第四章 矩阵分解

4.1 矩阵的三角分解

1.Gauss 消元法的矩阵形式

n 元线性方程组:

$$\begin{cases} a_{11}\xi_1+a_{12}\xi_2+\cdots+a_{1n}\xi_n=b_1 \\ a_{21}\xi_1+a_{22}\xi_2+\cdots+a_{2n}\xi_n=b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}\xi_1+a_{n2}\xi_2+\cdots+a_{nn}\xi_n=b_n \end{cases} \rightarrow Ax=b\text{，其中}\begin{pmatrix} A=(a_{ij}) \\ x=[\xi_1,\xi_2,\cdots\xi_n]^T \\ b=[b_1,b_2\cdots b_n]^T \end{pmatrix}$$

设 $A_0=A=\left(a_{ij}\right)_{n\times n}$，设 A 的 k 阶顺序主子式为 Δ_k，若 $\Delta_1=a_{11}^{(0)}\neq 0$，可以令

$c_{i1}=\dfrac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{0}}$ (i=2,3,...,n)，并构造 Frobenius 矩阵:

$$L_1=\begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ c_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ c_{n1} & 0 & & 1 \end{bmatrix}_{n\times n} \rightarrow L_1^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ -c_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -c_{n1} & 0 & & 1 \end{bmatrix}$$

计算可得:

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

初等变换不改变行列式，故 $\Delta_2=a_{11}^{0}a_{22}^{1}$，若 $\Delta_2\neq 0$，则 $a_{22}^{1}\neq 0$，又可定义

$c_{i2}=\dfrac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}(i=3,4,\cdots n)$，并构造 Frobenius 矩阵

$$L_2=\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & c_{32} & \ddots & \\ & \vdots & & \\ & c_{n2} & & 1 \end{bmatrix} \rightarrow L_2^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & -c_{32} & \ddots & \\ & \vdots & & \\ & -c_{n2} & & 1 \end{bmatrix}$$

$$A^{(2)}=L_2^{-1}A^{(1)}=\begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \rightarrow A^{(1)}=L_2A^{(2)}$$

依此类推，进行到第(r-1)步，则可得到:

$$A^{(r-1)}=\begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & \cdots & a_{1r-1}^{(0)} & a_{1r}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots & \\ & & a_{r-1r-1}^{(r-2)} & a_{r-1r}^{(r-2)} & \cdots & a_{r-1n}^{(r-2)} \\ & & & a_{rr}^{(r-1)} & \cdots & a_{rn}^{(r-1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nr}^{(r-1)} & \cdots & a_{nn}^{(r-1)} \end{bmatrix} \quad (r=2,3,\cdots,n-1)$$

则 A 的 r 阶顺序主子式 $\Delta_r = a_{11}^{(0)} a_{22}^{(1)} \cdots a_{r-1r-1}^{(r-2)} a_{rr}^{r-1}$，若 $\Delta_r \neq 0$，则 $a_{rr}^{r-1} \neq 0$ 可定义 $c_{ir} = \frac{a_{ir}^{r-1}}{a_{rr}^{r-1}}$，

并构造 Frobenius 矩阵:

$$L_r = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & c_{r+1 1} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & c_{nr} & & & 1 \end{bmatrix} \to L_r^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -c_{r+1 1} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -c_{nr} & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$A^{(r)} = L_r^{-1} A^{r-1} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & \cdots & a_{1r}^{(0)} & a_{1r+1}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \cdots & \\ & & a_{rr}^{(r-1)} & a_{rr+1}^{(r-1)} & \cdots & a_{rn}^{(r-1)} \\ & & & a_{r+1r+1}^{(r)} & \cdots & a_{r+1n}^{(r)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nr+1}^{(r)} & \cdots & a_{nn}^{(r)} \end{bmatrix} \to A^{(r-1)} = L_r A^{(r)}，（r=2,3,\cdots,n-1）$$

直到第（n－1）步，得到:

$$A^{(n-1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{n-1} \end{bmatrix}$$ 则完成了消元的过程

而消元法能进行下去的条件是 $\Delta_r \neq 0$（r=1,2,⋯,n-1）

2.LU 分解与 LDU 分解

当上述条件 $\Delta_r \neq 0$ 满足时，则由 $A^{(r-1)} = L_r A^{(r)}$ 有:

$$A = A^{(0)} = L_1 A^{(1)} = L_1 L_2 A^{(2)} = \cdots = L_1 L_2 L_3 \cdots L_{n-1} A^{(n-1)}$$

容易求出:

$$L = L_1 L_2 \cdots L_{n-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ c_{21} & 1 & & & \\ \vdots & & \ddots & & \\ c_{n-11} & c_{n-12} & & 1 & \\ c_{n1} & c_{n2} & & c_{nn-1} & 1 \end{bmatrix}$$ 为下三角矩阵

令 $U = A^{(n-1)}$ 为上三角矩阵，则有：A=LU

这样 A 就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，则称 A 可做三角分解或 LU 分解。显然，一个方阵的 LU 分解不唯一，令 D 为对角元素不为零的 n 阶对角阵，则:

$$A = LU = LDD^{-1}U = \hat{L}\hat{U}$$

可以采用如下的方法将分解完全确定，即要求

（1）L 为单位下三角矩阵

（2）U 为单位上三角矩阵

（3）将 A 分解为 LDU，其中 L，U 分别为单位下三角，单位上三角矩阵，D 为对角阵 diag($d_1, d_2, \ldots, d_n$)，而 $d_k = \frac{\Delta_k}{\Delta_{k-1}}$

（k=1,2,⋯n; $\Delta_0 = 1$）

n 阶非奇异矩阵 A 有三角分解 LU 或 LDU 的充要条件是 A 的顺序主子式 $\Delta_r \neq 0$（r=1,2,⋯,n）

例题：

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

解：因为 $\Delta_1=2$，$\Delta_2=5$，故A有唯一的LDU分解

构造矩阵：

$$L_1=\begin{bmatrix}1&&\\\frac{1}{2}&1&\\1&0&1\end{bmatrix},\quad L_1^{-1}=\begin{bmatrix}1&&\\-\frac{1}{2}&1&\\-1&0&1\end{bmatrix}$$

故 $L_1^{-1}A^{(0)}=A^{(1)}=\begin{bmatrix}2&-1&3\\0&\frac{5}{2}&-\frac{1}{2}\\0&5&-1\end{bmatrix}$

对 $A^{(1)}$ 构造矩阵：

$$L_2=\begin{bmatrix}1&&\\0&1&\\0&2&1\end{bmatrix},\quad L_2^{-1}=\begin{bmatrix}1&&\\0&1&\\0&-2&1\end{bmatrix}$$

故 $L_2^{-1}A^{(1)}=A^{(2)}=\begin{bmatrix}2&-1&3\\0&\frac{5}{2}&-\frac{1}{2}\\0&0&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2&&\\&\frac{5}{2}&\\&&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&-\frac{1}{2}&\frac{3}{2}\\0&1&-\frac{1}{5}\\0&0&1\end{bmatrix}$

