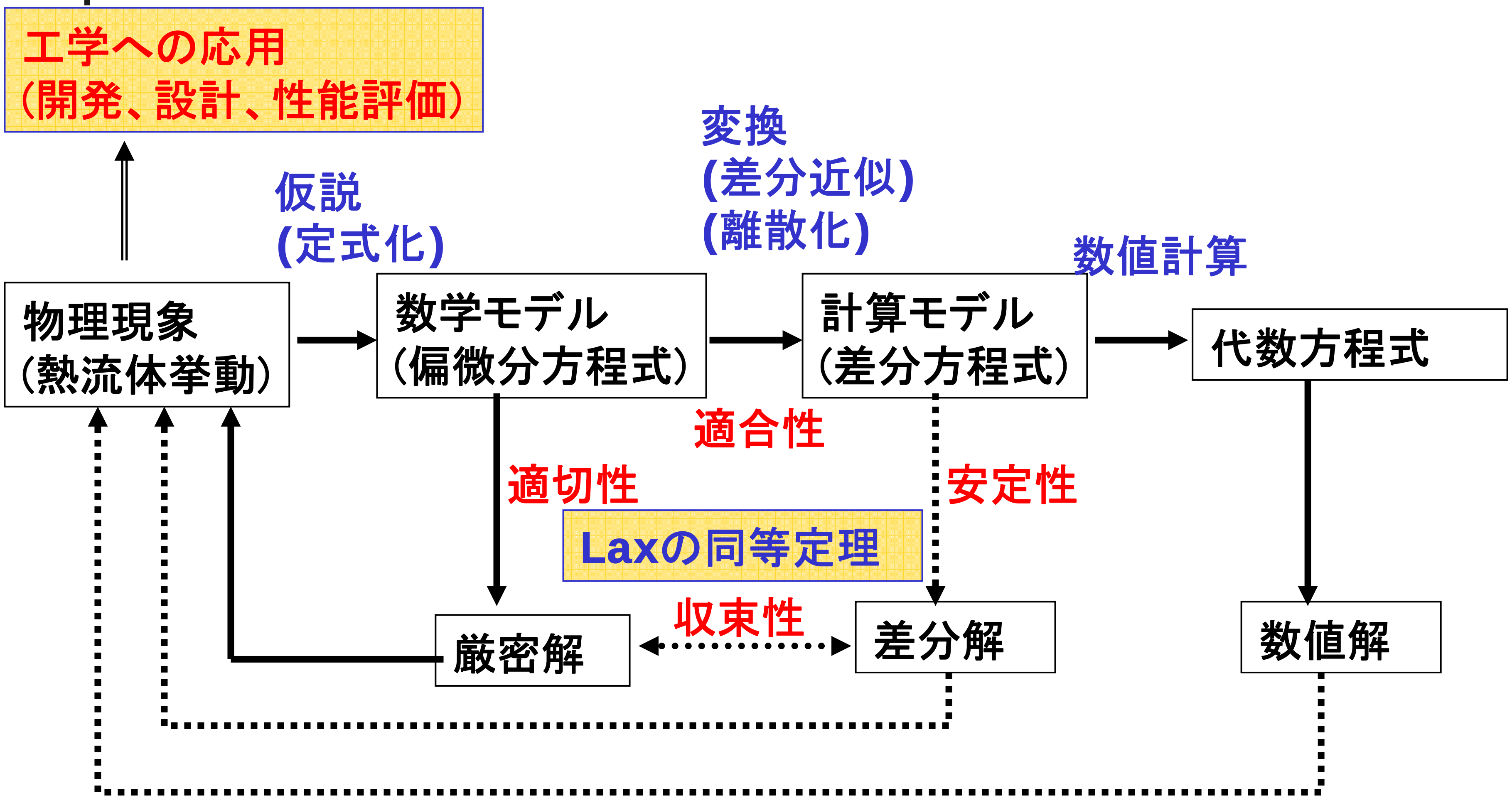
講義予定(案)

1. (9/ 2) 数値シミュレーションの手続き (テキスト第１章)
2. (9/ 9) 偏微分方程式と解析解 (テキスト第２章)
3. (9/16) 休講
4. (9/30) 差分方程式とそのスキーム (テキスト第３章) +変換 (テキスト第４章)
5. (10/ 7) 計算 (テキスト第５章)+連立一次方程式の解法(テキスト第６章)
6. (10/21) 流れ関数-ポテンシャルによる解法(テキスト第７章)
7. (10/28) 流速-圧力を用いた解法 (テキスト第７章)
8. (11/ 4) 熱流体解析と多相流解析
9. (11/11) 乱流の数値解析 by 金子暁子先生
10. (11/18) 数値解析の実際 by 渡辺正先生(JAEA)
11. (11/25) (予備日)

代数方程式(連立一次方程式)の解法



連立一次方程式の解法
モデル問題12

次の連立一次方程式

$$\boldsymbol{Au} = \boldsymbol{b}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & 1 & 0 \\ -2 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 7 \end{pmatrix}$$

