1　問題提起

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

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

この連立方程式は

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

と置くことで

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

なる恒等式と等価になる．ここで，$\boldsymbol{A}$ を「係数行列」，$\boldsymbol{x}$ を「変数ベクトル」，$\boldsymbol{b}$ を「右辺ベクトル」と呼ぶ．

2　LU 分解

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，$N \times N$ の対角成分より右上の要素が全て 0 である下三角行列 $\boldsymbol{L}$ と，$N \times N$ の対角成分が全て 1 で対角成分より左下の要素が全て 0 の上三角行列を

$$
\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} l_{0,0} & & & \text{\huge 0} \\ l_{1,0} & l_{1,1} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{N-1,0} & l_{N-1,1} & \cdots & l_{N-1,N-1} \end{bmatrix}, \boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} 1 & u_{0,1} & \cdots & u_{0,N-1} \\ & 1 & \cdots & u_{1,N-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ \text{\huge 0} & & & 1 \end{bmatrix}
\tag{4}
$$

とする時，$N \times N$ の正方行列

$$
\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_{0,0} & a_{0,1} & \cdots & a_{0,N-1} \\ a_{1,0} & a_{1,1} & \cdots & a_{1,N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N-1,0} & a_{N-1,1} & \cdots & a_{N-1,N-1} \end{bmatrix}
\tag{5}
$$

を，

$$
\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}
\tag{6}
$$

の形に分解することである．

式 (6) は

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

のように書き直す事ができる．ここで，

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

とし，$\boldsymbol{0}_{N-1}$ は要素数 $N-1$ の全零縦ベクトルを表す．また，$\cdot^T$ は転置を意味する．

式 (7) の恒等関係から

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

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 $\boldsymbol{l}_1$ が直ちに確定する．次に，確定した $l_{0,0}$ を用いて，第 3 式から $\boldsymbol{u}_1^T$ が確定する．これらにより定まった $\boldsymbol{l}_1$ と $\boldsymbol{u}_1^T$ を用いて，$\boldsymbol{A}_1$ を改めて

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

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．$\boldsymbol{A}_1$，$\boldsymbol{L}_1$，$\boldsymbol{U}_1$ は $(N-1)\times(N-1)$ 行列であり，式 (6) と同型であるので，同様の処理を繰り返すことで，LU 分解を完結できる．

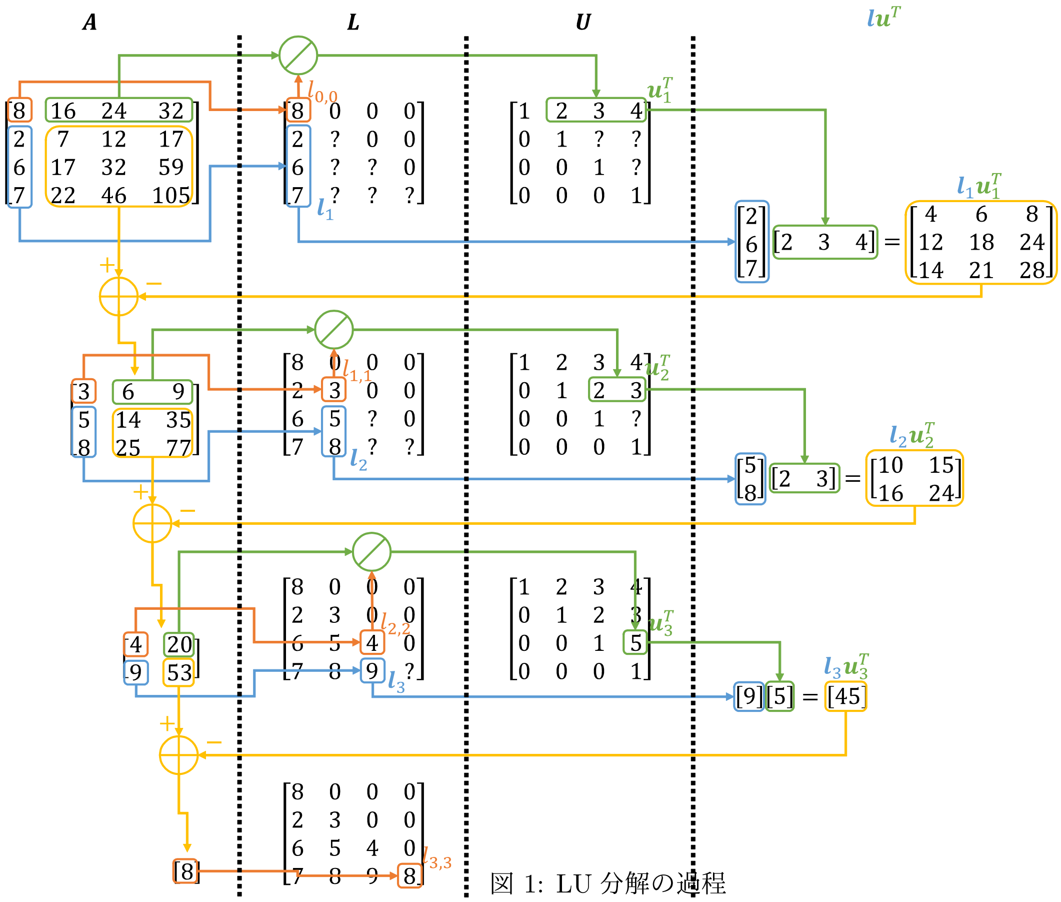

図 1: LU 分解の過程

2.1 例

式 (1) の連立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 2.1 に示す．最終的に

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

2.2 LU 分解と行列式の関係

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

$$
|\boldsymbol{A}| = |\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}| = |\boldsymbol{L}||\boldsymbol{U}| \tag{14}
$$

