矩阵运算



矩阵的加 (减) 法

如果 A 和 B 是 $m \times n$ 的矩阵,那么 A 和 B 的**和**定义为通过加上对应元素得到的 $m \times n$ 矩阵 A + B。即,

$$[A + B]_{ij} = [A]_{ij} + [B]_{ij}$$

- 矩阵 (-A) 称为 A 的**加法逆元** (additive inverse) , 定义为将 A 中的每个元素取反所得的矩阵。
- 也就是说,如果 $A=[a_{ij}]$,那么 $-A=[-a_{ij}]$ 。这使得矩阵减法可以用自然的方式定义。
- 对于形状相同的两个矩阵,A-B 的差定义为矩阵 A-B=A+(-B),因此

$$[A - B]_{ij} = [A]_{ij} - [B]_{ij}$$

矩阵加法的性质

对于 $m \times n$ 矩阵 A、B 和 C, 以下性质成立:

- **闭合性** (Closure property) : A + B 仍然是一个 $m \times n$ 的矩阵。
- 结合律 (Associative property) : (A+B)+C=A+(B+C).
- 交換律 (Commutative property) : A + B = B + A.
- 加法单位元 (Additive identity) : $m \times n$ 的零矩阵 0 具有 A+0=A 的性质。
- 加法逆元 (Additive inverse) : $m \times n$ 矩阵 -A 具有 A + (-A) = 0 的性质。

数乘 (Scalar Multiplication)

标量 α 与矩阵 A 的乘积,记作 αA ,定义为通过将 A 的每个元素乘以 α 所得到的矩阵。即

$$[\alpha A]_{ij} = \alpha [A]_{ij}$$
 对于每个 i 和 j .

数乘的性质

对于 $m \times n$ 矩阵 A 和 B 以及标量 α 和 β , 以下性质成立:

- **闭合性** (Closure property) : αA 仍然是一个 $m \times n$ 的矩阵。
- 结合律 (Associative property) : $(\alpha\beta)A = \alpha(\beta A)$.
- 分配律 1 (Distributive property) : lpha(A+B)=lpha A+lpha B。标量乘法对矩阵加法具有分配性。
- 分配律 2 (Distributive property) : $(\alpha + \beta)A = \alpha A + \beta A$ 。标量乘法对标量加法具有分配性。
- 单位元性质 (Identity property) : 1A = A。数字1在标量乘法中是单位元素。

转置 (Transpose)

 $A_{m \times n}$ 的**转置**定义为 $n \times m$ 矩阵 A^T ,通过将 A 中的行和列互换得到。更准确地说,如果 $A = [a_{ij}]$,那么 $[A^T]_{ij} = a_{ji}$ 。例如,

$$egin{pmatrix} 1 & 2 \ 3 & 4 \ 5 & 6 \end{pmatrix}^T = egin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \ 2 & 4 & 6 \end{pmatrix}.$$

显然,对于所有矩阵 A,都有 $(A^T)^T = A$ 。

共轭转置(Conjugate Transpose)

对于 $A=[a_{ij}]$,**共轭矩阵** (conjugate matrix) 定义为 $\overline{A}=[\overline{a_{ij}}]$,而 A 的**共轭转置** (conjugate transpose) 定义为 $\overline{A}^T=\overline{A^T}$ 。从现在开始, \overline{A}^T 将记作 A^* ,因此 $[A^*]_{ij}=\overline{a_{ji}}$ 。例如,

$$egin{pmatrix} \left(egin{matrix} 1 - 4i & i & 2 \ 3 & 2 + i & 0 \end{matrix}
ight)^* = \left(egin{matrix} 1 + 4i & 3 \ -i & 2 - i \ 2 & 0 \end{matrix}
ight).$$

- 对于所有矩阵, $(A^*)^*=A$, 并且当 A 仅包含实数元素时, $A^*=A^T$ 。
- 有时矩阵 A^* 被称为 A 的**伴随矩阵** (adjoint of A) 。

转置的性质 (Properties of the Transpose)

如果 A 和 B 是相同形状的两个矩阵,并且 α 是一个标量,那么以下各个陈述均为真:

- $(A+B)^T = A^T + B^T$ 并且 $(A+B)^* = A^* + B^*$.
- $(\alpha A)^T = \alpha A^T$ 并且 $(\alpha A)^* = \overline{\alpha} A^*$ 。

对称性 (Symmetries) (不重要)

设 $A = [a_{ij}]$ 为一个方阵。

- 当 $A=A^T$ 时,称 A 为**对称矩阵** (symmetric matrix) ,即 $a_{ij}=a_{ji}$ 。
- 当 $A=-A^T$ 时,称 A 为**反对称矩阵** (skew-symmetric matrix) ,即 $a_{ij}=-a_{ji}$ 。
- 当 $A=A^*$ 时,称 A 为**厄米矩阵** (hermitian matrix) ,即 $a_{ij}=\overline{a_{ji}}$ 。这是对称性的复数类比。
- 当 $A=-A^*$ 时,称 A 为**反厄米矩阵**(skew-hermitian matrix),即 $a_{ij}=-\overline{a_{ji}}$ 。这是反对称性的复数类比。

矩阵乘法 (Matrix Multiplication)