を解け。

この場合、解は

$$\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 1 \end{pmatrix}^T$$

である。

一次元Laplace方程式

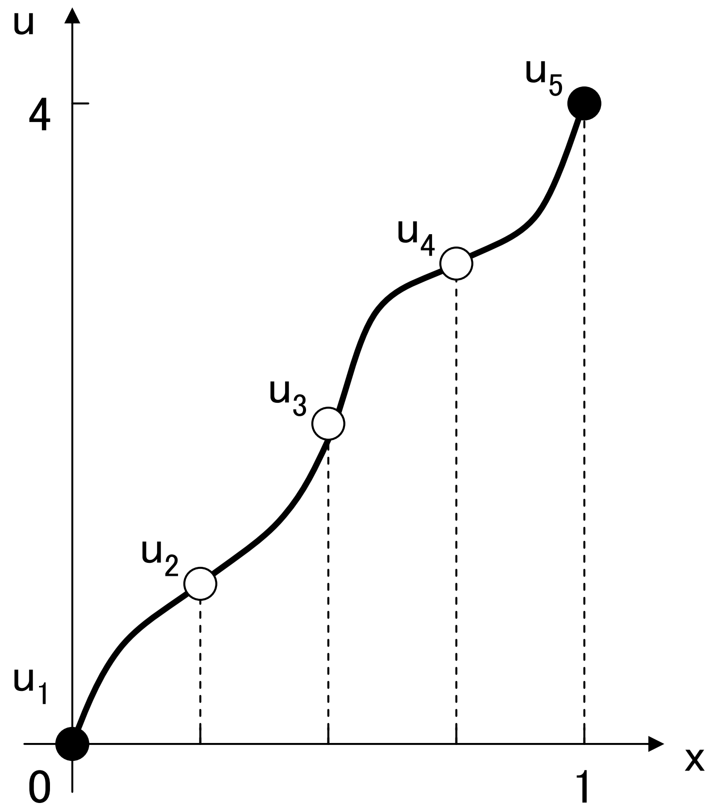
一次元Laplace方程式

$$\frac{d^2u}{dx^2} = 0$$

一次元Laplace方程式の厳密解

$$u(x) = 4x \quad (0 \leq x \leq 1)$$

変域を4分割する。内点を2,3,4と順々に番号をつけ、境界点を1,5とする。



一次元Laplace方程式の近似

一次元Laplace方程式を中心差分近似する。

$$\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta x^2} = 0 \quad (i = 2,3,4)$$

境界条件

$$u_1 = 0, \quad u_5 = 4$$

連立一次方程式

$$\begin{aligned} -2u_2 + u_3 &= -u_1 = 0 \\ u_2 - 2u_3 + u_4 &= 0 \\ u_3 - 2u_4 &= -u_5 = -4 \end{aligned}$$

モデル問題13

次の連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} 1 & -1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 & -1/2 \\ 0 & -1/2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}$$

を解け。

この場合、解は

$$\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}^T$$

である。

係数行列の必要十分条件

係数行列が正定値であるための必要十分条件

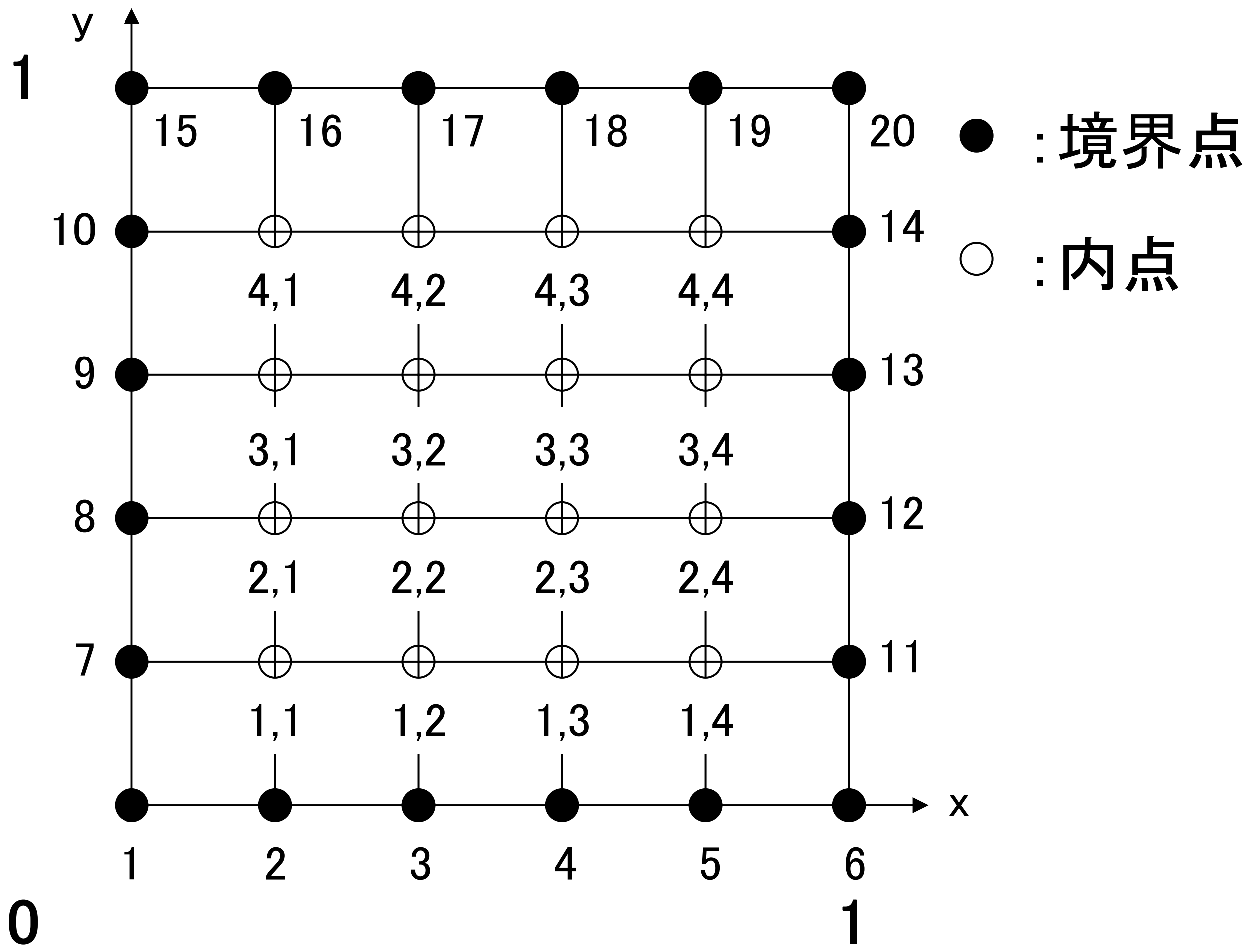
- Aの全ての固有値 λ_i について $\lambda_i \geq 0$

- Aのすべての左上小行列の行列式が正である

$$\det \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} > 0$$

- 全ての対角要素が正である

Poisson方程式のDirichlet問題



モデル問題14 (1/3)

