムは, R_{II} 格子と呼ばれる非自励離散可積分系の十分に時間が経過した後の従属変数の値から所望の一般化固有値が計算できることを利用している. その可積分系としての性質を利用することで, 提案アルゴリズムの収束性についての議論を行う.

1 はじめに

dqds 法 [3] は与えられた正定値実対称三重対角行列の固有値, もしくは上二重対角行列の特異値を計算するための高精度・高速な反復アルゴリズムであり, 有名な線型計算ライブラリである LAPACK [6] にも DLASQ ルーチンとして実装され, 利用されている.

本研究では, dqds 法の離散可積分系としての側面, およびこの観点から見た (選点) 直交多項式との関係に着目する. 具体的には以下の通りである.

1. dqds 法の漸化式は, 非自励離散戸田格子と呼ばれる離散可積分系の時間発展方程式と同一である [4].
2. 非自励離散戸田格子は, 直交多項式のスペクトル変換の両立条件として得られる [9].

本稿での目標は, こうした dqds 法と直交多項式との関係を, 一般化固有値問題の場合へと拡張することである.

三重対角行列に対して, その固有値問題の特性多項式を考えると自然に直交多項式を定める三項間漸化式が現れる. 同様に, 三重対角行列束に対して, その一般化固有値問題の特性多項式を考えると, R_{II} 多項式 [5] と呼ばれるものが定まり, これに対するスペクトル変換を考えることができる. このスペクトル変換の両立条件として現れるのが R_{II} 格子 [10] であり, これを用いることで一般化固有値の計算が可能であることが示される.

[†] E-mail: kmaeda@amp.i.kyoto-u.ac.jp

2 直交多項式と dqds 法

本節では、直交多項式と dqds 法の関係について概説する。直交多項式についてより詳しく知りたい方は Chihara [1] などを参照のこと。

2.1 直交多項式の導入

次の形の N 次三重対角行列

$$B = \begin{pmatrix} u_0 & 1 & & & \\ w_1 & u_1 & 1 & & \\ & w_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & w_{N-1} & u_{N-1} \end{pmatrix}, \quad u_n \in \mathbb{R}, \quad w_n \in \mathbb{R} - \{0\}, \quad (2.1)$$

の固有値問題

$$B\phi = x\phi \quad (2.2)$$

から始める。 B の n 次主座小行列を B_n , n 次の単位行列を I_n で表し、多項式 $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots, \phi_N(x)$ を

$$\phi_0(x) := 1,$$

$$\phi_n(x) := \det(xI_n - B_n) = \begin{vmatrix} x - u_0 & -1 & & & \\ -w_1 & x - u_1 & -1 & & \\ & -w_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & -w_{n-1} & x - u_{n-1} \end{vmatrix}, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

で定める。上の行列式の n 行目での展開を考えると、 $\phi_n(x)$ が満たす三項間漸化式

$$\phi_{n+1}(x) = (x - u_n)\phi_n(x) - w_n\phi_{n-1}(x), \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad (2.3)$$

が得られる。ただし、 $\phi_{-1}(x) = 0$ とする。 $\mathbb{R}[x]$ 上の 2 つの N 次ベクトル

$$\phi(x) := \begin{pmatrix} \phi_0(x) \\ \phi_1(x) \\ \vdots \\ \phi_{N-1}(x) \end{pmatrix}, \quad \phi_N(x) := \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \phi_N(x) \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

を用いると、三項間漸化式 (2.3) は次のようにも書ける：

$$B\phi(x) + \phi_N(x) = x\phi(x).$$

したがって、 $\phi_N(x) = 0$ となる x 、すなわち特性多項式 $\phi_N(x) = 0$ となる x について、 $\phi(x)$ は固有値問題 (2.2) の固有ベクトルとなる。

三項間漸化式 (2.3) から、 $\phi_n(x)$ は n 次のモニック（最高次の係数が 1 の）多項式であることが直ちにわかる。さらに、 $\{\phi_n(x)\}_{n=0}^N$ に対して、次の関係式を満たす線型汎関数 $\mathcal{S} : \mathbb{R}[x] \rightarrow \mathbb{R}$ が存在する：直交関係式

$$\mathcal{S}[\phi_m(x)\phi_n(x)] = h_n\delta_{m,n}, \quad h_n \neq 0, \quad m, n = 0, 1, \dots, N-1, \quad \delta_{m,n}: \text{Kronecker delta}, \quad (2.5a)$$

および、任意の $\pi(x) \in \mathbb{R}[x]$ について

$$\mathcal{L}[\pi(x)\phi_N(x)] = 0. \quad (2.5b)$$

これより、 $\{\phi_n(x)\}_{n=0}^N$ を直交多項式 (orthogonal polynomials) と呼ぶ。逆に、ある線型汎関数 $\mathcal{L}$ について直交関係式 (2.5) を満たす多項式 $\phi_n(x)$ は三項間漸化式 (2.3) を満たすことも言える。なお、関係式 (2.5) は

$$\mathcal{L}[x^m \phi_n(x)] = h_n \delta_{m,n}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad m = 0, 1, \dots, n, \quad (2.6a)$$

$$\mathcal{L}[x^m \phi_N(x)] = 0, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.6b)$$

と同値であることに注意しておく（便利なので、以降はこちらを直交関係式として用いる）。また、三項間漸化式 (2.3) から

$$h_n = h_0 w_1 w_2 \dots w_n, \quad n = 0, 1, \dots, N-1,$$

となることが言える。

線型汎関数 $\mathcal{L}$ は具体的に次のように与えることができる。 $\mathcal{L}$ の m 次モーメントを

$$\mu_m := \mathcal{L}[x^m]$$

で定めると、 $\mathcal{L}$ の線型性より全ての次数のモーメントを具体的に与えることと $\mathcal{L}$ を具体的に与えることは同値となる。そこで、

$$\mathcal{L}[\phi_0(x)] = h_0 \neq 0, \quad (2.7a)$$

$$\mathcal{L}[\phi_n(x)] = 0, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad (2.7b)$$

$$\mathcal{L}[x^m \phi_N(x)] = 0, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.7c)$$

を満たすようにモーメントを順に定めれば直交関係式 (2.6) が満たされることが確認できる。ただし、 h_0 は任意に与えることができる定数^{*1}。このとき、モノック直交多項式 $\{\phi_n(x)\}_{n=0}^N$ は行列式を用いて

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\tau_n} \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{n-1} & \mu_n \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_n & \mu_{n+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \mu_{n-1} & \mu_n & \cdots & \mu_{2n-2} & \mu_{2n-1} \\ 1 & x & \cdots & x^{n-1} & x^n \end{vmatrix}, \quad n = 1, 2, \dots, N, \quad (2.8)$$

$$\tau_{-1} := 0, \quad \tau_0 := 1, \quad \tau_n := |\mu_{i+j}|_{0 \leq i, j \leq n-1} = \begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdots & \mu_{n-1} \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mu_{n-1} & \mu_n & \cdots & \mu_{2n-2} \end{vmatrix}, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

と書ける。実際にこれが $\mathcal{L}$ に関する n 次のモノック直交多項式となっていることは、関係式 (2.6) を満たすことから容易に確認できる。