- 如果矩阵 A 和 B 满足 A 的列数等于 B 的行数(即 A 是 $m\times p$ 矩阵,B 是 $p\times n$ 矩阵),则称矩阵 A 和 B 在顺序 AB 上是 **可乘的**(conformable)。
- 对于可乘矩阵 $A_{m\times p}=[a_{ij}]$ 和 $B_{p\times n}=[b_{ij}]$,**矩阵积**(matrix product)AB 定义为一个 $m\times n$ 的矩阵,其第 (i,j) 个元素是A 的第 i 行与 B 的第 j 列的内积。即,

$$[AB]_{ij} = A_{i*}B_{*j} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \dots + a_{ip}b_{pj} = \sum_{k=1}^p a_{ik}b_{kj}.$$

• 如果 A 和 B 不可乘 (即 A 是 $m \times p$ 矩阵,而 B 是 $q \times n$ 矩阵,且 $p \neq q$) ,则不定义 AB 的积。

矩阵乘法不是交换律的(Matrix Multiplication Is Not Commutative)

矩阵乘法是一个**非交换运算**(noncommutative operation),即即使两个乘积都存在并且矩阵形状相同,也可能有 AB
eq BA。

(需要理解的,后面课件中经常出现的表达方式)在矩阵乘积中,有多种方法可以表示单个行和列。例如, $oldsymbol{AB}$ 的第 i 行为:

$$[AB]_{i*} = [A_{i*}B_{*1} \mid A_{i*}B_{*2} \mid \cdots \mid A_{i*}B_{*n}] = A_{i*}B$$

$$=(a_{i1}\,a_{i2}\,\cdots\,a_{ip})egin{pmatrix} B_{1*}\ B_{2*}\ dots\ B_{p*} \end{pmatrix}=a_{i1}B_{1*}+a_{i2}B_{2*}+\cdots+a_{ip}B_{p*}.$$

如下面所示,对于单个列也有类似的表示方式。

乘积的行与列(Rows and Columns of a Product)

假设 $A=[a_{ij}]$ 是 $m \times p$ 矩阵, $B=[b_{ij}]$ 是 $p \times n$ 矩阵。

- $[AB]_{i*} = A_{i*}B \ (AB \ \text{on} \ i \ \text{f}) = (A \ \text{on} \ i \ \text{f}) \times B$.
- $[AB]_{*i} = AB_{*i} \ (AB \ \text{on} \ j \ \text{Ø}) = A \times (B \ \text{on} \ j \ \text{Ø})$.
- $[AB]_{i*} = a_{i1}B_{1*} + a_{i2}B_{2*} + \dots + a_{ip}B_{p*} = \sum_{k=1}^{p} a_{ik}B_{k*}$
- $[AB]_{*j} = A_{*1}b_{1j} + A_{*2}b_{2j} + \cdots + A_{*p}b_{pj} = \sum_{k=1}^{p} A_{*k}b_{kj}$.

最后两个等式说明 AB 的行是 B 的行的组合, 而 AB 的列是 A 的列的组合。

线性函数 (Linear Functions)

假设 D 和 R 是具有加法运算和标量乘法运算的集合——即,标量与集合成员之间的乘法运算。一个将 D 中的点映射到 R 中的点的函数 f 称为**线性函数**,当且仅当 f 满足以下条件:

$$f(x+y) = f(x) + f(y)$$

和

$$f(\alpha x) = \alpha f(x)$$

对于 D 中的每个 x 和 y 以及所有标量 α 。这两个条件可以合并表示为:当且仅当

$$f(lpha x + y) = lpha f(x) + f(y)$$

对于所有标量 lpha 和 D 中的 x,y 时,f 是一个线性函数。

- 最简单的线性函数之一是 $f(x)=\alpha x$,其在 \mathbb{R}^2 中的图像是一条经过原点的直线。
- 然而, $f(x) = \alpha x + \beta$ 并不符合线性函数的定义——它是一个通过常数 β 偏移的线性函数。
- 线性函数的偏移被称为**仿射函数** (affine functions)。
- 在 \mathbb{R}^3 中,曲面 $f(x_1,x_2)=lpha_1x_1+lpha_2x_2$ 是一个经过原点的平面,并且容易验证 f 是一个线性函数。
- 当 $\beta \neq 0$ 时, $f(x_1,x_2) = \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \beta$ 不再是线性函数,而是一个仿射函数。
- 虽然我们无法通过肉眼观察到更高维度的情况, 但建议认为形式为

$$f(x_1,x_2,\cdots,x_n)=lpha_1x_1+lpha_2x_2+\cdots+lpha_nx_n \ f(heta_1x_1, heta_2x_2,\cdots, heta_nx_n)= heta_1lpha_1x_1+ heta_2lpha_2x_2+\cdots+ heta_nlpha_nx_n$$

的函数是一般的线性函数。

• 对于标量 α_j 和矩阵 X_j , 表达式

$$lpha_1 X_1 + lpha_2 X_2 + \dots + lpha_n X_n = \sum_{j=1}^n lpha_j X_j$$

被称为 X_i 的**线性组合** (linear combination) 。

单位矩阵 (Identity Matrix)

一个 $n \times n$ 矩阵,其主对角线上的元素为1,其余元素为0,定义为

$$I_n = egin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \ 0 & 1 & \cdots & 0 \ dots & dots & \ddots & dots \ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

称为**阶数为** n 的单位矩阵 (identity matrix of order n) 。对于每个 $m \times n$ 矩阵 A,

$$AI_n = A$$
 π $I_m A = A$.

