計算数学1　第2回課題解説

2008.7.14
作成者　田村博志

1

ノルムを変えて条件数 $Cond_p(A) := ||A||_p \cdot ||A^{-1}||_p (p = 1, 2)$ を求める.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1+\alpha \end{pmatrix}$$

ここに

$$\|A\|_p := \sup\left\{\frac{\|A\boldsymbol{x}\|_p}{\|\boldsymbol{x}\|_p}; \|\boldsymbol{x}\|_p > 0\right\}, \ \|\boldsymbol{x}\|_p := \left(\sum_{j=1}^{5} |x_j|^p\right)^{\frac{1}{p}}.$$

とくに

$$\|A\|_1 = \max\left\{\sum_{i=1}^{5} |a_{ij}|; 1 \le j \le n\right\}, \tag{1}$$

$$\|A\|_2 = \left(\max\{A^T A \text{ の固有値 }\}\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{2}$$

$$= A \text{ の絶対値最大固有値 } (A \text{ が対称のとき}).$$

• $\alpha = 1$ のとき
$||A||_1 = 4,\ ||A^{-1}||_1 = 15$ より $Cond_1(A) = 60$.
$||A||_2 = 3.6825,\ ||A^{-1}||_2 = 12.3435$ より $Cond_2(A) = 45.4552$.
• $\alpha = 0.01$ のとき
$||A||_1 = 4,\ ||A^{-1}||_1 = 510$ より $Cond_1(A) = 2040$.
$||A||_2 = 3.6184,\ ||A^{-1}||_2 = 506.0262$ より $Cond_2(A) = 1831$.

(求め方)
$||A||_1$ を (1) から求める. $||A^{-1}||_1$ は逆行列 A^{-1} を求めて (1) を利用する. A は対称行列なので, ある初期ベクトル $\boldsymbol{x}_0$ に A を繰り返し掛ければ A の最大固有値に対する固有ベクトルの方向に収束することを利用し Rayleigh 商から $||A||_2$ を求める (べき乗法). $||A^{-1}||_2$ は A^{-1} に対してべき乗法を行えばよい (逆反復法).
(考察)
$||A||_1 > ||A||_2, ||A^{-1}||_1 > ||A^{-1}||_2$ となった. 一般には任意の $n \times n$ 行列 M について $||M||_1/\sqrt{n} \le ||M||_2 \le \sqrt{n}||M||_1$ が成立する. $\alpha = 0.01$ のとき条件数が大きくなった. 特に $||A^{-1}||$ が大きく (最小固有値が小さく) なることに注意する.

$\alpha = 1$のときを例にべき乗法, 逆反復法でAの全固有値を求める．Aの最大固有値を得るために$\boldsymbol{x}_0 = (1\ 1\ 1\ 1\ 1)^T$に何回も$A$を掛けてその度にノルムを正規化して掛ける前との差が10^{-5}になるまで繰り返し, そのRayleigh商を求めた．その結果43回で最大固有値3.6825が得られた.

$$\lambda_5 = 3.6825$$

次にAの最小固有値を求める．Aの最小固有値$= (A^{-1}$の最大固有値$)^{-1}$なので$\boldsymbol{x}_0$にA^{-1}を掛けることを繰り返す．その結果6回でA^{-1}の最大固有値$= 12.3435$が求められ, Aの最小固有値$= 1/12.3435 = 0.081$が得られた.

$$\lambda_1 = 0.081$$

$a := (\lambda_1 + \lambda_5)/2$として$\boldsymbol{x}$に$(A - aI)^{-1}$ (I :=Identity=単位行列) を正規化しながら掛け算を繰り返し, 最後に$A\boldsymbol{x}$に対するRayleigh商を求める．これによりaに最も近い固有値が求められる．結果は6回で1.7154に収束した.

$$\lambda_3 = 1.7154$$

$\lambda_1 < \lambda_3 < a < \lambda_5$で$\lambda_3$は$a$に最も近いので$\lambda_3$と$a$の間に固有値はない．$b = (\lambda_1 + \lambda_3)/2$として$A - bI$に逆反復法を行うと, 6回で0.6903に収束した.

$$\lambda_2 = 0.6903$$

$c := (a + \lambda_5)/2$として$A - cI$に逆反復法を行うと, 6回で2.8308に収束した.

$$\lambda_4 = 2.8308$$

固有値が5つ得られたのでこれでAの固有値がすべて求められた.

(考察)

最大固有値を求めるときだけ他と比べて反復回数が多かった．これは$\lambda_4/\lambda_5 = 0.7687$のべき乗がなかなか0に収束しないことが原因として考えられる．一般にシフト点が2つの固有値の中央にあるときは収束しにくい．逆にシフト点が固有値の近くにあるときは少ない回数で収束する.

