

固有値計算に関連する離散可積分系について

東京理科大学 理学部 数理情報科学科

福田 亜希子¹

概 要 離散可積分系に分類される離散ハングリーロトカ・ボルテラ系及び離散ハングリー戸田方程式の時間発展は、あるクラスの帯行列の相似変形を与える。この性質を利用して定式化された帯行列の固有値計算アルゴリズムを紹介する。

1 はじめに

可積分系とは元来、古典力学の用語で、何らかの意味で線形化可能、あるいは線形系と関連付けられる非線形力学系の総称である。一般に、十分な量の保存量を持ち、初等関数や特殊関数を用いて解を具体的に書き下すことが可能な非線形力学系と理解されることも多い [4]。

近年、可積分系理論をもとにした新しい数値計算アルゴリズムが定式化されている。[3] では、可積分系に分類される離散ロトカ・ボルテラ (dLV: discrete Lotka-Volterra) 系

$$\begin{cases} u_k^{(n+1)}(1 + \delta^{(n)}u_{k-1}^{(n+1)}) = u_k^{(n)}(1 + \delta^{(n)}u_{k+1}^{(n)}), & k = 1, 2, \dots, 2m-1, \\ u_0^{(n)} \equiv 0, & u_{2m}^{(n)} \equiv 0, \quad n = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (1.1)$$

をもとに上 2 重対角行列に対する特異値計算のための dLV アルゴリズムが定式化されている。dLV 系は数理生物学に現れる生物種の捕食関係を記述する差分方程式であり、 k は生物番号、上付き添え字 n は離散時間を表し、 $u_k^{(n)}$ は離散時間 n における生物種 k の個体数を表す。また、 $\delta^{(n)}$ は離散時間 n における差分間隔を表す。dLV アルゴリズムは国際標準とされる線形数値計算ライブラリ LAPACK のルーチンよりも計算精度、速度の両面において優れていることが数値実験および理論的に確認されている。

個々の生物種が複数の生物種を捕食することを想定した離散可積分系として、離散ハングリーロトカ・ボルテラ (dhLV: discrete hungry Lotka-Volterra) 系

$$\begin{cases} u_k^{(n+1)} \prod_{j=1}^M (1 + \delta^{(n+1)}u_{k-j}^{(n+1)}) = u_k^{(n)} \prod_{j=1}^M (1 + \delta^{(n)}u_{k+j}^{(n)}), & k = 1, 2, \dots, M_m, \\ u_{-M+1}^{(n)} \equiv 0, & u_{-M+2}^{(n)} \equiv 0, \dots, u_0^{(n)} \equiv 0, \quad u_{M_m+1}^{(n)} \equiv 0, \dots, u_{M_m+M}^{(n)} \equiv 0, \quad n = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (1.2)$$

が知られている [5, 7]。ここで、 $M_m := (m-1)M + m$ であり、 $u_k^{(n)}$, $\delta^{(n)}$ の意味は dLV 系と同じである。また、 $M = 1$ の場合、dhLV 系は dLV 系と一致する。

一方、戸田方程式から広田差分によって得られる離散戸田方程式

$$\begin{cases} q_k^{(n+1)} = q_k^{(n)} - e_{k-1}^{(n+1)} + e_k^{(n)}, & k = 1, 2, \dots, m, \\ e_k^{(n+1)} = e_k^{(n)} \frac{q_{k+1}^{(n)}}{q_k^{(n+1)}}, & k = 1, 2, \dots, m-1, \\ e_0^{(n)} \equiv 0, & e_m^{(n)} \equiv 0, \quad n = 0, 1, \dots \end{cases} \quad (1.3)$$

は、対称な 3 重対角行列の固有値計算のための qd アルゴリズムの漸化式と一致する。離散戸田方程式の拡張として次の離散ハングリー戸田 (dhToda: discrete hungry Toda) 方程式が知られている [6]。

¹本研究は石渡恵美子教授（東京理科大学）、岩崎雅史准教授（京都府立大学）、山本有作教授（神戸大学）、中村佳正教授（京都大学）との共同研究である

$$\begin{cases} Q_k^{(n+M)} = Q_k^{(n)} + E_k^{(n)} - E_{k-1}^{(n+1)}, & k = 1, 2, \dots, m, \\ E_k^{(n+1)} = \frac{Q_{k+1}^{(n)} E_k^{(n)}}{Q_k^{(n+M)}}, & k = 1, 2, \dots, m-1, \\ E_0^{(n)} = E_m^{(n)} = 0. \end{cases} \quad (1.4)$$

本講演では、dhLV 系及び dhToda 方程式の保存量、Lax 表示、漸近挙動を示し、固有値計算との関連について述べる [1, 2].

