作者	**生姜 DrGinger**
脚本	**生姜 DrGinger**
视频	**崔崔 CuiCui**
开源学习资源	https://github.com/Visualize-ML
平台	https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang https://space.bilibili.com/3546865719052873 https://space.bilibili.com/513194466

9.5 QR 分解

本节你将掌握的核心技能：

▶ QR 分解：将任意实数矩阵分解为正交矩阵与上三角矩阵的乘积。

▶ 格拉姆-施密特正交化和 QR 分解联系。

▶ 区分完全型与经济型 QR 分解。

▶ 上三角矩阵的每一列给出了原始列向量在正交矩阵列向量构成的正交基下的坐标。

▶ 矩阵的 QR 分解和其格拉姆矩阵 Cholesky 分解之间的关系。

QR 分解与格拉姆-施密特正交化之间有着直接而深刻的联系。QR 分解的目标是将一个实数矩阵分解成正交矩阵 ($\boldsymbol{Q}$)、上三角矩阵 ($\boldsymbol{R}$) 乘积。而格拉姆-施密特正交化过程正是构造正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的一种方式。

回顾上一节，格拉姆-施密特算法以列满秩 $\boldsymbol{A}$ 的列向量为输入，通过逐列正交化的方法，构造出一组两两正交、并且单位化的向量，这组向量就组成了 $\boldsymbol{Q}$ 的列。与此同时，构造 $\boldsymbol{Q}$ 的过程中会计算出每个原始列向量在这些正交向量方向上的投影系数，这些系数恰好组成了矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的元素。因此，格拉姆-斯密特不仅提供了构造 $\boldsymbol{Q}$ 的方法，也自然给出了对应的 $\boldsymbol{R}$。

⚠ 不过需要注意的是，经典的格拉姆-斯密特在数值计算中可能不够稳定，因此在实际应用中更常使用其他算法，比如 Householder 变换，来完成 QR 分解。

本节让我们聊聊 QR 分解。

两种 QR 分解类型

QR 分解 (QR decomposition, QR factorization) 有两种常见形式：

◀ 完全型 (complete)，$\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵 (方阵)；

◀ 经济型 (reduced, thin)，$\boldsymbol{Q}$ 为半正交矩阵 (和原矩阵形状相同)。

让我们先完全型 QR 分解。

图 1 所示为形状细高矩阵 $\boldsymbol{A}$ 进行完全型 QR 分解示意图，对应的等式为：

$$\boldsymbol{A}_{n\times p} = \boldsymbol{Q}_{n\times n}\boldsymbol{R}_{n\times p} \tag{1}$$

其中，$\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵，形状为 $n \times n$；$\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 形状一致，形状为 $n \times p$。

⚠ 注意，任何实数矩阵都可以 QR 分解。

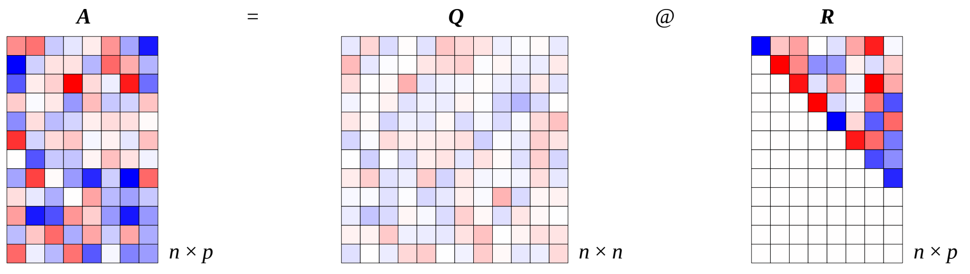

图 1. 完全型 QR 分解示意图

LA_09_05_01.ipynb 完成并可视化完全型 QR 分解。

图 2 所示为形状细高矩阵 $\boldsymbol{A}$ 进行经济型 QR 分解示意图，对应矩阵乘法

$$\boldsymbol{A}_{n\times p} = \boldsymbol{Q}_{n\times p}\boldsymbol{R}_{p\times p} \tag{2}$$

其中，$\boldsymbol{Q}$ 为半正交矩阵。

⚠ 注意，如果 $\boldsymbol{A}$ 为细高矩阵，经济型 QR 分解得到的 $\boldsymbol{Q}$ 为半正交矩阵；$\boldsymbol{Q}$ 的列向量为规范正交基。但是，如果 $\boldsymbol{A}$ 为扁平矩阵 (行数小于列数)，情况则不同。本节最后会聊到这一点。

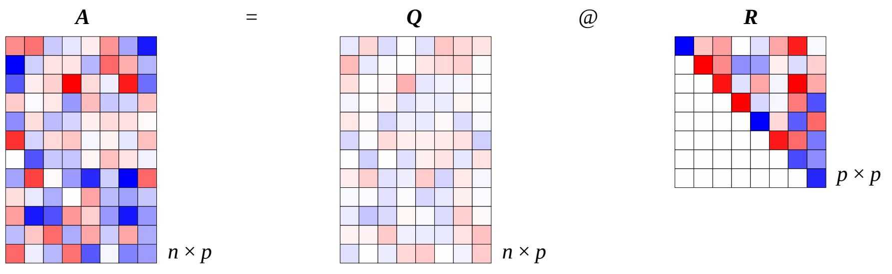

图 2. 经济型 QR 分解示意图

LA_09_05_02.ipynb 完成并可视化经济型 QR 分解。

完全型 QR 分解中的 Q

完全型 QR 分解中，方阵 Q 为正交矩阵，也就是说：

$$Q_{n\times n}Q_{n\times n}^{\mathrm{T}} = Q_{n\times n}^{\mathrm{T}}Q_{n\times n} = I_{n\times n} \tag{3}$$

