

計算数学1 第2回課題解説

2007.7.16

作成者 田村博志

1

$$\alpha > 0, A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 + \alpha \end{pmatrix} \text{ のとき}$$

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} \alpha^{-1} + 3 & \alpha^{-1} + 2 & \alpha^{-1} + 1 & \alpha^{-1} \\ \alpha^{-1} + 2 & \alpha^{-1} + 2 & \alpha^{-1} + 1 & \alpha^{-1} \\ \alpha^{-1} + 1 & \alpha^{-1} + 1 & \alpha^{-1} + 1 & \alpha^{-1} \\ \alpha^{-1} & \alpha^{-1} & \alpha^{-1} & \alpha^{-1} \end{pmatrix}$$

$\alpha = 1$ と $\alpha = 10^{-2}$ のときの $Cond_p(A) := \|A\|_p \|A^{-1}\|_p$ ($p = 1, 2$) を求める. ここで

$$\|A\|_p := \sup \left\{ \frac{\|A\mathbf{x}\|_p}{\|\mathbf{x}\|_p}; \|\mathbf{x}\|_p > 0 \right\} \quad \|\mathbf{x}\|_p := \left(\sum_{j=1}^n |x_j|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

とくに実際の計算では

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

$$\|A\|_2 = (\max\{A^*A \text{ の固有値}\})^{\frac{1}{2}}$$

$\|A\|_p$ ($p = 1, 2$) の 2 通りの表示の同値性

1-norm について

$A = (a_{ij}), \mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^T$ と表記.

$$M := \max \left\{ \sum_{i=1}^n |a_{ij}|; 1 \leq j \leq n \right\}$$

とおく. とくに j_0 のときに

$$M = \sum_{i=1}^n |a_{ij_0}|$$

が成立するものとする.このとき任意の x について

$$\begin{aligned}\|Ax\|_1 &= \sum_{i=1}^n \left| \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j \right| \\ &\leq \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n |a_{ij}| |x_j| \right) && \text{三角不等式より} \\ &= \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=1}^n |a_{ij}| \right) |x_j| \\ &\leq \sum_{j=1}^n M |x_j| \\ &= M \|x\|_1\end{aligned}$$

とくに $x = e_{j_0}$ (j_0 番目が1でその他が0のベクトル) とおくと等号が成立するので $\|A\|_1 = M$ が示された.

2-norm について

(たとえ A が複素行列であっても) A^*A の固有値はすべて非負の実数値である. 実際 λ を A^*A の固有値の一つ, v をその固有値に対する固有ベクトルの一つとすると

$$A^*Av = \lambda v$$

レーリー商を求めると

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{(A^*Av, v)}{(v, v)} \\ &= \frac{(Av, Av)}{(v, v)} \\ &\geq 0\end{aligned}$$

$\lambda_{max} := A^*A$ の最大固有値 ≥ 0 とおく. A^*A の固有ベクトルについて計算しやすいものを導入する. v_1, v_2 を固有値 λ_1, λ_2 に対する A^*A の固有ベクトルとする.

(difference) $\lambda_1 \neq \lambda_2$ のとき

実は $(v_1, v_2) = 0$ である. なぜなら

$$\begin{aligned}\lambda_1(v_1, v_2) &= (A^*Av_1, v_2) \\ &= (v_1, A^*Av_2) \\ &= \lambda_2(v_1, v_2)\end{aligned}$$

よって $(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = 0$.

(equal) $\lambda_1 = \lambda_2 (= \lambda \text{とおく})$ のとき

λ の固有空間の次元が 2 以上のときは必要ならば Schmidt の直交化を行い固有空間の基底として直交系を選ぶ.

