第9章　連立一次方程式の解法

本章では連立一次方程式の直接解法について学ぶ。最初に数値計算において連立一次方程式の求解が必要となる場面を復習し，係数行列の様々な性質について学んだ後，もっとも基本的な直接解法であるガウス消去法を詳しく学ぶ。次に，同じ係数行列を持ち右辺ベクトルのみが異なる複数の方程式を解くのに有用な LU 分解について学び，最後に係数行列の様々な性質を利用して計算量と計算に必要な記憶領域を削減する方法について考える。

9.1　数値計算における連立一次方程式

本章では，n 個の未知数 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ に対する n 個の連立方程式

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \tag{9.1}$$

を考える。係数行列を A，解ベクトルを $\mathbf{x}$，右辺ベクトルを $\mathbf{b}$ で表すと，これは

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{9.2}$$

と書ける。以下，行列 A は正則，すなわち $\det A \neq 0$ と仮定する。このとき，A の逆行列 A^{-1} が存在し，連立一次方程式の解は形式的に $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$ と書ける。これを数値計算により実際に求めることが，本章の主題である。

連立一次方程式の解を求めることは，数値計算の様々な場面で必要となる。以下に例を挙げる。

(i) 非線形連立方程式に対するニュートン法　非線形連立方程式 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ に対するニュートン法の反復式は

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \left(\left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(k)}} \right)^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}^{(k)}) \tag{9.3}$$

となる。ここで，ヤコビアン $\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}}$ の逆行列をかけるために連立一次方程式の求解が必要となる。

(ii) スプライン補間　スプライン補間において，第 i 番目（$i = 1, \ldots, N+1$）の点での 1 次の係数を X_i とすると，X_i は次の連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \gamma_1 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \gamma_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \beta_N & \alpha_N & \gamma_N \\ & & & \alpha_{N+1} & \gamma_{N+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_N \\ X_{N+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_N \\ Y_{N+1} \end{pmatrix} \tag{9.4}$$

を解くことにより求められる（教科書 p. 28 参照）。

(iii) 熱伝導方程式に対する陰的差分法　熱伝導方程式に対する陰的差分法では，時刻 t_j での解 $\{u_{i,j}\}$ から時刻 t_{j+1} での解 $\{u_{i,j+1}\}$ を求めるため，連立一次方程式 (7.24) を解く必要がある。

(iv) ポアソン方程式に対する差分法　ポアソン方程式に対する差分法では，$(N-1)^2$ 個の未知数に対する $(N-1)^2$ 本の連立一次方程式

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} = f(x_i, y_j) \tag{9.5}$$

を解く必要がある。

前章では (iv) の方程式を解くための反復解法を学んだが，本章では (i) 〜 (iv) のすべての連立一次方程式を扱えるより一般的な解法である直接解法について学ぶ。

9.2　係数行列の性質の分類

連立一次方程式を解く場合，係数行列 A がどのような性質を持つかにより，使うべき解法や求解のための計算量が大きく異なる。重要な性質としては，次のようなものが挙げられる。なお，以下では行列及びベクトルはすべて実数とする。

(a) 非零構造　行列の 0 でない要素がどのように分布しているかを，行列の非零構造と呼ぶ。代表的な非零構造を次に挙げる。

- **密行列**：　ほとんどの要素が非零である行列。もっとも一般的な行列である。
- **三重対角行列**：　対角線とその 1 つ上及び 1 つ下の斜めの列のみが非零の行列。前節の (ii)，(iii) の行列は三重対角行列の例である。三重対角行列を式で定義すると，「$|i-j| > 1$ のとき $a_{ij} = 0$ の行列」となる。

- **帯行列**： 対角線とその下の b 本，及びその上の b 本の斜めの列のみが非零の行列。帯行列を式で定義すると，「$|i-j|>b$ のとき $a_{ij}=0$ の行列」となる。b を**半帯幅**と呼ぶ。前節 (iv) の行列は，未知数を $u_{11},u_{12},\ldots,u_{1,N-1},u_{21},u_{22},\ldots,u_{N-1,N-1}$ の順に並べ，方程式も同じ順に並べると，半帯幅 $N-1$ の帯行列になる。
- **上三角行列**： 対角線とそれより上の要素のみが非零の行列。
- **下三角行列**： 対角線とそれより下の要素のみが非零の行列。
- **疎行列**： 上記の行列のような規則的な構造は持たないが，要素の大部分（たとえば 90%以上）が 0 の行列。

