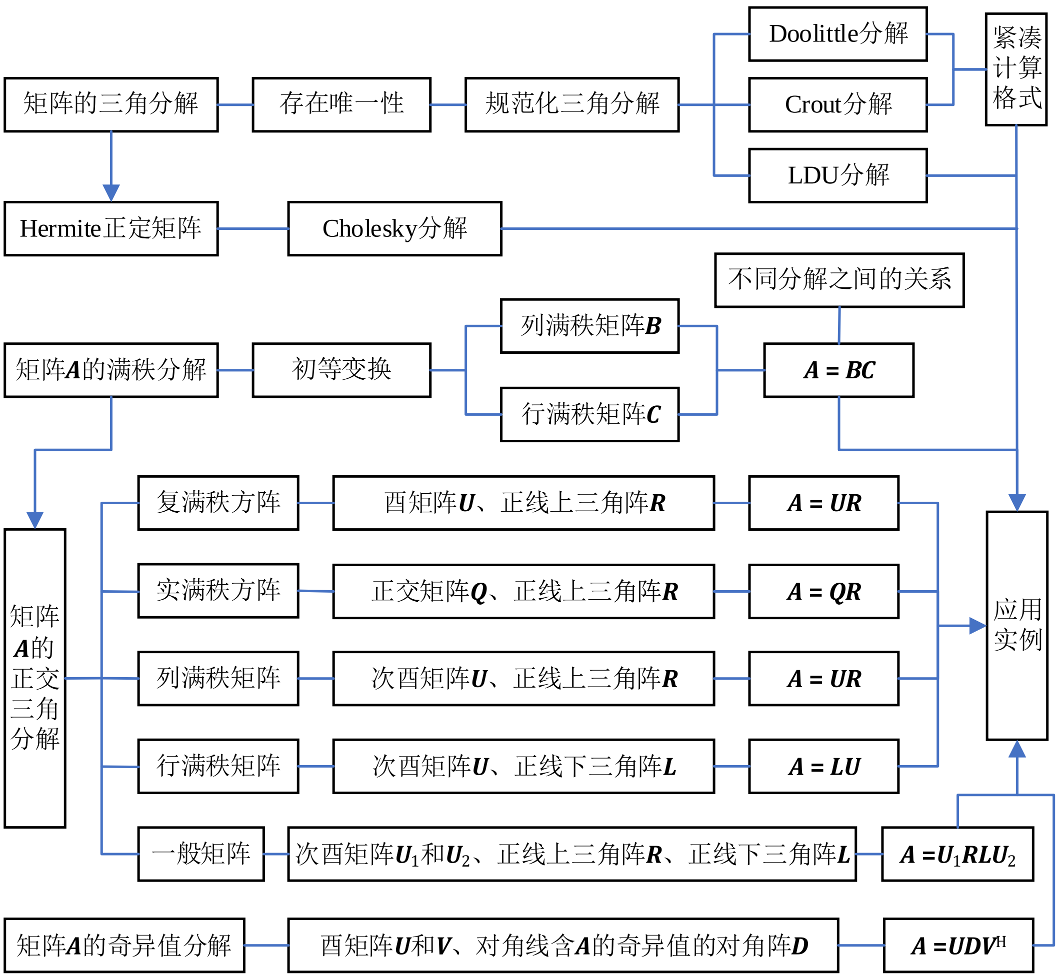
第 5 章　矩阵分解

为便于进行理论研究或简化计算，常需要将矩阵分解为结构简单或性质特殊的矩阵的乘积形式，这就是矩阵分解．例如，给定 n 阶实对称矩阵$\boldsymbol{A}$，可以找到 n 阶正交矩阵$\boldsymbol{T}$，使得$\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}$为对角阵$\boldsymbol{D}$，且$\boldsymbol{D}$的对角元素恰是$\boldsymbol{A}$的全部特征值，基于此可将矩阵$\boldsymbol{A}$分解为三个矩阵的乘积：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{T}\boldsymbol{D}\boldsymbol{T}^{-1}$.

然而，仅仅基于矩阵相似来研究矩阵分解有很大的局限性，往往达不到深化理论或简化计算的目的，本章将从其他角度研究矩阵分解，具体包括矩阵的三角（LU）分解、满秩分解、正交三角（QR）分解、奇异值分解(SVD)．本章最后给出矩阵分解的应用实例．

本章的知识网络框图：



5.1 矩阵的三角分解

5.1.1 三角分解及其存在唯一性

定义 5.1.1　设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$，$\boldsymbol{A}$的前 k 行、前 k 列元素构成的子矩阵

$$\boldsymbol{A}_k=\begin{bmatrix}a_{11} & \cdots & a_{1k}\\ \vdots & & \vdots\\ a_{k1} & \cdots & a_{kk}\end{bmatrix}\quad (k=1,2,\cdots,n)$$

称为 $\boldsymbol{A}$ 的 k 阶**顺序主子阵**.

n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$ 共有 n 阶顺序主子阵.

定义 5.1.2　设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$，$\boldsymbol{A}$的 k 阶顺序主子阵$\boldsymbol{A}_k$的行列式$\Delta_k=\det\boldsymbol{A}_k$ $(k=1,2,\cdots,n)$称为$\boldsymbol{A}$的 k 阶**顺序主子式**.

n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$ 共有 n 阶顺序主子式.

定义 5.1.3　设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$，若存在下三角阵$\boldsymbol{L}\in\mathbb{C}^{n\times n}$和上三角阵$\boldsymbol{U}\in\mathbb{C}^{n\times n}$，使得$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$，则称$\boldsymbol{A}$可以进行**三角分解**.

矩阵的三角分解也称为 **LU 分解**.

下面研究矩阵三角分解的存在性和唯一性.

定理 5.1.1　设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}_n^{n\times n}$，则$\boldsymbol{A}$可以进行三角分解的充要条件是$\Delta_k\neq 0$ $(k=1,2,\cdots,n-1)$，其中Δ_k为$\boldsymbol{A}$的 k 阶顺序主子式.

证：　①必要性．若$\boldsymbol{A}$可以进行三角分解，即$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$，其中$\boldsymbol{L}=(l_{ij})_{n\times n}$，$(l_{ij}=0,\ i<j)$，$\boldsymbol{U}=(u_{ij})_{n\times n}$，$(u_{ij}=0,\ i>j)$，将这三个矩阵进行分块，得

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_k & \boldsymbol{A}_{12}\\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{22}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_k & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_k & \boldsymbol{U}_{12}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{U}_{22}\end{bmatrix},$$

这里$\boldsymbol{A}_k$，$\boldsymbol{L}_k$和$\boldsymbol{U}_k$分别是$\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{L}$和$\boldsymbol{U}$的 k 阶顺序主子阵，且$\boldsymbol{L}_k$和$\boldsymbol{U}_k$分别是下三角阵和上三角阵．由矩阵的分块乘法运算可得

$$\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{U}_k\quad (k=1,2,\cdots,n),$$

因为

$$\det\boldsymbol{A}=\det\boldsymbol{L}\det\boldsymbol{U}=l_{11}l_{22}\cdots l_{nn}u_{11}u_{22}\cdots u_{nn}\neq 0,$$

所以

$$\Delta_k=\det\boldsymbol{A}_k=\det\boldsymbol{L}_k\det\boldsymbol{U}_k=l_{11}l_{22}\cdots l_{kk}u_{11}u_{22}\cdots u_{kk}\neq 0,\ k=1,2,\cdots,n-1.$$

②充分性. 对阶数 n 用数学归纳法证明.

当$n=1$时, $\boldsymbol{A}_1=(a_{11})=(1)(a_{11})$, 结论成立.

设对$n=k$结论成立, 即$\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{U}_k$, 其中$\boldsymbol{L}_k$和$\boldsymbol{U}_k$分别是下三角阵和上三角阵, 且由$\Delta_k=\det\boldsymbol{A}_k=\det\boldsymbol{L}_k\det\boldsymbol{U}_k\neq 0$可知$\boldsymbol{L}_k$和$\boldsymbol{U}_k$均可逆. 于是当$n=k+1$时有

$$\boldsymbol{A}_{k+1}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_k & \boldsymbol{c}_k\\ \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{T}} & a_{k+1,k+1}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_k & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{r}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_k^{-1} & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_k & \boldsymbol{L}_k^{-1}\boldsymbol{c}_k\\ \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}} & a_{k+1,k+1}-\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_k^{-1}\boldsymbol{L}_k^{-1}\boldsymbol{c}_k\end{bmatrix},$$

其中, $\boldsymbol{c}_k=(a_{1,k+1},a_{2,k+1},\cdots,a_{k,k+1})^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{r}_k^{\mathrm{T}}=(a_{k+1,1},a_{k+1,2},\cdots,a_{k+1,k})$, 故由归纳假设知$\boldsymbol{A}$可以进行三角分解. ■

由定理 5.1.1 可知, 并不是所有可逆矩阵都可以进行三角分解, 例如矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{bmatrix}$就不能进行三角分解.

定理 5.1.2 设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}_r^{n\times n}$, 且$\boldsymbol{A}$的前 r 个顺序主子式不为零, 即$\Delta_k\neq 0\ (k=1,2,\cdots,r)$, 则$\boldsymbol{A}$可以进行三角分解.

