2.1 矩阵的三角分解及其应用

2.1.1 Gauss消去法与矩阵的*LU*分解

2.1.2 Gauss列主元消去法与带列主元的*LU*分解

2.1.3 对称矩阵的Cholesky分解

2.1.4 三对角矩阵的三角分解

2.1.5 条件数与方程组的性态

2.1.6 矩阵的*QR*分解

矩阵分解是设计算法的主要技巧。

对于一个给定的矩阵计算问题，我们研究的首要问题就是，如何根据给定的问题的特点，设计出求解这一问题的有效的计算方法。设计算法的基本思想就是设法将一个一般的矩阵计算问题转化为一个或几个已与求解的特殊问题，而通常完成这一转化任务的最主要的技巧就是矩阵分解，即将一个给定的矩阵分解为几个特殊类型的矩阵的乘积。

例如，如下的两个三角方程组

$$\begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad \text{和} \quad \begin{pmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1n-1} & u_{1n} \\ & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & u_{n-1n-1} & u_{n-1n} \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

是容易求解的。 这样就将如何求解线性方程组的问题转化为如何实现上述矩阵分解的问题。这正是本章将要介绍的内容。

2.1.1 Gauss消去法与矩阵的*LU*分解

例1 Gauss消去法求解线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的一个实例。

$$
\begin{cases}
2x_1 + x_2 + x_3 = 4 & r_1^{(0)} \\
4x_1 + 3x_2 + 3x_3 + x_4 = 11 & r_2^{(0)} \\
8x_1 + 7x_2 + 9x_3 + 5x_4 = 29 & r_3^{(0)} \\
6x_1 + 7x_2 + 9x_3 + 8x_4 = 30 & r_4^{(0)}
\end{cases}
$$

第一步，消去 $r_2^{(0)}$ 、$r_3^{(0)}$ 和 $r_4^{(0)}$ 中的 x_1,即用 $\left(-\frac{4}{2}\right)\times r_1^{(0)}+r_2^{(0)}$、$\left(-\frac{8}{2}\right)\times r_1^{(0)}+r_3^{(0)}$ 和 $\left(-\frac{6}{2}\right)\times r_1^{(0)}+r_4^{(0)}$ 得

$$\begin{cases} 2x_1+x_2+x_3=4 & r_1^{(0)} \\ x_2+x_3+x_4=3 & r_2^{(1)} \\ 3x_2+5x_3+5x_4=13 & r_3^{(1)} \\ 4x_2+6x_3+8x_4=18 & r_4^{(1)} \end{cases}$$

第二步，消去 $r_3^{(1)}$ 和 $r_4^{(1)}$ 中的 x_2，即用

$\left(-\frac{3}{1}\right)\times r_2^{(1)}+r_3^{(1)}$ 和 $\left(-\frac{4}{1}\right)\times r_2^{(1)}+r_4^{(1)}$ 得

$$\begin{cases} 2x_1+x_2+x_3 \quad\quad\quad =4 & r_1^{(0)} \\ \quad\quad x_2+x_3+x_4=3 & r_2^{(1)} \\ \quad\quad\quad 2x_3+2x_4=4 & r_3^{(2)} \\ \quad\quad\quad 2x_3+4x_4=18 & r_4^{(2)} \end{cases}$$

第三步，消去 $r_4^{(2)}$ 中的 x_3 ，即用 $\left(-\frac{2}{2}\right)\times r_3^{(2)}+r_4^{(1)}$ 得

$$\begin{cases} 2x_1+x_2+x_3 \qquad\qquad =4 & r_1^{(0)} \\ \qquad x_2+x_3+x_4=3 & r_2^{(1)} \\ \qquad\qquad 2x_3+2x_4=4 & r_3^{(2)} \\ \qquad\qquad\qquad 2x_4=2 & r_4^{(3)} \end{cases}$$

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 4 & \Rightarrow \quad 2x_1 + 1 + 1 = 4 \\ x_2 + x_3 + x_4 = 3 & \Rightarrow \quad x_2 + 1 + 1 = 3 \\ 2x_3 + 2x_4 = 4 & \Rightarrow \quad 2x_3 + 2 \times 1 = 4 \\ 2x_4 = 2 & \Rightarrow \quad x_4 = \frac{2}{2} = 1 \end{cases}$$

上述为回代求解过程，得解：$x = (1, 1, 1, 1)^T$。

Gauss 消去法的实质是首先通过一系列的初等行变换将增广矩阵 $(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b})$ 化成上三角增广矩阵 $(\boldsymbol{U} \mid \boldsymbol{c})$，然后通过回代求与 ***Ax*=*b*** 三角方程组 ***Ux*=*c*** 的解。

我们来观察Gauss消去法求 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的解，增广矩阵 $(\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b})$ 化成上三角矩阵 $(\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$ 的过程，如何通过矩阵的变换来实现的。首先，注意

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix} 4 \\ 11 \\ 29 \\ 30 \end{pmatrix}$$

返回

解：

$$(A\,|\,b)\xrightarrow{\text{第三次消元}}\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & 5 \end{pmatrix}=(U\,|\,c)$$

三次消元过程写成矩阵的形式分别为：

$$\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&&&\\-2&1&&\\-4&&1&\\-3&&&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&1&0\\4&3&3&1\\8&7&9&5\\6&7&9&8\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&1&1&0\\0&1&1&1\\0&3&5&5\\0&4&6&8\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{L}_2(\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A})=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&-3&1&\\&-4&&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&1&0\\0&1&1&1\\0&3&5&5\\0&4&6&8\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&1&1&0\\0&1&1&1\\0&0&2&2\\0&0&2&4\end{pmatrix}$$

$$L_3(L_2L_1A)=\begin{pmatrix}1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & -1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & 1 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 1 & 1\\ 0 & 0 & 2 & 2\\ 0 & 0 & 2 & 4\end{pmatrix}$$

