計算機数学II (2018)
7: 連立1次方程式

照井 章（筑波大学 数理物質系 数学域）
Akira Terui (Institute of Mathematics, University of Tsukuba)

第7章の内容

- 連立1次方程式の数値解法
  - 直接法
    - ガウスの消去法
    - *LU*分解
  - 反復法
    - ヤコビ法
    - ガウス・ザイデル法
    - SOR法

7-1 連立1次方程式

連立1次方程式

$$
\left\{
\begin{array}{ccccccccc}
a_{1,1}x_1 & + & a_{1,2}x_2 & + & \cdots & + & a_{1,N}x_N & = & y_1 \\
a_{1,2}x_1 & + & a_{2,2}x_2 & + & \cdots & + & a_{2,N}x_N & = & y_2 \\
\vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\
a_{M,1}x_1 & + & a_{M,2}x_2 & + & \cdots & + & a_{M,N}x_N & = & y_M
\end{array}
\right.
\tag{7.3}
$$

- N: 未知変数 x_i の個数
- M: 方程式の個数
- $a_{i,j}$ および y_i はすべて実数で与えられている
- ここでは N=M の場合のみを考える

連立1次方程式

行列・ベクトル積で表すと

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,N} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{N,1} & a_{N,2} & \cdots & a_{N,N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \quad (7.5)$$

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$$

$A \in \mathrm{R}^{N \times N}$: 係数行列 (coefficient matrix)

数値計算の必要性

- 連立1次方程式の解法の研究は奥が深い
- 計算量の問題
  - 現実の問題では N=10^6 程度の大規模な問題もざらにある
- 与えられた問題により、係数行列が特殊な形になることが多い（対称行列、3重対角行列、etc.）
  - それらの行列の形に応じた解法を選ぶ

一意解の存在

- 今回は、連立1次方程式が一意的な解をもつ (rank(A)=N) と仮定する

7-2 ガウスの消去法

ガウスの消去法の一般形：前進消去

連立1次方程式の拡大係数行列:

$$
\begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,N} & y_1 \\
a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,N} & y_2 \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
a_{N,1} & a_{N,2} & \cdots & a_{N,N} & y_N
\end{pmatrix}
&
\begin{array}{l}
(1) \\ (2) \\ \\ (N)
\end{array}
\end{array}
$$

ガウスの消去法の一般形：前進消去

第1列を消去：

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,N} & y'_1 \\ 0 & a'_{2,2} & \cdots & a'_{2,N} & y'_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & a'_{N,2} & \cdots & a'_{N,N} & y'_N \end{pmatrix}$$

(1)

(2)' ←(2) - ($a_{2,1}/a_{1,1}$)x(1)

(N)' ←(N)- ($a_{N,1}/a_{1,1}$)x(1)

ガウスの消去法の一般形：前進消去

第2列を消去：

$$
\begin{pmatrix}
a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \cdots & a_{1,N} & y'_1 \\
0 & a'_{2,2} & a'_{2,3} & \cdots & a'_{2,N} & y'_2 \\
0 & 0 & a''_{3,3} & \cdots & a''_{3,N} & y''_3 \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & a''_{N,3} & \cdots & a''_{N,N} & y''_N
\end{pmatrix}
\begin{array}{l}
(1) \\
(2)' \\
(3)'' \leftarrow (3)' - (a'_{3,2}/a'_{2,2}) \times (2)' \\
\\
(N)'' \leftarrow (N)' - (a'_{N,2}/a'_{2,2}) \times (2)'
\end{array}
$$

以下、同様の消去を繰り返す

ガウスの消去法の一般形：前進消去

最終的に次の形を得る:

$$\begin{pmatrix} \bar{a}_{1,1} & \bar{a}_{1,2} & \bar{a}_{1,3} & \cdots & \bar{a}_{1,N} & \bar{y}_1 \\ 0 & \bar{a}_{2,2} & \bar{a}_{2,3} & \cdots & \bar{a}_{2,N} & \bar{y}_2 \\ 0 & 0 & \bar{a}_{3,3} & \cdots & \bar{a}_{3,N} & \bar{y}_3 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \bar{a}_{N,N} & \bar{y}_N \end{pmatrix}$$

