Матричные разложения I

Разложение Холецкого

def Пусть $A \in \text{Mat}_n \mathbb{R}$ симметричная положительно определённая матрица. ***Разложением Холецкого*** матрицы A назовем ее представиление вида:

$$A = LL^T$$

где L - нижнетреугольная матрица с положительными диагональными элементами

Алгоритм построения разложения Холецкого

Алгоритм вычисления матрицы L состоит из n однотипных шагов. На j-ом шаге строим j-ый столбец искомой матрицы следующим образом:

1. Вычисляем диагональный элемент l_{jj} по формуле

$$l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=0}^{k<j} l_{jk} l_{jk}}$$

2. при $i = j+1, \dots, n-1$ вычисляем

$$l_{ij} = \big(a_{ij} - \sum_{k=0}^{k<j} l_{ik} l_{jk}\big)/l_{jj}$$

Асимптотика построения разложения $\frac{n^3}{3} + O(n^2)$ Как только получили разложение, для решения исходной СЛАУ достаточно решить 2 системы с трегольными матрицами, а это $O(n^2)$

- Требуется в 2 раза меньше операций, чем для построения LU-разложения
- Обладает гарантированной вычислительной устойчивостью, но требует симметричности и положительной определенности от матрицы

Пример

Найдем разложение Холецкого для матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 5 & 7 & 3 \\ 3 & 7 & 14 & 1 \\ 4 & 3 & 1 & 59 \end{pmatrix}$$

Поочередно вычисляя столбцы матрицы L по формулам, получаем

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 2 & 0 \\ 4 & -5 & -3 & 3 \end{pmatrix}$$

LU разложение

def Пусть A - произвольная невырожденная квадратная матрица. ***LU-разложением*** матрицы A назовем ее представиление вида:

$$A = LU$$

где L - нижнетреугольная матрица с единицами на диагонали (нижняя унитреугольная), а U - верхнетреугольная матрица

LU без выбора ведущего элемента

Этот вид алгоритма подходит только для матриц, у которых отличны от нуля все главные миноры. В этом предположении построим матриц L и U. Рассмотрим j-ый шаг алгоритма:

1. $i = 0, \ldots, j-1$ вычислить u_{ij}

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=0}^{ki} l_{ik} u_{kj}$$

2. аналогично вычислить u_{jj}

$$u_{jj} = a_{jj} - \sum_{k=0}^{kj} l_{jk} u_{kj}$$

3. $i = j+1, \ldots, n-1$ вычислить l_{ij}

$$l_{ij} = \big(a_{ij} - \sum_{k=0}^{k<j} l_{ik} u_{kj}\big)/u_{jj}$$

Асимптотика построения разложения $\frac{2n^3}{3} + O(n^2)$
На 3 этапе происходит деление на очередной диагональный элемент u_{jj}, называемый ***ведущим элементом*** для j- го шага алгоритма. Требование отличия всех главных миноров исходной матрицы от нуля гарантирует, что ведущие элементы не равны нулю. Однако некоторые из этих значений могут оказаться сколь угодно близкими к 0. В этом случае мы получаем неконтролируемый рост погрешности

Матрицы с диагональным преобладанием

def Матрицу A, для любой строки которой выполнено соотношение

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}| + \delta, \quad \delta 0$$

называется ***матрицей с диагональным преобладанием***
Хорошая обусловленность таких матриц следует из теоремы Леви - Десппланка

Пример

Для матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -4 & 6 & 1 \\ 2 & 7 & 5 \end{pmatrix}$$

после несложных вычислений получаем:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 0 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

LU с выбором ведущего элемента

Метод LU разложения с частичным выбором ведущего элемента позволяет не накладывать дополнительных условий на матрицу A

<u>Th</u> С помощью некоторой перестановки строк невырожденной матрицы всегда можно сделать все ее главные миноры отличными от нуля.

Построим разложение не для исходной матрицы, а для матрицы $PA = LU$, где P - матрица перестановки

Будем итеративно вычислять столбцы матриц L и U. Инициализируем $U_{-1} = A$, $L_{-1} = E$. Для любого j должно выполняться $A_j = L_j U_j$. На каждой итерации будем вычислять матрицы рекурсивно:

$$A_j = P_j U_{j-1}$$

$$U_j = N_j P_j U_{j-1}$$

$$L_j = P_j L_{j-1} P_j N_j^{-1}$$

Матрица P_j - матрица транспозиции,необходимая при смене ведущего элемента
Матрица N_j - нижнетреугольная матрица, у которой на диагонали стоят единицы, а среди поддиагональных элементов могут быть отличны от нуля только элементы j-ого столбца: $\nu_{j+1\ j}, \dots, \nu_{n-1\ j}$. Причём, если $\tilde{U} = P_j U_{j-1}$, то $\nu_{ij} = -\tilde{u}_{ij}/\tilde{u}_{jj}$. Такой выбор позволяет обнулить все поддиагональные элементы соответствующего столбца матрицы U. Заметим, что вычисления в последней формуле можно упростить, тк обращение описанной нижней треугольной матрицы сводится к изменению знаков ее ненулевых поддиагональных элементов.