なお、通常直交多項式と言った場合は $N = \infty$ であり、 $\mathcal{L}$ は一般に積分を用いて

$$\mathcal{L}[f(x)] = \int_{\Omega} f(x) \rho(x) dx$$

^{*1} h_0 をどう選んでも以下の議論には影響しない。これは、 h_0 を定数倍しても全てのモーメントが一斉に定数倍されるだけであり、この定数倍の差は最終的に約分で消えてしまうため。

と与えられる (Ω は適当な実軸上の区間, $\rho(x)$ は Ω 上で定義された重み関数). この場合には, Hermite 多項式, Laguerre 多項式, Jacobi 多項式といった古典直交多項式が包摂されている. 本稿で扱う $N < \infty$ の場合は**選点直交多項式** (discrete orthogonal polynomials) と呼ばれるものになることが知られている. すなわち, $x_0, x_1, \dots, x_{N-1}$ を $\phi_N(x)$ の零点として, これらが全て単純であるという仮定の下で^{*2}, 線型汎関数が離散的な重み関数で与えられる [7]:

$$\mathcal{L}[f(x)] = \sum_{i=0}^{N-1} c_i f(x_i), \quad (2.9)$$

$$c_i := \frac{h_{N-1}}{\phi_{N-1}(x_i) \phi'_N(x_i)}, \quad i = 0, 1, \dots, N-1.$$

ここで, $\phi'_N(x)$ は $\phi_N(x)$ の導関数である.

2.2 直交多項式のスペクトル変換と dqds 法

スペクトル変換の導入により, モニック直交多項式に離散時間 $t \in \mathbb{N}$ を導入する. 以降では, これにともなってここまでに導入した変数等に導入される離散時間 t を上付きの (t) で表すものとする.

モニック直交多項式 $\{\phi_n^{(t)}(x)\}_{n=0}^N$ に対して, 次の時刻の $\{\phi_n^{(t+1)}(x)\}_{n=0}^N$ を

$$\phi_n^{(t+1)}(x) := \frac{\phi_{n+1}^{(t)}(x) + q_n^{(t)} \phi_n^{(t)}(x)}{x - s^{(t)}}, \quad q_n^{(t)} := -\frac{\phi_{n+1}^{(t)}(s^{(t)})}{\phi_n^{(t)}(s^{(t)}), \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad (2.10)$$

$$\phi_N^{(t+1)}(x) := \phi_N^{(t)}(x),$$

で定める. ただし, $s^{(t)} \in \mathbb{R}$ は時刻 t にのみ依存するパラメータであり, 全ての $n = 1, 2, \dots, N$ について $\phi_n^{(t)}(s^{(t)}) \neq 0$ であるものを選ぶ. $q_n^{(t)}$ の定義から $\phi_{n+1}^{(t)}(x) + q_n^{(t)} \phi_n^{(t)}(x)$ は $x - s^{(t)}$ で割り切れることに注意すると, $\phi_n^{(t+1)}(x)$ は再び n 次のモニック多項式となっていることがわかる. さらに, 次の時刻の線型汎関数 $\mathcal{L}^{(t+1)}$ を

$$\mathcal{L}^{(t+1)}[f(x)] := \mathcal{L}^{(t)}[(x - s^{(t)})f(x)] \quad (2.11)$$

で定める. すると, $\{\phi_n^{(t+1)}(x)\}_{n=0}^N$ と $\mathcal{L}^{(t+1)}$ は直交関係式 (2.6) を満たすことが容易に確認できる. つまり, モニック直交多項式 $\{\phi_n^{(t)}(x)\}_{n=0}^N$ から新たなモニック直交多項式 $\{\phi_n^{(t+1)}(x)\}_{n=0}^N$ が得られたことになる. この操作を何度も繰り返すことにより, 次々と新しいモニック直交多項式を得ることができる.

新しく構成された $\{\phi_n^{(t+1)}(x)\}_{n=0}^N$ はモニック直交多項式であることから, 三項間漸化式 (2.3) を満たさなければならない. このことから, (2.10) の逆変換にあたる

$$\phi_n^{(t)}(x) = \phi_n^{(t+1)}(x) + e_n^{(t)} \phi_{n-1}^{(t+1)}(x), \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad (2.12)$$

も成立しなければならないことがわかる. ここで, $e_n^{(t)}$ は次の (2.10) と (2.12) の両立条件を満たす変数である:

$$u_n^{(t+1)} = q_n^{(t+1)} + e_n^{(t+1)} + s^{(t+1)} = q_n^{(t)} + e_{n+1}^{(t)} + s^{(t)}, \quad (2.13a)$$

^{*2} 重根がある場合についても, 合流操作を行うことで導出が可能である.

$$w_n^{(t+1)} = q_{n-1}^{(t+1)} e_n^{(t+1)} = q_n^{(t)} e_n^{(t)}. \quad (2.13b)$$

ただし、境界条件として、任意の $t \in \mathbb{N}$ に対して $e_0^{(t)} = e_N^{(t)} = 0$ を課す。これが非自励離散戸田格子 (nonautonomous discrete Toda lattice) の時間発展方程式となっている。

実際の時間発展の計算は次のようにして行う。まず、初期 (入力) 行列 $B^{(0)}$ が与えられたとき、その成分から非自励離散戸田格子の変数の初期値を

$$e_0^{(0)} := 0, \quad e_n^{(0)} := \frac{w_n^{(0)}}{q_{n-1}^{(0)}}, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad e_N^{(0)} := 0, \quad (2.14a)$$

$$q_n^{(0)} := u_n^{(0)} - e_n^{(0)} - s^{(0)}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad (2.14b)$$

で計算する。そして、 $t = 0, 1, 2, \dots$ について

$$d_0^{(t+1)} := q_0^{(t)} - (s^{(t+1)} - s^{(t)}), \quad d_n^{(t+1)} := d_{n-1}^{(t+1)} \frac{q_n^{(t)}}{q_{n-1}^{(t+1)}} - (s^{(t+1)} - s^{(t)}), \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad (2.15a)$$

$$q_n^{(t+1)} := e_{n+1}^{(t)} + d_n^{(t+1)}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad (2.15b)$$

$$e_0^{(t+1)} := 0, \quad e_n^{(t+1)} := e_n^{(t)} \frac{q_n^{(t)}}{q_{n-1}^{(t+1)}}, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad e_N^{(t+1)} := 0, \quad (2.15c)$$

を順に計算していく。ここに現れた変数 $d_n^{(t+1)}$ は漸化式から $s^{(t+1)} - s^{(t)}$ による原点シフト以外の減算を除去し、桁落ちによる精度悪化を避けるために導入された補助変数であり、消去すれば (2.13) が復元することが確認できる。後に見るように、ある条件の下 $t \rightarrow +\infty$ で $q_n^{(t)}$ はある有限の値に、 $e_n^{(t)}$ は 0 に収束することが示されるので、(2.13) より三重対角行列 $B^{(t)}$ の副対角成分 $w_n^{(t)}$ は十分な回数の反復後に 0 に収束することがわかる。時間発展で $B^{(t)}$ の固有値は保存することが示されるので、所望の固有値はそのときの対角成分の値 $u_n^{(t)} = q_n^{(t)} + s^{(t)}$ で与えられることになる。漸化式 (2.15) による固有値計算アルゴリズムを **dqds 法** (differential quotient difference algorithm with shifts) と呼ぶ。

