数値計算　第8回　 LU分解法

- テーマ：　線形方程式とLU分解法
- LU分解法
  - 同じ係数行列Aを持つ線形方程式を，何回も解きたい場合（現実では多い）
  - ガウス消去法と基本は同じ
  - MATLABでは標準関数として含まれている
- LU分解法はA^{-1}計算より効率的で高精度

今回の演習

- 演習8-1 LU分解法による線形方程式の解法
- 演習8-2 LU分解法と逆行列の計算時間比較
- 演習8-3 フランク行列と逆行列のプロット

教科書57ページ

6.1　LU分解法のアルゴリズム

- 同じ係数行列Aの線形方程式が複数

$$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b},\ \boldsymbol{Ay}=\boldsymbol{c},\ \boldsymbol{Az}=\boldsymbol{d},\cdots$$

- 複数回，ガウス消去法をやる必要はない
- なぜなら前進消去と後退代入は，Aが同じなら同一作業
  - 行列Aの計算値をメモリに記憶（1度だけ）
  - b, c, d, …に対しては，メモリを使って計算
- LU分解法はこれを定式化した方法

三元連立線形方程式の場合(１)

前進消去

1/2倍して引算

1/2倍して引算

$$\begin{array}{llllr} 2x_1 & +3x_2 & +4x_3 & =9 & (1) \\ \boxed{x_1} & +2x_2 & +3x_3 & =6 & (2) \\ \boxed{x_1} & +x_2 & +3x_3 & =5 & (3) \end{array}$$

−1倍して引算

$$\begin{array}{llllr} 2x_1 & +3x_2 & +4x_3 & =9 & (1) \\ 0 & +\frac{1}{2}x_2 & +x_3 & =\frac{3}{2} & (2)' \\ 0 & \boxed{-\frac{1}{2}x_2} & +x_3 & =\frac{1}{2} & (3)' \end{array}$$

$$\begin{array}{llllr} 2x_1 & +3x_2 & +4x_3 & =9 & (1) \\ 0 & +\frac{1}{2}x_2 & +x_3 & =\frac{3}{2} & (2)' \\ 0 & 0 & +2x_3 & =2 & (3)'' \end{array}$$

前進消去に使用した係数

$$\begin{array}{ll} 1/2 & \\ 1/2 & -1 \end{array}$$

三元連立線形方程式の場合(2)

後退代入

$$
\begin{aligned}
2x_1 \quad +3x_2 \quad +4x_3 &= 9 \quad (1)\\
\tfrac{1}{2}x_2 \quad +x_3 &= \tfrac{3}{2} \quad (2)'\\
2x_3 &= 2 \quad (3)''
\end{aligned}
$$

後退代入に
使用した係数

$$
\begin{matrix}
2 & 3 & 4\\
 & 1/2 & 1\\
 & & 2
\end{matrix}
$$

$$
\begin{aligned}
x_1 &= \tfrac{1}{2}\cdot(9-3x_2-4x_3) = \tfrac{1}{2}\cdot 2 = 1\\
x_2 &= 2\cdot(\tfrac{3}{2}-1\cdot x_3) = 2\cdot\tfrac{1}{2} = 1\\
x_3 &= \tfrac{2}{2} = 1
\end{aligned}
$$

LとUの行列でガウス消去法を表現

前進消去に
使用した係数

$$
\begin{matrix}
1/2 & \\
1/2 & -1
\end{matrix}
$$

下三角行列 L
Lower Triangular Matrix

$$
L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0\\ 1/2 & 1 & 0\\ 1/2 & -1 & 1 \end{pmatrix}
$$

（対角要素には1を補う）

後退代入に
使用した係数

$$
\begin{matrix}
2 & 3 & 4\\
 & 1/2 & 1\\
 & & 2
\end{matrix}
$$

上三角行列 U
Upper Triangular Matrix

$$
U = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4\\ 0 & 1/2 & 1\\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}
$$