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

注意单位下三角矩阵（**Gauss变换**）

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{n,k} & & & 1 \end{pmatrix}$$

有令人惊奇，而平凡的性质：

(1) L_k 的逆恰好是 L_k 本身的每一个对角线以下的元素都取相反数；即

$$L_k^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & l_{n,k} & & & 1 \end{pmatrix}$$

事实上，我们定义向量(**Gauss向量**)：

$$\boldsymbol{l}_k=\left(0\cdots 0\ \overset{\text{第}k+1\text{个分量}}{l_{k+1k}}\ \cdots\ l_{nk}\right)^T$$

则$\boldsymbol{L}_k$可写成

$$\boldsymbol{L}_k=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{l}_k\boldsymbol{e}_k^T=\begin{pmatrix}1&&&&&\\&\ddots&&&&\\&&1&&&\\&&-l_{k+1,k}&1&&\\&&\vdots&&\ddots&\\&&-l_{n,k}&&&1\end{pmatrix}$$

其中 $\boldsymbol{e}_k=\left(0\cdots 0\ \overset{\text{第}k\text{个分量}}{1}\ 0\cdots 0\right)^T$，$\boldsymbol{e}_k^T\ \boldsymbol{l}_k=0$。而

$$\left(I-l_ke_k^T\right)\left(I+l_ke_k^T\right)=I-\cancel{l_ke_k^T}+\cancel{l_ke_k^T}-l_ke_k^Tl_ke_k^T=I$$

故 L_k 的逆为：

$$L_k^{-1} = \left(I + l_k e_k^T\right) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 0 & & & \\ & & l_{k+1,k} & 0 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & l_{n,k} & & & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & l_{n,k} & & & 1 \end{pmatrix}$$

则对于例题中的单位下三角阵而言，就有：

$$L_1=\begin{pmatrix}1&&&\\-2&1&&\\-4&&1&\\-3&&&1\end{pmatrix}\qquad L_2=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&-3&1&\\&-4&&1\end{pmatrix}\qquad L_3=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&-1&1\end{pmatrix}$$

$$\Updownarrow\qquad\qquad\qquad\Updownarrow\qquad\qquad\qquad\Updownarrow$$

$$L_1^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\2&1&&\\4&&1&\\3&&&1\end{pmatrix}\qquad L_2^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&3&1&\\&4&&1\end{pmatrix}\qquad L_3^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&1&1\end{pmatrix}$$

（2）乘积矩阵$\boldsymbol{L}$恰好是它们具有的非零对角线以下元素嵌入到相应位置的单位下三角矩阵。

考虑矩阵乘积 $\boldsymbol{L}_k^{-1}\ \boldsymbol{L}_{k+1}^{-1}$

$$\boldsymbol{L}_k^{-1}\boldsymbol{L}_{k+1}^{-1} = \left(I + l_k e_k^T\right)\left(I + l_{k+1} e_{k+1}^T\right)$$

$$= I + l_k e_k^T + l_{k+1} e_{k+1}^T - l_k e_k^T l_{k+1} e_{k+1}^T = I + l_k e_k^T + l_{k+1} e_{k+1}^T$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & l_{k+1,k} & 1 & & & \\ & & l_{k+2,k} & l_{k+2,k+1} & \ddots & & \\ & & \vdots & \vdots & & 1 & \\ & & l_{n,k} & l_{n,k+1} & & & 1 \end{pmatrix}$$

当我们取所有这些矩阵乘积$\boldsymbol{L}$时，对角线下面的每处都有同样方便的性质：

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{L}_{n-1}^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn-1} & 1 \end{pmatrix}$$

这样一来，例题中的计算过程可以表示为

$$L_3 L_2 L_1 A = U$$

令

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} L_3^{-1}$$

则由性质（2），可得出L的表达式，即

$$L_1^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\2&1&&\\4&&1&\\3&&&1\end{pmatrix}\quad L_2^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&3&1&\\&4&&1\end{pmatrix}\quad L_3^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&1&1\end{pmatrix}$$

$$L=L_1^{-1}L_2^{-1}L_3^{-1}=\begin{pmatrix}1&&&\\&1&&\\&&1&\\&&&1\end{pmatrix}$$

从而有

$$= \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 3 & 1 \\ 8 & 7 & 9 & 5 \\ 6 & 7 & 9 & 8 \end{pmatrix}$$

$$A$$

定义2.1 设A为n阶方阵，如果存在n阶单位下三角矩阵L和n阶上三角矩阵U，使得

$$A = LU$$

则称其为矩阵A的LU分解，也称 **Doolittle分解**。

Doolittle方法求解线性方程组：

$$AX = B \Leftrightarrow (LU)X = B$$

$$\Updownarrow$$

$$\begin{cases} LY = B \\ UX = Y \end{cases}$$

其中A，X，B，Y均为矩阵

练习题 用**Gauss**消去法求解如下方程组，并求***A***的***LU***分解。

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 10 & -7 & 0 \\ 5 & -1 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \\ 6 \end{pmatrix}$$

解:

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 & 4 \\ 10 & -7 & 0 & 7 \\ 5 & -1 & 5 & 6 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{消元}} \begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 & 4 \\ 0 & \dfrac{-1}{3} & 20 & \dfrac{61}{3} \\ 0 & \dfrac{7}{3} & 15 & \dfrac{38}{3} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{消元}} \begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 & 4 \\ 0 & \dfrac{-1}{3} & 20 & \dfrac{61}{3} \\ 0 & 0 & 115 & 115 \end{pmatrix}$$

从而求得方程组解：$x_1 = 0$，$x_2 = -1, x_3 = 1$。

已知

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{10}{3} & 1 & 0 \\ \frac{5}{3} & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 7 & 1 \end{pmatrix} \quad U = \begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 0 & \frac{-1}{3} & 20 \\ 0 & 0 & 115 \end{pmatrix}$$

