ВИДЫ ФАКТОРИЗАЦИЙ

Факторизацией, или ***разложением***, ***матрицы*** будем называть ее мультипликативное представление, т.е. представление в виде произведения нескольких матриц (обычно, двух - трех), обладающих теми или иными заданными свойствами. Процесс факторизации матриц осуществляется на основе различных линейных преобразований в соответствующих пространствах над векторами, отождествляемыми со столбцами или строками исходных матриц, а также матриц промежуточных этапов в применяемых алгоритмах.

Приведем несколько широко известных матричных разложений из тех, которые существенно используются в дальнейшем.

Пусть $\mathbf{A}$ — заданная вещественная квадратная матрица.

1. ***Треугольное разложение*** матрицы $\mathbf{A}$, иначе называемое $\mathbf{LU}$*-разложением* или $\mathbf{LR}$*-разложением*, — это ее представление в виде $\mathbf{A}=\mathbf{LU}$, где $\mathbf{L}$ и $\mathbf{U}$ — соответственно нижняя (левая) и верхняя (правая) вещественные треугольные матрицы. У одной из матриц $\mathbf{L}$ или $\mathbf{U}$ диагональные элементы обычно принимают равными единице.

Для расширения области применимости таких разложений иногда вводят (подбирают) подходящую матрицу перестановок $\mathbf{P}$ и выполняют треугольную факторизацию матрицы $\mathbf{PA}$. С таким обобщенным толкованием понятия $\mathbf{LU}$-разложения при наличии стратегии построения матрицы $\mathbf{P}$ треугольная факторизация может быть выполнена для любой невырожденной матрицы $\mathbf{A}$. ∎

2. $\mathbf{U}^T\mathbf{U}$***-разложение*** (а также аналогичное ему $\mathbf{LL}^T$***-разложение***) есть частный случай $\mathbf{LU}$-разложения для симметричных матриц. В процессе выполнения такой факторизации требуется вычислять квадратные корни, что может повлечь за собой появление мнимых чисел, т.е. может нарушиться вещественность разложения. Поэтому применяют такие разложения, как правило, только к положительно определенным матрицам.

В несколько более широких условиях можно осуществить $\mathbf{U}^T\mathbf{DU}$***-разложение*** — представление симметричных матриц в виде $\mathbf{A}=\mathbf{U}^T\mathbf{DU}$, где $\mathbf{D}$ — диагональная матрица, а $\mathbf{U}$ — верхняя треугольная с единичной диагональю.

3. ***Ортогональное разложение*** — представление произвольной квадратной матрицы $\mathbf{A}$ в виде произведения ортогональной матрицы $\mathbf{Q}$ на правую треугольную матрицу $\mathbf{R}$. Отсюда другое его название: $\mathbf{QR}$-***разложение.*** (Иногда при ортогональном разложении вместо правой треугольной матрицы $\mathbf{R}$ берут левую треугольную матрицу $\mathbf{L}$ и в соответствии с этим строят $\mathbf{QL}$-***разложение***.) Подчеркнем факт (который далее будет обоснован), что такое вещественное разложение может быть выполнено для любой вещественной матрицы $\mathbf{A}$.

4. ***Сингулярное разложение*** (иначе, SVD-***разложение***) — весьма универсальная факторизация матриц. Это разложение может быть выполнено для любой прямоугольной $m \times n$-матрицы $\mathbf{A}$ и имеет вид $\mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V}$, где $\mathbf{U}$ и $\mathbf{V}$ — ортогональные матрицы размера $m \times m$ и $n \times n$ соответственно, а $\mathbf{\Sigma}$ — диагональная матрица с диагональю из так называемых ***сингулярных*** (или иначе, ***главных***) ***чисел***. Эти числа суть квадратные корни из собственных чисел симметричной квадратной матрицы $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ (или, что то же, матрицы $\mathbf{AA}^T$, если иметь в виду только ненулевые собственные числа) и играют роль, аналогичную роли собственных чисел.

Разумеется, упомянутыми мультипликативными представлениями матриц далеко не исчерпывается множество возможных разложений, используемых в разных областях математики и ее приложений.

Зачастую бывает важным иметь не само представление данной матрицы в виде произведения двух треугольных или ортогональной и треугольной матриц, а процесс ее приведения к правой треугольной форме. В таком случае говорят о процедуре ***триангуляризации матрицы***. Название той или иной триангуляризации связывают с конкретными линейными (матричными) преобразованиями, лежащими в основе приведения матрицы к треугольному виду.

