

線形方程式の解法：直接法

中島 研吾

東京大学情報基盤センター

同 大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻

数値解析（科目番号 500080）

C言語速習コース

- 以下の2日間実施
 - 1月17日(金)15:00-18:00(予定)
 - 翌日センター試験のため休講, 浅野地区は入試がなく施設利用可能
 - 1月21日(火)13:00-17:00(予定)
- 情報基盤センター(浅野)本館1F 大演習室2
 - <http://www.itc.u-tokyo.ac.jp/itcPage/CntMap/jhongo.pdf>
- 教育用計算機システム(ECCS)アカウント取得のこと
 - <http://www.ecc.u-tokyo.ac.jp/user.html>
- 今日の話の範囲であれば手計算でも理解できるが, 反復法以降になると何らかのプログラミングが必要(Scilabでも良い)

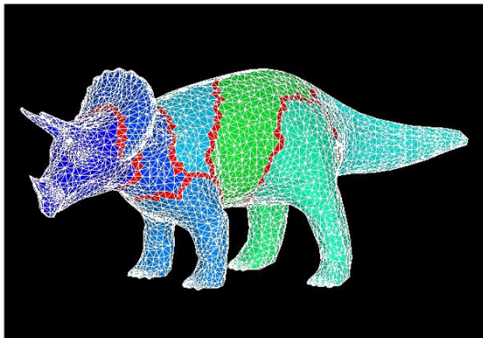
- ベクトル, 行列の基本的性質(復習)
- 線形方程式, 連立一次方程式の解法
- ガウスの消去法
- ピボットの選択
- LU分解法

今後の予定：かなりの詰め込みになる模様

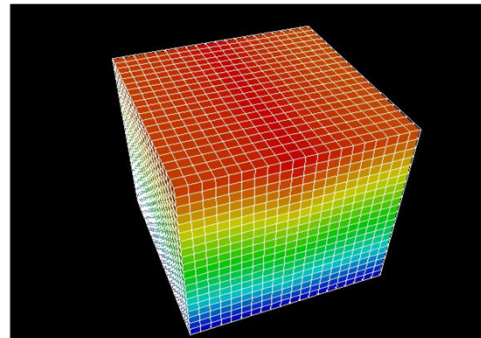
- 2013年12月13日(金)
- 2013年12月20日(金)
 - 線形方程式の解法(直接法)
 - 線形方程式の解法(反復法)
- 2014年1月10日(金)
- 2014年1月17日(金)
- 2014年1月24日(金)
 - 偏微分方程式の数値解法
 - 固有値解法
 - 大規模連立一次方程式の並列解法(実例)

科学技術計算の方法

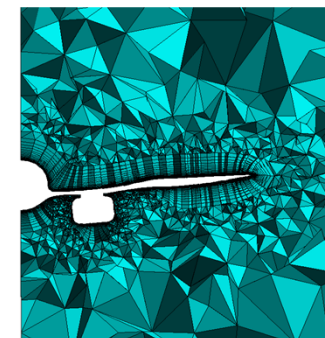
- 偏微分方程式 (Partial Differential Equations: PDE) 数値解
- メッシュ, 格子, 粒子 (mesh, grid, particle)
 - 大規模な連立一次方程式を解く必要あり
 - 細かいメッシュほど計算量が多いが精度の良い解



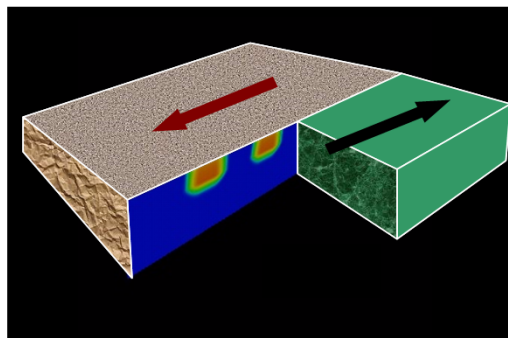
有限要素法
Finite Element Method
FEM



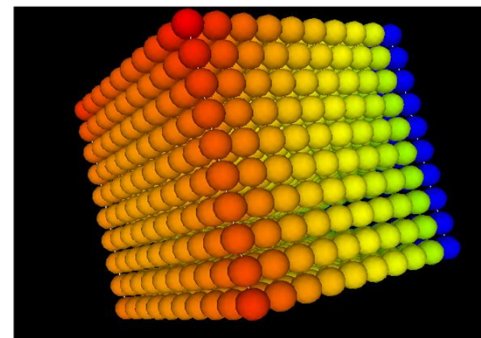
差分法
Finite Difference Method
FDM



有限体積法
Finite Volume Method
FVM



境界要素法
Boundary Element Method
BEM



個別要素法
Discrete Element Method
DEM



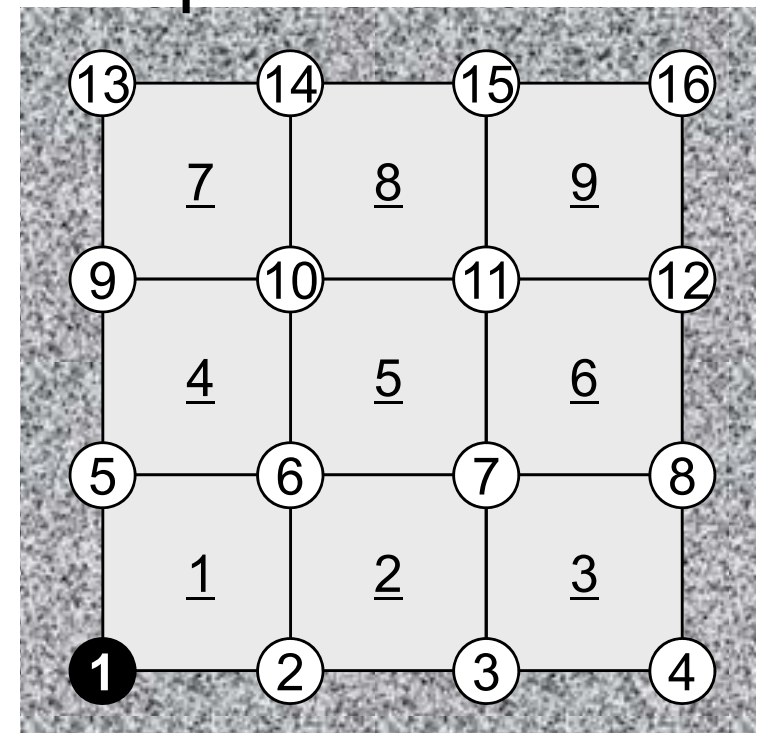
有限要素法

Finite-Element Method (FEM)

- One of the most popular numerical methods for solving PDE's.
 - elements 要素(meshes) & nodes 節点 (vertices)
- Consider the following 2D heat transfer problem:

$$\lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + Q = 0$$

- 16 nodes, 9 bi-linear elements
- uniform thermal conductivity ($\lambda=1$)
- uniform volume heat flux ($Q=1$)
- $T=0$ at node 1
- **Insulated boundaries**





Galerkin FEM procedures

- Apply Galerkin procedures to each element:

where $T = [N]\{\phi\}$ in each elem.

$$\int_V [N]^T \left\{ \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + Q \right\} dV = 0$$

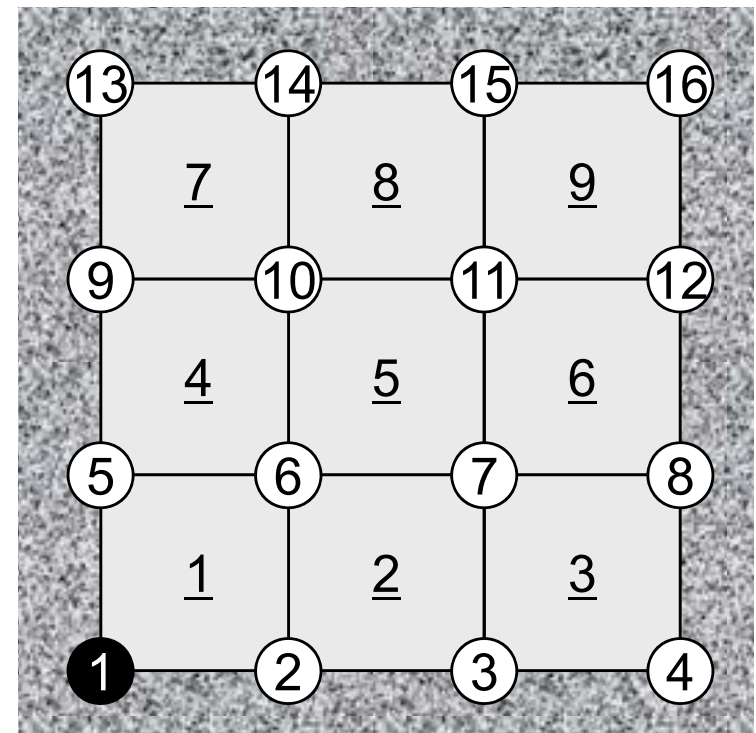
$\{\phi\}$: T at each vertex

$[N]$: Shape function

(Interpolation function)

- Introduce the following “weak form” of original PDE using Green’s theorem:

$$-\int_V \lambda \left(\frac{\partial [N]^T}{\partial x} \frac{\partial [N]}{\partial x} + \frac{\partial [N]^T}{\partial y} \frac{\partial [N]}{\partial y} \right) dV \cdot \{\phi\} + \int_V Q [N]^T dV = 0$$

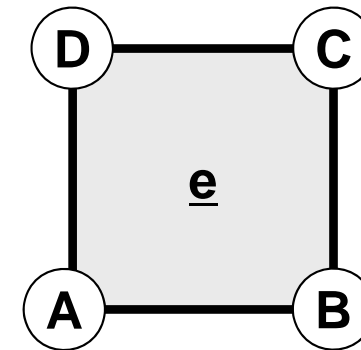




Element Matrix

- Apply the integration to each element and form “element” matrix.