从而

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{10}{3} & 1 & 0 \\ -\frac{5}{3} & -7 & 1 \end{pmatrix}$$

那么, 得到 $A = LU$

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 10 & -7 & 0 \\ 5 & -1 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{10}{3} & 1 & 0 \\ -\frac{5}{3} & -7 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 0 & \frac{-1}{3} & 20 \\ 0 & 0 & 115 \end{pmatrix}$$

练习题 求A的LU分解，并用于求解如下方程组。

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 10 & -7 & 0 \\ 5 & -1 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \\ 6 \end{pmatrix}$$

解：注意到

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{10}{3} & 1 & 0 \\ \frac{5}{3} & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 10 & -7 & 0 \\ 5 & -1 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 0 & \frac{-1}{3} & 20 \\ 0 & \frac{7}{3} & 15 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 7 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 0 & \frac{-1}{3} & 20 \\ 0 & \frac{7}{3} & 15 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 0 & \frac{-1}{3} & 20 \\ 0 & 0 & 115 \end{pmatrix}$$

那么, 得到 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU}$

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 10 & -7 & 0 \\ 5 & -1 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\dfrac{10}{3} & 1 & 0 \\ -\dfrac{5}{3} & -7 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 0 & \dfrac{-1}{3} & 20 \\ 0 & 0 & 115 \end{pmatrix}$$

从而解下三角方程组：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\dfrac{10}{3} & 1 & 0 \\ -\dfrac{5}{3} & -7 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 7 \\ 6 \end{pmatrix}$$

得方程组解：$y_1 = 4$，$y_2 = \dfrac{61}{3}$，$y_3 = 115$。

再解上三角方程组：

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 0 & \frac{-1}{3} & 20 \\ 0 & 0 & 115 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ \frac{61}{3} \\ 115 \end{pmatrix}$$

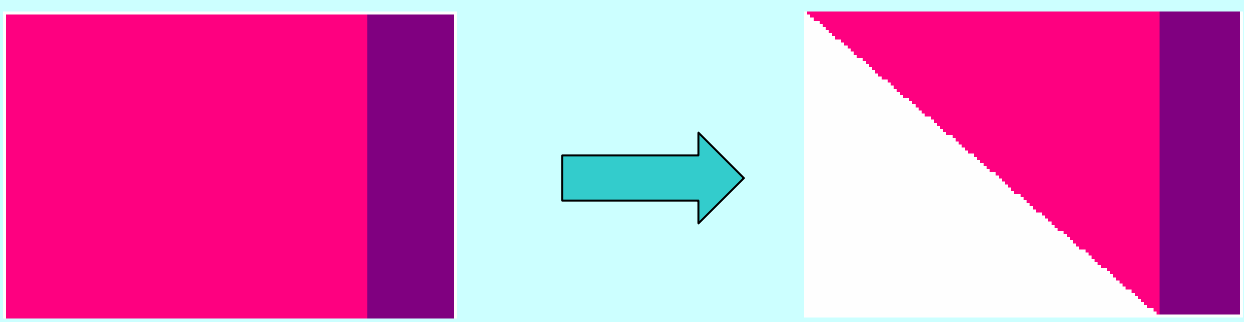
从而求得方程组解：$x_1 = 0$，$x_2 = -1, x_3 = 1$。

对一般n阶线性方程组进行**Gauss**消元求解：

思路

将（$\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}$）上三角化；

回代求解出$\boldsymbol{x}$。



具体步骤如下：

第一步，第1行$\times\left(-\dfrac{a_{i1}}{a_{11}}\right)+$第$i$行，$\quad i=2,\cdots,n$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

运算量：$(\boldsymbol{n}-1)\times(1+\boldsymbol{n})$

第二步： 第2行$\times\left(\dfrac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}\right)+$第$i$行，$i=3,\cdots,n$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

运算量： $(n\text{-}2)\times(1+n-1)=(n\text{-}2)n$

类似的做下去，我们有：

第k步：第k行$\times\left(-\dfrac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}\right)+$第$i$行，$i=k+1,\cdots,n$

运算量：$(n-k)\times(1+n-k+1)=(n-k)(n-k+2)$

$n-1$步以后，我们可以得到变换后的矩阵为：

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n-1)} & b_n^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

因此，总的运算量为：

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+2)$$

加上解上述上三角阵的运算量 (**n+1**) **n/2**，

总共为：

$$\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3}$$

当n较大时，它和　　　　同阶的。

注意到，计算过程中$a_{kk}^{(k-1)}$处在被除的位置，因此整个计算过程要保证它不为0。所以，**Gauss消元法的可行条件**为：

$$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$$

而这一条件的等价条件是要求**A**的各阶顺序主子式均不为0，即

$$\det\left(\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{bmatrix}\right) \neq 0, \quad i = 1, \cdots, n.$$

证明

因此，有些有解的问题，不能用**Gauss**消元求解。

另外，如果某个 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$ 很小的话，也会引起大的误差。

于是便有了——

返回本节

如果 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0,\ k=1,2,\cdots,n-1$ ，则 $\boldsymbol{A}$ 一定可作 $\boldsymbol{LU}$ 分解。

如何能判断出 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0,\ k=1,2,\cdots,n-1$ 呢？

