1 連立一次方程式の解法

連立一次方程式, $\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ を解くことを考える.

2 LU 分解法

掃き出し法と代入法の組み合わせである.

例 1. まずは具体的に解くところを見てみる.

$$\left\{\begin{array}{rcrrrl} 10 & = & x_1 & +3x_2 & +4x_3 & ① \\ 7 & = & 2x_1 & +x_2 & +5x_3 & ② \\ 11 & = & 6x_1 & +5x_2 & +x_3 & ③ \end{array}\right.$$

④ := ①, ⑤ := ② − 2 × ①, ⑥ := ③ − 6 × ① とすれば

$$\left\{\begin{array}{rcrrrll} 10 & = & x_1 & +3x_2 & +4x_3 & ④ & \\ -13 & = & & -5x_2 & -3x_3 & ⑤ & 2 \\ -49 & = & & -13x_2 & -23x_3 & ⑥ & 6 \end{array}\right.$$

⑦ := ④, ⑧ := ⑤, ⑨ := ③ $-\dfrac{13}{5}\times$ ⑧ とすれば

$$\left\{\begin{array}{rcrrrlll} 10 & = & x_1 & +3x_2 & +4x_3 & ⑦ & & \\ -13 & = & & -5x_2 & -3x_3 & ⑧ & 2 & \\ -\dfrac{76}{5} & = & & & -\dfrac{76}{5}x_3 & ⑨ & 6 & \dfrac{13}{5} \end{array}\right.$$

よって各々代入すれば

$$\left\{\begin{array}{l} x_3 = (-\dfrac{76}{5})(-\dfrac{5}{76}) = 1 \\ x_2 = (-13 + 3x_3)(-\dfrac{1}{5}) = (-13+3)(-\dfrac{1}{5}) = 2 \\ x_1 = 10 - 3x_2 - 4x_3 = 10 - 6 - 4 = 0 \end{array}\right.$$

ここまでは普通の掃き出し法と代入である. ところで同じ行列 $\mathbf{A}$ を用いた異なる $\mathbf{b}' = (8, 8, 12)$ に対する方程式を解く必要が出来たとしよう. 全く同じ操作をすれば解けるが上の式番号の横に書いたメモ書きがあれば前半の $\mathbf{A}$ に対する操作は繰り返す必要が無い. ⑦⑧⑨の左辺に相当する値 (y_1, y_2, y_3) を求めてみよう.

$$y_{=}b'_1 = 8, \quad y_2 = b'_2 - 2y_1 = -8, \quad y_3 = b'_2 - 6y_1 - \frac{13}{5}y_2 = -\frac{76}{5}$$

よって各々代入すれば

$$\left\{\begin{array}{l} x_3 = (-\dfrac{76}{5})(-\dfrac{5}{76}) = 1 \\ x_2 = (-8 + 3x_3)(-\dfrac{1}{5}) = (-8+3)(-\dfrac{1}{5}) = 1 \\ x_1 = 8 - 3x_2 - 4x_3 = 8 - 3 - 4 = 1 \end{array}\right.$$

よって⑦⑧⑨の右辺とメモ書きがあれば任意の $\mathbf{b}$ に対する方程式が代入操作のみによって解ける. ”⑦⑧⑨の右辺とメモ書き”を求める事を **LU 分解**と言う.

LU 分解 (行交換無し)

```
U <- A;
for any k form 1 to n {
  for any i form k+1 to n {
    L[i][k] <- U[i][k] / U[k][k];
    for any j form k to n{
      U[i][j] <- U[i][j] - U[k][j]*L[i][k];
    }
  }
}
```

特にメモ書きの数とその段階での明らかな 0 成分の数が同じである事に注意せよ. 明らかに 0 であるのだからその部分にメモ書きをしても問題なく, 通常そうする事によってメモリの節約をする. これは LU 分解法の利点の一つである.

```
LU <- A;
for any k form 1 to n {
  for any i form k+1 to n {
    LU[i][k] <- LU[i][k] / LU[k][k];
    for any j form k+1 to n{
      LU[i][j] <- LU[i][j] - LU[k][j]*LU[i][k];
    }
  }
}
```

上のアルゴリズムのループ構造が 3 重な事から見て取れるように LU 分解自体には n^3 に比例する時間を要する. 一方で下記の様に代入のループ構造は 2 重で n^2 に比例する時間で済む.

