第4章　矩阵分解

Matrix Factorization and Decomposition

矩阵分解的概述

- 矩阵的分解：

  A=A$_1$+A$_2$+…+A$_k$　　矩阵的和

  A=A$_1$A$_2$ …A$_m$　　矩阵的乘积
- 矩阵分解的原则：
  - 实际应用的需要
    - 显示原矩阵的某些特性
    - 矩阵化简的方法之一

理论上的需要
计算上的需要

- 主要技巧：
  - 各种标准形的理论和计算方法
  - 矩阵的分块

本章首先由Gauss消去法推导出矩阵的三角分解（或LU分解），然后介绍QR分解。满秩分解等。这些分解在计算数学中都扮演着十分重要的角色，尤其是QR分解所建立的QR方法，它对数值代数理论的发展起着关键的作用。我们还介绍在广义逆矩阵理论中所遇到的矩阵的满秩分解，奇异值分解和谱分解，它们与QR分解都是求解各类最小二乘法问题和最优化问题的重要数学工具。

4.1 矩阵的三角分解

4.1.1 Gauss消去法的矩阵表述

设有 n 元线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n \end{cases}$$

其矩阵形式为 $Ax=b$

其中 $A=(a_{ij})_{n\times n}, x=\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, b=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$

如果矩阵A非奇异，则线性方程组AX=b的解为

X=A^{-1}b,但当n充分大，用公式计算的元素是非常困难的。因此寻求（4.1）的直接解法是很有价值的，这就是解线性方程组的Gauss消去法产生的原因，而Gauss消去法又与矩阵分解有着密切关系。为建立矩阵的三角分解理论，我们用矩阵语言来描述Gauss消去法的程序。

设 $A^{(0)}=A$，其元素 $a_{ij}^{(0)}=a_{ij}$ 记A的k阶顺序主子式为A$_k$

k=1,2, …,n.如果 $\Delta_1 = a_{11}^{(0)} \neq 0$

，令 $c_{i1}=\dfrac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} \quad (i=2,3,\cdots,n)$

。对应于Gauss消元程序，构造消元矩阵 $L_1=\begin{pmatrix} 1 & & & \\ -c_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ -c_{n1} & -c_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}$

$$L_1A^{(0)}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix} = A^{(1)} \qquad L_1^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & & & \\ c_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

由于 $|A|=|A^{(0)}|=|L_1A^{(0)}|$

，所以由A 得 的二阶顺序主子式为 $A_2=a_{11}^{(0)}a_{22}^{(1)}$, 如果

，$\Delta_2\neq 0$则 $a_{22}^{(1)}\neq 0$令 $c_{i2}=\dfrac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}\quad(i=3,4,\cdots,n)$，并构造消元矩阵

$$L_2=\begin{pmatrix}1 & & & & \\ 0 & 1 & & & \\ 0 & -c_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & -c_{n2} & -c_{n3} & \cdots & 1\end{pmatrix}$$

则 $$L_2A^{(1)}=\begin{pmatrix}a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)}\\ & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)}\\ & & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)}\\ & & \vdots & & \vdots\\ & & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)}\end{pmatrix}=A^{(2)}L_2^{-1}=\begin{pmatrix}1 & & & & \\ 0 & 1 & & & \\ 0 & c_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & c_{n2} & c_{n3} & \cdots & 1\end{pmatrix}$$

同理由A(2)可得A的3阶顺序主子式$\Delta_3=a_{11}^{(0)}a_{22}^{(1)}a_{33}^{(2)}$ 如果$\Delta 3\neq 0$，则 $a_{33}^{(2)}\neq 0$ 继续下去，直到第r步，这时$\Delta r\neq 0$，则 $a_{rr}^{(r-1)}\neq 0$

$$L_rA^{(r-1)}=\begin{pmatrix}a_{11}^{(0)} & & a_{1r}^{(0)} & a_{1r+1}^{(0)} & & a_{1n}^{(0)}\\ & & & & & \\ & & a_{rr}^{(r-1)} & a_{rr+1}^{(r-1)} & & a_{rn}^{(r-1)}\\ & & & a_{r+1r+1}^{(r)} & & a_{r+1n}^{(r)}\\ & & & \vdots & \vdots & \vdots\\ & & & a_{nr+1}^{(r)} & & a_{nn}^{(r)}\end{pmatrix}=A^{(r)}$$

