

## 第四章 矩阵分解

### §1 三角分解

#### 一、三角分解的定义与条件

**定义** 设  $A \in \mathbf{C}^{n \times n}$ , 若存在下三角矩阵  $L \in \mathbf{C}^{n \times n}$  和上三角矩阵  $U \in \mathbf{C}^{n \times n}$ , 使得

$$A = LU$$

则称之为  $A$  的三角分解.

**问题:** 给出一个  $n$  阶方阵  $A$ , 在什么条件下它能进行三角分解? 三角分解是否唯一? 如何进行三角分解?

**定理** 设  $A = (a_{ij})_{n \times n}$  是  $n$  阶非奇异矩阵, 则  $A$  可进行三角分解的充要条件是

$\Delta_k \neq 0 \ (k=1,2,\dots,n)$ , 其中

$$\Delta_k = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix} \quad (k=1,2,\dots,n), \text{ 称之为 } A \text{ 的顺序主子式}$$

由此定理可见, 并不是每个非奇异矩阵都能进行三角分解, 如  $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  就不能进行三角分解.

**定理** 设  $A \in \mathbf{C}^{n \times n}$  且  $\text{rank } A = r$ , 如果  $\Delta_k \neq 0 \ (k=1,2,\dots,r)$ , 即  $A$  的前  $r$  个顺序主子式不为 0, 则  $A$  可进行三角分解  $A = LU$ , 且可适当选择分解使得  $L$  或  $U$  非奇异.

该定理的条件仅是充分的, 如  $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$  的秩为 1, 不满足定理条件, 但

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

等都是  $A$  的三角分解.

#### 二、三角分解的唯一性问题

即使一个矩阵的三角分解存在, 它也不是唯一的, 这是因为, 若取  $D$  为任意非奇异的对角阵, 则  $A = LU = (LD^{-1})(DU)$  又是一个三角分解. 为了讨论唯一性问题, 将三角分解规范化, 从而得到如下几种特殊形式的三角分解.

**定义** 设  $A \in \mathbf{C}^{n \times n}$ , 则称

(1)  $A = LU$  为 **Doolittle 分解**, 其中  $L$  是单位下三角阵 (主对角元素均是 1),  $U$  是上三角阵;

(2)  $A = LU$  为 **Crout 分解**, 其中  $L$  是下三角阵,  $U$  是单位上三角阵;

(3)  $A = LDU$  为 **LDU 分解**, 其中  $L$  是单位下三角阵,  $D$  是对角阵,  $U$  是单位上三角阵。

**定理**  $n$  阶非奇异矩阵  $A$  有唯一 LDU 分解的充要条件是  $A$  的所有顺序主子式不为 0, 即  $\Delta_k \neq 0$  ( $k = 1, 2, \dots, n$ ), 且对角阵  $D = \text{diag}(d_{11}, d_{22}, \dots, d_{nn})$  的元素满足

$$d_{11} = \Delta_1, \quad d_{ii} = \frac{\Delta_i}{\Delta_{i-1}} \quad (i = 2, \dots, n)$$

**推论**  $n$  阶非奇异矩阵  $A$  有唯一 Doolittle 分解或 Crout 分解的充要条件是  $\Delta_k \neq 0$  ( $k = 1, 2, \dots, n-1$ )。

上述定理的条件还可以适当放宽。

**定理**  $n$  阶方阵  $A$  有唯一 LDU (或 Doolittle, 或 Crout) 分解的充要条件是  $\Delta_k \neq 0$  ( $k = 1, 2, \dots, n-1$ )。

### 三、三角分解的紧凑计算格式

以下总假设  $n$  阶非奇异矩阵  $A = (a_{ij})_{n \times n}$  的三角分解唯一存在。

#### 1. Doolittle 分解

$$\text{由 } A = LU = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & u_{nn} \end{pmatrix}, \text{ 得}$$

$$\begin{cases} a_{1j} = u_{1j} \quad (j = 1, 2, \dots, n), & a_{i1} = l_{i1}u_{11} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \\ a_{kj} = \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}u_{rj} + u_{kj} \quad (j \geq k; k = 1, 2, \dots, n-1) \\ a_{ik} = \sum_{t=1}^{k-1} l_{it}u_{tk} + l_{ik}u_{kk} \quad (i \geq k+1; k = 1, 2, \dots, n-1) \end{cases}$$

$$\text{因此 } \begin{cases} u_{1j} = a_{1j} \quad (j = 1, 2, \dots, n), & l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}} \quad (i = 2, \dots, n) \\ u_{kj} = a_{kj} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{kr}u_{rj} \quad (j \geq k) \\ l_{ik} = \frac{1}{u_{kk}}(a_{ik} - \sum_{t=1}^{k-1} l_{it}u_{tk}) \quad (i \geq k+1) \end{cases} \quad (k = 2, 3, \dots, n)$$