☞ 前進消去 (forward elimination)

ガウスの消去法の一般形：後退代入

$$
\begin{pmatrix}
\bar{a}_{1,1} & \bar{a}_{1,2} & \bar{a}_{1,3} & \cdots & \bar{a}_{1,N} & \bar{y}_1 \\
0 & \bar{a}_{2,2} & \bar{a}_{2,3} & \cdots & \bar{a}_{2,N} & \bar{y}_2 \\
0 & 0 & \bar{a}_{3,3} & \cdots & \bar{a}_{3,N} & \bar{y}_3 \\
\vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \cdots & \bar{a}_{N,N} & \bar{y}_N
\end{pmatrix}
$$

より

$$
x_i = \left(\bar{y}_i - \sum_{k=i+1}^{N} \bar{a}_{i,k} x_k \right) \Bigg/ \bar{a}_{i,i} \qquad (i = N, \ldots, 1)
$$

☞ 後退代入 (backward substitution)

ガウスの消去法の一般形:前進消去のアルゴリズム

1. for $k \in [1..\ N\text{-}1]$ do
   a. for $i \in [k+1..\ N]$ do
      i. $\alpha \leftarrow a_{i,k} / a_{k,k}$
      ii. for $j \in [k+1..\ N]$ do
         1. $a_{i,j} \leftarrow a_{i,j} - \alpha\ a_{k,j}$
      iii. $y_i \leftarrow y_i - \alpha\ y_k$

ガウスの消去法の一般形：後退代入のアルゴリズム

1. $x_N \leftarrow y_N / a_{N,N}$
2. for $i \in [N\text{-}1..1]$ do
   i. $x_i \leftarrow y_i$
   ii. for $j \in [i+1..N]$ do
      1. $x_i \leftarrow x_i - a_{i,j} x_j$
   iii. $x_i \leftarrow x_i / a_{i,i}$

ガウスの消去法の時間計算量

- 前進消去の計算量
  - 乗除算:

$$\sum_{k=1}^{N-1}(N-k)(N-k+2) = \frac{N^3}{3} + \frac{N^2}{2} - \frac{5N}{6} = O\left(\frac{N^3}{3}\right)$$

  - 加減算: O(N^3/2)

ガウスの消去法の時間計算量

- 後退代入の計算量
    - 乗除算、加減算それぞれ $O(N^2/2)$
- 合計の計算量：$O(N^3/2)$

ガウスの消去法の空間計算量

- 行列 A のすべての成分 : N^2 個
- 変数の個数
  - x_i, y_i : 共用すると計 N 個
- 合計の空間計算量 : $O(N^2)$

アルゴリズムの問題点（1）

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 2 & 2 & -1 & 3 \\ -1 & 3 & 1 & 8 \end{pmatrix} \qquad (7.18)'$$

の第1列を消去すると

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 0 & -3 & 9 \\ 0 & 4 & 2 & 14 \end{pmatrix} \qquad (7.19)'$$

となり、第2行を用いた第2列の消去が不可能

アルゴリズムの問題点 (2)

$$\begin{pmatrix} 0.0003 & 1 & 1 & 5 \\ 2 & -1 & 2 & 6 \\ -1 & 3 & 1 & 8 \end{pmatrix} \qquad (7.20)'$$

正解は

$$x_1 = 10000/9979 = 1.0021\ldots$$

$$x_2 = 19970/9979 = 2.0012\ldots$$

$$x_3 = 29922/9979 = 2.9984\ldots$$

アルゴリズムの問題点 (2)

ガウスの消去法で、有効数字5桁で解く

第1列を消去すると

$$\begin{pmatrix} 0.0003 & 1 & 1 & 5 \\ 0 & -6667.7 & -6664.7 & -33328 \\ 0 & 3336.3 & 3334.3 & 16675 \end{pmatrix} \begin{array}{l} (1) \\ (2)' \leftarrow (2) - 6666.7\mathrm{x}(1) \\ (3)' \leftarrow (3) + 3333.3\mathrm{x}(1) \end{array}$$