如果将等式（**2-6**）两端在第k行第k列处分块，则有

$$\mathbf{A} = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} k & n-k \end{array} \\ \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_k & * \\ * & * \end{pmatrix} \end{array} = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} k & n-k \end{array} \\ \begin{pmatrix} \boldsymbol{L}_1 & 0 \\ * & \boldsymbol{L}_2^* \end{pmatrix} \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cc} k & n-k \end{array} \\ \begin{pmatrix} \boldsymbol{U}_1 & * \\ 0 & \boldsymbol{U}_2 \end{pmatrix} \end{array} = \boldsymbol{LU}$$

$$=$$

其中 $\boldsymbol{L}_1$ 为$\boldsymbol{L}$的第k阶顺序主子矩阵，它是单位下三角矩阵，$\boldsymbol{U}_1$为$\boldsymbol{U}$的第k阶顺序主子矩阵，它是一上三角矩阵，其对角元为：

$$a_{11}^{(0)}, a_{22}^{(1)}, \cdots, a_{kk}^{(k-1)}$$

因此 $\boldsymbol{A}$的第 k阶顺序主子式满足：

$$\mathrm{D}_k = \det(A_k) = \det(L_1U_1) = \det(L_1)\cdot\det(U_1)$$
$$= a_{11}^{(0)}\cdot a_{22}^{(1)}\cdots\cdots a_{kk}^{(k-1)}$$

$$\mathrm{D}_{k-1} = a_{11}^{(0)}\ a_{22}^{(1)}\cdots a_{k-1k-1}^{(k-2)}$$

由此可得，如果规定 $\mathrm{D}_0=1$，则有

$$a_{kk}^{(k-1)} = \frac{\mathrm{D}_k}{\mathrm{D}_{k-1}}\quad ,\ k=1,2,\ldots,n-1 \qquad \textbf{(2-7)}$$

综合上述结果得到如下定理

定理2.1（矩阵LU分解的存在和唯一性）

如果n阶矩阵A的各阶顺序主子式 $\mathrm{D}_k(k=1,2,\cdots,n)$ 均不为零，则必有单位下三角矩阵L和上三角矩阵U，使得 $A=LU$，而且L和U是唯一存在的。

2.1.2 Gauss列主元消去法 与 带列主元的LU分解

1. Gauss列主元消去法

在Gauss的第k步消元过程中，元素 $a_{kk}^{(k-1)}$ 起着非常关键的作用，我们称其为主元。 看下面的例子，

（1）
$$\begin{pmatrix} 0 & 3 & -1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 2 & -2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix}$$

其中 $a_{11}=0\,,l_{21}=\dfrac{1}{0}$，上溢，计算不可行。而 $\det(\boldsymbol{A})=16\neq 0$ 其解存在且唯一。

（2） 数值计算中，应尽量避免小数作除数，下面的例子说明小主元对解的影响。

例2 在一台八位十进制的计算机上，用**Gauss**消去法解线性方程组

$$\begin{pmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 \\ -2 & 1.072 & 5.643 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

解：在八位十进制的计算机上，经过两次消元有

$$(A \mid b) \xrightarrow{\text{第三次消元}} \begin{pmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 0.2\times10^{9} & 0.3\times10^{9} & 0.1\times10^{9} \\ 0 & 0.4\times10^{9} & 0.6\times10^{9} & 0.2\times10^{9} \end{pmatrix} = (U \mid c)$$

显然 $(U \mid c)$有无穷多解。但实际上$\det(A) \neq 0$，线性方程组有唯一解。

因此在计算过程中的舍入误差使解的面目全非了，这些均是由于小主元作除数所致。

Gauss列主元消去法:

为避免小主元作除数、或0作分母 在**Gauss**消去法，中增加选主元的过程，即在第$\boldsymbol{k}$步 $(k=1,2,\cdots,n-1)$ 消元时，首先在第k列主对角元以下（含主对角元）元素中挑选绝对值最大的数，并通过初等行交换，使得该数位于主对角线上，然后再继续消元。

称该绝对值最大的数为列主元。

将在消元过程中，每一步都按列选主元的Gauss消去法称之为Gauss列主元消去法。

例3　用**Gauss**列主元消去法解例2中的方程组。

解： $(\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b}) = \begin{pmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \end{pmatrix}$

$$\xrightarrow[\text{第一次消元}]{\text{选列主元 } r_1\leftrightarrow r_2} \cdots \xrightarrow{\text{第二次消元}} \begin{pmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ 0 & 0.3176\times 10 & 0.1801500\times 10 & 0.5 \\ 0 & 0 & 0.1865561\times 10 & 0.6851854 \end{pmatrix} = (\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$$

用回代法求 $(\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$ 得数值解为：

$$\tilde{\boldsymbol{x}} = (-0.49105820,\ \ -0.05088607,\ \ 0.36725739)^T$$

方程组的精确解为：

$$\boldsymbol{x} = (-0.491058227,\ -0.050886075,\ 0.367257384)^T$$

2. 带列主元的*LU*分解

由上述Gauss列主元消去过程可以得到矩阵的带有列选主元的*LU*分解，还是以例1中的系数矩阵*A*为例来说明。

回忆

L_3:

$$= U$$

实际上，上述过程可以表示为

$$L_3 P_3 L_2 P_2 L_1 P_1 A = U$$

显然，$L_3 P_3 L_2 P_2 L_1 P_1$ 似乎并不是一个单位下三角矩阵。我们将上式改写为

$$L_3 P_3 L_2 P_3^{-1} P_3 P_2 L_1 P_2^{-1} P_3^{-1} P_3 P_2 P_1 A = U$$

进一步

$$L_3 (P_3 L_2 P_3^{-1})(P_3 P_2 L_1 P_2^{-1} P_3^{-1})(P_3 P_2 P_1) A = U$$

由 $\boldsymbol{P}_i$ 的定义知 $\boldsymbol{P}_i^{-1}=\boldsymbol{P}_i$, 即

$$\boldsymbol{P}_1=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}=\boldsymbol{P}_1^{-1}\qquad \boldsymbol{P}_2=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\end{pmatrix}=\boldsymbol{P}_2^{-1}$$

$$\boldsymbol{P}_3=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}=\boldsymbol{P}_3^{-1}$$

从而，记

$$\tilde{L}_2 = P_3 L_2 P_3 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & \frac{2}{7} & 1 & \\ & \frac{3}{7} & & 1 \end{pmatrix} \qquad L_2 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & \frac{3}{7} & 1 & \\ & \frac{2}{7} & & 1 \end{pmatrix}$$

$$\tilde{L}_1 = P_3 P_2 L_1 P_2 P_3 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -\frac{3}{4} & 1 & & \\ -\frac{1}{2} & & 1 & \\ -\frac{1}{4} & & & 1 \end{pmatrix} \qquad L_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -\frac{1}{2} & 1 & & \\ -\frac{1}{4} & & 1 & \\ -\frac{3}{4} & & & 1 \end{pmatrix}$$

