第一节　QR分解

QR分解也称为正交三角分解

矩阵QR分解是一种特殊的三角分解，在解决矩阵特征值的计算、最小二乘法等问题中起到重要作用。

主要内容：

1·矩阵的QR分解-- Schmidt正交化方法

2·矩阵的QR分解-- Householder变换、Givens变换

定义:设$A\in C^{n\times n}$.如果存在n阶酉矩阵Q和n阶上三角矩阵R，使得 $A=QR$ 则称之为A的QR分解或酉三角分解

当 $A\in R^{n\times n}$ 时，则称为A的正三角分解

QR分解定理

任意一个满秩实(复）矩阵A，都可唯一地分解A = QR ，其中Q为正交（酉）矩阵，R是具有正对角元的上三角矩阵。

证明

设A是一个实满秩矩阵，A的n个列向量为 $x_1, x_2, \dots, x_n$

由于$x_1, x_2, \dots, x_n$ 线性无关，将它们用Schmidt正交

化方法得标准正交向量$e_1, e_2, \dots, e_n$

$$\begin{cases} x_1 = b_{11}e_1 \\ x_2 = b_{12}e_1 + b_{22}e_2 \\ \cdots \\ x_n = b_{1n}e_1 + b_{2n}e_2 + \cdots + b_{nn}e_n \end{cases}$$

其中 $b_{ii} > 0 , i = 1,2,\cdots,n$

从而有

$$\begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & b_{nn} \end{pmatrix}$$

令$Q=\begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix}, R=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & b_{nn} \end{pmatrix}$

则$Q^TQ=I$

再证唯一性　　如果$A=QR=Q_1R_1$,则

由此得　　$Q=Q_1R_1R^{-1}=Q_1D$

式中$D=R_1R^{-1}$仍为具有正对角元的上三角矩阵。由于

$$I=Q^TQ=(Q_1D)^T(Q_1D)=D^TD$$

即D为正交矩阵，因此D为单位矩阵（正规上三角为对角阵）

故　$Q=Q_1D=Q_1, R_1=DR=R$

说明：**1**·若不要求**R**具有正对角元，则**A**的不同**QR**分解仅在正交矩阵的列和上三角矩阵**R**的对应行相差模为**1**的因子。

2·若A为满秩复矩阵，则存在酉矩阵Q与复非奇异上三角矩阵R，使A = QR

该定理的证明过程给出了利用Schmidt正交化方法求可逆矩阵QR分解的方法。

例　求矩阵A的QR分解 $A=\begin{pmatrix}1&2&2\\1&0&2\\0&1&1\end{pmatrix}$

解

记 $x_1=\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix},x_2=\begin{pmatrix}2\\0\\1\end{pmatrix},x_3=\begin{pmatrix}2\\2\\1\end{pmatrix}$，则

将 x_1, x_2, x_3 正交化

$$\begin{cases} y_1 = x_1 \\ y_2 = x_2 - \frac{(x_2, y_1)}{(y_1, y_1)} y_1 = x_2 - y_1 = (1, -1, 1)^T \\ y_3 = x_3 - \frac{(x_3, y_1)}{(y_1, y_1)} y_1 - \frac{(x_3, y_2)}{(y_2, y_2)} y_2 \\ \qquad = x_3 - 2y_1 - \frac{1}{3} y_2 = \frac{1}{3}(-1, 1, 2)^T \end{cases}$$

单位化 $\begin{cases} e_1 = \frac{y_1}{|y_1|} = \frac{\sqrt{2}}{2}(1, 1, 0)^T \\ e_2 = \frac{y_2}{|y_2|} = \frac{\sqrt{3}}{3}(1, -1, 1)^T \\ e_3 = \frac{y_3}{|y_3|} = \frac{\sqrt{6}}{6}(-1, 1, 2)^T \end{cases}$

整理得

$$\begin{cases} x_1 = \sqrt{2}e_1 \\ x_2 = \sqrt{2}e_1 + \sqrt{3}e_2 \\ x_3 = 2\sqrt{2}e_1 + \frac{\sqrt{3}}{3}e_2 + \frac{\sqrt{6}}{3}e_3 \end{cases}$$

