# 連立1次方程式の解法

山本昌志*

2003 年 10 月 21 日

## 1 連立方程式

### 1.1 表現方法

言うまでも無く連立 1 次方程式 (Linear Equations) は、次のような形をしています。

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1N}x_N &= b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2N}x_N &= b_2 \\
a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \cdots + a_{3N}x_N &= b_3 \\
&\vdots \\
a_{M1}x_1 + a_{M2}x_2 + a_{M3}x_3 + \cdots + a_{MN}x_N &= b_M
\end{aligned}
\tag{1}
$$

ここでは、$M = N$ の場合を考えます。$M \neq N$ のようなものは、ここでの講義のレベルを超えますので、興味がある人は自分で学習してください。このような連立 1 次方程式を計算することは、実際に工学の問題でしばしば現れます。例えば、編微分方程式を離散化して解く場合などです。その場合、方程式の次元数がかなり大きく、100 万次元くらいにはすぐになります。100 万といっても、3 次元問題だと、$100 \times 100 \times 100$ 程度です。

式 (1) は行列とベクトルで書くと、式がすっきりして考えやすくなります。書き直すと、

$$
\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{2}
$$

となります。それぞれの行列とベクトルは、

$$
\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2N} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3N} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & a_{N3} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} \tag{3}
$$

*国立秋田工業高等専門学校　電気工学科

を表します。行列は大文字の太文字 (bold) スタイル、ベクトルは小文字の太文字スタイル、それぞれの成分は標準スタイルで表すことが多いです。

ここで、解く問題は行列 $\boldsymbol{M}$ が $N \times N$ の正方行列で、その行列式がゼロでないものとします。要するに、普通に解ける連立方程式です。ここで、解くべき問題は、既知の $\boldsymbol{M}$ と $\boldsymbol{b}$ から、行列方程式 (2) を満たす、$\boldsymbol{x}$ を求めることです。この行列方程式解く過程で、$\boldsymbol{M}$ の逆行列や行列式の値を求めることができます。逆行列や行列式は連立方程式と密接にかかわっています。

通常、連立 1 次方程式 (1) は

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2N} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3N} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & a_{N3} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} \tag{4}$$

と書き表せます。このようにすると、見通しがかなり良くなります。皆さんも、今後連立方程式を書くときは、行列とベクトルで書くようにしてください。ちょっとばかり格好良いです。

行列やベクトルを使うと、格好良いばかりでなくコンピューターで扱いやすくなります。例えば、行列 $\boldsymbol{A}$ の要素 $a_{ij}$ はプログラム中では 2 次元配列 `a[i][j]` として扱えます。同様にベクトル $b_k$ は 1 次元配列 `b[k]` として扱えます。

## 1.2 計算方法

連立 1 次方程式は、クラメールの公式により、解のベクトル $\boldsymbol{x}$ は四則演算で計算できます。行列 $\boldsymbol{A}$ が正則 ($\det A \neq 0$) ならば、解は

$$x_j = \frac{1}{\det A} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1j-1} & b_{1j} & a_{1j+1} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{1j-1} & b_{1j} & a_{1j+1} & \cdots & a_{2N} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{1j-1} & b_{1j} & a_{1j+1} & \cdots & a_{3N} \\ \vdots & & & \ddots & & & & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & a_{N3} & \cdots & a_{1j-1} & b_{1j} & a_{1j+1} & \cdots & a_{NN} \end{vmatrix} \tag{5}$$

より求められます。これは、2 つの行列式を計算する必要があり、大変計算量が多いです。したがって、$N \geq 4$ の場合は適しません。

次に考えられるのは、$\boldsymbol{A}$ の逆行列 $\boldsymbol{A}^{-1}$ を用いて、$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ から計算する方法です。この方法も、計算量と精度の面で問題があります。

連立 1 次方程式の計算方法は大別して、2 通りあります。 1 つは、ここで学習する消去法です。もう 1 つは反復法です。どちらの方法が良いかは、係数行列 $\boldsymbol{A}$ の性質によります。一般に、$\boldsymbol{A}$ が密なとき、即ちほとんどの要素がゼロでないときは、消去法が有利といわれています。一方、殆どの要素がゼロの $\boldsymbol{A}$ が疎のとき、反復法が有利といわれています。

