

物質情報学 2 (物理数学) 担当 谷村 平成 24 年度前期

ノート 5 : 斉次連立線形微分方程式と行列指数関数と相流

Set of homogeneous linear differential equations with constant coefficients,
exponential of matrix, and phase diagram

1 連立微分方程式

A は n 次の正方行列 (正方行列でない以下の話は意味をなさないことに注意!), $x(t)$ は未知関数を成分とする n 次元ベクトルとする:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad \mathbf{x}(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{pmatrix} \quad (1)$$

このとき, 微分方程式

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = A\mathbf{x} \quad (2)$$

を考える. これは

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n, \\ \dot{x}_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n, \cdots \\ \dot{x}_n &= a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n \end{aligned}$$

という n 個の連立方程式に他ならない.

演習 5-1. 連立微分方程式に慣れるために, とりあえず解かずに相流を描いてみる (微分方程式をベクトル場と見なし, 微分方程式の解の族を曲線族として描くことを「相流を描く」と言う).

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = A\mathbf{x}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

(i) $A = \begin{pmatrix} 10 & -3 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$

(ii) $A = \begin{pmatrix} 5 & -10 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$

(iii) $A = \begin{pmatrix} 2 & 9 \\ -1 & 8 \end{pmatrix}$

2 行列の指数関数

A は n 行 n 列の行列としたが, とくに $n = 1$ の場合は, A は 1 つの定数であり, 方程式 (2) は

$$\frac{dx}{dt} = Ax \quad (3)$$

という方程式であり，これを丁寧に解くと，

$$\begin{aligned} \frac{1}{x} \frac{dx}{dt} &= A \\ \int_0^t \frac{1}{x} \frac{dx}{dt} dt &= \int_{x(0)}^{x(t)} \frac{1}{x} dx = \int_0^t A dt \\ \log x(t) - \log x(0) &= At \\ \log \frac{x(t)}{x(0)} &= At \\ \frac{x(t)}{x(0)} &= e^{At} \end{aligned}$$

という式変形を経て，解

$$x(t) = e^{At} x(0) \tag{4}$$

を得る． A が行列である場合についても指数関数 e^{At} を定義したい．

定義：行列の指数関数： n 次正方行列 A （成分は実数または複素数）に対して

$$e^A = \exp(A) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k = I + A + \frac{1}{2} A^2 + \frac{1}{3!} A^3 + \dots \tag{5}$$

で定義する． I は n 次の単位行列であり， $A^0 = I$ と約束する． $A^1 = A$ ， $A^2 = A \cdot A$ ， $A^3 = A^2 \cdot A$ などは行列の積である．

定理：任意の正方行列 A （実数行列だろうと複素行列だろうと）に対して無限級数 (5) は収束する．上の定義から，

$$e^{tA} = \exp(tA) := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} A^k = I + tA + \frac{1}{2} t^2 A^2 + \frac{1}{3!} t^3 A^3 + \dots \tag{6}$$

が言える．

定理：任意の正方行列 A, B と任意の実数 t に関して次の関係式が成り立つ．ただし O は成分がすべて 0 の n 次正方行列．

- (1) $\frac{d}{dt} \exp(tA) = A \cdot \exp(tA) = \exp(tA) \cdot A$
- (2) $\exp O = I$
- (3) $AB = BA$ ならば， $\exp(A + B) = \exp(A) \cdot \exp(B) = \exp(B) \cdot \exp(A)$
- (4) $\exp(-A) = (\exp A)^{-1}$
- (5) U の逆行列が存在するならば， $\exp(U^{-1}AU) = U^{-1} \exp(A) U$
- (6) A が対角行列 (diagonal matrix) ならば $\exp A$ も対角行列であり，

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_n \end{pmatrix} \implies e^A = \begin{pmatrix} e^{a_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{a_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{a_n} \end{pmatrix}$$

演習 5-2. 上の定理を証明せよ．

公式 (1), (2) より,

$$\boldsymbol{x}(t) = \exp(tA)\boldsymbol{x}(0) \tag{7}$$

とおいたものは, 微分方程式

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \frac{d}{dt} \exp(tA)\boldsymbol{x}(0) = A \cdot \exp(tA)\boldsymbol{x}(0) = A \cdot \boldsymbol{x}(t) \tag{8}$$

と初期条件 $\boldsymbol{x}(t)|_{t=0} = \boldsymbol{x}(0)$ を満たすことがわかる.

演習 5-3. α, β, γ を任意の複素数として, 行列

$$C = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}, \quad E = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ 0 & \alpha \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma \\ 0 & \alpha & \beta \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}$$

の $\exp C, \exp D, \exp E, \exp F$ を, 行列の指数関数の定義通りに計算して求めよ.

