计算方法及MATLAB实现

郑勋烨　　编著

主审：　高世臣　褚宝增　王祖朝　王翠香

副审：　李少琪　李明霞　赵琳琳　赵俊芳

国防工业出版社

§5.3 矩阵三角分解法

(Matrix Factorization)

5.3.1 矩阵 Doolittle 分解和 Crout 分解

此前我们已经知道， Gauss 消去法用矩阵分解的语言描述，就是对系数方阵 A 作三角分解，将 A 分解为单位下三角矩阵 L 与上三角矩阵 U 的乘积形式： $A = LU$. 这种三角分解方法我们称为 *矩阵的 Doolittle 分解法*. 回顾我们有关三阶矩阵的 Doolittle 分解的命题：

【命题 1A. 三阶矩阵的 Doolittle 分解：】

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix}$$

$$
= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \dfrac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ \dfrac{a_{31}}{a_{11}} & \dfrac{a_{32} - l_{31}a_{12}}{u_{22}} & 1 \end{pmatrix}
$$

$$
\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} - \dfrac{a_{21}}{a_{11}}a_{12} & a_{23} - \dfrac{a_{21}}{a_{11}}a_{13} \\ 0 & 0 & a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23} \end{pmatrix}
$$

【**引理** 1A. **矩阵** Doolittle **分解的求解方程组意义**】作系数矩阵 A 的 Doolittle 分解 $A = LU$ 后，方程组 $Ax = b$ 等价于 $LUx = b$, 若令 $y = Ux$, 则等价于依次连续求解两个三角形方程组： $Ly = b$ 和 $Ux = y$.

1. 先求解单位下三角形方程组 $Ly=b$ 获得过渡向量 y：

$Ly=b$：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

2. 再求解上三角形方程组 $Ux=y$ 获得解向量 x： $Ux=y$:

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

【例 1. 利用矩阵 Doolittle 分解法求解方程组】利用矩阵 Doolittle 分解法求解非齐次线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + 2x_3 & = 5 \\ x_2 + x_4 & = 3 \\ x_1 + 2x_2 + 4x_3 + 3x_4 & = 17 \\ x_2 + 3x_4 & = 7 \end{cases}$$

【解】

方程组的系数矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 3 \\ 0 & 1 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

增广矩阵

$$(A|b) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 4 & 3 & 17 \\ 0 & 1 & 0 & 3 & 7 \end{pmatrix}$$

作系数矩阵的 Doolittle 分解

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 3 \\ 0 & 1 & 0 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

连续求解方程组 $Ly = b$ 和 $Ux = y$, 即

$$Ly = b: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 17 \\ 7 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 6 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$Ux = y : \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 6 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

【定理 1B. **矩阵** Crout **分解法** (Crout Method) **】**

n 阶系数方阵 $A = LU$, 即 $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$

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

其中

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

为下三角方阵;

$$U = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

为单位上三角方阵.

【命题 1B. 三阶矩阵的 Crout 分解：】

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} \\ 0 & 1 & u_{23} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$
= \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} - \dfrac{a_{12}}{a_{11}} a_{21} & 0 \\ a_{31} & a_{32} - \dfrac{a_{12}}{a_{11}} a_{31} & a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23} \end{pmatrix}
$$

$$
\times \begin{pmatrix} 1 & \dfrac{a_{12}}{a_{11}} & \dfrac{a_{13}}{a_{11}} \\ 0 & 1 & \dfrac{a_{23} - a_{21}u_{13}}{l_{22}} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
$$

【引理 1B. **矩阵** Crout **分解的求解方程组意义】**作系数矩阵 A 的 Crout 分解 $A = LU$ 后，方程组等价于连续求解两个三角形方程组： $Ly = b$ 和 $Ux = y$.

1. 先求解下三角形方程组 $Ly = b$ 获得过渡向量 y：

$$Ly = b: \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

2. 再求解单位上三角形方程组 $Ux = y$ 获得解向量 x：

$$Ux = y: \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

5.3.2 对称正定矩阵的 Cholesky 平方根分解法 (Cholesky Method)

在工程应用中，比如用 有限元方法 解决结构力学的问题时，经常归结为求解线性方程组问题，而方程组的系数矩阵大多具有 对称正定 性质. Cholesky 平方根分解法和 Cholesky 改进平方根分解法就是求解 对称正定线性方程组 的通用算法. 我们先来回顾 对称正定矩阵 的定义与基本特性.