当单位矩阵的大小在上下文中是显而易见时,通常会省略 I_n 上的下标。

通过将一个或两个因子划分为**子矩阵**(submatrices)来执行两个矩阵之间的乘法(即包含在另一个矩阵中的矩阵)可以是一种有用的技术。

分块矩阵乘法 (Block Matrix Multiplication)

假设矩阵 A 和 B 被划分为子矩阵 (通常称为块), 如下所示:

$$A = egin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1r} \ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2r} \ dots & dots & \ddots & dots \ A_{s1} & A_{s2} & \cdots & A_{sr} \end{pmatrix}, \quad B = egin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1t} \ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2t} \ dots & dots & \ddots & dots \ B_{r1} & B_{r2} & \cdots & B_{rt} \end{pmatrix}.$$

如果每一对 (A_{ik}, B_{kj}) 是可乘的,则称 A 和 B 为**可配对划分** (conformably partitioned) 。对于这样的矩阵,乘积 AB 是通过按普通矩阵 乘法中的方式组合各个块得到的。即,AB 中的 (i,j) 块为

$$A_{i1}B_{1j} + A_{i2}B_{2j} + \cdots + A_{ir}B_{rj}$$
.

块乘法在待乘矩阵中存在某些模式时尤其有用。考虑以下分块矩阵:

$$A = egin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 0 \ 3 & 4 & 0 & 1 \ 1 & 0 & 0 & 0 \ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = egin{pmatrix} C & I \ I & 0 \end{pmatrix}, \quad B = egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \ 0 & 1 & 0 & 0 \ 1 & 2 & 1 & 2 \ 3 & 4 & 3 & 4 \end{pmatrix} = egin{pmatrix} I & 0 \ C & C \end{pmatrix},$$

其中

$$I = egin{pmatrix} 1 & 0 \ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad
otag \quad C = egin{pmatrix} 1 & 2 \ 3 & 4 \end{pmatrix}.$$

使用块乘法,可以轻松计算出乘积 AB 为

$$AB = \begin{pmatrix} C & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ C & C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2C & C \\ I & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 1 & 2 \\ 6 & 8 & 3 & 4 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

矩阵的逆 (Matrix Inversion) -奇异矩阵、非奇异矩阵

- 如果 α 是一个非零标量,则对于每个数 β ,方程 $\alpha x = \beta$ 有唯一解 $x = \alpha^{-1}\beta$ 。
- 性质 $\alpha \alpha^{-1} = 1$ 和 $\alpha^{-1} \alpha = 1$ 是关键因素。
- 我们希望用与求解标量方程相同的方式求解矩阵方程。

对于给定的方阵 $A_{n \times n}$, 满足条件

$$AB = I_n$$
 和 $BA = I_n$

的矩阵 $B_{n\times n}$ 称为 A 的**逆矩阵** (inverse of A) ,记作 $B=A^{-1}$ 。并不是所有方阵都是可逆的——零矩阵是一个简单的例子,但还有许多非零矩阵是不可逆的。一个可逆矩阵称为**非奇异矩阵** (nonsingular) ,而没有逆的方阵称为**奇异矩阵** (singular matrix) 。

- 请注意,矩阵求逆仅对方阵定义。
- 尽管并非所有矩阵都是可逆的,但当逆存在时,它是唯一的。
- 由于矩阵求逆的定义类似于标量求逆, 因此我们有以下结论:
 - i. 如果 A 是一个非奇异矩阵,那么在矩阵方程 $A_{n \times n} X_{n \times p} = B_{n \times p}$ 中,矩阵 X 有唯一解,其解为

$$X = A^{-1}B.$$

ii. 一个包含 n 个未知数的 n 元线性方程组可以写成一个矩阵方程 $A_{n\times n}x_{n\times 1}=b_{n\times 1}$,因此当 A 是非奇异矩阵时,该系统有唯一解,解为

$$x = A^{-1}b.$$

逆矩阵的存在性 (Existence of an Inverse)

对于一个 $n \times n$ 矩阵 A, 以下陈述是等价的:

• A^{-1} 存在 (即 A 是非奇异的)。

- $\operatorname{rank}(A) = n_{\bullet}$
- A 经过高斯-约当消元可以化为单位矩阵 I。
- Ax = 0 推出 x = 0.

矩阵求逆的定义表明,为了计算 A^{-1} ,需要求解矩阵方程 AX = I 和 XA = I。

如果 A 和 X 是方阵,

$$AX = I \Longrightarrow XA = I$$
.

换句话说,如果 A 和 X 是方阵且 AX = I,那么 $X = A^{-1}$ 。

尽管我们通常尽量避免计算矩阵的逆,但在某些情况下必须求出逆矩阵。

计算逆矩阵 (Computing an Inverse)

高斯-约当消元法可用于通过如下化简来求 A 的逆:

$$[A \mid I] \xrightarrow{\text{Gauss-Jordan}} [I \mid A^{-1}].$$

这种化简唯一可能失败的情况是,在增广矩阵的左侧出现全零的行,这仅在 A 是奇异矩阵时发生。

Exp:

问题:如果可能,求
$$A=\begin{pmatrix}1&1&1\\1&2&2\\1&2&3\end{pmatrix}$$
的逆矩阵。

解答:

$$[A \mid I] = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & | & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 2 & | & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & | & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & | & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & | & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & | & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
$$\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & | & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & | & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & | & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

因此, 该矩阵是非奇异的, 且

$$A^{-1} = egin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \ -1 & 2 & -1 \ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

如果我们希望验证此结果,只需检查 $AA^{-1}=I$ 。

矩阵求逆的复杂度

和的逆矩阵与敏感性 (Inverses of Sums and Sensitivity)