(b) 対称性

- **対称行列**： $a_{ij}=a_{ji}$（すなわち $A^t=A$）の行列。前節 (iii)，(iv) は対称行列の例である。また，(ii) は補間点が等間隔ならば対称行列になる（教科書 p. 28 参照）。
- **非対称行列**： 対称でない行列。

(c) 数値的性質

- **正定値行列**： 任意のベクトル $\mathbf{x}$ に対して $\mathbf{x}^t A\mathbf{x}>0$ となる行列。正定値行列は正則行列である（証明せよ）。
- **対角優位行列**： $\sum_{j\neq i}|a_{ij}|<|a_{ii}|$ がすべての i に対して成り立つ行列。前節 (ii)，(iii) の行列は対角優位行列である。また，ある行列が対称かつ対角優位で，かつ対角成分がすべて正ならば正定値である（証明せよ）。

これらの性質をうまく使うと，連立一次方程式を解くための計算量や，計算に必要な記憶領域を減らすことができる。これについては 9.5 節で述べる。

9.3 ガウスの消去法

本節では，直接解法の中でもっとも基本的な解法であるガウスの消去法を説明する。この方法は，任意の正則行列を係数とする連立一次方程式に対して適用可能である。この方法では，まず方程式 $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$ を上三角行列 U を係数とする方程式 $U\mathbf{x}=\mathbf{c}$ に変形する。後に見るように上三角行列を係数とする方程式は代入計算によって容易に解けるので，これにより解 $\mathbf{x}$ を求めることができる。

9.3.1　アルゴリズム

連立一次方程式 (9.2) の係数行列を上三角行列に変形するため，まず係数 $a_{21}, a_{31}, \dots, a_{n1}$ を消去する。そのため，($a_{11} \neq 0$ と仮定して）第 1 番目の方程式に a_{i1}/a_{11} を掛けた式を第 i 式（$i = 2, \dots, n$）から引くと，連立方程式は次のようになる。

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad\quad a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ \qquad\quad a_{32}^{(2)}x_2 + a_{33}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{3n}^{(2)}x_n = b_3^{(2)} \\ \qquad\qquad \vdots \\ \qquad\quad a_{n2}^{(2)}x_2 + a_{n3}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{nn}^{(2)}x_n = b_n^{(2)} \end{cases} \tag{9.6}$$

ここで，上付き添字 (2) は，消去演算によって変化した係数であることを示す。次に，($a_{22}^{(2)} \neq 0$ と仮定して）第 2 番目の方程式に $a_{i2}^{(2)}/a_{22}^{(2)}$ を掛けた式を第 i 式（$i = 3, \dots, n$）から引くと，第 3 番目以降の方程式で x_2 の係数が消え，連立方程式は次のようになる。

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad\quad a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ \qquad\qquad\qquad a_{33}^{(3)}x_3 + \cdots + a_{3n}^{(3)}x_n = b_3^{(3)} \\ \qquad\qquad\qquad \vdots \\ \qquad\qquad\qquad a_{n3}^{(3)}x_3 + \cdots + a_{nn}^{(3)}x_n = b_n^{(3)} \end{cases} \tag{9.7}$$

こうして,「第 k ステップでは第 k 番目の方程式に $a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$ を掛けて第 i 式（$i = k+1, \dots, n$）から引く」という操作（**消去演算**と呼ぶ）を第 $n-1$ ステップまで繰り返すと，係数行列 A は次のように上三角行列に変形される。

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad\quad a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ \qquad\qquad\qquad a_{33}^{(3)}x_3 + \cdots + a_{3n}^{(3)}x_n = b_3^{(3)} \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \ddots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad a_{nn}^{(n)}x_n = b_n^{(n)} \end{cases} \tag{9.8}$$

