2005年6月8日（水）

数値解析講義　前期水曜3限
3年（2005）

システム情報学研究院情報理学専攻
青柳　睦
aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp

研究室：情報基盤センター５階502

講義内容

{括弧}の項目はSkipまたは参考程度

1．超越方程式(非線形方程式)の解法

1．1　2分法　→　演習

1．2　{補間法}

1．3　ニュートン法　→　演習

2．代数方程式の解法

2．1　グラーフェの方法　→　(演習)

2．2　{ベルヌーイの方法}

3．連立一次方程式の解法

3．1　行列計算　→　演習

3．2　ガウスの消去法　→　演習

3．3　3重対角行列の場合の解法

3．4　LU分解法　→　演習

講義vs演習スケジュールに余裕がある日を見つけて，「数値解析」を必要とする理学工学社会学？分野で活用されている計算科学の概論を紹介する(予定)．

３．５　特異値分解法

３．６　共役勾配法　→演習

３．７　反復法　→演習　3.7.1 ヤコビ法

３．７．２　ガウス･ザイデル法　　３．７．３　SOR法(参考)

４．固有値と固有ベクトルの近似計算

{４．１　レバリエールの方法}→固有値問題の序

４．２　ヤコビの方法(対角行列への帰着)→演習

４．３　ハウスホルダー法(3重対角行列への帰着)

４．４　バイセクション法(3重対角行列の固有値と固有ベクトルの計算)

４．５　ランチョスの方法(3重対角行列への帰着)

５．ラグランジュの未定乗数法

６．勾配法

６．１　最急降下法

６．２　最急降下加速法

６．３　ステップ幅の決め方

成績評価，その他

- 出席点5割＋前期末試験5割
- 講義ノートは，毎回配りますが
  もし欠席したら各自でDLしてください
  server-500.cc.kyushu-u.ac.jp
  （講義ノートはその週の金曜日17時までには公開）
- 座席指定でお願いします
  30分後には座席表から出欠を取ります
- 研究室の電話は 092-642-3838
- メールは，aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp
  Subjectには，「数値解析」と記入
  してください

4．1　固有値問題の序

固有値

$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$

$A: n \times n$ 行列

$\mathbf{x}$： 0でないn次元ベクトル

$$\Downarrow$$

$(A - \lambda I)\mathbf{x} = 0$

$\det(A - \lambda I) \neq 0$ なら $A - \lambda I$ の逆行列有

$\Longrightarrow$ $\mathbf{x}$ は0のみ

$$\Downarrow$$

$\underline{\det(A - \lambda I)} = 0$ ：固有方程式

$\downarrow$

固有多項式(n次)

$\det(A-\lambda I)=0$ ：固有方程式(n次方程式)

固有値はn次の代数方程式の解

⇩

一般に$(n \geq 5)$ 有限回の代数処理では(厳密には)求まらない

⇩

反復法による多数の繰り返し演算が必要

(実際には、要求される精度に達した時点で打ち切る)

固有値問題は、連立一次方程式同様、工学・理学・社会学の分野で非常に重要（固有振動解析、量子力学、他・・）

(余談)

Coupled Simulation（連成シミュレーション）の重要性

- 現実の理学，工学，社会学の現象はひとつのモデルで表現できるほど簡単ではない.
- 現象を理解(説明，予測)するために全体のシステムを部分に分割して考えてみる手法がある.
- 全体が複雑に絡み合っている様に見える現象の中にも，部分要素間の相互作用(Couplings)が本質的であるとみなせる場合がある.

（余談）

連成シミュレーション(1)

シミュレーション対象の全体を「複数の部分系に分割」し、部分系の計算途中でお互いのデータを交換しながら全体を解く手法.

