

# 電 301 数値解析

## 第 4 回

### 連立一次方程式の 解法 (1) LU 分解

## はじめに (1)

これから 3 回の講義の典拠は教科書および以下の文献:

- 杉原, 室田: 線形計算の数理, 岩波書店, 2009
- 斎藤: 数値解析入門, 東京大学出版会, 2012
- 久保田: 工学基礎 数値解析とその応用, 数理工学社, 2010

## はじめに (2)

### 文献 (つづき)

- 伊理: 線形代数汎論, 浅倉書店, 2009
- 伊理, 藤野: 数値計算の常識, 共立出版, 1996
- 渡部: 連立 1 次方程式の基礎知識, 九州大学大型計算機センター広報, Vol.28, No.4, pp.291-349, 1995.

## 連立一次方程式 (1)

- 数学を使って応用上の問題を解くということは, 方程式を立てて解を求めることに相当. .
- 多くの場合, 少なくとも局所的には, 線形近似が有効.
- 線形の数学モデルは非線形の数学モデルより圧倒的に取り扱いやすい.

## 連立一次方程式 (2)

- 必要に応じて線形近似してから問題を解くということがよく行われる.
- このような場合には, 最終的に線形方程式を解けばもとの問題の (近似?) 解が得られる.

## 連立一次方程式 (3)

- 今回および次回の講義では, 方程式に微分演算が含まれない場合について考える.
- 微分が含まれる場合については第 11 回から第 14 回で取り扱う.

## 連立一次方程式 (4)

- 変数が1個の線形方程式の解法について悩むことは何もないので …
- はじめから多変数の場合を考える.
- 多変数の微分を含まない線形方程式を連立一次方程式ともいう.

## Scilab で連立一次方程式を解く (1)

- $A$  を  $m$  行  $n$  列の行列,  $x$  を  $n$  次のベクトル,  $b$  を  $m$  次のベクトルとする.
- 数学的には, 連立一次方程式を解くとは,

$$Ax = b$$

を満たす  $x$  をすべて求めることを意味する.



## Scilab で連立一次方程式を解く (2)

- 連立一次方程式の解: 一意解, 不定解, 不能解
- Scilab で連立一次方程式を解くには演算子\  
(環境によっては¥記号) を使う.
- 行列  $A$  および  $b$  が Scilab において変数  $A$  およ  
び  $b$  に格納されているとき, Scilab で  $Ax = b$   
の解を求めるには,  
 $x=A\b$  のようにする.

## Scilab で連立一次方程式を解く (3)

- 一意解の場合には,  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  の解と Scilab の  $\mathbf{x}=\mathbf{A}\backslash\mathbf{b}$  は数値計算の誤差を除いて一致.
- 不定解の場合は, Scilab の  $\mathbf{x}=\mathbf{A}\backslash\mathbf{b}$  は  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  を満たす解のひとつを返す.
- 不能解の場合, Scilab は  $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|$  が最小となる  $\mathbf{x}$  を近似解として返す.

## Scilab で連立一次方程式を解く (4)

一意解の例： $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \end{pmatrix}$  の解は  $(x_1, x_2) = (2/3, 5/3)$  であり，Scilab で計算すると以下のようなになる．

```
-->A=[1 2;0 3];b=[4;5];x=A\b
```

```
x =
```

```
0.6666667
```

```
1.6666667
```

## Scilab で連立一次方程式を解く (5)

不定解の例:  $(1 \ 0) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 2$  の解は不定で,  $(x_1, x_2) = (2, 0)$  はひとつの解であるが, Scilab で計算すると以下のようなになる.

```
-->A=[1 0];b=2;x=A\b
```

```
x =  
 2.  
 0.
```

## Scilab で連立一次方程式を解く (6)

$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$  は解を持たないが, Scilab は最小二乗近似解を与える.

```
-->A=[1;1];b=[2;3];x=A\b
```

```
x =
```

```
2.5
```

## 連立一次方程式の一般論 (1)

- $A$  を  $m$  行  $n$  列の行列,  $x$  を  $n$  次のベクトル,  $b$  を  $m$  次のベクトルとする.
- 数学的には, 連立一次方程式を解くとは,

$$Ax = b$$

を満たす  $x$  をすべて求めることを意味する.