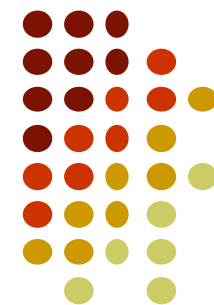
$$-\int_V \lambda \left(\frac{\partial [N]^T}{\partial x} \frac{\partial [N]}{\partial x} + \frac{\partial [N]^T}{\partial y} \frac{\partial [N]}{\partial y} \right) dV \cdot \{\phi\} + \int_V Q [N]^T dV = 0$$



$$[k^{(e)}] \{\phi^{(e)}\} = \{f^{(e)}\}$$



$$\begin{bmatrix} k_{AA}^{(e)} & k_{AB}^{(e)} & k_{AC}^{(e)} & k_{AD}^{(e)} \\ k_{BA}^{(e)} & k_{BB}^{(e)} & k_{BC}^{(e)} & k_{BD}^{(e)} \\ k_{CA}^{(e)} & k_{CB}^{(e)} & k_{CC}^{(e)} & k_{CD}^{(e)} \\ k_{DA}^{(e)} & k_{DB}^{(e)} & k_{DC}^{(e)} & k_{DD}^{(e)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_A^{(e)} \\ \phi_B^{(e)} \\ \phi_C^{(e)} \\ \phi_D^{(e)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_A^{(e)} \\ f_B^{(e)} \\ f_C^{(e)} \\ f_D^{(e)} \end{Bmatrix}$$



“Sparse” Global (Overall) Matrix

Accumulate each element matrix to “global” matrix.

$[K]\{\Phi\} = \{F\}$

Sparse Matrix
疎行列

$$\begin{bmatrix}
 D & X & & & & & & & & & & & & & & \\
 X & D & X & & & & & & & & & & & & & \\
 & X & D & X & & & & & & & & & & & & \\
 & & X & D & & & & & & & & & & & & \\
 X & X & & & D & X & & & & X & X & & & & & \\
 X & X & X & & X & D & X & & & X & X & X & & & & \\
 & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & \\
 & & X & X & & & X & D & & & X & X & & & & \\
 & & & & X & X & & & D & X & & & & & & \\
 & & & & X & X & X & & X & D & X & & & & & \\
 & & & & & X & X & & & X & D & X & & & & \\
 & & & & & & X & X & & & X & D & X & & & \\
 & & & & & & & X & X & & & X & D & X & & \\
 & & & & & & & & X & X & & & X & D & X & \\
 & & & & & & & & & X & X & & & X & D &
 \end{bmatrix}
 \begin{Bmatrix}
 \Phi_1 \\
 \Phi_2 \\
 \Phi_3 \\
 \Phi_4 \\
 \Phi_5 \\
 \Phi_6 \\
 \Phi_7 \\
 \Phi_8 \\
 \Phi_9 \\
 \Phi_{10} \\
 \Phi_{11} \\
 \Phi_{12} \\
 \Phi_{13} \\
 \Phi_{14} \\
 \Phi_{15} \\
 \Phi_{16}
 \end{Bmatrix}
 =
 \begin{Bmatrix}
 F_1 \\
 F_2 \\
 F_3 \\
 F_4 \\
 F_5 \\
 F_6 \\
 F_7 \\
 F_8 \\
 F_9 \\
 F_{10} \\
 F_{11} \\
 F_{12} \\
 F_{13} \\
 F_{14} \\
 F_{15} \\
 F_{16}
 \end{Bmatrix}$$



To each node ...

Effect of surrounding elem's/nodes are accumulated.

$[K]\{\Phi\} = \{F\}$

D	X			X	X										
X	D	X		X	X	X									
	X	D	X		X	X	X								
		X	D			X	X								
X	X			D	X			X	X						
X	X	X		X	D	X		X	X	X					
X	X	X		X	D	X		X	X	X					
				X	X			D	X			X	X		
				X	X	X		X	D	X		X	X	X	
					X	X	X		X	D	X		X	X	X
						X	X			D	X				
							X	X	X		D	X			
								X	X			D	X		
									X	X			D	X	
														D	

$$\begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \\ \Phi_5 \\ \Phi_6 \\ \Phi_7 \\ \Phi_8 \\ \Phi_9 \\ \Phi_{10} \\ \Phi_{11} \\ \Phi_{12} \\ \Phi_{13} \\ \Phi_{14} \\ \Phi_{15} \\ \Phi_{16} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \\ F_5 \\ F_6 \\ F_7 \\ F_8 \\ F_9 \\ F_{10} \\ F_{11} \\ F_{12} \\ F_{13} \\ F_{14} \\ F_{15} \\ F_{16} \end{bmatrix}$$



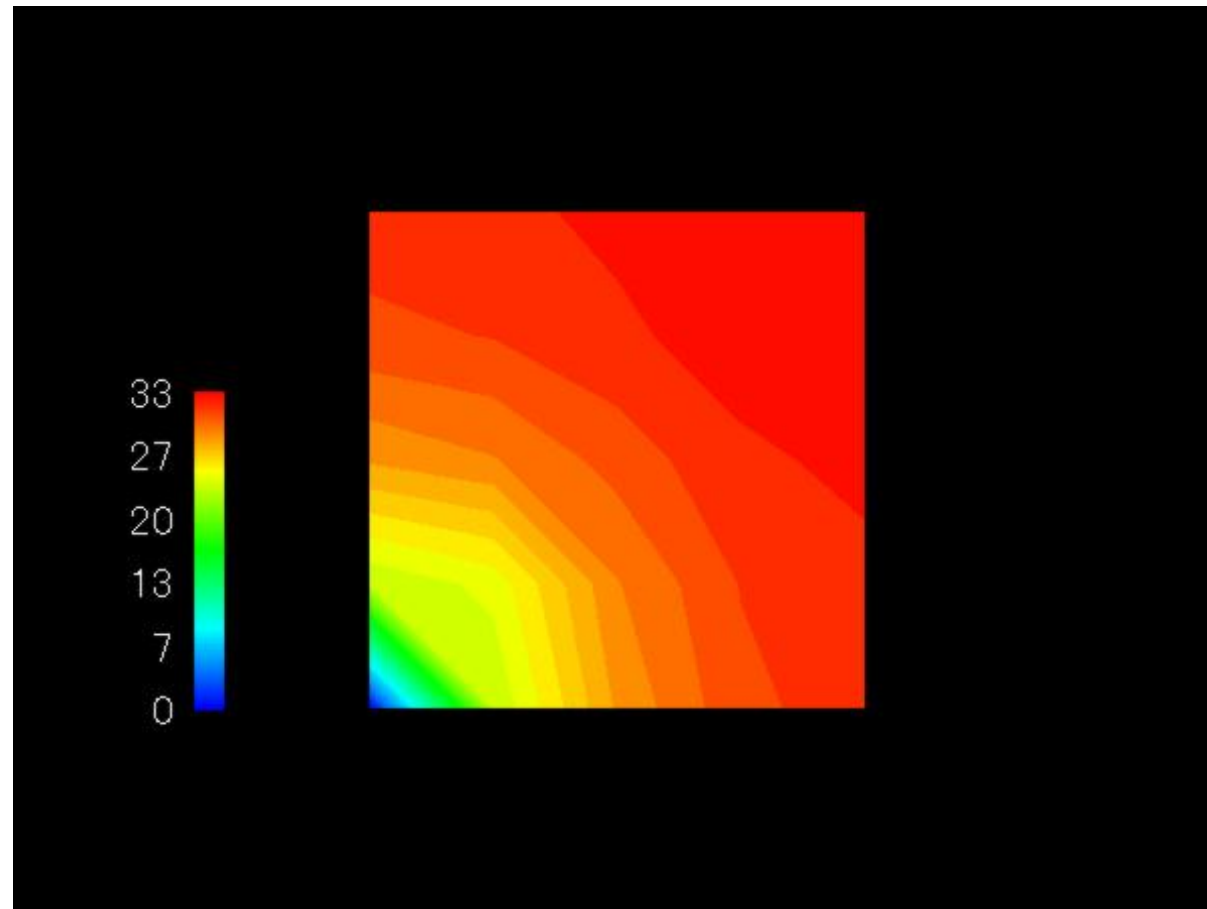
Solve the obtained global eqn's

under certain boundary conditions
($\Phi_1=0$ in this case)

科学技術シミュレーションで最も重要(時間かかる)

$$\begin{bmatrix}
 D & X & & & X & X & & & & & & & & & & & \\
 X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & & & \\
 & X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & & \\
 & & X & D & & & X & X & & & & & & & & & \\
 X & X & & & D & X & & & X & X & & & & & & & \\
 X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & & & \\
 & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & & \\
 & & X & X & & & X & D & & & X & X & & & & & \\
 & & & & X & X & & & D & X & & & X & X & & & \\
 & & & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & \\
 & & & & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & \\
 & & & & & & X & X & & & D & X & & & & & \\
 & & & & & & X & X & X & & X & D & X & & & & \\
 & & & & & & & X & X & X & & X & D & X & & & \\
 & & & & & & & & X & X & & & X & D & & & \\
 & & & & & & & & & X & X & & & X & D & & \\
 & & & & & & & & & & X & X & & & X & D & \\
 & & & & & & & & & & & X & X & & & X & D
 \end{bmatrix}
 \begin{Bmatrix}
 \Phi_1 \\
 \Phi_2 \\
 \Phi_3 \\
 \Phi_4 \\
 \Phi_5 \\
 \Phi_6 \\
 \Phi_7 \\
 \Phi_8 \\
 \Phi_9 \\
 \Phi_{10} \\
 \Phi_{11} \\
 \Phi_{12} \\
 \Phi_{13} \\
 \Phi_{14} \\
 \Phi_{15} \\
 \Phi_{16}
 \end{Bmatrix}
 =
 \begin{Bmatrix}
 F_1 \\
 F_2 \\
 F_3 \\
 F_4 \\
 F_5 \\
 F_6 \\
 F_7 \\
 F_8 \\
 F_9 \\
 F_{10} \\
 F_{11} \\
 F_{12} \\
 F_{13} \\
 F_{14} \\
 F_{15} \\
 F_{16}
 \end{Bmatrix}$$

Result ...



