
概率

统计

计算

方法

肖云茹 编著

南开大学出版社



概率统计计算方法

肖云茹 编著

南开大学出版社

内 容 提 要

应用统计方法解决各种实际问题时，最终归结为数学模型的数值计算问题。本书的目的就是力求把统计推导、数值计算步骤和计算机上实现有机地结合起来，使读者掌握用统计方法解决实际问题的全过程。

全书分常用数值计算方法、基本统计计算、蒙特卡洛方法和各种统计分析方法及应用等四部分。内容深入浅出，应用实例丰富，对于培养读者应用统计方法解决实际问题的能力非常实用。

本书可供应用统计工作者参考，也可作为高等院校统计专业、计算数学专业教材。

〔津〕新登字011号

概率统计计算方法

肖云茹 编著

南开大学出版社出版

(天津八里台南开天大学校内)

邮编：300071 电话：3358542

新华书店天津发行所发行

河北省邮电印刷厂印刷

1994年2月第1版

1994年2月第1次印刷

开本：850×1168 1/32 印张：12 插页2

字数：300千

印数：1—4 000

ISBN 7-310-00578-3

O·74 定价：8.00元

前 言

统计计算 (Statistical Computing) 是统计学、计算数学与计算机科学的一门交叉学科科目。随着国民经济各个领域的深刻变化和飞速发展, 尤其是电子计算机的普遍应用, 统计计算已成为我国应用学科中很重要很实用的分支之一。

利用统计方法解决科学计算中的实际问题是很普遍的。解决任何一个与统计有关的社会学、经济学及自然科学中的实际问题, 首先要经过统计理论分析把其抽象为统计模型, 如回归模型、判别模型等。然后归纳出求解该模型的数学问题 (也叫数学模型), 例如线性方程或超定方程组求解、矩阵的特征值和特征向量的计算等等, 最后给出相应的数值计算方案。利用电子计算机实现后, 再结合实际问题给出计算精度、误差分析和必要的解释。本书的目的就是力求把统计推导、数值计算步骤和计算机上实现有机地结合起来, 使读者掌握用统计方法解决实际问题的全过程。

本书内容共分四部分。第一部分 (第1章) 较系统地归纳和总结了一些常用的数值计算方法; 第二部分 (第2章) 是基本统计计算, 包括常用分布函数和分位数的数值计算, 给出一些近年来发展起来的新方法以及应用广泛、精度较高的近似公式; 第三部分 (第3章) 为蒙特卡洛 (M-C) 方法, 给出产生各种分布随机数的方法以及用M-C方法数值求积分、求解非线性方程组的方法; 第四部分 (第4—9章) 介绍用于讨论变量间相关关系、简化数据结构、判别、分类等方面的几种多元统计分析方法, 包括逐步回归分析、典型相关分析、主成分分析、因子分析、判别分析和聚类分析。介绍

中有理论推导和分析，但侧重于计算机上实现的算法步骤。这些算法步骤主要结合国内的SASD统计软件包给出，同时也考虑到国际上常用的统计软件包如SAS，SPSS等的使用。

本书是在作者多年讲授“统计计算”课的讲义基础上写成的，这门课对于统计专业及其有关专业的学生，培养其应用统计方法解决实际问题的能力起到了重要作用，学生普遍反映收获很大。本书可作为统计专业、计算专业和其它有关专业的本科生或研究生的教材。课程讲授为80—100学时，并配备适当的统计实习。本书也适合从事社会、经济、生物、环保、地质、水文等方面的实际统计工作者。内容由浅入深，前后联系紧密。对于每一种统计方法，从提取统计模型到选用数值计算方法以及具体算法步骤，都有一个较完整的论述。各章节还配有综合应用算例，读者从例子中也可受到启发。

作者感谢杨自强、沈世镒和张润楚教授对编写本书所给予的指教，感谢南开大学出版社裴志明、王家骅先生在编写出版过程中的指导和帮助，南开大学数学系计算数学教研室和数理统计教研室领导对此书的出版也给予了大力支持，在此一并表示感谢。