图 3 所示为 (3) 运算对应热图。

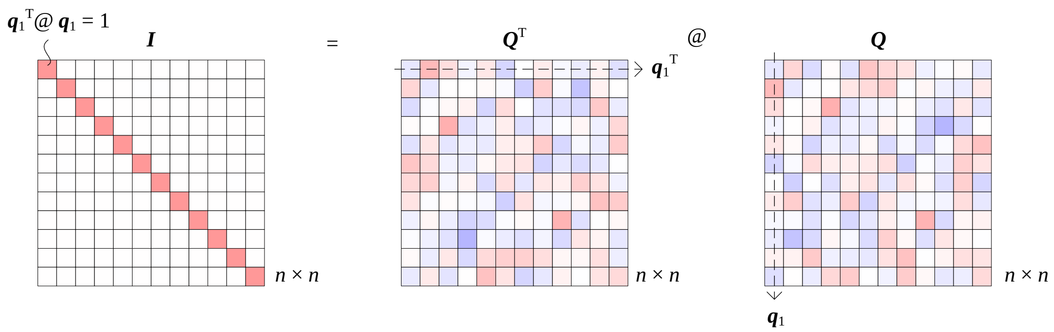

图 3. 矩阵乘法 $Q^{\mathrm{T}} @ Q = I$ 的热图，完全型 QR 分解

图 4 所示为使用矩阵乘法第一视角展开格拉姆矩阵 $Q^{\mathrm{T}} @ Q = I$。Q 的列向量均为单位向量，且两两正交，即

$$Q^{\mathrm{T}}Q = \begin{bmatrix} q_1^{\mathrm{T}} \\ q_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ q_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1^{\mathrm{T}}q_1 & q_1^{\mathrm{T}}q_2 & \cdots & q_1^{\mathrm{T}}q_n \\ q_2^{\mathrm{T}}q_1 & q_2^{\mathrm{T}}q_2 & \cdots & q_2^{\mathrm{T}}q_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_n^{\mathrm{T}}q_1 & q_n^{\mathrm{T}}q_2 & \cdots & q_n^{\mathrm{T}}q_n \end{bmatrix}_{n\times n} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}_{n\times n} \tag{4}$$

请大家把 (4) 的每个元素写成向量内积形式。

根据本书前文介绍的有关正交矩阵的性质，Q 的列向量 $[q_1, q_2, \ldots, q_n]$ 是一个规范正交基，张起的向量空间为 $\mathbb{R}^n$。

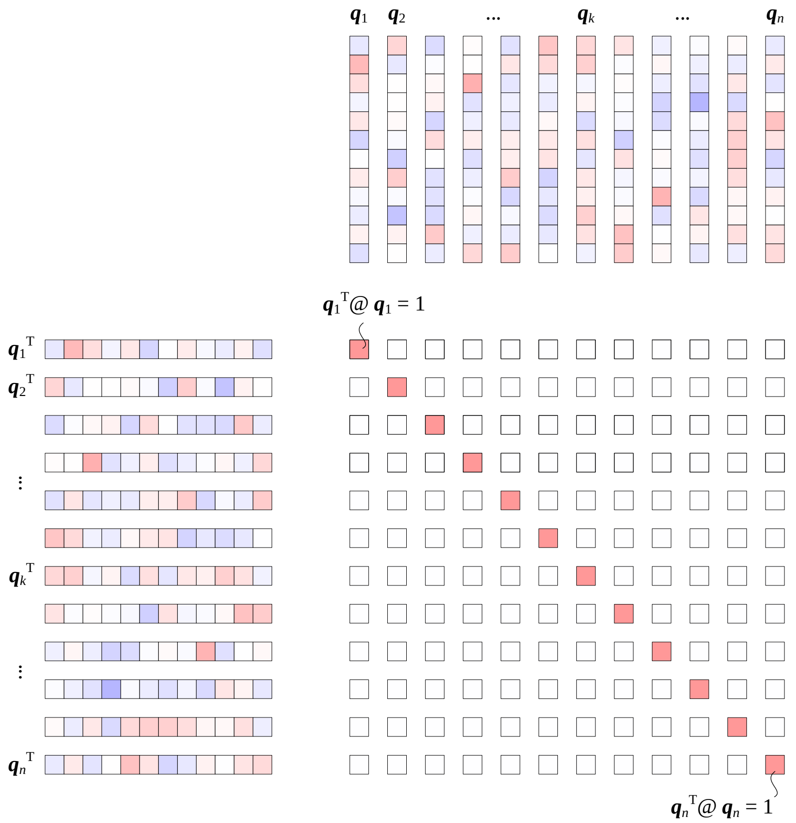

图 4. 矩阵乘法 $Q^T @ Q = I$，矩阵乘法第一视角展开，完全型 QR 分解

图 5 所示为矩阵乘法 $Q @ Q^T = I$ 的热图。

正交矩阵 Q 的行向量也是两两正交的单位向量，这意味着 Q 的行向量也是规范正交基。请大家用矩阵乘法第一视角展开 $Q @ Q^T = I$，并解释。

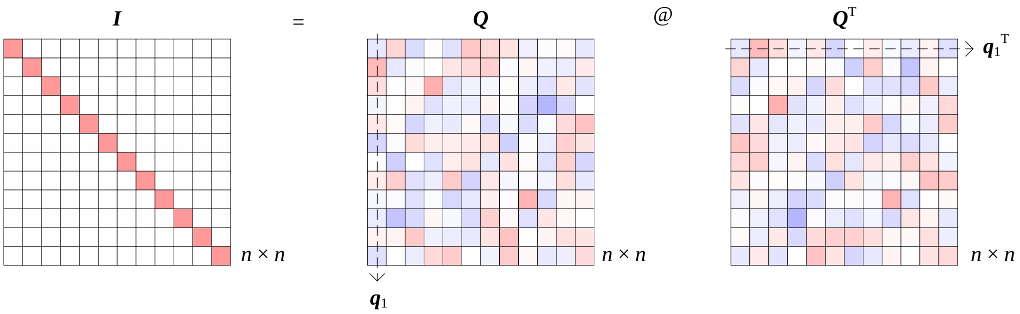

图 5. 矩阵乘法 $Q @ Q^T = I$ 的热图，完全型 QR 分解

用矩阵乘法第二视角展开 $Q @ Q^T = I$

$$
QQ^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1^{\mathrm{T}} \\ q_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ q_n^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} = q_1 q_1^{\mathrm{T}} + q_2 q_2^{\mathrm{T}} + \cdots + q_n q_n^{\mathrm{T}} = I \tag{5}
$$

