【プログラミング演習２資料】

LU 分解による連立方程式の解法

1　問題提起

次の連立方程式（未知変数 x_0, x_1, x_2, x_3）を解いてみよう．

$$\begin{cases} 8x_0 + 16x_1 + 24x_2 + 32x_3 &= 160 \\ 2x_0 + 7x_1 + 12x_2 + 17x_3 &= 70 \\ 6x_0 + 17x_1 + 32x_2 + 59x_3 &= 198 \\ 7x_0 + 22x_1 + 46x_3 + 105x_3 &= 291 \end{cases} \tag{1}$$

この連立方程式は

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 8 & 16 & 24 & 32 \\ 2 & 7 & 12 & 17 \\ 6 & 17 & 32 & 59 \\ 7 & 22 & 46 & 105 \end{bmatrix}, \underline{x} = \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \underline{b} = \begin{bmatrix} 160 \\ 70 \\ 198 \\ 291 \end{bmatrix} \tag{2}$$

と置くことで，

$$\boldsymbol{A}\underline{x} = \underline{b} \tag{3}$$

なる恒等式と等価となる．ここで，$\boldsymbol{A}$ を係数行列，$\underline{x}$ を変数ベクトル，$\underline{b}$ を右辺ベクトルと呼ぶ．

2　LU 分解法

連立方程式を解くアルゴリズムとして

- ガウス・ジョルダン法
- LU 分解法
- コレスキー分解法（正定値エルミート行列に限る）

などが知られている．ここでは，LU 分解法を用いて連立方程式を解くことを考える．

LU 分解とは，$N \times N$ 行列 $\boldsymbol{A}$ を

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_{0,0} & a_{0,1} & \cdots & a_{0,N-1} \\ a_{1,0} & a_{1,1} & \cdots & a_{1,N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N-1,0} & a_{N-1,1} & \cdots & a_{N-1,N-1} \end{bmatrix} \tag{4}$$

と表す時，以下のように $N \times N$ の下三角行列 $\boldsymbol{L}$ と $N \times N$ の上三角行列 $\boldsymbol{U}$ を用いて

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U} \tag{5}$$

を満たす $\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{U}$ を求めることである．ここで，

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} l_{0,0} & & & \Large 0 \\ l_{1,0} & l_{1,1} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{N-1,0} & l_{N-1,1} & \cdots & l_{N-1,N-1} \end{bmatrix}, \boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} 1 & u_{0,1} & \cdots & u_{0,N-1} \\ & 1 & \cdots & u_{1,N-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ \Large 0 & & & 1 \end{bmatrix} \tag{6}$$

とする．$\boldsymbol{L}$ は対角成分より右上の要素が全て 0 の下三角行列であり，$\boldsymbol{U}$ は対角成分が全て 1 で，対角成分より左下の要素が全て 0 の上三角行列である．

式 (5) は

$$
\begin{aligned}
\underbrace{\left[\begin{array}{c|ccc} a_{0,0} & a_{0,1} & \cdots & a_{0,N-1} \\ \hline a_{1,0} & a_{1,1} & \cdots & a_{1,N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N-1,0} & a_{N-1,1} & \cdots & a_{N-1,N-1} \end{array}\right]}_{\boldsymbol{A}}
&= \underbrace{\left[\begin{array}{c|ccc} l_{0,0} & & & \text{\Large 0} \\ \hline l_{1,0} & l_{1,1} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{N-1,0} & l_{N-1,1} & \cdots & l_{N-1,N-1} \end{array}\right]}_{\boldsymbol{L}}
\underbrace{\left[\begin{array}{c|ccc} 1 & u_{0,1} & \cdots & u_{0,N-1} \\ \hline & 1 & \cdots & u_{1,N-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ \text{\Large 0} & & & 1 \end{array}\right]}_{\underline{U}} \\
\left[\begin{array}{c|c} a_{0,0} & \underline{\alpha}_1^T \\ \hline \underline{a}_1 & \boldsymbol{A}_1 \end{array}\right]
&= \left[\begin{array}{c|c} l_{0,0} & \underline{0}_{N-1}^T \\ \hline \underline{l}_1 & \boldsymbol{L}_1 \end{array}\right]
\left[\begin{array}{c|c} 1 & \underline{u}_1^T \\ \hline \underline{0}_{N-1} & \boldsymbol{U}_1 \end{array}\right] \\
&= \left[\begin{array}{cc} l_{0,0} & l_{0,0}\underline{u}_1^T \\ \underline{l}_1 & \underline{l}_1\underline{u}_1^T + \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{U}_1 \end{array}\right]
\end{aligned} \tag{7}
$$