このようにして固有値 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ に対する互いに直交する固有ベクトルの族 $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ を得る. 任意の \mathbf{x} につき一意に固有ベクトル分解を許す.

$$\mathbf{x} = c_1 \mathbf{v}_1 + \dots + c_n \mathbf{v}_n$$

やっと道具が揃ったのでこれより 2-norm の計算に移る.

$$\begin{aligned} (A\mathbf{x}, A\mathbf{x}) &= (A^*A\mathbf{x}, \mathbf{x}) \\ &= (A^*A(c_1\mathbf{v}_1 + \dots + c_n\mathbf{v}_n), c_1\mathbf{v}_1 + \dots + c_n\mathbf{v}_n) \\ &= (c_1\lambda_1\mathbf{v}_1 + \dots + c_n\lambda_n\mathbf{v}_n, c_1\mathbf{v}_1 + \dots + c_n\mathbf{v}_n) \\ &= \lambda_1 c_1^2 (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1) + \dots + \lambda_n c_n^2 (\mathbf{v}_n, \mathbf{v}_n) \\ &\leq \lambda_{\max} (c_1^2 (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1) + \dots + c_n^2 (\mathbf{v}_n, \mathbf{v}_n)) \\ &= \lambda_{\max} (c_1\mathbf{v}_1 + \dots + c_n\mathbf{v}_n, c_1\mathbf{v}_1 + \dots + c_n\mathbf{v}_n) \\ &= \lambda_{\max} (\mathbf{x}, \mathbf{x}) \end{aligned}$$

とくに \mathbf{x} を λ_{\max} に対する固有ベクトルに選ぶと等号が成立するので $\|A\|_2^2 = \lambda_{\max}$ が示せた.

以上は前置きで, これより本題に移る (といっても計算はすべて計算機任せ).

(a) $\alpha = 1$ のとき

$$\|A\|_1 = 4, \|A^{-1}\|_1 = 10 \text{ なので } \text{Cond}_1(A) = 40$$

$$\|A\|_2 = 3.5321, \|A^{-1}\|_2 = 8.2909 \text{ なので } \text{Cond}_2(A) = 29.2841$$

(b) $\alpha = 10^{-2}$ のとき

$$\|A\|_1 = 4, \|A^{-1}\|_1 = 406 \text{ なので } \text{Cond}_1(A) = 1624$$

$$\|A\|_2 = 3.4149, \|A^{-1}\|_2 = 403.5131 \text{ なので } \text{Cond}_2(A) = 1377.95\dots = 1378$$

いずれも 2-norm の方の条件数が小さいことがわかる.

2

$$B = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -4 \\ 0 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \mathbf{c} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ のとき } \|B\mathbf{x} - \mathbf{c}\|_2 \text{ を最小にする } \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \text{ と最}$$

小値を QR 分解を用いて求める. B に QR 分解を行うと次のようになる.

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

$$\begin{aligned} \|B\mathbf{x} - \mathbf{c}\|_2^2 &= (B\mathbf{x} - \mathbf{c}, B\mathbf{x} - \mathbf{c}) \\ &= 2 \left(\frac{1}{2}(B^T B\mathbf{x}, \mathbf{x}) - (B^T \mathbf{c}, \mathbf{x}) \right) + (\mathbf{c}, \mathbf{c}) \end{aligned}$$

最後の (\mathbf{c}, \mathbf{c}) は \mathbf{x} に依らない定数なので $\frac{1}{2}(B^T B\mathbf{x}, \mathbf{x}) - (B^T \mathbf{c}, \mathbf{x})$ を最小にする \mathbf{x} を求めればよい。

$$A := B^T B \quad \mathbf{b} := B^T \mathbf{c}$$

とおくと行列 A は非負対称行列である。対称性は明らかなので非負性だけ示す。

$$\begin{aligned} (A\mathbf{x}, \mathbf{x}) &= (B^T B\mathbf{x}, \mathbf{x}) \\ &= (B\mathbf{x}, B\mathbf{x}) \\ &= \|B\mathbf{x}\|_2^2 \\ &\geq 0 \end{aligned} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbf{R}^3$$