LU-РАЗЛОЖЕНИЕ

Пусть $\mathbf{A} := (a_{ij})_{i,\,j=1}^{n}$ — данная $n \times n$-матрица, а $\mathbf{L} := (l_{ij})_{i,\,j=1}^{n}$ и $\mathbf{U} := (u_{ij})_{i,\,j=1}^{n}$ — соответственно нижняя (левая) и верхняя (правая) треугольные матрицы*.

Будем искать мультипликативное представление матрицы $\mathbf{A}$ с указанными множителями $\mathbf{L}$ и $\mathbf{U}$, осуществляя непосредственное перемножение этих матриц с неизвестными (искомыми) элементами l_{ij} и u_{ij} и приравнивая полученные элементы матрицы-результата соответствующим элементам a_{ij} данной матрицы. Ясно, что таких равенств — уравнений относительно l_{ij} и u_{ij} — получится столько, сколько элементов в матрице $\mathbf{A}$, т.е. n^2, в то время как суммарное число искомых элементов $n^2 + n$. Чтобы иметь возможность найти однозначное решение поставленной задачи, нужно наложить n дополнительных условий. Это можно сделать, например, полагая элементы диагонали одной из матриц $\mathbf{L}$ или $\mathbf{U}$ равными заданным наперед числам. Обычно принимают или $l_{ii} := 1$, или $u_{ii} := 1$

Итак, ищем такие значения l_{ij} (при $i > j$) и u_{ij} (при $i \le j$), с которыми справедливо равенство

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Выполнив перемножение матриц, на основе поэлементного приравнивания левых и правых частей приходим к $n \times n$-матрице уравнений

$$\begin{array}{llll} u_{11} = a_{11}, & u_{12} = a_{12}, & \dots, & u_{1n} = a_{1n}, \\ l_{21}u_{11} = a_{21}, & l_{21}u_{12} + u_{22} = a_{22}, & \dots, & l_{21}u_{1n} + u_{2n} = a_{2n}, \\ \dots\dots & \dots\dots\dots\dots & \dots & \dots\dots\dots\dots \\ l_{n1}u_{11} = a_{n1}, & l_{n1}u_{12} + l_{n2}u_{22} = a_{n2}, & \dots, & l_{n1}u_{1n} + \dots + u_{nn} = a_{nn} \end{array}$$

относительно $n \times n$-матрицы неизвестных

$$\mathbf{L} + \mathbf{U} - \mathbf{E} := \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}. \qquad (1.1)$$

Специфика этой системы позволяет вычислять фигурирующие в (1.1) неизвестные одно за другим в следующем порядке.

Из первой строки уравнений имеем

$$u_{1j} = a_{1j} \quad (j = 1, \dots, n) \;;$$

из оставшейся части первого столбца уравнений находим

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}} \quad (i = 2, \dots, n) \;;$$

из оставшейся части второй строки —

$$u_{2j} = a_{2j} - l_{21}u_{1j} \quad (j = 2, \dots, n) \;;$$

из оставшейся части второго столбца —

$$l_{i2} = \frac{a_{i\,2} - l_{i1}u_{12}}{u_{22}} \quad (i = 3, \dots, n) \;;$$

и т.д. Наконец, последним вычисляем элемент

$$u_{nn} = a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} l_{nk}u_{kn} \,.$$

Легко видеть, что все отличные от фиксированных заранее значений 0 и 1 элементы матриц **L** и **U** можно получить, применяя всего две формулы:

$$u_{i\,j} = a_{i\,j} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{i\,k}u_{k\,j} \quad (\text{где } i \le j), \tag{1.2}$$

$$l_{i\,j} = \frac{1}{u_{j\,j}}\left(a_{i\,j} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{i\,k}u_{k\,j} \right) \quad (\text{где } i > j). \tag{1.3}$$

При практическом выполнении **LU**-разложения матрицы **A** нужно иметь в виду следующие два обстоятельства.