次の連立一次方程式

$$AU = B$$

を解け。ただし未知変数と定数項は先の図の順序付けである。すなわち、次の諸式でA, U, Bを与える。

$$U = \begin{pmatrix} U_1 & U_2 & U_3 & U_4 \end{pmatrix}$$

$$U_1 = \begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & u_{1,4} \end{pmatrix}^T$$

$$U_2 = \begin{pmatrix} u_{2,1} & u_{2,2} & u_{2,3} & u_{2,4} \end{pmatrix}^T$$

$$U_3 = \begin{pmatrix} u_{3,1} & u_{3,2} & u_{3,3} & u_{3,4} \end{pmatrix}^T$$

$$U_4 = \begin{pmatrix} u_{4,1} & u_{4,2} & u_{4,3} & u_{4,4} \end{pmatrix}^T$$

モデル問題14 (2/3)

$$\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{B}_1 & \boldsymbol{B}_2 & \boldsymbol{B}_3 & \boldsymbol{B}_4 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{B}_1 = \begin{pmatrix} -\Delta x^2 g_{1,1} + u_2 + u_7 \\ -\Delta x^2 g_{1,2} + u_3 \\ -\Delta x^2 g_{1,3} + u_4 \\ -\Delta x^2 g_{1,4} + u_5 + u_{11} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{B}_2 = \begin{pmatrix} -\Delta x^2 g_{2,1} + u_8 \\ -\Delta x^2 g_{2,2} \\ -\Delta x^2 g_{2,3} \\ -\Delta x^2 g_{2,4} + u_{12} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{B}_3 = \begin{pmatrix} -\Delta x^2 g_{3,1} + u_9 \\ -\Delta x^2 g_{3,2} \\ -\Delta x^2 g_{3,3} \\ -\Delta x^2 g_{3,4} + u_{13} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{B}_4 = \begin{pmatrix} -\Delta x^2 g_{4,1} + u_{10} + u_{16} \\ -\Delta x^2 g_{4,2} + u_{17} \\ -\Delta x^2 g_{4,3} + u_{18} \\ -\Delta x^2 g_{4,4} + u_{14} + u_{19} \end{pmatrix}$$

モデル問題14 (3/3)

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & 0 \\ 0 & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\ 0 & 0 & A_{43} & A_{44} \end{pmatrix}$$

$$A_{ii} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}, \quad A_{ij} = A_{ji} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$(i = 1,2,3,4) \qquad\qquad (i, j = 1,2,3,4 : i \neq j)$$

モデル問題15

次の連立一次方程式を解け。

$$\begin{pmatrix} 5 & 1 & -3 \\ -1 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix}$$

この場合、解は

$$\boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} -0.2439 & 1.0488 & 0.6098 \end{pmatrix}^T$$

である。

直接法

連立一次方程式を一般的に次のように書いて、

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{b}$$

を解くとき、手続きとして

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$$

の形の解を求める方法を直接法という。また、行列Aを

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$$

のように下三角行列Lと上三角行列Uの積に変形すること
がある。この変換をLU分解と呼ぶ。

LU分解

$\boldsymbol{Au} = \boldsymbol{b}$ において、行列AがLU分解可能ならば、この式は

$$\boldsymbol{LUu} = \boldsymbol{L}(\boldsymbol{Uu}) = \boldsymbol{b}$$

と書ける。これを解くには

$$\boldsymbol{Lz} = \boldsymbol{b}$$

を解いてzを求め、zを用いて

$$\boldsymbol{Uu} = \boldsymbol{z}$$

から解uが求められる。

Gauss消去法(前進消去)1

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & 1 & 0 \\ -2 & 2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 7 \end{bmatrix} \qquad \begin{matrix} ① \\ ② \\ ③ \end{matrix}$$

$\downarrow$ ①の式の2倍を②の式から引く

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ -2 & 2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -4 \\ 7 \end{bmatrix} \qquad \begin{matrix} ① \\ ②' \\ ③ \end{matrix}$$

$\downarrow$ ①の式の−1倍を③の式から引く

Gauss消去法（前進消去）2

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 3 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -4 \\ 8 \end{bmatrix} \qquad \begin{matrix} ① \\ ②' \\ ③' \end{matrix}$$

$$\downarrow$$

②’の式の−3倍を③‘の式から引く

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & -4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -4 \\ -4 \end{bmatrix} \qquad \begin{matrix} ① \\ ②' \\ ③'' \end{matrix}$$

このようにして行列は三角行列となる。

Gauss消去法(後退消去)

③'' より

$$u_3 = 1$$

②' より

$$-u_2 - 2u_3 = -4$$

$$u_2 = \frac{-4+2}{-1} = 2$$

①より

$$2u_1 + u_2 + u_3 = 1$$

$$u_1 = \frac{1-2-1}{2} = -1$$

$\longrightarrow$ Program AUB

$$\therefore \quad u = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 1 \end{pmatrix}^T$$

Gauss−Jordan法1

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & 1 & 0 \\ -2 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 7 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} ① \\ ② \\ ③ \end{matrix}$$

$\downarrow$ ①の式の2倍を②の式から引く

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ -2 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -4 \\ 7 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} ① \\ ②' \\ ③ \end{matrix}$$

$\downarrow$ ①の式の−1倍を③の式から引く

Gauss−Jordan法2

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -4 \\ 8 \end{bmatrix} \qquad \begin{matrix} ① \\ ②' \\ ③' \end{matrix}$$

$\downarrow$　②’の式の−1倍を1の式から引く

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ -4 \\ 7 \end{bmatrix} \qquad \begin{matrix} ①' \\ ②' \\ ③' \end{matrix}$$

