

國立臺灣大學土木工程學系

碩士論文

Department of Civil Engineering

College of Engineering

National Taiwan University

Master Thesis



利用等模調整器求解病態線性系統之研究

The study of solving the ill-posed linear problem by
using the equilibrated conditioning method

陳又榛

Yu-Chen Chen

指導教授：劉進賢博士

Advisor: Chein-Shan Liu, Ph.D.

中華民國 102 年 7 月

July, 2013

口委審定書



國立臺灣大學碩士學位論文 口試委員會審定書

利用等模調整器求解病態線性系統之研究

The study of solving the ill-posed linear problem by using the
equilibrated conditioning method

本論文係陳又榛君 (r00521240) 在國立臺灣大學土木工程學系碩士班完成之碩士學位論文，於民國 102 年 7 月 11 日承下列考試委員審查通過及口試及格，特此證明

口試委員：

劉進賢

(指導教授)

張建仁

陳永為

呂良正

劉進賢

張建仁

陳永為

呂良正

系主任

誌謝



感謝劉老師當我研究上遇到困難時總是給我強大的幫助，毫無保留以及耐心地回答我所有不懂之問題，當我遇到挫折時，老師總是適時地給我勇往直前之推力，讓我得以順利完成研究，尤其特別感謝老師，當我沒自信以及練習時無法口條流利時，總是給我信心以及不厭其煩地告訴我哪裡需要改進，藉此，我才得以有不錯的表現。

感謝口試委員張老師以及陳老師，於口試時給予的建議以及溫馨的鼓勵，指正我論文中不足之處協助改進，使我的論文更加完善。

感謝研究團隊耿岑、康德、明鑫和廣興，當我研究遇到困難時，給我鼓勵以及安慰，讓我本該是困難艱辛的碩二時光充滿歡樂以及笑聲。

感謝學弟妹們於口試時期的幫助，使得口試得以圓滿落幕。

感謝我的父母、阿姨、姨爹、弟弟以及表弟，總是給我正向力量，並且體諒我總是不在家裡，當我在家時總是燒一桌滿滿我喜歡吃的菜，叮嚀我不要累壞，並且在我難過時，陪伴我身邊，給我滿滿地愛。

感謝我的男朋友，在我程式碼出現問題時不厭其煩地幫我找問題，在我心情低落時想辦法讓我開心，在我腦筋打結論文打不出來時給我建設性地建議。

感謝我的所有好朋友們，總是適時地給予我關心和幫助，讓我有更加勇往直前的動力。

感謝所有的人，這篇論文若沒有大家的鼓勵以及幫助是無法完成的，因為有你們，使得我的論文得以更加的完美。

中文摘要

本文之想法乃藉由簡易求得之調整器來改善病態線性系統 $Bx=b$ 中之給定矩陣 B 對於微小數值改變之敏感性，以達到數值解準確之結果，文章中將調整器分成兩類單側調整器以及雙側調整器，而任一種調整器當中又再因作用位置亦或是作用時機之差異又各有兩個調整器。

共軛梯度法於輕度病態之問題所求得之數值解，收斂速度快且準確性佳，因此本研究藉由不同調整器改善矩陣之病態程度，再使用共軛梯度法進行求解，由於目前並無任一調整器能夠適用於所有問題，本研究將藉由三個不同之正反算問題，來進行數值解比較，其中反算問題如反算柯西問題、反向熱傳導問題，正算問題則為線性希爾伯特問題。本研究藉由無網格法當中之基本解法將連續方程轉為線性方程以便於利用共軛梯度法求解。

不同調整器在面對正反算問題有不同之改善效果，於數值解誤差之改善或收斂速度之提升，可預期地，大部分之數值結果會較未經過任何調整器處理過就使用共軛梯度法進行求解之結果來得好。

關鍵字：病態線性系統、線性反算問題、共軛梯度法、基本解法、等模調整器、雙側調整器

Abstract

In order to get the accurate numerical solutions of ill-posed linear systems we propose an equilibrated conditioning method to reduce the condition number of the given matrix by a simple idea. In the thesis we proposed two kinds of the equilibrated conditioners; one-side equilibrated conditioner and two-side equilibrated conditioner, and for each kind we consider the different acting position or acting timing to generate two conditioners.

The conjugate gradient method(CGM) can get very well solution when the condition number is small; therefore, we try to use the different kind of conditioner to refine the ill-condition of the given matrix, and then use CGM to get the solution. We know that there is not any conditioner which is suitable for every problem, and we will use total three problems which include two inverse problems and one direct problem to verify our proposed methods, where Cauchy problem, Backward heat conduction problem and linear Hilbert problem to test them. We will discrete the problem into the linear system by using the method of fundamental solutions, which is one kind of meshless methods.

Different conditioners when facing various problems which can obtain different effects, decreasing the numerical error or accelerating the convergence speed.

Prospectively, most given matrix which is refined by conditioner which obtain the better numerical results than original one.

Key words: Ill-posed linear problem; Inverse problem; Conjugate gradient method; The method of fundamental solution; Equilibrated conditioner; Two-side conditioner.

目錄



口委審定書.....	i
誌謝.....	ii
中文摘要.....	iii
Abstract.....	iv
第一章 緒論.....	1
1.1 前言.....	1
1.2 文獻回顧.....	1
1.3 研究動機.....	3
1.4 論文結構.....	4
第二章 基礎理論.....	6
2.1 引言.....	6
2.2 數值穩定性.....	6
2.2.1 適定性問題(Well-posed problem)	6
2.2.2 病態問題(Ill-posed Problem)	7
2.3 條件數(Condition Number).....	8
2.4 正算、反算問題(Direct and Inverse Problem).....	9
2.5 無網格法(Meshless Method).....	10
2.5.1 基本解法 (The Method of Fundamental Solutions, MFS). 11	
2.6 共軛梯度法(Conjugate Gradient Method, CGM).....	12
2.6.1 牛頓法 (Newton's Method)	13
2.6.2 最速下降法(The Steepest Descent Method).....	14
2.6.3 共軛梯度法之演算法(Algorithms of CGM)	15
2.6.4 預處理共軛梯度法(Preconditioned CGM).....	17
2.6.5 矩陣之共軛梯度法(MCGM)	17

第三章	單側等模調整器之研究.....	23
3.1	前調整器(Preconditioning CGM, PreCGM).....	23
3.2	後調整器(Post-conditioning CGM, PostCGM)	25
3.3	數值算例.....	27
3.3.1	柯西問題(Inverse Cauchy Problem for Laplace equation) .	28
3.3.2	反向熱傳導問題(Backward Heat Conduction Problem)....	30
3.3.3	Linear Hilbert Problem	33
3.3.4	小結.....	37
第四章	雙側等模調整器之研究.....	54
4.1	雙邊調整器(Two-side conditioning CGM, TsCGM).....	55
4.2	前側雙邊調整器(Pre-conditioning CGM, PrCGM)	56
4.3	數值算例.....	57
4.3.1	反算柯西問題.....	57
4.3.2	反向熱傳導問題.....	61
4.3.3	Linear Hilbert Problem	63
4.4	調整器之比較.....	65
4.5	小結.....	66
第五章	結論.....	83
參考文獻	84

表目錄

Table 3.1 Hilbert 矩陣不同 n 之條件數	38
Table 3.2 $n=20$ Hilbert 矩陣不同噪音汙染下三種方法之結果比較.....	38
Table 4.1 $n=60$ Cauchy Problem 三種方法對應不同 D 之數值誤差與迭代步數 ...	67

圖目錄



Figure 2.1(A)病態問題未加入噪音之情形 (B)病態問題加入噪音之情形	20
Figure 2.2 (A)良置問題未加入噪音之情形 (B)良置問題加入噪音之情形	20
Figure 2.3(A)無網格法與(B)有網格法比較示意	20
Figure 2.4 牛頓法迭代過程示意圖	21
Figure 2.5 牛頓法對應不同初始猜值之迭代過程示意	21
Figure 2.6 最速下降法迭代過程示意圖	21
Figure 2.7 共軛梯度法迭代過程示意圖	22
Figure 3.1 $n=40$ Cauchy problem 數值解與真實解之比較	39
Figure 3.2 $n=40$ Cauchy Problem 三種方法之數值誤差	39
Figure 3.3 $n=40$ Cauchy Problem 三種方法之殘差與迭代步數關係圖	40
Figure 3.4 $n=120$ Cauchy Problem 數值解與真實解之比較	40
Figure 3.5 $n=120$ Cauchy Problem 三種方法之數值誤差比較	41
Figure 3.6 $n=120$ Cauchy Problem 三種方法之殘差與迭代步數關係圖	41
Figure 3.7 BHCP 源點佈設方式	42
Figure 3.8 $n=31$ BHCP 數值解與真實解之比較	42
Figure 3.9 $n=31$ BHCP 三種方法之數值誤差比較	43
Figure 3.10 $n=31$ BHCP 三種方法之殘差與迭代步數關係圖	43
Figure 3.11 $n=31$ BHCP PostCGM 與 PreCGM 之殘差與迭代步數關係圖	44
Figure 3.12 $n=71$ BHCP 數值解與真實解之比較	44
Figure 3.13 $n=71$ BHCP 三種方法之數值誤差比較	45
Figure 3.14 $n=71$ BHCP 三種方法之殘差與迭代步數關係圖	45
Figure 3.15 $n=71$ BHCP PostCGM 和 PreCGM 殘差與迭代步數關係圖	46
Figure 3.16 $n=20$ Hilbert 矩陣未加入噪音汙染之數值解與真實解之比較	46
Figure 3.17 $n=20$ Hilbert 矩陣未加入噪音汙染三種方法之數值誤差比較	47

Figure 3.18 $n=20$ Hilbert 矩陣未加入噪音汙染之殘差與迭代步數關係圖	47
Figure 3.19 $n=20$ Hilbert 矩陣之數值解與真實解之比較	48
Figure 3.20 $n=20$ Hilbert 矩陣三種方法之數值誤差比較	48
Figure 3.21 $n=20$ Hilbert 矩陣之殘差與迭代步數關係圖	49
Figure 3.22 $n=80$ Hilbert 矩陣之數值解與真實解之比較	49
Figure 3.23 $n=80$ Hilbert 矩陣三種方法之數值誤差比較	50
Figure 3.24 $n=80$ Hilbert 矩陣之殘差與迭代步數關係圖	50
Figure 3.25 $n=20$ Hilbert 矩陣受噪音汙染 $\sigma=0.01$ 之數值解與真實解之比較	51
Figure 3.26 $n=20$ Hilbert 矩陣受噪音汙染 $\sigma=10^{-4}$ 之數值解與真實解之比較	51
Figure 3.27 $n=20$ Hilbert 矩陣不同噪音汙染下 CGM 之數值誤差比較	52
Figure 3.28 $n=20$ Hilbert 矩陣不同噪音汙染下 PostCGM 之數值誤差比較	52
Figure 3.29 $n=20$ Hilbert 矩陣不同噪音汙染下 PreCGM 之數值誤差比較	53
Figure 4.1 $n=40$ Cauchy problem 數值解與真實解之比較	68
Figure 4.2 $n=40$ Cauchy Problem 三種方法數值誤差比較	68
Figure 4.3 $n=40$ Cauchy problem 三種方法之殘差與迭代步數關係圖	69
Figure 4.4 $n=120$ Cauchy problem 數值解與真實解之比較	69
Figure 4.5 $n=120$ Cauchy Problem 三種方法數值誤差比較	70
Figure 4.6 $n=120$ Cauchy problem 三種方法之殘差與迭代步數關係圖	70
Figure 4.7 三種方法之偏移量、最大誤差與收斂步數之三相圖	71
Figure 4.8 $n=31$ BHCP 數值解與真實解之比較	71
Figure 4.9 $n=31$ BHCP 三種方法之數值誤差比較	72
Figure 4.10 $n=31$ BHCP 三種方法之殘差與迭代步數關係圖	72
Figure 4.11 $n=31$ BHCP TsCGM 和 PrCGM 之殘差與迭代步數關係圖	73
Figure 4.12 $n=71$ BHCP 數值解與真實解之比較	73
Figure 4.13 $n=71$ BHCP 三種方法之數值誤差比較	74
Figure 4.14 $n=71$ BHCP 三種方法之殘差與迭代步數關係圖	74

Figure 4.15 $n=71$ BHCP TsCGM 和 PrCGM 之殘差與迭代步數關係圖	75
Figure 4.16 $n=20$ Hilbert 矩陣未加入噪音之數值解與真實解比較	75
Figure 4.17 $n=20$ Hilbert 矩陣未加入噪音三種方法之數值誤差比較	76
Figure 4.18 $n=20$ Hilbert 矩陣未加入噪音三種方法之殘差與迭代步數關係圖	76
Figure 4.19 $n=50$ Hilbert 矩陣加入噪音之數值解與真實解比較	77
Figure 4.20 $n=50$ Hilbert 矩陣加入噪音三種方法之數值誤差比較	77
Figure 4.21 $n=50$ Hilbert 矩陣加入噪音之殘差與迭代步數關係圖	78
Figure 4.22 $n=100$ Hilbert 矩陣加入噪音之數值解與真實解比較	78
Figure 4.23 $n=100$ Hilbert 矩陣加入噪音三種方法之數值誤差比較	79
Figure 4.24 $n=100$ Hilbert 矩陣加入噪音之殘差與迭代步數關係圖	79
Figure 4.25 $n=300$ Hilbert 矩陣加入噪音之數值解與真實解比較	80
Figure 4.26 $n=300$ Hilbert 矩陣加入噪音三種方法之數值誤差比較	80
Figure 4.27 $n=300$ Hilbert 矩陣加入噪音之數值解與真實解比較	81
Figure 4.28 $n=160$ Cauchy Problem 五種方法之數值誤差比較	81
Figure 4.29 $n=57$ BHCP 五種方法之數值誤差比較	82
Figure 4.30 $n=50$ Hilbert 矩陣加入噪音五種方法之數值誤差比較	82

第一章 緒論



1.1 前言

結構工程當中需將可能發生之物理現象進行定量化分析以評估設計是否適宜，一般將之歸納成為數學模型來模擬力學行為，其中最常使用微分方程及線性代數。例如熱傳導方程即為一重要之偏微分方程，用來描述一區域內之溫度隨時間而改變之情形，生活中有許多物理和力學的問題都可以歸納成熱傳導方程來求解，亦或是某些難解之題目轉成熱傳導方程來進行解析解之求得。當一簡支梁受力可利用微分方程描述其變形與位移，以推估可能產生之問題。

台灣處地震頻繁之地，於結構設計上需將其影響視為一重要考量，面對地震之未知性，若每次皆利用試驗來確認結構設計是否安全，其所需投入之時間與金錢是不符合效益的，因此須借助專業人員的經驗以及採用數學模型所得之動力資料，來設計出更安全的結構。

科技的進步，造就現在方便的社會。而計算機的發明使線性代數打破了純理論的侷限，將線性代數與計算機結合的數值計算造福許多工程人員，並應用至其他各領域。一般小問題只需將力學行為模擬成數學形式並利用計算機即可求得解。然而實際工程之技術問題常因物體形狀不規則及材料幾何非線性，導致數學問題過於複雜而難以求得真實解，藉助數值計算的方法是必要地。但是若同時考慮到噪音汙染可能會造成數值解與真實解差異過大，對於結構設計是相當危險地，於是本研究發展出一套針對線性病態系統的新演算法，以更有效率地求得更具精確性的數值解。

1.2 文獻回顧

如何求得方程式之解不論於數學或工程領域皆為眾所關心之重要議題。土木工程乃一民生工程，不容許任何錯估，工程問題上 $F(x)=0$ 可能是一高維度且高度病態的問題，所得之數值解不一定正確更甚是找不到閉合解。面對工程問題本

研究為方便使用演算法進行計算多採用線性方程組之形式來進行求解：

$$Bx = b \quad (1.1)$$

目的為其可將複雜之連續方程轉成較簡易求解的離散方程，求解線性方程組若直接利用 $x = B^{-1}b$ 來求解，由於所待求之工程問題多為病態問題，其中輸入向量可能受噪音污染而產生誤差，將因 B^{-1} 而造成誤差的放大，使其所求得之數值解準確性待商榷，另一方面，面對高維度的問題， B^{-1} 是非常不容易求得的。

一般求解線性方程之方法可分為直接法以及迭代法。直接法被廣泛地運用在 B 矩陣維度不大時，高斯消去法即為直接法的一種。當問題為複雜且未知數量龐大之方程組，迭代法之使用較為簡單且靈活，相較於直接法迭代法可有效率地使用電腦執行演算。由於工程中須面對之問題具高度病態性，迭代法也可能遇到失敗的情形而導致無法求得精確的數值解，因此進行適當的預處理程序係必要的。一般會採用正則化方法如 Tikhonov 正則方法或是引入調整器來做為改良之工具。正則化的想法是利用一與原方程相似之良置問題之解去逼近得病態問題的解，Tikhonov 正則法為將(1.1)改成：

$$(B^T B + \alpha I)x = B^T b \quad (1.2)$$

其中 α 是正則參數， $(B^T B + \alpha I)$ 即為將原 B 矩陣進行正則化處理所得結果。而 Tikhonov 正則法由於在等號左邊加入一個 αx 使得原方程遭受干擾而變為一新的方程之求解問題，因此 α 必須為適當的數值以及足夠微小使得新方程與原方程之差異不大。此方法中 α 扮演了很重要的角色，若選擇不適當將導致病態問題之求解發生困難，並失去了正則化處理的意義。本研究希望將原方程進行簡易之預處理即可進行求解而利用調整器來進行求解，有一優點即為不用改變原先的方程。因此本論文將研究對於改善矩陣效果佳之調整器，然而並非所有調整器都可達到減少收斂步數之要求，根據(Benzi 2002)所提出，一個好調整器須具備以下兩項特質：

1. 調整器需容易求解

2. 建立調整器需便宜且易取得的

於分裂法(*Splitting method*)中，假設 $B = M - N$ ，並將之與迭代法結合：

$$X_{k+1} = X_k + M^{-1}(b - BX_k) \quad (1.3)$$

其中， M^{-1} 所扮演的角色即為前調整器， M 和 B 相似度越高則收斂速度將越快，而一最簡單且最自然的調整器選擇即為取 B 矩陣之對角線數值作為調整器，如雅克比法(*Jacobi Method*)：

$$M(i, j) = \begin{cases} B_{ij}, i = j \\ 0 \end{cases} \quad (1.4)$$

然而，此法雖然簡單，且於某些問題上確實達到收斂速度變快之要求，但當面對系統較複雜時，收斂步數與未加調整器之演算法相比並無顯著差別。調整器的目的在於使矩陣之條件數降低，減少矩陣病態程度，以達到求解較易之目的。雅克比法對於簡單的矩陣有助益的效果，但工程上需面對的是病態程度非常高之問題，因此雅克比法並不適合。本研究將根據其簡單求得且調整器為對角矩陣之特性，發展更適合之方法。

於1960年代，(Bauer 1963)和(Sluis 1969)提出了理想縮放矩陣以達到條件數降低之目的，他們將矩陣中每一列之數值調整比例使其 L^1 模長皆為一，亦即利用等模長之觀念來降低條件數，也確實達到降低之效果，且(Vajargah and Moradi 2012)亦提出利用兩可逆之對角矩陣來作為調整器，有別於單一側的調整器，他們將兩矩陣以前調整器及後調整器同時作用於 B 矩陣上，以達到大幅降低條件數之目的。迭代法中，本研究可知其收斂速度與條件數呈正相關，因此於本篇論文中本研究將根據以上觀念加以發揚至病態問題的求解上使得收斂速度與準確度上昇。

1.3 研究動機

數值計算中有許多不同種之演算法，收斂速度快且所求數值解準確乃是本研究心中最佳演算法的條件。即便再好的演算法當所面對的問題本身屬不穩定者，

演算法亦可能造成求解失敗。工程問題為高度病態問題，常因微小的干擾或是計算上的偶然誤差導致數值解之不可信任，若輕忽此問題將可能造成財務以及生命的損失。為避免此問題之發生，本研究希望藉由調整器改良問題本身之病態程度，減少對微小干擾之敏感度，降低問題本身之不穩定性，再使用演算法進行求解，以達到收斂速度加快以及數值解較準確之目標。

1.4 論文結構

本論文分成五大章節，其內容簡述如下：

第一章 緒論

主要介紹本篇論文之背景，說明研究動機以及於文獻回顧中將介紹許多研究學者對於求解線性病態問題以及調整器之貢獻，以作為本篇論文之研究基礎，接著則為本論文中各章節之架構安排。

第二章 理論基礎

介紹作為本篇論文基礎所使用到之理論，首先介紹本文之重點何謂病態問題，以及用來判斷矩陣病態程度的條件數之求法。由於本研究將會利用三個正反算問題來做為驗證調整器是否確實作用之數值算例，因此於本章節亦會詳細介紹其定義及此兩種問題之差別，如何將一連續的問題轉為離散的線性方程組亦是一門學問，本研究使用無網格法中之基本解法來進行離散化之動作。何謂無網格法本研究將簡介其歷史並與有網格法進行優缺點之比較、基本解法之基本想法和理論推導。最後則為本論文所使用之迭代方法-共軛梯度法，由於共軛梯度法乃是最速下降法之改良且同時具備牛頓法之優點，因此本研究亦會著墨一點於此兩演算法上。

第三章 單側等模調整器之研究

此章節與下一章節為本篇論文之研究精華，於此章節中本研究採等模長之方法來求得調整器，根據其作用位置不同分為前調整器以及後調整器，利用此兩調整器對高度病態之矩陣進行預處理以改善其病態程度，再利用共軛梯度法進行求

解，本研究用三個算例來驗證其改善效果，將根據數值解之準確性以及收斂速度來與為經過調整器處理之共軛梯度法所求得數值解進行比較。

第四章 雙側等模調整器之研究

調整器的目的是為了降低條件數至最低，因此本研究採用等模長之觀念來求得調整器，然而此法並未能確實將條件數降至最低。所以本研究將利用一系列之連續預處理動作來求得調整器，有別於單側調整器，雙側調整器是將前調整器和後調整器同時引入矩陣之預處理當中，並根據前調整器之作用時機不同分成雙邊調整器以及前側雙邊調整器。同樣地將經由調整器處理過後矩陣再使用共軛梯度法結合球出數值解並與原始之矩陣所得之數值解進行準確性和收斂速度之比較，驗證此兩調整器之可行性。

第五章 結論和未來展望

本研究所需改進之處和未來展望。

第二章 基礎理論



2.1 引言

求得病態線性問題之解在工程界中是個重要的議題，一般工程上將可能遇到之物理問題於合理的假設下歸納成為一數學問題，然而現實之情況多為連續性問題，本研究將使用無網格法中之基本解法將連續方程離散化為較簡易求解之線性方程組。本研究中將使用不同演算法來求得病態線性方程組之解：

$$Bx = b \quad (2.1)$$

其中 $B \in R^{n \times n}$ 是一給定矩陣(一般為非對稱係數矩陣)， $x \in R^n$ 為未知向量， $b \in R^n$ 是輸入向量(可能遭受噪音汙染)。

然而利用數值方法計算出來的解雖為近似值但亦是理想情況下之解，於實際情況下可能會因為人為的失誤，儀器不準確，天氣之影響使得給定矩陣 B 以及輸入向量 b 產生誤差，實際上 b 鮮少給定確切值，且噪音汙染乃一不可避免之誤差，因此當 B 為一病態矩陣且 b 受噪音汙染時，將遇到所求之解與真實情況差異過大的問題，但其失真並非計算問題所造成的乃因本身之問題導致，因此稱此為病態問題。於本章節中將詳細介紹何謂病態問題以及造成其對數值如此敏感之原因。

2.2 數值穩定性

2.2.1 適定性問題(Well-posed problem)

由哈達瑪(Jacques Solomon Hadamard)所提出，認為滿足物理現象之數學模型均需滿足以下特質：

- 解的存在性
- 解的唯一性
- 解的穩定性

若不滿足以上任一條件者稱之為病態問題(Ill-posed Problem)，反之，同時滿足條件者即為良置問題(Well-posed Problem)。

2.2.2 病態問題(III-posed Problem)

由於病態問題受到一極微小擾動時會造成解劇烈變化，使得無法令人信任其計算結果，在思考如何解決問題前本研究先利用一個例子來說明何謂病態問題：

$$\begin{bmatrix} 2 & 6 \\ 2 & 6.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 8.0001 \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

尚未加入微小擾動前， $[x \ y]^T = [1 \ 1]^T$ 。接著於輸入向量中加入微小擾動：

$$\begin{bmatrix} 2 & 6 \\ 2 & 6.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 8.001 \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

加入擾動過後， $[x \ y]^T = [-26 \ 10]^T$ ，與未加入擾動前所得之結果相差甚大，直觀上會認為輸入向量僅改變些許，數值解應該也相差不遠。實際上，病態問題於受擾動前以及受擾動後所得之解改變卻甚大，是因為病態問題對於數值改變極為敏感，這也是為何病態問題之數值解是不被信任的。本研究將(2.2)式和(2.3)式畫成圖，使大家更了解為何病態問題對數值如此敏感：

求解二元一次方程組，兩條線交點即為所求，由 Figure 2.1 和 Figure 2.2 可以發現病態問題之兩條方程為幾近重疊的兩條線，當受到噪音汙染時任一條直線稍上下平移，交點的位置明顯地改變，而若為良置問題，兩條線分開明確，當受到噪音汙染時，平移一些，兩條線之交點亦改變一點而已。於工程計算上龐大的數據量不可能一一去確認數值解之正確性，一般數值計算中常使用殘差分析來確認數值解是否接近真值，殘差(Residual Error)之定義：

$$e = b - Bx \quad (2.4)$$

將上面例子之解假設為數值解，於下列方程加以解釋：

$$\begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 8.0001 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2 & 6 \\ 2 & 6.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -26 \\ 10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -0.001 \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

由(2.5)式可知，殘差僅-0.001，而合理地認為數值解誤差至多 ± 0.001 ，這也是病態問題中一危險特性。為了避免因殘差之合理導致數值解錯誤的使用，本研究將

引入另一判別病態問題之方法，也就是條件數(condition number)之概念，條件數可用來度量矩陣之穩定性以及敏感度，亦可用來判定病態程度，當一矩陣條件數甚大時，判定為病態問題，反之則為良置問題，關於條件數之定義以及如何求得將在下一節中詳細介紹。

2.3 條件數(Condition Number)

由給定矩陣 B 之條件數來判定此矩陣是否為病態，以了解所求得之數值解是否可靠，條件數之定義：

$$\text{Cond}(B) = \|B\|_F \|B^{-1}\|_F \quad (2.6)$$

$\|B\|_F$ 為 B 之弗洛貝尼烏斯範數(Frobenius norm)， $\|B\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n B_{ij}^2}$ 。矩陣範數為

向量範數之推廣，是一種估算矩陣數值大小之方法。

對於任何矩陣範數，存在著 $\rho(B) \leq \|B\|$ ，其中 $\rho(B)$ 即為 B 之譜半徑，定義為 B 之最大絕對特徵值。豪斯霍爾德(Householder)的理論中指出，對任何 $\varepsilon > 0$ 及 B 矩陣，存在一矩陣範數以致 $\rho(B) \leq \|B\| \leq \rho(B) + \varepsilon$ ，因此譜條件數 $\rho(B)\rho(B^{-1})$ 可以用來估算 B 之條件數，可將(2.6)改寫成：

$$\text{Cond}(B) = \frac{\max_{\sigma(B)} |\lambda|}{\min_{\sigma(B)} |\lambda|} \quad (2.7)$$

$\sigma(B)$ 為 B 矩陣特徵值的集合。

若一線性方程 $Bx = b$ 中， $B^T = B^{-1}$ 即為正交矩陣，則 $|\lambda_1| = |\lambda_2| = \dots = |\lambda_n| = 1$ ，帶入(2.7)式可發現條件數即為 1，由此可知正交矩陣具有最佳數值穩定性，因此，當矩陣之特徵值集合越接近 1 則矩陣之數值穩定性越高，反之當特徵值分布越遠離 1，或越接近 0，其條件數越高矩陣越病態。調整器的引入可以改善矩陣之條

件數，其原理為調整器可提高特徵值之極小值，代入(2.7)式中可知條件數會降低有助於改善矩陣之病態性，然而並非所有調整器都具備改善條件數之效果有些較差之調整器甚至會導致矩陣病態性的惡化。

2.4 正算、反算問題(Direct and Inverse Problem)

反算問題於科學界以及工程上越來越被關注，一般對於反算問題之了解即為藉由觀察到的結果反推求其來源，亦即由果求因，反之即為正算問題，下面將詳細定義正算以及反算問題。

根據(Kubo 1988)中提到若滿足以下所有條件者稱之為正算問題：

- 已知控制方程相關之材料性質
- 已知場域內力情形
- 邊界條件以及初始值資料充足
- 已知場域
- 已知場域之控制方程

正算問題可以藉由傳統的數值方法求得，像是有限差分法、邊界元素法或有限元素法。若是不滿足上面任一條件，即稱之為反算問題，目前尚未有一通用的方法可用來求解反算問題，由於反算問題之種類很廣泛，因此當要求解反算問題時，需先求解正算問題，再將反算問題視為一內差過程。

反算問題的種類如下：

- 缺少材料性質之反算問題

當已知場域中之控制方程卻無法得知其內部材料的特性，如進行開挖工程時土壤性質之推求。

- 缺少內力資料之反算問題

這類的問題於土木工程中常會遇到，例如：大地工程中求地盤反力，藉由量測應變推求其點之應力。

- 缺少充足邊界條件及初始值資料之反算問題

此種問題於已知的邊界條件上分成兩種，一種是任何邊界條件皆未給，另一種則是給過定的邊界條件(勢位能)，。

- 缺少場域之反算問題

即控制方程表示之定義域不明確，幾何形狀場域無法確定，例如：設計最佳尺寸。

- 缺少控制方程之反算問題

此多為系統之辨識問題，因為數學模型無法完全模擬出完整的力學行為，因此探討的方向或假設的不同，即會造成所求得之控制方程不同。

反算問題之起步遠較正算問題來的晚，目前還尚未成熟，反算問題多較正算問題來的難，因反算問題多為病態問題。由上一節可知道若不同時滿足適定性條件者則為病態問題，本研究將分別探討其三種條件之不滿足的原因：

