

# 連立一次方程式の数值解法 1

## LU分解

### 連立一次方程式

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

or

$$Ax = b \quad \left[ A = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}, x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \right]$$

Gauss, 消去法 ( $A_1 = (a_{ij}^{(1)}) = A, b_1 = (b_i^{(1)}) = b$ )

$k = 1, 2, \dots, m-1$  with

$i = k+1, \dots, m$  with

$$\begin{cases} m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}; \\ j = k+1, \dots, m \text{ with } \\ \left[ \begin{aligned} a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}; \\ b_i^{(k+1)} &= b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} \end{aligned} \right. \end{cases}$$

\*  $a_{kk}^{(k)} \neq 0$  ( $k=1, 2, \dots, m-1$ )  
と仮定する。

$$\downarrow$$

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(2)} & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}^{(m)} & & & a_{mn}^{(m)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_m^{(m)} \end{bmatrix}$$

→ 後述の代入法  
の解を求めらる。

§3.3.1 A を対角化するための操作を繰り返す。

$k = 1, 2, \dots, n-1$  に対して

$$M_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & -\underbrace{m_{n,k}}_k & & & 1 \end{bmatrix};$$

$$A_{k+1} = M_k A_k;$$

$M_k = I - e_k m_k,$   
 $e_k = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} (k), \quad m_k = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ m_{k+1,k} \\ \vdots \\ m_{n,k} \end{bmatrix}$  }  $k \geq 1$   $\left( \begin{array}{l} (I - m_k e_k^T)^{-1} = I + m_k e_k^T \\ \therefore (I - m_k e_k^T)(I + m_k e_k^T) \\ = I + \underbrace{m_k (e_k^T m_k)}_0 e_k^T \\ = I. \end{array} \right)$

とすると、

$$A_{k+1} = (I - m_k e_k^T) A_k,$$

$$A_k = (I - m_k e_k^T)^{-1} A_{k+1} = (I + m_k e_k^T) A_{k+1}.$$

$$A = A_1 = (I + m_1 e_1^T) A_2$$

$$= (I + m_1 e_1^T) (I + m_2 e_2^T) A_3$$

$$= \dots$$

$$= (I + m_1 e_1^T) \dots (I + m_{n-1} e_{n-1}^T) A_n \quad \left( \begin{array}{l} e_1^T m_2 = 0 \\ \vdots \\ \text{互いに直交} \end{array} \right)$$

$$= (I + m_1 e_1^T + m_2 e_2^T + \dots + m_{n-1} e_{n-1}^T) A_n$$

$$= \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & \dots & m_{n-1,n-1} & 1 \end{bmatrix}}_{\text{下三角行列}} \underbrace{\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ & & a_{33}^{(3)} & \dots & a_{3n}^{(3)} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix}}_{\text{上三角行列}}$$

下三角行列 (lower triangular matrix)      上三角行列 (upper triangular matrix)



## 部分転軸選択付きLU分解

LU分解 ... 途中  $a_{kk}^{(k)} = 0$  2nd 2nd 計算  $\rightarrow$  2nd 2nd  
 $a_{kk}^{(k)} \approx 0$  2nd 2nd 精度  $\rightarrow$  悪  $\rightarrow$  2nd 2nd.

↓  
 [ 各  $k$  段階  $\sim |a_{ik}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}|$  2nd 添字  $I (= I_k)$  2nd 2nd  
 第  $k$  行  $\sim$  第  $I$  行  $\rightarrow$  入れ替る ]

... 部分転軸選択 (partial pivoting)

