

*四、复方阵的 QR 分解（酉-三角分解）

1. 初等反射阵： $H = I_n - 2uu^H$ ， $u \in \mathbb{C}^n$ 且 $\|u\|_2 = 1$ 。

H 满足： $H^H = H$ （Hermite 阵）， $H^H H = I$ （酉矩阵）， $H^{-1} = H$ （自逆）， $\det H = -1$ 。

定理 给定单位向量 $z \in \mathbb{C}^n$ ，即 $\|z\|_2 = 1$ 。则对任意 $x \in \mathbb{C}^n$ ，存在初等反射阵 H ，使得 $Hx = \alpha z$ ，其中 $|\alpha| = \|x\|_2$ 且 $\alpha x^H z$ 为实数。

证 取 $u = \frac{x - \alpha z}{\|x - \alpha z\|_2}$ ，则 $Hx = x - 2uu^H x = x - 2 \frac{(x^H x - \bar{\alpha} z^H x)}{\|x - \alpha z\|_2^2} (x - \alpha z)$ 。因为

$$\begin{aligned}\|x - \alpha z\|_2^2 &= (x - \alpha z, x - \alpha z) = x^H x - \bar{\alpha} z^H x - \alpha x^H z + |\alpha|^2 z^H z \\ &= 2(x^H x - \operatorname{Re}(\alpha x^H z)) = 2(x^H x - \bar{\alpha} z^H x)\end{aligned}$$

（注： $\alpha x^H z = \bar{\alpha} z^H x$ 为实数）代入上一式即得 $Hx = \alpha z$ 。证毕

推论 对任意 $x \in \mathbb{C}^n$ ，存在初等反射阵 H ，使得 $Hx = \alpha e_1$ ，其中 $|\alpha| = \|x\|_2$ ，且 $\alpha \bar{\xi}_1$ 为实数，这里 ξ_1 是 x 的第 1 个分量。

例 试用 Householder 变换化向量 $x = (i, -2i, 0, 2)^T$ 与 e_1 同方向。

解 $\|x\|_2 = 3$ ，取 $\alpha = 3i$ （或 $\alpha = -3i$ ，因 $\xi_1 = i$ ， $\alpha \bar{\xi}_1$ 为实数），则

$$u = \frac{x - 3ie_1}{\|x - 3ie_1\|_2} = \frac{1}{\sqrt{12}}(-2i, -2i, 0, 2)^T = \frac{1}{\sqrt{3}}(-i, -i, 0, 1)^T$$

从而

$$H = I - 2uu^H = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & -2 & 0 & 2i \\ -2 & 1 & 0 & 2i \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ -2i & 2i & 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{ 且 } Hx = 3ie_1.$$

2. 初等旋转阵:

$$\mathbf{T}_{pq} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & e^{i\alpha} \cos \theta & & e^{i\beta} \sin \theta \\ & & & & 1 & \\ & & & & & \ddots \\ & & & -e^{-i\beta} \sin \theta & & e^{-i\alpha} \cos \theta \\ & & & & & & 1 \\ & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} p \\ q \end{matrix}$$

或

$$\mathbf{T}_{pq} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & \bar{c} & & \bar{s} \\ & & & & 1 & \\ & & & & & \ddots \\ & & & -s & & c \\ & & & & & & 1 \\ & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} p \\ q \end{matrix}, \text{ 且 } |c|^2 + |s|^2 = 1$$

\mathbf{T}_{pq} 是酉矩阵, 且 $\det \mathbf{T}_{pq} = 1$ 。

定理 设 $\mathbf{x} = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)^T \in \mathbf{C}^n$, 则存在初等旋转阵 \mathbf{T}_{pq} , 其中

$$c = \frac{\xi_p}{\sqrt{|\xi_p|^2 + |\xi_q|^2}}, \quad s = \frac{\xi_q}{\sqrt{|\xi_p|^2 + |\xi_q|^2}}, \text{ 使 } \mathbf{T}_{pq} \mathbf{x} \text{ 的第 } p \text{ 个分量为 } \sqrt{|\xi_p|^2 + |\xi_q|^2} \geq 0,$$

而 $\mathbf{T}_{pq} \mathbf{x}$ 的第 q 个分量为 0。(这里假设 $|\xi_p|^2 + |\xi_q|^2 \neq 0$ 。若 $\xi_p = \xi_q = 0$, 则取

