第四章 矩阵的分解

这章我们主要讨论矩阵的五种分解:

- (1) 矩阵的满秩分解 (2) 正交三角分解
- (3) 奇异值分解 (4) 极分解 (5) 谱分解

矩阵的满秩分解

定理: 设 $A \in C_r^{m \times n}$, 那么存在

$$B \in C_r^{m \times r}$$
, $C \in C_r^{r \times n}$

使得

$$A = BC$$

其中B为列满秩矩阵,C为行满秩矩阵。我们称此分解为矩阵的满秩分解。

证明:假设矩阵 A的前 r 个列向量是线性无关的,对矩阵 A 只实施行初等变换可以将其化成

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{I_r} & \boldsymbol{D} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

即存在 $P \in C_m^{m \times m}$ 使得

$$PA = \begin{bmatrix} I_r & D \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

于是有

$$A = P^{-1} \begin{bmatrix} I_r \\ 0 \end{bmatrix} [I_r \quad D] = BC$$

其中

$$B = P^{-1} \begin{bmatrix} I_r \\ 0 \end{bmatrix} \in C_r^{m \times r}, C = \begin{bmatrix} I_r & D \end{bmatrix} \in C_r^{r \times n}$$

如果 A的前 r 列线性相关,那么只需对 A 作列变换使得前 r个列是线性无关的。然后重复上面的过程即可。这样存在

$$P \in C_m^{m \times m}, \quad Q \in C_n^{n \times n}$$

且满足

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

从而

$$\mathbf{A} = \mathbf{P}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{I}_r & \mathbf{D} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{P}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{I}_r \\ 0 \end{bmatrix} [\mathbf{I}_r & \mathbf{D}] \mathbf{Q}^{-1}$$
$$= \mathbf{B} \mathbf{C}$$

例:分别求下面三个矩阵的满秩分解

$$(1) \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 1 & 3 & 3 \\ 2 & 4 & 3 & 1 & 4 & 5 \\ 4 & 8 & 6 & 2 & 8 & 10 \end{bmatrix}$$

解 : (1) 对此矩阵只实施行变换可以得到

由此可知 Rank(A) = 2,且该矩阵第一列,第三列是线性无关的。选取

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 4 & 6 \end{bmatrix} \in C_2^{4 \times 2},$$

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \in C_2^{2 \times 6}$$

同样,我们也可以选取

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 4 & 2 \end{bmatrix} \in C_2^{4 \times 2},$$

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \in C_2^{2 \times 6}$$

$$\begin{bmatrix}
0 & 0 & 1 & 2 & 3 \\
0 & 0 & 2 & 4 & 6
\end{bmatrix}$$

解:对此矩阵只实施行变换可以得到

$$\rightarrow \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

所以 Rank(A)=1,且此矩阵的第三,第四,第五列任意一列都是线性无关的,所以选取哪一列构成列满秩矩阵均可以。

选取

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \in \mathbf{C}_{1}^{2 \times 1},$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \in \mathbf{C}_{1}^{1 \times 5}$$

也可以选取

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \end{bmatrix} \in \mathbf{C}_{1}^{2 \times 1},$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{2} & 1 & \frac{3}{2} \end{bmatrix} \in \mathbf{C}_{1}^{1 \times 5}$$

$$\begin{bmatrix}
0 & 1 & 0 & -1 & 1 \\
0 & 2 & 0 & 1 & -1 \\
0 & 3 & 0 & 2 & -2
\end{bmatrix}$$

解:对此矩阵只实施行变换可以得到

$$\rightarrow \begin{bmatrix}
0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{bmatrix}$$

$$\begin{matrix}
r_2 + \rightarrow r_1, & r_1(\frac{1}{3}) \\
r_1(-2) + \rightarrow r_2 \\
(-3r_1 - 2r_2) + \rightarrow r_3
\end{matrix}$$

所以 Rank(A) = 2 ,且容易看出此矩阵的第二列和第四列是线性无关的,选取

$$B = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \in C_2^{3 \times 2},$$

$$C = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \in C_2^{2 \times 5}$$

由上述例子可看出矩阵的满秩分解形式并不唯一。

一般地我们选取行简化阶梯型矩阵主元所在的列对应的列向量构成列满秩矩阵,将阶梯型矩阵全为零的行去掉后即可构成行满秩矩阵。但是不同的分解形式之间有如下联系:

定理: 如果 $A = BC = B_1C_1$ 均为矩阵 A 的满秩分解,那么

(1) 存在矩阵 $\theta \in C_r^{r \times r}$ 满足

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}_1 \boldsymbol{\theta}, \quad \boldsymbol{C} = \boldsymbol{\theta}^{-1} \boldsymbol{C}_1$$