Во-первых, организация вычислений по формулам (1.2), (1.3) должна предусматривать переключение счета с одной формулы на другую в соответствии с показанным выше процессом получения неизвестных, приведшим к этим формулам. Это удобно делать, ориентируясь на матрицу $\mathbf{L}+\mathbf{U}-\mathbf{E}$ неизвестных (1.1). А именно, сначала, полагая $i := 1$, $j := 1, 2, \dots, n$ в формуле (1.2), заполняем первую строку матрицы (1.1), затем по формуле (1.3) при $j := 1$, $i := 2, \dots, n$ получаем первый столбец матрицы (1.1) (без первого элемента) и т.д.

Во-вторых, препятствием для осуществимости описанного процесса LU-разложения матрицы $\mathbf{A}$ может оказаться равенство нулю диагональных элементов матрицы $\mathbf{U}$, поскольку на них выполняется деление в формуле (1.3). Как показывает детальный анализ рассматриваемой ситуации, деления на нуль не будет происходить в том случае, если главные миноры данной матрицы отличны от нуля*. Пусть это требование выполнено. Так как

Из однозначности арифметических операций, выполняемых в процессе треугольной факторизации матрицы $\mathbf{A}$ по формулам (1.2), (1.3), при упомянутом требовании к главным минорам следует ее однозначная разложимость. Факт треугольной разложимости матрицы фиксируется следующей теоремой

Теорема 1.1. *Если все главные миноры квадратной матрицы $\mathbf{A}$ отличны от нуля, то существуют такие нижняя $\mathbf{L}$ и верхняя $\mathbf{U}$ треугольные матрицы, что $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$. Если элементы диагонали одной из матриц $\mathbf{L}$ или $\mathbf{U}$ фиксированы (ненулевые), то такое разложение единственно.*

Пример 1.1. Выполнить LU-разложение матрицы $\mathbf{A} := \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 4 & 3 & 1 \\ 6 & -13 & 6 \end{pmatrix}$.

По формулам (1.2), (1.3) последовательно вычисляем:

$$u_{11} := a_{11} = 2, \quad u_{12} := a_{12} = -1, \quad u_{13} := a_{13} = 1;$$

$$l_{21} := \frac{a_{21}}{u_{11}} = \frac{4}{2} = 2, \quad l_{31} := \frac{a_{31}}{u_{11}} = \frac{6}{2} = 3;$$

$$u_{22} := a_{22} - l_{21}u_{12} = 3 - 2(-1) = 5, \quad u_{23} := a_{23} - l_{21}u_{13} = 1 - 2 \cdot 1 = -1;$$

$$l_{32} := \frac{1}{u_{22}}(a_{32} - l_{31}\,u_{12}) = \frac{1}{5}(-13 - 3(-1)) = -2;$$

$$u_{33} := a_{33} - l_{31}\,u_{13} - l_{32}\,u_{23} = 6 - 3 \cdot 1 - (-2)(-1) = 1.$$

Таким образом, равенство $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ в данном случае выглядит так:

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 4 & 3 & 1 \\ 6 & -13 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -2 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 0 & 5 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Заметим, что так же употребительно фиксирование единичной диагонали у правой треугольной матрицы, т.е. представление матрицы **A** в виде:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & u_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

В этом случае элементы l_{ij} и u_{ij} находят по формулам, аналогичным формулам (1.2) и (1.3):

$$\begin{aligned} l_{ij} &= a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \qquad && (i \geq j); \\ u_{ij} &= \frac{1}{l_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} \right) \qquad && (i < j) , \end{aligned} \tag{1.5}$$

где индексы фиксируются так, чтобы вычислялись поочередно: столбец $(l_{i1})_{i=1}^{n}$, затем строка $(u_{1j})_{j=2}^{n}$, столбец $(l_{i2})_{i=2}^{n}$, строка $(u_{2j})_{j=3}^{n}$ и т.д.

РАЗЛОЖЕНИЕ СИММЕТРИЧНЫХ МАТРИЦ

Объем вычислений, требующихся для решения линейных алгебраических задач с симметричными матрицами, можно сократить почти вдвое, если учитывать симметрию при треугольной факторизации матриц.