(  $(k, k)$  ... 転軸,  $a_{kk}^{(k)}$  ... 転軸要素 )

$$\tilde{A}_1 = (\tilde{a}_{ij}^{(1)}) = P_1 A_1, \quad P_1 = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \dots & 0 \end{bmatrix}_{(I_1)}^{(1)} \quad (|a_{I_1 1}| = \max_{1 \leq i \leq n} |a_{i1}|)$$

$$m_{i1} = \frac{\tilde{a}_{i1}^{(1)}}{\tilde{a}_{I_1 1}^{(1)}} \quad (i = 2, \dots, n),$$

$$a_{ij}^{(2)} = \tilde{a}_{ij}^{(1)} - m_{i1} \tilde{a}_{I_1 j}^{(1)} \quad (i, j = 2, \dots, n),$$

$$A_2 = (a_{ij}^{(2)}) = (I - m_1 e_1^T) P_1 A_1 \quad (m_1 = [0, m_{21}, \dots, m_{n1}]^T),$$

$$\tilde{A}_2 = (\tilde{a}_{ij}^{(2)}) = P_2 A_2, \quad P_2 = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 0 & \dots & 1 \\ & \vdots & \ddots & \vdots \\ & 1 & \dots & 0 \end{bmatrix}_{(I_2)}^{(2)} \quad (|a_{I_2 2}^{(2)}| = \max_{2 \leq i \leq n} |a_{i2}^{(2)}|).$$

$$\tilde{m}_{i2} = \frac{\tilde{a}_{i2}^{(2)}}{\tilde{a}_{I_2 2}^{(2)}} \quad (i = 3, \dots, n),$$

$$a_{ij}^{(3)} = \tilde{a}_{ij}^{(2)} - \tilde{m}_{i2} \tilde{a}_{I_2 j}^{(2)} \quad (i, j = 3, \dots, n),$$

$$A_3 = (a_{ij}^{(3)}) = (I - m_2 e_2^T) P_2 A_2 \quad (m_2 = [0, 0, m_{32}, \dots, m_{n2}]^T),$$

...

$$A_m = (I - m_{m-1} e_{m-1}^T) P_{m-1} (I - m_{n-2} e_{n-2}^T) P_{n-2} \dots$$

$$(LU分解) \dots P_j (I - m_2 e_2^T) P_2 (I - m_1 e_1^T) P_1 A$$

$$\begin{aligned}
 &= (I - m_{n-1} e_{n-1}^T) P_{n-1} \cdots P_3 (I - m_2 e_2^T) (I - P_2 m_1 e_1^T) P_2 P_1 A \\
 &\quad \left[ e_1^T P_2 = e_2^T \text{ w.l.t. } e_1 \right] \\
 &= (I - m_{n-1} e_{n-1}^T) P_{n-1} \cdots (I - P_3 m_2 e_2^T) (I - P_3 P_2 m_1 e_1^T) P_3 P_2 P_1 A \\
 &\quad \dots \\
 &= (I - \tilde{m}_{n-1} e_{n-1}^T) \cdots (I - \tilde{m}_2 e_2^T) (I - \tilde{m}_1 e_1^T) P A,
 \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned}
 \tilde{m}_1 &= P_{n-1} \cdots P_3 P_2 m_1, \quad \tilde{m}_2 = P_{n-1} \cdots P_4 P_3 m_2, \quad \dots, \quad \tilde{m}_{n-2} = P_{n-1} m_{n-2}, \\
 \tilde{m}_{n-1} &= m_{n-1}, \quad P = P_{n-1} \cdots P_2 P_1.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 PA &= (I - \tilde{m}_1 e_1^T)^{-1} (I - \tilde{m}_2 e_2^T)^{-1} \cdots (I - \tilde{m}_{n-1} e_{n-1}^T)^{-1} A_n \\
 &= (I + \tilde{m}_1 e_1^T) (I + \tilde{m}_2 e_2^T) \cdots (I + \tilde{m}_{n-1} e_{n-1}^T) A_n \\
 &= (I + \tilde{m}_1 e_1^T + \tilde{m}_2 e_2^T + \cdots + \tilde{m}_{n-1} e_{n-1}^T) A_n
 \end{aligned}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \tilde{m}_{21} & 1 & & & \\ \tilde{m}_{31} & \tilde{m}_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ \tilde{m}_{n1} & \tilde{m}_{n2} & \dots & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_n \\ \text{(上三角行列)} \end{bmatrix}$$

$\therefore PA = LU$

部分主元選択時のLU分解

$P = P_{n-1} \cdots P_1$  置換行列

$L = \begin{bmatrix} l_{n1} & & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & \dots & l_{nn} \end{bmatrix}$  下三角行列,  $U = \begin{bmatrix} u_{11} & \dots & u_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & u_{nn} \end{bmatrix}$  上三角行列.