ここでは消去法を学びますが、反復法について簡単に述べておきます。まず、係数行列を $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} - \boldsymbol{C}$ と変形します。すると、元の連立 1 次方程式は、$\boldsymbol{Bx} = \boldsymbol{Cx} + \boldsymbol{b}$ となります。これを解くために、漸化式

$\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{b}$ とします。もし、初期値 $\boldsymbol{x}^{(0)}$ がよければ、$\boldsymbol{x}^{(\infty)}$ は真の解 $\boldsymbol{x}$ に収束します。もちろん、$\boldsymbol{B}$ は容易に計算できる連立 1 次方程式になるように選びます。この選び方により、ヤコビの反復法やガウス・ザイデル法、SOR 法などがあります。

## 2　ガウス消去法と後退代入

ガウス消去法とガウス・ジョルダン法は単純で、皆さんが今まで連立 1 次方程式を計算してきた方法と同じです。

ガウス消去法というのは、連立方程式 (4) を次にように変形させて、解く方法です。

$$\begin{pmatrix} a'_{11} & a'_{12} & a'_{13} & \cdots & a'_{1N} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & \cdots & a'_{2N} \\ 0 & 0 & a'_{33} & \cdots & a'_{3N} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a'_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ b'_3 \\ \vdots \\ b'_N \end{pmatrix} \tag{6}$$

このように式を変形する方法をガウスの消去法と言います。実際の変形方法については、次のガウス・ジョルダン法とほとんど同じですので、次節を参考にしてください。このように式が変形できると後は簡単で、次にように $x_N$ から $x_1$ まで順次計算していきます。$vmx$ の値は、

$$\begin{aligned} x_N &= \frac{1}{a'_{NN}} b'_N \\ x_{N-1} &= \frac{1}{a'_{N-1N-1}} \left( b'_{N-1} - a'_{N-1N} x_N \right) \\ x_{N-2} &= \frac{1}{a'_{N-2N-2}} \left( b'_{N-2} - a'_{N-2N-1} x_{N-1} - a'_{N-2N} x_N \right) \\ &\ \vdots \end{aligned} \tag{7}$$

と求めることができます。この式は、

$$x_i = \frac{1}{a'_{ii}} \left[ b'_i - \sum_{j=i+1}^{N} a'_{ij} x_j \right] \tag{8}$$

とまとめることができます。この式を使って、$N$〜0 まで処理することを後退代入といいます。重要なことは、後ろ $N$ から処理することです。決して、1 から処理することはできません。ガウス消去法と後退代入により連立 1 次方程式は、コンピューターで容易に解くことができます。

## 3　ガウス・ジョルダン法

逆行列が不要であれば、ガウス・ジョルダン法よりも、後で述べる LU 分解の法が計算速度は速い。しかし、教育的効果を考えると、両方の方法を知っておくのは良いことです。

### 3.1　基本的な考え方

ガウス・ジョルダン (Gauss-Jordan) 法というのは、連立方程式 (4) を次にように変形させて、解く方法です。

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ b'_3 \\ \vdots \\ b'_N \end{pmatrix} \tag{9}$$

この式から明らかに、求める解 $x_i = b'_i$ となります。これをどうやって求めるか?。コンピューターで実際に計算する前に、人力でガウス・ジョルダン法で計算してみましょう。例として、

$$\begin{cases} 3x + 2y + z = 10 \\ x + y + z = 6 \\ x + 2y + 2z = 11 \end{cases} \tag{10}$$

をガウス・ジョルダン法で計算してみましょう。

まずは、1 行目の $x$ の係数を 1 に、2 と 3 行目のそれは 0 にします。そのために、1 行目は $x$ の係数の値で割ります。2 行目と 3 行目は、1 行目に適当な係数を書けて引きます。次の通りです。

$$\begin{cases} x + \dfrac{2}{3}y + z = \dfrac{10}{3} \\ x + y + z = 6 \\ x + 2y + 2z = 11 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} x + \dfrac{2}{3}y + \dfrac{1}{3}z = \dfrac{10}{3} \\ 0 + \dfrac{1}{3}y + \dfrac{2}{3}z = \dfrac{8}{3} \\ 0 + \dfrac{4}{3}y + \dfrac{5}{3}z = \dfrac{22}{3} \end{cases} \tag{11}$$

