

Ostrowski 型下界と Brauer 型下界をシフトとして 用いた dqds 法の収束性について

山本 有作* 宮田 考史*

* 名古屋大学 大学院工学研究科 計算理工学専攻

概要. 本論文では、特異値計算のための dqds 法において、最小特異値に対する Ostrowski 型下界および Brauer 型下界をシフトとして用いた場合の収束性を理論的に解析する。いずれの場合も、シフトは大域的収束性のための条件を満たす。また、漸近的収束率は、Ostrowski 型下界の場合に 1.5 次、Brauer 型下界の場合に超 1.5 次となることが示される。数値実験の結果、これらの性質を実際に観察できた。

On Convergence of dqds Algorithm that Uses Ostrowski and Brauer Type Lower Bounds as Shifts

Yusaku Yamamoto* Takafumi Miyata*

*Department of Computational Science & Engineering, Nagoya University

Abstract. Recently, Aishima et al. proved that the dqds algorithm that uses the Johnson bound for the smallest singular value as shifts is globally convergent and its asymptotic convergence rate is 1.5. In this paper, we study the convergence of the dqds algorithm when Ostrowski and Brauer type bounds, which are stronger lower bounds than the Johnson bound, are used as shifts. Both shifting strategies satisfy the conditions for global convergence. The asymptotic convergence rate is shown to be 1.5 for the Ostrowski bound and super-1.5 for the Brauer bound. Numerical experiments support our theoretical analysis.

1. はじめに

A を任意の $n \times m$ 実行列 ($n \geq m$) とするとき、 A は $n \times m$ の列直交行列 (列ベクトルが正規直交系をなす行列) U , $m \times m$ の直交行列 V , 対角行列 $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m)$ ($\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_m \geq 0$) を用いて $A = U\Sigma V^T$ と書ける。ただし、上付き添字 T は行列の転置を表す。これを A の特異値分解と呼び、 $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m$ を A の特異値と呼ぶ [4]。行列の特異値は情報検索、画像処理、最小二乗法、電子状態計算など様々な応用で大きな役割を果たし、その数値計算は重要である。

特異値を求める標準的なアルゴリズムでは、まず A を $n \times m$ の列直交行列 U_1 , $m \times m$ の上二重対角行列 B , $m \times m$ の直交行列 V_1 の積に $A = U_1 B V_1^T$ と分解し (二重対角化), 次に B の特異値を求める [4]。このうち、二重対角化は有限回の演算で実行できるが、 B の特異値計算は有限回の演算で行うことができず、反復法が必要である。

二重対角行列の特異値計算には、従来、QR 法、分割統治法などの方法が使われてきたが、近年、qd 法の改良版である dqds (differential qd with shift) 法が提案され [8]、高速性・高精度性から利用が広まりつつある。dqds 法は線形計算ライブラリ LAPACK [3] においてルーチン DLASQ として実装されているほか、固有値分解・特異値分解のための画期的な手法として注目されている MR³ (Multiple Relatively Robust Representations) アルゴリズム [5] [6] [7] においても不可欠な部品として用いられている。

しかし dqds 法の収束性に関しては、従来理論的な結果があまり知られていなかった。大域的収束性については、収束加速のための原点シフトを行わない場合の証明が [13] で与えられているが、実用上重要なシフト付きの場合については、証明が知られていなかった。局所的収束性については、シフトがある特別な条件を満たす場合に 2 次収束であることが示されている [8]。しかしこの条件は、一般には保証することが困難な条件であり、あるシフトの取り方をすれば 2 次収束が保証できるという結果にはなっていない。

最近、相島らは dqds 法の収束性について新たな理論的結果を示した [1] [2]。彼らは、各ステップにおけるシフトを非負かつ二重対角行列の最小特異値より小さく選べば、dqds 法の大域的収束性が保証されることを示した。さらに、より具体的にシフトを Johnson 下界と呼ばれる最小特異値の下界に基づいて決めた場合に、収束次数が漸近的に 1.5 次となることを示した。しかし、これ以外のシフトを用いた場合に収束性がどうなるかについてはまだわかっていない。

そこで本論文では、相島らの解析の枠組みに基づき、最小特異値に対するより良い下界を用いてシフトを決めた場合の収束次数について考察する。具体的には、Ostrowski 型の下界と Brauer 型の下界 [11] について解析を行い、漸近的収束次数がそれぞれ 1.5 次、超 1.5 次となることを示す。最近、Brauer 型の下界を改良した下界が中務らにより提案されており [12]、Brauer 型の下界に対する理論的結果は中務らの下界に対しても適用できる。

本論文の構成は以下の通りである。まず 2 章で、dqds 法のアルゴリズムと相島らによる収束性解析の結果を述べる。3 章では、二重対角行列の最小特異値に対するいくつかの下界を紹介する。4 章、5 章では、それぞれ Ostrowski 型下界、Brauer 型下界を用いた場合の漸近的収束性を理論的に解析する。6 章で数値実験の結果を示し、最後に 7 章でまとめと今後の課題を述べる。

2. dqds 法のアルゴリズムと大域的収束性

本章では、 $m \times m$ の上二重対角行列

$$(2.1) \quad B = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & & \\ & b_3 & \ddots & \\ & & \ddots & b_{2m-2} \\ & & & b_{2m-1} \end{pmatrix}$$

に対する dqds 法のアルゴリズムを簡単に説明し、相島らによって与えられた大域的収束性に関する定理を述べる. なお, $b_1, b_2, \dots, b_{2m-1}$ の中に 0 の要素がある場合は, 簡単な前処理により, 二重対角部分の要素がすべて非零の, より小型の上二重対角行列に変形できる [8] [2]. よって, 以下では一般性を失わずに, $b_1, b_2, \dots, b_{2m-1}$ はすべて非零の実数であると仮定する. また, このとき B の特異値はすべて異なり [14], $\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_m > 0$ とおけることに注意する.

2.1 pqds 法と dqds 法

dqds 法を説明するため, まずシフト付き LR 法 [15] を対称正定値行列に特化した方法としてシフト付き LL^T 法を考え, これを対称正定値行列 BB^T に適用することを考える. すると, 反復式は次のようになる.

$$(2.2) \quad \left(B^{(n+1)}\right)^T B^{(n+1)} = B^{(n)} \left(B^{(n)}\right)^T - s^{(n)} I.$$

ここで, $B^{(0)} = B$ とする. また, $s^{(n)}$ は第 n 反復におけるシフトであり, 右辺の正定値性を保証するよう, $B^{(n)} \left(B^{(n)}\right)^T$ の最小固有値, すなわち $B^{(n)}$ の最小特異値の 2 乗 $(\sigma_m^{(n)})^2$ より小さい値に取る. このとき, $B^{(n)}$ はすべて上二重対角行列であり, $n \rightarrow \infty$ とすると $B^{(n)}$ は対角行列に近づくことが経験的に知られている. これを利用して, B の特異値を計算することができる. なお, $B^{(n)}$ では一般に $(m-1, m)$ 要素が速く 0 に近づくため, この要素が十分小さくなった段階で (m, m) 要素を特異値として分離する (減次) ことにより, より小さいサイズの行列に対して LL^T 法を続行することができる.

いま,

$$(2.3) \quad B^{(n)} = \begin{pmatrix} b_1^{(n)} & b_2^{(n)} & & & \\ & b_3^{(n)} & \ddots & & \\ & & \ddots & b_{2m-2}^{(n)} & \\ & & & b_{2m-1}^{(n)} & \\ & & & & b_{2m-1}^{(n)} \end{pmatrix}$$

とし, $2m-1$ 個の変数 $q_k^{(n)}, e_k^{(n)}$ を次のように定義する.

$$(2.4) \quad q_k^{(n)} = \left(b_{2k-1}^{(n)}\right)^2 \quad (k = 1, 2, \dots, m),$$

$$(2.5) \quad e_k^{(n)} = \left(b_{2k}^{(n)}\right)^2 \quad (k = 1, 2, \dots, m-1).$$

このとき, LL^T 法のアルゴリズムは次のように $q_k^{(n)}, e_k^{(n)}$ を用いて書き換えることができる.

[アルゴリズム 2.1: pqds 法]

初期設定: $q_k^{(0)} = (b_{2k-1})^2$ ($k = 1, 2, \dots, m$)

$e_k^{(0)} = (b_{2k})^2$ ($k = 1, 2, \dots, m-1$)

```

1:  for  $n = 0, 1, \dots$  do
2:      シフト量  $s^{(n)} (\geq 0)$  の設定
3:       $e_0^{(n+1)} := 0$ 
4:      for  $k = 1, \dots, m-1$  do
5:           $q_k^{(n+1)} := q_k^{(n)} - e_{k-1}^{(n+1)} + e_k^{(n)} - s^{(n)}$ 
6:           $e_k^{(n+1)} := e_k^{(n)} q_{k+1}^{(n)} / q_k^{(n+1)}$ 
7:      end for
8:       $q_m^{(n+1)} := q_m^{(n)} - e_{m-1}^{(n+1)} - s^{(n)}$ 
9:  end for

```

このアルゴリズムを pqds (progressive qd with shift) 法 [15] と呼ぶ. LL^T 法の収束に対応し, pqds 法では, $n \rightarrow \infty$ において $e_k^{(n)}$ が 0 に収束し, $q_k^{(n)}$ が $B^{(n)}$ の特異値に近づくことが経験的に知られている. また, $e_{m-1}^{(n)}$ が十分 0 に近づいた段階で減次を行うことができる.

Fernando と Parlett は, pqds 法に新たな中間変数

$$(2.6) \quad d_1^{(n+1)} = q_1^{(n)} - s^{(n)}$$

$$(2.7) \quad d_k^{(n+1)} = q_k^{(n)} - e_{k-1}^{(n+1)} - s^{(n)} \quad (k = 2, 3, \dots, m)$$

を導入することにより, 次のアルゴリズムを導出した.