のように書き直すことができる．ここで，

$$
\left\{
\begin{array}{lcl}
\underline{a}_1 & = & \begin{bmatrix} a_{1,0} \\ a_{2,0} \\ \cdots \\ a_{N-1,0} \end{bmatrix}, \underline{\alpha}_1^T = \begin{bmatrix} a_{0,1} & a_{0,2} & \cdots & a_{0,N-1} \end{bmatrix}, \boldsymbol{A}_1 = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,N-1} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N-1,1} & a_{N-1,2} & \cdots & a_{N-1,N-1} \end{bmatrix} \\
\underline{l}_1 & = & \begin{bmatrix} l_{1,0} \\ l_{2,0} \\ \vdots \\ l_{N-1,0} \end{bmatrix}, \boldsymbol{L}_1 = \begin{bmatrix} l_{1,1} & & & \text{\Large 0} \\ l_{2,1} & l_{2,2} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{N-1,1} & l_{N-1,2} & \cdots & l_{N-1,N-1} \end{bmatrix} \\
\underline{u}_1^T & = & \begin{bmatrix} u_{0,1} & u_{0,2} & \cdots & u_{0,N-1} \end{bmatrix}, \boldsymbol{U}_1 = \begin{bmatrix} 1 & u_{1,2} & \cdots & u_{1,N-1} \\ & 1 & \cdots & u_{2,N-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ \text{\Large 0} & & & 1 \end{bmatrix}
\end{array}
\right. \tag{8}
$$

とし，$\underline{0}_{N-1}$ は要素数 $N-1$ の全零ベクトルを表す．また，$\cdot^T$ は転置を意味する．

式 (7) の恒等関係から

$$
\left\{
\begin{array}{lcl}
l_{0,0} & = & a_{0,0} \\
\underline{l}_1 & = & \underline{a}_1 \\
\underline{u}_1^T & = & \underline{\alpha}_1^T / l_{0,0} \\
\boldsymbol{A}_1 & = & \underline{l}_1\underline{u}_1^T + \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{U}_1
\end{array}
\right. \tag{9}
$$

が満たされれば良いことがわかる．式 (9) の最初の 2 つの式から $l_{0,0}$ と $\underline{l}_1$ が確定する．次に，確定した $l_{0,0}$ と第 3 式から $\underline{u}_1^T$ が確定する．これらにより定まった $\underline{l}_1$ と $\underline{u}_1^T$ を用いて，$\boldsymbol{A}_1$ を改めて

$$
\boldsymbol{A}_1 \Leftarrow \boldsymbol{A}_1 - \underline{l}_1\underline{u}_1^T \tag{10}
$$

とすることで，

$$
\boldsymbol{A}_1 = \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{U}_1 \tag{11}
$$

と書くことができる．$(N-1)\times(N-1)$ 行列 $\boldsymbol{A}_1$，$\boldsymbol{L}_1$，$\boldsymbol{U}_1$ を用いて同様の操作を繰り返すことで，LU 分解が完結する．

