4. 行列演算

4-1. Poisson Equation

1次元で考えるが、2次元以上でも同様。

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x) \qquad ①$$

中心差分を用いてやると

$$u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1} = \delta x^2 f_j \qquad ②$$

4-1-1. Fourier 変換を用いる方法

Fourier変換	$\hat{u}_k \equiv \sum_{j=1}^{N} u_j \exp(2\pi i kj/N)$	④
逆 〃	$u_j \equiv \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} \hat{u}_k \exp(-2\pi i jk/N)$	⑤

u_j と f_j に対して逆 Fourier 変換の式を適応し、② へ代入。

$$\hat{u}_k \left(\exp(2\pi i k/N) + \exp(-2\pi i k/N) - 2 \right) = \delta x^2 \hat{f}_k$$

$$\therefore \quad \hat{u}_k = \frac{\delta x^2 \hat{f}_k}{4\left(\sin^2(\pi k/N)\right)} \qquad ⑥$$

← Not $\left(\frac{2\pi k}{N}\right)^2$!!

① f_j に対して Fourier変換を行い、$\hat{f}_k$ を求める。
② ⑥式を用いて、$\hat{u}_k$ を求める。
③ $\hat{u}_k$ に対して逆 Fourier 変換を行い、u_j を求める。($u_j = u_{j+N}$)

⟶ 周期的境界条件に有効。(sin 変換を用いれば、$u_0 = u_N = 0$ の固定境界条件に有効となる。)

DEPARTMENT OF PHYSICS
KYOTO UNIVERSITY.

4-1-2. 行列を用いる方法.

②式を行列で書くと.

$$
\begin{bmatrix}
-2 & 1 & 0 & \cdots & & & 1 \\
1 & -2 & 1 & 0 & & & 0 \\
0 & 1 & -2 & 1 & 0 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & & & & 1 & -2 & 1 \\
 & & & & & 1 & -2
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix}
= \delta x^2
\begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ f_N \end{bmatrix}
\qquad ⑦
$$

$$\underbrace{\qquad}_{\mathbb{A}} \qquad \underbrace{\qquad}_{\mathbb{x}} \qquad \underbrace{\qquad}_{\mathbb{b}}$$

4-2 連立1次方程式.

$$\boxed{\mathbb{A}\cdot\mathbb{x} = \mathbb{b}} \qquad ⑧$$

既知の行列 $\mathbb{A}$, ベクトル $\mathbb{b}$ について. ⑧ を満たす.ベクトル $\mathbb{x}$ を求める問題

4-2-1. 直接法.

A. LU分解法.

任意の行列. $\mathbb{A}$ が次の様に2つの行列の積に書けたとする.

$$\mathbb{L}\cdot\mathbb{U} = \mathbb{A} \qquad ⑨$$

ここで、$\mathbb{L}$ は. 下三角(対角要素とその下側だけ0でない)行列.
$\mathbb{U}$ は. 上三角(対角要素とその上側だけ0でない)行列.である.

$$
\mathbb{L} = \begin{bmatrix}
\alpha_{11} & & & & \\
\alpha_{21} & \alpha_{22} & & 0 & \\
\alpha_{31} & & \alpha_{33} & & \\
\vdots & & & \ddots & \\
\alpha_{N1} & \cdots & \cdots & & \alpha_{NN}
\end{bmatrix},
\quad
\mathbb{U} = \begin{bmatrix}
\beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \cdots & \beta_{1N} \\
 & \beta_{22} & & & \\
 & & \beta_{33} & & \\
 & 0 & & \ddots & \\
 & & & & \beta_{NN}
\end{bmatrix}
$$

$$\mathbb{A}\cdot\mathbb{x} = \mathbb{L}\cdot\underbrace{\mathbb{U}\cdot\mathbb{x}}_{\mathbb{y}} = \mathbb{b}$$ より.

$$\mathbb{L}\cdot\mathbb{y} = \mathbb{b} \qquad (10)$$

を満たす. ベクトル $\mathbb{y}$ を求め, 次に.

$$\mathbb{U}\cdot\mathbb{x} = \mathbb{y} \qquad (11)$$

を満たすベクトル $\mathbb{x}$ を求める.