2 dhLV 系の性質と固有値計算への応用

本節では、dhLV 系の性質をもとに、帯行列に対する固有値計算アルゴリズムを定式化する。まず、dhLV 系の Lax 表示と呼ばれる行列表示の存在と dhLV 変数の漸近挙動を明らかにする。

dhLV 系 (1.2) の Lax 表示は以下で与えられる。

$$\mathcal{R}^{(n)} \mathcal{L}^{(n+1)} = \mathcal{L}^{(n)} \mathcal{R}^{(n)}, \quad (2.1)$$

$$\mathcal{L}^{(n)} = \begin{pmatrix} \overbrace{0 \ \dots \ 0}^M & U_1^{(n)} & & & \\ 1 & 0 & \dots & & U_2^{(n)} \\ & \ddots & \ddots & & \ddots \\ & & \ddots & \ddots & U_{M_m}^{(n)} \\ & & & \ddots & 0 \\ & & & & \vdots \\ 0 & & & & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{R}^{(n)} = \begin{pmatrix} V_1^{(n)} & & & & 0 \\ 0 & V_2^{(n)} & & & \\ \vdots & 0 & \ddots & & \\ 0 & \vdots & \ddots & \ddots & \\ \delta^{(n)} & 0 & & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & \delta^{(n)} & 0 & \dots & 0 & V_{M_m+M}^{(n)} \end{pmatrix}.$$

ただし、 $U_k^{(n)}, V_k^{(n)}$ は dhLV 変数 $u_k^{(n)}$ によって、以下で与えられる。

$$U_k^{(n)} := u_k^{(n)} \prod_{j=1}^M (1 + \delta^{(n)} u_{k-j}^{(n)}), \quad V_k^{(n)} := \prod_{j=0}^M (1 + \delta^{(n)} u_{k-j}^{(n)}). \quad (2.2)$$

Lax 行列 $\mathcal{R}^{(n)}$ において、 $\delta^{(n)} > 0$ と (1.2) を考慮すると、(2.2) より、 $k = 1, 2, \dots, M_m + M$ に対して $V_k^{(n)} \geq 1$ である。従って、(2.1) は

$$\mathcal{L}^{(n+1)} = (\mathcal{R}^{(n)})^{-1} \mathcal{L}^{(n)} \mathcal{R}^{(n)} \quad (2.3)$$

と書けるので、 $\mathcal{L}^{(n)}$ と $\mathcal{L}^{(n+1)}$ は相似であり、dhLV 系の時間発展 $n \rightarrow n+1$ は $\mathcal{L}^{(n)}$ の固有値保存変形を与える。さらに、単位行列を I 、任意の実数を d とすれば、 $\mathcal{L}^{(0)} + dI$ と $\mathcal{L}^{(1)} + dI, \mathcal{L}^{(2)} + dI, \dots$ の固有値も保存される。従って、dhLV 系に関する保存量は

$$\sum_{k=1}^{M_m} U_k^{(n+1)} = \sum_{k=1}^{M_m} U_k^{(n)}, \quad \prod_{k=1}^m U_{M_k}^{(n+1)} = \prod_{k=1}^m U_{M_k}^{(n)} \quad (2.4)$$

で与えられる。(2.4) の第 1 式は $\mathcal{L}^{(n)}$ の全固有値の $(M+1)$ 乗和、第 2 式は $\mathcal{L}^{(n)}$ の行列式の値である。ある正数 K_0 に対し $0 < u_k^{(0)} < K_0$ ($k = 1, 2, \dots, M_m$) と定めれば、正数 K_1, K_2 に対して、 $0 < \sum_{k=1}^{M_m} U_k^{(0)} < K_1$ 、 $0 < \prod_{k=1}^m U_{M_k}^{(0)} < K_2$ が成立する。これより、 $n = 1, 2, \dots$ に対して、