由于 $\boldsymbol{Q}$ 的列向量均为非零向量，因此上式中 $\boldsymbol{q}_i\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}}$ 都是秩一矩阵，也是对称矩阵；比如，图 6 所示为 $\boldsymbol{q}_1$ @ $\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{T}}$ 得到的秩一矩阵。

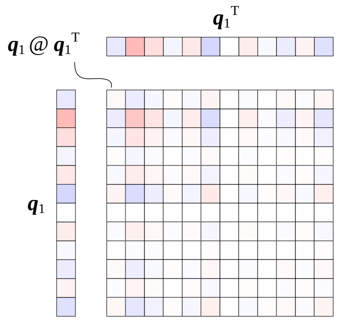

图 6. 矩阵乘法 $\boldsymbol{q}_1$ @ $\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{T}}$ 的热图，完全型 QR 分解

(5) 代表 n 个秩一矩阵叠加得到 $n \times n$ 单位矩阵，具体如图 7 所示。图中每个 $\boldsymbol{q}_i\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{T}}$ 都是单一方向的投影矩阵，它们代表正交的方向贡献。

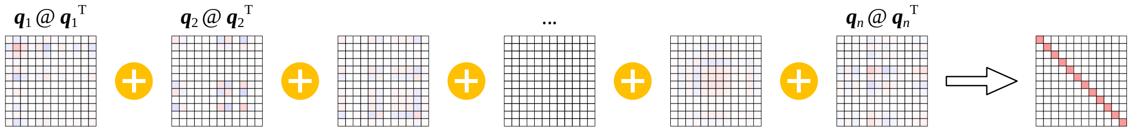

图 7. n 个秩一矩阵叠加得到单位矩阵，完全型 QR 分解

$\boldsymbol{R}$ 的列向量是坐标

用矩阵乘法第三视角——列向量线性组合——来分析 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR}$

$$
A = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_p \end{bmatrix} = QR = Q \begin{bmatrix} r_1 & r_2 & \cdots & r_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Qr_1 & Qr_2 & \cdots & Qr_p \end{bmatrix} \tag{6}
$$

如图 8 所示，把 $\boldsymbol{Q}$ 展开写成 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_n]$，$\boldsymbol{A}$ 的列向量 $\boldsymbol{a}_k$ 可以写成 $\boldsymbol{Q}$ 列向量的线性组合，即

$$
a_k = Qr_k = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{1,k} \\ r_{2,k} \\ \vdots \\ r_{n,k} \end{bmatrix} = r_{1,k} q_1 + r_{2,k} q_2 + \cdots + r_{n,k} q_n \tag{7}
$$

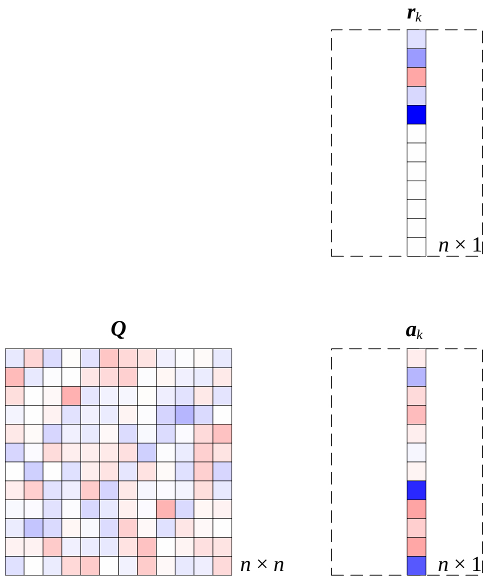

图 8. 计算 $\boldsymbol{a}_k$

比如，第一列向量 $\boldsymbol{a}_1$ 可以通过下式得到：

$$\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_2 & \cdots & \boldsymbol{q}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{1,1} \\ r_{2,1} \\ \vdots \\ r_{n,1} \end{bmatrix} = r_{1,1}\boldsymbol{q}_1 + \underbrace{r_{2,1}}_{=0}\boldsymbol{q}_2 + \cdots \underbrace{r_{n,1}}_{=0}\boldsymbol{q}_n = r_{1,1}\boldsymbol{q}_1 \tag{8}$$

如图 9 所示，上式相当于 $\boldsymbol{a}_1$ 在规范正交基 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_n]$ 张成的空间坐标为 $(r_{1,1}, r_{2,1}, \ldots, r_{n,1})$，即 $(r_{1,1}, 0, \ldots, 0)$。

也就是说，$\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{q}_1$ 平行，方向同向或反向。

这和上一章介绍的格拉姆-施密特正交化第一步一致。

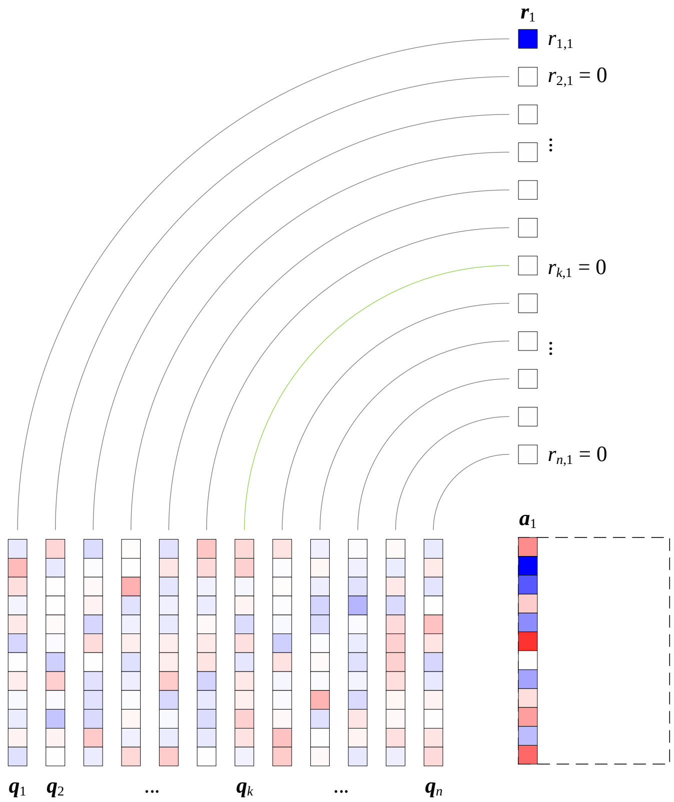

图 9. $\boldsymbol{A}$ 的第一列对应的矩阵乘法 $\boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{Q} @ \boldsymbol{r}_1$

