計算数学１レポート２解答・解説

作成者：松永浩介

2009 年 7 月 6 日

1.

$$A = \begin{pmatrix} 1.0000 & -1.0000 & 0 & 0 & 0 \\ -1.0000 & 2.0000 & -1.0000 & 0 & 0 \\ 0 & -1.0000 & 2.0000 & -1.0000 & 0 \\ 0 & 0 & -1.0000 & 2.0000 & -1.0000 \\ 0 & 0 & 0 & -1.0000 & 1.0+\omega \end{pmatrix}$$

$\omega = 1$ のとき：まず, 行列 A を MATLAB を用いて対角化すると,

$$V = \begin{pmatrix} -0.1698911 & 0.5968848 & 0.4557341 & 0.5485287 & -0.3260287 \\ 0.4557341 & 0.5485287 & -0.3260187 & 0.1698911 & 0.5968848 \\ -0.5968848 & 0.4557341 & -0.5485287 & -0.3260187 & -0.1698911 \\ 0.5485287 & 0.3260187 & 0.1698911 & -0.5968848 & -0.4557341 \\ -0.3260187 & 0.1698911 & 0.5968848 & -0.4557341 & 0.5485287 \end{pmatrix}$$

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 3.6825071 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0810141 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1.7153713 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.6902785 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2.83083 \end{pmatrix}$$

上の行列 V, Λ は, $AV = V\Lambda$ を満たす. 次に行列 A の QR 分解を MATLAB で求めると,

$$R = \begin{pmatrix} -1.4142136 & 2.1213203 & -0.7071068 & 0 & 0 \\ 0 & -1.2247449 & 2.0412415 & -0.8164996 & 0 \\ 0 & 0 & -1.1547005 & 2.0207259 & -0.8660254 \\ 0 & 0 & 0 & -1.118034 & 2.0124612 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.4472136 \end{pmatrix}$$

$$Q = \begin{pmatrix} -0.7071068 & -0.4082483 & -0.2886751 & -0.2236068 & 0.4472136 \\ 0.7071068 & -0.4082483 & -0.2886751 & -0.2236068 & 0.4472136 \\ 0 & 0.8164966 & -0.2886751 & -0.2236068 & 0.4472136 \\ 0 & 0 & 0.8660254 & -0.2236068 & 0.4472136 \\ 0 & 0 & 0 & 0.8944272 & 0.4472136 \end{pmatrix}$$

MATLAB を用いて条件数を求めると,

$$\mathrm{Cond}(A) = \mathrm{Cond}(\Lambda) = \mathrm{Cond}(R) = 45.455164$$
$$\mathrm{Cond}(Q) = \mathrm{Cond}(V) = 1$$
$$\mathrm{Cond}(A^{\mathrm{T}}A) = 2066.1719$$

$\omega = 0.01$ のとき：まず, 行列 A を MATLAB を用いて対角化すると,

$$V = \begin{pmatrix} 0.1952871 & 0.4507577 & 0.5110396 & 0.5996390 & 0.3714189 \\ -0.5113432 & 0.4498669 & -0.1965427 & 0.3684238 & -0.6014838 \\ 0.6322797 & 0.4480871 & -0.6319932 & -0.0048522 & -0.0011532 \\ -0.5119494 & 0.4454218 & -0.1923897 & -0.3762572 & 0.6007694 \\ 0.1962682 & 0.4418763 & 0.5135954 & -0.602581 & -0.3732828 \end{pmatrix}$$

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 3.6184176 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0019762 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1.3845939 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.3855906 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2.6194217 \end{pmatrix}$$

上の行列 V, Λ は, $AV = V\Lambda$ を満たす. 次に行列 A の QR 分解を MATLAB で求めると,

$$R = \begin{pmatrix} -1.4142136 & 2.1213203 & -0.7071068 & 0 & 0 \\ 0 & -1.2247449 & 2.0412415 & -0.8164996 & 0 \\ 0 & 0 & -1.1547005 & 2.0207259 & -0.8660254 \\ 0 & 0 & 0 & -1.118034 & 1.1269783 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0044721 \end{pmatrix}$$

$$Q = \begin{pmatrix} -0.7071068 & -0.4082483 & -0.2886751 & -0.2236068 & 0.4472136 \\ 0.7071068 & -0.4082483 & -0.2886751 & -0.2236068 & 0.4472136 \\ 0 & 0.8164966 & -0.2886751 & -0.2236068 & 0.4472136 \\ 0 & 0 & 0.8660254 & -0.2236068 & 0.4472136 \\ 0 & 0 & 0 & 0.8944272 & 0.4472136 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{Cond}(A) = \mathrm{Cond}(\Lambda) = \mathrm{Cond}(R) &= 1831.0142 \\ \mathrm{Cond}(Q) = \mathrm{Cond}(V) &= 1 \\ \mathrm{Cond}(A^{\mathrm{T}}A) &= 3352612.8 \end{aligned}$$

よって, 以下の関係式を得る.

$$\mathrm{Cond}(A)^2 = \mathrm{Cond}(\Lambda)^2 = \mathrm{Cond}(R)^2 = \mathrm{Cond}(A^{\mathrm{T}}A)$$

$$\mathrm{Cond}(Q) = \mathrm{cond}(V) = 1$$

2.

