§2 QR 分解

一、初等反射阵

1．定义 如下形式的n阶方阵

$$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{I}_n-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{u}\in\mathbf{R}^n \text{ 且 } \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}=1\ (\text{或}\ \|\boldsymbol{u}\|_2=1)$$

称为**初等反射阵**（或**镜象变换阵**，或 **Householder 矩阵**）；由初等反射阵$\boldsymbol{H}$确定的$\mathbf{R}^n$的变换$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}$称为**初等反射变换**或 **Householder 变换**。

2. 性质 设$\boldsymbol{H}$是初等反射阵，由定义容易证明$\boldsymbol{H}$的如下一些性质：

1）$\boldsymbol{H}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{H}$（实对称阵）；

$$\boldsymbol{H}^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{I}_n-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}_n-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{H}$$ **证毕**

2）$\boldsymbol{H}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}=\boldsymbol{I}$（正交阵）；

$$\boldsymbol{H}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}=(\boldsymbol{I}_n-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})^2=\boldsymbol{I}_n-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}+4\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}_n$$ **证毕**

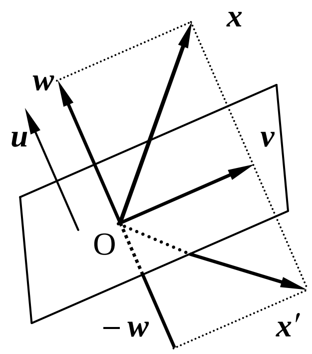
3）$\boldsymbol{H}^2=\boldsymbol{I}_n$（对合阵）；　4）$\boldsymbol{H}^{-1}=\boldsymbol{H}$（自逆阵）；

5）$\det\boldsymbol{H}=-1$。

由上节所证的结果，有$\det\boldsymbol{H}=\det(\boldsymbol{I}_n-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})=1-2\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}=1-2=-1$。**证毕**

3. 几何解释

在$\mathbf{R}^3$中说明称之为初等反射阵的原因。考虑以$\boldsymbol{u}$为法向量且过原点的平面π（见图）。



任取$\boldsymbol{x}\in\mathbf{R}^3$，将$\boldsymbol{x}$分解为

$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w}$，其中 $\boldsymbol{v}\in\pi$，$\boldsymbol{w}\perp\pi$

则 $(\boldsymbol{v},\boldsymbol{u})=\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}=0$（正交），$\boldsymbol{w}=\lambda\boldsymbol{u}$（共线）。从而

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{I}_3-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w})=$$

$$=\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}=\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w}-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}(\lambda\boldsymbol{u})=\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w}-2\lambda\boldsymbol{u}=\boldsymbol{v}-\boldsymbol{w}=\boldsymbol{x}'$$

可见$\boldsymbol{H}$作用于向量$\boldsymbol{x}$后，将其关于以$\boldsymbol{u}$为法向量的平面π反射变为$\boldsymbol{x}'$。

4. 一些重要结论

定理 设$\boldsymbol{H}$是n阶初等反射阵，则$\begin{pmatrix}\boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{H}\end{pmatrix}$是$n+r$阶初等反射阵。

证 因为$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{I}_n-2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}$，且$\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}=1$，所以

$$\begin{pmatrix} I_r & O \\ O & H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_r & O \\ O & I_n - 2uu^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_r & O \\ O & I_n \end{pmatrix} - 2\begin{pmatrix} O & O \\ O & uu^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} I_r & O \\ O & I_n \end{pmatrix} - 2\begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ u \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{0}^{\mathrm{T}} & u^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} = I_{n+r} - 2u_1u_1^T$$

其中 $u_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ u \end{pmatrix}$满足$u_1^{\mathrm{T}}u_1 = \begin{pmatrix} \mathbf{0}^{\mathrm{T}} & u^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ u \end{pmatrix} = u^{\mathrm{T}}u = 1$。故$\begin{pmatrix} I_r & O \\ O & H \end{pmatrix}$是初等反射阵。

证毕

定理 设$z \in \mathbf{R}^n$是给定的单位向量，即$\|z\|_2 = 1$，则对任意$x \in \mathbf{R}^n$，必存在初等反射阵H，使得

$$Hx = \alpha z, \qquad 其中\ \alpha = \pm\|x\|_2$$

证 若$x = \mathbf{0}$，任取单位向量u，则$H = I - 2uu^{\mathrm{T}}$满足$Hx = \mathbf{0} = \alpha z$，成立。