- 逆序律使得求积的逆矩阵比较容易处理,但求和的逆矩阵则要困难得多。
- 首先, $(A+B)^{-1}$ 可能不存在,即使 A^{-1} 和 B^{-1} 都存在。((AB) $^{-1}=B^{-1}A^{-1}$)
- 而且,即使 $(A+B)^{-1}$ 存在,在少数例外情况下, $(A+B)^{-1} \neq A^{-1} + B^{-1}$ 。
- 对于 $(A+B)^{-1}$ 没有通用的有用公式,但对于一些特定的和可以得出一些结论。
- 最容易求逆的和之一是 $I+cd^T$,其中 c 和 d 是 $n\times 1$ 的非零列,满足 $1+d^Tc\neq 0$ 。
- 通过直接乘法可以验证:

$$(I+cd^T)^{-1} = I - rac{cd^T}{1+d^Tc}.$$

Sherman-Morrison 公式

• 如果 $A_{n\times n}$ 是非奇异的,并且 c 和 d 是 $n\times 1$ 的列,满足 $1+d^TA^{-1}c\neq 0$,那么矩阵 $A+cd^T$ 是非奇异的,且

$$(A+cd^T)^{-1}=A^{-1}-rac{A^{-1}cd^TA^{-1}}{1+d^TA^{-1}c}.$$

• Sherman–Morrison–Woodbury 公式是这一结果的推广。如果 C 和 D 是 n imes k 的矩阵,且 $(I+D^TA^{-1}C)^{-1}$ 存在,那么

$$(A + CD^{T})^{-1} = A^{-1} - A^{-1}C(I + D^{T}A^{-1}C)^{-1}D^{T}A^{-1}.$$

- Sherman-Morrison-Woodbury 公式可以通过直接乘法验证。
- **应用场景**:假设 A^{-1} 已知于之前的计算,但 A 中的某个元素需要更改或更新——我们需要将 α 加到 a_{ij} 上。
- Sherman–Morrison 公式展示了如何通过已知的 A^{-1} 信息更新以获得新的逆矩阵。

问题:已知矩阵 A 和 A^{-1} 如下。通过对 a_{21} 加上1来更新 A,然后使用 Sherman-Morrison 公式来更新 A^{-1} :

$$A=egin{pmatrix} 1 & 2 \ 1 & 3 \end{pmatrix}$$
 for $A^{-1}=egin{pmatrix} 3 & -2 \ -1 & 1 \end{pmatrix}$.

解答: 更新后的矩阵为

$$B=egin{pmatrix}1&2\2&3\end{pmatrix}=egin{pmatrix}1&2\1&3\end{pmatrix}+egin{pmatrix}0&0\1&0\end{pmatrix}=egin{pmatrix}1&2\1&3\end{pmatrix}+egin{pmatrix}0\1&3\end{pmatrix}+egin{pmatrix}0\1&0\end{pmatrix}=A+e_2e_1^T.$$

应用 Sherman-Morrison 公式得到更新的逆矩阵:

$$B^{-1} = A^{-1} - rac{A^{-1}e_2e_1^TA^{-1}}{1 + e_1^TA^{-1}e_2} = A^{-1} - rac{[A]_{*2}^{-1}[A]_{1*}^{-1}}{1 + [A^{-1}]_{12}}.$$

计算得到:

$$= \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} - \frac{\begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & -2 \end{pmatrix}}{1-2} = \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -3 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}.$$

因此,

$$B^{-1}=egin{pmatrix} -3 & 2 \ 2 & -1 \end{pmatrix}.$$

另一个常需要求逆的和是 I-A,但需要小心,因为 $(I-A)^{-1}$ 不一定总是存在。然而,当 A 中的元素足够小时,求逆是安全的。 实际使用是 $(A+B)^{-1}$

Neumann 级数 (Neumann Series)

如果 $\lim_{n\to\infty}A^n=0$,则 I-A 是非奇异的,并且

$$(I-A)^{-1} = I + A + A^2 + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} A^k.$$

这称为 Neumann 级数。当 A 的元素具有小量级时,它提供了 $(I-A)^{-1}$ 的近似。例如,一阶近似为 $(I-A)^{-1}pprox I+A$ 。

- 虽然一般情况下不存在 $(A+B)^{-1}$ 的有用公式,但 Neumann 级数允许我们在 B 的元素相对于 A 较小时,或反之,得出一些结论。
- 例如,如果 A^{-1} 存在,并且 B 中的元素足够小以保证 $\lim_{n o \infty} (A^{-1}B)^n = 0$,则可以应用 Neumann 级数。

$$(A+B)^{-1} = (A(I-[-A^{-1}B]))^{-1} = (I-[-A^{-1}B])^{-1}A^{-1}$$

$$= \left(\sum_{k=0}^{\infty} [-A^{-1}B]^k\right)A^{-1}$$

一阶近似为:

$$(A+B)^{-1} \approx A^{-1} - A^{-1}BA^{-1}.$$

- 因此,如果 A 被一个小矩阵 B 扰动,可能由于测量误差不精确或舍入误差导致,则 A^{-1} 的变化大约为 $A^{-1}BA^{-1}$ 。
- 换句话说,一个小的扰动(或误差)B 的影响会因与 A^{-1} 的乘法(在两侧)而被放大。

因此,如果 A^{-1} 有较大的元素,A 中的小扰动(或误差)可能会在得到的逆矩阵中产生较大的扰动(或误差)。

灵敏度与条件数 (Sensitivity and Conditioning)

- 当非奇异矩阵 A 的一个小的相对变化会在 A^{-1} 中引起大的相对变化时,称 A 是**病态的** (ill conditioned) 。病态程度通过一个**条** 件数 $\kappa = \|A\| \|A^{-1}\|$ 来衡量,其中 $\|*\|$ 是矩阵范数。
- 线性方程 Ax = b 的解的灵敏度取决于 A 是病态矩阵的程度。