这就是 Doolittle 分解的**紧凑计算格式**。

实际计算时,  $u_{kj}$  与  $l_{ik}$  交叉计算, 由算法公式知, 在算出  $u_{kj}$  或  $l_{ik}$  后,  $a_{kj}$  或  $a_{ik}$  就不再使用了, 因此算出的结果放在矩阵  $\mathbf{A}$  的相应元素位置上, 见图。

$$\begin{array}{c}
 \begin{array}{ccccc}
 \overline{u_{11} \quad u_{12} \quad u_{13} \quad \cdots \quad u_{1n}} & \text{第 1 框} \\
 l_{21} \quad \overline{u_{22} \quad u_{23} \quad \cdots \quad u_{2n}} & \text{第 2 框} \\
 l_{31} \quad l_{32} \quad \overline{u_{33} \quad \cdots \quad u_{3n}} & \text{第 3 框} \\
 \vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \cdots \quad \vdots & \vdots \\
 l_{n1} \quad l_{n2} \quad l_{n3} \quad \cdots \quad \overline{u_{nn}} & \text{第 } n \text{ 框}
 \end{array}
 \end{array}$$

**例** 求矩阵  $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 5 & 2 & -4 \\ 2 & 1 & -2 \\ -4 & -2 & 5 \end{pmatrix}$  的 Doolittle 分解和 LDU 分解。

**解**

$$\begin{array}{ccc}
 \overline{5 \quad 2 \quad -4} \\
 \frac{2}{5} \quad \overline{\frac{1}{5} \quad -\frac{2}{5}} \\
 -\frac{4}{5} \quad -2 \quad \overline{1}
 \end{array}$$

故 
$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{2}{5} & 1 & 0 \\ -\frac{4}{5} & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 2 & -4 \\ 0 & \frac{1}{5} & -\frac{2}{5} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{2}{5} & 1 & 0 \\ -\frac{4}{5} & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & & \\ & \frac{1}{5} & \\ & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{2}{5} & -\frac{4}{5} \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

## 2. Crout 分解

与前面的推导类似, 可以得到 Crout 分解的**紧凑计算格式**:

$$\begin{cases}
 l_{i1} = a_{i1} \quad (i = 1, 2, \cdots, n), \quad u_{1j} = \frac{a_{1j}}{l_{11}} \quad (j = 2, 3, \cdots, n) \\
 l_{ik} = a_{ik} - \sum_{r=1}^{k-1} l_{ir} u_{rk} \quad (i \geq k) \\
 u_{kj} = \frac{1}{l_{kk}} (a_{kj} - \sum_{t=1}^{k-1} l_{tk} u_{tj}) \quad (j \geq k+1)
 \end{cases} \quad (k = 2, 3, \cdots, n)$$

## 3. Cholesky 分解

当  $n$  阶方阵  $\mathbf{A} = (a_{ij})_{n \times n}$  是对称正定阵时,  $\Delta_k > 0$  ( $k = 1, 2, \cdots, n$ ), 于是  $\mathbf{A}$  有

唯一的 LDU 分解, 且  $\mathbf{D}$  的对角元素均大于 0 ( $d_{11} = \Delta_1 > 0$ ,  $d_{ii} = \frac{\Delta_i}{\Delta_{i-1}} > 0$ )

( $i=2, \dots, n$ )。从而

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{U} = \mathbf{L}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}\mathbf{U}, \quad \text{其中 } \mathbf{D}^{\frac{1}{2}} = \text{diag}(\sqrt{d_{11}}, \sqrt{d_{22}}, \dots, \sqrt{d_{nn}})$$