が成立する．更に，余因子展開を用いると，$\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{U}$ が共に三角行列であることに注意すると，

$$\begin{cases} |\boldsymbol{L}| & = & \prod_{k=0}^{N-1} l_{k,k} \\ |\boldsymbol{U}| & = & \prod_{k=0}^{N-1} 1 = 1 \end{cases} \tag{15}$$

であるので，結局，

$$|\boldsymbol{A}| = \prod_{k=0}^{N-1} l_{k,k} \tag{16}$$

となる．

式 (12) の例では

$$|\boldsymbol{A}| = 8 \times 3 \times 4 \times 8 = 768 \tag{17}$$

となる．

3　LU 分解を用いた連立方程式の解法

式 (6) を式 (3) に代入することで，

$$\boldsymbol{LUx} = \boldsymbol{b} \tag{18}$$

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

$$\begin{cases} \boldsymbol{Ly} & = & \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{Ux} & = & \boldsymbol{y} \end{cases} \tag{19}$$

の 2 つの連立方程式を解けば良い事になる．このそれぞれの連立方程式は簡単に解くことができる．

まず，$\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b}$ を解いて，$\boldsymbol{y}$ を求める．この連立方程式は

$$\underbrace{\begin{bmatrix} l_{0,0} & & & \text{\Large 0} \\ l_{1,0} & l_{1,1} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{N-1,0} & l_{N-1,1} & \cdots & l_{N-1,N-1} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{L}} \underbrace{\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_{N-1} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{y}} = \underbrace{\begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{N-1} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{b}} \tag{20}$$

と書けるので，$\boldsymbol{y}$ の各成分は

$$\begin{cases} l_{0,0}y_0 & = & b_0 & \to & y_0 & = & b_0/l_{0,0} \\ l_{1,0}y_0 + l_{1,1}y_1 & = & b_1 & \to & y_1 & = & (b_1 - l_{1,0}y_0)/l_{1,1} \\ & & & \vdots & & & \\ \sum_{k=0}^{i-1} l_{i,k}y_k + l_{i,i}y_i & = & b_i & \to & y_i & = & \left(b_i - \sum_{k=0}^{i-1} l_{i,k}y_k\right)/l_{i,i} \\ & & & \vdots & & & \\ \sum_{k=0}^{N-2} l_{N-1,k}y_k + l_{N-1,N-1}y_{N-1} & = & b_{N-1} & \to & y_{N-1} & = & \left(b_{N-1} - \sum_{k=0}^{N-2} l_{N-1,k}y_k\right)/l_{N-1,N-1} \end{cases} \tag{21}$$

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

次に，求めた $\boldsymbol{y}$ を用いて，$\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$ を解いて，$\boldsymbol{x}$ を求める．この連立方程式は

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & u_{0,1} & \cdots & u_{0,N-1} \\ & 1 & \cdots & u_{1,N-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ \text{\Large 0} & & & 1 \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{U}} \underbrace{\begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{N-1} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \cdots \\ y_{N-1} \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{y}} \tag{22}$$

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，$\boldsymbol{x}$ の各成分は

$$\left\{\begin{array}{lclcl} x_{N-1} & = & y_{N-1} & \rightarrow & x_{N-1} & = & y_{N-1} \\ x_{N-2}+u_{N-2,N-1}x_{N-1} & = & y_{N-2} & \rightarrow & x_{N-2} & = & y_{N-2}-u_{N-2,N-1}x_{N-1} \\ & & & \vdots & & & \\ x_i+\sum_{k=i+1}^{N-1}u_{i,k}x_k & = & y_i & \rightarrow & x_i & = & y_i-\sum_{k=i+1}^{N-1}u_{i,k}x_k \\ & & & \vdots & & & \\ x_0+\sum_{k=1}^{N-1}u_{0,k}x_k & = & y_0 & \rightarrow & x_0 & = & y_0-\sum_{k=1}^{N-1}u_{0,k}x_k \end{array}\right. \tag{23}$$

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 $\boldsymbol{x}$ を求めることができる．

3.1 例

式 (13) の LU 分解の結果と式 (2) から $\boldsymbol{y}$ は

$$\begin{aligned} \overbrace{\begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 0 & 0 \\ 6 & 5 & 4 & 0 \\ 7 & 8 & 9 & 8 \end{bmatrix}}^{\boldsymbol{L}} \overbrace{\begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}}^{\boldsymbol{y}} &= \overbrace{\begin{bmatrix} 160 \\ 70 \\ 198 \\ 291 \end{bmatrix}}^{\boldsymbol{b}} \\ \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 160/8 \\ (70-2y_0)/3 \\ (198-6y_0-5y_1)/4 \\ (291-7y_0-8y_1-9y_2)/8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 20 \\ 10 \\ 7 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{24}$$

となる．更に，式 (13) の LU 分解の結果と $\boldsymbol{y}$ の計算結果を用いると，$\boldsymbol{x}$ は

$$\begin{aligned} \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}^{\boldsymbol{U}} \overbrace{\begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}}^{\boldsymbol{x}} &= \overbrace{\begin{bmatrix} 20 \\ 10 \\ 7 \\ 1 \end{bmatrix}}^{\boldsymbol{y}} \\ \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 20-2x_1-3x_2-4x_3 \\ 10-2x_2-3x_3 \\ 7-5x_3 \\ 1/1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{25}$$

となる．