由于作者水平所限，书中难免有一些错误和不足之处，诚恳希望读者批评指正。

3076/16

目 次

1 统计计算中常用的数值方法	(1)
1.1 引言	(1)
1.2 矩阵的三角分解	(2)
1.2.1 矩阵的Doolittle分解 (LU 分解)	(2)
1.2.2 矩阵的Crout分解	(7)
1.2.3 正定矩阵的Cholesky分解	(8)
1.3 矩阵的正交分解	(12)
1.3.1 $n \times n$ 实对称方阵的正交分解	(12)
1.3.2 $n \times n$ 实非奇矩阵的正交分解	(13)
1.3.3 $m \times n$ 实矩阵的正交分解	(14)
1.3.4 矩阵的奇异值分解	(17)
1.4 正交相似变换 (Givens和Householder变换)	(20)
1.4.1 平面旋转变换 (Givens变换)	(20)
1.4.2 反射变换 (Householder变换)	(25)
1.5 求标准特征问题的QR方法	(34)
1.5.1 $n \times n$ 实矩阵的QR方法	(35)
1.5.2 上Hessenberg阵的QR算法	(43)
1.5.3 对称三对角阵的QR算法	(49)
1.6 广义特征值和特征向量的计算	(56)
1.6.1 广义特征问题	(56)
1.6.2 广义特征值和特征向量的计算	(57)
1.7 矩阵的广义逆及计算	(66)
1.7.1 广义逆的定义	(66)
1.7.2 广义逆的结构性质及计算	(67)
1.8 扫描变换 (Sweep变换)	(76)
1.8.1 Sweep变换的定义	(76)

1.8.2	Sweep变换的性质	(79)
1.8.3	正(逆)Sweep变换	(82)
1.8.4	Sweep变换的作用	(85)
1.9	常用的几种数值积分公式	(93)
1.9.1	插值型求积公式	(94)
1.9.2	牛顿-柯特斯(N-C)求积公式	(95)
1.9.3	高斯型求积公式	(97)
1.10	连分式逼近	(103)
1.10.1	连分式的概念	(103)
1.10.2	连分式的计算	(105)
1.10.3	连分式的逼近	(106)
1.11	基于二阶展开的迭代法	(108)
2	常用分布函数和分位数的计算	(111)
2.1	分布函数与分位数的概念	(111)
2.2	几种连续分布的分布函数和分位数的计算	(112)
2.2.1	正态分布	(113)
2.2.2	χ^2 分布	(115)
2.2.3	β 分布	(119)
2.2.4	t 分布	(123)
2.2.5	F 分布	(125)
2.3	离散分布的分布函数的计算	(127)
2.3.1	二项分布	(127)
2.3.2	泊松分布	(128)
3	概率统计模拟	(130)
3.1	随机数的产生	(130)
3.1.1	随机数的概念	(130)
3.1.2	随机数产生的方法概述	(131)
3.2	均匀随机数的产生	(132)
3.2.1	平方取中法	(133)
3.2.2	线性同余法	(133)
3.3	产生其它连续分布随机数的方法	(144)
3.3.1	直接抽样法(反函数法)	(144)

3.3.2	变换抽样法	(146)
3.3.3	舍选抽样法	(151)
3.3.4	近似抽样	(153)
3.3.5	经验分布抽样	(156)
3.4	离散分布随机数的产生	(157)
3.4.1	直接抽样法	(157)
3.4.2	变换法	(158)
3.4.3	离散逼近法	(159)
3.5	随机数的检验	(160)
3.5.1	常用统计量和检验过程	(161)
3.5.2	参数检验	(162)
3.5.3	均匀性检验	(164)
3.5.4	独立性检验	(170)
3.5.5	组合规律检验	(171)
3.6	统计模拟方法在数值计算中的应用	(173)
3.6.1	统计模拟方法概述	(173)
3.6.2	用M-C方法求定积分	(177)
3.6.3	计算定积分的几点讨论	(183)
3.6.4	用M-C方法求解非线性方程组	(193)
4	逐步回归分析	(197)
4.1	逐步回归过程	(197)
4.2	变量的入选和剔除	(198)
4.2.1	入选自变量	(199)
4.2.2	剔除自变量	(202)
4.3	变量的显著性检验	(203)
4.3.1	显著性的度量——方差贡献	(203)
4.3.2	正规方程组的另一种形式	(205)
4.3.3	Q余的计算	(208)
4.3.4	Qj的计算	(208)
4.3.5	显著性检验	(210)
4.4	逐步回归算法步骤	(211)
5	判别分析	(218)