代入

```
for any i form 1 to n {
  y[i] = b[i];
  for any j form 1 to k-1{
    y[i] <- y[i] - LU[i][j]*y[j];
  }
}
for any i form n to 1 {
  x[i] = y[i];
  for any j form K+1 to n{
    x[i] <- x[i] - LU[i][j]*x[j];
  }
  x[i] <- x[i]/LU[k][k];
}
```

前半の代入操作を前進代入, 後半を後退代入と言う.

後半の操作が上三角行列を代入法で解いている事を考慮すれば前半の操作は下三角行列を代入法で解いている様に見える. 実際”メモ書”に単位行列を足した下三角行列を $\mathbf{L}$, 掃き出し法で残った上三角行列を $\mathbf{U}$ とすれば $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ の関係があり, $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ の変わりに $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ と $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$ を順次解く事に相当している.

ここまでは, 行の交換の無い三角化に対応する LU 分解であったが, 交換のある場合でも"メモ書き"と b の値も同時に交換してやる事により, 上手く働く.

LU 分解 (行交換有り)

```
LU <- A;
for any k form 1 to n {
  P[k] <- k;
}

for any k form 1 to n {
  let |LU[k][k_i]| be max of |LU[k][k]|, ..., |LU[k][n]|;
  swap k th row of LU and k_i th row of LU;
  swap P[k] and P[k_i];
  for any i form k+1 to n {
    LU[i][k] <- LU[i][k] / LU[k][k];
    for any j form k+1 to n{
      LU[i][j] <- LU[i][j] - LU[k][j]*LU[i][k];
    }
  }
}

for any i form 1 to n {
  y[i] = b[ P[i] ];
  for any j form 1 to k-1{
    y[i] <- y[i] - LU[i][j]*y[j];
  }
}
for any i form n to 1 {
  x[i] = y[i];
  for any j form K+1 to n{
    x[i] <- x[i] - LU[i][j]*x[j];
  }
  x[i] <- x[i]/LU[k][k];
}
```

定理 1. $|\mathbf{A}| \neq 0$, $\mathbf{A}^{(0)} := \mathbf{A}$ とする. $\sigma_k \geq k$ を適当に取れば次の様にして $\mathbf{A}^{(k)}$ が帰納的に well defined である. (即ち, $\hat{a}_{kk}^{(k-1)} = a_{\sigma_k k}^{(k-1)} \neq 0$ なる $\sigma_k \geq k$ が取れる)

$$\mathbf{P}^{(k)} := \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{k-1} & & 0 & & 0 \\ & 0 & \dots \;\; 0 & 1 & \\ & \vdots & & 0 & \\ 0 & & \mathbf{I}_{\sigma_k-k-1} & \vdots & 0 \\ & 0 & & & \\ & 1 & 0 \;\; \dots & 0 & \\ 0 & & 0 & & \mathbf{I}_{n-\sigma_k-k} \end{pmatrix}, \qquad (\hat{a}_{ij}^{k-1}) := \mathbf{P}^{(k)}\mathbf{A}^{(k-1)},$$

$$\mathbf{M}^{(k)} := \begin{pmatrix} & 0 & \\ \mathbf{I}_{k-1} & \vdots & \mathbf{0} \\ & 0 & \\ 0 & 1 & 0 \\ & -\hat{a}_{k+1k}^{(k-1)}/\hat{a}_{kk}^{(k-1)} & \\ \mathbf{0} & \vdots & \mathbf{I}_{n-k} \\ & -\hat{a}_{nk}^{(k-1)}/\hat{a}_{kk}^{(k-1)} & \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{A}^{(k)} := \mathbf{M}^{(k)}\mathbf{P}^{(k)}\mathbf{A}^{(k-1)}$$

この時 $\mathbf{A}^{(n)} =: \mathbf{U}$ は上三角行列となる. また

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}^{(k)} &:= \mathbf{M}^{(k)}\mathbf{P}^{(k)}\mathbf{M}^{(k-1)}\mathbf{P}^{(k-1)}\ldots\mathbf{M}^{(1)}\mathbf{P}^{(1)} \\
\mathbf{L}^{(k)} &:= \mathbf{P}^{(k)}(\mathbf{L}^{(k-1)} - \mathbf{I}) - (\mathbf{M}^{(k)} - \mathbf{I}) + \mathbf{I} \\
\mathbf{L}^{(1)} &:= -(\mathbf{M}^{(1)} - \mathbf{I}) + \mathbf{I}
\end{aligned}$$