<u>CG 法アルゴリズムの導出.</u>

$$f(x) := \frac{1}{2}(A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) - (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{b})$$

とおくと f を最小にする $\boldsymbol{x}'$ が $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解である ($\because \forall \boldsymbol{h}\ f(\boldsymbol{x}' + \boldsymbol{h}) - f(\boldsymbol{x}') \geq 0$ を示せばよい).
よって $f(\boldsymbol{x})$ を最小にする $\boldsymbol{x}$ を求めれば良いので, 適当な $\boldsymbol{x}_0$ から出発して帰納的に近似解 $\boldsymbol{x}_k$ を構成する.

修正ベクトル $\boldsymbol{p}_k$ を用いて

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k$$

のように $\boldsymbol{x}_k$ を更新する.

k 番目までが決まったとして, $k+1$ 番目を構成しよう.
α_k を $\boldsymbol{p}_k \neq \boldsymbol{o}$ のもとで $f(\boldsymbol{x}_{k+1})$ を最小にするように決める. 上の式と, 内積の対称性を用いて,

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}_{k+1}) &= \frac{1}{2}(A\boldsymbol{x}_{k+1}, \boldsymbol{x}_{k+1}) - (\boldsymbol{x}_{k+1}, \boldsymbol{b}) = \frac{1}{2}(A(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k), \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k) - (\boldsymbol{x}_k + \alpha_k, \boldsymbol{b}) \\ &= \underline{\underline{\frac{1}{2}(A\boldsymbol{x}_k, \boldsymbol{x}_k)}} + \underline{\frac{1}{2}\alpha_k(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{x}_k) + \frac{1}{2}\alpha_k(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{x}_k)} + \frac{\alpha_k^2}{2}(A\boldsymbol{p}_k, p_k) \underline{\underline{-(\boldsymbol{x}_k, b)}}\ \underline{-\alpha_k(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{b})} \\ &= \underline{\underline{f(\boldsymbol{x}_k)}} + \frac{1}{2}{\alpha_k}^2(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k) \underline{+\alpha_k(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{b})} \\ &= f(\boldsymbol{x}_k) + \frac{1}{2}{\alpha_k}^2(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k) \underline{-\alpha_k(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)} \end{aligned}$$

よって, α_k の 2 次方程式とみると, A が正定値より, 2 次の係数が正なので,

$$\alpha_k = \frac{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)}$$

で最小になる.

また, 残差ベクトル

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}_{k+1} &= \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_{k+1} \\ &= \boldsymbol{b} - A(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k) \\ &= \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k\end{aligned}$$

と書け, $\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{o}$ なら, $\boldsymbol{x}_{k+1}$ が解である.

次に, $\boldsymbol{r}_{k+1} \neq \boldsymbol{o}$ のとき, 修正ベクトル $\boldsymbol{p}_{k+1}$ を決める. $\boldsymbol{p}_{k+1}$ を $\boldsymbol{p}_1,\ \boldsymbol{p}_2, \cdots,\ \boldsymbol{p}_k$ と一次独立になるように選びたい (空間の次元を拡張する). しかし, 真の解が分かっていないので, 決め方が定まらない.
そこで, 方向 $A^{-1}\boldsymbol{b} - \boldsymbol{x}_{k+1}$ と $A\boldsymbol{p}_k$ の直交性に注目する. 実際,

$$(A\boldsymbol{p}_k, A^{-1}\boldsymbol{b} - \boldsymbol{x}_{k+1}) = (\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_{k+1}) = (\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{b} - A(\boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k)) = (\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k) = (\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k) - \alpha_k(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k) = 0.$$

$k+1$ 番目の修正ベクトルを

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k$$

の形で決め, $\boldsymbol{p}_k$ と $A\boldsymbol{p}_k$ が直交するように β_k を決める.

$$\begin{aligned}(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_{k+1}) &= (A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k) \\ &= (A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_{k+1}) + \beta(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k) \\ &= 0\end{aligned}$$

これより,

$$\beta_k = -\frac{(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_{k+1})}{(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)}$$

残差ベクトル $\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{o}$ となって, 空間が拡張できなくなったとき, $\boldsymbol{x}_k$ は解となっている. 初期修正ベクトル $\boldsymbol{p}_0$ は何でも良いが, 6 月 29 日の講義では $\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{r}_0$ と選んだ.