5.1	引言	(218)
5.2	距离判别	(218)
5.2.1	马氏距离的概念和性质	(219)
5.2.2	距离判别的判别准则和判别函数	(220)
5.3	贝叶斯 (Bayes) 判别	(223)
5.3.1	Bayes 判别准则	(223)
5.3.2	正态母体的 Bayes 判别	(227)
5.4	费歇 (Fisher) 判别	(230)
5.4.1	多母体的 Fisher 判别	(230)
5.4.2	两个母体的 Fisher 判别	(238)
5.5	两母体的 Fisher 判别与二值回归的等价性	(240)
5.6	判别效果的检验	(246)
5.6.1	两个母体的显著性检验	(247)
5.6.2	多个母体的显著性检验	(248)
5.7	变量的附加信息检验和变量的判别能力	(250)
5.8	逐步判别	(253)
5.8.1	变量的逐步引入或删除	(253)
5.8.2	逐步判别算法步骤	(255)
6	聚类分析	(267)
6.1	引言	(267)
6.2	相似性的度量	(267)
6.3	样品聚类常用的距离和相似系数	(269)
6.3.1	距离	(299)
6.3.2	相似系数	(270)
6.4	类的定义与类之间的距离	(272)
6.4.1	类的定义	(272)
6.4.2	类之间的距离	(273)
6.5	系统聚类法	(275)
6.6	有序样品的分类——最优分割法	(288)
6.6.1	分类的基本思想和分类函数的定义	(289)
6.6.2	分类过程	(290)
7	主成分分析	(295)

7.1	引言	(295)
7.2	主成分的数学求解	(297)
7.3	主成分的性质	(299)
7.4	载荷矩阵	(302)
7.5	主成分分析的算法步骤	(305)
8	因子分析	(318)
8.1	因子分析的数学模型	(318)
8.2	因子分析模型的性质	(320)
8.3	求解因子分析模型	(322)
8.3.1	因子载荷阵的统计意义	(322)
8.3.2	主因子解的导出	(324)
8.3.3	个性方差阵的估计	(329)
8.4	方差最大正交旋转	(329)
8.5	因子斜交旋转	(334)
8.5.1	斜交因子模型	(334)
8.5.2	斜交旋转的过程	(339)
8.6	因子得分的计算	(339)
8.6.1	回归法	(340)
8.6.2	巴特莱特 (Bartlett) 法	(341)
8.6.3	汤姆森 (Thompson) 法	(341)
8.7	算法步骤	(342)
9	典型相关分析	(349)
9.1	引言	(349)
9.2	典型变量和典型相关系数	(350)
9.2.1	典型相关分析的数学模型	(350)
9.2.2	广义逆意义下典型分析的数学模型	(355)
9.3	典型相关变量的性质	(357)
9.4	典型相关系数的显著性检验	(359)
9.5	算法步骤	(361)
	参考文献	(370)

1 统计计算中常用的数值方法

1.1 引言

本章介绍统计计算中常用的一些数值方法。前言中曾经说过，用统计计算方法解决实际问题时，化成的数学模型许多是数值代数或数值积分问题。例如，计算常用分布函数和分位数，实为计算无穷积分（无穷级数）和求解非线性方程组；多元统计计算中的主成分分析和因子分析，归结为标准特征值和特征向量的计算。因此，数值计算中的矩阵分解、奇异值分解、线性（非线性）方程（组）求解、广义逆矩阵以及广义特征值的计算等方法，被广泛地运用到判别分析、典型相关分析、蒙特卡洛方法等方法中。所以数值代数、数值积分等是统计计算中最重要、最基本的工具。

一般的数值方法在“计算方法”类的书中有介绍。但有些数值方法，如上面提到的奇异值分解、广义逆、广义特征问题等往往涉及不多；还有如很常用的求标准特征值的 QR 方法等，一般书中语焉不详，尤其从理论方法到计算机上具体实现的算法步骤阐述不多；又如用于求分位数的“基于二阶展开的迭代法”，计算常见的正态分布函数的连分式逼近等方法较少见到有关介绍。因此本章针对上述一些缺欠，对在统计计算中常使用的数值计算方法，多予较系统、详细的介绍。其中有的方法详细给出理论推导和算法步骤；有的方法给出重要、实用的公式；有的方法属于一般计算方法书中难以查到的增补内容，等等。