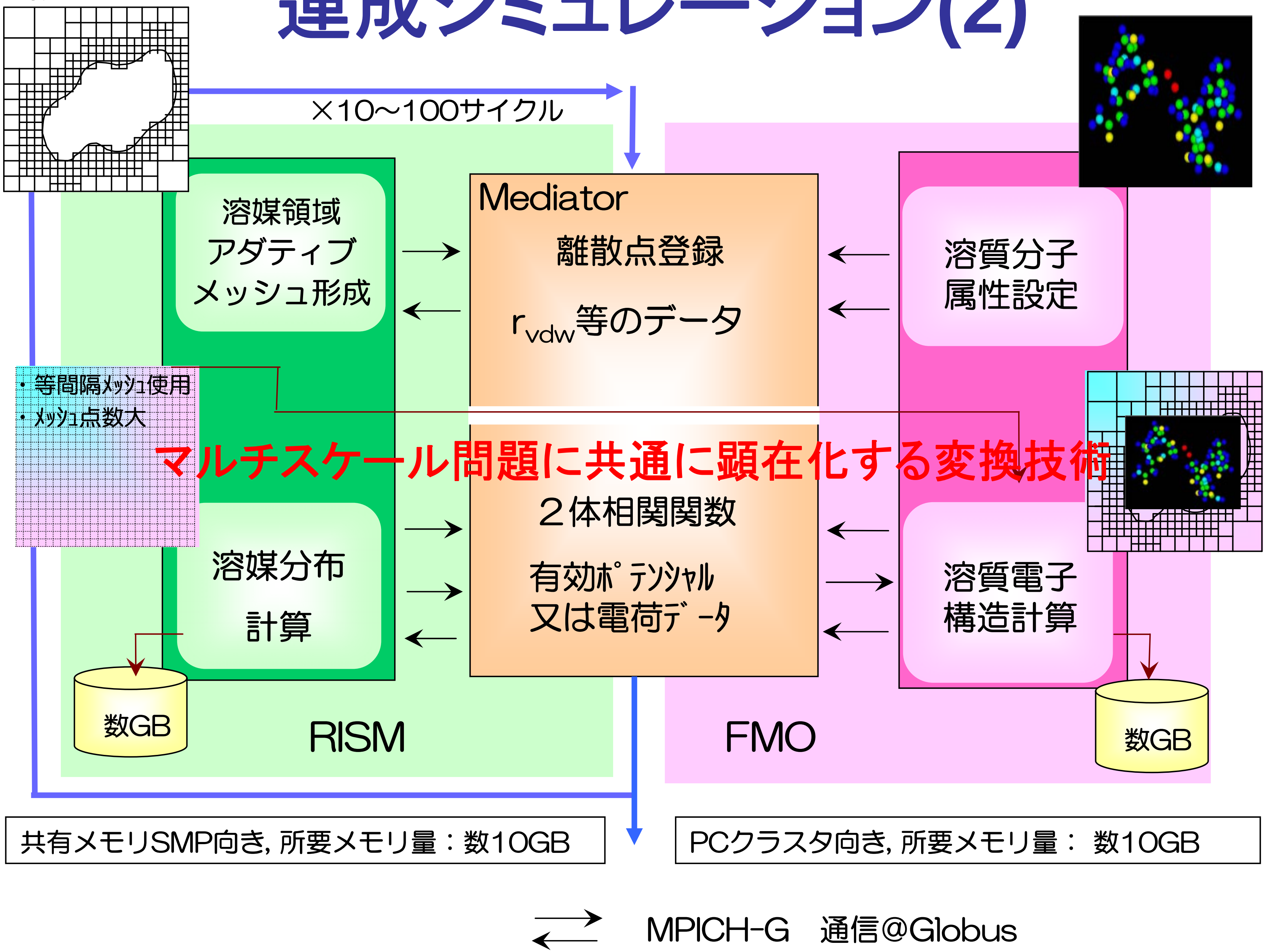
部分系Aを解く手法 ⇔ 部分系Bを解く手法

(例) 分子軌道計算 / 分子動力学計算
構造力学計算 / 分子動力学計算
流体計算 / 構造力学計算
統計力学計算 /分子軌道計算 ・・・etc

データ交換の頻度とデータ量は、部分系間の依存度、結合の強さにより、
弱連成・・強連成と区別することがある.

（余談）

連成シミュレーション(2)



（余談）

連成シミュレーション（3）

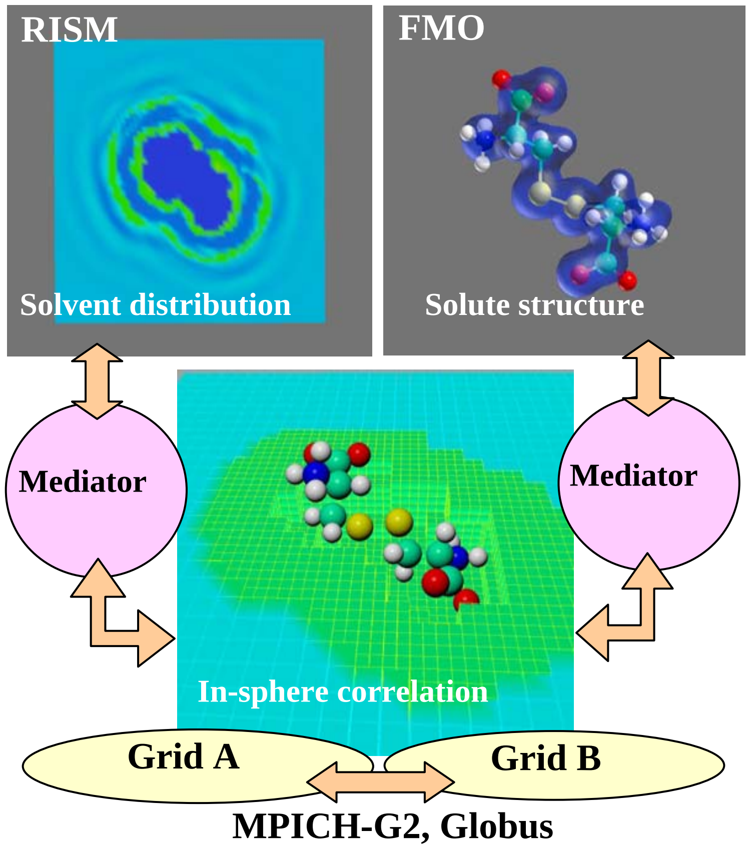


Fig.　RISM-FMO composite simulation
RISM: Reference Interaction Site Model
FMO: Fragment Molecular Orbital method

