2009/06/15

長谷川秀彦

計算数学－１　計算機実習

1. ノルム・条件数

５×５の対称行列 A と適当な右辺ベクトル $\boldsymbol{b}$, 解ベクトル $\boldsymbol{x}$ に対して、Ａのノルム、残差（ノルム)、誤差（ノルム)、条件数、スペクトル半径などを求める

1.0000	-1.0000	0	0	0	
-1.0000	2.0000	-1.0000	0	0	
0	-1.0000	2.0000	-1.0000	0	
0	0	-1.0000	2.0000	-1.0000	
0	0	0	-1.0000	1.0+a	(a はパラメータ)

1.1 条件数が大きくなると、ガウスの消去法の結果はどうなるか？

1.2 AQ = QΛ，Ｑは直交行列、Λは対角行列とするとき、Ｑ，Λの条件数を求めよ

1.3 A = QR，Ｑは直交行列、Ｒは上三角行列とするとき、Ｑ，Ｒの条件数を求めよ

1.4 A^TA の条件数を求めよ

2. 反復法

Gauss-Seidel 法、 SOR 法、 CG 法の収束を調べよう

2.1 ＳＯＲ法のωを変化させたとき、オペレータのスペクトル半径、収束に要する反復回数はどのように変化するか

2.2 初期ベクトル $\boldsymbol{x}_0$ で収束はどのように変化するか

2.3 CG 法が反復１回で収束する問題を作れ

3. PCG 法： Preconditioned Conjugate Gradient Method

対称行列 B を $U^TU = B$ と分解し、 $U^{-T}AU^{-1}\,\boldsymbol{y} = U^{-T}\,\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{y} = U^{-1}\,\boldsymbol{x}$ とし、この式に対して CG 法を適用することで収束を早めたい。どのようにＢを定めるのがいいだろう？またそのような B を使ったとき、スペクトル半径、条件数などはどのようになっているか？（ただし、 B = A は自明である）

数値処理入門(長谷川 秀彦)　　MATLAB入門

まずは画面の表示モードを変更します。デフォルトでは more off なので、
出力が多いと画面情報へ流れていってしまいます。 more on としておけば
１画面分の結果が表示されたところで画面がいったん止まります。
１行進ませるにはリターンキー、１画面分進めるにはスペースキーを押します。
途中で終えるには q と入力してください

```
>> more on
>> more off
```

コマンドを調べるには help を使います。 help とすれば使えるコマンドが
分類されて表示されます。分類 general に属するコマンドが知りたければ
help general, more コマンドについて知りたければ more help のように入力します。

```
>> help
```

```
For more help on directory/topic, type "help topic".
```

```
>> help ops
```

```
  演算子と特殊キャラクタ

  数値演算子
  plus      - 加算                          +
  uplus     - 単項加算                      +
  minus     - 減算                          -
  uminus    - 単項減算                      -
  mtimes    - 行列の乗算                    *
  times     - 配列の乗算                    .*
  mpower    - 行列のベキ乗                  ^
  power     - 配列のベキ乗                  .^
  mldivide  - バックスラッシュ、行列の左除算  ¥

  以下、省略。
```

MATLAB が扱うのは実数（正確には倍精度浮動小数点数）です。整数も内部では
実数として扱われています。数値の内部表現をみるには

```
>> pi

ans =

    3.1416

>> format long
>> pi

ans =

   3.14159265358979
```

long は 15 桁表示です。標準に戻すには format と入力します。

数、ベクトル、行列の入力は以下のようにします。
b=0; のように行末にセミコロン ； をつけると結果は表示されません。
ベクトル・行列を入力する際はかぎかっこ [ ] を使います。
ベクトルや行列など、次の行のデータを入力する場合はセミコロン ： で区切ります。
= の左辺がない場合は、 ans という変数に格納されます。
転置を作るには ' ダッシュを利用します。

```
>> a=1

a =

     1

>> b=2;
```

```
>> A=[1 -1 0 0; -1 2 -1 0; 0 -1 2 -1; 0 0 -1 1.1]

A =

    1.0000   -1.0000         0         0
   -1.0000    2.0000   -1.0000         0
         0   -1.0000    2.0000   -1.0000
         0         0   -1.0000    1.1000
```

