1　連立一次方程式 II

同じ係数行列を持つ複数個の連立一次方程式,

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= \mathbf{A}\mathbf{x}_1\\ \mathbf{b}_2 &= \mathbf{A}\mathbf{x}_2\\ &\vdots\\ \mathbf{b}_L &= \mathbf{A}\mathbf{x}_L\end{aligned}$$

を解くことを考える. 単純に考えれば, ガウスの消去法によって $n^3/3$ のオーダーの計算量[1]で連立方程式を解く事ができたので, $Ln^3/3$ のオーダーの計算量で全ての連立方程式を解く事ができる.

ここで掃き出し法は本質的には逆行列を求める方法であった事に着目する. 一度逆行列を求めてしまえば $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}_l = \mathbf{x}_l$ であり, 行列を乗じる計算量は n^2 の計算量ですむ. 実際, 掃き出し法において係数行列 $\mathbf{A}$ に対する操作を単位行列にも行う事により $3n^3/2$ の計算量で逆行列 $\mathbf{A}^{-1}$ を求める事ができる. 即ち, $3n^3/2 + Ln^2$ の計算量で全ての連立方程式を解く事ができる. $3n^3/2$ と比較して Ln^2 は無視できる計算量であるので, 同じ係数行列を持つ複数個の連立一次方程式がある場合, ガウスの消去法よりも逆行列を求めてから乗じる方が断然有利である.

ここで, ガウスの消去法が掃き出し法を効率化した方法であった事を思い出そう. 言わば "掃き出し法を修正して逆行列を求める" 事のガウスの消去法 varsion が **LU 分解**である.

2　LU 分解法

LU 分解は $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ を満たす下三角行列 $\mathbf{L}$ と上三角行列 $\mathbf{U}$ を求める方法[2]である. 明らかに,

命題 1. $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ なる時,

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{Ux} = \mathbf{y}$$

を満たす $\mathbf{x}$ は $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ を満たす.

$\mathbf{L}$ と $\mathbf{U}$ は三角行列である為に, 各々の方程式は単純な代入操作 (各々$n^2/2$ の計算量) によって解ける. 即ち, 既に LU 分解が為されている場合, 各 $\mathbf{b}_l$ に対し, 逆行列を乗じるのと同じ手間 (各々n^2 の計算量) で解 $\mathbf{x}_l$ が求まる.

例 1. まずはガウスの消去法によって具体的に解くところを見てみる.

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

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

$$\left\{\begin{array}{rclllll} 10 &=& x_1 & +3x_2 & +4x_3 & ④ & 1\\ -13 &=& & -5x_2 & -3x_3 & ⑤ & 2\\ -49 &=& & -13x_2 & -23x_3 & ⑥ & 6\end{array}\right.$$

⑦ := ④, ⑧ := ⑤/(−5), ⑨ := ③ − (−13) × ⑧ とすれば

$$\left\{\begin{array}{rcllllll} 10 &=& x_1 & +3x_2 & +4x_3 & ⑦ & 1 & \\ \frac{13}{5} &=& & x_2 & +\frac{3}{5}x_3 & ⑧ & 2 & -5\\ -\frac{76}{5} &=& & & -\frac{76}{5}x_3 & ⑨ & 6 & -13\end{array}\right.$$

[1] 暫くの間, 計算の手間を乗 (除) 算の数で評価する.

[2] この分解は一意ではない, 例えば上下のどちらを掃き出すかでクラウト法とドゥーリトル法があり, これは $\mathbf{U}$ と $\mathbf{L}$ のどちらの対角成分を 1 にするかに相当している.

⑩ := ⑦, ⑪ := ⑧, ⑫ := ⑨$/(-\frac{76}{5})$ とすれば

$$\left\{\begin{array}{ccccccccc} 10 & = & x_1 & +3x_2 & +4x_3 & ⑩ & 1 & & \\ \frac{13}{5} & = & & x_2 & +\frac{3}{5}x_3 & ⑪ & 2 & -5 & \\ 1 & = & & & x_3 & ⑫ & 6 & -13 & -\frac{76}{5} \end{array}\right.$$

よって各々代入すれば

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

ここまでは普通のガウスの消去法である．ここで同じ行列 $\mathbf{A}$ 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．

$$y_1 = b'_1/1 = 8, \quad y_2 = (b'_2 - 2y_1)/(-5) = \frac{8}{5}, \quad y_3 = (b'_3 - 6y_1 + 13y_2)/(-\frac{76}{5}) = 1$$

よって各々代入すれば

$$\left\{\begin{array}{l} x'_3 = 1 \\ x'_2 = \frac{8}{5} - \frac{3}{5}x_3 = 1 \\ x'_1 = 8 - 3x_2 - 4x_3 = 1 \end{array}\right.$$

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．($(1, 1, 1)$ が $\mathbf{b}' = \mathbf{A}\mathbf{x}$ の解である事は容易に確かめられるであろう)