若$x = \alpha z$，取满足$(x, u) = u^{\mathrm{T}}x = 0$的单位向量$u$，则$Hx = x = \alpha z$，成立。

若$x \neq \alpha z$，取$u = \dfrac{x - \alpha z}{\|x - \alpha z\|_2}$，则$u$是单位向量，且有

$$Hx = (I - 2uu^{\mathrm{T}})x = x - 2\frac{(x - \alpha z)(x - \alpha z)^{\mathrm{T}}}{\|x - \alpha z\|_2^2}x = x - 2\frac{x^{\mathrm{T}}x - \alpha z^{\mathrm{T}}x}{(x - \alpha z, x - \alpha z)}(x - \alpha z)$$

$$= x - 2\frac{x^{\mathrm{T}}x - \alpha z^{\mathrm{T}}x}{x^{\mathrm{T}}x - \alpha z^{\mathrm{T}}x - \alpha x^{\mathrm{T}}z + \alpha^2 z^{\mathrm{T}}z}(x - \alpha z) = x - \frac{2(x^{\mathrm{T}}x - \alpha z^{\mathrm{T}}x)}{2(x^{\mathrm{T}}x - \alpha z^{\mathrm{T}}x)}(x - \alpha z)$$

$$= x - (x - \alpha z) = \alpha z$$

证毕

推论 对任意$x \in \mathbf{R}^n$且x与e_1不共线，则初等反射阵$H = I_n - 2uu^{\mathrm{T}}$使得

$$Hx = \alpha e_1，\ 其中\ u = \frac{x - \alpha e_1}{\|x - \alpha e_1\|_2}，\quad \alpha = \pm\|x\|_2$$

初等反射阵的应用主要基于上述的定理和推论。推论的结果称为**用 Householder 变换化 x 与 e_1 同方向（共线）**。

例 试用 Householder 变换化向量$x = (-3, 0, 0, 4)^{\mathrm{T}}$与$e_1$同方向。

解 法 1. 取$\alpha = \|x\|_2 = 5$，则 $u = \dfrac{x - 5e_1}{\|x - 5e_1\|_2} = \dfrac{1}{\sqrt{80}}(-8, 0, 0, 4)^{\mathrm{T}}$，

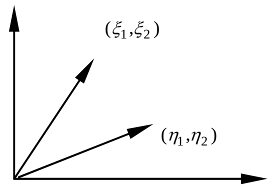
$$H = I - 2uu^{\mathrm{T}} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} -3 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}，使 \quad Hx = 5e_1$$

法 2. 取 $\alpha = -\|x\|_2 = -5$，则 $u = \dfrac{x+5e_1}{\|x+5e_1\|_2} = \dfrac{1}{\sqrt{20}}(2, 0, 0, 4)^{\mathrm{T}}$，

$$H = I - 2uu^{\mathrm{T}} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & -4 \\ 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 \\ -4 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}，使 \quad Hx = -5e_1$$

二、初等旋转阵

在 $\mathbf{R}^2$ 中，向量 $x = (\xi_1, \xi_2)$ 依顺时针方向旋转角度 θ 变为 $y = (\eta_1, \eta_2)$，则 x 与 y 的长度相等，且其坐标满足 $\begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix}$，



称 $T = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$ 为平面旋转阵,它是一个正交矩阵，推广到 $\mathbf{R}^n$ 上，即得

1．定义　称如下的 n 阶矩阵

$$T_{pq} = \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} 1 &&&&&&&&&& \\ & \ddots &&&&&&&&& \\ && 1 &&&&&&&& \\ &&& \cos\theta &&&& \sin\theta &&& \\ &&&& 1 &&&&&& \\ &&&&& \ddots &&&&& \\ &&&&&& 1 &&&& \\ &&& -\sin\theta &&&& \cos\theta &&& \\ &&&&&&&& 1 && \\ &&&&&&&&& \ddots & \\ &&&&&&&&&& 1 \end{pmatrix} & \begin{matrix} \\ \\ \\ p \\ \\ \\ \\ q \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \\ \begin{matrix} \qquad\qquad p & \qquad\qquad q \qquad\qquad \end{matrix} & \end{array} \qquad 或，$$

$$T_{pq} = \begin{pmatrix} 1 &&&&&&&&&& \\ & \ddots &&&&&&&&& \\ && 1 &&&&&&&& \\ &&& c &&&& s &&& \\ &&&& 1 &&&&&& \\ &&&&& \ddots &&&&& \\ &&&&&& 1 &&&& \\ &&& -s &&&& c &&& \\ &&&&&&&& 1 && \\ &&&&&&&&& \ddots & \\ &&&&&&&&&& 1 \end{pmatrix}, \quad c^2 + s^2 = 1$$