其中 $$L_r=\begin{pmatrix}1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & -c_{r+1,r} & 1 & \\ & & \vdots & \vdots & \ddots \\ & & -c_{nr} & -c_{n,r+1} & \cdots & 1\end{pmatrix}\quad L_r^{-1}=\begin{pmatrix}1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & c_{r+1,r} & 1 & \\ & & \vdots & \vdots & \ddots \\ & & c_{nr} & c_{n,r+1} & \cdots & 1\end{pmatrix}$$

如果这时$\Delta r=0$,即 $a_{r+1,r+1}^{(r)}=0$

则Gauss消元法过程中断；否则可以一直进行下去，

则在第n-1步，$\Delta_{n-1}\neq 0$,就有

$$L_{n-1}A^{(n-2)}=\begin{pmatrix}a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{13}^{(0)} & a_{1n}^{(0)}\\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{23}^{(1)} & a_{2n}^{(1)}\\ & & \ddots & \vdots & \vdots\\ & & & a_{n-1,n-1}^{(n-2)} & a_{n-1,n}^{(n-2)}\\ & & & & a_{nn}^{(n-1)}\end{pmatrix}=A^{(n-1)}$$

$$L_{n-1}=\begin{pmatrix}1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \\ & & -c_{n,n-1} & 1\end{pmatrix}\quad L_{n-1}^{-1}=\begin{pmatrix}1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \\ & & c_{n,n-1} & 1\end{pmatrix}\quad c_{n,n-1}=\frac{a_{n,n-1}^{(n-2)}}{a_{n-1,n-1}^{(n-2)}}$$

由上可知，对矩阵A的Gauss程序能够进行到最后一步的充要条件是 $a_{11}^{(0)},a_{22}^{(1)},\cdots,a_{n-1,n-1}^{(n-2)}$均不为零，也即A的前n-1个顺序主子式$\Delta_k\neq 0(k=1,2,\ldots,n-1)$ （4.2）

因为Gauss消元法上述过程用到行、列交换，所以附加条件（4.2）是合理的。我们看到当条件（4.2）成立时，有$L_{n-1}\ldots L_2L_1A=A^{(n-1)}$,也即$A=A^{(0)}=L_1^{-1}L_2^{-1}\ldots L_{n-1}^{-1}A^{(n-1)}$,令 $L=L_1^{-1}L_2^{-1}\ldots L_{n-1}^{-1}$,则

$$L=\begin{pmatrix}1 & & & & \\ c_{21} & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ c_{n-1,1} & c_{n-1,2} & \cdots & 1 & \\ c_{n,1} & c_{n,2} & \cdots & c_{n,n-1} & 1\end{pmatrix}$$

L是一个单位下三角矩阵，我们记$U=A^{(n-1)}$,则U是一个上三角矩阵，且A=LU.

从解线性方程组的观点看，由Gauss消去法我们得到一个简单的非奇异矩阵。即单位下三角矩阵 **L**,使**$L^{-1}A=U$**是一个上三角矩阵，令**$y=L^{-1}b$**,则**Ax=b**可化为

Ux=y **(4.3)**

它的第**n**个方程只含**x_n**,第**n-1**个方程只含**x_n**和**x_{n-1}**, …,因而可以依次求出**$x_n,x_{n-1},\ldots,x_1$**,进而解出（**4.3**）式。

4.1.2矩阵的三角分解

定义4.1 设矩阵A是n阶复矩阵，如果A可以分解成一个下三角矩阵K与一个上三角矩阵U的乘积，即A=KU，称A可以三角分解；
如果A可以分解为一个单位下三角矩阵L与一个上三角矩阵U的乘积，即A=LU,称A可以LU分解；
如果A=LDU，其中L是单位下三角矩阵，U是单位上三角矩阵，D是对角矩阵，称A可以LDU分解。

注：一个矩阵的三角分解一般不唯一。

矩阵能够三角分解的条件：

定理4.1 设矩阵A是n阶矩阵，则A能够唯一LDU分解的充要条件是A的前n-1个顺序主子式$\Delta_k \neq 0$(k=1,2, …,n-1)

其中L是单位下三角矩阵，U是单位上三角矩阵，

D=diag($d_1,d_2, …,d_n$)是对角矩阵，而且$d_1=\Delta_1, d_k=\Delta_k/\Delta_{k-1}$, (k=2,3, …,n).

