拡散方程式の陰的数値解法

拡散方程式の後退差分スキーム

以下の 1 次元拡散方程式を考える.

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial U(x,t)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2} \quad (0 \le x \le 1),\\
&U(x,0) = f(x),\\
&U(0,t) = U(1,t) = 0
\end{aligned}
\tag{1}
$$

ここで, κ は拡散係数である.

(1) 式を時間方向には 1 段階差分スキーム, 空間方向には 2 次精度中心差分を用いて離散化する. $0 \le x \le 1$ を N 分割し, $U(i\Delta x, n\Delta t) = U_i^n$ と表すことにする[1)]. そのとき離散化した式は,

$$
\begin{aligned}
\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} &= \kappa \frac{1}{\Delta x}\left[\alpha\left(\left.\frac{\partial U^n}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2}} - \left.\frac{\partial U^n}{\partial x}\right|_{i-\frac{1}{2}}\right) + \beta\left(\left.\frac{\partial U^{n+1}}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2}} - \left.\frac{\partial U^{n+1}}{\partial x}\right|_{i-\frac{1}{2}}\right)\right]\\
&= \kappa \frac{1}{\Delta x}\left[\alpha\left(\frac{U_{i+1}^n - U_i^n}{\Delta x} - \frac{U_i^n - U_{i-1}^n}{\Delta x}\right) + \beta\left(\frac{U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}}{\Delta x} - \frac{U_i^{n+1} - U_{i-1}^{n+1}}{\Delta x}\right)\right]\\
&= \kappa\left(\alpha \frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{\Delta x^2} + \beta \frac{U_{i+1}^{n+1} - 2U_i^{n+1} + U_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2}\right).
\end{aligned}
\tag{2}
$$

ここで,

$\alpha = 1, \beta = 0$	オイラースキーム
$\alpha = 0, \beta = 1$	後退差分スキーム
$\alpha = \frac{1}{2}, \beta = \frac{1}{2}$	台形スキーム

である.

1)詳細は GFD ノート 1 元拡散方程式 [1] を参照されたい.

今回は後退差分スキームを用いる. よって,

$$\frac{U_i^{n+1}-U_i^n}{\Delta t}=\kappa\left(\frac{U_{i+1}^{n+1}-2U_i^{n+1}+U_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}\right). \tag{3}$$

今 $p\equiv\kappa\dfrac{\Delta t}{\Delta x^2}$ とし, 整理しなおすと,

$$-pU_{i+1}^{n+1}+(1+2p)U_i^{n+1}-pU_{i-1}^{n+1}=U_i^n \tag{4}$$

となる. 境界条件より $i=1$ のとき $U_0=0$ なので,

$$-pU_2^{n+1}+(1+2p)U_1^{n+1}=U_1^n.$$

$i=N-1$ では $U_N=0$ なので,

$$(1+2p)U_{N-1}^{n+1}-pU_{N-2}^{n+1}=U_{N-1}^n.$$

$i=1,2,\ldots,N-1$ について式を並べると,

$$\begin{aligned}
-pU_2^{n+1}+&(1+2p)U_1^{n+1} &&=U_1^n,\\
-pU_3^{n+1}+&(1+2p)U_2^{n+1}-pU_1^{n+1}&&=U_2^n,\\
&\vdots\\
-pU_{i+1}^{n+1}+&(1+2p)U_i^{n+1}-pU_{i-1}^{n+1}&&=U_i^n,\\
&\vdots\\
-pU_{N-1}^{n+1}+&(1+2p)U_{N-2}^{n+1}-pU_{N-3}^{n+1}&&=U_{N-2}^n,\\
&(1+2p)U_{N-1}^{n+1}-pU_{N-2}^{n+1}&&=U_{N-1}^n
\end{aligned}$$

となる. これは行列形式で表すことができて,

$$A\cdot\boldsymbol{U}^{n+1}=\boldsymbol{U}^n. \tag{5}$$

ここで $\boldsymbol{U}^n=(U_1^n,U_2^n,\ldots,U_{N-1}^n)^t$, $\boldsymbol{U}^{n+1}=(U_1^{n+1},U_2^{n+1},\ldots,U_{N-1}^{n+1})^t$. A は $N-1\times N-1$ の帯行列で,

$$A=\begin{pmatrix}
(1+2p) & -p & 0 & & & \\
-p & (1+2p) & -p & 0 & & \mathbf{0}\\
0 & -p & (1+2p) & -p & 0 & \\
 & & \ddots & & & \\
 & \mathbf{0} & & & -p & (1+2p)
\end{pmatrix} \tag{6}$$

である [2].

