QR分解

定义

1.实（复）非奇异矩阵A能够分解成正交（酉）矩阵Q与正线上三角矩阵R的乘积，即$A = QR$，称为A的QR分解，且分解是唯一的。满秩矩阵
2.设A是$m \times n$实（复）矩阵，且其n个列线性无关，则A有分解$A = QR$，其中Q是$m \times n$实（复）矩阵，且满足$Q^TQ = I(Q^HQ = I)$，其中R为n阶的正线上三角。三角矩阵、正交矩阵与酉矩阵

分解方法

Schmidt正交化法能保证分解出来的R是正线上三角，剩下两种方法分解出来的可能不是。

1. Schmidt正交化法

(对于复数向量，下图中的$k_{ij} = \frac{(b_j, a_i)}{(b_j, b_j)}$)

证　设A的n个列向量依次为 $a_1, a_2, \cdots, a_n$.

因为A非奇异，所以n个列向量线性无关，按 ***Schmidt*** 正交化方法正交化，对$a_1, a_2, \cdots, a_n$.正交化可得

$$\begin{cases} b_1 = a_1 \\ b_2 = a_2 - k_{21}b_1 \\ \vdots \\ b_n = a_n - k_{n,n-1}b_{n-1} - \cdots - k_{n1}b_1 \end{cases}$$

其中 $k_{ij} = \dfrac{(a_i, b_j)}{(b_j, b_j)} (j < i)$. 将上式改写为

$$\begin{cases} a_1 = b_1 \\ a_2 = b_2 + k_{21}b_1 \\ \vdots \\ a_n = b_n + k_{n,n-1}b_{n-1} + \cdots + k_{n1}b_1 \end{cases}$$

则有 $(a_1, a_2, \cdots, a_n) = (b_1, b_2, \cdots, b_n)C.$

其中 $C = \begin{pmatrix} 1 & k_{21} & \cdots & k_{n1} \\ & 1 & \cdots & k_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{pmatrix}$

再对 $b_1, b_2, \cdots, b_n$. 单位化可得

$$q_i = \frac{1}{|b_i|} b_i \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

于是有 $(a_1, a_2, \cdots, a_n) = (b_1, b_2, \cdots, b_n)C$

$$= (q_1, q_2, \cdots, q_n) \begin{pmatrix} |b_1| & & \\ & \ddots & \\ & & |b_n| \end{pmatrix} C$$

令 $Q = (q_1, q_2, \cdots, q_n), R = diag(|b_1|, |b_2|, \cdots, |b_n|)C$

2. 初等旋转变换 (Givens) 法

任何n阶实非奇异矩阵都可以通过左乘有限个初等旋转矩阵化为上三角矩阵。

1. 首先介绍如何用Givens变换将任意向量化为单位向量的表示：

定理 设 $x=(\xi_1,\xi_2,\cdots,\xi_n)^T \neq O$，则存在有限个**Givens矩阵**的乘积，记作 $\boldsymbol{T}$，使得

$$Tx=|x|e_1$$

证：若 $\xi_1 \neq 0$，取 $c=\dfrac{\xi_1}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2}}, s=\dfrac{\xi_2}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2}}$

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

再对 $T_{12}x$ 构造**Givens矩阵** $T_{13}(c,s)$：

$$c=\frac{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2}}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2}}, s=\frac{\xi_3}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2}}$$

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

如此继续下去，最后对 $T_{1,n-1}\cdots T_{12}x$ 构造矩阵 T_{1n}

$$c=\frac{\sqrt{\xi_1^2+\cdots+\xi_{n-1}^2}}{\sqrt{\xi_1^2+\cdots+\xi_n^2}}, s=\frac{\xi_n}{\sqrt{\xi_1^2+\cdots+\xi_n^2}}$$

则 $T_{1n}\left(T_{1,n-1}\cdots T_{12}x\right)=(\sqrt{\xi_1^2+\cdots+\xi_n^2},0,\cdots,0)^T$

令 $T=T_{1n}T_{1,n-1}\cdots T_{12}$，则有 $Tx=|x|e_1$.

