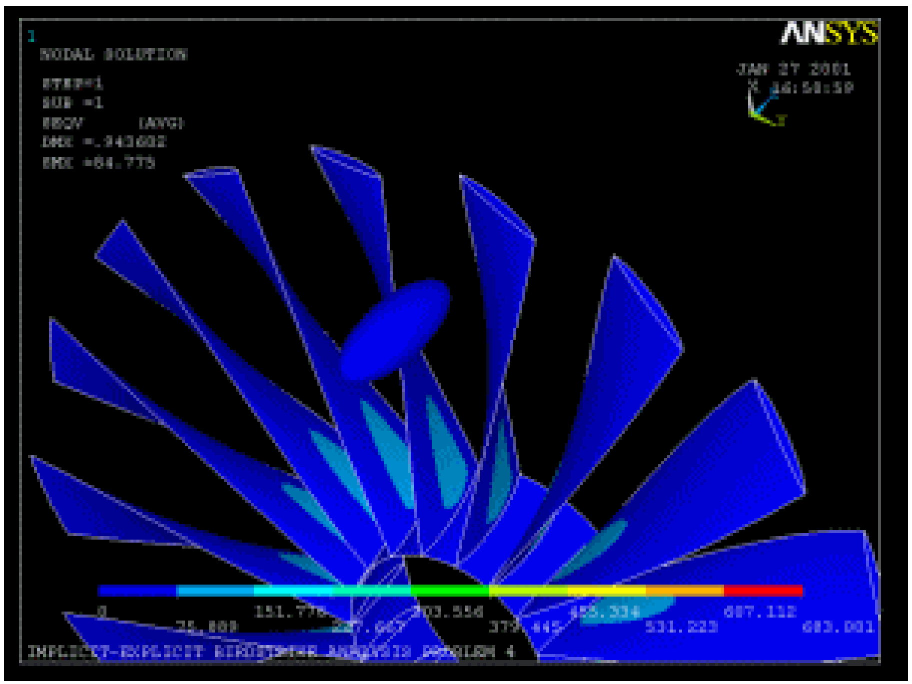
数値解析

2022年度前期　第11週 [6月30日]



静岡大学
創造科学技術大学院
情報科学専攻
工学部機械工学科
計測情報講座

三浦 憲二郎

講義アウトライン [6月30日]

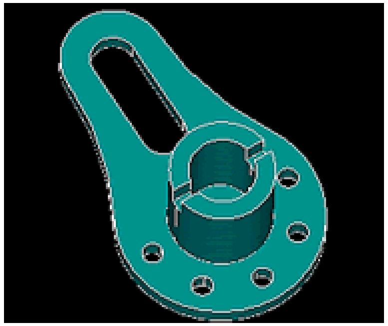
- 連立1次方程式の直接解法
  - 復習
    - ガウス消去法

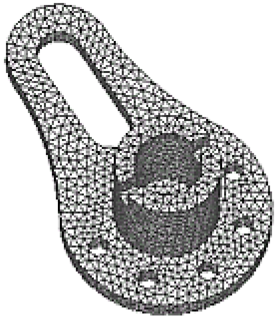
- 連立1次方程式の直接解法
  - LU分解

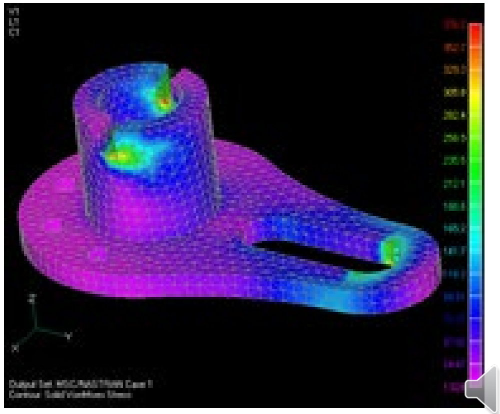
復習：連立1次方程式

$$Ax = b$$

- 連立1次方程式の重要性
  - 非線形の問題は基本的には解けない.
  - 非線形問題を線形化して解く.
    - 複雑な構造物，単純な要素に分解
    - 各要素に対して線形方程式を立てる.
    - 重ね合わせの原理により統合
    - ただし，変数の数は膨大
    - コンピュータにより数値的に解く.