$\downarrow$　②’の式の−3倍を③‘の式から引く

Gauss−Jordan法3

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ -4 \\ -4 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} ① \\ ②' \\ ③'' \end{matrix}$$

↓　③' 'の式の−1/4倍を①' の式から引く

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ -4 \\ -4 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} ①'' \\ ②' \\ ③'' \end{matrix}$$

↓　③' 'の式の−2/4倍を② 'の式から引く

Gauss−Jordan法4

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \\ -4 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} ①'' \\ ②'' \\ ③'' \end{matrix}$$

こうして対角行列が得られた。

①’’より $\quad u_1 = \dfrac{(-2)}{2} = -1$

②’’より $\quad u_2 = \dfrac{(-2)}{(-1)} = 2$

③’’より $\quad u_3 = \dfrac{(-4)}{(-4)} = 1$

$$\therefore \quad u = (-1 \quad 2 \quad 1)^T$$

⟶ Program AUB

前進代入と後退代入

未知ベクトルをuとした連立一次方程式

$$Au = b$$

係数行列Aが三角分解可能ならば、Lを下三角行列、Uを上三角行列とすると

$$A = LU$$

連立一次方程式を解くには $LUu = L(Uu) = Lz = b$ として

$$Lz = b$$

（前進消去）

この式を満足するzを求め、続いて

$$Uu = z$$

（後退代入）

を解いて u を求めることができる。

Crout法(LU分解)1

係数行列

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & 1 & 0 \\ -2 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

であり、LとUを

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & & \\ l_{21} & l_{22} & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} \\ & 1 & u_{23} \\ & & 1 \end{bmatrix}$$

とする。

Crout法(LU分解) 2

要素ごとの関係を書き出すと

$$\mathbf{l}_{11} = \mathbf{a}_{11} = 2 \qquad ①$$

$$\mathbf{l}_{21} = \mathbf{a}_{21} = 4 \qquad ②$$

$$\mathbf{l}_{31} = \mathbf{a}_{31} = -2 \qquad ③$$

$$\mathbf{l}_{11}\mathbf{u}_{12} = \mathbf{a}_{12} = 1 \qquad ④$$

$$\mathbf{l}_{11}\mathbf{u}_{13} = \mathbf{a}_{13} = 1 \qquad ⑤$$

$$\mathbf{l}_{21}\mathbf{u}_{12} + \mathbf{l}_{22} = \mathbf{a}_{22} = 1 \qquad ⑥$$

$$l_{31}u_{12} = l_{32} = a_{32} = 2 \qquad ⑦$$

$$l_{21}u_{13} + l_{22}u_{23} = a_{23} = 0 \qquad ⑧$$

$$l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + l_{33} = a_{33} = 1 \qquad ⑨$$

Crout法(LU分解) 3

この関係からLとUの要素を計算すると

①、②、③式から　$l_{11} = 2, \quad l_{21} = 4, \quad l_{31} = -2$

④式から　$2 \times u_{12} = 1 \qquad \therefore \quad u_{12} = 1/2$

⑤式から　$2 \times u_{13} = 1 \qquad \therefore \quad u_{13} = 1/2$

⑥式から　$4 \times (1/2) + l_{22} = 1 \qquad \therefore \quad l_{22} = -1$

⑦式から　$(-2) \times (1/2) + l_{32} = 3 \qquad \therefore \quad l_{32} = 3$

⑧式から　$4 \times (1/2) + (-1) u_{23} = 0 \qquad \therefore \quad u_{23} = 3$

⑨式から　$(-2) \times (1/2) + 3 \times 2 + l_{33} = 3 \qquad \therefore \quad l_{33} = -4$

となる。

Crout法(LU分解) 4

改めて係数行列をA=LUの形に書くと

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 4 & -1 & 0 \\ -2 & 3 & -4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/2 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

となる。

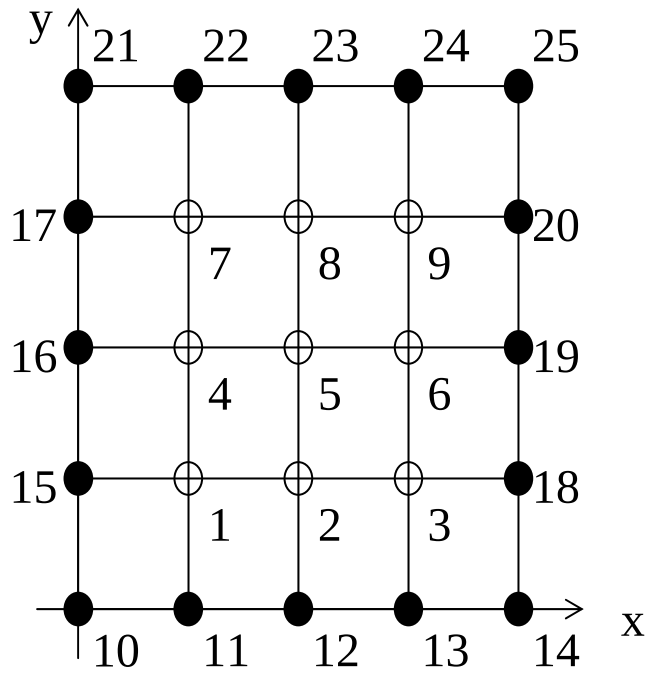
↓

Program AUB

Poisson方程式の数値解

Poisson方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=-g \quad (0 \le x \quad y \le 1)$$