显然, $\tilde{L}_2$和 $\tilde{L}_1$ 分别与 L_2和 L_1结构相同，只是下三角部分的元素进行相应的对调。从而有

$$L_3(P_3L_2P_3^{-1})(P_3P_2L_1P_2^{-1}P_3^{-1})(P_3P_2P_1)A = U$$

$$\Updownarrow$$

$$L_3\tilde{L}_2\tilde{L}_1(P_3P_2P_1)A = \tilde{U}_1^{-1}\tilde{L}_2^{-1}L_3^{-1}$$

令

$$P = P_3P_2P_1,\quad L = \tilde{L}_1^{-1}\tilde{L}_2^{-1}L_3^{-1}$$

则有

$$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}_3\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{L}=\tilde{\boldsymbol{L}}_1^{-1}\tilde{\boldsymbol{L}}_2^{-1}\boldsymbol{L}_3^{-1}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\\frac{3}{4}&1&0&0\\\frac{1}{2}&-\frac{2}{7}&1&0\\\frac{1}{4}&-\frac{3}{7}&\frac{1}{3}&1\end{pmatrix}$$

这样，我们得到另一种形式的矩阵分解：

$$\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LU}$$

$$\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&1&0\\4&3&3&1\\8&7&9&5\\6&7&9&8\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\\frac{3}{4}&1&0&0\\\frac{1}{2}&-\frac{2}{7}&1&0\\\frac{1}{4}&-\frac{3}{7}&\frac{1}{3}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}8&7&9&5\\0&\frac{7}{4}&\frac{9}{4}&\frac{17}{4}\\0&0&-\frac{6}{7}&-\frac{2}{7}\\0&0&0&\frac{2}{3}\end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{P}$ $\boldsymbol{A}$ $\boldsymbol{L}$ $\boldsymbol{U}$

一般地, 如果A为n阶方阵，进行**Gauss**列主元消去过程为：

$$\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}$$

类似的，可以改写成：

$$(\boldsymbol{L}_{n-1}\tilde{\boldsymbol{L}}_{n-2}\cdots\tilde{\boldsymbol{L}}_2\tilde{\boldsymbol{L}}_1)(\boldsymbol{P}_{n-1}\cdots\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1)\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}$$

其中，$\tilde{L}_k = P_{n-1}\cdots P_{k+1}L_k P_{k+1}\cdots P_{n-1}$（$k$=1,2,…,$n$−2）与$L_k$的结构相同，只是下三角部分元素经过了对调。因此，令

$$L = (L_{n-1}\tilde{L}_{n-2}\cdots\tilde{L}_2\tilde{L}_1)^{-1} \quad P = P_{n-1}\cdots P_2 P_1$$

则

$$PA = LU$$

定理2.2 对任意n阶矩阵A，均存在置换矩阵P、单位下三角矩阵L和上三角矩阵U，使得

$$PA = LU$$

例 用Gauss列主元消去法解如下方程组并给出 ***PA=LU***分解。

解:

$$(\boldsymbol{A}\,|\,\boldsymbol{b})=\begin{pmatrix}0 & -6 & -1 & -2\\ 1 & 2 & 2 & 4\\ 2 & -2 & 1 & 1\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{选列主元，交换第1和第三行}}\begin{pmatrix}2 & -2 & 1 & 1\\ 1 & 2 & 2 & 4\\ 0 & -6 & -1 & -2\end{pmatrix}\rightarrow\cdots=(\boldsymbol{U}\,|\,\boldsymbol{c})$$

用回代法求的解得：

$$x_3=\frac{5}{2},\quad x_2=\frac{-2+\frac{5}{2}}{-6}=-\frac{1}{12},\quad x_1=-\frac{5}{6}。\text{即 } \boldsymbol{x}=\left(-\frac{5}{6},-\frac{1}{12},\frac{5}{2}\right)^T。$$

下面求相应的$\boldsymbol{PA}=\boldsymbol{LU}$分解

第一次选列主元，交换第1行和第3行，左乘置换矩阵$\boldsymbol{P}_1$

$$\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-6&-1\\1&2&2\\2&-2&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2&-2&1\\1&2&2\\0&-6&-1\end{pmatrix}$$

第一次消元，用$\boldsymbol{L}_1$左乘$(\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{A})$，即

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 0 & -6 & -1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 0 & 3 & \frac{3}{2} \\ 0 & -6 & -1 \end{pmatrix}$$

第二次选列主元，交换第2行和第3行，即左乘置换矩阵$\boldsymbol{P}_2$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 0 & 3 & \frac{3}{2} \\ 0 & -6 & -1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 0 & -6 & -1 \\ 0 & 3 & \frac{3}{2} \end{pmatrix}$$

第二次消元，用L_2左乘($P_2L_1P_1A$)，即

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 0 & -6 & -1 \\ 0 & 3 & \frac{3}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 0 & -6 & -1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = U$$

注意：

$$\tilde{L}_1 = P_2L_1P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

则分解应为：

$$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&-6&-1\\1&2&2\\2&-2&1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\\frac{1}{2}&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&-\frac{1}{2}&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&-2&1\\0&-6&-1\\0&0&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

即有: $$PA = LU$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -6 & -1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 2 & -2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & -2 & 1 \\ 0 & -6 & -1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

练习题 用列主元Gauss消去法解如下方程组，并利用得到的上三角矩阵求出det$(\boldsymbol{A})$的值。

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 \\ 10 & -7 & 0 \\ 5 & -1 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 4 \\ 7 \\ 6 \end{pmatrix}$$

