第二章 矩阵的分解

2.1 QR分解

定理1： 设满秩方阵$A \in R^{n\times n}$,则存在**正交矩阵**Q及**正线上三角阵**R，满足$A = QR$,且**分解唯一**.

证明:$r(A) = n$,故A的n个列向量$x_1,\cdots,x_n$线性无关，$A = (x_1,\cdots,x_n)$,由正交化过程得R^n的一组标基$(z_1,\cdots,z_n)$，且

$$(x_1,\cdots,x_n) = (z_1,\cdots,z_n)\begin{pmatrix} \|y_n\| & (x_2,z_1) & \cdots & (x_n,z_1) \\ & \|y_2\| & \cdots & (x_n,z_2) \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & \|y_n\| \end{pmatrix}$$

令$Q=(z_1,\cdots,z_n)$，R为另外一因子，则$A=QR$.

而$Q^TQ=(z_1,\cdots,z_n)^T(z_1,\cdots,z_n)=(z_i^Tz_j)_{n\times n}=I_n$,

故Q为正交阵.

唯一性：设$A=Q_1R_1=Q_2R_2$，由$Q_1=Q_2R_2R_1^{-1}=Q_2D, D=R_2R_1^{-1}$，$D$仍然是正线上三角阵, 而

$I=Q_1^TQ_1=(Q_2D)^T(Q_2D)=D^TQ_2^TQ_2D=D^TD$,

从而D为正交矩阵，但又是正线上三角阵, 故$D=I$，所以$R_1=R_2$，进而$Q_1=Q_2$.

推论1： 设满秩方阵$A \in C^{n\times n}$,在存在酉矩阵U及正线上三角阵R，满足$A = UR$,且分解唯一.

推论2： 列满秩阵$A \in R^{m\times n}(C^{m\times n})$,则存在正交矩阵$Q$(酉矩阵$U$) $\in R^{m\times m}(C^{m\times m})$，使得

$$A = QR(UR),\ R = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix}_{m\times n} (n \le m).$$

证明: $\mathrm{r}(A)=n$,其n个列向量$x_1,\cdots,x_n$线性无关,故可扩充为R^m的一组基$x_1,\cdots,x_n,x_{n+1},\cdots,x_m$.令$B=(x_1,\cdots,x_n,x_{n+1},\cdots,x_m)=(A,K)$为$m$阶满秩方阵,由定理1知存在正交阵$Q\in R^{m\times m}$及正线上三角阵$S\in R^{m\times m}$,使$B=QS$.令$S=(R,S_1)$, R为$m\times n$阶阵(列满秩),所以

$$B=(A,K)=QS=Q(R,S_1)=(QR,QS_1).$$

所以$A=QR$,这里$R=\begin{pmatrix}R_1\\0\end{pmatrix}$, R_1为正线上三角阵.

推论2：列满秩阵$A \in R^{m\times n}(C^{m\times n})$,则存在正交矩阵$Q$(酉矩阵$U$) $\in R^{m\times m}(C^{m\times m})$，使得

$$A = QR(UR),\ R = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix}_{m\times n} (n \le m).$$

注：在上述定理中，如果令U_1是U的前n列，则$A = U_1R_1$,R_1为正线上三角阵.

例：设$A=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 1 & 2\\ 1 & 2 & 1\end{pmatrix}$,求$QR$分解.

解：设$A=(x_1,x_2,x_3)$,其中$x_1=(1,2,1)^T$,

$x_2=(2,1,2)^T$, $x_3=(3,2,1)^T$，可以验证$r(A)=3$,所以A满秩.由正交化过程得

$y_1=(1,2,1)^T$,$y_2=(1,-1,1)^T$,$y_3=(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})^T$.

单位化：

$z_1=(\frac{1}{\sqrt{6}},\frac{2}{\sqrt{6}},\frac{1}{\sqrt{6}})^T$,$z_2=(\frac{1}{\sqrt{3}},-\frac{1}{\sqrt{3}},\frac{1}{\sqrt{3}})^T$,

$z_3=(\frac{1}{\sqrt{2}},0,-\frac{1}{\sqrt{2}})^T$.

令$Q=(z_1,z_2,z_3)$,则

$$R=\begin{pmatrix} \|y_1\| & (x_2,z_1) & (x_3,z_1) \\ 0 & \|y_2\| & (x_3,z_2) \\ 0 & 0 & \|y_3\| \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \sqrt{6} & \sqrt{6} & \frac{7}{\sqrt{6}} \\ 0 & \sqrt{3} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

所以$A=QR.$

例：用QR分解方法求解相容方程组$Ax=b$，其中

$$A=\begin{pmatrix}-3 & 1 & -2\\ 1 & 1 & 1\\ 1 & -1 & 0\\ 1 & -1 & 1\end{pmatrix},\ b=\begin{pmatrix}1\\ 0\\ -2\\ 1\end{pmatrix}.$$

解：设$A=(x_1,x_2,x_3)$，其中$x_1=(-3,1,1,1)^T$，$x_2=(1,1,-1,-1)^T$，$x_3=(1,0,-2,1)^T$.

