おしらせ

- **第一回、および二回のレポートを、学科事務室にて返却しています**
  - 各人、都合の良い時に、早めに取りに行ってください
- **正誤のみ確認しています（点数はつけていない）。**
  - **各人、間違ったところについては、きちんと理解しておいてください。**
- **課題レポート提出に関して**
  - **期限：２月９日（月）正午**
  - **提出先：物理学科事務室**

数値計算法

第十回
逆行列を求める（Gauss-Jordan法）
＆
行列の固有値問題

若狭　智嗣

粒子物理学講座

Gauss–Jordan法

- **Gauss法**
  - 行列 A の左下非対角成分を0にする

- **Gauss–Jordan法**
  - 行列 A の左下非対角成分を0にする（Gauss法に同じ）
  - 行列 A の右上非対角成分も0にする
  - 行列 A の対角成分を1にする

連立方程式の解 x が自動的に得られる

具体例（3行3列の場合）

- 解くべき連立方程式

$$2x - 1y - 1z = +1 \tag{11.5}$$

$$3x - 2y + 2z = -3 \tag{11.6}$$

$$1x - 2y + 1z = -4 \tag{11.7}$$

1. まず、式 (11.5) を定数倍して x の係数 (a_{11} に相当) を 1 にする。この式 (11.21) を用いて、式 (11.6)、(11.7) の x の係数を 0 にする。

$$1x - \frac{1}{2}y - \frac{1}{2}z = +\frac{1}{2} \quad \ldots (11.5) \times \frac{1}{2} \tag{11.21}$$

$$0x - \frac{1}{2}y + \frac{7}{2}z = -\frac{9}{2} \quad \ldots (11.6) - (11.21) \times 3 \tag{11.22}$$

$$0x - \frac{3}{2}y + \frac{3}{2}z = -\frac{9}{2} \quad \ldots (11.7) - (11.21) \times 1 \tag{11.23}$$

具体例（3行3列の場合）—続き—

2. 次に、式 (11.22) を定数倍して y の係数 (a_{22} に相当) を 1 にする。この式 (11.25) を用いて、式 (11.21)、(11.23) の y の係数を 0 にする。

$$
\begin{aligned}
1x + 0y - 4z &= +5 \quad \ldots(11.21) - (11.25) \times \left(-\frac{1}{2}\right) && (11.24) \\
0x + 1y - 7z &= +9 \quad \ldots(11.22) \times (-2) && (11.25) \\
0x + 0y - 9z &= +9 \quad \ldots(11.23) - (11.25) \times \left(-\frac{3}{2}\right) && (11.26)
\end{aligned}
$$

3. 最後に、式 (11.26) を定数倍して z の係数 (a_{33} に相当) を 1 にする。この式 (11.29) を用いて、式 (11.24)、(11.25) の z の係数を 0 にする。

$$
\begin{aligned}
1x + 0y + 0z &= +1 \quad \ldots(11.24) + (11.29) \times 4 && (11.27) \\
0x + 1y + 0z &= +2 \quad \ldots(11.25) + (11.29) \times 7 && (11.28) \\
0x + 0y + 1z &= -1 \quad \ldots(11.26) \times \left(-\frac{1}{9}\right) && (11.29)
\end{aligned}
$$

結果から分かるように、$\boxed{\text{この方法では求める解 } x \text{ が自動的に得られている。}}$

演習

- Gauss-Jordanの消去法により、連立方程式を解くサブルーチンを
  /home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/jordan.f
  に置く。
  このサブルーチンを用いて、連立方程式

$$2x + 4y + 6z = 6$$

$$3x + 8y + 7z = 15$$

$$5x + 7y + 21z = 24$$

を数値計算により解け。

プログラム(jordan)の説明(入出力のみ)
(/home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/jordan.f)

```
      subroutine jordan(n,f,b)
      implicit none
c***************************************
c Gauss-Jordan の消去法により n 元連立方程式
c    Ax = b
c の解を求める。
c 入力
c    n: 次元
c    f: 係数行列 A の要素 (n x n)
c    b: ベクトル b の要素 (n)
c 出力
c    b: 解 x
c***************************************
c input/output:
      integer n
      real    f(n,n),b(n)
```