- 存在性：可能因為噪音汙染導致原本欲求的問題即為錯誤，因此所求之解可能為無解。
- 唯一性：反算問題有解，然而可能因量測誤差而導致解有多個甚至無窮多解，需要檢查並剔除不合理之數值解。
- 穩定性：藉由觀測到的物理行為，利用數值計算，反推求造成物理現象之原因是反算問題的精髓。若觀測時因噪音干擾或是累積誤差導致數值解之不穩定，此類的問題是數值計算上常會遇到的，亦是最需要關切的。

2.5 無網格法(Meshless Method)

將連續方程離散化一般多使用有限元素法，其通用性以及靈活性在工程界廣泛地使用，由於有限元素法是一將連續體劃分為多個小網格組成的離散結構，因此當分析涉及變形太大或是奇異性問題會有求解上的困難，如複雜的三維問題網格之生成、大變形問題所產生之網格畸變、與時間相關問題需要反覆重新分劃網格之問題等，以上這些問題不僅耗時且耗費金錢，更甚是造成分析失敗。

有限元素法之不足之處，造就無網格法的出現，其目的是為將造成有限元素法失敗之網格去除掉。無網格法起源於 1970 年代，1977 年 Lucy 和 Monaghan

以及 Gingold 發展了一套利用拉格朗日法去模擬天體物理學問題的方法，叫做光滑粒子動力學(Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH)。1991 年由 Nayroles 和 Touzot 研究的擴散元素法(Diffuse Element Method, DEM)為第一個根據迦遼金法(Galerkin Method)所發展，也是此法的發表激發大家對無網格法研究之興趣，1994 年 Belytschko 改善 DEM 之問題發展出元素釋放法(Element-Free Galerkin Method, EFGM)，EFGM 可應用於許多不同類的問題，像是波傳問題、流體力學問題以及裂縫擴展等。此法現為無網格法中一常被使用的方法，因它可以求解任何形狀之問題僅需具有節點資料即可，此為無網格法的優點之一，其他像是對於求解 2D 和 3D 問題之方法類似，其公式中不含數值積分，以及無網格法易於學習和識別，最重要的是它可省去許多功夫和金錢於計算上如劃分網格這個步驟上。

Figure 2.3 為同一問題使用網格法和無網格法之比較，目前無網格法之研究重點乃是應用無網格法實際求解科學以及工程上之問題，如最近新興的科學技術：生命科學、奈米技術等，也可以應用於傳統方法不易解決的問題，如裂紋問題、大變形問題、碰撞問題、高速爆炸問題等。關於無網格法之特性和歷史有初步了解，接下來將介紹基本解法之理論。

2.5.1 基本解法 (The Method of Fundamental Solutions, MFS)

基本解法於邊界值問題之數值求解於近十年受到廣泛關注，其耗費較少計算量卻可達到卓越之結果是此法一大特點。根據(Alves 2009)提到對於求解拉普拉斯方程時於完成時間和解之精確性之比較，無他法比基本解法有更完美之結果，然而基本解法有一目前尚無法解決的問題，即為基本解法無法同時得到精確解和好的條件數，若想要保有解之精確性則離散化後之矩陣可能為病態的，反之則可能會造成解的不精確性。因此一般使用此法將不刻意去追求較低條件數，源點之選擇是影響基本解法所求之解穩定性的最大原因，源點設置的自由性造就基本解法對於多種問題之通用性，但若將源點佈設於物理邊界內，將可能造成基本解之奇異性而導致矩陣不可逆或線性相關之特性，如此情形即屬於不佳之源點設置，

而不同問題亦有其適當之源點設置方式，其所需仰賴研究者之嘗試或前人之努力及經驗，接下來介紹基本解法之理論推導。

根據(Fairweather and Karageorghis 1998)，考慮一邊界值問題其控制方程為：

$$Lu(x) = 0, x \in \Omega \quad (2.8)$$

Ω 為邊界值域， L 為偏微分算子，當對應不同算子本研究將會有不同的基本解 Φ 。

$$L\Phi(x, y) = \delta(x - y) \quad (2.9)$$

δ 為單位脈衝函數， Φ 可定義於任何位置除了 $x = y$ 時為奇異，因此 y 稱之為基本解之奇異點。而近似的數值解 u_n 為基本解之線性組合。

$$u_n(x) = \sum_{j=1}^n c_j \Phi(x, y_j) \quad (2.10)$$

接著再使用給定邊界值求出係數矩陣，本文中將使用共軛梯度法執行求解之動作，而關於反算柯西問題以及反向熱傳方程之基本解將於下一章節詳細介紹之。

2.6 共軛梯度法(Conjugate Gradient Method, CGM)

共軛梯度法最早由 Hastenes 和 Stiefle 於 1952 年為求正定係數矩陣線性方程所提出，1964 年 Fletcher 和 Reeves 將此方法推廣至非線性最優化，得到求解函數極小值之共軛梯度法，亦有許多學者提出不同改良公式，像是 Herstenes-Stiefel 公式，Fletcher-Reeves 公式和 Polak-Ribiere 公式。本研究將採用 Fletcher-Reeves 公式進行計算。

由於使用共軛梯度法之前提為給定矩陣 B 需為正定且對稱之矩陣，因此本研究將(2.1)式改為(2.11)式：

$$Cx = b_1 \quad (2.11)$$

其中 $C = B^T B$ 而 $b_1 = B^T b$ 。

共軛梯度法之理論是結合最速下降法之簡易計算過程和牛頓法之二次收斂

性做進一步改良，克服最速下降法收斂速度慢又免除牛頓法需要大量儲存空間之缺點。接下來將分別介紹牛頓法、最速下降法以及共軛梯度法之演算步驟。



2.6.1 牛頓法 (Newton's Method)

牛頓法是一簡單且廣為通用於求解代數方程之數值方法。

首先本研究假設一待求解線性方程 $F(x)=0$ ， x_0 為初始猜值而 x_s 為方程的解，

將方程於 x_0 處進行泰勒展開並省略高階項如(2.12)式：

$$0 \approx F(x_0) + F'(x_0)(x_s - x_0) \quad (2.12)$$

$$F'(x_0)(x_s - x_0) \approx -F(x_0) \quad (2.13)$$

假定

$$F'(x) \neq 0 \quad (2.14)$$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{F(x_k)}{F'(x_k)}, k = 0, 1, \dots \quad (2.15)$$

由 Figure 2.4 可以知道牛頓法是根據一階導數的方向來找尋下一個更接近真實解之近似值，而下一個近似解會比前一個更接近真實解，慢慢逼近真實解，牛頓法之原理很簡單，但是其卻對初始猜值依賴性很高，由 Figure 2.5 可以發現不同初始猜值可能造成收斂或是發散不同之結果，所以當初始猜值與待求之解很相近時牛頓法會快速收斂，若初始猜值毫無根據的亂猜測可能會導致龐大的收斂步數，此為牛頓法的缺點之一。牛頓法之發散也會發生於 $F'(x)=0$ 或是 $F'(x) \rightarrow 0$ ，如此一階導數則會趨近於平行 x 軸致使無法收斂。

牛頓法亦可用於求解高維度非線性問題，然而需要泰勒展開至二階導數且當矩陣甚大時，雅可比矩陣需龐大之計算空間量，以及其逆矩陣得到之困難性也是使用牛頓法所面臨的問題之一。

2.6.2 最速下降法(The Steepest Descent Method)

最速下降法亦有人稱之為梯度法，是一算法簡單不需大量計算空間且不會過度依賴初始猜值之好方法，因此於數值計算中亦被廣為使用。最速下降法之基本原理為建立於求解線性系統之極小值上，其給定矩陣需為正定對稱矩陣，因此本研究將利用(2.11)式進行演算法之推導。有別於牛頓法，最速下降法之搜索方向為下降最快的方向亦即負梯度方向，而新的搜索方向會與前一搜索方向互相正交，因此，迭代過程會呈現鋸齒狀，如 Figure 2.6 所示，其中紅色點即為正確解。假定一極小值問題如(2.16)式：

$$\min_{x \in R^n} \varphi(x) = \min \left[\frac{1}{2} x^T C x - b_1 x \right] \quad (2.16)$$

對於求解極值問題，於一階導數為 0 處之值即為所求，

$$\varphi'(x) = Cx - b_1 = 0 \quad (2.17)$$

由(2.17)式可以發現求出(2.16)式之解等同於求得(2.11)式之線性代數方程的解。

最速下降法之演算步驟簡易，首先給定一初始猜值 x_0 ，決定前往下一點之搜索方向以及步長，直到收斂至最低點，然而最速下降法有一麻煩的缺點為越接近真實解其收斂速度會越慢，因此即便此法已解決牛頓法中對初始猜值之依賴，對於求解大型線性代數方程仍是不適當。如工程問題需龐大數據量之問題，最速下降法之步長對於迭代穩定性有很深的影響，若步長太長會導致搜索路徑較迂迴而若步長太短則會導致迭代步數增加，收斂速度變慢。最速下降法之演算步驟如下：

1. 給定初始猜值 x_0 以及收斂條件 ε
2. 計算初始殘差 $r_0 = b_1 - Cx_0$
3. $k=1, 2, \dots$ ，接下來重複以下計算值至滿足收斂條件

$$r_k = b_1 - Cx_k \quad (2.18)$$

$$x_{k+1} = x_k - \lambda_k r_k \quad (2.19)$$

$$\lambda_k = \frac{\|r_k\|^2}{r_k^T C r_k} \quad (2.20)$$

當 $\|r_k\| < \varepsilon$ ，則迭代停止否則繼續重複步驟 3 直到找到正確解為止， r_k 為下降方向而 λ_k 為步長，由(2.20)式可發現當越接近真實解， r_k 越小將會導致步長越小，因此會有越接近真解收斂速度越慢的問題產生，而且當 r_k 越小時若受到細微數值誤差就可能造成搜索方向之改變造成迭代次數的增加。

2.6.3 共軛梯度法之演算法(Algorithms of CGM)

由最速下降法改進之共軛梯度法其基本原理亦是建構於求解最小極值問題上。共軛梯度法改進最速下降法步長對殘差之依賴性，但演算過程卻保留其簡易計算之特性，演算想法為首先給定一初始猜值 x_0 ，搜索方向改成以前一個值的搜索方向為輔助向量並與當前的函數梯度方向做線性結合之共軛方向，直至滿足收斂條件。由於初始值無前一項之梯度向量，故其初始方向即為其梯度方向，如此演算法可使所有的下降方向皆為 C 之共軛方向如 Figure 2.7 所示。

由(2.11)式，殘差 $r = b_1 - Cx$ 即為 x 之負梯度方向，定義：

$$v_k = x_k - x_{k-1} \quad (2.21)$$

且滿足 $v_k^T C v_{k-1} = 0$ 而 $v_k^T C v_k = C r_{k-1}$ ，可知 v_k 和 v_{k-1} 對於 C 矩陣互為共軛關係，接著假設：

$$p_k = \frac{v_k}{\alpha_k} \quad (2.22)$$

$$r_{k-1}^T p_k = \|r_{k-1}\|^2 \quad (2.23)$$

因此

$$\alpha_k = \frac{v_k^T r_{k-1}}{p_k^T r_{k-1}} = \frac{v_k^T r_{k-1}}{\|r_{k-1}\|^2} = \frac{\|r_{k-1}\|^2}{p_k^T C p_k} \quad (2.24)$$

α_k 為步長，而 p_k 為搜索方向之單位向量，可以得到：

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_k p_k \quad (2.25)$$

$$r_k = r_{k-1} - \alpha_k C p_k \quad (2.26)$$

共軛梯度法之搜索方向為前一搜索值之搜索方向和當前函數之梯度線性結合：

$$p_k = r_{k-1} + \beta_k p_{k-1} \quad (2.27)$$

$$\beta_k = -\frac{p_{k-1}^T C r_{k-1}}{p_{k-1}^T C p_{k-1}} = \frac{\|r_k\|^2}{\|r_{k-1}\|^2} \quad (2.28)$$

當瞭解完共軛梯度法的理論基礎後其演算法之步驟如下：

1. 給定初始猜值 x_0 和收斂條件 ε
2. 計算初始殘差 $r_0 = b_1 - Cx_0$ ，初始方向 $p_1 = r_0$
3. $k=1,2,\dots$ 接下來進行以下的計算直到滿足收斂條件：

$$\alpha_k = \frac{\|r_{k-1}\|^2}{p_k^T C p_k} \quad (2.29)$$

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_k p_k \quad (2.30)$$

$$r_k = b_1 - Cx_k \quad (2.31)$$

$$\beta_k = \frac{\|r_k\|^2}{\|r_{k-1}\|^2} \quad (2.32)$$

$$p_k = r_{k-1} + \beta_k p_{k-1} \quad (2.33)$$

當 $\|r_k\| < \varepsilon$ 迭代停止，若不滿足則重新回到步驟 3 直到滿足收斂條件為止。

共軛梯度法於求解輕度病態問題時收斂速度快且數值解之準確性高，目前尚未有任一演算法於求解輕度病態問題之成就可超越共軛梯度法，然而，當所求之問題為高度病態時，共軛梯度法數值誤差甚大且收斂速度慢是所需要克服的。



2.6.4 預處理共軛梯度法(Preconditioned CGM)

共軛梯度法之發展使得數值運算可以更加有效率的求得解，省卻許多時間以及經濟成本，然而，當遇到問題為高度病態時，共軛梯度法之求解效果並不佳。收斂速度與給定矩陣之特徵值分布有關係，於章節 2.3 時曾提過，若矩陣特徵值集合的分布越接近 1，則求得解之速度會較快。有些學者針對此問題提出想法先將給定矩陣乘上一特定矩陣改善其特徵值分布，再使用共軛梯度法進行求解，使其轉為輕度病態之問題，稱之為預處理共軛梯度法，而對給定矩陣進行預處理所使用之特定矩陣稱之為調整器。目前尚未有任一種調整器可適用於所有問題，因此，發展出適用問題範圍較廣泛之調整器是許多學者們的目標，預處理即為先改善給定矩陣之病態性。再利用共軛梯度法面對求解輕度病態問題之穩定性以及準確性，以達到所求數值解之可信任，因此只要達成此目標所使用之特定矩陣可以不同，不論是乘於前側之調整器，後調整器，雙側調整器亦或是改變搜索方向使得更快找到正確解之方法。一般常使用之預處理共軛梯度法。

將(2.11)式改成求解：

$$MCx = Mb_1 \quad (2.34)$$

M 所扮演的即為調整器，此處使用前調整器來介紹，(2.34)式與(2.11)式所求得解會相同，可是已改善 B 之特徵值分布，降低病態性而達到求得準確性佳之數值解且收斂速度較快之結果，演算步驟將於第三章中詳細的介紹。

2.6.5 矩陣之共軛梯度法(MCGM)

判定矩陣之病態性，條件數是一個好用的工具，(2.6)式即為條件數之求法，然而，工程問題上 B 矩陣皆為維數很大且有反矩陣取得不易的問題，因此本研究將引入(Liu, Hong et al. 2010)矩陣之共軛梯度法來幫助求得反矩陣。

首先本研究利用(2.1)式來說明：

本研究假設一未知矩陣 U ，若可以滿足

$$B^T U^T = I = (UB)^T \quad (2.35)$$

I 為單位矩陣，則可以合理的推斷 U 為 B 之反矩陣。

矩陣共軛梯度法之演算步驟如下：

1. 選定適當的 x_0 一般選擇為 0 或是 1 向量，而 $y_0 = Bx_0$
2. $x_1 = \left[I - \frac{\|x_0\|^2}{x_0^T B x_0} B \right] x_0$ ，而 $y_1 = B^T x_1$
3. 令 $A = B^T B + y_1 y_1^T$ 以及 $V = B + y_1 x_1^T$
4. 假設初始猜值 U_0 ，多採 0 矩陣，以及收斂條件 ε
5. $R_0 = V - AU_0$
6. $P_1 = R_0$
7. $k=1, 2, \dots$ 接下來本研究進行以下的計算直到滿足收斂條件：

$$\alpha_k = \frac{\|R_{k-1}\|^2}{P_k \cdot (AP_k)} \quad (2.36)$$

$$U_k = U_{k-1} + \alpha_k P_k \quad (2.37)$$

$$R_k = V - AU_k \quad (2.38)$$

$$\beta_k = \frac{\|R_k\|^2}{\|R_{k-1}\|^2} \quad (2.39)$$

$$P_{k+1} = R_k + \beta_k P_k \quad (2.40)$$

若 $\|R_k\| < \varepsilon$ 即表收斂條件成立，而收斂時之 U 即為所求，亦可以求得 B 之反矩陣

為 $B^{-1} = U$ ，當未知數較少時之線性系統，如

$$Ax = b$$

此法可以較簡易求得 A^{-1} ，推出 $x = A^{-1}b$ 。工程問題中龐大的未知數使得無法如



此求解，矩陣之共軛梯度法的引入使得即便是求解繁雜或高度病態之問題，亦可以簡單求得其反矩陣，並得到問題之解。然而本論文之目的為研究不同調整器對於改善共軛梯度法迭代步數之貢獻，因此，本研究僅採用此法之觀念得 B^{-1} ，以探討條件數改進與否。

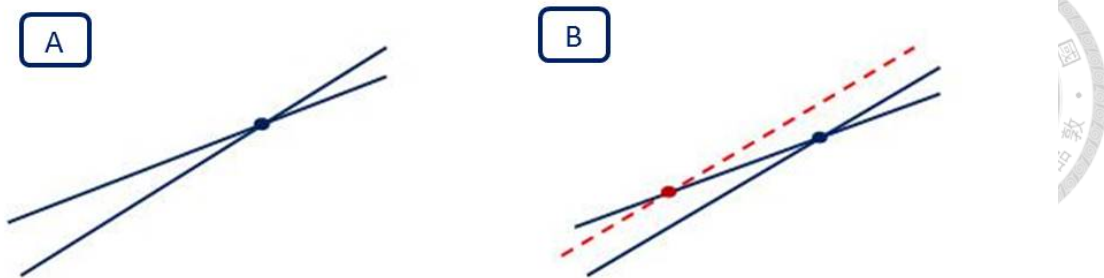


Figure 2.1(A)病態問題未加入噪音之情形 (B)病態問題加入噪音之情形

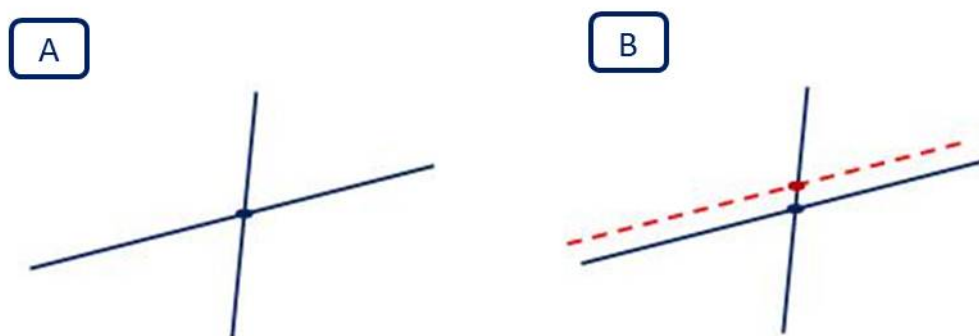


Figure 2.2 (A)良置問題未加入噪音之情形 (B)良置問題加入噪音之情形

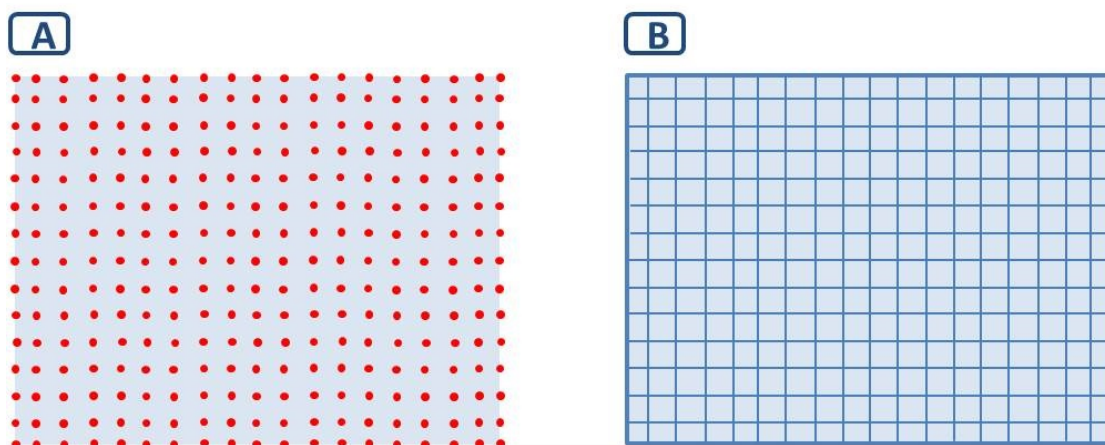


Figure 2.3(A)無網格法與(B)有網格法比較示意

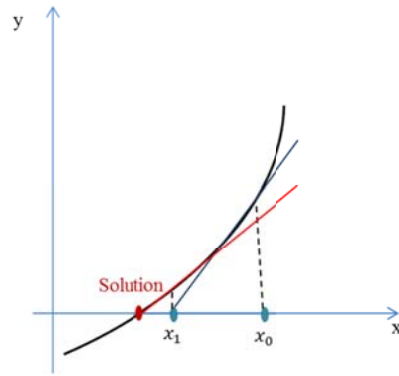


Figure 2.4 牛頓法迭代過程示意圖

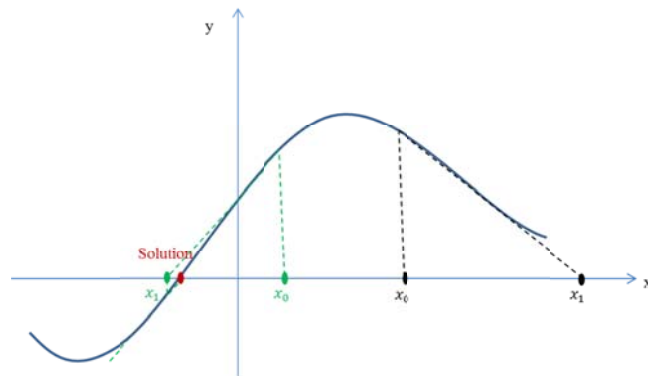


Figure 2.5 牛頓法對應不同初始猜值之迭代過程示意

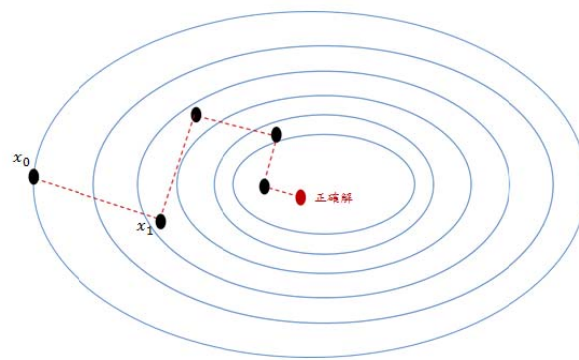


Figure 2.6 最速下降法迭代過程示意圖

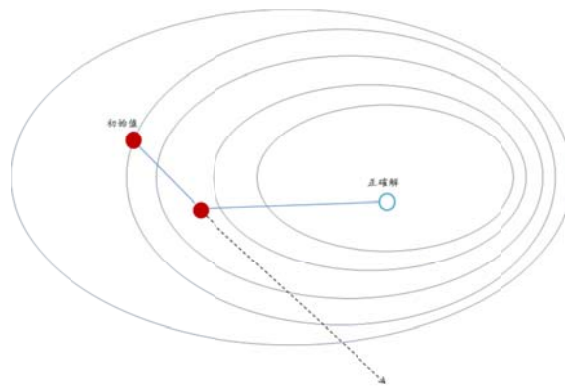


Figure 2.7 共軛梯度法迭代過程示意圖

第三章 單側等模調整器之研究

調整器之目的即為降低矩陣對數值之敏感性，使病態性減弱以使演算法之求解較為迅速。調整器的種類有很多，於文獻中曾經提過，當乘上調整器之矩陣其所有行或是列之模長相等，與此條件下矩陣具有較佳改善條件數之效果，因此，本研究將繼續沿用此觀念發展出等模調整器。

首先先來介紹何謂等模之觀念，一 4×4 矩陣 B ：

$$B_{4 \times 4} = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & B_{14} \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & B_{24} \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} & B_{34} \\ B_{41} & B_{42} & B_{43} & B_{44} \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

以每一行之 L^2 模方相等為例：

$$\|B_j\| = \sqrt{\sum_{i=1}^4 B_{ij}^2} = \sqrt{B_{1j}^2 + B_{2j}^2 + B_{3j}^2 + B_{4j}^2}, j = 1 \sim 4$$
$$\|B_1\| = \|B_2\| = \|B_3\| = \|B_4\|$$

行模長的定義為矩陣中每一行向量於向量空間的長度，若為列模長，亦同。

於本章節中將介紹前後調整器之求得以及對矩陣進行預處理後與共軛梯度法結合求解之演算步驟，並利用正算與反算共三個高度病態問題之不同算例，探討加入調整器前後對於求解問題之差別。

3.1 前調整器(Preconditioning CGM, PreCGM)

於基礎理論中，提過有學者發揚共軛梯度法而發展出一套預處理共軛梯度法。如今，本研究將就調整器之作用位置不同發展出兩套預處理之共軛梯度法，並加以比較，於本節當中首先介紹前調整器，前調整器不僅可以利用比例縮放矩陣達到特徵值分布改善，亦可以對搜索方向進行改正，以達到更快找到正確解之目的，其名稱來源顧名思義即為乘於給定矩陣前面之調整器，先找出一個適當之調整器，並延續雅可比法中調整器之特性將前調整器假定為一對角矩陣 Q ：

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & Q_2 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \vdots & \vdots & Q_{n-1} & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & Q_n \end{bmatrix} \quad (3.2)$$



對(2.11)式進行病態性之改善並對其給定矩陣 C 進行預處理：

$$A = QC = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & \cdots & C_{1n} \\ Q_2 C_{21} & Q_2 C_{22} & \cdots & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & Q_{n-1} C_{n-1n} \\ Q_n C_{n1} & \cdots & \cdots & Q_n C_{nn-1} & Q_n C_{nn} \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

調整器乃是根據等模之原理所求得，因此本研究設定調整器之加入需使得 A 矩陣中每一列之 L^2 模方皆相等，即為：

$$\sum_{i=1}^n A_{1i}^2 = \sum_{i=1}^n A_{2i}^2 = \sum_{i=1}^n A_{3i}^2 = \cdots = \sum_{i=1}^n A_{ni}^2 \quad (3.4)$$

$$\|A_j\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n A_{ji}^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^n C_{ji}^2} = \sqrt{Q_j^2 \sum_{i=1}^n C_{ji}^2} = \cdots = \sqrt{Q_n^2 \sum_{i=1}^n C_{ni}^2}$$

$$Q_2 = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n C_{1i}^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n C_{2i}^2}} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n C_{1i}^2}{\sum_{i=1}^n C_{2i}^2}}$$

可以推廣至求 Q_j ：

$$Q_n = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n C_{1i}^2}{\sum_{i=1}^n C_{ji}^2}}, \quad j = 2 \sim n \quad (3.5)$$

利用前調整器進行預處理並與共軛梯度法結合之方法(稱為 PreCGM)其演算步驟如下：

1. 計算 Q 矩陣
2. 給定一初始猜值 x_0 ，一般設定為零向量，以及收斂條件 ε

3. 初始殘差 $r_0 = b_1 - Cx_0$, $z_0 = Qr_0$, 搜索方向 $p_1 = z_0$
4. $k = 1, 2, \dots$, 重複以下之步驟：

$$\alpha_k = \frac{r_{k-1} \cdot z_{k-1}}{p_k^T C p_k} \quad (3.6)$$

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_k p_k \quad (3.7)$$

$$r_k = b_1 - Cx_k \quad (3.8)$$

$$z_k = Qr_k \quad (3.9)$$

$$\beta_k = \frac{r_k \cdot z_k}{r_{k-1} \cdot z_{k-1}} \quad (3.10)$$

$$p_{k+1} = z_k + \beta_k p_k \quad (3.11)$$

若 $\|r_k\| < \varepsilon$, 則迭代停止, 若是不滿足收斂條件則接續步驟 4 直到滿足收斂條件為止。

3.2 後調整器(Post-conditioning CGM, PostCGM)

接著介紹另一種單側調整器, 本研究稱之為後調整器, 而不同於前一節所介紹的前調整器, 本研究將對(2.1)式進行預處理, 接著再使用共軛梯度法進行迭代求解。稱之為後調整器乃是因為其矩陣是乘於給定矩陣之後, 因此有此名稱, 與前調整器相同將後調整器 P 假設為一對角矩陣：

$$P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & P_2 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \vdots & \vdots & P_{n-1} & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & P_n \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

令



$$x = Py \quad (3.13)$$

將(3.13)式代入(2.1)式中：

$$Bx = BPy = b$$

公式改為：

$$Ay = b \quad (3.14)$$

其中 A 矩陣即為經由後調整器進行欲處理過後之矩陣，為了使 A 矩陣之條件數相較於原先之給定矩陣 B 明顯地減少，因此，選擇合適的 P_n 值是必要的，於此同樣採等模之觀念：

$$BP = \begin{bmatrix} B_{11} & P_2 B_{12} & \cdots & \cdots & P_n B_{1n} \\ B_{21} & P_2 B_{22} & \cdots & \cdots & P_n B_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & P_{n-1} B_{n-1n} \\ B_{n1} & \cdots & \cdots & P_{n-1} B_{nn-1} & P_n B_{nn} \end{bmatrix} = A \quad (3.15)$$