推论4.1 设A是n阶矩阵，则A能够唯一分解为A=LU的充要条件是A的前n-1个顺序主子式均不为零，即$\Delta_k \neq 0$(k=1,2, …，n-1)

推论4.2 n阶非奇异矩阵A有三角分解A=KU的充要条件是A的前n-1个顺序主子式均不为零，即$\Delta_k \neq 0$(k=1,2, …，n-1)

求矩阵A的LU分解以及LDU分解。其中

$$A=\begin{pmatrix}2 & -1 & 3\\ 1 & 2 & 1\\ 2 & 4 & 2\end{pmatrix}$$

解：因为$\Delta_1=2$，$\Delta_2=5$，所以A有唯一的LU分解，令

$$L_1=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ -\frac{1}{2} & 1 & 0\\ -1 & 0 & 1\end{pmatrix} \quad L_1^{-1}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ \frac{1}{2} & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\end{pmatrix} \quad \text{则} \quad L_1A^{(0)}=\begin{pmatrix}2 & -1 & 3\\ 0 & \frac{5}{2} & -\frac{1}{2}\\ 0 & 5 & -1\end{pmatrix}=A^{(1)}$$

$$L_2=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & -2 & 1\end{pmatrix} \quad L_2^{-1}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 2 & 1\end{pmatrix} \quad \text{则} \quad L_2A^{(1)}=\begin{pmatrix}2 & -1 & 3\\ 0 & \frac{5}{2} & -\frac{1}{2}\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}=A^{(2)}$$

因为

$$L^{-1}=L_2L_1=\begin{pmatrix}1 & & \\ -\frac{1}{2} & 1 & \\ -1 & -2 & 1\end{pmatrix}, \therefore L=L_1^{-1}L_2^{-1}=\begin{pmatrix}1 & & \\ \frac{1}{2} & 1 & \\ 1 & 2 & 1\end{pmatrix}$$

于是 $A=A^{(0)}=L_1^{-1}A^{(1)}=L_1^{-1}L_2^{-1}A^{(2)}=LU$

从而得到矩阵A的LU分解为 $A=LA^{(2)}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ \frac{1}{2} & 1 & 0\\ 1 & 2 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & -1 & 3\\ 0 & \frac{5}{2} & -\frac{1}{2}\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$

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

故A的LDU分解为

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

由定理4. 1及推论1知，上述的两个分解都是唯一的。

- 三角分解的存在性和惟一性

  定理4.2 （*P.96*）：
  - 矩阵的k 阶主子式：取矩阵的前k行、前k列得到的行列式，k=1，2， … ， n。
  - 定理4.1: A$\in P^{n\times n}$有惟一LDU分解的充要条件是A的顺序主子式A_k非零，k=1，2，…，n-1。

  证明过程给出了LDV分解的一种算法

4.2 矩阵的满秩分解

设A是复数域C上，秩为r的$m\times n$矩阵，记为$A\in C_r^{m\times n}$

4.2.1 矩阵的满秩分解

设A是复数域C上，秩为r的$m\times n$矩阵，记为$A\in C_r^{m\times n}$(r>0)，如果存在秩为r的$m\times r$矩阵F和秩为r的$r\times n$矩阵G，使得$A=FG$，称其为A的一个满秩分解。

注1. F称为列满秩矩阵，G称为行满秩矩阵；

2. 矩阵的满秩分解一般不唯一。

满秩分解的存在性定理：

定理4.3 任何非零矩阵均存在满秩分解.