復習：ガウス消去法

連立1次方程式の解法

$x-y=1$　　(1)

$x+2y=4$　　(2)

1．代入法

式(1)より　$y=x-1$, 式(2)に代入

$x+2(x-1)=4$, したがって$3x=6$, よって$x=2$, 式(1)より$y=1$

2．加減法

式(2)より式(1)を引く：$3y=3$, したがって$y=1$, 式(1)より$x=2$

ガウス消去法は，加減法をコンピュータに適した方法で行う.

復習:ガウス消去法:n元

$$\begin{bmatrix} a_{00} & a_{01} & \cdots & a_{0,n-1} \\ a_{10} & a_{11} & \cdots & a_{1,n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n-1,0} & a_{n-1,2} & \cdots & a_{n-1,n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{n-1} \end{bmatrix}$$

(前進消去)

If $a_{00} \neq 0$

$$\alpha_{i0} = -\frac{a_{i0}}{a_{00}}, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1$$

$$\begin{bmatrix} a_{00} & a_{01} & \cdots & a_{0,n-1} \\ 0 & a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n-1,2} & \cdots & a_{n-1,n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1^{(1)} \\ \vdots \\ b_{n-1}^{(1)} \end{bmatrix}$$

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} + \alpha_{i0} a_{0j}, b_i^{(1)} = b_i + \alpha_{i0} b_0, i = 1,2,\cdots,n-1$$

復習:ガウス消去法:n元

（後退代入）

$$
\begin{aligned}
x_{n-1} &= \frac{b_{n-1}^{(n-1)}}{a_{n-1,n-1}^{(n-1)}} \\
x_{n-2} &= \frac{b_{n-2}^{(n-2)} - a_{n-2,n}^{(n-2)} x_{n-1}}{a_{n-2,n-2}^{(n-2)}} \\
x_k &= \frac{b_k^{(k-1)} - \sum_{j=k+1}^{n-1} a_{kj}^{(k-1)} x_j}{a_{kk}^{(k-1)}}
\end{aligned}
$$

LU分解　p.49

1. $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$をLU分解せよ。

ヒント

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ a & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b & c \\ 0 & d \end{bmatrix}$$

2. $\begin{bmatrix} 2 & 6 & 4 \\ 5 & 7 & 9 \end{bmatrix}$をLU分解せよ。

LU分解

1. $\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & -2 \end{bmatrix}$

2. $\begin{bmatrix} 2 & 6 & 4 \\ 5 & 7 & 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2.5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 6 & 4 \\ 0 & -8 & -1 \end{bmatrix}$

LU分解

部分ピボット選択付きガウス消去法

(1) k番方程式とip番方程式を入れ換える

(2) k番方程式をα_{ik}倍してi番方程式(i=k+1,k+2,･･･,n−1)に加える

$$P_{k-1} = \begin{array}{c} \begin{array}{ccccccccc} & & & (k) & & (ip) & & & \end{array} \\ \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & \\ & & & 0 & \cdots & 1 & & & \\ & & & \vdots & & \vdots & & & \\ & & & 1 & \cdots & 0 & & & \\ & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & 1 \end{bmatrix} \end{array} \qquad G_{k-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & \alpha_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & \alpha_{n-1,k} & & & 1 \end{bmatrix}$$

LU分解

$$G_{n-2}P_{n-2}\cdots G_0P_0Ax = G_{n-2}P_{n-2}\cdots G_0P_0b$$

$$PA = LU$$

U:上三角行列, L:下三角行列, P:置換行列

$$U = \begin{bmatrix} u_{00} & u_{01} & \cdots & u_{0,n-1} \\ & u_{11} & \cdots & u_{1,n-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{n-1,n-1} \end{bmatrix}, L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{10} & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{20} & l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ l_{n-1,0} & l_{n-1,1} & \cdots & \cdots & l_{n-1,n-2} & 1 \end{bmatrix}$$

LU分解(Pivotしない場合)

フロベニウス(Frobenius)行列

$$f_k = (0, \cdots, 0, f_{k+1,k}, \cdots, f_{n-1,k})^T$$

$$F_k = I - f_k e_k^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ & 1 & \\ & -f_{k+1,k} & \\ 0 & \vdots & 1 \\ & -f_{n-1,k} & \end{bmatrix}$$

$$F_k^{-1} = I + f_k e_k^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ & 1 & \\ & f_{k+1,k} & \\ 0 & \vdots & 1 \\ & f_{n-1,k} & \end{bmatrix}$$

