§6 LU 分解

6.1 LU 分解

回忆消元法的过程：方阵 $A \xrightarrow{\text{初等行变换}}$ 上三角矩阵 U.

使用矩阵语言：$EA = U, E$ 是初等矩阵的乘积.

例：$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 8 & 7 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_2 - 4r_1} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} = U$ $\qquad \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -4 & 1 \end{pmatrix}}_{E_{21}} A = U$

$$\Longrightarrow A = E_{21}^{-1} U = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

目标：将矩阵 A 分解成一个下三角矩阵(lower triangular matrix) 和一个上三角矩阵(upper triangular matrix)的乘积.

6.1 LU 分解

看三阶方阵的情形：

设不需做换行，A 经Gauss消元法变为上三角阵 U.

即 $(E_{32}E_{31}E_{21})A = U$.

于是 $A = (E_{21}^{-1}E_{31}^{-1}E_{32}^{-1})U = LU$.

消去矩阵为下三角矩阵. 下三角矩阵的逆、乘积均是下三角矩阵.

6.1 LU 分解

问题：为什么用 $A = LU$, 而非 $U = (E_{32}E_{31}E_{21})A$?

例： $E_{32} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -5 & 1 \end{pmatrix}, E_{31} = I_3, E_{21} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$

$$E_{32}E_{31}E_{21} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 10 & -5 & 1 \end{pmatrix} = E$$

$$E_{21}^{-1}E_{31}^{-1}E_{32}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 5 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 0 & 5 & 1 \end{pmatrix} = L$$

6.1 LU 分解

- L 容易计算, E 不易计算.
- L 只包含消去信息, E 包含其他信息.
- L 是这样得到的：将消元的系数写在相应位置上.

$$n = 3, A = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix}}_{L} U$$

记 $A = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{a}_3 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \mathbf{u}_2 \\ \mathbf{u}_3 \end{pmatrix};$

代入得

$$\mathbf{u}_1 = \mathbf{a}_1,$$
$$\mathbf{u}_2 = \mathbf{a}_2 - l_{21}\mathbf{u}_1,$$
$$\mathbf{u}_3 = \mathbf{a}_3 - l_{31}\mathbf{u}_1 - l_{32}\mathbf{u}_2.$$

“ l_{ij} ”表示把矩阵的第 i 行减去第 j 行的 l_{ij} 倍.

6.1 LU 分解

例

$$A=\begin{pmatrix}2&-1&0\\-1&2&-1\\0&-1&2\end{pmatrix}\xrightarrow{r_2-r_1\times(-\frac{1}{2})}\begin{pmatrix}2&-1&0\\0&\frac{3}{2}&-1\\0&-1&2\end{pmatrix}\xrightarrow{r_3-r_2\times(-\frac{2}{3})}\begin{pmatrix}2&-1&0\\0&\frac{3}{2}&-1\\0&0&\frac{4}{3}\end{pmatrix}=U$$

$$\Longrightarrow A=\begin{pmatrix}1&0&0\\-\frac{1}{2}&1&0\\0&-\frac{2}{3}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&-1&0\\0&\frac{3}{2}&-1\\0&0&\frac{4}{3}\end{pmatrix}=LU.$$

U 为上三角矩阵，对角元为 A 的主元.

L 为下三角矩阵，对角元为 1，乘数 l_{ij} 位于对角元下方.

6.1 LU 分解

有时，U 写成 $\begin{pmatrix} d_1 & & \\ & \ddots & \\ & & d_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & * & * \\ & \ddots & * \\ & & 1 \end{pmatrix}$

例：上例中

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{2}{3} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = LDU.$$

其中 D 为对角阵, U 为上三角阵, L 为下三角阵 , L 和 U 的对角元都是 1.

6.2 用 LU 分解解线性方程组

若 $A=LU$, 则方程组 $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$变为 $L\mathbf{c}=\mathbf{b}$ (下三角形方程组)

$U\mathbf{x}=\mathbf{c}$ (上三角形方程组)

例：已知

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

应用 A 的 LU 分解来解 $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$,其中 $\mathbf{b}=\begin{pmatrix}10\\17\\16\end{pmatrix}$.

6.2 用 LU 分解解线性方程组

解:

$$Lc = b : \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 1 \end{pmatrix} \mathbf{c} = \begin{pmatrix} 10 \\ 17 \\ 16 \end{pmatrix} \Longrightarrow \mathbf{c} = \begin{pmatrix} 10 \\ 12 \\ 8 \end{pmatrix},$$

$$U\mathbf{x} = \mathbf{c} : \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} & 1 \\ 0 & 0 & \frac{4}{3} \end{pmatrix} \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 10 \\ 12 \\ 8 \end{pmatrix} \Longrightarrow \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

不计求 LU 分解的运算在内, 解两个三角方程组 $L\mathbf{c} = \mathbf{b}$ 和 $U\mathbf{x} = \mathbf{c}$ 比直接解 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 简单.