## 連立一次方程式の一般論 (2)

- 行列  $A$  とベクトル  $b$  を結合して作った行列  $B = (A|b)$  を, 連立一次方程式  $Ax = b$  の拡大係数行列という.
- $\text{rank}A < \text{rank}B$  なら不能解.
- $\text{rank}A = \text{rank}B = \dim x$  なら一意解
- $\text{rank}A = \text{rank}B < \dim x$  なら不定解.

## 連立一次方程式の一般論 (3)

- 行列に行基本変形を施すことで, 以下のような階段行列が得られる.

$$\begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 & * & & \cdots & & \\ 0 & & \cdots & & & 0 & 1 & * & \cdots & \\ 0 & & & \cdots & & & 0 & 1 & * & \cdots \\ & & & & \cdots & & & & & \end{pmatrix}$$



## 連立一次方程式の一般論 (4)

- 階段行列の特徴は以下の通り: 1 の左はすべて零, 1 の右側は任意, 1 を含まない行はすべて零だけ, 行列全体を見ると 1 の系列は右斜め下に進む (真下不可)
- 第 1 行左端に零があるかないかは行列によって変わる.

## 連立一次方程式の一般論 (5)

- 一意解に対応する拡大係数行列を階段行列に変形すると (今回の講義ではこの場合を取り扱う)

$$\left( \begin{array}{cccc|c} 1 & * & \cdots & & * \\ 0 & 1 & * & \cdots & * \\ \vdots & \ddots & \ddots & * & * \\ 0 & \ddots & 0 & 1 & * \end{array} \right)$$

## 連立一次方程式の一般論 (6)

- 拡大係数行列を階段行列に変換する手順は行基本変形.
- 行基本変形は基本行列を拡大係数行列に左から掛けることに対応.
- 行基本変形によって, 係数行列  $\mathbf{A}$  が上三角行列 (後述) に変形されていることになる.

## 連立一次方程式の一般論 (7)

- 上三角行列とはこういう行列:

$$\begin{pmatrix} * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & * \end{pmatrix}$$

ただし \* は任意の数 (零でもよい).

## 連立一次方程式の解法 (1)

- 連立一次方程式の解法は、大別すると、直接法, 反復法の2種類に分類される.
- 直接法は数値計算の誤差がない場合に有限回の演算で解を与える手法.
- 反復法は繰り返しによって近似解の系列を生成する方法.

## 連立一次方程式の解法 (2)

- 上記以外に, 共役勾配法と呼ばれる方法がある.
- 消去法は直接法の種類. 今回の講義では直接法を取り扱う.
- 以下では, 行列  $\mathbf{A}$  は  $n$  行  $n$  列の正則行列とする.

## LU 分解 (1)

- もっとも素朴なガウスの消去法は、行列  $\mathbf{A}$  が正方かつ正則で、行列  $\mathbf{A}$  が行の入れ換えなしに階段行列に変形できる場合に相当。
- この場合に相当する、行列の LU 分解と呼ばれるものを、これから導出する。
- $\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}$  とし、以下、繰り返し計算によって、これを  $\mathbf{A}^{(2)}$ ,  $\mathbf{A}^{(3)}$ , ... のように変形してゆく。

## LU 分解 (2)

- $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{(1)}$  の各成分を以下のように書く.

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



## LU 分解 (3)

- $a_{11}^{(1)} \neq 0$  と仮定し,

$$l_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \\ \vdots \\ \frac{a_{n1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \end{pmatrix}, \mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \end{pmatrix} \text{ とす}$$

ると ...

## LU 分解 (4)

- $\mathbf{A}^{(1)} = l_1 \mathbf{u}_1^T + \mathbf{A}^{(2)},$

$$\mathbf{A}^{(2)} = \left( \begin{array}{c|ccc} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{array} \right)$$

という形にな

る (各成分の式は略).