ここで、dqds 法において重要な、変数の正値性について述べておく。仮定として、問題の行列 $B^{(0)}$ の副対角成分 $w_1^{(0)}, w_2^{(0)}, \dots, w_{N-1}^{(0)}$ は正数であるとする。このとき $B^{(0)}$ はある実対称三重対角行列と相似であり、その固有値は全て実かつ相異なることが言える。もし全ての時刻 t で $s^{(t)}$ を $B^{(0)}$ の最小固有値よりも小さくとれば、 $B^{(t)} - s^{(t)} I_N$ は正定値となるから、 $B^{(t)} - s^{(t)} I_N$ の主座小行列式の値は全て正となる。このとき、 $\phi_n^{(t)}(x) = \det(x I_n - B_n^{(t)})$ であったことを思い出すと、 $\text{sgn } \phi_n^{(t)}(s^{(t)}) = (-1)^n$ であり、このことと (2.10) から $q_n^{(t)} > 0$ がわかる。さらに、仮定 $w_n^{(0)} > 0$ と (2.14a) より $e_n^{(0)} > 0$ もわかり、(2.15c) より再帰的に $e_n^{(t)} > 0$ が全ての時刻 t で成り立つことも言える。最後に $d_n^{(t+1)} = q_n^{(t+1)} - e_{n+1}^{(t)}$ については、スペクトル変換 (2.10), (2.12) より

$$\phi_n^{(t+2)}(x) = \frac{\phi_{n+1}^{(t)}(x) + d_n^{(t+1)} \phi_n^{(t+1)}(x)}{x - s^{(t+1)}}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1,$$

が得られるから、 $d_n^{(t+1)} = -\frac{\phi_{n+1}^{(t)}(s^{(t+1)})}{\phi_n^{(t+1)}(s^{(t+1)})}$ であり、これより仮定の下で $d_n^{(t+1)} > 0$ がわかる。

2.3 dqds 法の行列表示

dqds 法の導出を行列を用いて書き直すと以下ようになる。2つの N 次二重対角行列を

$$L^{(t)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ e_1^{(t)} & 1 & & & \\ & e_2^{(t)} & \ddots & & \\ & & \ddots & e_{N-1}^{(t)} & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad R^{(t)} = \begin{pmatrix} q_0^{(t)} & 1 & & & \\ & q_1^{(t)} & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & q_{N-1}^{(t)} \end{pmatrix}$$

で定める。このとき、スペクトル変換 (2.10), (2.12) は, (2.4) で導入したベクトルを用いてそれぞれ次のように書ける：

$$(x - s^{(t)})\phi^{(t+1)}(x) = R^{(t)}\phi^{(t)}(x) + \phi_N^{(t)}(x), \quad \phi^{(t)}(x) = L^{(t)}\phi^{(t+1)}(x).$$

これより,

$$\begin{aligned} B^{(t+1)}\phi^{(t+1)}(x) + \phi_N^{(t+1)}(x) &= (L^{(t+1)}R^{(t+1)} + s^{(t+1)}I_N)\phi^{(t+1)}(x) + \phi_N^{(t+1)}(x) \\ &= (R^{(t)}L^{(t)} + s^{(t)}I_N)\phi^{(t+1)}(x) + \phi_N^{(t+1)}(x) \\ &= x\phi^{(t+1)}(x) \end{aligned}$$

を得る。したがって、両立条件 (2.13) を行列を用いて書けば

$$B^{(t+1)} = L^{(t+1)}R^{(t+1)} + s^{(t+1)}I_N = R^{(t)}L^{(t)} + s^{(t)}I_N$$

となることがわかる。つまり、dqds 法 (2.15) の 1 反復は、与えられた (2.1) の形の三重対角行列 $B^{(t)}$ を

$$B^{(t)} = L^{(t)}R^{(t)} + s^{(t)}I_N$$

とシフト付きで LU 分解し、新たな三重対角行列 $B^{(t+1)}$ を

$$B^{(t+1)} = R^{(t)}L^{(t)} + s^{(t)}I_N$$

で定めることで決まっている。これより,

$$B^{(t+1)} = (L^{(t)})^{-1} (L^{(t)}R^{(t)} + s^{(t)}I_N) L^{(t)} = (L^{(t)})^{-1} B^{(t)} L^{(t)}$$

であるから、時間発展で $B^{(t)}$ の固有値は保存することがわかる。

2.4 dqds 法の Hankel 行列式解と収束性

dqds 法についての議論に直交多項式を導入する利点の一つは、直交多項式の行列式表示 (2.8) を用いることで Hankel 行列式解を得ることができる点にある。すなわち、可積分系なので解を具体的に与えることができるのである。実際、スペクトル変換 (2.10), (2.12) から

$$q_n^{(t)} = -\frac{\phi_{n+1}^{(t)}(s^{(t)})}{\phi_n^{(t)}(s^{(t)})} = \frac{\tau_n^{(t)}\tau_{n+1}^{(t+1)}}{\tau_{n+1}^{(t)}\tau_n^{(t+1)}}, \quad e_n^{(t)} = \frac{\mathcal{L}^{(t)}[x^n\phi_n^{(t)}(x)]}{\mathcal{L}^{(t+1)}[x^{n-1}\phi_{n-1}^{(t+1)}(x)]} = \frac{\tau_{n+1}^{(t)}\tau_{n-1}^{(t+1)}}{\tau_n^{(t)}\tau_n^{(t+1)}}$$

がわかる。なお、 $q_n^{(t)}$ の Hankel 行列式解を求める際には、(2.11) から導かれるモーメントの時間発展式

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

を用いる。以下では議論の簡単のため、問題の三重対角行列 $B^{(0)}$ の固有値 $x_0, x_1, \dots, x_{N-1}$ は全て相異なると仮定する。この仮定の下で、Hankel 行列式 $\tau_n^{(t)}$ の成分であるモーメント $\mu_m^{(t)}$ は (2.9), (2.11) より次のように書ける：

$$\mu_m^{(t)} = \sum_{i=0}^{N-1} c_i x_i^m \prod_{j=0}^{t-1} (x_i - s^{(j)}). \quad (2.16)$$

(2.16) を Hankel 行列式に代入し、Cauchy-Binet の公式を用いて展開することにより、

$$\tau_n^{(t)} = |\mu_{i+j}^{(t)}|_{0 \leq i, j \leq n-1} = \sum_{0 \leq r_0 < r_1 < \dots < r_{n-1} \leq N-1} \left(\prod_{i=0}^{n-1} c_{r_i} \prod_{j=0}^{t-1} (x_{r_i} - s^{(j)}) \right) \left(\prod_{0 \leq k < l \leq n-1} (x_{r_l} - x_{r_k})^2 \right) \quad (2.17)$$