将每行化为首1

$L=L_1L_2=\begin{bmatrix}1&&\\\frac{1}{2}&1&\\1&2&1\end{bmatrix}$

所以A的LDU分解为：

$$A=L_1L_2A^{(2)}=\begin{bmatrix}1&&\\\frac{1}{2}&1&\\1&2&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&&\\&\frac{5}{2}&\\&&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&-\frac{1}{2}&\frac{3}{2}\\0&1&-\frac{1}{5}\\0&0&1\end{bmatrix}$$

补充：(1) $L=L_1L_2$，$U=A^{(2)}$

故 $A=LU=L_1L_2A^{(2)}=LDU$

不是同一个U

(2) $D=diag(d_1,d_2,d_3)$

$d_1=\frac{\Delta_1}{\Delta_0}=\frac{2}{1}=2$

$d_2=\frac{\Delta_2}{\Delta_1}=\frac{5}{2}$　　故 $D=\begin{bmatrix}2&&\\&\frac{5}{2}&\\&&0\end{bmatrix}$

$d_3=\frac{\Delta_3}{\Delta_2}=0$

矩阵 A 的 LDU 与 LU 两种分解都需要假设 A 的前 n-1 阶顺序主子式非零。若此条件不满足，则可以给 A 左乘以置换矩阵 P，即存在置换矩阵 P 使得 PA 的所有顺序主子式全部为零。

对非齐次方程组 Ax=b，其三角分解法为：

由 $\begin{cases}Ax=b\\A=LU\end{cases}$ 得 $\begin{matrix}Ly=b\\Ux=y\end{matrix}$，先由 Ly=b 解出 y，再由 Ux=y 解出 x.

3.其他三角分解

•定义：

(1)若将 A=LDU 中的 D,U 结合起来得 $A=L\hat{U}$ ($\hat{U}=DU$)，则称为 A 的 Doolittle 分解

(2)若将 A=LDU 中的 L,D 结合起来得 $A=\hat{L}U$ ($\hat{L}=LD$)，则称为 A 的 Crout 分解

A 的 Doolittle 分解也就是 A 的 LU 分解。

•**Cholesky 分解（平方根分解、对称三角分解）：**

当 A 为实对称正定矩阵时，$\Delta_k > 0\ (k=1,2,\cdots,n)$. 于是 A 有唯一的 LDU 分解，即

$$A = LDU$$

其中，$D = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n)$，且 $d_i > 0\ (i=1,2,\cdots,n)$. 令

$$\tilde{D} = \mathrm{diag}(\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \cdots, \sqrt{d_n})$$

于是有
$$A = L\tilde{D}^2 U$$

由 $A^{\mathrm{T}} = A$ 得到

$$L\tilde{D}^2 U = U^{\mathrm{T}} \tilde{D}^2 L^{\mathrm{T}}$$

再由分解的唯一性有

$$L = U^{\mathrm{T}}, \quad U = L^{\mathrm{T}}$$

因而有

$$A = L\tilde{D}^2 L^{\mathrm{T}} = LDL^{\mathrm{T}} \tag{4.1.31}$$

或者

$$A = L\tilde{D}^2 L^{\mathrm{T}} = (L\tilde{D})(L\tilde{D})^{\mathrm{T}} = GG^{\mathrm{T}} \tag{4.1.32}$$

这里 $G = L\tilde{D}$ 是下三角矩阵.

称 $A = GG^T$ 为实对称正定矩阵的 Cholesky 分解。其中：

$$g_{ij} = \begin{cases} \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} g_{ik}^2\right)^{1/2} & (i = j) \\ \frac{1}{g_{jj}}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} g_{ik} g_{jk}\right) & (i > j) \\ 0 & (i < j) \end{cases}$$

因为 A 的对角元素

$$a_{ii} = \sum_{j=1}^{i} g_{ij}^2$$

所以有

$$|g_{ij}| \leqslant \sqrt{a_{ii}} \quad (j \leqslant i)$$

例 4.2 已知矩阵

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

求 A 的 Cholesky 分解.

解 容易验证 A 是对称正定的. 由式(4.1.33)有

$g_{11} = \sqrt{a_{11}} = \sqrt{5}$

$g_{21} = \frac{a_{21}}{g_{11}} = -\frac{2}{\sqrt{5}}, \quad g_{22} = (a_{22} - g_{21}^2)^{1/2} = \sqrt{\frac{11}{5}}$

$g_{31} = \frac{a_{31}}{g_{11}} = 0, \quad g_{32} = \frac{a_{32} - g_{31}g_{21}}{g_{22}} = -\sqrt{\frac{5}{11}}$

$g_{33} = (a_{33} - g_{31}^2 - g_{32}^2)^{1/2} = \left(1 - \frac{5}{11}\right)^{1/2} = \sqrt{\frac{6}{11}}$

从而

$$A = \begin{bmatrix} \sqrt{5} & 0 & 0 \\ -\frac{2}{\sqrt{5}} & \sqrt{\frac{11}{5}} & 0 \\ 0 & -\sqrt{\frac{5}{11}} & \sqrt{\frac{6}{11}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{5} & -\frac{2}{\sqrt{5}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{11}{5}} & -\sqrt{\frac{5}{11}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{6}{11}} \end{bmatrix}$$

4.2 矩阵的 QR 分解

1.Givens 矩阵与 Givens 变换

•**定义：**设实数 c 与 s 满足 $c^2+s^2=1$，称：

$$
T_{ij}=\begin{array}{c}
\left[\begin{array}{ccccccccccc}
1 & & & & & & & & & & \\
 & \ddots & & & & & & & & & \\
 & & 1 & & & & & & & & \\
 & & & c & & & & s & & & \\
 & & & & 1 & & & & & & \\
 & & & \vdots & & \ddots & & & & & \\
 & & & & & & 1 & & & & \\
 & & & -s & & & & c & & & \\
 & & & & & & & & 1 & & \\
 & & & \vdots & & & & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & 1
\end{array}\right]
\begin{array}{l}
\\ \\ \\ \leftarrow(i) \\ \\ \\ \\ \leftarrow(j) \\ \\ \\ \\
\end{array}
\\
\qquad\qquad [i] \qquad\qquad [j]
\end{array}
$$

为 Givens 矩阵（初等旋转矩阵），也记作$T_{ij}=T_{ij}(c,s)$。由 Givens 矩阵所确定的线性变换称为 Givens 变换（初等旋转变换）。

•**性质：**

（1）$\left[T_{ij}(c,s)\right]^{-1}=\left[T_{ij}(c,s)\right]^{T}=T_{ij}(c,-s)$，$-s=-\sin(\theta)=\sin(-\theta)$，旋转θ度再反向旋转度θ度；$\det\left[T_{ij}(c,s)\right]=1$