## LU 分解 (5)

- $a_{22}^{(2)} \neq 0$  と仮定し, 以下のようにおくと:

$$l_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(2)}} \\ \vdots \\ \frac{a_{n2}^{(1)}}{a_{22}^{(2)}} \end{pmatrix}, \mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \end{pmatrix}$$

## LU 分解 (6)

- $\mathbf{A}^{(2)} = l_2 \mathbf{u}_2^T + \mathbf{A}^{(3)},$

$$\mathbf{A}^{(3)} = \left( \begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 0 & a_{22}^{(3)} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \end{array} \right) \text{ という形になる}$$

(各成分の式は略).

## LU 分解 (7)

- 同様にして一回計算するごとに行列の左および上側の零列と零行が1ずつ増えるから …
- $\mathbf{A}^{(n)} = \mathbf{l}_n \mathbf{u}_n^T + \mathbf{A}^{(n+1)}$  とすると,  $\mathbf{A}^{(n+1)} = \mathbf{0}$  (零行列) である.
- 以上をまとめると  $\mathbf{A} = \mathbf{l}_1 \mathbf{u}_1^T + \cdots + \mathbf{l}_n \mathbf{u}_n^T$  となるが …

## LU 分解 (8)

- $L = \begin{pmatrix} l_1 & \cdots & l_n \end{pmatrix}$ ,  $U = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{u}_n^T \end{pmatrix}$  とおくと …
- $A = LU$  となる. これを行列  $A$  の **LU 分解** という.  $L$  が下三角行列 (後述),  $U$  が上三角行列になっていることに注意.

## LU 分解 (9)

- 下三角行列とはこういう行列:

$$\begin{pmatrix} * & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ * & \cdots & \cdots & * \end{pmatrix}$$

ただし \* は任意の数 (零でもよい).

## LU 分解 (10)

- LU 分解を用いて連立一次方程式  $\mathbf{Ax} = \mathbf{LUx} = \mathbf{b}$  を解くには,  $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ ,  $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$  という 2 個の連立一次方程式を順に解けばよい.



## LU 分解 (11)

- $A = LU$  という LU 分解が得られているとき, さらに行列  $U$  を対角行列  $D$  と対角要素が 1 の上三角行列  $U'$  の積であらわし,  $A = LDU'$  と書き直すことがある. これを LDU 分解という.

## LU 分解 (12)

LDU 分解は存在すれば一意的である. この理由は,  $A = L_1 D_1 U_1 = L_2 D_2 U_2$  であったと仮定すると,  $L_2^{-1} L_1 D_1 = D_2 U_2 U_1^{-1}$  であるが,  $L_2^{-1} L_1$  が対角要素が 1 の下三角行列,  $U_2 U_1^{-1}$  が対角要素が 1 の上三角行列であることに注意すると, まず  $D_1 = D_2$  が得られ, 続いて  $L_2^{-1} L_1 D_1 = D_2 U_2 U_1^{-1}$  の左辺が下三角行列, 右辺が上三角行列であることから,  $L_2^{-1} L_1 = I_n$ ,  $U_2 U_1^{-1} = I_n$  となり, よって  $L_2 = L_1$ ,  $U_2 = U_1$  となるからである.

## LU 分解 (13)

- $A$  が対称行列で LDU 分解できるとき,  $A = LDU$  とすると,  $A = A^T$  と LDU 分解の一意性から,  $L = U^T, U = L^T$  が導かれる. したがって,  $A = LDL^T$  と書ける. これを対称行列  $A$  の  $LDL^T$  分解と呼ぶ.

## LU 分解 (14)

- $A$  が LDU 分解できる正定対称行列である場合には,  $D$  の各要素は正だから,  $D$  の対角要素の正の平方根を対角要素とする行列を  $G$  とすると,  $D = GG^T$  であり, したがって  $A = LGG^T L^T$  と書ける.  $C = LG$  とおくと,  $A = CC^T$  である. この表現を,  $A$  の Cholesky 分解と呼ぶ.