つぎに、2 行目の y の係数を 1 にして、1 と 3 行目のそれを 0 にします。

$$\begin{cases} x + \dfrac{2}{3}y + \dfrac{1}{3}z = \dfrac{10}{3} \\ 0 + y + 2z = 8 \\ 0 + \dfrac{4}{3}y + \dfrac{5}{3}z = \dfrac{22}{3} \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} x + 0 - z = -2 \\ 0 + y + 2z = 8 \\ 0 + 0 - z = -3 \end{cases} \tag{12}$$

同じことを $z$ についても繰り返します。すると、

$$\begin{cases} x + 0 - z = -2 \\ 0 + y + 2z = 8 \\ 0 + 0 + z = 3 \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} x + 0 + 0 = 1 \\ 0 + y + 0 = 2 \\ 0 + 0 + z = 3 \end{cases} \tag{13}$$

となります。従って、連立方程式 (10) の解は、

$$\begin{cases} x = 1 \\ y = 2 \\ z = 3 \end{cases} \tag{14}$$

となります。これがガウス・ジョルダン法です。

ガウス・ジョルダン法のイメージが湧いたと思いますので、もう少し数学的にその内容を説明します[1]。そのために、次の線形行列方程式を考えます。ここでは、紙面の関係で係数行列が $4\times 4$ について述べますが、一般的に $N$ への拡張は容易です。

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \cdot \left[ \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \sqcup \begin{pmatrix} y_{11} & y_{12} & y_{13} & y_{14} \\ y_{21} & y_{22} & y_{23} & y_{24} \\ y_{31} & y_{32} & y_{33} & y_{34} \\ y_{41} & y_{42} & y_{43} & y_{44} \end{pmatrix} \right] = \left[ \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} \sqcup \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \tag{15}$$

ここで、$\sqcup$ は列拡大、つまりこの両側の括弧を取り去って行列をくっつけて幅を広くすること意味します。この式から、容易に

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{16}$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{E} \tag{17}$$

が分かります。もちろん、$\boldsymbol{E}$ は単位行列です。要するに行列方程式 (15) を解くということは、この 2 つの連立方程式を解くことに他なりません。$\boldsymbol{x}$ はもとの方程式 (1) の解となり、$\boldsymbol{Y}$ は $\boldsymbol{A}$ の逆行列になっています。

式 (15) について、以下のことが容易に分かります。

- $\boldsymbol{A}$ の任意の 2 行を入れ替えて、それに対応する $\boldsymbol{b}$ と $\boldsymbol{E}$ を入れ替えた場合、$\boldsymbol{x}$ や $\boldsymbol{Y}$ の値と順序は変わらない。ただし、$\boldsymbol{E}$ はもはや単位行列ではない。これは連立方程式の順序を入れ替えて書いていることに相当している。
- $\boldsymbol{A}$ の任意の行を、その行と別の行との線形結合に置き換え、同時に対応する $\boldsymbol{b}$ と $\boldsymbol{E}$ も同様に置き換える。この場合、$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{Y}$ の値と順序は変わらない。当然、この場合も $\boldsymbol{E}$ はもはや単位行列ではない。
- $\boldsymbol{A}$ の任意の 2 列を入れ替えて、それに対応する $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{Y}$ の行を入れ替えれば、$\boldsymbol{b}$ と $\boldsymbol{E}$ の順序は入れ替える必要は無い。この場合、解の行の順序が変わるので、最後に元に戻す操作が必要になる。