大規模連立一次方程式 $Ax=b$ を解く！

- （教養の線形代数学（数学Ⅱ）（昔の「幾何」））
- 科学技術シミュレーションにおいて最も重要なプロセス
 - 時間がかかる
 - 安定で高速な手法が必須：新しい科学の開拓に貢献
- 解法
 - 直接法（ガウス消去法，LU分解）
 - 反復法（定常法，非定常法（クリロフ（Krylov）部分空間法））
- 係数行列 A
 - 密行列，疎行列（ゼロ多い）：モデル化手法，条件により異なる
 - 行列を見れば現象の全てがわかる！
- 研究としてやることはたくさんある，実用性も高い

線形方程式，連立一次方程式に関する 基本事項，前提条件（本講義）

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

- 係数行列 \mathbf{A} ，右辺定数ベクトル \mathbf{b} ，未知数ベクトル \mathbf{x} の成分は全て実数と仮定（実際は複素数の場合もある）
- 係数行列 \mathbf{A} は正方行列（ $n \times n$ ）と仮定（実際は正方行列でない場合もある）
- 係数行列 \mathbf{A} は「密」とする（「疎」な場合は非零成分のみ記憶）

解 : Cramerの公式

$$x_i = \frac{\det(\mathbf{A}_i)}{\det(\mathbf{A})} \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

$\det(\mathbf{A})$: \mathbf{A} の行列式

\mathbf{A}_i : \mathbf{A} の i 列目を \mathbf{b} で置き換えた行列

- 解の存在条件
 - $\det(\mathbf{A}) \neq 0$
 - $\text{rank}(\mathbf{A}) = n$
- 行列のランク(rank)
 - 一次独立な行ベクトル, 列ベクトルの最大数
 - 行列式 $\neq 0$ となる小行列式の最大次数

ベクトル・行列のノルム (Norm) $\|\cdot\|$

$$\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad \|\mathbf{A}\|_p = \sup_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{Ax}\|_p}{\|\mathbf{x}\|_p} = \max_{\|\mathbf{x}\|_p=1} \|\mathbf{Ax}\|_p$$

ベクトル成分の大きさには無関係,
 $\|\mathbf{x}\|=1$ としても一般性を失わない

- $p=1$: 1-ノルム, $p=2$: 2-ノルム (ユークリッドノルム)

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_j \left(\sum_{i=1}^n |a_{ij}| \right) \quad \text{列方向の絶対値の和の最大値}$$

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \max_i \left(\left| \lambda_i \left(\mathbf{A}^T \mathbf{A} \right) \right|^{\frac{1}{2}} \right) \quad \lambda_i(\mathbf{B}) (i = 1, 2, \dots, n)$$

行列 \mathbf{B} の固有値

$$\|\mathbf{Ax}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{x}\|, \quad \|\mathbf{AB}\| \leq \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{B}\|$$

スペクトル半径 $\rho(\mathbf{A})$

$$\|\mathbf{A}\mathbf{x}_i\| = \|\lambda_i(\mathbf{A})\mathbf{x}_i\| = |\lambda_i(\mathbf{A})|\|\mathbf{x}_i\| \quad \lambda_i : \text{固有値}$$

$$\frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}_i\|}{\|\mathbf{x}_i\|} = |\lambda_i(\mathbf{A})| \quad \mathbf{x}_i : \text{対応する固有ベクトル}$$

$$\therefore \|\mathbf{A}\| = \sup_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \geq |\lambda_i(\mathbf{A})|$$

$$\rho(\mathbf{A}) = \max_i |\lambda_i(\mathbf{A})| \leq \|\mathbf{A}\| \quad \mathbf{A} \text{の絶対値最大固有値} \\ (\text{スペクトル半径})$$

条件数 (Condition Number) $\text{cond}(\mathbf{A})$

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) = \mathbf{b} + \delta\mathbf{b}$$



$$\delta\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{b}$$

$$\|\delta\mathbf{x}\| \leq \|\mathbf{A}^{-1}\| \cdot \|\delta\mathbf{b}\|$$

$$\|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{x}\| \geq \|\mathbf{b}\|$$

$$\therefore \frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|} \leq \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\| \cdot \frac{\|\delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}$$

$$\text{cond}(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\| \geq 1 \quad \because \mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{I}$$

条件数: 右辺に入った誤差が左辺でどのくらいになり得るかの倍率, 条件数が大きいと「悪条件」, 「性質の良くない」方程式, すなわち解きにくい方程式となる

条件数 (Condition Number) (続き)

$$\text{cond}_p(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_p \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\|_p$$

この値はノルムの定義に依存する。

\mathbf{A} がエルミート行列(実行列であれば対称行列)の場合, 下記が成立することが知られている(最大最小固有値の比):

$$\begin{aligned} \text{cond}_2(\mathbf{A}) &= \|\mathbf{A}\|_2 \cdot \|\mathbf{A}^{-1}\|_2 = \max_i |\lambda_i(\mathbf{A})| \max_i \left| \frac{1}{\lambda_i(\mathbf{A})} \right| \\ &= \frac{\max_i |\lambda_i(\mathbf{A})|}{\min_i |\lambda_i(\mathbf{A})|} \quad \because \lambda(\mathbf{A}^{-1}) = \frac{1}{\lambda(\mathbf{A})} \end{aligned}$$

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \max_i \left(|\lambda_i(\mathbf{A}^T \mathbf{A})|^{\frac{1}{2}} \right) = \max_i \left(|\lambda_i(\mathbf{A}^2)|^{\frac{1}{2}} \right) = \max_i \left(|\lambda_i(\mathbf{A}) \lambda_i(\mathbf{A})|^{\frac{1}{2}} \right) = \max_i (|\lambda_i(\mathbf{A})|)$$

行列の基本変形 (1/3)

- 行に関する基本変形(基本行変換)
 - 二つの行を入れ替える
 - ある行を0でない定数倍する
 - ある行に, 他のある行の定数倍を加える
 - 行列Aに基本行変換を繰り返し施して得られた行列B: AとBは「行同値」
- 列に関する基本変形(基本列変換)
 - 二つの列を入れ替える
 - ある列を0でない定数倍する
 - ある列に, 他のある列の定数倍を加える
 - 行列Aに基本列変換を繰り返し施して得られた行列B: AとBは「列同値」

行列の基本変形 (2/3)

$$P_{i,j} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 0 & & 1 \\ & & & \ddots & \\ & 1 & & 0 & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} \quad (1 \leq i \neq j \leq n)$$

$$Q_{i,c} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & & c & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix} \quad (1 \leq i \leq n, c \neq 0)$$

$$R_{i,j,c} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & c \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix} \quad (1 \leq i \neq j \leq n, c \neq 0)$$

行列の基本変形 (3/3)

- 行に関する基本変形(基本行変換)
 - 二つの行を入れ替える: P を左側からかける
 - ある行を0でない定数倍する: Q を左側からかける
 - ある行に, 他のある行の定数倍を加える: R を左側からかける
 - 行列 A に基本行変換を繰り返し施して得られた行列 B : A と B は「行同値」
- 列に関する基本変形(基本列変換)
 - 二つの列を入れ替える: P を右側からかける
 - ある列を0でない定数倍する: Q を右側からかける
 - ある列に, 他のある列の定数倍を加える: R を右側からかける
 - 行列 A に基本列変換を繰り返し施して得られた行列 B : A と B は「列同値」

- ベクトル, 行列の基本的性質(復習)
- **線形方程式, 連立一次方程式の解法**
- ガウスの消去法
- ピボットの選択
- LU分解法

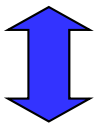
線形方程式，連立一次方程式の解法

- 直接法 (Direct Method)
 - 「解を変えない変形」を駆使して問題を解きやすい形に変形
 - ガウスの消去法, LU分解法 等
- 反復法 (Iterative Method)
 - 繰り返し計算によって解を求める方法
 - ヤコビ法 (Jacobi), ガウス・ザイデル法 (Gauss-Seidel)
 - 共役勾配法 (Conjugate Gradient, CG)

連立一次方程式の行列表現

n元の連立一次方程式の一般形

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned} \tag{1}$$



行列表現

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

「解を変えない変形」とは？

- 二つの行を入れ替える(式の入れ替え)
- ある行を0でない定数倍する(式の定数倍)
- ある行(式)に, 他のある行(式)の定数倍を加える
- 二つの列を入れ替える(変数の入れ替え)

解を変えない変形：4種類

$$\begin{array}{lll} 2x_1 + x_2 = 5 & \textcircled{1} & \text{解} \\ 7x_1 - 2x_2 = 1 & \textcircled{2} & x_1 = 1, x_2 = 3 \end{array}$$

- 二つの行を入れ替える(式の入れ替え)
- ある行を0でない定数倍する(式の定数倍)
- ある行(式)に, 他のある行(式)の定数倍を加える
- 二つの列を入れ替える(変数の入れ替え)

(1) ある行 (式) の定数倍

$$2x_1 + x_2 = 5$$

1

$$7x_1 - 2x_2 = 1$$

2

例

$$\textcircled{1} \times \alpha \quad (\alpha \neq 0)$$

$$x_1 = 1, x_2 = 3$$

$$2\alpha x_1 + \alpha x_2 = 5\alpha$$

$$7x_1 - 2x_2 = 1$$

$$2\alpha \times 1 + \alpha \times 3 = 5\alpha$$

$$7 \times 1 - 2 \times 3 = 1$$

(2) ある行 (式) に他行 (式) の 定数倍を加える

$$2x_1 + x_2 = 5 \quad \textcircled{1}$$

$$7x_1 - 2x_2 = 1 \quad \textcircled{2}$$

例

$$\textcircled{2} + \textcircled{1} \times \alpha \quad (\alpha \neq 0)$$

$$x_1 = 1, x_2 = 3$$

$$2x_1 + x_2 = 5$$

$$2 \times 1 + 3 = 5$$

$$(2\alpha + 7)x_1 + (\alpha - 2)x_2 \\ = 5\alpha + 1$$

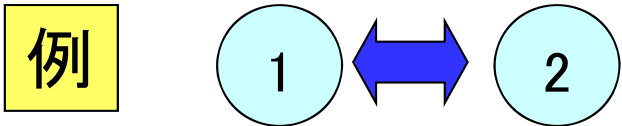
$$(2\alpha + 7) \times 1 + (\alpha - 2) \times 3 \\ = 5\alpha + 1$$