$\boldsymbol{q}_1$ 是单位向量，也就是说：

$$r_{1,1} = \pm\|\boldsymbol{a}_1\| \tag{9}$$

这一点已经说明 QR 分解结果不唯一。但是，如果 $\boldsymbol{X}$ 列满秩，且 $\boldsymbol{R}$ 的对角元素为正实数的情况下 QR 分解唯一。

类似地，$\boldsymbol{A}$ 的第二列向量 $\boldsymbol{a}_2$ 写成：

$$\boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix}\boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_2 & \cdots & \boldsymbol{q}_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix} r_{1,2} \\ r_{2,2} \\ \vdots \\ r_{n,2}\end{bmatrix} = r_{1,2}\boldsymbol{q}_1 + r_{2,2}\boldsymbol{q}_2 + \underbrace{r_{3,2}}_{=0}\boldsymbol{q}_3 + \cdots \underbrace{r_{n,2}}_{=0}\boldsymbol{q}_n = r_{1,2}\boldsymbol{q}_1 + r_{2,2}\boldsymbol{q}_2 \tag{10}$$

如图 10 所示，$\boldsymbol{a}_2$ 在规范正交基 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_n]$ 张成的空间坐标为 $(r_{1,2}, r_{2,2}, r_{3,2}, \ldots, r_{n,1})$，即 $(r_{1,2}, r_{2,2}, 0, \ldots, 0)$。

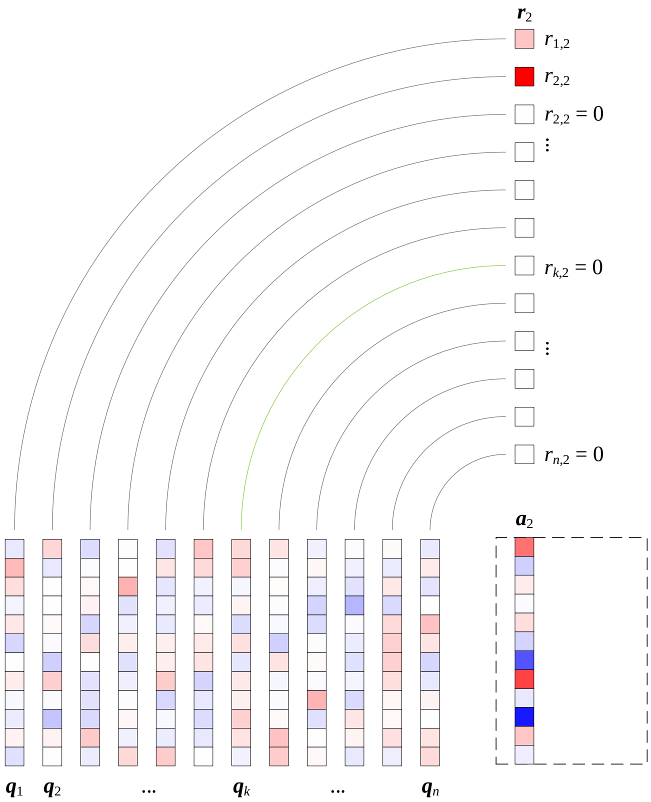

图 10. $\boldsymbol{A}$ 的第一列对应的矩阵乘法 $\boldsymbol{a}_2 = \boldsymbol{Q} @ \boldsymbol{r}_2$

经济型 QR 分解

图 1 对应的完全型 QR 分解可以进一步简化。将 (1) 中 $\boldsymbol{R}$ 上下切一刀，让上方子块为方阵，下方子块为零矩阵 $\boldsymbol{O}$。

如图 11 所示，(1) 可以写成分块矩阵乘法：

$$\boldsymbol{A}_{n\times p} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{Q}_{n\times p} & \boldsymbol{Q}_{n\times(n-p)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_{p\times p} \\ \boldsymbol{O}_{(n-p)\times p} \end{bmatrix} = \boldsymbol{Q}_{n\times p}\boldsymbol{R}_{p\times p} + \boldsymbol{Q}_{n\times(n-p)}\boldsymbol{O}_{(n-p)\times p} = \boldsymbol{Q}_{n\times p}\boldsymbol{R}_{p\times p} \tag{11}$$

其中，$\boldsymbol{Q}_{n\times p}$ 和 $\boldsymbol{A}_{n\times p}$ 矩阵形状相同。

$\boldsymbol{Q}_{n\times p}$ 为半正定矩阵。如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为细高矩阵，$\boldsymbol{Q}_{n\times p}$ 的列向量为单位向量，且两两正交；也就是说，$\boldsymbol{Q}_{n\times p}$ 的列向量为规范正交基。

$\boldsymbol{R}_{p\times p}$ 为上三角方阵。

⚠ 注意，(11) 中零矩阵 $\boldsymbol{O}$ 的形状为 $(n-p)\times p$，其所有元素均为 0。

图 11 告诉我们分块时，要想进行矩阵乘法，子矩阵的形状也必须匹配。

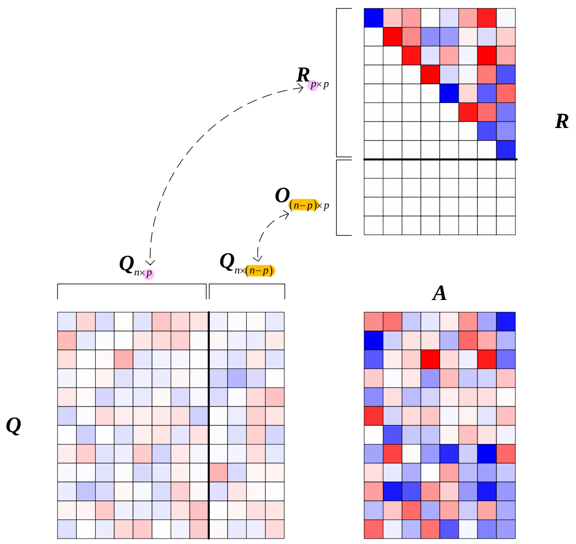

图 11. 完全型 QR 分解的分块矩阵乘法

(11) 分块矩阵乘法的结果是两个矩阵形状相同相加；其中，第二个矩阵为全 0 矩阵 $\boldsymbol{O}$，形状和 $\boldsymbol{A}$ 完全相同。图 12 所示为这两个矩阵乘法的结果。