（2）设 $x=[\xi_1\quad \xi_2\quad \cdots\quad \xi_n]^T$，$y=T_{ij}x=[\eta_1\quad \eta_2\quad \cdots\quad \eta_n]^T$，则有：

$$
\begin{cases}
\eta_i=c\xi_i+s\xi_j \\
\eta_j=-s\xi_i+c\xi_j \\
\eta_k=\xi_k \qquad (k\neq i,j)
\end{cases}
$$

当 $\xi_i^2+\xi_j^2\neq 0$ 时，总可以选 $c=\dfrac{\xi_i}{\sqrt{\xi_i^2+\xi_j^2}}$，$s=\dfrac{\xi_j}{\sqrt{\xi_i^2+\xi_j^2}}$ 使

$$
\begin{cases}
\eta_i=\sqrt{\xi_i^2+\xi_j^2} \\
\eta_j=0
\end{cases}
\rightarrow T_{ij}x=\left[\xi_1\quad \xi_2\quad \cdots\quad \sqrt{\xi_i^2+\xi_j^2}\quad \cdots\quad 0\quad \cdots\quad \xi_n\right]^T
$$

•**定理：**

设 $x=[\xi_1\quad \xi_2\quad \cdots\quad \xi_n]^T\neq 0$，则存在有限个 Givens 矩阵的乘积 T，使得 T

说明：（1）$|x|=\sqrt{\|x\|_2^2}=\sqrt{x^Tx}$（x 为实数时），$|x|=\sqrt{x^Hx}$（x 为复数时）。

（2）$e_1=[1\quad 0\quad 0\quad \cdots\quad 0]^T$

证：对 x 构造 Givens 矩阵 $T_{12}(c,s)$：

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

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

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

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

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

如此，最后对 $T_{1n-1}\cdots T_{12}x$ 构造 $T_{1n}(c,s)$：

$$c=\frac{\sqrt{\xi_1^2+\cdots+\xi_{n-1}^2}}{\sqrt{\xi_1^2+\xi_2^2+\cdots+\xi_n^2}},\quad s=\frac{\xi_n}{\sqrt{\xi_1^2+\cdots+\xi_n^2}}$$

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

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

例，设 $x=(3,4,5)^T$，用 Givens 变换化 x 为与 e_1 同方向的向量.

解：对 x 构造 $T_{12}(c,s)$

$$c=\frac{3}{\sqrt{3^2+4^2}}=\frac{3}{5}\qquad s=\frac{4}{\sqrt{3^2+4^2}}=\frac{4}{5}$$

则 $T_{12}x=\left(\sqrt{3^2+4^2},0,5\right)^T=(5,0,5)^T$

对 $T_{12}x$ 构造 $T_{13}(c,s)$

$$c=\frac{\sqrt{5^2+0^2}}{\sqrt{5^2+0+5^2}}=\frac{1}{\sqrt2},\quad s=\frac{5}{\sqrt{5^2+0+5^2}}=\frac{1}{\sqrt2}$$

则 $T_{13}(T_{12}x)=\left(\sqrt{5^2+0+5^2},0,0\right)^T$
$=(5\sqrt2,0,0)^T$

故 $T=T_{13}T_{12}$

$$=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt2} & & \frac{1}{\sqrt2}\\ & 1 & \\ -\frac{1}{\sqrt2} & & \frac{1}{\sqrt2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{3}{5} & \frac{4}{5} & 0\\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}=\frac{1}{5\sqrt2}\begin{bmatrix}3 & 4 & 5\\ -4\sqrt2 & 3\sqrt2 & 0\\ -3 & -4 & 5\end{bmatrix}$$

$Tx=5\sqrt2 e_1$

2. Householder 矩阵与 Householder 变换

•定义：设单位列向量 $u\in R^n$，称 $H=I-2uu^T$ 为 Householder 矩阵（初等反射矩阵），由 Householder 矩阵所确定的线性变换称为 Householder 变换（初等反射变换）。

$$y=Hx=(I-2uu^T)x$$

•性质：

$\mathbf{H}^T=\mathbf{H}$（实对称），$\mathbf{H}^{-1}=\mathbf{H}^T$（正交），$\mathbf{H}^2=\mathbf{I}$（对合），$\mathbf{H}^{-1}=\mathbf{H}$（自逆），$\det\mathbf{H}=-1$

•定理 1：任意给定非零列向量 $x\in R^n(n>1)$及单位列向量 $z\in R^n$，则存在 Householder 矩阵 H，使得 Hx=|x|z

证：当 $x=|x|z$ 时，取单位列向量 u 满足 $u^Tx=0$

则 $Hx=(I-2uu^T)x$

$=x-2u(u^Tx)=x=|x|z$

当 $x\neq|x|z$ 时，取 $u=\frac{x-|x|z}{|x-|x|z|}$

则有 $Hx=\left[I-2\frac{(x-|x|z)(x-|x|z)^T}{|x-|x|z|^2}\right]x$

$=x-2(x-|x|z,x)\frac{x-|x|z}{|x-|x|z|^2}=$

$x-(x-|x|z)=|x|z$

这里利用了等式：

$|x-|x|z|^2=2(x-|x|z,x)$

例1：设 $x=(1,2,2)^T$，用 Householder 变换化 x 为 e_1 同方向

解：$|x|=3$，$x-|x|e_1=\begin{pmatrix}1\\2\\2\end{pmatrix}-3\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}=2\begin{pmatrix}-1\\1\\1\end{pmatrix}$

由 $u=\frac{x-|x|z}{|x-|x|z|}=\frac{(-2,2,2)^T}{2\sqrt{3}}=\frac{1}{\sqrt{3}}(-1,1,1)^T$

构造 Householder 矩阵

$H=I-2uu^T$

$=\begin{bmatrix}1&&\\&1&\\&&1\end{bmatrix}-\frac{2}{3}\begin{bmatrix}-1\\1\\1\end{bmatrix}[-1,1,1]$

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

则 $Hx=3e_1$

•定理 2：初等旋转矩阵是两个初等反射矩阵的乘积，即$T_{ij}=H_vH_u$，$\det(T_{ij})=1,\det(H)=-1$.

3.QR(正交三角)分解

•**定义：** 如果实（复）矩阵 A 可化为正交（酉）矩阵 Q 与实（复）上三角矩阵 R 的乘积，即 $A = QR$，则称上式为 A 的 QR 分解。

•**定理：** 设 A 是 n 阶的非奇异矩阵，则存在正交（酉）矩阵 Q 与实（复）上三角矩阵 R 使得 $A = QR$，且除去相差一个对角元素的绝对值（模）全为 1 的对角因子外，上述分解唯一。

证　记矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个列向量依次为 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n$. 因为 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，所以这 n 个列向量线性无关. 将它们按 Schmidt 正交化方法正交化之，可得到 n 个标准正交列向量 $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_n$.