溶媒効果，水和構造　n依存

溶媒緩和⇔溶媒-溶質相互作用⇔溶質緩和

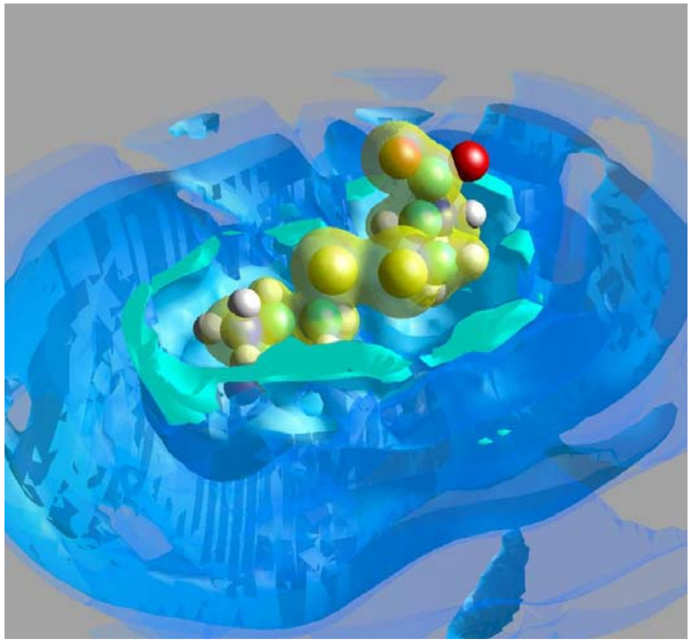


Fig.　Disulfide linkage immersed in H_2O solvent

（余談）
連成シミュレーションの例(1/2)

- 空間，時間的に局所的な相互作用 (Couplings) でモデル化できる場合に有効

  （例） 2つの部分系が「面」で接している
  構造物とまわりの風（流体）など

  演算量と情報交換量の関係も分散計算向き
  ＞

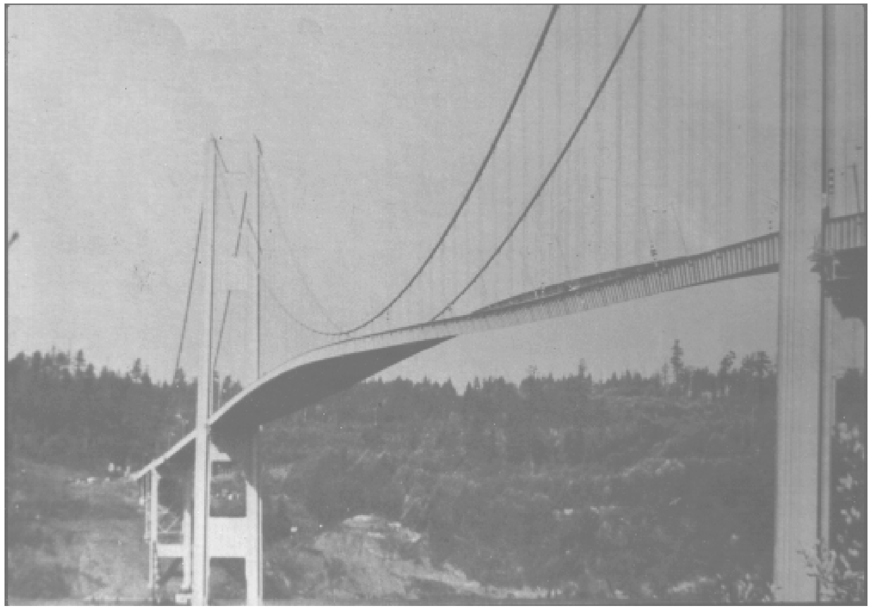
- 全体は近似モデルを適用するが，「重要な部分は厳密に解く」（複合シミュレーション）