特别建议大家借此机会回顾本书第 3 章有关分块矩阵乘法相关内容。

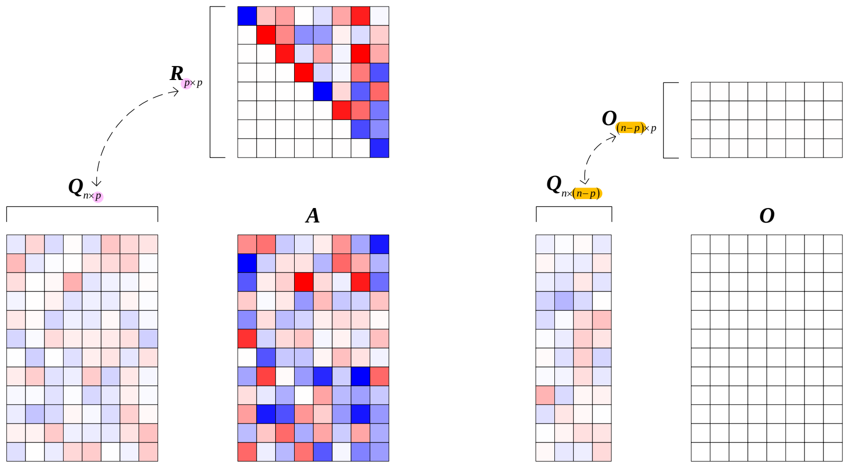

图 12. 两个矩阵乘法结果相加

图 13 所示为 QR 分解从完全型到经济型简化过程。

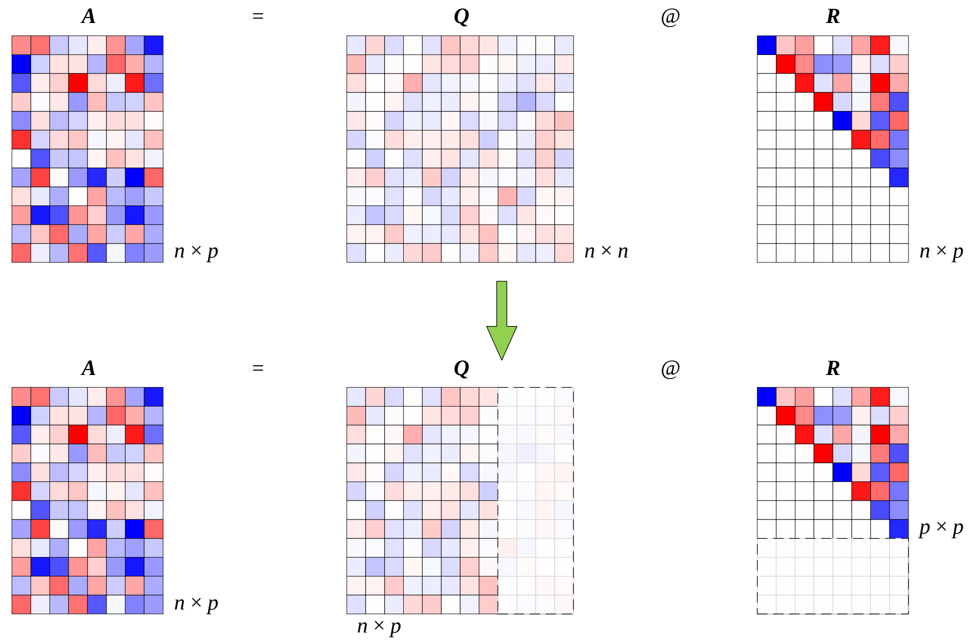

图 13. QR 分解从完全型到经济型简化过程

如图 14 所示，$\boldsymbol{Q}_{n\times p}$ 列向量、$\boldsymbol{Q}_{n\times(n-p)}$ 列向量张成的空间 span($\boldsymbol{q}_1$, $\boldsymbol{q}_2$, …, $\boldsymbol{q}_p$)、span($\boldsymbol{q}_{p+1}$, $\boldsymbol{q}_{p+2}$, …, $\boldsymbol{q}_n$) 互为正交补。

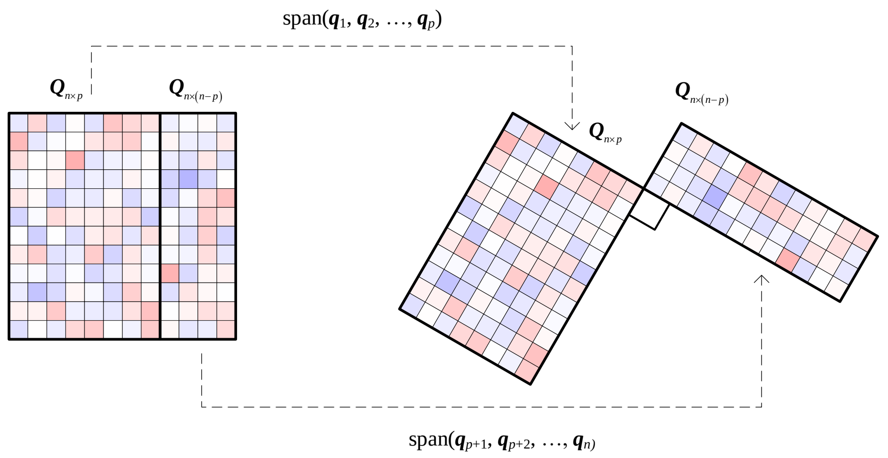

图 14. 互为正交补的向量空间

几何视角

从几何角度来看，如图 15 所示，经济型 QR 分解完成对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的正交化。