[アルゴリズム 2.2: dqds 法]

初期設定: $q_k^{(0)} = (b_{2k-1})^2$ ($k = 1, 2, \dots, m$)

$e_k^{(0)} = (b_{2k})^2$ ($k = 1, 2, \dots, m-1$)

```

1:  for  $n = 0, 1, \dots$  do
2:      シフト量  $s^{(n)} (\geq 0)$  の設定
3:       $d_1^{(n+1)} := q_1^{(n)} - s^{(n)}$ 
4:      for  $k = 1, \dots, m-1$  do
5:           $q_k^{(n+1)} := d_k^{(n+1)} + e_k^{(n)}$ 
6:           $e_k^{(n+1)} := e_k^{(n)} q_{k+1}^{(n)} / q_k^{(n+1)}$ 
7:           $d_{k+1}^{(n+1)} := d_k^{(n+1)} q_{k+1}^{(n)} / q_k^{(n+1)} - s^{(n)}$ 
8:      end for
9:       $q_m^{(n+1)} := d_m^{(n+1)}$ 
10: end for

```

これを dqds 法と呼ぶ [8]. dqds 法は pqds 法と等価であり, $q_k^{(n)}$, $e_k^{(n)}$ の値も等しい. し

かし、すべての変数が正値であり、かつ減算がシフト $s^{(n)}$ の部分に限定されているため、pqds 法に比べて桁落ちによる精度悪化が生じにくい。このため、現在では pqds 法に代わって dqds 法が広く用いられている。

以下の解析では、両手法が等価であることから、[2] にならって pqds 法に対して解析を行うが、得られた結果はそのまま dqds 法に対しても成り立つ。また、[2] にならい、

$$(2.8) \quad e_0^{(n)} = 0, \quad e_m^{(n)} = 0 \quad (n = 0, 1, \dots)$$

と定義する。

2.2 大域的収束性

本節では、以下の章で使うため、相島ら [1] [2] による補題と定理を証明なしに述べる。まず、次の補題が成り立つ。

補題 2.1 (pqds 法における正値性) $b_k \neq 0$ ($k = 1, 2, \dots, 2m-1$) を満たす上二重対角行列 B に pqds 法を適用するとき、 $s^{(n)} < (\sigma_m^{(n)})^2$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) ならば、 $n = 1, 2, \dots$ で $(B^{(n)})^T B^{(n)}$ は正定値であり、 $q_k^{(n)} > 0$ ($k = 1, \dots, m$)、 $e_k^{(n)} > 0$ ($k = 1, \dots, m-1$)。

次に、pqds 法の大域的収束性について、次の定理が成り立つ。

定理 2.2 (pqds 法の大域的収束性) 行列 B が $b_k \neq 0$ ($k = 1, 2, \dots, 2m-1$) を満たすとする。pqds 法におけるシフト量 $s^{(n)}$ を、 $B^{(n)}$ の最小特異値 $\sigma_m^{(n)}$ に対して $0 \leq s^{(n)} < (\sigma_m^{(n)})^2$ とすれば、

$$(2.9) \quad \sum_{n=0}^{\infty} s^{(n)} \leq \sigma_m^2$$

が成り立つ。さらに、

$$(2.10) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} e_k^{(n)} = 0 \quad (k = 1, 2, \dots, m-1),$$

$$(2.11) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} q_k^{(n)} = \sigma_k^2 - \sum_{n=0}^{\infty} s^{(n)} \quad (k = 1, 2, \dots, m)$$

が成立する。

定理 2.3 (pqds 法の収束次数) 定理 2.2 と同じ仮定の下で、

$$(2.12) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{e_k^{(n+1)}}{e_k^{(n)}} = \frac{\sigma_{k+1}^2 - \sum_{n=0}^{\infty} s^{(n)}}{\sigma_k^2 - \sum_{n=0}^{\infty} s^{(n)}} \quad (k = 1, 2, \dots, m-1)$$

が成り立つ。したがって、 $e_k^{(n)}$ ($k = 1, 2, \dots, m-2$) の収束次数は 1 次である。また、 $e_{m-1}^{(n)}$ の収束次数は $\sigma_m^2 - \sum_{n=0}^{\infty} s^{(n)} > 0$ のとき 1 次で、 $\sigma_m^2 - \sum_{n=0}^{\infty} s^{(n)} = 0$ のとき超 1 次となる。

pqds 法と dqds 法の等価性から, 補題 2.1, 定理 2.2, 定理 2.3 は dqds 法についても成り立つ. また, dqds 法では変数 $d_k^{(n)}$ の正值性も示せる [1] [2].

定理 2.2 より, pqds 法の各ステップにおいてシフト $s^{(n)}$ を $B^{(n)}$ の最小特異値の 2 乗より小さく取れば, 大域的収束性が保証される. したがって, たとえば最小特異値に対する狭義の下界 λ が与えられたとき, $(\max\{\lambda, 0\})^2$ をシフトとして用いる方法が考えられる. そこで次章では, 最小特異値に対する種々の下界について述べる.

3. 二重対角行列の最小特異値に対する種々の下界

本章では, 上二重対角行列 B の最小特異値に対する下界について述べる. その準備として, まず対称三重対角行列の最小固有値に対する下界について述べる.

3.1 対称三重対角行列の最小固有値に対する下界

$A = (a_{ij})$ を $m \times m$ の実対称三重対角行列とし, その固有値を $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_m > 0$ とする. また, $a_{10} = a_{m,m+1} = 0$ とおく. このとき, 固有値の存在範囲に関する Gerschgorin の定理 [9]:

$$(3.1) \quad \forall i, \exists k, |\lambda_i - a_{kk}| \leq |a_{k,k-1}| + |a_{k,k+1}|$$

において $i = m$ の場合を考えると, 最小固有値に対する次の下界が得られる.

定理 3.1 (最小固有値に対する Gerschgorin 型下界)

$$(3.2) \quad \lambda_m \geq \min_{1 \leq k \leq m} [a_{kk} - (|a_{k,k-1}| + |a_{k,k+1}|)].$$

同様に, 固有値の存在範囲に関する Brauer の定理 (Cassini の卵形) [9]:

$$(3.3) \quad \forall i, \exists j, k, j < k, |\lambda_i - a_{kk}| \cdot |\lambda_i - a_{jj}| \leq (|a_{k,k-1}| + |a_{k,k+1}|) (|a_{j,j-1}| + |a_{j,j+1}|)$$

において $i = m$ の場合を考え, $A - \lambda_m I$ が非負定値であることより $a_{kk} - \lambda_i \geq 0$, $a_{jj} - \lambda_i \geq 0$ に注意して 2 次不等式を解くと, 最小固有値に対する次の下界が得られる.

定理 3.2 (最小固有値に対する Brauer 型下界)

$$(3.4) \quad \lambda_m \geq \min_{1 \leq j < k \leq m} \frac{1}{2} \left[a_{kk} + a_{jj} - \sqrt{(a_{kk} - a_{jj})^2 + 4(|a_{k,k-1}| + |a_{k,k+1}|)(|a_{j,j-1}| + |a_{j,j+1}|)} \right].$$

さらに最近, 中務らは, Brauer の定理 (3.3) において, j, k としては $(a_{jk}, a_{kj}) \neq (0, 0)$ を満たす組合せのみを考慮すればよく, それによって計算量を抑えられると同時に存在範囲の推定をよりシャープに行えることを示した [12]. これを対称三重対角行列の場合に適用すると, 式 (3.4) において $j = k - 1$ においてよいことがわかり, 次の下界が得られる.

定理 3.3 (最小固有値に対する Nakatsukasa 下界)

$$(3.5) \quad \lambda_m \geq \min_{1 \leq k \leq m-1} \frac{1}{2} \left[a_{kk} + a_{k+1,k+1} - \sqrt{(a_{kk} - a_{k+1,k+1})^2 + 4(|a_{k,k-1}| + |a_{k,k+1}|)(|a_{k+1,k}| + |a_{k+1,k+2}|)} \right].$$

証明 定理 3.3 は予稿集 [12] で述べられているのみであるので, 対称三重対角行列の場合の証明を付録で与える. \square

次節では, 以上の最小固有値に対する下界を用いて, 二重対角行列の最小特異値に対する下界を導出する.

3.2 二重対角行列の最小特異値に対する下界

いま, B を上二重対角行列, $\sigma_m(B)$ をその最小特異値とし, 対称三重対角行列 A の最小固有値を $\lambda_m(A)$ と書くと, 次の補題が成り立つ [9].

補題 3.4

$$(3.6) \quad \lambda_m \left(\frac{1}{2} (B + B^T) \right) \leq \sigma_m(B).$$

さらに $b_1, b_2, \dots, b_{2m-1}$ がすべて非零ならば, 狭義の不等式が成り立つ.

証明 文献 [9] の p. 454, Problem 15 に証明の方針が述べられているが, 狭義の不等式が成り立つ条件については触れられていない. そこで付録において, 狭義の不等式の成立のための十分条件を含めた証明を与える. \square

補題 3.4 を用いると, $b_1, b_2, \dots, b_{2m-1}$ がすべて非零である上二重対角行列 B に対し, 最小固有値に対する任意の下界から, 最小特異値に対する狭義の下界を導ける. なお, このとき B の特異値はすべて異なり [14], $\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_m > 0$ なので, 補題 3.4 の適用に当たっては, 行列 $\frac{1}{2}(B + B^T)$ が正定値でないと意味がない. そこで, B の要素の符号を変えても特異値は変わらないことを利用し, $\frac{1}{2}(B + B^T)$ が正定値行列の必要条件を満たすよう, B の対角要素に絶対値を付けた行列に対して補題を適用する. この結果, 定理 3.1~3.3 より, それぞれ次の下界が導ける.

定理 3.5 (Johnson 下界 [10])

$$(3.7) \quad \sigma_m > \min_{1 \leq k \leq m} \left[|b_{2k-1}| - \frac{1}{2} (|b_{2k-2}| + |b_{2k}|) \right].$$

定理 3.6 (Brauer 型下界 [11])

(3.8)

$$\sigma_m > \min_{1 \leq j < k \leq m} \frac{1}{2} \left[|b_{2k-1}| + |b_{2j-1}| - \sqrt{(|b_{2k-1}| - |b_{2j-1}|)^2 + (|b_{2k-2}| + |b_{2k}|)(|b_{2j-2}| + |b_{2j}|)} \right].$$

定理 3.7 (Nakatsukasa 下界 [12])

(3.9)

$$\sigma_m > \min_{1 \leq k \leq m-1} \frac{1}{2} \left[|b_{2k-1}| + |b_{2k+1}| - \sqrt{(|b_{2k-1}| - |b_{2k+1}|)^2 + (|b_{2k-2}| + |b_{2k}|)(|b_{2k}| + |b_{2k+2}|)} \right].$$

一方, このようにして導かれる下界とは別に, Johnson らは, 一般の行列 $A = (a_{ij})$ の固有値の存在範囲に関する Ostrowski の定理 [9]:

$$(3.10) \quad \forall i, \exists k, \quad |\lambda_i - a_{kk}| \leq \left(\sum_{i \neq k} |a_{ik}| \right)^{1/2} \left(\sum_{j \neq k} |a_{kj}| \right)^{1/2}$$

を非正則行列

$$(3.11) \quad C = \begin{pmatrix} B & -\sigma_m I \\ -\sigma_m I & B^T \end{pmatrix}$$

に適用し, 零固有値を含む領域が存在することを用いて, σ_m に関する次の下界を導いた.