1.2 矩阵的三角分解

矩阵的三角分解是数值代数中最基本的内容之一，在统计计算中应用广泛。如“判别分析”中常常用到正定矩阵的 Cholesky 分解，等等。

这一节，我们给出矩阵的 Doolittle 分解和 Crout 分解以及正定矩阵的 Cholesky 分解。

1.2.1 矩阵的 Doolittle 分解 (LU 分解)

设线性方程组

$$Ax = b, \quad (1.2.1)$$

其中 $A = (a_{ij})_{n \times n}$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)'$, $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)'$ 。若矩阵 A 非奇，则方程组 (1.2.1) 有唯一解。我们用 Gauss 消去法求解方程组 (1.2.1)。

假设 A 的各阶顺序主子式 $\Delta_i \neq 0$, $i = 1, 2, \dots, n$ ，则对系数矩阵 A 进行的 Gauss 消去过程可顺序进行到底，消去过程如下。

令 $A^{(1)} = A$ ，由假设 $\Delta_1 = a_{11}^{(1)} \neq 0$ ，将 $A^{(1)}$ 的第 1 行依次乘以 $-\frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$, $-\frac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$, $\dots$, $-\frac{a_{n1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$ ，并分别加到第 2, 3, $\dots$, n 行上去，则 $A^{(1)}$ 化为

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix},$$

其中

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - a_{i1}^{(1)} a_{1j}^{(1)} / a_{11}^{(1)}, \quad i, j = 2, 3, \dots, n.$$

一般地，若第 $r-1$ 步得到

$$A^r = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1r}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2r}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{rr}^{(r)} & \cdots & a_{rn}^{(r)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nr}^{(r)} & \cdots & a_{nn}^{(r)} \end{pmatrix},$$

由假定, $\Delta_r \neq 0$, 即 $a_{rr}^{(r)} \neq 0$, 将 A^r 的第 r 行依次乘以 $-\frac{a_{r+1,r}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}$, $-\frac{a_{r+2,r}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}$, $\cdots$, $-\frac{a_{nr}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}$, 分别加到第 $r+1$, $r+2 \cdots$, n 行上去, 则 A^r 化为

$$A^{r+1} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1r}^{(1)} & a_{1r+1}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2r}^{(2)} & a_{2r+1}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{rr}^{(r)} & a_{rr+1}^{(r)} & \cdots & a_{rn}^{(r)} \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & a_{r+1,r+1}^{(r+1)} & \cdots & a_{r+1,n}^{(r+1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & a_{nr+1}^{(r+1)} & \cdots & a_{nn}^{(r+1)} \end{pmatrix}.$$

其中

$$a_{ij}^{(r+1)} = a_{ij}^{(r)} - a_{ir}^{(r)} a_{rj}^{(r)} / a_{rr}^{(r)}, \quad i, j = r+1, r+2, \cdots, n.$$

如上进行 $n-1$ 步, 则得到上三角阵

$$A^{(n)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix}.$$

于是, 对系数矩阵 A 经过 $n-1$ 步 Gauss 消去变换, 可使其化为上三角矩阵 $A^{(n)}$. 因而求解方程组 (1.2.1) 等价于求解三角形方程组

$$A^{(n)}x = b. \quad (1.2.2)$$

显然，三角方程组 (1.2.2) 求解简单易行，只须从最后一个方程逐步回代即可求出方程组的解 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)'$ 。

以上对矩阵 A 进行消去变换的每一步，实际上等价于用初等矩阵左乘以矩阵 A 。具体地，第 1 步消元相当于

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -\frac{a_{n1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix} = A^{(2)} \triangleq L_1^{-1} A^{(1)}, \quad (1.2.3)$$

其中

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{a_{n1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \\ \triangleq \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{n1} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

而

$$L^{-1}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ -l_{n1} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

形为 L_1 的初等矩阵称为Frobenius矩阵, 用 L_1^{-1} 左乘以矩阵 A , 可把 A 的第1列对角元以下各元素化为零.