[2] 今回の A は三重対角行列である. 三重対角行列とは $|i-j|>1$ の成分がすべて 0 の行列のことである. つまり, 0 出ない成分が対角線上とその前後のみに分布している行列である.

LU 分解

$\boldsymbol{U}^{n+1}$ は A の逆行列 A^{-1} を用いて.

$$\boldsymbol{U}^{n+1} = A^{-1}\boldsymbol{U}^{n}$$

で計算できる. これを我々もよく知っているクラメル (Cramer) の公式で解く場合 $n+1$ 個の n 次行列式を計算をしなくてはならず非効率的である. 実際数値計算ではクラメルの公式を用いることはほとんどない. そのため, 他の解法で連立 1 次方程式を解かなければならない. そこで LU 分解を用いて計算する [3].

今, n 次連立 1 次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{7}$$

を考える. ただし, $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$, $\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \ldots, b_N)$. A は n 次正方行列で,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \tag{8}$$

である. A を

$$A = LU \tag{9}$$

と分解する手順を考える. ここで L は下三角行列, U は対角要素が 1 である上三角行列であり,

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}, \tag{10}$$

$$U = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & 1 & \cdots & u_{3n} \\ & \mathbf{0} & & \ddots & \vdots \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \tag{11}$$

[3] 連立 1 次方程式の解法としては昔よく使われていたガウス・ジョルダン (Guss-Jordan) の掃き出し法がある. ガウス・ジョルダンの掃き出し法は LU 分解に比べて計算コストがかかるので現在は LU 分解を用いることが多い. 付録にてガウス・ジョルダンの掃き出し法の概要を紹介し, LU 分解との計算コストの比較を行っている.

とする. この分解を LU 分解という[4]. この分解を行うことで速度と精度が良いプログラムが比較的容易に書けるようになる. (9) 式を要素ごとに書く.

第 1 行

1 行目は

$$
\begin{aligned}
a_{11} &= l_{11}, \\
a_{12} &= l_{11}u_{12}, \\
a_{13} &= l_{11}u_{13}, \\
a_{14} &= l_{11}u_{14}, \\
a_{15} &= l_{11}u_{15}, \\
&\vdots.
\end{aligned}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
l_{11} &= a_{11}, \\
u_{12} &= \frac{a_{12}}{l_{11}}, \\
u_{13} &= \frac{a_{13}}{l_{11}}, \\
u_{14} &= \frac{a_{14}}{l_{11}}, \\
u_{15} &= \frac{a_{15}}{l_{11}}, \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

となる.

[4] U の対角要素が 1 の方法をドウリトル (Doolittle) 法, L の対角要素が 1 の方法をクラウト (Crout) 法と呼ぶ. 今回はドウリトル法を用いる.

第 2 行

2 行目は

$$
\begin{aligned}
a_{21} &= l_{21}, \\
a_{22} &= l_{21}u_{12} + l_{22}, \\
a_{23} &= l_{21}u_{13} + l_{22}u_{23}, \\
a_{24} &= l_{21}u_{14} + l_{22}u_{24}, \\
a_{25} &= l_{21}u_{15} + l_{22}u_{25}, \\
&\vdots.
\end{aligned}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
l_{21} &= a_{21}, \\
l_{22} &= a_{22} - l_{21}u_{12}, \\
u_{23} &= \frac{a_{23} - l_{21}u_{13}}{l_{22}}, \\
u_{24} &= \frac{a_{24} - l_{21}u_{14}}{l_{22}}, \\
u_{25} &= \frac{a_{25} - l_{21}u_{15}}{l_{22}}, \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

となる.