定理 3.8 (Ostrowski 型下界 [11] [16])

$$(3.12) \quad \sigma_m \geq \min_{1 \leq k \leq m} \left[\sqrt{|b_{2k-1}|^2 + \frac{1}{4} (|b_{2k-2}| - |b_{2k}|)^2} - \frac{1}{2} (|b_{2k-2}| + |b_{2k}|) \right].$$

ここで, 等号が成り立つのは, B の正規化された右特異ベクトル \mathbf{x} , 左特異ベクトル \mathbf{y} の成分が $|y_k| = |x_{k+1}|$ ($1 \leq k \leq m-1$) かつ $|y_m| = |x_1|$ を満たすときのみである.

証明 不等式の証明は文献 [11], 等号成立条件は文献 [16] に述べられている. ただし, [16] は未公開であるので, この部分を中心とした証明の概略を付録に含める. \square

定理 3.8 からわかるように, Ostrowski 型下界は, 本節で紹介した他の下界と異なり, 狭義の下界にはなっていない. しかし, 定理が示す通り, 等号が成立するのは左右の特異ベクトルが極めて特殊な条件を満たすときのみである. したがって, ほとんどの場合は, Ostrowski 型下界も狭義の下界を与えることに注意する.

以上で述べた下界の強さについては,

Johnson 下界 \leq Ostrowski 型下界

Johnson 下界 \leq Brauer 型下界 \leq Nakatsukasa 下界

が示せる [11] [12]. ただし, Ostrowski 型下界と Brauer 型下界, Ostrowski 型下界と Nakatsukasa 下界の間には, 単純な強弱関係はない.

また, 下界の計算量は, Johnson 下界, Ostrowski 型下界, Nakatsukasa 下界は $O(m)$, Brauer 型下界は $O(m^2)$ であることに注意する.

4. Ostrowski 型下界に対する dqds 法の収束性

本章では, 最小特異値に対する Ostrowski 型下界に基づきシフトを決めた場合の dqds 法の収束性について考察する. いま, Ostrowski 型下界の式を dqds 法の変数を使って書き直すと,

$$(4.1) \quad \sigma_m \geq \lambda_O^{(n)} = \min_{1 \leq k \leq m} \left[\sqrt{q_k^{(n)} + \frac{1}{4} \left(\sqrt{e_k^{(n)}} - \sqrt{e_{k-1}^{(n)}} \right)^2} - \frac{1}{2} \left(\sqrt{e_k^{(n)}} + \sqrt{e_{k-1}^{(n)}} \right) \right]$$

となる. ここで, 等号が成立する場合は $\lambda_O^{(n)}$ 自体が計算すべき最小特異値になっているため, 以下では狭義の不等号が成り立つ場合に限って収束性を議論する. この下界を使って第 n 反復におけるシフト量を

$$(4.2) \quad s_O^{(n)} = \left(\max \{ \lambda_O^{(n)}, 0 \} \right)^2$$

と決めると, これは定理 2.2 の仮定を満たすから, dqds 法の大域的収束性が保証される. また, Ostrowski 型下界は Johnson 下界より強い下界であるから, Johnson 下界に基づくシフトに比べ, 収束性が向上する可能性がある. そこで以下では, Johnson 下界に対する相島らの解析 [1] [2] の枠組みを利用し, シフト $s_O^{(n)}$ に対する漸近的収束次数を調べる.

まず, n が十分大きいとき, $\lambda_O^{(n)}$ は $q_m^{(n)}$ と $e_{m-1}^{(n)}$ だけで決まり, その結果, $q_m^{(n)}$ が 0 に近づくことを示す.

補題 4.1 ($n \rightarrow \infty$ での Ostrowski 型下界の式) n が十分大きいとき, 式 (4.1) 右辺の最小値は $k = m$ で達成され,

$$(4.3) \quad \lambda_O^{(n)} = \sqrt{q_m^{(n)} + \frac{1}{4} e_{m-1}^{(n)}} - \frac{1}{2} \sqrt{e_{m-1}^{(n)}}$$

となる.

証明 $k < m$ とすると,

$$(4.4) \quad \begin{aligned} & \left[\sqrt{q_k^{(n)} + \frac{1}{4} \left(\sqrt{e_k^{(n)}} - \sqrt{e_{k-1}^{(n)}} \right)^2} - \frac{1}{2} \left(\sqrt{e_k^{(n)}} + \sqrt{e_{k-1}^{(n)}} \right) \right] - \left[\sqrt{q_m^{(n)} + \frac{1}{4} e_{m-1}^{(n)}} - \frac{1}{2} \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \right] \\ &= \frac{q_k^{(n)} - q_m^{(n)} + \frac{1}{4} \left(\sqrt{e_k^{(n)}} - \sqrt{e_{k-1}^{(n)}} \right)^2 - \frac{1}{4} e_{m-1}^{(n)}}{\sqrt{q_k^{(n)} + \frac{1}{4} \left(\sqrt{e_k^{(n)}} - \sqrt{e_{k-1}^{(n)}} \right)^2} + \sqrt{q_m^{(n)} + \frac{1}{4} e_{m-1}^{(n)}}} - \frac{1}{2} \left(\sqrt{e_k^{(n)}} + \sqrt{e_{k-1}^{(n)}} - \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \right). \end{aligned}$$

ここで, $\lim_{n \rightarrow \infty} e_k = \lim_{n \rightarrow \infty} e_{k-1} = \lim_{n \rightarrow \infty} e_{m-1} = 0$ より, この式の右辺は $n \rightarrow \infty$ のとき

$$(4.5) \quad \frac{q_k^{(n)} - q_m^{(n)}}{\sqrt{q_k^{(n)}} + \sqrt{q_m^{(n)}}} > 0$$

に近づく. したがって, 十分大きな n に対して, 式 (4.1) の右辺の最小値は $k = m$ で達成され, 式 (4.3) が成り立つ. \square

補題 4.2 (対角要素の収束性)

$$(4.6) \quad \sum_{n=0}^{\infty} s_O^{(n)} = \sigma_m^2,$$

$$(4.7) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} q_k^{(n)} = \sigma_k^2 - \sigma_m^2 \quad (1 \leq k \leq m-1),$$

$$(4.8) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} q_m^{(n)} = 0.$$

証明 補題 4.1 と式 (4.1) より, n が十分大きいとき, $\lambda_O^{(n)} \rightarrow \sqrt{q_m^{(n)}} \geq 0$ となる. したがって,

$$(4.9) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} s_O^{(n)} = \lim_{n \rightarrow \infty} (\max\{\lambda_O^{(n)}, 0\})^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} q_m^{(n)}.$$

一方, $\sum_{n=0}^{\infty} s_O^{(n)} \leq \sigma_m^2$ より $\lim_{n \rightarrow \infty} s_O^{(n)} = 0$. よって $\lim_{n \rightarrow \infty} q_m^{(n)} = 0$. これを式 (2.11) に代入して式 (4.6), (4.7) が導ける. \square

さらに, 次の補題が成り立つ.

補題 4.3 ($n \rightarrow \infty$ での Ostrowski 下界の正值性) 十分大きなすべての n に対して $\lambda_O^{(n)} > 0$.

証明 補題 4.1 より, 十分大きなすべての n に対して, 下界は $k = m$ で達成される. このとき, $q_m^{(n)} > 0$ より,

$$(4.10) \quad \begin{aligned} \lambda_O^{(n)} &= \sqrt{q_m^{(n)} + \frac{1}{4}e_{m-1}^{(n)}} - \frac{1}{2}\sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \\ &= \frac{q_m^{(n)}}{\sqrt{q_m^{(n)} + \frac{1}{4}e_{m-1}^{(n)}} + \frac{1}{2}\sqrt{e_{m-1}^{(n)}}} > 0. \end{aligned}$$

\square

補題 4.1 と補題 4.3 より, n が十分大きいところで, シフト量は次のように確定する.

補題 4.4 ($n \rightarrow \infty$ でのシフト量) n が十分大きいとき,

$$(4.11) \quad s_O^{(n)} = (\lambda_O^{(n)})^2 = q_m^{(n)} + \frac{1}{2}e_{m-1}^{(n)} - \sqrt{e_{m-1}^{(n)}q_m^{(n)} + \frac{1}{4}(e_{m-1}^{(n)})^2} > 0.$$

補題 4.1～補題 4.4 を用いると、次のように、Ostrowski 型下界を用いた dqds 法の収束次数が 1.5 次であることが示せる。なお、次の定理が示しているのは $e_{m-1}^{(n)}$ と $q_m^{(n)}$ の 1.5 次収束性だけであるが、 $e_{m-1}^{(n)}$ が十分 0 に近づいた段階で減次を行うので、この定理の主張のみで十分である [1] [2].