一般地, 定义

$$L_r = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & l_{r+1r} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & l_{nr} & & & 1 \end{pmatrix}, \quad r=1, 2, \cdots, n-1,$$

其中

$$l_{ir} = -\frac{a_{ir}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}, \quad i=r+1, \cdots, n.$$

由式(1.2.3)看出, 对 A 进行 $n-1$ 步消元, 等价于用 $n-1$ 个初等矩阵 L_1^{-1} , L_2^{-1} , $\cdots$, L_{n-1}^{-1} 依次左乘以矩阵 A ,

$$L_{n-1}^{-1} L_{n-2}^{-1} \cdots L_2^{-1} L_1^{-1} A = A^{(n)} \triangleq U,$$

即

$$A = L_1 L_2 \cdots L_{n-1} U \triangleq LU, \quad (1.2.4)$$

其中 U 为上三角矩阵 $A^{(n)}$, 而 $L = L_1 L_2 \cdots L_{n-1}$ 是单位下三角矩阵, 并且 L 形为

$$L = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

其中

$$l_{ij} = \frac{a_{ij}^{(i)}}{a_{ii}^{(i)}}, \quad i=2,3,\dots,n; \quad j < i.$$

因此, 对矩阵 A 进行 $n-1$ 步 Gauss 消元, 就实现了对 A 的三角分解

$$A = LU.$$

我们称 A 的这种分解为 Doolittle 分解, 或称 LU 分解. 分解的算法公式如下.

$$(1) \quad u_{1i} = a_{1i}, \quad i = 1, 2, \dots, n;$$

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

(2) 计算矩阵 U 的第 r 行和矩阵 L 的第 r 列元素 ($r = 2, 3, \dots, n$).

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

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

对矩阵 A 施行 LU 分解之后, 求解方程组 (1.2.1) 可化为求解以下两个三角形方程组:

$$\left. \begin{array}{l} Ly = b, \\ Ux = y. \end{array} \right\} \quad (1.2.5)$$

求解的算法公式为

$$(1) \quad y_1 = b_1,$$

$$y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k, \quad i = 2, 3, \dots, n;$$

$$(2) \quad x_n = y_n / u_{nn},$$

$$x_i = \left(y_i - \sum_{k=i+1}^n u_{ik} x_k \right) / u_{ii}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1.$$

这种求解方程组 (1.2.1) 的方法称为直接三角分解法.

可以证明, 对于 $n \times n$ 矩阵 A (奇异的或非奇异的), 若 A 的顺序主子式 $\Delta_k \neq 0$ ($k = 1, 2, \dots, n-1$), 则 A 可分解为一个单位下三角阵 L 和一个上三角阵 U 的乘积, 且这种分解是唯一的.

我们知道, Gauss消去法分为选主元的和不选主元的两种, 同样, 矩阵 A 的 LU 分解也分为选主元的和不选主元的两种.

1.2.2 矩阵的Crout分解

当矩阵 A 的顺序主子式 $\Delta_k \neq 0$ ($k = 1, 2, \dots, n-1$) 时, A 还存在另一形式的三角分解

$$A = \overline{L} \overline{U}, \quad (1.2.6)$$

其中 $\overline{L}$ 为下三角矩阵, $\overline{U}$ 为单位上三角矩阵. 称 A 的这种三角分解为Crout分解.

实际上, A 的Crout分解是在 A 的Doolittle分解的基础上得到的另一形式的结果. 由1.2.1, 当 A 的各阶顺序主子式 $\Delta_k \neq 0$ ($k = 1, 2, \dots, n$) 时, A 可唯一分解为单位下三角阵 L 和上三角阵 U 之乘积, 即

$$A = LU.$$

令矩阵 $D = \text{diag}(u_{11}, u_{22}, \dots, u_{nn}) \triangleq \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$, 易证

$$\Delta_i = u_{11} u_{22} \cdots u_{ii} = d_1 d_2 \cdots d_i,$$

于是

$$D = \text{diag}\left(\Delta_1, \frac{\Delta_2}{\Delta_1}, \dots, \frac{\Delta_n}{\Delta_{n-1}}\right).$$

显然 D^{-1} 存在. 令 $\overline{U} = D^{-1}U$, 则

$$A = LU = LDD^{-1}U = (LD)\overline{U} \triangleq \overline{L}\overline{U},$$

其中 $\overline{L} = LD$ 为下三角矩阵, $\overline{U}$ 为单位上三角矩阵. 这就得到 A 的Crout分解.