证: 由定理 5.1.1 可知, $\boldsymbol{A}_r$可以进行三角分解, 即$\boldsymbol{A}_r=\boldsymbol{L}_r\boldsymbol{U}_r$, 且$\boldsymbol{L}_r$和$\boldsymbol{U}_r$分别是可逆的下三角阵和上三角阵, 将矩阵$\boldsymbol{A}$分块为

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_r & \boldsymbol{A}_{12}\\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{22}\end{bmatrix}.$$

由于$\mathrm{rank}\boldsymbol{A}_r=\mathrm{rank}\boldsymbol{A}=r$, 所以$\boldsymbol{A}$的后$n-r$行可以由前 r 行线性表示, 即存在矩阵$\boldsymbol{B}\in\mathbb{C}^{(n-r)\times r}$, 使得$\boldsymbol{A}_{21}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}_r$, $\boldsymbol{A}_{22}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}_{12}$, 从而

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_r & \boldsymbol{A}_{12}\\ \boldsymbol{B}\boldsymbol{A}_r & \boldsymbol{B}\boldsymbol{A}_{12}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_r & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{B}\boldsymbol{L}_r & \boldsymbol{I}_{n-r}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_r & \boldsymbol{L}_r^{-1}\boldsymbol{A}_{12}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix},$$

即得到$\boldsymbol{A}$的一种三角分解. ■

该定理的条件仅是充分条件. 例如矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0&0\\1&2\end{bmatrix}$的秩为 1, 不满足定理的条件, 但

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

都是$\boldsymbol{A}$的三角分解.

定理 5.1.3 若$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$可进行三角分解, 则三角分解不唯一.

证: 若$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$是$\boldsymbol{A}$的一个三角分解, 令$\boldsymbol{D}$是一个对角元素都不为零的对角

阵，则$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}=\tilde{\boldsymbol{L}}\tilde{\boldsymbol{U}}$，其中$\tilde{\boldsymbol{L}}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}$，$\tilde{\boldsymbol{U}}=\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}$也分别是下三角阵和上三角阵，即得到了$\boldsymbol{A}$的另一三角分解，故$\boldsymbol{A}$的三角分解不唯一. ■

5.1.2 规范化三角分解

为获得唯一的三角分解，需要对三角阵进行某种规范化.

定义 5.1.4　对角元素均为 1 的上(下)三角阵称为**单位上（下）三角阵**.

定义 5.1.5　设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$可分解为$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$，若 $\boldsymbol{L}$ 是单位下三角阵，$\boldsymbol{U}$是上三角阵，则称之为$\boldsymbol{A}$的 **Doolittle 分解**. 若 $\boldsymbol{L}$ 是下三角阵，$\boldsymbol{U}$是单位上三角阵，则称之为$\boldsymbol{A}$的 **Crout 分解**.

定义 5.1.6　设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$可分解为$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{U}$，若 $\boldsymbol{L}$ 是单位下三角阵，$\boldsymbol{D}$是对角阵，$\boldsymbol{U}$是单位上三角阵，则称之为$\boldsymbol{A}$的 **LDU 分解**.

关于 LDU 分解的充要条件和唯一性，见下述定理.

定理 5.1.4　设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}_n^{n\times n}$，则$\boldsymbol{A}$有唯一的 LDU 分解的充要条件是$\Delta_k\neq 0\ (k=1,2,\cdots,n-1)$，其中$\Delta_k$为$\boldsymbol{A}$的 k 阶顺序主子式，对角阵$\boldsymbol{D}=\operatorname{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_n)$的元素满足

$$d_1=\Delta_1,\ d_k=\frac{\Delta_k}{\Delta_{k-1}}\quad (k=2,3,\cdots,n).$$

证：①由定理 5.1.1，$\boldsymbol{A}$可以进行三角分解$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$的充要条件是$\Delta_k\neq 0\ (k=1,2,\cdots,n-1)$，令

$$\boldsymbol{D}_L=\operatorname{diag}(l_{11},l_{22},\cdots,l_{nn}),\ \boldsymbol{D}_U=\operatorname{diag}(u_{11},u_{22},\cdots,u_{nn}),$$

由$\boldsymbol{L}$和$\boldsymbol{U}$可逆知$\boldsymbol{D}_L$和$\boldsymbol{D}_U$也可逆，从而

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}_L^{-1}\boldsymbol{D}_L\boldsymbol{D}_U\boldsymbol{D}_U^{-1}\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}_L^{-1})(\boldsymbol{D}_L\boldsymbol{D}_U)(\boldsymbol{D}_U^{-1}\boldsymbol{U})$$

此即$\boldsymbol{A}$的 LDU 分解.

②再证分解的唯一性. 设$\boldsymbol{A}$有两个 LDU 分解$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{U}=\tilde{\boldsymbol{L}}\tilde{\boldsymbol{D}}\tilde{\boldsymbol{U}}$，则

$$\tilde{\boldsymbol{L}}^{-1}\boldsymbol{L}=\tilde{\boldsymbol{D}}\tilde{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{D}^{-1}.$$

上式的左边是单位下三角阵，右边是上三角阵，所以都应该是单位矩阵，因此有

$$\tilde{\boldsymbol{L}}^{-1}\boldsymbol{L}=\boldsymbol{E},\quad \tilde{\boldsymbol{D}}\tilde{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{D}^{-1}=\boldsymbol{E}.$$

从而

$$\boldsymbol{L}=\tilde{\boldsymbol{L}},\quad \tilde{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{U}^{-1}=\tilde{\boldsymbol{D}}^{-1}\boldsymbol{D}.$$

又$\tilde{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{U}^{-1}$是单位上三角阵，可知$\tilde{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{U}^{-1}=\boldsymbol{E}$，$\tilde{\boldsymbol{D}}^{-1}\boldsymbol{D}=\boldsymbol{E}$，故

$$L = \tilde{L},\quad U = \tilde{U},\quad D = \tilde{D}.$$

故$\boldsymbol{A}$的 LDU 分解是唯一的.

③将$\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{L}$，$\boldsymbol{D}$，$\boldsymbol{U}$进行分块可得

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_k & \boldsymbol{A}_{12} \\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{L}_k & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{D}_k & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{D}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_k & \boldsymbol{U}_{12} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{U}_{22} \end{bmatrix},$$

其中$\boldsymbol{A}_k$，$\boldsymbol{L}_k$，$\boldsymbol{D}_k$，$\boldsymbol{U}_k$分别是$\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{L}$，$\boldsymbol{D}$，$\boldsymbol{U}$的 k 阶顺序主子阵，故有

$$\boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{L}_k \boldsymbol{D}_k \boldsymbol{U}_k \quad (k = 1,2,\cdots,n).$$

由于

$$\Delta_k = \det \boldsymbol{A}_k = \det \boldsymbol{L}_k \det \boldsymbol{D}_k \det \boldsymbol{U}_k = d_1 d_2 \cdots d_k,$$

因此

$$d_1 = \Delta_1,\ d_k = \frac{\Delta_k}{\Delta_{k-1}} \quad (k = 2,3,\cdots,n).$$ ■

定理 5.1.5 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}_n^{n\times n}$的 Doolittle 分解和 Crout 分解是唯一的.

证： 设$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LDU}$是$\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}_n^{n\times n}$的 LDU 分解，则$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}(\boldsymbol{DU})$是$A$的 Doolittle 分解，$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{LD})\boldsymbol{U}$是$A$的 Crout 分解，由 LDU 分解的唯一性可得 Doolittle 分解和 Crout 分解的唯一性. ■

例 5.1.1 求矩阵$\boldsymbol{A}$的 Doolittle 分解, LDU 分解和 Crout 分解.

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 2 & 3 & 0 \\ 2 & 0 & -6 \end{bmatrix}$$

解： (1) 设

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 2 & 3 & 0 \\ 2 & 0 & -6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ & u_{22} & u_{23} \\ & & u_{33} \end{bmatrix},$$

由矩阵乘法，有

$$u_{11} = a_{11} = 1,\quad u_{12} = a_{12} = 3,\quad u_{13} = a_{13} = 0,$$

$$l_{21} = \frac{a_{21}}{u_{11}} = 2,\quad l_{31} = \frac{a_{31}}{u_{11}} = 2,$$

$$u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12} = -3,\quad u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13} = 0,$$

$$l_{32} = \frac{a_{32} - l_{31}u_{12}}{u_{22}} = 2,\quad u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23} = -6.$$

故$\boldsymbol{A}$的 Doolittle 分解为

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

(2) 设

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&3&0\\2&3&0\\2&0&-6\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}l_{11}&0&0\\l_{21}&l_{22}&0\\l_{31}&l_{32}&l_{33}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&u_{12}&u_{13}\\&1&u_{23}\\&&1\end{bmatrix},$$

同理可求得$\boldsymbol{A}$的 Crout 分解为

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

(3) 设

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&3&0\\2&3&0\\2&0&-6\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\2&2&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}d_{11}&0&0\\0&d_{22}&0\\0&0&d_{33}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&3&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix},$$

由矩阵乘法，有

$$d_{11}=1,\quad d_{22}=-3,\quad d_{33}=-6.$$

故$\boldsymbol{A}$的 LDU 分解为

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

5.1.3 三角分解的紧凑计算格式

分析 Doolittle 分解或 Crout 分解的过程可发现其计算过程存在规律性.

例如, Doolittle 分解先计算$\boldsymbol{U}$矩阵的第一行未知元素，再计算$\boldsymbol{L}$矩阵的第一列未知元素，再计算$\boldsymbol{U}$矩阵的第二行未知元素，再计算$\boldsymbol{L}$矩阵的第二列未知元素，依此类推，使后面的计算恰好能利用前面的结果.

将上述过程用数学语言刻画如下.