$\mathbf{T}_{pq} = \mathbf{I}$)。

推论 设 $\mathbf{x} \in \mathbf{C}^n$, 则存在初等旋转阵 $\mathbf{T}_{12}, \dots, \mathbf{T}_{1n}$, 使得

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

例 试用 Givens 变换化向量 $\mathbf{x} = (\mathbf{i}, -2\mathbf{i}, 0, 2)^T$ 与 \mathbf{e}_1 同方向。

解 取 $c_1 = \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{5}}, s_1 = \frac{-2\mathbf{i}}{\sqrt{5}}, \mathbf{T}_{12} = \begin{pmatrix} -\frac{\mathbf{i}}{\sqrt{5}} & \frac{2\mathbf{i}}{\sqrt{5}} & 0 & 0 \\ \frac{2\mathbf{i}}{\sqrt{5}} & \frac{\mathbf{i}}{\sqrt{5}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, 则 $\mathbf{T}_{12}\mathbf{x} = (\sqrt{5}, 0, 0, 2)^T$ 。

又取 $c_2 = \frac{\sqrt{5}}{3}, s_2 = \frac{2}{3}, \mathbf{T}_{14} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{5}}{3} & 0 & 0 & \frac{2}{3} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\frac{2}{3} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{5}}{3} \end{pmatrix}$, 且有 $\mathbf{T}_{14}\mathbf{T}_{12}\mathbf{x} = 3\mathbf{e}_1$ 。

3. 进行 QR 分解仍可采用 Householder 变换, Givens 变换和 Schmidt 正交化方法。

*五、实方阵正交相似于 Hessenberg 矩阵

定义 若 $\mathbf{A} = (a_{ij})_{n \times n} \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 的元素满足 $a_{ij} = 0$ ($i > j+1$), 则称 \mathbf{A} 为上 Hessenberg 矩阵; 若满足 $a_{ij} = 0$ ($j > i+1$), 则称 \mathbf{A} 为下 Hessenberg 矩阵; 若的元素满足 $a_{ij} = 0$ ($|i-j| > 1$), 则称 \mathbf{A} 为三对角矩阵。

定理 实方阵必可正交相似于上 Hessenberg 矩阵。

证 将矩阵 $\mathbf{A} = (a_{ij})_{n \times n} \in \mathbf{R}^{n \times n}$ 分块为

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & \mathbf{b}_{n-1}^T \\ \mathbf{a}_{n-1} & \mathbf{A}_{n-1} \end{pmatrix}, \text{ 其中 } \mathbf{a}_{n-1}, \mathbf{b}_{n-1} \in \mathbf{R}^{n-1}, \mathbf{A}_{n-1} \in \mathbf{R}^{(n-1) \times (n-1)}$$

设 $\mathbf{a}_{n-1} \neq \mathbf{0}$, 选择 $n-1$ 阶初等反射阵 $\tilde{\mathbf{H}}_1$, 使 $\tilde{\mathbf{H}}_1 \mathbf{a}_{n-1} = \alpha_1 \tilde{\mathbf{e}}_1$, $\tilde{\mathbf{e}}_1 \in \mathbf{R}^{n-1}$ 。

令 $\mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{H}}_1 \end{pmatrix}$, 则 \mathbf{H}_1 是 n 阶初等反射阵, 且

$$\mathbf{H}_1 \mathbf{A} \mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} a_{11} & \mathbf{b}_{n-1}^T \tilde{\mathbf{H}}_1 \\ \tilde{\mathbf{H}}_1 \mathbf{a}_{n-1} & \tilde{\mathbf{H}}_1 \mathbf{A}_{n-1} \tilde{\mathbf{H}}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & * & \dots & * \\ \alpha_1 & * & \dots & * \\ 0 & * & \dots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & * & \dots & * \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc|c} a_{11} & * & \mathbf{B}_2 \\ \alpha_1 & * & \\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{a}_{n-2} & \mathbf{A}_{n-2} \end{array} \right),$$

其中 $\mathbf{a}_{n-2} \in \mathbf{R}^{n-2}$, $\mathbf{B}_2 \in \mathbf{R}^{2 \times (n-2)}$, $\mathbf{A}_{n-2} \in \mathbf{R}^{(n-2) \times (n-2)}$ 。若 $\mathbf{a}_{n-1} = \mathbf{0}$, 则取 $\mathbf{H}_1 = \mathbf{I}$, 则上式仍成立。