对 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ 正交化，可得

$$\begin{cases} \boldsymbol{b}_1 = \boldsymbol{a}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 = \boldsymbol{a}_2 - k_{21}\boldsymbol{b}_1 \\ \quad\vdots \\ \boldsymbol{b}_n = \boldsymbol{a}_n - k_{n,n-1}\boldsymbol{b}_{n-1} - \cdots - k_{n1}\boldsymbol{b}_1 \end{cases}$$

其中，$k_{ij} = \dfrac{(\boldsymbol{a}_i, \boldsymbol{b}_j)}{(\boldsymbol{b}_j, \boldsymbol{b}_j)}$　$(j < i)$. 将上式改写为

$$\begin{cases} \boldsymbol{a}_1 = \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{a}_2 = k_{21}\boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2 \\ \quad\vdots \\ \boldsymbol{a}_n = k_{n1}\boldsymbol{b}_1 + k_{n2}\boldsymbol{b}_2 + \cdots + k_{n,n-1}\boldsymbol{b}_{n-1} + \boldsymbol{b}_n \end{cases}$$

用矩阵形式表示为

$$(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n) = (\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \cdots, \boldsymbol{b}_n)\boldsymbol{C}$$

其中

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

再对 $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \cdots, \boldsymbol{b}_n$ 单位化，可得

$$\boldsymbol{q}_i = \frac{1}{|\boldsymbol{b}_i|}\boldsymbol{b}_i \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

于是有

$$(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n) = (\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \cdots, \boldsymbol{b}_n)\boldsymbol{C} =$$

$$(\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_n)\begin{bmatrix} |\boldsymbol{b}_1| & & & \\ & |\boldsymbol{b}_2| & & \\ & & \ddots & \\ & & & |\boldsymbol{b}_n| \end{bmatrix}\boldsymbol{C}$$

令

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{Q} &= (\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_n) \\ \boldsymbol{R} &= \mathrm{diag}(|\boldsymbol{b}_1|, |\boldsymbol{b}_2|, \cdots, |\boldsymbol{b}_n|) \cdot \boldsymbol{C} \end{aligned}\right\} \qquad (4.2.8)$$

则 $\boldsymbol{Q}$ 是正交(酉)矩阵，$\boldsymbol{R}$ 是上三角矩阵，且有 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR}$.

为了证明唯一性，设 $\boldsymbol{A}$ 有两个分解式

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR} = \boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}_1$$

由此得

$$\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{R}^{-1} = \boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{D}$$

式中，$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{R}_1\boldsymbol{R}^{-1}$ 仍为实非奇异上三角矩阵. 于是

$$\boldsymbol{I} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q} = (\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{D})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{D}) = \boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}$$

这表明 $\boldsymbol{D}$ 不仅为正交矩阵，而且还是对角元素的绝对值全为 1 的对角矩阵. 从而 $\boldsymbol{R}_1 = \boldsymbol{DR}$，$\boldsymbol{Q}_1 = \boldsymbol{QD}^{-1}$.　证毕

•求 QR 分解的方法：

（1）施密特正交化法：

例：试用Schmidt正交化方法求 $A=\begin{bmatrix}1&2&2\\2&1&2\\1&2&1\end{bmatrix}$ 的QR分解

$k_{ij}=\dfrac{\langle a_i, b_j\rangle}{\langle b_j, b_j\rangle}$

解：$b_1=a_1=(1,2,1)^T$

$b_2=a_2-k_{21}b_1=a_2-b_1=(1,-1,1)^T \qquad k_{21}=\dfrac{\langle a_2,b_1\rangle}{\langle b_1,b_1\rangle}=\dfrac{2\times1+1\times2+2\times1}{1+4+1}=1$

$b_3=a_3-k_{31}b_1-k_{32}b_2 \qquad k_{31}=\dfrac{\langle a_3,b_1\rangle}{\langle b_1,b_1\rangle}=\dfrac{7}{6}$

$\quad=a_3-\frac{7}{6}b_1-\frac{1}{3}b_2=(\frac{1}{2},0,-\frac{1}{2})^T \qquad k_{32}=\dfrac{\langle a_3,b_2\rangle}{\langle b_2,b_2\rangle}=\dfrac{1}{3}$

对 b_1,b_2,b_3 单位化得 $q_i=\dfrac{b_i}{|b_i|}$

故 $Q=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt6}&\frac{1}{\sqrt3}&\frac{1}{\sqrt2}\\\frac{2}{\sqrt6}&-\frac{1}{\sqrt3}&0\\\frac{1}{\sqrt6}&\frac{1}{\sqrt3}&-\frac{1}{\sqrt2}\end{pmatrix}$

$R=\mathrm{diag}(|b_1|,|b_2|,\cdots,|b_n|)\cdot C$

$=\begin{pmatrix}\sqrt6&&\\&\sqrt3&\\&&\frac{1}{\sqrt2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&k_{21}&k_{31}\\&1&k_{32}\\&&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sqrt6&&\\&\sqrt3&\\&&\frac{1}{\sqrt2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&1&\frac{7}{6}\\&1&\frac{1}{3}\\&&1\end{pmatrix}$

$=\begin{pmatrix}\sqrt6&\sqrt6&\frac{7}{\sqrt6}\\&\sqrt3&\frac{1}{\sqrt3}\\&&\frac{1}{\sqrt2}\end{pmatrix}$

$A=QR$

（2）Householder 法：

(2) 采用Householder方法

第1步：对n阶矩阵 $A=[b^{(1)} *]$，A的第1列 $b^{(1)}=(a_{11},a_{21},\cdots,a_{n1})^T\neq0$，存在 H_1

使 $H_1b^{(1)}=|b^{(1)}|e_1$，令 $a_{11}^{(1)}=|b^{(1)}|$，则 $H_1A=\left[\begin{array}{c|c}a_{11}^{(1)}&a_{12}^{(1)}\cdots a_{1n}^{(1)}\\\hline 0&\\\vdots&A^{(1)}\\0&\end{array}\right]$

第2步：对 $A^{(1)}$ 的第1列 $b^{(2)}=(a_{22}^{(1)},a_{32}^{(1)},\cdots a_{n2}^{(1)})^T\neq0$，存在 H_2 使 $H_2b^{(2)}=|b^{(2)}|e_1$

令 $a_{22}^{(2)}=|b^{(2)}|$，则 $H_2A^{(1)}=\left[\begin{array}{c|c}a_{22}^{(2)}&a_{23}^{(2)}\cdots a_{2n}^{(2)}\\\hline 0&\\\vdots&A^{(2)}\\0&\end{array}\right]$

……

第n-1步：$A^{(n-2)}$ 的第1列 $b^{(n-1)}=(a_{n-1\,n-1}^{(n-2)},a_{n\,n-1}^{(n-2)})^T\neq0$，存在 H_{n-1} 使 $H_{n-1}b^{(n-1)}=|b^{(n-1)}|e_1$