定理 4.5 (Ostrowski 型下界を用いた dqds 法の収束次数) シフト量を Ostrowski 型下界で決定する dqds 法において、 $e_{m-1}^{(n)}$ と $q_m^{(n)}$ は次の式を満たし、1.5 次収束である。

$$(4.12) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{e_{m-1}^{(n+1)}}{(e_{m-1}^{(n)})^{3/2}} = \frac{1}{\sqrt{\sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2}},$$

$$(4.13) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{q_m^{(n+1)}}{(q_m^{(n)})^{3/2}} = \frac{1}{\sqrt{\sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2}}.$$

したがって、 $B^{(n)}$ の右下の 2 つの要素 $b_{2m-2}^{(n)}$, $b_{2m-1}^{(n)}$ も 0 に 1.5 次収束する。さらに、

$$(4.14) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{e_{m-1}^{(n)}}}{q_m^{(n)}} = \frac{1}{\sqrt{\sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2}}$$

が成り立つ。

証明 $q_m^{(n+1)}$ の計算式 (アルゴリズム 2.1 の第 8 行) に $s_O^{(n)}$ の式を代入すると、

$$(4.15) \quad \begin{aligned} q_m^{(n+1)} &= q_m^{(n)} - e_{m-1}^{(n+1)} - s_O^{(n)} \\ &= \sqrt{e_{m-1}^{(n)} q_m^{(n)} + \frac{1}{4} (e_{m-1}^{(n)})^2} - e_{m-1}^{(n+1)} - \frac{1}{2} e_{m-1}^{(n)}. \end{aligned}$$

ここで、右辺、左辺にそれぞれアルゴリズム 2.1 の第 6 行から得られる式

$$(4.16) \quad q_m^{(n+1)} = q_{m-1}^{(n+2)} e_{m-1}^{(n+2)} / e_{m-1}^{(n+1)},$$

$$(4.17) \quad e_{m-1}^{(n)} q_m^{(n)} = q_{m-1}^{(n+1)} e_{m-1}^{(n+1)}$$

を代入すると、

$$(4.18) \quad \begin{aligned} \frac{q_{m-1}^{(n+2)} e_{m-1}^{(n+2)}}{e_{m-1}^{(n+1)}} &= \sqrt{q_{m-1}^{(n+1)} e_{m-1}^{(n+1)} + \frac{1}{4} (e_{m-1}^{(n)})^2} - e_{m-1}^{(n+1)} - \frac{1}{2} e_{m-1}^{(n)} \\ &= \frac{q_{m-1}^{(n+1)} e_{m-1}^{(n+1)}}{\sqrt{q_{m-1}^{(n+1)} e_{m-1}^{(n+1)} + \frac{1}{4} (e_{m-1}^{(n)})^2} + \frac{1}{2} e_{m-1}^{(n)}} - e_{m-1}^{(n+1)}. \end{aligned}$$

両辺を $q_{m-1}^{(n+2)} \sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}}$ で割ると,

$$(4.19) \quad \frac{e_{m-1}^{(n+2)}}{(e_{m-1}^{(n+1)})^{3/2}} = \frac{\sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}}}{q_{m-1}^{(n+2)}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{q_{m-1}^{(n+1)}} \cdot \frac{(e_{m-1}^{(n)})^2}{e_{m-1}^{(n+1)}} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{q_{m-1}^{(n+1)}} \cdot \frac{(e_{m-1}^{(n)})^2}{e_{m-1}^{(n+1)}}}}}} - \frac{\sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}}}{\sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}}} \right\}.$$

ここで, $\{ \}$ の中が 1 に収束することを示す. まず, $\lim_{n \rightarrow \infty} q_{m-1}^{(n+1)} = \sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2 > 0$, $\lim_{n \rightarrow \infty} e_{m-1}^{(n+1)} = 0$ より, $\{ \}$ 中の第 2 項は $n \rightarrow \infty$ のとき 0 に収束する. 一方, 第 1 項の分母の平方根中にある因子 $(e_{m-1}^{(n)})^2 / e_{m-1}^{(n+1)}$ については, 式 (4.18) で $n+1 \rightarrow n$ として両辺の逆数を取った式を考え, さらにその両辺に $q_{m-1}^{(n+1)} e_{m-1}^{(n)}$ をかけると,

$$(4.20) \quad \frac{(e_{m-1}^{(n)})^2}{e_{m-1}^{(n+1)}} = q_{m-1}^{(n+1)} \cdot \frac{\sqrt{q_{m-1}^{(n)} e_{m-1}^{(n)} + \frac{1}{4} (e_{m-1}^{(n-1)})^2} + \frac{1}{2} e_{m-1}^{(n-1)}}{q_{m-1}^{(n)} - \sqrt{q_{m-1}^{(n)} e_{m-1}^{(n)} + \frac{1}{4} (e_{m-1}^{(n-1)})^2} - \frac{1}{2} e_{m-1}^{(n-1)}}.$$

ここで, 右辺の分数の分母は $\lim_{n \rightarrow \infty} q_{m-1}^{(n)} = \sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2 > 0$ に, 分子は 0 に収束する. したがって, $\lim_{n \rightarrow \infty} (e_{m-1}^{(n)})^2 / e_{m-1}^{(n+1)} = 0$ が成り立つ. これを式 (4.19) 右辺の $\{ \}$ 内に代入すると, $\{ \}$ の中が 1 に収束することがわかる. 以上より,

$$(4.21) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{e_{m-1}^{(n+2)}}{(e_{m-1}^{(n+1)})^{3/2}} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}}}{q_{m-1}^{(n+2)}} = \frac{1}{\sqrt{\sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2}}$$

であり, $e_{m-1}^{(n)}$ は 0 に 1.5 次収束する.

次に, 式 (4.21), (4.17), (4.7) より,

$$(4.22) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{q_m^{(n)}}{\sqrt{e_{m-1}^{(n)}}} = \lim_{n \rightarrow \infty} q_{m-1}^{(n+1)} \frac{e_{m-1}^{(n+1)}}{(e_{m-1}^{(n)})^{3/2}} = \sqrt{\sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2}$$

が成り立つ.

$q_m^{(n)}$ については,

$$(4.23) \quad \begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{q_m^{(n+1)}}{(q_m^{(n)})^{3/2}} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{q_m^{(n+1)}}{\sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}}} \left(\frac{q_m^{(n)}}{\sqrt{e_{m-1}^{(n)}}} \right)^{-3/2} \left(\frac{e_{m-1}^{(n+1)}}{(e_{m-1}^{(n)})^{3/2}} \right)^{1/2} \\ &= (\sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2)^{1/2-3/4-1/4} \\ &= (\sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2)^{-1/2} \end{aligned}$$

が成り立つ. □

5. Brauer 型下界に対する dqds 法の収束性

本章では、最小特異値に対する Brauer 型下界に基づいてシフトを決めた場合の dqds 法の収束性について考察する. 前章と同様に, Brauer 型下界の式を dqds 法の変数を使って書き直すと, 次のようになる.

$$\begin{aligned} \sigma_m &> \lambda_B^{(n)} \\ &= \min_{1 \leq j < k \leq m} \frac{1}{2} \left[\sqrt{q_k^{(n)}} + \sqrt{q_j^{(n)}} - \sqrt{\left(\sqrt{q_k^{(n)}} - \sqrt{q_j^{(n)}} \right)^2 + \left(\sqrt{e_k^{(n)}} + \sqrt{e_{k-1}^{(n)}} \right) \left(\sqrt{e_j^{(n)}} + \sqrt{e_{j-1}^{(n)}} \right)} \right]. \end{aligned} \quad (5.1)$$

この下界を使って第 n 反復におけるシフト量を

$$s_B^{(n)} = \left(\max \{ \lambda_B^{(n)}, 0 \} \right)^2 \quad (5.2)$$

と決めると, これは定理 2.2 の仮定を満たすから, dqds 法の大域的収束性が保証される. また, Brauer 型下界は Johnson 下界より強い下界であるから, Johnson 下界に基づくシフトに比べ, 収束性が向上する可能性がある. そこで以下では, Ostrowski 型下界の場合と同様, [1] [2] の解析の枠組みを利用し, シフト $s_B^{(n)}$ に対する漸近的収束次数を調べる.

まず, n が十分大きいとき, $\lambda_B^{(n)}$ は $\sqrt{q_m^{(n)}}$ に近づき, その結果, $q_m^{(n)}$ が 0 に近づくことを示す.

補題 5.1 ($n \rightarrow \infty$ での Brauer 型下界の式) n が十分大きいとき, 式 (5.1) 右辺の最小値は $k = m$ で達成され,

$$\begin{aligned} \lambda_B^{(n)} &= \min_{1 \leq j \leq m-1} \frac{1}{2} \left[\sqrt{q_m^{(n)}} + \sqrt{q_j^{(n)}} - \sqrt{\left(\sqrt{q_m^{(n)}} - \sqrt{q_j^{(n)}} \right)^2 + \left(\sqrt{e_m^{(n)}} + \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \right) \left(\sqrt{e_j^{(n)}} + \sqrt{e_{j-1}^{(n)}} \right)} \right] \end{aligned} \quad (5.3)$$

となる.

証明 まず, $j < k$ とすると, 十分大きい n に対して $q_k^{(n)} < q_j^{(n)}$ であるから,

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \left[\sqrt{q_k^{(n)}} + \sqrt{q_j^{(n)}} - \sqrt{\left(\sqrt{q_k^{(n)}} - \sqrt{q_j^{(n)}} \right)^2 + \left(\sqrt{e_k^{(n)}} + \sqrt{e_{k-1}^{(n)}} \right) \left(\sqrt{e_j^{(n)}} + \sqrt{e_{j-1}^{(n)}} \right)} \right] \\ (5.4) \quad &= \sqrt{q_k^{(n)}} + \frac{1}{2} \left(\sqrt{q_k^{(n)}} - \sqrt{q_j^{(n)}} \right) \left\{ \sqrt{1 + \frac{\left(\sqrt{e_k^{(n)}} + \sqrt{e_{k-1}^{(n)}} \right) \left(\sqrt{e_j^{(n)}} + \sqrt{e_{j-1}^{(n)}} \right)}{\left(\sqrt{q_k^{(n)}} - \sqrt{q_j^{(n)}} \right)^2}} - 1 \right\}. \end{aligned}$$

$\lim_{n \rightarrow \infty} e_i^{(n)} = 0$ ($1 \leq i \leq m$) であるから, 右辺の $\{ \}$ の中は $n \rightarrow \infty$ のとき 0 に収束し, 右辺は $\sqrt{q_k^{(n)}}$ に近づく. これが最小となるのは, $k = m$ のときである. \square

補題 5.2 (対角要素の収束性)

$$(5.5) \quad \sum_{n=0}^{\infty} s^{(n)} = \sigma_m^2,$$

$$(5.6) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} q_k^{(n)} = \sigma_k^2 - \sigma_m^2 \quad (1 \leq k \leq m-1),$$

$$(5.7) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} q_m^{(n)} = 0.$$

証明 補題 5.1 で示した通り, n が十分大きいとき, $\lambda_B^{(n)} \rightarrow \sqrt{q_m^{(n)}} \geq 0$ となる (下界の式 (5.1) の右辺で最小値を達成する j の値によらない). したがって,

$$(5.8) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} s_B^{(n)} = \lim_{n \rightarrow \infty} (\max\{\lambda_B^{(n)}, 0\})^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} q_m^{(n)}.$$

一方, $\sum_{n=0}^{\infty} s_B^{(n)} \leq \sigma_m^2$ より $\lim_{n \rightarrow \infty} s_B^{(n)} = 0$. よって $\lim_{n \rightarrow \infty} q_m^{(n)} = 0$. これを式 (2.11) に代入して式 (5.5), (5.6) が導ける. \square

次に, 十分大きいすべての n に対して $\lambda_B^{(n)} > 0$ となることを示す.

