3.3 三 角 分 解

定义3.3.1 （三角矩阵）设矩阵$A=[a_{ij}]\in\mathbb{C}^{n\times n}$，若$A$的对角线上（下）方的元素全为零，即$\forall i<j$，$a_{ij}=0$（$\forall i>j$，$a_{ij}=0$），则称矩阵$A$为**下（上）三角矩阵**. 通常将下三角矩阵和上三角矩阵统称为**三角矩阵**. 进一步，将对角线元素全为正实数的三角矩阵称为**正线三角矩阵**，将对角线元素全为1的三角矩阵称为**单位三角矩阵**.

上下三角矩阵的性质：

（1）设A,B是两个n阶上(下)三角矩阵，则$A+B$也是上(下)三角矩阵；

（2）设$A=(a_{ij})$是n阶上(下)三角矩阵，则A可逆的充要条件是$a_{11}a_{22}\cdot\cdots\cdot a_{nn}\neq 0$;

（3）设A,B是两个n阶（单位）上(下)三角矩阵，则AB也是(单位)上(下)三角矩阵；

（4）设A是n阶(单位)上(下)三角矩阵且A可逆，则A^{-1}也是(单位)上(下)三角矩阵.

若方阵A可分解为

$$A = LU$$

其中, L为单位下三角矩阵, U为上三角矩阵, 则称A可三角分解或LU分解.

应用: 对于非齐次线性方程组

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

若有三角分解, 则有

$$A\boldsymbol{x} = (LU)\boldsymbol{x} = L(U\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b}$$

令$U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$, 则

$$\begin{cases} L\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b} \\ U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \end{cases}$$

问题：是否任何方阵都可以LU分解？

例1. $A=\begin{bmatrix}0 & 4 & 6\\ 0 & -3 & -5\\ 1 & -3 & -6\end{bmatrix}$，若进行$LU$分解，则

$$\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ l_{21} & 1 & 0\\ l_{31} & l_{32} & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & 4 & 6\\ 0 & u_{22} & u_{23}\\ 0 & 0 & u_{33}\end{bmatrix}$$

因此不能作LU分解.

$\boxed{\text{有些矩阵不能LU分解，但通过初等行列变换使得顺序主子式不等于0，从而实现LU分解。}}$

定理3.3.1（*LU*分解定理） 设矩阵$A=[a_{ij}]\in\mathbb{C}^{n\times n}$是非奇异矩阵，则存在唯一的单位下三角矩阵$L$和上三角矩阵$U$使得$A=LU$成立的充分必要条件是$A$的所有顺序主子式均非零，即

单位下三角、唯一

$$\Delta_i(A)=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1i} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2i} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix}\neq 0,\quad i=1,\cdots,n$$

必要性证明: 如果存在单位下三角矩阵L和上三角矩阵U使得$A=LU$. 记

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

则$|A|=|LU|=|U|=u_{11}u_{22}\cdots u_{nn}$. 因为$A$非奇异，所以$u_{\mathrm{ii}}\neq 0$. 将$A=LU$分块写成

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} L_{11} & 0 \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} \\ 0 & U_{22} \end{bmatrix}$$

其中A_{11}，L_{11}，U_{11}分别为A，L，U的k阶顺序主子矩阵，于是$A_{11}=L_{11}U_{11}$.

从而$|A_{11}| = \Delta_1 = |U_{11}| = u_{11}u_{22}\cdots u_{kk} \neq 0 (k = 1,2,\cdots,n)$, 并且

$$u_{11} = a_{11}, u_{kk} = \frac{\Delta_k}{\Delta_{k-1}}, k = 2,\cdots,n.$$

充分性证明:对矩阵的阶数作归纳法证明分解式$A = LU$存在. 当矩阵的阶为1时结论显然成立. 设对$n-1$阶矩阵有分解式$A = LU$. 对n阶矩阵A, 记

$$A = \begin{bmatrix} A_{n-1} & \beta \\ \alpha & a_{nn} \end{bmatrix}$$

其中A_{n-1}为A的$n-1$阶顺序主子矩阵.