令 $a_{n-1\,n-1}^{(n-1)}=|b^{(n-1)}|$，则 $H_{n-1}A^{(n-2)}=\begin{bmatrix}a_{n-1\,n-1}^{(n-1)}&a_{n-1,n}^{(n-1)}\\0&a_{nn}^{(n-1)}\end{bmatrix}$

最后，令 $S=\begin{bmatrix}I_{n-2}&0\\0&H_{n-1}\end{bmatrix}\cdots\begin{bmatrix}I_2&0\\0&H_3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0\\0&H_2\end{bmatrix}H_1$

注意到，H_u 是 n-1 阶 Householder 矩阵，即

$$H_u = I_{n-1} - 2uu^T$$

则 $\begin{bmatrix} I_1 & 0 \\ 0 & H_u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_1 & 0 \\ 0 & I_{n-1} \end{bmatrix} - 2\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & uu^T \end{bmatrix} = I_n - 2vv^T \quad (v^Tv = u^Tu = 1)$

故

$$SA = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(1)} & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2,n-1}^{(2)} & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & & \\ & & & a_{n-1,n-1}^{(n-1)} & a_{n-1,n}^{(n-1)} \\ & & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix} = R$$

有 $A = QR$，其中 $Q = S^{-1} = S^T$

例. 用 Householder 变换求矩阵 $A = \begin{bmatrix} 3 & 14 & 9 \\ 6 & 43 & 3 \\ 6 & 22 & 15 \end{bmatrix}$ 的 QR 分解

解：第1步：对 A 的第1列 $b^{(1)} = (3,6,6)^T$，构造 H_1 使 $H_1 b^{(1)} = |b^{(1)}| e_1$

$|b^{(1)}| = 9$，$b^{(1)} - |b^{(1)}|e_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 6 \\ 6 \end{pmatrix} - 9\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 6\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$

则 $u = \dfrac{6(-1,1,1)^T}{6\sqrt{3}} = \dfrac{1}{\sqrt{3}}(-1,1,1)^T$

故 $H_1 = I - 2uu^T = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{bmatrix} - \dfrac{2}{3}\begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}[-1,1,1] = \dfrac{1}{3}\begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & -2 \\ 2 & -2 & 1 \end{bmatrix}$

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

第2步：对 $A^{(1)} = \begin{bmatrix} 9 & -3 \\ -12 & 9 \end{bmatrix}$ 的第1列 $b^{(2)} = \begin{pmatrix} 9 \\ -12 \end{pmatrix}$ 构造 H_2，使 $H_2 b^{(2)} = |b^{(2)}| e_1$

$|b^{(2)}| = 15$，$b^{(2)} - |b^{(2)}|e_1 = \begin{pmatrix} 9 \\ -12 \end{pmatrix} - 15\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 6\begin{pmatrix} -1 \\ -2 \end{pmatrix}$

则 $u = \dfrac{6(-1,-2)}{6\sqrt{5}} = \dfrac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} -1 \\ -2 \end{pmatrix}$

故 $H_2 = I - 2uu^T = \begin{bmatrix} 1 & \\ & 1 \end{bmatrix} - \dfrac{2}{5}\begin{pmatrix} -1 \\ -2 \end{pmatrix}(-1,-2) = \dfrac{1}{5}\begin{bmatrix} 3 & -4 \\ -4 & -3 \end{bmatrix}$

$$H_2 A^{(1)} = \begin{bmatrix} 15 & -9 \\ 0 & -3 \end{bmatrix}$$

最后，令 $S = \begin{bmatrix} 1 & \\ & H_2 \end{bmatrix} H_1 = \dfrac{1}{15}\begin{bmatrix} 5 & 10 & 10 \\ -2 & 11 & -10 \\ -14 & 2 & 5 \end{bmatrix}$，则有

$Q = S^T = \dfrac{1}{15}\begin{bmatrix} 5 & -2 & -14 \\ 10 & 11 & 2 \\ 10 & -10 & 5 \end{bmatrix}$，$R = \begin{bmatrix} 9 & 48 & 15 \\ & 15 & -9 \\ & & -3 \end{bmatrix}$

→ 与 H_1A 第1行相同
→ 与 $H_2A^{(1)}$ 第1行相同
→ 与 $H_2A^{(1)}$ 第2行相同

（3）Givens 法：

3、求QR分解的方法

(1) 采用Givens方法

将n阶非奇异矩阵A写为 $A=\begin{bmatrix} b^{(1)T} \\ * \end{bmatrix}^T$ $b^{(1)}=[a_{11},a_{21},\cdots,a_{n1}]^T$ 为A的第一列

则存在有限个Givens矩阵的乘积，使得 $T_1b^{(1)}=|b^{(1)}|e_1$

$$\rightarrow T_1A=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} \cdots a_{1n}^{(1)} \\ 0 & \\ \vdots & A^{(1)} \\ 0 & \end{bmatrix}$$

$b^{(2)}=[a_{22}^{(1)},a_{32}^{(1)},\cdots,a_{n2}^{(1)}]^T$ 为 $A^{(1)}$ 的第一列

将 $A^{(1)}$ 写成 $A^{(1)}=\begin{bmatrix} b^{(2)T} \\ * \end{bmatrix}^T$，存在 T_2，使得

$T_2b^{(2)}=|b^{(2)}|e_1 \rightarrow T_2A^{(1)}=\begin{bmatrix} a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \cdots a_{2n}^{(2)} \\ 0 & \\ \vdots & A^{(2)} \\ 0 & \end{bmatrix}$

$b^{(n-1)}=[a_{n-1\,n-1}^{(n-2)},a_{n\,n-1}^{(n-2)}]^T$ 为 $A^{(n-2)}$ 的第一列

$A^{(n-2)}$ 写成 $A^{(n-2)}=\begin{bmatrix} b^{(n-1)T} \\ * \end{bmatrix}^T$，存在 T_{n-1}，使得

$T_{n-1}b^{(n-1)}=|b^{(n-1)}|e_1 \rightarrow T_{n-1}A^{(n-2)}=\begin{bmatrix} a_{n-1\,n-1}^{(n-1)} & a_{n-1\,n}^{(n-1)} \\ 0 & a_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix}$

令 $T=\begin{bmatrix} I_{n-2} & 0 \\ 0 & T_{n-1} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} I_{n-3} & 0 \\ 0 & T_{n-2} \end{bmatrix}\cdots\begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & T_3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & T_2 \end{bmatrix}T_1$

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

$$\Rightarrow A=T^{-1}R=QR$$

T为正交矩阵，于是 $Q=T^{-1}=T^T$，R为上三角矩阵

例. 用初等旋转变换求矩阵 $A=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ 的QR分解

解：第一步：对A的第1列 $b^{(1)}=(0,1,1)^T$ 构造 T_1，使 $T_1b^{(1)}=|b^{(1)}|e_1$

对 $b^{(1)}$ 构造 $T_{12}(c,s)$：$c=0$，$s=1$

故 $T_{12}=\begin{bmatrix} 0 & 1 & \\ -1 & 0 & \\ & & 1 \end{bmatrix}$ $T_{12}b^{(1)}=(\sqrt{0+1^2},0,1)^T=(1,0,1)^T$