演習 5-4. 上の問題の行列 C について微分方程式 $\dot{\boldsymbol{x}} = C\boldsymbol{x}$ が定めるベクトル場と相流を描け. 行列 D, E についても同様にベクトル場と相流を描け.

演習 5-5. 上の問題の行列 C について微分方程式 $\dot{\boldsymbol{x}} = C\boldsymbol{x}$ を解け. 行列 D, E, F についても同様に微分方程式を解け (行列の対角化をしなくても, うまく変数分離できて解くことができる).

3 計算方法

一般の行列 A に対して指数関数 e^{tA} を定義通り無限級数を使って計算するのは楽ではない. いくつかの方針がある:

行列の指数関数の計算方法 (これらのうちのどれかを用いればよい)

- (i) 定義式 (5) の無限級数の各項が満たす関係式や漸化式などを見つけて, 各項をうまく求めてまとめる.
- (ii) 行列の指数関数なんか使わなくても, 微分方程式 (2) の初期値問題の解が求められることがある. その場合は解を $\boldsymbol{x}(t) = e^{tA}\boldsymbol{x}(0)$ という形に書き直せば, e^{tA} が求められる (普通は微分方程式を解くために行列指数関数を求めるのだが, 先に微分方程式が解けてしまってその答えを利用して行列指数関数を求めるというアプローチ. この場合は, 微分方程式を解くという目的のためには行列指数関数は要らなかったことになる).
- (iii) 行列 A の対角化あるいは標準形 Λ を求める (その手順は以下に詳しく述べる). $U^{-1}AU = \Lambda$ にあてはまる行列 U と Λ を得れば, あとは定理 (5) より

$$\exp(tA) = \exp(tU\Lambda U^{-1}) = U \exp(t\Lambda) U^{-1} \tag{9}$$

を計算すればよい. この (iii) の方法について以下で詳しく説明する.

行列の対角化・標準化を利用して行列指数関数を計算する手順

- (i) n 次の正方行列 A に対して

$$A\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}, \quad \boldsymbol{v} \neq \mathbf{0} \tag{10}$$

が成り立つとき, λ を A の固有値 (eigenvalue) といい, \boldsymbol{v} を固有値 λ に属する固有ベクトル (eigenvector) という.

(ii) 方程式 (10) は

$$(\lambda I - A)v = 0, \quad v \neq 0 \quad (11)$$

とも書ける．この式を満たす v が存在するための必要十分条件は $(\lambda I - A)$ が逆行列を持たないことである．この条件は

$$\det(\lambda I - A) = 0 \quad (12)$$

と同等である．この方程式を行列 A の特性方程式 (characteristic equation) という．これを解いて根 $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$ を求め、各 λ_i に対して

$$(\lambda_i I - A)v_i = 0 \quad (13)$$

を満たすベクトル v_i を求める．

(iii) 一次独立な n 個の固有ベクトルの組 $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ があれば、 A は対角化可能 (diagonalizable) である．この場合、縦ベクトル v_i を並べて

$$U := (v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n), \quad \Lambda := \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix} \quad (14)$$

とおけば、 U の逆行列 U^{-1} が存在し、方程式 (10) の $Av_i = \lambda_i v_i = v_i \lambda_i$ は

$$\begin{aligned} AU &= U\Lambda \\ A &= U\Lambda U^{-1} \end{aligned} \quad (15)$$

と書き換えられる．あとは

$$\exp(tA) = \exp(tU\Lambda U^{-1}) = U \exp(t\Lambda) U^{-1} \quad (16)$$

を計算すればよい．

(iv) しかし、一次独立な n 個の固有ベクトルの組 $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ がないような行列 A もある．特性方程式が重根を持っているときにこういうことが起こり得る． λ_i が特性方程式の根になっていることは、それを固有値とする固有ベクトルが少なくとも 1 つ存在するための必要十分条件であるが、重根の場合、一次独立な固有ベクトルが縮重度と同じ個数だけ存在することは保証できないからである．

このような場合、 A は対角化不可能であるが、ジョルダン標準形に変換することはできる．一般の n 次行列を扱うとやたらと紙面を使うので、2 次行列の標準化を説明する．固有値が実数で重根であり、一次独立な固有ベクトルが 1 つしかない場合でも

$$Av_1 = \lambda v_1, \quad Av_2 = \lambda v_2 + v_1$$

を満たす一次独立な v_1, v_2 を見つけることはできる．これらをまとめて

$$A(v_1, v_2) = (Av_1, Av_2) = (\lambda v_1, \lambda v_2 + v_1) = (v_1, v_2) \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$$

と書いてよい．ここで，

$$U = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2), \quad S = \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$$