$\boldsymbol{A}$ 的列向量 [$\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$, …, $\boldsymbol{a}_p$] 很可能并非两两正交，经过经济型 QR 分解得到的 [$\boldsymbol{q}_1$, $\boldsymbol{q}_2$, …, $\boldsymbol{q}_p$] 两两正交，且每个向量为单位向量。

[$\boldsymbol{q}_1$, $\boldsymbol{q}_2$, …, $\boldsymbol{q}_p$] 是一个规范正交基。

规范正交基 $[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_p]$ 的重要特点是 $\boldsymbol{q}_1$ 平行于 $\boldsymbol{a}_1$。

特别是，如果 $\boldsymbol{A}$ 列满秩，则 $\text{span}(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \ldots, \boldsymbol{a}_p) = \text{span}(\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \ldots, \boldsymbol{q}_p)$。

当然，对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的正交化方法并不唯一。本书前文提过，谱分解 (用在实对称方阵)、奇异值分解等也都可以获得正交矩阵。

⚠ 注意，不同正交化方法得到的规范正交基不同。本书后面还会介绍其他正交化方法，请大家注意区分结果的差异以及应用场合。

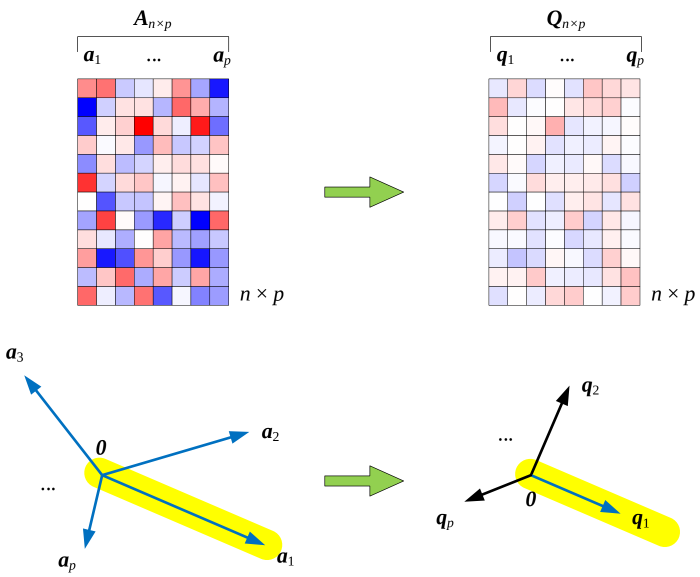

图 15. 经济型 QR 分解背后的几何意义

半正交矩阵

虽然 (11) 中矩阵 $\boldsymbol{Q}_{n\times p}$ 不是一个方阵，但列向量也两两正交，因为，

$$\left(\boldsymbol{Q}_{n\times p}\right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Q}_{n\times p} = \boldsymbol{I}_{p\times p} \tag{12}$$

$\boldsymbol{Q}_{n\times p}$ 为半正交矩阵。

⚠ 注意，$\boldsymbol{Q}_{n\times p}$ 不再是正交矩阵。正交矩阵的前提是矩阵为方阵。

图 16 所示为 $\boldsymbol{Q}_{n\times p}{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{n\times p}$ 运算对应的热图。

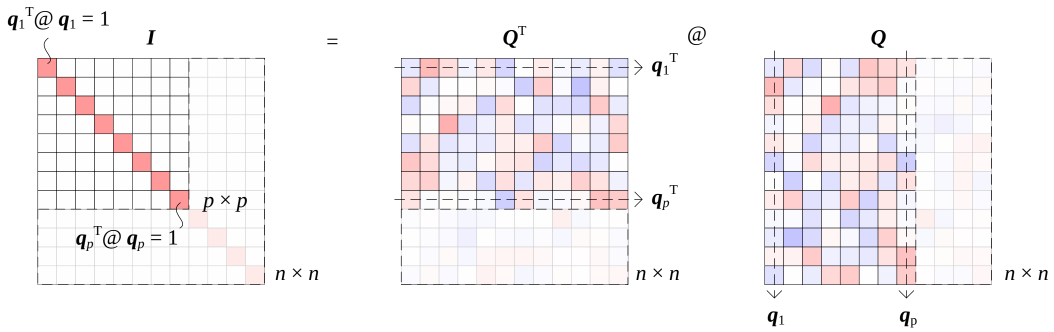

图 16. 半正交矩阵 $Q^T @ Q = I$

把 $Q_{n\times p}$ 展开写成 $[q_1, q_2, \ldots, q_p]$，代入上式得到：

$$
Q_{n\times p}^{T} Q_{n\times p} = \begin{bmatrix} q_1^T \\ q_2^T \\ \vdots \\ q_p^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1^T q_1 & q_1^T q_2 & \cdots & q_1^T q_p \\ q_2^T q_1 & q_2^T q_2 & \cdots & q_2^T q_p \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_p^T q_1 & q_p^T q_2 & \cdots & q_p^T q_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}_{p\times p} \tag{13}
$$

图 17 所示为获得 $I_{p\times p}$ 的每个元素。

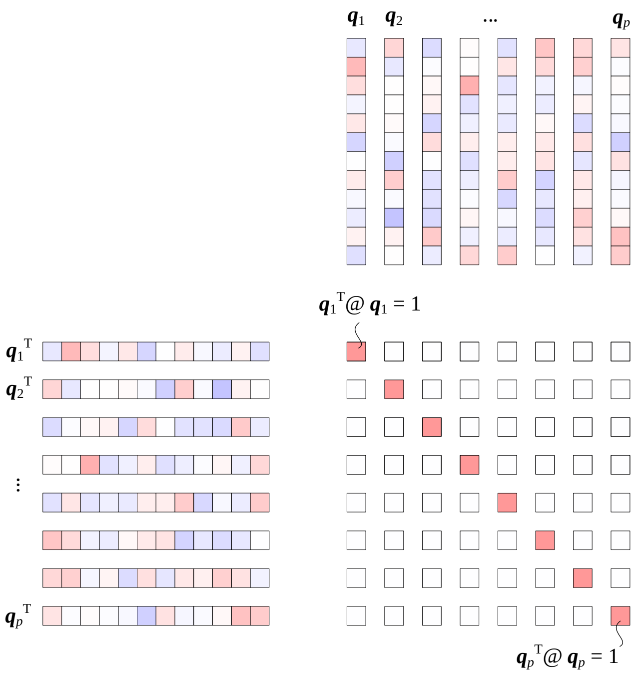

图 17. 半正交矩阵 $Q^T @ Q = I$，矩阵乘法第一视角展开

下面让我们也用分块矩阵乘法来推导如何从 $Q_{n\times n}^T Q_{n\times n}$ 得到 $Q_{n\times p}^T Q_{n\times p}$。