A(3,3) のように すれば 要素を指定できる

LU 分解を用いて連立１次方程式 A x = b の解を求めるには、以下のようにします。

```
>> b = [ -2; 4; -4; 2.1 ]

b =

   -2.0000
    4.0000
   -4.0000
    2.1000

>> x=A\b

x =

   -1.0000
    1.0000
   -1.0000
    1.0000
```

$x = A^{-1}b$ あるいは $x = inv(A)*b$

条件数、ノルムの計算には、関数 norm, cond, eig を使います：

```
>> norm(A,1)

ans =

    4

>> norm(A,2)

ans =

    3.4218

>> cond(A,2)

ans =

  149.2780

>> cond(A,1)

ans =

  184.0000
```

その他 lu, qr, chol, chol など

$norm_1(A)$ 1-ノルム

$norm_2(A)$ 2-ノルム

$cond_2(A)$ 条件数 2-ノルム

$cond_1(A)$ 条件数 1-ノルム

MATLAB のプログラムは xxx.m という M-ファイルに一連の手続きを記述します。
% から始まる行はコメントで、あとは MATLAB のコマンドをならべるだけです。
下の例では、 A0, R, b を受け取って、反復法を実行する LEQ という関数の定義です。
while を除けば、これまでの説明で十分に理解できる内容のはずです。

理科大では Z:¥ドライブを使うこと

xxx.m の内容：

```
function LEQ(A0,R,b)
% Solves Linear Equations by Stationary Iterative Method
%                H. Hasegawa: May 19, 2006
s=size(A0); x = rand(s(1),1); k= 0; res= 1;
while ( res > 1.0e-8)
   y = A0¥(R*x+b);
   k = k+1;
   res = norm(y-x,2);
   x = y;
   out = [k res];
   disp(sprintf('%5d %20.8e',out))
end
x
```

変化量を2-ノルムで

} 出力

出力

s は行列 A_0 のサイズ, x は乱数ベクトル

$A_0 y = Rx + b$

$(y = A_0^{-1}(Rx + b))$

これを実行するには、MATLAB のウインドウで Current Directory を変更し、
コマンドウィンドウに LEQ(A0,R,b) と入力します。
what で M-ファイルの一覧、help LEQ で LEQ 関数のコメント部分
(% から始まる行) が表示されます。

どのような変数が作られているかの一覧を調べるには who, whos コマンド、
それらの変数の内容をみるには変数名を入力します。

```
>> A0=[ 1 0 0 0; 0 2 0 0; 0 0 2 0; 0 0 0 2]

A0 =

     1     0     0     0
     0     2     0     0
     0     0     2     0
     0     0     0     2

>> R=A0-A;

>> LEQ(A0,R,b)

    1     2.60843061e+000
    2     2.23826612e+000
    3     2.10138665e+000

   中略

 1006     1.01665179e-008
 1007     1.00312625e-008
 1008     9.89780639e-009

x =

  -0.99999961572770
   1.00000037915994
  -0.99999963604112
   1.00000033907360

>> eig(inv(A0)*R)

ans =

  -0.90244107895598
  -0.23404854350955
   0.98669599008469
   0.59979363236085
```

A_0 を A の対角要素で
(a_{44} は少し変更した)

$A = A_0 - R$

反復法によって A_0 (または R) の
決め方が異なる。

1008回で収束 (1009回というべきか?)

反復法による解

$eig(A_0^{-1}R)$ 絶対値最大の固有値の絶対値が
スペクトル半径. この場合
$\rho(A_0^{-1}R) = 0.9866\ldots$

定常反復法

○ Gauss-Seidel 法 i より前の $x_i^{(k)}$ を利用する

$$x_i^{(k)} = \{ b_i - \underbrace{\sum_{j<i} a_{ij} x_j^{(k)}}_{\text{この部分がより新しい値.}} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{(k-1)} \} / a_{i,i}$$

○ Successive Over-Relaxation 法 (逐次的過剰緩和法)

$$x_i^{(k)} = \omega \tilde{x}_i^{(k)} + (1-\omega) x_i^{(k-1)}$$

$$\tilde{x}_i = \{ b_i - \sum_{j<i} a_{ij} \tilde{x}_j^{(k)} - \sum_{j>i} a_{ij} x_j^{(k-1)} \} / a_{i,i}$$: Gauss-Seidel 法の反復解

$x_i^{(k)}$ を直接更新するのでなく ω をパラメータとして更新量を調節

$0<\omega<1$: 過小　$\omega=1$: Gauss-Seidel 法　$1<\omega<2$ 過大