令

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{3} & -\frac{\sqrt{6}}{6} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{6}}{6} \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{6}}{3} \end{pmatrix}, \quad R = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & 2\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3} & \frac{\sqrt{3}}{3} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{6}}{3} \end{pmatrix}$$

则

$$A = QR$$

例1：利用Schmidt正交化方法求矩阵的QR分解 $A=\begin{pmatrix} 0 & 3 & 1 \\ 0 & 4 & -2 \\ 2 & 1 & 2 \end{pmatrix}$

设 $x_1=(0,0,2)^T, x_2=(3,4,1)^T, x_3=(1,-2,2)^T$， 则 x_1, x_2, x_3

线性无关，首先将它们正交化得：

$$y_1=x_1=(0,0,2)^T,$$

$$y_2=x_2-\frac{(x_2,y_1)}{(y_1,y_1)}y_1=x_2-\tfrac{1}{2}y_1=(3,4,0)^T$$

$$y_3=x_3-\frac{(x_3,y_1)}{(y_1,y_1)}y_1-\frac{(x_3,y_2)}{(y_2,y_2)}y_2=x_3-y_1+\frac{1}{5}y_2=\left(\frac{8}{5},-\frac{6}{5},0\right)^T$$

再单位化：$e_1=\frac{1}{2}y_1=(0,0,1)^T$， $e_2=\frac{1}{5}y_2=\left(\frac{3}{5},\frac{4}{5},0\right)^T$，

$$e_1=\frac{1}{2}y_1=(0,0,1)^T,$$

$$e_2=\frac{1}{5}y_2=\left(\frac{3}{5},\frac{4}{5},0\right)^T,$$

$$e_3=\frac{1}{2}y_3=\left(\frac{4}{5},-\frac{3}{5},0\right)^T,$$

于是： $x_1=y_1=2e_1$

$$x_2=\frac{1}{2}y_1+y_2=e_1+5e_2$$

$$x_3=y_1-\frac{1}{5}y_2+y_3=2e_1-e_2+2e_3$$

从而

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

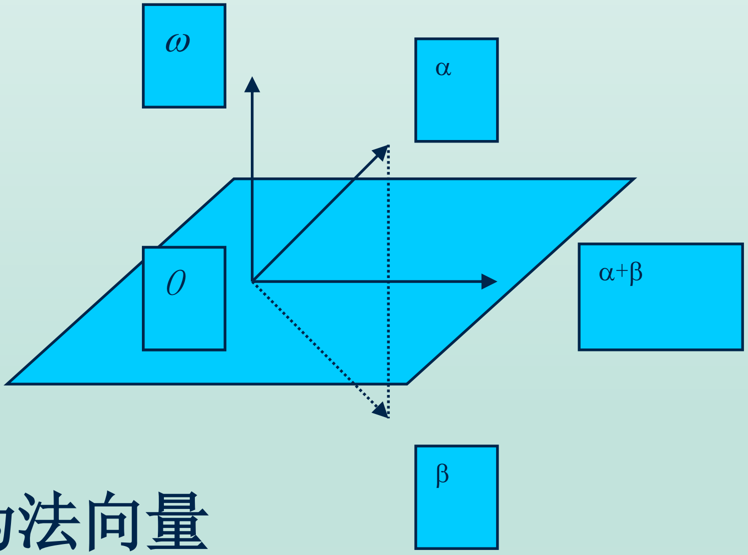
Householder变换

Householder变换又称为反射变换或镜像变换，有明显的几何意义。在 R^3 中，给定一个向量α，令β表示α关于平面π（以ω 为法向量）的反射变换所得像，如图所示，