(3) 行を入れ替える (式の入替え)

$$2x_1 + x_2 = 5$$
$$7x_1 - 2x_2 = 1$$

1

2



$$7x_1 - 2x_2 = 1$$
$$2x_1 + x_2 = 5$$

1

2

(4) 列を入れ替える (変数の入れ替え)

$$2x_1 + x_2 = 5$$

1

$$7x_1 - 2x_2 = 1$$

2

例

$$x_1 \Leftrightarrow x_2$$

$$x_1 + 2x_2 = 5$$

$$-2x_1 + 7x_2 = 1$$

解は $x_1 = 3, x_2 = 1$

となるが、どの変数を入れ替えたかを記憶しておけば、元の方程式の解が復元できる

- ベクトル, 行列の基本的性質(復習)
- 線形方程式, 連立一次方程式の解法
- **ガウスの消去法**
- ピボットの選択
- LU分解法

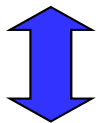
ガウスの消去法 (1/3)

Gaussian Elimination

n元の連立一次方程式の一般形

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned}$$

(1)



行列表現

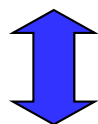
$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

ガウスの消去法 (2/3)

Gaussian Elimination

解を変えない変形を駆使して、以下のような形に変形する

$$\begin{aligned} x_1 + a'_{12}x_2 + \cdots + a'_{1n}x_n &= b'_1 \\ x_2 + \cdots + a'_{2n}x_n &= b'_2 \\ &\vdots \\ x_n &= b'_n \end{aligned}$$



(2)

行列表現

$$\begin{pmatrix} 1 & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} & b'_1 \\ 0 & 1 & \cdots & a'_{2n} & b'_2 \\ \vdots & 0 & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & b'_n \end{pmatrix}$$

ガウスの消去法 (3/3)

Gaussian Elimination

$$\begin{aligned}x_1 + a'_{12}x_2 + \cdots + a'_{1n}x_n &= b'_1 \\x_2 + \cdots + a'_{2n}x_n &= b'_2 \\&\vdots\end{aligned}\tag{2}$$

この式の解は？

$$x_n = b'_n$$

後退代入 (Backward Substitution) によって簡単に求められる

$$x_n = b'_n$$

$$x_{n-1} = b'_{n-1} - a'_{n-1,n}x_n$$

$$\vdots$$

$$x_1 = b'_1 - (a'_{12}x_2 + \cdots + a'_{1n}x_n)$$

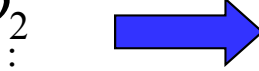
前進消去・後退代入 (1/2)

Forward Elimination & Backward Substitution

前進消去 (Forward elimination)

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2$$



$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n$$

$$x_1 + a'_{12}x_2 + \cdots + a'_{1n}x_n = b'_1$$

$$x_2 + \cdots + a'_{2n}x_n = b'_2$$

$$x_n = b'_n$$

式をこのように変形すること

前進消去・後退代入 (2/2)

Forward Elimination & Backward Substitution

$$\begin{aligned}x_1 + a'_{12}x_2 + \cdots + a'_{1n}x_n &= b'_1 \\x_2 + \cdots + a'_{2n}x_n &= b'_2 \\&\vdots \\x_n &= b'_n\end{aligned}$$



後退代入 (Backward substitution)

$$x_n = b'_n$$

$$x_{n-1} = b'_{n-1} - a'_{n-1,n}x_n$$

$$\vdots$$

$$x_1 = b'_1 - (a'_{12}x_2 + \cdots + a'_{1n}x_n)$$

変形した式を用いて解を
求めること

行と列

n元の連立一次方程式の一般形を次式のように、行列表現で表す.

1行
2行
n行

→

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

↑

↑


↑

↑

1列 2列 n列 (n+1)列

前進消去（行列表現）

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$



$$\begin{pmatrix} 1 & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} & b'_1 \\ 0 & 1 & \cdots & a'_{2n} & b'_2 \\ \vdots & 0 & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & b'_n \end{pmatrix}$$

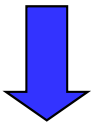
対角成分

数值例

$$2x_1 + 3x_2 + x_3 = 5$$

$$2x_1 + x_2 - 2x_3 = 1$$

$$x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 7$$



行列表現

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 & 5 \\ 2 & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 7 \end{pmatrix}$$

4. 第2行 $\div (-2)$

$$\begin{pmatrix} 1 & 3/2 & 1/2 & 5/2 \\ 0 & 1 & 3/2 & 2 \\ 0 & 1/2 & 5/2 & 9/2 \end{pmatrix}$$

5. 第2行 $\div (-2) + 3$ 行

$$\begin{pmatrix} 1 & 3/2 & 1/2 & 5/2 \\ 0 & 1 & 3/2 & 2 \\ 0 & 0 & 7/4 & 7/2 \end{pmatrix}$$

6. 第3行 $\times 4/7$

$$\begin{pmatrix} 1 & 3/2 & 1/2 & 5/2 \\ 0 & 1 & 3/2 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 3/2 & 1/2 & 5/2 \\ 0 & -2 & -3 & -4 \\ 0 & 1/2 & 5/2 & 9/2 \end{pmatrix}$$

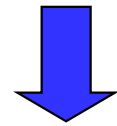
$$\begin{array}{r} [0, 1, 3/2, 2] \xrightarrow{\div (-2)} [0, -1/2, -3/4, -1] \\ +) [0, +1/2, +5/2, +9/2] \\ \hline [0, 0, +7/4, +7/2] \end{array}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} & b'_1 \\ 0 & 1 & \cdots & a'_{2n} & b'_2 \\ \vdots & 0 & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & b'_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 3/2 & 1/2 \\ 0 & 1 & 3/2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 5/2 \\ 2 \\ 2 \end{Bmatrix}$$

数値例（続き）

$$\begin{pmatrix} 1 & 3/2 & 1/2 \\ 0 & 1 & 3/2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 5/2 \\ 2 \\ 2 \end{Bmatrix}$$



後退代入


$$x_3 = 2$$

$$x_2 = 2 - \frac{3}{2}x_3 = -1$$

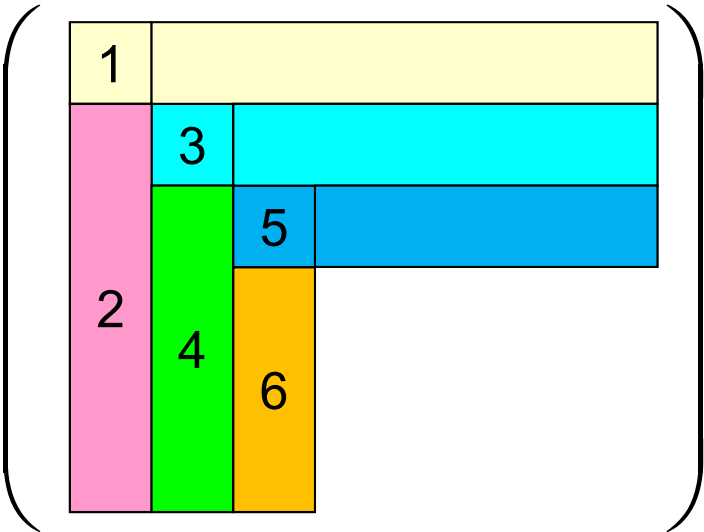
$$x_1 = \frac{5}{2} - \frac{3}{2} \times (-1) - \frac{1}{2} \times 2 = 3$$

前進消去（行列表現）：まとめ

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$



$$\begin{pmatrix} 1 & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} & b'_1 \\ 0 & 1 & \cdots & a'_{2n} & b'_2 \\ \vdots & 0 & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & b'_n \end{pmatrix}$$



- 1

$a_{11} \rightarrow 1$
- 2

$a_{21}, a_{31}, \cdots, a_{n1} \rightarrow 0$
- 3

$a_{22} \rightarrow 1$
- 4

$a_{32}, a_{42}, \cdots, a_{n2} \rightarrow 0$

プログラム例（前進消去）

```
do k= 1, N
```

```
  RAKk= 1. d0/A(k, k)
```

```
  do j= k, N
```

```
    A(k, j)= A(k, j) * RAKk
```

```
  enddo
```

```
  B(k)= B(k) * RAKk
```

**k行目の成分 a_{kj} ($j=k, k+1, \dots, N$)
を a_{kk} で割る
 $a_{kk}=1$ となっていることに注意**

```
  do i= k+1, N
```

```
    Aik= A(i, k)
```

```
    do j= k, N
```

```
      A(i, j)= A(i, j) - Aik*A(k, j)
```

```
    enddo
```

```
    B(i)= B(i) - Aik*B(k)
```

```
  enddo
```

**i行目 ($i=k+1, k+2, \dots, N$)の成分
からk行目の成分の a_{ik} 倍を引き,
 $a_{ik}=0$ となるようにする**

```
enddo
```

$A(i,j)$: A の a_{ij} 成分 \Rightarrow 前進消去後の行列

$B(i)$: b の各成分 \Rightarrow 前進消去後の b' の各成分

$$\begin{pmatrix} 1 & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} & b'_1 \\ 0 & 1 & \cdots & a'_{2n} & b'_2 \\ \vdots & 0 & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & b'_n \end{pmatrix}$$

プログラム例（後退代入）

```
do k= N, 1, -1
  VAL= 0. d0
  do j= k+1, N
    VAL= VAL + A(k, j)*B(j)
  enddo
  B(k)= B(k) - VAL
enddo
```

$$\begin{aligned}x_1 + a'_{12}x_2 + \cdots + a'_{1n}x_n &= b'_1 \\x_2 + \cdots + a'_{2n}x_n &= b'_2 \\&\vdots \\x_n &= b'_n\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}x_n &= b'_n \\x_{n-1} &= b'_{n-1} - a'_{n-1,n}x_n \\&\vdots \\x_1 &= b'_1 - (a'_{12}x_2 + \cdots + a'_{1n}x_n)\end{aligned}$$

