5.2 矩阵的三角分解

朱升峰

华东师范大学 数学科学学院

2022 年 11 月

目录

LU 分解法

把一个矩阵分解为两个三角形矩阵的乘积称为矩阵的三角分解.

下面借助矩阵理论进一步对消去法作些分析，从而建立 Gauss 消去法与矩阵分解的关系.

设方程组的系数矩阵 $\boldsymbol{A} \in \boldsymbol{R}^{n\times n}$ 的各顺序主子式均不为零，由于对 $\boldsymbol{A}$ 施行行初等变换，相当于用初等矩阵左乘 $\boldsymbol{A}$.

进行第一步消元, 即

$$\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}^{(1)} = \boldsymbol{A}^{(2)}, \quad \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{b}^{(2)}$$

其中

$$\boldsymbol{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ -m_{21} & 1 & & & \\ -m_{31} & & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & & 1 \end{pmatrix}$$

第 k 步消元，$\boldsymbol{A}^{(k)}$ 化为 $\boldsymbol{A}^{(k+1)}$,$\boldsymbol{b}^{(k)}$ 化为 $\boldsymbol{b}^{(k+1)}$, 相当于

$$\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{A}^{(k)} = \boldsymbol{A}^{(k+1)}, \quad \boldsymbol{L}_k\boldsymbol{b}^{(k)} = \boldsymbol{b}^{(k+1)}$$

其中

$$\boldsymbol{L}_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -m_{nk} & & & 1 \end{pmatrix}.$$

重复以上过程，最后得到

$$\begin{cases} \boldsymbol{L}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}^{(1)} = \boldsymbol{A}^{(n)} \\ \boldsymbol{L}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{b}^{(n)} \end{cases}$$

记 $\boldsymbol{U}=\boldsymbol{A}^{(n)}$(上三角矩阵)，则

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

其中

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{L}_{n-1}^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

为单位下三角矩阵.

$\Longrightarrow$ 高斯消去法实质上产生了一个将 $\boldsymbol{A}$ 分解为两个三角形矩阵相乘的因式分解.

定理 1 (矩阵的 LU 分解)

设 $\boldsymbol{A}$ 为 n 阶矩阵，如果 $\boldsymbol{A}$ 的顺序主子式 $D_i \neq 0 (i = 1, 2, \cdots n)$，则 $\boldsymbol{A}$ 可分解为一个单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 和一个上三角矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的乘积，且这种分解是唯一的.

例系数矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 4 & -1 \\ 2 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

由高斯消去法，$m_{21} = 0, m_{31} = 2, m_{32} = -1$, 则

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}.$$

列主元消去法

由高斯消去法知道，在消元过程中可能出现 $a_{kk}^{(k)} = 0$ 的情况，这时消去法将无法进行；即使主元 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 但很小时，用其作为除数，会导致其他元素数量级的严重增长和舍入误差的扩散，使得计算解不可靠.

- 全主元消去法
- 列主元消去法

例 求解线性方程组

$$\begin{bmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 \\ -2.000 & 1.072 & 5.643 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.000 \\ 2.000 \\ 3.000 \end{bmatrix}.$$

用 4 位浮点数进行计算. 精确解舍入到 4 位有效数字为

$$x^* = (-0.4904, -0.05104, 0.3675)^\top.$$

解 方法一: 高斯消去法求解

$$
(\boldsymbol{A} \,\vdots\, \boldsymbol{b}) = \left[\begin{array}{ccc|c} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 & 2.000 \\ -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \end{array}\right] \qquad \begin{array}{l} m_{21} = -1.000/0.001 = -1000 \\ m_{31} = -2.000/0.001 = -2000 \end{array}
$$

$$
\to \left[\begin{array}{ccc|c} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ 0 & 2004 & 3005 & 1002 \\ 0 & 4001 & 6006 & 2003 \end{array}\right] \qquad m_{32} = 4001/2004 = 1.997
$$

$$
\to \left[\begin{array}{ccc|c} 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \\ 0 & 2004 & 3005 & 1002 \\ 0 & 0 & 5.000 & 2.000 \end{array}\right]
$$

计算解为

$$
\overline{\boldsymbol{x}} = (-0.400, -0.09980, 0.4000)^{\mathrm{T}}
$$

显然计算解 $\overline{\boldsymbol{x}}$ 不能作为方程组的近似解，原因在于在消元计算时用了小主元 0.001，使得约化后的方程组元素数量级大大增长.