记 $$\omega = \frac{\alpha - \beta}{|\alpha - \beta|} \in R^3$$

$$H(\omega) = I - 2\omega\omega^T$$

则 $$H(\omega)\alpha = \beta$$



即：该变换将向量 α 变成了以 ω 为法向量的平面的对称向量β 。

定义 设 $\omega \in C^n$ 是一个单位向量，令

$$H(\omega) = I - 2\omega\omega^H$$

则称H是一个Householder矩阵或Householder变换。

性质5.1.1 设*H*是一个Householder矩阵，则

（1）*H*是Hermite矩阵，$H^H = H$；
（2）*H*是酉矩阵，$H^H H = I$ ；
（3）*H*是对合矩阵，$H^2 = I$ ；
（4）*H*是自逆矩阵 $H^{-1} = H$
（5）$diag(I, H)$ 也是一个Householder矩阵;
（6）$\det H = -1$。

定理 设$u \in C^n$是一个单位向量，则对于任意的 $x \in C^n$

存在Householder矩阵H，使得 $Hx = au$其中 $|a| = \|x\|_2, ax^H u$ 为实数

证明 当x=0时，任取单位向量 $\omega \in C^n$

则 $$H(\omega)(x) = (I - 2\omega\omega^H)0 = 0$$

当 $x = au \neq 0$ 时，取单位向量 $\omega \in C^n$ 使 $\omega^H x = 0$

则
$$H(\omega)(x) = (I - 2\omega\omega^H)x = x - 2\omega(\omega^H x) = x = au$$

当 $x \neq au$ 时，取 $\omega = \dfrac{x-au}{\|x-au\|_2}$,

$$H(\omega)x = \left(I - 2\omega\omega^T\right)x = \left(I - 2\frac{(x-au)(x-au)^H}{\|x-au\|_2^2}\right)x$$

$$= x - 2\frac{(x-au)^H x}{(x-au)^H (x-au)}(x-au)$$

由于 $(x-au)^H(x-au) = x^H x - ax^H u - \bar{a}u^H x + |a|^2 u^H u$

$$= x^H x - \left(ax^H u\right)^H - \bar{a}u^H x + \|x\|_2^2$$

$$= 2(x^H x - \bar{a}u^H x) = 2(x-au)^H x$$

所以 $H(\omega)x = x - 2\dfrac{(x-au)^H x}{(x-au)^H (x-au)}(x-au) = au$

推论1 对于任意的 $x \in C^n$，存在Householder矩阵H，使得 $Hx = ae_1$ 其中 $|a| = \|x\|_2, ax^H e_1$ 为实数。

推论2 对于任意的 $x \in R^n$，存在Householder矩阵H

$$H(\omega) = I - 2uu^T, \qquad (u \in R^n, u^T u = 1)$$

使得 $Hx = ae_1$ ，其中 $|a| = \|x\|_2$

上述结论表明，可以利用Householder变换将任意向量 $x \in R^n$ 化为与第一自然基向量 e_1 平行的向量（共线）。

例2 用Householder变换将向量 $x=(-2i,\quad i,\quad 2)^T$ 化为与 $e_1=(1,\quad 0,\quad 0)^T$ 平行的向量。

解 由于 $\|x\|_2=3 \quad x^H e_1=2i$

为了使 $|a|=\|x\|_2, ax^H e_1=a2i$ 为实数，取 $a=3i$

令

$$\omega=\frac{x-ae_1}{\|x-ae_1\|_2}=\frac{1}{\sqrt{30}}\begin{pmatrix}-5i\\ i\\ 2\end{pmatrix}$$

则

$$H=I-2\omega\omega^H=\frac{1}{15}\begin{pmatrix}-10 & 5 & 10i\\ 5 & 14 & -2i\\ -10i & 2i & 11\end{pmatrix}$$

因此 $Hx=3ie_1$

说明 也可取 $a=\pm 3$ 或 $a=-3i$

利用Householder矩阵求矩阵的QR分解的步骤：

[1] 将矩阵A按列分块 $A=(\alpha_1, \quad \alpha_2, \quad \cdots, \quad \alpha_n)$, 取

$$\omega_1=\frac{\alpha_1-a_1e_1}{\|\alpha_1-a_1e_1\|_2}, a_1=\|\alpha_1\|_2$$

则 $$H_1=I-2\omega_1\omega_1^H$$

$$H_1A=(H_1\alpha_1, \quad H_1\alpha_2, \quad \cdots, \quad H_1\alpha_n)=\begin{pmatrix} a_1 & * & \cdots & * \\ 0 & & & \\ \vdots & & B_1 & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