< 連立一次方程式の解 >

$$Ax = b \iff \begin{cases} Ly = Pb & \rightarrow \text{前進代入の解} \\ Ux = y & \rightarrow \text{後退代入の解} \end{cases}$$

# < 部分転軸選択付きLU分解の連立一次方程式の解法 >

行の入れ替えの記録  $\rightarrow$  行ベクトル  $p = [p(1), \dots, p(n)]^T$  とする.

最初  $p = [1, 2, \dots, n]^T$ .

各  $k$  段階で  $(p(k), p(I)) := (p(I), p(k))$  (入れ替え),

~ 算法 ~

$$p = [1, 2, \dots, n]^T;$$

$$k = 1, 2, \dots, n-1 \text{ に対して}$$

$$\left[ \begin{array}{l} |a_{p(I)k}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{p(i)k}^{(k)}| \text{ の添字 } I \text{ を見つける;} \\ (p(k), p(I)) := (p(I), p(k)); \\ i = k+1, \dots, n \text{ に対して} \\ \left[ \begin{array}{l} m_{p(k)i} = a_{p(i)k}^{(k)} / a_{p(k)k}^{(k)}; \\ j = k+1, \dots, n \text{ に対して} \\ [ a_{p(i)j}^{(k+1)} = a_{p(i)j}^{(k)} - m_{p(k)i} a_{p(k)j}^{(k)}; \end{array} \right. \end{array} \right. \text{LU分解}$$

$$\left( \text{したがって, } PA = LU, L = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ m_{p(2)1} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ m_{p(n)1} & \dots & & 1 \end{bmatrix}, U = \begin{bmatrix} a_{p(1)1}^{(1)} & \dots & a_{p(1)n}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & a_{p(n)n}^{(n)} \end{bmatrix} \text{ と得る.} \right)$$

$$i = 1, 2, \dots, n \text{ に対して}$$

$$\left[ y_i = b_{p(i)} - \sum_{j=1}^{i-1} m_{p(i)j} y_j \right]; \quad \dots L y_1 = P b \text{ と解く}$$

$$i = n, n-1, \dots, 1 \text{ に対して}$$

$$\left[ x_i = \frac{1}{a_{p(i)i}^{(i)}} \left( y_i - \sum_{j=i+1}^n m_{p(i)j} x_j \right) \right]; \quad \dots U x = y_1 \text{ と解く}$$

例33) ノルムと条件数の推定

例33)  $x = [x_1, \dots, x_m]^T$  のノルム

$$\|x\|_p \equiv \left( \sum_{i=1}^m |x_i|^p \right)^{1/p}, \quad \|x\|_\infty \equiv \max_{1 \leq i \leq m} |x_i|.$$

$p=2$  ... Euclid ノルム  
 $p=1, \infty$  の場合  $\Delta \subseteq \mathbb{R}^m$ .

例34)  $A = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1m} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mm} \end{bmatrix}$  のノルム

$$\|A\|_p \equiv \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p} = \sup_{\|x\|=1} \|Ax\|_p.$$

例34) (1)  $\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^m |a_{ij}|,$

(2)  $\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq m} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|.$

□

∴ (1)  $\|x\|_\infty = 1$  なる  $x$  あり

$$\begin{aligned} \|Ax\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq m} \left| \sum_{j=1}^m a_{ij} x_j \right| \\ &\leq \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^m |a_{ij}| |x_j| \\ &\leq \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^m |a_{ij}| \quad (\because |x_j| \leq \|x\|_\infty = 1). \end{aligned}$$

よって、 $\|A\|_\infty$  を attainment する  $x$  ( $\|x\|_\infty = 1$ ) は  $x_j = \text{sgn } a_{ij}$  である。

$$\sum_{j=1}^m |a_{ij}| = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^m |a_{ij}| \quad \text{この条件で } i \text{ を } i^* \text{ とする.}$$

$$x_j = \text{sgn } a_{i^*j} = \begin{cases} +1 & (a_{i^*j} > 0) \\ 0 & (a_{i^*j} = 0) \\ -1 & (a_{i^*j} < 0) \end{cases} \quad (j=1, \dots, m)$$