このプログラムの機能

結果(解)は
b に上書きされる
(*b* の内容は破壊)

演習の答え

$$x = -33$$

$$y = 9$$

$$z = 6$$

Gauss-Jordan法により逆行列を求める

- **Gauss-Jordan法**
  - 行列 A の左下非対角成分を0にする（Gauss法に同じ）
  - 行列 A の右上非対角成分も0にする
  - 行列 A の対角成分を1にする

Gauss-Jordan法は A を E (単位行列) に変換している
(A に A^{-1} をかけて E にしている)

同じ操作を E に対して行うと…

E に A^{-1} をかけるので A^{-1} に変換される

演習

- Gauss-Jordanの消去法により、逆行列を求めるサブルーチンを
  /home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/matinv_jordan.f
  に置く。
  このサブルーチンを用いて、次の５行５列の行列

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 3 & 3 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix}$$

  の逆行列を数値計算により求めよ。
- 上記で求めた逆行列が正しいことを、筆算と数値計算により確認せよ

プログラム(matinv_jordan)の説明(入出力のみ)
(/home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/matinv_jordan.f)

```
      subroutine matinv_jordan(n,a)
      implicit none
c*******************************************
c Gauss-Jordan の消去法により n 次正方行列 A の
c 逆行列 A^-1 を求める。
c 入力
c      n: 次元
c      a: 行列 A の要素 (n x n)
c 出力
c      a: 逆行列 A^-1 の要素
c*******************************************
c input/output:
      integer n
      real*8  a(n,n)
```

このプログラムの機能

結果(解)は
a に上書きされる
(***a*** の内容は破壊)

行列要素は倍精度
(real*8)である必要がある

プログラム例

```
c const
      integer N          ! 行列の次元
      parameter(N=5)
c local variable
      real*8  a(N,N)     ! 行列要素（倍精度）
c for loop
      integer i,j
c begin
      a(1,1)=  1.
      a(1,2)=  1.
```

途中略

```
      call matinv_jordan(N,a)
      do i=1,5
        write(*,'(5f7.2)') (a(i,j),j=1,5)
      end do
```

以下略

行に関するループ
1行目から5行目

列に関するループ
1列目から5列目の要素が
同一行に出力される

計算(出力)例

kterm

```
% frt -o matinv_jordan_test matinv_jordan_test.f matinv_jordan.f
matinv_jordan_test.f:
matinv_jordan.f:
Linking:
% ./matinv_jordan_test
   2.00  -1.00   0.00   0.00   0.00
  -1.00   2.00  -1.00   0.00   0.00
   0.00  -1.00   2.00  -1.00   0.00
   0.00   0.00  -1.00   2.00  -1.00
   0.00   0.00   0.00  -1.00   1.00
% 
```

演習の答え

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

固有値と固有振動―線形物理学と非線形物理学―

- **物理学の（かなり大雑把な）分類の1例**
  - 線形物理学
  - 非線形物理学
- **線形物理学の例**
  - 力学のなかの弾性論
  - 電磁気学
  - 量子力学（波動方程式）
- **線形物理学一般**
  - 対象とする形に固有のモード（波動）の固有値、固有運動（振動）を求める問題に帰着
  - 固有振動を求めるという意味では以下の分野でも重要
    - 原子核物理学
    - 固体物理学