”⑦⑧⑨の右辺”の係数行列を $\mathbf{U}$, ”メモ書き”の行列を $\mathbf{L}$, 即ち,

$$\mathbf{L} := \begin{pmatrix} 1 & & \\ 2 & -5 & \\ 6 & -13 & -76/5 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} := \begin{pmatrix} 1 & 3 & 4 \\ & 1 & 3/5 \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

とおけば $\mathbf{LU} = \mathbf{A}$ なることに注意せよ．つまりこれが LU 分解である．

操作自体はガウスの消去法と変わらない事に注意すれば, LU 分解に必要な計算量が $n^3/3$ のオーダーである事がわかる．これは逆行列を求める手間より軽い．

LU 分解 (行交換無し)

1. U に A を, L に単位行列を代入する．
2. 次の操作を $k = 1, \ldots, n$ に対して行う．
   (a) L_{kk} に U_{kk} を代入する．
   (b) U の k 行目を正規化する．
   (c) L の k 列目の $i = k+1, \ldots, n$ 行目に U_{ik} を代入する．
   (d) U の $i = k+1, \ldots, n$ 行目を掃き出す．

LU 分解では $\mathbf{L}$ と $\mathbf{U}$ を求めるだけなので, 実際に方程式を解くには次の代入操作が必要である．

代入

1. y_1 に b_1/L_{11} を代入する．
2. 次の操作を $k = 2, \ldots, n$(昇順) に対して行う．
   (a) y_k に $b_k - \sum_{j=1}^{k-1} L_{kj}y_j$ を代入する．
   (b) y_k を L_{kk} で割る．
3. x_n に y_n を代入する．
4. 次の操作を $k = n-1, \ldots, 1$(降順) に対して行う．
   (a) x_k に $y_k - \sum_{j=k+1}^{n} U_{kj}x_j$ を代入する．

前半の代入操作を前進代入, 後半を後退代入と言う．

ここまでは, 行の交換の無いガウスの消去法に対応する LU 分解であった．このままでは $|\mathbf{A}| \neq 0$ なる $\mathbf{A}$ であっても解けない場合がある．一般の交換のある場合は”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)

1. U に A を, L に単位行列を代入する.
2. $P = (p_1, \ldots, p_n)$ に $(1, 2, \ldots, n)$ を代入する.
3. 次の操作を $k = 1, \ldots, n$ に対して行う.
   (a) $|U_{kk}|, |U_{k+1k}|, \ldots, |U_{nk}|$ の内最大値をとる $|U_{\sigma k}|$ を探す.
   (b) U 及び L の k 行目と σ 行目を入れ替える.
   (c) P の k 行目と σ 行目を入れ替える.
   (d) L_{kk} に U_{kk} を代入する.
   (e) U の k 行目を正規化する.
   (f) L の k 列目の $i = k+1, \ldots, n$ 行目に U_{ik} を代入する.
   (g) U の $i = k+1, \ldots, n$ 行目を掃き出す.

行の交換のある消去法 においては b の値も同時に交換した事に注目せよ. つまり, その場合は $\mathbf{A}$ そのものの分解 $\mathbf{LU} = \mathbf{A}$ では無く, 適当な置換行列 $\mathbf{P}$ を掛けたものの分解

$$\mathbf{LU} = \mathbf{PA}$$

となる. 置換行列は正則であるので $\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{PAx} = \mathbf{Pb}$ であるから代入操作で $\mathbf{b}$ の代わりに $\mathbf{Pb}$ を用いてやれば連立方程式を解ける.

命題 2. $\mathbf{PA} = \mathbf{LU}$ なる時,

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{Pb}, \quad \mathbf{Ux} = \mathbf{y}$$

を満たす $\mathbf{x}$ は $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ を満たす.

$\mathbf{Pb}$ と書けば行列とベクトルの積であるが, 実際は置換操作であるので $\mathbf{b}$ の順序を入れ替えるだけでよい.

代入

1. $j = 1, \ldots, n$ について $\widetilde{b}_j$ に b_{p_j} を代入する.
2. y_1 に $\widetilde{b}_1 / L_{11}$ を代入する.
3. 次の操作を $k = 2, \ldots, n$(昇順) に対して行う.
   (a) y_k に $\widetilde{b}_k - \sum_{j=1}^{k-1} L_{kj} y_j$ を代入する.
   (b) y_k を L_{kk} で割る.
4. x_n に y_n を代入する.
5. 次の操作を $k = n-1, \ldots, 1$(降順) に対して行う.
   (a) x_k に $y_k - \sum_{j=k+1}^{n} U_{kj} x_j$ を代入する.