如果非奇异系统 Ax=b 稍微扰动得到系统 $(A+B)\tilde{x}=b$,则 $x=A^{-1}b$ 且 $\tilde{x}=(A+B)^{-1}b$,因此(如果要应用一阶诺曼级数)

$$x - \tilde{x} = A^{-1}b - (A + B)^{-1}b \approx A^{-1}Bx.$$

结果有:

$$\|x- ilde{x}\|\lesssim \|A^{-1}\|\|B\|\|x\|,$$

$$rac{\|x- ilde{x}\|}{\|x\|}\lesssim \|A^{-1}\|\|B\|=\kappa\left(rac{\|B\|}{\|A\|}
ight).$$

notes::干嘛要这样来定义条件数。。。纯纯的设置专业壁垒

• **经验法则**:如果使用带部分选主元的高斯消元法求解非奇异系统 Ax=b,并使用 t 位数的浮点运算,那么在假设不存在其他误差来源的情况下,可以认为当条件数 κ 的数量级为 10^p 时,计算的解预计具有至少 t-p 位有效数字的精度。

初等矩阵与等价性 (Elementary Matrices and Equivalence)

- 数学中的一个常见主题是将复杂的对象分解为更基本的成分。
- 将大的多项式分解为较小的多项式的乘积。
- 本节旨在为矩阵代数中的类似思想奠定基础,通过考虑如何将一个一般矩阵分解为多个更基本的矩阵的乘积。
- 形如 $I-uv^T$ 的矩阵,其中 u 和 v 是 $n\times 1$ 的列,且满足 $v^Tu\neq 1$,称为**初等矩阵** (elementary matrices) 。
- 所有这样的矩阵都是非奇异的, 且

$$(I - uv^T)^{-1} = I - rac{uv^T}{v^Tu - 1}.$$

□ 证明等式

- 请注意,初等矩阵的逆也是初等矩阵。
- 我们主要关注与以下三种初等行(或列)操作相关的初等矩阵:
 - 类型Ⅰ:交换第 i 行(列)和第 j 行(列)。
 - 。 **类型 II**: 将第 i 行 (列) 乘以 $\alpha \neq 0$ 。
 - 。 **类型 Ⅲ**: 将第 i 行 (列) 的某个倍数加到第 j 行 (列) 。
- 类型 I、II 或 III 的初等矩阵是通过在单位矩阵上执行类型 I、II 或 III 的初等操作得到的。
- 例如:

$$E_1 = egin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \ 1 & 0 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad E_2 = egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & lpha & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad E_3 = egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & 1 & 0 \ lpha & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

- $E_1 = I uu^T$, 其中 $u = e_1 e_2$ 。
- $E_2 = I (1 lpha)e_2e_2^T oxdots E_3 = I + lpha e_3e_1^T$.

初等矩阵的性质 (Properties of Elementary Matrices)

- 当作为**左乘**运算符时,类型 I、II 或 III 的初等矩阵执行相应的行操作。
- 当作为**右乘**运算符时,类型 I、II 或 III 的初等矩阵执行相应的列操作。

用于将 $A=egin{pmatrix}1&2&4\\2&4&8\\3&6&13\end{pmatrix}$ 化简为 E_A 的行操作序列如下:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 2 & 4 & 8 \\ 3 & 6 & 13 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_2 - 2R_1} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \\ 3 & 6 & 13 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_3 - 3R_1} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{$\not$$$} \cancel{\cancel{\times}} \cancel{\cancel{\times}} \cancel{\cancel{\times}} \cancel{\cancel{\times}} \cancel{\cancel{\times}} \cancel{\cancel{\times}} \cancel{\cancel{\times}} \cancel{\cancel{\times}} \cancel$$

这种化简可以通过与相应的初等矩阵的左乘序列来实现,如下所示:

$$egin{pmatrix} 1 & -4 & 0 \ 0 & 1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & 0 & 1 \ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & -3 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \ -2 & 1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} A = E_A.$$

定理: A 是非奇异矩阵当且仅当 A 是类型 I、II 或 III 的初等矩阵的乘积。

证明:如果 A 是非奇异的,那么通过高斯-约当方法可以通过行操作将 A 化为单位矩阵 I。设 G_1,G_2,\ldots,G_k 是对应于所使用的初等行操作的初等矩阵序列,则

$$G_k \cdots G_2 G_1 A = I$$

或等价地,

$$A = G_1^{-1} G_2^{-1} \cdots G_k^{-1}.$$

由于初等矩阵的逆也是同类型的初等矩阵,这证明了 A 是类型 I、II 或 III 的初等矩阵的乘积。反之,如果 $A=E_1E_2\cdots E_k$ 是初等矩阵的乘积,那么 A 必须是非奇异的,因为 E_i 是非奇异矩阵,而非奇异矩阵的乘积也是非奇异的。

等价性 (Equivalence)