を得る。

この解を用いることにより、dqds 法の収束性を議論することができる。前述の仮定に加えて、 $B^{(0)}$ の固有値は全て実数であり、添字が $x_0 > x_1 > \dots > x_{N-1}$ となるように付けられているとする。そして、全ての時刻 t で、シフト量 $s^{(t)}$ を $s^{(t)} < x_{N-1}$ を満たすように選ぶとする。このとき、 $x_0 - s^{(t)} > x_1 - s^{(t)} > \dots > x_{N-1} - s^{(t)} > 0$ であり、十分 t が大きければ $\tau_n^{(t)}$ の (2.17) における総和において $r_i = i$ と選んだ場合が主要な項となる。これより、十分大きな t で

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

であり、したがって $t \rightarrow +\infty$ で $q_n^{(t)} \rightarrow x_n - s^{(t)}$, $e_n^{(t)} \rightarrow 0$ となることがわかる。なお、本稿では詳細は割愛するが、固有値に重複がある場合も同様の値に対数収束することが言える。

3 $R_{||}$ 多項式と $R_{||}$ 格子

前節で述べた理論を三重対角行列束の一般化固有値問題の場合に拡張する。

3.1 $R_{||}$ 多項式の導入

次の 2 つの N 次三重対角行列

$$A = \begin{pmatrix} v_0 & \kappa_0 & & & \\ \lambda_1 w_1 & v_1 & \kappa_1 & & \\ & \lambda_2 w_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \kappa_{N-2} \\ & & & \lambda_{N-1} w_{N-1} & v_{N-1} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} u_0 & 1 & & & \\ w_1 & u_1 & 1 & & \\ & w_2 & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & w_{N-1} & u_{N-1} \end{pmatrix},$$

$u_n, w_n \in \mathbb{R} - \{0\}, \quad v_n, \kappa_n, \lambda_n \in \mathbb{R},$

の組 (行列束) (A, B) の一般化固有値問題

$$A\Phi = xB\Phi \quad (3.1)$$

を考える. x が (A, B) の固有値であることは, x が特性多項式 $\det(xB - A) = 0$ の根であることと同値である. A, B の n 次主座小行列をそれぞれ A_n, B_n で表し, x の多項式 $\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_N(x)$ を $\varphi_0(x) := 1$,

$$\varphi_n(x) := \det(xB_n - A_n) = \begin{vmatrix} u_0x - v_0 & x - \kappa_0 & & & \\ w_1(x - \lambda_1) & u_1x - v_1 & x - \kappa_1 & & \\ & w_2(x - \lambda_2) & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & x - \kappa_{n-2} \\ & & & w_{n-1}(x - \lambda_{n-1}) & u_{n-1}x - v_{n-1} \end{vmatrix}, \quad n = 1, 2, \dots, N,$$

で定める. 行列式の n 行目での展開を考えることで, $\varphi_n(x)$ が満たす三項間漸化式

$$\varphi_{n+1}(x) = (u_nx - v_n)\varphi_n(x) - w_n(x - \kappa_{n-1})(x - \lambda_n)\varphi_{n-1}(x), \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (3.2)$$

が得られる. ただし, $\varphi_{-1}(x) = 0, w_0 = 0$ とする. これより, $\varphi_n(x)$ は n 次多項式であり, 特に全ての $k = 0, 1, \dots, n-1$ について $u_k - w_k = 1$ が成立していればモニック多項式になる. 以下では常にこの仮定 ($u_k = 1 + w_k$) が成立しているものとする^{*3}. この漸化式により定まる $\varphi_n(x)$ を R_{II} 多項式 (R_{II} polynomials) という.

R_{II} 多項式 $\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^N$ に対し, $\frac{x^m}{\prod_{j=0}^{k-1}(x - \kappa_j) \prod_{j=1}^l(x - \lambda_j)}$, $k, l = 0, 1, \dots, N, m = 0, 1, 2, \dots$, で張られる線型空間を定義域とする線型汎関数 $\mathcal{L}$ で, 次のある種の直交関係式を満たすものが存在する [5]:

$$\mathcal{L} \left[\frac{x^m \varphi_n(x)}{\prod_{j=0}^{n-1}(x - \kappa_j) \prod_{j=1}^n(x - \lambda_j)} \right] = h_n \delta_{m,n}, \quad h_n \neq 0, \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad m = 0, 1, \dots, n, \quad (3.3a)$$

$$\mathcal{L} \left[\frac{x^m \varphi_N(x)}{\prod_{j=0}^{N-1}(x - \kappa_j) \prod_{j=1}^N(x - \lambda_j)} \right] = 0, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (3.3b)$$

ただし, 問題で与えられていないパラメータ κ_{N-1}, λ_N は任意に選ぶものとする. このとき, 三項間漸化式 (3.2) から,

$$h_{n+1} = u_n h_n - w_n h_{n-1}, \quad n = 1, 2, \dots, N-2, \quad (3.4)$$

が成立することがわかる.

$\mathcal{L}$ のモーメントを

$$\mu_m^{k,l} := \mathcal{L} \left[\frac{x^m}{\prod_{j=0}^{k-1}(x - \kappa_j) \prod_{j=1}^l(x - \lambda_j)} \right]$$

で定める. 定義より関係式

$$\mu_m^{k,l} = \mu_{m+1}^{k+1,l} - \kappa_k \mu_m^{k+1,l} = \mu_{m+1}^{k,l+1} - \lambda_{l+1} \mu_m^{k,l+1} \quad (3.5)$$

^{*3} 各 $\varphi_n(x)$ をその最高次係数で割る変換を考えることでこの状況を容易に作ることができる.

が成立することを用いると, $\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^N$ に対して次の条件を満たすモーメント $\mu_m^{k,l}$, $k, l = 0, 1, \dots, N$, $m = 0, 1, 2, \dots$, を定めることができる:

$$\mathcal{L} \left[\frac{\varphi_1(x)}{(x - \lambda_1)} - 1 \right] = h_1 - h_0 \neq 0, \quad \mathcal{L} \left[\frac{\varphi_n(x)}{\prod_{j=0}^{n-2} (x - \kappa_j) \prod_{j=1}^n (x - \lambda_j)} \right] = 0, \quad n = 2, 3, \dots, N, \quad (3.6a)$$

$$\mathcal{L} \left[\frac{\varphi_n(x)}{\prod_{j=0}^{n-1} (x - \kappa_j) \prod_{j=1}^n (x - \lambda_j)} \right] = 0, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad (3.6b)$$

$$\mathcal{L} \left[\frac{x^m \varphi_N(x)}{\prod_{j=0}^{N-1} (x - \kappa_j) \prod_{j=1}^N (x - \lambda_j)} \right] = 0, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (3.6c)$$

ここで, $h_1 - h_0$ は非零の任意の値を選ぶことができる^{*4}. こうして定まる線型汎関数 $\mathcal{L}$ に対して, $\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^N$ は直交関係式 (3.3) を満たすことが示され, さらにモーメントを用いた R_{II} 多項式の行列式表示

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

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

が得られる.

線型汎関数 $\mathcal{L}$ は直交多項式の場合と同様に, $N = \infty$ の場合は一般に積分で与えられ, 本稿で扱う $N < \infty$ の場合は次のようにして離散的な重み関数で与えられる [11]. すなわち, $x_0, x_1, \dots, x_{N-1}$ を $\varphi_N(x)$ の零点とし, これらが全て単純であるという仮定の下で,

$$\mathcal{L}[f(x)] = \sum_{i=0}^{N-1} c_i f(x_i), \quad (3.7)$$

$$c_i := \frac{h_{N-1} \prod_{j=0}^{N-2} (x_i - \kappa_j) \prod_{j=1}^{N-1} (x_i - \lambda_j)}{\varphi_{N-1}(x_i) \varphi'_N(x_i)}, \quad i = 0, 1, \dots, N-1,$$

が成り立つ.