设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$可进行 Doolittle 分解，即

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

则有

$$
\begin{cases}
a_{1j} = u_{1j} & (j = 1,2,\cdots,n) \\
a_{i1} = l_{i1}u_{11} & (i = 2,3,\cdots,n) \\
a_{kj} = \sum\limits_{t=1}^{k-1} l_{kt}u_{tj} + u_{kj} & (j = k, k+1,\cdots,n; k = 2,3,\cdots,n) \\
a_{ik} = \sum\limits_{t=1}^{k-1} l_{it}u_{tk} + l_{ik}u_{kk} & (i = k+1, k+2,\cdots,n; k = 2,3,\cdots,n)
\end{cases}
$$

由上式可导出$\boldsymbol{A}$的 Doolittle 分解的紧凑计算格式:

$$
\begin{cases}
u_{1j} = a_{1j} & (j = 1,2,\cdots,n) \\
l_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{u_{11}} & (i = 2,3,\cdots,n) \\
u_{kj} = a_{kj} - \sum\limits_{t=1}^{k-1} l_{kt}u_{tj} & (j = k, k+1,\cdots,n; k = 2,3,\cdots,n) \\
l_{ik} = \dfrac{1}{u_{kk}}\left(a_{ik} - \sum\limits_{t=1}^{k-1} l_{it}u_{tk}\right) & (i = k+1, k+2,\cdots,n; k = 2,3,\cdots,n)
\end{cases}
$$

具体计算时，可按图 5.1.1 所示由第 1 框至第 n 框逐步进行计算，对同一框中的元素，u_{kk}必须在计算l_{ik}之前先算出，其余元素的计算先后次序没有影响. 此外，由公式可知，在计算出u_{ij}或l_{ij}后，a_{ij}就不再使用了，因此算出的u_{ij}或l_{ij}可以直接放在$\boldsymbol{A}$的相应元素的位置上.

$$
\begin{array}{ccccc|l}
u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} & \text{第 1 框} \\
l_{21} & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} & \text{第 2 框} \\
l_{31} & l_{32} & \ddots & & \vdots & \quad\vdots \\
\vdots & \vdots & & & & \quad\vdots \\
l_{n1} & l_{n2} & & \cdots & u_{nn} & \text{第}n\text{框}
\end{array}
$$

图 5.1.1　Doolittle 分解的紧凑计算格式

类似地，可得到 Crout 分解的紧凑计算格式:

$$
\begin{cases}
l_{i1} = a_{i1} & (i = 1,2,\cdots,n) \\
u_{1j} = \dfrac{a_{1j}}{l_{11}} & (j = 2,3,\cdots,n) \\
l_{ik} = a_{ik} - \sum\limits_{t=1}^{k-1} l_{it}u_{tk} & (i = k, k+1,\cdots,n; k = 2,3,\cdots,n) \\
u_{kj} = \dfrac{1}{l_{kk}}\left(a_{kj} - \sum\limits_{t=1}^{k-1} l_{kt}u_{tj}\right) & (j = k+1, k+2,\cdots,n; k = 2,3,\cdots,n)
\end{cases}
$$

例 5.1.2 求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & -1 & 3\\ 1 & 2 & 1\\ 2 & 4 & 3\end{bmatrix}$的 Doolittle 分解和 Crout 分解.

解: (1) 由 Doolittle 分解的紧凑计算格式可得

$$u_{11}=a_{11}=2,\quad u_{12}=a_{12}=-1,\quad u_{13}=a_{13}=3,$$

$$l_{21}=\frac{a_{21}}{u_{11}}=\frac{1}{2},\quad l_{31}=\frac{a_{31}}{u_{11}}=1,$$

$$u_{22}=a_{22}-l_{21}u_{12}=\frac{5}{2},\quad u_{23}=a_{23}-l_{21}u_{13}=-\frac{1}{2},$$

$$l_{32}=\frac{1}{u_{22}}(a_{32}-l_{31}u_{12})=2,\quad u_{33}=a_{33}-l_{31}u_{13}-l_{32}u_{23}=1.$$

故$\boldsymbol{A}$的 Doolittle 分解为

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 1/2 & 1 & 0\\ 1 & 2 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & -1 & 3\\ 0 & 5/2 & -1/2\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}.$$

(2) 由 Crout 分解的紧凑计算格式可得

$$l_{11}=a_{11}=2,\quad l_{21}=a_{21}=1,\quad l_{31}=a_{31}=2,$$

$$u_{12}=\frac{a_{12}}{l_{11}}=-\frac{1}{2},\quad u_{13}=\frac{a_{13}}{l_{11}}=\frac{3}{2},$$

$$l_{22}=a_{22}-l_{21}u_{12}=\frac{5}{2},\quad l_{32}=a_{32}-l_{31}u_{12}=5,$$

$$u_{23}=\frac{1}{l_{22}}(a_{23}-l_{21}u_{13})=-\frac{1}{5},\quad l_{33}=a_{33}-l_{31}u_{13}-l_{32}u_{23}=1.$$

故$\boldsymbol{A}$的 Crout 分解为

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & 0 & 0\\ 1 & 5/2 & 0\\ 2 & 5 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & -1/2 & 3/2\\ 0 & 1 & -1/5\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}.$$

5.1.4 Hermite 正定矩阵的 Cholesky 分解

定义 5.1.7 若矩阵$\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$满足$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}$, 且对任意非零向量$\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$, 都有$(\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}>0$, 则称$\boldsymbol{A}$为对称正定矩阵.

定义 5.1.8 若矩阵$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$满足$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$, 且对任意非零向量$\boldsymbol{0}\neq\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^n$, 都有$(\boldsymbol{Ax},\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}>0$, 则称$\boldsymbol{A}$为 Hermite 正定矩阵.

显然, 对称正定矩阵是 Hermite 正定矩阵在实线性空间的特例.

引理 5.1.1 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$是 Hermite 正定矩阵的充要条件是$\boldsymbol{A}$的 n 个顺序主子式全为正, 即$\Delta_k>0\ (k=1,2,\cdots,n)$.

Hermite 正定矩阵的三角分解有如下结果.

定理5.1.6 设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$是Hermite正定矩阵，则存在下三角阵$\boldsymbol{G}\in\mathbb{C}^{n\times n}$，使

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}.$$

称之为$\boldsymbol{A}$的 **Cholesky 分解**.

证：由引理 5.1.1 知，若$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$是 Hermite 正定矩阵，则有$\Delta_k>0\ (k=1,2,\cdots,n)$，故$\boldsymbol{A}$有三角分解，且$\boldsymbol{A}$有唯一的 LDU 分解$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{U}$，根据$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$和 LDU 分解的唯一性可得$\boldsymbol{U}=\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}$，即

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}.$$

又由定理 5.1.4 和引理 5.1.1 知对角阵$\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_n)$的对角元素$d_i>0\ \ (i=1,2,\cdots,n)$，于是

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\mathrm{diag}(\sqrt{d_1},\sqrt{d_2},\cdots,\sqrt{d_n})\mathrm{diag}(\sqrt{d_1},\sqrt{d_2},\cdots,\sqrt{d_n})\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}.$$

令

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{L}\mathrm{diag}(\sqrt{d_1},\sqrt{d_2},\cdots,\sqrt{d_n}),$$

则$\boldsymbol{G}$是下三角阵，且$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}$. ■

Hermite 正定矩阵的 Cholesky 分解的特点是当$\boldsymbol{G}$的元素求出后，$\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}$的元素即可随之求出，因此 Cholesky 分解比一般的三角分解计算量小，但要进行开平方根运算. 由于此分解法要进行开平方根运算，故也称为**平方根法**.

例 5.1.3 求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}5&2&-4\\2&1&-2\\-4&-2&5\end{bmatrix}$的 Cholesky 分解.

解：设$\boldsymbol{A}$的 Cholesky 分解是$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}$，由于$\boldsymbol{A}$是对称正定矩阵，$\boldsymbol{G}$也是实下三角阵，设

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}5&2&-4\\2&1&-2\\-4&-2&5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}g_{11}&0&0\\g_{21}&g_{22}&0\\g_{31}&g_{32}&g_{33}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}g_{11}&g_{21}&g_{31}\\0&g_{22}&g_{32}\\0&0&g_{33}\end{bmatrix}$$

由矩阵乘法，有

$$g_{11}=\sqrt{a_{11}}=\sqrt{5},\quad g_{21}=\frac{a_{21}}{g_{11}}=\frac{2}{\sqrt{5}},\quad g_{31}=\frac{a_{31}}{g_{11}}=-\frac{4}{\sqrt{5}},$$

$$g_{22}=\sqrt{a_{22}-|g_{21}|^2}=\frac{1}{\sqrt{5}},\quad g_{32}=\frac{1}{g_{22}}(a_{32}-g_{31}g_{21})=-\frac{2}{\sqrt{5}},$$

$$g_{33}=\sqrt{a_{33}-|g_{31}|^2-|g_{32}|^2}=1.$$

故$\boldsymbol{A}$的 Cholesky 分解为

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\sqrt{5} & 0 & 0\\ \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & 0\\ -\frac{4}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sqrt{5} & \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{4}{\sqrt{5}}\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}}\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}.$$

5.2 矩阵的满秩分解

5.2.1 满秩分解

定理 5.2.1 设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}_r^{m\times n}$，$r\le\min\{m,n\}$，则存在$\boldsymbol{B}\in\mathbb{C}_r^{m\times r}$，$\boldsymbol{C}\in\mathbb{C}_r^{r\times n}$，满足

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{BC}. \tag{5.2.1}$$

证: 首先设$\boldsymbol{A}$的前r个列向量是线性无关的，对矩阵$\boldsymbol{A}$只作初等行变换可将$\boldsymbol{A}$变换为

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{E}_r & \boldsymbol{D}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix},$$

即存在$\boldsymbol{P}\in\mathbb{C}_m^{m\times m}$，满足

$$\boldsymbol{PA}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{E}_r & \boldsymbol{D}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix},$$

也即

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{E}_r & \boldsymbol{D}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix}=\boldsymbol{P}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{E}_r\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix}[\boldsymbol{E}_r \quad \boldsymbol{D}]=\boldsymbol{BC}.$$

其中$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{P}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{E}_r\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix}\in\mathbb{C}_r^{m\times r}$，$\boldsymbol{C}=[\boldsymbol{E}_r \quad \boldsymbol{D}]\in\mathbb{C}_r^{r\times n}$.