アルゴリズムの問題点 (2)

第2列を消去すると

$$\begin{array}{cl} \begin{pmatrix} 0.0003 & 1 & 1 & 5 \\ 0 & -6667.7 & -6664.7 & -33328 \\ 0 & 0 & -0.50000 & -1.00000 \end{pmatrix} & \begin{array}{l} (1) \\ (2)' \\ (3)'' \leftarrow (3)' + 0.50037 \times (2)' \end{array} \end{array}$$

後退代入の結果は

$$x_1 = 2.0000,\ x_2 = 2.9994,\ x_3 = 2.0000$$

(正解：$x_1 = 1.0021\ldots,\ x_2 = 2.0012\ldots,\ x_3 = 2.9984\ldots$)

アルゴリズムの問題点 (2)

第1列の消去の際

$$\begin{pmatrix} 0.0003 & 1 & 1 & 5 \\ 0 & -6667.7 & -6664.7 & -33328 \\ 0 & 3336.3 & 3334.3 & 16675 \end{pmatrix} \begin{array}{l} (1) \\ (2)' \leftarrow (2) - 6666.7\text{x}(1) \\ (3)' \leftarrow (3) + 3333.3\text{x}(1) \end{array}$$

$|a_{1,1}| << 1$ より,

(2)' ←(2) - 6666.7 × (1), (3)' ←(3) +3333.3 × (1)

もともとの第2行、第3行の値が有効数字の下位桁に押し込められてしまう→誤差の原因

ピボット（枢軸）選択
（ピボッティング Pivoting）

第 k 列の消去の前に、第 k 列の成分 $a_{k,k}, \ldots, a_{k,n}$ の中で絶対値が最も大きな成分を選んで消去を行う

アルゴリズムの問題点(1)

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 2 & 2 & -1 & 3 \\ -1 & 3 & 1 & 8 \end{pmatrix} \qquad (7.18)'$$

の第1列を消去すると

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 0 & -3 & 9 \\ 0 & 4 & 2 & 14 \end{pmatrix} \qquad (7.19)'$$

となり、第2行を用いた第2列の消去が不可能

アルゴリズムの問題点 (1): ピボット選択による改善

第2列の消去前に第2行と第3行を交換すると

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & 2 & 14 \\ 0 & 0 & -3 & 9 \end{pmatrix}$$

これにより、ガウスの消去法を続行可能になる

アルゴリズムの問題点 (2): ピボット選択による改善

$$\begin{pmatrix} 0.0003 & 1 & 1 & 5 \\ 2 & -1 & 2 & 6 \\ -1 & 3 & 1 & 8 \end{pmatrix} \qquad (7.20)'$$

第1行と第2行を交換すると

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 & 6 \\ 0.0003 & 1 & 1 & 5 \\ -1 & 3 & 1 & 8 \end{pmatrix}$$

アルゴリズムの問題点 (2): ピボット選択による改善

第1列を消去すると

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 & 6 \\ 0 & 1.0001 & 0.9997 & 4.9991 \\ 0 & 2.5 & 2 & 11 \end{pmatrix}$$

第2行と第3行を交換すると

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 & 6 \\ 0 & 2.5 & 2 & 11 \\ 0 & 1.0001 & 0.9997 & 4.9991 \end{pmatrix}$$

アルゴリズムの問題点 (2): ピボット選択による改善

第2列を消去すると

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 & 6 \\ 0 & 2.5 & 2 & 11 \\ 0 & 0 & 0.19962 & 0.59866 \end{pmatrix}$$

後退代入でこれを解くと有効数字3桁まで一致

$x_1 = \underline{1.00}14,\ x_2 = \underline{2.00}08,\ x_3 = \underline{2.99}9$

（数式処理システム Risa/Asir で計算）

部分ピボット選択 (Partial pivoting)

- 第 k 列の消去の前に、第 k 列の成分 $a_{k,k}, \ldots, a_{k,n}$ の中で絶対値が最も大きな成分を選んで消去を行う
- 「完全ピボット選択」(complete pivoting) という手法もあるが、今回は省略