为**初等旋转阵**或 **Givens 矩阵**。由 T_{pq} 确定的 $\mathbf{R}^n$ 的变换 $y = T_{pq}\,x$ 称为**初等旋转变**

换或 Givens 变换。

2．几何解释　$\mathbf{R}^n$ 中由 $\boldsymbol{e}_p$ 和 $\boldsymbol{e}_q$ 所构成的平面上的旋转变换。

3．性质

$H^TH=I$

性质 1　$\boldsymbol{T}_{pq}$ 是正交阵且 $\det \boldsymbol{T}_{pq}=1$。

性质 2　设 $\boldsymbol{x}=(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbf{R}^n$，则存在初等旋转阵 $\boldsymbol{T}_{pq}$，使 $\boldsymbol{T}_{pq}\,\boldsymbol{x}$ 的第 p 个分量非负，第 q 个分量为 0，而其余分量不变。

证　$\boldsymbol{T}_{pq}\,\boldsymbol{x}==\begin{array}{c}\begin{pmatrix}\xi_1\\ \vdots\\ \xi_{p-1}\\ c\xi_p+s\xi_q\\ \xi_{p+1}\\ \vdots\\ \xi_{q-1}\\ -s\xi_p+c\xi_q\\ \xi_{q+1}\\ \vdots\\ \xi_n\end{pmatrix}\end{array}\begin{array}{l}\\ \\ \\ p\\ \\ \\ \\ q\\ \\ \\ \\ \end{array}$　可见除 p，q 分量外,其余分量不变.

若 $\xi_p=\xi_q$=0，取 $c=1, s=0$，则 $\boldsymbol{T}_{pq}=\boldsymbol{I}$，且 $\boldsymbol{T}_{pq}\,\boldsymbol{x}$ 满足所述条件;

若 $\xi_p^2+\xi_q^2\neq 0$，取 $c=\dfrac{\xi_p}{\sqrt{\xi_p^2+\xi_q^2}}$，$s=\dfrac{\xi_q}{\sqrt{\xi_p^2+\xi_q^2}}$，则 $\boldsymbol{T}_{pq}\,\boldsymbol{x}$ 的第 p 个分量为

$$c\,\xi_p+s\,\xi_q=\frac{1}{\sqrt{\xi_p^2+\xi_q^2}}(\xi_p^2+\xi_q^2)=\sqrt{\xi_p^2+\xi_q^2}>0$$

而 $\boldsymbol{T}_{pq}\,\boldsymbol{x}$ 的第 q 个分量　　$-s\xi_p+c\xi_q=0$　　**证毕**

性质 3　设 $\boldsymbol{x}=(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_n)^{\mathrm{T}}\in\mathbf{R}^n$，则存在初等旋转阵 $\boldsymbol{T}_{12},\boldsymbol{T}_{13},\cdots,\boldsymbol{T}_{1n}$，使得

$$\boldsymbol{T}_{1n}\cdots\boldsymbol{T}_{13}\boldsymbol{T}_{12}\boldsymbol{x}=\|\boldsymbol{x}\|_2\,\boldsymbol{e}_1$$

证　若 $\xi_1^2+\xi_2^2\neq 0$，则取 $\boldsymbol{T}_{12}$ 使得 $\boldsymbol{T}_{12}\boldsymbol{x}=(\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2},0,\xi_3,\cdots,\xi_n)^{\mathrm{T}}$（若 $\xi_1^2+\xi_2^2=0$，则取 $\boldsymbol{T}_{12}=\boldsymbol{I}$，找 $\xi_k\neq 0$，构造 $\boldsymbol{T}_{1k}$,使

$$\boldsymbol{T}_{1k}\boldsymbol{x}=(\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2},0,\cdots,0,\xi_{k+1},\cdots,\xi_n)^{\mathrm{T}})$$

又取 $c=\dfrac{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2}}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2}}$，$s=\dfrac{\xi_3}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2}}$，构造 $\boldsymbol{T}_{13}$ 使

$$T_{13}(T_{12}x)=(\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2},0,0,\xi_4,\cdots,\xi_n)^{\mathrm{T}}$$

依次进行下去，最后得 $\quad T_{1n}\cdots T_{13}T_{12}x=(\sqrt{\sum_{k=1}^{n}\xi_k^2},0,\cdots,0)^{\mathrm{T}}=\|x\|_2 e_1$

初等旋转阵的应用主要基于性质 3，称之为**用 Givens 变换化 x 与 e_1 同方向**。

例 试用 Givens 变换化向量 $x=(0,3,0,-4)^{\mathrm{T}}$ 与 e_1 同方向.