若$\boldsymbol{A}$的前r个列向量线性相关，只需将$\boldsymbol{A}$先作初等列变换，使得前r个列向量线性无关，然后用上述方法即可. 即存在$\boldsymbol{P}\in\mathbb{C}_m^{m\times m}$，$\boldsymbol{Q}\in\mathbb{C}_n^{n\times n}$，满足

$$\boldsymbol{PAQ}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{E}_r & \boldsymbol{D}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix},$$

也即

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{E}_r & \boldsymbol{D}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix}\boldsymbol{Q}^{-1}=\boldsymbol{P}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{E}_r\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix}[\boldsymbol{E}_r \quad \boldsymbol{D}]\boldsymbol{Q}^{-1}=\boldsymbol{BC}.$$

其中$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{P}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{E}_r\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix}\in\mathbb{C}_r^{m\times r}$，$\boldsymbol{C}=[\boldsymbol{E}_r \quad \boldsymbol{D}]\boldsymbol{Q}^{-1}\in\mathbb{C}_r^{r\times n}$. ■

定理 5.2.1 表明任意矩阵都可以分解为一个列满秩矩阵与一个行满秩矩阵的乘积. 对秩为r的矩阵$\boldsymbol{A}$作满秩分解时，无论$\boldsymbol{A}$的前r个列向量是线性无关还是线

性相关，对$\boldsymbol{A}$只作初等行变换就可以得到$\boldsymbol{A}$的满秩分解. 以下分矩阵列向量线性无关和线性相关两种情况分别给出矩阵满秩分解的实例.

例 5.2.1　求矩阵$\boldsymbol{A}$的满秩分解.

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&4&-1&5&6\\2&0&0&0&-14\\-1&2&-4&0&1\\2&6&-5&5&-7\end{bmatrix}$$

解:　对$\boldsymbol{A}$作初等行变换:

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&4&-1&5&6\\2&0&0&0&-14\\-1&2&-4&0&1\\2&6&-5&5&-7\end{bmatrix}\to\cdots\to\begin{bmatrix}1&0&0&0&-7\\0&1&0&\dfrac{10}{7}&\dfrac{29}{7}\\0&0&1&\dfrac{5}{7}&\dfrac{25}{7}\\0&0&0&0&0\end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{A}$的秩为 3, 且前三个列向量线性无关, 故取

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}1&4&-1\\2&0&0\\-1&2&-4\\2&6&-5\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}1&0&0&0&-7\\0&1&0&\frac{10}{7}&\frac{29}{7}\\0&0&1&\frac{5}{7}&\frac{25}{7}\end{bmatrix}$$

容易验证$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}$.

例 5.2.2　求矩阵$\boldsymbol{A}$的满秩分解.

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&3&2&1&4\\2&6&1&0&7\\3&9&3&1&11\end{bmatrix}$$

解:　对$\boldsymbol{A}$作初等行变换:

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&3&2&1&4\\2&6&1&0&7\\3&9&3&1&11\end{bmatrix}\to\cdots\to\begin{bmatrix}1&3&0&-\dfrac{1}{3}&\dfrac{10}{3}\\0&0&1&\dfrac{2}{3}&\dfrac{1}{3}\\0&0&0&0&0\end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{A}$的秩为 2, 且第 1、3 列向量线性无关, 故取

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}1&2\\2&1\\3&3\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}1&3&0&-\frac{1}{3}&\frac{10}{3}\\0&0&1&\frac{2}{3}&\frac{1}{3}\end{bmatrix}$$

容易验证$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}$.

另外, $\boldsymbol{A}$的第 2、3 列向量线性无关, 故取

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}3&2\\6&1\\9&3\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}\frac{1}{3}&1&0&-\frac{1}{9}&\frac{10}{9}\\0&0&1&\frac{2}{3}&\frac{1}{3}\end{bmatrix}$$

容易验证$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{BC}$.

由本例题可知：矩阵的满秩分解是不唯一的.

5.2.2 不同满秩分解之间的关系

引理 5.2.1 对于任意复矩阵$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{m\times n}$，都有

$$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})=\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})=\mathrm{rank}\boldsymbol{A}=\mathrm{rank}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}.$$

证： 若$\boldsymbol{x}\in\mathbb{C}^{n}$是$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$的解，则$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$，即$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}$，因此$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$，这表明$\boldsymbol{x}$也是$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$的解. 同时，若$\boldsymbol{x}$是$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$的解，也必是$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$的解. 所以，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$与$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$是同解方程组，解空间的维数相同，即$n-\mathrm{rank}\boldsymbol{A}=n-\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})$，故$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})=\mathrm{rank}\boldsymbol{A}$. 同理可得$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})=\mathrm{rank}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$，又因为$\mathrm{rank}\boldsymbol{A}=\mathrm{rank}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$，故命题得证. ■

矩阵的不同满秩分解之间存在如下定理所表述的关系.

定理 5.2.2 已知$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}_r^{m\times n}$，$\boldsymbol{B},\boldsymbol{B}_1\in\mathbb{C}_r^{m\times r}$，$\boldsymbol{C},\boldsymbol{C}_1\in\mathbb{C}_r^{r\times n}$，若$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{BC}=\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{C}_1$均为$\boldsymbol{A}$的满秩分解，则存在$\boldsymbol{\theta}\in\mathbb{C}_r^{r\times r}$，满足

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{\theta},\ \boldsymbol{C}=\boldsymbol{\theta}^{-1}\boldsymbol{C}_1. \tag{5.2.2}$$

证：由$\boldsymbol{BC}=\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{C}_1$，等式两端右乘$\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}$，有

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}, \tag{①}$$

由引理 5.2.1，因为$\mathrm{rank}\boldsymbol{C}=\mathrm{rank}\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}=r$，$\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\in\mathbb{C}_r^{r\times r}$，由式①可知

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}})^{-1}=\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{\theta}_1. \tag{②}$$

其中，$\boldsymbol{\theta}_1=\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}})^{-1}$.

同理，在等式$\boldsymbol{BC}=\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{C}_1$两端左乘$\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}$并整理，可得

$$\boldsymbol{C}=(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{C}_1=\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{C}_1. \tag{③}$$

其中，$\boldsymbol{\theta}_2=(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_1$.

将式②与③代入$\boldsymbol{BC}=\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{C}_1$，可得

$$\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{C}_1=\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{C}_1,$$

因此

$$\boldsymbol{B}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{C}_1^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{B}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\theta}_2\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{C}_1^{\mathrm{H}}.$$

其中，$\boldsymbol{B}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_1$和$\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{C}_1^{\mathrm{H}}$都是可逆矩阵（引理 5.2.1）. 于是有

$$\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\theta}_2=\boldsymbol{E}.$$

由于$\boldsymbol{\theta}_1\boldsymbol{\theta}_2$是 r 阶方阵，故$\boldsymbol{\theta}_2=\boldsymbol{\theta}_1^{-1}$，取$\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}_1$，则式(5.2.2)成立. ■

5.3 矩阵的正交三角分解

矩阵的正交三角分解又称为 $\boldsymbol{QR}$ 分解或 $\boldsymbol{UR}$ 分解.

对 n 阶实满秩矩阵，必有 n 阶正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 及 n 阶正线上三角阵 $\boldsymbol{R}$，使$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$，这称为 $\boldsymbol{QR}$ 分解. 对 n 阶复满秩矩阵，必有 n 阶酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 及 n 阶正线上三角阵 $\boldsymbol{R}$，使$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{UR}$，这称为 $\boldsymbol{UR}$ 分解. 此外，对于列满秩矩阵，行满秩矩阵和一般矩阵，也有对应的正交三角分解.

5.3.1 满秩方阵的正交三角分解

定义 5.3.1　若 n 阶方阵的主对角线上的元素全是正的，则称该方阵是**正线矩阵**. 若 n 阶方阵是上三角阵且主对角线上的元素全是正的，则称为**正线上三角阵**；若 n 阶方阵是下三角阵且主对角线上的元素全是正的，则称为**正线下三角阵**.

引理 5.3.1　若 n 阶方阵$\boldsymbol{A}$是正线上三角阵，又是酉矩阵，则$\boldsymbol{A}$是单位阵.

下面给出复满秩方阵的 $\boldsymbol{UR}$ 分解定理.

定理 5.3.1　设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}_n^{n\times n}$，则$\boldsymbol{A}$可以唯一地分解为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{UR} \tag{5.3.1}$$

或

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{U}_1 \tag{5.3.2}$$

其中，$\boldsymbol{U}$，$\boldsymbol{U}_1\in U^{n\times n}$，$\boldsymbol{R}$是正线上三角阵，$\boldsymbol{L}_1$是正线下三角阵.