若 $\xi_1=0$，不妨设

$$\xi_1=\cdots=\xi_{k-1}=0, \xi_k \neq 0 \quad (1<k\leq n)$$

此时 $|x|=\sqrt{\xi_k^2+\cdots+\xi_n^2}$ 上面的步骤由 $T_{1,k}$ 开始进行即得结论．

2. 然后介绍如何用Givens变换进行LR分解：

证 **第1步**：由 $\det A \neq 0$ 知，$\boldsymbol{A}$ 的第**1**列

$b^{(1)}=(a_{11},a_{21},\cdots,a_{n1})^T \neq 0$ 存在有限个**Givens**矩阵的乘积，记作 T_1，使得

$$T_1 b^{(1)}=|b^{(1)}|e_1 \quad (e_1 \in R^n)$$

令 $a_{11}^{(1)}=|b^{(1)}|$，则有

$$T_1 A=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & & & \\ \vdots & & A^{(1)} & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

为什么$det A^{(1)} \neq 0$，由于T_1是正交矩阵，满秩、A是满秩矩阵，因此$det T_1 A = a_{11}^{(1)} det\ A^{(1)} \neq 0$。

第2步：由 $\det A^{(1)} \neq 0$ 知，$A^{(1)}$ 的第**1**列

$b^{(2)}=(a_{22}^{(1)},a_{32}^{(1)},\cdots,a_{n2}^{(1)})^T \neq 0$ 存在有限个**Givens**矩阵的乘积，记作 T_2，使得

$$T_2 b^{(2)}=|b^{(2)}|e_1 \quad (e_1 \in R^{n-1})$$

令 $a_{22}^{(2)}=|b^{(2)}|$，则有

$$T_2 A^{(1)}=\begin{pmatrix} a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & & & \\ \vdots & & A^{(2)} & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

第n-1步：由 $\det A^{(n-1)} \neq 0$ 知，$A^{(n-1)}$ 的第 1列

$b^{(n-1)} = (a_{n-1,n-1}^{(n-2)}, a_{n,n-1}^{(n-2)})^T \neq 0$ 　　存在有限个Givens

矩阵的乘积，记作 T_{n-1}，使得

$$T_{n-1} b^{(n-1)} = \left| b^{(n-1)} \right| e_1 \quad (e_1 \in R^2)$$

令 $a_{n-1,n-1}^{(n-1)} = \left| b^{(n-1)} \right|$，则有

$$T_{n-1} A^{(n-2)} = \begin{pmatrix} a_{n-1,n-1}^{(n-1)} & a_{n-1,n}^{(n-1)} \\ 0 & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

最后，令 $T = \begin{pmatrix} I_{n-2} & O \\ O & T_{n-1} \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} I_2 & O \\ O & T_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & O \\ O & T_2 \end{pmatrix} T_1$

则 T 是有限个**Givens**矩阵的乘积，使得

$$TA = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix} = R$$

所以 $A=QR$，其中 $Q = T^{-1} = T^T$

3. Householder法

任何实非奇异矩阵 $A \in R^{n\times n}$，可以通过左乘有限个Householder矩阵化为上三角矩阵。方法跟Givens法类似。

例4.8 用**Householder**变换求矩阵

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

的 QR 分解.

解　对 A 的第1列，构造**Householder**矩阵

$$b^{(1)} = \begin{pmatrix} 3 \\ 6 \\ 6 \end{pmatrix}, b^{(1)} - \left| b^{(1)} \right| e_1 = 6 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, u = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$H_1 = I - 2uu^T = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & -2 \\ 2 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

$$H_1 A = \begin{pmatrix} 9 & 48 & 15 \\ 0 & 9 & -3 \\ 0 & -12 & 9 \end{pmatrix}$$

对 $A^{(1)}$ 的第1列，构造Householder矩阵

$$b^{(2)}=\begin{pmatrix}9\\-12\end{pmatrix},\ b^{(2)}-\left|b^{(2)}\right|e_1=6\begin{pmatrix}-1\\-2\end{pmatrix},u=\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}-1\\-2\end{pmatrix}$$

$$H_2=I-2uu^T=\frac{1}{5}\begin{pmatrix}3&-4\\-4&-3\end{pmatrix},H_2A^{(1)}=\begin{pmatrix}15&-9\\0&-3\end{pmatrix}$$

最后，令

$$S=\begin{pmatrix}1&\\&H_2\end{pmatrix}H_1=\frac{1}{15}\begin{pmatrix}5&10&10\\-2&11&-10\\-14&2&5\end{pmatrix}$$

则有

$$Q=S^T=\frac{1}{15}\begin{pmatrix}5&-2&-4\\10&11&2\\10&-10&5\end{pmatrix}$$

$$R=\begin{pmatrix}9&48&15\\&15&-9\\&&-3\end{pmatrix},\ A=QR.$$