補題 5.3 ($n \rightarrow \infty$ での Brauer 下界の正值性) 補題 5.1 と同じ仮定の下で, 十分大きなすべての n について $\lambda_B^{(n)} > 0$.

証明 [1] [2] に従い, (i) どんな大きな整数 N' に対しても $\lambda_B^{(n)} > 0$ となる $n > N'$ が存在すること, および (ii) ある整数 N'' が存在して, $n > N''$ ならば「 $\lambda_B^{(n)} > 0 \Rightarrow \lambda_B^{(n+1)} > 0$ 」が成り立つこと, の 2 つを示せばよい.

まず (i) の証明は, Johnson 下界の場合 [2] とまったく同じである. すなわち, もしある N' に対して $\lambda_B^{(n)} = 0$ ($\forall n > N'$) となったとすると, $s_B^{(n)} = 0$ ($\forall n > N'$) であり, 定理 2.2 の式 (2.11) より,

$$(5.9) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} q_m^{(n)} = \sigma_m^2 - \sum_{n=0}^{\infty} s^{(n)} = \sigma_m^2 - \sum_{n=0}^{N'} s^{(n)} > 0$$

となるが, これは補題 5.2 に矛盾する.

次に (ii) を証明する. そのため, まず次のことに注意する.

(A) ある N_1 が存在して, $n > N_1$ ならば式 (5.1) の右辺の最小値は $k = m$ で達成される (補題 5.1 より).

(B) ある N_2 が存在して, $n > N_2$ ならば

$$(5.10) \quad \sqrt{q_j^{(n+1)}} > \frac{\sqrt{e_j^{(n+1)}} + \sqrt{e_{j-1}^{(n+1)}}}{2} \quad (1 \leq \forall j \leq m-1)$$

が成り立つ ($1 \leq j \leq m-1$ に対して $\lim_{n \rightarrow \infty} q_j^{(n)} > 0$, $\lim_{n \rightarrow \infty} e_j^{(n)} = 0$ より).

(C) ある N_3 が存在して, $n > N_3$ ならば

$$(5.11) \quad \sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}} \sqrt{e_j^{(n)}} > 5 \sqrt{q_j^{(n)}} \sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}} \quad (1 \leq \forall j \leq m-1)$$

が成り立つ ($1 \leq j \leq m-1$ に対して $\lim_{n \rightarrow \infty} q_j^{(n)} > 0$ であること, $1 \leq j \leq m-1$ に対して $e_j^{(n)}$ が 0 に 1 次収束すること, 式 (5.5) および定理 2.3 から $e_{m-1}^{(n)}$ が 0 に超 1 次収束することより).

そこで, $N'' = \max\{N_1, N_2, N_3\}$ とおく. いま, $n > N''$ とし, $\lambda_B^{(n)} > 0$ とする. このとき, (A) より, ($e_m^{(n)} = 0$ に注意して)

$$(5.12) \quad \lambda_B^{(n)} = \min_{1 \leq j \leq m-1} \frac{1}{2} \left[\sqrt{q_m^{(n)}} + \sqrt{q_j^{(n)}} - \sqrt{\left(\sqrt{q_m^{(n)}} - \sqrt{q_j^{(n)}}\right)^2 + \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_j^{(n)}} + \sqrt{e_{j-1}^{(n)}}\right)} \right].$$

さらに, 簡単な計算により

$$(5.13) \quad \lambda_B^{(n)} > 0 \quad \Leftrightarrow \quad \sqrt{q_m^{(n)}} \sqrt{q_j^{(n)}} > \frac{1}{4} \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_j^{(n)}} + \sqrt{e_{j-1}^{(n)}} \right) \quad (1 \leq \forall j \leq m-1)$$

が示せる. そこで, 式 (5.13) 右辺の不等式を用いて, 同じ不等式を $n+1$ の場合に示せばよい. $q_m^{(n+1)}$ の計算式に $s_B^{(n)} = (\lambda_B^{(n)})^2$ を代入すると, 式 (5.12) の右辺の最小値を与える j の値を j' とし,

$$\begin{aligned} q_m^{(n+1)} &= q_m^{(n)} - e_{m-1}^{(n+1)} - (\lambda_B^{(n)})^2 \\ &= \frac{1}{2} \left(\sqrt{q_m^{(n)}} + \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right) \sqrt{\left(\sqrt{q_m^{(n)}} - \sqrt{q_{j'}^{(n)}}\right)^2 + \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}}\right)} \\ &\quad - \frac{1}{2} \left(q_{j'}^{(n)} - q_m^{(n)} \right) - \frac{1}{4} \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) - e_{m-1}^{(n+1)} \\ &= \left[\frac{1}{4} \left(\sqrt{q_m^{(n)}} + \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right)^2 \left\{ \left(\sqrt{q_m^{(n)}} - \sqrt{q_{j'}^{(n)}}\right)^2 + \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}}\right) \right\} \right. \\ &\quad - \frac{1}{4} \left(q_{j'}^{(n)} - q_m^{(n)} \right)^2 - \frac{1}{4} \left(q_{j'}^{(n)} - q_m^{(n)} \right) \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) \\ &\quad \left. - \frac{1}{16} e_{m-1}^{(n)} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right)^2 \right] / A_n - e_{m-1}^{(n+1)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \left\{ q_m^{(n)} + \sqrt{q_m^{(n)}} \sqrt{q_{j'}^{(n)}} - \frac{1}{8} \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) \right\} \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) / A_n \\
&\quad - e_{m-1}^{(n+1)} \\
&> \frac{1}{2} \left(q_m^{(n)} + \frac{1}{2} \sqrt{q_m^{(n)}} \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right) \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) / A_n - e_{m-1}^{(n+1)} \\
&= \frac{1}{2} \sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}} \sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}} \left(\sqrt{q_m^{(n)}} + \frac{1}{2} \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right) \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) / A_n - e_{m-1}^{(n+1)}.
\end{aligned}
\tag{5.14}$$

ここで,

$$\begin{aligned}
A_n &= \frac{1}{2} \left(\sqrt{q_m^{(n)}} + \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right) \sqrt{\left(\sqrt{q_m^{(n)}} - \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right)^2 + \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right)} \\
&\quad + \frac{1}{2} \left(q_{j'}^{(n)} - q_m^{(n)} \right) + \frac{1}{4} \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) > 0
\end{aligned}
\tag{5.15}$$

である. また, 式 (5.14) の不等号を導くには, 式 (5.13) 右辺の不等式を用い, 最後の等号では, dqds 法のアルゴリズム中の式

$$q_m^{(n)} e_{m-1}^{(n)} = q_{m-1}^{(n+1)} e_{m-1}^{(n+1)} \tag{5.16}$$

を用いた. 通分のために $-A_n e_{m-1}^{(n+1)}$ を計算しておくと,

$$\begin{aligned}
-A_n e_{m-1}^{(n+1)} &= - \left\{ \frac{1}{2} \left(\sqrt{q_m^{(n)}} + \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right) \sqrt{\left(\sqrt{q_m^{(n)}} - \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right)^2 + \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right)} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \left(q_{j'}^{(n)} - q_m^{(n)} \right) + \frac{1}{4} \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) \right\} e_{m-1}^{(n+1)} \\
&> - \left\{ \frac{1}{2} \left(\sqrt{q_m^{(n)}} + \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right) \sqrt{\left(\sqrt{q_m^{(n)}} - \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right)^2 + 4 \sqrt{q_m^{(n)}} \sqrt{q_{j'}^{(n)}}} \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{2} \left(q_{j'}^{(n)} - q_m^{(n)} \right) + \sqrt{q_m^{(n)}} \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right\} e_{m-1}^{(n+1)} \\
&= q_{j'}^{(n)} e_{m-1}^{(n+1)}
\end{aligned}
\tag{5.17}$$

となる. ここで, 不等号では, 式 (5.13) 右辺の不等式を 2 箇所を使った. 式 (5.15), (5.17),

(5.11) より,

$$\begin{aligned}
 & q_m^{(n+1)} - \frac{1}{4} e_{m-1}^{(n+1)} \\
 & > \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}} \sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}} \left(\sqrt{q_m^{(n)}} + \frac{1}{2} \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right) \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) - \frac{5}{4} q_{j'}^{(n)} e_{m-1}^{(n+1)} \right\} / A_n \\
 & = \left[\frac{1}{2} \sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}} \sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}} \left\{ \sqrt{q_m^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right\} \right. \\
 & \quad \left. + \frac{1}{4} \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}} \left(\sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}} \sqrt{e_{j'}^{(n)}} - 5 \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}} \right) \right] / A_n \\
 & > \frac{1}{2} \sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}} \sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}} \left\{ \sqrt{q_m^{(n)}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right\} / A_n \\
 (5.18) \quad & > 0
 \end{aligned}$$

が成り立つ. すなわち,

$$(5.19) \quad \sqrt{q_m^{(n+1)}} > \frac{1}{2} \sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}}$$

である. 式 (5.10) と式 (5.19) とを辺々掛け合わせるにより, 式 (5.13) 右辺の不等式が $n+1$ についても成り立つ. すなわち, $\lambda_B^{(n+1)} > 0$ である. \square

補題 5.1 と補題 5.3 より, n が十分大きいところで, シフト量は次のように確定する.

補題 5.4 ($n \rightarrow \infty$ でのシフト量) n が十分大きいとき,

$$\begin{aligned}
 s_B^{(n)} &= \left(\lambda_B^{(n)} \right)^2 \\
 &= \min_{1 \leq j \leq m-1} \frac{1}{4} \left[\sqrt{q_m^{(n)}} + \sqrt{q_j^{(n)}} - \sqrt{\left(\sqrt{q_m^{(n)}} - \sqrt{q_j^{(n)}} \right)^2 + \sqrt{e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{e_j^{(n)}} + \sqrt{e_{j-1}^{(n)}} \right)} \right]^2 \\
 (5.20) \quad &> 0.
 \end{aligned}$$

補題 5.1~5.4 を用いると, 次のように, Brauer 型下界を用いた dqds 法の収束次数が超 1.5 次であることが示せる.