第 3 行

3 行目は

$$
\begin{aligned}
a_{31} &= l_{31}, \\
a_{32} &= l_{31}u_{12} + l_{32}, \\
a_{33} &= l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + l_{33}, \\
a_{34} &= l_{31}u_{14} + l_{32}u_{24} + l_{33}u_{34}, \\
a_{35} &= l_{31}u_{15} + l_{32}u_{24} + l_{33}u_{35}, \\
&\vdots.
\end{aligned}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
l_{31} &= a_{31}, \\
l_{32} &= a_{32} - l_{31}u_{12}, \\
l_{33} &= a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23}, \\
u_{34} &= \frac{a_{34} - l_{31}u_{14} - l_{32}u_{24}}{l_{33}}, \\
u_{35} &= \frac{a_{35} - l_{31}u_{15} - l_{32}u_{25}}{l_{33}}, \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

となる.

第 k 行

k 行目は,

$i \leq k$ のとき

$$
a_{ki} = \sum_{j=1}^{i-1} l_{kj}u_{ji} + l_{ki}.
$$

よって,

$$
l_{ki} = a_{ki} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{kj}u_{ji}. \tag{12}
$$

$i > k$ のとき

$$
a_{ki} = \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}u_{ji} + l_{kk}u_{ki}.
$$

よって,

$$
u_{ki} = \frac{a_{ki} - \displaystyle\sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}u_{ji}}{l_{kk}} \tag{13}
$$

となる.

第 n 行

最終行である n 行目は,

$$
\begin{aligned}
a_{n1} &= l_{n1}, \\
a_{n2} &= l_{n1}u_{12} + l_{n2}, \\
&\vdots \\
a_{nn} &= \sum_{j=1}^{n-1} l_{nj}u_{jn} + l_{nn}.
\end{aligned}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
l_{n1} &= a_{n1}, \\
l_{n2} &= a_{n2} - l_{n1}u_{12}, \\
&\vdots \\
l_{nn} &= a_{nn} - \sum_{j=1}^{n-1} l_{nj}u_{jn}
\end{aligned}
$$

となる.

従って, 行列 A は

$$
A = \begin{pmatrix}
l_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\
l_{21} & l_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & & l_{nn}
\end{pmatrix}, \tag{14}
$$

となる.

LU 分解法:前進代入と後退代入

行列 A が LU 分解できたので (7) 式と (9) 式から $\boldsymbol{x}$ を求めることができる.

今, $\boldsymbol{y} = U\boldsymbol{x}$ と置くと, (7) 式は 2 つの連立 1 次方程式

$$
L\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}, \tag{15}
$$

$$
U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \tag{16}
$$

に分けることができる. (15) 式から $\boldsymbol{y}$ を求めて, その $\boldsymbol{y}$ を用いて (16) 式から $\boldsymbol{x}$ を求めれば (7) 式の解が求められたということである.

(15) 式と (16) 式は L と U が三角行列のために容易に解くことができる. (15) 式を要素ごとに第 1 式から第 n 式まで書くと,

$$
\begin{aligned}
l_{11}y_1 &= b_1, \\
l_{21}y_1 + l_{22}y_2 &= b_2, \\
l_{31}y_1 + l_{32}y_2 + l_{33}y_3 &= b_3, \\
&\vdots \\
\sum_{j=1}^{n-1} l_{nj}y_j + l_{nn}y_n &= b_n.
\end{aligned}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
y_1 &= \frac{b_1}{l_{11}}, \\
y_2 &= \frac{b_2 - l_{21}y_1}{l_{22}}, \\
y_3 &= \frac{b_3 - l_{31}y_1 - l_{32}y_2}{l_{33}}, \\
&\vdots \\
y_n &= \frac{b_n - \displaystyle\sum_{j=1}^{n-1} l_{nj}y_j}{l_{nn}} \qquad (17)
\end{aligned}
$$