解:

$$\begin{pmatrix} -3 & 2 & 6 & 4 \\ 10 & -7 & 0 & 7 \\ 5 & -1 & 5 & 6 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ -3 & 2 & 6 & 4 \\ 5 & -1 & 5 & 6 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{消元}} \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & -\frac{1}{10} & 6 & \frac{61}{10} \\ 0 & \frac{5}{2} & 5 & \frac{5}{2} \end{pmatrix}$$

返回本节

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & \frac{5}{2} & 5 & \frac{5}{2} \\ 0 & -\frac{1}{10} & 6 & \frac{61}{10} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{消元}} \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & \frac{5}{2} & 5 & \frac{5}{2} \\ 0 & 0 & \frac{31}{5} & \frac{31}{5} \end{pmatrix}$$

从而求得方程组解：$x_1 = 0$，$x_2 = -1, x_3 = 1$。

又，

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

而一般情形下，$\det(\boldsymbol{P}) = (-1)^k$，其中$k$为交换次数，这里$k$=2。

那么 $\det(\boldsymbol{PA}) = \det(\boldsymbol{LU}) = 10 \times \frac{5}{2} \times \frac{31}{5} = 155$，则 $\det(\boldsymbol{A}) = 155$

2.1.3 对称矩阵的Cholesky分解

正定（半正定）对称矩阵的定义和某些性质：

$\boldsymbol{A}$为半正定对称矩阵，对任何$\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^n$，$(\boldsymbol{Ax}, \boldsymbol{x})\geqslant 0$。

$\boldsymbol{A}$为正定对称矩阵，如果$\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}\in\mathbf{R}^n$，恒有$(\boldsymbol{Ax}, \boldsymbol{x})>0$。

$\boldsymbol{A}$为正定(半正定)对称矩阵$\Longleftrightarrow$ $\boldsymbol{A}$的特征值为正（非负）。

$\boldsymbol{A}$为正定(半正定)对称矩阵$\Longleftrightarrow$$\boldsymbol{A}$的各阶顺序主子式为正（非负）。

大家已经知道，对于一般方阵，为了消除$\boldsymbol{LU}$分解的局限性和误差得过分积累，而采用选主元的方法。但对于对称正定矩阵而言，选主元却是完全不必要的。

Cholesky分解法又叫平方根法，是求解对称正定线性方程组最常用的方法之一。

将对称正定阵 A 做 LU 分解，得到L和U，进一步

$$U=\begin{pmatrix} & & u_{ij} \\ & \ddots & \\ & & \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} u_{11} & & \\ & u_{22} & \\ & & \ddots \\ & & & u_{nn}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & & * \\ & 1 & \\ & & \ddots \\ & & & 1\end{pmatrix}\overset{\text{记为}}{=\!=} D\tilde{U}$$

即 $A=L(D\tilde{U})$，由A 对称，得 $L(D\tilde{U})=\tilde{U}^T(DL^T)$

由A 的LU分解的唯一性 $\longrightarrow$ $L=\tilde{U}^T$ 即 $A=LDL^T$

记 $D^{1/2}=\begin{pmatrix}\sqrt{u_{11}} & & \\ & \sqrt{u_{22}} & \\ & & \ddots \\ & & & \sqrt{u_{nn}}\end{pmatrix}$ 则 $\tilde{L}=LD^{1/2}$ 是下三角矩阵

对称正定阵的分解为：

$$\boxed{A=\tilde{L}\tilde{L}^T}$$

定理2. 3（Cholesky分解）

对任意n阶对称正定矩阵 A，均存在下三角矩阵L 使 $A=LL^T$ 成立，称其为对称正定矩阵A的Cholesky分解。进一步地，如果规定 L 的对角元为正数，则L是唯一确定的。

因此，若线性方程组$Ax=b$的系数矩阵是对称正定的， 则我们自然可以按如下的步骤求其解：

（1）求A的Cholesky分解：$A=LL^T$；

（2）求解：$Ly=b$ 得 y；

（3）求解：$L^Tx=y$ 得 x；

因此，若线性方程组$Ax=b$的系数矩阵是对称正定的， 则我们自然可以按如下的步骤求其解：

（1）求A的Cholesky分解：$A=LL^T$;

（2）求解：$Ly=b$ 得 y;

（3）求解：$L^Tx=y$ 得 x;

下面研究如何进行对称正定矩阵的Cholesky分解。 当然，上述的证明过程提供一种计算Cholesky分解的方法。 我们还可以使用下面将要介绍的直接分解方法。

设

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

利用矩阵乘法规则和利用的下三角结构得到:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk} + l_{ij} l_{jj}, \quad i = j, j+1, \cdots, n$$

首先，由 $a_{11}=l_{11}^2$， $l_{11}=\sqrt{a_{11}}$。 得

再由$\boldsymbol{a_{i1}=l_{11}l_{i1}}$，得

$$l_{i1}=\frac{a_{i1}}{l_{11}},\ i=1,\cdots,n$$

这样便得到了矩阵$\boldsymbol{L}$的第一列。假定已算出$\boldsymbol{L}$的第j−1列元素，

由 $a_{jj}=\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}^2$ 得 $l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}^2\right)^{\frac{1}{2}}$

再由 $a_{ij}=\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{jk}+l_{ij}l_{jj}$， 得 $l_{ij}=\left(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{jk}\right)/l_{jj}$

$$i=j+1,\ j+2,\ \cdots,n$$

用平方根法解线性代数方程组的算法

（1）对矩阵**A**进行**Cholesky**分解，即 $\boldsymbol{A=LL^T}$，由矩阵乘法：

对于 $j=1, 2, \cdots, n$ 计算

$$l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}^2\right)^{\frac{1}{2}}\quad（2\text{-}15），\quad l_{ij}=\left(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{jk}\right)/l_{jj}\quad（2\text{-}16）$$

$$i=j+1,\ \ j+2, \cdots, n$$

计算次序为：

$$l_{11}, l_{21}, \cdots, l_{n1},\ l_{22}, l_{32}, \cdots, l_{n2}, \cdots, l_{nn}。$$