由  $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$  及分解的唯一性可得  $\mathbf{L} = \mathbf{U}^T$ , 于是  $\mathbf{A} = (\mathbf{L}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}})(\mathbf{L}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}})^T = \mathbf{G}\mathbf{G}^T$ , 其中  $\mathbf{G}$  是下三角阵, 称  $\mathbf{A} = \mathbf{G}\mathbf{G}^T$  为  $\mathbf{A}$  的 **Cholesky 分解**。

$$\text{由 } \mathbf{A} = \mathbf{G}\mathbf{G}^T = \begin{pmatrix} g_{11} & & & \\ g_{21} & g_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{21} & \cdots & g_{n1} \\ & g_{22} & \cdots & g_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & g_{nn} \end{pmatrix} \text{ 得}$$

$$\left( \begin{array}{l} \text{(只比较下三角部分)} \end{array} \right) \begin{cases} a_{11} = g_{11}^2, & a_{i1} = g_{i1}g_{11} \quad (i=2, \dots, n) \\ a_{kk} = g_{k1}^2 + g_{k2}^2 + \cdots + g_{kk}^2 & (k=2, 3, \dots, n) \\ a_{ik} = g_{i1}g_{k1} + \cdots + g_{ik}g_{kk} \quad (i > k) \end{cases}$$

$$\text{从而得} \quad \begin{cases} g_{11} = \sqrt{a_{11}}, & g_{i1} = \frac{a_{i1}}{g_{11}} \quad (i=2, \dots, n) \\ g_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{r=1}^{k-1} g_{kr}^2} & (k=2, 3, \dots, n) \\ g_{ik} = \frac{1}{g_{kk}}(a_{ik} - \sum_{t=1}^{k-1} g_{it}g_{kt}) \quad (i > k) \end{cases}$$

计算时如右图, 一列一列计算:

$$\begin{pmatrix} g_{11} & & & \\ g_{21} & g_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix}$$

**例** 求正定矩阵  $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 5 & -2 & 0 \\ -2 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$  的 Cholesky 分解。

**解** 因为

$$\begin{pmatrix} \sqrt{5} & & \\ -\frac{2}{\sqrt{5}} & \sqrt{\frac{11}{5}} & \\ 0 & -\sqrt{\frac{5}{11}} & \sqrt{\frac{6}{11}} \end{pmatrix}$$

所以

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \sqrt{5} & & \\ -\frac{2}{\sqrt{5}} & \sqrt{\frac{11}{5}} & \\ 0 & -\sqrt{\frac{5}{11}} & \sqrt{\frac{6}{11}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{5} & -\frac{2}{\sqrt{5}} & 0 \\ & \sqrt{\frac{11}{5}} & -\sqrt{\frac{5}{11}} \\ & & \sqrt{\frac{6}{11}} \end{pmatrix}$$

三角分解的应用说明如下：（设  $A = LU$ ）

1. 求解线性方程组  $Ax = b \Rightarrow L U x = b$  化为  $Ly = b$ ,  $Ux = y$  求解;

2. 求行列式  $\det A = \det L \det U = l_{11} \cdots l_{mm} u_{11} \cdots u_{mm}$ ;

3. 求逆矩阵  $A^{-1} = U^{-1} L^{-1}$ 。

#### 四、分块三角分解

在处理较高阶矩阵时常用的一种简化方法就是将矩阵加以分块, 并在分块的形式下进行计算, 即把不必过细剖分的一部分当成一个整体来处理。这样既避免了繁琐的表达式, 又易于抓住主要特征。

考虑如下的四分块矩阵:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad A \in \mathbb{C}^{m \times m}, \quad D \in \mathbb{C}^{n \times n}, \quad \text{且假设 } A \text{ 或 } D \text{ 是可逆的}$$

**情形 1.** 设  $A$  可逆

因为 
$$\begin{pmatrix} I_m & O \\ -CA^{-1} & I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ O & D - CA^{-1}B \end{pmatrix}$$

或 
$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_m & -A^{-1}B \\ O & I_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & O \\ C & D - CA^{-1}B \end{pmatrix}$$

又有 
$$\begin{pmatrix} I_m & O \\ -CA^{-1} & I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_m & -A^{-1}B \\ O & I_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & O \\ O & D - CA^{-1}B \end{pmatrix}$$

可求得 
$$\begin{pmatrix} I_m & O \\ -CA^{-1} & I_n \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} I_m & O \\ CA^{-1} & I_n \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} I_m & -A^{-1}B \\ O & I_n \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} I_m & A^{-1}B \\ O & I_n \end{pmatrix}$$

故得 
$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} I_m & O \\ CA^{-1} & I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ O & D - CA^{-1}B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & O \\ C & D - CA^{-1}B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_m & A^{-1}B \\ O & I_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} I_m & O \\ CA^{-1} & I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & O \\ O & D - CA^{-1}B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_m & A^{-1}B \\ O & I_n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

这是分块矩阵的分块三角分解。

利用这组公式可以得到

1) 行列式:  $\det \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \det A \cdot \det(D - CA^{-1}B)$