- ベクトル, 行列の基本的性質(復習)
- 線形方程式, 連立一次方程式の解法
- ガウスの消去法
- **ピボットの選択**
- LU分解法

ガウスの消去法：前進消去

プログラムを作ることを考えて見る

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{red arrow}} \begin{pmatrix} 1 & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} & b'_1 \\ 0 & 1 & \cdots & a'_{2n} & b'_2 \\ \vdots & 0 & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & b'_n \end{pmatrix}$$

- ① i 行を a_{ii} で割る
- ② j 行 ($j > i$) に i 行の $-a_{ji}$ 倍を足す $\Rightarrow a'_{ji} = 0$
- ③ $i = i + 1$ として繰り返す

$a_{ii} = 0$ となったらどうする？

行の交換・・・プログラムではどうやって対処する？

計算例

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & -2 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 8 \\ 6 \\ 9 \end{Bmatrix}$$

ピボットの選択と誤差

$|p| = 0 \longrightarrow$ 割り算が不可能

$|p|$ が小さい場合 $\longrightarrow |a_{kj} / p| \quad |b_k / p|$ が大きくなる

$\longrightarrow \begin{cases} a_{ij} - a_{ik} a_{kj} \rightarrow a_{ij} \\ b_i - a_{ik} b_k \rightarrow b_i \end{cases}$ で丸め誤差が発生

いずれにせよ、ピボット $|p|$ は大きい方がよい。

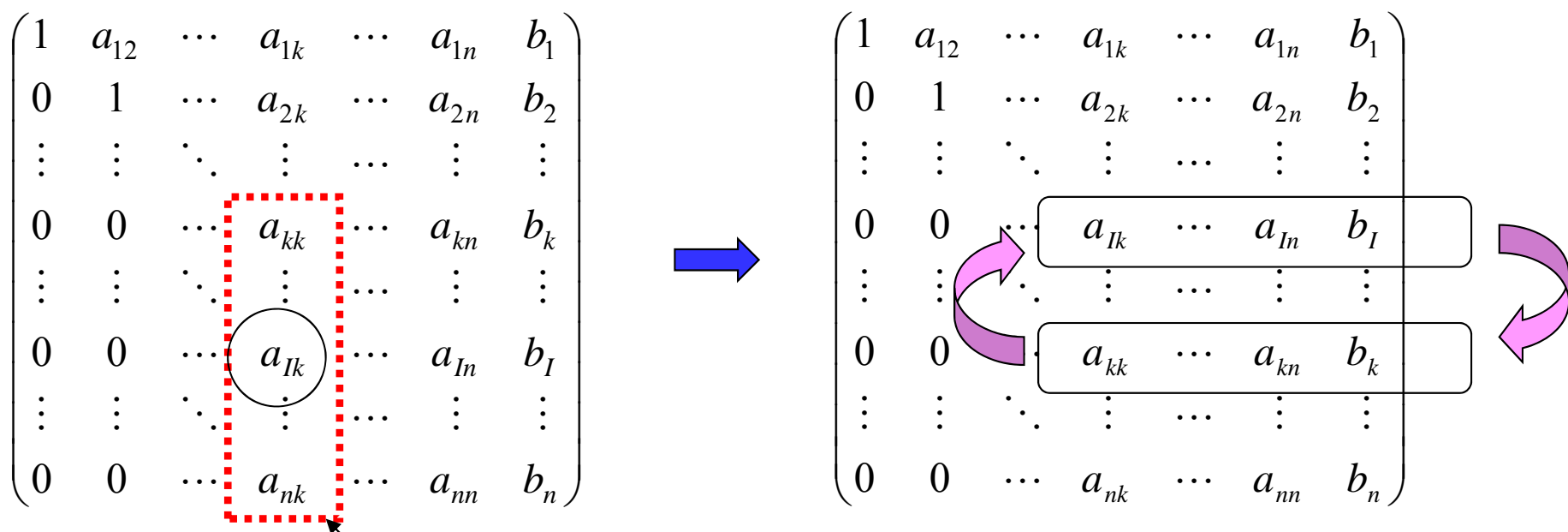
戦略

ピボットを大きく選びながらガウスの消去法を適用すれば誤差を抑え、精度の良い解を得ることができる。

部分ピボットティング

Partial Pivoting

ピボットティング (pivoting) : ピボット(軸) 選択すること

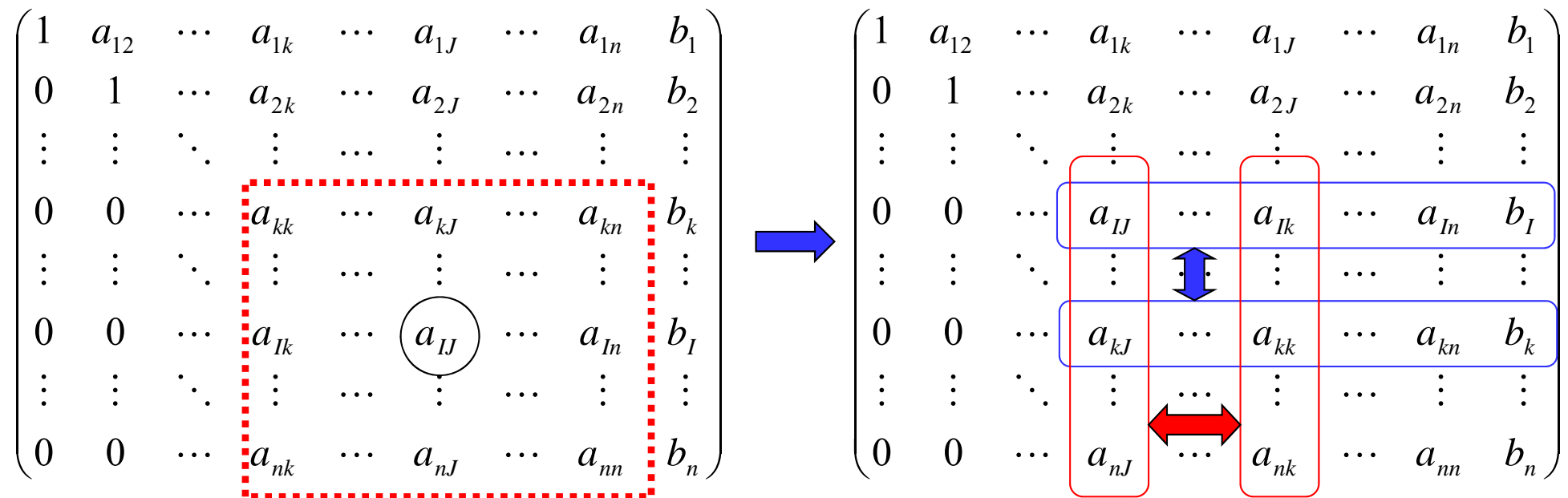


この中で、絶対値が最大の a_{ik} を持つ行 (第 I 行とする) を選び、 I 行と k 行を入れ替える.

入れ替えたあとは、普通に計算続行 (解は不変)

完全ピボットイング

Full Pivoting



この中で、絶対値が最大の a_{ik} を持つ行(第 I 行)と列(第 J 列)を選び、 I 行と k 行、 J 列と k 列とを入れ替える。

入れ替えたあとは、普通に計算続行(解は不変)

ただし、「列」の入れ替えを行なった場合は、どの列とどの列を入れ替えたかを記憶しておく必要がある(変数を入れ替えたことに相当するので)。

部分・完全ピボットティングによる ガウスの消去法

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & -2 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 8 \\ 6 \\ 9 \end{Bmatrix}$$

を部分・完全ピボットティングで解く

前進消去 拡張された行列表現

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 4 & -2 & 8 \\ 1 & 2 & 1 & 6 \\ 1 & 3 & 2 & 9 \\ \hline 1 & 2 & 3 & \end{array} \right)$$

各列に対応する番号を記述
(列交換しなければ不変)

前進消去スタート

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 8 \\ 1 & 2 & 1 & 6 \\ 1 & 3 & 2 & 9 \end{pmatrix}$$

1. 1行÷2

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 & 4 \\ 1 & 2 & 1 & 6 \\ 1 & 3 & 2 & 9 \end{pmatrix}$$

2. 2行-1行, 3行-1行

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 1 & 3 & 5 \end{pmatrix}$$

3. 2行↔3行(交換)

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 & 4 \\ 0 & 1 & 3 & 5 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \end{pmatrix}$$

例：部分ピボットティング (1/2)

3. 2行 \leftrightarrow 3行(交換)

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 & 4 \\ 0 & 1 & 3 & 5 \\ 0 & 0 & \boxed{2} & 2 \end{pmatrix}$$

4. 3行 $\div 2$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 & 4 \\ 0 & 1 & 3 & 5 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