  （例） 合金の変形，亀裂生成
  ⇒ 構造力学＋分子動力学

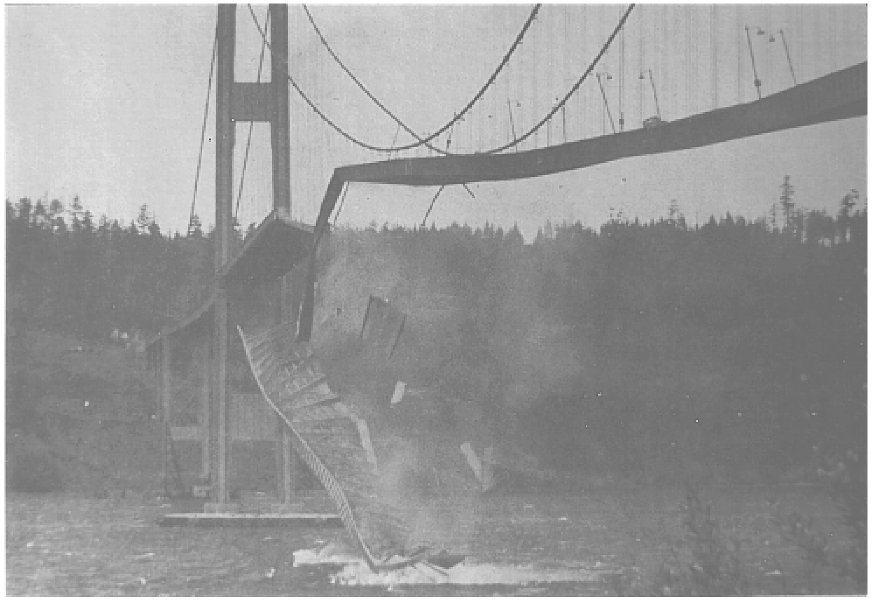
Tacoma（タコマ）橋の崩壊

- Washington state, On November 7 of 1940, at approximately 11:00 AM, the Tacoma Narrows suspension-bridge collapsed due to wind-induced vibrations.

橋のねじれ（固有）振動　～　風による振動



→



単一モデルの適応範囲を超えた？

- When the twisting motion was at the maximum, elevation of the sidewalk at the right was 28 feet (8.5m) higher than the sidewalk at the left (It had not been expected).

共鳴・共振

http://cee.carleton.ca/Exhibits/Tacoma_Narrows/index.html

（余談）
連成シミュレーションの例(2/2)

- 空間時間スケールの異なる現象を（多くは・・むりやり）結びつける.

  Multi-Scale Multi-Physics Simulations

- 保存量や系の対象性を考慮した物理量の「意味変換」が必要な場合が多い.