设 $\mathbf{a}_{n-2} \neq \mathbf{0}$, 选择 $n-2$ 阶初等反射阵 $\hat{\mathbf{H}}_2$, 使 $\hat{\mathbf{H}}_2 \mathbf{a}_{n-2} = \alpha_2 \hat{\mathbf{e}}_1$, $\hat{\mathbf{e}}_1 \in \mathbf{R}^{n-2}$ 。

令 $H_2 = \begin{pmatrix} I_2 & O \\ O & \hat{H}_2 \end{pmatrix}$, 则 H_2 是 n 阶初等反射阵, 且

$$H_2(H_1AH_1)H_2 = \left(\begin{array}{cc|ccc} a_{11} & * & & & \\ \alpha_1 & * & & & \\ \hline 0 & \hat{H}_2 a_{n-2} & \hat{H}_2 A_{n-2} \hat{H}_2 & & \end{array} \right) = \begin{pmatrix} a_{11} & * & * & \dots & * \\ \alpha_1 & * & \vdots & & \vdots \\ 0 & \alpha_2 & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & * & \dots & * \end{pmatrix}.$$

继续这一步骤, 最多 $n-2$ 次, 即可得到上 Hessenberg 矩阵 H , 即

$$H_{n-2} \cdots H_1 A H_1 \cdots H_{n-2} = H$$

令 $Q = H_1 \cdots H_{n-2}$, 则 Q 是正交阵, 且 $Q^T A Q = H$ 。

该定理的证明过程给出了用 Householder 变换化矩阵与 Hessenberg 矩阵正交相似的方法。同样, 用 Givens 变换也能完成这一过程:

$$T_{n-1,n} \cdots T_{3n} \cdots T_{34} T_{2n} \cdots T_{23} A T_{23}^T \cdots T_{2n}^T T_{34}^T \cdots T_{3n}^T \cdots T_{n-1,n}^T = H$$

正交阵 $Q = T_{23}^T \cdots T_{2n}^T T_{34}^T \cdots T_{3n}^T \cdots T_{n-1,n}^T$ 使 $Q^T A Q = H$ 。

例 化矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 3 & 1 & 2 \\ 4 & -2 & 1 \end{pmatrix}$ 正交相似于 Hessenberg 矩阵。

解 法 1. 利用 Householder 变换

对 $a_2 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$, 取 $\alpha_1 = \|a_2\|_2 = 5$, 则 $u_1 = \frac{a_2 - 5\tilde{e}_1}{\|a_2 - 5\tilde{e}_1\|_2} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$, 于是

$$\tilde{H}_1 = I - 2u_1 u_1^T = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 4 & -3 \end{pmatrix}, \text{ 令 } H_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & \tilde{H}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ 0 & \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix}, \text{ 则}$$

$$H_1 A H_1 = \begin{pmatrix} 1 & \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \\ 5 & 1 & -2 \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

法 2. 利用 Givens 变换

$$\text{取 } c = \frac{3}{5}, s = \frac{4}{5}, \text{ 则 } T_{23} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ 0 & -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix}, \text{ 且 } T_{23} A T_{23}^T = \begin{pmatrix} 1 & \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \\ 5 & 1 & 2 \\ 0 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

推论 实对称阵必可正交相似于三对角阵。

证 存在正交阵 Q 使 $Q^T A Q = H$, H 为 Hessenberg 阵。又

$$\mathbf{H}^T = (\mathbf{Q}^T \mathbf{A} \mathbf{Q})^T = \mathbf{Q}^T \mathbf{A}^T \mathbf{Q} = \mathbf{Q}^T \mathbf{A} \mathbf{Q} = \mathbf{H}$$

故 \mathbf{H} 为三对角阵。证毕

例 化矩阵 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & -2 & 4 \\ 0 & -2 & 1 & 3 \\ 1 & 4 & 3 & 1 \end{pmatrix}$ 正交相似于三对角阵。

解 法 1. 用 Householder 变换

对 $\mathbf{a}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, 取 $\alpha_1 = \|\mathbf{a}_3\|_2 = 1$, 则 $\mathbf{u}_1 = \frac{\mathbf{a}_3 - \tilde{\mathbf{e}}_1}{\|\mathbf{a}_3 - \tilde{\mathbf{e}}_1\|_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 。从而

$$\tilde{\mathbf{H}}_1 = \mathbf{I} - 2\mathbf{u}_1\mathbf{u}_1^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \text{ 令 } \mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{H}}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