直交関係式 (3.3) の意味するところが一見ただけではわかりづらいと思われる. 実は以下で述べるように双直交有理関数と関係している. 次の三項間漸化式で定義される 2 つの関数列を考える:

$$(x - \kappa_n) \Phi_{n+1}(x) = -(u_n x - v_n) \Phi_n(x) - w_n (x - \lambda_n) \Phi_{n-1}(x), \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad (3.8)$$

^{*4} 直交多項式の場合と同様に, $h_1 - h_0$ の値を定数倍すると, それに応じて全てのモーメントの値が定数倍される. $h_1 - h_0$ の値だけからでは h_0, h_1 の個々の値が定まらないが, これは (3.5) と (3.6c) から一意に定まる.

$$(x - \lambda_{n+1})\Phi_{n+1}^*(x) = -(u_n x - v_n)\Phi_n^*(x) - w_n(x - \kappa_{n-1})\Phi_{n-1}^*(x), \quad n = 0, 1, \dots, N-1,$$

$$\Phi_{-1}(x) = \Phi_{-1}^*(x) = 0, \quad \Phi_0(x) = \Phi_0^*(x) = 1.$$

$\Phi_n(x), \Phi_n^*(x)$ はともに $[n/n]$ 次の有理関数であり, R_{Π} 多項式 $\varphi_n(x)$ とは次の関係がある:

$$\Phi_n(x) = (-1)^n \frac{\varphi_n(x)}{\prod_{j=0}^{n-1} (x - \kappa_j)}, \quad \Phi_n^*(x) = (-1)^n \frac{\varphi_n(x)}{\prod_{j=1}^n (x - \lambda_j)}, \quad n = 0, 1, \dots, N.$$

さらに, これらを用いて次の有理関数列を定める:

$$\Psi_n(x) := \Phi_n(x) + \frac{h_n}{h_{n-1}} \Phi_{n-1}(x), \quad \Psi_n^*(x) := \Phi_n^*(x) + \frac{h_n}{h_{n-1}} \Phi_{n-1}^*(x).$$

このとき, $\mathcal{L}$ について次の双直交関係式が満たされることが, 直交関係式 (3.3) から容易に確かめられる [2]:

$$\mathcal{L} [\Psi_m(x) \Psi_0^*(x)] = h_0 \delta_{m,0}, \quad m = 0, 1, \dots, N-1,$$

$$\mathcal{L} [\Psi_m(x) \Psi_n^*(x)] = \frac{h_n}{h_{n-1}} (h_{n-1} - h_n) \delta_{m,n}, \quad m = 0, 1, \dots, N-1, \quad n = 1, \dots, N-1.$$

なお, R_{Π} 多項式 $\{\varphi_n(x)\}_{n=0}^N$ がモニックでかつ $h_1 \neq h_0$ であるとき, (3.4) より任意の n で $h_n \neq h_{n-1}$ となることがわかる. したがって, 上式の右辺は $m = n$ ならば非零である.

三項間漸化式 (3.8) は, ここで出てきた有理関数 $\Phi_n(x)$ を成分に持つ 2 つの N 次ベクトル

$$\Phi(x) := \begin{pmatrix} \Phi_0(x) \\ \Phi_1(x) \\ \vdots \\ \Phi_{N-1}(x) \end{pmatrix}, \quad \Phi_N(x) := \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \Phi_N(x) \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

を用いれば, 次のように書くこともできる:

$$A\Phi(x) + \kappa_{N-1}\Phi_N(x) = x(B\Phi(x) + \Phi_N(x)).$$

したがって, $\Phi_N(x) = \mathbf{0}$ となる x , すなわち特性多項式 $\varphi_N(x) = 0$ となる x について, $\Phi(x)$ は一般化固有値問題 (3.1) の固有ベクトルとなる.

3.2 R_{Π} 多項式のスペクトル変換と R_{Π} 格子

モニック R_{Π} 多項式に対して, スペクトル変換を導入する. これに伴って導入される離散時間 $t \in \mathbf{N}$ を上付きの (t) , 他にも上付きの独立変数を持つ変数に対しては例えば k, l, t と表す.

モニック R_{Π} 多項式 $\{\varphi_n^{(t)}(x)\}_{n=0}^N$ に対して, 次の時刻の $\{\varphi_n^{(t+1)}(x)\}_{n=0}^N$ を

$$\varphi_n^{(t+1)}(x) := \frac{(1 + q_n^{(t)})^{-1} \varphi_{n+1}^{(t)}(x) + q_n^{(t)} (1 + q_n^{(t)})^{-1} (x - \kappa_{t+n}) \varphi_n^{(t)}(x)}{x - s^{(t)}}, \quad (3.10)$$

$$q_n^{(t)} := -(s^{(t)} - \kappa_{t+n})^{-1} \frac{\varphi_{n+1}^{(t)}(s^{(t)})}{\varphi_n^{(t)}(s^{(t)})}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1,$$

$$\varphi_N^{(t+1)}(x) := \varphi_N^{(t)}(x),$$

で定める。ただし、パラメータの時間発展を

$$\kappa_n^{(t+1)} = \kappa_{n+1}^{(t)} = \kappa_{t+n+1}, \quad \lambda_n^{(t+1)} = \lambda_n^{(t)} = \lambda_n$$

で導入するものとし、この時間発展式で定まらない新たに必要となるパラメータ $\kappa_{t+N} \in \mathbb{R}$ は任意に選ぶこととする。また、 $s^{(t)} \in \mathbb{R}$ も任意に選ぶことができるパラメータである。対応して線型汎関数の時間発展を

$$\mathcal{L}^{(t+1)}[f(x)] = \mathcal{L}^{(t)} \left[\frac{x - s^{(t)}}{x - \kappa_t} f(x) \right] \quad (3.11)$$

で定めると、 $\{\varphi_n^{(t+1)}(x)\}_{n=0}^N$ は再び直交関係式 (3.3) を満たすモニックな R_{II} 多項式の列となり、(3.2) の形の三項間漸化式を満たす。また、逆変換

$$\varphi_n^{(t)}(x) = (1 + e_n^{(t)})^{-1} \varphi_n^{(t+1)}(x) + e_n^{(t)} (1 + e_n^{(t)})^{-1} (x - \lambda_n) \varphi_{n-1}^{(t+1)}(x), \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad (3.12)$$