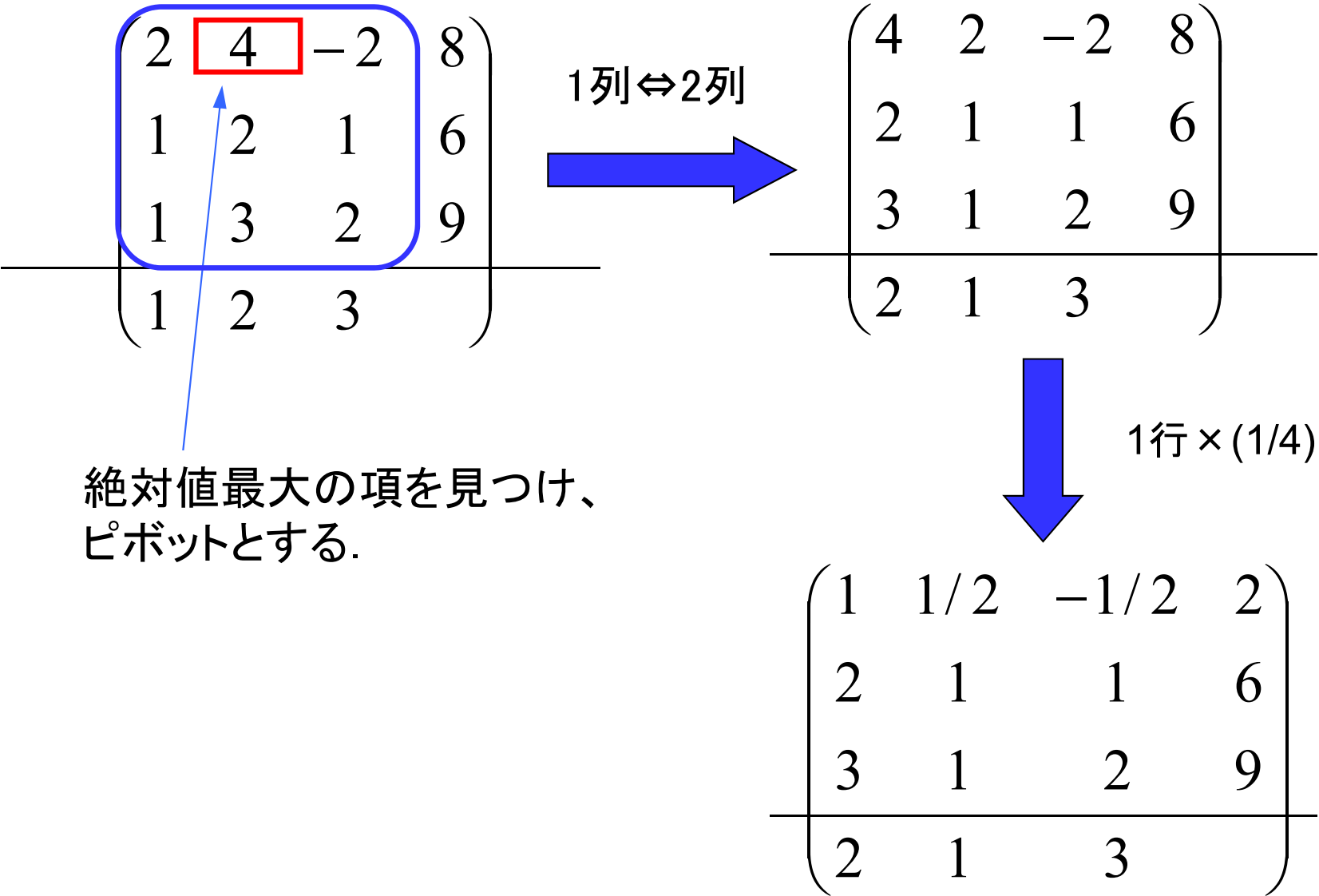
$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 4 \\ 5 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

例：部分ピボットティング (2/2)

後退代入

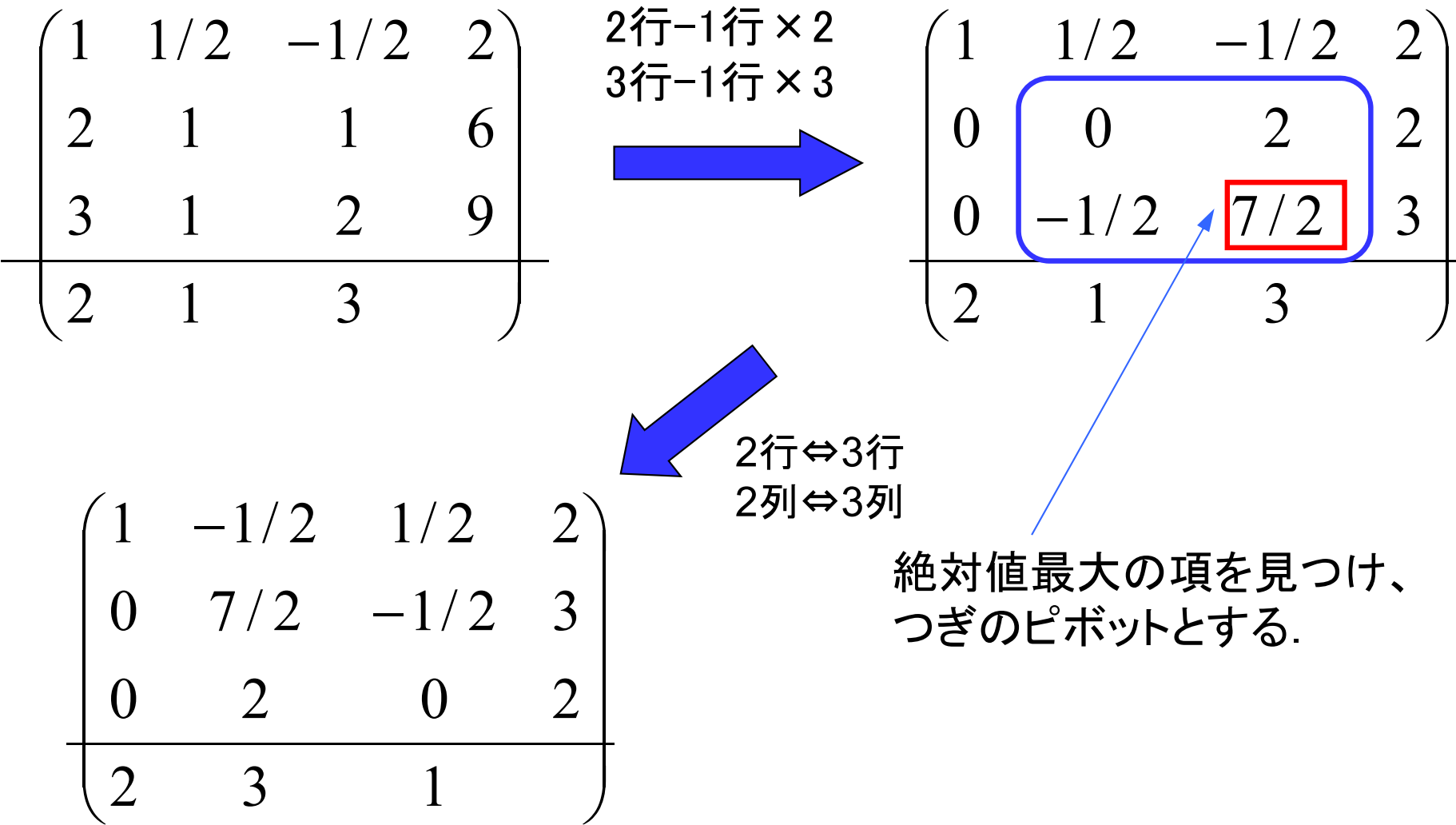
$$\begin{aligned} x_3 &= 1 \\ x_2 &= 5 - 3x_3 = 2 \\ x_1 &= 4 + x_2 - 2x_3 = 1 \end{aligned}$$

例：完全ピボットティング（1/5）



絶対値最大の項を見つけ、
ピボットとする.


例：完全ピボットティング（2/5）



例：完全ピボットティング（3/5）

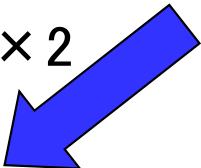
$$\begin{pmatrix} 1 & -1/2 & 1/2 & 2 \\ 0 & 7/2 & -1/2 & 3 \\ 0 & 2 & 0 & 2 \\ \hline 2 & 3 & 1 & \end{pmatrix}$$

2行 × (2/7)




$$\begin{pmatrix} 1 & -1/2 & 1/2 & 2 \\ 0 & 1 & -1/7 & 6/7 \\ 0 & 2 & 0 & 2 \\ \hline 2 & 3 & 1 & \end{pmatrix}$$

3行 - 2行 × 2



$$\begin{pmatrix} 1 & -1/2 & 1/2 & 2 \\ 0 & 1 & -1/7 & 6/7 \\ 0 & 0 & 2/7 & 2/7 \\ \hline 2 & 3 & 1 & \end{pmatrix}$$

3行 × (7/2)



$$\begin{pmatrix} 1 & -1/2 & 1/2 & 2 \\ 0 & 1 & -1/7 & 6/7 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ \hline 2 & 3 & 1 & \end{pmatrix}$$

例：完全ピボットティング（4/5）

ここまで、まとめると

$$\left(\begin{array}{cccc} 2 & 4 & -2 & 8 \\ 1 & 2 & 1 & 6 \\ 1 & 3 & 2 & 2 \\ \hline 1 & 2 & 3 & \end{array}\right)$$

前進消去



$$\left(\begin{array}{cccc} 1 & -1/2 & 1/2 & 2 \\ 0 & 1 & -1/7 & 6/7 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ \hline 2 & 3 & 1 & \end{array}\right)$$

前進消去終了

$$\left(\begin{array}{cccc} 1 & -1/2 & 1/2 & 2 \\ 0 & 1 & -1/7 & 6/7 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ \hline 2 & 3 & 1 & \end{array}\right)$$

後退代入



$$\begin{aligned} x'_3 &= 1 \\ x'_2 &= \frac{6}{7} + \frac{1}{7}x'_3 = 1 \\ x'_1 &= 2 + \frac{1}{2} \times x'_2 - \frac{1}{2} \times x'_3 = 2 \end{aligned}$$

例：完全ピボットティング (5/5)

列を入れ替えたことを考慮する.

$$x'_1 \Leftrightarrow x_2$$

$$x'_2 \Leftrightarrow x_3$$

$$x'_3 \Leftrightarrow x_1$$

ゆえに, もとの方程式の解は:

$$\begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = 2 \\ x_3 = 1 \end{cases}$$

プログラム例 (完全Pivoting) (1/3)

```
do i= 1, N
  JP(i)= i
enddo
```

JP(i) (i=1,2,...N)

JP(新列番号) = 旧列番号(変数番号)

```
do k= 1, N
  pivot= dabs(A(k, k))
  imax = k
  jmax = k
  do i= k, N
    do j= k, N
      if (dabs(A(i, j)).gt.pivot) then
        pivot= dabs(A(i, j))
        imax = i
        jmax = j
      endif
    enddo
  enddo
enddo
```

k行目の操作:

