数値解析

第5回 連立方程式の直接解法2 ～ LU分解 ～

本日の目標

- LU分解を理解し、連立方程式を解く

LU分解 – 三角行列

- 上三角行列

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

- 下三角行列

$$
L = \begin{pmatrix}
l_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
l_{21} & l_{22} & 0 & \cdots & 0 \\
l_{31} & l_{32} & l_{33} & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn}
\end{pmatrix}
$$

LU分解 – 置換行列

- 行列の2つの行を交換する

$$
P = \begin{pmatrix}
1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \vdots & 0 & 0 \\
0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & \vdots & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1
\end{pmatrix}
$$

交換したい行を入れ替える

対角要素は基本的に1

例: 4x4の置換行列

- 1行目と3行目を入れ替える.

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 7 & 1 \\ 1 & -1 & 5 & 4 \\ 3 & 9 & 1 & 5 \\ -3 & 3 & 1 & 5 \end{pmatrix},\ P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$PA = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 7 & 1 \\ 1 & -1 & 5 & 4 \\ 3 & 9 & 1 & 5 \\ -3 & 3 & 1 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 9 & 1 & 5 \\ 1 & -1 & 5 & 4 \\ 2 & 3 & 7 & 1 \\ -3 & 3 & 1 & 5 \end{pmatrix}$$

ガウスの消去法 の 1ステップ

- 置換行列 P による行の交換
- ピボットを基準とした係数消去(前進消去)

$$G = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & \vdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \alpha_{k+1,k} & 1 & \vdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_{n-1,k} & \alpha_{n-1,k+1} & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_{n,k} & \alpha_{n,k+1} & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

例

- $A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 7 & 1 \\ 1 & -1 & 5 & 4 \\ 3 & 9 & 1 & 5 \\ -3 & 3 & 1 & 5 \end{pmatrix}$, $P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, $G = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1/3 & 1 & 0 & 0 \\ -2/3 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

$$GPA = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1/3 & 1 & 0 & 0 \\ -2/3 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 & 7 & 1 \\ 1 & -1 & 5 & 4 \\ 3 & 9 & 1 & 5 \\ -3 & 3 & 1 & 5 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1/3 & 1 & 0 & 0 \\ -2/3 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 9 & 1 & 5 \\ 1 & -1 & 5 & 4 \\ 2 & 3 & 7 & 1 \\ -3 & 3 & 1 & 5 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 3 & 9 & 1 & 5 \\ 0 & -4 & 5-1/3 & 4-5/3 \\ 0 & -3 & 7-2/3 & 1-2/3 \\ 0 & 12 & 2 & 10 \end{pmatrix}$$

LU分解 (LUP分解)

- $PA = LU$の形に分解すること.

- 前進消去1ステップがG_1P_1Aで記述できる.
- 2ステップなら$G_2P_2G_1P_1A$と書ける.
- $G_1' = P_2G_1P_2^{-1}$とおく$\rightarrow G_2P_2G_1P_2^{-1}P_2P_1A \rightarrow G_2G_1'P_2P_1A$

- 前進消去が終わるとAは上三角行列Uになっている.
- $G_2G_1'P_2P_1A = U \rightarrow \underbrace{P_2P_1}_{\mathrm{P}}A = \underbrace{(G_2G_1')^{-1}}_{\mathrm{L}}U$

LU分解を利用した解法

- $PA = LU, Ax = b$

$$LUx = Pb$$

$$Ux = y$$

$$Ly = Pb$$

三角行列の場合 解xやyは
単純な代入演算のみ

$$\begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_3 \\ b_2 \\ b_1 \\ b_4 \end{pmatrix} \downarrow$$

上から解けばよい.

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} \uparrow$$

下から解けばよい.