[2] 将矩阵 $B_1 \in C^{(n-1)\times(n-1)}$ 按列分块, $B_1 = (\beta_2, \quad \beta_3, \quad \cdots, \quad \beta_n)$

取 $u_2 = \dfrac{\beta_2 - b_2 e_1}{\|\beta_2 - b_2 e_1\|_2}, b_2 = \|\beta_2\|_2$

$$\tilde{H}_2 = I - 2u_2 u_2^H \qquad H_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & \tilde{H}_2 \end{pmatrix}$$

则

$$H_2(H_1 A) = \begin{pmatrix} a_1 & * & * & \cdots & * \\ 0 & a_2 & * & \cdots & * \\ 0 & 0 & & C_2 & \end{pmatrix}$$

其中 $C_2 \in C^{(n-2)\times(n-2)}$

依次进行下去，得到第n-1个n阶的Household矩阵H_{n-1}，使得

$$H_{n-1}\cdots H_2 H_1 A = \begin{pmatrix} a_1 & * & \cdots & * \\ & a_2 & \cdots & \vdots \\ & & \ddots & * \\ & & & a_n \end{pmatrix} = R$$

[3]因 H_i 为自逆矩阵，令 $Q = H_1 H_2 \cdots H_{n-1}$

则　A=QR

例2：已知矩阵 $A=\begin{pmatrix}0 & 3 & 1\\ 0 & 4 & -2\\ 2 & 1 & 1\end{pmatrix}$，利用Householder变换求A的QR分解

因为$\alpha_1=(0,0,2)^T$，记 $a_1=\|\alpha_1\|_2=2$，令

$$\omega_1=\frac{\alpha_1-a_1e_1}{\|\alpha_1-a_1e_1\|_2}=\frac{1}{\sqrt{2}}(-1,0,1)^T$$ 则 $$H_1=I-2\omega_1\omega_1^H=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix},$$

从而 $H_1A=\begin{pmatrix}2 & 1 & 2\\ 0 & 4 & -2\\ 0 & 3 & 1\end{pmatrix}$ 记 $\beta=(4,3)^T$，则 $b_2=\|\beta_2\|_2=5,$

令 $$\mu_1=\frac{\beta_2-b_2e_2}{\|\beta_2-b_2e_2\|_2}=\frac{1}{\sqrt{10}}(-1,3)^T,\quad \tilde{H}_2=I-2\mu_2\mu_2^H=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}4 & 3\\ 3 & -4\end{pmatrix},$$

记 $H_2=\begin{pmatrix}1 & 0^T\\ 0 & \tilde{H}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 4 & 3\\ 0 & 3 & -4\end{pmatrix}$, 则

$$H_2(H_1A)=\begin{pmatrix}2 & 1 & 2\\ 0 & 5 & -1\\ 0 & 0 & -2\end{pmatrix}=R$$ 取 $$Q=H_1H_2=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}0 & 3 & -4\\ 0 & 4 & 3\\ 5 & 0 & 0\end{pmatrix}$$

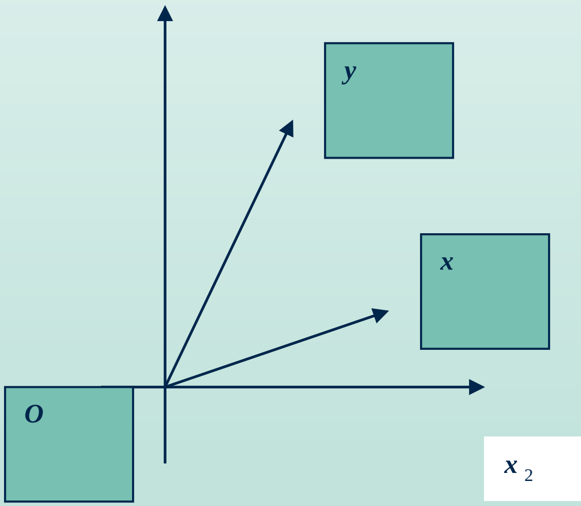
则 $A=QR$

Givens变换

我们知道，平面坐标系R^2中的旋转角为θ 变换可表示为

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = T\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, T = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

