神戸市立工業高等専門学校
電気工学科／電子工学科
専門科目「数値解析」

2018.1.19

連立1次方程式2

山浦 剛（tyamaura@riken.jp）

講義資料ページ

- http://climate.aics.riken.jp/members/yamaura/numerical_analysis.html

3重対角行列とLU分解

- 3重対角行列となる連立1次方程式の効率的な解き方を考える。
- $$\begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & \mathbf{0} \\ b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} \\ \mathbf{0} & & & b_N & a_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix}$$
  - 係数行列の対角成分とその隣接成分のみ値をもち、それ以外が全てゼロの疎行列。
  - このときの係数行列Aを**3重対角行列**という。
- 3重対角行列は、LU分解を用いるとガウスの消去法と比べ、効率的に解くことができる。
  - ただし、LU分解が3重対角行列の係数行列をもつ連立1次方程式に対してのみ適用できるというわけではなく、一般的な係数行列をもつ連立1次方程式でも同様に解くことができる。

LU分解のアルゴリズム1

- まず、係数行列Aを2つの行列LとUに置き換える。
  - $$\begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & \mathbf{0} \\ b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} \\ \mathbf{0} & & & b_N & a_N \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & & & & \mathbf{0} \\ l_2 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & l_{N-1} & 1 & \\ \mathbf{0} & & & l_N & 1 \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{L}} \underbrace{\begin{pmatrix} d_1 & c_1 & & & \mathbf{0} \\ & d_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & d_{N-1} & c_{N-1} \\ \mathbf{0} & & & & d_N \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{U}}$$
  - Lは対角成分より上が全てゼロなので、**下三角行列**と呼ばれる。Uは対角成分より下が全てゼロなので、**上三角行列**と呼ばれる。

LU分解のアルゴリズム2

- 行列LとUの積を考えると、
- $$\begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & \mathbf{0} \\ b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} \\ \mathbf{0} & & & b_N & a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 & c_1 & & & \mathbf{0} \\ l_2 d_1 & d_2 + l_2 c_1 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & l_{N-1} d_{N-2} & d_{N-1} + l_{N-1} c_{N-2} & c_{N-1} \\ \mathbf{0} & & & l_N d_{N-1} & d_N + l_N c_{N-1} \end{pmatrix}$$
- 左辺と右辺の各成分を比較。$c_1 \sim c_{N-1}$の部分と成分がゼロとなる部分は矛盾がない。その他の成分は、
  - $d_1 = a_1,\quad l_i = b_i / d_{i-1},\quad d_i = a_i - l_i c_{i-1}\quad (i = 2,3,\ldots,N)$
- この式を用いると、与えられたa_i, b_i, c_iの値からd_1, l_2, d_2, l_3, d_3, ..., l_N, d_Nという順に値を計算できる。
- これで係数行列Aから行列LとUを一意に定めることができ、この過程を**LU分解**という。

LU分解のアルゴリズム3

- LU分解により、係数行列Aを行列LとUで表現できるので、$LU\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$とおくことができる。ここで、$\boldsymbol{z}=U\boldsymbol{x}$となる新しいベクトルを用意。ベクトル$\boldsymbol{z}$を用いて、
  - $L\boldsymbol{z}=\boldsymbol{y}$　$(U\boldsymbol{x}=\boldsymbol{z})$
- すなわち、
  - $$\begin{pmatrix} 1 & & & & \mathbf{0} \\ l_2 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & l_{N-1} & 1 & \\ \mathbf{0} & & & l_N & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_{N-1} \\ z_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 + l_2 z_1 \\ \vdots \\ z_{N-1} + l_{N-1} z_{N-2} \\ z_N + l_N z_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix}$$
  - $$\begin{pmatrix} d_1 & c_1 & & & \mathbf{0} \\ & d_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & d_{N-1} & c_{N-1} \\ \mathbf{0} & & & & d_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 x_1 + c_1 x_2 \\ d_2 x_2 + c_2 x_3 \\ \vdots \\ d_{N-1} x_{N-1} + c_{N-1} x_N \\ d_N x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_{N-1} \\ z_N \end{pmatrix}$$

LU分解のアルゴリズム4

- 解$\boldsymbol{x}$を求めるには、前頁の連立の式を解けばよい。解を導く手順は、まず$\boldsymbol{z}$を求め、それを用いて$\boldsymbol{x}$を求めること。
  - $z_1 = y_1, \quad z_i = y_i - l_i z_{i-1} \quad (i = 2,3,\ldots,N)$
- $z_1, z_2, \ldots z_N$の順に、$\boldsymbol{z}$を定めることができる。これを**前進代入**という。
- 続いて、
  - $x_N = z_N / d_N, \quad x_i = (z_i - c_i x_{i+1}) / d_i \quad (i = 1,2,\ldots,N-1)$
- $x_N, x_{N-1}, \ldots x_1$の順に、$\boldsymbol{x}$を定めることができる。これを**後退代入**という。