よって、 $\|x\|_\infty = 1$  である。

$$|Ax \text{ の } j \text{ 成分}| = \left| \sum_{i=1}^m a_{ij} x_i \right| = \sum_{i=1}^m |a_{ij} x_i|$$

$$\|Ax\|_\infty \geq \text{任意 } \|Ax\|_\infty \geq \sum_{i=1}^m |a_{ij}|$$

$$\therefore \|Ax\|_\infty = \sum_{i=1}^m |a_{ij}| = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}| \quad \text{やはり OK.}$$

(2)  $\|x\|_1 = 1$  なる  $x$  をとる

$$\begin{aligned} \|Ax\|_1 &= \sum_{i=1}^m \left| \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right| \\ &\leq \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}| |x_j| = \sum_{j=1}^n \left\{ \sum_{i=1}^m |a_{ij}| \right\} |x_j|. \end{aligned}$$

$$\sum_{i=1}^m |a_{ij}| = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}| \quad \text{この添字 } j \text{ をとる}$$

$$\|Ax\|_1 \leq \left\{ \sum_{i=1}^m |a_{ij}| \right\} \underbrace{\left\{ \sum_{j=1}^n |x_j| \right\}}_{\|x\|_1 = 1} = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|.$$

よって,  $k$  を  $x$  を attainment する  $x$  ( $\|x\|_1 = 1$ ) とする

$$x_j = \begin{cases} 1 & (j = J) \\ 0 & (j \neq J) \end{cases}$$

とすれば,  $\|x\|_1 = 1$  であり,

$$\|Ax\|_1 = \sum_{i=1}^m \left| \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right| = \sum_{i=1}^m |a_{iJ}| = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|$$

やはり OK.





< 行列の条件数 (condition number) >

$$\kappa_p(A) \equiv \|A\|_p \|A^{-1}\|_p.$$

$$\underbrace{\text{命題}} \left\{ \begin{array}{l} x : Ax = b \text{ の解} \\ x + \Delta x : (A + \Delta A)(x + \Delta x) = b + \Delta b \text{ の解} \end{array} \right.$$

↓

$$\frac{\|\Delta x\|_p}{\|x\|_p} \leq \frac{\kappa_p(A)}{1 - \kappa_p(A) \|\Delta A\|_p / \|A\|_p} \left( \frac{\|\Delta A\|_p}{\|A\|_p} + \frac{\|\Delta b\|_p}{\|b\|_p} \right) \quad \square$$

$$\underbrace{\frac{\|\Delta x\|_p}{\|x\|_p}}_{\text{出力の相対誤差}} \lesssim \kappa_p(A) \underbrace{\left( \frac{\|\Delta A\|_p}{\|A\|_p} + \frac{\|\Delta b\|_p}{\|b\|_p} \right)}_{\text{入力の相対誤差}}.$$

出力の相対誤差

入力の相対誤差

条件数  $\kappa_p(A)$  が大きいほど、 $A, b$  の成分の誤差が小さいと、解  $x$  の誤差が大きくなる。

$$\therefore \begin{cases} (A + \Delta A)(x + \Delta x) = b + \Delta b \\ Ax = b \end{cases}$$

$$A \Delta x = \Delta b - \Delta A(x + \Delta x),$$

$$\Delta x = A^{-1} \Delta b - A^{-1} \Delta A(x + \Delta x),$$

$$= A^{-1}(\Delta b - (\Delta A)x) - A^{-1}(\Delta A) \Delta x$$

$$\|\Delta x\| \leq \|A^{-1}\| (\|\Delta b\| + \|\Delta A\| \|x\|) + \|A^{-1}\| \|\Delta A\| \|\Delta x\|,$$

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A^{-1}\| (\|\Delta b\| + \|\Delta A\| \|x\|)}{1 - \|A^{-1}\| \|\Delta A\| \|x\|}$$

$$= \frac{\kappa(A) \left( \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \frac{1}{\|x\|} + \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \right)}{1 - \kappa(A) \|\Delta A\| / \|A\|}$$

$$\leq \frac{\kappa(A)}{1 - \kappa(A) \|\Delta A\| / \|A\|} \left( \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \right).$$