(10) より.
$$y_1 = \frac{b_1}{\alpha_{11}}, \quad y_i = \frac{1}{\alpha_{ii}}\left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1}\alpha_{ij}y_j\right] \quad (i=2,3,\cdots N).$$

(11) より.
$$x_N = \frac{y_N}{\beta_{NN}}, \quad x_i = \frac{1}{\beta_{ii}}\left[y_i - \sum_{j=i+1}^{N}\beta_{ij}x_j\right] \quad (i=N-1, N-2, \cdots, 1)$$

B. LU分解の実行.

$\mathbb{L}\cdot\mathbb{U} = \mathbb{A}$ を書き下すと.

$$i<j \qquad \alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots + \alpha_{ii}\beta_{ij} = a_{ij} \qquad (12)$$
$$i=j \qquad \alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots + \alpha_{ii}\beta_{jj} = a_{ij} \qquad (13)$$
$$i>j \qquad \alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots + \alpha_{ij}\beta_{jj} = a_{ij} \qquad (14)$$

(12)～(14) は. N^2個の方程式. 一方. 未知数. α, β は. N^2+N 個.
よって.
$$\alpha_{ii} = 1 \qquad (i=1,2,\cdots,N) \qquad (15)$$

として. 先に決めてしまう.

次に. $j=1,2,3,\cdots,N$ のそれぞれについて.

i). $i=1,2,\cdots,j$ について. ⑫.⑬.⑮より.

$$\beta_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \alpha_{ik}\beta_{kj} \qquad (16)$$

ii) $i=j+1, j+2, \cdots, N$ について. ④より.

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{\beta_{jj}}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{ik}\beta_{kj} \right) \qquad (17)$$

これですべての α, β が求まる.

数値誤差を少なくするには. ⑰式で β_{jj} が十分大きくないといけない.

⟶ Aの行を入れ換えて. より β_{jj} が使える様にする

これを. $\boxed{\text{ピボット選択}}$という.

↳ 対角優位のAでは不要.
(普通は必須).

c. 逆行列 A^{-1} の求め方.

$$A \cdot A^{-1} = L \cdot U \cdot A^{-1} = I \quad \text{を使う.}$$

$I = [e_1, e_2, \cdots, e_N]$, $A^{-1} = [a_1^{-1}, a_2^{-1}, \cdots a_N^{-1}]$.
と分解すると.

$$L \cdot U \cdot a_i^{-1} = e_i$$

となり. ⑩. ⑪と同様の手順で. A^{-1}が求まる.

4-2-2. 反復法

$$\mathbb{A} = \mathbb{D} + \mathbb{L} + \mathbb{U}$$

$\mathbb{D} = \begin{bmatrix} \ddots & 0 \\ 0 & \ddots \end{bmatrix}$

$\mathbb{L} = \begin{bmatrix} & 0 \\ \ddots & \end{bmatrix}$

$\mathbb{U} = \begin{bmatrix} & \ddots \\ 0 & \end{bmatrix}$

$$\mathbb{A} \cdot x = (\mathbb{D} + \mathbb{L} + \mathbb{U}) x = \mathbb{b}$$

i) Jacobi法

$$\therefore \; \mathbb{D} x = \mathbb{b} - (\mathbb{L} + \mathbb{U}) x$$

対角のみ.

$$x = \mathbb{D}^{-1} \left[\mathbb{b} - (\mathbb{L} + \mathbb{U}) x \right]$$

$$\boxed{x^{n+1} = \mathbb{D}^{-1} \left[\mathbb{b} - (\mathbb{L} + \mathbb{U}) x^{n} \right]}$$

ii) Gauss - Seidel 法.

$$(\mathbb{D} + \mathbb{L}) x = \mathbb{b} - \mathbb{U} x$$

$j \leqq i$ すべて.

$$x = (\mathbb{D} + \mathbb{L})^{-1} \left[\mathbb{b} - \mathbb{U} x \right]$$

$$\boxed{x^{n+1} = (\mathbb{D} + \mathbb{L})^{-1} \left[\mathbb{b} - \mathbb{U} x^{n} \right]}$$

注: $\mathbb{D}$にゼロの対角要素が出て来ない様にAの行,列をならび変える 又は、行と行の1次結合を取る.