とおけば

$$\mathbf{L}^{(k)}\mathbf{B}^{(k)} = \mathbf{P}^{(k)}\mathbf{P}^{(k-1)}\cdots\mathbf{P}^{(1)}$$

特に $\mathbf{L} := \mathbf{L}^{(n)}$, $\mathbf{P} := \mathbf{P}^{(n)}\mathbf{P}^{(n-1)}\cdots\mathbf{P}^{(1)}$ と置けば $\mathbf{PA} = \mathbf{LU}$

$\mathbf{U}$ が三角化の結果得られる上三角行列であり, $\mathbf{L} - \mathbf{I}$ が今までの議論における"メモ書き"に相当する. (対角成分は常に 1 であるのでメモを取る必要が無かった)

Proof. $\mathbf{P}^{(k)}$ が well def. で $\mathbf{A}^{(k)}$ が上三角行列となる事は Gauss の方法の時と同様の証明で示せるので略す.

以下,

$$\mathbf{L}^{(k)}\mathbf{B}^{(k)} = \mathbf{P}^{(k)}\mathbf{P}^{(k-1)}\cdots\mathbf{P}^{(1)}$$

を帰納法によって示す. $\mathbf{M}^{(1)}$ の定義より $(\mathbf{M}^{(1)} - \mathbf{I})(\mathbf{M}^{(1)} - \mathbf{I}) = 0$. よって

$$\mathbf{L}^{(1)}\mathbf{B}^{(1)} = (-(\mathbf{M}^{(1)}-\mathbf{I})+\mathbf{I})\mathbf{M}^{(1)}\mathbf{P}^{(1)} = (\mathbf{I}-(\mathbf{M}^{(1)}-\mathbf{I})(\mathbf{M}^{(1)}-\mathbf{I}))\mathbf{P}^{(1)} = \mathbf{P}^{(1)}.$$

$k-1$ の時を仮定する. $\mathbf{M}^{(k)}$ の定義より, $(\mathbf{M}^{(k)} - \mathbf{I})(\mathbf{M}^{(k)} - \mathbf{I}) = 0$, $(\mathbf{L}^{(k-1)} - \mathbf{I})(\mathbf{M}^{(k)} - \mathbf{I}) = 0$ であるから,

$$\begin{aligned}
\mathbf{L}^{(K)}\mathbf{B}^{(K)} &= (\mathbf{P}^{(k)}(\mathbf{L}^{(k-1)} - \mathbf{I}) - (\mathbf{M}^{(k)} - \mathbf{I}) + \mathbf{I})\mathbf{M}^{(k)}\mathbf{P}^{(k)}\mathbf{B}^{(k-1)} \\
&= (\mathbf{P}^{(k)}(\mathbf{L}^{(k-1)} - \mathbf{I}) - (\mathbf{M}^{(k)} - \mathbf{I}) + \mathbf{I})((\mathbf{M}^{(k)} - \mathbf{I}) + \mathbf{I})\mathbf{P}^{(k)}\mathbf{B}^{(k-1)} \\
&= \mathbf{P}^{(k)}(\mathbf{L}^{(k-1)} - \mathbf{I})\mathbf{P}^{(k)}\mathbf{B}^{(k-1)} + \mathbf{P}^{(k)}\mathbf{B}^{(k-1)}
\end{aligned}$$

$\mathbf{P}^{(k)}$ は右から掛けた時は k と $\sigma_k \geq k$ の列交換で $(\mathbf{L}^{(k-1)} - \mathbf{I})$ の k 列目以降の列は全て 0 であるので $(\mathbf{L}^{(k-1)} - \mathbf{I})\mathbf{P}^{(k)} = (\mathbf{L}^{(k-1)} - \mathbf{I})$. よって

$$\mathbf{L}^{(k)}\mathbf{B}^{(k)} = \mathbf{P}^{(k)}\mathbf{L}^{(k-1)}\mathbf{B}^{(k-1)}$$

帰納法の仮定を用いれば求めるものを得る. $\square$