境界条件は、一辺が1の正方形の上でu=0とする。差分方程式は

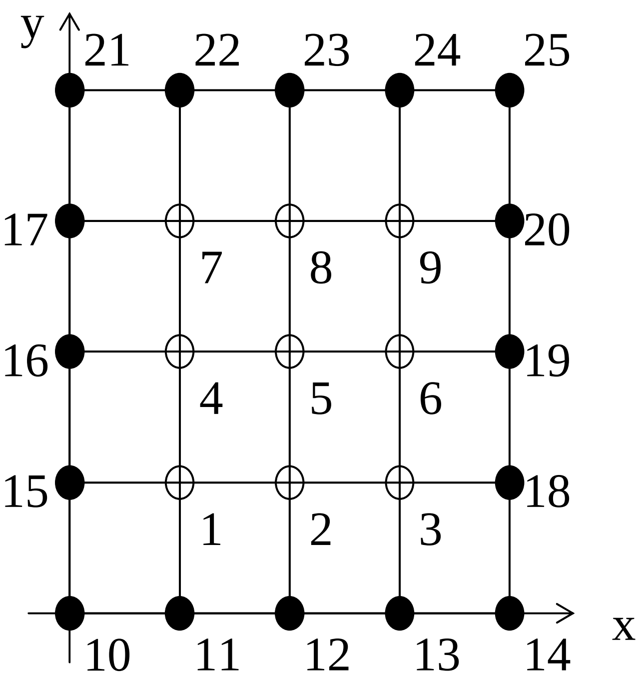
$$-u_{i,j-1}-u_{i-1,j}+4u_{i,j}+u_{i+1,j}-u_{i,j+1}=\Delta x^2 g_{i,j}$$

ここで、Δx=Δyとした。

差分方程式の行列表示(1/2)

行列表示

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix}$$



$$A_{ii} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & \\ -1 & 4 & -1 \\ & -1 & 4 \end{pmatrix} \qquad (i = 1,2,3)$$

$$A_{ij} = A_{ji} = \begin{pmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 \end{pmatrix} \qquad (i, j = 1,2,3, \quad i \neq j)$$

疎な行列(Sparse Matrix)

格子分割の数：　n分割とすると

変数の数：　$n \times n = n^2$

係数行列の全要素数：　$n^2 \times n^2 = n^4$

非零の要素数：　$(n+2(n-1)) \times n + n \times (n-1) \times 2 = (5n-4)n$

非零の要素数の割合：　$(5n-4)/n^3$

n=1	100 %
n=2	75 %
n=5	16.8 %
n=10	4.6 %
n=20	1.2 %
n=50	0.1968 %
n=100	0.0496 %

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix}$$

$$A_{ii} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & \\ -1 & 4 & -1 \\ & -1 & 4 \end{pmatrix} \qquad (i = 1,2,3)$$

$$A_{ij} = A_{ji} = \begin{pmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 \end{pmatrix} \qquad (i, j = 1,2,3, \quad i \neq j)$$

反復法1

連立一次方程式

$$\boldsymbol{Au} = \boldsymbol{b}$$

この係数行列Aが次の形に分離できるものと仮定する。

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q} - \boldsymbol{R}$$

ここで、Qは分離行列で正則である。こうすると方程式は

$$\boldsymbol{Qu} = \boldsymbol{Ru} + \boldsymbol{b}$$

と書ける。Qは正則であるからこの式は次式のようになる。

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{Ru} + \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{b}$$

これを書き改めて、

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{Gu} + \boldsymbol{f}, \quad \boldsymbol{G} = \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{R}, \quad \boldsymbol{f} = \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{b}$$

反復法2

反復法の基礎式

$$u^{(k+1)} = Gu^{(k)} + f \quad (k = 0,1,2,\cdots)$$

ここでkは反復回数である。uを反復計算によって収束した真の解とする。そうすると、次式が成立する。

$$u = Gu + f$$

第k番目の反復における誤差

$$e^{(k)} = u^{(k)} - u \quad (k = 0,1,2,\cdots)$$

上式に代入

$$u^{(k+1)} - u = G(u^{(k)} - u)$$

反復法2

よって

$$\boldsymbol{e}^{(k+1)} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{e}^{(k)}$$

この式は

$$\boldsymbol{e}^{(k)} = \boldsymbol{G}^{k}\boldsymbol{e}^{(0)}$$

を意味するから、$G^k \to 0$ならば

$$\boldsymbol{e}^{(k)} \to \boldsymbol{0} \quad (k \to \infty)$$

である。このときGは収束する性質を持つという。

収束のための必要十分条件

近似関数列　$\boldsymbol{u}^{(0)},\ \boldsymbol{u}^{(1)},\ \boldsymbol{u}^{(2)},\ \cdots$ がuに収束するときに、収束するという。

収束のための必要十分条件は反復行列Gのスペクトル半径 $\rho(\boldsymbol{G})$ が

$$\rho(\boldsymbol{G}) < 1$$

を満たすことである。Gのスペクトル半径とはGの固有値λ_jの絶対値が最大のものである。すなわち、

$$\rho(\boldsymbol{G}) = \max_{1 \le j \le n} \left| \lambda_j \right|$$

である。

反復法の意味

反復法の意味は

$\boldsymbol{Au}=\boldsymbol{b}$の解と$(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{G})\boldsymbol{u}=\boldsymbol{f}$の解は同じである

ということである。ここで、

$$\boldsymbol{u}=\boldsymbol{Gu}+\boldsymbol{f},\quad \boldsymbol{G}=\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{R},\quad \boldsymbol{f}=\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{R}$$

数学的準備1

Au=bの解uと第k回目の反復値$u^{(k)}$を用いて、誤差ベクトル$e^{(k)}$を

$$\boldsymbol{e}^{(k)} = \boldsymbol{u}^{(k)} - \boldsymbol{u}$$

と定義すると、次式である。

$$\boldsymbol{e}^{(k)} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{e}^{(k-1)} = \cdots = \boldsymbol{G}^{k}\boldsymbol{e}^{(0)} \quad k > 0$$

ノルムの性質と定理から

$$\left\|\boldsymbol{e}^{(k)}\right\| \le \left\|\boldsymbol{G}^{k}\right\| \cdot \left\|\boldsymbol{e}^{(0)}\right\| \quad k > 0$$

数学的準備2

行列Aに対する第k回の反復の平均収束率

$$R\left(A^{(k)}\right) = -\ln\left[\left(\left\|A^k\right\|\right)^{1/k}\right] = -\ln\frac{\left\|A^k\right\|}{k} \quad \left(\left\|A^k\right\| < 1\right)$$