T是正交矩阵，称为平面旋转矩阵。将其推广到一般的n维酉空间中，可以得到初等旋转变换，也称为Givens变换。



定义 设 $c,s\in C^n$ $|c|^2+|s|^2=1$ 记n阶矩阵

$$T_{kl}=\begin{array}{cc}
\begin{pmatrix}
1 &&&&&&&&&& \\
& \ddots &&&&&&&&& \\
&& 1 &&&&&&&& \\
&&& \bar{c} &&&& \bar{s} &&& \\
&&&& 1 &&&&&& \\
&&&&& \ddots &&&&& \\
&&&&&& 1 &&&& \\
&&& -s &&&& c &&& \\
&&&&&&&& 1 && \\
&&&&&&&&& \ddots & \\
&&&&&&&&&& 1
\end{pmatrix} &
\begin{matrix} \\ \\ \\ (k) \\ \\ \\ \\ (l) \\ \\ \\ \\ \end{matrix} \\
\begin{matrix} \quad & \quad & \quad & (k) & \quad & \quad & \quad & (l) & \quad & \quad & \quad \end{matrix} &
\end{array}$$

称 T_{kl} 为Givens矩阵或初等旋转矩阵；

由 T_{kl} 所确定的线性变换称为Givens变换或初等旋转变换。

容易验证，Givens矩阵是酉矩阵，且 $\det T_{kl}=1$。

定理 对于任意向量 $x \in C^n$，存在Givens变换 T_{kl}，使得 $T_{kl}x$ 的第 l 个分量为0，第 k 个分量为非负实数，其余分量不变。

证明 记 $x = (x_1, \quad x_2, \quad \cdots, \quad x_n)^T, T_{kl}x = (y_1, \quad y_2, \quad \cdots, \quad y_n)^T$

由Givens矩阵的定义可得

$$\begin{cases} y_k = \bar{c}x_k + \bar{s}x_l \\ y_l = -sx_k + cx_l \\ y_j = x_j, (j \neq k, l) \end{cases}$$

当 $|x_k|^2+|x_l|^2=0$ 时，取c=1, s=0，则$T_{kl}=I$, 此时

$y_k=y_l=0, y_j=x_j (j\neq k,l)$ ，结论成立。

当 $|x_k|^2+|x_l|^2\neq 0$ 时，取 $c=\dfrac{x_k}{\sqrt{|x_k|^2+|x_l|^2}}, s=\dfrac{x_l}{\sqrt{|x_k|^2+|x_l|^2}}$

则

$$y_k=\frac{\bar{x}_k x_k}{\sqrt{|x_k|^2+|x_l|^2}}+\frac{\bar{x}_l x_l}{\sqrt{|x_k|^2+|x_l|^2}}=\sqrt{|x_k|^2+|x_l|^2}>0$$

$$y_l=-\frac{x_k x_l}{\sqrt{|x_k|^2+|x_l|^2}}+\frac{x_k x_l}{\sqrt{|x_k|^2+|x_l|^2}}=0$$

$$y_j=x_j (j\neq k,l)$$

推论 给定一个向量 $x\in C^n$，则存在一组Givens矩阵

$T_{12},T_{13},\cdots,T_{1n}$， 使得 $T_{1n}\cdots T_{13}T_{12}x=\|x\|_2 e_1$

称为用Givens变换化向量 $x\in C^n$ 与第一自然基向量 e_1 共线。

证明 设 $x=(x_1,\quad x_2,\quad \cdots,\quad x_n)^T$

由上述定理存在Givens矩阵 T_{12}

使得 $T_{12}x=\left(\sqrt{|x_1|^2+|x_2|^2},0,x_3,\cdots,x_n\right)^T$

对于 $T_{12}x$ 又存在Givens矩阵 T_{13}，使得

$$T_{13}(T_{12}x)=\left(\sqrt{|x_1|^2+|x_2|^2+|x_3|^3},\quad 0,\quad 0,\quad x_4,\quad \cdots,\quad x_n\right)^T$$