解 取 $c_1=\frac{0}{\sqrt{0^2+3^2}}=0$， $s_1=\frac{3}{\sqrt{0^2+3^2}}=1$，则

$$T_{12}=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}，\text{使}\ T_{12}\,x=(3,0,0,-4)^{\mathrm{T}}；$$

又取 $c_2=\frac{3}{\sqrt{3^2+(-4)^2}}=\dfrac{3}{5}$， $s_2=\frac{-4}{\sqrt{3^2+(-4)^2}}=-\dfrac{4}{5}$，则

$$T_{14}=\begin{pmatrix}\frac{3}{5}&0&0&-\frac{4}{5}\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\\frac{4}{5}&0&0&\frac{3}{5}\end{pmatrix}，\text{使}\,T_{14}\,T_{12}x=5e_1$$

4. Givens 矩阵与 Householder 矩阵的关系

定理 任一初等旋转阵总能表为两个初等反射阵的乘积。

证

$$T_{pq}==\begin{pmatrix}1&&&&&&&&&&\\&\ddots&&&&&&&&&\\&&1&&&&&&&&\\&&&\cos\theta&&&&-\sin\theta&&&\\&&&&1&&&&&&\\&&&&&\ddots&&&&&\\&&&&&&1&&&&\\&&&-\sin\theta&&&&-\cos\theta&&&\\&&&&&&&&1&&\\&&&&&&&&&\ddots&\\&&&&&&&&&&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&&&&&&&&&&\\&\ddots&&&&&&&&&\\&&1&&&&&&&&\\&&&1&&&&&&&\\&&&&1&&&&&&\\&&&&&\ddots&&&&&\\&&&&&&1&&&&\\&&&&&&&-1&&&\\&&&&&&&&1&&\\&&&&&&&&&\ddots&\\&&&&&&&&&&1\end{pmatrix}=H_1H_2$$

其中 $H_1=I-2u_1u_1^{\mathrm{T}}$， $H_2=I-2u_2u_2^{\mathrm{T}}$，而

$$u_1=(0,\cdots,0,\sin\frac{\theta}{2},0,\cdots,0,\cos\frac{\theta}{2},0,\cdots,0)^{\mathrm{T}}，\quad u_2=(0,\cdots,0,0,0,\cdots,0,1,0,\cdots,0)^{\mathrm{T}}$$

注 1) 初等旋转阵表为初等反射阵的乘积是不唯一的；

2) 初等反射阵不能表为初等旋转阵的乘积，因为 $\det H=-1$，而 $\det T_{pq}=1$。

三、QR 分解

定义　设$\boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{n\times n}$，如果存在$n$阶正交阵$\boldsymbol{Q}$和$n$阶上三角阵$\boldsymbol{R}$，使

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}$$

则称之为$\boldsymbol{A}$的 **QR 分解**(或**正交-三角分解**).

结论　设$\boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{n\times n}$，则$\boldsymbol{A}$总可以进行 QR 分解.

求方阵$\boldsymbol{A}$的 QR 分解有如下三种方法:

方法 1　利用 Householder 变换

设$\boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{n\times n}$，将$\boldsymbol{A}$按列分块为$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n)$。若$\boldsymbol{a}_1\neq\boldsymbol{0}$，则存在$n$阶初等反射阵$\boldsymbol{H}_1$，使$\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{a}_1=\alpha_1\boldsymbol{e}_1$，从而

$$\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{a}_n)=\left(\begin{array}{c|ccc}\alpha_1 & * & \cdots & * \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \boldsymbol{B}_{n-1} & \\ 0 & & & \end{array}\right),\quad \boldsymbol{B}_{n-1}\in\mathbf{R}^{(n-1)\times(n-1)}$$

若$\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{0}$，直接进行下一步（或取$\boldsymbol{H}_1=\boldsymbol{I}$）。