滿足 A 矩陣中每一行之 L^2 模長皆相等：

$$\sum_{i=1}^n A_{i1}^2 = \sum_{i=1}^n A_{i2}^2 = \sum_{i=1}^n A_{i3}^2 = \cdots = \sum_{i=1}^n A_{in}^2 \quad (3.16)$$

$$\|A_j\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n A_{ij}^2} = \sqrt{\sum_{i=1}^n B_{ij}^2} = \sqrt{P_2^2 \sum_{i=1}^n B_{i2}^2} = \cdots = \sqrt{P_n^2 \sum_{i=1}^n B_{in}^2}$$

$$P_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n B_{i1}^2}{\sum_{i=1}^n B_{i2}^2}}$$

並推廣至求 P_j ：

$$P_j = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n B_{i1}^2}{\sum_{i=1}^n B_{ij}^2}}, \quad j = 2 \sim n \quad (3.17)$$

當 P 矩陣求得完畢，對(3.14)式進行求解。

利用後調整器進行預處理並與共軛梯度法結合之方法(稱為 PostCGM)其演算步驟如下：



1. 計算 P 矩陣
2. $A=BP$, $b_1=A^T b$, $C=A^T A$
3. 給定一初始猜值 y_0 , 同於前調整器 , 一般本研究給定一零向量
4. 初始殘差 $r_0=b_1-Cy_0$, 搜索方向 $p_1=r_0$
5. $k=1,2,\dots$, 重複以下之步驟：

$$\alpha_k = \frac{\|r_{k-1}\|^2}{p_k^T C p_k} \quad (3.18)$$

$$y_k = y_{k-1} + \alpha_k p_k \quad (3.19)$$

$$r_k = b_1 - C y_k \quad (3.20)$$

$$\beta_k = \frac{\|r_k\|^2}{\|r_{k-1}\|^2} \quad (3.21)$$

$$p_{k+1} = r_k + \beta_k p_k \quad (3.22)$$

當 $\|r_k\| < \varepsilon$ 即為滿足收斂條件，則迭代終止，反之，則重回步驟 5 直至滿足收斂條件為止。

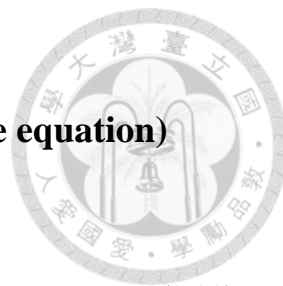
滿足收斂條件後所得之解為 y 需代回公式(3.13)，將 y 轉成 x 才算是完成求解之程序。

以上兩種單側調整器皆為對角等模之矩陣，但因其作用位置之差異以及演算步驟之不同，面對不同問題時，改善效果亦有所差異。

3.3 數值算例

本研究將採用三個數值算例來驗證調整器是否確實達到良好預處理之作用。數值算例中包含反算柯西問題，反向熱傳導問題，以及 Hilbert 線性問題，前兩

個問題為反算問題而 Hilbert 線性問題則為唯一之正算問題。



3.3.1 柯西問題(Inverse Cauchy Problem for Laplace equation)

考慮反算柯西問題之拉普拉斯方程以及邊界問題：

$$\Delta u = u_{rr} + \frac{1}{r}u_r + \frac{1}{r^2}u_{\theta\theta} = 0 \quad (3.23)$$

$$u(\rho, \theta) = h(\theta), \quad 0 \leq \theta \leq \beta\pi \quad (3.24)$$

$$u_n(\rho, \theta) = g(\theta), \quad 0 \leq \theta \leq \beta\pi \quad (3.25)$$

本題之柯西問題為一過定邊界條件之問題，給定一半之邊界以求得另一半之邊界問題，於(3.24)式和(3.25)式中的 $h(\theta)$ 和 $g(\theta)$ 視為已給定之函數，假設 $\beta \leq 1$ 以及利用 $r = \rho(\theta)$ 來描述給定之邊界 $\Gamma_1 := \{(r, \theta) | r = \rho(\theta), 0 \leq \theta \leq \beta\pi\}$ 而待求邊界函數 $f(\theta)$ 於 $\Gamma_2 := \{(r, \theta) | r = \rho(\theta), \beta\pi \leq \theta \leq 2\pi\}$ 上，利用已知條件(3.23)式、(3.24)式以及(3.25)式來尋找 $f(\theta)$ 。

拉普拉斯方程之基本解採圓對稱之假設進行推導：

由於圓對稱之假設可以知道解與 θ 無關僅受半徑 r 之影響亦即 $u = u(r)$ ，因此將(3.23)式分別對 r 取積分：

$$\int \left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} \right) dr = c \quad (3.26)$$

式子簡化可得

$$\begin{aligned} \int \frac{d}{dr} \left(r \frac{du}{dr} \right) dr &= r \frac{du}{dr} = c \\ du &= \frac{dr}{r} \cdot c \end{aligned}$$

等號兩邊對 r 取積分，得：

$$u = c \ln r \quad (3.27)$$

利用基本解法，可以將於場域點上 $z = (r \cos \theta, r \sin \theta)$ 之解 u 表示成一基本解

$U(z, s_j)$ 之線性組合：



$$u(z) = \sum_{j=1}^n c_j U(z, s_j), \quad s_j \in \Omega^c \quad (3.28)$$

s_j 為源點， z 為場點，而兩點之間的差值即為半徑 r 。

將(3.27)式化成本題之基本解即為：

$$U(z, s_j) = \ln r_j, \quad r_j = \|z - s_j\| \quad (3.29)$$

於實際應用當中，藉由施加邊界條件(3.24)式和(3.25)式於(3.28)式上，可得一線性方程組：

$$Bx = b \quad (3.30)$$

其中

$$z_i = (z_i^1, z_i^2) = (\rho(\theta_i) \cos \theta_i, \rho(\theta_i) \sin \theta_i)$$

$$s_j = (s_j^1, s_j^2) = (R(\theta_j) \cos \theta_j, R(\theta_j) \sin \theta_j)$$

當 i 為奇數時：

$$B_{ij} = \ln \|z_i - s_j\|$$

若 i 為偶數時：

$$B_{ij} = \frac{\eta(\theta_i)}{\|z_i - s_j\|^2} \left\{ \rho(\theta_i) - s_j^1 \cos \theta_i - s_j^2 \sin \theta_i - \frac{\rho'(\theta_i)}{\rho(\theta_i)} [s_j^1 \sin \theta_i - s_j^2 \cos \theta_i] \right\}$$

$$\eta(\theta_i) = \frac{\rho(\theta_i)}{\sqrt{\rho^2(\theta_i) + [\rho'(\theta_i)]^2}}$$

而

$$x = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$$

$$b = (h(\theta_1), g(\theta_1), \dots, h(\theta_m), g(\theta_m))^T$$

其中 $n = 2m$ ，於邊界數據 b 中加入噪音汙染：

$$b_i = \begin{bmatrix} h(\theta_1) \\ g(\theta_1) \\ \vdots \\ h(\theta_m) \\ g(\theta_m) \end{bmatrix} + \sigma R(i)$$



σ 為噪音強度， $R(i)$ 是一組介於 $[-1,1]$ 間之隨機亂數。

而邊界場域之半徑 $\rho(\theta) = \sqrt{10 - 6\cos 2\theta}$, $0 \leq \theta \leq 2\pi$ ，源點將沿著以 $R(\theta)$ 為半徑之虛擬邊界佈設，其中 $R(\theta) = \rho(\theta) + D$ ， D 為偏移量。

利用 PostCGM、PreCGM 和 CGM 求解，並且與真實解(3.31)式進行數值結果比較：

$$u(r, \theta) = r^2 \cos(2\theta) \quad (3.31)$$

令 D 為 120， σ 為 0.01，並利用 $n=40$ 和 $n=120$ 兩個不同維度之矩陣來進行方法之比較與討論，設定收斂條件為 $\|r_k\| \leq \varepsilon$ ，其 $\varepsilon = 10^{-9}$ 。

無論是病態程度較低的問題($n=40$)條件數為 2.2715×10^{18} 或是病態程度較高($n=120$)條件數為 3.844×10^{18} ，於收斂速度上調整器之加入明顯地改善收斂步數， $n=40$ 時使用調整器預處理之收斂步數有明顯的改善，且與真實解之誤差最大皆不超過 0.03，可以由 Figure 3.1 和 Figure 3.4 看出數值解與真解幾乎重合，此結果於 $n=120$ 時也可以發現，不同處為其初始殘差較 $n=40$ 時大，當矩陣之維度增加時，CGM 之迭代步數明顯增加，但是對於經過預處理之矩陣，對於其迭代步數並無明顯之增長，由此可以證實經預處理過之矩陣其穩定性較佳。

3.3.2 反向熱傳導問題(Backward Heat Conduction Problem)

考慮空間中間隔為 $0 < x < \ell$ 作用於板之兩端的邊界問題，方程為：

$$u_t(x, t) = \alpha u_{xx}(x, t), \quad 0 < t < T \quad 0 < x < \ell \quad (3.32)$$

其中 α 為熱傳導係數， t 為時間函數以及 x 是位置函數。

邊界條件為

$$u(0,t)=u_0(t) \quad u(\ell,t)=u_\ell(t) \quad (3.33)$$

於最終狀態的條件下進行求解：

$$u(x,T)=u^T(x) \quad (3.34)$$

反向熱傳導問題為一個具備邊界條件及終值狀態條件反推求初始值之問題。同樣採用基本解法，而(3.32)式之基本解為：

$$K(x,t)=\frac{H(t)}{2\sqrt{\alpha\pi t}}e^{\left(\frac{-x^2}{4\alpha t}\right)} \quad (3.35)$$

其中 $H(t)$ 為 Heaviside function，單位階梯函數 $H(t-a)$ ：

$$H(t-a)=\begin{cases} 1, & t > a \\ 0, & t < a \end{cases}$$

於場域 $z=(x,t)$ 中可將 u 表示成一基本解之線性組合，

$$u(z)=\sum_{j=1}^n c_j U(z,s_j), \quad s_j=(\eta_j, \tau_j) \in \Omega^c \quad (3.36)$$

本題中 n 為源點之個數， c_j 是待求係數， s_j 是坐落於 Ω^c 之源點， Ω^c 為

$\Omega=[0,\ell]\times[0,T]$ 之補充條件，對於熱傳導方程有以下之基本函數：

$$U(z,s_j)=K(x-\eta_j, t-\tau_j) \quad (3.37)$$

基本解法中源點之選擇是非常重要的，矩陣的病態性將會隨著源點和場點之距離增加或源點之數目增加而增加，源點也會影響基本解法之準確性和穩定性，因此，如何選擇適當的源點亦是值得研究的地方，根據學者之研究(Hon and Li 2009)，BHCP 採用均勻的佈設源點於兩條直線上，對於求解有良好的精確性和穩定性，其佈設方法如 Figure 3.7 所示。

藉由施加(3.33)式和(3.34)式於(3.36)式可得一線性方程組：

$$Bx=b \quad (3.38)$$

其中



$$B_{ij} = U(z_i, s_j)$$

$$x = (c_1, \dots, c_n)^T$$

$$b = (u_\ell(t_i) \ i=1, \dots, m_1; u^T(x_j) \ j=1, \dots, m_2; u_0(t_k) \ k=m_1, \dots, 0)^T$$

場點之個數為 $n=2m_1+m_2$ ， m_1 是板之兩端點中任一端的場點個數， m_2 則為最終狀態時之場點個數，而 BHCP 之真實解為：

$$u(x, t) = \cos(\pi x) e^{-\pi^2 t} \quad (3.39)$$

令 $T=1$ 和 $\ell=1$ ，並將 α 取為 1，而源點之佈設取於兩條平行 t 軸之直線，分別於 $x=-2.5$ 和 $x=3.5$ 上，每條分別佈設 $\frac{n}{2}$ 個源點，本研究將就噪音汙染 $\sigma=0.01$ 並根據不同 n 之矩陣來探究病態程度以及求得之結果比較。

反向熱傳導問題本身即為一種違反大自然運行法則的問題。一般求解熱傳導問題是給定初始溫度推測熱的傳導，隨著時間之改變直至最終時間下之溫度分布，如今，卻要由最終的溫度反推求最初之來源溫度，造就方程本身之高度病態以及不穩定性。同時利用 $n=31$ 和 $n=71$ 兩個不同維度之矩陣來討論， $n=31$ 的問題中 $m_1=11$ 而 $m_2=9$ ， $n=71$ 則是 $m_1=21$ 而 $m_2=29$ 。於這個例題當中本研究證實演算法穩定性之重要。無論是在 $n=31$ 或 $n=71$ 例子當中，CGM 皆無法於 500 步內達成收斂的要求，但是經過調整器之預處理後，不論是在收斂步數上或是數值解之誤差程度以及降低條件數皆有不錯的表現。

首先來探討 $n=31$ 時之情形，未經過調整器處理之矩陣條件數 7.352×10^{37} ，經過調整器預處理過後矩陣皆可以收斂，PreCGM 之條件數降為 5.798×10^{24} 並且於 168 步收斂，PostCGM 條件數則降至 1.0056×10^{18} 且於 18 步就收斂，皆為不錯之結果。尤其由 Figure 3.8 和 Figure 3.9 可看出所求出之數值解誤差值皆不超過 0.2 然而 CGM 之最大誤差卻將近 0.8，失去可靠性，Figure 3.10 中更顯示即便迭代步數更久 CGM 也是無法滿足收斂條件，這就是因演算法面對高度病態問題時

本身之不穩定所致。

$n=71$ 時，未經過調整器處理的矩陣條件數高達 1.0503×10^{55} ，PreCGM 條件數降為 5.8148×10^{48} 雖仍屬於高度病態問題卻已較原先之條件數來得低。PostCGM 條件數更降為 2.9773×10^{18} 具有最佳病態改善效果，於收斂步數方面，PreCGM 於 101 步收斂 PostCGM 僅 19 步就收斂。數值解之部分 PreCGM 所求得之數值解最大誤差不超過 0.3 而 PostCGM 之數值解最大誤差甚至不到 0.2，未經過任何處理的 CGM，其結果並不甚理想，無法收斂以及數值誤差高達 0.9，由此可知，調整器的加入確實有效降低 CGM 之數值解誤差過大問題。

Figure 3.11 與 Figure 3.15 為僅探討 PreCGM 和 PostCGM 之殘差和迭代步數之關係，可以看出兩者因經過不同調整器之處理而有不同之結果。利用 Figure 3.11 來解釋，PreCGM 之殘差已由原本未處理過的 2.2×10^{16} 降至 8.4×10^7 ，PostCGM 殘差更是降至僅 0.25 而已與 CGM 相差 10^{17} 倍和 PreCGM 亦相差 10^8 之多。對病態問題而言，即便殘差很小並無法直接證實其數值解之準確，但藉由殘差之下降可使得目標之搜索得以加速，減少收斂步數較快速求得解。

本算例中可明顯看出無論是 PostCGM 或是 PreCGM 對於改善矩陣條件數、收斂步數、以及數值解之準確性皆有不錯的結果。

3.3.3 Linear Hilbert Problem

找尋一個 n 階之多項式函數 $p(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$ 最符合給定連續函數 $f(x)$ ，其中 $x \in [0,1]$ ；可以表成以下式子：

$$\min_{\deg(p) \leq n} \int_0^1 [f(x) - p(x)]^2 dx \quad (3.40)$$

若將此問題轉換至線性方程 $Bx = b$ 上，其中 B 為一個 $(n+1) \times (n+1)$ 的 Hilbert 矩陣：

$$B_{ij} = \frac{1}{i+j-1} \quad (3.41)$$

x 為多項式函數 $p(x)$ 之係數， a_0, a_1, \dots, a_n 共 $n+1$ 個，而 b 矩陣之組成為

$$b = \begin{bmatrix} \int_0^1 f(x)dx \\ \int_0^1 xf(x)dx \\ \vdots \\ \int_0^1 x^n f(x)dx \end{bmatrix}$$



是唯一僅藉由 $f(x)$ 所得。

這是一個正算的問題但其中 Hilbert 矩陣是一個具有高度病態性之矩陣，隨著維度之增加病態性亦隨之提高，由

Table 3.1 可看出條件數的增長伴隨於 n 之增加，即便同屬高度病態之問題，但其算例的穩定性卻較反算問題來得佳，因此本研究將針對不同 n 之矩陣進行收斂步數與準確性之比較，並且將探討添加噪音汙染與否對求解之影響。

首先探討當 $n=20$ 並未加入噪音汙染時情形，由上表可知當 $n=20$ 時條件數高達 1.8458×10^{18} 已屬於高度病態問題。

令此問題之真實解為 $[x_1, x_2, \dots, x_n]^T = [1, 1, \dots, 1]^T$ ，而 b 為：

$$b_i = \sum_{j=1}^n \frac{1}{i+j-1} \quad (3.43)$$

即便如此高度病態之問題，三種方法皆可於 6 步以內達到收斂條件之要求，CGM 在 6 步收斂，PostCGM 於 5 步收斂及 PreCGM 為 4 步收斂。雖然是否經過預處理之收斂速度並無太大改變，但可以由 Figure 3.16 發現，經過調整器預處理之矩陣，其所求得之數值解較未處理過之精準。PreCGM 所求得之解甚至幾近和真實解重合，Figure 3.17 顯示三種方法之數值誤差，也可發現經過預處理後所求得之解誤差皆較小，CGM 的數值誤差最高可達 0.047，而 PostCGM 之數值誤差最大為 0.025，PreCGM 數值誤差之最大值僅為 2×10^{-5} ，具有最好的收斂性以及解之精確性。可以明顯的看出經過調整器的預處理確實對收斂速度和解之準確性有改善的作用。

接下來加入噪音汙染，分別就 $n=20$ 和 $n=80$ 之矩陣，探討三種方法之穩定性是否同未加入汙染前相同，而輸入向量 b 改為(3.44)式：

$$b_i = \sum_{j=1}^n \frac{1}{i+j-1} + \sigma R(i) \quad (3.44)$$

σ 為噪音強度令為 10^{-5} ， $R(i)$ 是一組介於 $[-1, 1]$ 間之隨機亂數。

於 $n=20$ 時，收斂條件訂為 $\|r_k\| \leq \varepsilon = 10^{-9}$ 。由 Figure 3.21 可以發現當加入噪音汙染時，收斂步數有所改變，CGM 和 PostCGM 之收斂步數分別由 6 步和 5 步轉變成 9 步才收斂，PreCGM 於收斂步數並無任何改變仍維持 4 步收斂，雖然

加入噪音汙染導致收斂步數提高，可以由 Figure 3.19 和 Figure 3.20 發現其數值解較準確，CGM 的最大數值誤差為 0.0168，PostCGM 最大數值誤差甚至不到 0.004，而 PreCGM 仍保持收斂速度最快及數值解最精確之特性，誤差最大僅 0.000168。和 CGM 之誤差差了 100 倍和 PostCGM 之結果相差 24 倍。

$n = 80$ 同樣加入 $\sigma = 10^{-5}$ 噪音汙染而收斂條件 $\varepsilon = 10^{-9}$ ，Hilbert 矩陣之特色就是隨著 n 越大，對微小數值之敏感度也越高，所得之解精確性亦不若 $n = 20$ 時如此佳。三種方法之收斂步數皆相同，都係 7 步就收斂，但是對於數值解之誤差卻相對於前一例題大很多，CGM 之最大誤差可達 0.082 而 PostCGM 最大誤差為 0.047，前面兩個例題於解的精確性表現很好的前側調整器誤差已不若前面那麼小。Figure 3.23 可以看到其數值解已不與真實解重合了，即便其仍是三種方法中誤差最小的誤差最大值僅為 0.0081，因此可知道當病態程度越高時所得之數值解越不可靠。

是否噪音汙染越小收斂步數就越少，接下來本研究將同樣就 $n = 20$ 之矩陣以及收斂條件探討噪音汙染對數值解準確性之影響，根據 Table 3.2 可了解即便噪音汙染達到 0.01 其收斂步數與當噪音汙染為 10^{-5} 時並無相差太多，皆是在 8 步以內就收斂。而是否由調整器預處理過也對收斂步數造成些許之改善，但是，隨著噪音汙染越大，所求得之數值解誤差亦越大，本研究將不同噪音汙染所求得之數值解依不同演算法分別繪製於圖上比較即為 Figure 3.27、Figure 3.28 和 Figure 3.29。當噪音汙染為 $\sigma = 10^{-2}$ 時，三種方法來說皆失去穩定性，所求得之數值解誤差甚大無法信任。由 Figure 3.25 本研究可以看出，即便是經過預處理所求得之結果並未較好，隨著噪音汙染強度之降低，準確性明顯地有改善，由 $\sigma = 10^{-3}$ 以後之情況皆可以發現，數值誤差不論是哪種方法皆大幅下降，顯示對 CGM 來說，噪音汙染之大小對於收斂性和準確性來說並無直接的影響，收斂步數皆相同以及數值誤差中竟以 $\sigma = 10^{-3}$ 時誤差最小，但是對經過調整器預處理之 CGM，就可以明顯看出隨著噪音汙染較小收斂越快誤差越小，PreCGM 之數值誤差皆趨近於 0，其收斂速度亦最佳，並沒有任何一個調整器適用於所有的問題，但是於 Hilbert

problem 中藉由不同的噪音污染以及不同之 n ，雖然結果相差不大，但是可以發現經過預處理後所求得之結果不論是於收斂速度或是數值解的誤差上面，皆較原本 CGM 所得之結果優，尤其是經由前調整器所做之預處理，求得解可靠性強，因此，由以上之算例可以證實單側調整器確實達到改善之要求。

3.3.4 小結

單側等模調整器於三個算例當中皆有不錯的效果，無論是單就收斂步數，或是數值解之準確更甚是兩者皆具備，前面曾提過不同的調整器適用於不同之算例，於本章節之算例當中，可以發現於柯西方程當中 PostCGM 和 PreCGM 之結果兩者無明顯差異，而於反向熱傳導問題當中雖然兩者皆明顯優於 CGM 但是 PostCGM 同時具備最快速收斂、條件數降至最低以及數值解最精確之特性，Hilbert problem 中則是 PreCGM 表現較佳，由於此問題為正算問題，即便其矩陣之條件數病態程度與柯西方程不相上下甚至更高，但是反算問題本身之不穩定因素導致收斂步數較正算問題高，因此於此問題之收斂步數並無明顯之差異，但所求得之解卻幾乎與正確解重合，可靠性極佳。

Table 3.1 Hilbert 矩陣不同 n 之條件數

n	Condition number
5	4.7761×10^5
20	1.8458×10^{33}
50	1.7249×10^{77}
100	7.63×10^{227}
300	1.5893×10^{761}

Table 3.2 $n=20$ Hilbert 矩陣不同噪音汙染下三種方法之結果比較

	n=20		
	CGM	後側調整器	前側調整器
$\sigma = 10^{-2}$	8	8	8
$\sigma = 10^{-3}$	6	6	5
$\sigma = 10^{-4}$	6	6	4
$\sigma = 10^{-5}$	6	5	4