LU分解のアルゴリズム5

- $N, a_{i,j}, y_i$を設定 $\Rightarrow$ $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$の問題設定
- LU分解（係数行列AをLとUに分解）
  - $d_1 \coloneqq a_1$
    $\left[\begin{array}{l} i \coloneqq 2,3,\ldots,N\text{の順に} \\ \qquad\qquad l_i \coloneqq b_i/d_{i-1} \\ \qquad\qquad d_i \coloneqq a_i - l_i c_{i-1} \\ \text{を繰り返す} \end{array}\right.$
- 前進代入（$L\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y}$を解く）
  - $z_1 \coloneqq y_1$
    $\left[\begin{array}{l} i \coloneqq 2,3,\ldots,N\text{の順に} \\ \qquad\qquad z_i \coloneqq y_i - l_i z_{i-1} \\ \text{を繰り返す} \end{array}\right.$
- 後退代入（$U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$を解く）
  - $x_N \coloneqq z_N/d_N$
    $\left[\begin{array}{l} i \coloneqq N-1, N-2, \ldots, 1\text{の順に} \\ \qquad\qquad x_i \coloneqq (z_i - c_i x_{i+1})/d_i \\ \text{を繰り返す} \end{array}\right.$

LU分解の計算量とガウスの消去法の関連

- 3重対角行列を解くためのLU分解のアルゴリズムは、計算量が少なくて済む。
  - 乗除算の回数は、LU分解に$2(N-1)$回、前進代入に$(N-1)$回、後退代入に$2(N-1)+1$回。
  - 四則演算の回数は、$O(N)$程度の回数で済む。使用メモリ量も$O(N)$程度。
- ガウスの消去法で、同様に3重対角行列を解くと、$O(N^3)$の演算回数が必要。
  - これは値がゼロの成分を含めて計算を行っているから。メモリも行列程度（$O(N^2)$）必要。
  - ガウスの消去法でも、ゼロ成分を記憶せず、その成分が関わる計算をアルゴリズムから予め除いておけば、LU分解と同じ計算量となる。
- ガウスの消去法とLU分解は、本質的には同じ計算が行われている。
  - LU分解の前進代入で得られる方程式は、$Ux=z$という形になる。これは、ガウスの消去法の前進消去を行って得られる方程式と同じ。LU分解の後退代入も、ガウスの消去法の後退代入と同じ。
- ガウスの消去法と同様、ピボット選択が必要になる場合がある。
  - ただし現実的な問題として、3重対角行列の係数行列ではピボット選択が不要なことが多いので、取り扱わない。

一般係数行列の場合1

- LU分解は3重対角行列だけでなく、通常の行列にも適用可能。
- $$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \cdots & a_{1,N} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & \cdots & a_{2,N} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & \cdots & a_{3,N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N,1} & a_{N,2} & a_{N,3} & \cdots & a_{N,N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{2,1} & 1 & & \mathbf{0} & \\ l_{3,1} & l_{3,2} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{N,1} & l_{N,2} & \cdots & l_{N,N-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \cdots & u_{1,N} \\ & u_{2,2} & u_{2,3} & \cdots & u_{2,N} \\ & & u_{3,3} & \cdots & u_{3,N} \\ & \mathbf{0} & & \ddots & \vdots \\ & & & & u_{N,N} \end{pmatrix}$$
- $a_{1,1} = u_{1,1},\ \ a_{1,2} = u_{1,2},\ \ \ldots,\ \ a_{1,N} = u_{1,N}$
- $a_{2,1} = l_{2,1} u_{1,1}$
- $a_{2,2} = l_{2,1} u_{1,2} + u_{2,2},\ \ a_{2,3} = l_{2,1} u_{1,2} + u_{2,3},\ \ \ldots,\ \ a_{2,N} = l_{2,1} u_{1,N} + u_{2,N}$
- $a_{3,1} = l_{3,1} u_{1,1},\ \ a_{3,2} = l_{3,1} u_{1,2} + l_{3,2} u_{2,2}$
- $a_{3,3} = l_{3,1} u_{1,3} + l_{3,2} u_{2,3} + u_{3,3},\ \ a_{3,4} = l_{3,1} u_{1,4} + l_{3,2} u_{2,4} + u_{2,3},\ \ \ldots,\ \ a_{3,N} = l_{3,1} u_{1,N} + l_{3,2} u_{2,N} + u_{3,N}$
- 順序よく解いていけば、下三角行列と上三角行列に分解できる。

一般係数行列の場合2

- $N, a_{i,j}, y_i$を設定 ⇒ $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$の問題設定
- LU分解
- $i \coloneqq 1,2,\dots,N$の順に
  - $j \coloneqq 1,2,\dots,i-1$の順に
    $$l_{i,j} \coloneqq \frac{1}{u_{j,j}}\left(a_{i,j} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{i,k}u_{k,j}\right)$$
    を繰り返す
  - $j \coloneqq i, i+1, \dots, \mathrm{N}$の順に
    $$u_{i,j} \coloneqq a_{i,j} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{i,k}u_{k,j}$$
    を繰り返す