证：　将矩阵$\boldsymbol{A}$按列分块为$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)$，由于$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}_n^{n\times n}$，故列向量$\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n$线性无关，用 Schmidt 正交化方法将$\boldsymbol{\alpha}_i\ (i=1,2,\cdots,n)$正交化为$\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n$，再单位化为$\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n$，得

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\alpha}_1&=c_{11}\boldsymbol{u}_1\\
\boldsymbol{\alpha}_2&=c_{21}\boldsymbol{u}_1+c_{22}\boldsymbol{u}_2\\
\boldsymbol{\alpha}_3&=c_{31}\boldsymbol{u}_1+c_{32}\boldsymbol{u}_2+c_{33}\boldsymbol{u}_3\\
&\vdots\\
\boldsymbol{\alpha}_n&=c_{n1}\boldsymbol{u}_1+c_{n2}\boldsymbol{u}_2+\cdots+c_{nn}\boldsymbol{u}_n
\end{aligned}$$

其中，$c_{ii}=\|\boldsymbol{\beta}_i\|>0$. 于是有

$$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n)=(c_{11}\boldsymbol{u}_1,c_{21}\boldsymbol{u}_1+c_{22}\boldsymbol{u}_2,\cdots,c_{n1}\boldsymbol{u}_1+c_{n2}\boldsymbol{u}_2+\cdots+c_{nn}\boldsymbol{u}_n)$$

$$= (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n)\begin{bmatrix} c_{11} & c_{21} & \cdots & c_{n1} \\ & c_{22} & \cdots & c_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & \boldsymbol{0} & & c_{nn} \end{bmatrix} = \boldsymbol{UR}.$$

其中，$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n) \in U^{n\times n}$，$\boldsymbol{R}$是正线上三角阵.

再证分解的唯一性. 设$\boldsymbol{A}$有两个分解式

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{UR} = \tilde{\boldsymbol{U}}\tilde{\boldsymbol{R}}.$$

则

$$\tilde{\boldsymbol{U}}^{-1}\boldsymbol{U} = \tilde{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{R}^{-1}.$$

由于$\tilde{\boldsymbol{U}}^{-1}\boldsymbol{U}$是酉矩阵，$\tilde{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{R}^{-1}$是正线上三角阵，故由引理 5. 3. 1 知

$$\tilde{\boldsymbol{U}}^{-1}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{E}, \qquad \tilde{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{R}^{-1} = \boldsymbol{E}.$$

因此$\boldsymbol{U} = \tilde{\boldsymbol{U}}$，$\boldsymbol{R} = \tilde{\boldsymbol{R}}$，分解的唯一性得证.

又因$\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}_n^{n\times n}$，故$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \in \mathbb{C}_n^{n\times n}$. 根据已证的式(5.3.1)，得

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \tilde{\boldsymbol{U}}\tilde{\boldsymbol{R}}.$$

其中，$\tilde{\boldsymbol{U}} \in U^{n\times n}$, $\tilde{\boldsymbol{R}}$是正线上三角阵. 于是

$$\boldsymbol{A} = \tilde{\boldsymbol{R}}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{U}}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{U}_1.$$

其中，$\boldsymbol{L}_1$是正线下三角阵，$\boldsymbol{U}_1$是酉矩阵. ■

由于实矩阵是复矩阵的特例，正交矩阵是酉矩阵的特例，可得如下实满秩方阵的 $\boldsymbol{QR}$ 分解定理.

定理 5. 3. 2　若$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}_n^{n\times n}$，则必有 n 阶正交矩阵$\boldsymbol{Q}$及 n 阶正线上三角阵$\boldsymbol{R}$，使得$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR}$.

实满秩方阵的$\boldsymbol{QR}$分解也是唯一的.

5. 3. 2　一般矩阵的正交三角分解

引理 5. 3. 2　对任意复矩阵$\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}$，都有$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$与$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$是半正定 Hermite 矩阵.

证：首先，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$显然是 Hermite 矩阵，对应的 Hermite 二次型为$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}$，对任一 n 维复向量$\boldsymbol{x}_0$，有

$$f(\boldsymbol{x}_0) = \boldsymbol{x}_0^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}_0 = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0)^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0) = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0) = \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0\|^2 \geq 0.$$

故$f(\boldsymbol{x})$为半正定的，从而$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$是半正定Hermite矩阵. 类似地，可证$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$是半正定

Hermite 矩阵. ■

定理 5. 3. 3　设$\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}_r^{m\times r}$，则$\boldsymbol{A}$可以唯一地分解为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{R} \tag{5.3.3}$$

其中，$\boldsymbol{U} \in U_r^{m\times r}$，$\boldsymbol{R}$是$r$阶正线上三角阵.

证：　将矩阵$\boldsymbol{A}$按列分块为$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_r)$，将$\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_r$用 Schmidt 方法标准正交化得$\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_r$，则有$r$个关系式

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\alpha}_1 &= k_{11}\boldsymbol{u}_1 \\
\boldsymbol{\alpha}_2 &= k_{21}\boldsymbol{u}_1 + k_{22}\boldsymbol{u}_2 \\
&\vdots \\
\boldsymbol{\alpha}_r &= k_{r1}\boldsymbol{u}_1 + k_{r2}\boldsymbol{u}_2 + \cdots + k_{rr}\boldsymbol{u}_r
\end{aligned}$$

则

$$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \cdots, \boldsymbol{\alpha}_r) = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_r)\begin{bmatrix} k_{11} & k_{21} & \cdots & k_{r1} \\ & k_{22} & \cdots & k_{r2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & k_{rr} \end{bmatrix} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{R}.$$

其中，$\boldsymbol{U} = (\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_r) \in U_r^{m\times r}$，$\boldsymbol{R} = \left(k_{ij}\right)_{r\times r}$是正线上三角阵.

再证分解的唯一性. 设

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{R}_1 = \boldsymbol{U}_2\boldsymbol{R}_2,$$

则

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_1 = \boldsymbol{R}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_2.$$

因为$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$是正定 Hermite 矩阵（当$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$满秩时正定），由定理 5.1.6，它的正交三角分解是唯一的，故$\boldsymbol{R}_1 = \boldsymbol{R}_2$，于是$\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{U}_2$. ■

定理 5. 3. 4　若$\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}_r^{r\times n}$，则$\boldsymbol{A}$可以唯一地分解为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U} \tag{5.3.4}$$

其中$\boldsymbol{L}$是r阶正线下三角阵，$\boldsymbol{U} \in U_r^{r\times n}$.

证：　由定理 5.3.3 知$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{R}$，故$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{T}}$，其中$\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}$为$r$阶正线下三角阵，$\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{T}} \in U_r^{r\times n}$. ■

对于一般矩阵，其正交三角分解定理如下.

定理 5. 3. 5　若$\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}_r^{m\times n}$，则$\boldsymbol{A}$可以分解为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{R}\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}_2. \tag{5.3.5}$$

其中，$\boldsymbol{U}_1 \in U_r^{m\times r}$，$\boldsymbol{R}$是$r$阶正线上三角阵，$\boldsymbol{L}$是$r$阶正线下三角阵，$\boldsymbol{U}_2 \in U_r^{r\times n}$.

证：　由满秩分解定理，若$\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}_r^{m\times n}$，则存在$\boldsymbol{B} \in \mathbb{C}_r^{m\times r}$，$\boldsymbol{C} \in \mathbb{C}_r^{r\times n}$，满足

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{C},$$

对$\boldsymbol{B}$使用定理 5.3.3 进行矩阵分解，对$\boldsymbol{C}$使用定理 5.3.4 进行矩阵分解，即可得到式(5.3.5). ■

定理 5.3.1 和定理 5.3.3 给出了矩阵正交三角分解的 Schmidt 正交化方法.

例 5. 3. 1　求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-3 & 1 & -2\\ 1 & 1 & 1\\ 1 & -1 & 0\\ 1 & -1 & 1\end{bmatrix}$的 QR 分解.

解：　将$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3)$的列向量$\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\boldsymbol{\alpha}_3$用 Schmidt 方法标准正交化，得

$$\boldsymbol{u}_1=\left(-\frac{\sqrt{3}}{2},\frac{1}{2\sqrt{3}},\frac{1}{2\sqrt{3}},\frac{1}{2\sqrt{3}}\right)^{\mathrm{T}},$$

$$\boldsymbol{u}_2=(0,\frac{2}{\sqrt{6}},-\frac{1}{\sqrt{6}},-\frac{1}{\sqrt{6}})^{\mathrm{T}},$$

$$\boldsymbol{u}_3=(0,0,-\frac{1}{\sqrt{2}},\frac{1}{\sqrt{2}})^{\mathrm{T}}.$$

令$\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\boldsymbol{u}_3)=\begin{bmatrix}-\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0\\ \frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & 0\\ \frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$，由于$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{R}$，于是有$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$，即

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2\sqrt{3} & -\frac{2}{\sqrt{3}} & \frac{4}{\sqrt{3}}\\ 0 & \frac{4}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}}\\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}.$$

容易验证$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{R}$.

5.4　矩阵的奇异值分解

5.4.1　矩阵的奇异值

特征值是矩阵的重要指标之一，由特征值的计算可知，方阵有特征值，而长方阵没有特征值. 奇异值则是对一般矩阵而言的（不一定是方阵），是与特征值同一范畴的概念.

设$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}_r^{m\times n}$，$\lambda_i$是$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的特征值，$\mu_i$是$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$的特征值，由引理 5.3.3，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$和

$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$都是半正定 Hermite 矩阵，再由定理 3.3.6，λ_i和μ_i都是非负实数. 此外，因$\boldsymbol{A}$的秩为r，故其非零特征值的个数是r（对$\boldsymbol{A}$对角化后可得）. 设

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > \lambda_{r+1} = \lambda_{r+2} = \cdots = \lambda_m = 0$$

$$\mu_1 \geq \mu_2 \geq \cdots \geq \mu_r > \mu_{r+1} = \mu_{r+2} = \cdots = \mu_n = 0$$

则特征值λ_i与μ_i满足下述引理.

引理 5.4.1　设$\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}_r^{m\times n}$，$\lambda_i$是$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的特征值，$\mu_i$是$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$的特征值$(i = 1,2,\cdots,r)$，则

$$\lambda_i = \mu_i > 0 \quad (i = 1,2,\cdots,r).$$

定义 5.4.1　设$\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}_r^{m\times n}$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的正特征值为$\lambda_i$，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$的正特征值为$\mu_i$，称

$$\alpha_i = \sqrt{\lambda_i} = \sqrt{\mu_i} \qquad (i = 1,2,\cdots,r)$$

是$\boldsymbol{A}$的**正奇异值**，简称**奇异值**.