LU分解(Pivotしない場合)

フロベニウス(Frobenius)行列

$$F_0^{-1} \cdots F_{n-2}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ f_{1,0} & 1 & 0 \\ & f_{2,1} & \\ \vdots & \vdots & 0 \\ f_{n-1,0} & f_{n-1,1} & 1 \end{bmatrix}$$

ガウス消去法　前進消去の第k段の操作(行の交換が不要の場合)

$$A^{(n-1)} = F_{n-2} A^{(n-2)}$$

ただし，　$f_k = (0, \cdots, 0, f_{k+1,k}, \cdots, f_{n-1,k})^T, f_{i,k} = \dfrac{a_{i,k}^{(k)}}{a_{k,k}^{(k)}}$

$$A^{(n-1)} = F_{n-2} \cdots F_0 A \Leftrightarrow A = F_0^{-1} \cdots F_{n-1}^{-1} A^{(n-1)}$$

LU分解

以下の行列を計算せよ

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -a & 1 & 0 \\ -b & 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -c & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -a & 1 & 0 \\ -b & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -a & 1 & 0 \\ ac-b & -c & 1 \end{bmatrix}^{-1}$$

LU分解

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -a & 1 & 0 \\ -b & 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ b & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -c & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -a & 1 & 0 \\ -b & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -a & 1 & 0 \\ ac-b & c & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -a & 1 & 0 \\ ac-b & c & 1 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ b & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & c & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 \\ b & c & 1 \end{bmatrix}$$

LU分解

$$G_{n-2}P_{n-2}\cdots G_0P_0Ax = G_{n-2}P_{n-2}\cdots G_0P_0b$$

$$PA = LU$$

U:上三角行列, L:下三角行列, P:置換行列

$$U = \begin{bmatrix} u_{00} & u_{01} & \cdots & u_{0,n-1} \\ & u_{11} & \cdots & u_{1,n-1} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{n-1,n-1} \end{bmatrix}, L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{10} & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{20} & l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ l_{n-1,0} & l_{n-1,1} & \cdots & \cdots & l_{n-1,n-2} & 1 \end{bmatrix}$$

LU分解

$$A^{(k)} = F_{k-1} P_{k-1} A^{(k-1)}$$

P_{k-1}:第 k 行と第 p_k 行を交換する置換行列

F_{k-1} の成分　$f_{p_k-1,k-1} = \frac{a^{(k-1)}_{k-1,k-1}}{a^{(k)}_{p_k-1,k-1}}$, $f_{i-1,k-1} = \frac{a^{(k-1)}_{i-1,k-1}}{a^{(k)}_{p_k-1,k-1}}$ $(i = k, ..., n-1, i \neq p_{k-1})$

$$\begin{aligned}
A^{(1)} &= F_0 P_0 A \\
A^{(2)} &= F_1 P_1 A^{(1)} = F_1 (P_1 F_0 P_1)(P_1 P_0) A \\
A^{(3)} &= F_2 P_2 A^{(2)} = F_2 (P_2 P_1 F_0 P_1 P_2)(P_2 P_1 P_0) A \\
A^{(4)} &= \cdots
\end{aligned}$$

$G_{k-1} = P_{n-2} \cdots P_k F_{k-1} P_k \cdots P_{n-2}$

$A^{n-1} = (G_{n-1} \cdots G_0)(P_{n-2} \cdots P_0 A)$

置換行列

$\sigma(i) = r,\ \sigma(r) = i,\ \sigma(j) = j\ (j \in N_n, j \neq i, r)$

命題

$i,\ r \geq k+1$ ならば,

$P F_{k-1} P = I - (P \boldsymbol{f}_{k-1} e^T_{k-1})$

LU分解

値の格納

$$A' = \begin{bmatrix} u_{00} & u_{01} & u_{02} & u_{03} & \cdots & u_{0,n-1} \\ l_{10} & u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1,n-1} \\ l_{20} & l_{21} & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2,n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & u_{n-2,n-1} \\ l_{n-1,0} & l_{n-1,1} & \cdots & \cdots & l_{n-1,n-2} & u_{n-1,n-1} \end{bmatrix}$$

