1. (対角化) 次の各行列 A を i) 対角化し，さらに ii) A^n (n は自然数)，iii) e^A，iv) $\mathrm{Tr}(e^A)$ を求めよ．

(1) $\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$　(2) $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$　(3) $\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$

2. (正規方程式) 2 種類の観測量 x，y があり，y が x の関数としてふるまう場合を考える．最も簡単な関係として，$y = ax + b$ の線形関係を考える．一般に誤差を含む n 組みの観測データ $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ から，a と b を推定する問題を考える．

(1) $Q = \sum_{i=1}^{n} \{y_i - (ax_i + b)\}^2$ を残差平方和という．Q を最小化する条件から a と b を求める方程式を導け．このようにして推定される直線 $y = ax + b$ を回帰直線という．

(2) この問題を観測量 x がベクトル $\boldsymbol{x}$ の場合に一般化する．ここで $\boldsymbol{x}$ は p 個の成分からなる．このとき y と $\boldsymbol{x}$ に線形関係 $y = a_0 + \sum_{j=1}^{p} a_j x_j$ があるものとする．n 組みの誤差を含む観測データ $(\boldsymbol{x}^{(1)}, y_1), \ldots, (\boldsymbol{x}^{(n)}, y_n)$ から a_i を求めることを考える．次のように列ベクトルと行列を導入する．

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, X = \begin{pmatrix} 1 & x_1^{(1)} & \ldots & x_p^{(1)} \\ 1 & x_1^{(2)} & \ldots & x_p^{(2)} \\ \vdots & & & \\ 1 & x_1^{(n)} & \ldots & x_p^{(n)} \end{pmatrix}, \boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix}$$

このとき残差平方和 $\sum_{i=1}^{n} \left\{ y_i - (a_0 + \sum_{j=1}^{p} a_j x_j) \right\}^2$ が最小になるには $\boldsymbol{a}$ が次の方程式を満たせば良いことを証明せよ．

$${}^t X X \boldsymbol{a} = {}^t X \boldsymbol{y}$$

この方程式を正規方程式と呼ぶ．

3. (永年方程式 1) 直線 3 原子分子 (例えば CO_2) のモデルとして，図のように 3 質点 m，M，m が質量の無視できるバネ定数 k のバネで連結されている系を考える．簡単のため質点の運動は質点を結ぶ直線上に限られるものとする．

(1) 3質点の平衡位置からの変位をそれぞれ x_1, x_2, x_3 とする時，各質点の運動方程式は以下のように書けることを示せ．

$$\left.\begin{array}{rcl}\ddot{x_1} &=& \lambda(x_2 - x_1)\\ \ddot{x_2} &=& \mu(x_3 - 2x_2 + x_1)\\ \ddot{x_3} &=& \lambda(x_2 - x_3)\end{array}\right\} \text{ただし } \lambda = \frac{k}{m}, \mu = \frac{k}{M}$$

ここで $\ddot{x_i}$ は時間に関する2階微分をあらわす．

(2) 解を $x_1 = a_1 e^{i\omega t}$, $x_2 = a_2 e^{i\omega t}$, $x_3 = a_3 e^{i\omega t}$ とおいて代入する．これを整理すると以下の形にすることができる．

$$(\omega^2 I - A)\boldsymbol{a} = 0$$

ただし I は単位行列で $\boldsymbol{a} = ^t(a_1, a_2, a_3)$ である．行列 A を書き下せ．

(3) 自明でない解 $\boldsymbol{a} \neq 0$ が存在するための条件は $\det(\omega^2 I - A) = 0$ である．この永年方程式を解いて系の固有振動数 ω を求めよ (一般にエルミート行列の特性方程式を永年方程式という).