方法二: 交换行，避免绝对值小的主元作除数

$$(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b}) \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_3} \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 & 2.000 \\ 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \end{array}\right] \qquad \begin{aligned} m_{21} &= 0.5000 \\ m_{31} &= -0.0005 \end{aligned}$$

$$\longrightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ 0 & 3.176 & 1.801 & 0.5000 \\ 0 & 2.001 & 3.003 & 1.002 \end{array}\right] \qquad m_{32} = 0.6300$$

$$\longrightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ 0 & 3.176 & 1.801 & 0.5000 \\ 0 & 0 & 1.868 & 0.6870 \end{array}\right],$$

得计算解为

$$\boldsymbol{x} = (-0.4900, -0.05113, 0.3678)^{\mathrm{T}} \approx \boldsymbol{x}^*.$$

这个例子说明在高斯消去法中，小主元产生麻烦，故应避免采用绝对值小的主元 $a_{kk}^{(k)}$，最好每一步选取系数矩阵中绝对值最大的元素作为主元, 以使高斯消去法具有较好的数值稳定性，这就是全主元消去法，在选主元时要花费较多的机器时间，目前主要使用的是列主元消去法.

列主元消去法

假定线性方程组的系数矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbf{R}^{n\times n}$ 为非奇异的.
设线性方程组的增广矩阵为

$$\boldsymbol{B} = \left[\begin{array}{cccc:c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array}\right].$$

首先在 $\boldsymbol{A}$ 的第 1 列中选取绝对值最大的元素作为主元素, 例如

$$|a_{i_1,1}| = \max_{1\leqslant i\leqslant n} |a_{i1}| \neq 0,$$

然后交换 $\boldsymbol{B}$ 的第 1 行与第 i_1 行, 经第 1 次消元计算得

$$\left(\begin{array}{c:c} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{b} \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{c:c} \boldsymbol{A}^{(2)} & \boldsymbol{b}^{(2)} \end{array}\right)$$

重复上述过程, 设已完成第 $k-1$ 步的选主元素, 交换两行及消元计算, $\left(\begin{array}{c:c} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{b} \end{array}\right)$ 约化为

$$\left(\begin{array}{c:c} \boldsymbol{A}^{(k)} & \boldsymbol{b}^{(k)} \end{array}\right) = \left[\begin{array}{cccccc:c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ & a_{22} & \cdots & a_{2k} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ & & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk} & \cdots & a_{kn} & b_k \\ & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nk} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array}\right],$$

其中 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的元素仍记为 $a_{ij}, \boldsymbol{b}^{(k)}$ 的元素仍记为 b_i. 第 k 步选主元素 (在 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 右下角方阵的第 1 列内选), 即确定 i_k, 使

$$|a_{i_k,k}| = \max_{k\leqslant i\leqslant n} |a_{ik}| \neq 0.$$

交换 $\left(\boldsymbol{A}^{(k)}:\boldsymbol{b}^{(k)}\right)$ 第 k 行与 $i_k(k=1,2,\cdots,n-1)$ 行的元素，再进行消元计算，最后将原线性方程组化为

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

回代求解得

$$\begin{cases} x_n = b_n/a_{nn} \\ x_i = \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j\right)/a_{ii}, \quad i=n-1,\cdots,2,1 \end{cases}$$

定理 2 (列主元素的三角分解定理)

如果 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵，则存在排列矩阵 $\boldsymbol{P}$ 使

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

其中 $\boldsymbol{L}$ 为单位下三角矩阵，$\boldsymbol{U}$ 为上三角矩阵.

