矩阵的 LU 分解与应用

Dezeming Family

2021 年 7 月 22 日

DezemingFamily 系列书和小册子因为是电子书，所以可以很方便地进行修改和重新发布。如果您获得了 DezemingFamily 的系列书，可以从我们的网站 [https://dezeming.top/] 找到最新版。对书的内容建议和出现的错误欢迎在网站留言。

20210722：完成第一版。

目录

一 矩阵的 LU 分解引入

一个矩阵可以由其他多个矩阵相乘得到，我们把一个矩阵化解为多个矩阵相乘，称为矩阵的分解，例如三角分解，Jordan 分解、奇异值分解等，以及我们要讲的矩阵的 LU 分解，它将矩阵分解为一个单位下三角 L 矩阵和上三角 U 矩阵：

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ * & 1 & 0 & 0 \\ * & * & 1 & 0 \\ * & * & * & 1 \end{bmatrix} \qquad U = \begin{bmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{bmatrix} \tag{一.1}$$

LU 分解在求逆矩阵、计算行列式以及解线性方程中都有很重要的作用。

矩阵的 LU 分解的过程其实很简单，我们先找一系列的初等变换矩阵，将矩阵 A 变换为 U 矩阵，之后再把那些初等变换的逆相乘，得到 L 矩阵：

$$E_m \times ... \times E_2 \times E_1 \times A = U \tag{一.2}$$

$$L = E_1^{-1} \times E_2^{-1} \times ... \times E_m^{-1} \tag{一.3}$$

$$A = LU \tag{一.4}$$

因为 LU 分解得到的是上三角和下三角矩阵，也就是说矩阵 A 应该是满秩的矩阵。而且对于每个消元矩阵 E_i^{-1}，不能出现两行互换的作用矩阵，我举个例子，假如我们有一个矩阵 A：

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 6 \\ 0 & -2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{bmatrix} \tag{一.5}$$

然后我们对其进行包含了行交换操作的变换：

$$E_2E_1A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} A \tag{一.6}$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 4 \\ 0 & -2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 0 & -2 & 3 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \tag{一.7}$$

这样我们就得到了一个上三角矩阵，我们使用的变换矩阵 E_2 交换了第一行和第三行。

但我们得到的 $E_1^{-1}E_2^{-1}$ 为：

$$E_1^{-1}E_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{一.8}$$

并没有得到单位下三角矩阵。

但如果我们换种变换方式，不进行行列交换来得到上三角矩阵：

$$E_1A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} A = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 6 \\ 0 & -2 & 3 \\ 0 & 0 & -4 \end{bmatrix} \tag{一.9}$$

$$L = E_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{一.10}$$

二　LU 分解的步骤

现在步骤已经很明确了：首先先经过变换使得第一行的第一个元素不为 0（如果矩阵 A 第一行第一个元素为 0，就让其加上或者减去别的第一个元素不为 0 的行），例如：

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 1 & 6 & 4 \\ 3 & 2 & 2 \end{bmatrix} \Longrightarrow E_1A = \begin{bmatrix} 1 & 8 & 5 \\ 1 & 6 & 4 \\ 3 & 2 & 2 \end{bmatrix} \tag{二.1}$$

就是将第二行加到第一行上得到的第一行第一个元素不为 0 的矩阵。

然后再经过变换，使用第一行去把其他行的第一个元素都消除为 0。

$$E_1A = \begin{bmatrix} 1 & 8 & 5 \\ 1 & 6 & 4 \\ 3 & 2 & 2 \end{bmatrix} \Longrightarrow E_2AE_1A \begin{bmatrix} 1 & 8 & 5 \\ 0 & -2 & -1 \\ 0 & -22 & -13 \end{bmatrix} \tag{二.2}$$

之后我们再保证第二行的第二个元素是大于 0 的，并用第二行去把第三行到最后一行的第二个元素都消为 0。

以此类推，直到最终得到上三角矩阵即可。我们记录每次变换的逆变换，然后将逆变换相乘，即可得到最终的值。

三　矩阵 LU 分解的意义

我们在求方程组时，可以把方程组写为矩阵的形式：

$$A\boldsymbol{X} = \boldsymbol{b} \Longrightarrow \boldsymbol{X} = A^{-1}\boldsymbol{b} \tag{三.1}$$

$$LU\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \Longrightarrow L(U\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} \tag{三.2}$$

$$U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Y} \tag{三.3}$$

LU 分解的过程计算复杂度为 $O(0.5\cdot n^3)$，求 $L(\boldsymbol{Y})=\boldsymbol{b}$ 中的 $\boldsymbol{Y}$ 的计算复杂度为 $O(n^2)$，求 $U\boldsymbol{X}=\boldsymbol{Y}$ 中的 $\boldsymbol{X}$ 的计算复杂度为 $O(n^2)$，也就是总共 $O(0.5\cdot n^3)+2O(n^2)$，而直接求矩阵的逆的复杂度为 $O(2\cdot n^3)+O(n^2)$，当矩阵阶数 n 非常大的时候，LU 分解比矩阵求逆就快了很多。

而对于高斯消元法，需要使用增广矩阵（见《矩阵与方程组的解》），每次 $\boldsymbol{b}$ 更新的时候就得重新计算。LU 分解中的 L^{-1} 可以直接在生成 L 矩阵时计算出来并保存（对于单位下三角矩阵求逆也很容易）；且 U 矩阵因为是上三角矩阵，所以不需要求逆来解 $U\boldsymbol{X}=\boldsymbol{Y}$ 中的 $\boldsymbol{X}$，因此只需要保存矩阵 U 即可，然后就可以重复利用这些结果了。

$$L=E_1^{-1}E_2^{-1}...E_m^{-1} \tag{三.4}$$

$$L^{-1}=\left(E_1^{-1}E_2^{-1}...E_m^{-1}\right)^{-1}=E_m...E_2E_1 \tag{三.5}$$

注意高斯消元过程其实也是将矩阵变换为上三角矩阵的过程：$[A,\boldsymbol{b}]\longrightarrow[U,\boldsymbol{b'}]$，只是需要处理增广矩阵比较麻烦（其实也可以记录 A 生成 U 的变换矩阵 E'，然后将 E' 作用到 $\boldsymbol{b}$ 上得到 $\boldsymbol{b'}$）。

参考文献

[1] https://zhuanlan.zhihu.com/p/54943042