再将$\boldsymbol{B}_{n-1}$按列分块为$\boldsymbol{B}_{n-1}=(\boldsymbol{b}_2,\boldsymbol{b}_3,\cdots,\boldsymbol{b}_n)$。若$\boldsymbol{b}_2\neq\boldsymbol{0}$，则存在$n-1$阶初等反射阵$\tilde{\boldsymbol{H}}_2$，使$\tilde{\boldsymbol{H}}_2\boldsymbol{b}_2=\alpha_2\tilde{\boldsymbol{e}}_1$，其中$\tilde{\boldsymbol{e}}_1\in\mathbf{R}^{n-1}$。令$\boldsymbol{H}_2=\begin{pmatrix}1 & \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{0} & \tilde{\boldsymbol{H}}_2\end{pmatrix}$，则$\boldsymbol{H}_2$是$n$阶初等反射阵，且

$$\boldsymbol{H}_2(\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A})=\begin{pmatrix}1 & \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{0} & \tilde{\boldsymbol{H}}_2\end{pmatrix}\left(\begin{array}{c|ccc}\alpha_1 & * & \cdots & * \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \boldsymbol{B}_{n-1} & \\ 0 & & & \end{array}\right)=\left(\begin{array}{c|ccc}\alpha_1 & * & \cdots & * \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{\boldsymbol{H}}_2\boldsymbol{B}_{n-1} & \\ 0 & & & \end{array}\right)$$

$$=\left(\begin{array}{cc|ccc}\alpha_1 & * & * & \cdots & * \\ 0 & \alpha_2 & * & \cdots & * \\ \hline 0 & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & & \boldsymbol{C}_{n-2} & \\ 0 & 0 & & & \end{array}\right),\quad \boldsymbol{C}_{n-2}\in\mathbf{R}^{(n-2)\times(n-2)}$$

若$\boldsymbol{b}_2=\boldsymbol{0}$，直接进行下一步（或取$\boldsymbol{H}_2=\boldsymbol{I}$）。

继续这一步骤，最多进行$n-1$步即得

$$H_{n-1}\cdots H_2 H_1 A=\begin{pmatrix}\alpha_1 & & & \\ & \alpha_2 & * & \\ & & \ddots & \\ & & & \alpha_n\end{pmatrix}=R,\qquad \text{其中 } R \text{ 是上三角阵}$$

于是 $$A=H_1H_2\cdots H_{n-1}R=QR \qquad \text{（注意 } H_i \text{ 均是自逆的）}$$

其中$Q=H_1H_2\cdots H_{n-1}$是n阶正交矩阵。

例 试求矩阵 $A=\begin{pmatrix}0&3&1\\0&4&-2\\2&1&2\end{pmatrix}$ 的 QR 分解。

解 $a_1=\begin{pmatrix}0\\0\\2\end{pmatrix}$，取$\alpha_1=\|a_1\|_2=2$，则 $u_1=\dfrac{a_1-2e_1}{\|a_1-2e_1\|_2}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1\\0\\1\end{pmatrix}$，于是

$$H_1=I-2u_1u_1^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}，使 H_1A=\begin{pmatrix}2&1&2\\0&4&-2\\0&3&1\end{pmatrix}。$$

又$b_2=\begin{pmatrix}4\\3\end{pmatrix}$，取$\alpha_2=\|b_2\|_2=5$，$u_2=\dfrac{b_2-5\tilde{e}_1}{\|b_2-5\tilde{e}_1\|_2}=\dfrac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix}-1\\3\end{pmatrix}$，于是

$\tilde{H}_2=I-2u_2u_2^{\mathrm{T}}=\dfrac{1}{5}\begin{pmatrix}4&3\\3&-4\end{pmatrix}$，令

$$H_2=\begin{pmatrix}1&\\&\tilde{H}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&\frac{4}{5}&\frac{3}{5}\\0&\frac{3}{5}&-\frac{4}{5}\end{pmatrix}，则 H_2(H_1A)=\begin{pmatrix}2&1&2\\0&5&-1\\0&0&-2\end{pmatrix},$$

故 $$A=(H_1H_2)R=\begin{pmatrix}0&\frac{3}{5}&-\frac{4}{5}\\0&\frac{4}{5}&\frac{3}{5}\\1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&2\\0&5&-1\\0&0&-2\end{pmatrix}。$$