(4) それぞれの固有振動数 ω に対応する固有ベクトル $\boldsymbol{a}$ を求め，それぞれの振動のパターンを論ぜよ．

4. (3重対角行列の行列式) 次のような対角成分とそれに隣接する成分以外の成分が 0 である行列を3重対角行列という．

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \dots & 0 \\ c_1 & a_2 & b_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & c_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & \dots & 0 & c_{n-1} & a_n \end{pmatrix}$$

3重対角行列はいろいろな場面で登場する．以下ではその幾つかの性質を調べる．

(1)　基本的な $n \times n$ 3 重対角行列

$$T = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

を考える．

$$\boldsymbol{u}_j =^t (\sin\frac{j\pi}{n+1}, \sin\frac{2j\pi}{n+1}, \ldots, \sin\frac{nj\pi}{n+1})\ (j = 1, \ldots, n)$$

は T の固有ベクトルであることを示せ．またその固有値も求めよ．

(2)　$n \times n$ 3 重対角行列

$$A = \begin{pmatrix} a & b & & & \\ c & a & b & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & c & a & b \\ & & & c & a \end{pmatrix}, bc \neq 0$$

は適当な対角行列 P を用いると，

$$P^{-1}AP = aI + rT, r^2 = bc$$

と変型できることを示せ．ただし I は $n \times n$ 単位行列である．

(3)　A の固有値と固有ベクトルを求めよ．

5. (永年方程式 2: n 調和振動子) 固体中の弾性振動のモデルとして，n 個の等質量 (m) の質点が直線上に並んでおり，隣あう質点が質量の無視できるバネ定数 k のバネで連結されている系の振動特性を考える．簡単のため運動は質点を結ぶ直線上に限られているものとする．

(1)　各質点の平衡位置からの変位をそれぞれ $x_1, \ldots, x_n$ とする．このとき各質点の運動方程式を書け．

(2)　解を $x_l = a_l e^{i\omega t}$ $(l = 1, \ldots, n)$ の形に仮定し，運動方程式を $(\omega^2 I - A)\boldsymbol{a} = 0$ の形で表せ．ここで A は $n \times n$ 行列，I は $n \times n$ 単位行列，$\boldsymbol{a} =^t (a_1, \ldots, a_n)$ をあらわす．

(3)　永年方程式を解き，固有周期と固有ベクトルを求めよ．

6. (差分法による熱伝導方程式の解法) 1 次元の熱伝導方程式

$$\frac{\partial T(t,x)}{\partial t} = \frac{\partial^2 T(t,x)}{\partial x^2}$$

を離散化して (コンピュータで) 解く手法について考察する．ここで時間と空間の単位系を適当に変換し，熱拡散係数 κ は 1 とした．

(1)　この方程式を 2 次元 (t,x) 空間上の間隔一定の 2 次元格子で離散化する．格子間隔をそれぞれ $t_{i+1} - t_i = h$，$x_{j+1} - x_j = k$ と置くことにする．h が時間ステップ幅，k が空間ステップ幅である．$T_{i,j}$ を $T(t_i, x_j)$ の近似値とすると，上記の方程式は

$$\frac{T_{i+1,j} - T_{i,j}}{h} = \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{k^2} \qquad (1)$$

と近似できることを示せ (注：もっとも近似法はこの一つではないことに注意しておく).

(2)　時間ステップ i での $T_{i,j}$ を j について並べたベクトル $\boldsymbol{u}^{(i)} = {}^t(T_{i,1}, T_{i,2}, \ldots, T_{i,n})$ を導入する．すると (1) の近似式は $n \times n$ 行列 A を導入して $\boldsymbol{u}^{(i+1)} = A\boldsymbol{u}^{(i)}$ と書くことができる．A を書き下せ．ただし境界条件 $T_{i,0} = T_{i,n+1} = 0$ がなりたつものとする．

(3)　式 (1) の解は $\boldsymbol{u}^{(k)} = A^k \boldsymbol{u}^{(0)}$ で与えられる．しかしこれがもとの熱伝導方程式の近似解になっているためには，ベクトル $\boldsymbol{u}^{(k)}$ のどの成分も発散するようなことがあってはならない．そのためには

$$\frac{h}{k^2} \leq \frac{1}{2}$$

であることが条件となる．これを証明せよ (3 重対角行列の固有値を利用する).