标准化得$z_1=\frac{1}{\sqrt{12}}(-3,1,1,1)^T$，$z_2=\frac{1}{\sqrt{6}}(0,2,-1,-1)^T$，$z_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(0,0,-1,1)^T$.

令$U=(z_1,z_2,z_3)$,由

$$(x_1,x_2,x_3)=(z_1,z_2,z_3)\begin{pmatrix} \|y_1\| & (x_2,z_1) & (x_3,z_1) \\ 0 & \|y_2\| & (x_3,z_2) \\ 0 & 0 & \|y_3\| \end{pmatrix}$$

得$R=\begin{pmatrix} 2\sqrt{3} & \frac{-2}{\sqrt{3}} & \frac{4}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{4}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$.则$A=UR$.

所以$URx=b \Rightarrow x=R^{-1}U^{H}b=(-\frac{5}{2},-\frac{1}{2},3)^{T}$.

定义1： 设$u \in \mathbb{C}^n$是单位向量，即$u^H u = 1$,称

$$H = I - 2uu^H$$

为Householder矩阵或初等反射矩阵.

称由Householder矩阵确定的变换

$$y = Hx$$

为Householder变换或初等反射变换.

Household矩阵的性质： 设$\mathrm{H} \in \mathbb{C}^{n\times n}$是Householder矩阵,则

(1) $H^H = H, H^H H = \mathrm{I} = H^2$ (Hermite,酉,对合矩阵);

(2) $H^{-1} = H$;

(3) $\begin{bmatrix} I_r & O \\ O & H \end{bmatrix}$是$n+r$阶Householder矩阵;

(4) $\det H = -1$.

证明: (3) $\begin{bmatrix} I_r & O \\ O & H \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_r & O \\ O & I - 2uu^H \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_r & O \\ O & I_n \end{bmatrix} - 2\begin{bmatrix} 0 \\ u \end{bmatrix}[0^T, u^H] = I_{r+n} - 2\tilde{u}\tilde{u}^H$,

其中$\tilde{u} = \begin{bmatrix} 0 \\ u \end{bmatrix}$是单位向量.

证明: (4)因为

$$\begin{bmatrix} I-2uu^H & O \\ 2u^H & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & -u \\ 0^T & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & u \\ 2u^H & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} I & 0 \\ -2u^H & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & u \\ 2u^H & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & u \\ 0^T & 1-2u^H u \end{bmatrix}$$

所以$\det H = \det \begin{bmatrix} I & u \\ 2u^H & 1 \end{bmatrix} = 1-2u^H u =- 1.$

定理2： 设e是单位向量，$\forall x \in \mathbb{C}^n$,存在Householder矩阵$H$,使得$Hx = \rho \mathrm{e}$,其中$|\rho| = \|x\|_2$，且$\rho x^H e$是实数.

证明： 当$x = 0$时，任选单位向量u，则

$$Hx = (I - 2uu^H)0 = 0 = 0e$$

当$x = \rho \mathrm{e}$时,取单位向量u满足$u^H x = 0$,则有

$$Hx = (I - 2uu^H)x = x - 0 = x = \rho \mathrm{e}$$

当$x \neq \rho \mathrm{e}$时,取$u = \frac{x-\rho \mathrm{e}}{\|x-\rho \mathrm{e}\|_2}$,则有

$$Hx = \left(I - 2\frac{(x-\rho \mathrm{e})(x-\rho \mathrm{e})^H}{\|x-\rho \mathrm{e}\|_2^2} \right) x$$

$$= x - 2\frac{(x-\rho \mathrm{e})(x-\rho \mathrm{e})^H}{(x-\rho \mathrm{e})^H (x-\rho \mathrm{e})} x = \rho \mathrm{e}$$

定理得证.

推论3： $\forall x \in \mathbb{C}^n$,存在Householder矩阵$H = I - 2uu^H$,使得$Hx = \rho \mathrm{e}_1$,其中$|\rho| = \|x\|_2$,且$\rho x^H \mathrm{e}_1$是实数.

推论4： $\forall x \in \mathbb{R}^n$,存在Householder矩阵

$$H = I - 2uu^T,\text{其中} u \in \mathbb{R}^n,\ u^T u = 1,$$

使得$Hx = \rho \mathrm{e}_1$,其中$|\rho| = \pm\|x\|_2$.

例:用Householder变换下列向量与e_1共线.

(1)$x=(1,2,2)^T$; (2)$x=(-2i,i,2)^T$.

解: (1)$\rho=\|x\|_2=3$,

$$u=\frac{x-\rho\mathrm{e}_1}{\|x-\rho\mathrm{e}_1\|_2}=\frac{1}{\sqrt{12}}\begin{bmatrix}-2\\2\\2\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}-1\\1\\1\end{bmatrix}$$

$$H=I-2uu^T=\frac{1}{3}\begin{bmatrix}1&2&2\\2&1&-2\\2&-2&1\end{bmatrix},Hx=3\mathrm{e}_1.$$

例:用Householder变换下列向量与e_1共线.

(1)$x = (1,2,2)^T$; (2)$x = (-2i, i, 2)^T$.