定理 5.5 (Brauer 型下界を用いた dqds 法の収束性) シフト量を Brauer 型下界で決定する dqds 法において, $e_{m-1}^{(n)}$ は次の式を満たし, 超 1.5 次収束である.

$$(5.21) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{e_{m-1}^{(n+1)}}{\left(e_{m-1}^{(n)} \right)^{3/2}} = 0.$$

証明 補題 5.4 より, 十分大きな n に対して $s_B^{(n)}$ は式 (5.20) で与えられる. 補題 5.3 の証明と同様に, 式 (5.20) の右辺の最小値を与える j の値を j' とすると, 式 (5.14) の 4 番目の等号より

$$(5.22) \quad q_m^{(n+1)} = \frac{1}{2} \left\{ \sqrt{q_m^{(n)} e_{m-1}^{(n)}} \left(\sqrt{q_m^{(n)}} + \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \right) - \frac{1}{8} e_{m-1}^{(n)} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) \right\} \\ \times \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) / A_n - e_{m-1}^{(n+1)}$$

が成り立つ. ここで, dqds 法のアルゴリズムから導かれる式

$$(5.23) \quad q_m^{(n+1)} = q_{m-1}^{(n+2)} e_{m-1}^{(n+2)} / e_{m-1}^{(n+1)}$$

を左辺に代入し, 式 (5.16) を右辺に代入して, 両辺を $q_{m-1}^{(n+2)} \sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}}$ で割ると,

$$(5.24) \quad \frac{e_{m-1}^{(n+2)}}{(e_{m-1}^{(n+1)})^{3/2}} = \frac{1}{2} \cdot \frac{\sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}}}{q_{m-1}^{(n+2)}} \left\{ \sqrt{q_m^{(n)}} + \sqrt{q_{j'}^{(n)}} - \frac{1}{8} \cdot \frac{1}{\sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}}} \cdot \frac{e_{m-1}^{(n)}}{\sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) \right\} \\ \times \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) / A_n - \frac{\sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}}}{q_{m-1}^{(n+2)}}.$$

ここで, $\{ \}$ 内の式の $n \rightarrow \infty$ における振る舞いを評価する. まず, $\{ \}$ 内の第 3 項について, 次の評価が成り立つ.

$$(5.25) \quad 0 < \frac{1}{8} \cdot \frac{1}{\sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}}} \cdot \frac{e_{m-1}^{(n)}}{\sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}}} \left(\sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \right) \\ < \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}}} \cdot \frac{\sqrt{e_{m-1}^{(n)}}}{\sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}}} \cdot \sqrt{q_m^{(n)}} \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \\ = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}}} \cdot \frac{\sqrt{e_{m-1}^{(n)}}}{\sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}}} \cdot \frac{\sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}} \sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}}}{\sqrt{e_{m-1}^{(n)}}} \cdot \sqrt{q_{j'}^{(n)}} \\ = \frac{1}{2} \sqrt{q_{j'}^{(n)}}.$$

ただし, 2 番目の不等号では, いまシフトとして $(\lambda_B^{(n)})^2$ が選ばれていることから, $\lambda_B^{(n)} > 0$ であり, 式 (5.13) の不等号が成り立っていることを用いた. また, 等号では, 式 (5.16) を用いた. これより, $\{ \}$ 内の式を B_n とおくと,

$$(5.26) \quad \sqrt{q_m^{(n)}} + \frac{1}{2} \sqrt{q_{j'}^{(n)}} < B_n < \sqrt{q_m^{(n)}} + \sqrt{q_{j'}^{(n)}}.$$

極限を取ると, (j' は一般に n の関数であり, $1 \leq j' \leq m-1$ の範囲の値を取ることに注意して)

$$(5.27) \quad \frac{1}{2} \sqrt{\sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2} \leq \lim_{n \rightarrow \infty} B_n \leq \sqrt{\sigma_1^2 - \sigma_m^2}$$

が言える. 式 (5.24) の他の項・因子については, $n \rightarrow \infty$ のとき

$$(5.28) \quad \frac{\sqrt{q_{m-1}^{(n+1)}}}{q_{m-1}^{(n+2)}} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{\sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2}},$$

$$(5.29) \quad \sqrt{e_{j'}^{(n)}} + \sqrt{e_{j'-1}^{(n)}} \rightarrow 0,$$

$$(5.30) \quad \frac{\sqrt{e_{m-1}^{(n+1)}}}{q_{m-1}^{(n+2)}} \rightarrow 0$$

となる. また, A_n については, $n \rightarrow \infty$ のとき明らかに $A_n/q_{j'}^{(n)} \rightarrow 1$ であるから, 式 (5.27) と同様にして

$$(5.31) \quad \sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2 \leq \lim_{n \rightarrow \infty} A_n \leq \sigma_1^2 - \sigma_m^2$$

が言える. 式 (5.27)~(5.31) を式 (5.24) に代入すると,

$$(5.32) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{e_{m-1}^{(n+2)}}{(e_{m-1}^{(n+1)})^{3/2}} = 0$$

となる. すなわち, $e_{m-1}^{(n)}$ は 0 に超 1.5 次収束する. □

Nakatsukasa 下界に対しても, 次のように超 1.5 次収束性が示せる.

定理 5.6 (Nakatsukasa 下界を用いた dqds 法の収束性) シフト量を Nakatsukasa 下界で決定する dqds 法において, $e_{m-1}^{(n)}$ は次の式を満たし, 超 1.5 次収束である.

$$(5.33) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{e_{m-1}^{(n+1)}}{(e_{m-1}^{(n)})^{3/2}} = 0.$$

証明 Nakatsukasa 下界は, Brauer 下界の式 (3.8) において特に $j = k-1$ と置いて得られる下界である. この点を考慮して Brauer 下界の場合の収束性の証明が Nakatsukasa 下界の場合にどうなるかを考える. まず補題 5.1 では, $j = m-1$ とした命題が成り立つ. 補題 5.2 はそのまま成り立つ. 補題 5.3, 5.4, 定理 5.5 でも, j, j' を $m-1$ で置き換えた命題が成り立つ. なお, 補題 5.3, 定理 5.5 の証明では, j' を式 (5.12) あるいは式 (5.20) の右辺の最小値を与える j の値として定義しているが, 証明中では最小値を与えるという性

質は使っておらず, $\lambda_B^{(n)}$ の計算が右辺において j を j' とした式で行われるという事実のみを使っている. よって, j' を $m-1$ で置き換えても問題はない. \square

なお, 定理 5.5, 5.6 では $e_{m-1}^{(n)}$ についてのみ漸近収束次数の結果を示した. これは, $q_m^{(n)}$ については簡明な結果が得られなかったためである. ただし, dqds 法では $e_{m-1}^{(n)}$ が十分 0 に近くなった段階で減次を行い, 次の特異値の計算に移れるため, 重要なのは $q_m^{(n)}$ よりも $e_{m-1}^{(n)}$ の収束次数である. このことから, Brauer 下界および Nakatsukasa 下界を用いた dqds 法の収束次数は超 1.5 次であると言ってよいと考えられる.

6. 数値実験

以上の解析結果を検証するため, 対称正定値 m 次三重対角行列

$$(6.1) \quad A = \begin{pmatrix} a & b & & 0 \\ b & a & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b \\ 0 & & b & a \end{pmatrix}$$

(ただし $a \geq 2b$) をコレスキー分解して得られる上二重対角行列 B に対して, Johnson 下界, Ostrowski 型下界, Brauer 型下界, Nakatsukasa 下界の 4 種類のシフトを用いた dqds 法を適用し, 収束性を調べた. B は [2] で用いられたのと同じ行列であり, その特異値は

$$(6.2) \quad \sigma_k = \sqrt{a + 2b \cos\left(\frac{\pi k}{m+1}\right)} \quad (k = 1, \dots, m)$$

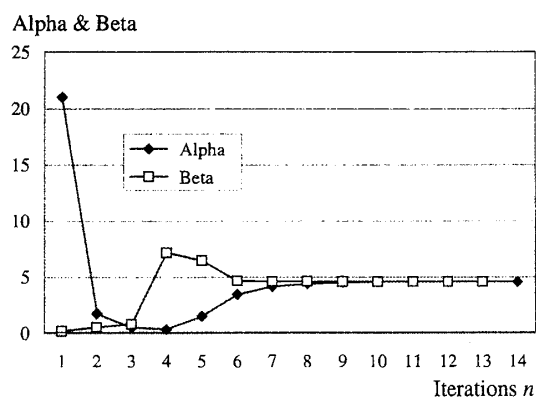
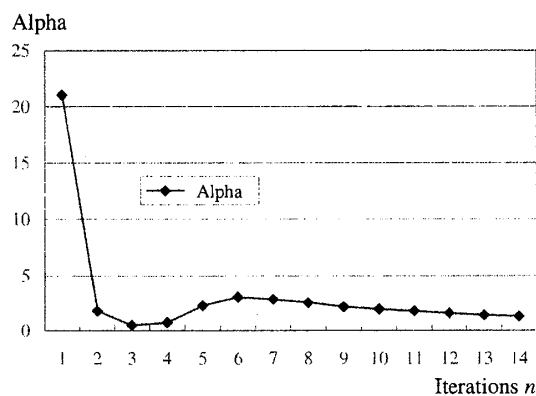
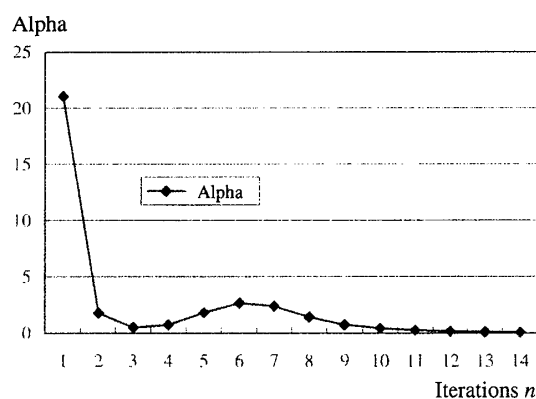
である. ここでは $m = 10$, $a = 1.0$, $b = 0.2$ とした.

まず, Ostrowski 型下界を用いた場合について, $e_{m-1}^{(n)}$ および $q_m^{(n)}$ の 1.5 次収束性の検証を行う. 論文 [2] にならって

$$(6.3) \quad \alpha^{(n)} = \frac{e_{m-1}^{(n+1)}}{(e_{m-1}^{(n)})^{3/2}}, \quad \beta^{(n)} = \frac{q_m^{(n+1)}}{(q_m^{(n)})^{3/2}},$$

とおくと, 定理 4.5 より, これらは両方とも n が大きくなるにつれ, $1/\sqrt{\sigma_{m-1}^2 - \sigma_m^2} = 4.60$ に収束するはずである. この数値実験結果を Fig. 1 に示す. 図より, 理論的な予想通り, 1.5 次収束性が実現されていることがわかる.