【 定义 1. 对称正定矩阵 】 (Positive Definite Matrix)

一个 n 阶矩阵 $A \in R^{n\times n}$ 如果是对称矩阵，即 $A^T = A$, 且对于任意非零 n 维列向量 $x \neq 0$，总有二次型 $x^T Ax > 0$，则称此对称矩阵为对称正定矩阵，或简称为 正定矩阵.

容易验证，如下定义皆可作为 n 阶对称方阵 $A \in R^{n\times n}$ 成为正定矩阵的等价定义：

(1)A 的各阶顺序主子式 (The Leading Principal Subdeterminant)（即顺序主子阵的行列式）大于零：

$|A_k| > 0$；即

$$| A_1 |= a_{11} > 0, \quad | A_2 |= \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} > 0,$$

$$| A_3 |= \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} > 0, \cdots ,$$

$$| A_n |= Det(A) = |A| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} > 0.$$

(2) A 的所有特征值 (Eigenvalues) 大于零（首先，正定矩阵作为实对称阵，其特征值是实数）： $\lambda_k > 0$；

(3) A "合同于" 单位矩阵，或说 A 可以分解为某个非奇异矩阵 C 与其自身转置矩阵的乘积形式： $A = C^T C$.

(4) A 对应的二次型 x^TAx 的 正惯性指数(即二次型的标准形中正平方项的个数) 等于其阶数： $p=n$. 即二次型 x^TAx 的标准形（经过非奇异线性变换后获得）可写为

$$x^TAx = y^Ty = y_1^2 + y_2^2 + \cdots + y_n^2$$

除此之外，　正定矩阵A 还具有性质：

(1)A 的各阶顺序主子阵 (The Leading Principal Submatrix) 也是正定矩阵：　$\lambda(A_k) > 0$;

(2)A 的逆阵 (The Inverse Matrix) 也是正定矩阵：$\lambda(A^{-1}) > 0$.

【 释例 1. 3 阶对称正定矩阵 】

验证如下 3 阶矩阵是对称正定矩阵:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

【 证明 】

显然，此 3 阶矩阵是对称矩阵： $a_{ij} = a_{ji}.$

计算矩阵的各阶顺序主子式 (The Leading Principal Subdeterminant) 可知它们都大于零： $|A_k| > 0$ ；即

$$| A_1 | = 2 > 0, \quad | A_2 | = \begin{vmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} = 4 - 1 = 3 > 0$$

$$|A_3| = \begin{vmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{vmatrix} =$$

$$2\begin{vmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{vmatrix} - (-1)\begin{vmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 2 \end{vmatrix} = 6 - 2 = 4 > 0.$$

故由正定矩阵的等价定义可知此 3 阶矩阵是对称正定矩阵.

注记.　有限元方法　*有限元方法* 是由我国数学家 冯康 先生（ 1920-1993 ）首创的计算方法，是冯康在“大跃进”时期全国修筑水坝的热潮中，为解决超大规模数据计算问题，独立于西方创造了一套求解偏微分方程问题的系统化、现代化的计算方法，当时命名为“基于变分原理的差分方法”，现在国际通称“有限元方法”，是当前科学与工程计算最常用的方法之一。冯康 曾任中国科学院计算中心主任，是我国杰出的计算数学大师，中国当代计算数学和计算技术的奠基人。

【 **定理** 2. **对称正定矩阵的** Cholesky **平方根分解法** (Cholesky Method for Positive Definite Matrix) 】对称正定矩阵 A 的顺序主子式大于零，可分解为 $A = LL^T$ 形式．其中 L 为非奇异下三角方阵；当限定 L 的对角元素大于零时，这种分解是唯一的.

$$
\begin{pmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}
\end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{pmatrix}
l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\
l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\
0 & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & l_{nn}
\end{pmatrix}.
$$

其中

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

为下三角方阵;

$$L^T = \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ 0 & l_{22} & \cdots & l_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

为上三角方阵.