まず a_{kk} をpivotとし, 下図の赤点線の範囲から最大の成分 $a_{imax,jmax}$ (図中では $a_{I,J}$)を探索する

$$\begin{pmatrix} 1 & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1J} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k} & \cdots & a_{2J} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{kk} & \cdots & a_{kJ} & \cdots & a_{kn} & b_k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{Ik} & \cdots & a_{IJ} & \cdots & a_{In} & b_I \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nk} & \cdots & a_{nJ} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

プログラム例（完全Pivoting）（2/3）

```
if (jmax.ne.k) then
  iik= JP(k)
  JP(k) = JP(jmax)
  JP(jmax)= iik
endif
```

新JP(k) = 旧JP(jmax)
新JP(jmax)= 旧JP(k)

```
do i= 1, N
  pivot= A(i, k)
  A(i, k)= A(i, jmax)
  A(i, jmax)= pivot
enddo
```

k列とjmax列(J列)を入れ替える

```
do j= k, N
  pivot= A(k, j)
  A(k, j)= A(imax, j)
  A(imax, j)= pivot
enddo
```

k行とimax行(I行)を入れ替える

```
pivot = B(k)
B(k) = B(imax)
B(imax)= pivot
```

(右辺の)k行とimax行(I行)を入れ替える

$$\begin{pmatrix} 1 & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1J} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k} & \cdots & a_{2J} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{kk} & \cdots & a_{kJ} & \cdots & a_{kn} & b_k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{Ik} & \cdots & a_{IJ} & \cdots & a_{In} & b_I \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nk} & \cdots & a_{nJ} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

プログラム例 (完全Pivoting) (3/3)

```

RAkk= 1. d0/A(k, k)
do j= k, N
  A(k, j)= A(k, j) * RAkk
enddo
B(k)= B(k) * Rakk

do i= k+1, N
  Aik= A(i, k)
  do j= k, N
    A(i, j)= A(i, j) - Aik*A(k, j)
  enddo
  B(i)= B(i) - Aik*B(k)
enddo

```

新しい番号を使用して, 下図の赤点線の範囲で前進消去

$$\begin{pmatrix}
 1 & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1J} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\
 0 & 1 & \cdots & a_{2k} & \cdots & a_{2J} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & \cdots & a_{kk} & \cdots & a_{kJ} & \cdots & a_{kn} & b_k \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & \cdots & a_{Ik} & \cdots & a_{IJ} & \cdots & a_{In} & b_I \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\
 0 & 0 & \cdots & a_{nk} & \cdots & a_{nJ} & \cdots & a_{nn} & b_n
 \end{pmatrix}$$

The diagram illustrates the range of the matrix for forward elimination. A red dashed rectangle encloses the submatrix starting from row k and column k to row n and column n . The element a_{IJ} is circled, indicating it is the pivot element for the next step.

- ベクトル, 行列の基本的性質(復習)
- 線形方程式, 連立一次方程式の解法
- ガウスの消去法
- ピボットの選択
- **LU分解法**

連立一次方程式の行列表現 より一般的な表現方法


n元の連立一次方程式の一般形

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2$$
$$\vdots$$

$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n$$

行列表現


$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

$\mathbf{A} \qquad \mathbf{x} \qquad \mathbf{b}$

LU分解による解法

LU分解(エル・ユーブンカイ)

\mathbf{A} が $n \times n$ 行列のとき, \mathbf{A} を次式のように表すことを
(あるいは, そのような \mathbf{L} と \mathbf{U} そのものを) \mathbf{A} のLU分解という.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}$$

\mathbf{L} : Lower triangular part of matrix \mathbf{A} (下三角成分)

\mathbf{U} : Upper triangular part of matrix \mathbf{A} (上三角成分)

LU分解による連立一次方程式解法

1 $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ となるAのLU分解LとUを求める

2 $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ の解 y を求める(前進代入)

3 $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$ の解 x を求める(後退代入)

この x が $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ の解となる

$$\therefore \mathbf{Ax} = \mathbf{LUx} = \mathbf{Ly} = \mathbf{b}$$

$\mathbf{Ly}=\mathbf{b}$ を解く

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b} \quad \longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$



$$\begin{aligned} y_1 &= b_1 \\ l_{21}y_1 + y_2 &= b_2 \\ \vdots \\ l_{n1}y_1 + l_{n2}y_2 + \cdots + y_n &= b_n \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} y_1 &= b_1 \\ y_2 &= b_2 - l_{21}y_1 \\ \vdots \\ y_n &= b_n - l_{n1}y_1 - l_{n2}y_2 = b_n - \sum_{i=1}^{n-1} l_{ni}y_i \end{aligned}$$

前進代入 (Forward Substitution)

Ux=yを解く

$$\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{y} \quad \longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} u_{nn}x_n &= y_n \\ u_{n-1,n-1}x_{n-1} + u_{n-1,n}x_n &= y_{n-1} \\ \vdots \\ u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n &= y_1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_n &= y_n / u_{nn} \\ x_{n-1} &= (y_{n-1} - u_{n-1,n}x_n) / u_{n-1,n-1} \\ \vdots \\ x_1 &= \left(y_1 - \sum_{i=2}^n u_{1i}x_i \right) / u_{11} \end{aligned}$$

後退代入 (Backward Substitution)

LU分解法のメリット

一回の演算量はガウスの消去法と同じ.

メリットは

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

を、いろいろな \mathbf{b} に対して解かなければならない場合:
一度LU分解 $\mathbf{A}=\mathbf{LU}$ を求めておけば、
 \mathbf{b} が変わっても、 $\mathbf{Ly}=\mathbf{b}$, $\mathbf{Ux}=\mathbf{y}$ を解くだけでOK.

ガウスの消去法では、 \mathbf{b} が変わるたびに
最初からやり直し.

LU分解を計算する

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

$a_{ij} = \{L \text{ の } i \text{ 行目}\} \times \{U \text{ の } j \text{ 列目}\}$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2j} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3j} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & a_{i3} & \cdots & a_{ij} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \cdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nj} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & 0 \\ l_{i1} & l_{i2} & l_{i3} & \cdots & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1j} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2j} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3j} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{jj} & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

LU分解の求め方 (1/4)

①

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

=

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

a_{1j} : [L]の第1行と, [U]の第 j 列の内積 \Rightarrow [U]の第1行のみ残る

①

$\Rightarrow a_{11} = u_{11}, a_{12} = u_{12}, \cdots, a_{1n} = u_{1n} \Rightarrow u_{11}, u_{12}, \cdots, u_{1n}$

LU分解の求め方 (2/4)

①

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

②

a_{i1} : [L]の第 i 行と, [U]の第1列の内積

- ① ➡ $a_{11} = u_{11}, a_{12} = u_{12}, \cdots, a_{1n} = u_{1n} \Rightarrow u_{11}, u_{12}, \cdots, u_{1n}$
- ② ➡ $a_{21} = l_{21}u_{11}, a_{31} = l_{31}u_{11}, \cdots, a_{n1} = l_{n1}u_{11} \Rightarrow l_{21}, l_{31}, \cdots, l_{n1}$

LU分解の求め方 (3/4)

①

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

②

a_{2j} : [L]の第 2行と, [U]の第 j 列の内積

- ① $\Rightarrow a_{11} = u_{11}, a_{12} = u_{12}, \cdots, a_{1n} = u_{1n} \Rightarrow u_{11}, u_{12}, \cdots, u_{1n}$
- ② $\Rightarrow a_{21} = l_{21}u_{11}, a_{31} = l_{31}u_{11}, \cdots, a_{n1} = l_{n1}u_{11} \Rightarrow l_{21}, l_{31}, \cdots, l_{n1}$
- ③ $\Rightarrow a_{22} = l_{21}u_{12} + u_{22}, \cdots, a_{2n} = l_{21}u_{1n} + u_{2n} \Rightarrow u_{22}, u_{23}, \cdots, u_{2n}$

LU分解の求め方 (4/4)

①

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

②

④

③

a_{i2} : [L]の第 i 行と, [U]の第2列の内積

① $\Rightarrow a_{11} = u_{11}, a_{12} = u_{12}, \cdots, a_{1n} = u_{1n} \Rightarrow u_{11}, u_{12}, \cdots, u_{1n}$

② $\Rightarrow a_{21} = l_{21}u_{11}, a_{31} = l_{31}u_{11}, \cdots, a_{n1} = l_{n1}u_{11} \Rightarrow l_{21}, l_{31}, \cdots, l_{n1}$

③ $\Rightarrow a_{22} = l_{21}u_{12} + u_{22}, \cdots, a_{2n} = l_{21}u_{1n} + u_{2n} \Rightarrow u_{22}, u_{23}, \cdots, u_{2n}$

④ $\Rightarrow a_{32} = l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22}, \cdots \Rightarrow l_{32}, l_{42}, \cdots, l_{n2}$

数值例 (1/2)

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 6 & 7 & 10 \\ 2 & 2 & 8 & 7 \\ 0 & -4 & 7 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{pmatrix}$$

第1行 $\Rightarrow 1 = u_{11}, 2 = u_{12}, 3 = u_{13}, 4 = u_{14}$

第1列 $\Rightarrow 2 = l_{21}u_{11} \Rightarrow l_{21} = 2/u_{11} = 2, \quad 2 = l_{31}u_{11} \Rightarrow l_{31} = 2/u_{11} = 2$

$$0 = l_{41}u_{11} \Rightarrow l_{41} = 0/u_{11} = 0$$

第2行 $\Rightarrow 6 = l_{21}u_{12} + u_{22} \Rightarrow u_{22} = 2, \quad 7 = l_{21}u_{13} + u_{23} \Rightarrow u_{23} = 1$

$$10 = l_{21}u_{14} + u_{24} \Rightarrow u_{24} = 2$$

第2列 $\Rightarrow 2 = l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22} \Rightarrow l_{32} = -1, \quad -4 = l_{41}u_{12} + l_{42}u_{22} \Rightarrow l_{42} = -2$

数値例 (2/3)

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 6 & 7 & 10 \\ 2 & 2 & 8 & 7 \\ 0 & -4 & 7 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{pmatrix}$$

第3行 \Rightarrow $8 = l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + u_{33} \Rightarrow u_{33} = 3,$
 $7 = l_{31}u_{14} + l_{32}u_{24} + u_{34} \Rightarrow u_{34} = 1$

第3列 \Rightarrow $7 = l_{41}u_{13} + l_{42}u_{23} + l_{43}u_{33} \Rightarrow l_{43} = 3$

第4行(第4列) \Rightarrow $1 = l_{41}u_{14} + l_{42}u_{24} + l_{43}u_{34} + u_{44} \Rightarrow u_{44} = 2$

1行, 1列, 2行, 2列、・・・の順に求める式を作っていく.

