§9. LU-разложение: «хорошие» СЛАУ

Современная вычислительная линейная алгебра – бурно развивающаяся наука. Ее центральная проблема – это решение систем линейных уравнений. В настоящее время разработано множество методов, упрощающих эту задачу, которые, в частности, зависят от структуры матрицы СЛАУ. Большинство методов основано на представлении матрицы в виде произведения других матриц специального вида, или *матричных разложениях* (по-другому, *факторизациях*). Как правило, после определенного разложения матрицы, задача решения СЛАУ существенно упрощается. Кроме того, прибегая к определенным разложениям матриц, можно получить универсальный вид решения, как для «хороших», так и для «плохих» СЛАУ.

Приведем конспективно метод решения СЛАУ посредством матричных разложений, не останавливаясь на формулах соответствующих алгоритмов их построения. С одной стороны, они довольно громоздки, а с другой – почти всегда запрограммированы в современных математических пакетах.

Начнем с простого, но исключительно важного, частного случая, а именно, системы с треугольной матрицей, т. е. такой матрицей, по одну из сторон от диагонали которой находятся одни нули. Приведем пример нижней треугольной матрицы **L** и верхней треугольной матрицы **U** размерности N=3:

$$L=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 2 & 3 & 0\\ 4 & 5 & 6\end{pmatrix}, \quad U=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 0 & 4 & 5\\ 0 & 0 & 6\end{pmatrix}. \qquad (50)$$

Для определения неизвестного вектора **x** в СЛАУ с нижне- или верхне-треугольной матрицей

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{b},\ \mathbf{U}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{b} \qquad (51)$$

требуется всего N операций. Достаточно, двигаясь по строкам матрицы (сверху-вниз в случае нижней треугольной матрицы **L**, и снизу-вверх в случае верхней треугольной матрицы **U**), просто подставлять уже известные x_i. Такой алгоритм решения СЛАУ с треугольной матрицей называют иногда либо *подстановкой*, либо *прямым ходом* решения СЛАУ (часто подразумевая, что до него выполнены определенные преобразования, именуемые обратным ходом). В частности, решение еще одного часто встречающегося типа систем с *трехдиагональной* матрицей сводится к прямому и обратному ходу алгоритма, называемого *прогонкой* (см. §6.4).

Оказывается, решение «хороших» СЛАУ с квадратной матрицей **A** методом Гаусса можно представить в форме *LU-разложения*, (или, по-другому, *треугольного* разложения):

$$\mathbf{A}=\mathbf{L}\cdot\mathbf{U}, \tag{52}$$

где L и U – это нижняя и верхняя треугольные матрицы соответственно.

Алгоритм Гаусса с выбором главного элемента представим в виде:

$$\mathbf{P}\cdot\mathbf{A}=\mathbf{L}\cdot\mathbf{U}, \tag{53}$$

где **P** – это диагональная матрица перестановок. Заметим, что **P**, **A**, **L**, **U** – это квадратные матрицы одного и того же размера NxN.

Метод LU-разложения является мощным средством решения СЛАУ и особенно важен при обработке соответствующих экспериментальных данных. Чтобы понять это, заменим исходную систему

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{b} \tag{54}$$

эквивалентной системой

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{U}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{P}\cdot\mathbf{b}, \tag{55}$$

а ее, в свою очередь, парой других систем:

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{y}=\mathbf{P}\cdot\mathbf{b}, \tag{56}$$

$$\mathbf{U}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{y}. \tag{56+}$$

Несложно сообразить, что обе системы (56) и (56+) решаются прямой подстановкой, т. к. матрицы **L** и **U** – треугольные. Сначала из первой СЛАУ определяется промежуточный вектор **y**, а затем (из второй системы) – искомый вектор **x**.

Главное преимущество метода LU-разложения заключается в том, что явный вид вектора правой части **b** при решении СЛАУ используется только на заключительном этапе (в формулах прямого хода), а наиболее трудоемкие операции по вычислению самих матриц **L** и **U** вовсе не требуют знания вектора **b**. Таким образом, если решается серия СЛАУ с одной и той же матрицей **A**, но разными правыми частями **b** (что весьма характерно в обратных задачах интерпретации эксперимента), то очень выгодно единожды вычислить LU-разложение матрицы **A**, а уже затем быстрой подстановкой решить каждую из конкретных систем.

Разложением Холецкого симметричной (т. е. содержащей одинаковые элементы на местах, расположенных симметрично относительно главной диагонали) матрицы **A** является представление вида

$$\mathbf{A}=\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}^{\mathrm{T}}, \tag{57}$$

где L – это нижняя треугольная матрица (нули сверху от диагонали), а транспонированная матрица $\mathbf{L}^{\mathrm{T}}$ является верхней треугольной. Отметим, что, исходя из математического вида разложения Холецкого, матрицу **L** иногда называют *квадратным корнем матрицы* **A**.