例 5.4.1　求$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$的奇异值.

解：　因为

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

因此，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的特征值为 5, 0, 0，故$\boldsymbol{A}$的奇异值为$\sqrt{5}$.

定理 5.4.1　若$\boldsymbol{A}$是正规矩阵，则$\boldsymbol{A}$的奇异值是$\boldsymbol{A}$的非零特征值的模.

证：　对正规矩阵$\boldsymbol{A}$，存在酉矩阵$\boldsymbol{U}$，满足

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}},$$

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}\mathrm{diag}(\bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \cdots, \bar{\lambda}_n)\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}},$$

故

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}\mathrm{diag}(\lambda_1\bar{\lambda}_1, \lambda_2\bar{\lambda}_2, \cdots, \lambda_n\bar{\lambda}_n)\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}.$$

于是$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的特征值为$\lambda_1\bar{\lambda}_1, \lambda_2\bar{\lambda}_2, \cdots, \lambda_n\bar{\lambda}_n$. 再由奇异值的定义可得证.　■

5.4.2　矩阵的奇异值分解

定义 5.4.2　设$\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in \mathbb{C}^{m\times n}$，若存在 m 阶酉矩阵$\boldsymbol{U}$和 n 阶酉矩阵$\boldsymbol{V}$，使$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{B}$，则称$\boldsymbol{A}$与$\boldsymbol{B}$酉等价.

酉等价是酉相似的普遍化.

由正规矩阵的结构定理, 正规矩阵$\boldsymbol{A}$酉相似于对角阵$\boldsymbol{D}$, 即$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{D}$, 由此可导出矩阵$\boldsymbol{A}$的三因子分解$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$, 但这一分解要求$\boldsymbol{A}$是正规矩阵. 对于一般的复矩阵$\boldsymbol{A}$, 基于酉等价$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{D}$也可导出矩阵$\boldsymbol{A}$的三因子分解$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$, 这就是适用于一般复矩阵的奇异值分解(Singular Value Decomposition, SVD).

奇异值对角阵$\boldsymbol{D}$是矩阵$\boldsymbol{A}$在酉等价意义下的标准形, SVD 可将任意复矩阵$\boldsymbol{A}$分解为酉矩阵$\boldsymbol{U}$、奇异值对角阵$\boldsymbol{D}$和酉矩阵$\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$之积.

定理 5.4.2　若$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}_r^{m\times n}$, $\delta_1\geq\delta_2\geq\cdots\geq\delta_r$是$\boldsymbol{A}$的$r$个奇异值, 则存在$m$阶酉矩阵$\boldsymbol{U}$和$n$阶酉矩阵$\boldsymbol{V}$, 满足

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}.$$

其中, $\boldsymbol{\Delta}=\mathrm{diag}(\delta_1,\delta_2,\cdots,\delta_r)$.

证: 由于$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$是 Hermite 矩阵, 故存在 m 阶酉矩阵$\boldsymbol{U}$, 满足

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\Delta}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix},$$

令$\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2)$, 其中$\boldsymbol{U}_1$是$m\times r$次酉矩阵, $\boldsymbol{U}_2$是$m\times(m-r)$次酉矩阵, 则

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}[\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2]=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\Delta}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix}.$$

比较上式两端, 得

$$\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\Delta}^{\mathrm{H}} \tag{①}$$

$$\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_2=\boldsymbol{0} \tag{②}$$

$$\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{0} \tag{③}$$

$$\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_2=\boldsymbol{0} \tag{④}$$

由①式, $\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1(\boldsymbol{\Delta}^{\mathrm{H}})^{-1}=\boldsymbol{\Delta}$, 令$\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1(\boldsymbol{\Delta}^{\mathrm{H}})^{-1}$, 则

$$\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{\Delta}^{-1}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1(\boldsymbol{\Delta}^{\mathrm{H}})^{-1}=\boldsymbol{\Delta}^{-1}\boldsymbol{\Delta}=\boldsymbol{E}_r,$$

所以$\boldsymbol{V}_1\in U_r^{n\times r}$. 于是存在$\boldsymbol{V}_2$使$\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{V}_1,\boldsymbol{V}_2)$为$n$阶酉矩阵, 因此

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{V}_1,\boldsymbol{V}_2)=\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 & \boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2\\ \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 & \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2\end{bmatrix}.$$

对各元素逐一进行分析:

(1) $\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1(\boldsymbol{\Delta}^{\mathrm{H}})^{-1}=\boldsymbol{\Delta}$.

(2) $\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{V}_2=\boldsymbol{0}=\boldsymbol{\Delta}^{-1}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2$, 因此$\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2=\boldsymbol{0}$.

(3) 由式④可得$\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{0}$，故$\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{0}$.

(4) 同理，$\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2=\boldsymbol{0}$.

综上可得

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix},$$

将$\boldsymbol{A}$表示出来，可得$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}})^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{-1}=\boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$. ■

定理 5.4.2 给出了任意复矩阵的奇异值分解. 可以证明，在定理 5.4.2 中:

(1)酉矩阵$\boldsymbol{U}$的列向量是$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的特征向量，酉矩阵$\boldsymbol{V}$的列向量是$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$的特征向量，但并不是任取$n$个$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$的两两正交的单位特征向量都可以作为$\boldsymbol{V}$的列向量，而是必须与$\boldsymbol{U}$的列向量相匹配，匹配关系由$\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1(\boldsymbol{\Delta}^{\mathrm{H}})^{-1}$确定.

(2)次酉矩阵$\boldsymbol{U}_1$和$\boldsymbol{V}_1$的列向量分别是$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$和$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$的非零特征值所对应的特征向量.

(3)次酉矩阵$\boldsymbol{U}_2$和$\boldsymbol{V}_2$的列向量分别是$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$和$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$的零特征值所对应的特征向量.

定理 5. 4. 3 若$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}_r^{m\times n}$，$\delta_1\geq\delta_2\geq\cdots\geq\delta_r$是$\boldsymbol{A}$的奇异值，则总有次酉矩阵$\boldsymbol{U}_r\in U_r^{m\times r}$，$\boldsymbol{V}_r\in U_r^{n\times r}$，满足

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{V}_r^{\mathrm{H}}.$$

其中，$\boldsymbol{\Delta}=\mathrm{diag}(\delta_1,\delta_2,\cdots,\delta_r)$.

证： 由定理 5.4.2 可知

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}.$$

若设$\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_m)$，$\boldsymbol{V}=(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_n)$，则

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}&=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_m)\begin{bmatrix}\delta_1 & & & & & \\ & \delta_2 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \delta_r & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{v}_n^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}\\ &=\delta_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}}+\delta_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}}+\cdots+\delta_r\boldsymbol{u}_r\boldsymbol{v}_r^{\mathrm{H}}\\ &=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_r)\begin{bmatrix}\delta_1 & & & \\ & \delta_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \delta_r\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{v}_r^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}=\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{V}_r^{\mathrm{H}}\end{aligned}$$ ■

定理 5.4.3 的分解对应定理 5.4.2 分解的核心部分，称为**次奇异值分解**.

例 5. 4. 2 已知$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 0 & 0\\ 1 & 1\end{bmatrix}$，求$\boldsymbol{A}$的奇异值分解.

解： $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\begin{bmatrix}2&0&2\\0&0&0\\2&0&2\end{bmatrix}$，$|\lambda\boldsymbol{E}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}|=\lambda^2(\lambda-4)$，所以$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的特征值$\lambda_1=4$，$\lambda_2=\lambda_3=0$，$\boldsymbol{A}$的奇异值$\alpha=2$，$\boldsymbol{\Delta}=2$.

特征值$\lambda_1=4$对应的单位特征向量$\boldsymbol{u}_1=(\frac{1}{\sqrt{2}},0,\frac{1}{\sqrt{2}})^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{u}_1=(\frac{1}{\sqrt{2}},0,\frac{1}{\sqrt{2}})^{\mathrm{T}}$.

因此

$$\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1(\boldsymbol{\Delta}^{\mathrm{H}})^{-1}=\begin{bmatrix}1&0&1\\1&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\0\\\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\cdot\frac{1}{2}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}.$$

不难验证

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\0\\\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\cdot 2\cdot\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}.$$

这是次奇异值分解的形式. 若进行奇异值分解，还需计算$\boldsymbol{U}_2$和$\boldsymbol{V}_2$.

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的零特征值所对应的次酉矩阵

$$\boldsymbol{U}_2=\begin{bmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\0&1\\\frac{1}{\sqrt{2}}&0\end{bmatrix},$$

$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$的零特征值所对应的次酉矩阵

$$\boldsymbol{V}_2=\begin{bmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix},$$

于是$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$对应的酉矩阵$\boldsymbol{U}$与$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$对应的酉矩阵$\boldsymbol{V}$分别为

$$\boldsymbol{U}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\0&0&1\\\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}&0\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}.$$

且

$$\boldsymbol{D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta}&\boldsymbol{0}\\\boldsymbol{0}&\boldsymbol{0}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2&0\\0&0\\0&0\end{bmatrix}.$$

不难验证$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$.

例 5.4.3 求$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2&0\\0&-i\\0&0\end{bmatrix}$的奇异值分解.

解：$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\begin{bmatrix}4&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{bmatrix}$，$|\lambda\boldsymbol{E}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}|=\lambda(\lambda-1)(\lambda-4)$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的特征值$\lambda_1=4$，$\lambda_2=1$，$\lambda_3=0$.