同様に, Brauer 型下界および Nakatsukasa 下界を用いた場合の上記の $\alpha^{(n)}$ の振る舞いをそれぞれ Fig. 2 および Fig. 3 に示す. なお, 式 (5.1) の計算においては, 桁落ち防止のため, 分子の有理化を行っている. 図より, どちらの場合も $\alpha^{(n)}$ は n が大きくなるにつれ 0 に近づくことが観察できる. これは, 第 2 節で導いた超 1.5 次収束性と一致している.

Fig. 1. Convergence of $\alpha^{(n)}$ and $\beta^{(n)}$ for dqds algorithm with Ostrowski shift.Fig. 2. Convergence of $\alpha^{(n)}$ for dqds algorithm with Brauer shift.Fig. 3. Convergence of $\alpha^{(n)}$ for dqds algorithm with Nakatsukasa shift.

最後に、4 種類の下界に対する $e_{m-1}^{(n)}$ の収束特性の比較を Fig. 4 に示す. 下界の強さから予想される通り, Ostrowski 型および Brauer 型下界を用いた dqds 法は, Johnson 下界を用いた dqds 法より速く収束する. また, Nakatsukasa 下界を用いた dqds 法は, Brauer 型下界を用いた dqds 法より速く収束する.

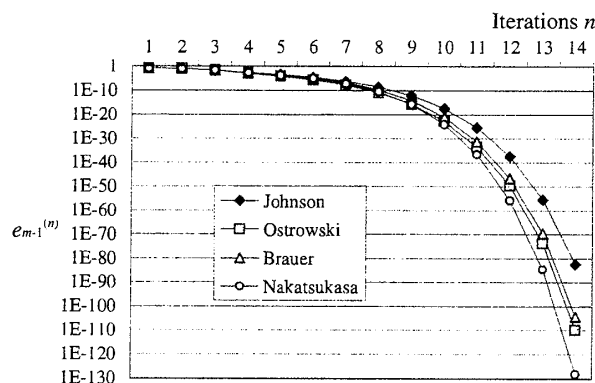


Fig. 4. Convergence of dqds algorithm with four shifting strategies.

以上では $a = 1.0$, $b = 0.2$ の場合の結果を示したが, $b = 0.01$, $b = 0.5$ とした場合でも, ほとんど同じ結果が得られた.

7. おわりに

本論文では, 特異値計算のための dqds 法において, 最小特異値に対する Ostrowski 型下界および Brauer 型下界に基づいてシフトを決めた場合の収束性について, 相島らの解析の枠組みを利用して理論的考察を行った. その結果, 漸近的収束性が Ostrowski 型下界の場合は 1.5 次, Brauer 型下界の場合は超 1.5 次となることを示した. また, Brauer 型の下界を改良した Nakatsukasa 下界に対しても, 超 1.5 次収束性を示した. また, これらの結果を数値実験により確認した.

本論文では各シフトに対する収束性の理論的解析のみを行ったが, 実用上はシフト計算のための計算量も含めた評価が必要である. 各シフトの計算量を平方根の回数により評価すると, Johnson 下界と Ostrowski 型下界は $2m - 1$ 回, Nakatsukasa 下界は $3m - 1$ 回, Brauer 型下界は $O(m^2)$ 回となる. したがって, 実用性の高いのは Johnson 下界, Ostrowski 型下界, Nakatsukasa 下界である. 今後は, これらの下界について, シフトの計算方式を最適化した上で, 収束性とシフトの計算量のトレードオフから最良のシフトを決めることが考えられる. また, より高い次数の収束性を持つ新たなシフト戦略を見つけることも今後の課題である.

謝辞 本論文を丁寧に査読して下さい, 的確なコメントを下された査読者の皆様に感謝いたします. また, 未公開の論文を見せて下さり, 本論文の草稿に対しても有益な助言を下

さった東京大学大学院情報理工学系研究科の杉原正顕教授，日頃から特異値計算に関してご議論頂いている京都大学大学院情報学研究科の中村佳正教授と中村研究室の皆様，研究全般についてご指導頂いている名古屋大学大学院工学研究科の張紹良教授に感謝いたします．なお，本研究は名古屋大学 21 世紀 COE プログラム「計算科学フロンティア」，科学研究費補助金基盤研究（C）（課題番号 18560058），および科学研究費補助金特定領域研究「i-explosion」（課題番号 18049014）の補助を受けている．

付録

A 定理 3.3 の証明

A の固有値 λ に対応する固有ベクトルを \mathbf{x} とし， \mathbf{x} の成分で絶対値最大のものの一つを x_k とする．すると， $A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ の第 k 成分より，

$$(A.1) \quad (\lambda - a_{kk})x_k = a_{k,k+1}x_{k+1} + a_{k,k-1}x_{k-1}.$$

が成り立つ．ただし， $a_{1,0} = a_{m,m+1} = 0$ ， $x_0 = x_{m+1} = 0$ と約束する．

いま $|x_{k+1}| \geq |x_{k-1}|$ の場合を考え， $x_{k+1} \neq 0$ と仮定すると，

$$\begin{aligned} |\lambda - a_{kk}| &\leq |a_{k,k+1}| \cdot \frac{|x_{k+1}|}{|x_k|} + |a_{k,k-1}| \cdot \frac{|x_{k-1}|}{|x_k|} \\ &= \left(|a_{k,k+1}| + |a_{k,k-1}| \cdot \frac{|x_{k-1}|}{|x_{k+1}|} \right) \cdot \frac{|x_{k+1}|}{|x_k|} \\ (A.2) \quad &\leq (|a_{k,k+1}| + |a_{k,k-1}|) \cdot \frac{|x_{k+1}|}{|x_k|}. \end{aligned}$$

ここで，式 (A.1) において $k \rightarrow k+1$ とした式を考え，絶対値を取って両辺を $|x_k|$ で割ると，

$$\begin{aligned} |\lambda - a_{k+1,k+1}| \cdot \frac{|x_{k+1}|}{|x_k|} &\leq |a_{k+1,k+2}| \cdot \frac{|x_{k+2}|}{|x_k|} + |a_{k+1,k}| \\ (A.3) \quad &\leq |a_{k+1,k+2}| + |a_{k+1,k}|. \end{aligned}$$

式 (A.2)，(A.3) を辺々掛け合わせ， $x_{k+1} \neq 0$ に注意して約分すると，

$$(A.4) \quad |\lambda - a_{kk}| \cdot |\lambda - a_{k+1,k+1}| \leq (|a_{k,k+1}| + |a_{k,k-1}|)(|a_{k+1,k+2}| + |a_{k+1,k}|)$$

が得られる．なお， $x_{k+1} = 0$ のときは $x_{k-1} = 0$ となり，式 (A.1) より $\lambda = a_{kk}$ となるから，この不等式は左辺が 0 となって自明に成り立つ． λ が最小固有値の場合は $a_{kk} - \lambda \geq 0$ ， $a_{k+1,k+1} - \lambda \geq 0$ であるから，この 2 次不等式を解いて

$$(A.5) \quad \lambda \geq \frac{1}{2} \left[a_{kk} + a_{k+1,k+1} - \sqrt{(a_{kk} - a_{k+1,k+1})^2 + 4(|a_{k,k-1}| + |a_{k,k+1}|)(|a_{k+1,k}| + |a_{k+1,k+2}|)} \right]$$

となる. $|x_{k+1}| < |x_{k-1}|$ の場合も同様の計算を行うと, 式 (A.5) において $k \rightarrow k-1$ とした不等式が得られる.

実際には k の値はわからず, また $|x_{k+1}|$ と $|x_{k-1}|$ の大小関係も ($k=1, m$ の場合を除いては) わからないので, 可能な $2m-2$ 個の下界 (同じものが 2 個ずつある) について最大値を取ると, 定理 3.3 の下界が得られる. (証明終)

B 補題 3.4 の証明

簡単のため, $\lambda \equiv \lambda_m\left(\frac{1}{2}(B+B^T)\right)$, $\sigma \equiv \sigma_m(B)$ とおく. また, B の特異値 σ に対する正規化された右特異ベクトルを \mathbf{x} とする. すると,

$$(B.1) \quad (B^T - \lambda I)(B - \lambda I) = B^T B - \lambda(B + B^T) + \lambda^2 I \geq O$$

(ここで $A \geq B$ は行列 $A - B$ が非負定値であることを示す. また, O は零行列) であるから,

$$(B.2) \quad \sigma^2 = \mathbf{x}^T B^T B \mathbf{x} \geq \lambda \mathbf{x}^T (B + B^T) \mathbf{x} - \lambda^2 \mathbf{x}^T \mathbf{x} \geq 2\lambda^2 - \lambda^2 = \lambda^2.$$

定義より $\sigma \geq 0$ だから, $\sigma \geq |\lambda| \geq \lambda$ が言える.

次に $b_1, b_2, \dots, b_{2m-1}$ がすべて非零であるとし, $\sigma = \lambda$ が成り立つと仮定して矛盾が生じることを示す. $\sigma = \lambda$ のとき, 式 (B.2) において 2 番目の不等号が等号でなければならないから,

$$(B.3) \quad \lambda \mathbf{x}^T \left(\frac{1}{2}(B + B^T) \right) \mathbf{x} = \lambda^2.$$

ここで B の対角成分はすべて非零であるから, B は正則で, $\sigma \neq 0$. よって $\lambda \neq 0$. したがって,

$$(B.4) \quad \mathbf{x}^T \left(\frac{1}{2}(B + B^T) \right) \mathbf{x} = \lambda.$$

λ は $\frac{1}{2}(B + B^T)$ の最小固有値だから, 式 (B.4) は \mathbf{x} が $\frac{1}{2}(B + B^T)$ の固有値 λ に属する固有ベクトルであることを意味する. すなわち,

$$(B.5) \quad \frac{1}{2}(B + B^T)\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}.$$

いま, B の特異値 σ に対する正規化された特異ベクトルを \mathbf{y} とし, B と B^T , \mathbf{x} と \mathbf{y} を入れ替えて以上の議論を繰り返すと, 同様に

$$(B.6) \quad \frac{1}{2}(B + B^T)\mathbf{y} = \lambda \mathbf{y}.$$

が言える. ところが, $\frac{1}{2}(B + B^T)$ は副対角要素がすべて非零の対称三重対角行列であるから, その固有値はすべて単根である [14]. したがって $\mathbf{x} = \mathbf{y}$. これと $B\mathbf{x} = \sigma\mathbf{y}$, $\sigma = \lambda$ より, $B\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$. さらに $B^T\mathbf{y} = \sigma\mathbf{x}$ より $B^T\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ となる.