を満たす $e_n^{(t)}$ が存在しなければならないこともわかる。 $e_n^{(t)}$ の満たすべき式、つまりスペクトル変換 (3.10) と (3.12) の両立条件は次で与えられる：

$$\begin{aligned} u_n^{(t+1)} = 1 + w_n^{(t+1)} &= -q_n^{(t+1)} - e_n^{(t+1)} \frac{1 + q_n^{(t+1)}}{1 + q_{n-1}^{(t+1)}} + (1 + q_n^{(t+1)})(1 + e_n^{(t+1)}) \\ &= -q_n^{(t)} \frac{1 + e_{n+1}^{(t)}}{1 + e_n^{(t)}} - e_{n+1}^{(t)} + (1 + q_n^{(t)})(1 + e_{n+1}^{(t)}), \end{aligned} \quad (3.13a)$$

$$\begin{aligned} v_n^{(t+1)} &= -\kappa_{t+n+1} q_n^{(t+1)} - \lambda_n e_n^{(t+1)} \frac{1 + q_n^{(t+1)}}{1 + q_{n-1}^{(t+1)}} + s^{(t+1)} (1 + q_n^{(t+1)})(1 + e_n^{(t+1)}) \\ &= -\kappa_{t+n} q_n^{(t)} \frac{1 + e_{n+1}^{(t)}}{1 + e_n^{(t)}} - \lambda_{n+1} e_{n+1}^{(t)} + s^{(t)} (1 + q_n^{(t)})(1 + e_{n+1}^{(t)}), \end{aligned} \quad (3.13b)$$

$$w_n^{(t+1)} = q_{n-1}^{(t+1)} e_n^{(t+1)} \frac{1 + q_n^{(t+1)}}{1 + q_{n-1}^{(t+1)}} = q_n^{(t)} e_n^{(t)} \frac{1 + e_{n+1}^{(t)}}{1 + e_n^{(t)}}. \quad (3.13c)$$

ただし、境界条件として、任意の $t \in \mathbb{N}$ に対して $e_0^{(t)} = e_N^{(t)} = 0$ を課す。(3.13) を変数 $q_n^{(t)}, e_n^{(t)}$ を従属変数とする離散力学系とみなし、 R_{II} 格子 (R_{II} chain) と呼ぶ [10]。

実際の時間発展の計算は以下のように行う。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：

$$e_0^{(0)} := 0, \quad \tilde{e}_n^{(0)} := \frac{w_n^{(0)}}{q_{n-1}^{(0)}}, \quad e_n^{(0)} := \tilde{e}_n^{(0)} \frac{1 + q_{n-1}^{(0)}}{1 + q_n^{(0)}}, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad e_N^{(0)} := 0, \quad (3.14a)$$

$$q_n^{(0)} := \frac{v_n^{(0)} - s^{(0)} u_n^{(0)} - (s^{(0)} - \lambda_n) \tilde{e}_n^{(0)}}{s^{(0)} - \kappa_n}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1. \quad (3.14b)$$

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：

$$\begin{aligned} d_0^{(t+1)} &:= (s^{(t)} - \kappa_t) q_0^{(t)} - (s^{(t+1)} - s^{(t)}), \quad d_n^{(t+1)} := d_{n-1}^{(t+1)} \frac{q_n^{(t)}}{q_{n-1}^{(t+1)}} - (s^{(t+1)} - s^{(t)})(1 + q_n^{(t)}), \\ &\quad n = 1, 2, \dots, N-1, \end{aligned} \quad (3.15a)$$

$$q_n^{(t+1)} := \frac{(s^{(t+1)} - \lambda_{n+1})e_{n+1}^{(t)} + d_n^{(t+1)}(1 + e_{n+1}^{(t)})}{s^{(t+1)} - \kappa_{t+n+1}}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1, \quad (3.15b)$$

$$e_0^{(t+1)} := 0, \quad e_n^{(t+1)} := e_n^{(t)} \frac{q_n^{(t)}}{q_{n-1}^{(t+1)}} \frac{1 + q_{n-1}^{(t+1)}}{1 + q_n^{(t+1)}} \frac{1 + e_{n+1}^{(t)}}{1 + e_n^{(t)}}, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad e_N^{(t+1)} := 0. \quad (3.15c)$$

変数の正値性について調べておこう。 $\varphi_n^{(t)}(x) = \det(xB_n^{(t)} - A_n^{(t)})$ であったから、パラメータ $s^{(t)}$ を $A^{(t)} - s^{(t)}B^{(t)}$ が正定値になるようにとれば $q_n^{(t)} > 0$ となることが言える。さらに $w_n^{(t)} > 0$ ならば $e_n^{(t)} > 0$ も言えることがわかる。計算中にシフト以外の減算が現れないようにするためには、これ以外にパラメータ間の条件 $s^{(t)} > \kappa_{t+n}$, $s^{(t)} > \lambda_{n+1}$, $n = 0, 1, \dots, N-1$, も必要になる。なお、 $A^{(t)} - s^{(t)}B^{(t)}$ が正定値になるための $s^{(t)}$ の選び方についてはより詳しい研究が必要であるが、例えば行列束 $(A^{(t)}, B^{(t)})$ が互いに相異なる実固有値を持ち、かつ $A^{(t)}$ と $B^{(t)}$ が共通の直交変換でそれぞれ対称行列、正定値対称行列に変換可能ならば、 $s^{(t)}$ を $(A^{(t)}, B^{(t)})$ の最小固有値より小さくとれば $A^{(t)} - s^{(t)}B^{(t)}$ が正定値になることが言える。

3.3 R_{Π} 格子の行列表示

R_{Π} 格子に対しても、その行列表示を考えてみよう。次の二重対角行列

$$L_A^{(t)} := \begin{pmatrix} \kappa_t & & & & \\ -\lambda_1 e_1^{(t)} & \kappa_{t+1} & & & \\ & -\lambda_2 e_2^{(t)} & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -\lambda_{N-1} e_{N-1}^{(t)} & \kappa_{t+N-1} \end{pmatrix}, \quad L_B^{(t)} := \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -e_1^{(t)} & 1 & & & \\ & -e_2^{(t)} & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -e_{N-1}^{(t)} & 1 \end{pmatrix},$$

$$R^{(t)} := \begin{pmatrix} q_0^{(t)} & -1 & & & \\ & q_1^{(t)} & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & -1 \\ & & & & q_{N-1}^{(t)} \end{pmatrix},$$

および対角行列

$$D_{1+q}^{(t)} := \text{diag}(1 + q_0^{(t)}, 1 + q_1^{(t)}, \dots, 1 + q_{N-1}^{(t)}),$$

$$D_{1+e}^{(t)} := \text{diag}(1, 1 + e_1^{(t)}, \dots, 1 + e_{N-1}^{(t)}), \quad \hat{D}_{1+e}^{(t)} := \text{diag}(1 + e_1^{(t)}, \dots, 1 + e_{N-1}^{(t)}, 1)$$

を導入する。このとき、スペクトル変換 (3.10) と (3.12) は、これらの行列と (3.9) で導入したベクトルを用いてそれぞれ次のように書ける：

$$(x - s^{(t)})\Phi^{(t+1)}(x) = (x - \kappa_t)(D_{1+q}^{(t)})^{-1} (R^{(t)}\Phi^{(t)}(x) - \Phi_N^{(t)}(x)),$$

$$\Phi^{(t)}(x) = (x - \kappa_t)^{-1}(D_{1+e}^{(t)})^{-1} (xL_B^{(t)} - L_A^{(t)})\Phi^{(t+1)}(x).$$