## Gauss の消去法 (1)

- Gauss の消去法を LU 分解から導く.
- ベクトル  $l_k$  の第  $k$  成分が 1 であったことを思い出し, 第  $k + 1$  成分以降をまとめた  $n - k - 1$  次のベクトルを  $\bar{l}_k$  と書くことにする.
- $L_1 = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ -\bar{l}_1 & I_{n-1} \end{pmatrix}$  とおく ( $I_{n-1}$  は  $n - 1$  次の単位行列,  $\mathbf{0}$  はその部分が零であることを示す)

## Gauss の消去法 (2)

- $\mathbf{A}^{(1)} = l_1 \mathbf{u}_1^T + \mathbf{A}^{(2)}$  の両辺に  $\mathbf{L}_1$  を左から乗じ,  $\mathbf{L}_1$  の構造を利用して整理すると (詳細は略),  $\mathbf{L}_1 \mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{e}_1 \mathbf{u}_1^T + \mathbf{A}^{(2)}$  となる (ただし  $\mathbf{e}_1$  は第 1 番目の単位ベクトル).
- 次に,  $\mathbf{A}^{(2)} = l_2 \mathbf{u}_2^T + \mathbf{A}^{(2)}$  を考える.
- $\mathbf{L}_2 = \left( \begin{array}{c|cc} 1 & 0 & \mathbf{0} \\ \hline 0 & 1 & \mathbf{0} \\ 0 & -\bar{l}_2 & \mathbf{I}_{n-2} \end{array} \right)$  とおく.

## Gauss の消去法 (3)

- この行列の構造に注意して計算すると,  $L_2 A^{(2)} = e_2 u_2^T + A^{(3)}$  となる.
- $L_2 e_1 = e_1$  であることに注意すると,  
 $L_2 L_1 A = e_1 u_1^T + e_2 u_2^T + A^{(3)}$  となる.
- 以下同様にして,  
 $L_n \cdots L_1 A = e_1 u_1^T + \cdots + e_n u_n^T = U$   
となる ( $A^{(n+1)} =$  に注意).

## Gauss の消去法 (4)

- 以上によって得られた式の  $L_n \cdots L_1$  は基本行列の積であり, 右辺は階段行列になっている. 階段行列を求める手順が Gauss の消去法だったから, LU 分解から Gauss の消去法が導かれたことになる.



## Gauss の消去法 (5)

- 上述のように階段行列を求める手順を**前進消去**という.
- 行交換が必要ない場合には, Gauss の消去法も, LU 分解も,  $l_1, \dots, l_n, u_1, \dots, y_n$  を求めることに相当するので, Gauss の消去法と LU 分解は本質的に同じ.

## Gauss の消去法 (6)

- $Ax = b$  は,  $\bar{b} = L_n \cdots L_1 b$  とおくと,  
 $L_n \cdots L_1 Ax = Ux = \bar{b}$  と変形されるから,  
 $Ux = \bar{b}$  という連立一次方程式を解くことにより, 解  $x$  が求められる.

## Gauss の消去法 (7)

- 具体的には,  $\bar{\mathbf{b}}$  の各成分を  $\bar{b}_1, \dots, \bar{b}_n$  とし,  $\mathbf{U}$  の第  $(i, j)$  成分を  $u_{ij}$  とし,  $\mathbf{U}$  が正則な上三角行列であったことに注意すると, まず  $x_n = \bar{b}_n / u_{nn}$  が得られ, 次に  $u_{n-1, n-1}x_{n-1} + u_{n-1, n}x_n = \bar{b}_{n-1}$  にこれを代入して  $x_{n-1}$  が得られ, というふうに, 逐次的に解  $\mathbf{x}$  の全成分が得られる. この操作を後退代入という.

## ピボット選択 (1)

- 行列  $A$  が正則であっても,  $a_{11} = 0$  であるということはある。
- $a_{11} \neq 0$  であっても, 絶対値が零に近い場合には,  $a_{11}$  を使って LU 分解あるいは Gauss の消去法によって連立一次方程式の解を求めると, 数値計算の誤差が大きくなる可能性がある。

## ピボット選択 (2)

- 以下では、仮に、零あるいは零に近い要素を「条件が悪い」と呼び、そうでない要素を「条件が良い」と呼ぶ.

