2005年5月11日（水）

2005年度
数値解析講義　前期水曜３限

青柳　睦
aoyagi@cc.kyushu-u.ac.jp

研究室：情報基盤センター５階５０２

講義内容

{括弧}の項目はSkipまたは参考程度

１．超越方程式（非線形方程式）の解法

１．１　2分法　→　演習

１．２　{補間法}

１．３　ニュートン法　→　演習

２．代数方程式の解法

２．１　グラフェの方法　→　（~~演習~~）

２．２　{ベルヌーイの方法}

３．連立一次方程式の解法

３．１　行列計算　→　演習

３．２　ガウスの消去法　→　演習

３．３　３重対角行列の場合の解法

３．４　LU分解法　→　演習

講義vs演習スケジュールに余裕がある日を見つけて，「数値解析」を必要とする理学工学(社会学？)分野で活用されている計算科学の概論を紹介します（予定）．

３．５　特異値分解法

３．６　共役勾配法

３．７　反復法

４．固有値と固有ベクトルの近似計算

４．１　レバリエールの方法

４．２　3重対角行列の固有値と固有ベクトルの計算

４．３　ランチョスの方法（3重対角行列への帰着）

４．４　ギブンスの方法（対称な3重対角行列への帰着）

４．５　ヤコビの方法（対角行列への帰着）

５．ラグランジュの未定乗数法

６．勾配法

６．１　最急降下法

６．２　最急降下加速法

６．３　ステップ幅の決め方

4章 「固有値･･」以降は，講義と演習の進捗状況によっては項目を絞った内容にする可能性があります･･．

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)} a_{kj}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \qquad a_{ij}^{(1)} = a_{ij},$$

$$i = k+1, \dots, n, \quad j = k+1, \dots, n+1, \quad k = 1, 2, \dots, n-1$$

$$x_n = \frac{a_{n,n+1}^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}},$$

$$x_k = \frac{1}{a_{kk}^{(k)}} \left(a_{k,n+1}^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right), \qquad k = n-1, \dots, 1$$

前回の復習･･

Gaussの消去法のプログラミング

【記号】　連立1次方程式を次のように成分表示する。

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2m} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & a_{m3} & \cdots & a_{mm} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_m \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_m \end{Bmatrix}$$

前進消去

$$k = 1 \to m-1$$

$$j = k+1 \to m$$

$$f_j = f_j - \left(\frac{a_{jk}}{a_{kk}} \right) f_k$$

$$i = k+1 \to m$$

$$a_{ji} = a_{ji} - \left(\frac{a_{jk}}{a_{kk}} \right) a_{ki}$$

後退代入

$$u_m = \frac{f_m}{a_{mm}}$$

$k = m-1 \to 1$ （ $\boldsymbol{k}$ が減少する順）

$$j = k+1 \to m$$

$$f_k = f_k - a_{kj} f_j$$

$$f_k = f_k - \sum_{j=j+1}^{m} a_{kj} f_j$$

$$u_k = \frac{f_k}{a_{kk}}$$

Gaussの消去法のプログラム(fortran版)

【非対称マトリクス】

```
'***** 前進消去 *****

FOR I=1 TO M-1
     FOR J=I+1 TO M
          AA=A(J,I)/A(I,I)
          F(J)=F(J)-AA*F(I)
          FOR K=1 TO M
               A(J,K)=A(J,K)-AA*A(I,K)
          NEXT K
     NEXT J
NEXT I

'***** 後退代入 *****

F(M)=F(M)/A(M,M)
FOR I=M-1 TO 1 STEP -1
     FOR J=I+1 TO M
          F(I)=F(I)-A(I,J)*F(J)
     NEXT J
     F(I)=F(I)/A(I,I)
NEXT I
```

【対称マトリクス】(参考)

```
'***** 前進消去 *****

FOR I=1 TO M-1
     FOR J=I+1 TO M
          AA=A(I,J)/A(I,I)
          F(J)=F(J)-AA*F(I)
          FOR K=J TO M
               A(J,K)=A(J,K)-AA*A(I,K)
          NEXT K
     NEXT J
NEXT I

'***** 後退代入 *****

F(M)=F(M)/A(M,M)
FOR I=M-1 TO 1 STEP -1
     FOR J=I+1 TO M
          F(I)=F(I)-A(I,J)*F(J)
     NEXT J
     F(I)=F(I)/A(I,I)
NEXT I
```