このときの係数行列を U，右辺ベクトルを $\mathbf{c}$ と書く。この形の連立一次方程式 $U\mathbf{x} = \mathbf{c}$ は簡単に解くことができる。すなわち，第 n 式より x_n を求め，次にそれを第 $n-1$ 式

$$a_{n-1,n-1}^{(n-1)}x_{n-1} + a_{n-1,n}^{(n-1)}x_n = b_{n-1}^{(n-1)} \tag{9.9}$$

に代入して x_{n-1} を求め，更に x_n と x_{n-1} を第 $n-2$ 式

$$a_{n-2,n-2}^{(n-2)}x_{n-2} + a_{n-2,n-1}^{(n-2)}x_{n-1} + a_{n-2,n}^{(n-2)}x_n = b_{n-2}^{(n-2)} \tag{9.10}$$

に代入して x_{n-2} を求めるというように，下から順々に代入計算を行っていけばよい。この操作を**後退代入**と呼ぶ。

数値例　3 元の連立一次方程式の求解

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 5 & 4 \\ 4 & 6 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 17 \\ 23 \end{pmatrix} \tag{9.11}$$

$$\Rightarrow \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -5 \\ 0 & -2 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ -7 \\ -9 \end{pmatrix} \tag{9.12}$$

$$\Rightarrow \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ -7 \\ 5 \end{pmatrix} \tag{9.13}$$

$$\Rightarrow \quad x_3 = 1, \quad x_2 = 2, \quad x_1 = 1 \quad \text{（後退代入による）} \tag{9.14}$$

9.3.2 計算量

ガウスの消去法により n 元の連立一次方程式を解くときの計算量を，係数行列の上三角行列への変形，それに伴う右辺ベクトルに対する変形，後退代入の 3 つの部分に分けて調べると，次のようになる。

係数行列の上三角行列への変形　四則演算をそれぞれ 1 演算と数えると，第 k ステップでの計算量は，$a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$ の計算のための 割り算が $n-k$ 回，掛け算と引き算がそれぞれ $(n-k)^2$ 回である。したがって合計の計算量は

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{n-1}\{(n-k)+2(n-k)^2\} &= \sum_{k'=1}^{n-1}(k'+2k'^2) \\ &= \frac{1}{2}n(n-1)+\frac{2}{6}(n-1)n(2n-1) \\ &= \frac{1}{6}n(n-1)(4n+1) \\ &\simeq \frac{2}{3}n^3 \end{aligned} \tag{9.15}$$

となる。

右辺ベクトルに対する変形　第 k ステップでは掛け算と引き算がそれぞれ $(n-k)$ 回必要だから，合計の計算量は

$$\sum_{k=1}^{n-1} 2(n-k) = n(n-1) \tag{9.16}$$

となる。

後退代入　第 k ステップでは割り算 1 回，掛け算と引き算がそれぞれ $k-1$ 回必要だから，合計の計算量は

$$\sum_{k=1}^{n}\{1+2(k-1)\}=n^2 \tag{9.17}$$

となる。

9.3.3　ピボット選択

以上で述べたガウスの消去法のアルゴリズムは，実はこのままでは完全なアルゴリズムとは言えない。なぜなら，A が正則行列であっても，上三角行列への変形の途中で $a_{kk}^{(k)}=0$ となる場合があり，そうすると 0 で割ることができないため，そこから先に計算を進めることができなくなるからである。また，$a_{kk}^{(k)}$ が 0 でなくても極めて 0 に近い値（たとえば 10^{-10} など）の場合には，精度上の問題が起こりうる。というのは，$a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$ の絶対値が極めて大きくなるため，第 k 行にこれを掛けたものを第 i 行から引いたとき，情報落ちが起こって精度が悪化するからである。

そこで，第 k ステップにおいて消去を行う前に，$a_{ik}^{(k)}$（$i=k,k+1,\ldots,n$）の絶対値を見比べ，もっとも絶対値の大きい行と第 k 行とを入れ替えるという操作を行う。これを**ピボット選択**と呼ぶ。これは，元の連立方程式で言えば，式の順番を入れ替えることに相当する。