故 $T_{12}b^{(1)}$ 构造 $T_{13}(c,s)$：$c=\frac{\sqrt{1^2+0}}{\sqrt{1^2+0+1^2}}=\frac{1}{\sqrt2}$，$s=\frac{1}{\sqrt{1^2+0+1^2}}=\frac{1}{\sqrt2}$

故 $T_{13}=\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt2} & & \frac{1}{\sqrt2} \\ & 1 & \\ -\frac{1}{\sqrt2} & & \frac{1}{\sqrt2} \end{bmatrix}$ $T_{13}(T_{12}b^{(1)})=(\sqrt{1^2+0+1^2},0,0)^T=(\sqrt2,0,0)^T$

$T_1=T_{13}T_{12}=\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt2} & \frac{1}{\sqrt2} \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt2} & \frac{1}{\sqrt2} \end{bmatrix}$ $T_1A=\begin{bmatrix} \sqrt2 & \frac{1}{\sqrt2} & \frac{1}{\sqrt2} \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt2} & \frac{1}{\sqrt2} \end{bmatrix}$

第2步：对 $A^{(1)}=\begin{bmatrix}-1 & -1\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$ 的第1列 $b^{(2)}=\begin{bmatrix}-1\\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$ 构造 T_2，使 $T_2b^{(2)}=\|b^{(2)}\|e_1$

对 $b^{(2)}$ 构造 $T_{12}(c,s)$： $c=\frac{-1}{\sqrt{1+\frac{1}{2}}}=-\sqrt{\frac{2}{3}}$，$s=\frac{-\frac{1}{\sqrt{2}}}{\sqrt{1+\frac{1}{2}}}=-\sqrt{\frac{1}{3}}$

故 $T_{12}=\begin{bmatrix}-\sqrt{\frac{2}{3}} & -\sqrt{\frac{1}{3}}\\ \sqrt{\frac{1}{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}}\end{bmatrix}$，$T_{12}b^{(2)}=(\sqrt{1+\frac{1}{2}},0)^T=\begin{bmatrix}\sqrt{\frac{3}{2}}\\ 0\end{bmatrix}$

$T_2=T_{12}$，$T_2A^{(1)}=\begin{bmatrix}\sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}}\\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{3}}\end{bmatrix}$

最后，令 $T=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & T_2\end{bmatrix}T_1=\begin{bmatrix}0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}}\\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}}\end{bmatrix}$

则有 $Q=T^T=\begin{bmatrix}0 & \frac{2}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}}\end{bmatrix}$ $R=TA=\begin{bmatrix}\sqrt{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ & \frac{3}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}}\\ & & -\frac{2}{\sqrt{3}}\end{bmatrix}$

$\rightarrow$ 与 T_1A 第1行相同

$\rightarrow$ 与 $T_2A^{(1)}$ 第1行；

$\rightarrow$ 与 $T_2A^{(1)}$ 第2行；

需要指出，使用Givens变换求 n 阶 A 的QR分解时，R的第1行元素与 T_1A 的第1行元素相同，R的第2行后 $n-1$ 个元素与 $T_2A^{(1)}$ 第1行元素相同，R的第 $n-1$ 行后两个元素与 $T_{n-1}A^{(n-2)}$ 的第1行元素相同，R的第 n 行最后一个元素与 $T_{n-1}A^{(n-2)}$ 的第2行最后一个元素相同，此外 T_1A 的第1列一定是 $(\|b^{(1)}\|,0,\cdots,0)^T$

4.3 矩阵的满秩分解

1. 定义

设 $A\in C_r^{m\times n}(r>0)$，若存在矩阵 $F\in C_r^{m\times r}$及 $G\in C_r^{r\times n}$，使得 A=FG，则称其为 A 的一个满秩分解。

说明：(1)F 为列满秩矩阵，即列数等于秩；G 为行满秩矩阵，即行数等于秩。

(2)满秩分解不唯一。$\forall D\in C_r^{r\times r}$(r 阶可逆方阵)，则 $A=FG=F(DD^{-1})G=(FD)(D^{-1}G)=F_1G_1$，且$F_1\in C_r^{m\times r}$，$G_1\in C_r^{r\times n}$。

2. 定理

任何非零矩阵均存在满秩矩阵。

证：设 $A\in C_r^{m\times n}$，则存在初等变换矩阵 $E\in C_m^{m\times m}$

使 $EA=B=\begin{bmatrix}G\\0\end{bmatrix}\begin{matrix}r行\\(m-r)行\end{matrix}$，其中 $G\in C_r^{r\times n}$

将A写成 $A=E^{-1}B$，把E^{-1}分块成 $E^{-1}=[\underbrace{F}_{r列}\vdots\underbrace{S}_{(m-r)列}]$，其中 $F\in C_r^{m\times r}$，$S\in C_{m-r}^{m\times(m-r)}$

则 $A=\underbrace{[F\vdots S]}_{E^{-1}}\underbrace{\begin{bmatrix}G\\0\end{bmatrix}}_{B}=FG$，E是满秩方阵

例. 求 $A=\begin{bmatrix}-1&0&1&2\\1&2&-1&1\\2&2&-2&-1\end{bmatrix}$ 的满秩分解

解. $[A\vdots I]=\left[\begin{array}{cccc|ccc}-1&0&1&2&1&&\\1&2&-1&1&&1&\\2&2&-2&-1&&&1\end{array}\right]\xrightarrow{行}\left[\begin{array}{cccc|ccc}-1&0&1&2&1&0&0\\0&2&0&3&1&1&0\\0&2&0&3&2&0&1\end{array}\right]\to\left[\begin{array}{cccc|ccc}-1&0&1&2&1&0&0\\0&2&0&3&1&1&0\\0&0&0&0&1&-1&1\end{array}\right]$

故 $B=\begin{bmatrix}-1&0&1&2\\0&2&0&3\\0&0&0&0\end{bmatrix}$，$E=\begin{pmatrix}1&0&0\\1&1&0\\1&-1&1\end{pmatrix}$，$E^{-1}=\begin{pmatrix}1&0&0\\-1&1&0\\-2&1&1\end{pmatrix}$

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

首先对矩阵$[A|I]$进行初等行变换，将其转换为$[B|E]$，选取矩阵 B 的非零行构成矩阵 G，对矩阵 E 进行逆变换得E^{-1}，此题中 rankA=rankB=2，故选取矩阵E^{-1}的前 2 列作为矩阵 F，于是有 A=FG。一般情况下，求E^{-1}会非常麻烦，故多采用后续介绍方法。

3. Hermite 标准形(行阶梯标准形)

设 $B\in C_r^{m\times n}(r>0)$，且满足

(1) B 的前行中每一行至少含一个非零元素（称为非零行），且第一个非零元素为 1，而后(m-r)行的元素全为零（称为零行）。

(2) 若 B 中第 i 行的第一个非零元素（即 1）在第j_i列(i=1,2,⋯,r)，则$j_1<j_2<\ldots<j_r$.