$0 < u_k^{(n)} < K$ となる．ただし、 K は正数とする．このとき、dhLV 変数 $u_k^{(n)}$ の解挙動に関して、以下の定理が得られる．

定理 2.1 $k = 1, 2, \dots, M_m$ に対し $0 < u_k^{(0)} < K_0$ とする．このとき dhLV 系 (1.2) の $n \rightarrow \infty$ における漸近挙動は以下で与えられる．

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_{M_k}^{(n)} = c_k, \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (2.5)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_{M_k+p}^{(n)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, m-1, \quad p = 1, 2, \dots, M. \quad (2.6)$$

ここで、 c_k は正数であり、 $c_1 \geq c_2 \geq \dots \geq c_m$ を満たす．

定理 2.1 を用いれば、(2.2) の第 1 式で与えられる $U_k^{(n)}$ の漸近挙動は $\lim_{n \rightarrow \infty} U_{M_k}^{(n)} = c_k$ ($k = 1, 2, \dots, m$)、 $\lim_{n \rightarrow \infty} U_{M_k+p}^{(n)} = 0$ ($k = 1, 2, \dots, m-1, p = 1, 2, \dots, M$) となる．(2.2), (2.5), (2.6) より、 $U_k^{(n)}$ と $V_k^{(n)}$ の極限が存在するので、 $\mathcal{L}^{(n)} + dI$ の極限は

$$\mathcal{L}(d) := \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{L}^{(n)} + dI = \begin{pmatrix} \mathcal{L}_1(d) & & & \\ \mathcal{I}_M & \mathcal{L}_2(d) & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \mathcal{I}_M & \mathcal{L}_m(d) \end{pmatrix}$$

となる．ただし、ブロック行列 $\mathcal{L}_k(d)$, $\mathcal{I}_M$ は $(M+1) \times (M+1)$ 行列

$$\mathcal{L}_k(d) := \begin{pmatrix} d & & & c_k \\ 1 & d & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & d \end{pmatrix}, \quad \mathcal{I}_M := \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 \\ & \ddots & & 0 \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$

である．このとき、 $\det(\lambda I - \mathcal{L}_k(d)) = (\lambda - d)^{M+1} - c_k$ なので、 $\mathcal{L}(d)$ の固有多項式は

$$\det(\lambda I - \mathcal{L}(d)) = \prod_{k=1}^m \{(\lambda - d)^{M+1} - c_k\} \quad (2.7)$$

となる． $\mathcal{L}(d)$ と $\mathcal{L}^{(n)} + dI$ が相似であることから、 $\mathcal{L}^{(n)} + dI$ の固有値に関して、次の定理が得られる．

定理 2.2 $\mathcal{L}^{(n)} + dI$ の固有多項式は c_k を用いて、(2.7) のように因数分解される．従って固有値は以下で与えられる．

$$\lambda_{k,\ell} = \sqrt[M+1]{c_k} \left\{ \cos \left(\frac{2\ell\pi}{M+1} \right) + i \sin \left(\frac{2\ell\pi}{M+1} \right) \right\} + d, \quad (2.8)$$

$$\ell = 1, 2, \dots, M+1, \quad k = 1, 2, \dots, m.$$

ある有限の n では、 $\mathcal{L}^{(0)} + dI$ の固有多項式は近似的に $\prod_{k=1}^m \{(\lambda - d)^{M+1} - U_{M_k}^{(n)}\}$ と因数分解され、 n が大きくなるにつれて (2.7) の右辺に近づく． $M, m, d, U_k^{(0)}$ の値は初期行列 $\mathcal{L}^{(0)} + dI$ より定め、 $\delta^{(n)} > 0$ とする．次に、 $\mathcal{L}^{(0)} + dI$ の成分 $U_k^{(0)}$ をもとに dhLV 系の初期値を

$$u_k^{(0)} = \frac{U_k^{(0)}}{\prod_{j=1}^M (1 + \delta^{(0)} u_{k-j}^{(0)})}, \quad k = 1, 2, \dots, M_m \quad (2.9)$$