前進消去のアルゴリズム（部分ピボット選択つき）

1. for $k \in [1..\ N\text{-}1]$ do

   // 絶対値最大の $a_{k,L}$ 成分を探す

   a. $L \leftarrow k$; max $\leftarrow |a_{k,k}|$

   b. for $i \in [k+1..\ N]$ do

      i. if ($|a_{i,k}| >$ max) then

         1. $L \leftarrow i$; max $\leftarrow |a_{i,k}|$;

前進消去のアルゴリズム（部分ピボット選択つき）

c. if ($L \neq k$) then

// 第 k 行と第 L 行を交換する

i. for $j \in [k \,..\, N]$ do

1. tmp $\leftarrow a_{k,j}$; $a_{k,j} \leftarrow a_{L,j}$; $a_{L,j} \leftarrow$ tmp;

ii. tmp $\leftarrow y_k$; $y_k \leftarrow y_L$; $y_L \leftarrow$ tmp;

前進消去のアルゴリズム（部分ピボット選択つき）

d. for $i \in [k+1..\ N]$ do

   // 通常の列消去を行う

   i. $\alpha \leftarrow a_{i,k} / a_{k,k}$

   ii. for $j \in [k+1..\ N]$ do

      1. $a_{i,j} \leftarrow a_{i,j} - \alpha\ a_{k,j}$

   iii. $y_i \leftarrow y_i - \alpha\ y_k$

7-3 *LU*分解

3重対角行列とLU分解

3重対角行列:

$$\begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & O \\ b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} \\ O & & & b_N & a_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix} \tag{7.26}$$

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$$

3重対角行列と*LU*分解

- *LU*分解を用いることで、3重対角行列という特殊性を用いて連立1次方程式を効率よく解くことができる
- ただし、*LU*分解の方法は一般の連立1次方程式にも適用可能（実際に用いられている場合が多い）

3重対角行列の*LU*分解

行列*A*を*L*と*U*の積で表す:

L: lower triangular matrix
U: upper triangular matrix

$$
\begin{pmatrix}
a_1 & c_1 & & & O \\
b_2 & a_2 & c_2 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} \\
O & & & b_N & a_N
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
1 & & & & & O \\
l_2 & 1 & & & & \\
 & l_3 & 1 & & & \\
 & & \ddots & \ddots & & \\
 & & & l_{N-1} & 1 & \\
O & & & & l_N & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
d_1 & c_1 & & & & O \\
 & d_2 & c_2 & & & \\
 & & d_3 & c_3 & & \\
 & & & \ddots & \ddots & \\
 & & & & d_{N-1} & c_{N-1} \\
O & & & & & d_N
\end{pmatrix}
\qquad (7.27)
$$

L: 下三角行列　　　*U*: 上三角行列

3重対角行列のLU分解

LとUの積をとると

$$
\begin{pmatrix}
a_1 & c_1 & & & O \\
b_2 & a_2 & c_2 & & \\
& \ddots & \ddots & \ddots & \\
& & b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} \\
O & & & b_N & a_N
\end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{pmatrix}
d_1 & c_1 & & & & O \\
l_2 d_1 & d_2 + l_2 c_1 & c_2 & & & \\
& l_3 d_2 & d_3 + l_3 c_2 & c_3 & & \\
& & \ddots & \ddots & \ddots & \\
& & & l_{N-1} d_{N-2} & d_{N-1} + l_{N-1} c_{N-2} & c_{N-1} \\
O & & & & l_N d_{N-1} & d_N + l_N c_{N-1}
\end{pmatrix} \quad (7.28)
$$

3重対角行列のLU分解

LとUの積をとり、両辺の行列の各成分を比較すると

- 0 の成分および $c_1, \dots, c_{N-1}$ の成分は等しい
- その他の成分は以下を満たす:

$$d_1 = a_1, \quad l_i = b_i / d_{i-1}, \quad d_i = a_i - l_i c_{i-1} \qquad (i = 2, 3, \dots, N)$$