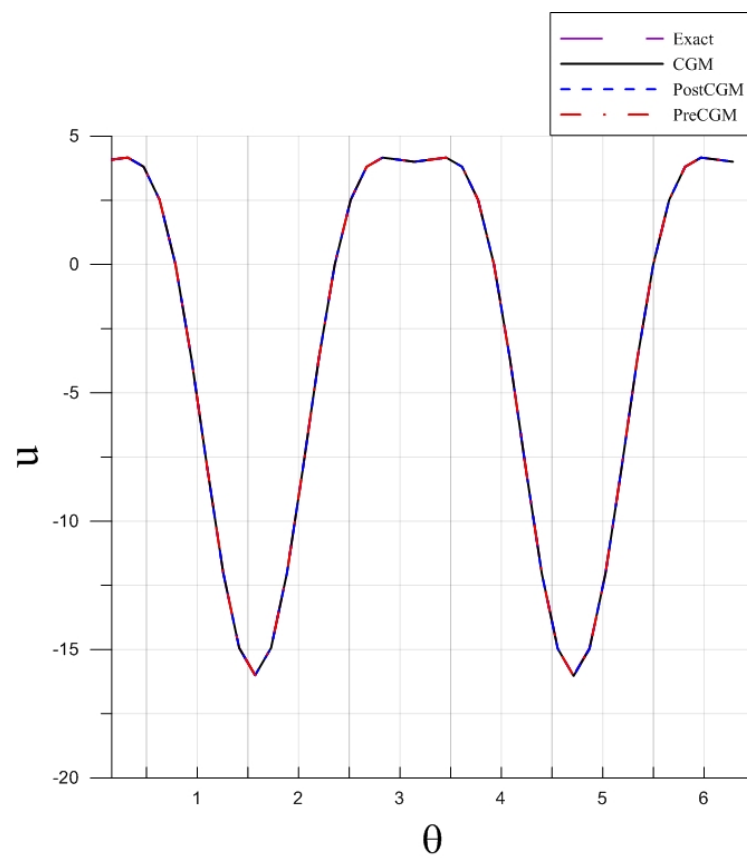


Figure 3.1 $n=40$ Cauchy problem 數值解與真實解之比較

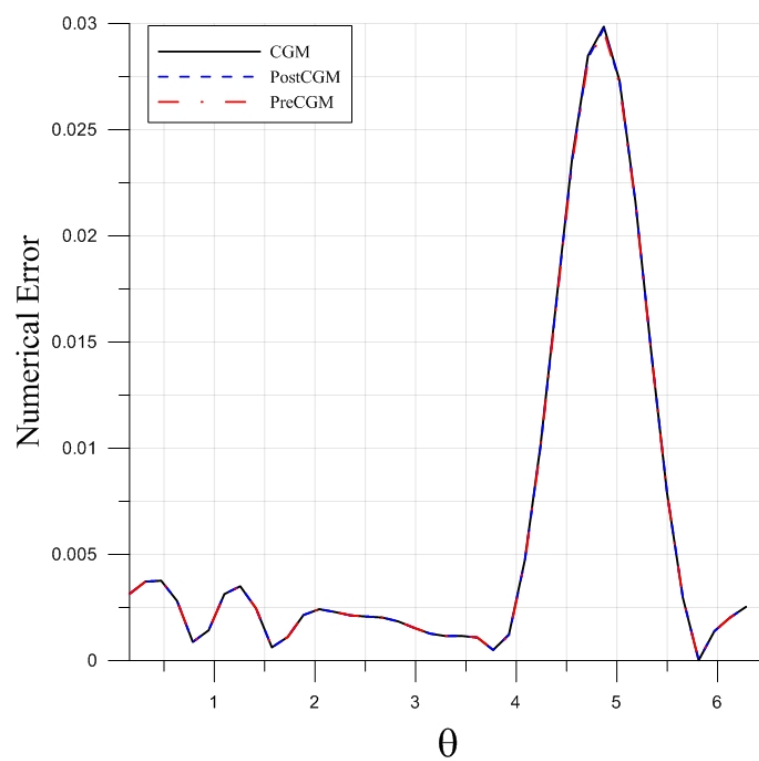


Figure 3.2 $n=40$ Cauchy Problem 三種方法之數值誤差

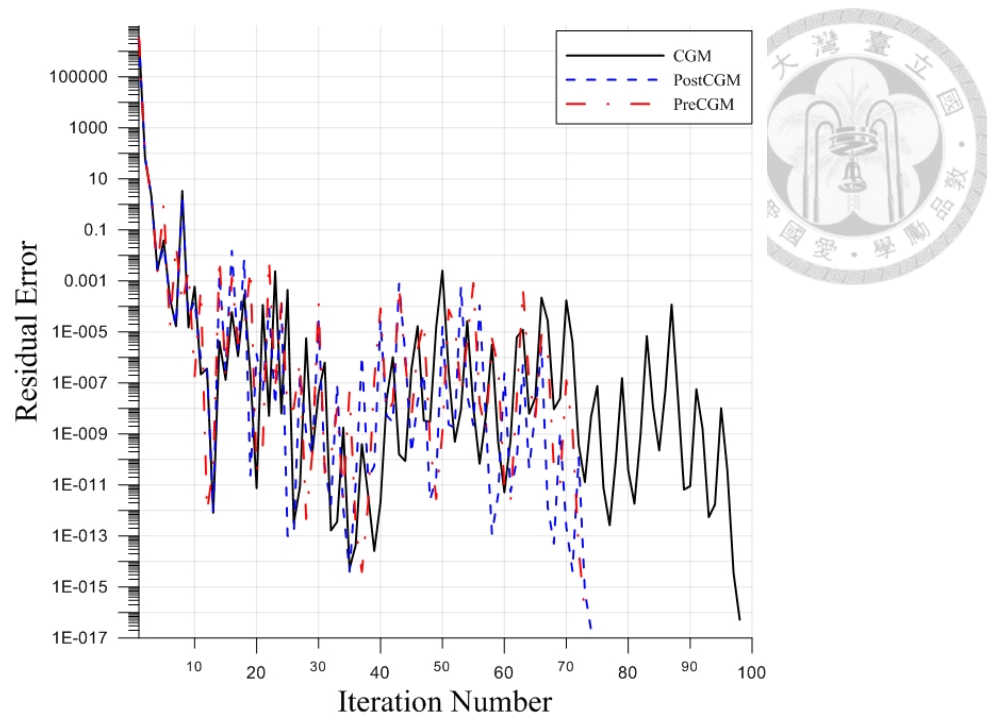


Figure 3.3 $n=40$ Cauchy Problem 三種方法之殘差與迭代步數關係圖

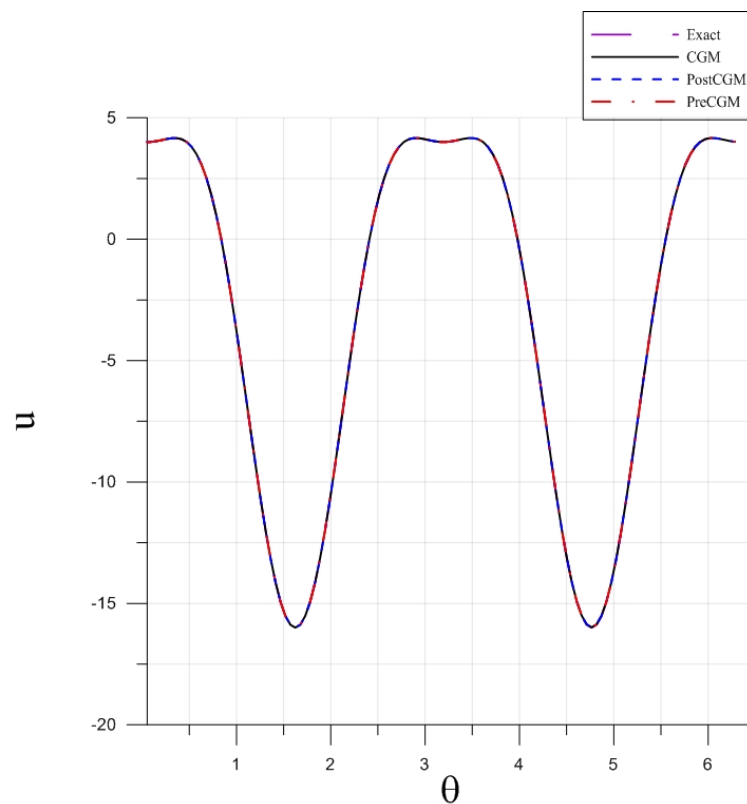


Figure 3.4 $n=120$ Cauchy Problem 數值解與真實解之比較

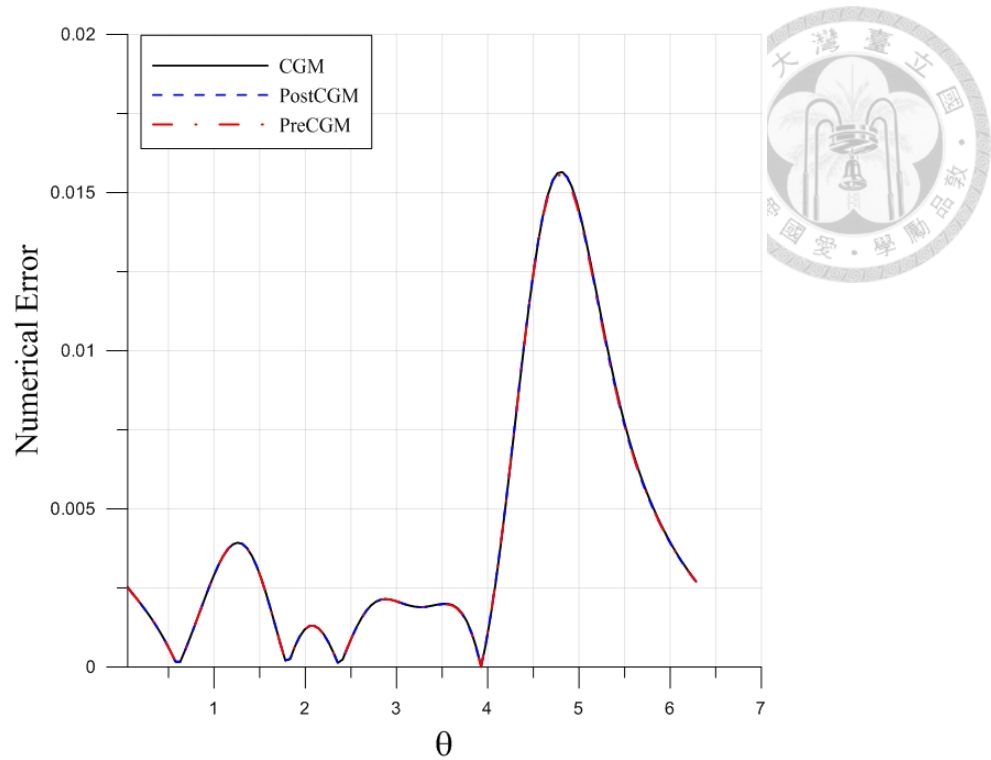


Figure 3.5 $n=120$ Cauchy Problem 三種方法之數值誤差比較

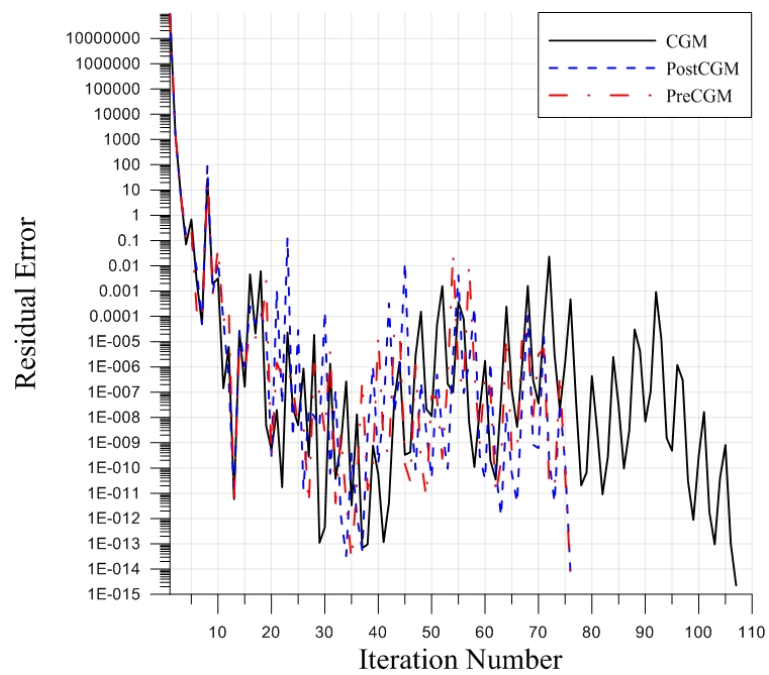


Figure 3.6 $n=120$ Cauchy Problem 三種方法之殘差與迭代步數關係圖

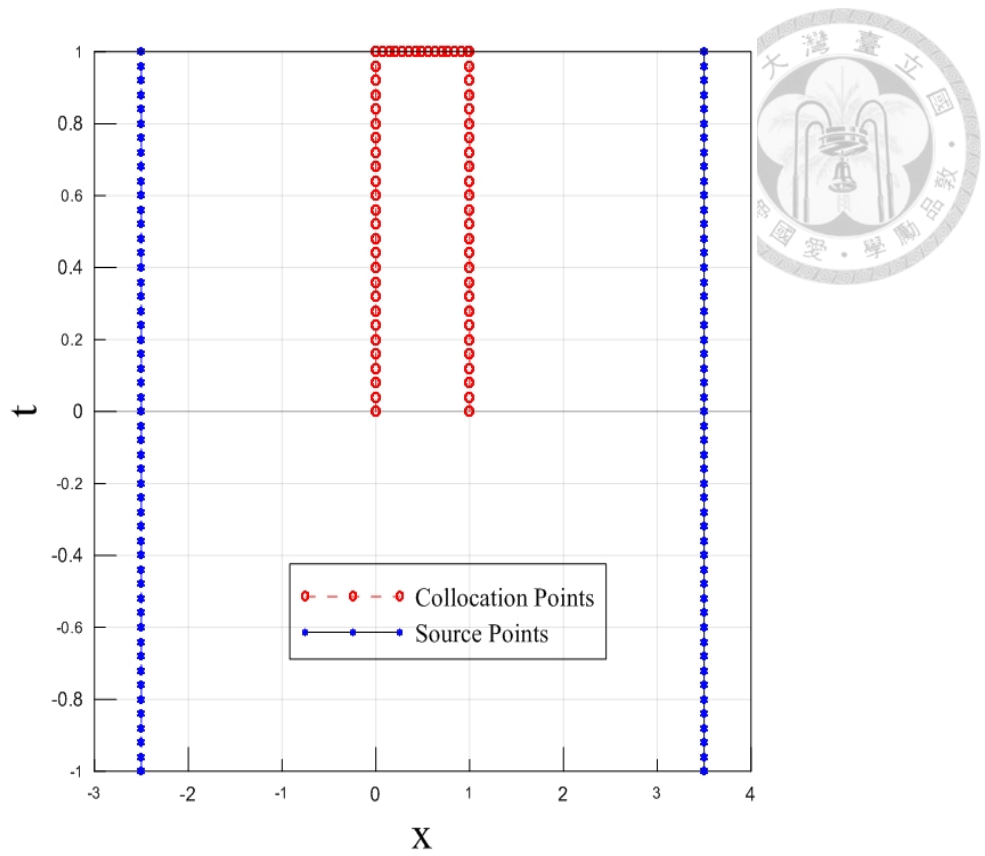


Figure 3.7 BHCP 源點佈設方式

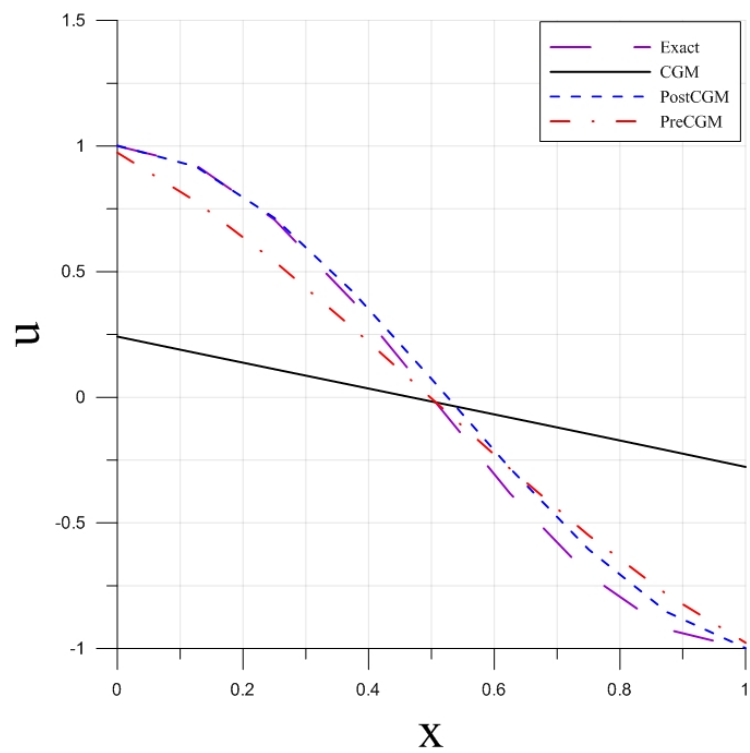


Figure 3.8 $n=31$ BHCP 數值解與真實解之比較

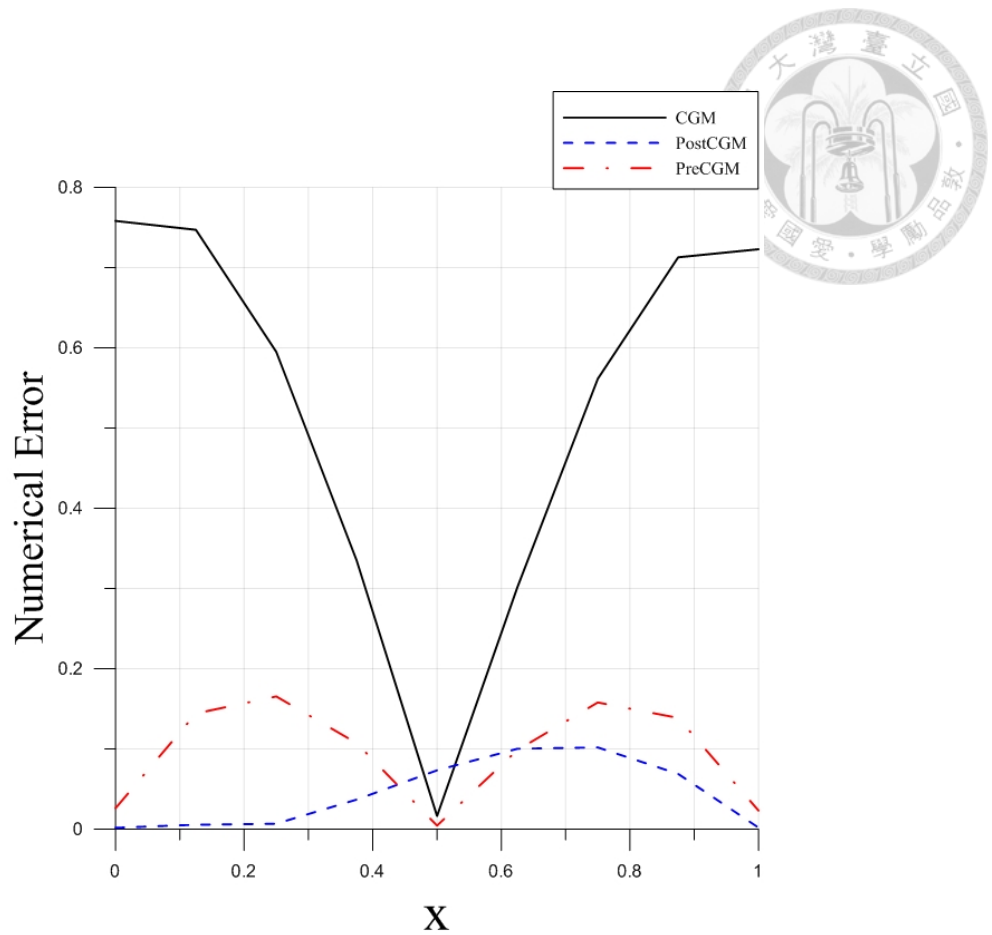


Figure 3.9 $n=31$ BHCP 三種方法之數值誤差比較

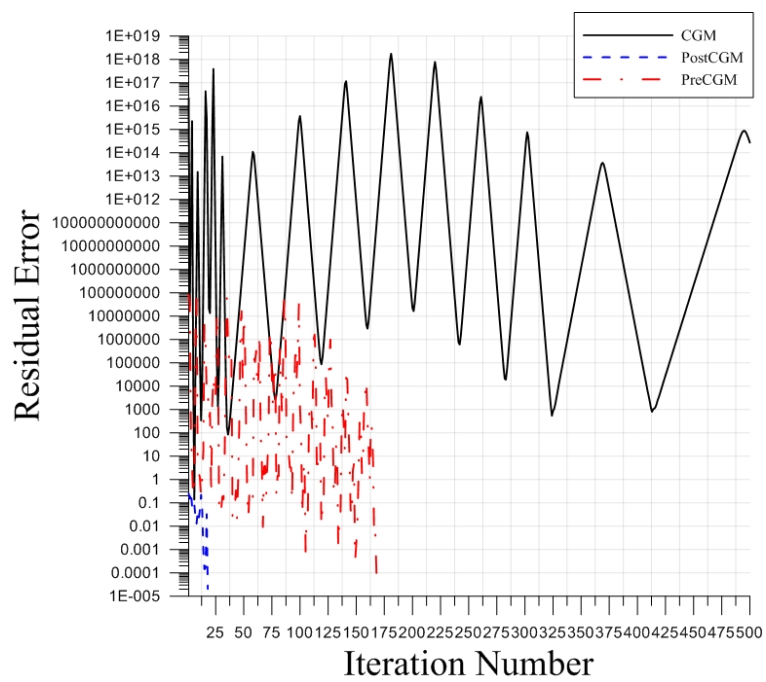


Figure 3.10 $n=31$ BHCP 三種方法之殘差與迭代步數關係圖

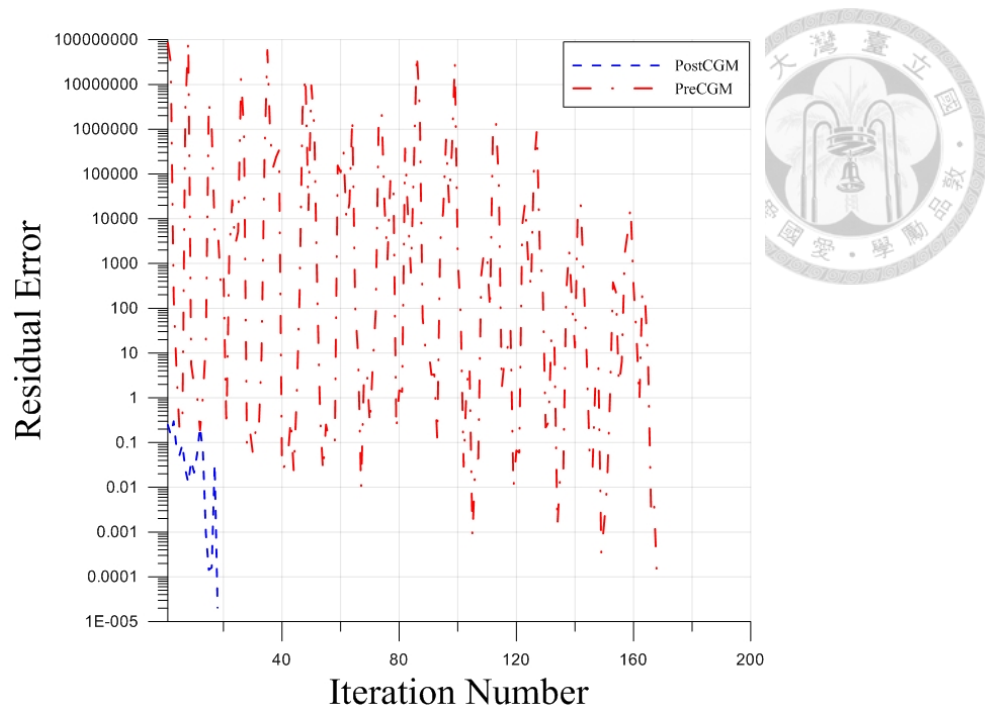


Figure 3.11 $n=31$ BHCP PostCGM 與 PreCGM 之殘差與迭代步數關係圖

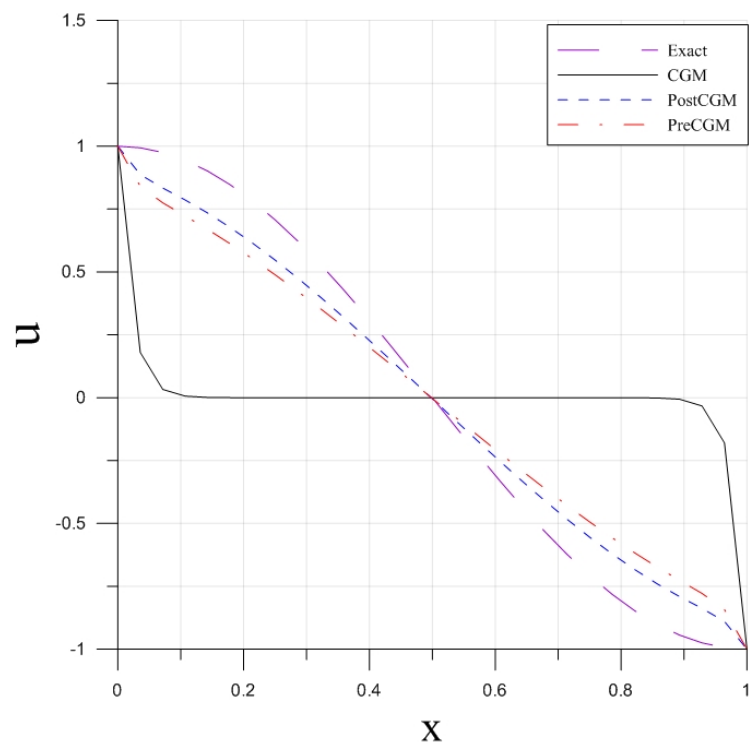


Figure 3.12 $n=71$ BHCP 數值解與真實解之比較

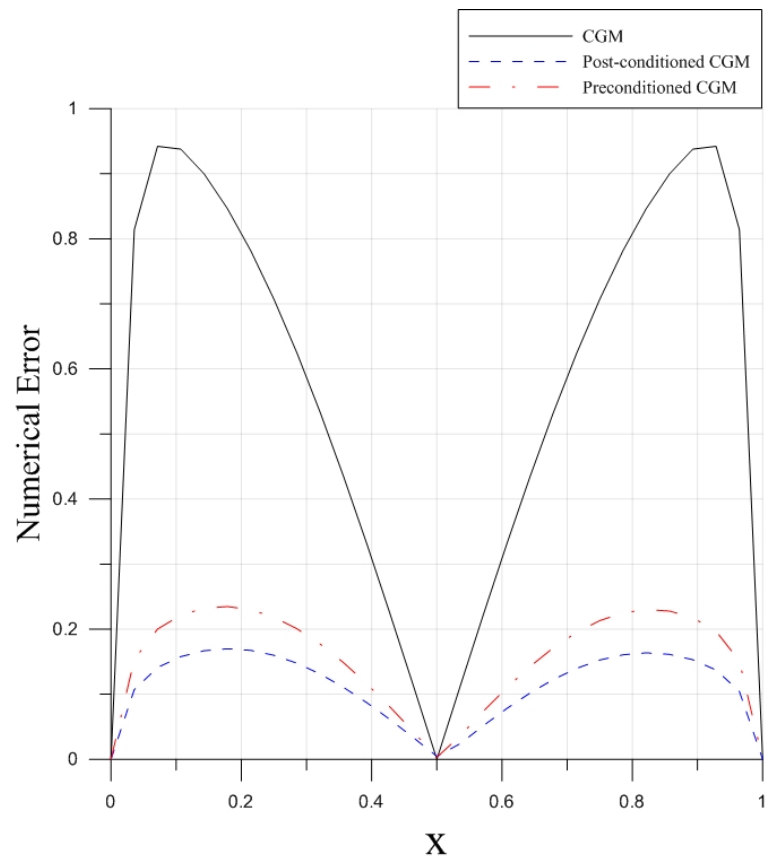


Figure 3.13 $n=71$ BHCP 三種方法之數值誤差比較

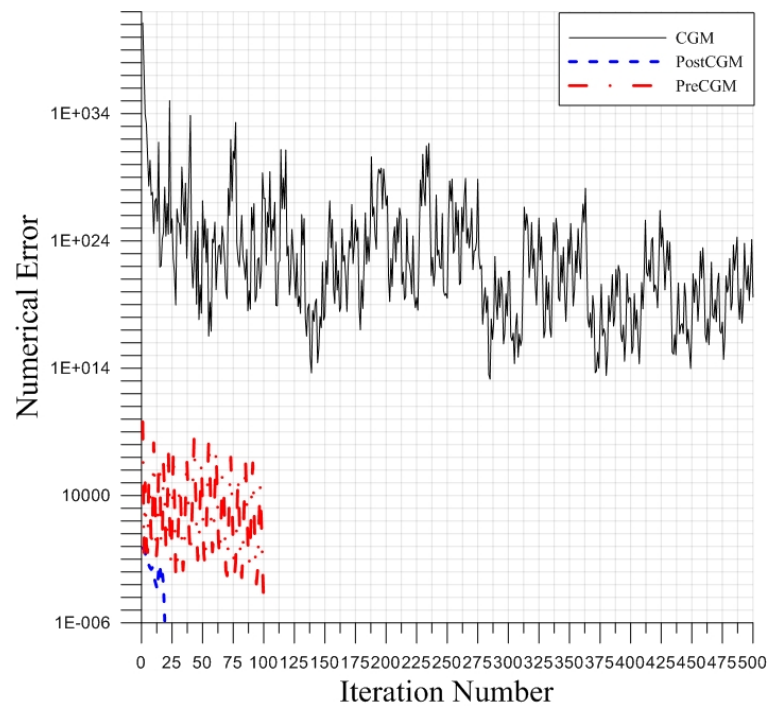


Figure 3.14 $n=71$ BHCP 三種方法之殘差與迭代步數關係圖

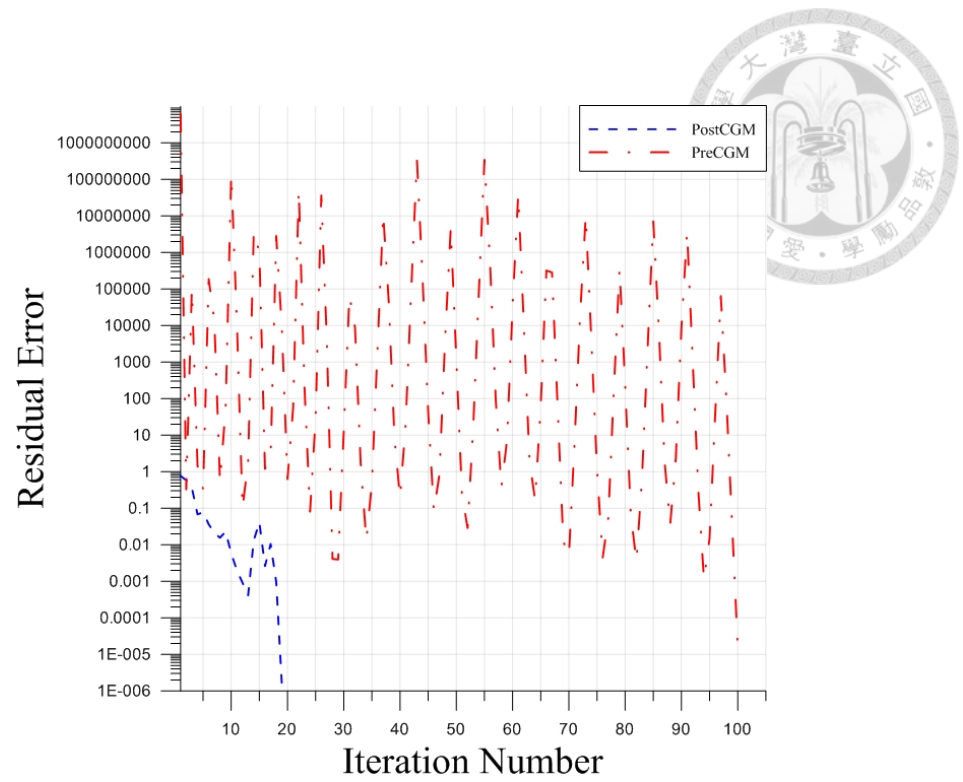


Figure 3.15 $n=71$ BHCP PostCGM 和 PreCGM 殘差與迭代步數關係圖

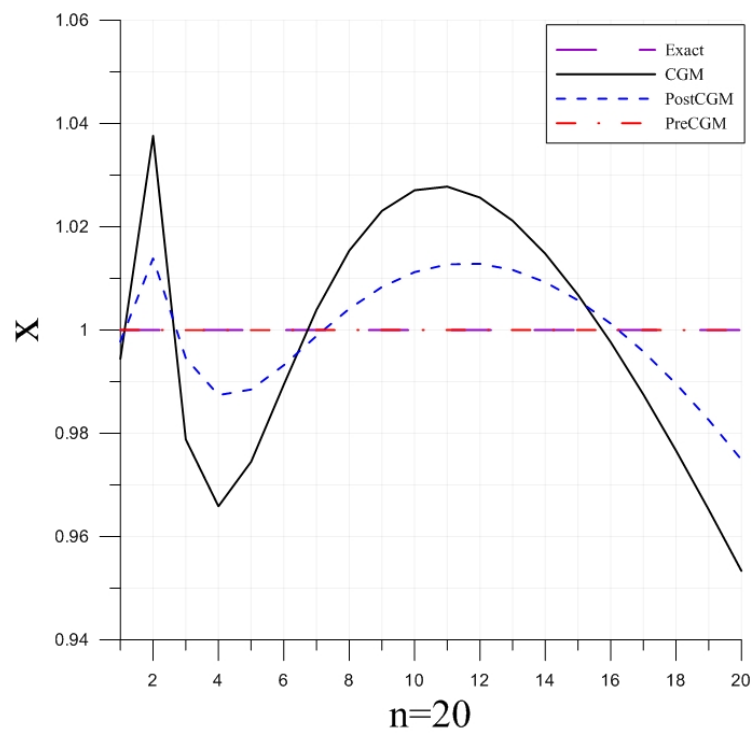


Figure 3.16 $n=20$ Hilbert 矩陣未加入噪音汙染之數值解與真實解之比較

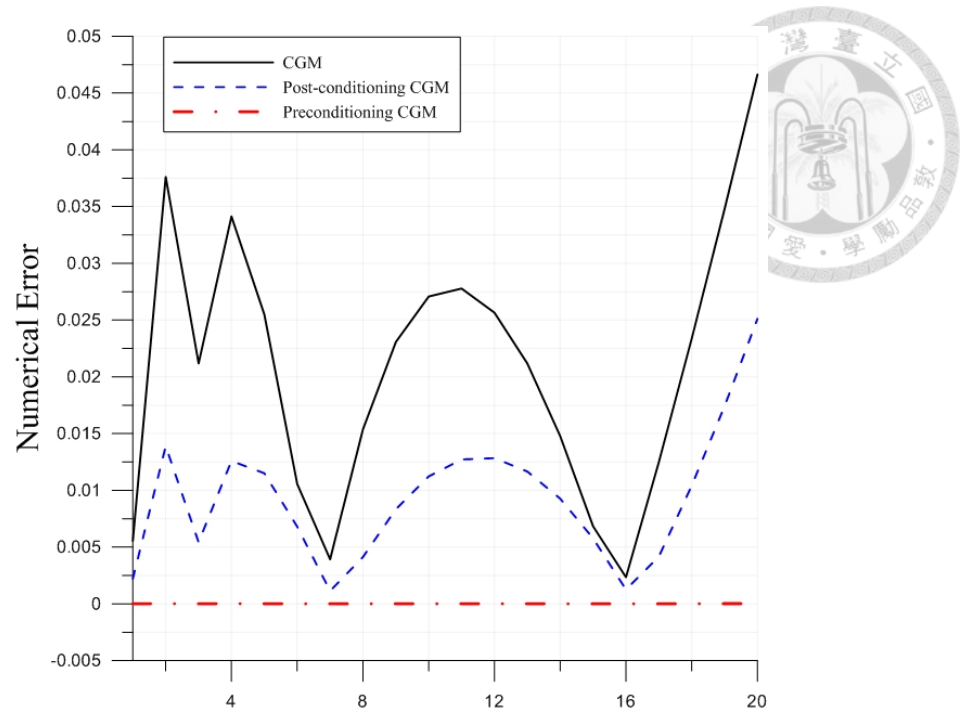


Figure 3.17 $n=20$ Hilbert 矩陣未加入噪音汙染三種方法之數值誤差比較

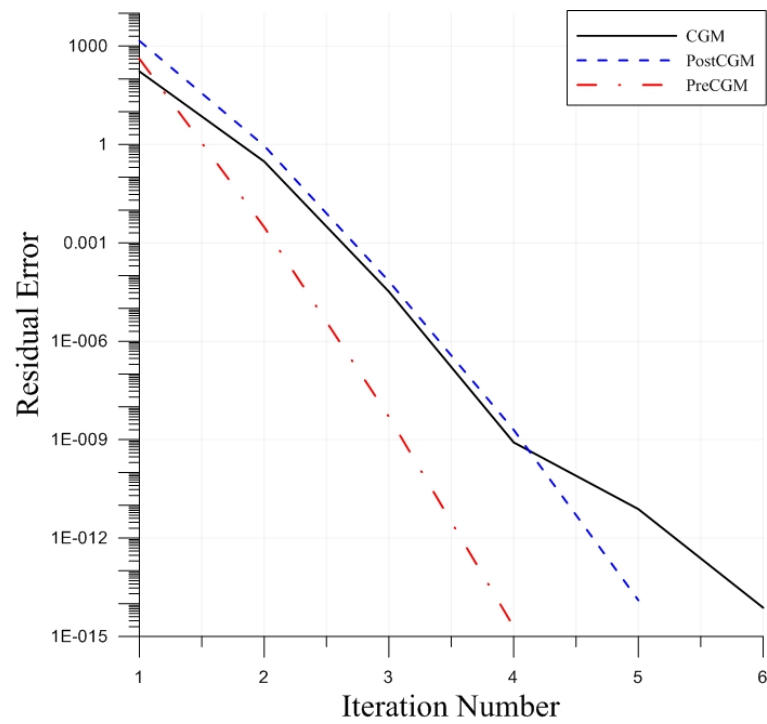


Figure 3.18 $n=20$ Hilbert 矩陣未加入噪音汙染之殘差與迭代步數關係圖

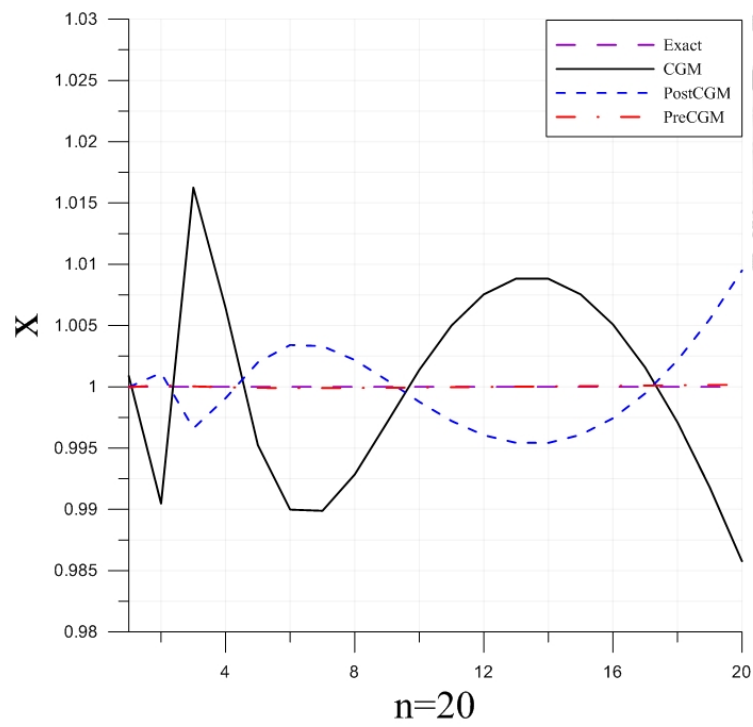


Figure 3.19 $n=20$ Hilbert 矩陣之數值解與真實解之比較

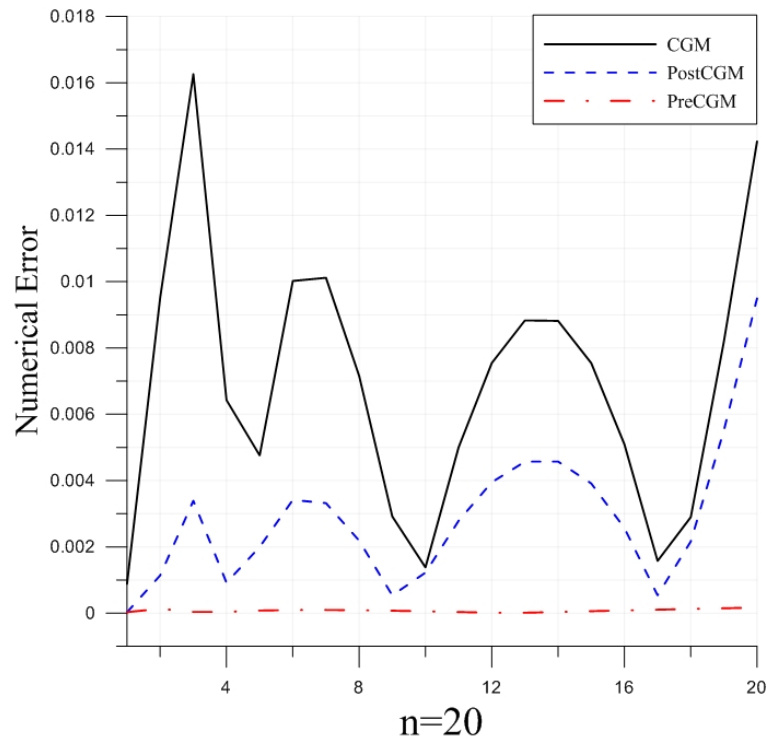


Figure 3.20 $n=20$ Hilbert 矩陣三種方法之數值誤差比較

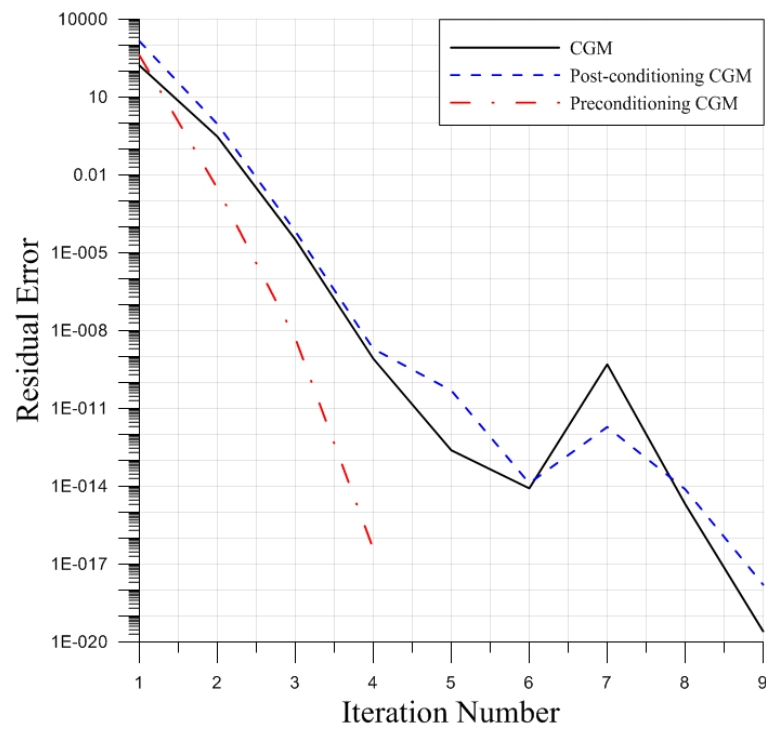


Figure 3.21 $n=20$ Hilbert 矩陣之殘差與迭代步數關係圖

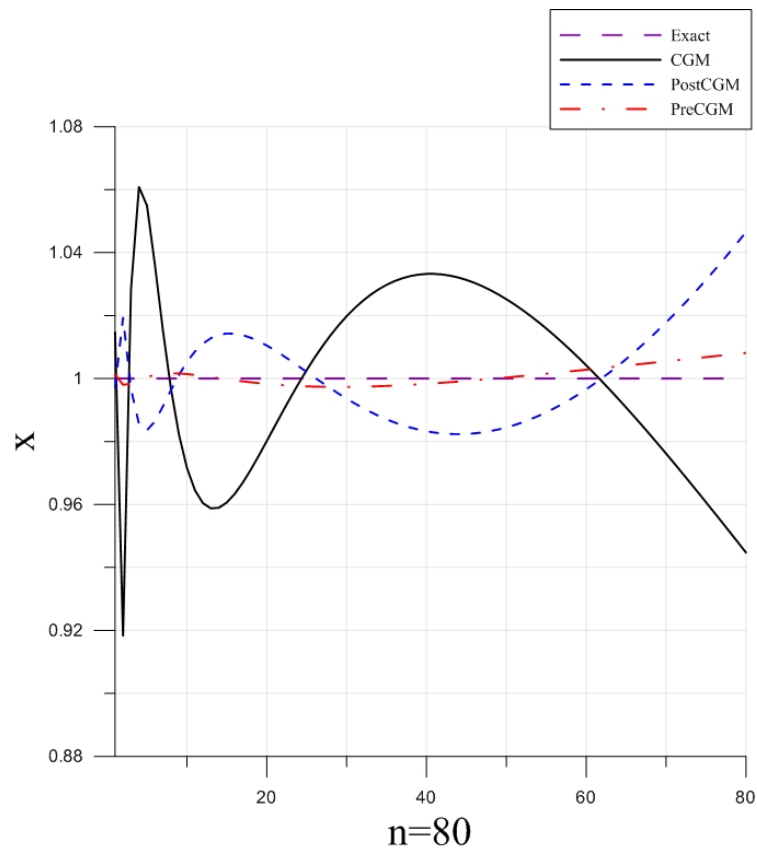


Figure 3.22 $n=80$ Hilbert 矩陣之數值解與真實解之比較

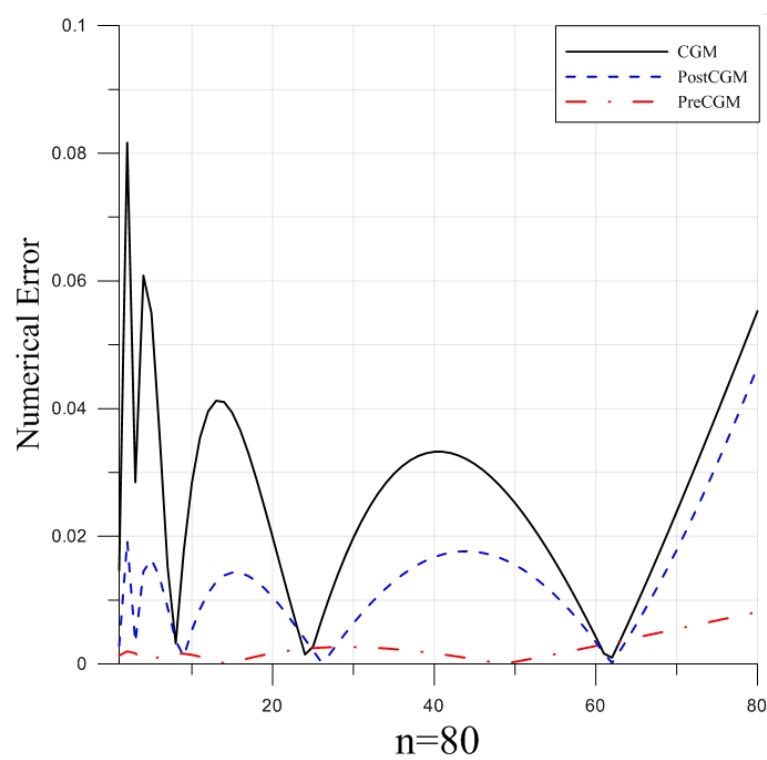


Figure 3.23 $n=80$ Hilbert 矩陣三種方法之數值誤差比較

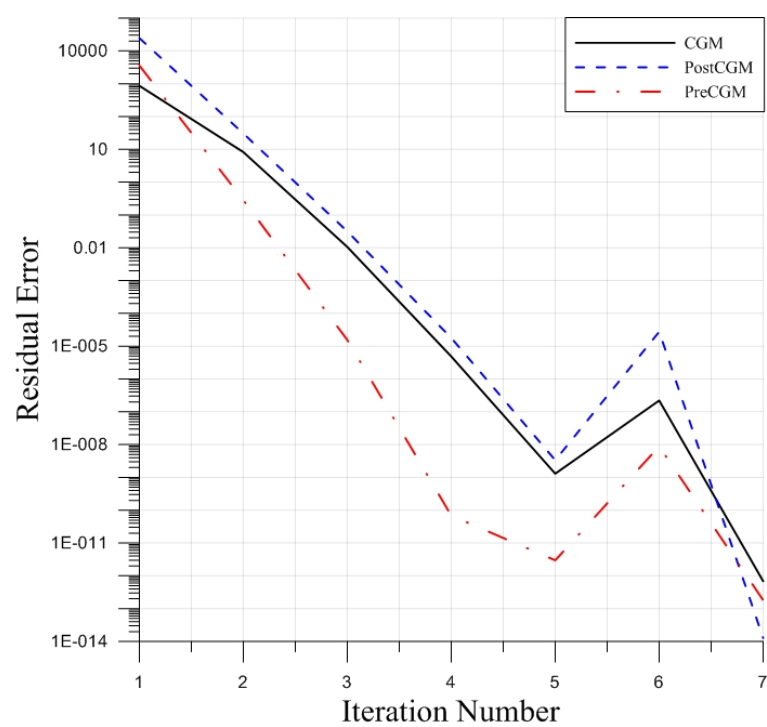


Figure 3.24 $n=80$ Hilbert 矩陣之殘差與迭代步數關係圖

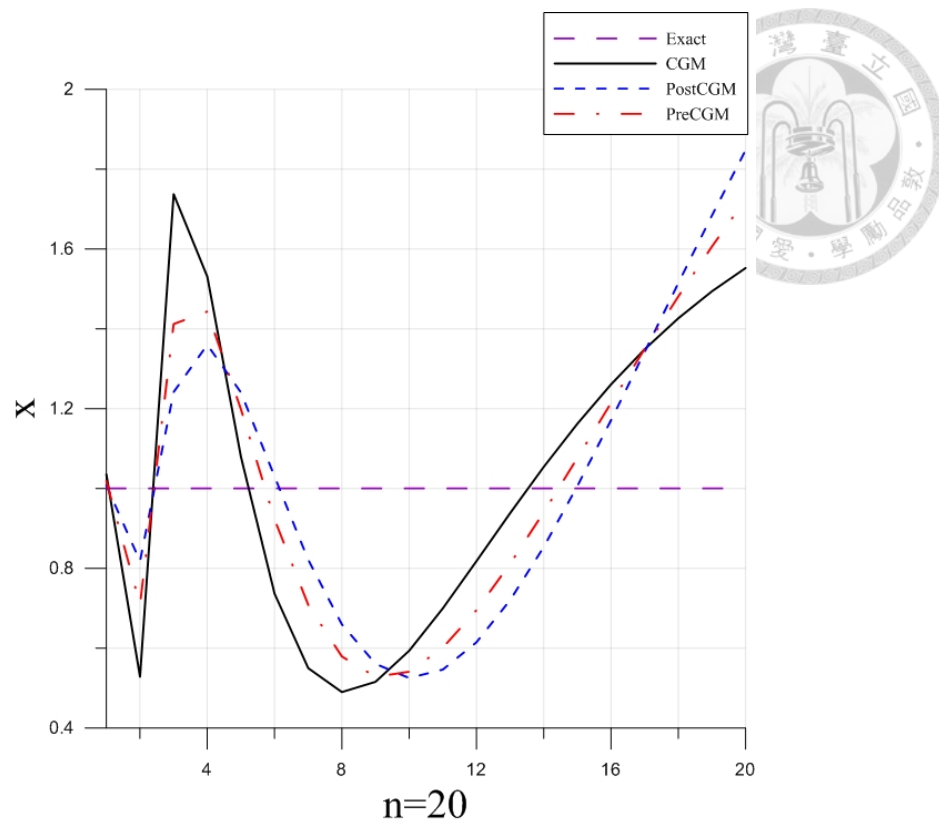