とおくと，上の式は

$$AU = US$$

と書ける (S は標準形 standard form と呼ばれる) . U^{-1} が存在することが確認できて， $A = USU^{-1}$ となり，

$$\begin{aligned} e^{tA} &= e^{tUSU^{-1}} \\ &= U \cdot e^{tS} \cdot U^{-1} \\ &= U \cdot \begin{pmatrix} e^{\lambda t} & te^{\lambda t} \\ 0 & e^{\lambda t} \end{pmatrix} \cdot U^{-1} = U \cdot e^{\lambda t} \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot U^{-1} \end{aligned}$$

の行列積を計算すれば e^{tA} が求められる．

演習 5-6. 演習 5-1 に示された微分方程式を行列の対角化 (あるいは標準化) を用いて解け．

4 相流

この講義では，とくに相流の描き方をマスターして，微分方程式の解の振る舞いの全体像を把握できるようになってほしい．

定義：相流 (phase flow)，相図 (phase diagram) 微分方程式 (非線形でもよい)

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{V}(\mathbf{x}(t)) \quad (17)$$

において，初期点 $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$ から発する微分方程式の解を $\mathbf{x}(t)$ としたとき，各時刻 t に対して写像

$$\phi_t : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{x}_0 \mapsto \phi_t(\mathbf{x}_0) := \mathbf{x}(t) \quad (18)$$

を定めることができるが， ϕ_t をベクトル場 $\mathbf{V}(\mathbf{x})$ の相流という．また， \mathbb{R}^n において，さまざまな初期条件に対する相流の軌跡を描いた図を相図という．

定義：不動点 (stationary point, fixed point) 任意の $t \in \mathbb{R}$ に対して $\phi_t(\mathbf{x}_0) = \mathbf{x}_0$ となる点 \mathbf{x}_0 を相流の不動点という．

定理： \mathbf{x}_0 が相流の不動点 $\iff \mathbf{V}(\mathbf{x}_0) = 0$

不動点は，そこでいったん相流が止まる点であり，相流の流れ方の変わり目でもあるので，不動点の近傍の相流を観察することによって，相流全体の特徴を捉えることができる．

2次元の相流の不動点の分類：湧き出し (湧点, 源, source)，吸い込み (沈点, sink)，鞍点 (峠点, saddle point)，渦 (vortex)，さらに，湧き出し渦，吸い込み渦，左回り渦，右回り渦などに分類される．

2次元線形方程式の相流の特徴の捉え方：実数の2次正方行列 A について次のいずれかが成り立つ．

(i) 固有値が実数で重根がない場合，または重根であっても一次独立な固有ベクトルがある場合，

$$Av_1 = \lambda_1 v_1, \quad Av_2 = \lambda_2 v_2$$

任意のベクトル x は

$$x = c_1 v_1 + c_2 v_2$$

と表されて，この点を初期点とする微分方程式の解は

$$x(t) = e^{At} x = c_1 e^{\lambda_1 t} v_1 + c_2 e^{\lambda_2 t} v_2$$

つまり， v_k の方向に $e^{\lambda_k t}$ の倍率で拡大 ($\lambda_k < 0$ なら縮小) するような相流になる．

(ii) 固有値が複素根の場合，一方の固有値・固有ベクトルを

$$\lambda_1 = \alpha + i\beta, \quad v_1 = p - iq$$

とおくと，もう一方の固有値・固有ベクトルは

$$\lambda_2 = \alpha - i\beta, \quad v_2 = p + iq$$

で与えられる． $Av_1 = \lambda_1 v_1$ という式は $A(p - iq) = (\alpha + i\beta)(p - iq)$ と書かれ，これを実部と虚部に分けると，

$$Ap = \alpha p + \beta q, \quad Aq = -\beta p + \alpha q$$

となる．これらをまとめて，

$$A(p, q) = (Ap, Aq) = (\alpha p + \beta q, -\beta p + \alpha q) = (p, q) \begin{pmatrix} \alpha & -\beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

と書いてよい．ここで，

$$U = (p, q), \quad S = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

とおくと，上の式は

$$AU = US$$

と書ける． U^{-1} が存在することが確認できて， $A = USU^{-1}$ となり，

$$\begin{aligned} e^{tA} &= e^{tUSU^{-1}} \\ &= U \cdot e^{tS} \cdot U^{-1} \\ &= U \cdot e^{\alpha t} \begin{pmatrix} \cos \beta t & -\sin \beta t \\ \sin \beta t & \cos \beta t \end{pmatrix} \cdot U^{-1} \end{aligned}$$

の行列積から指数関数 e^{tA} が得られる．この式の右側から $(p, q) = U$ を掛け算すると

$$\begin{aligned} e^{tA}(p, q) &= U \cdot e^{\alpha t} \begin{pmatrix} \cos \beta t & -\sin \beta t \\ \sin \beta t & \cos \beta t \end{pmatrix} \cdot U^{-1} \cdot U \\ &= (p, q) \cdot e^{\alpha t} \begin{pmatrix} \cos \beta t & -\sin \beta t \\ \sin \beta t & \cos \beta t \end{pmatrix} \\ &= \left(e^{\alpha t}(p \cos \beta t + q \sin \beta t), e^{\alpha t}(-p \sin \beta t + q \cos \beta t) \right) \end{aligned}$$