Пусть $\mathbf{A} := (a_{i\,j})_{i,\,j=1}^{n}$ — данная симметричная матрица, т.е. $a_{i\,j} = a_{j\,i}$. Будем строить ее представление в виде $\mathbf{A} = \mathbf{U}^T\mathbf{U}$, где

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1\,n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2\,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & u_{n\,n} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}^T = \begin{pmatrix} u_{11} & 0 & \dots & 0 \\ u_{12} & u_{22} & \cdots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_{1\,n} & u_{2\,n} & \cdots & u_{n\,n} \end{pmatrix}.$$

Аналогично тому, как это делалось в предыдущем параграфе, составим систему $\dfrac{n(n+1)}{2}$ уравнений относительно такого же числа неизвестных (элементов матрицы $\mathbf{U}$):

$$\begin{aligned} &u_{11}^2 = a_{11}, \quad u_{12}u_{11} = a_{12},\ \dots, && u_{11}u_{1\,n} = a_{1\,n}, \\ &\qquad u_{12}^2 + u_{22}^2 = a_{22},\ \dots, && u_{12}u_{1\,n} + u_{22}u_{2\,n} = a_{2\,n}, \\ & && \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ & && u_{1\,n}^2 + u_{2\,n}^2 + \dots + u_{n\,n}^2 = a_{n\,n}. \end{aligned}$$

Из первой строки уравнений находим сначала $u_{11} = \sqrt{a_{11}}$, затем $u_{1\,j} = \dfrac{a_{1\,j}}{u_{11}}$ при $j = 2, \dots, n$. Из второй — $u_{22} = \sqrt{a_{22} - u_{12}^2}$, затем $u_{2\,j} = \dfrac{a_{2\,j} - u_{12}u_{1\,j}}{u_{22}}$ при $j = 3, \dots, n$, и т.д. Завершается процесс вычислением

$$u_{n\,n} = \sqrt{a_{n\,n} - \sum_{k=1}^{n-1} u_{k\,n}^2}\,.$$

Таким образом, матрица **U** может быть получена с помощью следующей совокупности формул:

$$u_{i\,i} = \sqrt{a_{i\,i} - \sum_{k=1}^{i-1} u_{k\,i}^2} \quad \text{при} \quad i = 1,\ 2, \ldots,\ n\ ; \tag{1.6}$$

$$u_{i\,j} = \frac{a_{i\,j} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} u_{ki} u_{k\,j}}{u_{ii}} \quad \text{при} \quad j = 2, \ldots, n; \quad j > i \tag{1.7}$$

$$(\, u_{ij} := 0 \quad \text{при} \quad j < i\ ).$$

Осуществимости определяемого формулами (1.6) – (1.7) вещественного $\mathbf{U}^T\mathbf{U}$-***разложения*** вещественной симметричной матрицы **A** по этим формулам (называемого также ***разложением Холецкого****) могут помешать два обстоятельства: обращение в нуль элемента $u_{i\,i}$ при каком-либо значении $i \in \{1,\ 2, \ldots\ ,\ n\}$ и отрицательность подкоренного выражения. Так как $\mathbf{U}^T\mathbf{U}$-разложение можно считать частным случаем **LU**-разложения, то для его осуществимости достаточно потребовать неравенство нулю главных миноров данной матрицы. Для симметричных матриц это условие будет выполнено в случае их положительной определенности, что для многих участвующих в приложениях матриц имеет место.

Замечание 1.2. Формально, находя u_{11} из равенства $u_{11}^2 = a_{11}$, как и последующие диагональные элементы u_{ii} из аналогичных соответствующих равенств, мы берем только один корень из двух — для простоты положительный. С таким же успехом можно брать отрицательные или, например, чередующиеся при изменении i положительные и отрицательные корни — все это не противоречит теореме 1.1 об **LU**-разложении. Поскольку диагональ треугольной матрицы не фиксирована, здесь нет единственности; единственность разложения появляется с фиксированием знака перед арифметическим корнем.

Более универсальным, чем $\mathbf{U}^T\mathbf{U}$-разложение Холецкого, является $\mathbf{U}^*\mathbf{D}\mathbf{U}$-***разложение***, пригодное для эрмитовых матриц, частным случаем которых являются вещественные симметричные матрицы ([3, 18, 61]). Для матриц с вещественными элементами эрмитово сопряжение равносильно транспонированию, и $\mathbf{U}^*\mathbf{D}\mathbf{U}$-разложение реализуется в виде $\mathbf{U}^T\mathbf{D}\mathbf{U}$-***разложения***. Под такой модификацией разложения Холецкого понимают следующее мультипликативное представление вещественной симметричной матрицы $\mathbf{A}$:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}^T\mathbf{D}\mathbf{U}\ , \tag{1.8}$$

где $\mathbf{U}$ — верхняя треугольная матрица с элементами, равными единице на главной диагонали; $\mathbf{U}^T$ — транспонированная к ней матрица; $\mathbf{D}$ — диагональная матрица.