Figure 3.25 $n=20$ Hilbert 矩陣受噪音汙染 $\sigma=0.01$ 之數值解與真實解之比較

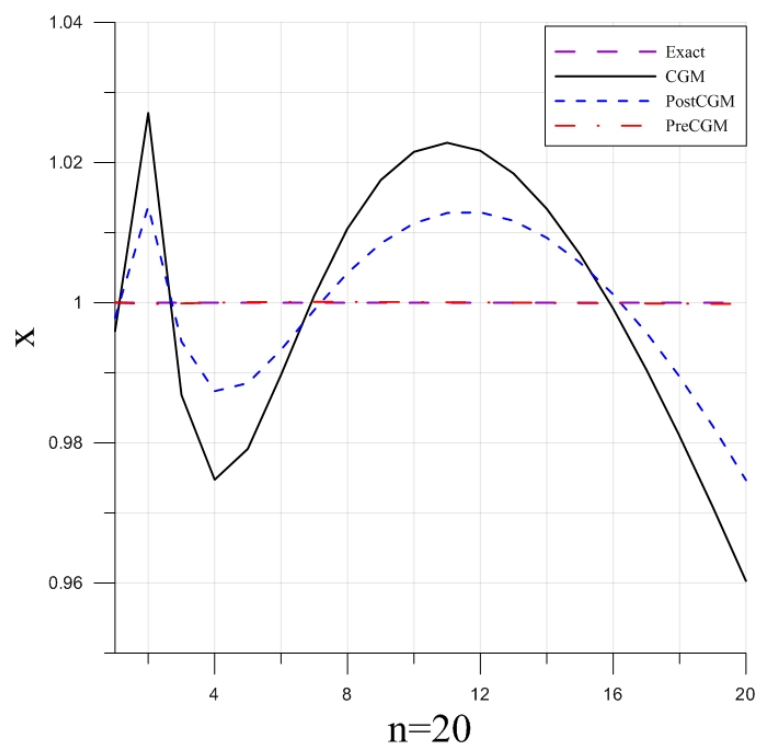


Figure 3.26 $n=20$ Hilbert 矩陣受噪音汙染 $\sigma=10^{-4}$ 之數值解與真實解之比較

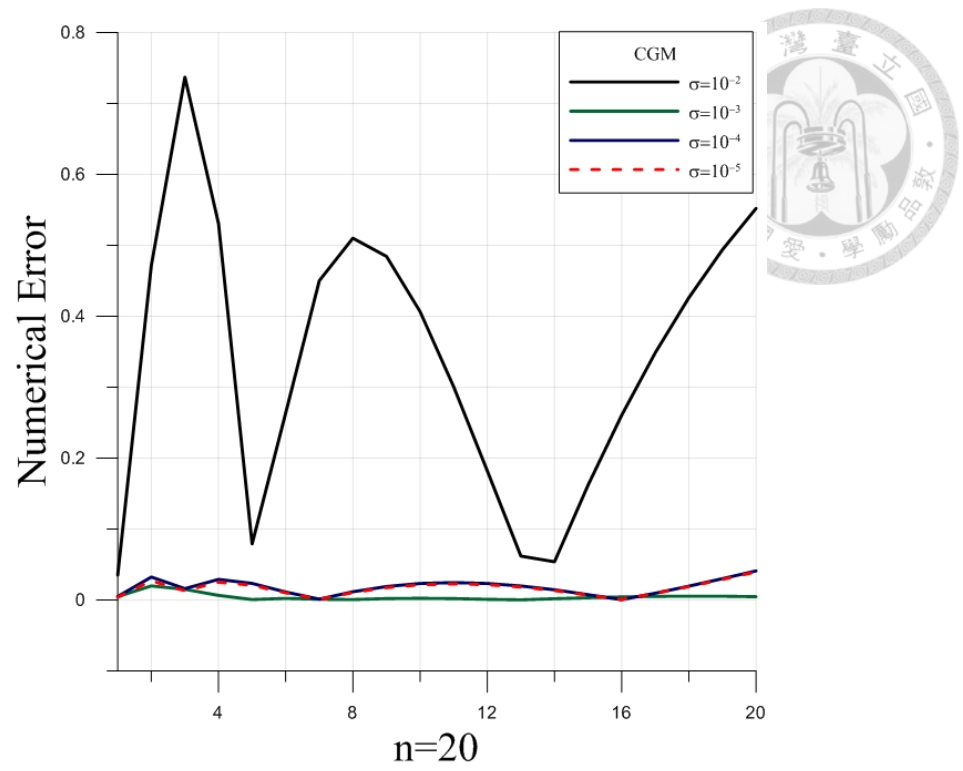


Figure 3.27 $n=20$ Hilbert 矩陣不同噪音汙染下 CGM 之數值誤差比較

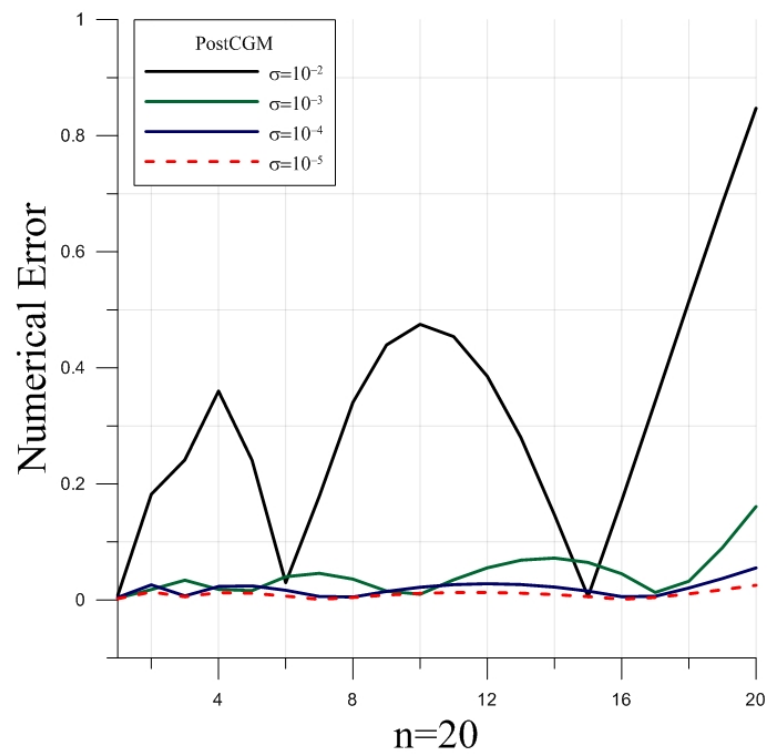


Figure 3.28 $n=20$ Hilbert 矩陣不同噪音汙染下 PostCGM 之數值誤差比較

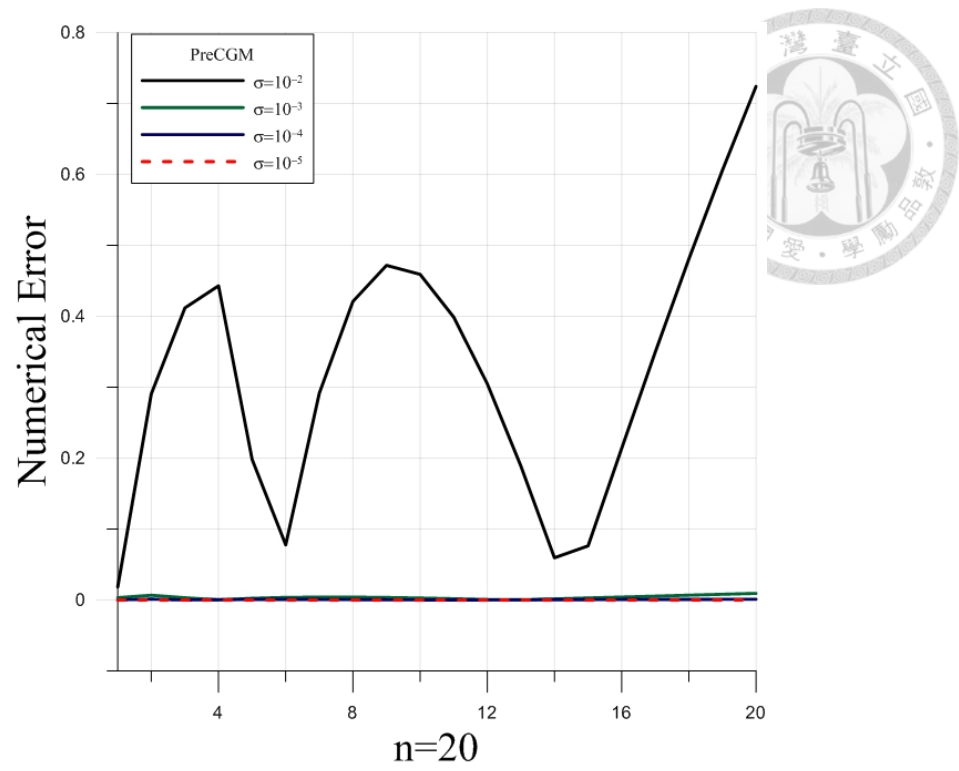


Figure 3.29 $n=20$ Hilbert 矩陣不同噪音汙染下 PreCGM 之數值誤差比較

第四章 雙側等模調整器之研究

前章所介紹之單側等模調整器，於不同算例當中分別各自占有優勢點，而本章節將延續其等模長調整器之理論，更進一步發展出同時保有前調整器及後調整器優點之雙側調整器。本章節一開始將介紹兩個其前調整器作用時機不相同之雙側調整器，接著將採用與上章節相同之三個算例來驗證調整器之優劣。

使用調整器的目的為希望條件數降至越低越好，以便求解，於單側調整器中，條件數確實有下降但並非至最小，因此於本章之研究以降低條件數至最小為目標，調整器的求得雖然同樣是以等模長之觀念得到，步驟卻較為繁雜。

由於兩個方法中前調整器與後調整器之求得方法是相同的，只是作用時機之差異，首先來介紹調整器之求得。

利用加入參數 γ 改良(3.5)式和(3.17)式兩公式：

$$P = \gamma \left(\frac{\sum_{i=1}^n B_{i1}^2}{\sum_{i=1}^n B_{ij}^2} \right), j = 2 \sim n \quad (4.1)$$

$$Q = \gamma \left(\frac{\sum_{i=1}^n B_{1i}^2}{\sum_{i=1}^n B_{ji}^2} \right), j = 2 \sim n \quad (4.2)$$

其中 γ 為欲使條件數最小的參數，隨問題不同而有所差異。

本研究先利用前後調整器對給定矩陣 B 進行一系列連續之預處理程序，採 PQ 程序，亦即先利用 P 調整器進行預處理再採用 Q 調整器進行預處理，重複以上之步驟直至條件數降至滿意為止，其中，所有的 P 和 Q 將隨著 B 矩陣之改變而改變，而以上之步驟只是為求取可將條件數降至最佳結果的 P 和 Q 。最終用來進行求解預處理步驟的調整器是為 PQ 程序當中所有的 P 矩陣相乘為後調整器，所有的 Q 相乘視為前調整器。將(4.1)式及(4.2)式以符號表示成：

$$P = P(B), Q = Q(B) \quad (4.3)$$

(4.3)式顯示調整器 P 和 Q 是藉由 B 矩陣所求得。由此可以得到一個建構調整器之

連續程序：

$$\begin{aligned} P_1 &= P(B), Q_1 = Q(B_1), \\ P_2 &= P(B_2), Q_2 = Q(B_3), \\ &\vdots \\ P_M &= P(B_{2M-2}), Q_M = Q(B_{2M-1}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

其中

$$\begin{aligned} B_1 &= BP_1, B_2 = QB_1 \\ B_3 &= B_2P_2, B_4 = Q_2B_3 \\ &\vdots \\ B_{2M-1} &= B_{2M-2}P_M, B_{2M} = Q_MB_{2M-1} \end{aligned} \quad (4.5)$$

因此，本研究可以得 P 和 Q 調整器分別為：

$$\begin{aligned} P &= P_1P_2P_3 \cdots P_M \\ Q &= Q_MQ_{M-1}Q_{M-2} \cdots Q_1 \end{aligned} \quad (4.6)$$

當分別求得 P 和 Q 調整器後，由於雙側調整器中皆會同時利用前調整器以及後調整器作用，於此，利用後調整器之假設令 $x = Py$ 來進行求解。

4.1 雙邊調整器(Two-side conditioning CGM, TsCGM)

所謂雙邊調整器，也就是雙邊同時使用調整器來進行預處理，利用前調整器以及後調整器同時作用於給定矩陣上，將其條件數降至最低，再進行求解，而求解之步驟如以下，首先將給定 M 以利用(4.1)式～(4.6)式求解 P 和 Q 調整器以及最佳之 γ 。接著進行以下之步驟：