• 当 B 可以通过对 A 进行初等行和列操作得到时,我们记作 $A\sim B$,并称 A 和 B 是**等价矩阵** (equivalent matrices)。由于初等行和列操作分别对应于左乘和右乘初等矩阵,因此我们可以说:

$$A \sim B \iff PAQ = B$$

对于非奇异矩阵 P 和 Q。

• 当矩阵 B 可以通过对矩阵 A 执行一系列的初等**行**操作得到时,我们记作 $A \sim^{\mathrm{row}} B$,并称 A 和 B 是**行等价**的(row equivalent)。换句话说:

$$A \sim^{\text{row}} B \Longleftrightarrow PA = B$$

其中 P 是非奇异矩阵。

• 当矩阵 B 可以通过对矩阵 A 执行一系列的初等**列**操作得到时,我们记作 $A\sim^{\mathrm{col}}B$,并称 A 和 B 是**列等价**的(column equivalent)。换句话说:

$$A \sim^{\operatorname{col}} B \Longleftrightarrow AQ = B$$

其中Q是非奇异矩阵。

- 如果可以通过初等行和列操作从 A 到达 B, 显然也可以从 B 回到 A, 因为初等操作是可逆的。
- 因此,讨论矩阵之间的等价关系时无需考虑顺序: $A \sim B \Longleftrightarrow B \sim A$ 。
- 每种类型的等价关系都是传递的, 即:

$$A \sim B$$
 $\exists A \sim C \Longrightarrow A \sim C$.

秩标准形 (Rank Normal Form)

如果 A 是一个 $m \times n$ 的矩阵,且 $\operatorname{rank}(A) = r$,则

$$A \sim N_r = egin{pmatrix} I_r & 0 \ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

 N_r 称为 A 的**秩标准形**,它是通过行和列操作对 A 进行完全化简的最终结果。

- 给定矩阵 A 和 B, 如何判断 $A \sim B$ 是否成立?
 - \circ 我们可以通过尝试将 A 通过初等操作化简为 B 来进行试验。
 - 。 $A \sim B$ 当且仅当 $\operatorname{rank}(A) = \operatorname{rank}(B)$ 。
 - 推论: 非奇异矩阵的乘法不会改变秩。因为非奇异矩阵可以由初等矩阵组成。
- 转置不改变秩——即,对于所有 $m \times n$ 的矩阵,有

$$\operatorname{rank}(A) = \operatorname{rank}(A^T) \quad ext{fl} \quad \operatorname{rank}(A) = \operatorname{rank}(A^*).$$

LU 分解 (LU Factorization)

- 现在,我们回到使用高斯消元法和回代法求解非奇异线性方程组。这一次,目标是在矩阵的上下文中描述和理解该过程。
- 如果 Ax = b 是一个非奇异系统,那么高斯消元法的目标是通过初等行操作将 A 化为上三角矩阵。
- 如果没有遇到零主元,则不需要行交换。行仅交换破坏LU分解
- 这种化简可以仅使用类型 Ⅲ 的初等行操作来实现。例如,考虑将矩阵化简:

$$A = egin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \ 4 & 7 & 7 \ 6 & 18 & 22 \end{pmatrix}. \ egin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \ 4 & 7 & 7 \ 6 & 18 & 22 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_2 - 2R_1} egin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \ 0 & 3 & 3 \ 0 & 12 & 16 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_3 - 3R_1} egin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \ 0 & 3 & 3 \ 0 & 12 & 16 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_3 - 4R_2} egin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \ 0 & 3 & 3 \ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} = U.$$

我们在上一节中了解到,这些类型 \square 操作可以通过与相应初等矩阵 G_i 的左乘来实现。这些 G_i 的乘积为:

$$\mathbf{G}_3\mathbf{G}_2\mathbf{G}_1 = egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & 1 & 0 \ 0 & -4 & 1 \end{pmatrix} egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \ 0 & 1 & 0 \ -3 & 0 & 1 \end{pmatrix} egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \ -2 & 1 & 0 \ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \ -2 & 1 & 0 \ 5 & -4 & 1 \end{pmatrix}$$

换句话说, $G_3G_2G_1A=U$,因此 $A=G_1^{-1}G_2^{-1}G_3^{-1}U=LU$,其中 L 是下三角矩阵:

$$L=G_1^{-1}G_2^{-1}G_3^{-1}=egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \ 2 & 1 & 0 \ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}.$$

因此,A=LU 是一个下三角矩阵 L 与一个上三角矩阵 U 的乘积。这自然被称为 A 的 \mathbf{LU} 分解。

观察到U 是高斯消去法的最终结果,且其对角线上的位置为主元,同时 L 的对角线元素为 1。

• L 具有显著的性质:在其对角线下方,每个元素 l_{ij} 恰好是消去法中用于消去 (i,j) 位置的倍数。(实际上不重要,不要死记这个性质。)

LU分解

如果 A 是一个 $n\times n$ 矩阵,且在应用 Type III 操作的高斯消去法时未遇到零主元,那么 A 可以被分解为乘积 A=LU,其中满足以下条件:

- L 是下三角矩阵, U 是上三角矩阵。
- $l_{ii}=1$ 且 $u_{ii}
 eq 0$ 对于每个 $i=1,2,\ldots,n$ 。
- 在 L 的对角线以下,元素 l_{ij} 是第 j 行的倍数,该倍数从第 i 行中减去,以在高斯消去法中消去 (i,j) 位置的元素。
- U 是高斯消去法应用于 A 的最终结果。
- A 的分解 A=LU 被称为 **LU 分解**,矩阵 L 和 U 被称为 A 的 LU 因子。

一旦为一个非奇异矩阵 $A_{n imes n}$ 获得了 LU 因子,就可以相对容易地解线性方程组 Ax = b。通过将 Ax = b 重写为

$$L(Ux) = b$$

并设 y=Ux,我们可以看到 Ax=b 等价于两个三角方程组

$$Ly = b$$
 和 $Ux = y$.

