数値解析 （塩田）

— LU 分解法 —

状況設定

n 次正則行列 $A = (a_{ij})$ と n 次ベクトル $\boldsymbol{b} = (b_i)$ に対して、方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解 $\boldsymbol{x}$ を求めたい。

方針

Step 1

n 次正則行列 $A = (a_{ij})$ を次の形に分解する:

$$A = LU,$$

$$L = \begin{pmatrix} \ell_{11} & & & \text{\Large O} \\ \ell_{21} & \ell_{22} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \ell_{n1} & \ell_{n2} & \cdots & \ell_{nn} \end{pmatrix}, \qquad U = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ \text{\Large O} & & & 1 \end{pmatrix}$$

$n = 2$ の例

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ c & d - \frac{bc}{a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{b}{a} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$n = 3$ の例

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ d & e' & 0 \\ g & h' & i' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{b}{a} & \frac{c}{a} \\ 0 & 1 & j \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ただし

$$e' = e - \frac{bd}{a}, \quad h' = h - \frac{bg}{a}, \quad j = \frac{1}{e'}\left(f - \frac{cd}{a}\right), \quad i' = i - \frac{cg}{a} - jh'$$

Step 2 $L\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$ の解 $\boldsymbol{y}$ を求める。

Step 3 $U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ の解 $\boldsymbol{x}$ を求める。(すると $\boldsymbol{x}$ は $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解となる。)

LU 分解法の使いどころ

同じ A に対して $\boldsymbol{b}$ だけが異なる方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を複数解く場合に有効。(2 個目以降は計算量の少ない **Step 2-3** のみ実行すれば良い。)

Step 1 の手順

$A = LU$ という式を成分で書いて、1 行目の左から

$$\begin{pmatrix} \longrightarrow \\ \longrightarrow \\ \vdots \\ \longrightarrow \end{pmatrix}$$

の順に見てゆくと、i 行目では

$$\ell_{i1}, \cdots, \ell_{ii}, \quad u_{i,i+1}, \cdots, u_{in}$$

の順に未知数がわかってゆく:

1 行目:

$$\begin{aligned}
&\underline{a_{11}} = \boxed{\ell_{11}} \\
&\underline{a_{12}} = \underline{\ell_{11}} \times \boxed{u_{12}} \\
&\underline{a_{13}} = \underline{\ell_{11}} \times \boxed{u_{13}} \\
&\quad\vdots \\
&\underline{a_{1n}} = \underline{\ell_{11}} \times \boxed{u_{1n}}
\end{aligned}$$

2 行目:

$$\begin{aligned}
&\underline{a_{21}} = \boxed{\ell_{21}} \\
&\underline{a_{22}} = \underline{\ell_{21}} \times \underline{u_{12}} + \boxed{\ell_{22}} \\
&\underline{a_{23}} = \underline{\ell_{21}} \times \underline{u_{13}} + \underline{\ell_{22}} \times \boxed{u_{23}} \\
&\underline{a_{24}} = \underline{\ell_{21}} \times \underline{u_{14}} + \underline{\ell_{22}} \times \boxed{u_{24}} \\
&\quad\vdots \\
&\underline{a_{2n}} = \underline{\ell_{21}} \times \underline{u_{1n}} + \underline{\ell_{22}} \times \boxed{u_{2n}}
\end{aligned}$$

i 行目: $j \leq i$ のとき

$$\underline{a_{ij}} = \sum_{1 \leq k < j} \underline{\ell_{ik}} \times \underline{u_{kj}} + \boxed{\ell_{ij}}$$

$$\left(\begin{array}{l} \ell_{ik} \text{ たちは } j-1 \text{ 列目までに求まっていて、} \\ u_{kj} \text{ たちは } i-1 \text{ 行目までに求まっている。} \end{array} \right)$$

$i < j$ のとき

$$\underline{a_{ij}} = \sum_{1 \leq k < i} \underline{\ell_{ik}} \times \underline{u_{kj}} + \underline{\ell_{ii}} \times \boxed{u_{ij}}$$

$$\left(\begin{array}{l} \ell_{ik} \text{ たちは } i \text{ 列目までに全て求まっていて、} \\ u_{kj} \text{ たちは } i-1 \text{ 行目までに求まっている。} \end{array} \right)$$

Step 1 のアルゴリズム ver.1:

$A=(a_{ij})$, $L=(\ell_{ij})$, $U=(u_{ij})$ として、

for $i:=1$ **to** n **do begin**

　　for $j:=1$ **to** i **do** $\ell_{ij}:=a_{ij}-\sum_{1\leq k<j}\ell_{ik}u_{kj}$ **;**

　　for $j:=i+1$ **to** n **do** $u_{ij}:=(a_{ij}-\sum_{1\leq k<i}\ell_{ik}u_{kj})\,/\,\ell_{ii}$

end;

Step 1 のアルゴリズム ver.2:

メモリ節約の為に L, U の為の変数を使わない方法。$A=(a_{ij})$ について次の手続きを行うと、最終的に

$$\begin{cases} \ell_{ij}=a_{ij} & (\quad i \geqq j \text{ のとき } \quad) \\ u_{ij}=a_{ij} & (\quad i<j \text{ のとき } \quad) \end{cases}$$

となっている。

for $i:=1$ **to** $n-1$ **do begin**

　　$c:=a_{ii}$ **;**

　　for $j:=i+1$ **to** n **do** $a_{ij}:=a_{ij}/c$ **;**

　　for $k:=i+1$ **to** n **do**

　　　　for $j:=i+1$ **to** n **do** $a_{kj}:=a_{kj}-a_{ki}a_{ij}$

end;

部分ピボット選択を用いる場合の注意

(1) 行の入れ換えを **Step 2** に反映させなければならない。

　1° 配列 `s[]` を用意し、初期値は `s[i] = i`.

　2° i 行目と p 行目を入れ換えたら `swap(s[i], s[p])`

　3° **Step 2** では `b[i]` の代わりに `b[s[i]]` を入れて計算する

(2) ガウスの消去法は 0 になっている成分は入れ換えなくてよいのに対し、LU 分解法では行を全て入れ換える。