1. 計算 $A = QBP$ ， $b_1 = A^T Qb$ 而 $C = A^T A$
2. 給定初始猜值 y_0 以及 ε
3. 初始殘差 $r_0 = b_1 - Cy_0$ 而搜索方向 $p_1 = r_0$
4. $k = 1, 2, \dots$, 重複以下步驟：

$$\alpha_k = \frac{\|r_{k-1}\|^2}{p_k^T C p_k}$$



$$y_k = y_{k-1} + \alpha_k p_k$$

$$r_k = b_1 - Cy_k$$

$$\beta_k = \frac{\|r_k\|^2}{\|r_{k-1}\|^2}$$

$$p_{k+1} = r_k + \beta_k p_k$$

當 $\|r_k\| < \varepsilon$ 視為滿足收斂條件， y_k 為所求，迭代停止，反之則回到步驟 4 繼

續進行迭代。數值解 $x = Py_k$ 。

4.2 前側雙邊調整器(Pre-conditioning CGM, PrCGM)

有別於前一節所介紹的雙邊調整器同時使用前後調整器來進行預處理，此法為先利用後調整器來改善矩陣之病態程度接著採 PreCGM 演算方法進行求解，整體之演算步驟如下，首先給定 M 並利用(4.1)式~(4.6)式求出最佳 γ 、 P 和 Q 調整器，接著利用以下步驟進行對 y 之求解：

1. 令 $A = BP$, $b_1 = A^T b$ and $C = A^T A$
2. 給定初始猜值 y_0 以及 ε
3. 計算初始殘差 $r_0 = b_1 - Cy_0$, $z_0 = Qr_0$ 以及搜索方向 $p_1 = z_0$
4. $k = 1, 2, \dots$, 重複以下步驟：

$$\alpha_k = \frac{r_{k-1} \cdot z_{k-1}}{p_k^T C p_k}$$

$$y_k = y_{k-1} + \alpha_k p_k$$

$$r_k = b_1 - Cy_k$$

$$z_k = Qr_k$$



$$\beta_k = \frac{r_k \cdot z_k}{r_{k-1} \cdot z_{k-1}}$$

$$p_{k+1} = z_k + \beta_k p_k$$

當 $\|r_k\| < \varepsilon$ 視為滿足收斂條件， y_k 為所求，迭代停止，反之則回到步驟 4 繼

續進行迭代。而數值解 $x = Py_k$ 。

4.3 數值算例

驗證雙側調整器之功效將繼續採用前一章節所使用之三個數值算例，其中包含兩個反算問題和一個正算問題，分別為反算柯西問題、反向熱傳導問題以及線性 Hilbert 問題。

4.3.1 反算柯西問題

考慮反算柯西問題之拉普拉斯方程：

$$\Delta u = u_{rr} + \frac{1}{r} u_r + \frac{1}{r^2} u_{\theta\theta} = 0 \quad (4.7)$$

邊界條件為

$$u(\rho, \theta) = h(\theta), \quad 0 \leq \theta \leq \beta\pi \quad (4.8)$$

$$u_n(\rho, \theta) = g(\theta), \quad 0 \leq \theta \leq \beta\pi \quad (4.9)$$

本題之柯西問題為一過定邊界條件之問題，給定一半之邊界以求得另一半之邊界問題，於(4.8)式和(4.9)式中的 $h(\theta)$ 和 $g(\theta)$ 視為已給定之函數，假設 $\beta \leq 1$ 以及利用 $r = \rho(\theta)$ 來描述給定之邊界 $\Gamma_1 := \{(r, \theta) | r = \rho(\theta), 0 \leq \theta \leq \beta\pi\}$ 而待求邊界函數 $f(\theta)$ 於 $\Gamma_2 := \{(r, \theta) | r = \rho(\theta), \beta\pi \leq \theta \leq 2\pi\}$ 上，利用已知條件(4.7)式、(4.8)式和(4.9)式來尋找未知函數 $f(\theta)$ 。

拉普拉斯方程一般採基本解法來進行求解，利用基本解法可將場域點上 $z = (r \cos \theta, r \sin \theta)$ 之 u 表示為一個線性結合之基本解 $U(z, s_j)$ 。



$$u(z) = \sum_{j=1}^n c_j U(z, s_j), \quad s_j \in \Omega^c \quad (4.10)$$

拉普拉斯方程之基本解

$$U(z, s_j) = \ln r_j, \quad r_j = \|z - s_j\|$$

於實際應用當中，藉由施加邊界條件(4.8)式和(4.9)式於(4.10)式上，可得一線性方程組：

$$Bx = b$$

其中

$$z_i = (z_i^1, z_i^2) = (\rho(\theta_i) \cos \theta_i, \rho(\theta_i) \sin \theta_i)$$

$$s_j = (s_j^1, s_j^2) = (R(\theta_j) \cos \theta_j, R(\theta_j) \sin \theta_j)$$

當 i 為奇數時：

$$B_{ij} = \ln \|z_i - s_j\|$$

若 i 為偶數時：

$$B_{ij} = \frac{\eta(\theta_i)}{\|z_i - s_j\|^2} \left\{ \rho(\theta_i) - s_j^1 \cos \theta_i - s_j^2 \sin \theta_i - \frac{\rho'(\theta_i)}{\rho(\theta_i)} [s_j^1 \sin \theta_i - s_j^2 \cos \theta_i] \right\}$$

$$\eta(\theta_i) = \frac{\rho(\theta_i)}{\sqrt{\rho^2(\theta_i) + [\rho'(\theta_i)]^2}}$$

而

$$x = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$$

$$b = (h(\theta_1), g(\theta_1), \dots, h(\theta_m), g(\theta_m))^T$$

其中 $n=2m$ ，於邊界數據 b 中加入噪音汙染：

$$b_i = \begin{bmatrix} h(\theta_1) \\ g(\theta_1) \\ \vdots \\ h(\theta_m) \\ g(\theta_m) \end{bmatrix} + \sigma R(i)$$

σ 為噪音強度， $R(i)$ 是一組介於 $[-1,1]$ 間之隨機亂數。

邊界場域之半徑 $\rho(\theta) = \sqrt{10 - 6\cos 2\theta}$ ， $0 \leq \theta \leq 2\pi$ ，源點將沿著以 $R(\theta)$ 為半徑之虛擬邊界佈設，其中 $R(\theta) = \rho(\theta) + D$ ， D 為偏移量。

本研究將利用 TsCGM、PrCGM 和 CGM 所求得之數值解與真實解比較：

$$u(r, \theta) = r^2 \cos(2\theta) \quad (4.11)$$

並且探討不同病態程度下 ($n=40, n=120$) 調整器之作用結果，比較收斂步數和數值誤差等。由於源點之佈設於基本解法當中對求解影響甚大，因此於本節也將探討隨著偏移量之不同對數值結果之影響。

本例題中令噪音汙染 $\sigma=0.01$ ，偏移量 $D=120$ 且皆採用 $\gamma=0.5$ 來進行求解以及數值結果之比較。Figure 4.1 和 Figure 4.5 顯現出對於求解此問題，三種方法之數值解皆不因受到噪音之汙染導致數值解差異性過大，而 Figure 4.2 與 Figure 4.5 為三種方法於不同 n 之矩陣所求得之數值解與真實解之間的誤差。在 $n=40$ 時條件數較小之情況下，三種方法不論是否經過調整器預處理之矩陣所求得之數值解誤差皆不會太大，最大誤差皆約為 0.07，然而， $n=120$ 時就可以明顯看出數值的誤差。原始的矩陣所求出來的結果最大的誤差接近 0.1，預處理過之矩陣所求得數值節最高誤差僅為 0.03，顯現出調整器的使用對於數值解之準確性有不錯之改善效果。關於收斂速度之比較可以由 Figure 4.3 和 Figure 4.6 來探究。同樣地， n 較小的矩陣其收斂速度間並無因調整器的作用而導致明顯的差別，但當求解 n 較大之矩陣，病態程度較高因此收斂速度有了明顯的差異，CGM 於 319 步時收斂，TsCGM 和 PrCGM 分別於 121 以及 91 步時滿足收斂條件，可以看出於條件數較低時，CGM 就可求得不錯之數值結果，不採用調整器之幫助是可行的，



然而面對高病態亦即條件數較高之情形，就必須引入調整器之幫忙，以達到數值準確以及收斂速度快的目的。



Table 4.1 和 Figure 4.7 是同為 $n=60$ 且 $\sigma=0.01$ 時對應不同偏移量 D 時 CGM、TsCGM 和 PrCGM 所得之數值解誤差與迭代步數的比較。當 $D=20$ 時，表示源點與場點之距離較為接近，導致矩陣之奇異性質較明顯，因此所得數值誤差較大，然而，TsCGM 及 PrCGM 皆改善 CGM 之誤差甚大之問題，隨著 D 越大，也就是說所佈設之源點與場點差越遠，三種方法之數值解準確性亦隨之提升，然而，無論 D 為何，TsCGM 及 PrCGM 之收斂步數皆較 CGM 來得少許多。

於前面章節曾提到使用基本解法時如何適當的選取源點之佈設也是很重要的，否則對於所求得數值解之準確性影響會很大，和演算法的穩定性亦有密切之關係。

4.3.2 反向熱傳導問題

考慮空間中間隔為 $0 < x < \ell$ 作用於板之兩端的邊界問題，方程形式如下：

$$u_t(x, t) = \alpha u_{xx}(x, t), \quad 0 < t < T, \quad 0 < x < \ell \quad (4.12)$$

其中 α 為熱傳導係數， t 為時間函數以及 x 是位置函數。

邊界條件為

$$u(0, t) = u_0(t) \quad (4.13)$$

$$u(\ell, t) = u_\ell(t)$$

最終狀態之條件為

$$u(x, T) = u^T(x) \quad (4.14)$$

(4.12)式之基本解形式為

$$K(x, t) = \frac{H(t)}{2\sqrt{\alpha\pi t}} e^{\left(\frac{-x^2}{4\alpha t}\right)} \quad (4.15)$$

其中 $H(t)$ 為單位階梯函數。

於場域中 $z = (x, t)$ 中 u 的解可以表示成一基本解之線性組合，

$$u(z) = \sum_{j=1}^n c_j U(z, s_j), \quad s_j = (\eta_j, \tau_j) \in \Omega^c \quad (4.16)$$

n 為源點個數， c_j 是待求係數， s_j 是坐落於 Ω^c 之源點， Ω^c 為 $\Omega = [0, \ell] \times [0, T]$ 之

補充條件，熱傳導方程之基本函數 $U(z, s_j)$ ：

$$U(z, s_j) = K(x - \eta_j, t - \tau_j) \quad (4.17)$$

藉由施加邊界條件(4.13)式和最終狀態條件(4.14)式於(4.12)式上，可得一線性方程組：

$$Bx = b$$

其中

$$B_{ij} = U(z_i, s_j)$$

$$x = (c_1, \dots, c_n)^T$$

$$b = (u_\ell(t_i) \ i = 1, \dots, m_1; u^T(x_j) \ j = 1, \dots, m_2; u_0(t_k) \ k = m_1, \dots, 0)^T$$

真實解為：

$$u(x, t) = \cos(\pi x) e^{-\pi^2 t} \quad (4.18)$$

於本例題當中令 $T=1$, $\ell=1$ 以及 $\alpha=1$ 來進行求解，所得之數值解將與(4.18)式比較以探討演算法之準確性。本例題採 $\gamma=1$ 來求得調整器，本研究利用兩個不同 m_1, m_2 的組合進行數值結果的比較，分別為 $m_1=11, m_2=9$ 以及 $m_1=21, m_2=29$ 之組合。於前章節曾提過由於反向熱傳導問題是一個違反自然運行的問題，因此常會造成問題本身之不穩定性，導致有些平時表現不錯之演算法亦失去數值解之穩定性，這是難以避免的。因此本研究亦可藉由數值解之穩定性來判定調整器是否有效改善矩陣的病態性。

Figure 4.8 和 Figure 4.9 為第一組的 m_1, m_2 組合，其中 $n=2m_1+m_2$ 接下來將利用 n 來表示矩陣的大小，由這兩張圖可以看出，即便於條件數較小的情況下，

CGM之數值準確性仍較TsCGM或PrCGM差許多，且由Figure 4.10、Figure 4.11，CGM不僅於數值解之準確性上略遜一籌，收斂速度上，調整器有效改善問題本身之不穩定性，滿足收斂條件而達到收斂，證實即便病態程度較低的矩陣仍需要經由預處理方可達到數值穩定。未經過處理的矩陣條件數為 7.352×10^{37} 而經由調整器處理過後的矩陣條件數皆降至 10^{18} ，證明條件數與數值穩定性有密切的關係，接著來探討病態程度較高之矩陣其數值結果比較。

當 $n=71$ 其未處理過的矩陣條件數高達 9.0967×10^{54} 是屬於更為病態之問題。同樣地不論原先矩陣是如何的病態藉由雙側調整器預處理過之矩陣皆降至條件數為 10^{18} ，證明本研究當初之設定調整器使矩陣的條件數降至最低，確實發揮其作用，接著來看其結果之比較，同樣的未處理過的矩陣而直接使用CGM求解，所得之解誤差大且無法收斂，不僅無法滿足數值解的準確性也無法達到穩定性。Figure 4.12、Figure 4.13、Figure 4.14和Figure 4.15皆明顯地展現出調整器改善矩陣的效果是非常好的，不論是在收斂速度或是數值解之準確性上面。因此，由上面這三個不同病態程度的矩陣所求得之數值解，可以明顯的看出，面對高度病態且穩定性差之問題調整器的引入是必要的，求解反向熱傳導問題中此兩種調整器皆發揮不錯之功效，雙邊調整器於收斂速度上又較優於前側雙邊調整器，因此，對於此問題可能採雙邊調整器的使用會較為適合。

4.3.3 Linear Hilbert Problem

找尋一個 n 階之多項式函數 $p(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$ 最符合一給定之連續函數 $f(x)$ ，其中 $x \in [0,1]$ ，可以表成以下式子：

$$\min_{\deg(p) \leq n} \int_0^1 [f(x) - p(x)]^2 dx \quad (4.19)$$

將此問題轉換成 $Bx=b$ ，其中 B 為一個 $(n+1) \times (n+1)$ 的Hilbert矩陣

$$B_{ij} = \frac{1}{i+j-1} \quad (4.20)$$

x 為多項式函數 $p(x)$ 之係數， a_0, a_1, \dots, a_n 共 $n+1$ 個，而 b 矩陣之組成為：

$$b = \begin{bmatrix} \int_0^1 f(x) dx \\ \int_0^1 xf(x) dx \\ \vdots \\ \int_0^1 x^n f(x) dx \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

是唯一僅藉由 $f(x)$ 所得。

先對 $n=20$ 且未加入噪音汙染之矩陣來進行求解，此問題的真實解為：

$$[x_1, x_2, \dots, x_n]^T = [1, 1, \dots, 1]^T \quad (4.22)$$

而 b 為：

$$b_i = \sum_{j=1}^n \frac{1}{i+j-1} \quad (4.23)$$

Figure 4.16 跟 Figure 4.17 為數值解準確性的探討，Figure 4.18 則為收斂速度之比較，可以明顯看出，於收斂速度上 CGM、TsCGM 和 PrCGM 皆同時於九步達到收斂，已說明三種演算法皆達到最好之收斂結果。然而當探討數值解之誤差時，CGM 卻擁有最準確的解，最大誤差不超過 0.015，TsCGM 之最大誤差較高為 0.04，而 PrCGM 之數值解準確性最低最大誤差可達 0.15，為 CGM 之十倍。當面對的問題為低病態性以及未遭受噪音汙染時，利用調整器進行預處理反而會造成結果之惡化。

接著將 b 加入噪音汙染，利用 $n=50$ 、 $n=100$ 以及 $n=300$ 來探討三個方法之穩定性，此時輸入向量 b 改為：

$$b_i = \sum_{j=1}^n \frac{1}{i+j-1} + \sigma R(i) \quad (4.24)$$

σ 為噪音強度令為 10^{-5} ， $R(i)$ 是一組介於 $[-1, 1]$ 間之隨機亂數，兩項之乘積視為噪

音汙染。

$n=50$ 時之數值結果於 Figure 4.19 和 Figure 4.20 顯現，TsCGM 具有最佳數值之準確性，但 PrCGM 之誤差相近於 CGM。雖然 Hilbert 矩陣為高度病態之矩陣，但因其為正算問題整體屬為較穩定之方程，因此 CGM 可以最快速度達到收斂，即便使用調整器亦僅早一步收斂。Figure 4.22、Figure 4.23 所顯示的為 $n=100$ 時分別所求得之數值解比較，TsCGM 以及 PrCGM 所得之結果差於 CGM，但是其最大誤差僅 0.022，可知三種方法所得之數值結果皆非常準確。Figure 4.24 為迭代步數與殘差之關係圖，雖然 TsCGM 和 PrCGM 初始殘差較高，但卻可以較 CGM 快速 4 步達到收斂，僅 7 步皆收斂，最後則為 $n=300$ 之數值結果比較即 Figure 4.25 以及 Figure 4.26。當面對到如此高病態的矩陣，三種方法皆無法得到準確地解，最大誤差甚至可高達 3 已經失去了數值解之可信任性。而由以上幾個例子來看，本研究可以推測對於求解 Hilbert 問題採用雙邊調整器的效果會優於前側雙邊調整器，收斂速度上兩者有同樣的結果，但是若就準確性來看的話，雙邊的效果較前側雙邊之結果來的佳。

4.4 調整器之比較

由於無從預測噪音亂數之影響，即便相同維度之矩陣，仍可能造成方程之差異，造成結果之不同。為比較單側調整器以及雙側調整器之功效，將五種方法同時求解相同之問題並觀察其結果。Figure 4.28 是 $n=160$ 柯西問題之數值誤差比較，由此圖可明顯看出於準確性上分成兩組，分別為準確性較差之 CGM 及 PreCGM，以及準確性較佳之 PostCGM、TsCGM 及 PrCGM，後三者之準確性相當。於收斂速度方面 TsCGM 僅 102 步收斂，為最快收斂且數值解最準確之方法。Figure 4.29 為 BHCP 中 $n=57$ 之問題，同樣地 TsCGM 於 18 步即收斂優於 PostCGM 之 19 步收斂，而 PrCGM 亦有不錯之結果於 29 步收斂，然而，PreCGM 之改善結果不若其他方法來得佳，且其收斂速度亦是四種調整器當中最慢的，至 99 步方達到收斂。以上兩問題皆為反算問題因此其方程之穩定性較差，我們可明顯看出，

雙側調整器以及 PostCGM 之數值結果較佳，PreCGM 面對反算問題之結果較不理想。而在收斂速度上 TsCGM 皆略優於 PostCGM。Figure 4.30 為 Hilbert 矩陣 $n=50$ 之結果比較，在此正算問題中，單側調整器之結果較佳，不論是數值解之準確性亦或是收斂速度之結果皆優於 CGM。然而，雙側調整器中於反算問題表現極佳之 TsCGM 面對此問題不僅無改善之效果其結果甚至較 CGM 來得不理想。

4.5 小結

本章節之調整器是採用雙側調整器來進行預處理，目的是為使矩陣條件數降至最低再來進行求解以達到收斂速度加快之目的，先進行一系列之預處理程序以確保矩陣之條件數降至最低，再使用其調整器來進行數值計算，TsCGM 與 PrCGM 於反算例子中皆有明顯改善的表現，如求解反算柯西問題時其數值解之精確性明顯優於 CGM 之結果，但是當面對正算問題時，雙側調整器無特別明顯的優勢，不若單側調整器中的前調整器具備顯著的改善效果，同樣地，兩個調整器皆在不同問題中發揮了效果，柯西問題中 PrCGM 較快達到收斂，而 BHCP 中則為 TsCGM 有好的表現。

於前一節本研究將單側及雙側共四個調整器求解同一問題進行結果之比較，由以上三個例子可以明顯看出，雙側調整器之想法為降低條件數至最低，其求法相對複雜以及麻煩，反算問題本身之不穩定性藉由雙側調整器之處理改善效果佳，反算問題之求解不僅需降低其矩陣之病態程度亦需改善問題本身之不穩定性，然而當面對之問題為較為穩定之正算問題，由於問題本身僅病態程度高之問題，僅需改善其條件數即可，因此，利用較簡單之單側調整器可得到較佳之結果，若採用雙側調整器，效果反而不佳。

Table 4.1 $n=60$ Cauchy Problem 三種方法對應不同 D 之數值誤差與迭代步數

		CGM	TsCGM	PrCGM
D=20	最大誤差	0.88	0.225	0.22
	收斂步數	180	116	110
D=50	最大誤差	0.043	0.045	0.046
	收斂步數	68	57	50
D=200	最大誤差	0.0297	0.023	0.0233
	收斂步數	92	58	48