数値例　3 元の連立一次方程式を解く例を以下に示す。

$$\begin{pmatrix}1&2&3\\3&6&4\\4&6&7\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}8\\19\\23\end{pmatrix} \tag{9.18}$$

$$\Rightarrow\quad\begin{pmatrix}1&2&3\\0&0&-5\\0&-2&-5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}8\\-5\\-9\end{pmatrix} \tag{9.19}$$

ここで，$a_{22}^{(2)}$ は 0 なので，このままでは第 2 行による消去を行うことができない。そこで，第 2 行と第 3 行とを入れ替えると次のようになる（右辺ベクトルも同時に入れ替えることに注意）。

$$\Rightarrow\quad\begin{pmatrix}1&2&3\\0&-2&-5\\0&0&-5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}8\\-9\\-5\end{pmatrix} \tag{9.20}$$

入れ替えの結果，$(2,2)$ 要素は 0 でなくなったので，第 2 行による消去を行うことができる。ただし，この例では，この段階で係数行列は既に上三角行列

になっており，第 2 行による消去を行わずにこのまま後退代入へと進むことができる。

上の数値例では，ピボット選択を取り入れることによってガウスの消去法を行うことができたが，一般的にピボット選択を取り入れれば，どんな連立一次方程式でも解けるのだろうか。これについては，次の定理が成り立つ。

定理　連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ において，係数行列 A が正則ならば，ピボット選択付きのガウスの消去法によって必ず解を求めることができる。

証明　ピボット選択付きのガウスの消去法において，計算途中で先へ進めなくなる場合を考えると，これは $a_{ik}^{(k)}$（$i = k, \ldots, n$）がすべて 0 の場合だけである（このときは，ピボット選択でどの行を選んでも第 (k, k) 要素を 0 でなくすることができない）。このとき，行列中の $a_{k,k+1}^{(k)}$ を左上隅の要素とする $(n - k + 1) \times (n - k)$ 小行列に着目すると,（列より行のほうが多いから）この行列の $n - k + 1$ 本の行ベクトルは一次独立でない。次に，全体行列の第 k 行から第 n 行の $n - k + 1$ 本の行ベクトルを考えると，これらは小行列の行ベクトルの先頭に k 個の 0 を付け加えたものであるから，やはり一次独立でない。したがって，第 k ステップにおける係数行列は一次独立でない行ベクトルの集合を含むから，正則でない。一方，この行列は最初の係数行列 A に対し，ある行から別の行の定数倍を差し引くという操作（行基本変形）を繰り返して得られたものであるが，この操作は行列の正則性を変えない。したがって，元の係数行列 A も正則でないことになる。以上より，ガウスの消去法が途中で先へ進めなくなるのは，A が正則でない場合のみであることがわかった。この対偶を取ることにより，A が正則な場合はガウス消去法は最後まで進めることができ，解 $\mathbf{x}$ を求められることがわかる。

この定理より，ガウスの消去法はどんな正則行列に対しても適用できる汎用的なアルゴリズムであることがわかる。ただし，ここでは丸め誤差の影響は考慮していない。丸め誤差があると，元の係数行列が正則でも $a_{ik}^{(k)}$（$i = k, \ldots, n$）がすべて 0 になり，計算を進められなくなる場合が起こりうるので，注意が必要である。

9.4　LU 分解

行列形式で書いたガウスの消去法　いま，ピボット選択なしのガウスの消去法のアルゴリズムを見直してみる。第 k ステップの変形を行う直前の係数行列を $A^{(k)}$，右辺ベクトルを $\mathbf{b}^{(k)}$ と書く。第 k ステップでは，第 k 番目の方程式に $a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$ を掛けて第 i 番目の方程式（$i = k + 1, \ldots, n$）から引くが，これは行列 $A^{(k)}$ と右辺ベクトル $\mathbf{b}^{(k)}$ に次のような下三角行列 L_k を左から掛け