(2)
$$C^{H}(CC^{H})^{-1}(B^{H}B)^{-1}B^{H}$$

= $C_{1}^{H}(C_{1}C_{1}^{H})^{-1}(B_{1}^{H}B_{1})^{-1}B_{1}^{H}$

矩阵的正交三角分解(UR分解)

定理 设 $A \in C_n^{n \times n}$, 那么 A 可唯一地分解为

$$A = UR$$

$$A = R_1 U_1$$

其中 U, $U_1 \in U^{n \times n}$, R 是正线上三角矩阵, R_1 是正线下三角矩阵。

证明: 先证明分解的存在性。将矩阵A按列分块得到

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \cdots & \alpha_n \end{bmatrix}$$

由于 $A \in C_n^{n \times n}$,所以

$$\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$$

是线性无关的。利用 Schmidt 正交化与单位化方法, 先得到一组正交向量组

$$\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_n$$

其中
$$i=1,2,\cdots,n$$
 (1)

再单位化,这样得到一组标准正交向量组

$$\eta_i = \frac{\beta_i}{|\beta_i|}$$

并且向量组之间有如下关系

$$\alpha_1 = c_{11}\eta_1$$

$$\alpha_2 = c_{21}\eta_1 + c_{22}\eta_2$$

$$\alpha_3 = c_{31}\eta_1 + c_{32}\eta_2 + c_{33}\eta_3$$

$$\dots$$

$$\alpha_n = c_{n1}\eta_1 + c_{n2}\eta_2 + \dots + c_{nn}\eta_n$$

其中
$$c_{ii} = |\beta_i| > 0$$
, $i = 1, 2, \dots, n$,于是有

$$A = [\alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \cdots \quad \alpha_n]$$

$$= \begin{bmatrix} \boldsymbol{\eta}_1 & \boldsymbol{\eta}_2 & \cdots & \boldsymbol{\eta}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{c}_{11} & \boldsymbol{c}_{21} & \cdots & \boldsymbol{c}_{n1} \\ & \boldsymbol{c}_{22} & \cdots & \boldsymbol{c}_{n2} \\ & & \ddots & \\ & 0 & & \boldsymbol{c}_{nn} \end{bmatrix} = \boldsymbol{UR}$$

其中
$$U = [\eta_1 \quad \eta_2 \quad \cdots \quad \eta_n] \in U_n^{n \times n}$$

显然矩阵 R是一个正线上三角矩阵。

下面考虑分解的唯一性。设有两种分解式

$$A = UR = UR$$

那么有

$$U^{-1}U=RR^{-1}$$
 引理3.9.1

注意到 $U^{-1}U$ 是酉矩阵,而 RR^{-1} 是一个正线上三角矩阵,由前面的结论可知

$$\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}, \quad \boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^{-1} = \boldsymbol{I}$$

因此有

$$U=U$$
, $R=R$

因为有 $A \in C_n^{n \times n}$,所以 $A^T \in C_n^{n \times n}$,按照分解的存在性可知

$$A^T = UR$$

其中 $U \in U^{n \times n}$, R 是正线上三角矩阵。于是

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R}^T \boldsymbol{U}^T = \boldsymbol{R}_1 \boldsymbol{U}_1$$

其中 R_1 是正线下三角矩阵,而 $U_1 \in U^{n \times n}$ 。

此结论也可以被推广为

定理: 设 $A \in C_r^{m \times r}$,则 A 可以唯一地分解为

$$A = UR$$

其中 R 是 r 阶正线上三角矩阵, $U \in U_r^{m \times r}$,即 U 是一个次酉矩阵。

证明:分解的存在性证明,同上面的例题完全一样。

分解的唯一性证明。设

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

则

$$A^{H}A = R_{1}^{H}R_{1} = R_{2}^{H}R_{2}$$

因为 $A^H A$ 是正定的 Hermite 矩阵(为什么?),由正定二次型的等价定理可知,其三角分解是唯一的,故 $R_1 = R_2$,进一步有 $U_1 = U_2$ 。