证明：采用构造性证明方法。设A是秩为r的$m\times n$矩阵，故存在m阶初等矩阵$E_1, E_2, \dots, E_k$，使得

$$B = E_k \cdots E_2 E_1 A = \begin{pmatrix} G \\ \cdots \\ O \end{pmatrix} \begin{array}{l} r\text{行} \\ \\ m-r\text{行} \end{array}$$

其中G是$r\times n$行满秩矩阵，记$P= E_k E_{k-1} \dots E_1$，则P可逆，并且$A=P^{-1}B$，把P^{-1}分块为$P^{-1}=(F, S)$，其中F为$m\times r$矩阵，则$A=FG$，F是列满秩矩阵，G是行满秩矩阵，这就是矩阵A的一个满秩分解。

上述分解方法虽然能够直接求出G，但还需要由P求出P^{-1}，才能够求出F，而求P^{-1}还是比较麻烦的，下面我们给出初等变换直接求满秩分解的方法。

设A是秩为r的$m\times n$矩阵，则A有r个列向量线性无关，不妨设前r列线性无关，则A的后$n-r$个列向量可以表示为前r列的线性组合，用分块矩阵表示就是

$$A=(F, A_2)=(F, FQ)$$

其中F是A的前r个列向量构成的$m\times r$列满秩矩阵，Q是一个$n-r$阶方阵，于是 $A=F(I_r, Q)=FG$.

$G=(I_r, Q)$是$r\times(n-r)$行满秩矩阵。

由此得到求矩阵A的满秩分解的初等变换方法：

对A初等行变换化为行最简形式 $\begin{pmatrix} G \\ \cdots \\ O \end{pmatrix}$

再去掉全为零的$m-r$个行，即得矩阵G，然后再根据G中单位矩阵I_r对应的列，找出矩阵A中对应的列向量$\alpha_{j1}, \alpha_{j2}, \dots, \alpha_{jr}$，令

$$F=(\alpha_{j1}, \alpha_{j2}, \dots, \alpha_{jr})$$

$A=FG$就是A的一个满秩分解。

例4.3 求矩阵A的一个满秩分解，其中

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 & 1 \\ 2 & 3 & 3 & -2 \\ 3 & 5 & 2 & -1 \\ -1 & -3 & 6 & -5 \end{pmatrix}$$

解 为了对A进行初等行变换后化为行阶梯形矩阵B,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 & 1 \\ 2 & 3 & 3 & -2 \\ 3 & 5 & 2 & -1 \\ -1 & -3 & 6 & -5 \end{pmatrix} \xrightarrow{\substack{r_2-2r_1 \\ r_3-3r_1 \\ r_4+r_1}} \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 5 & -4 \\ 0 & -1 & 5 & -4 \\ 0 & -1 & 5 & -4 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\substack{r_3-r_2 \\ r_4-r_2 \\ r_1+2r_2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 9 & -7 \\ 0 & -1 & 5 & -4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_2\times(-1)} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 9 & -7 \\ 0 & 1 & -5 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad G = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 9 & -7 \\ 0 & 1 & -5 & 4 \end{pmatrix}$$

G的前两列构成单位矩阵，所以A的前两列构成矩阵F，即

$$F = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 3 & 5 \\ -1 & -3 \end{pmatrix}$$

所以A的一个满秩分解是：

$$A = FG = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \\ 3 & 5 \\ -1 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 9 & -7 \\ 0 & 1 & -5 & 4 \end{pmatrix}$$

例4.4 设A是$m\times n$阶矩阵，$r(A)=r$，$A = \begin{pmatrix} X & Y \\ Z & W \end{pmatrix}$

其中X是r阶可逆矩阵，$W=ZX^{-1}Y$.

证明A有如下的满秩分解：

$$A = \begin{pmatrix} X \\ Z \end{pmatrix} (I_r, X^{-1}Y) \text{ 或 } A = \begin{pmatrix} I_r \\ ZX^{-1} \end{pmatrix} (X, Y)$$

提示：

$$\begin{pmatrix} X^{-1} & O \\ ZX^{-1} & I_{m-r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X & Y \\ Z & W \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_r & X^{-1}Y \\ O & W-ZX^{-1}Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_r & X^{-1}Y \\ O & O \end{pmatrix}$$

由初等变换求满秩分解的方法知

$$A = \begin{pmatrix} X \\ Z \end{pmatrix} (I_r, X^{-1}Y)$$

4.3矩阵的QR分解

利用酉变换得到矩阵A的QR分解，在数值代数中起着重要作用，它为计算特征值的数值方法提供了理论依据，而且是求解线性方程组的一个重要工具.