いま, B の固有値は λ であり, B は上二重対角行列であるため, B のある (k, k) 要素は λ とおくことができる. すると, B は副対角成分がすべて非零の上二重対角行列であるから, $B\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ の両辺の成分比較から容易にわかるように, $x_{k+1} = x_{k+2} = \cdots = x_m = 0$. また, $B^T\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ の成分比較より, $x_{k-1} = x_{k-2} = \cdots = x_1 = 0$. よって $\mathbf{x} = \mathbf{e}_k$ (単位行列の第 k 列) となる. ところが, これを $B\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ の第 $k-1$ 成分の式:

$$(B.7) \quad b_{2k-3}x_{k-1} + b_{2k-2}x_k = \lambda x_{k-1}$$

に代入すると, $x_k = 1$, $x_{k-1} = 0$ より, $b_{2k-2} = 0$ となる. これは副対角要素が 0 であることを示し, 矛盾である. (上記では $k > 1$ を暗に仮定したが, $k = 1$ の場合は $B^T\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ の第 2 成分を考えればよい.)

以上より, $b_1, b_2, \dots, b_{2m-1}$ がすべて非零の場合は, 狭義の不等式 $\sigma > \lambda$ が成り立つことが示された. (証明終)

C 定理 3.8 の証明

B の特異値 σ_m に対応する正規化された右特異ベクトルを \mathbf{x} , 左特異ベクトルを \mathbf{y} とすると, $C[\mathbf{x}^T, \mathbf{y}^T]^T = \mathbf{0}$ であるから, 行列 C は特異である. したがって, Ostrowski の定理 (3.10) において $\lambda_i = 0$ とすると,

$$(C.1) \quad \exists k, |b_{2k-1}| \leq \sqrt{|b_{2k-2}| + \sigma_m} \sqrt{|b_{2k}| + \sigma_m}.$$

ただし, $b_0 = b_{2m} = 0$ とおいた. これより,

$$(C.2) \quad \exists k, \sigma_m \geq \sqrt{|b_{2k-1}|^2 + \frac{1}{4}(|b_{2k-2}| - |b_{2k}|)^2} - \frac{1}{2}(|b_{2k-2}| + |b_{2k}|)$$

となって不等式 (3.12) が導ける.

次に, 式 (3.12) において等号が成り立つとすると,

$$(C.3) \quad \forall k, \sigma_m \leq \sqrt{|b_{2k-1}|^2 + \frac{1}{4}(|b_{2k-2}| - |b_{2k}|)^2} - \frac{1}{2}(|b_{2k-2}| + |b_{2k}|)$$

両辺は非負だから, 2 乗して整理すると,

$$(C.4) \quad \forall k, |b_{2k-1}|^2 \geq (|b_{2k-2}| + \sigma_m)(|b_{2k}| + \sigma_m)$$

よって,

$$(C.5) \quad \forall k, \frac{|b_{2k-1}|^2}{|b_{2k}| + \sigma_m} \geq |b_{2k-2}| + \sigma_m,$$

$$(C.6) \quad \forall k, \frac{|b_{2k-1}|^2}{|b_{2k-2}| + \sigma_m} \geq |b_{2k}| + \sigma_m.$$

式 (C.5), (C.6) にそれぞれ \mathbf{x} の第 k 成分 x_k , \mathbf{y} の第 k 成分 y_k の絶対値の 2 乗を掛け, k について足し合わせると,

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^m \left\{ \frac{|b_{2k-1}|^2}{|b_{2k}| + \sigma_m} \cdot |x_k|^2 + \frac{|b_{2k-1}|^2}{|b_{2k-2}| + \sigma_m} \cdot |y_k|^2 \right\} \\ (C.7) \quad & \geq \sum_{k=1}^m \left\{ (|b_{2k-2}| + \sigma_m) |x_k|^2 + (|b_{2k}| + \sigma_m) |y_k|^2 \right\}. \end{aligned}$$

一方, $B\mathbf{x} = \sigma_m \mathbf{y}$ の第 k 式より,

$$\begin{aligned} |b_{2k-1}| |x_k| & \leq \sigma_m |y_k| + |b_{2k}| |x_{k+1}| \\ & = \sqrt{\sigma_m} \cdot \sqrt{\sigma_m} |y_k| + \sqrt{|b_{2k}|} \cdot \sqrt{|b_{2k}|} |x_{k+1}| \\ (C.8) \quad & \leq \sqrt{\sigma_m + |b_{2k}|} \sqrt{\sigma_m |y_k|^2 + |b_{2k}| |x_{k+1}|^2}. \end{aligned}$$

ここで, 第 2 の不等号ではシュワルツの不等式を用いた. 式 (C.8) を 2 乗して整理すると,

$$(C.9) \quad \frac{|b_{2k-1}|^2}{|b_{2k}| + \sigma_m} \cdot |x_k|^2 \leq \sigma_m |y_k|^2 + |b_{2k}| |x_{k+1}|^2$$

が得られる. また同様にして,

$$(C.10) \quad \frac{|b_{2k-1}|^2}{|b_{2k-2}| + \sigma_m} \cdot |y_k|^2 \leq \sigma_m |x_k|^2 + |b_{2k-2}| |y_{k-1}|^2$$

が得られる. 式 (C.9), (C.10) をすべての k について足し合わせると, ($b_0 = b_{2m} = 0$ に注意して) 次の式が得られる.

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^m \left\{ \frac{|b_{2k-1}|^2}{|b_{2k}| + \sigma_m} \cdot |x_k|^2 + \frac{|b_{2k-1}|^2}{|b_{2k-2}| + \sigma_m} \cdot |y_k|^2 \right\} \\ (C.11) \quad & \leq \sum_{k=1}^m \left\{ (|b_{2k-2}| + \sigma_m) |x_k|^2 + (|b_{2k}| + \sigma_m) |y_k|^2 \right\}. \end{aligned}$$

ところが式 (C.7) は反対向きの不等号が成り立つことを示しているから, 実は式 (C.11) においては等号が成り立つ. ここで, 式 (C.9), (C.10) において 1 個でも狭義の不等式が成り立つと, 式 (C.11) の等号は成り立たないから, 式 (C.9), (C.10) でも, すべての k について等号が成り立つ. したがって, 特に式 (C.8) のシュワルツの不等式においても, 等号が成り立つ. このとき, シュワルツの不等式の等号成立条件より,

$$(C.12) \quad \sqrt{\sigma_m} : \sqrt{\sigma_m} |y_k| = \sqrt{|b_{2k}|} : \sqrt{|b_{2k}|} |x_{k+1}|,$$

すなわち ($1 \leq k \leq m-1$ のとき $\sigma_m \neq 0$, $|b_{2k}| \neq 0$ に注意して)

$$(C.13) \quad |y_k| = |x_{k+1}| \quad (1 \leq k \leq m-1)$$

と言える. さらに, \mathbf{x} , \mathbf{y} が正規化されていることから,

$$(C.14) \quad |y_m| = |x_1|$$

も成り立つ. (証明終)

参考文献

- [1] K. Aishima, T. Matsuo, K. Murota and M. Sugihara, On convergence of the dqds algorithm for singular value decomposition, *Mathematical Engineering Technical Reports*, METR 2006-59, University of Tokyo, 2006.
- [2] 相島健助, 松尾宇泰, 室田一雄, 杉原正顯, 特異値計算のための dqds 法と mdLVs 法の収束性について, 日本応用数理学会論文誌, Vol. 17, No. 2 (2007), 97–131.
- [3] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, J. Demmel, J. Dongarra, J. D. Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, S. Ostrouchov and D. Sorensen, *LAPACK User's Guide*, SIAM, Philadelphia, 1992.
- [4] J. Demmel, *Numerical Linear Algebra*, SIAM, Philadelphia, 1997.
- [5] I. S. Dhillon, *A New $O(n^2)$ Algorithm for the Symmetric Tridiagonal Eigenvalue Problem*, Ph. D Thesis, Computer Science Division, University of California, Berkeley, California, 1997.
- [6] I. S. Dhillon and B. N. Parlett, Orthogonal eigenvectors and relative gaps, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, Vol. 25 (2004), 858–899.
- [7] I. S. Dhillon and B. N. Parlett, Multiple representations to compute orthogonal eigenvectors of symmetric tridiagonal matrices, *Linear Algebra and Its Applications*, Vol. 387 (2004), 1–28.
- [8] K. V. Fernando and B. N. Parlett, Accurate singular values and differential qd algorithms, *Numerische Mathematik*, Vol. 67 (1994), 191–229.
- [9] R. Horn and C. R. Johnson, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, 1985.
- [10] C. R. Johnson, A Gersgorin-type lower bound for the smallest singular value, *Linear Algebra and Its Applications*, Vol. 112 (1989), 1–7.
- [11] C. R. Johnson and T. Szulc, Further lower bounds for the smallest singular value, *Linear Algebra and Its Applications*, Vol. 272 (1998), 169–179.
- [12] 中務祐治, 橋本康, 杉原正顯, 張紹良, Gerschgorin の定理の新しい拡張, 2006 年数値解析シンポジウム予稿集, 2006, 71–74.
- [13] B. N. Parlett, The new qd algorithm, *Acta Numerica*, 1995, 459–491.

- [14] B. N. Parlett, *The Symmetric Eigenvalue Problem*, SIAM, Philadelphia, 1998.
- [15] H. Rutishauser, *Lectures on Numerical Mathematics*, Birkhäuser, Boston, 1990.
- [16] Y. Yamamoto, Equality conditions for lower bounds for the smallest singular value of a bidiagonal matrix, to appear in *Applied Mathematics and Computation*.

山本 有作 (正会員) 〒464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町

1992 年 東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻 修士課程終了。同年 (株) 日立製作所入社。現在, 名古屋大学大学院工学研究科 計算理工学専攻 准教授。並列数値計算アルゴリズムとその応用の研究に従事。博士 (工学)。

宮田 考史 (非会員) 〒464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町

2007 年 名古屋大学大学院工学研究科 計算理工学専攻 修士課程終了。現在, 同大学院博士課程在学中。並列固有値計算アルゴリズムとその応用の研究に従事。修士 (工学)。

(2007 年 3 月 29 日 受付)

(2008 年 1 月 17 日 最終稿 受付)