極めて適用範囲が広く、それゆえ数値計算も重要である

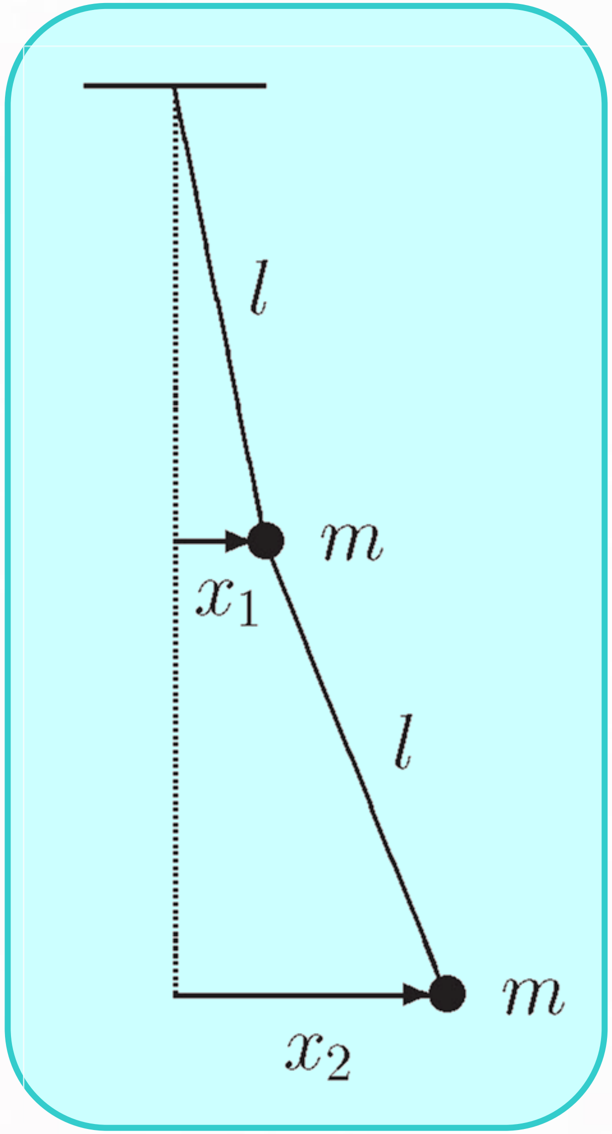
行列の固有値問題の具体例ー2重振り子ー

- **微小振動**

$$\left|\frac{x_1}{l}\right| \ll 1, \quad \left|\frac{x_2}{l}\right| \ll 1$$

の場合、系のラグランジアンは

$$\boxed{\mathcal{L} = \frac{m}{2}\left(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2\right) - \frac{1}{2}\frac{mg}{l}\left\{2x_1^2 + (x_2 - x_1)^2\right\}}$$



Lagrangeの運動方程式

- **Lagrangeの運動方程式**

$$\boxed{\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_i}\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_i} = 0} \xrightarrow{\text{連立方程式}} \boxed{\begin{aligned} m\ddot{x}_1 &= -\frac{mg}{l}2x_1 + \frac{mg}{l}(x_2 - x_1) \\ m\ddot{x}_2 &= -\frac{mg}{l}(x_2 - x_1) \end{aligned}}$$

- **固有振動(2つの質点が同じ角振動数ωで振動)の場合**

$$\boxed{\ddot{x}_1 = -\omega^2 x_1, \quad \ddot{x}_2 = -\omega^2 x_2}$$

$$\boxed{\begin{aligned} (3\omega_0^2 - \omega^2)x_1 - \omega_0^2 x_2 = 0 \\ -\omega_0^2 x_1 + (\omega_0^2 - \omega^2)x_2 = 0 \\ \omega_0^2 = g/l \end{aligned}}$$

行列・固有値問題へ

- **行列を用いた表現**

$$\begin{pmatrix} 3\omega_0^2 & -\omega_0^2 \\ -\omega_0^2 & \omega_0^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \omega^2 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

$$\lambda = \omega^2/\omega_0^2$$

$$\begin{pmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$$

- **固有値問題（固有値方程式）**

$$\begin{vmatrix} 3-\lambda & -1 \\ -1 & 1-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