定义4.5 如果n阶矩阵A可以分解成一个酉（正交）矩阵Q与一个复（实）上三角矩阵R的乘积，即$A=QR$，此式称为矩阵A的一个QR分解.

矩阵A能够QR分解的一个条件：

定理4.6 如果n阶方阵$A=(a_{ij})_{n\times n}$是可逆复（实）矩阵，则存在n阶酉（正交）矩阵Q和复（实）的正线上三角矩阵R，使$A=QR$.

证明 把矩阵A按照列分块$A=(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n)$，则向量组$\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$线性无关，由Schmidt正交化方法可得到

$$\beta_1=\alpha_1,$$
$$\beta_2=\alpha_2-k_{21}\beta_1$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$\beta_n=\alpha_n-k_{n,n-1}\beta_{n-1}-\ldots-k_{n1}\beta_1.$$

其中$k_{ij}=(\alpha_i, \beta_j)/(\beta_j, \beta_j)$, $(j<i)$，即有

$$\alpha_1=\beta_1,$$
$$\alpha_2=k_{21}\beta_1+\beta_2$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$\alpha_n=k_{n1}\beta_1+k_{n2}\beta_2+\ldots+k_{n,n-1}\beta_{n-1}+\beta_n$$

于是

$$(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n)=(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_n)\begin{pmatrix}1 & k_{21} & \cdots & k_{n1}\\ 0 & 1 & \ddots & \vdots\\ \vdots & \vdots & \ddots & k_{n\,n-1}\\ 0 & 0 & \cdots & 1\end{pmatrix}$$

再将$\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_n$单位化得$\gamma_i=\dfrac{1}{\|\beta_i\|}\beta_i\ (i=1,2,\cdots,n)$

$$A=(\gamma_1,\gamma_2,\cdots,\gamma_n)\begin{pmatrix}\|\beta_1\| & & & \\ & \|\beta_2\| & & \\ & & \ddots & \\ & & & \|\beta_n\|\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & k_{21} & \cdots & k_{n1}\\ & 1 & \ddots & \vdots\\ & & \ddots & k_{n,n-1}\\ & & & 1\end{pmatrix}$$

令 $Q=(\gamma_1,\gamma_2,\cdots,\gamma_n)$，则$Q$是酉（正交）矩阵，而令

$$R=\begin{pmatrix}\|\beta_1\| & & & \\ & \|\beta_2\| & & \\ & & \ddots & \\ & & & \|\beta_n\|\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & k_{21} & \cdots & k_{n1}\\ & 1 & \ddots & \vdots\\ & & \ddots & k_{n,n-1}\\ & & & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\|\beta_1\| & \dfrac{(\alpha_2,\beta_1)}{\|\beta_1\|} & \cdots & \dfrac{(\alpha_2,\beta_1)}{\|\beta_1\|}\\ & \|\beta_2\| & \ddots & \vdots\\ & & \ddots & \dfrac{(\alpha_n,\beta_{n-1})}{\|\beta_{n-1}\|}\\ & & & \|\beta_n\|\end{pmatrix}$$

因为$\|\beta_i\|>0(i=1,2,\cdots,n)$是正实数，所以$R$是正线上三角矩阵，因此$A$有$QR$分解。

推论1 设$n\times r$矩阵A的秩是r，则存在n阶酉矩阵Q及r阶复正线上三角矩阵R，使得

$$A=Q\begin{pmatrix}R\\ \cdots\\ O\end{pmatrix}$$

推论2 设A是n阶实对称正定矩阵，则存在正线上三角矩阵R，使得 $A=R^TR$.

