数値解析（松尾）　レポート　　2020 年 11 月 2 日

- 質問は `matsuo@mist.i.u-tokyo.ac.jp` まで．バグ等補足情報は ITC-LMS にて．
- **提出日： 11 月 16 日 (月) 正午（12:00）**．提出先：ITC-LMS.
- PDF ファイルひとつにまとめて提出.（複数のファイルをアップロードできるが，処理が大変なのでひとつの PDF にまとめてください.）
- 下記から **「★３つ分」** の問題を選択し解答せよ．★４つ分以上の組み合わせを選択しても差し支えないが，原則として成績には★３つ分しか参入されない．
- 計算機を使う場合, 計算環境（分かる範囲で良い；一般に数値解析論文で書かれるのは「CPU，メモリ量，OS，使ったプログラミング言語とそのバージョン」など）を付記すること．またプログラムコードを添付することが望ましい．

【手で解く問題】

(1) [★] 講義で説明した PCG 法が原型の CG 法から導出できることを説明せよ．例えば次の手順に沿って考えると良い．

1. 講義第 2.1 節資料 p.43 の記号で $\tilde{A} := S^{-1}AS^{-\top}$，$\tilde{x} := S^{\top}x$，$\tilde{b} := S^{-1}b$ とおき，$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ に対する原型の CG 法を書き下せ．
2. ここで $p_k := S^{-\top}\tilde{p}_k$, $r_k := S\tilde{r}_k$ と置き，変数をすべて "$\tilde{\cdot}$"（チルダ）なしのものに書き直せ．
3. さらにいくつか変数を置き換えるなどで講義資料 p.44 の PCG 法を導出せよ．

(2) [★] 講義で説明した（普通の線形代数の教科書に載っている）Gram–Schmidt の直交化は，計算機上では丸め誤差により直交性が十分担保されず，使うのであれば次の「修正 Gram–Schmidt 法」の方がよい．直交化すべきベクトルが，変数 $\{a_1, \ldots, a_n\}$ に代入された状態からスタートするとする．

for $j := 1, \ldots, n$ {
　$q_j := a_j / \|a_j\|$
　for $k := j+1, \ldots, n$ {
　　$a_k := a_k - (q_j, a_k) q_j$
　}
}

これが通常の Gram–Schmidt と同値である，すなわち,（丸め誤差がなければ）同じ $\{q_1, \ldots, q_n\}$ が生成されることを説明せよ．

（注）実際にこちらの方が優位であることをきちんと示すのは結構大変で，普通の線形計算の本にもあまり書いてない．興味がある人は "Accuracy and Stability of Numerical Algorithms," N. J. Higham, SIAM, 1996 などを参照．

(3) [★] 定常反復法の収束性（資料 p.37）のうち,「$\rho(H) < 1 \Rightarrow \forall x^{(0)} \in \mathbb{R}^n, \lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x$」は，縮小写像の原理を使っても示せる．これを示せ．

（参考：縮小写像の原理の表現例「X：Banach 空間，$M \subseteq X$：閉集合・非空，写像 $A : M \to M$：縮小写像（すなわち $\exists k \in [0,1)$，$\forall x, y \in M$，$\|Ax - Ay\| \le k\|x - y\|$）とする．このとき M には不動点 $x^\star$ が一意に存在し，それは（任意の初期点 $x^{(0)} \in M$ に対して）反復 $x^{(k+1)} = Ax^{(k)}$ で与えられる.」）

（ヒント：次の事実を使ってよい.「$\forall H \in \mathbb{R}^{n\times n}$，$\forall \varepsilon > 0$, $\exists \|\cdot\|$：行列の作用素ノルム，$\|A\| \le \rho(H) + \varepsilon$.」）

【自分でプログラムを書く計算問題】

(4) [★] 講義第１章で説明したように，無限級数和の計算時には「情報落ち」に注意が必要で，要求される精度によっては逆向きに加算をとる工夫が必要である．講義で提供しているサンプルプログラム（〜AccumulationError〜）を変形して，正しい和が計算できるようにせよ．

(5) [★★] LU 分解のプログラムを実装せよ（枢軸選択なしの版でよい；余力がある人は選択付き版を書いてもよい）．その上で，

1. 適当に与えた二，三の行列に対し正しく LU 分解が計算できることを確認せよ．(すなわち，$A = LU$（あるいは $PA = LU$）が成立していることを確認せよ．)
2. プログラムを，消去が一段進むごとにその段階での行列を出力するよう工夫し，具体的に次の行列について，一段ごとに消去（分解）が進む様子を示せ（この行列に対しては枢軸選択不要のはず）．

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 2 & 3 & -1 \\ 2 & 10 & -2 & 0 \\ -1 & 3 & 10 & 4 \\ 2 & -1 & 5 & 10 \end{pmatrix}.$$

(6) [★★] CG 法のプログラムを実装せよ（前処理なし版でよい）．その上で，いくつかの実対称正定値行列に対して実際に計算を行い，収束の様子を図示せよ（横軸：反復回数，縦軸：「残差」$= \|b - Ax^{(k)}\|$）．

(7) [★★] 次の２つの行列に対し初期ベクトル $(1, 1, 1)^\top$ から出発してべき乗法を適用せよ．結果はそれぞれどう解釈されるか．

$$A_1 = \begin{pmatrix} 10 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 4 \\ 0 & -2 & 2 \end{pmatrix}, \qquad A_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}.$$

注意：手（電卓）計算でやってもよい（大変なのでお薦めはしない）．そのときは整数性を保つためにベクトルを正規化しない方が楽．

【既存の関数・ライブラリを使う計算問題】

(8) [★★] 行列の条件数（真値）（⇔ 行列とその逆行列のノルム），およびその推定値を計算する関数（ライブラリ）の揃う計算環境を用意せよ．そこで様々な行列について条件数の「真値」と「推定ルーチンによる推定値」の計算を行い，推定がどの程度良いか，実験的に評価せよ．十分広範な行列例について実験できるよう，行列の用意の仕方にも可能な限り工夫すること．
（参考）MATLAB：`rcond`：1 乗ノルムに基づく条件数の推定値の逆数を返す．
Python：`scipy.linalg.lapack.dgecon` か？（松尾未確認；LAPACK の `dgecon` を Python から呼び出す wrapper）

(9) [★] 自分の使用している計算環境（QR 分解ルーチンの備わっているもの）で様々な大きさの正方行列を QR 分解し，計算時間の，行列の大きさ n に対する依存性を測定せよ．（参考）MATLAB：`qr`，Python：`scipy.linalg.qr` あるいは `numpy.linalg.qr`．Python における時間測定は `time` の模様（松尾未確認）．

（番外） 講義についての要望・感想等があったら，**ITC-LMS での提出時にコメント欄に**書いてください．

※有意な意見に対しては，「$+\varepsilon$ $(\varepsilon > 0)$」
※ ITC-LMS のコメント欄に書き切れない場合は，ITC-LMS で「レポートに意見を書きました」とコメントを付け，レポートの方に書いてください．
※即対応が望まれる要望はこれに依らず直接松尾に伝えてください．