首先,通过**前向替换**解下三角系统 Ly=b 得到 y。也就是说,如果

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \ell_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \ell_{31} & \ell_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \ell_{n1} & \ell_{n2} & \ell_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

则

$$y_1 = b_1, \quad y_2 = b_2 - \ell_{21} y_1, \quad y_3 = b_3 - \ell_{31} y_1 - \ell_{32} y_2$$

前向替换算法可以更简洁地表示为

$$y_1=b_1$$
 和 $y_i=b_i-\sum_{k=1}^{i-1}\ell_{ik}y_k$ 对于 $i=2,3,\ldots,n.$

在求得 y 之后,利用标准的回代方法从 $x_n=y_n/u_{nn}$ 开始解上三角系统 Ux=y,并设置

$$x_i = rac{1}{u_{ii}} \left(y_i - \sum_{k=i+1}^n u_{ik} x_k
ight) \quad
ot if \quad i = n-1, n-2, \dots, 1.$$

问题: 使用 A 的 LU 分解来解方程 Ax = b, 其中

$$A = egin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \ 4 & 7 & 7 \ 6 & 18 & 22 \end{pmatrix}, \quad b = egin{pmatrix} 12 \ 24 \ 12 \end{pmatrix}.$$

$$L = egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \ 2 & 1 & 0 \ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}, \quad U = egin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \ 0 & 3 & 3 \ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

策略是设 Ux = y 并通过解两个三角方程组来求解 Ax = L(Ux) = b:

$$Ly = b$$
 π $Ux = y$.

首先,通过**前向替换**解下三角系统 Ly=b:

$$egin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \ 2 & 1 & 0 \ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} egin{pmatrix} y_1 \ y_2 \ y_3 \end{pmatrix} = egin{pmatrix} 12 \ 24 \ 12 \end{pmatrix} \Rightarrow egin{pmatrix} y_1 = 12, \ y_2 = 24 - 2y_1 = 0, \ y_3 = 12 - 3y_1 - 4y_2 = -24. \end{pmatrix}$$

然后,使用回代法解上三角系统 Ux=y:

$$egin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \ 0 & 3 & 3 \ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} egin{pmatrix} x_1 \ x_2 \ x_3 \end{pmatrix} = egin{pmatrix} 12 \ 0 \ -24 \end{pmatrix} \Rightarrow egin{pmatrix} x_1 = rac{(12 - 2x_2 - 2x_3)}{2} = 6, \ x_2 = rac{(0 - 3x_3)}{3} = 6, \ x_3 = -24/4 = -6. \end{pmatrix}$$

• 如果只需要解一个方程组 Ax=b,那么将增广矩阵 [A|b] 化为行阶梯形式的方法与 LU 分解方法之间没有显著差异。但是,假设之后有必要解其他方程组 Ax=b,其系数矩阵相同,但右侧不同的情形,这种情况在应用工作中经常出现。如果在原方程组求解时已经计算并保存了 A 的 LU 因子,则不需要重新计算这些因子,因此后续方程组 Ax=b 的求解相对成本较低。

总结

- 要使用 LU 分解 A=LU 来解非奇异方程组 Ax=b,首先使用前向替换算法解 Ly=b 得到 y,然后使用回代法解 Ux=y 得到 x。
- 该方法的优势在于,一旦 A 的 LU 因子计算完毕,任何其他线性方程组 Ax=b 都可以仅使用 n^2 次乘法/除法和 n^2-n 次加法/减法来解出。

并非所有非奇异矩阵都拥有 LU 分解。

显然不存在非零的 u_{11} 值使得成立。

$$\begin{pmatrix}0&1\\1&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\l_{21}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_{11}&u_{12}\\0&u_{22}\end{pmatrix}$$

问题在于(1,1)位置的零主元。

一个非奇异矩阵 A 存在 LU 分解当且仅当在使用 Type III 操作进行行化简至上三角形形式的过程中,不会出现零主元。

还有另一种有趣的方式来描述 LU 因子的存在性。此描述是基于矩阵 A 的主子矩阵的,定义为从矩阵 A 的左上角提取的那些子矩阵。即

$$A_1=(a_{11}), \quad A_2=egin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \ldots, A_k=egin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1k} \ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2k} \ dots & dots & \ddots & dots \ a_{k1} & a_{k2} & \ldots & a_{kk} \end{pmatrix}, \ldots$$

LU 因子的存在性

以下每个陈述都等价于一个非奇异矩阵 $A_{n\times n}$ 拥有 LU 分解的条件:

- 在使用 Type III 操作进行行化简至上三角形形式的过程中不会出现零主元。(充分不必要条件,如果是用TYPE III 操作,可以确保没有问题)
- 每个主子矩阵 A_k 是非奇异的。

到目前为止,我们避免了处理行交换,因为如果需要通过行交换来去除零主元,那么就不可能进行 LU 分解。 然而,我们知道在实际计算中,部分主元法的行交换是必要的.因此,即使没有出现零主元,通常我们也需要以某种方式考虑行交换。 当允许行交换时,只要原始矩阵 A 是非奇异的,就可以始终避免零主元的出现。

因此,我们可以得出结论:对于每一个非奇异矩阵 A,都存在一个置换矩阵 P(一系列基本行交换矩阵的乘积),使得 PA 具有 LU 分解。

这意味着我们可以像在没有行交换的情况下那样进行操作,逐步覆盖原始包含 A 的数组,每个乘数替换它所消去的位置。每当发生行交换时,相应的乘数也会被正确地交换。

置换矩阵 P **只是所使用的各种交换的累计记录**,矩阵 P 中的信息可以通过一个简单的技术来处理,下面的例子中展示了这种方法。

问题:对矩阵进行部分选主元操作

$$A = egin{pmatrix} 1 & 2 & -3 & 4 \ 4 & 8 & 12 & -8 \ 2 & 3 & 2 & 1 \ -3 & -1 & 1 & -4 \end{pmatrix}$$