Вывод формул для выполнения данной факторизации можно осуществить аналогично предыдущему, рассматривая матричное равенство (1.8) в поэлементном представлении. Имеем:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ u_{12} & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_{1\,n} & u_{2\,n} & \dots & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & d_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \dots & u_{1\,n} \\ 0 & 1 & \dots & u_{2\,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1\,n} \\ a_{12} & a_{22} & \dots & a_{2\,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{1\,n} & a_{2\,n} & \dots & a_{n\,n} \end{pmatrix}.$$

Учитывая, что в искомом разложении неизвестных величин d_{ii} и u_{ij} всего $0{,}5n(n+1)$, из получающихся при перемножении матриц и поэлементном приравнивании левых и правых частей уравнений выбираем такое же число несовпадающих:

$$\begin{aligned} d_{11} = a_{11}, \quad u_{12}d_{11} = a_{12}, \quad \dots\ , \quad & u_{1\,n}d_{11} = a_{1\,n}, \\ u_{12}^2 d_{11} + d_{22} = a_{22}, \dots, \quad & u_{12}u_{1\,n}d_{11} + u_{2\,n}d_{22} = a_{2\,n}, \\ & \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ & u_{1\,n}^2 d_{11} + u_{2\,n}^2 d_{22} + \dots + d_{nn} = a_{n\,n}. \end{aligned}$$

Отсюда последовательно находим:

$$d_{11} = a_{11} \quad \text{и} \quad u_{1j} = \frac{a_{1j}}{d_{11}} \ \ (j = 2, \ \ldots, \ n)$$

— из первой строки уравнений,

$$d_{22} = a_{22} - u_{12}^2 d_{11} \quad \text{и} \quad u_{2j} = \frac{a_{2j} - u_{12} u_{1j} d_{11}}{d_{22}} \ \ (j = 3, \ \ldots, \ n)$$

— из второй строки уравнений, и т.д., пока не будет найдено последнее значение

$$d_{nn} = a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} u_{kn}^2 d_{kk} \, .$$

В результате приходим к следующей совокупности формул, по которым, циклически переключаясь с одной на другую, можно найти $\mathbf{U}^T\mathbf{DU}$-разложение симметричной матрицы $\mathbf{A} := (a_{ij})_{i,\,j=1}^n$:

$$d_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} u_{ki}^2 d_{kk} \qquad \text{при} \quad i = 1, 2, \ldots, n;$$

$$u_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} u_{ki} u_{kj} d_{kk}}{d_{ii}} \qquad \text{при} \quad j = 2, \ldots, n, \quad j > i; \tag{1.9}$$

$$u_{ij} := 0 \qquad \text{при} \quad j < i.$$

Как видим, реализация вещественного $\mathbf{U}^T\mathbf{DU}$-разложения не требует извлечения квадратных корней, что расширяет границы его применимости (факторизуемая симметричная матрица не обязана быть положительно определенной).

Пример 1.2. Дана симметричная матрица $\mathbf{A} := \begin{pmatrix} 25 & 5 & 5 \\ 5 & 10 & 4 \\ 5 & 4 & 1 \end{pmatrix}$.

Найдем ее $\mathbf{U}^T\mathbf{DU}$ -разложение.

Пользуясь формулами (1.9), последовательно вычисляем ненулевые элементы матриц $\mathbf{D}$ и $\mathbf{U}$:

$$d_{11} := a_{11} = 25\,, \qquad u_{12} := \frac{a_{12}}{d_{11}} = \frac{5}{25} = \frac{1}{5}\,, \qquad u_{13} := \frac{a_{13}}{d_{11}} = \frac{5}{25} = \frac{1}{5}\,;$$

$$d_{22} := a_{22} - u_{12}^2 d_{11} = 10 - \frac{1}{25}\cdot 25 = 9\,,$$

$$u_{23} := \frac{a_{23} - u_{12}u_{13}d_{11}}{d_{22}} = \frac{4 - \frac{1}{5}\cdot\frac{1}{5}\cdot 25}{9} = \frac{1}{3}\,;$$

$$d_{33} := a_{33} - u_{13}^2 d_{11} - u_{23}^2 d_{22} = 1 - \frac{1}{25}\cdot 25 - \frac{1}{9}\cdot 9 = -1\,.$$