例 1: 求下列矩阵的正交三角分解

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

解: 容易判断出 $A \in C_3^{4\times 3}$,即 A是一个列满秩矩阵。按照定理的证明过程,将 $A = [\alpha_1 \ \alpha_2 \ \alpha_3]$ 的三个列向量正交化与单位化。先得到一个正交向量组

$$\boldsymbol{\beta}_1 = \boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T$$

$$\boldsymbol{\beta}_2 = \boldsymbol{\alpha}_2 - \frac{(\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\beta}_1)}{(\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_1)} \boldsymbol{\beta}_1 = \boldsymbol{\alpha}_2 - \frac{1}{2} \boldsymbol{\beta}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\beta}_3 = \boldsymbol{\alpha}_3 - \frac{(\boldsymbol{\alpha}_3, \boldsymbol{\beta}_1)}{(\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_1)} \boldsymbol{\beta}_1 - \frac{(\boldsymbol{\alpha}_3, \boldsymbol{\beta}_2)}{(\boldsymbol{\beta}_2, \boldsymbol{\beta}_2)} \boldsymbol{\beta}_2 =$$

$$\alpha_3 + \frac{1}{2}\beta_1 + \frac{1}{3}\beta_2 = \begin{bmatrix} -1 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 1 \end{bmatrix}^T$$

再将其单位化,得到一组标准正交向量组

$$\boldsymbol{\eta}_1 = \frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}_1\|} \boldsymbol{\beta}_1 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & 0 \end{bmatrix}^T$$

$$\boldsymbol{\eta}_2 = \frac{1}{\|\boldsymbol{\beta}_2\|} \boldsymbol{\beta}_2 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{6}}{6} & \frac{-\sqrt{6}}{6} & \frac{\sqrt{6}}{3} & 0 \end{bmatrix}^T$$

$$\eta_3 = \frac{1}{\|\beta_3\|} \beta_3 = \begin{bmatrix} -\sqrt{3} & \sqrt{3} & \sqrt{3} & \sqrt{3} \\ 6 & 6 & 6 \end{bmatrix}^T$$

这样,原来的向量组与标准正交向量之间的关系可表示成

$$\alpha_1 = \sqrt{2}\eta_1$$

$$\alpha_2 = \frac{\sqrt{6}}{2}\eta_2 + \frac{\sqrt{2}}{2}\eta_1$$

$$\alpha_3 = \frac{2\sqrt{3}}{3}\eta_3 - \frac{\sqrt{6}}{6}\eta_2 - \frac{\sqrt{2}}{2}\eta_1$$

将上面的式子矩阵化,即为

$$A = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 & \boldsymbol{\alpha}_2 & \boldsymbol{\alpha}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\eta}_1 & \boldsymbol{\eta}_2 & \boldsymbol{\eta}_3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \sqrt{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{6}}{2} & -\frac{\sqrt{6}}{6} \\ 0 & 0 & \frac{2\sqrt{3}}{3} \end{bmatrix} = \boldsymbol{UR}$$

$$(2) \quad A = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

解: 首先判断出 $A \in C_3^{3\times3}$,由定理可知必存在 $U \in U^{3\times3}$,以及三阶正线上三角矩阵 R 使得

$$A = UR$$

推论:设 $A \in C_r^{m \times n}$,则 A 可分解为 $A = U_1 R_1 L_2 U_2$

其中 $U_1 \in U_r^{m \times r}$, $U_2 \in U_r^{r \times n}$, R_1 是 r 阶正线

上三角矩阵, L_2 是r阶正线下三角矩阵。

矩阵的奇异值分解

引理 1: 对于任何一个矩阵 A 都有

$$Rank(AA^H) = Rank(A^HA) = Rank(A)$$

引理 2: 对于任何一个矩阵 A 都有 AA^H 与 A^HA 都是半正定的 Hermite-矩阵。

设 $A \in C_r^{m \times n}$, λ_i 是 AA^H 的特征值, μ_i 是 A^HA 的特征值, 它们都是实数。如果记

$$\lambda_{1} \geq \lambda_{2} \geq \cdots \geq \lambda_{r}$$

$$> \lambda_{r+1} = \lambda_{r+2} = \cdots = \lambda_{m} = 0$$

$$\mu_{1} \geq \mu_{2} \geq \cdots \geq \mu_{r}$$

$$> \mu_{r+1} = \mu_{r+2} = \cdots = \mu_{n} = 0$$

特征值 λ_i 与 μ_i 之间有如下关系。

定理: 设 $A \in C_r^{m \times n}$, 那么

$$\lambda_i = \mu_i > 0, \quad i = 1, 2, \dots, r.$$

同时,我们称

$$\alpha_i = \sqrt{\lambda_i} = \sqrt{\mu_i} > 0, \quad i = 1, 2, \dots, r$$

为矩阵A 的正奇异值,简称奇异值。

3-27 设 $A \in C^{m \times n}$, 证明: AA^H, A^HA 都是半正定矩阵,且 AA^H, A^HA 的非零特征值相同.