解: (2)$\|x\|_2 = 3$，为使$|\rho| = \|x\|_2 = 3$且$\rho x^H \mathrm{e}_1$是实数，可取$\rho = 3\mathrm{i}$,所以

$$u = \frac{x - \rho \mathrm{e}_1}{\|x - \rho \mathrm{e}_1\|_2} = \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{bmatrix} -5\mathrm{i} \\ i \\ 2 \end{bmatrix}$$

例:用Householder变换下列向量与e_1共线.

(1)$x=(1,2,2)^T$; (2)$x=(-2i,i,2)^T$.

解:$H=I-2uu^T=\frac{1}{15}\begin{bmatrix}-10 & 5 & 10i\\ 5 & 14 & -2i\\ -10i & 2i & 11\end{bmatrix}$, $Hx=3ie_1$.

注： 可试在(1)中取$\rho=-3$,(2)中取$\rho=-3i$计算.

定理3:任意$\mathrm{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$都可以做$QR$分解.

证明:将A进行列分块, $\mathrm{A} = (a_1, a_2, \cdots, a_n)$.由定理2,存在$n$阶Householder矩阵$H_1$，使得$H_1 a_1 = \rho_1 \mathrm{e}_1$.
于是

$$H_1 \mathrm{A} = (H_1 a_1, H_1 a_2, \cdots, H_1 a_n) = \begin{bmatrix} \rho_1 & * \\ 0 & B_{n-1} \end{bmatrix}$$

其中$B_{n-1} \in \mathbb{C}^{(n-1)\times(n-1)}$,令$B_{n-1} = (b_2, b_3, \cdots, b_n)$.
则存在$n-1$阶Householder矩阵$\widetilde{H}_2$，使得$\widetilde{H}_2 b_2 = \rho_2 \tilde{\mathrm{e}}_1$,这里$\tilde{\mathrm{e}}_1 = (1,0,\cdots,0)^T \in \mathbb{C}^{(n-1)}$;

记$\mathrm{H}_2=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \widetilde{H}_2\end{bmatrix}$,则$\mathrm{H}_2$是$n$阶Householder矩阵且

$$H_2(H_1\mathrm{A})=\begin{bmatrix}\rho_1 & *\\ 0 & \widetilde{H}_2 B_{n-1}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\rho_1 & * & *\\ & \rho_2 & *\\ 0 & & C_{n-2}\end{bmatrix}$$

其中$C_{n-2}\in\mathbb{C}^{(n-2)\times(n-2)}$,继续下去，在$n-1$步得

$$H_{\mathrm{n}-1}\cdots H_2H_1\mathrm{A}=\begin{bmatrix}\rho_1 & * & *\\ & \ddots & *\\ 0 & & \rho_n\end{bmatrix}=R$$

因为H_k都是n阶Householder矩阵，所以

$$\mathrm{A} = H_1 H_2 \cdots H_{\mathrm{n}-1} R =: \mathrm{Q} R$$

这里Q是酉矩阵，R是上三角矩阵（不一定可逆）.

例:求矩阵$A=\begin{bmatrix}0 & 3 & 1\\ 0 & 4 & -2\\ 2 & 1 & 2\end{bmatrix}$的$QR$分解.

例:求矩阵$A=\begin{bmatrix}0 & 3 & 1\\ 0 & 4 & -2\\ 2 & 1 & 2\end{bmatrix}$的$QR$分解.

解:已知$a_1=(0,0,2)^T$,取$\rho_1=\|a_1\|_2=2$.令

$$u_1=\frac{a_1-\rho_1 \mathrm{e}_1}{\|a_1-\rho_1 \mathrm{e}_1\|_2}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}-1\\ 0\\ 1\end{bmatrix}$$

$$H_1=I-2u_1{u_1}^T=\begin{bmatrix}0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

$$H_1A=\begin{bmatrix}2 & 1 & 2\\ 0 & 4 & -2\\ 0 & 3 & 1\end{bmatrix}$$

已知$b_2=(4,3)^T$,取$\rho_2=\|b_2\|_2=5$.令

$$\tilde{u}_1=\frac{b_2-\rho_2\tilde{e}_1}{\|b_2-\rho_2\tilde{e}_1\|_2}=\frac{1}{\sqrt{10}}\begin{bmatrix}-1\\ 3\end{bmatrix}$$

$$\widetilde{H}_2=I-2\tilde{u}_1\tilde{u}_1{}^T=\frac{1}{5}\begin{bmatrix}4 & 3\\ 3 & -4\end{bmatrix}$$

令$\mathrm{H}_2=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \widetilde{H}_2\end{bmatrix}$,则

$$\mathrm{H}_2H_1A=\begin{bmatrix}2 & 1 & 2\\ 0 & 5 & -1\\ 0 & 0 & -2\end{bmatrix}=R$$

A的QR分解为

$$A=\mathrm{H}_1H_2R=\begin{bmatrix}0 & \frac{3}{5} & -\frac{4}{5}\\ 0 & \frac{4}{5} & \frac{3}{5}\\ 1 & 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & 1 & 2\\ 0 & 5 & -1\\ 0 & 0 & -2\end{bmatrix}$$