３．３　３重対角行列の場合の解法

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\
a_2 & b_2 & c_2 & \cdots & 0 \\
 & \cdots & & & \\
0 & \cdots & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
0 & \cdots & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n
\end{pmatrix}
$$

【基礎となるworking Eq. の導出】

まず $i-1$ 行目まで a を消去した状態を考える‥

$$
\begin{array}{r}
\\ \\ \\ \times a_i/\beta_{i-1} \\ \\ \\ \\
\end{array}
\begin{pmatrix}
\beta_1 & \gamma_1 & & \cdots & & & \\
0 & \beta_2 & \gamma_2 & \cdots & & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\
 & & 0 & \beta_{i-1} & \gamma_{i-1} & & \\
 & & & a_i & b_i & c_i & \\
 & & & & \ddots & \ddots & \ddots \\
 & & & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{i-1} \\ x_i \\ \\ x_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
\delta_1 \\ \delta_2 \\ \vdots \\ \delta_{i-1} \\ d_i \\ \\ d_n
\end{pmatrix}
$$

$i-1$ 行目に a_i/β_{i-1} をかけて・・・

i 行目から引く‥

$$
\begin{pmatrix}
\beta_1 & \gamma_1 & & \cdots & & & \\
& \beta_2 & \gamma_2 & \cdots & & & \\
& \ddots & \ddots & \ddots & & & \\
& & 0 & \beta_{i-1} & \gamma_{i-1} & & \\
& & \beta_i \leftarrow & 0 & \boxed{b_i - \dfrac{a_i}{\beta_{i-1}}\gamma_{i-1}} & c_i & \\
& & & & a_{i+1} & \ddots & \ddots \\
& & & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{i-1} \\ x_i \\ \\ x_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
\delta_1 \\ \delta_2 \\ \vdots \\ \delta_{i-1} \\ \boxed{d_i - \dfrac{a_i}{\beta_{i-1}}\delta_{i-1}} \rightarrow \delta_i \\ \\ d_n
\end{pmatrix}
$$

すなわち，

$$\begin{aligned}\beta_{i-1}x_{i-1} + \gamma_{i-1}x_i \qquad\qquad\qquad &= \delta_{i-1},\\ a_i\, x_{i-1} \;+\; b_i x_i \;+\; c_i x_{i+1} &= d_i\end{aligned}$$

の第１式の両辺に a_i / β_{i-1} をかけて

第２式から引くと、

$$(b_i - \frac{a_i}{\beta_{i-1}}\gamma_{i-1})x_i \;+ c_i x_{i+1} = d_i - \frac{a_i}{\beta_{i-1}}\delta_{i-1}$$

となり・・、これが第１式で $i \to i+1$ としたもの

に相当するので，次の漸化式が得られる.

漸化式

$$\beta_i = b_i - \frac{a_i}{\beta_{i-1}}\gamma_{i-1}, \quad i = 2,3,\ldots, n,$$

$$\delta_i = d_i - \frac{a_i}{\beta_{i-1}}\delta_{i-1}, \quad i = 2,3,\ldots, n$$

$$\gamma_i = c_i,$$

ここで，初期値は

$$\beta_1 = b_1, \quad \gamma_1 = c_1, \quad \delta_1 = d_1$$

$$x_n = \frac{\delta_n}{\beta_n},$$

x_n が求まれば（後進代入により）
順次，x_{n-1}, x_{n-2}・・と求まる.

a を全て消去した状態

$$\begin{pmatrix} \beta_1 & \gamma_1 & & \cdots & 0 \\ & \beta_2 & \gamma_2 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & \cdots & \beta_{n-1} & \gamma_{n-1} \\ 0 & & \cdots & & \beta_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \\ \vdots \\ \delta_{n-1} \\ \delta_n \end{pmatrix}$$

これより、（後進代入）

$$x_n = \frac{\delta_n}{\beta_n}, \qquad x_k = \frac{1}{\beta_k}(\delta_k - \gamma_k x_{k+1}), \quad k = n-1, \cdots, 1$$