Таким образом, $\mathbf{U}^T\mathbf{DU}$ -разложение матрицы $\mathbf{A}$ имеет вид

$$\begin{pmatrix} 25 & 5 & 5 \\ 5 & 10 & 4 \\ 5 & 4 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0,2 & 1 & 0 \\ 0,2 & 0,333 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 25 & 0 & 0 \\ 0 & 9 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0,2 & 0,2 \\ 0 & 1 & 0,333 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

РЕШЕНИЕ СЛАУ И ОБРАЩЕНИЕ МАТРИЦ НА ОСНОВЕ LU-РАЗЛОЖЕНИЯ

Итак, рассмотрим вопрос о численном решении систем вида

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ \dots \ + a_{1n}x_n = b_1 \ , \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ \dots \ + a_{2n}x_n = b_2 \ , \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ \dots \ + a_{nn}x_n = b_n \ , \end{cases} \tag{2.1}$$

или, в иной терминологии, векторно-матричных уравнений

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \ , \tag{2.1a}$$

где $\mathbf{b} := (b_1; b_2; \dots; b_n)^T$ и $\mathbf{x} := (x_1; x_2; \dots; x_n)^T$ — вектор свободных членов и вектор неизвестных соответственно (последний в других случаях может означать и вектор-решение) с вещественными координатами, а $\mathbf{A} := (a_{ij})_{i,\,j=1}^{n}$ — вещественная $n \times n$-матрица коэффициентов данной системы. Эффективность способов решения системы (2.1) во многом зависит от структуры и свойств матрицы $\mathbf{A}$: размера, обусловленности, симметричности, заполненности (т.е. соотношения между числом ненулевых и нулевых элементов), специфики расположения ненулевых элементов в матрице и др.

Если матрица $\mathbf{A}$ исходной системы (2.1) разложена в произведение треугольных матриц $\mathbf{L}$ и $\mathbf{U}$, то, значит, вместо уравнения (2.1a) можно записать эквивалентное ему уравнение

$$\mathbf{LUx} = \mathbf{b} \ .$$

Введя вектор вспомогательных переменных $\mathbf{y} := (y_1; y_2; \dots; y_n)^T$, последнее можно переписать в виде системы

$$\begin{cases} \mathbf{Ly} = \mathbf{b}, \\ \mathbf{Ux} = \mathbf{y} \ . \end{cases}$$

Таким образом, решение данной системы с *квадратной* матрицей коэффициентов свелось к последовательному решению двух систем с *треугольными* матрицами коэффициентов.

Получим сначала формулы для вычисления элементов y_i вспомогательного вектора $\mathbf{y}$. Для этого запишем уравнение $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ в развернутом виде:

$$\begin{cases} y_1 = b_1, \\ l_{21}y_1 + y_2 = b_2, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ l_{n\,1}y_1 + l_{n\,2}y_2 + \dots + l_{n,n-1}y_{n-1} + y_n = b_n. \end{cases}$$

Отсюда видно, что все значения y_i могут быть последовательно найдены при $i = 1, 2, \dots, n$ по формуле

$$y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{i\,k} y_k. \tag{2.8}$$

Развернем теперь векторно-матричное уравнение $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$:

$$\begin{cases} u_{11}x_1 + \; u_{12}x_2 + \; \dots \; + \; u_{1\,n}x_n = y_1\,, \\ \qquad\qquad u_{22}x_2 + \; \dots \; + \; u_{2\,n}x_n = y_2\,, \\ \qquad\qquad \dots\dots\dots \qquad \dots\dots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad u_{n\,n}x_n = y_n\,. \end{cases} \tag{2.9}$$

Из этой системы значения неизвестных x_i находят так же последовательно, как и y_i, но в обратном порядке, что можно отразить одной формулой:

$$x_i = \frac{1}{u_{i\,i}} \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{i\,k} x_k \right), \quad \text{где } \; i = n, n-1, \; \dots \;, 2, 1. \tag{2.10}$$

Решение системы (2.1) с матрицей коэффициентов, факторизованной по формулам (1.5) (т.е. с фиксированием элементов диагонали матрицы $\mathbf{U}$), получают следующим образом:

$$y_i = \frac{1}{l_{i\,i}} \left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{i\,k} y_k \right), \quad i = 1, 2, \; \dots, n,$$

$$x_i = y_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{i\,k} x_k\,, \quad i = n, n-1, \dots, 1\,.$$