并确定 LU 分解 PA=LU ,其中 P 是相应的置换矩阵。

$$[A|p] = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 & 4 & | & 1 \\ 4 & 8 & 12 & -8 & | & 2 \\ 2 & 3 & 2 & 1 & | & 3 \\ -3 & -1 & 1 & -4 & | & 4 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 4 & 8 & 12 & -8 & | & 2 \\ 1 & 2 & -3 & 4 & | & 1 \\ 2 & 3 & 2 & 1 & | & 3 \\ -3 & -1 & 1 & -4 & | & 4 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 4 & 8 & 12 & -8 & | & 2 \\ 1/4 & 0 & -6 & 6 & | & 1 \\ 1/2 & -1 & -4 & 5 & | & 3 \\ -3/4 & 5 & 10 & -10 & | & 4 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 4 & 8 & 12 & -8 & | & 2 \\ -3/4 & 5 & 10 & -10 & | & 4 \\ 1/2 & -1 & -4 & 5 & | & 3 \\ 1/4 & 0 & -6 & 6 & | & 1 \\ 1/4 & 0 & -6 & 6 & | & 1 \\ 1/2 & -1/5 & -5 & 3 & | & 3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 4 & 8 & 12 & -8 & | & 2 \\ -3/4 & 5 & 10 & -10 & | & 4 \\ 1/4 & 0 & -6 & 6 & | & 1 \\ 1/2 & -1/5 & 1/3 & 1 & | & 3 \end{pmatrix}.$$

因此,

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -3/4 & 1 & 0 & 0 \\ 1/4 & 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & -1/5 & 1/3 & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 4 & 8 & 12 & -8 \\ 0 & 5 & 10 & -10 \\ 0 & 0 & -6 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

带行交换的 LU 分解

- 对于每一个非奇异矩阵 A,存在一个置换矩阵 P,使得 PA 拥有 LU 分解 PA=LU。
- 为了计算 L、U 和 P,逐步覆盖最初包含 A 的数组。将每个被消去的元素替换为执行消去操作时使用的乘数。当执行部分选主元的行交换时,数组中的乘数将自动按正确的方式交换。
- 尽管很少需要完整的置换矩阵 P,但它可以通过根据所使用的各种交换对单位矩阵 I 的行进行置换来构造。这些交换可以累积在一个"置换计数列" p 中,该列最初按自然顺序排列($1,2,\ldots,n$)。
- 为了使用带部分选主元的 LU 分解求解非奇异线性方程组 Ax=b,首先根据交换顺序调整 b 中的分量,即构造 \bar{b} ,并使其对应于 p 的顺序——然后通过前向替代法求解 $Ly=\bar{b}$ 。

很容易将部分选主元的优势与 LU 分解结合,以便求解非奇异系统 Ax=b。

由于置换矩阵是非奇异的,系统 Ax = b 等价于

$$PAx = Pb$$
.

因此,我们可以使用之前讨论的 LU 解法技术来求解该置换系统。

也就是说,如果我们已经完成了因式分解 PA=LU,那么可以通过前向替代求解 Ly=Pb 得到 y,然后通过回代求解 Ux=y。

问题: 使用通过部分选主元获得的 LU 分解来求解系统 Ax=b, 其中

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 & 4 \\ 4 & 8 & 12 & -8 \\ 2 & 3 & 1 & 2 \\ -3 & -1 & -1 & 4 \end{pmatrix} \quad \text{fit} \quad b = \begin{pmatrix} 3 \\ 60 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix}.$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -3/4 & 1 & 0 & 0 \\ 1/4 & 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & -1/5 & 1/3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 60 \\ 5 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 60 \\ 50 \\ -12 \\ -15 \end{pmatrix}.$$

然后通过回代求解 Ux = y:

$$\begin{pmatrix} 4 & 8 & 12 & -8 \\ 0 & 5 & 10 & -10 \\ 0 & 0 & -6 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 60 \\ 50 \\ -12 \\ -15 \end{pmatrix} \Rightarrow x = \begin{pmatrix} 12 \\ 6 \\ -13 \\ -15 \end{pmatrix}.$$

LDU 分解

- 在 LU 分解中存在一些不对称性,因为下三角矩阵的对角线上是 1, 而上三角矩阵的对角线上不是单位对角。
- 这可以通过将对角线元素从上三角矩阵中提取出来来解决,如下所示:

$$egin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \ dots & dots & \ddots & dots \ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} = egin{pmatrix} u_{11} & 0 & \cdots & 0 \ 0 & u_{22} & \cdots & 0 \ dots & dots & \ddots & dots \ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} egin{pmatrix} 1 & u_{12}/u_{11} & \cdots & u_{1n}/u_{11} \ 0 & 1 & \cdots & u_{2n}/u_{22} \ dots & dots & \ddots & dots \ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

• 设 $D=\mathrm{diag}(u_{11},u_{22},\cdots,u_{nn})$ (主元的对角矩阵),并重新定义 U 为上面所示的最右边的上三角矩阵,这样可以将任何 LU 分解写为:

$$A = LDU$$
.

- 其中, L 和 U 分别是下三角和上三角矩阵, 且它们的对角线元素均为 1。
- 这称为矩阵 A 的 LDU 分解。
- 此分解是唯一的,当 A 是对称矩阵时,LDU 分解可以写为 $A=LDL^T$ 。