方法 2　利用 Givens 变换

将$A\in\mathbf{R}^{n\times n}$按列分块$A=(a_1,a_2,\cdots,a_n)$，则存在初等旋转矩阵$T_{12},\cdots,T_{1n}$，使$T_{1n}\cdots T_{12}a_1=\|a_1\|_2e_1$，于是

$$
\boldsymbol{T}_{1n}\cdots\boldsymbol{T}_{12}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\alpha_1 & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & *\end{pmatrix}=\left(\begin{array}{c|ccc}\alpha_1 & * & \cdots & * \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & \boldsymbol{b}_2 & \cdots & \boldsymbol{b}_n \\ 0 & & & \end{array}\right)，\quad \boldsymbol{b}_i\in\mathbf{R}^{n-1}
$$

又存在$\boldsymbol{T}_{23},\cdots,\boldsymbol{T}_{2n}$使$\boldsymbol{T}_{2n}\cdots\boldsymbol{T}_{23}\begin{pmatrix} * \\ \boldsymbol{b}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} * \\ \alpha_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0\end{pmatrix}$，*未变，而$\alpha_2=\|\boldsymbol{b}_2\|_2$，于是

$$
\boldsymbol{T}_{2n}\cdots\boldsymbol{T}_{23}\,(\boldsymbol{T}_{1n}\cdots\boldsymbol{T}_{12}\boldsymbol{A})=\begin{pmatrix}\alpha_1 & * & * & \cdots & * \\ 0 & \alpha_2 & * & \cdots & * \\ 0 & 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & * & \cdots & *\end{pmatrix}
$$

如此进行下去，最多$\dfrac{n(n-1)}{2}$次 Givens 变换，得

$$
\boldsymbol{T}_{n-1,n}\cdots\boldsymbol{T}_{2n}\cdots\boldsymbol{T}_{23}\,\boldsymbol{T}_{1n}\cdots\boldsymbol{T}_{12}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\alpha_1 & & & \\ & \alpha_2 & * & \\ & & \ddots & \\ & & & \alpha_n\end{pmatrix}=\boldsymbol{R}
$$

故
$$
\boldsymbol{A}=\boldsymbol{T}_{12}^{\mathrm{T}}\cdots\boldsymbol{T}_{1n}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{23}^{\mathrm{T}}\cdots\boldsymbol{T}_{2n}^{\mathrm{T}}\cdots\boldsymbol{T}_{n-1,n}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}
$$

其中 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{T}_{12}^{\mathrm{T}}\cdots\boldsymbol{T}_{1n}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{23}^{\mathrm{T}}\cdots\boldsymbol{T}_{2n}^{\mathrm{T}}\cdots\boldsymbol{T}_{n-1,n}^{\mathrm{T}}$为$n$阶正交矩阵。

例 求矩阵$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0 & 3 & 1 \\ 0 & 4 & -2 \\ 2 & 1 & 2\end{pmatrix}$的 QR 分解。

解 取$c_1=0,s_1=1$，则 $\boldsymbol{T}_{13}=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0\end{pmatrix}$使 $\boldsymbol{T}_{13}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2 & 1 & 2 \\ 0 & 4 & -2 \\ 0 & -3 & -1\end{pmatrix}$。

又取$c_2=\dfrac{4}{5},s_2=-\dfrac{3}{5}$，则 $\boldsymbol{T}_{23}=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \\ -1 & \frac{3}{5} & \frac{4}{5}\end{pmatrix}$，使 $\boldsymbol{T}_{23}\boldsymbol{T}_{13}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2 & 1 & 2 \\ 0 & 5 & -1 \\ 0 & 0 & -2\end{pmatrix}=\boldsymbol{R}$

故
$$
\boldsymbol{A}=\boldsymbol{T}_{13}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{23}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}=\begin{pmatrix}0 & \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ 0 & \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & 1 & 2 \\ 0 & 5 & -1 \\ 0 & 0 & -2\end{pmatrix}
$$