如图 18 所示，将正交矩阵 $Q_{n\times n}$ 写成 $[Q_{n\times p}, Q_{n\times(n-p)}]$，这样 $Q_{n\times n}^T Q_{n\times n}$ 可以展开

$$
Q_{n\times n}^{T} Q_{n\times n} = \begin{bmatrix} Q_{n\times p}^T \\ Q_{n\times(n-p)}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{n\times p} & Q_{n\times(n-p)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_{n\times p}^T Q_{n\times p} & Q_{n\times p}^T Q_{n\times(n-p)} \\ Q_{n\times(n-p)}^T Q_{n\times p} & Q_{n\times(n-p)}^T Q_{n\times(n-p)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_{p\times p} & O_{p\times(n-p)} \\ O_{(n-p)\times p} & I_{(n-p)\times(n-p)} \end{bmatrix} \tag{14}
$$

分块来看，$\boldsymbol{Q}_{n\times p}$ 为半正交矩阵，因此其格拉姆矩阵 $\boldsymbol{Q}_{n\times p}{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{n\times p}$ 为单位矩阵 $\boldsymbol{I}_{p\times p}$。

$\boldsymbol{Q}_{n\times(n-p)}$也是半正交矩阵，其格拉姆矩阵 $\boldsymbol{Q}_{n\times(n-p)}{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{n\times(n-p)}$为单位矩阵 $\boldsymbol{I}_{(n-p)\times(n-p)}$。

由于 $\boldsymbol{Q}_{n\times p}$、$\boldsymbol{Q}_{n\times(n-p)}$正交，因此 $\boldsymbol{Q}_{n\times p}{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{n\times(n-p)}$、$\boldsymbol{Q}_{n\times(n-p)}{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{n\times p}$ 均为零矩阵。

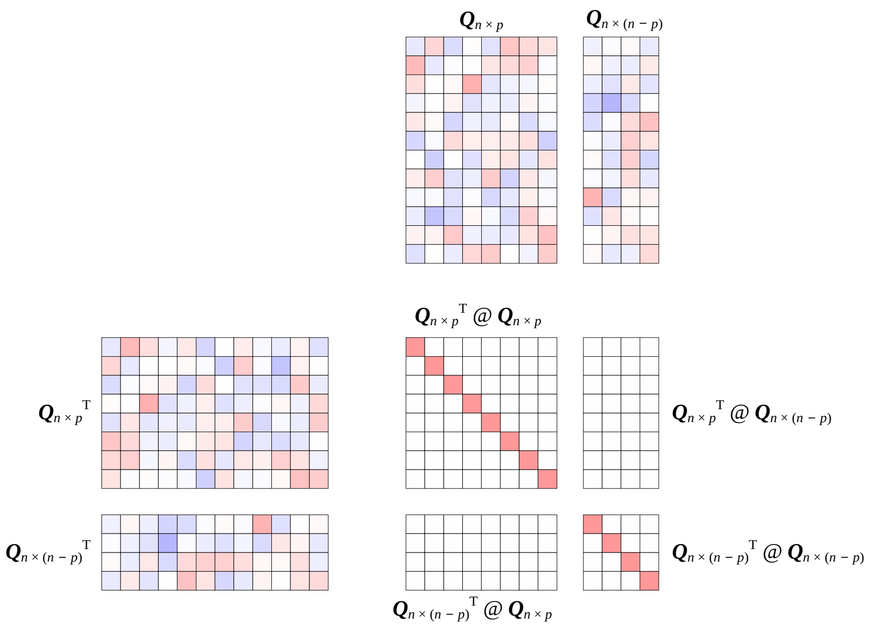

图 18. 从 $\boldsymbol{Q}_{n\times n}{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{n\times n}$得到 $\boldsymbol{Q}_{n\times p}{}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{n\times p}$

图 19 所示为 $\boldsymbol{Q}_{n\times p}\boldsymbol{Q}_{n\times p}{}^{\mathrm{T}}$运算对应的热图，显然结果不是单位矩阵！

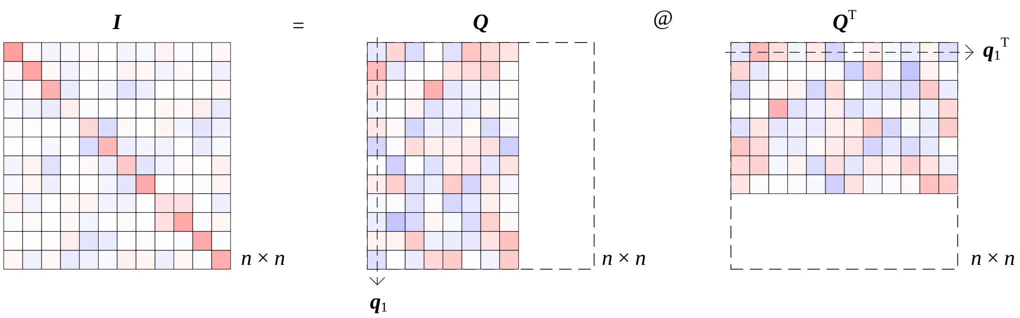

图 19. 半正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ @ $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$

如图 20 所示，这是因为在叠加合成的时候缺了 $n-p$ 个方阵，因此结果并不是单位矩阵，即

$$\boldsymbol{Q}_{n\times p}\boldsymbol{Q}_{n\times p}{}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{q}_1 & \boldsymbol{q}_2 & \cdots & \boldsymbol{q}_p\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{q}_1{}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{q}_2{}^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{q}_p{}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}=\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{q}_1{}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{q}_2\boldsymbol{q}_2{}^{\mathrm{T}}+\cdots+\boldsymbol{q}_p\boldsymbol{q}_p{}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}-\left(\boldsymbol{q}_{p+1}\boldsymbol{q}_{p+1}{}^{\mathrm{T}}+\cdots+\boldsymbol{q}_n\boldsymbol{q}_n{}^{\mathrm{T}}\right) \tag{15}$$