これより、

$$\begin{aligned} & x(B^{(t+1)}\Phi^{(t+1)}(x) + \Phi_N^{(t+1)}(x)) - A^{(t+1)}\Phi^{(t+1)}(x) - \kappa_{t+N}\Phi_N^{(t+1)}(x) \\ &= x \left((-D_{1+q}^{(t+1)}L_B^{(t+1)}(D_{1+q}^{(t+1)})^{-1}R^{(t+1)} + D_{1+q}^{(t+1)}D_{1+e}^{(t+1)})\Phi^{(t+1)}(x) + \Phi_N^{(t+1)}(x) \right) \\ & \quad - (-D_{1+q}^{(t+1)}L_A^{(t+1)}(D_{1+q}^{(t+1)})^{-1}R^{(t+1)} + s^{(t+1)}D_{1+q}^{(t+1)}D_{1+e}^{(t+1)})\Phi^{(t+1)}(x) - \kappa_{t+N}\Phi_N^{(t+1)}(x) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= x \left((-\hat{D}_{1+c}^{(t)} R^{(t)} (D_{1+c}^{(t)})^{-1} L_B^{(t)} + D_{1+q}^{(t)} \hat{D}_{1+c}^{(t)}) \Phi^{(t+1)}(x) + \Phi_N^{(t+1)}(x) \right) \\
&\quad - \left((-\hat{D}_{1+e}^{(t)} R^{(t)} (D_{1+e}^{(t)})^{-1} L_A^{(t)} + s^{(t)} D_{1+q}^{(t)} \hat{D}_{1+e}^{(t)}) \Phi^{(t+1)}(x) - \kappa_{t+N} \Phi_N^{(t+1)}(x) \right) \\
&= 0
\end{aligned}$$

を得る。したがって、 R_{II} 格子の行列表示は

$$\begin{aligned}
A^{(t+1)} &= -D_{1+q}^{(t+1)} L_A^{(t+1)} (D_{1+q}^{(t+1)})^{-1} R^{(t+1)} + s^{(t+1)} D_{1+q}^{(t+1)} D_{1+c}^{(t+1)} \\
&= -\hat{D}_{1+e}^{(t)} R^{(t)} (D_{1+e}^{(t)})^{-1} L_A^{(t)} + s^{(t)} D_{1+q}^{(t)} \hat{D}_{1+e}^{(t)}, \\
B^{(t+1)} &= -D_{1+q}^{(t+1)} L_B^{(t+1)} (D_{1+q}^{(t+1)})^{-1} R^{(t+1)} + D_{1+q}^{(t+1)} D_{1+e}^{(t+1)} \\
&= -\hat{D}_{1+e}^{(t)} R^{(t)} (D_{1+e}^{(t)})^{-1} L_B^{(t)} + D_{1+q}^{(t)} \hat{D}_{1+e}^{(t)}
\end{aligned}$$

で与えられることがわかる。行列表示から、関係式

$$\begin{aligned}
A^{(t+1)} &= \hat{D}_{1+c}^{(t)} R^{(t)} (D_{1+q}^{(t)} D_{1+c}^{(t)})^{-1} A^{(t)} (R^{(t)})^{-1} D_{1+q}^{(t)}, \\
B^{(t+1)} &= \hat{D}_{1+e}^{(t)} R^{(t)} (D_{1+q}^{(t)} D_{1+e}^{(t)})^{-1} B^{(t)} (R^{(t)})^{-1} D_{1+q}^{(t)}
\end{aligned}$$

が得られ、

$$x B^{(t+1)} - A^{(t+1)} = \hat{D}_{1+e}^{(t)} R^{(t)} (D_{1+q}^{(t)} D_{1+e}^{(t)})^{-1} (x B^{(t)} - A^{(t)}) (R^{(t)})^{-1} D_{1+q}^{(t)}$$

となるから、時間発展で行列束 $(A^{(t)}, B^{(t)})$ の固有値は保存することがわかる。

3.4 R_{II} 格子の Hankel 行列式解と収束性

スペクトル変換 (3.10) と (3.12) より、 R_{II} 格子の従属変数 $q_n^{(t)}$ は次の Hankel 行列式解を持つ：

$$q_n^{(t)} = -(s^{(t)} - \kappa_{t+n})^{-1} \frac{\varphi_{n+1}^{(t)}(s^{(t)})}{\varphi_n^{(t)}(s^{(t)})} = (s^{(t)} - \kappa_{t+n})^{-1} \frac{\tau_n^{n,n,t} \tau_{n+1}^{n,n+1,t+1}}{\tau_n^{n-1,n,t+1} \tau_{n+1}^{n+1,n+1,t}}. \quad (3.16)$$

なお、計算には (3.11) から得られるモーメントの時間発展式

$$\mu_m^{k,l,t+1} = \mu_{m+1}^{k+1,l,t} - s^{(t)} \mu_m^{k+1,l,t} \quad (3.17)$$

を用いる。また、(3.5), (3.10) より

$$1 + q_n^{(t)} = (\kappa_{t+n} - s^{(t)})^{-1} \frac{\varphi_{n+1}^{(t)}(\kappa_{t+n})}{\varphi_n^{(t+1)}(\kappa_{t+n})} = (s^{(t)} - \kappa_{t+n})^{-1} \frac{\tau_{n+1}^{n,n+1,t} \tau_n^{n,n,t+1}}{\tau_{n+1}^{n+1,n+1,t} \tau_n^{n-1,n,t+1}}.$$

さらに、Jacobi の恒等式と呼ばれる行列式の恒等式から得られる関係式

$$\tau_n^{k-1,l-1,t} \tau_n^{k,l,t} - \tau_n^{k-1,l,t} \tau_n^{k,l-1,t} - \tau_{n-1}^{k-1,l-1,t} \tau_{n+1}^{k,l,t} = 0$$

を用いると、三項間漸化式 (3.2) から

$$w_n^{(t)} = \frac{\mathcal{L}^{(t)} \left[\frac{x^{n+1} \varphi_{n+1}^{(t)}(x)}{\prod_{j=0}^n (x - \kappa_{t+j}) \prod_{j=1}^{n+1} (x - \lambda_j)} - \frac{x^n \varphi_n^{(t)}(x)}{\prod_{j=0}^{n-1} (x - \kappa_{t+j}) \prod_{j=1}^n (x - \lambda_j)} \right]}{\mathcal{L}^{(t)} \left[\frac{x^n \varphi_n^{(t)}(x)}{\prod_{j=0}^{n-1} (x - \kappa_{t+j}) \prod_{j=1}^n (x - \lambda_j)} - \frac{x^{n-1} \varphi_{n-1}^{(t)}(x)}{\prod_{j=0}^{n-2} (x - \kappa_{t+j}) \prod_{j=1}^{n-1} (x - \lambda_j)} \right]} = \frac{\tau_{n-1}^{n-1,n-1,t} \tau_{n+1}^{n,n+1,t} \tau_{n+1}^{n+1,n,t}}{\tau_n^{n-1,n,t} \tau_n^{n,n-1,t} \tau_{n+1}^{n+1,n+1,t}}$$

がわかるので、 $e_n^{(t)}$ の Hankel 行列式解が (3.13c) から

$$e_n^{(t)} = \frac{w_n^{(t)} (1 + q_{n-1}^{(t)})}{q_{n-1}^{(t)} (1 + q_n^{(t)})} = (s^{(t)} - \kappa_{t+n}) \frac{\tau_{n-1}^{n-1, n-1, t+1} \tau_{n+1}^{n+1, n, t}}{\tau_n^{n, n-1, t} \tau_n^{n, n, t+1}} \quad (3.18)$$