この 3 つの操作を組み合わせて、係数行列 $\boldsymbol{A}$ を単位行列に変換するのがガウス・ジョルダン法です。$\boldsymbol{A}$ が単位行列に変換されれば、右辺に $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{Y}$ が表れます。したがって、解と逆行列が求められたことになります。もし、逆行列が不要であれば $\boldsymbol{x}$ だけ計算し、逆行列のみ必要であれば $\boldsymbol{Y}$ のみ計算することになります。

### 3.2 ピボット選択

先に示した、ガウス・ジョルダン法の 3 つの基本操作のうち、2 番目しか使わない方法を「ピボット選択なしのガウス・ジョルダン法」といいます。最初、人力で連立方程式を解いた方法です。この方法の明らかにまずい点は、もし 1 にしたい対角要素がゼロの場合、計算ができなくなってしまいます。この割る要素をピボット (pivot) と言います。ゼロでないにしても、そのピボットが非常に小さい値の場合、丸め誤差が大きくなります[2]。このようなことから、普通はピボット選択なしのガウス・ジョルダン法というものは考えられません。

[1]この辺の議論は 技術評論社の「NUMERICAL RECIPES in C」を参考にしています。これは数値計算の良い教科書です。

[2]数値計算の場合、小さな数で割ることを非常に嫌います。誤差の入り込む要因です。式を変形して、できるだけそれを避けなくてはなりません。

この問題を避けるためにどうするかというと、ピボット選択という方法を使います。方法は簡単で、先に示した 3 つの基本操作のうち、1 番目と 3 番目を使って、対角に素性の良い要素をもってきます。1 番目の操作のみを用いて行を入れ替える方法を、部分ピボット選択 (partial pivoting) といいます。1 番目の操作と 3 番目の操作を使って、行と列を入れ替えるのを完全ピボット選択 (full pivoting) といいます。すでにある程度出来上がっている単位行列を壊したくないので、ピボットの選択は操作している行のしたの行から選ばなくてはなりません。

部分ピボット選択の方が明らかに簡単です。解の行列を入れ替える必要が無いからです。その場合、行の入れ替えしかしないので、ピボットはその列から選ばなくてはなりません。完全ピボット選択の方が選べる要素が多いのですが、最終的な解の精度はあまり変わらないようです。したがって、ここではプログラムの簡単な部分ピボット選択で計算しましょう。

次に考えなくてはならないのは、ピボットを選択する基準です。簡単に言えば、大きな要素選択すれば大体よいです。しかし、ある行を 100 万倍して、それに対応する右辺の行も 100 万倍することもできますので、ただ大きいというだけでは問題がありそうです。どうするかと言うと、各方程式の最大係数を 1 に規格化して、最大のものをピボットに選ぶことが行われています。この方法を陰的ピボット選択 (implicit pivoting) と呼ばれています。

これで、ピボットの問題も片付いたので、フローチャートを書いてみます。

# 4 LU 分解

## 4.1 LU 分解による解の計算方法

係数行列 $\boldsymbol{A}$ が下三角行列 $\boldsymbol{L}$ と上三角行列 $\boldsymbol{U}$ の積に展開できたとします。

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU} \tag{18}$$

下三角行列と上三角行列の要素を書き出すと

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 & 0 \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & 0 \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} \\ 0 & \beta_{22} & \beta_{23} & \beta_{24} \\ 0 & 0 & \beta_{33} & \beta_{34} \\ 0 & 0 & 0 & \beta_{14} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} \tag{19}$$

となります。

このように LU 分解できると、連立 1 次方程式は

$$\boldsymbol{Ax} = (\boldsymbol{LU})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{L}(\boldsymbol{Ux}) = \boldsymbol{b} \tag{20}$$

となります。これをさらに書き換えると、

$$\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b} \tag{21}$$

$$\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y} \tag{22}$$

となります。これらの連立方程式の解 $\boldsymbol{y}$ と $\boldsymbol{x}$ は、それぞれの係数が三角行列なので容易に計算できます (ガウス消去法と後退代入の説明を見よ)。$y$ の方は、係数が下三角行列なので 1〜$N$ まで前進代入により解きます。具体的には、

$$
\begin{aligned}
y_1 &= \frac{1}{\alpha_1 1} b_1 \\
y_i &= \frac{1}{\alpha_i i}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} y_j\right) \qquad i = 2, 3, \cdots, N
\end{aligned}
\tag{23}
$$