ていることに相当する。

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 &&&&&&& \\ 0 & 1 &&&&&& \\ 0 & 0 & \ddots &&&&& \\ \vdots & \vdots && 1 &&&& \\ \vdots & \vdots && -l_{k+1,k} & 1 &&& \\ \vdots & \vdots && -l_{k+2,k} & 0 & \ddots && \\ \vdots & \vdots && \vdots & \vdots && 1 & \\ 0 & 0 & \cdots & -l_{nk} & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{9.21}$$

ここで，

$$l_{ik} = a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} \quad (i = k+1, \ldots, n) \tag{9.22}$$

である。$A^{(k)}$ を要素で書いて実際に左から L_k を掛けると，それが消去演算になっていることがわかる（第 i 行について確認せよ）。したがって，

$$L_k A^{(k)} = A^{(k+1)} \quad (k = 1, 2, \ldots, n-1) \tag{9.23}$$

となる。

(9.23) 式を繰り返し使うと，A の上三角行列 U への変形は，次のように A に $L_1, L_2, \ldots, L_{n-1}$ を順に左から掛けていく操作と捉えることができる。

$$\begin{aligned} U &= A^{(n)} \\ &= L_{n-1}A^{(n-1)} \\ &= \cdots \\ &= L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2 L_1 A \end{aligned} \tag{9.24}$$

同様に，$\mathbf{b}$ に対する変形も次のように書ける。

$$\begin{aligned} \mathbf{c} &= \mathbf{b}^{(n)} \\ &= L_{n-1}L_{n-1}\cdots L_2 L_1 \mathbf{b} \end{aligned} \tag{9.25}$$

これよりガウスの消去法で連立一次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を解く過程は次の 3 つの処理に分解できる。

(1) (9.22) 式と (9.23) 式とを繰り返し順に使うことにより，A を U に変形し，副産物として $L_1, L_2, \ldots, L_{n-1}$ を得る処理

(2) 得られた $L_1, L_2, \ldots, L_{n-1}$ を使い，(9.25) 式より $\mathbf{c}$ を求める処理

(3) $U\mathbf{x} = \mathbf{c}$ を解いて解 $\mathbf{x}$ を求める処理

(2) を**前進消去**と呼ぶ。また，先に述べたように，(3) を後退代入と呼ぶ。

右辺ベクトルのみが異なる方程式の解法　上記の 3 つの処理において，処理 (1) では係数行列 A のみを使い，右辺ベクトル $\mathbf{b}$ は使わない。したがって，方程式 $A\mathbf{x} =$ を解くために処理 (1)，(2)，(3) を実行した後，右辺ベクトルのみが異なる別の方程式 $A\mathbf{x}' = \mathbf{b}'$ を解きたい場合には，(1) で得られた $L_1, L_2, \ldots, L_{n-1}$ と U とを再利用し，処理 (2)，(3) のみを行えばよいことになる。

9.3 節で示したように，(1) の処理には約 $\frac{2}{3}n^3$ の計算量が必要なのに対し，(2)，(3) の計算量はそれぞれ約 n^2 であるから，この方法を使うと，$A\mathbf{x}' = \mathbf{b}'$ をはじめから解く場合に比べ，計算量が大幅に節約できることになる。

応用例　以上の方法は，次のような場合に役立つ。

- 熱伝導方程式に対する陰的差分法。時刻 t_j での解 $\{u_{i,j}\}$ から時刻 t_{j+1} での解 $\{u_{i,j+1}\}$ を求めるには連立一次方程式 (7.24) を解く必要があるが，この連立一次方程式の係数行列は時間ステップに依存しない。したがって，(1) の処理を最初に 1 回行えば，それ以後の時間ステップでは (2)，(3) の計算だけで済む。
- スプライン補間では，係数行列は標本点の間隔のみに依存する。したがって，同じ標本点を使って多くのデータを補間する場合，(1) の処理は 1 回のみで済む。
- ポアソン方程式 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x, y)$ に対する差分法では，係数行列は計算格子のみに依存する。したがって，同じ格子を使って複数の $f(x, y)$（たとえば複数の電荷分布）に対する方程式を解きたい場合，(1) の処理は 1 回でよい。