となる. これは $y_1, y_2, \cdots, y_n$ の順に次々と y を求めていくことになる. これを前進代入と呼ぶ. また, (16) 式を要素ごとに第 n 式から第 1 式まで書くと,

$$
\begin{aligned}
x_n &= y_n, \\
x_{n-1} + u_{n-1n}x_n &= y_{n-1}, \\
x_{n-2} + u_{n-2n-1}x_{n-1} + u_{n-2n}x_n &= y_{n-2}, \\
&\vdots \\
x_1 + \sum_{j=2}^{n} u_{1j}x_j &= y_1.
\end{aligned}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
x_n &= y_n, \\
x_{n-1} &= y_{n-1} - u_{n-1n}x_n, \\
x_{n-2} &= y_{n-2} - u_{n-2n-1}x_{n-1} - u_{n-2n}x_n, \\
&\vdots \\
x_1 &= y_1 - \sum_{j=2}^{n} u_{1j}x_j
\end{aligned}
\tag{18}
$$

となり, x_n から x_1 を逆順に求めることができる. これを, 後退代入と呼ぶ.

前進代入と後退代入を用いることで (7) 式の解を求めることができた.

一次元拡散方程式への LU 分解の適用

(5) 式と (6) 式を LU 分解をして解くことを考える. (6) 式は帯行列なので L と U も帯行列となる. よって, L と U をそれぞれ

$$
L = \begin{pmatrix}
l_{11} & & & & \\
l_{21} & l_{22} & & \mathbf{0} & \\
0 & l_{32} & l_{33} & & \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\
\mathbf{0} & & \cdots & l_{n-1n-2} & l_{n-1n-1}
\end{pmatrix},
$$

$$
U = \begin{pmatrix}
1 & u_{12} & & \mathbf{0} & \\
0 & 1 & u_{23} & & \\
0 & 0 & 1 & u_{34} & \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\
\mathbf{0} & & \cdots & & 1
\end{pmatrix}
$$

と表す. それぞれの要素について第 1 行目から第 3 行目までと最終行を書き表す.

第 1 行目

$$
\begin{aligned}
l_{11} &= 1 + 2p, \\
u_{12} &= -\frac{p}{l_{11}}, \\
u_{1i} &= 0 && (i \geq 3).
\end{aligned}
$$

第 2 行目

$$
\begin{aligned}
l_{21} &= -p, \\
l_{22} &= 1 + 2p - l_{21}u_{12}, \\
u_{23} &= -\frac{p}{l_{22}}, \\
u_{2i} &= 0 && (i \geq 4).
\end{aligned}
$$

第 3 行目

$$
\begin{aligned}
l_{31} &= 0, \\
l_{32} &= -p, \\
l_{33} &= 1 + 2p - l_{32}u_{23}, \\
u_{34} &= -\frac{p}{l_{33}}, \\
u_{3i} &= 0 && (i \geq 5).
\end{aligned}
$$

第 $n-1$ 行目

$$
\begin{aligned}
l_{n-1i} &= 0 && (i \leq n-3), \\
l_{n-1n-2} &= -p, \\
l_{n-1n-1} &= 1 + 2p - l_{n-1n-2}u_{n-2n-1}.
\end{aligned}
$$

後は,

$$
\begin{aligned}
L\boldsymbol{y} &= \boldsymbol{U}^n, \\
U\boldsymbol{U}^{n+1} &= \boldsymbol{y}
\end{aligned}
$$

として前進代入と後退代入を用いることで U^{n+1} を求めることができる.

付録: ガウス・ジョルダンの掃き出し法と計算コスト

ガウスジョルダンの掃き出し法

連立 1 次方程式

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

を解くことを考える. ここで

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & \cdots & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

とする. $\boldsymbol{x}$ を求めようとするとき, 形式的に, A の逆行列を左から掛け,

$$\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b}$$

を計算することで求めることができる [5]. そこで, 右辺の行列を見つけるため

$$(A|\boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ & \cdots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

[5] ここで A は正則行列であり, 逆行列 A^{-1} が存在する場合を仮定した.