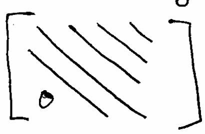
4-3. 固有値問題

$$A \cdot x = \lambda x$$

（任意の行列 A について、左式を満たす、スカラー λ、ベクトル x の組を求める。）

4-4-1. 行列 A の型とアルゴリズム.

$$\begin{tikzcd}
\bullet\ \text{Real Symmetric}(a_{ij}=a_{ji}) \arrow[rr, "\textcircled{1}"] \arrow[dr, "\textcircled{2}"] & & \lambda,\ x \\
\bullet\ \text{Hermite}(a_{ij}=a_{ji}) \arrow[r, "\textcircled{2}"] & \text{Tridiagonal.}(a_{i\,i-1}, a_{ii}, a_{i\,i+1} \neq 0) \arrow[ur, "\textcircled{3}"] & \\
\cdot\ \text{General} \arrow[r, "\textcircled{4}"] & \text{Hessenberg} \arrow[uur, "\textcircled{5}"] &
\end{tikzcd}$$



①. Jacobi 変換.

② Givens 変換、Householder 変換.

③ QR法、QL法.

（④、⑤ ここでは扱わない。）

実際には、自分でプログラムを作るより、科学技術計算用のパッケージを用いる方が、安全でしかも速い.

Lapack, Slatec, Netlib → 無料.

IMSL, NAG → 有料

4-3-2. Schrödinger Equation.

$$-\nabla^2\psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi \qquad ①$$

A. 中心差分を用いて書くと.(1次元)

$$\delta x^{-2}\left[-\psi_{j-1} + (2+\delta x^2 V_j)\psi_j - \psi_{j+1}\right] = E\psi_j \qquad ②$$

$$\mathbb{H}\cdot\vec{\psi} = E\vec{\psi} \qquad ③$$

↑
N×N 三重対角行列. $\vec{\psi} = [\psi_1, \psi_2, \cdots \psi_N]$.
→ Nは空間のメッシュの数なので大.
N×Nは.さらに大

B. 適当な基底関数 ϕ_n で展開する. →(化学では.原子軌道、物理では平面波を用いるやり方が発展した.)

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_\beta a_\beta \phi_\beta(\mathbf{r}) \qquad ④$$

④を①に代入. $\sum_\beta a_\beta(-\nabla^2 + V(\mathbf{r}))\phi_\beta(\mathbf{r}) = E\sum_\beta a_\beta \phi_\beta(\mathbf{r})$

両辺に $\phi_\alpha^*(\mathbf{r})$ をかけて. 積分すると.

$$\sum_\beta \underbrace{\int d\mathbf{r}\, \phi_\alpha^* (-\nabla^2 + V)\phi_\beta}_{H_{\alpha\beta}}\, a_\beta = E\sum_\beta \underbrace{\int d\mathbf{r}\, \phi_\alpha^* \phi_\beta}_{S_{\alpha\beta}}\, a_\beta$$

$$\mathbb{H}\cdot\mathbf{a} = E\,\mathbb{S}\cdot\mathbf{a} \qquad \mathbf{a}\equiv[a_1, a_2 \cdots a_M]. \quad ⑤$$

普通は、$S_{\alpha\beta}=\delta_{\alpha\beta}$ とるので.

$$\boxed{\mathbb{H}\cdot\mathbf{a} = E\mathbf{a}} \qquad ⑥$$

→ 普通の固有値問題.

② にくらべると自由度が少なくできる.

空間点 → 係数のベクトル

4-3-3. 対称行列のJacobi変換

Jacobi回転行列 $\mathbb{P}_{pq}$ を用いて、行列 $\mathbb{A}$ の非対角要素 $a_{pq}=a_{qp}$ を次々に 0 に変換していく。
一度0になった要素も0のままであるとは限らないが、非対角要素は次第に小さくなってゆき、最終的に（試行回数有限）でほとんど対角になる。

$$\mathbb{P}_{pq} = \begin{array}{c} \\ \\ \end{array}\begin{array}{cc} & \begin{array}{cccc} \quad & p列 & q列 & \quad \end{array} \\ & \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & c & s & \\ & -s & c & \\ & & & 1 \end{bmatrix} \begin{array}{l} \\ \leftarrow p行 \\ \leftarrow q行 \\ \\ \end{array} \end{array} \qquad \begin{array}{l} s^2+c^2=1. \\ \begin{cases} s = \sin\phi \\ c = \cos\phi \end{cases} \end{array} \qquad ①$$

$$\mathbb{A}' = \mathbb{P}_{pq}^{T}\cdot\mathbb{A}\cdot\mathbb{P}_{pq} \qquad ②$$