LU分解アルゴリズム

$$
\begin{aligned}
Ax &= b\\
LUx &= Pb\\
Ly &= Pb\\
Ux &= y
\end{aligned}
$$

Input A, ε
for $k = 0,1,\cdots,n-2$
    Exchange 2 rows if necessary
        $P_k \leftarrow ip$
    if $ip \neq k$ then
        for $j = k, k+1,\cdots,n-1$
            $a_{kj} \leftrightarrow a_{ip,j}$
        end for
    end if
    for $i = k+1, k+2,\cdots,n-1$
        $\alpha \leftarrow -\frac{a_{ik}}{a_{kk}}$
        $a_{ik} \leftarrow \alpha$
        for $j = k+1, k+2,\cdots,n-1$
            $a_{ij} \leftarrow a_{ij} + a_{kj}$
        end for
    end for
end for
Output A, P

LU分解

$$
\begin{aligned}
Ax &= b \\
LUx &= Pb \\
Ly &= Pb \\
Ux &= y
\end{aligned}
$$

LU分解を利用してAx=bを解くアルゴリズム

Input A, b, P
for $k = 0,1,\cdots,n-2$
　　$b_k \leftrightarrow b_{P_k} A$
　　for $i = k+1, k+2, \cdots, n-1$
　　　　$b_i \leftarrow b_i + a_{ik} b_k$
　　end for
end for
for $k = n-1, n-2, \cdots, 0$
　　$b_k \leftarrow \frac{b_k - \sum_{j=k+1}^{n-1} a_{kj} b_j}{a_{kk}}$
end for
Output b

LU分解：プログラム

```
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#define N 4 /* N次正方行列 */
void input_matrix(double a[N][N],char c,FILE* fin, FILE* fout);
void input_vector(double b[N],char c,FILE* fin,FILE* fout);
void lu_decomp(double a[N][N],int p[N]);
Void lu_solve(double a[N][N],double b[N],int p[N]);
int main(void){
    FILE *fin, *fout;
    double a[N][N], b[N];
    int I, p[N]; /* p[0…N-2]を利用, p[N-1]は未使用 */
    if((fin=fopen("input_lu.dat","r"))==NULL) exit(1);
    if((fout=fopen("output_lu.dat","w"))==NULL) exit(1);
    input_matrix(a,'A',fin,fout); input_vector(b,'b',fin,fout);
    lu_decomp(a,p); lu_solve(a,b,p);
    fprintf(fout,"Ax=bの解は次の通りです¥n");
    for(i=0;i<N;i++){ fprintf(fout,"%f¥n",b[i]);}
    fclose(fin); fclose(fout);
    return 0;
}
```

LU分解：lu_decomp()

```
void lu_decomp(double a[N][N],int p[N]){
    int i,j,k,ip;
    double alpha, tmp;
    double amax, eps=pow(2.0,-50.0); /* eps=2^{-50}とする */
    for(k=0;k<N-1;k++){
        amax=fabs(a[k][k]); ip=k; /* ピボットの選択 */
        for(i=k+1;i<N;i++){
            if(fabs(a[i][k])>amax){
                amax=fabs(a[i][k]); ip=i;
            }
        }
        if(amax<eps) { /* 正則性の判定 */
            printf("入力した行列は正則ではない!!¥n"); exit(1);
        }
        p[k]=ip;
        if(ip!=k){
            for(j=k;j<N;j++){
                tmp=a[k][j]; a[k][j]=a[ip][j]; a[ip][j]=tmp;
            }
        }
        for(i=k+1;i<N;i++){ /* 前進消去 */
            alpha=a[i][k]/a[k][k];
            a[i][k]=alpha;
            for(j=k+1;j<N;j++){
                a[i][j]=a[i][j]-alpha*a[k][j];
            }
        }
    }
}
```

LU分解：lu_solve()

```
void lu_solve(double a[N][N],double b[N],int p[N]){
    int i,j,k;
    double tmp;

    for(k=0;k<N-1;k++){
        tmp=b[k]; b[k]=b[p[k]]; b[p[k]]=tmp; /*右辺の行変換*/
        for(i=k+1;i<N;i++){  /* 前進代入 */
            b[i]=b[i]-a[i][k]*b[k];
        }
    }

    b[N-1]=b[N-1]/a[N-1][N-1];
    for(k=N-2;k>=0;k--){ /* 後退代入 */
        tmp=b[k];
        for(j=k+1;j<N;j++){
            tmp=tmp-a[k][j]*b[j];
        }
        b[k]=tmp/a[k][k];
    }
}
```

まとめ

- 連立1次方程式の直接解法
  - LU分解