を考え, 左側の $n \times n$ の部分が単位行列になるような操作を行えば, 最後の列に解が求まる[6]. この操作をガウス・ジョルダン (Guss-Jordan) の掃き出し法と呼ぶ[7]

ガウス・ジョルダンの掃き出し法を順番に見ていく. 操作結果を理解しやすくするため要素を a_{ij}^k の様に表す[8]. ここで i は行, j は列, k は何回目の操作なのかを表す[9] まず, 拡張行列 $(A|\boldsymbol{b})$ の 1 行目の各要素を a_{11}^0 で割る. 式で書くと,

$$
\begin{aligned}
a_{1j}^1 &= \frac{a_{1j}^0}{a_{11}^0} \qquad\qquad (j = 1, 2, \cdots, n),\\
b_1^1 &= \frac{b_1^0}{a_{11}^0}.
\end{aligned}
$$

この結果拡張行列は,

$$
B(A|\boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix} 1 & a_{12}^1 & \cdots & a_{1n}^1 & b_1^1 \\ a_{21}^0 & a_{22}^0 & \cdots & a_{2n}^0 & b_2^0 \\ & \cdots & & & \\ a_{n1}^0 & a_{n2}^0 & \cdots & a_{nn}^0 & b_n^0 \end{pmatrix}
$$

---

[6]拡張行列 $B(A|\boldsymbol{b})$ に左からある行列 B を掛けると

$$B(A|\boldsymbol{b}) = (BA|B\boldsymbol{b})$$

となる. このとき BA が単位行列 E になるとすると B は A の逆行列 A^{-1} になる. そのとき

$$
\begin{aligned}
(BA|B\boldsymbol{b}) &= (E|A^{-1}\boldsymbol{b})\\
&= (E|\boldsymbol{x})
\end{aligned}
$$

となり, 拡張行列 $(E|\boldsymbol{x})$ の最後の列に解がでる.

[7]単に掃き出し法とも呼ぶ. 拡張行列の $\boldsymbol{b}$ に単位行列 E を置き換えれば逆行列 A^{-1} を求める操作になる.

[8]例えば

$$a_{22}^1 = a_{22}^0 - \frac{a_{12}^0}{a_{11}^0}$$

と表された場合, a_{22}^1 は初期の要素 $a_{22}^0, a_{11}^0, a_{12}^0$ を用いて右辺の操作を行われた新たな 2 行 2 列目の要素ということである.

[9]ここでの一回の操作とは対角要素が 1 でそれ以外の列要素が 0 になるまでが一回の操作とする. 例えば 1 回目の操作とは

$$
\begin{pmatrix} 1 & \cdots & b_1^1 \\ 0 & \cdots & b_2^1 \\ \vdots & \cdots & \\ 0 & \cdots & b_n^1 \end{pmatrix}
$$

となることである.

となる. この新たな 1 行目を a^0_{21} 倍して 2 行目から引く. 式で書くと,

$$
\begin{aligned}
a^1_{2j} &= a^0_{2j} - a^0_{2j}\frac{a^0_{1j}}{a^0_{11}} \qquad (j = 1, 2, \cdots, n),\\
b^1_2 &= b^0_2 - a^0_{2j}\frac{b^0_1}{a^0_{11}}.
\end{aligned}
$$

この結果拡張行列は

$$
B(A|\boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix}
1 & a^1_{12} & \cdots & a^1_{1n} & b^1_1 \\
0 & a^1_{22} & \cdots & a^1_{2n} & b^1_2 \\
 & \cdots & & & \\
a^0_{n1} & a^0_{n2} & \cdots & a^0_{nn} & b^0_n
\end{pmatrix}
$$

となる. 同じ操作を $i = 3, 4, \cdots, n$ まで行うと拡張行列は

$$
B(A|\boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix}
1 & a^1_{12} & \cdots & a^1_{1n} & b^1_1 \\
0 & a^1_{22} & \cdots & a^1_{2n} & b^1_2 \\
 & \cdots & & & \\
0 & a^1_{n2} & \cdots & a^1_{nn} & b^1_n
\end{pmatrix}
$$

となる.