可见 
$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \text{ 可逆} \Leftrightarrow D - CA^{-1}B \text{ 可逆 (条件 } \det A \neq 0 \text{)}$$

2) 逆矩阵

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^{-1} &= \begin{pmatrix} I_m & -A^{-1}B \\ O & I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^{-1} & O \\ O & (D-CA^{-1}B)^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_m & O \\ -CA^{-1} & I_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} A^{-1} + A^{-1}B(D-CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} & -A^{-1}B(D-CA^{-1}B)^{-1} \\ -(D-CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} & (D-CA^{-1}B)^{-1} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

这样就可将高阶矩阵求逆问题转化为低阶矩阵的求逆问题。

**情形 2.** 设  $D$  可逆

同样有一组公式:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} I_m & -BD^{-1} \\ O & I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} A-BD^{-1}C & O \\ C & D \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_m & O \\ -D^{-1}C & I_n \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} A-BD^{-1}C & B \\ O & D \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} I_m & -BD^{-1} \\ O & I_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_m & O \\ -D^{-1}C & I_n \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} A-BD^{-1}C & O \\ O & D \end{pmatrix} \end{aligned}$$

相应地可以得到行列式及逆矩阵的有关结果。

作为上述思想的应用, 举如下几例。

**例** 设  $A, B$  为同阶方阵, 证明  $\det \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} = \det(A+B) \det(A-B)$ 。

**证** 因为  $\begin{pmatrix} I & O \\ I & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & O \\ -I & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A-B & B \\ O & A+B \end{pmatrix}$ , 取行列式即得。

**例** 设  $A, B, C, D$  为同阶方阵,  $A$  可逆, 且  $AC=CA$ 。证明:

$$\det \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \det(AD-CB)$$

**证** 因为  $\begin{pmatrix} I & O \\ -CA^{-1} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ O & D-CA^{-1}B \end{pmatrix}$ , 取行列式得

$$\begin{aligned} \det \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} &= \det A \cdot \det(D-CA^{-1}B) = \det[A(D-CA^{-1}B)] = \det(AD-ACA^{-1}B) \\ &= \det(AD-CAA^{-1}B) = \det(AD-CB)。 \end{aligned}$$

**例** 设  $A \in \mathbf{C}^{m \times n}$ ,  $B \in \mathbf{C}^{n \times m}$ 。证明:  $\det(\mathbf{I}_m + AB) = \det(\mathbf{I}_n + BA)$ 。

**证** 构造矩阵  $\begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & A \\ -B & \mathbf{I}_n \end{pmatrix}$ , 因为

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & \mathbf{O} \\ B & \mathbf{I}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & A \\ -B & \mathbf{I}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & A \\ \mathbf{O} & \mathbf{I}_n + BA \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & -A \\ \mathbf{O} & \mathbf{I}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & A \\ -B & \mathbf{I}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_m + AB & \mathbf{O} \\ -B & \mathbf{I}_n \end{pmatrix}$$

所以 
$$\det(\mathbf{I}_n + BA) = \det \begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & A \\ -B & \mathbf{I}_n \end{pmatrix} = \det(\mathbf{I}_m + AB)$$

**例** 条件同上例, 且  $\lambda \neq 0$ 。证明:  $\det(\lambda \mathbf{I}_m - AB) = \lambda^{m-n} \det(\lambda \mathbf{I}_n - BA)$   
(即  $AB$  和  $BA$  的非零特征值相同)。

**证** 构造矩阵  $\begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & A \\ B & \lambda \mathbf{I}_n \end{pmatrix}$ , 因为

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & \mathbf{O} \\ -B & \mathbf{I}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & A \\ B & \lambda \mathbf{I}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & A \\ \mathbf{O} & \lambda \mathbf{I}_n - BA \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & -\frac{1}{\lambda}A \\ \mathbf{O} & \lambda \mathbf{I}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & A \\ B & \lambda \mathbf{I}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_m - \frac{1}{\lambda}BA & \mathbf{O} \\ B & \lambda \mathbf{I}_n \end{pmatrix}$$

所以 
$$\begin{aligned} \det(\lambda \mathbf{I}_n - BA) &= \det \begin{pmatrix} \mathbf{I}_m & A \\ B & \lambda \mathbf{I}_n \end{pmatrix} = \det(\mathbf{I}_m - \frac{1}{\lambda}AB) \det(\lambda \mathbf{I}_n) \\ &= \frac{1}{\lambda^m} \det(\lambda \mathbf{I}_m - AB) \lambda^n = \lambda^{n-m} \det(\lambda \mathbf{I}_n - BA) \end{aligned}$$