数値計算（I類2年・火曜3限）
連立一次方程式に対するLU分解による解法

（担当）緒方秀教　(e-mail)ogata@im.uec.ac.jp

2018年11月13日（火）

1　Gaussの消去法

次の連立一次方程式を考える．

$$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b},\quad \text{ここで，}\quad A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix},\quad \boldsymbol{x}=\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}. \tag{1}$$

連立一次方程式 (1) に対する Gauss の消去法は次の通りである[1]．

$*$ $a_{ij}^{(1)}=a_{ij}, A^{(1)}=A$ とおく．

$$
\begin{array}{l}
k=1,2,\ldots,n-1 \text{ に対して} \\
\left[\begin{array}{l}
i=k+1,k+2,\ldots,n \text{ に対して} \\
\left[\begin{array}{l}
m_{ik}=a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}; \\
j=k+1,k+2,\ldots,n \text{ に対して} \\
\left[a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-m_{ik}a_{kj}^{(k)}; \right. \\
b_i^{(k+1)}=b_i^{(k)}-m_{ik}b_k^{(k)};
\end{array}\right.
\end{array}\right.
\end{array}
$$

課題 1

Gauss 消去法 C ソースプログラム gauss_ elim.c を入手・コンパイルして，実行せよ
C プログラムは緒方のホームページから入手すること（http://www.uec-ogata-lab.jp/→「教育ページ」→「(授業）数値計算（2018 年度)」→「11 月 13 日（火）: プログラミング演習 1 ：連立一次方程式の数値解法」とアクセス）．ただし，セキュリティの理由から ZIP 圧縮してあるので，解凍して用いること．

[1] 下記の C プログラム gauss_elim.c では，行列 $(a_{ij}^{(1)}),(a_{ij}^{(2)}),\ldots$ 各々に 2 次元配列を割り当てることはせずに，一つの配列 a[i][j] に行列 $(a_{ij}^{(k)})$ $(k=1,2,\ldots)$ を上書きしている．同様に，ベクトル $(b_i^{(k)})$ $(k=1,2,\ldots)$ は配列 b[i] に上書きしている．

2　LU 分解

Gauss の消去法から行列 A に対する掃き出し演算のみ取り出せば，LU 分解が得られる．すなわち，

$$
\begin{array}{l}
k = 1, 2, \ldots, n-1 \text{ に対して} \\
\left[\begin{array}{l}
i = k+1, k+2, \ldots, n \text{ に対して} \\
\left[\begin{array}{l}
m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}; \\
j = k+1, k+2, \ldots, n \text{ に対して} \\
\left[a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}; \right.
\end{array}\right.
\end{array}\right.
\end{array}
$$

$$\Downarrow$$

$$
A = LU, \quad L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}.
$$

連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解くには，方程式を

$$
LU\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \quad \text{すなわち,} \quad \begin{cases} L\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \\ U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \end{cases}
$$

と書き直し，$\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}$ をそれぞれ前進代入，後退代入で求める．すなわち，

$$
y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} m_{ij} y_j \quad (\, j = 1, 2, \ldots, n\,),
$$

$$
x_i = \frac{1}{a_{ii}^{(i)}} \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j \right) \quad (\, i = n, n-1, \ldots, 1\,).
$$

課題 2

行列 A を各自自由に選んで，課題 1 で用いた C プログラム `gauss_elim.c` を書き直して，行列 A に対する LU 分解のプログラムを作成し実行せよ．そして，LU 分解が正しく行われていることを確認せよ（積 LU が行列 A に一致することを確かめる）．
さらに，ベクトル $\boldsymbol{b}$ を各自自由に選んで，連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を LU 分解により解くプログラムを作成し実行せよ．

3　枢軸選択付き LU 分解

LU 分解は，途中で「枢軸要素」$a_{kk}^{(k)}$ が 0 になると計算ができなくなる．また，$a_{kk}^{(k)} \neq 0$ であっても 0 に非常に近い値ならば，計算の精度が悪くなる．そのため，掃き出し演算ごとに行の入れ替えを行って，枢軸要素がある程度の大きさになるようにする．

行の入れ替えをするには，インデックスベクトル $\boldsymbol{p} = (p(1), \dots, p(n))^T$ を用意して，行の入れ替えの情報を $\boldsymbol{p}$ に書き込むようにする．

$$
\begin{array}{l}
\boldsymbol{p} = (1, 2, \dots, n)^T \text{とおく;} \\
k = 1, 2, \dots, n-1 \text{ に対し} \\
\left[\begin{array}{l}
|a^{(k)}_{p(I)k}| = \displaystyle\max_{k \leqq i \leqq n} |a_{p(i)k}| \text{ なる添字 } I \text{ を見つける;} \\
p(k) \text{ と } p(I) \text{ の値を入れ替える;} \\
i = k+1, k+2, \dots, n \text{ に対して} \\
\left[\begin{array}{l}
m_{p(i)k} = a^{(k)}_{p(i)k} / a^{(k)}_{p(k)k}; \\
j = k+1, k+2, \dots, n \text{ に対して} \\
\left[a^{(k+1)}_{p(i)j} = a^{(k)}_{p(i)j} - m_{p(i)k} a^{(k)}_{p(k)j}; \right.
\end{array}\right.
\end{array}\right.
\end{array}
$$

結果として次の LU 分解を得る．

$$
PA = LU,
$$

$$
P \text{ は行の入れ替えを表す置換行列,}
$$

$$
L = \begin{pmatrix}
1 & & & \\
m_{p(2)1} & 1 & & \\
m_{p(3)1} & m_{p(3)2} & & \\
\vdots & \vdots & \ddots & \\
m_{p(n)1} & m_{p(n)2} & \cdots & 1
\end{pmatrix}, \quad
U = \begin{pmatrix}
a^{(1)}_{p(1)1} & a^{(1)}_{p(1)2} & \cdots & a^{(1)}_{p(1)n} \\
 & a^{(2)}_{p(2)2} & \cdots & a^{(2)}_{p(2)n} \\
 & & \ddots & \vdots \\
 & & & a^{(n)}_{p(n)n}
\end{pmatrix}.
$$

したがって，連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ は

$$
LU\boldsymbol{x} = P\boldsymbol{b} = (b_{p(1)}, b_{p(2)}, \dots, b_{p(n)})^T, \quad \text{すなわち,} \quad \begin{cases} L\boldsymbol{y} = P\boldsymbol{b} \\ U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \end{cases}
$$

に帰着される．

課題 3

行列 A を各自自由に選んで，行列 A に対する枢軸選択付き LU 分解のプログラムを作成し実行せよ．
さらに，ベクトル $\boldsymbol{b}$ を各自自由に選んで，連立一次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を枢軸選択付き LU 分解により解くプログラムを作成し実行せよ．