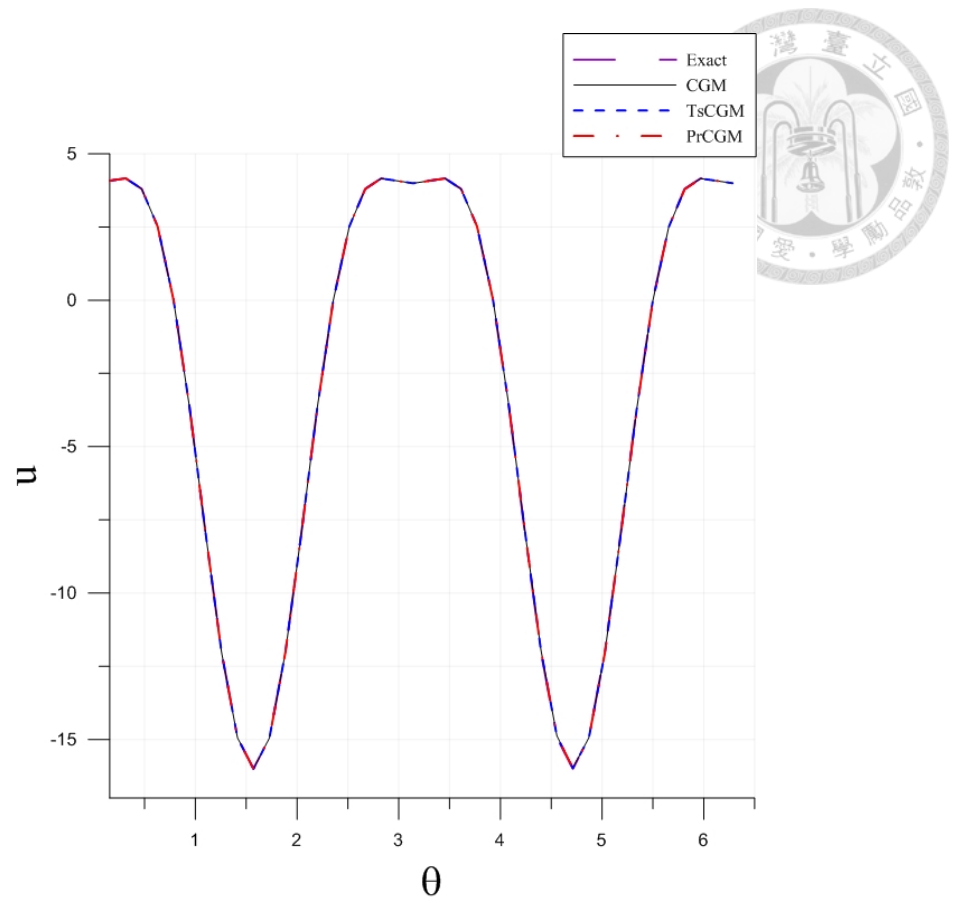


Figure 4.1 $n=40$ Cauchy problem 數值解與真實解之比較

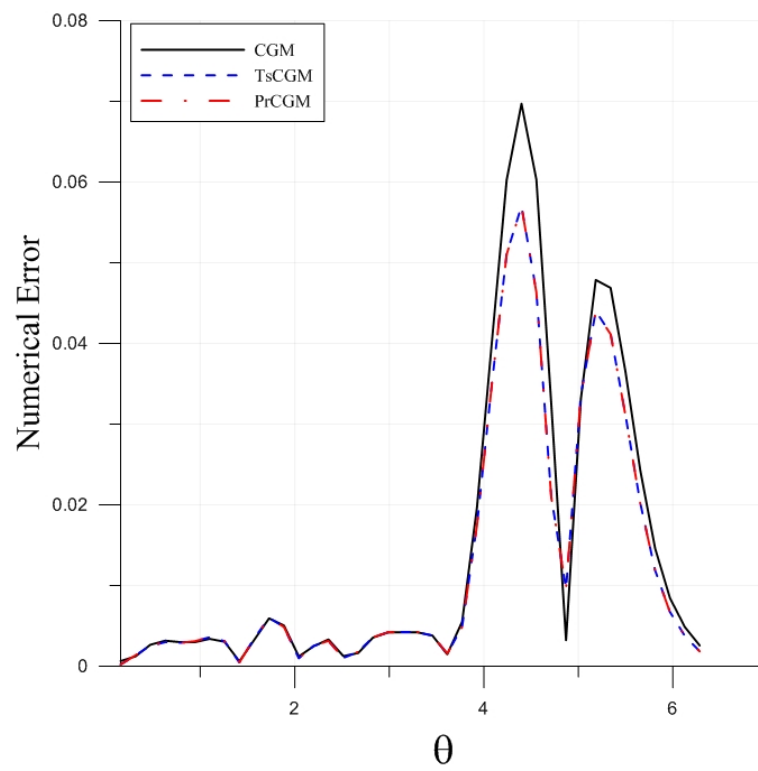


Figure 4.2 $n=40$ Cauchy Problem 三種方法數值誤差比較

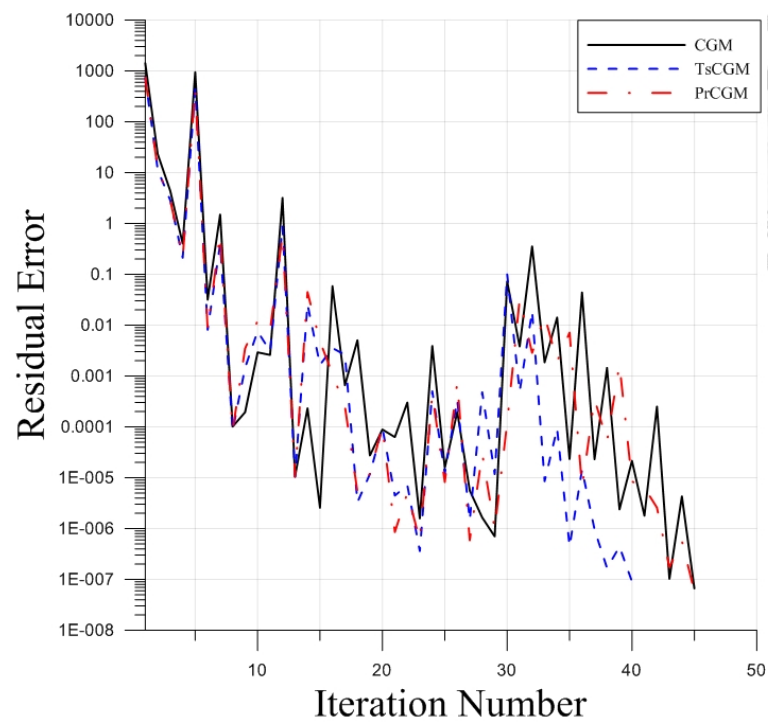


Figure 4.3 $n=40$ Cauchy problem 三種方法之殘差與迭代步數關係圖

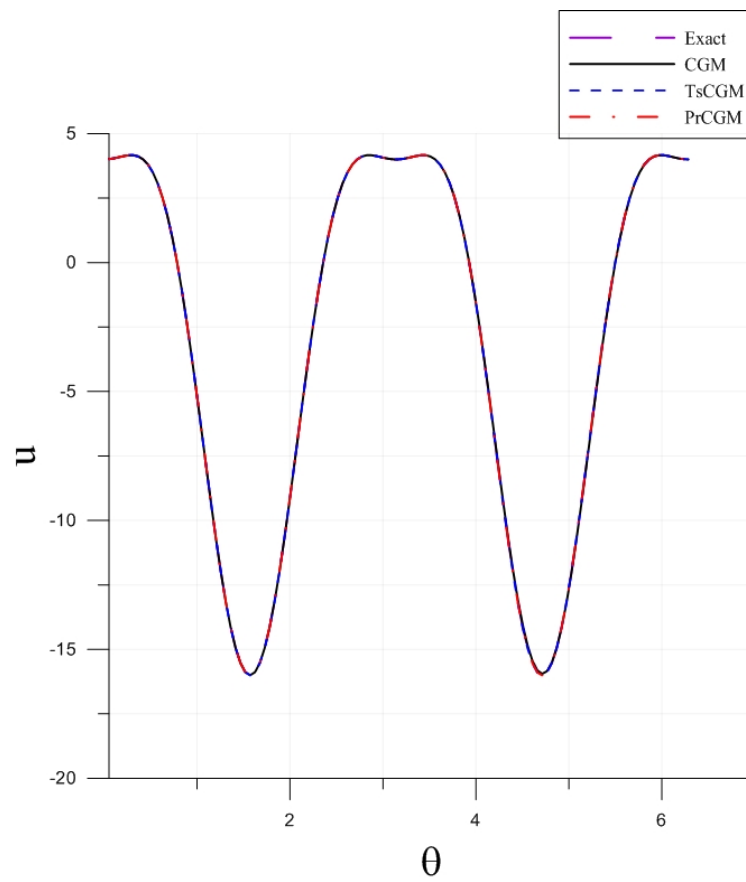


Figure 4.4 $n=120$ Cauchy problem 數值解與真實解之比較

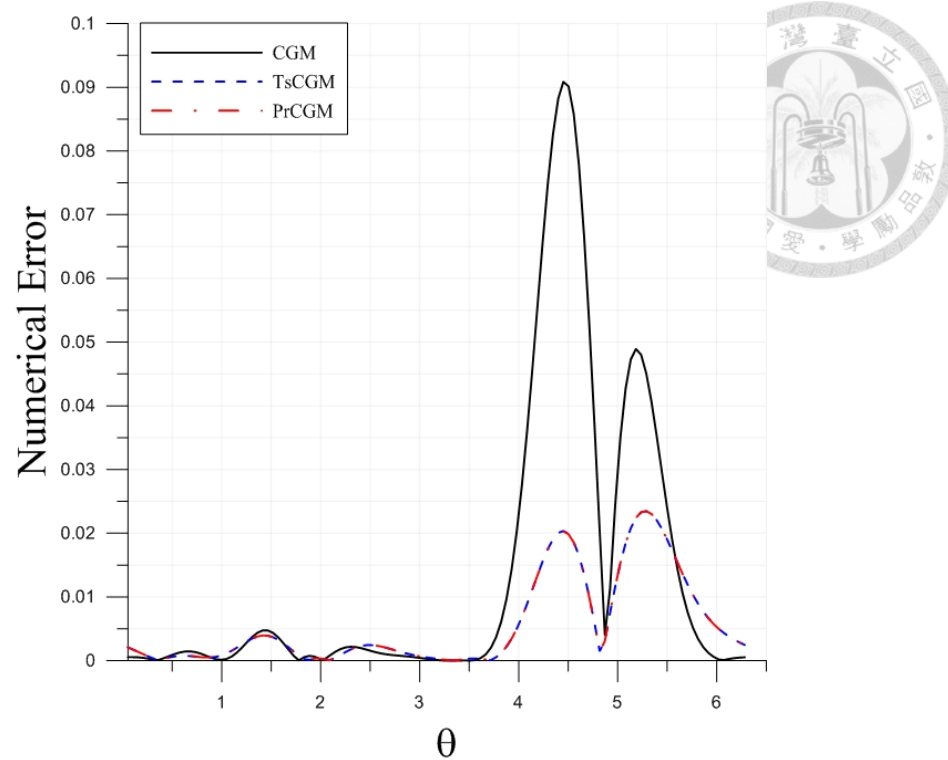


Figure 4.5 $n=120$ Cauchy Problem 三種方法數值誤差比較

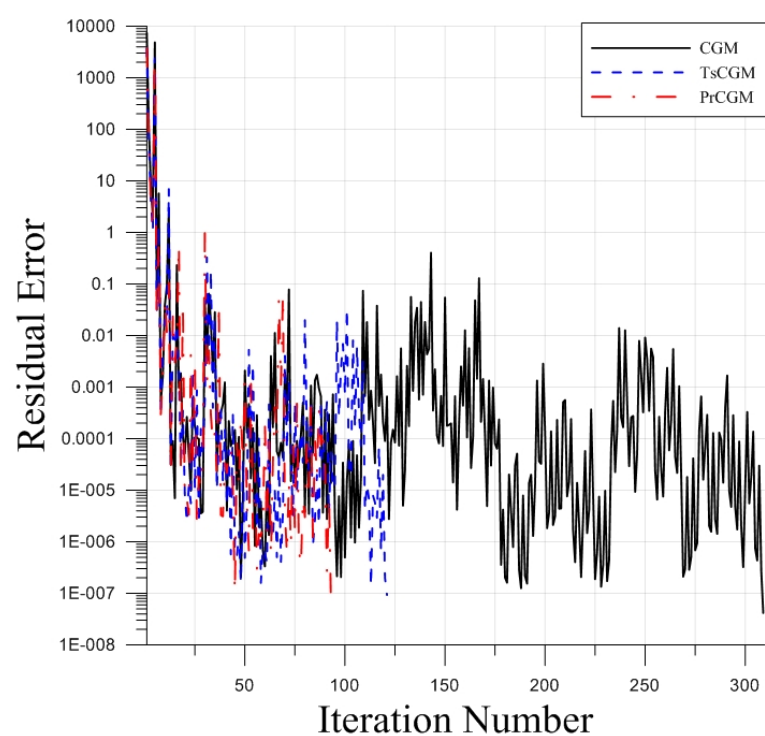


Figure 4.6 $n=120$ Cauchy problem 三種方法之殘差與迭代步數關係圖

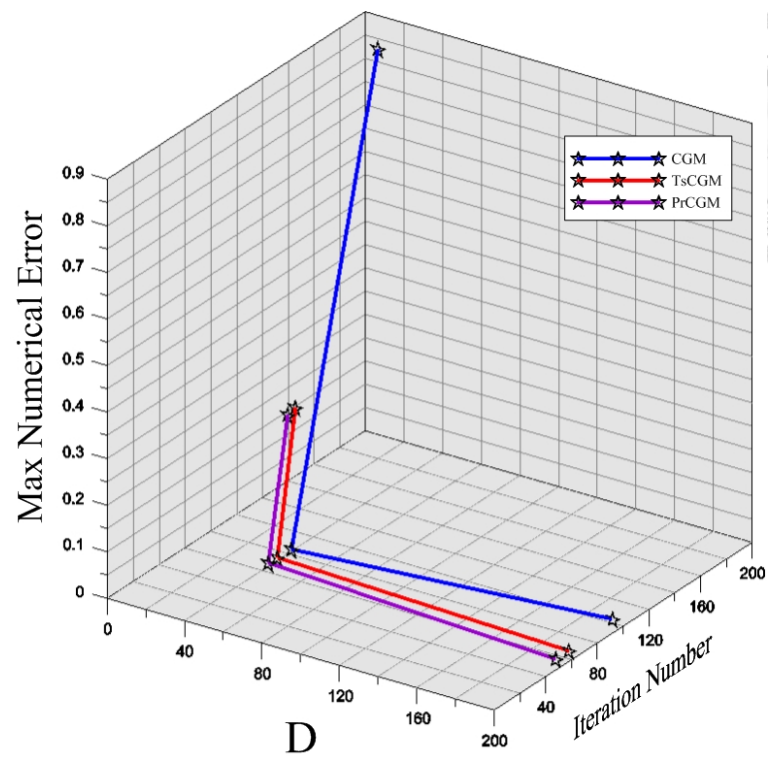


Figure 4.7 三種方法之偏移量、最大誤差與收斂步數之三相圖

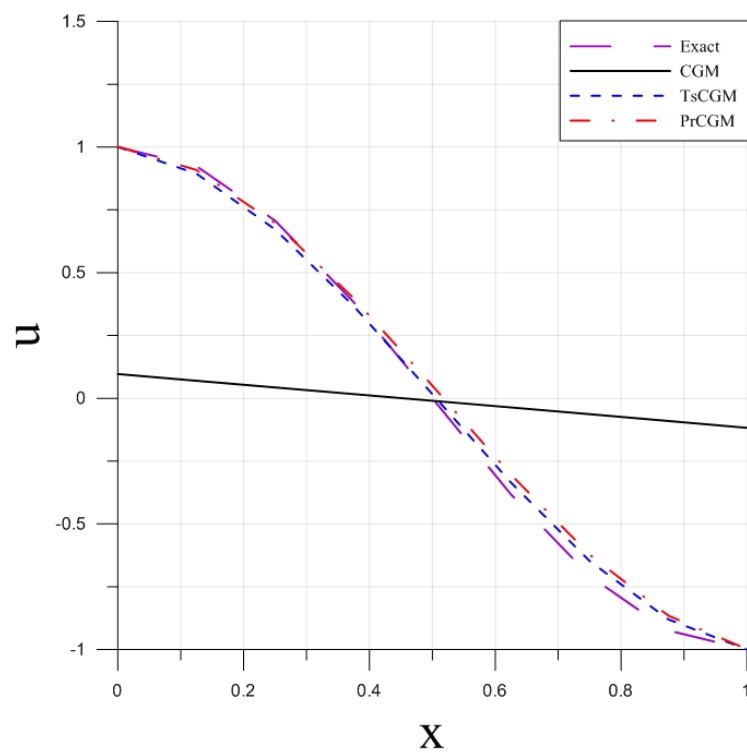


Figure 4.8 $n=31$ BHCP 數值解與真實解之比較

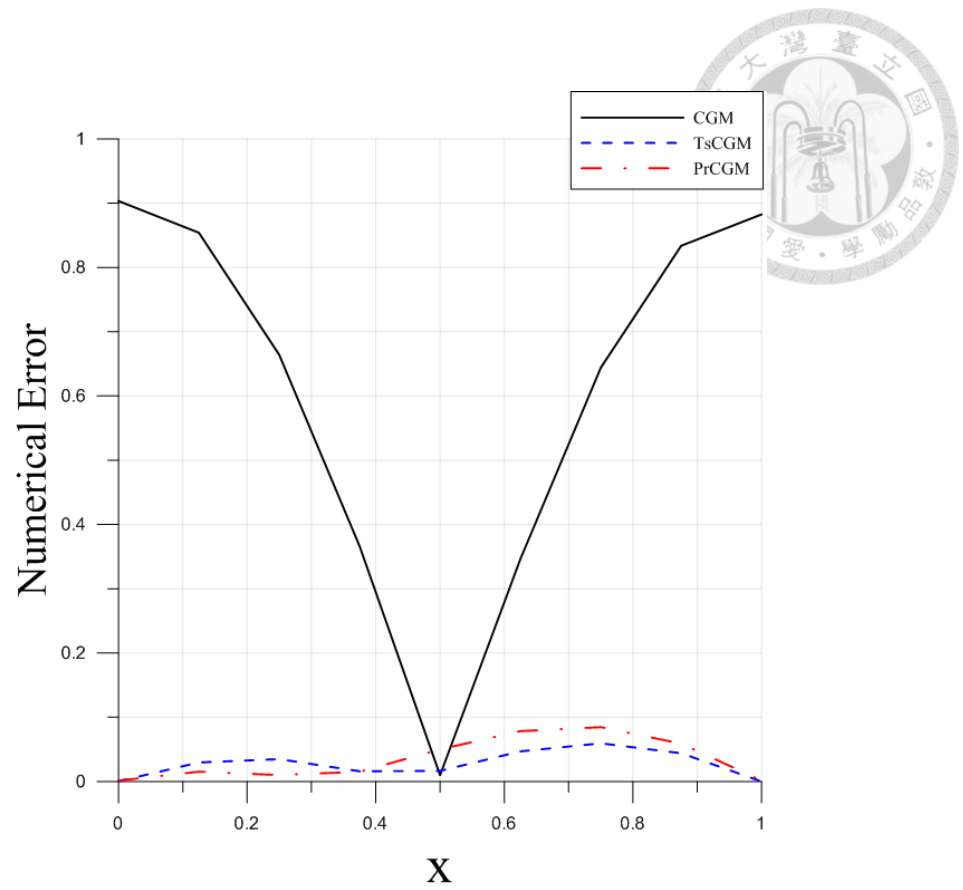


Figure 4.9 $n=31$ BHCP 三種方法之數值誤差比較

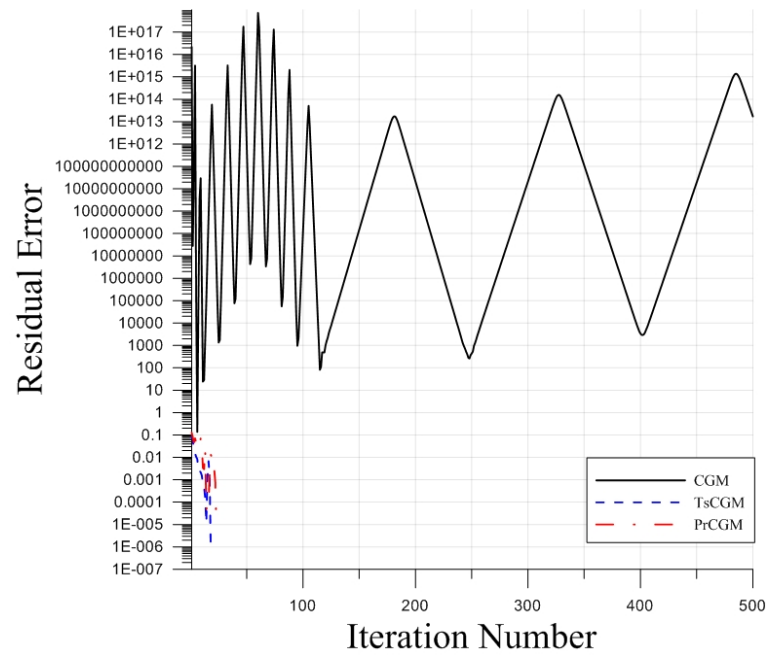


Figure 4.10 $n=31$ BHCP 三種方法之殘差與迭代步數關係圖

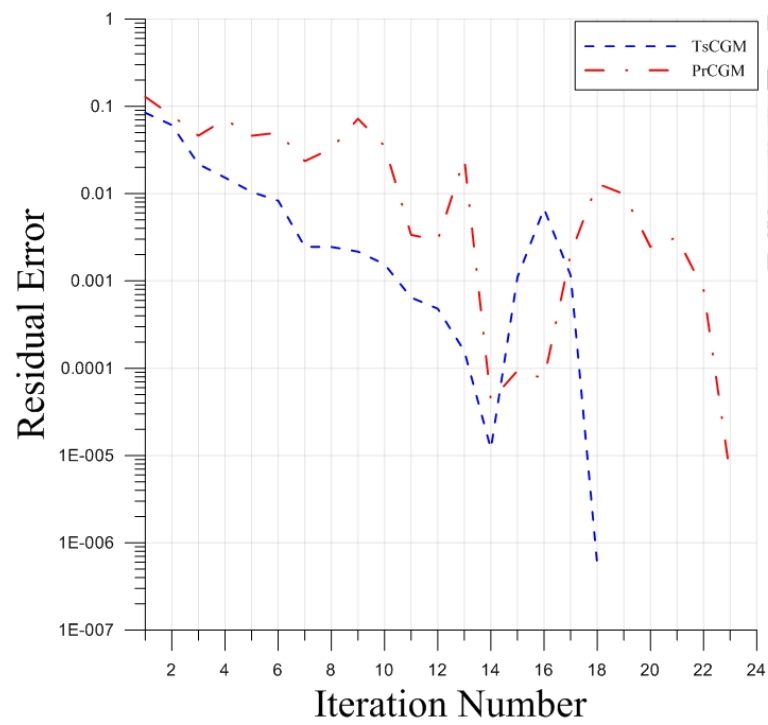


Figure 4.11 $n=31$ BHCP TsCGM 和 PrCGM 之殘差與迭代步數關係圖

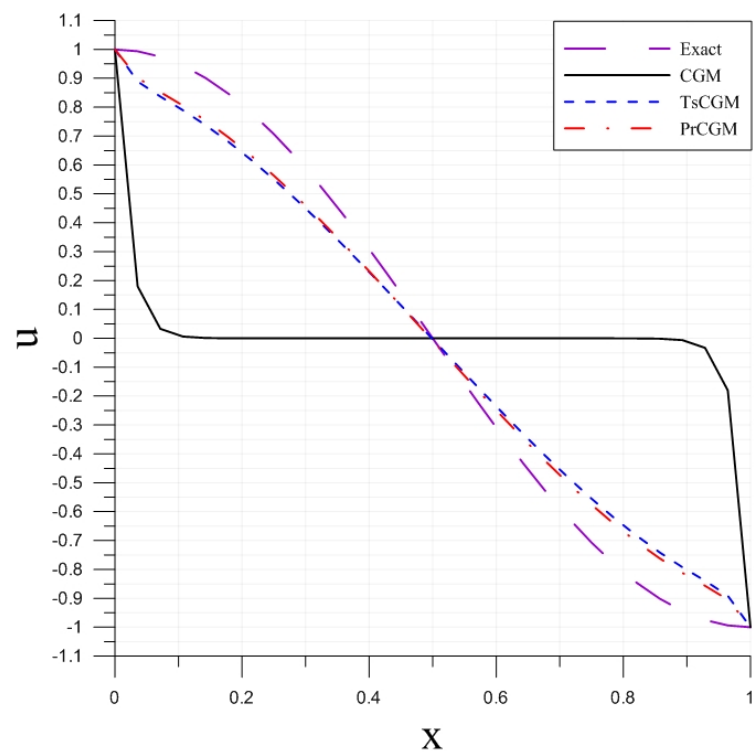


Figure 4.12 $n=71$ BHCP 數值解與真實解之比較

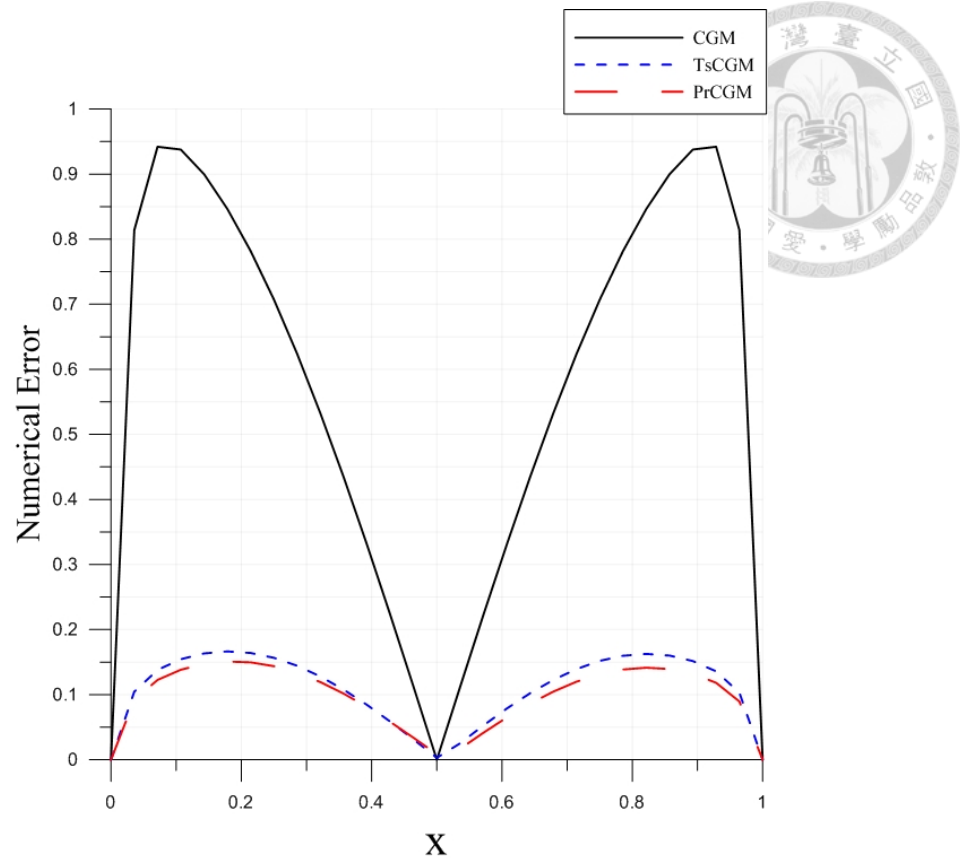


Figure 4.13 $n=71$ BHCP 三種方法之數值誤差比較

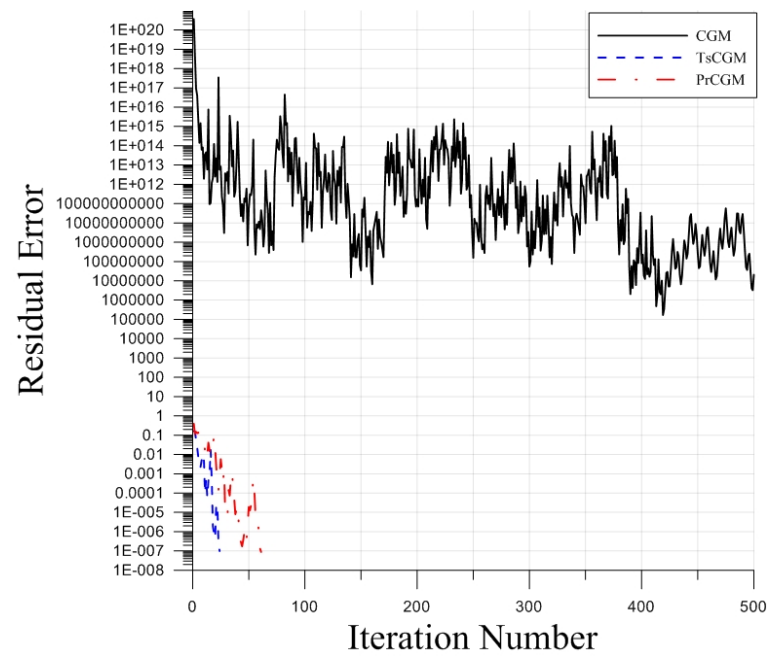


Figure 4.14 $n=71$ BHCP 三種方法之殘差與迭代步數關係圖

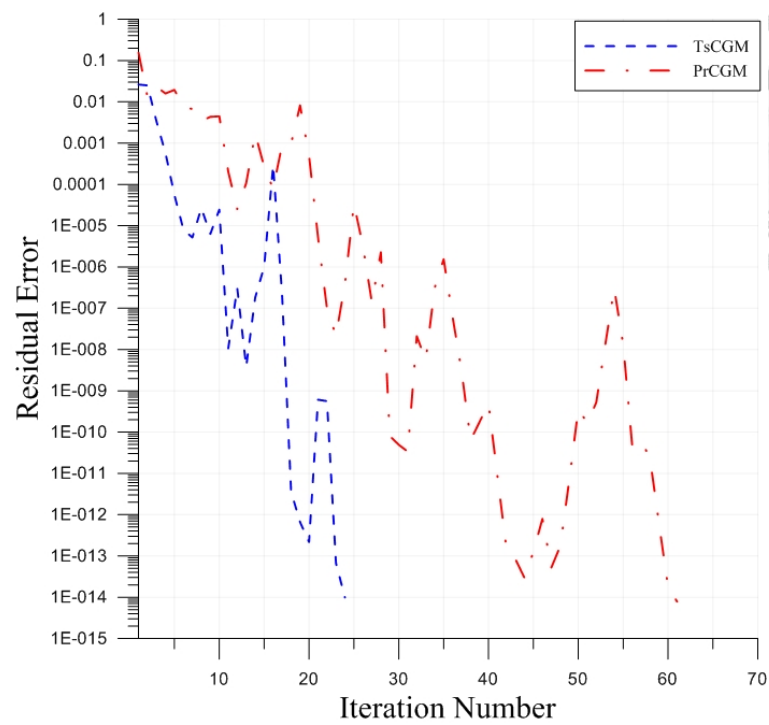


Figure 4.15 $n=71$ BHCP TsCGM 和 PrCGM 之殘差與迭代步數關係圖

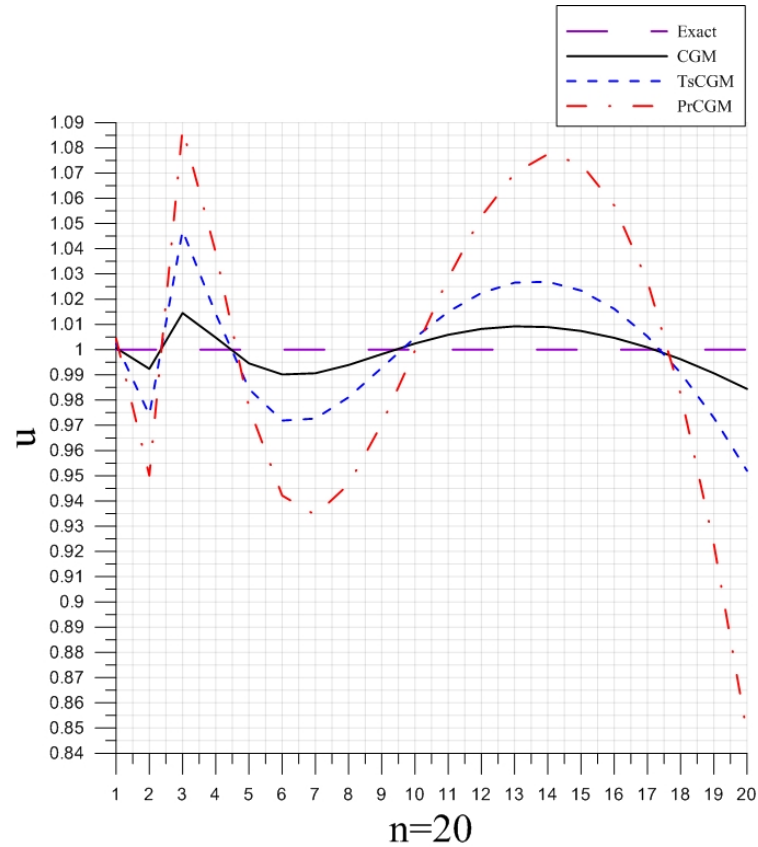


Figure 4.16 $n=20$ Hilbert 矩陣未加入噪音之數值解與真實解比較

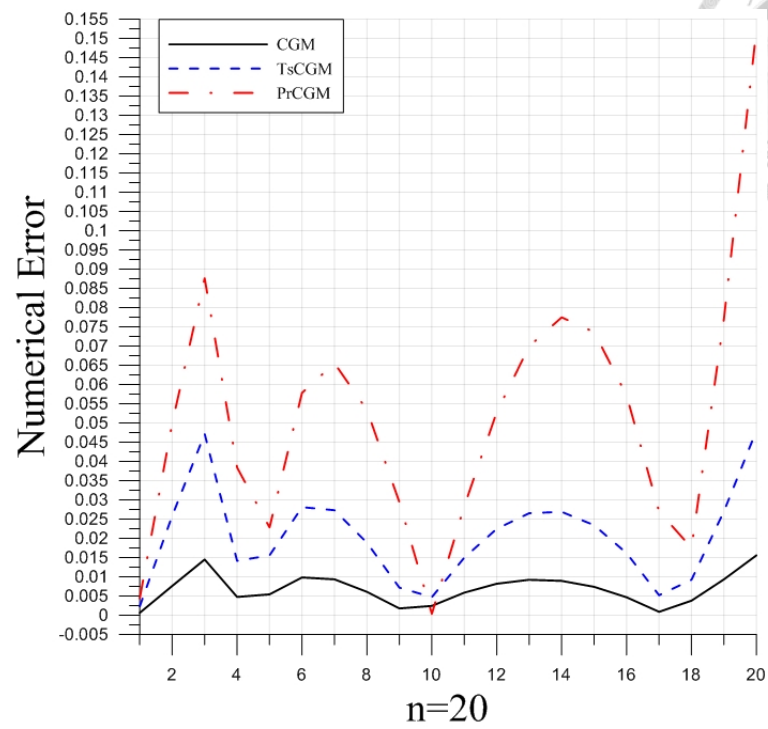


Figure 4.17 $n=20$ Hilbert 矩陣未加入噪音三種方法之數值誤差比較

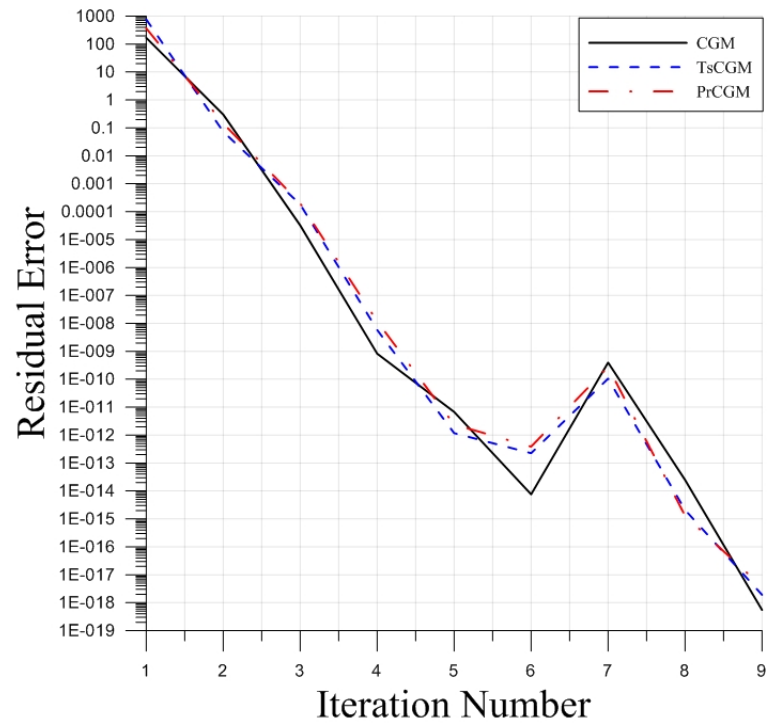


Figure 4.18 $n=20$ Hilbert 矩陣未加入噪音三種方法之殘差與迭代步數關係圖

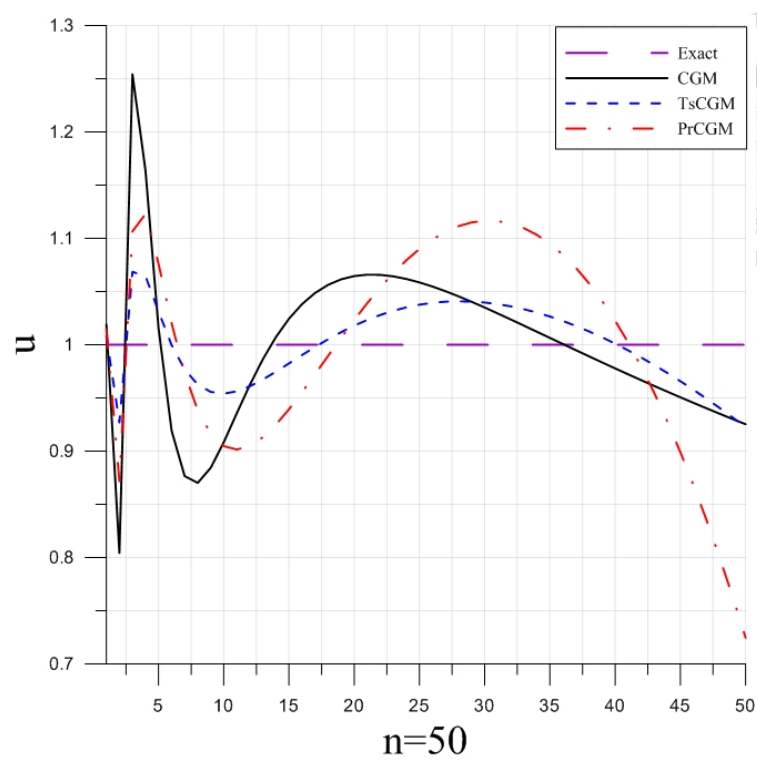


Figure 4.19 $n=50$ Hilbert 矩陣加入噪音之數值解與真實解比較

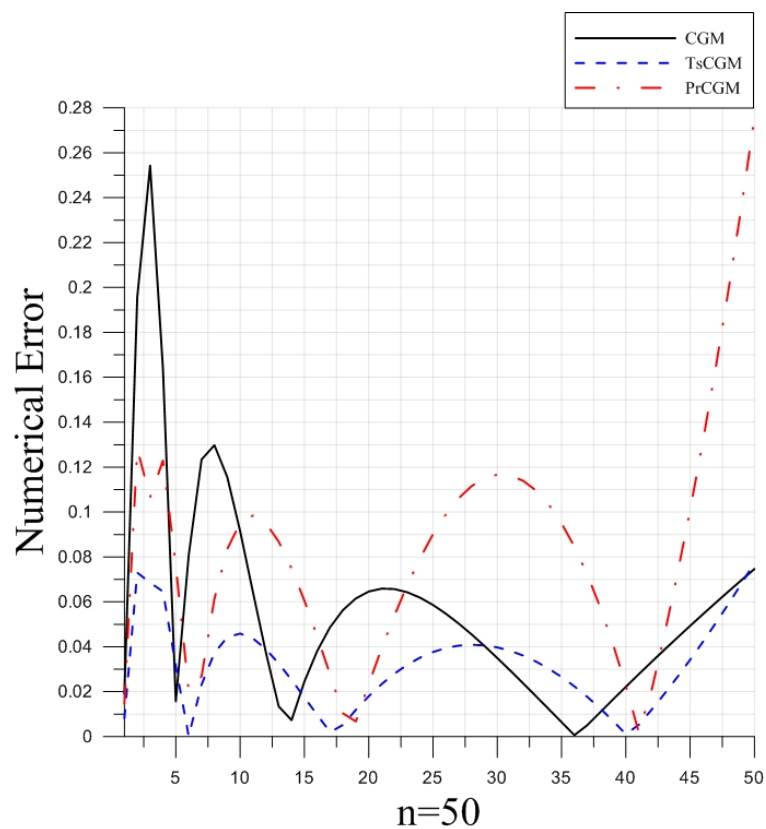


Figure 4.20 $n=50$ Hilbert 矩陣加入噪音三種方法之數值誤差比較

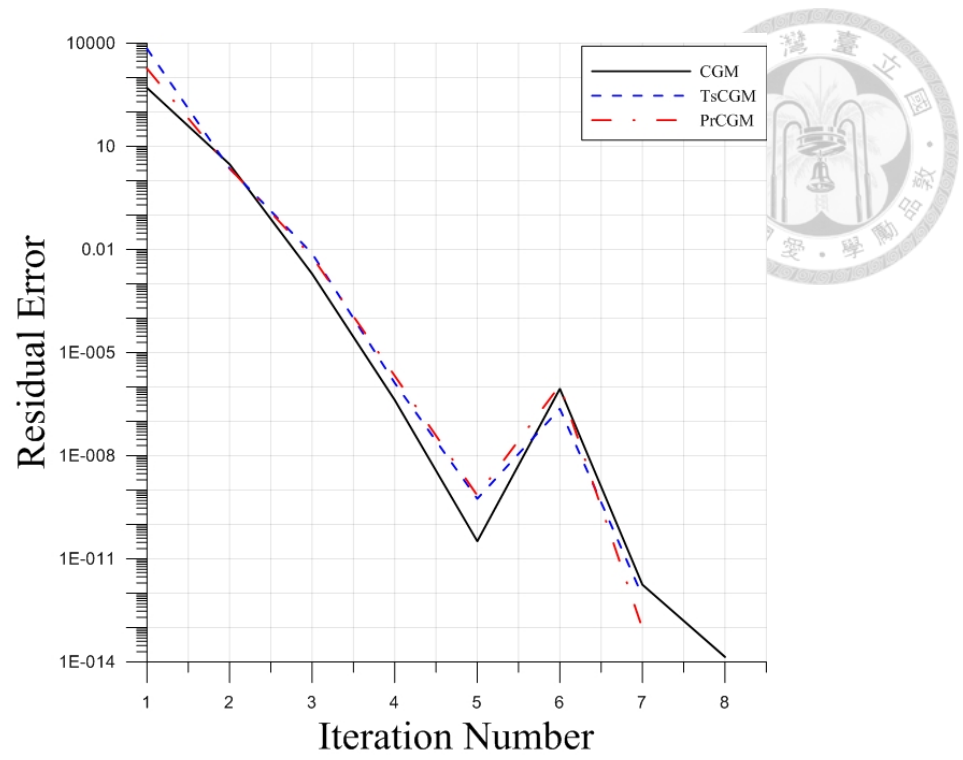


Figure 4.21 $n=50$ Hilbert 矩陣加入噪音之殘差與迭代步數關係圖

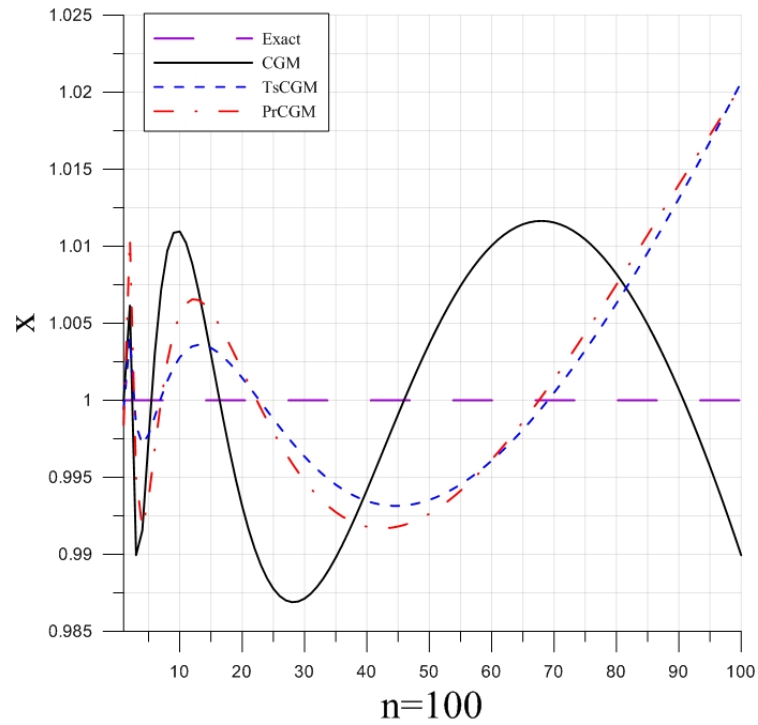


Figure 4.22 $n=100$ Hilbert 矩陣加入噪音之數值解與真實解比較

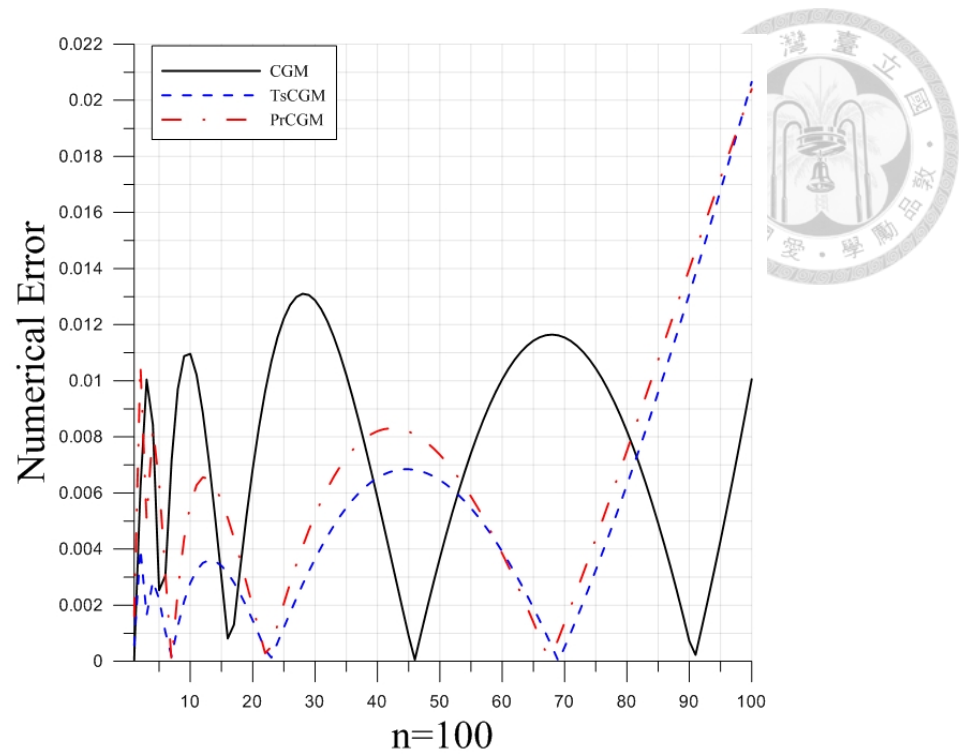


Figure 4.23 $n=100$ Hilbert 矩陣加入噪音三種方法之數值誤差比較

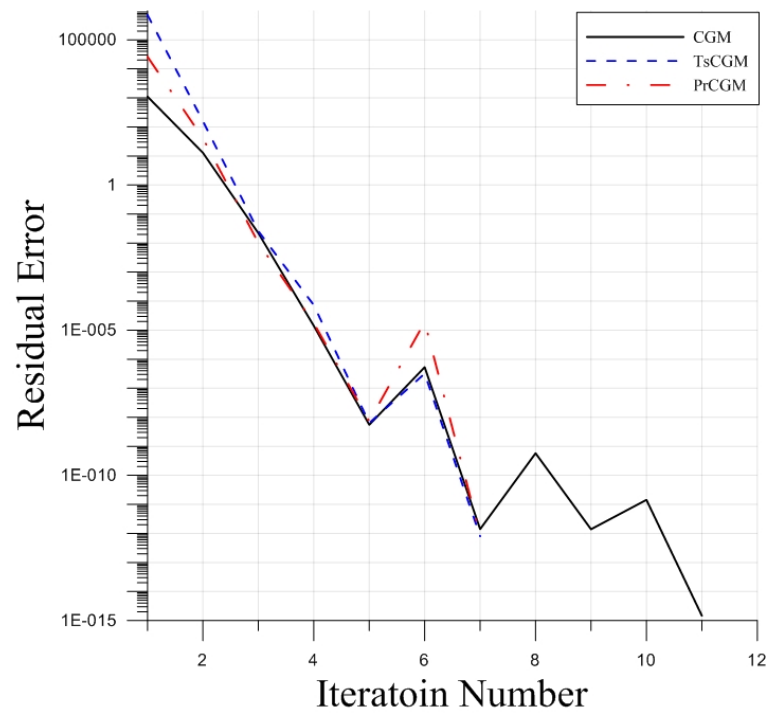


Figure 4.24 $n=100$ Hilbert 矩陣加入噪音之殘差與迭代步數關係圖

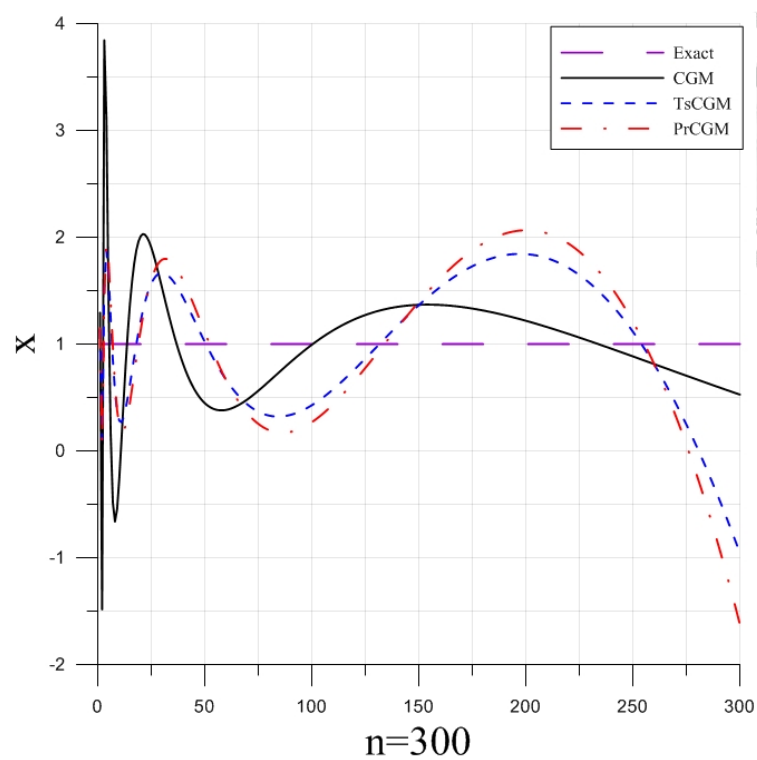


Figure 4.25 $n=300$ Hilbert 矩陣加入噪音之數值解與真實解比較

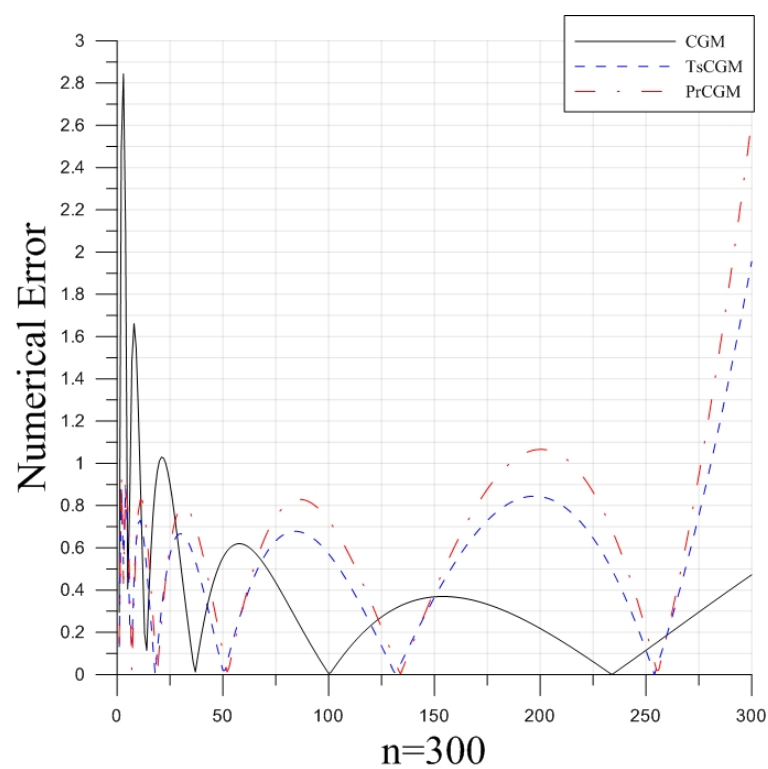


Figure 4.26 $n=300$ Hilbert 矩陣加入噪音三種方法之數值誤差比較

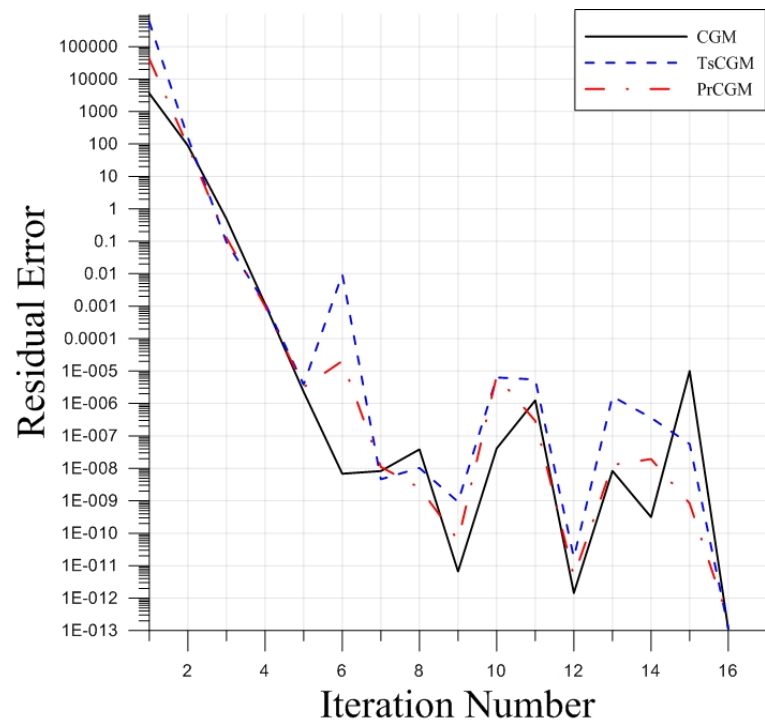


Figure 4.27 $n=300$ Hilbert 矩陣加入噪音之數值解與真實解比較

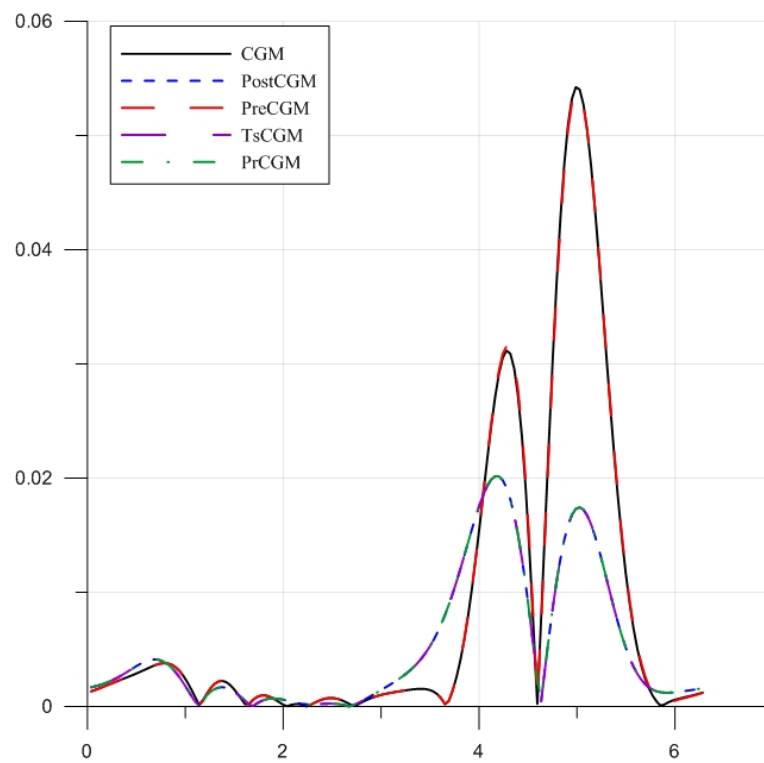


Figure 4.28 $n=160$ Cauchy Problem 五種方法之數值誤差比較

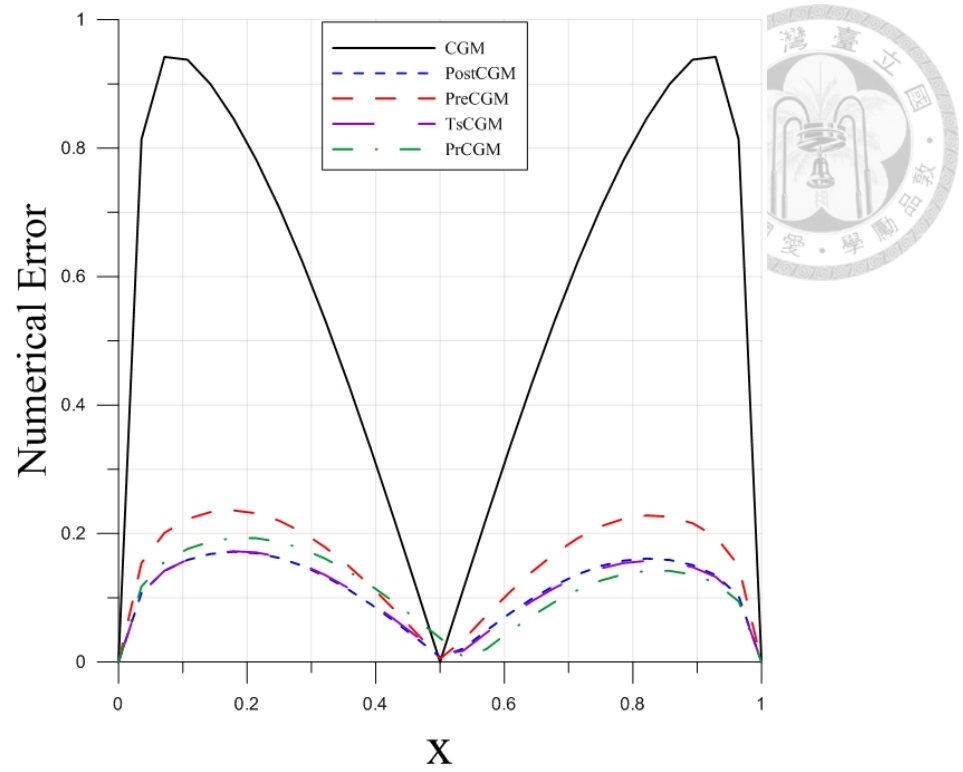


Figure 4.29 $n=57$ BHCP 五種方法之數值誤差比較

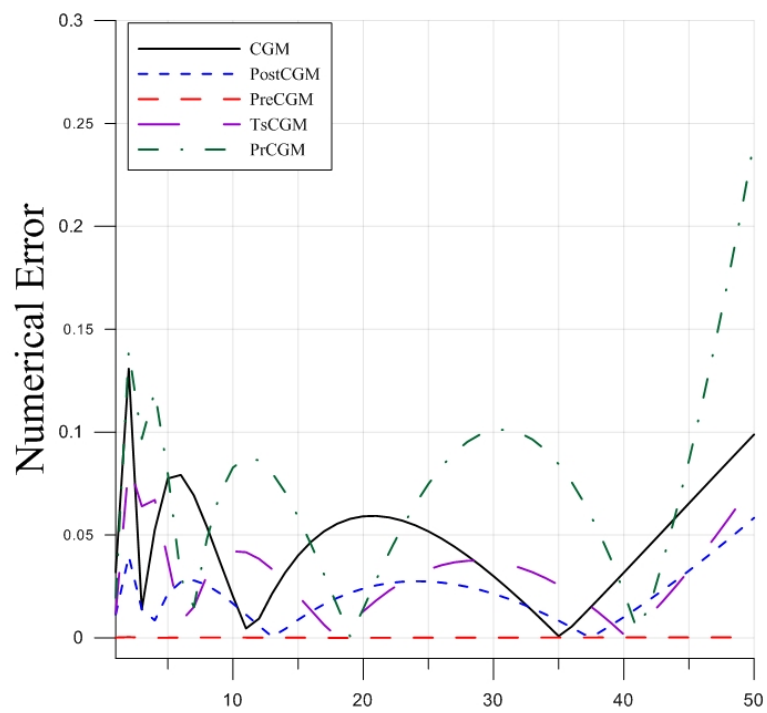


Figure 4.30 $n=50$ Hilbert 矩陣加入噪音五種方法之數值誤差比較

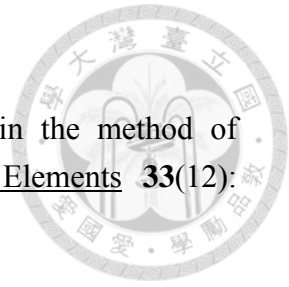
第五章 結論

面對高度病態問題，仍可快速求得不失準確性的解是本研究的目標，而為改善共軛梯度法對病態問題之不穩定性，卻又希望同時保留此法於輕度病態矩陣的快速收斂以及準確性的優點，因此本研究希望藉由先對矩陣進行預處理降低病態性，方可使用共軛梯度法來進行較準確之求解。

本研究所介紹之四種調整器，改善效果各有所異，於反算問題當中其所求出來之結果皆較 CGM 來得好，降低 CGM 所得之結果誤差甚大之問題，且較快速求得數值解，符合我們所期望之目標，然而，在求解正算問題時，由於其穩定性較反算問題來得好，雙側調整器之改善方式乃是藉由不斷地預處理來降低條件數，如此可能導致原先矩陣之惡化，而造成數值解較 CGM 來得差的結果，但反觀單側調整器卻無此問題。

本研究希望可以得到面對不同問題皆可有不錯改善效果之調整器，因此未來本研究希望將藉由更多正反算問題來驗證本研究調整器之適用性，並推廣至更高維度的問題，而本研究也將改正雙側調整器面對正算問題時即便條件數已降至最低仍結果不佳之問題，更甚是可以將調整器搭配其他演算法來進行求解，期許得到不同之效果。

參考文獻



- [1]. Alves, C. J. S. (2009). "On the choice of source points in the method of fundamental solutions." Engineering Analysis with Boundary Elements **33**(12): 1348-1361.
- [2]. Bauer, F. L. (1963). "Optimally scaled matrices." Numerische Mathematik **5**(1): 73-87.
- [3]. Bauer, F. L. (1969). "Remarks on optimally scaled matrices." Numerische Mathematik **13**(1): 1-3.
- [4]. Benzi, M. (2002). "Preconditioning Techniques for Large Linear Systems: A Survey." Journal of Computational Physics **182**(2): 418-477.
- [5]. Benzi, M., C. Meyer, M. Tuma. (1996). "A Sparse Approximate Inverse Preconditioner for the Conjugate Gradient Method." SIAM Journal on Scientific Computing **17**(5): 1135-1149.