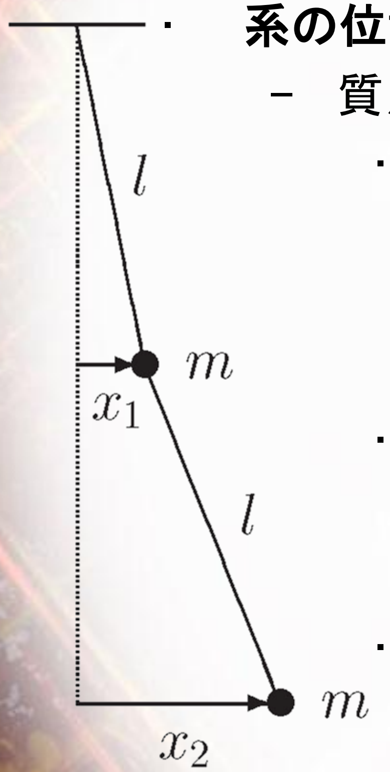
演習

- **例題の2重振り子の固有振動を求めよ。**
つまり以下の量を求めよ。
  - 系の運動エネルギーと位置エネルギー
  - 系のラグランジアン
  - ラグランジの運動方程式
  - 運動方程式から導かれる行列を用いた式と固有値方程式
  - 2つの固有値
  - 各固有値に対応した固有ベクトル
- **それぞれがどのような振動運動か図示せよ。**

演習の解答

- **系の運動エネルギー**

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{x}_1)^2 + \frac{1}{2}m(\dot{x}_2)^2$$



- **系の位置エネルギー**
  - 質点1，2の振れ角をθ $_1$, θ $_2$とし、θ $_1$= θ $_2$=0をポテンシャルの基準にとる
    - 質点1

$$\sin\theta_1 \approx \theta_1 = \frac{x_1}{l}$$

$$V_1 = mgl(1-\cos\theta_1) \approx \frac{1}{2}mgl\,\theta_1^2 = \frac{1}{2}\frac{mg}{l}x_1^2$$

    - 質点2

$$\sin\theta_2 \approx \theta_2 = \frac{x_2 - x_1}{l}$$

$$V_2 = V_1 + mgl(1-\cos\theta_2) \approx V_1 + \frac{1}{2}mgl\,\theta_2^2 = \frac{1}{2}\frac{mg}{l}x_1^2 + \frac{1}{2}\frac{mg}{l}(x_2 - x_1)^2$$