(3) 矩阵 B 的第j_1列，第j_2列，⋯，第j_r列合起来恰为 m 阶单位方阵I_m的前 r 列（即$j_1,j_2,\ldots,j_r$列除了 1 外全为 0），则称 B 为 Hermite 标准形。

如：

$$B_1=\begin{bmatrix}1&2&0&0&-1&3\\0&0&1&0&2&2\\0&0&0&1&-1&1\\0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0\end{bmatrix}_{5\times6}\in C_3^{5\times6}$$

$$B_2=\begin{bmatrix}0&0&1&0&2\\0&0&0&1&3\\0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0\end{bmatrix}_{4\times5}\in C_2^{4\times5}$$

均为Hermite标准形

4. 满秩分解的求法

对任意矩阵 $A \in C_r^{m\times n}$,

（1）采用行初等变换将 A 化为 Hermite 标准形，其矩阵形式为 EA=B，其中 B 为 Hermite 标准形。

（2）选取置换矩阵：

①$\mathbf{P}$ 的第 $\mathbf{i}$ 列为 $\mathbf{e}_{\mathbf{j}_\mathbf{i}}$，即该列向量除第 $\mathbf{j}_\mathbf{i}$ 个元素为 **1** 外，其余元素全为零 $(\mathbf{i}=\mathbf{1},\mathbf{2},\ldots,\mathbf{r})$，其中 $\mathbf{j}_\mathbf{i}$ 为 **Hermite** 标准形中每行第一个非零元素（即 **1**）所在的列数；

②其它 $(\mathbf{n}-\mathbf{r})$ 列只需确保 $\mathbf{P}$ 为置换矩阵即可（$\mathbf{P}$ 的每一行，每一列均只有一个非零元素，且为 **1**）；

③用 $\mathbf{P}$ 右乘任何矩阵（可乘性得到满足时），即可得该矩阵的第 $\mathbf{j}_\mathbf{i}$ 列置换到新矩阵（即乘积矩阵）的第 $\mathbf{i}$ 列

④令 $\mathbf{P}=[\underset{\text{r列}}{\mathbf{P}_1}\ |\ \underset{(\mathbf{n}-\mathbf{r})\text{列}}{*}]$，即 $\mathbf{P}_1=\left[\mathbf{e}_{\mathbf{j}_1}\quad \mathbf{e}_{\mathbf{j}_2}\ldots\mathbf{e}_{\mathbf{j}_\mathbf{r}}\right]_{\mathbf{n}\times\mathbf{r}}\in \mathbf{C}_\mathbf{r}^{\mathbf{n}\times\mathbf{r}}$

（3）令 G=B 的前 r 行$\in C_r^{r\times n}$，$F=AP_1\in C_r^{m\times r}$，则 A=FG

例. $A=\begin{bmatrix}1&2&3&0\\0&2&1&-1\\1&0&2&1\end{bmatrix}$，求其满秩分解。

解：(1) $[A\,\vdots\,I]=\left[\begin{array}{cccc|ccc}1&2&3&0&1&0&0\\0&2&1&-1&0&1&0\\1&0&2&1&0&0&1\end{array}\right]\xrightarrow[(3)+(2)]{(3)-(1)}\left[\begin{array}{cccc|ccc}1&2&3&0&1&0&0\\0&2&1&-1&0&1&0\\0&0&0&0&-1&1&1\end{array}\right]$

$\xrightarrow{(1)-(2)}\left[\begin{array}{cccc|ccc}1&0&2&1&1&-1&0\\0&2&1&-1&0&1&0\\0&0&0&0&-1&1&1\end{array}\right]\xrightarrow{\frac{1}{2}\times(2)}\left[\begin{array}{cccc|ccc}1&0&2&1&1&-1&0\\0&1&\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}&0&\frac{1}{2}&0\\0&0&0&0&-1&1&1\end{array}\right]$

发现规律：
rank A = rank B = 2
故 $\boxed{\text{B的前两行}}$ 构成 $\boxed{G}$。
由B的前两列知 $j_1=1, j_2=1$
故可直接选 $\boxed{\text{A的前两列}}$ 为 $\boxed{F}$。

故 $B=\begin{bmatrix}1&0&2&1\\0&1&\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}\\0&0&0&0\end{bmatrix}$，$G=\begin{bmatrix}1&0&2&1\\0&1&\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}$，$E=\begin{bmatrix}1&-1&0\\0&\frac{1}{2}&0\\-1&1&1\end{bmatrix}$

(2) 由B可知，$j_1=1, j_2=1$，$A\in C_2^{3\times4}$，$P_1\in C_2^{4\times2}$

选 $P_1=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\\0&0\\0&0\end{bmatrix}$，$F=AP_1=\begin{bmatrix}1&2\\0&2\\1&0\end{bmatrix}$

故 A=FG

说明：最后可以检验结果，计算 $FG=\begin{bmatrix}1&2\\0&2\\1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0&2&1\\0&1&\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&2&3&0\\0&2&1&-1\\1&0&2&1\end{bmatrix}=A$

例：

对 $A=\begin{bmatrix}1&2&3&0\\0&2&1&-1\\1&0&2&1\end{bmatrix}$ 进行满秩分解

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

故 $G=\begin{pmatrix}1&0&2&1\\0&1&\frac{1}{2}&-\frac{1}{2}\end{pmatrix}$　　$A=FG$

$F=\begin{pmatrix}1&2\\0&2\\1&0\end{pmatrix}$

总结：解 A=FG，由 $[A\,|\,I]$ 进行初等行变换转换为 $[B\,|\,Q]$，由 B 的非零行直接构成 G，由 B 的极大无关组所在列数选取 A 与之对应的列向量构成 F，则 A=FG.

4.4 矩阵的奇异值分解

为了论述矩阵的奇异值与奇异值分解，需要下面的结论：

（1）设 $A \in C_r^{m\times n}(r>0)$，则$A^HA$ 是 Hermite 矩阵，且其特征值均是非负实数；

（2）$rank(A^HA)=rank(A)$；

（3）设 $A \in C^{m\times n}$，则 $A=O$ 的充要条件是$A^HA=O$.

1. 定义

设 $A \in C_r^{m\times n}(r>0)$，则$A^HA$ 的特征值为$\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \dots \ge \lambda_r > \lambda_{r+1} = \dots = \lambda_n = 0$，则称$\sigma_i=\sqrt{\lambda_i}\ (i=1,2,\dots n)$为 A 的奇异值；当 A 为零矩阵时，它的奇异值都是 0.

易见，矩阵 A 的奇异值的个数等于 A 的列数，A 的非零奇异值的个数等于 $rankA$.

