しけぷり

某しけたい 4

2008 年 10 月 16 日

▷もくじ◁

1 偏微分方程式の数値解析–行列の扱い方

全部人形遣いがやった

しけたい４　(死亡フラグ立ちまくり)

このシケプリは無断転載禁止です。

間違い指摘できる人お願いします！！

相棒・・・私に一人で仕事やらせるなんて酷いわ・・・・・・

そうだ、この藁人形で・・・・・・・ごっすんごっすん（ぐさっ）

（手から鮮血がほとばしる）

・・・・・・・・・・・

1　オープニング・記事紹介

血の匂いに釣られて来ましたしけたい４の代理です。今週から来週にかけてのカレンダーを見直すと、一気に体重が変わりそうなフラグが立ちまくっていますが何か起こっても奴は血を吸ったわけでも吸われたわけでもない（多分）なので御安心ください。

行列なんてきゅっとしてドカーンね

無断転載禁止するべからず

レポートの内容の正しさは完全には保障できません

間違い気付きましたら教えてください

この顔アイコンはみょふ～会様からのお借り物です

ネタが長い
出来が悪い

ゼミに出損ねた人、演習作ってよという人、数学的解説がもうちょい欲しい（特に今回は省略が激しい）という人、申し訳ないですがもうしばらくお待ちください。それと、大変恐縮ですが、しけ４が出られなかった分のゼミについては個別に教えてもらいにいくかもしれません。しけ４の頭脳具合が教材にもろ影響するのでよりよいシケプリ作成にご協力を（何

2 空っぽのみかん箱

秋はやっぱりこたつにみかんよね～
間欠泉騒ぎのおかげで今年の収穫心配してたけど、不思議となんとかなってて助かったわ。あ、間欠泉といえば熱々になった石を利用して焼き芋作ってたんだっけ。そろそろ焼けたかしら。

（最後のみかんに目をやりながら）
まさか芋を取りにいく間に勝手に食べるとは・・・・・・考えにくいけど。万が一食べられたら嫌だから箱を結界で守っておこうかしら。

数分後。巫女が芋を回収して戻ってきたら・・・

おい、大変だ。このみかん箱、妙な力で守られてるぞ！

（魔法使いにアンクルホールドを決めながら）
そう、よかったわね。もし食べることが出来てたなら今頃貴女の皮をはいでいるところだったわ♪
なんて、冗談だけど。結界で守っておいて良かったわ゛

（関節を押さえながら）
いててて。魔女の宅急便でなぜ箒が折れてしまったのかわかった気がするぜ。ついでに冗談に聞こえないって。あれ？どうかしたみたいだな？表情暗いぜ。

結界の解除方法忘れちゃったみたい・・・・・
この結界は行列で封印したから逆行列とか固有ベクトルとか使えないと開かないの。。

おいおい、みかん一つでそんな泣きそうな顔になるなって。
しょうがないから手伝ってやるぜ。みかん半分で！待て、そんな目で見ないでくれ。解った解ったよ。無事にみかんを救出してから決めよう。ああ。

3　逆行列を求めるその１–吐き出し法

今までの講義で解ったと思うけど、差分法、有限要素法を用いた偏微分方程式の解法では、未知数、未知の固有ベクトルを求めるために必要な分の偏微分の差分近似や関数の内積を用意して行列式（または連立方程式）の形に直していたわね。元の満たすべき式や、差分の作法や、有限要素で用いる関数の形によって、行列は様々な形に変化するわ。ここからは、逆行列や固有値、固有ベクトルを求める方法を解説していくわ。

吐き出し法はみんなも数学２などで遊んだことのある相手だな。計算回数も程々で使い勝手が良いぜ。直接解を求める方法はここではこれしか扱わないわない。LU 分解は常微分のゼミのお楽しみってことにしといてくれ。

一番解りやすいのは以下のような手順だな

- １列目について、a_{11} 以外が０になるように変換
- ２列目について、a_{22} 以外が０になるように変換
- 以下繰り返し

ただ、この場合 a_{nn} が０だったり限りなく小さい値だったときにうまく計算できないぜ。これを回避するために手順を以下のように書き換えるべきだな。

- a_{n1}（n=1,2・・）が最大となる行を１行目と入れ替える
- １列目について、a_{11} 以外が０になるように変換
- a_{n2}（n=2,3・・）が最大となる行を２行目と入れ替える
- ２列目について、a_{22}h 以外が０になるように変換
- 以下繰り返し

4　連立方程式を解く２–ガウス・ザイテル法

連立方程式の解を求める方法のもう一つに、反復計算を繰り返して近似解を得るというのもあるの。こちらの方法は、はじめから近似解を見積もることに焦点をしぼっているという点で、先ほどのメソッドと異なるわ。
求めたい連立方程式の解 x を $Ax = b$
としたとき、以下のような試行を繰り返して行くの

行列の数列 x^i を作る
適当な初期ベクトルを定め、A を対角行列 U と上三角行列 L と下三角行列 D の和の形で書きなおし
$(L + D)x^{r+1} = b - Ux^r$
を満たすようにベクトルを更新していく