其中，$q_1q_1^{\mathrm{T}}+q_2q_2^{\mathrm{T}}+\cdots+q_pq_p^{\mathrm{T}}$ 为朝 span(q_1, q_2, … q_p) 正交投影的投影矩阵。

$q_{p+1}q_{p+1}^{\mathrm{T}}+\cdots+q_nq_n^{\mathrm{T}}$ 为朝 span(q_{p+1}, q_2, … q_n) 正交投影的投影矩阵。

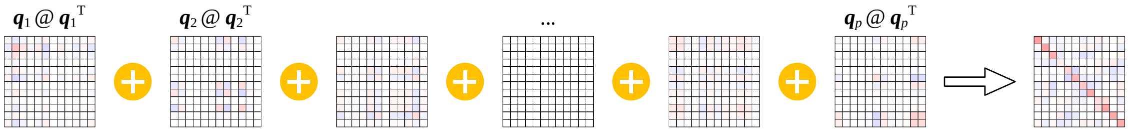

图 20. p 个秩一矩阵叠加得到的方阵，经济型 QR 分解

格拉姆矩阵

让我们看矩阵 A 的格拉姆矩阵 $A^{\mathrm{T}}A$，具体如图 21 所示。

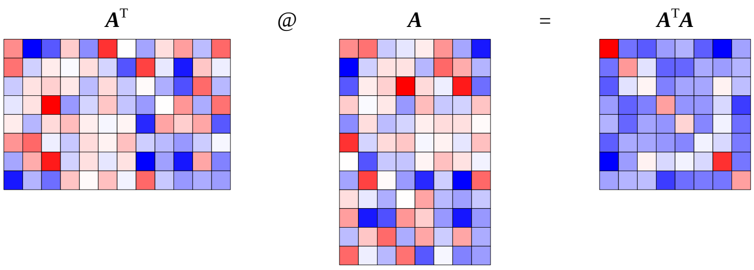

图 21. 计算矩阵 A 的格拉姆矩阵 $A^{\mathrm{T}}A$

用经济型 QR 分解展开来写 $A^{\mathrm{T}}A$

$$\begin{aligned} A^{\mathrm{T}}A &= \left(Q_{n\times p}R_{p\times p}\right)^{\mathrm{T}}\left(Q_{n\times p}R_{p\times p}\right) \\ &= R_{p\times p}{}^{\mathrm{T}}\underbrace{Q_{n\times p}{}^{\mathrm{T}}Q_{n\times p}}_{I}R_{p\times p} \\ &= R_{p\times p}{}^{\mathrm{T}}R_{p\times p} \end{aligned} \tag{16}$$

如图 22 所示，矩阵 $A^{\mathrm{T}}A$ 被分解称上三角矩阵转置 (R^{T})、上三角矩阵 (R) 的乘积。

这是本书后文要讲解的 Cholesky 分解。

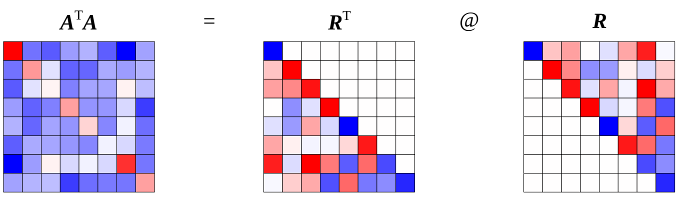

图 22. $A^{\mathrm{T}}A$ 的分解为 R^{T} @ R

扁平矩阵

图 23 所示为扁平矩阵的 QR 分解。扁平矩阵 $\boldsymbol{A}$ 显然列不满秩。

请大家自行写出图 23 对应的矩阵乘法。

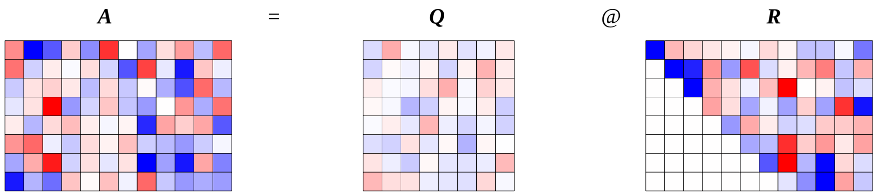

图 23. 扁平矩阵的 QR 分解

如图 24、图 25 所示，得到的 $\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵。

请大家自行分析图 24、图 25。

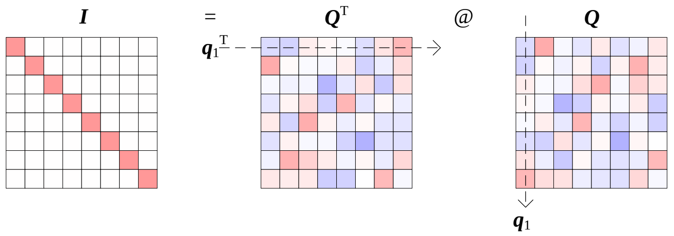

图 24. $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$ @ $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}$，扁平矩阵

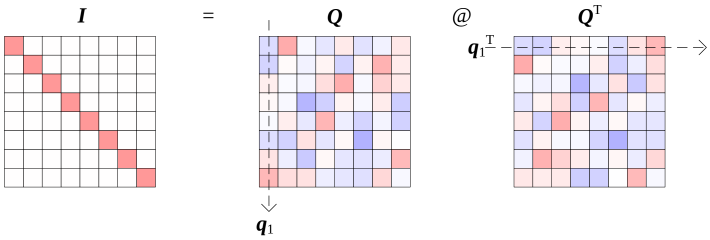

图 25. $\boldsymbol{Q}$ @ $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}$，扁平矩阵

请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

Q1. 编写 Python 代码计算如下矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的完全型 QR 分解。

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

Q2. 了解如何使用 Householder 算法完成 QR 分解。