３．４　LU 分解法

$$Ax = b$$

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

$$b = {}^t(b_1, b_2, \dots, b_n)$$

$$A = LU$$

L： 下半三角行列

U： 上半三角行列

$$L = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \cdots & 0 \\ & \cdots & & \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \cdots & \alpha_{nn} \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \cdots & \beta_{1n} \\ 0 & \beta_{22} & \cdots & \beta_{2n} \\ & \cdots & & \\ 0 & \cdots & & \beta_{nn} \end{pmatrix},$$

$$LUx = b$$

$$Ly = b,$$

$$Ux = y, \qquad y = {}^t(y_1, y_2, \ldots, y_n)$$

これより、

$$y_1 = \frac{b_1}{\alpha_{11}},$$

$$y_i = \frac{1}{\alpha_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} y_j\right), \quad i = 2,3,\ldots,n$$

$$Ly = b$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & & & \cdots & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \\ \alpha_{n-11} & & \cdots & \alpha_{n-1n-1} & \\ \alpha_{n1} & & \cdots & \alpha_{nn-1} & \alpha_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{pmatrix}$$

前進代入

$$\alpha_{11} y_1 = b_1 \quad \rightarrow \quad y_1 = b_1 / \alpha_{11}$$

$$\alpha_{21} y_1 + \alpha_{22} y_2 = b_2 \quad \rightarrow \quad y_2 = \left(b_2 - \alpha_{21} y_1 \right) / \alpha_{22}$$

$$\vdots$$

$$\alpha_{i1} y_1 + \alpha_{i2} y_2 + \cdots + \alpha_{ii} y_i = b_i \quad \rightarrow \quad y_i = \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} y_j \right) / \alpha_{ii}$$

$$Ux = y$$

$$\begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & & \cdots & \beta_{1n} \\ & \beta_{22} & & \cdots & \beta_{2n} \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & \cdots & \beta_{n-1n-1} & \beta_{n-1n} \\ 0 & 0 & \cdots & & \beta_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix}$$

後進代入

$$\beta_{nn} x_n = y_n \quad \rightarrow \quad x_n = y_n / \beta_{nn}$$

$$\beta_{n-1n-1} x_{n-1} + \beta_{n-1n} x_n = y_{n-1} \quad \rightarrow \quad x_{n-1} = \left(y_{n-1} - \beta_{n-1n} x_n \right) / \beta_{n-1n-1}$$

$$\vdots$$

$$\beta_{ii} x_i + \beta_{ii+1} x_{i+1} + \cdots + \beta_{nn} x_n = y_i \quad \rightarrow \quad x_i = \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} \beta_{ij} x_j \right) / \beta_{ii}$$

$$x_n = \frac{y_n}{\beta_{nn}},$$

$$x_i = \frac{1}{\beta_{ii}}\left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} \beta_{ij} x_j \right), \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1$$

L と *U* をいかにして求めるか？

$$A = LU$$

より、

LU分解アルゴリズム

$$A = LU = \begin{pmatrix} l_{11} & & & & & 0 \\ l_{21} & l_{22} & & & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} & & 0 \\ & \vdots & & & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & l_{n4} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} & & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & u_{24} & \cdots & u_{2n} \\ & & u_{33} & u_{34} & & u_{3n} \\ & & & u_{44} & & u_{4n} \\ & \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix},$$

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik} u_{kj} \cdots (i \prec j)$$

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j} l_{ik} u_{kj} \cdots (i \geq j)$$

$i < j$ $\quad \boxed{l_{21} u_{14} + l_{22} u_{24} = a_{24}} \quad \Rightarrow u_{24}$

$i = j$ $\quad \boxed{l_{31} u_{13} + l_{32} u_{23} + l_{33} u_{33} = a_{33}} \quad \Rightarrow l_{33}$

$i > j$ $\quad \boxed{l_{41} u_{12} + l_{42} u_{22} = a_{42}} \quad \Rightarrow l_{42}$

$$(i \prec j) \cdots a_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} + l_{ii} u_{ij} \quad ① \qquad u_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}) / l_{ii}$$

$$\longrightarrow$$

$$(i \geq j) \cdots a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} + l_{ij} u_{jj} \quad ② \qquad l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}) / u_{jj}$$

LU分解アルゴリズム

- L,Uの対角値
  - Doolittle型　　　　　$L_{ii}=1$
  - クラウト(Crout)型　$U_{ii}=1$
- ３通りのアルゴリズム
  - right-looking法（ガウス法）
    メモリアクセスが広範囲，バンド幅を要求
  - left-looking法（ガウス法その２）