РЕШЕНИЕ СИММЕТРИЧНЫХ СЛАУ

Пусть матрица $\mathbf{A} = \left(a_{i\,j}\right)$ системы (2.1) обладает симметрией: $a_{i\,j} = a_{ji}$. Тогда при наличии ее $\mathbf{U}^T\mathbf{U}$-разложения (см. § 1.3) решение системы $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ сводится к последовательному решению двух треугольных систем:

$$\mathbf{U}^T\mathbf{y} = \mathbf{b} \quad \text{и} \quad \mathbf{Ux} = \mathbf{y}\,.$$

Первая из них имеет вид

$$\begin{cases} u_{11}y_1 = b_1, \\ u_{12}y_1 + u_{22}y_2 = b_2, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ u_{1\,n}y_1 + u_{2\,n}y_2 + \ldots + u_{n\,n}y_n = b_n, \end{cases}$$

откуда последовательно получаем значения вспомогательных неизвестных $y_1,\ y_2,\ \ldots,\ y_n$ по единой формуле

$$y_i = \frac{1}{u_{i\,i}}\left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} u_{k\,i}y_k\right), \tag{2.15}$$

полагая в ней $i := 1,\ 2,\ \ldots\ ,\ n$. Из второй системы

$$\begin{cases} u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \ldots + u_{1\,n}x_n = y_1\,, \\ \qquad\quad u_{22}x_2 + \ldots + u_{2\,n}x_n = y_2\,, \\ \qquad\qquad\qquad \dots\dots\dots\dots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad u_{n\,n}x_n = y_n \end{cases}$$

находим искомые значения x_i в обратном порядке, т.е. последовательной подстановкой значений $i := n,\ n-1,\ \ldots,\ 1$ в формулу

$$x_i = \frac{1}{u_{i\,i}}\left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{i\,k}x_k\right). \tag{2.16}$$

Решение симметричных СЛАУ посредством совокупности формул (1.6) – (1.7), (2.15) – (2.16) называют ***методом квадратных корней*** или ***схемой Холецкого***. В случае систем с положительно определенными матрицами можно рассчитывать на хорошие результаты применения такого метода (особенно если в процессе решения делать проверку на немалость величин $|u_{i\,i}|$, чтобы избежать большого роста погрешностей).

Аналогично решаются симметричные системы (2.1) при помощи $\mathbf{U}^T\mathbf{DU}$-разложения, процесс выполнения которого показан в § 1.3 (см. итоговые формулы (1.9)). В этом случае эквивалентным уравнению $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ является уравнение

$$\mathbf{U}^T\mathbf{DUx} = \mathbf{b} \ .$$

Введя вектор вспомогательных переменных $\mathbf{y} = (y_1; y_2; ...; y_n)^T$, последнее можно переписать в виде системы

$$\begin{cases} \mathbf{U}^T\mathbf{D}\,\mathbf{y} = \mathbf{b}, \\ \quad \mathbf{Ux} = \mathbf{y} \ . \end{cases} \tag{2.17}$$

Первое из уравнений этой системы в развернутом виде суть

$$\begin{cases} d_{11}y_1 = b_1, \\ u_{12}d_{11}y_1 + d_{22}y_2 = b_2, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ u_{1\,n}d_{11}y_1 + u_{2\,n}d_{22}y_2 + \ldots + d_{nn}y_n = b_n \ . \end{cases}$$

Отсюда, придавая i значения 1, 2, … , n, последовательно получаем значения вспомогательных неизвестных y_1, y_2, …, y_n:

$$y_i = \frac{1}{d_{ii}}\left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} u_{k\,i}d_{k\,k}y_k\right) . \tag{2.18}$$

Развернув второе уравнение векторно-матричной системы (2.17), получаем систему

$$\begin{cases} x_1 + u_{12}x_2 + \ldots + u_{1\,n}x_n = y_1 \, , \\ \qquad\quad x_2 + \ldots + u_{2\,n}x_n = y_2 \, , \\ \qquad\qquad\qquad \dots\dots\dots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad x_n = y_n \ . \end{cases}$$

Значения $x_n, x_{n-1}, \ldots, x_1$ находят из нее по формуле

$$x_i = y_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{ik}x_k \ , \quad \text{где } i := n,\ n-1,\ \ldots,\ 1 \ . \tag{2.19}$$