- a_i, b_i, c_i から $d_1, l_1, d_2, l_2, \dots$ の順に値が定まる

以上より、行列 L と U が A から一意に定まる

3重対角行列の*LU*分解

LU 分解
（*LU* decomposition）

行列*A*を*L*と*U*の積で表す:

$$\begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & O \\ b_2 & a_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_{N-1} & a_{N-1} & c_{N-1} \\ O & & & b_N & a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & O \\ l_2 & 1 & & & & \\ & l_3 & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & l_{N-1} & 1 & \\ O & & & & l_N & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & c_1 & & & & O \\ & d_2 & c_2 & & & \\ & & d_3 & c_3 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & d_{N-1} & c_{N-1} \\ O & & & & & d_N \end{pmatrix} \quad (7.27)$$

L: 下三角行列　　*U*: 上三角行列

前進代入と後退代入

- $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$
- $A = LU$ を代入すると $LU\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ (7.30)
- $\boldsymbol{z} = (z_1, z_2, \ldots z_N)^{\mathrm{T}}$ とおく
- $\boldsymbol{z} = U\boldsymbol{x}$ とおくと $L(U\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{y}$ より $L\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y}$

前進代入と後退代入

- そこで、$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$を以下の手順で解く
  a. $L\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y}$を解いて$\boldsymbol{z}$を求める
     （前進代入, forward substitution）
  b. $U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$を解いて$\boldsymbol{x}$を求める（後退代入）

前進代入

$$
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & O \\
l_2 & 1 & & & & & \\
 & l_3 & 1 & & & & \\
 & & \ddots & \ddots & & & \\
 & & & & l_{N-1} & 1 & \\
O & & & & & l_N & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_{N-1} \\ z_N \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 + l_2 z_1 \\ z_3 + l_3 z_2 \\ \vdots \\ z_{N-1} + l_{N-1} z_{N-2} \\ z_N + l_{N-} z_{N-1} \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix}
\tag{7.31a}
$$

$$
z_1 = y_1, \quad z_i = y_i - l_i z_{i-1} \;\; (i = 2, 3, \ldots N) \tag{7.32}
$$

により $z_1, z_2, \ldots z_N$ の順に求める

後退代入

$$\begin{pmatrix} d_1 & c_1 & & & & O \\ & d_2 & c_2 & & & \\ & & d_3 & c_3 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & d_{N-1} & c_{N-1} \\ O & & & & & d_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 x_1 + c_1 x_2 \\ d_2 x_2 + c_2 x_3 \\ d_3 x_3 + c_3 x_4 \\ \vdots \\ d_{N-1} x_{N-1} + c_{N-1} x_n \\ d_N x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_{N-1} \\ z_N \end{pmatrix} \quad (7.31b)$$

$x_N = z_N/\mathrm{d}_N$,　$x_i = (z_i - c_i x_{i+1})/d_i$　($i = N$-1, … , 2, 1)　(7.33)

により $x_N, x_{N-1}, \ldots, x_2, x_1$ の順に求める

*LU*分解のアルゴリズム

1. $d_1 \leftarrow a_1$;
2. for $i \in [2 .. N]$ do
   a. $l_i \leftarrow \mathrm{b}_i / \mathrm{d}_{i-1}$;
   b. $\mathrm{d}_\mathrm{i} \leftarrow a_\mathrm{i} - l_i c_{i-1}$;

前進代入、後退代入のアルゴリズム

1. $z_1 \leftarrow y_1$;
2. for $i \in [2 .. N]$ do
   a. $z_i \leftarrow y_i - l_i z_{i-1}$;
3. $x_N \leftarrow z_N / d_N$;
4. for $i \in [N-1 .. 1]$ do
   a. $x_i \leftarrow (z_i - c_i x_{i+1}) / d_i$;