（2）求解下三角形方程组

$$y_1 = b_1 / l_{11}, \quad y_i = \left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \right) / l_{ii}, \qquad (2\text{-}18)$$

$$i = 2, 3, \cdots, n$$

（3）求解$\boldsymbol{L}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$

$$x_n = y_n / l_{nn}, \quad x_i = \left(y_i - \sum_{k=i+1}^{n} l_{ki} x_k \right) / l_{ii}, \qquad (2\text{-}19)$$

$$i = n-1, n-2, \cdots, 1$$

由

$$l_{jj}=\left(a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

得 $a_{jj}=\sum_{k=1}^{j}l_{jk}^2$，由此推出 $\left|l_{jk}\right|\le\sqrt{a_{jj}}$ ，k=1, 2, ⋯, j。

因此在分解过程中$\boldsymbol{L}$元素的数量级不会增长，故平方根法通常是数值稳定的，不必选主元。

由于$\boldsymbol{A}$的元素a_{ij}被用来计算出l_{ij}后不再使用，所以可将$\boldsymbol{L}$的元素存储在$\boldsymbol{A}$的对应位置上。

容易算出平方根法的运算量，仅是**Gauss**消去法的一半。

注意公式（2-16）

$$l_{jj} = \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

用平方根法解对称正定线性代数方程组时，计算$\boldsymbol{L}$ 的对角元素l_{jj}需要开方运算。 为了避免开方，我们可求$\boldsymbol{A}$ 的如下形式的分解，

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^T$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 是单位下三角矩阵，$\boldsymbol{D}$ 是对角元素均为正数的对角矩阵。这一分解称作$\boldsymbol{LDL}^T$分解，它是**Cholesky**分解的变形。

例4 用Cholesky方法解线性方程组$Ax=b$, 其中

$$A=\begin{pmatrix}4 & -1 & 1\\ -1 & 4.25 & 2.75\\ 1 & 2.75 & 3.5\end{pmatrix}\qquad b=\begin{pmatrix}4\\ 6\\ 7.25\end{pmatrix}$$

解： 显然$A^T=A$, 且 $D_1=4>0$, $D_2=16>0$, $D_3=16>0$。因此，A为对称正定矩阵，故存在 $A=LL^T$。由分解公式（2-15）和(2-16)依次计算出L的诸元素：

$$l_{11}=\sqrt{a_{11}}=\sqrt{4}=2,\qquad l_{21}=\frac{a_{21}}{l_{11}}=-0.5,\qquad l_{31}=\frac{a_{31}}{l_{11}}=0.5,$$

$$l_{22}=\sqrt{a_{22}-l_{21}^2}=\sqrt{4.25-0.5^2}=2,\qquad l_{32}=\frac{a_{12}-l_{31}l_{21}}{l_{11}}=0.5\times(2.75+0.5^2)=1.5,$$

$$l_{33}=\sqrt{a_{33}-l_{31}^2-l_{32}^2}=\sqrt{3.5-0.5^2-1.5^2}=1$$

返回本节

从而得

$$L=\begin{pmatrix} 2 & & \\ -0.5 & 2 & \\ 0.5 & 1.5 & 1 \end{pmatrix}$$

再利用（2-18）求下三角方程组**Ly=b**的解，即得

$$y_1=\frac{b_1}{l_{11}}=\frac{4}{2}=2,\quad y_2=\frac{b_2-l_{21}\cdot y_1}{l_{22}}=\frac{6+1}{2}=3.5,$$

$$y_3=\frac{b_3-l_{31}\cdot y_1-l_{32}\cdot y_2}{l_{33}}=7.25-0.5\times2-1.5\times3.5=1,\quad \boldsymbol{y}=(2,,3.5,1)^T。$$

再利用（2-19）求上三角方程组**L**^{T}**x=y**的解，即得

$$x_3=\frac{y_3}{l_{33}}=\frac{1}{1}=1,\quad x_2=\frac{y_2-l_{32}\cdot x_2}{l_{22}}=\frac{3.5-1.5}{2}=1,$$

$$x_1=\frac{y_1-l_{21}\cdot x_2-l_{31}\cdot x_3}{l_{11}}=0.5\times(2+0.5-0.5)=1,\quad \boldsymbol{x}=(1,1,1)^T。$$

2.1.4 三对角矩阵的三角分解

设三对角矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

如果矩阵***A***可以进行***LU***分解***A=LU***, 其中

$$\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & \ddots & & \\ & & \ddots & 1 & \\ & & & l_n & 1 \end{pmatrix},\quad \boldsymbol{U}=\begin{pmatrix} u_1 & d_1 & & & \\ & u_2 & d_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & u_{n-1} & d_{n-1} \\ & & & & u_n \end{pmatrix}$$

利用矩阵乘法规则得到：

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & & & \\
a_2 & b_2 & c_2 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 & & & a_n & b_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
1 & & & & \\
l_2 & 1 & & & \\
 & l_3 & \ddots & & \\
 & & \ddots & 1 & \\
 & & & l_n & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
u_1 & d_1 & & & \\
 & u_2 & d_2 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & u_{n-1} & d_{n-1} \\
 & & & & u_n
\end{pmatrix}
$$

$$
=
\begin{pmatrix}
u_1 & d_1 & & & \\
l_2u_1 & l_2d_1+u_2 & d_2 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & l_{n-1}u_{n-22} & l_{n-1}d_{n-2}+u_{n-1} & d_{n-1} \\
 & & & l_nu_{n-1} & l_nd_{n-1}+u_n
\end{pmatrix}
$$

追赶法解三对角形方程组的算法：

（1）对矩阵**A**进行***LU***分解，公式如下：

$$\begin{cases} d_i = c_i, & i = 1,2,\cdots,n-1 \\ u_1 = b_1 & \\ l_i = a_i / u_{i-1}, & i = 2,3,\cdots,n \\ u_i = b_i - l_i c_{i-1}, & i = 2,3,\cdots,n \end{cases} \qquad (2\text{-}22)$$