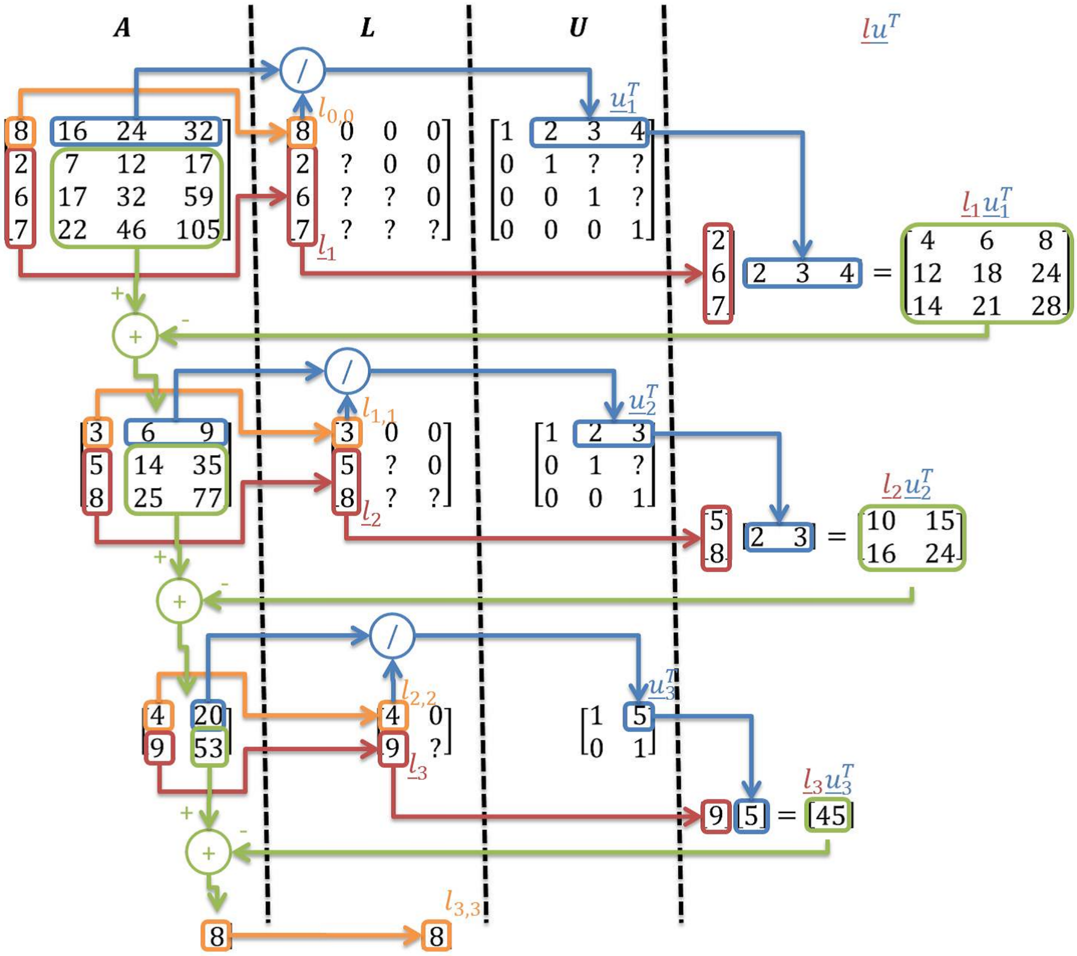

図 1: LU 分解の過程

2.1 例

式 (1) の方程式を解く具体的な例として

$$
\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 8 & 16 & 24 & 32 \\ 2 & 7 & 12 & 17 \\ 6 & 17 & 32 & 59 \\ 7 & 22 & 46 & 105 \end{bmatrix} \tag{12}
$$

を LU 分解する過程を図 1 に示す.

最終的に

$$
\underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 16 & 24 & 32 \\ 2 & 7 & 12 & 17 \\ 6 & 17 & 32 & 59 \\ 7 & 22 & 46 & 105 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 0 & 0 \\ 6 & 5 & 4 & 0 \\ 7 & 8 & 9 & 8 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{U}} \tag{13}
$$

のように LU 分解できる.

2.2　LU 分解を用いた連立方程式の解法

式 (5) を式 (3) に代入することで

$$\boldsymbol{LU}\underline{x} = \underline{b} \tag{14}$$

と書くことができる．ここで，$\underline{y} = \boldsymbol{U}\underline{x}$ と置くと，

$$\begin{cases} \boldsymbol{L}\underline{y} &= \underline{b} \\ \boldsymbol{U}\underline{x} &= \underline{y} \end{cases} \tag{15}$$

の 2 つの連立方程式を解けば良いことになる．この 2 つの連立方程式は簡単に解くことができる．

まず，$\boldsymbol{L}\underline{y} = \underline{b}$ を解いて，$\underline{y}$ を求める．この第 1 の方程式 $\boldsymbol{L}\underline{y} = \underline{b}$ は

$$\underbrace{\begin{bmatrix} l_{0,0} & & & \text{\Large 0} \\ l_{1,0} & l_{1,1} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{N-1,0} & l_{N-1,1} & \cdots & l_{N-1,N-1} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}} \underbrace{\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_{N-1} \end{bmatrix}}_{\underline{y}} = \underbrace{\begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{N-1} \end{bmatrix}}_{\underline{b}} \tag{16}$$