次に, 2 行目について同様の操作を行う. 2 行目を a^1_{22} で割る. 式で書くと,

$$
\begin{aligned}
a^2_{2j} &= \frac{a^1_{2j}}{a^1_{22}} \qquad (j = 2, 3, \cdots, n),\\
b^2_2 &= \frac{b^1_2}{a^1_{22}}.
\end{aligned}
$$

この結果拡張行列は

$$
B(A|\boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix}
1 & a^1_{12} & a^1_{13} & \cdots & a^1_{1n} & b^1_1 \\
0 & 1 & a^2_{23} & \cdots & a^2_{2n} & b^2_2 \\
 & \cdots & & & & \\
0 & a^1_{n2} & a^1_{n3} & \cdots & a^1_{nn} & b^1_n
\end{pmatrix}
$$

となる. 新しい 2 行目の要素を a^1_{12} 倍して 1 行目から引く. これを式で書くと,

$$
\begin{aligned}
a^2_{1j} &= a^1_{1j} - a^1_{12}\frac{a^1_{2j}}{a^1_{22}} \qquad (j = 2, 3, \cdots, n),\\
b^2_1 &= b^1_1 - a^1_{12}\frac{b^1_2}{a^1_{22}}.
\end{aligned}
$$

この結果拡張行列は

$$B(A|\boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & a^2_{13} & \cdots & a^2_{1n} & b^2_1 \\ 0 & 1 & a^2_{23} & \cdots & a^2_{2n} & b^2_2 \\ & \cdots & & & & \\ 0 & a^1_{n2} & a^1_{n3} & \cdots & a^1_{nn} & b^1_n \end{pmatrix}$$

となる. この操作を $i = 3, 4, \cdots, n$ まで行うと拡張行列は

$$B(A|\boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & a^2_{13} & \cdots & a^2_{1n} & b^2_1 \\ 0 & 1 & a^2_{23} & \cdots & a^2_{2n} & b^2_2 \\ & \cdots & & & & \\ 0 & 0 & a^2_{n3} & \cdots & a^2_{nn} & b^2_n \end{pmatrix}$$

となる. これらの操作を n 解行うと最終的に拡張行列は

$$B(A|\boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & b^n_1 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & b^n_2 \\ & \cdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & b^n_n \end{pmatrix}$$

となる. この最後の列の要素 $b^n_1, b^n_2, \cdots, b^n_n$ が解となる.

このガウス・ジョルダンの掃き出し法は昔はよくつかわれていた. しかし, 現在では LU 分解法を用いることのほうが多い. なぜなら, ガウス・ジョルダンの掃き出し法よりも LU 分解のほうが計算量が少なくて済むためである [10).]

ガウス・ジョルダンの掃き出し法と LU 分解法の計算量

ガウス・ジョルダンの掃き出し法の計算量を見積もってみる.

積和計算の数を数える [11)]. $k = 1, 2 \cdots, n$ までで,

$$a^k_{ij} = a^{k-1}_{ij} - a^{k-1}_{ik} \frac{a^{k-1}_{kj}}{a^{k-1}_{kk}} \qquad (j = k, k+1, \cdots, n)$$

$$b^k_i = b^{k-1}_i - a^{k-1}_i \frac{b^{k-1}_k}{a^{k-1}_{kk}}$$

[10)]他にも LU 分解は別の $\boldsymbol{b}$ に対しても A が変わらない限り少ない計算量で解を求めることができるという利点がある. ガウスジョルダンの掃き出し法の場合 $\boldsymbol{b}$ が変わってしまうとまた位置から計算をしなくてはいけなくなる.

[11)]おおざっぱであるが $c = c - d\dfrac{e}{f}$ の計算を 1 回の計算としている. LU 分解とは計算の数え方が違うので厳密には比べられないが所詮ファクターの数 (しかもガウスジョルダンの掃き出し法のほうの計算回数) が大きくなるだけなので良しとする.

を考える. このときの計算量は

$$
\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}\left(1+\sum_{j=k}^{n}1\right) &= \sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}(1+n+1-k) \\
&= \sum_{k=1}^{n}(n-k+2)\sum_{i=1}^{n}1 \\
&= \sum_{k=1}^{n}(n-k+2)n \\
&= n\sum_{k=1}^{n}(n-k+2) \\
&= n\left\{(n+2)n-\frac{(n+1)n}{2}\right\} \\
&= \frac{n^3}{2}+O(n^2)
\end{aligned}
$$

となる [12].

