第十讲 矩阵的三角分解

一、 Gauss 消元法的矩阵形式

n 元线性方程组

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

$$\begin{pmatrix} A = (a_{ij}) \\ x = [\xi_1, \xi_2, \cdots \xi_n]^{\mathrm{T}} \\ b = [b_1, b_2 \cdots b_n]^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}$$

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

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

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

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

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

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 $\Delta_r = a_{11}^{(0)} a_{22}^{(1)} \cdots a_{r-1r-1}^{(r-2)} a_{rr}^{r-1}$，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

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

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

$$\to A^{(r-1)} = L_r A^{(r)}$$

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

直到第（n—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

而消元法能进行下去的条件是$\Delta_r \neq 0 \quad (r=1,2,\cdots,n-1)$

二、 LU 分解与 LDU 分解

$$A=A^{(0)}=L_1A^{(1)}=L_1L_2A^{(2)}=\cdots=L_1L_2L_3\cdots L_{n-1}A^{(n-1)}$$

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

$A = LU$ （L: lower U: upper L: left R: right）

以上将 A 分解成一个单位下三角矩阵与上三角矩阵的乘积，就称为 LU 分解或 LR 分解。

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 $d_k = \Delta_k / \Delta_{k-1}$ $(k = 1, 2, \cdots, n)$ $\Delta_0 = 1$。

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 $\Delta_r \neq 0 \quad (r = 1, 2, \cdots, n)$

n 个顺序主子式全不为零的条件实际上是比较严格的，特别是在数值计算中，$a_{kk}^{(k-1)}$很小时可能会带来大的计算误差。因此，有必要采取选主元的消元方法，这可以是列主元（在$a_{kk}^{(k-1)}, a_{k+1\ k}^{(k-1)}, \cdots, a_{nk}^{(k-1)}$中选取模最大者作为新的$a_{kk}^{(k-1)}$）、行主元（在$a_{kk}^{(k-1)}, a_{kk+1}^{(k-1)}, \cdots, a_{kn}^{(k-1)}$中选取模最大者作为新的$a_{kk}^{(k-1)}$）全主元（在所有$a_{ij}^{(k-1)}$（$k \le i, j \le n$）中选模最大者作为新的$a_{kk}^{(k-1)}$）。之所以这样做，其理论基础在于对于任何可逆矩阵 A，存在置换矩阵 P 使得 PA 的所有顺序主子式全不为零。

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。

$$Ax = b$$

$$A = LU$$

$$\begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases} \leftarrow \text{两个三角形方程回代即可}$$

三、其他三角分解

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

（1） Crout 分解，设

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

由 $A=\hat{L}U$ 乘出得

（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

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

直至最后，得到的l_{ij},u_{ij}恰可排成

$$\begin{bmatrix} l_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & l_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & & l_{nn} \end{bmatrix}$$

先算列后算行

3. 厄米正定矩阵的 Cholesky 分解

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

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

具体过程如下：

$$G = \begin{bmatrix} g_{11} & & & 0 \\ g_{21} & g_{22} & & \\ \vdots & g_{32} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & & g_{nn} \end{bmatrix} \qquad G^H = \begin{bmatrix} \overline{g}_{11} & \overline{g}_{21} & & \cdots & \overline{g}_{n1} \\ & \overline{g}_{22} & \overline{g}_{32} & \cdots & \overline{g}_{n2} \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & \overline{g}_{nn} \end{bmatrix}$$

$$A = GG^H$$

则 $$\begin{cases} a_{ii} = |g_{i1}|^2 + \cdots + |g_{ii}|^2 \\ a_{ij} = g_{i1}\overline{g}_{j1} + g_{i2}\overline{g}_{j2} \end{cases} \qquad (i > j)$$

$$a_{11} = \left|g_{11}\right|^2$$

$$a_{21} = g_{21}\bar{g}_{11}$$

$$a_{31} = g_{31}\bar{g}_{11}$$

$\therefore$ 第一步 $g_{11} = a_{11}^{1/2}$

第二步 $a_{i1} = g_{i1} g_{11}$ $\quad g_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{g_{11}}$

第三步 $$g_{ij}=\begin{cases}(\mathrm{a}_{ij}-\sum_{k=1}^{i-1}\left|g_{ik}\right|^{2}) & (i=j)\\ \dfrac{1}{g_{jj}}(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}g_{ik}\overline{g}_{jk}) & (i>j)\\ 0 & (i<j)\end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} * & & & & \\ \downarrow & * & & & \\ \downarrow & \downarrow & * & & \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \ddots & \\ & & & & * \end{bmatrix}$$

作业：p195　　2、3