LU 分解　（授業ではやらなかったので試験範囲からは除外します。）
(9.24) 式の両辺に $L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1$ を掛けると，

$$A = (L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1)^{-1}U \tag{9.26}$$

となる。ここで，下三角行列どうしの積は下三角行列であり，下三角行列の逆行列も下三角行列であること（証明せよ）を使うと，$(L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_2L_1)^{-1}$ は下三角行列であることがわかる。そこで，これを L と書くと，

$$A = LU \tag{9.27}$$

となる。これを A の LU **分解**と呼ぶ。さらに，この L は，(9.22) 式で与えられる l_{ik} を使って

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ l_{21} & 1 & & & & & & \\ l_{31} & l_{32} & \ddots & & & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & 1 & & & & \\ \vdots & \vdots & & l_{k+1,k} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & & l_{k+2,k} & l_{k+2k+1} & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & 1 & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nk} & l_{n,k+1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix} \tag{9.28}$$

と書けることもわかる。したがって，ガウスの消去法を行うと，A の LU 分解が自動的に得られる。

LU 分解を求める方法は，実はガウスの消去法だけではなく，クラウト法，内積形式ガウス法[1]などいろいろなアルゴリズムがある。しかし，A が正則である場合には，L の対角要素がすべて 1 であるという条件のもとで，$A = LU$ を満たす下三角行列 L，上三角行列 U は一意的に定まることが証明できる。

LU 分解が得られると，方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の解 $\mathbf{x}$ は，２つの方程式

$$L\mathbf{c} = \mathbf{b} \tag{9.29}$$

$$U\mathbf{x} = \mathbf{c} \tag{9.30}$$

を順に解くことによって得られる。(9.30) 式の解は代入計算によって簡単に求められることを 9.3 節で示したが，(9.29) 式の解も同様に代入計算のみによって簡単に求められる（実は (9.25) 式と同じ計算をしていることになる）。(9.30)，(9.29) をとくための計算量は共に約 n^2 であるから，A の LU 分解を求めておけば，任意の右辺ベクトルに対する連立一次方程式を約 $2n^2$ の計算量で解くことができる。

9.5　特別な係数行列に対するガウスの消去法

前節までに述べた解法は係数行列 A が一般の正則行列の場合のアルゴリズムであるが，A が 9.2 節で述べたような特殊な性質を持つ場合には，それを利用して計算量と計算に必要な記憶領域とを削減できる。ここでは，A が帯行列の場合と対称行列の場合の２つについて，それらに適したガウスの消去法のアルゴリズムを説明する。なお，以下では簡単のため，ピボット選択は行わないと仮定する。

[1]たとえば小国力編著：「行列計算ソフトウェア - WS，スーパーコン並列計算機」，丸善，1991 を参照

9.5.1　帯行列に対するガウスの消去法

帯行列に対するガウスの消去法の性質　いま，A が半帯幅 b の帯行列（$|i-j|>b$ のとき $a_{ij}=0$）であるとする。このとき，第 k ステップ変形を行う直前の係数行列を $A^{(k)}$ とすると，第 (k,k) 要素を左上隅の要素とする $A^{(k)}$ の $(n-k+1)\times(n-k+1)$ 部分行列は，やはり半帯幅 b の帯行列である。これを帰納法により示す。

まず，$k=1$ に対しては $A^{(1)}=A$ であるから，命題は正しい。次に，ある k に対して命題が正しいと仮定する。すると，第 k ステップの変形では，消去すべき第 k 行の要素は $a^{(k)}_{k+1,k},\ldots,a^{(k)}_{k+b,k}$ の b 個だけである（それより下の要素は帯の外だから最初から 0）から，消去対象の行は $k+1\le i\le k+b$ の b 行だけである。また，消去では第 k 行の定数倍をこれらの行から引くが，第 k 行で 0 でない要素は $a^{(k)}_{kk},a^{(k)}_{k,k+1},\ldots,a^{(k)}_{k,k+b}$ の $b+1$ 個だけであるから，消去に関わる列は $k\le j\le k+b$ の b 列だけである。したがって，第 k ステップでの消去により第 (i,j) 要素が影響を受けるのは

