数值解析第11回 LU分解法

1. 行列の階段化

正則正方行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ の階段化は(1)行の**交換**と(2)ある行の定数倍を下の行から引く**消去**を繰り返し、 上三角行列に変形する操作である。

上の図の実下線の行をピボット行、黒丸の要素をピボット要素と言う。

- ・消去: ピボット行を定数倍し、下の行から引き、ピボット要素の下の要素を0にする。 このとき、ピボット要素が零では不都合である。そこで、
- ・交換: ピボット要素が零のとき(②)、下の行と交換して非零にする(③).

2. LU分解

行列の階段化で、ピボット行の何倍が下の行から引かれたかと、交換を記録するとLU分解になる。

各行列の左にもう1行追加し、その行が元の行列の第何行かを記録している。薄い色の数字はその行が上の行の何倍を引かれてできたかを記録している。

例えば、最後の行列⑤の第4行は元の行列Aの第2行から、行列⑤の第1行の2倍、第2行の0倍、第3行の1倍が引かれてできたことを示す。即ち、

$$(0,0,0,1) = (2,4,4,7) - \frac{2}{2} \times (1,2,1,2) - \frac{0}{2} \times (0,1,2,1) - \frac{1}{2} \times (0,0,2,2)$$

と言う履歴が記録されている。これより、行列⑤の上三角部を $U=\begin{pmatrix}1&2&1&2\\&1&2&1\\&&2&2\\O&&1\end{pmatrix}$ と置くと、A の第2行は

$$(2,4,4,7) = \frac{2}{2} \times (1,2,1,2) + \frac{0}{2} \times (0,1,2,1) + \frac{1}{2} \times (0,0,2,2) + (0,0,0,1) = (2,0,1,1) \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 2 \\ O & 1 \end{pmatrix} = (2,0,1,1)U$$

で再現される。同様にして、 A の全ての行が再現され、 A の第2行と第4行を交換した行列が

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 3 & 3 \\ 2 & 5 & 6 & 7 \\ 2 & 4 & 4 & 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & O \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 2 \\ O & 1 \end{pmatrix} = LU, L = \begin{pmatrix} 1 & O \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

 \triangle L のように、対角成分が1の下三角行列を単位下三角行列という。

と表される.左辺は置換行列
$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 により, PA と表されるので,次の定理を得る.

[**定理**]正則正方行列 A は $A = P^{-1}LU$ と分解される。ここで, P は置換行列, L は単位下三角行列, U は上三角行列である。これを A のLU分解という。//

3. LU分解の計算量

授業資料 http://www.st.nanzan-u.ac.jp/info/sugiurah 質問メールなど sugiurah@nanzan-u.ac.jp

行の交換はOflopsなので、行交換のない場合で計算量を考えれば良い。

<行交換無しのLU分解アルゴリズム>配列 A に行列の成分が格納されている.

$$1 \ k = 1, 2, \dots, n-1 \ \mathcal{C},$$

$$2$$
 $i=k+1,k+2,\dots,n$ で, $(i$ 行を消去)

$$a_{ik} = a$$

$$a_{ij} = a_{ij} / a_{ij}$$

$$a_{ik} = a_{ik} / a_{kk}$$
, $(a_{ik} にピボット行に掛ける定数を保持)$

$$j = k+1, k+2, \dots, n$$
 \mathcal{C} ,

$$5$$
 a

$$a_{ij} = a_{ij} - a_{ik}a_{kj}$$
 (i 行 = i 行 - $a_{ik} \times k$ 行の計算)

Lの要素, Uの要素を配列Aの上に格納している。

★ LU分解の計算量 =
$$\sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=k+1}^{n} \left(1 + \sum_{j=k+1}^{n} 1\right) = \frac{1}{3} n^3 - \frac{1}{3} n = \frac{1}{3} n^3 + O(n^2)$$
 flops . //

4. LU分解法

 $A = P^{-1}LU$ とLU分解されていれば、線形方程式 Ax = b は次の手順で解ける.

<LU求解アルゴリズム> 計算量 n^2 flops

(1) 要素の置換:
$$c = Pb$$
 0 flops

(2) 前進代入 :
$$d = L^{-1}c$$
 $\frac{1}{2}n(n-1)$ flops

$$\frac{1}{2}n(n-1)$$
 flops

(2) 後退代入 :
$$x = U^{-1}d$$
 $\frac{1}{2}n(n+1)$ flops

$$\frac{1}{2}n(n+1)$$
 flops

結局線形方程式 Ax = b は次の手順で解ける.

<LU分解法>

(1) LU分解:
$$A = P^{-1}LU$$
 $\frac{1}{3}n^3 + O(n^2)$ flops

$$\frac{1}{2}n^3 + O(n^2)$$
 flops

(2) LU求解:
$$\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$$
 n^2 flops

$$n^2$$
 flops

注意: A を一度LU分解しておけば、右辺の異なる方程式がLU求解(n^2 flops)だけで解ける。

練習問題

 $n \times n$ 方程式 $A^2 x = b$ の効率的な解法を考えよ.