定理 1. $|\mathbf{A}| \neq 0$, $\mathbf{A}^{(1)} := \mathbf{A}$ 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, $\hat{a}_{kk}^{(k)} = a_{\sigma_k k}^{(k)} \neq 0$ なる $\sigma_k \geq k$ が取れる)

$$\begin{aligned}
p_{ij}^{(k)} &:= \begin{cases} 1 & \text{if } i = j \neq k, \sigma_k \\ 1 & \text{if } (i,j) = (k, \sigma_k) \text{ or } (i,j) = (\sigma_k, k) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad \mathbf{P}^{(k)} := (p_{ij}^{(k)}), \\
\hat{\mathbf{A}}^{(k)} &:= \mathbf{P}^{(k)} \mathbf{A}^{(k)} \\
m_{ij}^{(k)} &:= \begin{cases} 1/\hat{a}_{kk}^{(k)} & \text{if } i = j = k \\ -\hat{a}_{ik}^{(k)}/\hat{a}_{kk}^{(k)} & \text{if } i > k, j = k \\ 1 & \text{if } i = j \neq k \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad \mathbf{M}^{(k)} := (m_{ij}^{(k)}), \\
\mathbf{A}^{(k+1)} &:= \mathbf{M}^{(k)} \mathbf{P}^{(k)} \mathbf{A}^{(k)} = \mathbf{M}^{(k)} \hat{\mathbf{A}}^{(k)}
\end{aligned}$$

この時 $\mathbf{A}^{(n+1)} =: \mathbf{U}$ は上三角行列となる. また $\mathbf{C}^{(1)} := \mathbf{0}$,

$$\mathbf{C}^{(k+1)} = \mathbf{P}^{(k)}\mathbf{C}^{(k)} + \begin{pmatrix} & {\scriptstyle 0} & \\ \mathbf{0} & {\scriptstyle \vdots} & \mathbf{0} \\ & {\scriptstyle 0} & \\ & {\scriptstyle \hat{a}_{kk}^{(k)}} & \\ \mathbf{0} & {\scriptstyle \vdots} & \mathbf{0} \\ & {\scriptstyle \hat{a}_{nk}^{(k)}} & \end{pmatrix}$$

$\mathbf{L} := \mathbf{C}^{(n+1)}$, $\mathbf{P} := \mathbf{P}^{(n)}\mathbf{P}^{(n-1)}\cdots\mathbf{P}^{(1)}$ と置けば $\mathbf{L}$ は下三角行列で $\mathbf{PA} = \mathbf{LU}$ を満たす.

$\mathbf{U}$ が三角化の結果得られる上三角行列であり, $\mathbf{L}$ が例における"メモ書き"に相当する.

Proof. $\mathbf{P}^{(k)}$ 等が well def. で $\mathbf{A}^{(n+1)} = \mathbf{U}$ が上三角行列となる事は掃き出し法の時と同様の証明で示せるので略す.

$$\mathbf{K}^{(k)} := \begin{pmatrix} & {\scriptstyle 0} & \\ \mathbf{I}_{k-1} & {\scriptstyle \vdots} & \mathbf{0} \\ & {\scriptstyle 0} & \\ & {\scriptstyle \hat{a}_{kk}^{(k)}} & \\ \mathbf{0} & {\scriptstyle \vdots} & \mathbf{I}_{n-k} \\ & {\scriptstyle \hat{a}_{nk}^{(k)}} & \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D}^{(k)} := \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_{n-k+1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L}^{(k)} := \mathbf{C}^{(k)} + \mathbf{D}^{(k)}$$

とおけば

$$\mathbf{L}^{(k+1)} = (\mathbf{P}^{(k)}(\mathbf{L}^{(k)} - \mathbf{D}^{(k)}) + \mathbf{D}^{(k)})\mathbf{K}^{(k)}, \quad \mathbf{L}^{(1)} = \mathbf{I}, \quad \mathbf{L}^{(n+1)} = \mathbf{C}^{(n+1)} = \mathbf{L}$$

である.

以下,

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

となる事を帰納法で示す. $k = 1$ の時自明である. k の時を仮定する.

$$\mathbf{L}^{(k+1)}\mathbf{M}^{(k)}\mathbf{P}^{(k)} = \mathbf{P}^{(k)}\mathbf{L}^{(k)} \tag{1}$$

を示せれば $\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{M}^{(k)}\mathbf{P}^{(k)}\mathbf{A}^{(k)}$ から

$$\mathbf{L}^{(k+1)}\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{L}^{(k+1)}\mathbf{M}^{(k)}\mathbf{P}^{(k)}\mathbf{A}^{(k)} = \mathbf{P}^{(k)}\mathbf{L}^{(k)}\mathbf{A}^{(k)} = \mathbf{P}^{(k)}\mathbf{P}^{(k-1)}\cdots\mathbf{P}^{(1)}\mathbf{A}$$

より良い.

$\mathbf{K}^{(k)}$ が $\mathbf{M}^{(k)}$ の逆行列である事, $\mathbf{C}^{(k)} = \mathbf{L}^{(k)} - \mathbf{D}^{(k)}$ の k 列から n 列までが全て 0 であること, $\mathbf{P}$ が k 以後同士の置換である事から

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

を得る. □

問 1. 命題 1 を示せ.

問 2. 定理 1 の証明の省略部分を完成させよ.