と求まる。

Hankel 行列式 $\tau_n^{k, l, t}$ の成分のモーメント $\mu_m^{k, l, t}$ は、問題の三重対角行列束 $(A^{(0)}, B^{(0)})$ の固有値 $x_0, x_1, \dots, x_{N-1}$ が全て相異なるという仮定の下で、(3.7), (3.17) より次のように書くことができる：

$$\mu_m^{k, l, t} = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{c_i x_i^m \prod_{j=0}^{t-1} (x_i - s^{(j)})}{\prod_{j=0}^{t+k-1} (x_i - \kappa_j) \prod_{j=1}^l (x_i - \lambda_j)}. \quad (3.19)$$

(3.19) を Hankel 行列式に代入して展開すれば

$$\tau_n^{k, l, t} = \sum_{0 \leq r_0 < r_1 < \dots < r_{n-1} \leq N-1} \left(\prod_{i=0}^{n-1} \frac{c_{r_i} \prod_{j=0}^{t-1} (x_{r_i} - s^{(j)})}{\prod_{j=0}^{t+k-1} (x_{r_i} - \kappa_j) \prod_{j=1}^l (x_{r_i} - \lambda_j)} \right) \left(\prod_{0 \leq \alpha < \beta \leq n-1} (x_{r_\beta} - x_{r_\alpha})^2 \right)$$

を得る。さらに仮定として、 $(A^{(0)}, B^{(0)})$ の固有値は全て実数で、添字が $x_0 > x_1 > \dots > x_{N-1}$ 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。このとき、十分大きな t で Hankel 行列式解 (3.16), (3.18) の漸近挙動は

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

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

となり、したがって $t \rightarrow +\infty$ で $q_n^{(t)} \rightarrow \frac{x_n - s^{(t)}}{s^{(t)} - \kappa_{t+n}}$, $e_n^{(t)} \rightarrow 0$ と各変数の値は収束することがわかる。これより、行列束 $(A^{(t)}, B^{(t)})$ の各成分は $t \rightarrow +\infty$ で $u_n^{(t)} \rightarrow 1$, $v_n^{(t)} \rightarrow x_n$, $w_n^{(t)} \rightarrow 0$ と収束することがわかる。また、収束速度についても dqds 法と同様の性質があり、 $s^{(t)}$ が原点シフトパラメータとして働いていることがわかる。

3.5 数値例

以下では簡単な数値例により、実際に R_{Π} 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

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

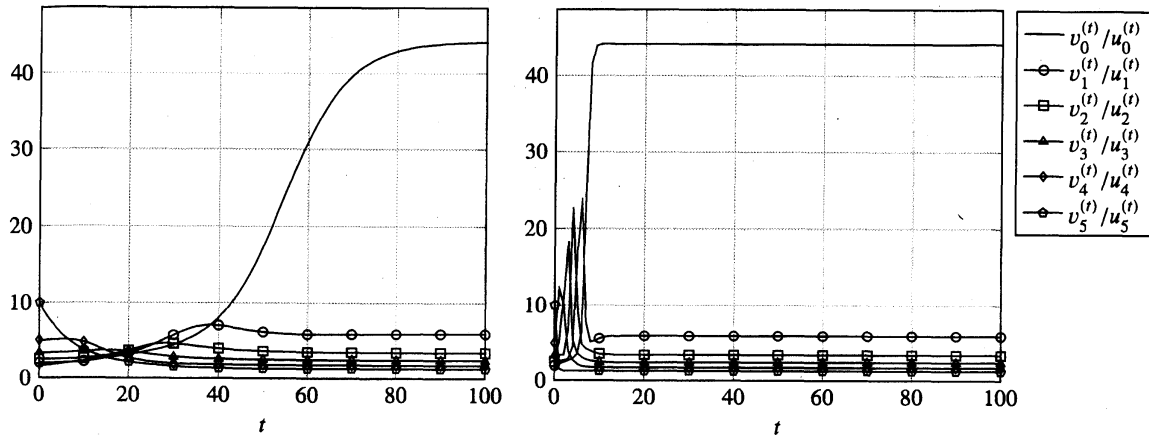


図1 R_{II} 格子を用いた一般化固有値計算の例. $A^{(t)}$ と $B^{(t)}$ の対角成分の比 $v_n^{(t)}/u_n^{(t)}$ をプロットしている. 左図: $s^{(t)} = 0, \alpha_{t+5} = -1, t \geq 0$. 右図: $s^{(t)} = 1.282, \alpha_{t+5} = -10000, t \geq 0$.

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

を与え、これをモニック化した後、初期値の $q_n^{(0)}, e_n^{(0)}$ を (3.14) で計算し、 R_{II} 格子の反復計算 (3.15) を行うプログラムを Python 3.2.3 で書き、Intel Core i5 760 2.80GHz 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. 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) 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.

4 まとめと今後の課題

本稿では三重対角行列束の一般化固有値問題の特性多項式から自然に得られる R_{II} 多項式、およびそのスペクトル変換を考えることで導出される離散可積分系である R_{II} 格子に着目し、 R_{II} 格子を用いて三重対角行列束の一般化固有値を計算する手法を提案した. 今後の課題としては、前処理 (同時

三重対角化)の研究 [8], 従来法 (QZ 法や標準固有値問題に帰着する方法) との速度・精度の比較, 変数の正值性のより詳しい条件の研究が挙げられる.

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] T. S. Chihara, *An introduction to orthogonal polynomials*, Gordon and Breach Science Publishers, New York–London–Paris, 1978.
- [2] M. S. Derevyagin and A. S. Zhedanov, *An operator approach to multipoint Padé approximations*, J. Approx. Theory, **157** (2009), 70–88.
- [3] K. V. Fernando and B. N. Parlett, *Accurate singular values and differential qd algorithms*, Numer. Math. **67** (1994), 191–229.
- [4] 広田良吾, 辻本諭, 今井達也, *Difference scheme of soliton equations*, 数理解析研究所講究録, **822** (1993), 144–152.
- [5] M. E. H. Ismail and D. R. Masson, *Generalized orthogonality and continued fractions*, J. Approx. Theory, **83** (1995), 1–40.
- [6] LAPACK, <http://www.netlib.org/lapack/>.
- [7] 森正武, 数値解析 第2版, 共立出版, 2002.
- [8] R. B. Sidje, *On the simultaneous tridiagonalization of two symmetric matrices*, Numer. Math. **118** (2011), 549–566.
- [9] V. Spiridonov and A. Zhedanov, *Discrete Darboux transformations, the discrete-time Toda lattice, and the Askey-Wilson polynomials*, Methods Appl. Anal. **2** (1995), 369–398.
- [10] V. Spiridonov and A. Zhedanov, *Spectral transformation chains and some new biorthogonal rational functions*, Comm. Math. Phys. **210** (2000), 49–83.
- [11] A. Zhedanov, *Biorthogonal rational functions and the generalized eigenvalue problem*, J. Approx. Theory, **101** (1999), 303–329.