数理アルゴリズムとシミュレーション 演習課題 3

提出期限: 2020/10/29 23:59

以下の課題を行い，レポートを提出すること．レポートの作成に関しては，manaba の「演習課題」ページ内の項目をしっかりと確認すること．また，レポートの作成にあたって参考にした文献や Web ページはその出典を明示すること．

課題 1

(1-1) 行列 A を正定値対称行列とし，$\boldsymbol{x}^*$ を $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解とする．関数 $f(\boldsymbol{x})$ を

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

とする．零ベクトルでないベクトル $\boldsymbol{h}$ に対して，以下の不等式

$$f(\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{h}) > f(\boldsymbol{x}^*)$$

が成り立つことを示す．空欄に当てはまるものを選べ．

$$f(\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{h}) - f(\boldsymbol{x}^*) = \boxed{} > 0$$
$$\therefore f(\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{h}) > f(\boldsymbol{x}^*)$$

(a) $\frac{1}{2}(h, Ah)$ (b) $\frac{1}{2}(h, Ax^*)$ (c) $\frac{1}{2}(x^*, Ah)$ (d) $\frac{1}{2}(x^*, Ax^*)$

(1-2) 次の (1), (2) に当てはまるものをそれぞれ選べ．
ベクトル $\boldsymbol{x}_{k+1}$ は $\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k$ で与えられるとする．このとき, $\boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_k$ とすると,

$$f(\boldsymbol{x}_{k+1}) = \boxed{\quad (1) \quad}$$

となる．係数 α_k は, $f(\boldsymbol{x})$ を最小とするように設定するので,

$$\alpha_k = \boxed{\quad (2) \quad}$$

が導かれる．

(1)

(a) $\frac{1}{2}\alpha_k^2(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k) - \alpha_k(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{r}_k) + f(\boldsymbol{x}_k)$

(b) $\frac{1}{2}\alpha_k^2(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k) - \alpha_k(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k) + f(\boldsymbol{x}_k)$

(c) $\dfrac{1}{2}\alpha_k^2(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k) - \alpha_k(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k) + f(\boldsymbol{x}_k)$

(2)

(a) $\dfrac{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{r}_k, A\boldsymbol{p}_k)}$　(b) $\dfrac{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)}$　(c) $\dfrac{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}$　(d) $\dfrac{(\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{r}_k, A\boldsymbol{r}_k)}$

(1-3) 続いて, 式 $\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k$ から β_k を求めたい. $\boldsymbol{p}_k$ と $\boldsymbol{p}_{k+1}$ は互いに共役であることを利用して,

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

となるので, $\beta_k = \boxed{\quad (2) \quad}$ が導かれる. (1), (2) に当てはまるものをそれぞれ選べ.

(1)

(a) $(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{p}_k) + \beta_k(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)$　(b) $(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{p}_k) + \beta_k(\boldsymbol{r}_k, A\boldsymbol{r}_k)$

(c) $(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{r}_k) + \beta_k(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)$　(d) $(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{r}_k) + \beta_k(\boldsymbol{r}_k, A\boldsymbol{r}_k)$

(2)

(a) $-\dfrac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}$　(b) $-\dfrac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{r}_k, A\boldsymbol{r}_k)}$　(c) $-\dfrac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)}$　(d) $-\dfrac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{r}_k)}{(\boldsymbol{r}_k, A\boldsymbol{r}_k)}$

(次ページへ続く)

課題 2

ラプラス方程式の差分近似の式から，$n = 3$ のときの連立一次方程式の係数行列 A および右辺ベクトル $\boldsymbol{b}$ を図 1 を参考に作成し，$A, \boldsymbol{b}$ の各要素をレポートに示せ．このとき，求めたいベクトル $\boldsymbol{x}$ は以下のように表される．

$$\boldsymbol{x} = (u_{1,1}\ \ u_{1,2}\ \ u_{1,3}\ \ u_{2,1}\ \ u_{2,2}\ \ u_{2,3}\ \ u_{3,1}\ \ u_{3,2}\ \ u_{3,3})^{\mathrm{T}}$$