    - 全体

$$V = V_1 + V_2 = \frac{1}{2}\frac{mg}{l}\left[2x_1^2 + (x_2 - x_1)^2\right]$$

- **系のラグランジアン** $L = T - V$

演習の解答―固有値と固有ベクトル―

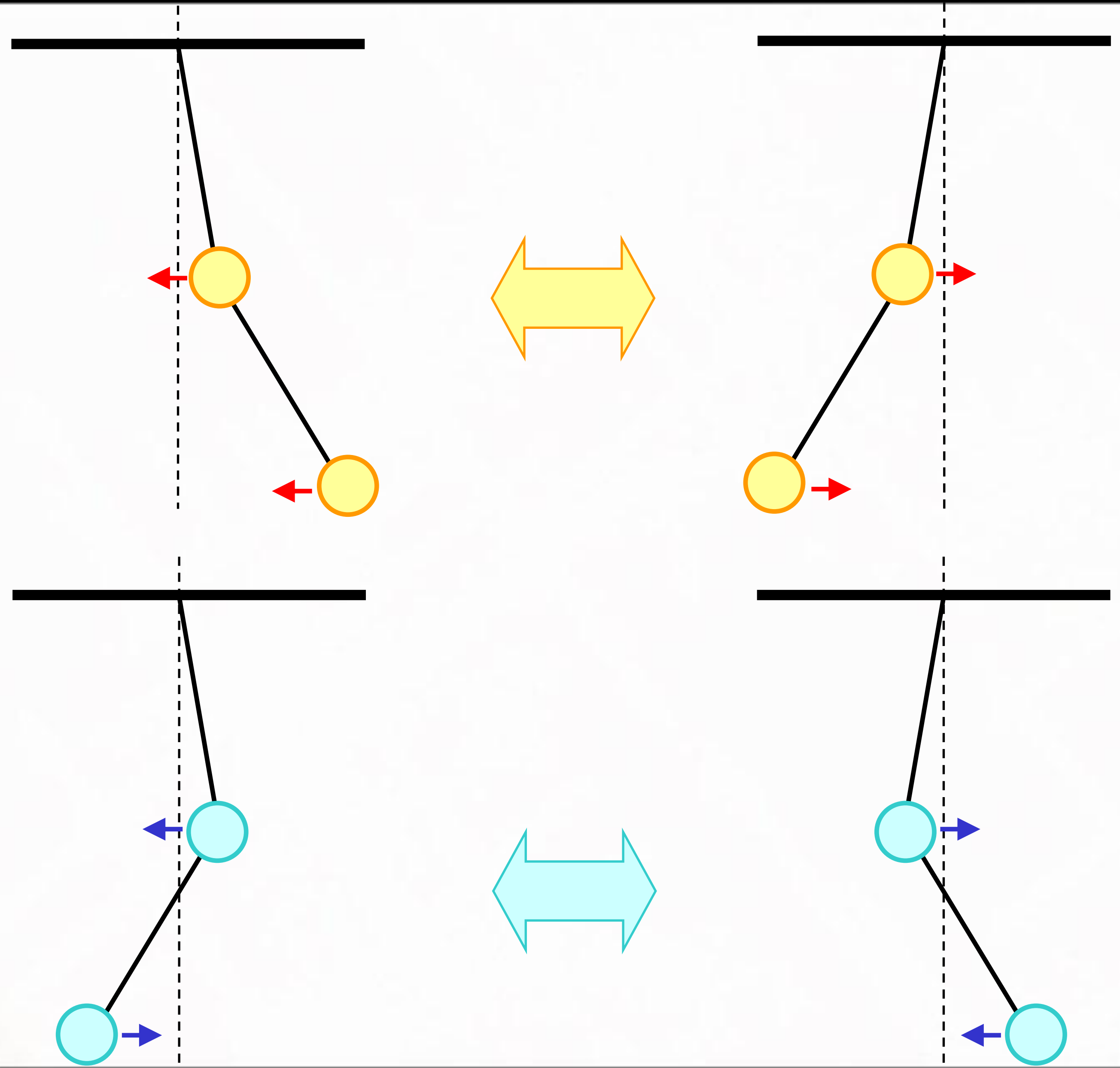
- 固有値 $\lambda = 2+\sqrt{2}$
  - 固有ベクトル $x_2 = -\left(\sqrt{2}-1\right)x_1$
  - 規格化された固有ベクトル $x_1 = \pm\sqrt{\dfrac{1}{2(2-\sqrt{2})}} = \pm 0.92388\cdots$

$$x_2 = -\left(\sqrt{2}-1\right)x_1 = \mp 0.38268\cdots$$

- 固有値 $\lambda = 2-\sqrt{2}$
  - 固有ベクトル $x_2 = \left(\sqrt{2}+1\right)x_1$
  - 規格化された固有ベクトル $x_1 = \pm\sqrt{\dfrac{1}{2(2+\sqrt{2})}} = \pm 0.38268\cdots$

$$x_2 = \left(\sqrt{2}-1\right)x_1 = \pm 0.92388\cdots$$

演習の解答（概観）



行列の固有値問題

- **固有値問題**

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

→ 固有値λと固有ベクトル***x***を求める

- **固有値方程式**

$$\begin{vmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22}-\lambda & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

→ λに関する***n***次方程式の解（一般に解くのが困難）

簡単化

- **物理学でよく出てくる固有値方程式（2重振り子等）**

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_3 & \alpha_4 & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

→ 対角要素とそれに隣り合う要素のみが非0で対称

3重対角行列の固有値問題の数値解法

- 3重対角実対称行列の解法
  - スツルムの定理 （定理の説明は省略）
- 推奨される態度
  - 3重実対称行列のような特別な（疎な）行列に対してなら、
    固有値を求めるプログラムがすでにあるはずである
    - （だから、スツルムの定理を知らなくても解けるはず）
- 多くの有用な計算プログラムが掲載された本
  - 「Numerical Recipes in Fortran 77, Second Edition」
    W.H.Press, S.A.Teukolsky, W.T.Vetterling, and B.P. Flannery
  - 3重対角実対称行列の固有値を求めるプログラムが掲載
- 既存のプログラム（ライブラリ）を用いる際の注意
  - プログラムの動作・制限を正しく理解する
    - 自分の必要としているものか？
  - 入力・出力を正しく理解する
    - 正しく使用する