また、$R(A^k)<R(B^k)$ならば、第k回目までの反復に対して「行列BはAよりも反復が早い」という。また、十分大きいkに対して

$$R_\infty(A) = \lim_{k\to\infty} R\left(A^k\right) = -\ln\rho(A)$$

なので漸近収束率$R_\infty(A)$はスペクトル半径$\rho(A)$から求めることができる。

誤差ノルム

Euclidノルム以外の誤差を評価するノルムとして、以下のものがあげられる。

ベクトル $x = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix}^T$ とするとき、

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \le i \le n} |x_i|$$

収束状況

uを真の解として第k回目の反復値を$u^{(k)}$として以下の式の誤差$e^{(k)}$をもって評価する。

$$\boldsymbol{e}^{(k)} = \left\| \frac{\boldsymbol{u}^{(k)} - \boldsymbol{u}}{\boldsymbol{u}} \right\|_\infty$$

収束を判定する規準として

$$\boldsymbol{e}^{(k)} < \varepsilon$$

とする。

Jacobi法１

連立一次方程式

$$\boldsymbol{Au} = \boldsymbol{b}$$

行列Aを次式のように分離する

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{E} - \boldsymbol{F}$$

ここで、$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{diag}\left(a_{11} \quad a_{22} \quad \cdots \quad a_{nn}\right)$ は対角行列である。E、FはAの主対角要素を境にしてAの要素に－符号をつけてそれぞれ下三角と上三角の行列である

Jacobi法2

モデル問題13における行列Aを分離する。

$$
\begin{pmatrix} 1 & -1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 & -1/2 \\ 0 & -1/2 & 1 \end{pmatrix}
= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
- \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}
- \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
$$

Au=bを分離すると次式のようになる。

$$
\boldsymbol{Du} = (\boldsymbol{E} + \boldsymbol{F})\boldsymbol{u} + \boldsymbol{b}
$$

Jacobi法3

uのi成分は

$$u_i^{(k+1)} = -\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} \left(a_{i,j} / a_{i,i}\right) u_j^{(k)} + b_i / a_{i,i}$$

この式を第k回目から第k+1回目へと順次反復させる。これを行列式で書くと

$$u^{(k+1)} = Gu^{(k)} + D^{-1}b$$

$$G = D^{-1}\left(E + F\right)$$

Jacobi法4

誤差ノルム

$$e_1 = \left\| u^{(k)} - u_E \right\|_\infty$$

$$e_2 = \left\| \left(u^{(k)} - u_E \right) / u_E \right\|_\infty$$

$$e_3 = \left\| \left(u^{(k)} - u^{(k-1)} \right) / u^{(k)} \right\|_\infty$$

$$e_4 = \left\| Au^{(k)} - b \right\|_2 / \left\| b \right\|_2$$

モデル問題12と15の係数行列

$$A_{12} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & 1 & 0 \\ -2 & 2 & 1 \end{pmatrix} \quad A_{12} = \begin{pmatrix} 5 & 1 & -3 \\ -1 & 3 & -1 \\ 2 & 1 & 4 \end{pmatrix} \longrightarrow$$

Program AUBIT

Gauss-Seidel法1

いま、$u_i^{(k+1)}$を求めるときに第k+1回目の反復値

$$u_i^{(k+1)} \quad (i = 1,2,\cdots,i-1)$$

はすでに計算が完了している。この変数値を$u_i^{(k+1)}$の計算に役立てたほうがよいと考えるのは自然である。この考えによって次式を書き換える。

$$u_i^{(k+1)} = -\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} \left(a_{i,j} / a_{i,i}\right) u_j^{(k)} + b_i / a_{i,i}$$

Gauss−Seidel法2

すると

$$a_{i,i}u_i^{(k+1)} = -\sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}u_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{i-1} a_{i,j}u_j^{(k)} + b_i \quad (1 \le i \le n)$$

これがGauss−Seidel法である。行列Aの分離を用いて、この式を行列形式に書くと

$$(D - E)u^{(k+1)} = Fu^{(k)} + b$$

となり、変形すると

$$u^{(k+1)} = \mathrm{L}_1 u^{(k)} + (D - E)^{-1} b, \quad \mathrm{L}_1 = (D - E)^{-1} F$$

ここで、$\mathcal{L}_1$ はGauss−Seidel行列と呼ばれる。

⟶ Program AUBIT

SOR法1

Gauss-Seidel法を書き、その左辺を仮の反復値 $\tilde{u}_i^{(k+1)}$ と見る。
すなわち、

$$a_{i,i}\tilde{u}_i^{(k+1)} = -\sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}u_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{i-1} a_{i,j}u_j^{(k)} + b_i$$

と定義する。反復値 $u_i^{(k+1)}$ は重みωとして

$$u_i^{(k+1)} = u_i^{(k)} + \omega\left[\tilde{u}_i^{(k+1)} - u_i^{(k)}\right]$$

あるいは変形して

$$u_i^{(k+1)} = (1-\omega)u_i^{(k)} + \omega\tilde{u}_i^{(k+1)}$$

ωは緩和係数と呼ばれる。

SOR法2

ω＞1を過緩和といい、ω＜1を不足緩和という。
上式から $\tilde{\boldsymbol{u}}_i^{(k+1)}$ を消去すると、

$$a_{i,i}u_i^{(k+1)} = a_{i,i}u_i^{(k)} + \omega\left[-\sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j}u_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j}u_j^{(k)} + b_i - a_{i,i}u_j^{(k)}\right]$$

この表現をSOR法という。行列Aを分離すると、この式のベクトル形式は

$$(\boldsymbol{D} - \omega)\boldsymbol{E}\boldsymbol{u}^{(k+1)} = [(1-\omega)\boldsymbol{D} + \omega\boldsymbol{F}]\boldsymbol{u}^{(k)} + \omega\boldsymbol{b}$$