と書けるので，$\underline{y}$ の各成分は

$$\begin{cases} l_{0,0}y_0 &= b_0 &\rightarrow y_0 &= b_0/l_{0,0} \\ l_{1,0}y_0 + l_{1,1}y_1 &= b_1 &\rightarrow y_1 &= (b_1 - l_{1,0}y_0)/l_{1,1} \\ &\vdots & &\vdots \\ \displaystyle\sum_{k=0}^{i-1} l_{i,k}y_k + l_{i,i}y_i &= b_i &\rightarrow y_i &= \left(b_i - \displaystyle\sum_{k=0}^{i-1} l_{i,k}y_k\right)/l_{i,i} \\ &\vdots & &\vdots \\ \displaystyle\sum_{k=0}^{N-2} l_{N-1,k}y_k + l_{N-1,N-1}y_{N-1} &= b_{N-1} &\rightarrow y_{N-1} &= \left(b_{N-1} - \displaystyle\sum_{k=0}^{N-2} l_{N-1,k}y_k\right)/l_{N-1,N-1} \end{cases} \tag{17}$$

と書くことができる．すなわち，$y_0 \rightarrow y_1 \rightarrow \cdots \rightarrow y_{N-1}$ の順に計算することで，容易に $\underline{y}$ を求めることができる．

次に，求めた $\underline{y}$ を用いて第 2 の方程式 $\boldsymbol{U}\underline{x} = \underline{y}$ を解いて $\underline{x}$ を求める．第 2 の方程式 $\boldsymbol{U}\underline{x} = \underline{y}$ は

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & u_{0,1} & \cdots & u_{0,N-1} \\ & 1 & \cdots & u_{1,N-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ \text{\Large 0} & & & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{U}} \underbrace{\begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{N-1} \end{bmatrix}}_{\underline{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_{N-1} \end{bmatrix}}_{\underline{y}} \tag{18}$$

と書けるので，$\boldsymbol{U}$ の対角成分は全て 1 であることに注意すると，$\underline{x}$ の各成分は

$$\begin{cases} x_{N-1} &= y_{N-1} &\rightarrow x_{N-1} &= y_{N-1} \\ x_{N-2} + u_{N-2}x_{N-1} &= y_{N-2} &\rightarrow x_{N-2} &= y_{N-2} - u_{N-2,N-1}x_{N-1} \\ &\vdots & &\vdots \\ x_i + \displaystyle\sum_{k=i+1}^{N-1} u_{i,k}x_k &= y_i &\rightarrow x_i &= y_i - \displaystyle\sum_{k=i+1}^{N-1} u_{i,k}x_k \\ &\vdots & &\vdots \\ x_0 + \displaystyle\sum_{k=1}^{N-1} u_{0,k}x_k &= y_0 &\rightarrow x_0 &= y_0 - \displaystyle\sum_{k=1}^{N-1} u_{0,k}x_k \end{cases} \tag{19}$$

と書くことができる．すなわち，$x_{N-1} \rightarrow x_{N-2} \rightarrow \cdots \rightarrow x_0$ の順で計算することで，容易に $\underline{x}$ を求めることができる．

3　LU 分解と行列式の関係

行列 $\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{U}$ は同じ次数の正方行列であるので，

$$|\boldsymbol{A}| = |\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}| = |\boldsymbol{L}||\boldsymbol{U}| \tag{20}$$

が成立する．更に，余因子展開を用いると三角行列 $\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{U}$ の行列式は

$$\begin{cases} |\boldsymbol{L}| &= \displaystyle\prod_{k=0}^{N-1} l_{k,k} \\ |\boldsymbol{U}| &= \displaystyle\prod_{k=0}^{N-1} 1 = 1 \end{cases} \tag{21}$$

であるので，結局，行列式 $|\boldsymbol{A}|$ は

$$|\boldsymbol{A}| = \prod_{k=0}^{N-1} l_{k,k} \tag{22}$$

となる．