です。この $y$ が求まったならば、今度は係数が上三角行列の式 (22) の $\boldsymbol{x}$ を求めます。これは、$N$〜1 の順序で計算する後退代入を使います。

$$
\begin{aligned}
x_N &= \frac{1}{\beta_{NN}} y_N \\
x_i &= \frac{1}{\beta_i i}\left(y_i - \sum_{j=1+1}^{N} \beta_{ij} x_j\right) \qquad i = N-1, N-2, \cdots, 1
\end{aligned}
\tag{24}
$$

これらの前進代入と後退代入は、コンピューターにとって非常に簡単に計算できます。これは、係数行列 $A$ を LU 分解できれば、連立方程式は簡単に解けると言っています。次節で LU 分解の方法を詳しく説明します。

いったん LU 分解が出来てしまえば、式 (1) の右辺 $\boldsymbol{b}$ が変わっても、その LU 分解の形を変える必要がありません。右辺が変わっても、LU 分解は 1 回で済みます。これが、ガウスの消去法と後退代入を組み合わせた方法やガウス・ジョルダン法に比べて、際立って優れている点です。

## 4.2 LU 分解 (クラウトのアルゴリズム)

LU 分解するということは、式 (19) の $\alpha_{ij}$ と $\beta_{ij}$ を計算することにほかなりません。この式の行列方程式は、$N^2 + N$ の未知数と $N^2$ の式を含みます。未知数の数が方程式の数より多いので、$N$ 個の未知数を勝手に決めて残りを計算することが可能です。従って、LU 分解は一意に決まりませんので、計算しやすいように $N$ 個の未知数を決めることができます。ここでは、LU 分解のクラウト (Crout) のアルゴリズムに従い、

$$
\alpha_{ii} = 1 \qquad i = 1, 2, 3, \cdots, N \tag{25}
$$

とします。

それでは、クラウトのアルゴリズムによる LU 分解の手順を示します。

1. $\alpha_{ii} = 1 \quad (i = 1, \cdots, N)$ とします。この操作により、解くべき行列方程式 (19) は

$$
\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 \\
\alpha_{21} & 1 & 0 & 0 \\
\alpha_{31} & \alpha_{32} & 1 & 0 \\
\alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & 1
\end{pmatrix}
\cdot
\begin{pmatrix}
\beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} \\
0 & \beta_{22} & \beta_{23} & \beta_{24} \\
0 & 0 & \beta_{33} & \beta_{34} \\
0 & 0 & 0 & \beta_{14}
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\
a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\
a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\
a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44}
\end{pmatrix}
\tag{26}
$$

と変形できます。

2. この式を見ると、$\beta_{ij}$ と $\alpha_{ij}$ が次に示す順序で簡単に求められることが分かります。まずは式を見て分かるように、$\beta_{11}$ が直ちに計算できます。次に $\beta_{11}$ を利用して、$\alpha_{21}, \alpha_{31}, \alpha_{41}$ を求めることができます。これで、$L$ と $U$ の第 1 列目が求められました。次に第 2 列目です。これも $\beta_{12}$ は直ちに計算できます。そうして、これまで分かっている $\beta_{ij}$ と $\alpha_{ij}$ を使うと、$\beta_{22}, \alpha_{32}, \alpha_{42}$ を求めることができます。これで第 2 列目は終わりで、同じことを繰り返すと、全ての $\beta_{ij}$ と $\alpha_{ij}$ が計算できます。これをアルゴリズムにすると次のようになります。
   $j = 1, 2, 3, \cdots, N$ という順序で計算していきます。$\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{U}$ の $j$ 列目を計算することになります。具体的には、以下のようにして、$j$ 列目の $\beta_{ij}$ と $\alpha_{ij}$ を求めます。