を得る．つまり， e^{tA} は，原点を中心に倍率 $e^{\alpha t}$ で平面を拡大しながら， p から q に向かう方向に角度 βt の分だけ回転するような運動を表す．任意のベクトル x は

$$x = c_1 p + c_2 q$$

と表されて，この点を初期点とする微分方程式の解は

$$\begin{aligned} x(t) = e^{At} x &= c_1 e^{At} p + c_2 e^{At} q \\ &= c_1 e^{\alpha t} (p \cos \beta t + q \sin \beta t) + c_2 e^{\alpha t} (-p \sin \beta t + q \cos \beta t) \end{aligned}$$

となる．

(iii) 固有値が実数で重根であり，一次独立な固有ベクトルが 1 つしかない場合，

$$A v_1 = \lambda v_1, \quad A v_2 = \lambda v_2 + v_1$$

を満たす一次独立な v_1, v_2 を見つけることはできる．これらをまとめて

$$A(v_1, v_2) = (A v_1, A v_2) = (\lambda v_1, \lambda v_2 + v_1) = (v_1, v_2) \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$$

と書いてよい．ここで，

$$U = (v_1, v_2), \quad S = \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$$

とおくと，上の式は

$$AU = US$$

と書ける． U^{-1} が存在することが確認できて， $A = USU^{-1}$ となり，

$$\begin{aligned} e^{tA} &= e^{tUSU^{-1}} \\ &= U \cdot e^{tS} \cdot U^{-1} \\ &= U \cdot e^{\lambda t} \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot U^{-1} \end{aligned}$$

の行列積を計算すれば e^{tA} が求められる．この式の右側から $(v_1, v_2) = U$ を掛け算すると

$$\begin{aligned} e^{tA}(v_1, v_2) &= U \cdot e^{\lambda t} \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot U^{-1} \cdot U \\ &= (v_1, v_2) \cdot e^{\lambda t} \begin{pmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= (e^{\lambda t} v_1, e^{\lambda t} (v_2 + t v_1)) \end{aligned}$$

となる．任意のベクトル x は

$$x = c_1 v_1 + c_2 v_2$$

と表されて，この点を初期点とする微分方程式の解は

$$x(t) = e^{At} x = c_1 e^{\lambda t} v_1 + c_2 e^{\lambda t} (v_2 + t v_1)$$

となる．つまり， e^{tA} は，基本的には $e^{\lambda t}$ の倍率での拡大なのだが， v_2 の正の方向では v_1 の方向にそれる流れを重ねたような相流になり， v_2 の負の方向では $-v_1$ の方向にそれる流れを重ねたような相流になる．

【別の計算方法】 $Av_2 = \lambda v_2 + v_1$ を得たら，

$$\begin{aligned} A^0 v_2 &= v_2 \\ A^1 v_2 &= \lambda v_2 + v_1 \\ A^2 v_2 &= \lambda(\lambda v_2 + v_1) + \lambda v_1 = \lambda^2 v_2 + 2\lambda v_1 \\ A^n v_2 &= \lambda^n v_2 + n\lambda^{n-1} v_1 \end{aligned}$$

となることが数学的帰納法で示される．よって，

$$\begin{aligned} e^{tA} v_2 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} A^n v_2 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \lambda^n v_2 + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} n\lambda^{n-1} v_1 \\ &= e^{\lambda t} v_2 + t \sum_{n=1}^{\infty} \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} \lambda^{n-1} v_1 \\ &= e^{\lambda t} v_2 + t e^{\lambda t} v_1 \\ &= e^{\lambda t} (v_2 + t v_1) \end{aligned}$$

となる．

演習 5-7. 以下の行列 A に対して $\exp(tA)$ を求めよ．ただし t は任意の実数．また， $x(t) = e^{tA} x(0)$ が定める相流の概形を描け．

$$(1) \quad A = \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 3 & 5 \end{pmatrix}$$

$$(2) \quad A = \begin{pmatrix} 0 & -2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(3) \quad A = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

$$(4) \quad A = \begin{pmatrix} 7 & 8 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$(5) \quad A = \begin{pmatrix} 7 & -5 \\ 10 & -7 \end{pmatrix}$$

$$(6) \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -5 & 4 \end{pmatrix}$$

$$(7) \quad A = \begin{pmatrix} -1 & 8 \\ -2 & 7 \end{pmatrix}$$

$$(8) \quad A = \begin{pmatrix} 7 & -5 & 4 \\ -5 & 7 & 4 \\ 4 & 4 & -2 \end{pmatrix}$$