 λ_i 是 AA^H 的非零特征值, x 是对应于 λ_i 的特征向量,

则 λ_i 也是 $A^H A$ 的特征值, $A^H x$ 是对应于 λ_i 的特征向量. 设 λ_i 代数重数为 p_i ,则几何重数也为 p_i . 设 $x_{i1}, \dots x_{ip_i}$ 线性无关,是 对应于 $\lambda_i \neq 0$ 的特征向量,则 $A^H x_{i1}, \dots , A^H x_{ip_i}$ 也线性无关.

$$(k_{1}A^{H}x_{i1} + k_{2}A^{H}x_{i2} + \dots + k_{p_{i}}A^{H}x_{ip_{i}} = 0$$

$$0 = k_{1}AA^{H}x_{i1} + \dots + k_{p_{i}}AA^{H}x_{ip_{i}} = \lambda_{i}\left(k_{1}x_{i1} + \dots + k_{p_{i}}x_{ip_{i}}\right)$$

 $\therefore A^H A$ 的特征值 λ_i 的重数不小于 p_i .

又: $r(AA^H) = r(A^HA)$, $AA^H = A^HA$ 非零特征值的个数相同.

 $\therefore AA^H$ 与 A^HA 非零特征值的完全相同.

例: 求下列矩阵的奇异值

$$(1) \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

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

解: (1) 由于

$$AA^{H} = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

显然 AA^H 的特征值为 5, 0, 0, 所以 A 的奇异值为 $\sqrt{5}$.

(2) 由于

$$AA^{H} = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}$$

显然 AA^H 的特征值为 2, 4, 所以 A 的奇异值 为 $\sqrt{2}$, 2。

例 2 证明: 正规矩阵的奇异值为其非零特征值的模长。

定理:设 $A \in C_r^{m \times n}$,

$$\alpha_1 \geq \alpha_2 \geq \cdots \geq \alpha_r$$

是 A 的 r 个奇异值,那么存在 m 阶酉矩阵U 和 n 阶酉矩阵 V 使得

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

其中,

$$\Delta = egin{bmatrix} oldsymbol{lpha}_1 & & & \ & oldsymbol{lpha}_2 & & \ & \ddots & \ & & oldsymbol{lpha}_r \end{bmatrix}$$

且满足

$$\alpha_1 \ge \alpha_2 \ge \cdots \ge \alpha_r > 0$$

证明: 由于 Rank(A) = r ,所以 AA^H 的特征值为

$$\boldsymbol{\alpha}_1^2 \ge \boldsymbol{\alpha}_2^2 \ge \cdots \ge \boldsymbol{\alpha}_r^2 > 0,$$

$$\boldsymbol{\alpha}_{r+1}^2 = \boldsymbol{\alpha}_{r+2}^2 = \cdots = \boldsymbol{\alpha}_m^2 = 0$$

因为 AA^H 是一个 H-阵,所以存在 m 阶酉矩阵 U 且满足

$$\boldsymbol{U}^{H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{H}\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} \Delta^{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

将酉矩阵U按列进行分块,记

$$U=\begin{bmatrix}U_1 & U_2\end{bmatrix}$$
,其中
$$U_1 \in U_r^{m \times r}, \quad U_2 \in U_{m-r}^{m \times (m-r)}$$

于是有

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_1^H \\ \boldsymbol{U}_2^H \end{bmatrix} \boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^H \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_1 & \boldsymbol{U}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Delta}^2 & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} \end{bmatrix}$$

从而有

$$U_1^H A A^H U_1 = \Delta^2$$
, $U_2^H A A^H U_2 = 0$

$$U_2^H A = 0.$$

令
$$V_1 = A^H U_1 \Delta^{-1}$$
,那么容易验证

$$V_1 \in U_r^{n \times r}$$
, $V_1^H V_1 = I_r$

选取
$$V_2$$
 使得 $V = \begin{bmatrix} V_1 & V_2 \end{bmatrix}$ 是酉矩阵,则

$$0 = V_1^H V_2 = \Delta^{-1} U_1^H A V_2 \longrightarrow U_1^H A V_2 = 0$$

由上式可得

$$\boldsymbol{U}^{H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_{1}^{H} \\ \boldsymbol{U}_{2}^{H} \end{bmatrix} \boldsymbol{A} \begin{bmatrix} \boldsymbol{V}_{1} & \boldsymbol{V}_{2} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_{1}^{H} \boldsymbol{A} \boldsymbol{V}_{1} & \boldsymbol{U}_{1}^{H} \boldsymbol{A} \boldsymbol{V}_{2} \\ \boldsymbol{U}_{2}^{H} \boldsymbol{A} \boldsymbol{V}_{1} & \boldsymbol{U}_{2}^{H} \boldsymbol{A} \boldsymbol{V}_{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

这里,要注意 $U_2^H A = 0$.

我们称此定理为奇异值分解定理。称表达式

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

为矩阵 A 的奇异值分解式 (SVD).