$\mathbb{A}'$ の要素のうち、②の変換で影響を受けるのは
p, q 行 と p, q 列 にあるもの。

$$\mathbb{A}' = \begin{bmatrix} & a'_{1p} & a'_{1q} & \\ a'_{p1}\cdots & a'_{pp} & \cdots a'_{pq} & \cdots a'_{pN} \\ a'_{q1}\cdots & a'_{qp} & a'_{qq} & \cdots a'_{qN} \\ & a'_{Np} & a'_{Nq} & \end{bmatrix} \qquad ③$$

それらを書き下すと、

$$a'_{rp} = c\,a_{rp} - s\,a_{rq} \quad (= a'_{pr}) \qquad r\neq p,\ r\neq q. \qquad ④$$
$$a'_{rq} = c\,a_{rq} + s\,a_{rp} \quad (= a'_{qr}) \qquad ⑤$$
$$a'_{pp} = c^2 a_{pp} + s^2 a_{qq} - 2sc\,a_{pq} \qquad ⑥$$
$$a'_{qq} = s^2 a_{pp} + c^2 a_{qq} + 2sc\,a_{pq} \qquad ⑦$$
$$a'_{pq} = (c^2-s^2)\,a_{pq} + sc\,(a_{pp}-a_{qq}) \quad (= a_{qp}) \qquad ⑧$$

②の変換によって、非対角要素 a'_{pq} をゼロにすることを考えると、

⑧より、 $a'_{pq} = (c^2-s^2)\,a_{pq} + sc\,(a_{pp}-a_{qq}) = 0.$

回転角 ϕ とすると、

$$\theta \equiv \cot 2\phi = \frac{c^2-s^2}{2sc} = \frac{a_{qq}-a_{pp}}{2a_{pq}}$$

を満たせばよい。 $t \equiv s/c$ とおくと、

$$t^2+2t\theta-1 = 0.$$

この2次方程式の小さい方の根が、$|\phi|<\frac{\pi}{4}$ の回転角に対応。それを実現する c, s を求めて、①式で $\mathbb{P}_{pq}$ を定める。

この手順をそれぞれの対角要素について何度もくり返すと、
最終的にコンピュータの精度内で対角行列 $\mathbb{D}$ が得られる。

$$\mathbb{D} = \mathbb{V}^T\cdot A\cdot\mathbb{V}. \quad \cdots\cdots ⑨$$

$$\left(\begin{array}{l} \mathbb{V} \equiv \mathbb{P}_1\,\mathbb{P}_2\,\mathbb{P}_3\cdots \\ \mathbb{V}^T \equiv \cdots\,\mathbb{P}_3^T\cdot\mathbb{P}_2^T\cdot\mathbb{P}_1^T \end{array}\right)$$

ここで、元の固有値方程式の変形を考える。

$$\mathbb{A}\cdot x = \lambda x. \quad \cdots\cdots ⑩$$

固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 \cdots \lambda_N$ を要素に持つ対角行列 $\mathbb{D}$
と固有ベクトル $x_1, x_2, \cdots x_N$ を列に持つ行列 $\mathbb{V}$ を定義
⑩を $\mathbb{D}$ と $\mathbb{V}$ を用いて書くと、

$$\mathbb{A}\cdot\mathbb{V} = \mathbb{V}\cdot\mathbb{D} \quad \cdots\cdots ⑪$$

ここで、 $x_i^T\cdot x_i = 1$, $x_i^T\cdot x_j = 0\ (i\neq j)$ より、

$$\mathbb{V}^T\cdot\mathbb{V} = \mathbb{I} \Rightarrow \mathbb{V}^T = \mathbb{V}^{-1} \quad \cdots ⑫$$

∴ ⑪の左より $\mathbb{V}^T$ を作用させると、

$$\mathbb{V}^T \cdot \mathbb{A} \cdot \mathbb{V} = \mathbb{D} \quad \cdots \quad ⑬$$

これは、⑨にほかならない。

⑬の形は、コンピュータで扱い良い。