数値計算講義ノート4
連立一次方程式の数値解法

大石進一

April 28, 2003

§1 線形代数からの復習

つぎの記号を用いる。

- A, B など大文字は行列を表す。
- x, y などの小文字はベクトルを表す。
- スカラーは α, β などで表す。

つぎは線形代数の基本定理の一つである (これが理解されていると線形代数はわかっていると思ってよい)

定理１　次の命題は同値である：

1. $n \times n$ 行列 A は正則 (A^{-1} が存在する)
2. $\det A \neq 0$
3. $Ax = 0$ は唯一解 $x = 0$ をもつ
4. $Ax = b$ は全ての b について解をもつ。
5. A のランク (線形独立な行の数) は n。

- 行列Aは$A^T = A$のとき対称(symmetric)と呼ばれる。

- 対称な行列Aが全てのベクトル$x \neq 0$に対して

$$x^T A x > 0 \tag{1}$$

  を満たすとき、正値対称(positive definite)と呼ばれる。

§2 三角行列

- $n \times n$ 行列 U が上三角行列であるとは、$U = (\alpha_{ij})$ とするとき $i > j$ なら $\alpha_{ij} = 0$ となることをいう。

- $n \times n$ 行列 L が下三角行列であるとは、$L = (\beta_{ij})$ とするとき $i < j$ なら $\beta_{ij} = 0$ となることをいう。

$n \times n$ 行列 U を上三角行列として

$$Ux = b \tag{2}$$

を解くことを考える。

解は$i = n, n-1, \cdots, 1$の順に解いていくとして

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j}{u_{ii}} \tag{3}$$

で与えられる。

アルゴリズム(後退代入のアルゴリズム) として書くと

```
x[n] = b[n] / u[n][n];
for(i=n-1;i>0;i--) {
   s = b[i];
   for(j=i+1;j<=n;j++) {
      s = s - u[i][j] * x[j];
   }
   x[i] = s / u[i][i];
}
```

となる。

注意

1. 三角行列方程式の解法は数値計算において大変重要である。多くのアルゴリズムは三角行列方程式の求解へ問題を帰着させるように設計されている。

2. 次の結果が知られている：Tを上三角行列または下三角行列とする。浮動小数点演算で後退代入で$Tx = b$を解いた数値解を$\overline{x}$とすると

$$(T + \Delta T)\overline{x} = b, \quad |\Delta T| \leq \gamma_n |T| \tag{4}$$

が成り立つ。ただし、

$$\gamma_n = \frac{n\epsilon}{1 - n\epsilon} \tag{5}$$

でϵはマシンエプシロンと呼ばれる定数である。doubleのときは$\epsilon = 2^{-53}$である。

§3 LU分解法

$n \times n$ 行列 A を PLU と３つの行列の積に分解する。

- P は置換行列である。
- L は対角成分が１である下三角行列。
- U は上三角行列である。

$$Ax = b \tag{6}$$

を

$$PLUx = b \tag{7}$$

として変形して解く。

1．右辺ベクトルの置換

$$Ax = b \quad \Longrightarrow \quad PLUx = b \Longrightarrow \quad LUx = P^{-1}b \quad \Longrightarrow LUx = P^{T}b$$

2．前進消去

$$\Longrightarrow \quad Ux = L^{-1}P^{T}b$$

3．後退代入

$$\Longrightarrow \quad x = U^{-1}(L^{-1}P^{T}b)$$

という解法プロセスである。ただし、$y = L^{-1}(P^{T}b)$ や $U^{-1}y$ は三角行列方程式の代入解法で求める。

§4 ガウスの消去法によりLU分解を求める(ピボットなし)

行列の基本変形(解を変えない変形)により$n \times n$行列Aを上三角行列にする。

消去法の出発点

```
for i=1 to n-1
   for j=i+1 to n
      for k=i to n
         A(j,k) = A(j,k) - (A(j,i)/A(i,i)) * A(i,k);
```

内側のループから A(j,i)/A(i,i) を外へ出す

```
for i=1 to n-1
   for j=i+1 to n
      m = (A(j,i)/A(i,i));
      for k=i to n
         A(j,k) = A(j,k) - m * A(i,k);
```

計算しなくてすむ部分をはずす

```
for i=1 to n-1
   for j=i+1 to n
      m = (A(j,i)/A(i,i));
      for k=i+1 to n
         A(j,k) = A(j,k) - m * A(i,k);
```

Ｌも計算する

```
for i=1 to n-1
   for j=i+1 to n
      A(j,i) = (A(j,i)/A(i,i));
      for k=i+1 to n
         A(j,k) = A(j,k) - A(j,i) * A(i,k);
```

行列計算の形に書き直すと

```
for i=1 to n-1
   A(i+1:n,i)=A(i+1:n,i)/A(i,i);
   A(i+1:n,i+1:n)=A(i+1:n,i+1:n)-A(i+1:n,i)*A(i,i+1:n);
```

定理 ２　計算された後、上書きされたＡの狭義下三角部分を M として $L = I + M$、上三角部分を U とする。計算が最後まで実行されたとき (ゼロで割ることが起きなかったとき)、

$$A = LU \tag{8}$$

となる。