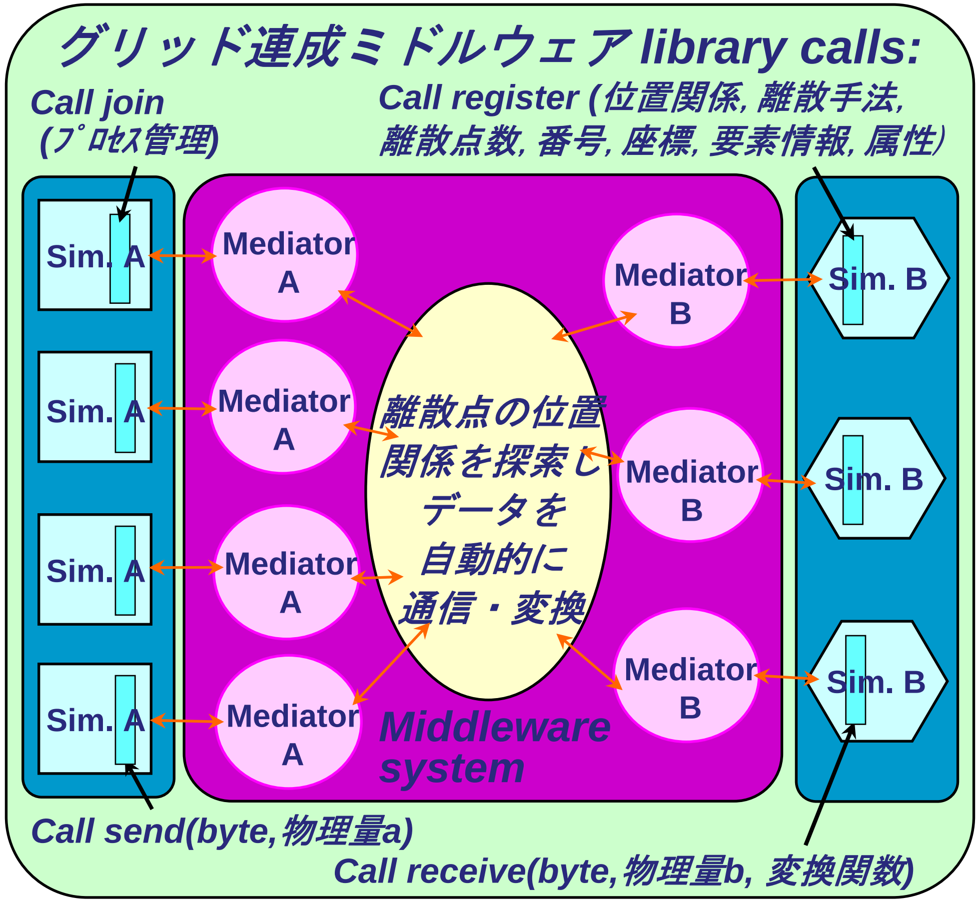
  （例） 多粒子の平均運動⇔圧力

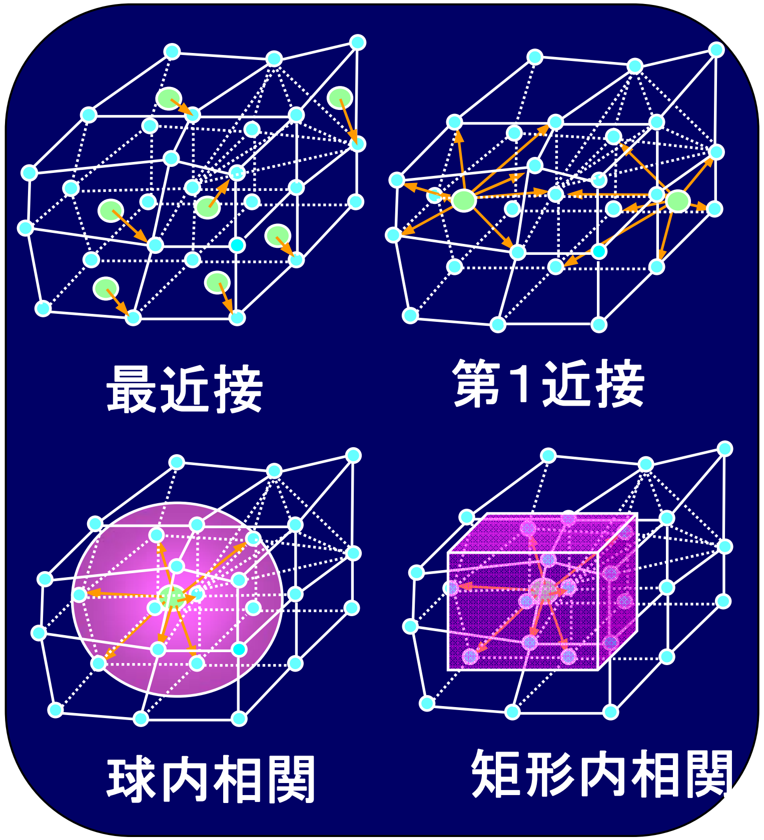
  （例） 粒子座標⇔メッシュ（格子点）

  （例） 疎視化動力学

あおやぎ研究室ではMediatorという通信ライブラリを作っている

グリッド連成ミドルウェア（Mediator）は高度セマンティック変換をサポートすることによって、指定された相関関係にある離散点上の物理量を交換する





本題に戻ります・・

相似変換

$B = P^{-1}AP \qquad P : n \times n$ 正則(逆行列のある)行列

固有多項式は変わらない ⇨ 固有値も変わらない

$$
\begin{aligned}
\det(B - \lambda I) &= \det\left(P^{-1}AP - \lambda I\right) \\
&= \det\left(P^{-1}AP - \lambda P^{-1}P\right) \\
&= \det\left(P^{-1}(A - \lambda I)P\right) \\
&= \det\left((A - \lambda I)PP^{-1}\right) \\
&= \det(A - \lambda I)
\end{aligned}
$$

（公式）行列積の行列式

$$\det(XY) = \det(YX)$$

$$
\begin{aligned}
\det(XYZ) &= \det\left(X(YZ)\right) \\
&= \det\left((YZ)X\right) \\
&= \det(YZX)
\end{aligned}
$$

$$\left.\begin{aligned} A_1 &\equiv A \\ A_2 &= P^{-1} A_1 P \\ A_3 &= P^{-1} A_2 P \\ &\vdots \end{aligned}\right\} \text{相似変換の繰り返し}$$

収束するまで
繰り返し

有限回の変換

$$\begin{pmatrix} * & & & & & \\ & * & & & 0 & \\ & & * & & & \\ & & & \ddots & & \\ & 0 & & & * & \\ & & & & & * \end{pmatrix}$$

対角行列

ヤコビ法等

対角要素→固有値

$$\begin{pmatrix} * & * & & & & \\ * & * & * & & 0 & \\ & * & * & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & \ddots & * & * \\ & & & & * & * \end{pmatrix}$$

3重対角行列

ハウスホルダー法等

固有値
→別の反復法により求める

４．２　ヤコビの方法

相似変換の行列 P

$$P=\begin{array}{cc}\begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & 0 & \\ & & \cos\phi & \cdots & \sin\phi & & \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & & \\ & & -\sin\phi & \cdots & \cos\phi & & \\ & 0 & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix} & \begin{array}{c} \\ \\ p \\ \\ q \\ \\ \\ \end{array} \\ \begin{array}{ccccccc} \quad & \quad & p & \quad & q & \quad & \quad \end{array} & \end{array}$$