反復回数 (高々 n 回)

まず, $(\boldsymbol{r}_j, \boldsymbol{p}_i) = 0,\ (A\boldsymbol{p}_j, \boldsymbol{p}_i) = 0$ (for $0 \leq i < j \leq n$) を数学的帰納法を用いて示す.

$\cdot\ n = 1$ のとき

$$(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{p}_0) = (\boldsymbol{r}_0 - \alpha_0 A\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_0) = (\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{p}_0) - \frac{(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{p}_0)}{(\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0)}(A\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_0) = 0$$

$$(A\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_0) = (A(\boldsymbol{r}_1 - \beta \boldsymbol{p}_0), \boldsymbol{p}_0) = (A\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{p}_0) - \frac{(\boldsymbol{r}_1, A\boldsymbol{p}_0)}{(\boldsymbol{p}_0, A\boldsymbol{p}_0)}(A\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_0) = (\boldsymbol{r}_1, A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_0) - (\boldsymbol{r}_1, A\boldsymbol{p}_0) = 0$$

$\cdot\ n > 1$ のとき

$1 \leq n \leq k$ を仮定して $n = k+1$ を示そう.
最初に $i = k$ のときを示す. このとき $j = k+1$ となる.

$$(\boldsymbol{r}_{k+1}, \boldsymbol{p}_k) = (\boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k) = (\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k) - \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}(A\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k) = 0$$

$$(A\boldsymbol{p}_{k+1},\boldsymbol{p}_k)=(A(\boldsymbol{r}_{k+1}-\beta_k\boldsymbol{p}_k),\boldsymbol{p}_k)=(A\boldsymbol{r}_{k+1},\boldsymbol{p}_k)-\frac{(\boldsymbol{r}_{k+1},A\boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{p}_k,A\boldsymbol{p}_k)}(A\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{p}_k)=(\boldsymbol{r}_{k+1},A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_k)-(\boldsymbol{r}_{k+1},A\boldsymbol{p}_k)=0$$

また, $i<k$ のとき, $j\le k$ のときは仮定より成立するため, $j=k+1$ のときのみを示す.

$$(\boldsymbol{r}_{k+1},\boldsymbol{p}_i)=(\boldsymbol{r}_k-\alpha_kA\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{p}_i)=(\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{p}_i)-\frac{(\boldsymbol{r}_k,\boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{p}_k,A\boldsymbol{p}_k)}(A\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{p}_i)=0$$

$$(A\boldsymbol{p}_{k+1},\boldsymbol{p}_i)=(\boldsymbol{p}_{k+1},A\boldsymbol{p}_i)=(\boldsymbol{r}_{k+1}-\beta_k\boldsymbol{p}_k,A\boldsymbol{p}_i)=(\boldsymbol{r}_{k+1},A\boldsymbol{p}_i)-\beta_k(\boldsymbol{p}_k,A\boldsymbol{p}_i)=\frac{1}{\alpha_k}(\boldsymbol{r}_{k+1},(\boldsymbol{p}_i+\beta_k\boldsymbol{p}_{i-1})-(\boldsymbol{p}_{i+1}+\beta_k\boldsymbol{p}_i))=0$$

$((\boldsymbol{r}_{k+1},\boldsymbol{p}_i)=0$, $(\boldsymbol{p}_k,A\boldsymbol{p}_i)=0$ (for $0\le i\le k$) を用いた.)

よって, 数学的帰納法より示された.
ここで, A の対称性より, $(A\boldsymbol{p}_j,\boldsymbol{p}_i)=0$ (for $0\le i<j\le n$) が示せたので, $(A\boldsymbol{p}_j,\boldsymbol{p}_i)=0$ (for $i\ne j$) を示した事に注意する.

次に今得られた結果を用いて, $(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j)=0$ $(i\ne j)$ を示したいが, $i<j$ としても一般性を失わないので, このときを数学的帰納法を用いて示す.
· $n=1$ のとき

$$(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_1)=(\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{r}_1)=0$$

· $n>1$ のとき
$0\le n\le k$ のとき成り立つと仮定し, $n=k+1$ のとき成り立つことを示そう. このとき $j\le k$ のときは仮定より成り立つので $j=k+1$ のときのみ示す.

$$(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_{k+1})=(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_k-\alpha_kA\boldsymbol{p}_k)=(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_k)-\alpha_k(A\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{r}_i)=(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_k)-\alpha_k(A\boldsymbol{p}_k,\boldsymbol{p}_i+\beta_k\boldsymbol{p}_{i-1})=0$$

以上から数学的帰納法より示された.

ここで, 残差ベクトル列 $\{\boldsymbol{r}_i\}$ は互いに直交する一次独立なベクトルである. よって, 次元数 n よりは大きくならないため, 理論上必ず n 回以下の反復で収束する.