6.2 用 LU 分解解线性方程组

实际问题中常需解一系列具有相同系数矩阵的线性方程组

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}_1, A\mathbf{x} = \mathbf{b}_2, \cdots, A\mathbf{x} = \mathbf{b}_p.$$

当 A 可逆时，可求 A^{-1}, 再求 $A^{-1}\mathbf{b}_1, A^{-1}\mathbf{b}_2, \cdots, A^{-1}\mathbf{b}_p$.

实践中，

1. 用消元法解第一个方程组，同时得到 A 的 LU 分解；
2. 用 LU 分解解剩下的方程组.

6.3 消元法的计算量

问题：设 A 为 n 阶矩阵，用Gauss消元法解 $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$ 需多少次加减乘除运算？

$$A^{(1)}=A=\begin{pmatrix} a_{11} & * & * & * \\ a_{21} & * & * & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & * & * & * \end{pmatrix}, \mathbf{b}^{(1)}=\mathbf{b}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}.$$

- 求乘数 $l_{i1}=\frac{a_{i1}}{a_{11}}(i=2,\cdots,n)$ 共需 $n-1$ 次除法.
- $l_{i1}a_{1j}, l_{i1}b_1(i,j=2,\cdots,n)$ 共需 $n(n-1)$次乘法.
- $a_{ij}-l_{i1}a_{1j}, b_i-l_{i1}b_1(i,j=2,\cdots,n)$共需 $n(n-1)$ 次减法.

$$\Longrightarrow A^{(2)}=\begin{pmatrix} a_{11} & * \\ 0 & B \end{pmatrix},$$ 对 $n-1$阶矩阵继续消元，……

6.3 消元法的计算量

所以，消元法一般过程含乘除法次数为

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)+\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+1)=\frac{n(n-1)(2n+5)}{6}\approx\frac{n^3}{3}.$$

含加减法次数为

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+1)=\frac{n(n+1)(n-1)}{3}\approx\frac{n^3}{3}.$$

回代过程：含乘除法次数为$\frac{n(n+1)}{2}$，含加减法次数为$\frac{n(n-1)}{2}$.

因此，Gauss消元法的计算量为

$$\begin{aligned}\text{含乘除法次数} &= \frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3}\approx\frac{n^3}{3}\\ \text{加减法次数} &= \frac{n^3}{3}+\frac{n^2}{2}-\frac{5n}{6}\approx\frac{n^3}{3}\end{aligned}$$

6.4 LU分解的存在性和唯一性

并非每个矩阵 A 都有 LU 分解, 即使 A 可逆.

例：若 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ l_{21} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ 0 & u_{22} \end{pmatrix} = LU,$

则 $u_{11} = 0, u_{12} = 1, 2 = l_{21} \cdot 0?$

问题：若可逆矩阵 A 有 LU 分解，则 A 应满足什么条件？

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

设 A_k是 A 的左上角的 $k \times k$ 子矩阵，称为 A的 k 阶顺序主子阵.

6.4 LU分解的存在性和唯一性

定理：设可逆矩阵 A 的顺序主子阵 $A_k(k=1,\cdots,n)$ 均为可逆阵，则A 有 LU 分解.

证明：对 A 的阶数 n用数学归纳法.

$n=1$时，$L=(1), U=A=(a_{11})\neq 0$, 定理成立.

假设 $n=k$ 时定理成立, 则$n=k+1$ 时，

$$A=\begin{pmatrix} A_k & \beta \\ \alpha^T & a_{nn} \end{pmatrix},$$

其中 β 是 k 维列向量，α^T 是 k维行向量.

6.4 LU 分解的存在性和唯一性

由 A_k 可逆，对 A 作消元：$\begin{pmatrix} I_k & 0 \\ -\alpha^T A_k^{-1} & 1 \end{pmatrix} A = \begin{pmatrix} A_k & \beta \\ 0 & a_{nn} - \alpha^T A_k^{-1}\beta \end{pmatrix}$.

即 $$A = \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ \alpha^T A_k^{-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_k & \beta \\ 0 & a_{nn} - \alpha^T A_k^{-1}\beta \end{pmatrix}.$$

由归纳假设，$A_k = L_k U_k$.

故 $$A = \begin{pmatrix} I_k & 0 \\ \alpha^T A_k^{-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_k & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k & L_k^{-1}\beta \\ 0 & a_{nn} - \alpha^T A_k^{-1}\beta \end{pmatrix} = LU.$$

定理得证.

6.4 LU分解的存在性和唯一性

定理：设n阶可逆阵A有$A=LU$,其中L为下三角矩阵,U为上三角矩阵，且 $l_{ii}=1, u_{ii}\neq 0(1\le i\le n)$,则分解唯一.

