

コラム：LU 分解

正方行列 A を, 対角成分がすべて 1 である下三角行列 L と対角成分に 0 を含まない上三角行列 U の積に表すことを **LU 分解** という.

$$A = LU.$$

LU 分解の L と U は, それぞれ lower triangular matrix, upper triangular matrix からきている. LU 分解を求めるには, 行基本変形 (2.2 節) を用いる. 例として,

$$A = \begin{bmatrix} 5 & 12 & 2 \\ 10 & 25 & 25 \\ -10 & -21 & 65 \end{bmatrix}$$

の LU 分解を求めてみよう. 最初に, A の第 1 行を使って第 2 行と第 3 行の第 1 成分を消す.

$$A \rightarrow A_1 = \begin{bmatrix} 5 & 12 & 2 \\ 0 & 1 & 21 \\ 0 & 3 & 69 \end{bmatrix}$$

行基本変形は, 基本行列を左にかける操作に相当するので,

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} A$$

である. ここで現れる基本行列は, 2.2 節で導入した基本行列の中で (III) 型と呼ばれる下三角行列であることに注意しよう. さらに A_1 について, 第 2 行を使って第 3 行の先頭項を消す操作を行う.

$$A_1 \rightarrow A_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 12 & 2 \\ 0 & 1 & 21 \\ 0 & 3 & 69 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 12 & 2 \\ 0 & 1 & 21 \\ 0 & 0 & 6 \end{bmatrix}.$$

このときも、用いる基本行列は (III) 型と呼ばれる下三角行列である. $U = A_2$ とおくと, これは上三角行列であり,

$$U = \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}^B A$$

となる. 右辺の 3 つの行列はいずれも対角成分がすべて 1 である下三角行列であるから, B および B^{-1} も対角成分がすべて 1 である下三角行列になる. したがって, $L = B^{-1}$ とおけば,

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -2 & 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & 12 & 2 \\ 0 & 1 & 21 \\ 0 & 0 & 6 \end{bmatrix}$$

となって, 行列 A の LU 分解を得る.

LU 分解はいつも存在するわけではない (行基本変形の操作 (III) (定義 2.2.1) だけで上三角行列が得られるとは限らないことによる). 一方, LU 分解が存在するとき, 行列 L と U は一意に定まる. 実際, $LU = L'U'$ とすれば, $(L')^{-1}L = U'U^{-1}$ であり, 左辺は対角成分がすべて 1 である下三角行列, 右辺は上三角行列であるから, 両者が一致するには単位行列しかない. よって, $(L')^{-1}L = U'U^{-1} = E$, 従って $L = L', U = U'$ となる.

LU 分解を利用して連立 1 次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を解くには次のように行う. まず $A\mathbf{x} = \mathbf{b} \iff LU\mathbf{x} = \mathbf{b}$ に注意して, $\mathbf{y} = U\mathbf{x}$ とおいて, $L\mathbf{y} = \mathbf{b}$ を解く. その際, L は下三角行列なので, 簡単に解を求めることができる (前進代入法と呼ばれる). 次に, この解 $\mathbf{y}$ を使って $U\mathbf{x} = \mathbf{y}$ を解く. このときも U が上三角行列なので, 簡単に解を求めることができる (後退代入法という). こうして, 前進代入と後退代入の 2 段階の計算によって解を求めることができる.

LU 分解による解法の特長は, 計算コストを抑えることができる点にある. 特に係数行列 A を固定し $\mathbf{b}$ をいろいろ変えるときに, おおきな効力を発揮する. 例えば, 非線形微分方程式など解くことが困難な微分方程式の近似解を求めるために, 有限要素法と呼ばれる手法がある. 有限要素法を実行する過程で, 連立 1 次方程式を (大量に) 解く作業が生じるが, これはちょうど, 係数行列 A が一定で $\mathbf{b}$ がいろいろ変わるという設定になっている. そこで, 最初に A の LU 分解を求め, その行列情報をメモリに保存しておく. この状態で計算を実行することにより, 計算時間がおおきく短縮されるのである. LU 分解は, コンピュータによる数値計算の分野で重要なツールであり, 有限要素法に限らず広く利用されている.