计算次序是：

$$u_1 \to l_2 \to u_2 \to l_3 \to u_3 \to \cdots \to l_n \to u_n$$

（2）求解下三角形方程组***Ly=f***

$$y_1 = f_1, \quad y_i = f_i - l_i y_{i-1}, \quad i = 2, 3, \cdots, n \qquad (2\text{-}23)$$

（3）求解上三角形方程组$\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$

$$x_n = y_n / u_n, \quad x_i = (y_i - c_i x_{i+1}) / u_i, \qquad (2\text{-}24)$$

$$i = n-1, n-2, \cdots, 1$$

定理2.4 设具有三对角形式的矩阵$\boldsymbol{A}$，满足条件

(1) $|b_1| > |c_1| > 0$

(2) $|b_n| > |a_n| > 0$

(3) $|b_i| \geq |a_i| + |c_i|, \; a_i c_i \neq 0, \; i = 2, 3, \cdots n-1$

则方程组$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{f}$可用追赶法，且解存在唯一。

证 由（2-22）**和条件**（1）**知**，$u_1 = b_1 \neq 0$ 且有 $0 < \left|\frac{c_1}{u_1}\right| < 1$。

下面用归纳法证明 $u_i \neq 0$，且有 $0 < \left|\frac{c_i}{u_i}\right| < 1,\ i = 2,3,\cdots,n-1$。

假设 $u_{i-1} \neq 0,\ 0 < \left|\frac{c_{i-1}}{u_{i-1}}\right| < 1$，从（**2-22**）和条件（**3**），知

$$|u_i| = |b_i - l_i c_{i-1}| \geq |b_i| - |a_i|\left|\frac{c_{i-1}}{u_{i-1}}\right| > |b_i| - |a_i| \geq |c_i| > 0$$

$$i = 2,3,\cdots,n-1$$

故 $u_i \neq 0,\ 0 < \left|\frac{c_i}{u_i}\right| < 1,\ i = 2,3,\cdots,n-1$。

再应用条件（**2**），得

$$|u_n| = |b_n - l_n c_{n-1}| \geq |b_n| - |a_n|\left|\frac{c_{n-1}}{u_{n-1}}\right| > |b_n| - |a_n| > 0。$$

从而可得 $\det(\boldsymbol{A})=\det(\boldsymbol{L})\det(\boldsymbol{U})=u_1u_2\cdots u_n\neq 0,$

故方程组 ***Ax=f*** 的解存在唯一。又因为

$$|u_i|=|b_i-l_ic_{i-1}|\ \le |b_i|+|a_i|\left|\frac{c_{i-1}}{u_{i-1}}\right|<|b_i|+|a_i| \quad i=2,3,\cdots,n$$

于是有

$$|b_i|-|a_i|<|u_i|<|b_i|+|a_i|,\ \text{且}\quad d_i=c_i,\ |l_i|=\left|\frac{a_i}{u_{i-1}}\right|,\ i=2,3,\ldots,n$$

即追赶法计算过程中的中间数有界，不会产生大的变化，从而说明它通常是数值稳定的。

定理条件中有$a_i c_i \neq 0$，如果有某个$a_i = 0$或$c_i = 0$，则可化成低阶方程组求解。

追赶法公式简单，计算量和存储量都小。整个求解过程仅须5$\boldsymbol{n}$−4次乘除和3($\boldsymbol{n}$−1)次加减运算，总共计8$\boldsymbol{n}$−7次运算。仅需4个一维数组存储向量$\boldsymbol{c}, \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$和 $\boldsymbol{f}$

其中 $\boldsymbol{d}_i, \boldsymbol{l}_i, \boldsymbol{u}_i$和$\boldsymbol{x}_i$分别存在数组$\boldsymbol{c}, \boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$和 $\boldsymbol{f}$ 中 当$\boldsymbol{A}$对角。占优时，追赶法通常数值稳定。

例 用追赶法解线性方程组***Ax*=*b***，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}4 & -1 & 0\\ -1 & 4 & -1\\ 0 & -1 & 4\end{pmatrix}\qquad \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}1\\ 2\\ 3\end{pmatrix}$$

解 利用公式（2-22），$d_i=c_i=-1$。依次计算出 u_1,l_2,u_2,l_2,u_3,l_3 诸元素：

$$b_1=u_1=4,\ l_2=\frac{a_2}{u_1}=0.25,\ u_2=b_2-l_2c_1=4-(-0.25)\times(-1)=3.75$$

$$l_3=\frac{a_3}{u_2}=\frac{-1}{3.75}=-0.2667,\quad u_3=b_3-l_3c_2=4-0.2667=3.7331$$

$$\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ -0.25 & 1 & 0\\ 0 & -0.2667 & 1\end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{U}=\begin{pmatrix}4 & -1 & 0\\ 0 & 3.75 & -1\\ 0 & 0 & 3.7333\end{pmatrix}$$

再利用（**2-23**），求下三角线性方程组***Ly*=*b***的解，即得

$$y_1=1，\ y_2=f_2-l_2\cdot y_1=3+0.25=3.25，$$

$$y_3=f_3-l_3\cdot y_2=2+0.2667\times 3.25=2.8667，$$

$$\boldsymbol{y}=(1,3.25,\ 2.8667)^T。$$

再利用（**2-24**）求上三角线性方程组***Ux*=*y***的解，即得

$$x_3=\frac{y_3}{u_3}=0.7679，\quad x_2=\frac{y_2-c_2\cdot x_3}{u_2}=1.0714，$$

$$x_1=\frac{y_1-c_1\cdot x_2}{u_1}=0.5179，\quad \boldsymbol{x}=(0.7679,1.0714,\ 0.5179)^T。$$

返回本节