## ピボット選択 (3)

- 計算不能あるいは数値的な条件悪化を防ぐには, 行を入れ換えて, 条件がよい  $a_{k_1,1}$  が行列の一番上に来るようにすればよい.
- これは, 見方を変えると,  $a_{11}$  のかわりに  $a_{k_1,1}$  に着目して, LU 分解あるいは Gauss の消去法を遂行していることになる.

## ピボット選択 (4)

- 第  $k$  ステップについても同様に, 数値的な条件が良い  $a_{j_k, k}$  に着目して LU 分解あるいは Gauss の消去法を遂行してゆく.

## ピボット選択 (5)

- LU 分解あるいは Gauss の消去法の各ステップで着目している条件が良い要素の番号  $(j_k, k)$  のことを**ピボット**あるいは**枢軸**と呼ぶ.
- 対応する  $a_{j_k, k}^{(k)}$  のことを**ピボット要素**あるいは**枢軸要素**と呼ぶ.



## ピボット選択 (6)

- 数値的な条件が良いように適切にピボットを選ぶ操作のことを、**ピボット選択**あるいは**枢軸選択**と呼ぶ.
- ピボット選択の選択法のひとつは、 $\{a_{j,k}^{(k)} : j = k, k+1, \dots, n\}$  の中で絶対値が最大の要素の添字を選ぶ方法 (行交換によるピボット操作).

## ピボット選択 (7)

- 列交換によるピボット操作と呼ばれる第  $k$  列以降の列について同様の操作をする手法や、完全ピボット操作と呼ばれる第  $(p, q)$  要素 (ただし  $p, q \geq k$ ) すべての中から絶対値最大のものを選ぶ手法もある.

## ピボット選択 (8)

- 列交換によるピボット操作や完全ピボット操作では, 変数の順番もこれに対応して入れ換える必要がある.
- 数値計算の誤差はベクトル  $\mathbf{b}$  の成分の大きさにも依存するので, ピボット操作だけで数値計算の誤差の低減が保証されるとは限らない.

## ピボット選択 (9)

- 方程式  $Ax = b$  を解くためにピボット選択付きの Gauss の消去法を使うことは,  $P$  をそれに対応する置換行列としたとき,  $PA$  を LU 分解することに相当する.

## Scilab における LU 分解 (1)

- Scilab において LU 分解を求める関数は `lu` である.
- $[L,U,P]=lu(A)$  とすることで,  $PA = LU$  となる行列  $L, U, P$  を求めることができる.
- 実行例は次ページの通り.

```
-->A=[1 2 3;4 5 6;7 8 9];
```

```
-->[L,U,P]=lu(A);
```

```
-->L
```

```
L =
```

```
1.          0.          0.  
0.1428571   1.          0.  
0.5714286   0.5        1.
```

```
-->U
```

```
U =
```

```
7.          8.          9.  
0.          0.8571429   1.7142857  
0.          0.          1.110D-16
```

```
-->P
```

```
P =
```

```
0.          0.          1.  
1.          0.          0.  
0.          1.          0.
```

```
-->P*A
```

```
ans =
```

```
7.          8.          9.  
1.          2.          3.  
4.          5.          6.
```

```
-->L*U
```

```
ans =
```

```
7.          8.          9.  
1.          2.          3.  
4.          5.          6.
```

## Gauss-Jordan 法

- Gauss の消去法の終了後に, さらに列基本変形を施して, 行列  $U$  を単位行列に変換する方法もある. これを **Gauss-Jordan 法** という.
- 計算量という観点から言うと Gauss-Jordan 法にはあまりメリットはないが, 並列計算機には適しているという指摘もある.

## 疎行列 (1)

- 要素の大部分が零の行列を疎行列という.
- 応用であらわれる大規模行列は多くの場合疎行列である.
- 疎行列で零要素をメモリに格納することは無駄であるので, 必要な要素だけをメモリに記憶する方法が工夫されている.



## 疎行列 (2)

- 疎行列に対する演算は, 行列の疎性を破壊しないことが望ましい.
- Scilab で疎行列を扱うための組み込み関数は `sparse`.