依此继续下去，可以得出

$$T_{1n}\cdots T_{13}T_{12}x=\left(\sqrt{|x_1|^2+|x_2|^2+\cdots+|x_n|^2},\quad 0,\quad \cdots,\quad 0\right)^T=\|x\|_2 e_1$$

例3 用Givens变换化向量 $x=\left(-2i,\quad i,\quad 2\right)^T$ 与第一自然基向量共线

解 由于 $x_1=-2i, x_2=i, \sqrt{|x_1|^2+|x_2|^2}=\sqrt{5}$

取 $c_1=\dfrac{-2i}{\sqrt{5}}, s_1=\dfrac{i}{\sqrt{5}}$

则构造Givens矩阵

$$T_{12}=\begin{pmatrix} \dfrac{2i}{\sqrt{5}} & \dfrac{-i}{\sqrt{5}} & 0 \\ -\dfrac{i}{\sqrt{5}} & \dfrac{-2i}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad T_{12}x=\begin{pmatrix} \sqrt{5} \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}$$

对于 $T_{12}x$ 由于 $x'_1=\sqrt{5}, x_3=2, \sqrt{|x'_1|^2+|x_3|^2}=3$

取 $c_2=\dfrac{\sqrt{5}}{3}, s_2=\dfrac{2}{3}$

则

$$T_{13}=\begin{pmatrix} \dfrac{\sqrt{5}}{3} & 0 & \dfrac{2}{3} \\ 0 & 1 & 0 \\ \dfrac{-2}{3} & 0 & \dfrac{\sqrt{5}}{3} \end{pmatrix}, T_{13}T_{12}x=\begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}=3e_1$$

利用Givens矩阵求矩阵的QR分解的步骤：

先将矩阵A按列分块，$A=(\alpha_1, \quad \alpha_2, \quad \cdots, \quad \alpha_n) \quad A\in C^{n\times n}$

[1] 对于 α_1

存在一组Givens矩阵 $T_{12}, T_{13}, \cdots, T_{1n}$

使得 $T_{1n}\cdots T_{13}T_{12}\alpha_1=\|\alpha_1\|_2 e_1$

于是 $T_{1n}\cdots T_{13}T_{12}A=\begin{pmatrix} a_1 & * \\ 0 & B_1 \end{pmatrix}, \qquad a_1=\|\alpha_1\|_2$

[2] 将矩阵 $\begin{pmatrix} * \\ B_1 \end{pmatrix} \in C^{n\times(n-1)}$ 按列分块

$$\begin{pmatrix} * \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ \beta_2 & \beta_3 & \cdots & \beta_n \end{pmatrix}$$

又存在一组Givens矩阵 $T_{23}, T_{24}, \cdots, T_{2n}$

使得$T_{2n}\cdots T_{24}T_{23}\begin{pmatrix} * \\ \beta_2 \end{pmatrix} = (*,\quad b_2,\quad 0,\quad \cdots,\quad 0)^T \qquad b_2 = \left\|\beta_2\right\|_2$

因此

$$T_{2n}\cdots T_{23}T_{1n}\cdots T_{12}A=\begin{pmatrix} a_1 & * & * & \cdots & * \\ 0 & b_1 & * & \cdots & * \\ 0 & 0 & & C_2 & \end{pmatrix}$$ 其中，$C_2\in C^{(n-2)\times(n-2)}$

依次进行下去，得到

$$T_{n-1,n}\cdots T_{2n}\cdots T_{23}T_{1n}\cdots T_{12}A=\begin{pmatrix} a_1 & * & \cdots & * \\ & b_2 & \cdots & * \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & c_n \end{pmatrix}=R$$

[3]令 $Q=T_{12}^{H}\cdots T_{1n}^{H}T_{23}^{H}\cdots T_{2n}^{H}\cdots T_{n-1,n}^{H}$

则A=QR

说明：利用Givens矩阵进行QR分解，需要作 $\frac{n(n-1)}{2}$ 个初等旋转矩阵的连乘积， 当**n**较大时，计算量较大，因此常用镜像变换来进行QR分解