  を繰り返す
- 前進代入
  $z_1 \coloneqq y_1$
- $i \coloneqq 2,3,\dots,N$の順に
  $$z_i \coloneqq y_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{i,k}z_k$$
  を繰り返す
- 後退代入
  $x_N \coloneqq z_N/u_{N,N}$
- $i \coloneqq N-1, N-2, \dots, 1$の順に
  $$x_i \coloneqq \left(z_i - \sum_{k=i+1}^{N} u_{i,k}x_k\right)/u_{i,i}$$
  を繰り返す
- 最終的に求めたい解$\boldsymbol{x}$が算出できる。

LU分解の優位性

- LU分解のアルゴリズムの計算量
  - 各ルーチンの乗除算の数を見積もると、
    - LU分解： $\approx O(N^3)$，前進代入： $\approx O(N^2)$，後退代入： $\approx O(N^2)$
  - 全体では、LU分解の部分が$O(N^3)$程度かかり、ガウスの消去法と同程度の計算量を要する。
- ガウスの消去法と比べ、何が有利か？
  - 係数行列をLU分解するところだけ$O(N^3)$の計算量を要するが、それを保存しておけばベクトル$\boldsymbol{y}$の変化に対する解$\boldsymbol{x}$を$O(N^2)$の計算量で求めることができる。
  - ガウスの消去法では、前進消去により係数行列の値も変化してしまうので、ベクトル$\boldsymbol{y}$の変化に対して初めから計算しなおさなければならない。 ⇒ 常に$O(N^3)$の計算量を要する。
- 一回だけ行列を解くだけなら計算量の優位性はないが、係数行列を使いまわすことができる場合、LU分解は計算量を減らすことができる。

練習問題

- LU分解を用いて、以下の連立1次方程式を解け。
  - $$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$
  - $$\begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$$

回答例1

- LU分解を用いて、以下の連立1次方程式を解け。
  - $$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$
- LU分解
  - $$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_2 & 1 & 0 \\ 0 & l_3 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} d_1 & -1 & 0 \\ 0 & d_2 & -1 \\ 0 & 0 & d_3 \end{pmatrix}$$
  - $d_1 = 2$
  - $l_2 = -1/d_1 = -\frac{1}{2}, \quad d_2 = 2 + l_2 = \frac{3}{2}$
  - $l_3 = -1/d_2 = -\frac{2}{3}, \quad d_3 = 2 + l_3 = \frac{4}{3}$
- 前進代入（$L\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y}$）
  - $$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$
  - $z_1 = -1, \quad z_2 = 2 + \frac{z_1}{2} = \frac{3}{2}, \quad z_3 = 1 + \frac{2}{3}z_2 = 2$
- 後退代入（$U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$）
  - $$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} & -1 \\ 0 & 0 & \frac{4}{3} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ \frac{3}{2} \\ 2 \end{pmatrix}$$
- $x_3 = \frac{3}{2}, \quad x_2 = \frac{2}{3}\left(\frac{3}{2} + x_3\right) = 2, \quad x_1 = \frac{1}{2}(-1 + x_2) = \frac{1}{2}$

回答例2

- LU分解を用いて、以下の連立1次方程式を解け。
  - $$\begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$$
- LU分解
  - $$\begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ l_2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & l_3 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & l_4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & l_5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_5 \end{pmatrix}$$
  - $d_1 = 4$
  - $l_2 = 2/d_1 = \frac{1}{2}, \quad d_2 = 4 - l_2 = \frac{7}{2}$
  - $l_3 = 2/d_2 = \frac{4}{7}, \quad d_3 = 4 - l_3 = \frac{24}{7}$
  - $l_4 = 2/d_3 = \frac{7}{12}, \quad d_4 = 4 - l_4 = \frac{41}{12}$
  - $l_5 = 2/d_4 = \frac{24}{41}, \quad d_5 = 4 - l_5 = \frac{140}{41}$

回答例2（続）

- LU分解を用いて、以下の連立1次方程式を解け。
  - $$\begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$$
- 前進代入（$L\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y}$）
  - $$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{7} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{7}{12} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{24}{41} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \\ z_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$$
  - $z_1 = 2, \quad z_2 = -1 - \frac{z_1}{2} = -2, \quad z_3 = -1 - \frac{4}{7} z_2 = \frac{1}{7}$
  - $z_4 = -\frac{7}{12} z_3 = -\frac{1}{12}, \quad z_5 = 3 - \frac{24}{41} z_4 = \frac{125}{41}$
- 後退代入（$U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$）
  - $$\begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{7}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{24}{7} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{41}{12} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{140}{41} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -2 \\ \frac{1}{7} \\ -\frac{1}{12} \\ \frac{125}{41} \end{pmatrix}$$
- $x_5 = \frac{25}{28}, \quad x_4 = \frac{12}{41}\left(-\frac{1}{12} - x_5\right) = -\frac{2}{7}, \quad x_3 = \frac{7}{24}\left(\frac{1}{7} - x_4\right) = \frac{1}{8}$
- $x_2 = \frac{2}{7}(-2 - x_3) = -\frac{17}{28}, \quad x_1 = \frac{1}{4}(2 - x_2) = \frac{73}{112}$