係数行列AとLUの関係

$$
LU = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0\\ 1/2 & 1 & 0\\ 1/2 & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 3 & 4\\ 0 & 1/2 & 1\\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4\\ 1 & 2 & 3\\ 1 & 1 & 3 \end{pmatrix} = A
$$

$$
A = LU
$$

6.2　LU分解の名の由来
（数式で記述したアルゴリズム）

教科書60ページ

$$
A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}
$$

LU分解結果をメモリ上に配置
（行交換不要を想定）

$$
A' = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{21} & \cdots & u_{n1}\\ l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{n2}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n,n-1} & u_{nn} \end{pmatrix} \qquad (2)
$$

教科書61ページ

三角行列LとU

(単位)下三角行列*L*
(Lower Triangular Matrix)

上三角行列 ***U***
(Upper Triangular Matrix)

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{21} & \cdots & u_{n1} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{n2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & u_{nn} \end{pmatrix} \qquad (3)$$

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU}$$

証明は教科書61ページ参照

教科書60ページ

LU分解による線形方程式解法

- 線形方程式をLU分解

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{LUx} = \boldsymbol{L}(\underbrace{\boldsymbol{Ux}}_{\boldsymbol{c}}) = \boldsymbol{b}$$

- cを使うと線形方程式

$$\boldsymbol{Lc} = \boldsymbol{b},$$

$$\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{c}$$

- 二つの行列は三角行列のため計算が容易

教科書61ページ

前進代入と後退代入

（前進代入）

$$\boldsymbol{L}\underbrace{\boldsymbol{c}}_{\text{（未知）}} = \boldsymbol{b} \qquad \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

（後退代入）

$$\boldsymbol{U}\underbrace{\boldsymbol{x}}_{\text{（未知）}} = \boldsymbol{c} \qquad \begin{pmatrix} u_{11} & u_{21} & \cdots & u_{n1} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{n2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

演習8-1　LU分解

- MATLABのLU分解で線形方程式を解く
- 行列AをLU分解．L，U，Eを表示
- LとUの積がAに一致することを確認

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \qquad \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 3 \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 9 \\ 6 \\ 5 \end{pmatrix}$$

MATLABサンプルコード　（リスト8-1）

```
[L,U]= lu(A)
[L,U,E]= lu(A)   % Eは置換行列
```

演習8-1 MATLABでLU分解（続き）

- LU分解の結果を用いて，ステップ(1)(2)で線形方程式を解く

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \rightarrow \boldsymbol{L(Ux)} = \boldsymbol{b}$$

$$(1)\ \boldsymbol{Lc} = \boldsymbol{b}$$

$$(2)\ \boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{c}$$

$$\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 9 \\ 6 \\ 5 \end{pmatrix}$$

```
MATLABコード
c=L¥b
x=U¥c        またはx=U¥(L¥b)
% ¥はバックスラッシュ
```

```
MATLABでの直接解法
x=A¥b
% 内部でLU分解演算？
```


LU分解法の計算量

- 中心的な演算は，ガウス消去の前進消去と同じ

$$r = a_{ik} / a_{kk},$$
$$a'_{ij} = a_{ij} - r a_{kj} \quad (k \le j \le n), \qquad (9)$$
$$\cancel{b'_i = b_i - r b_k}$$

bの演算不要

- 計算量の見積もり（乗算の回数）

$$\sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=k+1}^{n} \left\{ 1 + \sum_{j=k+1}^{n} 1 \right\} = \frac{n^3}{3} - \frac{n}{3}$$
$$= \frac{n^3}{3} + O(n^2)$$

nが大きいと無視できる

計算量は$O(n^3)$

計算量のオーダー

- 大規模の問題では計算量の把握が重要
- n^3に比べnやn^2の項は無視できる(n>>0)

n	n^2	n^3
2	4	8
3	9	27
4	16	64
5	25	125
10	100	1000
100	10000	1000000
1000	1000000	10^9