【证明】对于一般的对称矩阵，我们有 $A = LU$, 即

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

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

对上三角阵 U 再作分解 $U = DU_0$ (主对角 $\times$ 单位上三角)

$$\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & u_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\times \begin{pmatrix} 1 & u_{12}/u_{11} & \cdots & u_{1n}/u_{11} \\ 0 & 1 & \cdots & u_{2n}/u_{22} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

于是 $A = LU = LDU_0$. 由于 A 为对称矩阵，而对角矩阵的转置是其自身： $D^T = D$, 故

$$A = A^T = (LDU_0)^T = U_0^T D^T L^T = U_0^T D L^T$$

由分解的唯一性有 $U_0^T = L$ ，从而 $A = LDL^T$.

当 A 为对称且正定的矩阵，其顺序主子式大于零，
$d_1 = D_1 > 0, d_i = D_i/D_{i-1} > 0$, 即对角阵 D 的主对角元素全大于零，因此可作平方根分解 $D = D^{1/2}D^{1/2}$:

$$
\begin{pmatrix}
d_1 & 0 & \cdots & 0 \\
0 & d_2 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & d_n
\end{pmatrix}
=
$$

$$
\begin{pmatrix}
\sqrt{d_1} & 0 & \cdots & 0 \\
0 & \sqrt{d_2} & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & \sqrt{d_n}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\sqrt{d_1} & 0 & \cdots & 0 \\
0 & \sqrt{d_2} & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & \sqrt{d_n}
\end{pmatrix}
$$

故 $A = LDL^T = LD^{1/2}D^{1/2}L^T = LD^{1/2}(LD^{1/2})^T = L_1L_1^T$.
此即对称正定矩阵的 Cholesky 平方根分解.

证毕

【命题 2B. 三阶对称正定矩阵的 Cholesky 平方根分解】

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{pmatrix}$$

$$
= \begin{pmatrix} l_{11}^2 & l_{11}l_{21} & l_{11}l_{31} \\ l_{11}l_{21} & l_{21}^2 + l_{22}^2 & l_{21}l_{31} + l_{22}l_{32} \\ l_{11}l_{31} & l_{21}l_{31} + l_{22}l_{32} & l_{31}^2 + l_{32}^2 + l_{33}^2 \end{pmatrix}
$$

从而

$$L=\begin{pmatrix} \sqrt{a_{11}} & 0 & 0 \\ \dfrac{a_{12}}{\sqrt{a_{11}}} & \dfrac{\sqrt{a_{11}a_{22}-a_{12}^2}}{\sqrt{a_{11}}} & 0 \\ \dfrac{a_{13}}{\sqrt{a_{11}}} & \dfrac{a_{23}-l_{21}l_{31}}{l_{22}} & \sqrt{a_{33}-l_{31}^2-l_{32}^2} \end{pmatrix}$$

【**例** 2.Cholesky **平方根分解法**】用 Cholesky 平方根分解法求解对称正定阵作为系数矩阵的非齐次线性方程组

$$\begin{cases} 3x_1 + 2x_2 + 3x_3 & = 5 \\ 2x_1 + 2x_2 & = 3 \\ 3x_1 + 12x_3 & = 7 \end{cases}$$

【 解 】 作系数矩阵的 Cholesky 分解

$$A=\begin{pmatrix} 3 & 2 & 3 \\ 2 & 2 & 0 \\ 3 & 0 & 12 \end{pmatrix}=$$

$$\begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \frac{2}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 \\ \sqrt{3} & -\sqrt{6} & \sqrt{3} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sqrt{3} & \frac{2}{\sqrt{3}} & \sqrt{3} \\ & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\sqrt{6} \\ & & \sqrt{3} \end{pmatrix}$$

连续求解方程组 $Ly=b$ 和 $L^Tx=y$, 即

$$Ly=b:\begin{pmatrix}\sqrt{3} & 0 & 0\\ \frac{2}{\sqrt{3}} & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0\\ \sqrt{3} & -\sqrt{6} & \sqrt{3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}y_1\\ y_2\\ y_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}5\\ 3\\ 7\end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow\begin{pmatrix}y_1\\ y_2\\ y_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{5}{\sqrt{3}}\\ -\frac{1}{\sqrt{6}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$$

$$L^T x = y : \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \frac{2}{\sqrt{3}} & \sqrt{3} \\ & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & -\sqrt{6} \\ & & \sqrt{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{5}{\sqrt{3}} \\ -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