( $\|b\| = \|Ax\| \leq \|A\| \|x\|$  より  
 $\|x\|^{-1} \leq \|A\| \|b\|^{-1}$  なる)

## < 条件数、推定法 >

( 各取亮・塚本敦子: 行列の条件数の推定,  
京都大学数理解析研究所講究録 483(1983) 212-222, )

行列  $A$  の条件数  $\kappa_1(A)$  を推定する.

$$\kappa_1(A) = \underbrace{\|A\|_1}_{\text{計算が楽}} \underbrace{\|A^{-1}\|_1}_{\text{2次元問題のn次元問題}}$$

$$\|A^{-1}\|_1 = \|(A^{-1})^T\|_\infty = \|(A^T)^{-1}\|_\infty,$$

$$\|(A^T)^{-1}\|_\infty = \sup_{\|x\|_\infty=1} \|(A^T)^{-1}x\|_\infty$$

右辺は attain する  $x$  は  $[\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1]$  の形になる.

$$y_i = (A^T)^{-1}x \quad \text{と} \quad A^T y_i = x.$$

$$\therefore \|y_i\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} |y_i| \quad \text{が} \quad \|x\|_\infty = 1 \quad \text{のとき最大になる.}$$

$x = [\pm 1, \dots, \pm 1]$  の各成分の符号を決定する.

$A$  の回転選択行列  $L$  の LU 分解:  $PA = LU$ ,

$$\tilde{y}_i = P^T y_i \quad \text{と} \quad \|\tilde{y}_i\|_\infty = \|y_i\|_\infty \quad \text{であり,}$$

$$U^T L^T \tilde{y}_i = x.$$

回転選択行列  $L$  の LU 分解の性質から  $|L_{ij}| \leq 1$  であるから,

$$\|\tilde{y}_i\|_\infty \leq \|L^T \tilde{y}_i\|_\infty \quad \text{との逆は成り立たない.}$$

$$\downarrow$$

$$(\|y_i\|_\infty \text{ の代わりに}) \quad U^T z = x \quad \text{の解} \quad z \quad \text{を求め,} \quad \|z\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |z_i| \quad \text{が}$$

$$\quad (z = L^T \tilde{y}_i)$$

このとき最大になる  $z$  は  $x = [\pm 1, \dots, \pm 1]^T$  の各成分の符号を決定する.

$U^T z = \alpha$  の解

$$z_i = \frac{1}{u_{ii}} \left( \alpha_i - \sum_{j=1}^{i-1} u_{ji} z_j \right) \quad (i=1, \dots, n).$$

1)  $\alpha_1 = +1$  とおくと,  $z_1 = \frac{1}{u_{11}}$ .

2) 各  $i=2, \dots, n$  に対して,

$|z_i|$  をできるだけ小さく (なるべく)  $\alpha_i$  と  $-\sum_{j=1}^{i-1} u_{ji} z_j$  と  
同符号にする。

$$\begin{aligned} \alpha_i &= -\operatorname{sgn} \left( \sum_{j=1}^{i-1} u_{ji} z_j \right) \\ z_i &= \frac{1}{u_{ii}} \left( \alpha_i - \sum_{j=1}^{i-1} u_{ji} z_j \right) \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} \alpha_i &= -\operatorname{sgn} \left( \sum_{j=1}^{i-1} u_{ji} z_j \right) \\ z_i &= \frac{1}{u_{ii}} \left( \alpha_i - \sum_{j=1}^{i-1} u_{ji} z_j \right) } \right\} \quad (i=1, \dots, n).$$

3) 1) ~ 2) の解を  $z$  とおくと,

$$L^T y = z$$

を後述代々解を  $y$  と求める。

$$\|A^{-1}\|_1 = \|(A^T)^{-1}\|_\infty \approx \|y\|_\infty,$$

↓

$$\kappa_1(A) = \|A\|_1 \|A^{-1}\|_1.$$