2.1
まず, 行列 A の固有ベクトルとそれに対する固有値を $\boldsymbol{v}_i$, λ_i とおく. (i.e., $A\boldsymbol{v}_i=\lambda_i\boldsymbol{v}_i$)

ここで, 解を $\boldsymbol{v}_i$ とし $(\boldsymbol{b}=\lambda_i\boldsymbol{v}_i)$, $x_0=\boldsymbol{o}$ としてアルゴリズムに代入してみる.

$$\boldsymbol{r}_0=\lambda_i\boldsymbol{v}_i$$
$$\boldsymbol{p}_0=\boldsymbol{r}_0=\lambda_i\boldsymbol{v}_i$$

よって,

$$\alpha_0=\frac{(\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{r}_0)}{(A\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_0)}=\frac{(\lambda_i\boldsymbol{v}_i,\lambda_i\boldsymbol{v}_i)}{(\lambda_iA\boldsymbol{v}_i,\lambda_i\boldsymbol{v}_i)}=\frac{(\boldsymbol{v}_i,\boldsymbol{v}_i)}{(\lambda_i\boldsymbol{v}_i,\boldsymbol{v}_i)}=\frac{1}{\lambda_i}$$

以上から,

$$\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{x}_0+\alpha_0\boldsymbol{p}_0=\frac{1}{\lambda_i}\lambda\boldsymbol{v}_i=\boldsymbol{v}_i$$
$$\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{r}_0-\alpha_0A\boldsymbol{p}_0=\lambda_i\boldsymbol{v}_i-\frac{1}{\lambda_i}\lambda_iA\lambda_i=0$$

よって, 残差が 0 になっているためアルゴリズムが終了する (MATLAB での実験は各自に任せる).

3.

定常反復法 (Jacobi 法, Gauss-Seidel 法, SOR 法) で収束までの反復回数を MATLAB を用いて調べる.
(残差の 2-norm が 1.0×10^{-4} 以下になるまで反復を繰り返すプログラムを用いた.)

<u>$\omega = 1$ のとき</u>

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ここで定常反復法を行うと (それぞれの方法 · 方針については昨年の課題解説を参照),

	Jacobi 法	Gauss-Seidel 法	SOR 法
反復回数	136 回	72 回	42 回
解	$\begin{pmatrix} 0.9994 \\ 0.9994 \\ 0.9995 \\ 0.9997 \\ 0.9998 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.9993 \\ 0.9994 \\ 0.9995 \\ 0.9997 \\ 0.9998 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.9993 \\ 0.9994 \\ 0.9995 \\ 0.9996 \\ 0.9998 \end{pmatrix}$

また, SOR 法のアルゴリズムにおける ω を 0.1 刻みで動かしたとき, $\omega = 1.4$ のとき最速で収束したため, そのときの結果を用いた.

<u>$\omega = 0.1$ のとき</u>

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1.1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0.1 \end{pmatrix}$$

ここで定常反復法を行うと,

	Jacobi 法	Gauss-Seidel 法	SOR 法
反復回数	678 回	257 回	172 回
解	$\begin{pmatrix} 09998 \\ 0.9998 \\ 0.9998 \\ 0.9999 \\ 0.9999 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.9975 \\ 0.9976 \\ 0.9977 \\ 0.9978 \\ 0.9980 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0.9976 \\ 0.9976 \\ 0.9977 \\ 0.9979 \\ 0.9980 \end{pmatrix}$

また, SOR 法のアルゴリズムにおける ω を 0.1 刻みで動かしたとき, $\omega = 0.9$ のとき最速で収束したため, そのときの結果を用いた.

次に, スペクトル半径を求める.

$$A = L + D + U \ (L: \text{下三角行列},\ D: \text{対角行列},\ U: \text{上三角行列})$$

と分解し, それぞれ以下のスペクトル半径を考える.

$$\begin{aligned} \text{Jacobi 法} &: -D^{-1}(L+U) \\ \text{Gauss-Seidel 法} &: -(L+D)^{-1}U \\ \text{SOR 法} &: (1-\omega)I - \omega(L+D)^{-1}U \ (\text{ただし}, 0 < \omega < 2) \end{aligned}$$

(SOR 法における ω と問題における ω は関係ないことに注意せよ.)

以上より, スペクトル半径を MATLAB を用いて求め, まとめると,

	Jacobi 法	Gauss-Seidel 法	SOR 法
$\omega = 1$	0.9511	0.9045	0.8568 ($\omega = 1.4$)
$\omega = 0.1$	0.9891	0.9783	0.9675 ($\omega = 0.9$)

以上から, 反復回数は Jacobi 法 >Gauss-Seidel 法 >SOR 法となり, またスペクトル半径も Jacobi 法 >Gauss-Seidel 法 >SOR 法となって, 大小関係が対応している.