  - Crout法
    right-looking法よりもメモリアクセス範囲は狭い

分解アルゴリズムの内容(Right-looking法）

```
/* Right-looking method
 Crout type (u_ii == 1)
 Input    a: matrix, n: matrix size
 Output   a: matrix  */

for(k=0;k<n-1;k++)
  {
   for(j=k+1;j<n;j++)
     a[k][j] /= a[k][k];
   for(i=k+1;i<n;i++)
     for(j=k+1;j<n;j++)
       a[i][j] -= a[i][k] * a[k][j];
  }
```

$$
\begin{array}{l}
k=0 \\
\\
k=1 \\
\\
k=2
\end{array}
\quad
\begin{pmatrix}
a_{00} & a_{01} & a_{02} & a_{03} \\
a_{10} & a_{11} & a_{12} & a_{13} \\
a_{20} & a_{21} & a_{22} & a_{23} \\
a_{30} & a_{31} & a_{32} & a_{33}
\end{pmatrix}
$$

$$\downarrow$$

$$
\begin{pmatrix}
l_{00} & u_{01} & u_{02} & u_{03} \\
l_{10} & l_{11} & u_{12} & u_{13} \\
l_{20} & l_{21} & l_{22} & u_{23} \\
l_{30} & l_{31} & l_{32} & l_{33}
\end{pmatrix}
$$

例えば n=4

```
for(k=0;k<n-1;k++)
  {
   for(j=k+1;j<n;j++)
    a[k][j] /= a[k][k];
   for(i=k+1;i<n;i++)
    for(j=k+1;j<n;j++)
     a[i][j] -= a[i][k] * a[k][j];
  }
```

k=0

$$a_{01} = a_{01} / a_{00}$$
$$a_{02} = a_{02} / a_{00}$$
$$a_{03} = a_{03} / a_{00}$$

$l \rightarrow a_{11} = a_{11} - a_{10} * a_{01}$

$\boxed{u \rightarrow} a_{12} = a_{12} - a_{10} * a_{02}$

$\boxed{u \rightarrow} a_{13} = a_{13} - a_{10} * a_{03}$

$l \rightarrow a_{21} = a_{21} - a_{20} * a_{01}$

$l \rightarrow a_{22} = a_{22} - a_{20} * a_{02}$

$\boxed{u \rightarrow} a_{23} = a_{23} - a_{20} * a_{03}$

$l \rightarrow a_{31} = a_{31} - a_{30} * a_{01}$

$l \rightarrow a_{32} = a_{32} - a_{30} * a_{02}$

$l \rightarrow a_{33} = a_{33} - a_{30} * a_{03}$

k=1

$$a_{12} = a_{12} / a_{11}$$
$$a_{13} = a_{13} / a_{11}$$

$l \rightarrow a_{22} = a_{22} - a_{21} * a_{12}$

$\boxed{u \rightarrow} a_{23} = a_{23} - a_{21} * a_{13}$

$l \rightarrow a_{32} = a_{32} - a_{31} * a_{12}$

$l \rightarrow a_{33} = a_{33} - a_{31} * a_{13}$

k=2

$$a_{23} = a_{23} / a_{22}$$
$$a_{33} = a_{33} - a_{32} * a_{23}$$

例えば　n=4　　$(①i<j\text{の場合})u_{ij}=(a_{ij}-\sum_{k=0}^{i-1}l_{ik}u_{kj})/l_{ii}$

$$(0<1,2,3)u_{01}=(a_{01}-\sum_{k=0}^{0-1}l_{0k}u_{k1})/l_{00}=a_{01}/l_{00}$$

$$u_{02}=a_{02}/l_{00}\qquad u_{03}=a_{03}/l_{00}$$

$$(1<2)u_{12}=(a_{12}-\sum_{k=0}^{1-1}l_{1k}u_{k2})/l_{11}=(a_{12}-l_{10}u_{02})/l_{11}$$

$$(1<3)u_{13}=(a_{13}-\sum_{k=0}^{1-1}l_{1k}u_{k3})/l_{11}=(a_{13}-l_{10}u_{03})/l_{11}$$

（kのループでどの位置にある配列要素が参照されているかに注目）

$$(2<3)u_{23}=(a_{23}-\sum_{k=0}^{2-1}l_{2k}u_{k3})/l_{22}=(a_{23}-l_{20}u_{03}-l_{21}u_{13})/l_{22}$$