证明：设可逆阵 A 有两个LU分解：$A=L_1U_1=L_2U_2$, 则

$$L_1^{-1}L_2=U_1U_2^{-1}$$

为对角阵. 因 L_1, L_2的对角元为1, 故 $L_1^{-1}L_2$对角元全为1.
故 $L_1^{-1}L_2=U_1U_2^{-1}=I$, 即 $L_1=L_2, U_1=U_2$.

同理，设可逆矩阵 $A=LDU$, 则分解唯一.

6.5 对称矩阵的 LDL^T分解

设可逆对称矩阵 A 不需换行，只通过消元能化成上三角矩阵 U, 即有 $A = LDU$, 则 $A = A^T = U^T D L^T$.

由 LDU 分解唯一性知 $U = L^T$.

故 $A = LDL^T$.

例：$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$ $\qquad$ LU 分解

$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ $\quad$ LDL^T分解

6.5 对称矩阵的 LDL^T分解

例：

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 6 & 0 \\ 1 & 0 & 6 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_2-2r_1} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & -2 \\ 1 & 0 & 6 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_3-r_1} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & 5 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_3-(-r_2)} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} = U$$

$$\Longrightarrow A = \begin{pmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 2 & \\ & & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ & 1 & -1 \\ & & 1 \end{pmatrix} = LDL^T.$$

6.6 置换矩阵

定义：一个n元置换是$1, 2, \cdots, n$的一个排列. 这诱导了n 阶单位矩阵行的一个重排. 单位阵行重排后得到的矩阵称为置换阵.

注：$1, 3, 2 \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ $3, 1, 2 \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

例：所有2×2置换阵为 $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $P_{21} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$.

6.6 置换矩阵

所有 3×3 置换阵为
$$
\begin{aligned}
I=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},P_{21}=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix},P_{32}P_{21}=\begin{pmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{pmatrix},\\
P_{31}=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix},P_{32}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},P_{21}P_{32}=\begin{pmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

- 共有 $n!$ 个 n 阶置换阵.
- 置换阵的逆还是置换阵, 置换阵的乘积仍是置换阵.
- 置换阵 P 满足 $P^{-1}=P^T$.

6.7 $PA=LU$分解

定理：设 A是一个 n 阶可逆阵，则存在置换阵 P, 使得$PA=LU$.

证明：对矩阵 A 的阶数 n 用数学归纳法.

$n=1$ 时定理显然成立. 假设 $n=k$ 时定理成立.

$n=k+1$时, A 的第一列有非零元，否则 A 不可逆.

设 $a_{i1}\neq 0$, 则调换第 1 行和第 i 行, 得矩阵 A'.于是 $A'=P_{i1}A$ 也可逆.

对 A'作消元得 $A''=\begin{pmatrix} a_{i1} & * \\ 0 & A_1 \end{pmatrix}$, 且 $A'=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ t & I \end{pmatrix}A''$.

6.7 $PA = LU$分解

A_1为 $n-1$阶可逆阵, 由归纳假设知，存在 $n-1$ 阶置换阵P_1 使得 $P_1A_1 = L_1U_1$.

$$\text{于是 } P_{i1}A = A' = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ t & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{i1} & * \\ 0 & A_1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ t & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \\ & P_1^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \\ & L_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{i1} & * \\ 0 & U_1 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & \\ & P_1^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ P_1 t & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \\ & L_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{i1} & * \\ 0 & U_1 \end{pmatrix},$$

$$\text{故 } \begin{pmatrix} 1 & \\ & P_1 \end{pmatrix} P_{i1}A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ P_1 t & L_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{i1} & * \\ 0 & U_1 \end{pmatrix} = LU.$$

最后令 $P = \begin{pmatrix} 1 & \\ & P_1 \end{pmatrix} P_{i1}$，则 $PA = LU$.

6.7 $PA = LU$分解

例：$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 7 & 9 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_1 \longleftrightarrow r_2} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 2 & 7 & 9 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_3 - 2r_1} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 7 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_3 - 3r_2} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$

故 $P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, PA = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} = LU.$

6.7 $PA = LU$分解

例：$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_1 \longleftrightarrow r_3} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_4 - 2r_1} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & -1 & 1 \end{pmatrix}$

$$\xrightarrow{r_2 \longleftrightarrow r_4} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_4 - 3r_3} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -6 \end{pmatrix} = U.$$

$$\Longrightarrow U = E_{43}(-3) P_{42} E_{41}(-2) P_{31} A$$

$$\Longrightarrow A = P_{31} E_{41}(2) P_{42} E_{43}(3) U.$$

6.7 $PA = LU$分解

注意到

$$E_{41}(2)P_{42} = P_{42}E_{21}(2)$$

$$\Longrightarrow A = \underbrace{P_{31}P_{42}}_{P}\underbrace{E_{21}(2)E_{43}(3)}_{L}U = PLU$$

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, L = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 0 & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & 3 & 1 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -6 \end{pmatrix}.$$