である。

SOR法3

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{E}, \quad \boldsymbol{U} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{F}$$

と定義するとこの式は

$$\boldsymbol{u}^{(k+1)} = (\boldsymbol{1} - \omega\boldsymbol{L})^{-1}[(\boldsymbol{1} - \omega)\boldsymbol{I} + \omega\boldsymbol{U}]\boldsymbol{u}^{(k)} + \omega(\boldsymbol{1} - \omega\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b}$$

となる。この式を整理して、

$$\boldsymbol{u}^{(k+1)} = \mathrm{L}_{\omega}\boldsymbol{u}^{(k)} + \omega(\boldsymbol{1} - \omega\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b}$$

$$\mathrm{L}_{\omega} = (\boldsymbol{1} - \omega\boldsymbol{L})^{-1}[(\boldsymbol{1} - \omega)\boldsymbol{I} + \omega\boldsymbol{U}]$$

が反復法の行列形式による表現である。$\mathcal{L}_{\omega}$ はSOR行列と呼ばれ、$\mathcal{L}_{\omega=1}$ はGauss−Seidel行列を意味している。

SOR法4

$$a_{i,i}u_i^{(k+1)} = a_{i,i}u_i^{(k)} + \omega\left[-\sum_{j=1}^{i-1}a_{i,j}u_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n}a_{i,j}u_j^{(k)} + b_i - a_{i,i}u_j^{(k)}\right]$$

この式中において

$$R = D^{-1}\omega$$

とし、右辺第2項の[ ]の中の1，2，3項は

$$b - A\tilde{u}^{(k)}$$

とかける。こうすると上式は、

$$u^{(k+1)} = u^{(k)} + \omega\left[b - A\tilde{u}^{(k)}\right] \longrightarrow$$ Program SOR

よって、SOR法は残差修正法である。

系の制御

力学系の状態

$$\frac{dx}{dt} = Ax + Bu$$

$$x = \begin{pmatrix} x & \dot{x} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix}^T$$

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -\alpha \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 \\ \beta \end{pmatrix} \quad (\alpha = 1, \quad \beta = 1)$$

$$x(0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^T$$

⟶ Program OPTCON

終端値に到達するための入力1

評価関数

$$J = \frac{1}{2}\int \left(x^T Q x + R u^2 \right) dt$$

$$Q = \begin{pmatrix} 10^2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad R = 1$$

ここで、Q、Rは評価関数に含まれる重みである。この計算では投入エネルギーができるだけ小さくなるように状態x(t)を制御することを目的としている。

終端値に到達するための入力2

変分法の計算から操作uは次式のようになる。

$$U = Q^{-1} B^T P x$$

$$P = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix}$$

$$p_{11} = a\delta + \Delta\delta p_{22}, \quad \delta = \sqrt{q_{11} R} / \beta, \quad \Delta = \beta^2 / R$$

$$p_{12} = p_{21} = \delta$$

$$p_{22} = \left(-a + \sqrt{a^2 + \Delta\left(q22 + 2\delta\right)} \right) \ / \Delta$$

終端値に到達するための入力3

最短時間で到達するためのuを計算する。評価関数は

$$J = \int_0^t dt$$

操作uに次の制約を設ける。

$$|u| < u_m$$

制御の切り替え時間t_1と最短到達時間Tは

$$t_1 = \left(T + ax_0 / u_m\right)^2$$

$$T = -\frac{2}{a}\ln z, \quad z = \delta - \sqrt{\delta^2 - 1} > 0$$

$$\delta = e^{\alpha\gamma}, \quad \gamma = \alpha x_0 / 2\beta u_m$$

モデル問題13

$$\boldsymbol{u} = (u_1 \quad u_2 \quad u_3)^T$$

としてこの問題を再び書くと次式である。

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{b}$$

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

これを解くと、解は次式のようになる。

$$\boldsymbol{u} = (1 \quad 2 \quad 3)^T$$

Jacobi行列のスペクトル半径

Jacobi法

$$\boldsymbol{I}\boldsymbol{u}^{(k+1)} = (\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})\boldsymbol{u}^{(k)} + \boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Jacobi行列の固有値μは

$$|\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}-\mu\boldsymbol{I}| = -\mu^3 + \frac{1}{2}\mu = -\mu\left(\mu^2 - \frac{1}{2}\right) = 0, \quad \therefore \quad \mu = -\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}$$

スペクトル半径ρ(L+U)

$$\rho(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}) = \sqrt{2}/2 < 1$$

Gauss–Seidel行列のスペクトル半径1

反復法

$$\boldsymbol{u}^{(k+1)} = \mathrm{L}_1 \boldsymbol{u}^{(k)} + (\mathbf{1} - \boldsymbol{L})^{-1} \boldsymbol{b}$$

$$\mathrm{L}_1 = (\mathbf{1} - \boldsymbol{L})^{-1} \boldsymbol{U}$$

$$\mathbf{1} - \boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\mathbf{1} - \boldsymbol{L})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ 1/4 & 1/2 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathrm{L}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/4 & 1/2 \\ 0 & 1/8 & 1/4 \end{pmatrix}$$

Gauss−Seidel行列のスペクトル半径2

Gaus−Seidel行列の固有値は

$$\left|\mathrm{L}_1 - \lambda \boldsymbol{I}\right| = -\lambda^2\left(\lambda - \mathbf{1/2}\right) = \mathbf{0} \qquad \therefore \quad \lambda = \mathbf{0}, \quad \mathbf{1/2}$$

スペクトル半径ρ($\mathcal{L}_1$)

$$\rho\left(\mathrm{L}_1\right) = \mathbf{1/2 < 1}$$

また、

$$\rho\left(\mathrm{L}_1\right) < \rho\left(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}\right) < \mathbf{1}$$

