

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 $\mathbf{b} = (b_i)$ に対して、方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の解 \mathbf{x} を求める。

LU 分解法

Step 1° n 次正則行列 $A = (a_{ij})$ を次の形に分解する:

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

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

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

Step 1° の例

• $n = 2$ のとき
$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ c & d - \frac{bc}{a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{b}{a} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

• $n = 3$ のとき
$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ d & e' & 0 \\ g & h' & i' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{b}{a} & \frac{c}{a} \\ 0 & 1 & j \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

ただし

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

LU 分解法の使いどころ

同じ A に対して \mathbf{b} だけが異なる方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を複数個解く場合に有効。(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

$$l_{i1}, \dots, l_{ii}, \quad u_{i,i+1}, \dots, u_{in}$$

の順に未知数が求まってゆく (下線は既に求まっていて、赤字だけが未知数) :

$$\begin{aligned} 1 \text{ 行目: } & \underline{a_{11}} = \underline{l_{11}} \\ & \underline{a_{12}} = \underline{l_{11}} \times \underline{u_{12}} \\ & \vdots \\ & \underline{a_{1n}} = \underline{l_{11}} \times \underline{u_{1n}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2 \text{ 行目: } & \underline{a_{21}} = \underline{l_{21}} \\ & \underline{a_{22}} = \underline{l_{21}} \times \underline{u_{12}} + \underline{l_{22}} \\ & \underline{a_{23}} = \underline{l_{21}} \times \underline{u_{13}} + \underline{l_{22}} \times \underline{u_{23}} \\ & \vdots \\ & \underline{a_{2n}} = \underline{l_{21}} \times \underline{u_{1n}} + \underline{l_{22}} \times \underline{u_{2n}} \end{aligned}$$

i 行目: $j \leq i$ のとき

$$\underline{a_{ij}} = \sum_{1 \leq k < j} \underline{l_{ik}} \times \underline{u_{kj}} + \underline{l_{ij}} \quad \left(\begin{array}{l} \underline{l_{ik}} \text{ たちは } j-1 \text{ 列目までに求まっていて、} \\ \underline{u_{kj}} \text{ たちは } i-1 \text{ 行目までに求まっている。} \end{array} \right)$$

$i < j$ のとき

$$\underline{a_{ij}} = \sum_{1 \leq k < i} \underline{l_{ik}} \times \underline{u_{kj}} + \underline{l_{ii}} \times \underline{u_{ij}} \quad \left(\begin{array}{l} \underline{l_{ik}} \text{ たちは } i \text{ 列目までに全て求まっていて、} \\ \underline{u_{kj}} \text{ たちは } i-1 \text{ 行目までに求まっている。} \end{array} \right)$$

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  $n$ 
  for  $j = 1$  to  $i$ 
     $\ell_{ij} = a_{ij} - \sum_{1 \leq k < j} \ell_{ik} u_{kj}$ 
  for  $j = i + 1$  to  $n$ 
     $u_{ij} = \left( a_{ij} - \sum_{1 \leq k < i} \ell_{ik} u_{kj} \right) / \ell_{ii}$ 
```

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

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

となっている。

```
for  $i = 1$  to  $n - 1$ 
   $c = a_{ii}$ 
  for  $j = i + 1$  to  $n$ 
     $a_{ij} = a_{ij} / c$ 
  for  $k = i + 1$  to  $n$ 
    for  $j = i + 1$  to  $n$ 
       $a_{kj} = a_{kj} - a_{ki} a_{ij}$ 
```

Step 2° のアルゴリズム

```
for  $i = 1$  to  $n$ 
   $y_i = \left( b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \ell_{ij} y_j \right) / \ell_{ii}$ 
```

Step 3° のアルゴリズム

```
for  $i = n$  downto  $1$ 
   $x_i = y_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij} x_j$ 
```

部分ピボット選択を用いる場合の注意

- (a) 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 $\text{swap}(s[i], s[p])$
 - (3) **Step 2°** では $b[i]$ の代わりに $b[s[i]]$ を入れて計算する
- (b) 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。