- [6]. Benzi, M. and A. Wathen (2008). "Some Preconditioning Techniques for Saddle Point Problems." Model Order Reduction: Theory, Research Aspects and Applications. W. A. Schilders, H. Vorst and J. Rommes, Springer Berlin Heidelberg. **13**: 195-211.
- [7]. Wei, T., Y. C. Hon, Leevan Ling. (2007). "Method of fundamental solutions with regularization techniques for Cauchy problems of elliptic operators." Engineering Analysis with Boundary Elements **31**(4): 373-385.
- [8]. Chen, C.S., H.A. Cho, M.A. Golberg (2006). "Some comments on the ill-conditioning of the method of fundamental solutions." Engineering Analysis with Boundary Elements **30**(5): 405-410.
- [9]. Concus, P., G. Golub, G. Meurant. (1985). "Block Preconditioning for the Conjugate Gradient Method." SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing **6**(1): 220-252.
- [10]. Fairweather, G. and A. Karageorghis (1998). "The method of fundamental solutions for elliptic boundary value problems." Advances in Computational Mathematics **9**(1-2): 69-95.

[11].Gautschi, W. (2011). "Optimally scaled and optimally conditioned Vandermonde and Vandermonde-like matrices." BIT Numerical Mathematics**51**(1): 103-125.

[12].Hon, Y. C. and M. LI (2009). "A discrepancy principle for the source points location in using the MFS for solving the BHCP." International Journal of Computational Methods**06**(02): 181-197.

[13].Kubo, S. (1988). "Inverse Problems Related to the Mechanics and Fracture of Solids and Structures." JSME international journal. Ser. 1, Solid mechanics, strength of materials**31**(2): 157-166.

[14].Liu, C.-S. (2008). "A highly accurate MCTM for direct and inverse problems of biharmonic equation in arbitrary plane domains." CMES: Computer Modeling in Engineering & Sciences**30**(2): 65-76.

[15].Liu, C.-S. (2008). "Improving the Ill-conditioning of the Method of Fundamental Solutions for 2D Laplace Equation." CMES: Computer Modeling in Engineering & Sciences **28**(2): 77-93.

[16].Liu, C.-S. (2011). "The method of fundamental solutions for solving the backward heat conduction problem with conditioning by a new post-conditioner." Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals **60**(1): 57-72.

[17].Liu, C.-S. (2012). "An equilibrated method of fundamental solutions to choose the best source points for the Laplace equation." Engineering Analysis with Boundary Elements **36**(8): 1235-1245.

[18].Liu, C.-S. (2012). "A globally optimal iterative algorithm to solve an ill-posed linear system." CMES: Computer Modeling in Engineering & Sciences **84**(4): 383.

[19].Liu, C.-S. (2012). "Optimally generalized regularization methods for solving linear inverse problems." CMC:Computers Materials and Continua **29**(2): 103.

[20].Liu, C.-S. (2012). "Optimally scaled vector regularization method to solve ill-posed linear problems." Applied Mathematics and Computation **218**(21): 10602-10616.

[21].Liu, C.-S. (2013). "A Dynamical Tikhonov Regularization for Solving Ill-posed Linear Algebraic Systems." Acta Applicandae Mathematicae **123**(1): 285-307.

[22].Liu, C.S., H.K. Hong, S.N. Atluri (2010). "Novel algorithms based on the conjugate gradient method for inverting ill-conditioned matrices, and a new regularization method to solve ill-posed linear systems." CMES:Computer Modeling in Engineering and Sciences **60**(3): 279.

[23].Sluis, A. (1969). "Condition numbers and equilibration of matrices." Numerische Mathematik **14**(1): 14-23.

[24].Sluis, A. (1970). "Condition, equilibration and pivoting in linear algebraic systems." Numerische Mathematik **15**(1): 74-86.

[25].Vajargah, B. F. and M. Moradi (2012). "Diagonal Scaling of Ill-Conditioned Matrixes by Genetic Algorithm." Journal of Applied Mathematics, Statistics and Informatics **8**(1): 49-53.

[26].Watson, G. (1991). "An algorithm for optimal ℓ_2 scaling of matrices." IMA Journal of Numerical Analysis **11**(4): 481-492.