ちなみに、この場合
$x_i^{r+1} = (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} x_j^{r+1} - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j^r)/d_{ii}$ となるわ。
この行列が収束するなら真の解に収束するのはわかるわね？具体的な式を見れば解るとは思うけど、この方法は対角成分が十分大きいときでないとうまく収束しないわ。

5 連立方程式を解く３–共役勾配法

これも近似解を求めるためのメソッドだ。それなりに強力なメソッドで、工学とかでは一番使われてるんじゃないかな？結局のところ反復なんだが、ベクトルの更新が
$x^{r+1} = x^r + a^r p^r$
という形になってるんだ。a はスカラー、p がベクトルで、a,p は以下の条件を求めるように作るぜ。

$\frac{1}{2}x^T Ax - x^T b$ が min になる。
この汎関数は実際の解のベクトル x について、Ax-b のベクトルの大きさが min になることを利用すれば出せるんじゃないかと思う。詳しくは追加記事が出たときにでも期待しといてくれ。行列の形にいろいろ制限が掛かるみたいだぜ。正値性と言うらしい。

さて、この式を満たす p、a を求めるのを繰り返せばいいわけだ。未知数が与えられる式より多いから、もう一つトリックが要りそうなことに気付けたか？この場合
$r^k = b - Ax^k$
$p^0 = r^0$
としてまず二次関数の極小値から a^0 を求めるんだ。

p^{r+1} を決めるには p^r **が** p^{r-1}, p^{r-2}・・と垂直という条件をくわえて
$p^{r+1} = r^{r+1} - \beta^r p^r$ と決め付ければ求めることが出来るぜ。

以下、これを繰り返せば良い。

5.1 この方法をやる前の下準備

収束の精度を上げるため、以下のような技をくわえることも出来るわ。先ほどと同じように A を対角、上、下に分解したときの対角行列を用いて
$D^{-1/2}AD^{-1/2}y = D^{-1/2}b$
$x = D^{-1/2}y$
見れば解るとは思うけど、全く同じ式よ。左辺の行列の対角成分が全て 1 になったのがポイントね。

これで収束が早まるの。それを考えるために
$Ax = b$ の b がちょっと動いたときの解の変化を考えてみようかしら。
b は A の固有値 d_i に対応するベクトル a_i の線形結合
$\sum c_i a_i$ と書き直せるわ。

すると、解 x は
$\sum(c_i/d_i)a_i$
になるわ。d_i がばらついていればばらついているほど、b の変化に対して解の変化が激しくなりそうなことが解るわね。
まあ、具体的な例を持ち出すと思いのほかそうとばかりはいかないのだけどね。

6　固有値を求めたい

（こたつで転がりながら）
次は固有値を求めたいわね。有限要素法などで遊んで解ったと思うけど、計算機で出てくる行列は対称行列であることに気付いたかしら？ここでは対称行列の固有値をハウスホルダー変換と二分法で求めるわ。さて、アウトラインを喋ったことだし、次は貴女の番よ？

え〜〜〜。
このセクションの題名に釣られて来た人が凄く可愛そうなんだが。

しょうがないわね。特別にしけたい４の極秘情報を此処に晒しておくわ。
ゼミの補足資料総集編アンダーグラウンドで作成中。題名は
八雲トリオで８×３=24 時間テレビ
境界商事が提供する 24 時間テレビの流れに沿って様々なしけ４ワールドが展開されるとかされないとか。演習とかゼミでの反省とかが活かされたいい作品に・・・・仕上がるといいわね♪

読者の皆さんごめんなさい。。

7　ハウスホルダー法による対角行列の変形

ハウスホルダー法はあるベクトル r を回転させて、ある軸にそろえさせたいときに使う技だぜ。r の大きさと同じ大きさで、かつ軸にそったベクトル p を用意しよう。この時 r を p にするような行列を探せば良いと解るな？

そんな行列は以下のように定義できるぜ。$H = I + \frac{2(p-r)^T(p-r)}{|p-r|^2}$ 図にすると解りやすいかな。H は対称行列で 2 乗は I になるぜ。これによって、この変換でも固有値が変わらないことが解るはずだぜ。

ハウスホルダー法用いて、ひたすら対角行列 A を三重対角行列に書き換えるぜ。例えば４行４列ならまず

1 行目のベクトル $(a_{11}, a_{12}, a_{13}, a_{14})^T$ を変形したい。ベクトル $(0, a_{12}, a_{13}, a_{14})$ の大きさを a とすれば最終的には $(a_{11}, a, 0, 0)$ の形になれば良いわけだな。早速、先ほど紹介した方法を用いて変換するぜ。
$A_1 = HAH$

A,H が共に対称行列だから、$a_{13}, a_{14}, a_{31}, a_{41}$ の部分が 0 になった行列が完成するぜ。この要領で変換を繰り返していけば OK だ。