2. 定理

设 $A \in C_r^{m\times n}(r>0)$，则存在 m 阶酉矩阵 U 和 n 阶酉矩阵 V，使得：$U^HAV=\begin{bmatrix}\Sigma & O\\ O & O\end{bmatrix}$

其中$\Sigma=diag(\sigma_1,\sigma_2,\dots,\sigma_r)$，而$\sigma_i\ (i=1,2,\dots,r)$为矩阵 A 的全部非零值。即：

$$U^HAV=\begin{array}{cc}\left[\begin{array}{cc}\begin{matrix}\sigma_1 & & \\ & \sigma_2 & \\ & & \ddots \\ 0 & & & \sigma_r\end{matrix} & \begin{matrix}0\\ O\end{matrix}\\ O & O\end{array}\right] & \begin{matrix}r\text{行}\\ (m-r)\text{行}\end{matrix}\\ \begin{matrix}r\text{列} & \quad (n-r)\text{列}\end{matrix} & \end{array} \qquad A=U\begin{bmatrix}\sigma_1 & & & & O\\ & \sigma_2 & & & \\ & & \cdot & & \\ & & & \sigma_r & \\ O & & & & O\end{bmatrix}V^H$$

上式中，$A=U\begin{bmatrix}\Sigma & O\\ O & O\end{bmatrix}V^H$ 称为矩阵 A 的奇异值分解。

证明：记 Hermite 矩阵A^HA 的特征值为$\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge \dots \ge \lambda_r > \lambda_{r+1} = \dots = \lambda_n = 0$

存在 n 阶酉矩阵 V 使得：

$$V^H(A^HA)V=\begin{bmatrix}\lambda_1 & \cdots & O\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ O & \cdots & \lambda_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\Sigma^2 & O\\ O & O\end{bmatrix}$$

将 V 分块为 $V=[V_1|V_2]$，$V_1 \in C_r^{n\times r}$，$V_2 \in C_{n-r}^{n\times(n-r)}$.

对上式改写为：

$$A^HAV=V\begin{bmatrix}\Sigma^2 & O\\ O & O\end{bmatrix}$$

$$A^HA[V_1|V_2]=[V_1|V_2]\begin{bmatrix}\Sigma^2 & O\\ O & O\end{bmatrix}$$

则有：

$$A^HAV_1=V_1\Sigma^2,\quad A^HAV_2=O$$

故由上式的第一式得：

$$V_1{}^HA^HAV_1=\Sigma^2 \text{ 或 } (AV_1\Sigma^{-1})^H(AV_1\Sigma^{-1})=I_r$$

由上式的第二式得：

$$(AV_2)^H(AV_2)=O \text{ 或 } AV_2=O$$

令$U_1=AV_1\Sigma^{-1}$，则$U_1{}^HU_1=I_r$，即U_1的 r 个列是两两正交的单位向量，记$U_1=(u_1,u_2,\dots,u_r)$，可将U_1扩充为C^m的标准正交基，构造$U_2=(u_{r+1},u_{r+2},\dots,u_m)$，则 $U=[U_1|U_2]=(u_1,u_2,\dots,u_r,u_{r+1},u_{r+2},\dots,u_m)$是 m 阶酉矩阵，且有

$$U_1{}^HU_1=I_r,\quad U_2{}^HU_1=O$$

于是可得：

$$U^HAV=U^H[AV_1|AV_2]=\begin{bmatrix}U_1{}^H\\ U_2{}^H\end{bmatrix}[U_1\Sigma|O]=\begin{bmatrix}U_1{}^HU_1\Sigma & O\\ U_2{}^HU_1\Sigma & O\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\Sigma & O\\ O & O\end{bmatrix}$$，证毕。

3. 例题

例. 求 $A=\begin{bmatrix}1&0&1\\0&1&1\\0&0&0\end{bmatrix}$ 的奇异值分解.

解: $A^TA=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\1&1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0&1\\0&1&1\\0&0&0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&1\\0&1&1\\1&1&2\end{bmatrix}$

易解其特征值为 $\lambda_1=3,\ \lambda_2=1,\ \lambda_3=0$

故 $\Sigma=\begin{bmatrix}\sqrt{3}&0\\0&1\end{bmatrix}$

使 $V^T(A^TA)V=\begin{bmatrix}3&&\\&1&\\&&0\end{bmatrix}$ 成立的 V 可由 A^TA 特征值对应的特征向量构成

$\lambda_1=3$: $(3I-A^TA)=\begin{bmatrix}2&0&-1\\0&2&-1\\-1&-1&1\end{bmatrix}$, 故 $\xi_1=(1,1,2)^T$

$\lambda_2=1$: $(I-A^TA)=\begin{bmatrix}0&0&-1\\0&0&-1\\-1&-1&-1\end{bmatrix}$, 故 $\xi_2=(1,-1,0)^T$

$\lambda_3=0$: $(0-A^TA)=\begin{bmatrix}-1&0&-1\\0&-1&-1\\-1&-1&-2\end{bmatrix}$, 故 $\xi_3=(1,1,-1)^T$

V 可由 (ξ_1,ξ_2,ξ_3) 单位化得:

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

$A\in C_r^{m\times n}$

由 $A\in C_2^{3\times 3}$, 故 $V_1\in C_2^{3\times 2}$, 即 $V_1=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{6}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{2}{\sqrt{6}}&0\end{bmatrix}$

$V_1\in C_r^{n\times r}$

$\underline{U_1=AV_1\Sigma^{-1}}=\begin{bmatrix}1&0&1\\0&1&1\\0&0&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{6}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{2}{\sqrt{6}}&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}&\\&1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}\\0&0\end{bmatrix}$

构造的 U_2 需满足与 U_1 中各向量正交!

构造 $U_2=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$, 故 $U=[U_1\,\vdots\,U_2]=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}&0\\0&0&1\end{bmatrix}$

则 A 的奇异值分解为:

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

例:

求 $A=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\\1&1\end{bmatrix}$ 的奇异值分解

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

$|\lambda I-A^TA|=\begin{vmatrix}\lambda-2&-1\\-1&\lambda-2\end{vmatrix}=(\lambda-1)(\lambda-3)$

故 $\lambda_1=3$ ，$\lambda_2=1$

$\Sigma=\begin{pmatrix}\sqrt{3}&\\&1\end{pmatrix}$

$\lambda_1=3$ 对应的特征向量：$\xi_1=(1,1)^T$

$\lambda_2=1$ 对应的特征向量：$\xi_2=(1,-1)$

故 $V=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$

又 $\operatorname{rank}A=2$ ，故 $V_1=V$

$U_1=AV_1\Sigma^{-1}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\\1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}&\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}&-\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}&\\&1\end{pmatrix}$

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

取 $U_2=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}}\\\frac{1}{\sqrt{3}}\\-\frac{1}{\sqrt{3}}\end{pmatrix}$

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

则 A 的奇异值分解为

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