$$\begin{aligned} k+1\le i\le k+b \\ k\le j\le k+b \end{aligned} \tag{9.31}$$

の場合だけであるが，これを満たす i，j については明らかに

$$-b+1\le i-j\le b \tag{9.32}$$

が成り立つ。これより $|i-j|>b$ となるが，これはこの要素が帯の内側にあることを示す。したがって，消去により帯の外側に非零が増えることはなく，第 $(k+1,k+1)$ 要素を左上隅の要素とする $A^{(k+1)}$ の $(n-k)\times(n-k)$ 部分行列もやはり半帯幅 b の帯行列となる。したがって帰納法により，命題は $1\le\forall k\le n$ について成り立つ。

計算量と記憶領域　上記の証明より，各ステップで消去に関わる行，列はそれぞれ b 行，$b+1$ 列のみであるから，消去のための計算量は（掛け算と引き算を合わせて）$2b\times(b+1)$ となる。したがって，全体での計算量は約 $2b^2n$ 程度となる。また，消去によって帯の外の要素が新たに非零となることはないから，行列の記憶領域としては帯の内部の要素を記憶するための領域のみを持てばよい。したがって必要な記憶領域は約 $(2b+1)n$ となる。

応用例　101×101 の格子上でポアソン方程式のディリクレ型境界値問題を解く場合を考える。すると，未知数は $100\times100=10^4$ 個で，10^4 元の連立一次方程式を解くことになる。これを密行列として扱うと，係数行列 A を上三角行列に変形するための計算量は

$$\frac{2}{3}\times(10^4)^3=\frac{2}{3}\times10^{12} \tag{9.33}$$

と膨大になる。

一方，9.2 節で述べたように，行列 A は（未知数に適当な順序を付けることにより）半帯幅 100 の帯行列となる。これを本節で説明した帯行列用の解法で扱うと，上三角行列への変形の計算量は

$$2 \times 100^2 \times 10^4 = 2 \times 10^8 \tag{9.34}$$

となる。これは密行列として扱った場合に比べ，計算量が約 3300 倍も少なくて済むことになる。このような大規模問題を扱う場合，係数行列の性質を最大限に利用して計算量をできるだけ削減することは必須である。

9.5.2 対称行列に対するガウスの消去法

対称行列に対するガウスの消去法の性質　もう一つの例として，行列 A が対称行列，すなわち $a_{ij} = a_{ji}$ である場合を考える。このとき，$A^{(k)}$ において，第 (k,k) 要素を左上隅の要素とする $(n-k+1) \times (n-k+1)$ 部分行列は対称行列である。これを帰納法により示す。

まず，$k=1$ に対しては $A^{(1)} = A$ であるから，命題は正しい。次に，ある k に対して命題が正しいと仮定する。いま，第 k ステップの変形では第 k 行の $a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$ 倍を第 i 行から引くが，これを成分で書くと，

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \cdot a_{kj}^{(k)} \qquad (i, j = k+1, \ldots, n) \tag{9.35}$$

となる。ここで，$a_{ij}^{(k)} = a_{ji}^{(k)}$（$i, j = k, \ldots, n$）を使って上式を変形すると，

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ji}^{(k)} - \frac{a_{ki}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \cdot a_{jk}^{(k)} \\ &= a_{ji}^{(k)} - \frac{a_{jk}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \cdot a_{ki}^{(k)} \\ &= a_{ji}^{(k+1)} \end{aligned} \tag{9.36}$$

となる。したがって，命題は $k+1$ についても成り立つ。よって帰納法により命題は $1 \leq \forall k \leq n$ について成り立つ。

計算量と記憶領域　上記の命題より，対称行列に対するガウスの消去法では，行列 $A^{(k)}$ の上三角部分のみを記憶し，計算を行えばよい。計算のために下三角部分の要素 $a_{ji}^{(k)}$ が必要な場合は，これを $a_{ij}^{(k)}$ で代用する。これにより，計算量と計算に必要な記憶領域は半分に削減できる。