方法 3　利用 Schmidt 正交化过程

要求 $\boldsymbol{A}\in\mathbf{R}^{n\times n}$ 非奇异。

将 $\boldsymbol{A}$ 按列分块 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n)$，则 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n$ 线性无关，按 Schmidt 正交化过程将其正交化得：

$$\begin{cases}\boldsymbol{p}_1=\boldsymbol{a}_1\\ \boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{a}_2-\alpha_{21}\boldsymbol{p}_1\\ \boldsymbol{p}_3=\boldsymbol{a}_3-\alpha_{31}\boldsymbol{p}_1-\alpha_{32}\boldsymbol{p}_2\\ \quad\vdots\\ \boldsymbol{p}_n=\boldsymbol{a}_n-\alpha_{n1}\boldsymbol{p}_1-\cdots-\alpha_{n,n-1}\boldsymbol{p}_{n-1}\end{cases}\quad,\quad 其中\quad \alpha_{ij}=\frac{(\boldsymbol{a}_i,\boldsymbol{p}_j)}{(\boldsymbol{p}_j,\boldsymbol{p}_j)}$$

再将 $\boldsymbol{p}_i$ 单位化，记为 $\boldsymbol{q}_i=\dfrac{\boldsymbol{p}_i}{\|\boldsymbol{p}_i\|_2}$（$i=1,2,\cdots,n$），由上式得

$$\begin{cases}\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{p}_1=\|\boldsymbol{p}_1\|_2\boldsymbol{q}_1\\ \boldsymbol{a}_2=\alpha_{21}\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2=\alpha_{21}\|\boldsymbol{p}_1\|_2\boldsymbol{q}_1+\|\boldsymbol{p}_2\|_2\boldsymbol{q}_2\\ \quad\vdots\\ \boldsymbol{a}_n=\alpha_{n1}\boldsymbol{p}_1+\cdots+\alpha_{n,n-1}\boldsymbol{p}_{n-1}+\boldsymbol{p}_n=\alpha_{n1}\|\boldsymbol{p}_1\|_2\boldsymbol{q}_1+\alpha_{n,n-1}\|\boldsymbol{p}_{n-1}\|_2\boldsymbol{q}_{n-1}+\|\boldsymbol{p}_n\|_2\boldsymbol{q}_n\end{cases}$$

故
$$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n)=(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_n)\begin{pmatrix}\|\boldsymbol{p}_1\| & \alpha_{21}\|\boldsymbol{p}_1\| & \cdots & \alpha_{n1}\|\boldsymbol{p}_1\|\\ 0 & \|\boldsymbol{p}_2\| & \cdots & \alpha_{n1}\|\boldsymbol{p}_2\|\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & \|\boldsymbol{p}_n\|\end{pmatrix}=\boldsymbol{QR}$$

其中 $\boldsymbol{Q}=(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_n)$ 是 n 阶正交阵，

$$\boldsymbol{R}=\begin{pmatrix}\|\boldsymbol{p}_1\| & & & \\ & \|\boldsymbol{p}_2\| & & \\ & & \ddots & \\ & & & \|\boldsymbol{p}_n\|\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & \alpha_{21} & \cdots & \alpha_{n1}\\ & 1 & \ddots & \vdots\\ & & \ddots & \alpha_{n,n-1}\\ & & & 1\end{pmatrix}是可逆上三角阵。$$

例　求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0 & 3 & 1\\ 0 & 4 & -2\\ 2 & 1 & 2\end{pmatrix}$ 的 QR 分解。

解　将列向量 $\boldsymbol{a}_1=\begin{pmatrix}0\\0\\2\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{a}_2=\begin{pmatrix}3\\4\\1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{a}_3=\begin{pmatrix}1\\-2\\2\end{pmatrix}$ 正交化得

$$\boldsymbol{p}_1=\boldsymbol{a}_1=\begin{pmatrix}0\\0\\2\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{a}_2-\frac{2}{4}\boldsymbol{p}_1=\begin{pmatrix}3\\4\\0\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{p}_3=\boldsymbol{a}_3-\frac{4}{4}\boldsymbol{p}_1-\frac{-5}{25}\boldsymbol{p}_2=\begin{pmatrix}\frac{8}{5}\\-\frac{6}{5}\\0\end{pmatrix}$$

单位化得 $\quad \boldsymbol{q}_1=\frac{1}{2}\boldsymbol{p}_1=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{q}_2=\frac{1}{5}\boldsymbol{p}_2=\begin{pmatrix}\frac{3}{5}\\\frac{4}{5}\\0\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{q}_3=\frac{1}{2}\boldsymbol{p}_3=\begin{pmatrix}\frac{4}{5}\\-\frac{3}{5}\\0\end{pmatrix}$