$$ {}^{t}PP = I$$

$$P^{-1} = {}^{t}P \quad \text{直交行列}$$

変換後の行列 $B = P^{-1}AP$ の特定の成分を0にする

相似変換 $B = P^{-1}AP$ において

1) A が対称 ${}^tA = A$ ならば

$${}^tB = {}^t(P^{-1}AP) = {}^tPA\,{}^t(P^{-1}) = P^{-1}AP = B$$

よって B も対称

2) A の p,q 行目および p,q 列目のみが変更される

$$
P^{-1}A=\begin{array}{c}\begin{pmatrix}
1 & & & & & & \\
 & \ddots & & & & 0 & \\
 & & \cos\phi & \cdots & -\sin\phi & & \\
 & & \vdots & \ddots & \vdots & & \\
 & & \sin\phi & \cdots & \cos\phi & & \\
 & 0 & & & & \ddots & \\
 & & & & & & 1
\end{pmatrix}\\
\begin{array}{ccccccc} & & p & & q & & \end{array}
\end{array}
\begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
a_{11} & \cdots & a_{1p} & \cdots & a_{1q} & \cdots & a_{1n}\\
\vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots\\
a_{p1} & \cdots & a_{pp} & \cdots & a_{pq} & \cdots & a_{pn}\\
\vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots\\
a_{q1} & \cdots & a_{qp} & \cdots & a_{qq} & \cdots & a_{qn}\\
\vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots\\
a_{n1} & \cdots & a_{np} & \cdots & a_{nq} & \cdots & a_{nn}
\end{pmatrix} &
\begin{array}{c} \\ \\ p \\ \\ q \\ \\ \\ \end{array}\\
\begin{array}{ccccccc} \phantom{a_{11}} & & p & & q & & \phantom{a_{1n}}\end{array} &
\end{array}
$$

$$
=\begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
a_{11} & \cdots & a_{1p} & \cdots & a_{1q} & \cdots & a_{1n}\\
\vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots\\
a'_{p1} & \cdots & a'_{pp} & \cdots & a'_{pq} & \cdots & a'_{pn}\\
\vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots\\
a'_{q1} & \cdots & a'_{qp} & \cdots & a'_{qq} & \cdots & a'_{qn}\\
\vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots\\
a_{n1} & \cdots & a_{np} & \cdots & a_{nq} & \cdots & a_{nn}
\end{pmatrix} &
\begin{array}{c} \\ \\ p \\ \\ q \\ \\ \\ \end{array}\\
\begin{array}{ccccccc} \phantom{a_{11}} & & p & & q & & \phantom{a_{1n}}\end{array} &
\end{array}
$$

$$
\begin{cases}
a'_{pk}=a_{pk}\cos\phi-a_{qk}\sin\phi\\
a'_{qk}=a_{pk}\sin\phi+a_{qk}\cos\phi
\end{cases}
$$

$$B = P^{-1}AP$$

$$
= \begin{array}{c}
\begin{pmatrix}
a_{11} & \cdots & a_{1p} & \cdots & a_{1q} & \cdots & a_{1n} \\
\vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\
a'_{p1} & \cdots & a'_{pp} & \cdots & a'_{pq} & \cdots & a'_{pn} \\
\vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
a'_{q1} & \cdots & a'_{qp} & \cdots & a'_{qq} & \cdots & a'_{qn} \\
\vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{n1} & \cdots & a_{np} & \cdots & a_{nq} & \cdots & a_{nn}
\end{pmatrix} \\
\begin{array}{ccccccc} \phantom{a_{11}} & & p & & q & & \phantom{a_{nn}} \end{array}
\end{array}
\begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & \\
& \ddots & & & & 0 & \\
& & \cos\phi & \cdots & \sin\phi & & \\
& & \vdots & \ddots & \vdots & & \\
& & -\sin\phi & \cdots & \cos\phi & & \\
& 0 & & & & \ddots & \\
& & & & & & 1
\end{pmatrix} &
\begin{array}{c} \\ \\ p \\ \\ q \\ \\ \\ \end{array}
\end{array}
$$

$$
= \begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
a_{11} & \cdots & a''_{1p} & \cdots & a''_{1q} & \cdots & a_{1n} \\
\vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\
a'_{p1} & \cdots & a''_{pp} & \cdots & a''_{pq} & \cdots & a'_{pn} \\
\vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
a'_{q1} & \cdots & a''_{qp} & \cdots & a''_{qq} & \cdots & a'_{qn} \\
\vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{n1} & \cdots & a''_{np} & \cdots & a''_{nq} & \cdots & a_{nn}
\end{pmatrix} &
\begin{array}{c} \\ \\ p \\ \\ q \\ \\ \\ \end{array} \\
\begin{array}{ccccccc} \phantom{a_{11}} & & p & & q & & \phantom{a_{nn}} \end{array} &
\end{array}
$$

$$
\begin{cases}
a''_{kp} = a_{kp}\cos\phi - a_{kq}\sin\phi \\
a''_{kq} = a_{kp}\sin\phi + a_{kq}\cos\phi
\end{cases}
\quad k \neq p, q
$$

$$
\begin{cases}
a''_{pp} = a_{pp}\cos^2\phi + a_{qq}\sin^2\phi - (a_{pq} + a_{qp})\cos\phi\sin\phi \\
a''_{qq} = a_{pp}\sin^2\phi + a_{qq}\cos^2\phi + (a_{pq} + a_{qp})\cos\phi\sin\phi \\
a''_{pq} = (a_{pp} - a_{qq})\cos\phi\sin\phi + a_{pq}\cos^2\phi - a_{qp}\sin^2\phi \\
a''_{qp} = (a_{pp} - a_{qq})\cos\phi\sin\phi + a_{pq}\cos^2\phi - a_{qp}\sin^2\phi
\end{cases}
$$

