线性方程组求解——Cholesky 分解

湘潭大学, 数学与计算科学学院, 21 级王艺博

一、问题描述

对于线性方程组

$$Ax = b, \quad A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

A 为**对称正定矩阵**，求向量 x

二、对称正定矩阵的 Cholesky 分解

(参考`https://zhuanlan.zhihu.com/p/387603571`)

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

上式可以看作，做第一步

$$\left[\begin{array}{c|c} a_{11} & A_{21}^{\mathrm{T}} \\ \hline A_{21} & A_{22} \end{array}\right] = \begin{bmatrix} l_{11} & \\ L_{21} & L_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & L_{21}^{\mathrm{T}} \\ & L_{22}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11}^2 & l_{11} L_{21}^{\mathrm{T}} \\ l_{11} L_{21} & L_{21} L_{21}^{\mathrm{T}} + L_{22} L_{22}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}$$

按顺序，求出 l_{11}, L_{21} 后，再得 $L_{22}L_{22}^T$，而 $L_{22}L_{22}^T$ 依然是对称正定的，继续按照第一步的思路进行计算。

举一个例子

$$\begin{bmatrix} 4 & 12 & -16 \\ 12 & 37 & -43 \\ -16 & -43 & 98 \end{bmatrix}$$

对这个三维矩阵做 Cholesky 分解 (手算示范)

三、算法

♡ Cholesky 分解：`[L]=Cholesky_fac(A)`

输入：系数矩阵 A

输出：下三角矩阵 L

实现过程：在原矩阵上做改变，

- for $i = 1$ to $n - 1$
- $a_{ii} = \sqrt{A_{ii}}$
- $A_{i+1:n,i} = A_{i+1:n,i} * \frac{1}{a_{ii}}$
- $A_{i+1:n,i+1:n} = A_{i+1:n,i+1:n} - A_{i+1:n,i} * A^T_{i+1:n,i}$

i = n 时，$A_{n,n} = \sqrt{A_{n,n}}$

四、北太天元源程序

Cholesky 分解

```
function [L] = Cholesky_fac(A)
   % 对称正定矩阵 的 Cholesky分解
   % A = LL'
   % 输入:
   %    A,对称正定
   % 输出:
   % 分解后的 下三角 L
   % 创建时间: 1/18/2024
   % 版本: 1.0
   n = length(A);
   for i = 1:1:n-1
       A(i,i) = sqrt(A(i,i));
       A(i+1:n,i) = A(i+1:n,i)/A(i,i);
       A(i+1:n,i+1:n) = A(i+1:n,i+1:n)-A(i+1:n,i)*A(i+1:n,i)';
   end
   A(n,n)= sqrt(A(n,n));
   L = tril(A);
end
```

将上述代码保存为 `Cholesky_fac.m` 文件。

五、数值算例

例 1

$$\begin{bmatrix} 10 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 9 & -1 & 2 & -3 \\ 2 & -1 & 7 & 3 & -5 \\ 3 & 2 & 3 & 12 & -1 \\ 4 & -3 & -5 & -1 & 15 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ -27 \\ 14 \\ -17 \\ 12 \end{bmatrix}$$

用 *Cholesky* 分解求解向量 x

```
clc,clear all;
%%
A1 = [4 12 -16;12 37 -43;-16 -43 98];
L1 = Cholesky_fac(A1)


%% 对称正定矩阵下
A2 = [10 1 2 3 4; 1 9 -1 2 -3; 2 -1 7 3 -5; 3 2 3 12 -1; 4 -3 -5 -1 15];
b = [12; -27; 14; -17; 12];
L2 = Cholesky_fac(A2)
x = back_substitution_two(L2,L2',b)


%% 对称非正定矩阵下 结果不正确
A3 = [-10 1 2 3 4; 1 -5 -1 2 -3; 2 -1 7 3 -5; 3 2 3 12 -1; 4 -3 -5 -1 15];
b = [12; -27; 14; -17; 12];
L3 = Cholesky_fac(A3) %出现虚数


x31 = back_substitution_two(L3,L3',b)

x32 = gsem_column(A3,b)
```

将上述代码保存为 `Cholesky_test.m`

运行后，对称正定矩阵下的解为

$$x = \begin{bmatrix} 1.0000 \\ -2.0000 \\ 3.0000 \\ -2.0000 \\ 1.0000 \end{bmatrix}$$

是正确的。

考虑一下对称但非正定的情况，

$$A3 = \begin{bmatrix} -10 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & -5 & -1 & 2 & -3 \\ 2 & -1 & 7 & 3 & -5 \\ 3 & 2 & 3 & 12 & -1 \\ 4 & -3 & -5 & -1 & 15 \end{bmatrix}$$

对角线上前两项变为了负，常数项 b 不变。

分别用 Cholesky 和 Gauss 列主元消去法对其进行求解:

Cholesky 下

$$L3 = \begin{bmatrix} 0.0000 + 3.1623i & 0.0000 + 0.0000i & 0.0000 + 0.0000i & 0.0000 + 0.0000i & 0.0000 + 0.0000i \\ 0.0000 - 0.3162i & 0.0000 + 2.2583i & 0.0000 + 0.0000i & 0.0000 + 0.0000i & 0.0000 + 0.0000i \\ 0.0000 - 0.6325i & 0.0000 + 0.5314i & 2.5135 + 0.0000i & 0.0000 + 0.0000i & 0.0000 + 0.0000i \\ 0.0000 - 0.9487i & 0.0000 - 0.7528i & 1.1140 + 0.0000i & 3.0483 + 0.0000i & 0.0000 + 0.0000i \\ 0.0000 - 1.2649i & 0.0000 + 1.5055i & -2.6258 + 0.0000i & 0.6097 + 0.0000i & 1.9664 + 0.0000i \end{bmatrix}$$

$$x31 = \begin{bmatrix} 8.1524 + 0.0000i \\ -23.9180 + 0.0000i \\ 23.8006 + 0.0000i \\ -6.7427 + 0.0000i \\ 16.5172 + 0.0000i \end{bmatrix}$$

发现其 Cholesky 分解出现虚数，分解失败

Gauss 列主元

$$x32 = \begin{bmatrix} 0.2250 \\ 1.6622 \\ 5.2829 \\ -2.8504 \\ 2.6434 \end{bmatrix}$$