第九讲 矩阵的三角分解

一、Gauss消去法的矩阵形式

n 元线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}\xi_1 + a_{12}\xi_2 + \cdots + a_{1n}\xi_n = b_1 \\ a_{21}\xi_1 + a_{22}\xi_2 + \cdots + a_{2n}\xi_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}\xi_1 + a_{n2}\xi_2 + \cdots + a_{nn}\xi_n = b_n \end{cases} \quad \rightarrow \quad Ax = b$$

其中，$A = (a_{ij})_{n\times n}$ $x = (\xi_1 \quad \xi_2 \quad \cdots \quad \xi_n)^T$ $b = (b_1 \quad b_2 \quad \cdots \quad b_n)^T$

设 $A^{(0)} = A = \left(a_{ij}\right)_{n\times n}$，设 A 的 k 阶顺序主子式为 Δ_k，若

$\Delta_1 = a_{11}^{(0)} \neq 0$，可以令 $c_{i1} = \dfrac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}$，并构造 **Frobenius** 矩阵：

$$L_1=\begin{bmatrix}1 & & & 0\\ c_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ c_{n1} & 0 & & 1\end{bmatrix}_{n\times n} \rightarrow L_1^{-1}=\begin{bmatrix}1 & & & 0\\ -c_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -c_{n1} & 0 & & 1\end{bmatrix}$$

计算可得

$$A^{(1)}=L_1^{-1}A^{(0)}=\begin{bmatrix}a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)}\\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)}\\ 0 & \vdots & \ddots & \vdots\\ & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)}\end{bmatrix} \rightarrow A^{(0)}=L_1A^{(1)}$$

初等变换不改变行列式，故$\Delta_2=a_{11}^{(0)}a_{22}^{(1)}$，若$\Delta_2\neq 0$，则$a_{22}^{(1)}\neq 0$，又可定义$c_{i2}=\dfrac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}(i=3,4,\cdots n)$，并构造 Frobenius 矩阵

$$L_2=\begin{bmatrix}1 & & & \\ & 1 & & \\ & c_{32} & \ddots & \\ & \vdots & & \\ & c_{n2} & & 1\end{bmatrix} \rightarrow L_2^{-1}=\begin{bmatrix}1 & & & \\ & 1 & & \\ & -c_{32} & \ddots & \\ & \vdots & & \\ & -c_{n2} & & 1\end{bmatrix}$$

$$A^{(2)} = L_2^{-1}A^{(1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad A^{(1)} = L_2 A^{(2)}$$

依此类推，进行到第(*r*-1)步，则可得到

$$A^{(r-1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & \cdots & a_{1r-1}^{(0)} & a_{1r}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots & \\ & & a_{r-1r-1}^{(r-2)} & a_{r-1r}^{(r-2)} & \cdots & a_{r-1n}^{(r-2)} \\ & & & a_{rr}^{(r-1)} & \cdots & a_{rn}^{(r-1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nr}^{(r-1)} & \cdots & a_{nn}^{(r-1)} \end{bmatrix} \qquad (r = 2, 3, \cdots, n)$$

则 A 的 r 阶顺序主子式 $\varDelta_r = a_{11}^{(0)} a_{22}^{(1)} \cdots a_{r-1r-1}^{(r-2)} a_{rr}^{(r-1)}$，若 $\Delta_r \neq 0$，则 $a_{rr}^{r-1} \neq 0$ 可

定义 $c_{ir} = \dfrac{a_{ir}^{(r-1)}}{a_{rr}^{(r-1)}}$，并构造 **Frobenius** 矩阵

$$L_r=\begin{bmatrix}1&&&&&\\&\ddots&&&&\\&&1&&&\\&&c_{r+1r}&1&&\\&&\vdots&&\ddots&\\&&c_{nr}&&&1\end{bmatrix}\rightarrow L_r^{-1}=\begin{bmatrix}1&&&&&\\&\ddots&&&&\\&&1&&&\\&&-c_{r+1r}&1&&\\&&\vdots&&\ddots&\\&&-c_{nr}&&&1\end{bmatrix}$$

$$A^{(r)}=L_r^{-1}A^{r-1}=\begin{bmatrix}a_{11}^{(0)}&\cdots&a_{1r}^{(0)}&a_{1r+1}^{(0)}&\cdots&a_{1n}^{(0)}\\&\ddots&\vdots&\vdots&\cdots&\\&&a_{rr}^{(r-1)}&a_{rr+1}^{(r-1)}&\cdots&a_{rn}^{(r-1)}\\&&&a_{r+1r+1}^{(r)}&\cdots&a_{r+1n}^{(r)}\\&&&\vdots&&\vdots\\&&&a_{nr+1}^{(r)}&\cdots&a_{nn}^{(r)}\end{bmatrix}\rightarrow A^{(r-1)}=L_rA^{(r)}$$

$$(r=2,3,\cdots,n-1)$$

直到第（n一1）步，得到

$$A^{(n-1)}=\begin{bmatrix}a_{11}^{(0)}&a_{12}^{(0)}&\cdots&a_{1n}^{(0)}\\&a_{22}^{(1)}&\cdots&a_{2n}^{(1)}\\&&\ddots&\vdots\\&&&a_{nn}^{(n-1)}\end{bmatrix}$$