$a_{ij} = a_{ij}$ を用いると結局

$$
\begin{cases}
b_{ij} = a_{ij} & i, j \neq p, q \\
b_{pk} = b_{kp} = a_{pk} \cos\phi - a_{qk} \sin\phi & k \neq p, q \\
b_{qk} = b_{kq} = a_{pk} \sin\phi + a_{qk} \cos\phi & k \neq p, q \\
b_{pp} = \dfrac{a_{pp} + a_{qq}}{2} + \dfrac{a_{pp} - a_{qq}}{2} \cos 2\phi - a_{pq} \sin 2\phi & \\
b_{qq} = \dfrac{a_{pp} + a_{qq}}{2} - \dfrac{a_{pp} - a_{qq}}{2} \cos 2\phi + a_{pq} \sin 2\phi & \\
b_{pq} = \dfrac{a_{pp} - a_{qq}}{2} \sin 2\phi + a_{pq} \cos 2\phi &
\end{cases}
$$

$b_{pq} = 0$ とするためには $\tan 2\phi = \dfrac{-2a_{pq}}{a_{pp} - a_{qq}}$ とすればよい.

（注）もし、 $a_{pp} = a_{qq}$ ならば、

$$\varphi = sign(a_{pq})\frac{\pi}{4}$$

と選ぶ。

p, q の選び方

絶対値が最大の非対角要素が0となるように選ぶ

一度0になった要素が後の変換で0でなくなることもありうる（次に「収束」の保証について考察する）

「ヤコビ法の収束について」

相似変換 $B = P^{-1}AP$ において次が成り立つ

(a) $\boxed{\sum_{i,j} a_{ij}^2 = \sum_{i,j} b_{ij}^2}$

(全要素の2乗の和は変わらない)

P は直交行列 ($P^{-1} = {}^tP$) だから

$${}^tBB = {}^t(P^{-1}AP)(P^{-1}AP) = {}^tPA\,{}^t(P^{-1})P^{-1}AP = P^{-1}\,{}^tAAP$$

対角和は相似変換によって不変だから

$$\mathrm{tr}\,A^T A = \mathrm{tr}\,B^T B$$

成分ごとに書くと

$$\sum_{i,j} a_{ij}^2 = \sum_{i,j} b_{ij}^2$$

補足

対角和(トレース)

$$\mathrm{tr}\,X = \sum_{i=1}^{n} x_{ii}$$

XY の対角和 $= YX$ の対角和

$$\mathrm{tr}\,XY = \sum_{i=1}^{n} \left(XY\right)_{ii} = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{n} x_{ij} y_{ji} \right) = \sum_{j=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{n} y_{ji} x_{ij} \right) = \mathrm{tr}\,YX$$

相似変換によって変わらない

$$\mathrm{tr}\,Y^{-1}XY = \mathrm{tr}\,Y^{-1}\left(XY\right) = \mathrm{tr}\left(XY\right)Y^{-1} = \mathrm{tr}\,X\left(YY^{-1}\right) = \mathrm{tr}\,X$$

(b) $\boxed{b_{pp}^2 + b_{qq}^2 = a_{pp}^2 + 2a_{pq}^2 + a_{qq}^2}$ の証明.

まず $b_{pp}^2 + 2b_{pq}^2 + b_{qq}^2 = a_{pp}^2 + 2a_{pq}^2 + a_{qq}^2$ を示す

$$\begin{cases} b_{pp} = \dfrac{a_{pp} + a_{qq}}{2} + \dfrac{a_{pp} - a_{qq}}{2}\cos 2\phi - a_{pq}\sin 2\phi \\ b_{qq} = \dfrac{a_{pp} + a_{qq}}{2} - \dfrac{a_{pp} - a_{qq}}{2}\cos 2\phi + a_{pq}\sin 2\phi \\ b_{pq} = \dfrac{a_{pp} - a_{qq}}{2}\sin 2\phi + a_{pq}\cos 2\phi \end{cases}$$