なので、Gauss−Seidel法のほうがJacobi法よりも早い反復であることがわかる

SOR法のスペクトル半径1

反復法

$$\boldsymbol{u}^{(k+1)} = \mathrm{L}_{\omega}\boldsymbol{u}^{(k)} + \omega(\boldsymbol{I} - \omega\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{b}$$

$$\mathrm{L}_{\omega} = \omega(\boldsymbol{I} - \omega\boldsymbol{L})^{-1}[(\boldsymbol{I} - \omega)\boldsymbol{I} + \omega\boldsymbol{U}]$$

固有値

$$\left|\mathrm{L}_{\omega} - \lambda\boldsymbol{I}\right| = \boldsymbol{0}$$

しかし、この方法では固有値を計算するのは容易ではない。

SOR法のスペクトル半径2

そこで、この式を変形する。

$$\left|\left(I+\omega(U-I)\right)-\lambda\left(I-\omega L\right)\right|=0$$

$$\left|\left(U+\lambda L\right)-\frac{\lambda+\omega-1}{\omega}I\right|=0$$

第1項を修正して(αL+U/α)の形にする。

$$\left|\lambda^{1/2}\left(\lambda^{1/2}L+\lambda^{-1/2}U\right)-\frac{\lambda+\omega-1}{\omega}I\right|=0$$

数学的準備1

$$\begin{bmatrix} I_1 & F \\ G & I_2 \end{bmatrix} \quad (I_1, I_2 \text{は単位行列})$$

行列がこの条件を満たすとき、「この行列は2循環である」という。問題としている行列は

$$\begin{pmatrix} 1 & -1/2 & 0 \\ -1/2 & 1 & -1/2 \\ 0 & -1/2 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 & 1 \\ -1/2 & 1 & -1/2 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1/2 \\ 0 & 1 & 1 \\ -1/2 & -1/2 & 1 \end{pmatrix}$$

数学的準備2

もし、行列A=(1−L−U)が2循環であり、次の行列のすべての固有値がαに依存しないとき、

$$\alpha L + U/\alpha \quad (\alpha \neq 0)$$

Aは整合順序であるという。例えば次の行列

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 & 0 \\ -4 & 1 & -3 \\ 0 & -5 & 1 \end{pmatrix} = 1 - L - U$$

この行列は2循環行列である。

数学的準備3

固有値

$$\begin{pmatrix} -\lambda & 2/\alpha & 0 \\ 4\alpha & -\lambda & 3/\alpha \\ 0 & 5\alpha & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda\left(\lambda^2 - 23\right) = 0$$

$$\therefore \quad \lambda = \pm\sqrt{23}, 0$$

固有値はaに依存せず、したがってこの行列は2循環であり、かつ整合順序である

SOR法のスペクトル半径3

$$\left| \lambda^{1/2}\left(\lambda^{1/2}\boldsymbol{L}+\lambda^{-1/2}\boldsymbol{U}\right)-\frac{\lambda+\omega-1}{\omega}\boldsymbol{I} \right| = 0$$

この式を変形して、

$$\left| \left(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}\right)-\frac{\lambda+\omega-1}{\lambda^{1/2}\omega}\boldsymbol{I} \right| = 0$$

また、$\Lambda(\lambda)=(\lambda+\omega-1)/\lambda^{1/2}\omega$ とすると、

$$\left| \left(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U}\right)-\Lambda\boldsymbol{I} \right| = 0$$

したがって、ΛはJacobi行列L+Uの固有値と結びつく。

SOR法のスペクトル半径4

すなわち、

$$\mu = \frac{\lambda + \omega - 1}{\lambda^{1/2}\omega}$$

である。次の変域

$$0 \le \mu \le \rho(L+U) < 1$$

の範囲のμについて固有値を計算する。このために次の関数を定義する。

$$f_\omega(\lambda) = \frac{\lambda + \omega - 1}{\omega}$$

$$g(\lambda) = \mu\lambda^{1/2}$$

SOR法のスペクトル半径5

$\mu = (\lambda + \omega - 1)/\lambda^{1/2}\omega$ の式の根は

$$\lambda = \frac{1}{2}\mu^2\omega^2 - (\omega - 1) \pm \mu\omega\sqrt{\frac{1}{4}\mu^2\omega^2 - (\omega - 1)}$$

$f_\omega(\lambda)$と$g(\lambda)$の接点においては次の条件が成り立つ。

$$\frac{1}{4}\mu^2\omega^2 - \omega + 1 = 0 \qquad \therefore \quad \omega = \frac{2}{1 \mp \sqrt{1 - \mu^2}}$$

SOR法はGauss−Seidel法を含むので

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}} \quad (1 \le \omega \le 2)$$

を採用しなければならない。

SOR法のスペクトル半径6

$\omega_+ < \omega \le 2$ とすると、λは複素共役根となる。そのとき、λ^*を複素共益とすると

$$\lambda\lambda^* = (\omega - 1)^2$$

となる。つまり、

$$|\lambda| = \omega - 1 \quad (\omega_+ < \omega \le 2)$$

である。こうしてλ の最小値$\bar{\lambda}$ は

$$\bar{\lambda} = \omega_+ - 1$$

である。

SOR法のスペクトル半径7

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}}$$

この式のμは変域を　$(0 \le \mu \le \rho(L+U) < 1)$　とするJacobi行列の固有値である。また、

$$g(\lambda) = \mu \lambda^{1/2}$$

だから、μが最も大きい

$$g(\lambda) = \rho(L+U)\lambda^{1/2}$$

としたときに$f_\omega(\lambda)$と$g(\lambda)$の接点は原点に近くなる。

SOR法のスペクトル半径８

したがって、SOR行列のスペクトル半径の最小は、μが
Jacobi行列のスペクトル半径μ_0のときである。

$$\lambda_0 = \min_{\omega} \rho(\mathrm{L}_{\omega}) = \rho(\mathrm{L}_{\omega 0}) = \omega_b - 1$$

$$\therefore \quad \omega_b = \frac{2}{1+\sqrt{1-\mu_0^2}}$$

→ Program　SORCG