Рассмотрим принцип работы алгоритма. Матрицу транспозиций будем хранить в виде одного массива. Двумерный массив `LU` изначально инициализируем исходной матрицей. В процессе преобразования данные изменятся следующим образом(пример для $n = 3$):

$$\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} \\ a_{10} & a_{11} & a_{12} \\ a_{20} & a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} u_{00} & u_{01} & u_{02} \\ l_{10} & u_{11} & u_{12} \\ l_{20} & l_{21} & u_{22} \end{pmatrix}$$

Этапы j-ого шага:

1. для $i = 0, \dots, j-1$ вычисляем u_{ij}

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=0}^{k<i} l_{ik} u_{kj}$$

2. для $i = j, \dots, n-1$ вычисляем u_{ij}

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=0}^{k<j} l_{ik} u_{kj}$$

3. Ищем максимальный по модулю элемент u_{ij}, где $i \geq j$. Фиксируем t, содержащий его номер строки, и если $t \neq j$, то меняем строки местами, указвая соответствующий элемент массива перестановки равным t

4. для $i = j+1, \dots, n-1$ вычисляем l_{ij}

$$l_{ij} = -\nu_{ij} = \tilde{u}_{ij}/\tilde{u}_{jj}$$

Пример

Для матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 10 \end{pmatrix}$$

применим алгоритм и получим разложение:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 4/7 & 1 & 0 \\ 1/7 & 6/7 & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 7 & 8 & 10 \\ 0 & 3/7 & 11/7 \\ 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} \qquad P = [2, 2, 2]$$

QR разложение

def Пусть A - произвольная невырожденная квадратная матрица. ***QR-разложением*** матрицы A назовем ее представиление вида:

$$A = QR$$

где Q - ортогональная матрица, а R - правая треугольная матрица

Метод Грама-Шмидта

QR разложение матрицы может быть получено как "побочный" продукт ортогонализации столбцов исходной матрицы методом Грама-Шмидта. Считаем, что данный метод был изучен в курсе линейной алгебры

Метод Хаусхолдера (метод отражений)

def ***Матрицей Хаусхолдера*** (матрицей отражений) в общем случае назовем матрицу оператора отражения H:

$$H = E - \frac{2}{(u,u)} \cdot u \otimes u$$

которая в ортонормированном базисе (наш случай) принимает вид:

$$H = E - \frac{2}{(u,u)} \cdot uu^T$$

Вектор u в этом случае назывется ***вектором отражения***

Заметим, что умножение матрицы на столбец a, можно оптимизировать, сведя его к выполнению операций:

$$\lambda = \frac{2 \cdot (u,a)}{(u,u)} \qquad a^* = a - \lambda u$$

Задача разложения матрицы сводится к поиску таких матриц H_i, что:

$$R = H_{n-2} \dots H_0 A$$

Тк все опреаторы H_i ортогональны, то $H_{n-2} \dots H_0 = Q^T$

Фактически, мы строим набор векторов отражений, в котором каждый вектор отвечает за обнуление элементов определенного столбца исходной матрицы Научимся по заданному столбцу строить вектор отражения:

1. Фиксируем a_j - последний НЕ обнуляющийся элемент столбца
2. Элементы вектора отражения с номерами, соответсвующими неизменяемым элементам столбца, полагаем равными нулю
3. Считаем S' - сумму квадратов тех элементов исходного столбца, которые должны быть обнулены
4. Может быть 2 случая
   (a) $S' = 0$ и $a_j = 0$. такой случай является вырожденным, все элементы вектора отражения кроме j-го надо приравнять к 0, а j-ый - к 1
   (b) Иначе находим:
   $$\sigma = (a_j \geq 0 \ ? \ 1 \ : \ -1), \quad S = \sigma\sqrt{a_j^2 + S'}$$
5. Все элементы вектора отражения, соответствующие обнуляемым элементам a, полагаем равными их исходным значениям в a
6. Элемент $u_j = a_j + S$

На практике матрицу Q вычисляют либо реккурентно, либо вообще не используют, раюотая с векторами отражений

Пример

Для матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 10 & -170 & 60 \\ -40 & 104 & 174 \\ 80 & -28 & 282 \end{pmatrix}$$

применим алгоритм и получим разложение:

$$R = \begin{pmatrix} -90 & 90 & -180 \\ 0 & -180 & -90 \\ 0 & 0 & -270 \end{pmatrix} \qquad Q^T = \begin{pmatrix} -1/9 & 4/9 & -8/9 \\ 8/9 & -16/45 & -13/45 \\ -4/9 & -37/45 & -16/45 \end{pmatrix}$$