5 Матричные разложения - I

5.1 Мотивация

Матричные разложения позволяют представить матрицу A в виде произведения более простых по структуре матриц, что облегчает выполнение различных операций:

Ex 1. *Рассмотрим систему уравнений:*

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 4 & 7 & 3 \\ 6 & 9 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 5 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix},$$

в которой матрица $A = L \cdot U$ представлена в виде произведения нижне- и верхнетреугольной матриц (L и U соответственно). Обозначим $Ux = y$ и решим систему $Ly = b$, а далее $Ux = y$, получим:

$$y = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T \quad \Rightarrow \quad x = \begin{bmatrix} 1/2 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T.$$

Ex 2. *Решим теперь ту же самую задачу, имея иное разложение для матрицы A:*

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 1 \\ 4 & 7 & 3 \\ 6 & 9 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{14} & 3/\sqrt{14} & 0 \\ 2/\sqrt{14} & -1/\sqrt{14} & 1/\sqrt{2} \\ 3/\sqrt{14} & -2/\sqrt{14} & -1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sqrt{14} & 33/\sqrt{14} & 16/\sqrt{14} \\ 0 & \sqrt{14} & 3/\sqrt{14} \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{bmatrix},$$

которое имеет вид $A = Q \cdot R$, где Q - ортогональная, а R - верхнетреугольная матрицы. Решение в этом случае удобно искать в следующей форме:

$$QRx = b \quad \Rightarrow \quad Rx = Q^T b.$$

5.2 LU - разложение

Пусть $A \in \mathrm{Mat}_{\mathbb{R}}(n)$ - произвольная квадратная матрица.

Def 1. LU-**разложением** матрицы A называется представление данной матрицы в виде произведения двух матриц, одна из которых (L) является нижнетреугольной с единицами на главной диагонали, а другая (U) - верхнетреугольной.

Ex 3. *Алгоритм вычисления LU - разложения:*

- *инициализация:*

$$U = A, \quad L = I, \quad P = I.$$

- *выбор главного элемента* $(k = 1, \ldots, n-1)$*:*

  – *Находим индекс $r \in \{k, \ldots, n\}$, при котором $|U_{rk}|$ максимально;*

- *Если $r \neq k$, меняем местами строки k и r в U, в P и в L.*

- *Вычисление элементов L_{ik}:*
  - *вычисление коэффициента l_{ik} $(i = k+1, \dots, n)$:*
$$l_{ik} = U_{ik}/U_{kk}.$$
  - *Запоминаем $L_{ik} = l_{ik}$ и обновляем строку i матрицы U:*
$$U_{ij} \leftarrow U_{ij} - l_{ik}U_{kj}, \quad j = k, \dots, n.$$

NB. 1. *Вычислительная сложность процедуры для плотной матрицы равна $\approx \frac{2}{3}n^3$.*

5.3 Разложение Холецкого

Пусть $A \in \mathrm{Mat}_{\mathbb{R}}(n)$ - симметричная положительно определенная $n \times n$ матрица:
$$A^T = A, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, \quad x \neq 0 \quad x^T A x > 0.$$

Лемма 1. *Для всякой симметричной положительно определенной матрицы A существует и единственна матрица L, такая что:*
$$A = L \cdot L^T.$$

Доказательство. Из курса линейной алгебры известно, что для матрицы A, обладающей перечисленными свойствами, существует ортогональная матрица U и диагональная матрица D (с положительными элементами на диагонали), такие что:
$$A = U \cdot D \cdot U^T = U \cdot \sqrt{D} \cdot \sqrt{D} \cdot U^T = (U \cdot \sqrt{D}) \cdot (U \cdot \sqrt{D})^T = L \cdot L^T.$$
□

Def 2. Разложение представленного вида называется **разложением Холецкого** для матрицы A.

Ex 4. *Алгоритм вычисления разложения Холецкого:*

- *Инициализируем L как нулевую матрицу;*
- *Для $k = 1$ до n:*
  - *Вычисляем диагональный элемент:*
$$L_{kk} = \sqrt{A_{kk} - \sum_{s=1}^{k-1} L_{ks}^2}.$$
  - *Заполняем элементы матрицы L $(i = k+1$ до $n)$:*
$$L_{ik} = \frac{1}{L_{kk}} \left(A_{ik} - \sum_{s=1}^{k-1} L_{is} L_{ks} \right).$$

NB. 2. *Вычислительная сложность процедуры для плотной матрицы равна $\approx \frac{1}{3}n^3$.*

5.4 QR - разложение

Пусть снова $A \in Mat_{\mathbb{R}}(n)$ - произвольная квадратная матрица.

Def 3. QR**-разложением** матрицы A называется представление данной матрицы в виде произведения двух матриц, одна из которых (Q) является ортогональной матрицей, а другая R - верхнетреугольной.

Лемма 2. *Для всякой невырожденной матрицы A существует единственное QR-разложение.*

Доказательство. Доказательство следует из того факта, что во всяком евклидовом пространстве можно выбрать ортонормированный базис (процедурой ортогонализации Грама-Шмидта). Действительно, пусть

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_n \end{bmatrix}, \quad \det A \neq 0,$$

тогда существует ортогональная матрица Q и верхнетреугольная матрица $R = (r_m^k)$:

$$Q = \begin{bmatrix} e_1 & e_2 & \dots & e_n \end{bmatrix}, \quad a_m = e_m + \sum_{k=1}^{m-1} r_m^k e_k.$$

Отсюда сразу следует, что $A = Q \cdot R$. □

Ex 5. *Алгоритм Хаусхолдера:*

- $k = 1, \dots, n$*:*
  - *выделяем подстолбец* $x := A_{k:n,\,k} \in \mathbb{R}^{n-k+1}$
  - *определяем вектор* $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^{n-k+1}$
  - *строим вектор* ω*:*

    $$\omega := x + \mathrm{sign}(x_1) \cdot \|x\|_2 \cdot e_1, \quad \omega := \omega / \|\omega\|_2,$$

  - *обновляем подматрицу* $A_{k:n,\,k:n}$*:*

    $$A_{k:n,\,k:n} := A_{k:n,\,k:n} - 2\omega(\omega^T A_{k:n,\,k:n}).$$

  - *запоминаем вектор* $\omega \to \omega_k$ *для построения* Q.
- *завершение алгоритма:*
  - *После завершения цикла матрица* A *содержит* R *в верхнетреугольной части;*
  - *Матрица* Q *восстанавливается по сохранённым векторам* ω_k*:*

    $$Q = H_1 H_2 \cdots H_n, \quad H_k = \mathrm{diag}\{I_{k-1}, \widetilde{H}_k\},$$
    $$\widetilde{H}_k = I - 2\omega_k \omega_k^T \in \mathbb{R}^{(n-k+1)\times(n-k+1)}.$$

NB. 3. *Вычислительная сложность процедуры для плотной матрицы равна* $\approx \frac{2}{3} n^3$.