于是 $\begin{cases}\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{p}_1=2\boldsymbol{q}_1\\ \boldsymbol{a}_2=\frac{1}{2}\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{q}_1+5\boldsymbol{q}_2\\ \boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{p}_1-\frac{1}{5}\boldsymbol{p}_2+\boldsymbol{p}_3=2\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{q}_2+2\boldsymbol{q}_3\end{cases}$，故 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0&\frac{3}{5}&\frac{4}{5}\\0&\frac{4}{5}&-\frac{3}{5}\\1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&1&2\\0&5&-1\\0&0&2\end{pmatrix}$。

例 用 Householder 变换求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0&3&1&-4\\0&4&-2&3\\2&1&2&4\\0&0&0&-5\end{pmatrix}$ 的 QR 分解。

解 $\boldsymbol{a}_1=\begin{pmatrix}0\\0\\2\\0\end{pmatrix}$，$\alpha_1=2$，$\boldsymbol{u}_1=\dfrac{\boldsymbol{a}_1-2\boldsymbol{e}_1}{\|\boldsymbol{a}_1-2\boldsymbol{e}_1\|_2}=\dfrac{1}{2\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-2\\0\\2\\0\end{pmatrix}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}-1\\0\\1\\0\end{pmatrix}$，

$$\boldsymbol{H}_1=\begin{pmatrix}0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}2&1&2&4\\0&4&-2&3\\0&3&1&-4\\0&0&0&-5\end{pmatrix};\quad \boldsymbol{b}_2=\begin{pmatrix}4\\3\\0\end{pmatrix},\quad \alpha_2=5,$$

$$\boldsymbol{u}_2=\frac{\boldsymbol{b}_2-5\tilde{\boldsymbol{e}}_1}{\|\boldsymbol{b}_2-5\tilde{\boldsymbol{e}}\|_2}=\frac{1}{\sqrt{10}}\begin{pmatrix}-1\\3\\0\end{pmatrix},\quad \tilde{\boldsymbol{H}}_2=\begin{pmatrix}\frac{4}{5}&\frac{3}{5}&0\\\frac{3}{5}&-\frac{4}{5}&0\\0&0&1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{H}_2=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&\frac{4}{5}&\frac{3}{5}&0\\0&\frac{3}{5}&-\frac{4}{5}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{H}_2(\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A})=\begin{pmatrix}2&1&2&4\\0&5&-1&0\\0&0&-2&5\\0&0&0&-5\end{pmatrix}=\boldsymbol{R},\quad \boldsymbol{Q}=\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{H}_2=\begin{pmatrix}0&\frac{3}{5}&-\frac{4}{5}&0\\0&\frac{4}{5}&\frac{3}{5}&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}。$$

例 用 Givens 变换求矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0&1&0&1\\1&0&1&0\\0&1&0&1\\1&0&1&0\end{pmatrix}$ 的 QR 分解。

解 $c_1=\dfrac{0}{\sqrt{0^2+1^2}}=0, s_1=1$，$\boldsymbol{T}_{12}=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\-1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{T}_{12}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&0&1&0\\0&-1&0&-1\\0&1&0&1\\1&0&1&0\end{pmatrix}$；

$c_2=\dfrac{1}{\sqrt{2}}, s_2=\dfrac{1}{\sqrt{2}}$，$\boldsymbol{T}_{14}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&0&0&\frac{1}{\sqrt{2}}\\0&1&0&0\\0&0&1&0\\-\frac{1}{\sqrt{2}}&0&0&\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$，$\boldsymbol{T}_{14}(\boldsymbol{T}_{12}\boldsymbol{A})=\begin{pmatrix}\sqrt{2}&0&\sqrt{2}&0\\0&-1&0&-1\\0&1&0&1\\0&0&0&0\end{pmatrix}$；

$c_3=-\dfrac{1}{\sqrt{2}}, s_3=\dfrac{1}{\sqrt{2}}$， $\boldsymbol{T}_{23}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\0&-\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$,

$\boldsymbol{T}_{23}(\boldsymbol{T}_{14}\boldsymbol{T}_{12}\boldsymbol{A})=\begin{pmatrix}\sqrt{2}&0&\sqrt{2}&0\\0&\sqrt{2}&0&\sqrt{2}\\0&0&0&0\\0&0&0&0\end{pmatrix}=\boldsymbol{R}$，$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{T}_{12}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{14}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{23}^{\mathrm{T}}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&1&0\\1&0&0&-1\\0&1&-1&0\\1&0&0&1\end{pmatrix}$,

且 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}$ 。