   - まず、$i = 1, 2, \cdots, j$ について、次式に従い $\beta_{ij}$ を計算します。
   $$\begin{aligned} \beta_{1j} &= a_{1j} \\ \beta_{ij} &= a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \alpha_{ik}\beta_{kj} \end{aligned} \tag{27}$$
   - 次に、$i = j+1, j+2, \cdots, N$ について、$\alpha_{ij}$ を計算します。
   $$\alpha_{ij} = \frac{1}{\beta_{jj}} \left( a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{ik}\beta_{kj} \right) \tag{28}$$
   - これで、$\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{U}$ の $j$ 列目が完成したので、同じ操作を $j+1$ 列目に行います。同じことを繰り返して、LU 分解の行列を完成させます

この方法により、LU 分解ができます。次に示すピボット選択をしなければ、アルゴリズムは非常に単純です。

### 4.3 ピボット選択

ここでも、ピボット選択の問題が出てきます。式 (28) の $\beta_{jj}$ で割る部分です。安定な解を求めるためには、ピボット選択は必要不可欠です。完全ピボット選択は複雑なので、部分ピボット選択で十分でしょう。

ではどうするかですが、これも途中 ($j$ 列) まで分解した行列は崩したくありません。そのためには、行列 $\boldsymbol{L}$ の行を交換し、それに対応した行列 $\boldsymbol{A}$ の行を交換すれば問題がもっとも少なくなります。当然、行列 $\boldsymbol{U}$ は行も列も変化しません。最終的には行を交換した行列 $\boldsymbol{A}'$ の LU 分解が出来上がります。連立 1 次方程式を解くときには、同様に $\boldsymbol{b}$ の行も交換しておきます。ただし、行の交換であるため、解 $\boldsymbol{x}$ の要素の順序は入れ替わりません。

つぎに、どのようにして交換する行を決めるかです。一般的には、$\beta jj$ が大きくなるように選択すれば良い結果が得られます。クラウト法のピボット選択は、次のように進めます。$j$ 列目のピボットを選択する場合です。

1. まずは、$j-1$ 列目までの行列 $\boldsymbol{L}$ の各行の要素の最大値を 1 に規格化します。同時に、対応する行列 $\boldsymbol{A}$ の行も同じ係数をかけます。

2. そうして、

$$\gamma_i = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \alpha_{ik}\beta_{kj} \qquad (i = j, j+1, \cdots, N) \tag{29}$$

を計算します。これは、式 (27) と同じ、式 (28) と $\beta_{jj}$ で割ること以外は同じであることに注意してください。

3. 最大の $\gamma_i$ となるものをピボットと選択します。

4. 最大のピボットとなる行が分かったので、後は元 (規格化前) の $\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{A}$ を用いて、式 (28) と $\beta_{jj}$ を計算します。

これがピボット探索のルーチンです。実際には、ピボット作成用の関数を作成して、計算をすることになります。

# 5 練習問題

## 5.1 ガウス・ジョルダン法

1. 次の連立方程式をピボット選択無しのガウス・ジョルダン法で計算するプログラムを作成しなさい。これは、教科書の P.22 の例題 2 です。プログラムは、$N = 3$ のみならず、$N = 100$ 程度まで容易に計算できるように汎用的にすること。

$$\begin{cases} 2x - 4y + 6z = 5 \\ -x + 7y - 8z = -3 \\ x + y - 2z = 2 \end{cases}$$

2. プログラムが完成したら、逆行列を計算するルーチンも追加しなさい。そして、逆行列と元の行列をかけ合わせたら単位行列になることを確認しなさい。

3. 逆行列が完成したら、ピボット選択のルーチンを追加しなさい。

4. ピボット選択のルーチンが完成したならば、次の連立方程式を計算しなさい。

$$a_{ij} = \cos\left[\frac{\pi(i-1)(j-1)}{N}\right] \qquad i, j = 1, 2, \cdots, N$$

$$b_i = \frac{i-1}{N} \qquad i = 1, 2, \cdots, N$$

これは、三角波のフーリエ変換になっている。とりあえず、N=100 程度で計算してみて、最後に

$$f(x) = \sum_{j=1}^{N} x_i \cos\left[(j-1)x\right]$$

をプロットして三角波になっていうることを確認せよ。