例4.5 用Schmidt正交化方法求A的QR分解。其中

$$A=\begin{pmatrix}3 & 14 & 9\\ 6 & 43 & 3\\ 6 & 22 & 15\end{pmatrix}$$

解 A的列向量

$$\alpha_1=\begin{pmatrix}3\\6\\6\end{pmatrix},\alpha_2=\begin{pmatrix}14\\43\\22\end{pmatrix},\alpha_3=\begin{pmatrix}9\\3\\15\end{pmatrix}$$

将其正交化得

$$\beta_1=\begin{pmatrix}3\\6\\6\end{pmatrix}\qquad \beta_2=\alpha_2-\frac{16}{3}\beta_1=\begin{pmatrix}-2\\11\\-10\end{pmatrix}$$

$$\beta_3=\alpha_3+\frac{3}{5}\beta_2-\frac{5}{3}\beta_1=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}14\\-2\\-5\end{pmatrix}$$

再单位化得

$$\gamma_1=\frac{1}{3}\begin{pmatrix}1\\2\\2\end{pmatrix},\gamma_2=\frac{1}{15}\begin{pmatrix}-2\\11\\-10\end{pmatrix},\gamma_3=\frac{1}{15}\begin{pmatrix}14\\-2\\-5\end{pmatrix}$$

故得正交矩阵$Q=(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3)$ $\quad Q=\dfrac{1}{15}\begin{pmatrix}5 & -2 & 14\\ 10 & 11 & -2\\ 10 & -10 & -5\end{pmatrix}$

以及上三角矩阵

$$R=\begin{pmatrix}9 & 0 & 0\\ 0 & 15 & 0\\ 0 & 0 & 3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 16/3 & 5/3\\ 0 & 1 & -3/5\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}9 & 48 & 15\\ 0 & 15 & -9\\ 0 & 0 & 3\end{pmatrix}$$

所以

$$A=\frac{1}{15}\begin{pmatrix}5 & -2 & 14\\ 10 & 11 & -2\\ 10 & -10 & -5\end{pmatrix}\begin{pmatrix}9 & 48 & 15\\ 0 & 15 & -9\\ 0 & 0 & 3\end{pmatrix}$$

4.4 矩阵的奇异值分解

利用酉变换得到矩阵A的奇异值分解，在最小二乘法和矩阵的广义逆中起着关键作用。

定义4.6 如果$m\times n$矩阵A的秩为r，则n阶*Hermite*矩阵A^HA半正定，故特征值均非负实数，特征值可以表示成 $\lambda_1\geq\lambda_2\geq\ldots\geq\lambda_r>\lambda_{r+1}=\ldots=\lambda_n=0$，则称

$$\sigma_i=\sqrt{\lambda_i}\quad(i=1,2,\cdots,n)$$

为矩阵A的奇异值。

定理 4.9 设$A\in C_r^{m\times n}$，$\sigma_1,\sigma_2,\ldots,\sigma_r$是$A$的$r$个正奇异值，则存在酉矩阵$U\in C^{m\times m}$ 和$V\in C^{n\times n}$，使得

$$A=U\begin{pmatrix}\Sigma & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}V^H$$

其中，$\Sigma=diag(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_r)$，

$$\sigma_1\geq\sigma_2\geq\cdots\geq\sigma_r>0.$$

证 由A^HA是正规矩阵，且半正定，

$$V^HA^HAV=\begin{pmatrix}\Sigma^H\Sigma & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sigma_1^2 &&&&&&\\ & \sigma_2^2 &&&&&\\ && \ddots &&&&\\ &&& \sigma_r^2 &&&\\ &&&& 0 &&\\ &&&&& \ddots &\\ &&&&&& 0\end{pmatrix}$$

$$V=\begin{pmatrix}V_1 & V_2\end{pmatrix},\ V_1\in C_r^{n\times r},\ V_2\in C_{n-r}^{n\times(n-r)}$$

$$V^HA^HAV=$$

$$\begin{pmatrix}V_1^HA^HAV_1 & V_1^HA^HAV_2\\ V_2^HA^HAV_1 & V_2^HA^HAV_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\Sigma^2 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

$$V_1^HA^HAV_1=\Sigma^H\Sigma,\quad V_2^HA^HAV_2=0$$

$$(AV_2)^HAV_2=0\qquad AV_2=0$$

令$U_1=AV_1\Sigma^{-1}$，则$U_1^HU_1=I_r$，所以U_1的列向量是标准正交的单位向量。设$U_1=(\gamma_1,\gamma_2,\ldots,\gamma_r)$，将其扩充成$C^n$的标准正交基$\gamma_1,\gamma_2,\ldots,\gamma_r,\ \gamma_{r+1},\ldots,\gamma_m$.