演習8-2 LU分解と逆行列の計算時間

- 逆行列とLU分解の計算時間を比較する
- フランク行列を使う
- 次元は500, 1000，1500, 2000, 2500

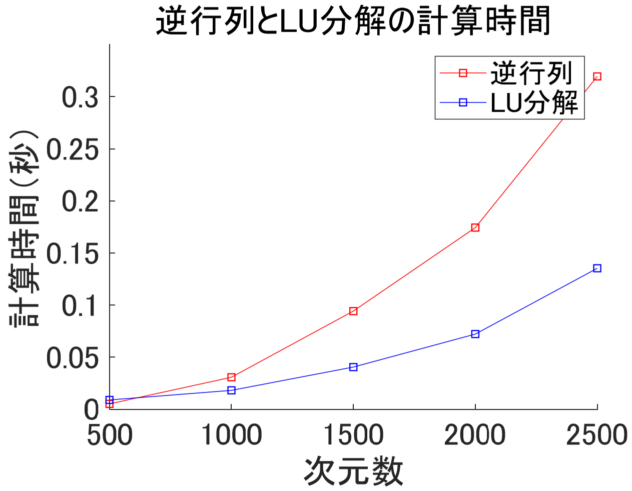
$$\boldsymbol{A} = (a_{ij}),\ a_{ij} = n - \max(i, j) + 1$$

4次元のフランク行列

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 4 & 3 & 2 & 1 \\ 3 & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

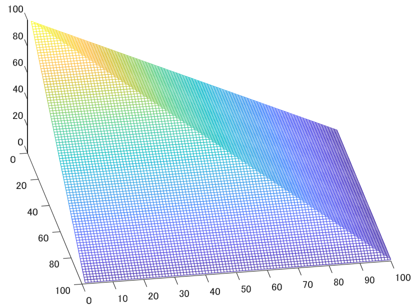
逆行列はLU分解に比べ3倍の計算量

2500次元までの行列の計算時間

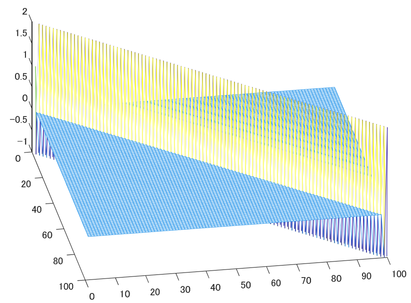


演習8-3　フランク行列とその逆行列

演習8-3を実行すればプロットできる



フランク行列



フランク行列の逆行列

教科書67ページ

6.5 逆行列のアルゴリズム

- n次正則行列Aの逆行列の求め方
- Aに対し下式の n本の方程式をLU分解法で解く

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{I} = (e_1, e_2, \cdots, e_n) \tag{15}$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{c}_j = \boldsymbol{e}_j$$

$$\boldsymbol{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}, \boldsymbol{e}_j = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- 計算量の見積もり

$$\left\{\frac{1}{3}n^3 + O(n^2)\right\} + \left\{\frac{2}{3}n^3 + O(n^2)\right\} = n^3 + O(n^2) \tag{16}$$

教科書68ページ

A^{-1}を作るのはよくない

- A^{-1}の計算にLU分解の3倍の計算量（遅い）
- 計算量が増加するので丸め誤差の影響大（まずい）
- A^{-1}にn×nの2次元配列が必要（高い）
  - 実際の問題ではAが帯行列のことが多い
  - しかしA^{-1}は密行列になる　教科書78ページ

地球シミュレータなどで使われる多くの連立方程式では帯行列を解くことになる

今回の講義のまとめ

- テーマ：　線形方程式とLU分解法
- LU分解法
  - 同じ係数行列Aを持つ線形方程式を，何回も解きたい場合（現実では多い）
  - ガウス消去法と基本は同じ
  - MATLABでは標準関数として含まれている
- LU分解法はA^{-1}計算より効率的で高精度

次回　行列計算の誤差伝搬

- 線形方程式 $Ax = b$ の計算誤差を評価する
- ただし，Aは行列で，解xはベクトル
- そこでベクトルや行列の大きさを評価するノルムを定義して，計算する

1-ノルム　$\|\boldsymbol{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$

2-ノルム　$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2}$ ⇒ デフォルト

∞-ノルム　$\|\boldsymbol{x}\|_\infty = \max_{1 \le i \le n} |x_i|$

次次回　小テスト

- これまで学んだことの確認（配点１０点）
- テスト後に解説

- 数値表現と計算誤差
- 関数計算
- 数値積分
- 線形方程式
- 計算量