则完成了消元的过程

二、*LU*分解与*LDU*分解

$$A = A^{(0)} = L_1 A^{(1)} = L_1 L_2 A^{(2)} = \cdots = L_1 L_2 L_3 \cdots L_{n-1} A^{(n-1)}$$

容易求出

$$L = L_1 L_2 \cdots L_{n-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ c_{21} & 1 & & & \\ \vdots & & \ddots & & \\ c_{n-11} & c_{n-12} & & 1 & \\ c_{n1} & c_{n2} & & c_{nn-1} & 1 \end{bmatrix}$$ 为下三角矩阵

令 $U = A^{(n-1)}$ 为上三角矩阵，则

$$A = LU$$

以上将 A 分解成一个下三角矩阵与上三角矩阵的乘积，就称为 LU 分解或 LR 分解。（**L: lower　U: upper　L: left　R: right**）

LU 分解不唯一，显然，令 D 为对角元素不为零的 n 阶对角阵，则

$$A = LU = LDD^{-1}U = \hat{L}\hat{U}$$

可以采用如下的方法将分解完全确定，即要求

（1） L 为单位下三角矩阵 或

（2） U 为单位上三角矩阵 或

（3） 将 A 分解为 LDU，其中 L，U 分别为单位下三角，单位上三角矩阵，D 为对角阵 $D=\mathrm{diag}[d_1,d_2,\cdots,d_n]$，而 $d_k=\Delta_k / \Delta_{k-1}$ $(k=1,2,\cdots,n)$ $\Delta_0=1$。

[定理] n 阶非奇异矩阵 A 有三角分解 LU 或 LDU 的充要条件是 A 的顺序主子式 $\Delta_r \neq 0$ $(r=1,2,\cdots,n)$

[定理] 设A是n阶非奇异矩阵，则存在置换矩阵P使得PA的n个顺序诸子式非零。

定义：以n阶单位矩阵的n个列向量$e_1,e_2,\ldots,e_n$为列构成的n阶矩阵P=（$e_{i1},e_{i2},\ldots,e_{in}$）称为置换矩阵，其中$i1,i2,\ldots,in$为1,2,…,n的一个排列。

列主元素法：在矩阵的某列中选取模值最大者作为新的对角元素，选取范围为对角线元素以下的各元素。比如第一步：找第一个未知数前的系数$|a_{i1}|$最大的一个，将其所在的方程作为第一个方程，即交换矩阵的两行，自由项也相应变换；第二步变换时，找$|a_{i2}|(i \geq 2)$中最大的一个，然后按照第一步的方法继续。

行主元素法：在矩阵的某行中选取模值最大者作为新的对角元素，选取范围为对角线元素以后的各元素，需要记住未知数变换的顺序，最后再还原回去。因此需要更多的存储空间，不如列主元素法方便。

全主元素法：若某列元素均较小或某行元素均较小时，可在各行各列中选取模值最大者作为对角元素。与以上两种方法相比，其计算稳定性更好，精度更高，计算量增大。

经过三角分解后，原方程可化为：

$$\left.\begin{array}{r} Ax=b \\ A=LU \end{array}\right\} \Rightarrow \left\{\begin{array}{l} Ly=b \\ Ux=y \end{array}\right.$$

三、其它的三角分解

1. 定义 设 A 具有唯一的 LDU 分解

(1) 若将 D，U 结合起来得 $A=L\hat{U}$（$\hat{U}=DU$），则称为 A 的 Doolittle 分解

(2) 若将 L, D 结合起来得 $A=\hat{L}U$（$\hat{L}=LD$），则称为 A 的 Crout 分解

2. 算法(Crout 分解)

$$\hat{L}=\begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}, \quad U=\begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

由 $A=\hat{L}U$ 得:

（1） $l_{i1}=a_{i1}$ (第1列)　（$i=1,2,3,\cdots n$）　($A,\hat{L}$第1列)

（2） $u_{1j}=a_{1j}/l_{11}$ (第1行)　（$j=2,3,\cdots n$）　(A,U第1行)

（3） $l_{i2}=a_{i2}-l_{i1}u_{12}$ (第2列)　($i=2,3,\cdots n$)　($A,\hat{L}$第2列)

（4） $u_{2j}=\dfrac{1}{l_{22}}\left(a_{2j}-l_{21}u_{1j}\right)$　（$j=3,4,\cdots n$）　(A,U第2行)

（5）一般地，对 $A,\hat{L}$ 的第 k 列运算，有

$$l_{ik}=a_{ik}-\sum_{m=1}^{k-1}l_{im}u_{mk}\qquad (k=1,2,\cdots,n;i=k,k+1,\cdots,n)$$

（6） 对 A，U 的第 k 行运算，有

$$u_{kj}=\frac{1}{l_{kk}}(a_{kj}-\sum_{m=1}^{k-1}l_{km}u_{mj})\qquad (k=1,2,\cdots n-1;j=k+1,k+2,\cdots n)$$

3. 厄米正定矩阵的 Cholesky 分解

$$A = GG^{\mathrm{H}}$$

$$g_{ij} = \begin{cases} \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} |g_{ik}|^2 \right)^{1/2} & i = j \\ \dfrac{1}{g_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} g_{ik} \overline{g_{ik}} \right) & i > j \\ 0 & i < j \end{cases}$$

作业：**p195 2、3**