LU分解の求め方

- はじめに

$$PA = LU$$

$$P\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

nn個の要素

nn(行列要素数)
+ n(対角要素重複)個の未知数

未知数の方が多いので，解は一意に求まらない(n個の任意設定)

LU分解の求め方

- Lの対角要素を1と置く

$a_{11} = u_{11}, \ a_{12} = u_{12}, \ \ldots$ (1行目は変化しない)

$$P\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \boxed{a_{22}} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

$$a_{22} = l_{21} \times u_{12} + u_{22}$$

$$a_{22} - l_{21} \times a_{12} = u_{22}$$

➡ ガウス消去法の前進消去と同じ

$$u_{22} = a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{12}$$

LU分解例

- $$\begin{pmatrix} -4 & 2 & 1 \\ 2 & -1 & 5 \\ 8 & 2 & -1 \end{pmatrix} \qquad P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

1. ピボット選択して行交換

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 8 & 2 & -1 \\ 2 & -1 & 5 \\ -4 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

2. 前進消去(1ステップ)

$$\begin{pmatrix} 8 & 2 & -1 \\ 0 & -1.5 & 5.25 \\ 0 & 3 & 0.5 \end{pmatrix} \qquad L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.25 & 1 & 0 \\ -0.5 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

LU分解例

$$P=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}8&2&-1\\0&-1.5&5.25\\0&3&0.5\end{pmatrix}\quad L=\begin{pmatrix}1&0&0\\0.25&1&0\\-0.5&0&1\end{pmatrix}$$

3. 再度ピボット選択して行交換

$$P=\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}\quad\begin{pmatrix}8&2&-1\\0&3&0.5\\0&-1.5&5.25\end{pmatrix}\quad L=\begin{pmatrix}1&0&0\\-0.5&1&0\\0.25&0&1\end{pmatrix}$$

計算が終わったところを入れ替える.

4. 前進消去(1ステップ)

$$\begin{pmatrix}8&2&-1\\0&3&0.5\\0&0&5.5\end{pmatrix}=U\quad L=\begin{pmatrix}1&0&0\\-0.5&1&0\\0.25&-0.5&1\end{pmatrix}$$

LU分解による連立方程式解法

- $$\begin{pmatrix} -4 & 2 & 1 \\ 2 & -1 & 5 \\ 8 & 2 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 5 \\ 23 \end{pmatrix}$$

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0.5 & 1 & 0 \\ 0.25 & -0.5 & 1 \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} 8 & 2 & -1 \\ 0 & 3 & 0.5 \\ 0 & 0 & 5.5 \end{pmatrix}$$

$$Ly = Pb$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0.5 & 1 & 0 \\ 0.25 & -0.5 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 5 \\ 23 \end{pmatrix}$$

(1) $y_1 = 23$

(2) $-0.5y_1 + y_2 = 1$

$y_2 = 12.5$

(3) $0.25y_1 - 0.5y_2 + y_3 = 5$

$y_3 = -5.75 + 6.25 + 5 = 5.5$

$$Ux = y$$

LU分解による連立方程式解法

$Ux = y$

$$\begin{pmatrix} 8 & 2 & -1 \\ 0 & 3 & 0.5 \\ 0 & 0 & 5.5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 23 \\ 12.5 \\ 5.5 \end{pmatrix}$$

(1) $5.5x_3 = 5.5$

$x_3 = 1.0$

(2) $3x_2 + 0.5x_3 = 12.5$

$3x_2 = 12.5 - 0.5$

$x_2 = 4.0$

(3) $8x_1 + 2x_2 - x_3 = 23$

$8x_1 = 23 - 8 + 1$

$x_1 = 2.0$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.0 \\ 4.0 \\ 1.0 \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} 8 & 2 & -1 \\ 0 & 3 & 0.5 \\ 0 & 0 & 5.5 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 23 \\ 12.5 \\ 5.5 \end{pmatrix}$$

演習課題5

- k5-input1.csvから入力される係数行列Aと，k5-input2.csvから入力されるベクトルyに関して,以下の連立一次方程式をLU分解を用いて解け。LU分解の結果であるL，UおよびP行列も出力すること。

$$\mathrm{Ax} = \mathrm{y}$$

例

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 5 \\ -4 & 2 & 1 \\ 8 & 2 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 15 \\ 3 \\ 21 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 5 \\ -4 & 2 & 1 \\ 8 & 2 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 32 \\ -9 \\ 17 \end{pmatrix}$$