とする．(2.9) の値をもとに、dhLV 系 (1.2) を利用して、 $u_k^{(1)}, u_k^{(2)}, \dots$ を逐次的に求め、十分小さな

$\epsilon > 0$ に対して $\max_{k \neq M_1, M_2, \dots, M_m} u_k^{(n)} < \epsilon$ が満たされた時点で反復を停止する．そのときの $u_{M_k}^{(n)}$ の値を c_k の近似値とみなせば，(2.8) より $\mathcal{L}^{(0)} + dI$ の近似固有値が得られる．以上の手順により，帯行列 $\mathcal{L}^{(0)} + dI$ の固有値を計算するアルゴリズムとして dhLV アルゴリズムが定式化できる．

3 dhToda 方程式に基づく固有値計算

dhToda 方程式 (1.4) の Lax 表示

$$L^{(n+1)} R^{(n+M)} = R^{(n)} L^{(n)}, \quad (3.1)$$

$$L^{(n)} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ E_1^{(n)} & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & E_{m-1}^{(n)} & 1 \end{pmatrix}, \quad R^{(n)} = \begin{pmatrix} Q_1^{(n)} & 1 & & \\ & Q_2^{(n)} & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & Q_m^{(n)} \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

に現れる Lax 行列 $L^{(n)}, R^{(n)}$ の積 $X^{(n)} := L^{(n)} R^{(n+M-1)} R^{(n+M-2)} \dots R^{(n+1)} R^{(n)}$ を考える．(3.1) より， $X^{(n)}$ の固有値は離散時間 n によらず一定となることがわかる．すなわち， $X^{(0)}$ の固有値は dhToda 方程式の時間発展によって変化しない．なお，[6] では $X^{(n)}$ のトレースが n によって変化しないことが示されている．

また，dhToda 方程式の変数 $Q_k^{(n)}, E_k^{(n)}$ の漸近挙動は以下で与えられる．

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{j=0}^{M-1} Q_k^{(n+j)} = \lambda_k, \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad (3.3)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E_k^{(n)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, m-1. \quad (3.4)$$

(3.3), (3.4) より， $n \rightarrow \infty$ において $X^{(n)}$ は上三角行列に収束することは明らか．さらに，対角成分は λ_k で与えられ， $X^{(n)}$ の固有値となる．上記の Lax 表示に関する議論と合わせると， $\lim_{n \rightarrow \infty} X^{(n)}$ の対角成分は $X^{(0)}$ の固有値となる．以上より， $X^{(0)}$ の固有値を求めるアルゴリズムとして dhToda アルゴリズムが定式化できる．dhToda アルゴリズムの詳細は講演時に述べる．

参考文献

- [1] A. Fukuda, E. Ishiwata, M. Iwasaki, Y. Nakamura, The discrete hungry Lotka-Volterra system and a new algorithm for computing matrix eigenvalues, *Inverse Problems*, **25** (2009), 015007.
- [2] A. Fukuda, E. Ishiwata, Y. Yamamoto, M. Iwasaki, Y. Nakamura, The discrete hungry integrable systems and their related algorithms, submitted.
- [3] M. Iwasaki, Y. Nakamura, On the convergence of a solution of the discrete Lotka-Volterra system, *Inverse Problems*, **18** (2002), 1569–1578.
- [4] 中村 佳正 (編著), 可積分系の応用数理, 裳華房, 東京, 2000.
- [5] Y. B. Suris, Integrable discretization of the Bogoyavlensky lattices, *J. Math. Phys.*, **37** (1996), 3982–3996.
- [6] T. Tokihiro, A. Nagai, J. Satsuma, Proof of solitonical nature of box and ball systems by means of inverse ultra-discretization, *Inverse Problems*, **15** (1999), 1639–1662.
- [7] 辻本 諭, 広田 良吾, 大石 進一, Volterra 方程式の拡張とその差分化 I, 電子情報通信学会技術研究報告, **92**–90 (1993), 1–3.