则 $\mathbf{H}_1 \mathbf{A} \mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 3 & 4 \\ 0 & 3 & 1 & -2 \\ 0 & 4 & -2 & -1 \end{pmatrix}$ 。对 $\mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$, 取 $\alpha_1 = \|\mathbf{a}_2\|_2 = 5$, 则

$$\mathbf{u}_2 = \frac{\mathbf{a}_2 - 5\hat{\mathbf{e}}_1}{\|\mathbf{a}_2 - 5\hat{\mathbf{e}}_1\|_2} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}, \text{ 从而 } \hat{\mathbf{H}}_2 = \mathbf{I} - 2\mathbf{u}_2\mathbf{u}_2^T = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 4 & -3 \end{pmatrix},$$

令 $\mathbf{H}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_2 & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \hat{\mathbf{H}}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ 0 & 0 & \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix}$, 则 $\mathbf{H}_2 \mathbf{H}_1 \mathbf{A} \mathbf{H}_1 \mathbf{H}_2 = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 5 & 0 \\ 0 & 5 & -\frac{11}{5} & \frac{2}{5} \\ 0 & 0 & \frac{2}{5} & \frac{11}{5} \end{pmatrix} = \mathbf{T}$ 。

故正交矩阵 $\mathbf{Q} = \mathbf{H}_1 \mathbf{H}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \\ 0 & 0 & \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ 使 $\mathbf{Q}^T \mathbf{A} \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 5 & 0 \\ 0 & 5 & -\frac{11}{5} & \frac{2}{5} \\ 0 & 0 & \frac{2}{5} & \frac{11}{5} \end{pmatrix}$ 。

法 2. 利用 Givens 变换

取 $c_1 = 0, s_1 = 1$, 则 $\mathbf{T}_{24} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$, 且 $\mathbf{T}_{24} \mathbf{A} \mathbf{T}_{24}^T = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 3 & -4 \\ 0 & 3 & 1 & 2 \\ 0 & -4 & 2 & 1 \end{pmatrix}$ 。

又取 $c_2 = \frac{3}{5}, s_2 = -\frac{4}{5}$, 则 $T_{34} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ 0 & 0 & \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix}$, 且

$$T_{34} T_{24} A T_{24}^T T_{34}^T = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 5 & 0 \\ 0 & 5 & -\frac{11}{5} & \frac{2}{5} \\ 0 & 0 & \frac{2}{5} & \frac{11}{5} \end{pmatrix}$$

故正交矩阵 $Q = T_{24}^T T_{34}^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \\ 0 & 0 & \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ 使 $Q^T A Q = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 5 & 0 \\ 0 & 5 & -\frac{11}{5} & \frac{2}{5} \\ 0 & 0 & \frac{2}{5} & \frac{11}{5} \end{pmatrix}$ 。

六、QR 分解的应用

1. 求行列式: $\det A = \det Q \det R = \pm \det R$;

2. 求逆矩阵: $A^{-1} = R^{-1} Q^T$;

3. 求方程组: $Ax = b \Rightarrow Rx = Q^T b$;

4. 求方阵 A 的全部特征值的 QR 方法:

设 $A \in \mathbf{R}^{n \times n}$, 构造

$$A_1 = A = Q_1 R_1, \quad A_2 = R_1 Q_1 = Q_2 R_2, \quad A_3 = R_2 Q_2 = Q_3 R_3, \dots,$$

一般地 $A_k = R_{k-1} Q_{k-1} = Q_k R_k \quad (k = 1, 2, \dots)$

可以证明, A_1, A_2, \dots , 均是相似的, 且在一定的条件下, $A_k \rightarrow T$ ($k \rightarrow +\infty$), 其中 T 是一个上三角矩阵, 从而 T 的对角元就是 A 的全部特征值。

如果在进行 QR 方法之前, 首先使 A 正交相似于 Hessenberg 矩阵 H , 即 $Q^T A Q = H$ 。再对 H 用 QR 方法求解: H_1, H_2, \dots , 则可证明 H_i 均是 Hessenberg 矩阵, 且 $\lim_{k \rightarrow +\infty} H_k = T$ 。这样计算工作量将大大减少, QR 方法仍是目前求全部特征值的有效方法之一。