プログラム(tqli)の説明

(/home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/tqli.f)

```
      subroutine tqli(d,e,n,z)
      implicit none
c*************************************************
c 機能:
c     n 次 3 重対角実対称行列の固有値・固有ベクトル
c     を求める
c 入力:
c     d(1)-d(n)  :  対角行列要素
c     e(2)-e(n)  :  対角行列要素に隣り合う要素
c                   (e(1) は任意)
c     n          :  行列の次元
c     z(n,n)     :  単位行列要素
c 出力:
c     d(1)-d(n)  :  n 個の固有値
c     z(n,n)     :  規格化された固有ベクトル
c                :  i 列目が固有値 d(i) に対応
c 注意:
c     1. 関数: pythag(a,b) が必要
c     2. e の内容は保存されない
c*************************************************
```

プログラムの機能

上書きされる

上書きされる

Numerical Recipes に載っている

プログラム(pythag.f)(説明省略)
(/home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/pythag.f)

```
      real function pythag(a,b)
      implicit none
c input/output:
      real a,b
c local:
      real absa,absb
c begin:
      absa=abs(a)
      absb=abs(b)
      if(absa.gt.absb)then
        pythag=absa*sqrt(1.+(absb/absa)**2)
      else
        if(absb.eq.0.)then
          pythag=0.
        else
          pythag=absb*sqrt(1.+(absa/absb)**2)
        endif
      endif
      return
      end
```

道具として使えばよい
↓
コピーしてリンクすればよい

演習

- n次3重実対称行列の固有値・固有ベクトルを求めるためのサブルーチンと関数を
  /home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/tqli.f
  /home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/pythag.f
  に置く。
- このサブルーチンを用いて、３重振り子の固有振動を求めよ。
  ３重振り子の固有値方程式は、

$$\begin{pmatrix} +5 & -2 & 0 \\ -2 & +3 & -1 \\ 0 & -1 & +1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \qquad \lambda \equiv \frac{\omega^2}{\omega_0^2} \quad \omega_0^2 \equiv \frac{g}{l}$$

  で与えられる。
  この関係式を満たすλ（固有値）とx（固有ベクトル）を求めよ。
- 各々どのような運動か、簡単に図示せよ。

プログラム例

```
      program furiko
      implicit none
c
      integer   N
      parameter(N=3)
c local variable
      real        d(N)     ! 対角要素 & 固有値
      real        e(N)     ! 非対角要素
      real        z(N,N)   ! 単位行列 & 固有ベクトル
c for loop
      integer   i,j
```

行列の次元
（今の場合3）

プログラム例(続き)

```
c begin
      d(1)= 5.0
      d(2)= 3.0
      d(3)= 1.0
      e(2)=-2.0
      e(3)=-1.0
      do i=1,N
         do j=1,N
            if (i.eq.j) then
               z(i,j) = 1.0
            else
               z(i,j) = 0.0
            endif
         end do
      end do
```

対角要素を代入

非対角要素を代入

単位行列を生成

対角要素なら

非対角要素なら

行に関するループ

列に関するループ

プログラム例（続き）

```
call tqli(d,e,N,z)
do i=1,N
    write(*,'(i2,a,f7.4,a,f8.5,a,f8.5,a,f8.5,a)')
&        i,'-th eigen value:',d(i),
&        ',  eigen vector:(',z(1,i),',',z(2,i),',',z(3,i),')'
end do
```

サブルーチンを呼んで、
固有値と固有ベクトルを求める

固有値
に関する
ループ

書式（フォーマット）を使って、
表示を分かり易くしている

実際の出力と比較してみること

実行結果の例

ah.s.kyushu-u.ac.jp:22 - Tera Term VT

ファイル(F) 編集(E) 設定(S) コントロール(O) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)

```
% frt -o furiko furiko.f tqli.f pythag.f
furiko.f:
tqli.f:
pythag.f:
Linking:
% furiko
 1-th eigen value: 6.2899, eigen vector:(-0.83599, 0.53919,-0.10193)
 2-th eigen value: 2.2943, eigen vector:( 0.50490, 0.68305,-0.52775)
 3-th eigen value: 0.4158, eigen vector:(-0.21494,-0.49266,-0.84326)
%
```