$(②i \geq j$の場合$u_{jj}=1$に注意$)\, l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=0}^{j-1} l_{ik}u_{kj})/u_{jj}$

$$(3,2,1,0 \geq 0)\, l_{00} = (a_{00} - \sum_{k=0}^{0-1} l_{0k}u_{k0})/u_{00} = a_{00}/u_{00}$$

$$l_{10} = a_{10}/u_{00} \quad l_{20} = a_{20}/u_{00} \quad l_{30} = a_{30}/u_{00}$$

$$(3,2,1 \geq 1)\, l_{11} = (a_{11} - \sum_{k=0}^{1-1} l_{1k}u_{k1})/u_{11} = (a_{11} - l_{10}u_{01})/u_{11}$$

$$l_{21} = (a_{21} - l_{20}u_{01})/u_{11} \quad l_{31} = (a_{31} - l_{30}u_{01})/u_{11}$$

$$(3,2 \geq 2)\, l_{22} = (a_{22} - \sum_{k=0}^{2-1} l_{2k}u_{k2})/u_{22} = (\boxed{\boxed{a_{22} - l_{20}u_{02}} - l_{21}u_{12}})/u_{22}$$

$$l_{32} = (\boxed{\boxed{a_{32} - l_{30}u_{02}} - l_{31}u_{12}})/u_{22}$$

$$(3 \geq 3)\, l_{33} = (a_{33} - \sum_{k=0}^{3-1} l_{3k}u_{k3})/u_{33} = (\boxed{\boxed{\boxed{a_{33} - l_{30}u_{03}} - l_{31}u_{13}} - l_{32}u_{23}})/u_{33}$$

アルゴリズムの違い（参考まで）

```
/* Left-looking method
(Up-lookuing method)
 Crout type (u_ii == 1)
 Input    a: matrix, n: matrix size
 Output   a: matrix  */

 for(i=0;i<n;i++)
  {
   for(k=0;k<i;k++)
    for(j=k+1;j<n;j++)
     a[i][j] -= a[i][k] * a[k][j];
   for(j=i+1;j<n;j++)
    a[i][j] /= a[i][i];
  }
```

```
/* Crout method
 Crout type (u_ii == 1)
 Input    a: matrix, n: matrix size
 Output   a: matrix  */

 for(k=0;k<n;k++)
  {
   for(i=k;i<n;i++)
    for(j=0;j<k;j++)
     a[i][k] -= a[i][j] * a[j][k];
   for(j=k+1;j<n;j++)
    for(i=0;i<k;i++)
     a[k][j] -= a[i][j] * a[k][i];
   for(j=k+1;j<n;j++)
    a[k][j] /= a[k][k];
  }
```

（参考まで）LU分解アルゴリズムの並列化例(R-L法）

```
void  lu_p(int n, mat_t a)
{
 int i,j,k;
 int MAP[SIZE];
 int blk;

 /* cyclic decomposition */
 for(i=0;i<n;i++) MAP[i]= i % numprocs;

 /* block decomposition
 blk=n/numprocs;
 for(i=0;i<numprocs;i++)
   for(j=0;j<blk;j++) MAP[i*blk + j]= i; */

for(k=0;k<n-1;k++)
 {
     if( MAP[k] == my_rank )
         for(j=k+1;j<n;j++)
           a[k][j] /= a[k][k];

  MPI_Bcast(&a[k][k+1],n-k-1,MPI_DOUBLE,
                    MAP[k],MPI_COMM_WORLD);

 (以下右上に続く)
```

```
     for(i=k+1;i<n;i++)  {
         if( MAP[i] == my_rank )
           for(j=k+1;j<n;j++)
             a[i][j] -= a[i][k] * a[k][j];
     } /* end of i-loop */
 } /* end of k-loop */

 /* copy a[i][*] of my_rank ->  a[i][*] of Rank0  */

     for(i=0;i<n;i++)  {
       if(MAP[i] > 0) MPI_Send(&a[i][0],n,
      MPI_DOUBLE,0,i,MPI_COMM_WORLD);
     }
     if(my_rank==0)
        for(i=0;i<n;i++) {
        if(MAP[i] > 0 ) MPI_Recv(&a[i][0],n,
                  MPI_DOUBLE,MAP[i],i,
                  MPI_COMM_WORLD,&status);
        }
} /* End of lu_p */
```