所以，$\boldsymbol{A}$的奇异值为$\alpha_1=2$，$\alpha_2=1$，故$\boldsymbol{\Delta}=\begin{bmatrix}2&\\&1\end{bmatrix}$.

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的特征值为 4 的单位特征向量为

$$\boldsymbol{u}_1=(1,0,0)^{\mathrm{T}},$$

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的特征值为 1 的单位特征向量为

$$\boldsymbol{u}_2=(0,1,0)^{\mathrm{T}},$$

于是

$$\boldsymbol{U}_1=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2)=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\\0&0\end{bmatrix},$$

因此

$$\boldsymbol{V}_1=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1(\boldsymbol{\Delta}^{\mathrm{H}})^{-1}=\begin{bmatrix}1&0\\0&i\end{bmatrix},$$

所以

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\\0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&\\&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0\\0&i\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}.$$

这是次奇异值分解的形式. 若进行奇异值分解，还需计算$\boldsymbol{U}_2$和$\boldsymbol{V}_2$.

$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的特征值为 0 的单位特征向量

$$\boldsymbol{u}_3=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}=\boldsymbol{U}_2,$$

故

$$\boldsymbol{U}=(\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2)=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{V}=\boldsymbol{V}_1=\begin{bmatrix}1&0\\0&i\end{bmatrix},$$

所以

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&0\\0&1\\0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0\\0&i\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}.$$

5.5 应用实例

5.5.1 解线性代数方程组

矩阵的三角分解和正交三角分解都可应用于求解线性代数方程组.

1. 矩阵三角分解法

若线性代数方程组$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$的系数矩阵$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}_n^{n\times n}$，且$\Delta_k\neq 0\ (k=1,2,\cdots,n-1)$，其中$\Delta_k$为$\boldsymbol{A}$的 k 阶顺序主子式，则$\boldsymbol{A}$可以进行三角分解$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$. 于是可得与$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$同解的两个线性代数方程组:

$$\boldsymbol{L}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b},\quad \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}.$$

注意这两个方程组的系数矩阵都是三角阵，因而便于求解: 由第一个方程组递推求得$\boldsymbol{y}$，再代入第二个方程组回代求得$\boldsymbol{x}$.

例 5.5.1 用矩阵三角分解法解方程组$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&3&0\\2&3&0\\2&0&-6\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\2\\3\end{bmatrix}.$$

解: 例 5.1.1 已解出$\boldsymbol{A}$的 Doolittle 分解为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}=\begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\2&2&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&3&0\\0&-3&0\\0&0&-6\end{bmatrix}.$$

由$\boldsymbol{L}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{b}$递推求得

$$y_1=1,\quad y_2=0,\quad y_3=1.$$

再由$\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$回代可得

$$x_3=-\tfrac{1}{6},\quad x_2=0,\quad x_1=1.$$

2. 矩阵正交三角分解法

矩阵的三角分解仅适用于方阵，而矩阵的正交三角分解无此要求，适用于一般矩阵. 此外，用于解线性代数方程组时，矩阵正交三角分解法通过矩阵运算完成求解，无需递推与回代.

例 5.5.2 用矩阵正交三角分解法解方程组$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-3&1&-2\\1&1&1\\1&-1&0\\1&-1&1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\0\\-2\\1\end{bmatrix}.$$

解: 例 5.3.1 已解出$\boldsymbol{A}$的正交三角分解为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}-\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0\\ \frac{1}{2\sqrt{3}} & \frac{2}{\sqrt{6}} & 0\\ \frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{2\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2\sqrt{3} & -\frac{2}{\sqrt{3}} & \frac{4}{\sqrt{3}}\\ 0 & \frac{4}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}}\\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix},$$

由$\boldsymbol{URx}=\boldsymbol{b}$可得$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}$，于是

$$\boldsymbol{R}^{-1}=\begin{bmatrix}\frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{\sqrt{6}}{12} & -\frac{3\sqrt{2}}{4}\\ 0 & \frac{\sqrt{6}}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4}\\ 0 & 0 & \sqrt{2}\end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}-\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{3}{4}\\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2}\\ 0 & 0 & -1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\\-2\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\frac{5}{2}\\-\frac{1}{2}\\3\end{bmatrix}.$$

5.5.2 基于奇异值分解的数字图像压缩

数字图像可以模型化为矩阵，矩阵元素就是像素点的灰度值.

对于矩阵$\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}_r^{m\times n}$，$\boldsymbol{A}$的奇异值分解为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}},$$

其中$\boldsymbol{U}$是m阶酉矩阵，$\boldsymbol{V}$是n阶酉矩阵，对角阵$\boldsymbol{\Delta}=\mathrm{diag}(\delta_1,\delta_2,\cdots,\delta_r)$，对角元素$\delta_1\geq\delta_2\geq\cdots\geq\delta_r>0$是$\boldsymbol{A}$的全部正奇异值.

设$\boldsymbol{U}$的列向量为$\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_m$，$\boldsymbol{V}$的列向量为$\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_n$，则有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}&=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_m)\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix}(\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_n)^{\mathrm{H}}\\ &=(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_m)\begin{bmatrix}\delta_1 & & & & & \\ & \delta_2 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \delta_r & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{v}_n^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}\\ &=\delta_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}}+\delta_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}}+\cdots+\delta_r\boldsymbol{u}_r\boldsymbol{v}_r^{\mathrm{H}}=\sum_{i=1}^{r}\delta_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}.\end{aligned}$$

存储矩阵$\boldsymbol{A}$需要mn个数据，而存储$\delta_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}}+\delta_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}}+\cdots+\delta_r\boldsymbol{u}_r\boldsymbol{v}_r^{\mathrm{H}}$则需要$r(m+n+1)$个数据，当$r<\min\{m,n\}$时，$r(m+n+1)\leq mn$，从而可以实现数

据压缩. 上述数据压缩方法由于可以从存储数据完全恢复原始数据, 因而称为**无损压缩**. 对于图像数据, 往往允许恢复的图像存在一定失真, 以换取更大的数据压缩比（定义为原始图像数据量/压缩后图像数据量）, 这种数据压缩方法称为**有损压缩**. 例如, 由于$\delta_1 \geq \delta_2 \geq \cdots \geq \delta_r$, 前面的奇异值对图像恢复的贡献更大, 若只取前 k 个奇异值, 可得近似矩阵

$$\boldsymbol{A} \approx \delta_1 \boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}} + \delta_2 \boldsymbol{u}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}} + \cdots + \delta_k \boldsymbol{u}_k \boldsymbol{v}_k^{\mathrm{H}}, \quad (k < r),$$

则只需要$k(m+n+1)$个存储数据, 数据压缩比为$\frac{mn}{k(m+n+1)}$.

(a) 原始图像　(b) 奇异值个数为 10　(c) 奇异值个数为 20

(d) 奇异值个数为 30　(e) 奇异值个数为 40　(f) 奇异值个数为 50

(g) 奇异值个数为 70　(h) 奇异值个数为 100　(i) 奇异值个数为 200

图 5.5.1　奇异值个数不同时的压缩图像效果

用奇异值分解(SVD)进行数字图像压缩时, 奇异值个数不同时的压缩图像效果如图 5.5.1 所示. 图 5.5.1(a)是原始图像(大小为 512×512 的 Lena.bmp), 对应一个 512×512 矩阵($m = n = 512$). 图 5.5.1(b)~(i)是奇异值个数为 10 至 200 时的压缩图像效果. 当奇异值个数为 10 时, 压缩图像模糊, 细节信息未被保留, 当奇异值个数为 20 时, 压缩图像仍较模糊但改善明显, 当奇异值个数为 30~50 时, 压缩图像效果不断改善且保留了原始图像的绝大部分信息, 当奇异值个数为 70 时, 压缩图像效果接近于原始图像, 当奇异值个数为 100 时, 压缩图像几乎等同于原始图像, 当奇异值个数增加至 200 时, 压缩图像效果继续改善但改善幅度趋于减小. 表 5.5.1 给出了奇异值个数不同时的数据压缩比.

表 5.5.1　奇异值个数不同时的数据压缩比

奇异值个数	数据压缩比
10	25.575
20	12.788
30	8.525
40	6.394
50	5.115
70	3.654
100	2.558
200	1.279

5.5.3　基于奇异值分解的数字水印

数字水印(digital watermarking)技术是将特定的数字信号嵌入数字产品中以保护数字产品版权, 完整性, 防复制或去向追踪的技术. 例如, 利用数字水印技术可在不影响多媒体产品质量的情况下将某些版权信息嵌入多媒体数据, 以便发生版权纠纷时原创者可以检测或恢复嵌入其中的版权信息, 作为重要的法律证据, 是版权保护的有效手段.

数字水印应具有以下特点:

(1) 隐蔽性: 数字水印嵌入后不影响原作品的价值与使用效果, 不会造成感知质

量上的下降, 即要求数字水印具有不可察觉的特点.

(2) 鲁棒性: 数字水印在常见信号处理后不会丢失, 具有抵抗常见信号处理的能力.

(3) 安全性: 对恶意篡改有强的抵抗力, 版权方通过特定的算法能够准确地提取数字产品中的水印, 且提取的水印能够证明版权所有.

基于奇异值分解的数字水印是一种变换域方法, 具有很高的稳定性. 下面以在数字图像中嵌入数字水印为例介绍其原理.

将数字图像模型化为矩阵$\boldsymbol{A}$, 则$\boldsymbol{A}$的奇异值分解为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}},$$

其中$\boldsymbol{U}$是m阶酉矩阵, $\boldsymbol{V}$是n阶酉矩阵, 对角阵$\boldsymbol{\Delta}=\mathrm{diag}(\delta_1,\delta_2,\cdots,\delta_r)$, 对角元素$\delta_1\geq\delta_2\geq\cdots\geq\delta_r>0$是$\boldsymbol{A}$的全部正奇异值.