根据定理的条件, A_{n-1}是非奇异矩阵, 则有

$$\begin{bmatrix} I_{n-1} & 0 \\ -\alpha A_{n-1}^{-1} & 1 \end{bmatrix} A = \begin{bmatrix} I_{n-1} & 0 \\ -\alpha A_{n-1}^{-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{n-1} & \beta \\ \alpha & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} A_{n-1} & \beta \\ 0 & a_{nn} - \alpha A_{n-1}^{-1} \beta \end{bmatrix}$$

从而

$$A = \begin{bmatrix} I_{n-1} & 0 \\ \alpha A_{n-1}^{-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{n-1} & \beta \\ 0 & a_{nn} - \alpha A_{n-1}^{-1} \beta \end{bmatrix}$$

由归纳假设, 存在$n-1$阶单位下三角矩阵L_{n-1}和上三角矩阵U_{n-1}使得$A_{n-1} = L_{n-1} U_{n-1}$.

$$A=\begin{bmatrix} I_{n-1} & 0 \\ \alpha A_{n-1}^{-1} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} L_{n-1}U_{n-1} & \beta \\ 0 & a_{nn}-\alpha A_{n-1}^{-1}\beta \end{bmatrix}$$
$$=\begin{bmatrix} I_{n-1} & 0 \\ \alpha A_{n-1}^{-1} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} L_{n-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} U_{n-1} & L_{n-1}^{-1}\beta \\ 0 & a_{nn}-\alpha A_{n-1}^{-1}\beta \end{bmatrix}$$

令

$$L=\begin{bmatrix} I_{n-1} & 0 \\ \alpha A_{n-1}^{-1} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} L_{n-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$
$$\mathrm{U}=\begin{bmatrix} U_{n-1} & L_{n-1}^{-1}\beta \\ 0 & a_{nn}-\alpha A_{n-1}^{-1}\beta \end{bmatrix}$$

即得$A=LU$.

唯一性证明:

假设存在不同的三角分解

$$A=L_1U_1=L_2U_2$$

$$L_2^{-1}L_1=U_2U_1^{-1}$$

等式左边为下三角矩阵，对角元全是1，等式右边为上三角矩阵，故

$$L_2^{-1}L_1=U_2U_1^{-1}=\mathrm{I},\quad L_1=L_2,\quad U_1=U_2.$$

例3.3.1 求矩阵$A=\begin{bmatrix}1 & 2 & -1\\ 3 & 1 & 0\\ -1 & -1 & -2\end{bmatrix}$的$LU$分解.

A的各阶顺序主子式都不为零，存在唯一的LU分解

$$A=LU$$

分析: $[A,I]\to[U,L^{-1}]$

$$\to\begin{bmatrix}1 & 2 & -1 & 1 & 0 & 0\\ 0 & -5 & 3 & -3 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -12/5 & 2/5 & 1/5 & 1\end{bmatrix}$$

例3.3.1 求矩阵$A=\begin{bmatrix}1 & 2 & -1\\ 3 & 1 & 0\\ -1 & -1 & -2\end{bmatrix}$的$LU$分解.

注1： 非奇异上三角矩阵U可进一步分解为对角矩阵和单位上三角矩阵的乘积，即

$$\begin{bmatrix}u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n}\\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n}\\ & & \ddots & \ddots & \vdots\\ & & & u_{n-1,n-1} & u_{n-1,n}\\ 0 & \cdots & & 0 & u_{nn}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}u_{11} & & & & \\ & u_{22} & & 0 & \\ & & \ddots & & \\ & 0 & & u_{n-1,n-1} & \\ & & & & u_{nn}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & \frac{u_{12}}{u_{11}} & \frac{u_{12}}{u_{11}} & \cdots & \frac{u_{1n}}{u_{11}}\\ & 1 & \frac{u_{23}}{u_{22}} & \cdots & \frac{u_{2n}}{u_{22}}\\ & & \ddots & \ddots & \vdots\\ & 0 & & 1 & \frac{u_{n-1,n}}{u_{n-1,n-1}}\\ & & & & 1\end{bmatrix}$$

注意是单位下三角矩阵

定理3.3.2（*LDU*分解定理） 设$A = [a_{ij}] \in \mathbb{C}^{n\times n}$是非奇异矩阵，则存在唯一的单位下三角矩阵$L$，对角矩阵$D$和单位上三角矩阵$U$使得$A = LDU$成立的充分必要条件是$A$的所有顺序主子式均非零，即

$$\Delta_i(A) = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1i} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2i} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0, \quad i = 1, \cdots, n$$

分解式$A = LDU$称为矩阵A的***LDU*分解**.