由于 Cholesky 平方根分解法的分解矩阵元素带有平方根形式，处理起来颇为棘手. 因而计算实践中我们对于对称正定矩阵往往是作 Cholesky 改进平方根分解，将对称正定矩阵 A 分解为 $A = LDL^T$ 形式. 其中 L 为单位下三角方阵， D 为对角阵. 有时我们将这种 Cholesky 改进平方根分解直接称为矩阵的 Cholesky 分解法. 而将 Cholesky 平方根分解法称为矩阵的平方根分解法.

【定理 3. 对称正定矩阵的 Cholesky 改进平方根分解法 (Cholesky Method for PDM)】 对称正定矩阵 A 的顺序主子式大于零，则可唯一分解为 $A = LDL^T$ 形式．其中 L 为单位下三角方阵,D 为对角阵．即

$$
\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \times
$$

$$
\begin{pmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ 0 & 1 & \cdots & l_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.
$$

其中

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

为单位下三角方阵;

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_n \end{pmatrix}$$

为对角方阵.

【 算法 3. 对称正定矩阵的 Cholesky 改进平方根分解法的求解方程组意义 】作对称正定矩阵的 Cholesky 改进平方根分解 $A = LDL^T$ 后，方程组等价于连续求解两个三角形方程组： $Ly = b$ 和 $DL^T x = y$.

I. 正向追的过程：由 $Ly = b$ 求过渡未知元 y_i:

$$\begin{cases} y_1 = b_1 \\ y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \end{cases}, \quad i = 2, 3, \cdots, n$$

II. 倒向赶的过程：由 $DL^Tx=y$ 求初始未知元 x_i:

$$\begin{cases} x_n = y_n/d_n \\ x_i = \dfrac{y_i}{d_i} - \displaystyle\sum_{k=i+1}^{n} l_{ki}x_k \end{cases}, \quad i=n-1,n-2,\cdots,2,1$$

【 命题 3. 三阶对称正定矩阵的 Cholesky 改进平方根分解 】

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & l_{21} & l_{31} \\ 0 & 1 & l_{32} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$
= \begin{pmatrix} d_1 & d_1 l_{21} & d_1 l_{31} \\ d_1 l_{21} & l_{21}^2 d_1 + d_2 & l_{21} d_1 l_{31} + d_2 l_{32} \\ d_1 l_{31} & l_{21} d_1 l_{31} + d_2 l_{32} & l_{31}^2 d_1 + l_{32}^2 d_2 + d_3 \end{pmatrix}
$$

从而 $L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{a_{12}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ \frac{a_{13}}{a_{11}} & \frac{a_{23} - l_{21}d_1l_{31}}{d_2} & 1 \end{pmatrix}$,

$$D = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{12}^2}{a_{11}} & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} - l_{31}^2 d_1 - l_{32}^2 d_2 \end{pmatrix}$$

【**例** 3.Cholesky **改进平方根分解法**】用 Cholesky 改进平方根分解法求解对称阵作为系数矩阵的非齐次线性方程组

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 + x_3 & = 4 \\ -x_1 - 2x_2 + 3x_3 & = 5 \\ x_1 + 3x_2 + x_3 & = 6 \end{cases}$$

【解】 作系数矩阵的 Cholesky 改进平方根分解

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

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{7}{5} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & & \\ & -\frac{5}{2} & \\ & & \frac{27}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ & 1 & -\frac{7}{5} \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

连续求解方程组 $Ly = b$ 和 $DL^T x = y$, 即

$$Ly = b: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{7}{5} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \\ \frac{69}{5} \end{pmatrix}$$

$DL^T x = y:$

$$\begin{pmatrix} 2 & & \\ & -\frac{5}{2} & \\ & & \frac{27}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ & 1 & -\frac{7}{5} \\ & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \\ \frac{69}{5} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{23}{9} \approx 2.55556 \\ \frac{7}{9} \approx 0.77778 \\ \frac{10}{9} \approx 1.11111 \end{pmatrix}$$