设$\boldsymbol{U}$的列向量为$\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_m$, $\boldsymbol{V}$的列向量为$\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_n$, 则由上一小节的推导, $\boldsymbol{A}$的奇异值分解为

$$\boldsymbol{A}=\delta_1\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}}+\delta_2\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}}+\cdots+\delta_r\boldsymbol{u}_r\boldsymbol{v}_r^{\mathrm{H}}=\sum_{i=1}^{r}\delta_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}},$$

这表明$\boldsymbol{A}$可以看成是 r 个秩为 1 的子图$\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}$叠加的结果, 而奇异值$\delta_i$为权系数.

若以 F-范数的平方表示图像的能量, 则由矩阵奇异值分解的定义有:

$$\|\boldsymbol{A}\|_F^2=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})=\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{V}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Delta} & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\right)=\sum_{i=1}^{r}\delta_i^2,$$

也即矩阵$\boldsymbol{A}$经奇异值分解后, 其纹理和几何信息都集中在$\boldsymbol{U}$和$\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$中, 而$\boldsymbol{\Delta}$中的奇异值则代表图像的能量信息.

图像矩阵的奇异值具有以下特性:

(1) 奇异值矩阵$\boldsymbol{D}$体现图像的能量信息, 酉矩阵$\boldsymbol{U}$和$\boldsymbol{V}$体现图像的纹理和几何信息;

(2) 对奇异值进行小幅度修改对图像的影响小, 即奇异值具有稳定性.

以下简称图像矩阵为图像, 数字水印嵌入和提取的基本原理如下.

1. 水印嵌入

设原始图像为$\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}$, 水印图像$\boldsymbol{W}\in\mathbb{R}^{m\times n}$与原始图像大小一致(若不一致则可通过补零的方法实现一致), 对$\boldsymbol{A}$进行奇异值分解可得$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$, 希望将水印隐藏于$\boldsymbol{A}$的奇异值中, 但$\boldsymbol{D}$为对角阵, 无法直接将$\boldsymbol{W}$添加到$\boldsymbol{D}$中. 但是, 利用奇异值的稳定性, 可以对$\boldsymbol{D}+\alpha\boldsymbol{W}$进行奇异值分解, 其中$\alpha$决定水印嵌入的强度,

即有

$$\boldsymbol{D}+\alpha\boldsymbol{W}=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{D}_1\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}, \tag{*}$$

选择合适的嵌入系数α，使$\boldsymbol{D}_1$既含有水印信息，又与$\boldsymbol{D}$相差不大，如果用$\boldsymbol{D}_1$代替$\boldsymbol{D}$，则可得到新的图像

$$\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}_1\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}},$$

即完成了水印嵌入. 由于奇异值对扰动具有不敏感性，当α选择合适时，新图像与原图像的差异在视觉上难以察觉.

2. **水印提取**

设输入图像为$\boldsymbol{A}^*$，由于可能经过噪声恶化或人为处理，$\boldsymbol{A}^*$通常不等于$\boldsymbol{A}_1$，且一般并不知道$\boldsymbol{A}^*$是否含有水印. 假设$\boldsymbol{A}^*$确实含有水印，为了对水印进行提取，先对$\boldsymbol{A}^*$作奇异值分解，得

$$\boldsymbol{A}^*=\boldsymbol{U}_2\boldsymbol{D}_2\boldsymbol{V}_2^{\mathrm{H}},$$

若$\boldsymbol{A}^*$被破坏得不严重，则用$\boldsymbol{D}_2$替换式(*)中的$\boldsymbol{D}_1$后，解出的$\boldsymbol{W}^*$与真实水印$\boldsymbol{W}$应该差别不大，从而有

$$\boldsymbol{W}^*=\frac{1}{\alpha}(\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{D}_2\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}-\boldsymbol{D}),$$

即完成了水印提取.

基于奇异值分解(SVD)的数字水印实验结果如图 5.5.3 所示.

(a) 原始图像和原始水印

(b) 嵌入系数为 0.2 的图像和提取的水印

(c) 嵌入系数为 0.5 的图像和提取的水印

(d) 嵌入系数为 0.8 的图像和提取的水印

图 5.5.3　嵌入系数不同时的图像和提取的水印

图 5.5.3(a)是原始图像(大小为 512×512 的 Lena.png)和原始水印(大小为 64×64 的矩阵分析.png), 图 5.5.3(b)~(d)依次是嵌入系数为 0.2, 0.5 和 0.8 时生成的图像和提取出来的水印, 可以发现嵌入系数越大, 对原始图像的影响也越大, 对提取出来的水印的影响也越大.

本 章 小 结

本章介绍了几种常用的矩阵分解，包括矩阵的三角分解（也称LU分解）、满秩分解、正交三角分解（也称QR分解或UR分解）、矩阵的奇异值分解（SVD）、并介绍了矩阵分解的若干应用实例.

学习完本章内容后，应能达到如下基本要求：

1. 掌握矩阵三角分解的定义及不唯一性，三种规范化三角分解的定义和计算，Hermite正定矩阵的三角分解（Cholesky分解）的定义和计算.

2. 掌握矩阵满秩分解的定义及具体分解方法，理解矩阵满秩分解的不唯一性及不同满秩分解之间的关系.

3. 掌握矩阵正交三角分解的定义及具体分解方法，理解矩阵正交三角分解与Schmidt正交与单位化方法之间的关系. 理解矩阵正交三角分解的唯一性.

4. 掌握矩阵奇异值分解的定义及具体分解方法.

5. 了解矩阵分解的应用.

习题 5

5-1　设$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} a+1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$, 则 a 取何值时矩阵$\boldsymbol{A}$可以进行 LU 分解？

5-2　求$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 2 & 2 & 3 \\ 4 & 7 & 7 \\ -2 & 4 & 5 \end{bmatrix}$的 Doolittle 分解和 Crout 分解，并计算$|\boldsymbol{A}|$.

5-3　求$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix}$的 Doolittle 分解和 Crout 分解，并计算$|\boldsymbol{A}|$.

5-4　求$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 2 & -1 & 3 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 3 \end{bmatrix}$的 LDU 分解.

5-5　求$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 1 & 3 & 0 \\ 2 & 4 & 0 \\ 1 & 4 & 5 \end{bmatrix}$的 Doolittle 分解, LDU 分解和 Crout 分解.

5-6　Crout 分解的紧凑计算格式与 Doolittle 分解的紧凑计算格式的区别是什么？

5-7　设$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} a+1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$, 则 a 取何值时矩阵$\boldsymbol{A}$可以进行 Cholesky 分解？

5-8　求$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 1 \\ 1 & 1 & 5 \end{bmatrix}$的 Cholesky 分解.

5-9　求$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 4.25 & 2.75 \\ 1 & 2.75 & 3.50 \end{bmatrix}$的 Cholesky 分解.

5-10　求矩阵$\boldsymbol{A}$的一种满秩分解.

（1）$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$　　（2）$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 2 & -1 & 1 \\ -2 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$

5-11　求矩阵$\boldsymbol{A}$的一种满秩分解.

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

5-12　求矩阵$\boldsymbol{A}$的一种满秩分解.

（1）$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 1 & 3 & 3 \\ 2 & 4 & 3 & 1 & 4 & 5 \\ 4 & 8 & 6 & 2 & 8 & 10 \end{bmatrix}$　　（2）$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & 1 & 1 & 10 \\ 3 & 6 & 1 & 4 & 2 & 36 \\ 2 & 4 & 0 & 2 & 2 & 27 \\ 6 & 12 & 1 & 7 & 5 & 73 \end{bmatrix}$

5-13　求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$的正交三角分解.

5-14　求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}3 & 14 & 9\\ 6 & 43 & 3\\ 6 & 22 & 15\end{bmatrix}$的正交三角分解.

5-15　求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 2 & 2\\ 2 & 1 & 2\\ 1 & 2 & 1\end{bmatrix}$的 $\boldsymbol{QR}$ 分解.

5-16　求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 4 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ 0 & 3 & 2\end{bmatrix}$的 $\boldsymbol{QR}$ 分解.

5-17　求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 1 & 1 & 1\end{bmatrix}$的奇异值分解.

5-18　求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 2 & 0 & 0\end{bmatrix}$的奇异值分解.

5-19　求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 0 & 0\\ 1 & -1\end{bmatrix}$的奇异值分解.

5-20　求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & 0\\ 0 & 3\\ 0 & 0\end{bmatrix}$的奇异值分解.

5-21　设$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$是矩阵$\boldsymbol{A}$的一个奇异值分解，试证明:

(1) 酉矩阵$\boldsymbol{U}$的列向量是$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$的特征向量，称其为矩阵$\boldsymbol{A}$的左奇异向量;

(2) 酉矩阵$\boldsymbol{V}$的列向量是$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$的特征向量，称其为矩阵$\boldsymbol{A}$的右奇异向量.

5-22　用矩阵三角分解法解方程组$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & -1 & 3\\ 1 & 2 & 1\\ 2 & 4 & 3\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}3\\ 4\\ 7\end{bmatrix}.$$

5-23　用矩阵三角分解法解方程组$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}2 & 1 & 1\\ 1 & 3 & 2\\ 1 & 2 & -3\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}3\\ 3\\ 11\end{bmatrix}.$$

5-24　用矩阵正交三角分解法解方程组$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 2 & 2\\ 2 & 1 & 2\\ 1 & 2 & 1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}3\\ 4\\ 5\end{bmatrix}.$$

5-25　用矩阵正交三角分解法解方程组$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 4 & 1\\ 1 & 1 & 1\\ 0 & 3 & 2\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}6\\ 5\\ 7\end{bmatrix}.$$