次に LU 分解での計算量を見積もる. (12) 式と (13) 式から計算量は

$$
\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{i-1}1+\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=k+1}^{n}\sum_{j=1}^{k-1}1 &= \sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{k-1}(i-1)+\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=k+1}^{n}(k-1) \\
&= \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{k(k-1)}{2}-k+1\right)+\sum_{k=1}^{n}(k-1)(n-k) \\
&= \frac{1}{2}\frac{n(n-1)(2n-1)}{6}+\frac{n^2(n+1)}{2}-\frac{n(n-1)(2n-1)}{6}+O(n^2) \\
&= \frac{n^3}{3}+O(n^2)
\end{aligned}
$$

となる [13].

LU 分解法では LU 分解した後に前進代入と後退代入も行っている. この計算量を見積もる. (15) 式より第 k 式は

$$
y_k = \frac{b_k-\displaystyle\sum_{j=1}^{k-1}l_{kj}y_j}{l_{kk}}
$$

[12] $\displaystyle\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}1$ は b の計算数, $\displaystyle\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=k}^{n}1$ は a の計算数を表している.

[13] $\displaystyle\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{i-1}1$ は $i \le k$ のときの l の計算量, $\displaystyle\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=k+1}^{n}\sum_{j=1}^{k-1}1$ は $i > k$ のときの u の計算量を表している.

となるので $k = 1, 2, \cdots, n$ で考えると, 前進代入の計算量は,

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{k-1} 1 &= \sum_{k=1}^{n}(k-1)\\ &= \frac{n(n+1)}{2} - n\\ &= \frac{n^2}{2} + O(n)\end{aligned}$$

となる. 同様に (16) 式より第 k 式は

$$x_{n-k+1} = y_{n-k+1} - \sum_{j=2}^{n-k+1} u_{1j}x_j$$

となるので $k = 1, , 2, \cdots, n$ で考えると, 後退代入の計算量は,

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=2}^{n-k+1} 1 &= \sum_{k=1}^{n}(n-k)\\ &= n^2 - \frac{n(n+1)}{2}\\ &= \frac{n^2}{2} + O(n)\end{aligned}$$

とんる. よって, 前進代入と後退代入の計算量は両方足しても n^2 程度となる.

従って, 前進代入と後退代入の両方を入れてもガウス・ジョルダンの掃き出し法に対して LU 分解法の大まかな計算量は 1.5 倍減る [14].

[14] ガウス・ジョルダンの掃き出し法に比べて LU 分解法の利点は計算量だけではない. $\boldsymbol{b}$ の値が変わった時 A の値が変わらなければ LU 分解法の場合 LU の再計算はいらない. そのため計算量は前進代入と後退代入の n^2 で済む. それに対してガウス・ジョルダンの掃き出し法はすべてまた計算し直さなければならない. 一度計算してしまえばあとは少ない計算でよいということも LU 分解法を用いる利点の一つである.

参考文献

関連図書

[1] 荻原 弘尭, 2012,「1 次元拡散方程式」
URL:http://www.ep.sci.hokudai.ac.jp/∼gfdlab/comptech/resume/0119/2012_0202-ogihara.pdf

[2] 川上一郎, 2009,「数値計算の基礎」
URL:http://www7.ocn.ne.jp/∼kawa1/

[3] 渡辺善隆,「連立 1 次方程式の基礎知識 - 九州大学」
URL:http://yebisu.cc.kyushu-u.ac.jp/∼watanabe/RESERCH/MANUSCRIPT/KOHO/GEPP/GEPP.pdf

[4] Tomonori Kouya, 2003, 「ソフトウェアとしての数値計算」
URL;http://202.253.248.12/gijutu/mathematics/nasoft/

[5] 平野拓一, 2004, 「数値計算法（連立一次方程式の解法）」
URL:http://www-antenna.ee.titech.ac.jp/∼hira/hobby/edu/em/mom/linear_system/lin_eqs.pdf