これより A は非負対称行列で、 $\|B\mathbf{x} - \mathbf{c}\|_2$ の最小値は $\frac{1}{2}(A\mathbf{x}, \mathbf{x}) - (\mathbf{x}, \mathbf{b})$ の最小値に帰着され、それは $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ のときに実現される (課題 1 参照)。以上により $\|B\mathbf{x} - \mathbf{c}\|_2$ は $B^T B\mathbf{x} = B^T \mathbf{c}$ のとき最小値 $\|B(B^T B)^{-1}B^T \mathbf{c} - \mathbf{c}\|_2$ をとる。方程式 $B^T B\mathbf{x} = B^T \mathbf{c}$ に $B = QR$ を代入する。 $Q^T Q = I_3$ と R の正則性を用いて

$$\begin{aligned} B^T B\mathbf{x} = B^T \mathbf{c} &\iff (QR)^T QR\mathbf{x} = (QR)^T \mathbf{c} \\ &\iff R^T Q^T QR\mathbf{x} = R^T Q^T \mathbf{c} \\ &\iff R\mathbf{x} = Q^T \mathbf{c} \end{aligned}$$

これを解くと

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ -0.5 \\ -0.5 \end{pmatrix}, \|B \begin{pmatrix} 0 \\ -0.5 \\ -0.5 \end{pmatrix} - \mathbf{c}\|_2 = 1$$

3

正値対称行列 A に対する $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ について CG 法を用いた解法のアルゴリズムを導出する。

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

とおくと f を最小にする x が $Ax = b$ の解であるという事実に基づいて適当な x_0 から出発して帰納的に近似解 x_k を構成する.

$$\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_k \quad (2)$$

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0 \quad (3)$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k \quad (4)$$

ここで α_k は $\mathbf{p}_k \neq \mathbf{o}$ (もちろん \mathbf{o} のときはそこで終了) が定まったとき $f(\mathbf{x}_{k+1})$ を最小にするものを選ぶ. (2), (4) ならびに A の対称性を用いて

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

よってこれを最小にする α_k は

$$\alpha_k = \frac{(\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k)}{(A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_k)} \quad (5)$$

で与えられる. x_0, r_0, p_0, α_0 は決まったので以下 k 番目まで決まったとして $k+1$ 番目を構成する. まず x_{k+1} は (4) によって定義される. r_{k+1} は (2) によって定義される.

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_{k+1} \quad (6)$$

しかし (6) は $k+1$ 番目の量を使わずに次のようにも書ける.

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{k+1} &= \mathbf{b} - A(\mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k) \\ &= \mathbf{r}_k - \alpha_k A\mathbf{p}_k \end{aligned} \quad (7)$$

次に \mathbf{p}_{k+1} を決める. $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{o}$ のときは次に進む必要がないので \mathbf{o} でないとする. α_k は \mathbf{p}_k 方向だけでの f の最小値を決めているので全空間での最小値に近づけるためには $\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1, \dots$ などがいろいろな方向を向いている, つまり 1 次独立であるのが望ましい.

$$\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k \quad (8)$$

の形で β_k を

$$(A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_{k+1}) = 0 \quad (9)$$

なるように選ぶ.

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

これより

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

α_{k+1} は (5) によって決まる. また α_k の分子は次のようにも書ける. $k \geq 1$ について

$$(\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k) = (\mathbf{r}_k + \beta_{k-1} \mathbf{p}_{k-1}, \mathbf{r}_k) \quad (8) \text{ より}$$

$$= (\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k) + \beta_{k-1} (\mathbf{p}_{k-1}, \mathbf{r}_{k-1} - \alpha_{k-1} A\mathbf{p}_{k-1}) \quad (7) \text{ より}$$

$$= (\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k) + \beta_{k-1} \left((\mathbf{p}_{k-1}, \mathbf{r}_{k-1}) - \frac{(\mathbf{p}_{k-1}, \mathbf{r}_{k-1})}{(A\mathbf{p}_{k-1}, \mathbf{p}_{k-1})} (A\mathbf{p}_{k-1}, \mathbf{p}_{k-1}) \right) \quad (5) \text{ より}$$

$$= (\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)$$

特に $k = 0$ のときも \mathbf{p}_0 の定義から $(\mathbf{p}_0, \mathbf{r}_0) = (\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)$. これより