3重対角行列の*LU*分解の方法の時間計算量

- 乗算回数
  - *LU*分解 : 2(N-1)回
  - 前進代入 : N-1回
  - 後退代入 : 2N-1回
  - 計 : O(5N) 回

3重対角行列の*LU*分解の方法の時間計算量

- 加算回数
  - *LU*分解 : N-1 回
  - 前進代入 : N-1 回
  - 後退代入 : N-1回
  - 計 : O(3N) 回
- 合計の時間計算量 : O(8N) = O(N)

3重対角行列の*LU*分解の方法の空間計算量

- 変数の個数
    - a_i, d_i : 各 N 個、計 $2N$ 個
    - b_i, c_i, l_i : 各 N-1 個、計 3(N-1) 個
    - x_i, y_i, z_i : 共用すると計 N 個
- 合計の空間計算量 : $O(6N) = O(N)$

*LU*分解とガウスの消去法の対応

$N = 4$の場合

$$\begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & \\ b_2 & a_2 & c_2 & \\ & b_3 & a_3 & c_3 \\ & & b_4 & a_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} \qquad (7.34)$$

*LU*分解とガウスの消去法の対応

ガウスの消去法の前進消去を行うと

$$\begin{pmatrix} d_1 & c_1 & & \\ & d_2 & c_2 & \\ & & d_3 & c_3 \\ & & & d_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \end{pmatrix} \qquad (7.35)$$

$U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$ の形になる: *LU*分解後の前進代入の後の形に対応する

これを後退代入で解けば「*LU*分解→前進代入→後退代入」の形に対応する

一般の係数行列に対する*LU*分解

$$
\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,N} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{N,1} & a_{N,2} & \cdots & a_{N,N} \end{pmatrix}
= \begin{pmatrix} 1 & & & & O \\ l_{2,1} & 1 & & & \\ l_{3,1} & l_{3,2} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{N,1} & l_{N,2} & \cdots & l_{N-1} & 1 \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \cdots & u_{1,N} \\ & u_{2,2} & u_{2,3} & \cdots & u_{2,N} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & u_{N-1,N-1} & u_{N-1,N} \\ O & & & & u_{N,N} \end{pmatrix}
\tag{7.36}
$$

と分解した後で、$L\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y}$, $U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$ を順に解くことにより、ガウスの消去法と同じ操作で解を求めている

一般の係数行列に対する*LU*分解のアルゴリズム

1. $N, a_{i,j}, y_i$を設定する;
2. for $i \in [1 .. N]$ do
   a. for $j \in [1 .. i\text{-}1]$ do
      i. $l_{i,j} \leftarrow \frac{1}{u_{j,j}} \left(a_{i,j} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{i,k} u_{k,j} \right)$
   b. for $j \in [i .. N]$ do
      i. $u_{i,j} \leftarrow a_{i,j} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{i,k} u_{k,j}$

一般の係数行列に対する前進代入、後退代入のアルゴリズム

1. $z_1 \leftarrow y_1$;
2. for $i \in [2 \,..\, N]$ do
   a. $$z_i \leftarrow y_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{i,k} z_k$$
3. $x_N \leftarrow z_N / u_{N,N}$;
4. for $i \in [N\text{-}1 \,..\, 1]$ do
   a. $$x_i \leftarrow \left(z_i - \sum_{k=i+1}^{N} u_{i,k} x_k \right) \Big/ u_{i,i}$$

一般の行列に対するLU分解の方法の時間計算量

- LU分解：$O(N^3)$
- 前進代入：$O(N^2)$
- 後退代入：$O(N^2)$

*LU*分解の方法の長所

連立1次方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$ を、$\boldsymbol{y}$ をいろいろ変えて解く場合

- LU分解 $A=LU$: $\mathrm{O}(N^3)$ を一度計算しておけば
- 前進代入 $L\boldsymbol{z}=\boldsymbol{y}$: $\mathrm{O}(N^2)$
- 後退代入 $U\boldsymbol{x}=\boldsymbol{z}$: $\mathrm{O}(N^2)$

で、$\boldsymbol{y}$ を次々に取り替えた後で $\mathrm{O}(N^2)$ の計算量で解を求められる
（ガウスの消去法だと毎回 $\mathrm{O}(N^3)$ の計算が必要）