令$U_2=(\gamma_{r+1},\ldots,\gamma_m)$，则$U=(U_1,U_2)$, $U_1^HU_1=I_r$, $U_2^HU_1=0$,

$$\Rightarrow\ U_1^HAV_1=\Sigma\qquad(AV_2)^HAV_2=0$$

$$AV_2=0\ \Rightarrow\ U_1^HAV_2=0\qquad U_2^HAV_2=0$$

$$\Rightarrow\ U^HAV=\begin{pmatrix}U_1^H\\ U_2^H\end{pmatrix}A\begin{pmatrix}V_1 & V_2\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}U_1^HAV_1 & U_1^HAV_2\\ U_2^HAV_1 & U_2^HAV_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\Sigma & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

定理 4.10 设A是n阶非奇异矩阵，则存在n阶酉矩阵U,V使得

$$A=U\begin{pmatrix}\sigma_1 &&& 0\\ & \sigma_2 &&\\ && \ddots &\\ 0 &&& \sigma_n\end{pmatrix}V^H$$

$$\sigma_1\geq\sigma_2\geq\cdots\geq\sigma_n>0.$$

若将U,V分别写成$U=(u_1,u_2,\ldots,u_n)$，$V=(v_1,v_2,\ldots,v_n)$，则

$$A=\sum_{i=1}^{n}\sigma_iu_iv_i^H\ .$$

例4.8 求矩阵 $A=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\\0&0&0\end{pmatrix}$ 的奇异值分解

一、求$A^H A$的特征值及特征向量

$$A^H A=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\\1&1&2\end{pmatrix}$$

$$|\lambda I-A^H A|=(\lambda-3)(\lambda-1)\lambda$$

$$\Rightarrow \lambda_1=3,\ \lambda_2=1,\ \lambda_3=0;\ \sigma_1=\sqrt{3},\sigma_2=1$$

$$(\lambda_i I-A^H A)x=0 \quad \Rightarrow$$

$$\alpha_1=\begin{pmatrix}1\\1\\2\end{pmatrix}\quad \alpha_2=\begin{pmatrix}1\\-1\\0\end{pmatrix}\quad \alpha_3=\begin{pmatrix}1\\1\\-1\end{pmatrix}$$

它们两两正交，将其单位化得到

$$\gamma_1=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}\\\frac{1}{\sqrt{6}}\\\frac{2}{\sqrt{6}}\end{pmatrix}\quad \gamma_2=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\-\frac{1}{\sqrt{2}}\\0\end{pmatrix}\quad \gamma_3=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}\\\frac{1}{\sqrt{3}}\\-\frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$$

构造酉矩阵V

$$\boldsymbol{V}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}&\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{3}}\\\frac{1}{\sqrt{6}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{3}}\\\frac{2}{\sqrt{6}}&0&-\frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$$

$$U_1=AV_1\Sigma^{-1}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}\\0&0\end{pmatrix}$$

取U_1的列向量生成子空间的正交补的基 $\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$

$$U_2=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

$$U=(U_1,U_2)=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$A=U\begin{pmatrix}\sqrt{3}&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix}V^H$$

$$=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{3}&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}&\frac{1}{\sqrt{6}}&\frac{2}{\sqrt{6}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\\frac{1}{\sqrt{3}}&\frac{1}{\sqrt{3}}&-\frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$$

例4.10 设矩阵A的奇异值分解为 $A=U\begin{pmatrix}\Sigma&0\\0&0\end{pmatrix}V^H$

其中

$$\Sigma=diag(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_r).$$

则U的列向量是矩阵AA^H的特征向量，而V的列向量是A^HA的特征向量。