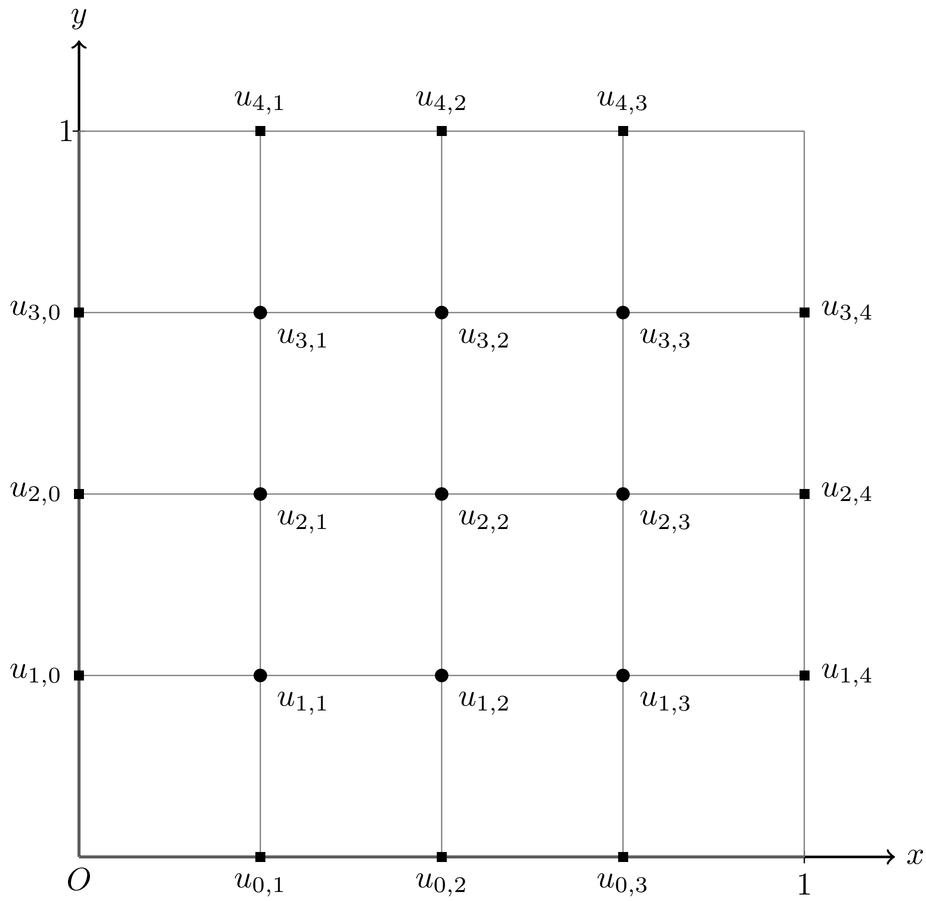

図 1　ラプラス方程式の離散化　$u_{i,j}$ を各格子点における関数 u の値とし，$u_{i,j} (1 \leq i, j \leq 3)$ は未知数，それ以外は境界条件である

(次ページへ続く)

課題 3

前回の課題 (演習課題 2 の課題 1) におけるラプラス方程式の差分近似を，連立一次方程式に置き換えたときの係数行列 A および右辺ベクトル $\boldsymbol{b}$ に対して，格子数 $n = 4, 50, 200$ としたとき，それぞれ以下の課題を行うこと．$A, \boldsymbol{b}$ の行列データのファイルは manaba に用意しているため，それをダウンロードして使用すること．$n = 4$ の場合，`load n_4` とすると，変数 $A, \boldsymbol{b}$ がワークスペースに読み込まれる．$n = 50, 200$ の場合も同様に `load n_50`，`load n_200` とすることで変数が読み込まれる．

(3-1) 連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く CG 法のプログラムを作成し，解を求めよ．ここで，初期ベクトル $\boldsymbol{x}_0$ は零ベクトルとし，$\boldsymbol{r}_k$ の 2 ノルムが 10^{-4} より小さくなったとき収束したと見なすこと．レポートには各反復ごとの $\boldsymbol{r}_k$ の 2 ノルムをグラフに示せ．グラフを作成する際は線形グラフ，片対数グラフ，両対数グラフのうちから適切なものを選択すること．なお，CG 法のアルゴリズムは manaba の「CG 法のアルゴリズム」を参照すること．

(3-2) (3-1) で求めた解 $\boldsymbol{x}$ を n 次正方行列に変換し，その値を MATLAB の関数 **surf** を用いてグラフに描き, 前回の課題 (演習課題 2 の課題 1) の図 1 と同じ結果になることを確認せよ．

課題 4

CG 法を用いてソースコード 1 で生成される行列 A と乱数ベクトル $\boldsymbol{b}$ からなる連立一次方程式を解け．このとき，収束条件は $\boldsymbol{r}_k$ の 2 ノルムが 10^{-8} より小さくなった時収束したとみなすこと．また，行列サイズ n を $n = 10, 11, \ldots, 100$ の間で変更し，収束までの反復回数をグラフに描画せよ．

ソースコード 1　行列を生成するプログラム

```
A = rand(n);
A = (A + A')/2;
A = A + 5*eye(n);
b = rand(n,1);
```