3

QR 分解を用いて $||B\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}||_2$ を最小にする $\boldsymbol{x}$ とその最小値を求める. ここに

$$B=\begin{pmatrix}1&-1&0\\-1&2&-1\\0&-1&2\\0&0&-1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{c}=\begin{pmatrix}1\\0\\1\\1\end{pmatrix}.$$

$||B\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}||_2$ の最小解は正規方程式 $B^TB\boldsymbol{x}=B^T\boldsymbol{c}$ の解として得られる (正値対称行列についての方程式の解とある 2 次形式の最小解との同値性, 第 1 回課題参照). B は次のように直交行列 Q と上三角行列 R に分解される.

$$B=QR, Q=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{6}}&\frac{1}{2\sqrt{3}}\\-\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{6}}&\frac{1}{2\sqrt{3}}\\0&-\sqrt{\frac{2}{3}}&\frac{1}{2\sqrt{3}}\\0&0&-\frac{\sqrt{3}}{2}\end{pmatrix}, R=\begin{pmatrix}\sqrt{2}&-\frac{3}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\0&\sqrt{\frac{3}{2}}&-\frac{5}{\sqrt{6}}\\0&0&\frac{2}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}.$$

$B^TB\boldsymbol{x}=B^T\boldsymbol{c}$ に $B=QR$ を代入すると $R^TQ^TQR\boldsymbol{x}=R^TQ^T\boldsymbol{c}$ となる. Q の直交性により $R\boldsymbol{x}=Q^T\boldsymbol{c}$ となる. R は正則行列なのでこの方程式は後退代入で解ける.

$$\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix}0&-\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}\end{pmatrix}^T.$$

このとき $||B\boldsymbol{x}-\boldsymbol{c}||_2=1$ となる.

また条件数は正則な行列 $B^TB,\ R$ にのみ定義され

$$Cond_2(B^TB)=88.125,\ Cond_2(R)=9.38.$$

Q は正方行列ではないので条件数は定義されないが $Cond(Q^TQ)=1$ なので形式的に $Cond(Q)=1$ とみなせる. また $9.38^2=88.125$ である. これは次の結果である:

$$\begin{aligned}Cond(B^TB)&=||B^TB||\cdot||(B^TB)^{-1}||\\&=||R^TR||\cdot||(R^TR)^{-1}||\\&=||R||^2\cdot||R^{-1}||^2\\&=Cond(R)^2.\end{aligned}$$

　方程式を異なる手法で解いてその精度と収束の速さを比較する．次の方程式を考える．

$$
\begin{aligned}
&A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b},\\
&A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} -2 \\ 4 \\ -4 \\ 4 \\ -3 \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

今回は Jacobi 法, Gauss-Seidel 法, SOR 法について述べる．準備として $A = L + U + D =$ 下三角行列 $+$ 上三角行列 $+$ 対角行列と分解しておく．

$$
L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.
$$

これより $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ は $(L + U + D)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ となる．$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{o}$ として $||A\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{b}||_2 < 10^{-4}$ となるまで反復を行った．

(Jacobi 法)

方程式を $D\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} - (L + U)\boldsymbol{x}$ と変形して反復を行う．

$$D\boldsymbol{x}_k := \boldsymbol{b} - (L + U)\boldsymbol{x}_{k-1}.$$

結果は 224 回で次の値に収束した:

$$\boldsymbol{x} = (-1 \quad 1 \ -1 \quad 1 \ -1)^T.$$

(Gauss-Seidel 法)

方程式を $(L + D)\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} - U\boldsymbol{x}$ と変形して反復を行う．

$$(L + D)\boldsymbol{x}_k := \boldsymbol{b} - U\boldsymbol{x}_{k-1}.$$

$L + D$ は下三角行列なので前進代入を行えばよい．結果は 49 回で次の値に収束した:

$$\boldsymbol{x} = (-1.0007 \quad 0.9994 \ -1.0005 \quad 0.9997 \ -1.0002)^T.$$

(SOR 法)

Gauss-Seidel 法で作った反復解 $\boldsymbol{y}$ と $\boldsymbol{x}_{k-1}$ を $(1-\omega):\omega$ に内分する点を $\boldsymbol{x}_k$ とする:

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{y} &:= (L + D)^{-1}(\boldsymbol{b} - U\boldsymbol{x}_{k-1}),\\
\boldsymbol{x}_k &:= \omega\boldsymbol{y} + (1-\omega)\boldsymbol{x}_{k-1}.
\end{aligned}
$$

$\omega > 1$ のときを過剰緩和法といい, $\omega = 1$ は Gauss-Seidel 法である. ω を 0.1 刻みで 0 から 2 まで動かしたときに最良の場合を選んだ. それが $\omega = 1.5$ のときで 32 回で次の値に収束した:

$$\boldsymbol{x}_{\omega=1.5} = (-1.0007 \quad 0.9994 \quad -1.0005 \quad 0.9997 \quad -1.0002)^T.$$

以上から反復回数は Jacobi 法 >Gauss-Seidel 法 >SOR 法となった. 3 つの反復法における $\boldsymbol{x}_{k-1}$ の係数行列は

$$\begin{array}{cc}
\text{Jacobi 法:} & -D^{-1}(L+U), \\
\text{Gauss-Seidel 法:} & -(L+D)^{-1}U, \\
\text{SOR 法:} & (1-\omega)I - \omega(L+D)^{-1}U.
\end{array}$$

一般に反復 $\boldsymbol{x}_k = M\boldsymbol{x}_{k-1} + \boldsymbol{c}$ は係数行列のスペクトル半径 $\gamma(M) := \max\{|M$ の固有値$|\} < 1$ のとき収束して, この値が小さいほど収束が速い. 今回の場合, スペクトル半径は上から順に 0.9511, 0.9045, 0.8568 となっている.