Doolittle 分解

一旦实现了矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 $\boldsymbol{LU}$ 分解，那么求解 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的问题就等价于求解两个三角形方程组

(1) $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{b}$, 求 $\boldsymbol{y}$;

(2) $\boldsymbol{Ux}=\boldsymbol{y}$, 求 $\boldsymbol{x}$.

设 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵, 且有分解式

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

其中 $\boldsymbol{L}$ 为单位下三角矩阵, $\boldsymbol{U}$ 为上三角矩阵, 即

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

Doolittle 分解 (直接三角分解法)

$\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{U}$ 的元素可由 n 步直接计算定出.
其中，第 r 步定出 $\boldsymbol{U}$ 的第 r 行和 $\boldsymbol{L}$ 的第 r 列元素.
由分解式，当 $r=1$ 时，
$\boldsymbol{U}$ 的第 1 行元素：

$$a_{1i} = u_{1i}, \quad i = 1, 2, \cdots, n,$$

$\boldsymbol{L}$ 的第 1 列元素：

$$a_{i1} = l_{i1} u_{11}, \quad \Rightarrow l_{i1} = a_{i1}/u_{11}, \quad i = 2, 3, \cdots, n$$

设已经定出 $\boldsymbol{U}$ 的第 1 行到第 $r-1$ 行元素与 $\boldsymbol{L}$ 的第 1 列到第 $r-1$ 列元素.
由分解式和矩阵乘法 ($r<k$ 时，$l_{rk}=0$)

$$a_{ri} = \sum_{k=1}^{n} l_{rk} u_{ki} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki} + u_{ri}$$

故

$$u_{ri} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk} u_{ki}, \quad i = r, r+1, \cdots, n.$$

又由分解式有

$$a_{ir} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik}u_{kr} = \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik}u_{kr} + l_{ir}u_{rr}.$$

总结上述讨论，得到直接三角分解法解 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$

步 1 $u_{1i} = a_{1i}(i = 1, 2, \cdots, n), \quad l_{i1} = a_{i1}/u_{11}, i = 2, 3, \cdots, n.$

步 2 计算 $\boldsymbol{U}$ 的第 r 行, $\boldsymbol{L}$ 的第 r 列元素 $(r = 2, 3, \cdots, n)$：

$$u_{ri} = a_{ri} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{rk}u_{ki}, i = r, r+1, \cdots, n \tag{1}$$

$$l_{ir} = \left(a_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} l_{ik}u_{kr}\right) \Big/ u_{rr}, i = r+1, \cdots, n, \ r \neq n. \tag{2}$$

步 3 求解 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b}$:

$$\begin{cases} y_1=b_1, \\ y_i=b_i-\sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik}y_k, i=2,3,\cdots,n; \end{cases} \tag{3}$$

步 4 求解 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$:

$$\begin{cases} x_n=y_n/u_{nn} \\ x_i=\left(y_i-\sum\limits_{k=i+1}^{n} u_{ik}x_k\right)\Big/ u_{ii}, i=n-1,n-2,\cdots,1 \end{cases} \tag{4}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的分解公式(1)(2)又称为 Doolittle 分解.

例 直接三角分解法解

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 2 \\ 3 & 1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 14 \\ 18 \\ 20 \end{bmatrix}$$

解 利用分解公式，有

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -4 \\ 0 & 0 & -24 \end{bmatrix} = \boldsymbol{LU}$$

求解

$$\boldsymbol{Ly} = (14, 18, 20)^{\mathrm{T}}, \quad 得\boldsymbol{y} = (14, -10, -72)^{\mathrm{T}},$$
$$\boldsymbol{Ux} = (14, -10, -72)^{\mathrm{T}}, \quad 得\boldsymbol{x} = (1, 2, 3)^{\mathrm{T}}.$$