において $F = \dfrac{a_{pp} + a_{qq}}{2}, \quad G = \dfrac{a_{pp} - a_{qq}}{2}, \quad H = a_{pq}$ とおくと

$$\begin{cases} b_{pp} = F + G\cos 2\phi - H\sin 2\phi \\ b_{qq} = F - G\cos 2\phi + H\sin 2\phi \\ b_{pq} = G\sin 2\phi + H\cos 2\phi \end{cases}$$

$$\left(x+y\right)^2+\left(x-y\right)^2=2x^2+2y^2$$

$$\begin{aligned}
b_{pp}^2+2b_{pq}^2+b_{qq}^2 &= \left\{F+\left(G\cos 2\phi-H\sin 2\phi\right)\right\}^2+\left(F-\left(G\cos 2\phi-H\sin 2\phi\right)\right)^2 \\
&\quad +2\left(G\sin 2\phi+H\cos 2\phi\right)^2 \\
&= 2F^2+2\left(G\cos 2\phi-H\sin 2\phi\right)^2+2\left(G\sin 2\phi+H\cos 2\phi\right)^2 \\
&= 2F^2+2\left\{G^2\cos^2 2\phi+H^2\sin^2 2\phi-2GH\cos 2\phi\sin 2\phi\right\} \\
&\quad +2\left\{G^2\sin^2 2\phi+H^2\cos^2 2\phi+2GH\cos 2\phi\sin 2\phi\right\} \\
&= 2\left(F^2+G^2+H^2\right) \\
&= 2\left\{\left(\frac{a_{pp}+a_{qq}}{2}\right)^2+\left(\frac{a_{pp}-a_{qq}}{2}\right)^2+a_{pq}^2\right\} \\
&= 2\left\{\frac{a_{pp}^2+a_{qq}^2}{2}+a_{pq}^2\right\} \\
&= a_{pp}^2+2a_{pq}^2+a_{qq}^2
\end{aligned}$$

$$b_{pp}^2 + 2b_{pq}^2 + b_{qq}^2 = a_{pp}^2 + 2a_{pq}^2 + a_{qq}^2$$

において P は $b_{pq} = 0$ となるように選んだから

$$b_{pp}^2 + b_{qq}^2 = a_{pp}^2 + 2a_{pq}^2 + a_{qq}^2$$

以上(a)、(b)からBの非対角要素の2乗の和は

$$\begin{aligned}
\sum_{i \neq j} b_{ij}^2 &= \sum_{i,j} b_{ij}^2 - \left(\sum_{i \neq p,q} b_{ii}^2 + b_{pp}^2 + b_{qq}^2 \right) \\
&= \sum_{i,j} a_{ij}^2 - \left(\sum_{i \neq p,q} a_{ii}^2 + a_{pp}^2 + 2a_{pq}^2 + a_{qq}^2 \right) \\
&= \sum_{i \neq j} a_{ij}^2 - 2a_{pq}^2
\end{aligned}$$

となる

$$\sum_{i\neq j} b_{ij}^2 = \sum_{i\neq j} a_{ij}^2 - 2a_{pq}^2$$

において p,q は $a_{pq}^2 = \max_{i\neq j} a_{ij}^2$ となるように選んだから

全ての $i \neq j$ について

$$a_{ij}^2 \leq a_{pq}^2$$

和をとると $\sum_{i\neq j}$ の項数は $n^2 - n$ だから

$$\sum_{i\neq j} a_{ij}^2 \leq n(n-1)a_{pq}^2 \quad \Longrightarrow \quad \frac{2}{n(n-1)}\sum_{i\neq j} a_{ij}^2 \leq 2a_{pq}^2$$

よって

$$\sum_{i\neq j} b_{ij}^2 = \sum_{i\neq j} a_{ij}^2 - 2a_{pq}^2 \leq \left\{1 - \frac{2}{n(n-1)}\right\} \sum_{i\neq j} a_{ij}^2$$

$$\sum_{i\neq j} b_{ij}^2 \leq \left\{1-\frac{2}{n(n-1)}\right\}\sum_{i\neq j} a_{ij}^2$$

$k-1$回相似変換を行った後の行列A_kの要素を $a_{ij}^{(k)}$と書くと

$$\sum_{i\neq j}\left(a_{ij}^{(k)}\right)^2 \leq \left\{1-\frac{2}{n(n-1)}\right\}^k \sum_{i\neq j} a_{ij}^2$$

$n\geq 3$に対しては $0<1-2/n(n-1)<1$ だから

$k\to\infty$ のとき $\sum_{i\neq j}\left(a_{ij}^{(k)}\right)^2 \to 0$

よって･･(上のPによる) 相似変換の繰り返しで
非対角成分は全体として0に収束する

「固有値と固有ベクトル」

k回目の相似変換の行列をP_kと書く

$$A_{k+1} = P_k^{-1} A_k P_k, \quad k = 1, 2, \cdots$$

$$T = \lim_{k \to \infty} P_1 P_2 \cdots P_k$$

を作ると、以上の結果から

$$\Lambda = T^{-1} A T$$

ここでΛは対角行列

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & 0 \\ 0 & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

λ_i: Aの固有値

$$\Lambda = T^{-1}AT$$

から

$$AT = T\Lambda$$

T の第i列からなる列ベクトルをt_i とすると

$$T = (t_1, t_2, \cdots, t_n)$$

$$At_k = \lambda_k t_k$$

t_i がAの固有値λ_i に属する固有ベクトルとなる