9.3　LU 分解法

LU 分解法は、名前の由来である下三角行列 (Lower) と上三角行列 (Upper) に分解する**消去法**と、**代入法**によって連立 1 次方程式の解を求めます。この方法は、ガウスの消去法とほぼ同じですが、係数行列 A が同じ連立 1 次方程式を繰り返し解く場合に有利です (ガウスの消去法では前進消去の段階で係数行列の要素が変わってしまうため)。

消去法　LU 分解によって係数行列 A が $A = LU$ となるように、下三角行列 L と上三角行列 U に分解します。ただし、

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

とします。$A = LU$ より、

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}$$

となりますが、n^2 個の関係式に対して L と U に含まれる未知数は $n^2 + n$ 個あるので、n 個を自由にとることができます。そこで、$u_{11} = u_{22} = \cdots = u_{nn} = 1$ にとり

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

とします。このように分解することを**クラウト法**と呼びます (以後、クラウト法について話を進めていきます)。関係を詳しく調べるために書き下してみると

$$\begin{array}{llll} a_{11} = l_{11}, & a_{12} = l_{11}u_{12}, & a_{13} = l_{11}u_{13}, & \cdots \\ a_{21} = l_{21}, & a_{22} = l_{21}u_{12} + l_{22}, & a_{23} = l_{21}u_{13} + l_{22}u_{23}, & \cdots \\ a_{31} = l_{31}, & a_{32} = l_{31}u_{12} + l_{32}, & a_{33} = l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + l_{33}, & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{array}$$

となり、$l_{11}, u_{12}, u_{13}, \cdots, u_{1n}, l_{21}, l_{22}, u_{23}, \cdots$ の順に値が決まっていくことがわかります。従って、l_{ij}, u_{ij} を a_{ij} とそれ以前に求めた L, U の成分を使って表すことができます (問題 1)。

また、l_{ij}, u_{ij} を決定する際、a_{ij} は一度しか利用しないので、L, U の成分で 0 または 1 に決まっている部分を省略して

$$A = \begin{bmatrix} l_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & l_{22} & u_{23} & u_{24} & \cdots & u_{2n} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & u_{34} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}$$

のように配列を利用すると、メモリを節約することができます (問題 2)。

代入法　連立 1 次方程式 $Ax = b$ は、消去法によっ$A = LU$ と分解されたので、

$$LUx = b$$

と書けます。$y = Ux$ とおくことにより、最初に

$$Ly = b$$

を解いてから

$$y = Ux$$

を解くと連立 1 次方程式の解が得られます。実際、$Ly = b$ を書き下すと

$$\begin{aligned} &l_{11}y_1 = b_1 \\ &l_{21}y_1 + l_{22}y_2 = b_2 \\ &l_{31}y_1 + l_{32}y_2 + l_{33}y_3 = b_3 \\ &\qquad\qquad\vdots \\ &l_{n1}y_1 + l_{n2}y_2 + \cdots + l_{nn}y_n = b_n \end{aligned}$$

となり、$y_1, y_2, \cdots, y_n$ の値が順に決まります。同様に、関係式 $y = Ux$ を書き下すと

$$\begin{aligned} &y_1 = x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n \\ &\qquad\qquad\vdots \\ &y_{n-2} = x_{n-2} + u_{n-2n-1}x_{n-1} + u_{n-2n}x_n \\ &y_{n-1} = x_{n-1} + u_{n-1n}x_n \\ &y_n = x_n \end{aligned}$$

となり、$x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1$ の値が順に決まり、連立 1 次方程式の解が得られます。

【注意】LU 分解法でもピポッド選択を行うと誤差が少なくなりますが、行を入れ替えたとき b の値も入れ変わるので、どのように入れ替えたかを記憶しておくことが必要です。

問題 1　消去法において、l_{ij}, u_{ij} を a_{ij} とそれ以前に求めた L, U の成分を使って表しなさい。

問題 2 メモリの節約を参考に、問題 1 の関係式を全て a_{ij} で表しなさい。

問題 3 代入法において、y_i, x_i を u_{ij}, l_{ij} とそれ以前に求めた y, x の成分を使って表しなさい。

問題 4 メモリの節約を参考に、問題 3 の関係式を全て a_{ij} で表しなさい。

問題 5 問題 2,4 を使って LU 分解法のプログラムを作成しなさい。

問題 6 ピポット選択を用いた LU 分解法のプログラムを作成しなさい。

9.4 ヤコビ法

消去法や LU 分解法は解を直接求めるため**直接法**と呼ばれますが、**ヤコビ法**やガウス-ザイデル法のように**反復法**によって連立 1 次方程式の解を求める方法があります。反復法は、ニュートン法のように適当な初期値を仮定し、必要な精度 (収束する) まで同じ手順を繰り返して解を求める方法です。例として、連立 1 次方程式

$$\begin{cases} 4x + y = 8 \\ x + 2y = 5.5 \end{cases}$$

をヤコビ法で解くと次のようになります。まず、第 1 式を x について解き、第 2 式を y について解きます。

$$\begin{cases} x = 2 - 0.25y \\ y = 2.75 - 0.5x \end{cases}$$

ここで x と y について適当な初期値[2]を仮定するわけですが、今回は $x = y = 0$ をとることにします。この値を変形した連立 1 次方程式の右辺に代入すると

$$\begin{aligned} x &= 2 - 0.25 \times 0 = 2 \\ y &= 2.75 - 0.5 \times 0 = 2.75 \end{aligned}$$

を得ます。さらに、この値を右辺に代入すると

$$\begin{aligned} x &= 2 - 0.25 \times 2 = 1.3125 \\ y &= 2.75 - 0.5 \times 2.75 = 1.75 \end{aligned}$$

を得ます。このような操作を繰り返していくと

$$\begin{aligned} x &= 0 \to 2 \to 1.3125 \to \cdots \to 1.5 \\ y &= 0 \to 2.75 \to 1.75 \to \cdots \to 2 \end{aligned}$$

と解に近づいていきます。

[2] 初期値は解に近い値が良い

従って、ヤコビ法の一般式は、$x_i^{(k)}$ を k 回目に求まった x_i とすると、

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{m=1}^{i-1} a_{im} x_m^{(k)} - \sum_{m=i+1}^{n} a_{im} x_m^{(k)} \right) \Bigg/ a_{ii}$$

となります。

また、ガウス-ザイデル法は、ヤコビ法を改良したもので、$x_i^{(k)}$ の代わりに最新の $x_i^{(k+1)}$ を使って収束を早める方法です。従って、一般式は

$$x_i^{(k+1)} = \left(b_i - \sum_{m=1}^{i-1} a_{im} x_m^{(k+1)} - \sum_{m=i+1}^{n} a_{im} x_m^{(k)} \right) \Bigg/ a_{ii}$$

となります。

問題 1　ヤコビ法を用いて、連立 1 次方程式の解を求めるプログラムを作成しなさい。

問題 2　ガウス-ザイデル法を用いて、連立 1 次方程式の解を求めるプログラムを作成しなさい。