注2： 定理3.3.2中对角矩阵$D = \mathrm{diag}(d_1, \cdots, d_n)$可由矩阵$A$的顺序主子式求得

$$d_1 = a_{11}$$

$$d_i = \frac{\Delta_i(A)}{\Delta_{i-1}(A)},\ \ i = 2, \cdots, n$$

注3： 若定义$\tilde{L} = LD$，矩阵A的分解为$A = \tilde{L}U$，其中，$\tilde{L}$是下三角矩阵，U是单位上三角矩阵．这是定理3.3.1的另一种表达，常称之为**Crout分解**．定理3.3.1常称之为**Doolittle分解**.

例3.3.2 求解A_1和A_2的LU分解，其中

$$A_1=\begin{bmatrix}0&1\\0&2\end{bmatrix},\quad A_2=\begin{bmatrix}0&0\\1&1\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}0&1\\0&2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0\\x&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0&1\\0&y\end{bmatrix}$$

只要$x+y=2$即可.

例3.3.2 求矩阵$A=\begin{bmatrix}0&4&6\\0&-3&-5\\1&-3&-6\end{bmatrix}$的$LU$分解.

注4： 在定理3.3.1和定理3.3.2中，矩阵A的非奇异性仅作为相应定理的已知条件，并非分解存在性的充分必要条件. 换而言之，若矩阵A是奇异矩阵且可作LU分解，但其分解是不唯一的（例3.3.2）；若矩阵A是非奇异矩阵，其LU分解可能不存在（例3.3.3）.

推理3.3.1（Cholesky分解） 若n阶实对称矩阵A是正定的，则存在唯一的正线上三角矩阵R使得$A=R^TR$.

证明：$A=LDU=U^TDL^T$

由LDU分解的唯一性，$L=U^T, U=L^T$. $R=D^{\frac{1}{2}}U$

例3.3.4 求正定矩阵$A=\begin{bmatrix}2 & 1\\1 & 2\end{bmatrix}$的Cholesky分解.

例3.3.5 求解线性方程组：

$$\begin{bmatrix}1 & -1 & 5\\1 & 2 & -1\\2 & 3 & 4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3\\0\\5\end{bmatrix}$$

【思考】：若将例3.3.5中的系数矩阵A替换为

$$A=\begin{bmatrix}0 & 4 & 6\\ 0 & -3 & -5\\ 1 & -3 & -6\end{bmatrix}$$

则根据例3.3.3知，此时无法利用LU分解求解线性方程组$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$. 但实际上，由于系数矩阵$A$是非奇异的，该方程组一定存在唯一解$\boldsymbol{x}=A^{-1}\boldsymbol{b}$. 面临矩阵$A$无法进行$LU$分解的困难，应如何处理这一问题呢？

定义3.3.2（排列矩阵） 设$\boldsymbol{e}_i$是n阶单位矩阵I的第i个列向量，则矩阵$P=[\boldsymbol{e}_{i_1},\cdots,\boldsymbol{e}_{i_n}]$称为一个$n$阶**排列矩阵**（或**置换矩阵**），其中$i_1,\cdots,i_n$是$1,\cdots,n$的一个排列.

命题3.3.1 若P是排列矩阵，则P^T和P^{-1}也是排列矩阵，且$P^T=P^{-1}$.

注5： 将矩阵A的行按照$i_1,\cdots,i_n$的次序重排，即排列矩阵$[\boldsymbol{e}_{i_1},\cdots,\boldsymbol{e}_{i_n}]$左乘矩阵$A$；将$A$的列按照$i_1,\cdots,i_n$的次序重排，即排列矩阵$[\boldsymbol{e}_{i_1},\cdots,\boldsymbol{e}_{i_n}]$右乘矩阵$A$.

引理3.3.1 设$A = [a_{ij}] \in \mathbb{C}^{n\times n}$是非奇异矩阵，则存在排列矩阵$P$使得$PA$的所有顺序主子式均非零.

例3.3.6 求解线性方程组

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

取$P = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$, 则$PA = \begin{bmatrix} 1 & -3 & -6 \\ 0 & -3 & -5 \\ 0 & 4 & 6 \end{bmatrix}$