β_{ij} と α_{ij} を計算するアルゴリズムの【まとめ】

(i) $\alpha_{ii} \equiv 1, \quad i = 1,2,\ldots,n$

(ii) $j = 1,2,\ldots,n$ のそれぞれに対して、

$$\beta_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \alpha_{ik}\beta_{kj}, \quad i = 1,2,\ldots,j$$

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{\beta_{jj}}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{ik}\beta_{kj}\right), \quad i = j+1, j+2,\ldots,n$$

β_{ij} と α_{ij} の計算でのポイント

(a) α_{ij} を求めるには $a_{ij}, \alpha_{ik}\left(k<i\right), \beta_{kj}\left(k=1,\cdots,j\right)$ が必要

(b) β_{ij} を求めるには $a_{ij}, \beta_{kj}\left(k<j\right), \alpha_{ik}\left(k=1,\cdots,i\right)$ が必要

(c) a_{ij} は α_{ij} または β_{ij} の計算以外では参照されない

(d) $\alpha_{ii}=1(i=1,2,\ldots,n)$ は配列に入れる必要なし

LU分解による解法手順

(1) α_{ij}, β_{ij}を求め配列Aを置き換える（LU分解）

(2) $Ly = b$からyを求める（前進代入）

$$y_1 = \frac{b_1}{\alpha_{11}}, \quad y_i = \frac{1}{\alpha_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1}\alpha_{ij}y_j\right), \quad i = 2,3,\ldots,n$$

(3) $Ux = y$からxを求める（後進代入）

$$x_n = \frac{y_n}{\beta_{nn}}, \; x_i = \frac{1}{\beta_{ii}}\left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n}\beta_{ij}x_j\right), \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1$$

（参考） Gaussの前進消去プロセス とLU分解の関係

$$
M_1 = \begin{pmatrix}
1 & & & & \\
-m_{21} & 1 & & 0 & \\
-m_{31} & 0 & 1 & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\
-m_{n1} & 0 & 0 & \cdots & 1
\end{pmatrix}
\qquad
m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}
$$

Gaussの消去法の第一段は、行列M_1
を使って表すと・・

$$A^{(1)} \equiv A$$

上（番号）は消去法のステップ数

$$M_1 A^{(1)} = A^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \vdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}$$

同様にして・・（k）ステップから（k＋１）ステップへの変換行列M_kは・・

$$M_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ 0 & 1 & & & & 0 & & \\ \vdots & & \ddots & & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & & & & \\ \vdots & \vdots & & -m_{k+1\,k} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & & -m_{k+2\,k} & 0 & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \ddots & \\ 0 & 0 & \cdots & -m_{n\,k} & 0 & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

$$m_{jk} = \frac{a_{jk}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$

$$M_k A^{(k)} = A^{(k+1)}$$

最終ステップまで進めると・・

$$M_{n-1}M_{n-2}\cdots M_2 M_1 A = A^{(n)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ & 0 & & \ddots & \vdots \\ & & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow U$と表記する

一方、右辺bベクトルは・・

$$M_{n-1}M_{n-2}\cdots M_2 M_1 b = b^{(n)} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{pmatrix}$$

$$Ux = b^{(n)}$$

M_k の逆行列は以下の様な簡単な形になるので・・

$$
M_k^{-1} = \begin{pmatrix}
1 & & & & & & & \\
0 & 1 & & & & 0 & & \\
\vdots & & \ddots & & & & & \\
0 & 0 & \cdots & 1 & & & & \\
\vdots & \vdots & & m_{k+1\,k} & 1 & & & \\
\vdots & \vdots & & m_{k+2\,k} & 0 & \ddots & & \\
\vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \ddots & \\
0 & 0 & \cdots & m_{n\,k} & 0 & \cdots & \cdots & 1
\end{pmatrix}
\qquad
m_{jk} = \frac{a_{jk}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}
$$

$$L = M_1^{-1} M_2^{-1} \cdots M_{n-1}^{-1}$$ を $$Ux = b^{(n)}$$

の左から掛けると‥

$$LUx = b$$

LU分解法の基になる式！

ここでLは簡単な計算によって‥

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ m_{21} & 1 & & & 0 & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & 1 & \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & m_{n\,n-1} & 1 \end{pmatrix}$$

$$m_{jk} = \frac{a_{jk}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$