（巫女がうつらうつらしてるのに気付いて）
こら、寝るなぁあ！

8 固有値を求める–2 分法

さて、こうして得られた三重対角行列（A とする）から固有値を求めるわ。
$det|A - \lambda I|$
は三重対角行列の性質から数列を作って簡単に求めることが可能よ。

$\phi_0 = 1$
$\phi_1 = a_{11} - \lambda$
$\phi_{k+1} = (a_{k+1,k+1} - \lambda)\phi_k - 2(a_{k+1,k})^2\phi_{k-1}$

ϕ_i はここで面白い性質を満たしているのよ。それは
ϕ_i を 0 から順番に n まで見て行ったとき、符号の反転する回数は、λ より行列 A の固有値の数に等しい
これが本当なら、以下のような手順で固有値を求められるわね（スツルムの定理の応用。簡単な証明は下に）

- 最も大きい固有値を含んでいる領域 [a,b] を定める
- $det|A - (a + b/2)I|$ を求める。
- ϕ_i の符号反転回数が 1 以上なら領域を [(a+b)/2,b] にする
- ϕ_i の符号反転回数が 0 なら領域を [a,(a+b)/2] にする
- 繰り返して領域を絞る

スツルムの定理の簡単な証明：
まず ϕ_i について考えるわ。数列自体が ϕ_{k+1} をユークリッドの互除法で ϕ_k, ϕ_{k-1} としていると解釈できるわね。もし、三重対角行列に 0 がなければ、任意の ϕ_i は他と同時に 0 になることは無いわね。
$0 < k < n$ について
$\phi_k(\lambda)$ が ϵ、0、$-\epsilon$ となるような微小な領域について λ を動かすとするわ。ϵ は任意の正の実数ね。

さて、ϵ は何処までも小さくできるので λ の値が動く間に『ϕ_i 以外の符号が入れ替わらない』という状況を作れるわね。そして、ϕ_i の式を見直すと
$\phi_{i+1} = (a_{i+1,i+1} - \lambda)\phi_i - 2(a_{i+1,i})^2\phi_{i-1}$
つまり、$\phi_i = 0$ の時は ϕ_{i+1}, ϕ_{i-1} は（正、負）か（負、正）。そして λ の移動中はこれらの符号は入れ替わらないとしているから（下の表での ϵ_0 は任意の絶対値が小さい数）

x	ϕ_{i-1}	ϕ_i	ϕ_{i+1}	符号変化数
$\lambda_0 + \epsilon_0$	$\pm$	$+$	$\mp$	1
λ_0	$\pm$	0	$\mp$	1
$\lambda_0 - \epsilon_0$	$\pm$	-	$\mp$	1

こうなるわね。つまり、符号の入れ替わった回数は変わらないわ。一方 k=n の時は
$\phi_n = (a_{n,n} - \lambda)\phi_{n-1} - 2(a_{n,n-1})^2\phi_{n-2}$
$\phi_n = 0$ が正から負へ変化しても、ϕ_{n-1}, ϕ_{n-2} などの符号は変化しないのだから、符合の変化回数が変わるわ。さて、ϕ_i は λ の i 次の関数で、i 次の係数は $(-1)^i$ だわ。
これから $\lambda \to -\infty$ とした時、ϕ_i は全て正になるはずね。

同様に $\lambda \to \infty$ とした時は正、負、正、負・・となるはずだわ。以上から、**ϕ_i を 0 から順番に n まで見て行ったとき、符号の反転する回数は、λ より行列 A の固有値の数に等しい**という命題が成り立つと証明できたわ。重解の場合などはちょっと考えるのが面倒だけどこれを応用すれば解けるはずよ。

9　固有値から固有ベクトルを求める

これには逆反復法というメソッドがよく使われるわ。求められた固有値を λ 適当な初期ベクトル x_0 を用意して、これにひたすら
$|A - \lambda I|^{-1}$
をかけあわせるの。実際は何度もかけなくてもそれなりの精度の解は得られるわ。

この方法のポイントは、初期ベクトルを固有ベクトルで分解すれば理解できるわね。
$x_0 = \sum a_l v_l$
$|A - \lambda I|^{-1} x_0 = \frac{1}{E_l - \lambda} a_l v_l$
見ての通り、固有値に対応するベクトルだけ指数関数的に大きくなってくれるの。こうして作り上げたベクトルを適当な大きさに縮めれば OK ね。

初期ベクトルを変えれば、重解にも対応できるわ。ここまでやれば、貴女の謎の半分くらいは解けたのではないかしら？

さて♪
結界が解除できたわね。早速みかんを・・・・
（びちゃ）

あ〜
こりゃ腐ってたみたいだな。箱詰めのみかんは最後の一個って下に居るせいか痛みやすくて、そのくせ痛むのが下の方であることが殆どだから触るまで解らない。落ち込むなって、よくある事だｚ・・・

うわああああああああああああん！

こうして焼き芋は墨になった。
巫女の慟哭が繰り返されたことはいうまでも無い
おしまい（何