数值例 (3/3)

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 6 & 7 & 10 \\ 2 & 2 & 8 & 7 \\ 0 & -4 & 7 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$



L



U

プログラム例 (LU分解) (1/3)

```

do k= 1, N
  do j= k, N
    s= 0.d0
    if (k.ne.1) then
      do ll= 1, k-1
        s= s + A(k,ll)*A(ll,j)
      enddo
    endif
    A(k,j)= A(k,j) - s
  enddo

  if (k.ne.N) then
    do i= k+1, N
      s= 0.d0
      if (k.ne.1) then
        do ll= 1, k-1
          s= s + A(i,ll)*A(ll,k)
        enddo
      endif
      A(i,k)= (A(i,k)-s)/A(k,k)
    enddo
  endif
enddo

```

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

A(i,j):

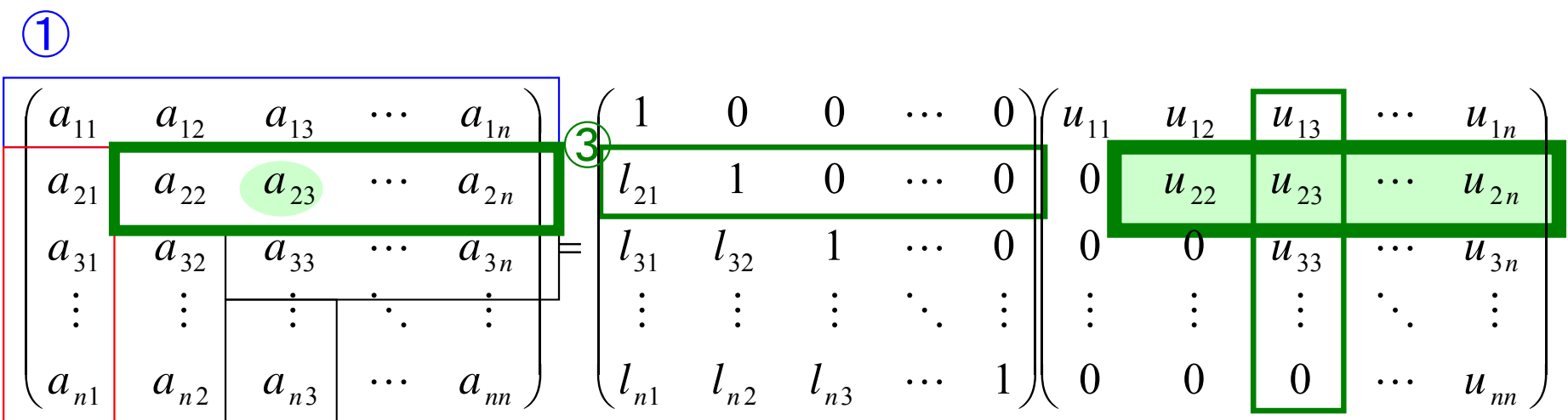
Aの a_{ij} 成分 \Rightarrow L(対角成分除く)+U

プログラム例 (LU分解) (2/3)

```
do k= 1, N
  do j= k, N
    s= 0.d0
    if (k.ne.1) then
      do ll= 1, k-1
        s= s + A(k,ll)*A(ll,j)
      enddo
    endif
    A(k,j)= A(k,j) - s
  enddo
```

$$a_{kj} = \left[\sum_{l=1}^{k-1} \left(l_{kl} u_{lj} \right) \right] + u_{kj}$$

a_{kj} : Lのk行目,
Uのj列目の内積



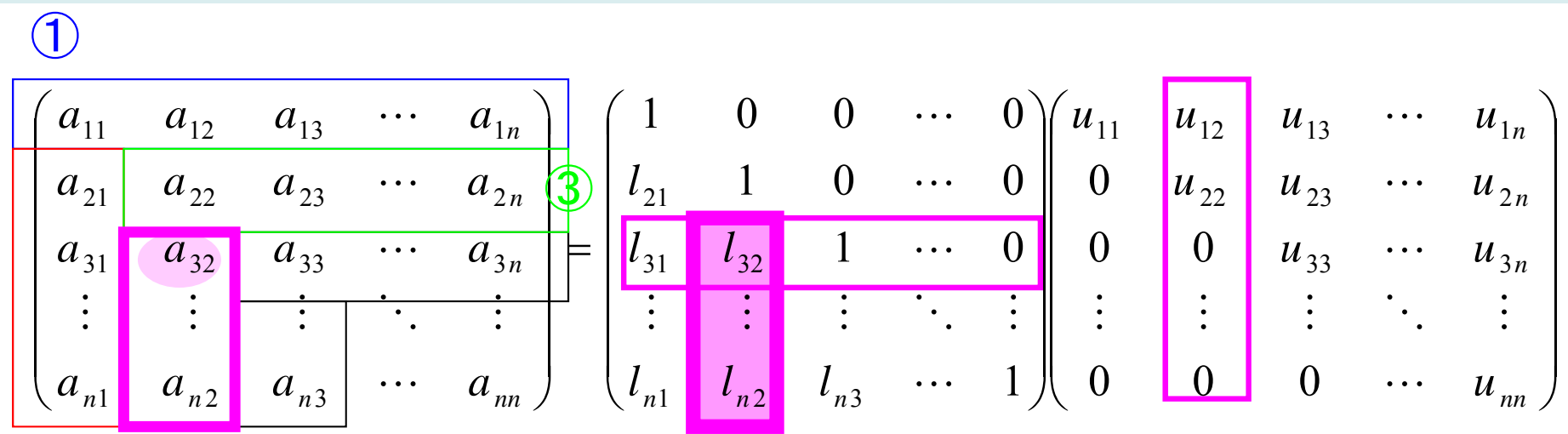
③ $\Rightarrow a_{22} = l_{21} u_{12} + u_{22}, \dots, a_{2n} = l_{21} u_{1n} + u_{2n} \Rightarrow u_{22}, u_{23}, \dots, u_{2n}$

プログラム例 (LU分解) (3/3)

```
if (k.ne.N) then
  do i= k+1, N
    s= 0.d0
    if (k.ne.1) then
      do ll= 1, k-1
        s= s + A(i,ll)*A(ll,k)
      enddo
    endif
    A(i,k)= (A(i,k)-s)/A(k,k)
  enddo
endif
enddo
```

$$a_{ik} = \left[\sum_{l=1}^{k-1} (l_{il}u_{lk}) \right] + l_{ik}u_{kk}$$

a_{ik} : Lのi行目,
Uのk列目の内積



④ ➡ $a_{32} = l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22}, \dots$

$\Rightarrow l_{32}, l_{42}, \dots, l_{n2}$

プログラム例（前進代入）

```

do i= 1, N
  Y(i)= B(i)
enddo

do i= 2, N
  s= 0.d0
  do ll= 1, i-1
    s= s + A(i,ll)*Y(ll)
  enddo
  Y(i)= Y(i) - s
enddo

```

$\mathbf{L} \mathbf{y} = \mathbf{b}$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$\mathbf{B}(\mathbf{i})$:

\mathbf{b} の各成分 \Rightarrow 解 \mathbf{x} の各成分

$\mathbf{B}(\mathbf{i})$:

\mathbf{y} の各成分(実は不要)

$$\begin{aligned} y_1 &= b_1 \\ l_{21} y_1 + y_2 &= b_2 \\ \vdots & \\ l_{n1} y_1 + l_{n2} y_2 + \cdots + y_n &= b_n \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} y_1 &= b_1 \\ y_2 &= b_2 - l_{21} y_1 \\ \vdots & \\ y_n &= b_n - l_{n1} y_1 - l_{n2} y_2 = b_n - \sum_{i=1}^{n-1} l_{ni} y_i \end{aligned}$$

プログラム例（後退代入）

$$\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{y}$$

```

B(N)= Y(N)/A(N,N)
do i= N-1, 1, -1
  s= 0.d0
  do ll= i+1, N
    s= s + A(i,ll)*B(ll)
  enddo
  B(i)= (Y(i)-s)/A(i,i)
enddo
    
```

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} u_{nn}x_n &= y_n \\ u_{n-1,n-1}x_{n-1} + u_{n-1,n}x_n &= y_{n-1} \\ &\vdots \\ u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n &= y_1 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} x_n &= y_n / u_{nn} \\ x_{n-1} &= (y_{n-1} - u_{n-1,n}x_n) / u_{n-1,n-1} \\ &\vdots \\ x_1 &= \left(y_1 - \sum_{j=2}^n u_{1j}x_j \right) / u_{11} \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & -2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 5 \\ 1 \\ 7 \end{Bmatrix}$$

**ガウスの
消去法**

$$\begin{pmatrix} 1 & 3/2 & 1/2 \\ 0 & 1 & 3/2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 5/2 \\ 2 \\ 2 \end{Bmatrix} \quad (x_1, x_2, x_3) = (3, -1, 2)$$

LU分解

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & -2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1/2 & -1/4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 0 & -2 & -3 \\ 0 & 0 & 7/4 \end{pmatrix}$$

線形計算の数理 (岩波数学叢書)

杉原 正顯 (著)
室田 一雄 (著)



本書では、連立1次方程式と固有値問題を中心に、線形計算の数理的基礎を解説。理論の全体像を俯瞰できるように標準的な話題を見通し良い形で記述した。同時に、高度な内容でも数理的に興味深い理論や発展性のあるテーマは最新結果も取り上げて詳説。考え方の筋道がわかるよう丁寧に説明して、研究者、技術者の双方に役立つ内容とした。