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

β_k については直交性 $(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_{k+1}) = (A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_{k-1}) = 0$ を認めれば $\alpha_k > 0$ なので

$$\begin{aligned} \beta_k &= -\frac{(\alpha_k A\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_{k+1})}{(\alpha_k A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_k)} \\ &= -\frac{(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1})}{(\alpha_k A\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k + \beta_{k-1} \mathbf{p}_{k-1})} \quad (7)(8) \text{ より} \\ &= \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1})}{(\alpha_k A\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k)} \quad \text{直交性より} \\ &= \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1})}{(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_k)} \quad (7) \text{ より} \\ &= \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1})}{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)} \quad \text{直交性より} \end{aligned}$$

以上から \mathbf{x}_0 は任意として

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0 \quad \mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0 \text{ (初期設定)} \quad (10)$$

$$\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}{(A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_k)} \quad (11)$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k \quad (12)$$

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_{k+1} \quad (13)$$

$\|\mathbf{r}_{k+1}\|_2$ がある程度大きいとき次のステップへ ($\epsilon > 0$ を決めて $\|\mathbf{r}_{k+1}\|_2 \geq \epsilon$ などをループの条件に組み込む). そうでないときは \mathbf{x}_{k+1} を解として採用.

$$\beta_k = \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1})}{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)} \quad (14)$$

$$\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k \quad (15)$$

直交性 $(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = (A\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j) = 0 (i \neq j)$ の証明

$(A\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j) = (\mathbf{p}_i, A\mathbf{p}_j)$ より $i < j$ としても一般性を失わない. $0 \leq i < j \leq k$ で成立することを k について帰納法で示す.

• $k = 1$ のとき (つまり $i = 0, j = 1$)

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1) &= (\mathbf{p}_0, \mathbf{r}_0 - \alpha_0 A\mathbf{p}_0) \\ &= (\mathbf{p}_0, \mathbf{r}_0) - \frac{(\mathbf{p}_0, \mathbf{r}_0)}{(A\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_0)} \\ (A\mathbf{p}_0, \mathbf{p}_1) &= 0 \end{aligned} \quad (9), \text{すなわち } \mathbf{p}_1 \text{ の定義より}$$

• k 以下までを認めて $k + 1$ のときを示す ($i \leq k$ かつ $j = k + 1$ を調べればよい).

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_{k+1}) &= (\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k - \alpha_k A\mathbf{p}_k) \\ &= (\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k) - \alpha_k (\mathbf{r}_i, A\mathbf{p}_k) \\ &= (\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k) - \alpha_k (\mathbf{p}_i - \beta_{i-1} \mathbf{p}_{i-1}, A\mathbf{p}_k) \\ &= (\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k) - \frac{(\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k)}{(A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_k)} (\mathbf{p}_i, A\mathbf{p}_k) \\ &= 0 \end{aligned}$$

ここで $i < k$ のときは帰納法の仮定より. $i = k$ のときは $(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k) = (\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k)$ を用いた (6 ページ参照).

$i < k$ のとき

$$\begin{aligned} (A\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_{k+1}) &= (A\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k) && (8) \text{ より} \\ &= (A\mathbf{p}_i, \mathbf{r}_{k+1}) \\ &= \frac{1}{\alpha_i} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}, \mathbf{r}_{k+1}) && (7) \text{ より} \\ &= 0 \end{aligned} \quad \text{前半の } (\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = 0 (i < j) \text{ により}$$

$i = k$ のとき $(A\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_{k+1}) = (A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_{k+1}) = 0$ なることは \mathbf{p}_{k+1} の構成法から明らか. これより直交性は示された.