arXiv:2304.02659v1 [math.NA] 5 Apr 2023

消元与分解

Gilbert Strang 麻省理工学院
gilstrang@gmail.com

MSC分类 15A21 15A23 97 ORCID 0000-0001-8511-7862

摘要

如果一个矩阵 A 的秩为 r，那么它的行阶梯形（来自消元）在其前 r 个线性无关的列中包含单位矩阵。我们如何解释出现在该阶梯形剩余列中的矩阵 F？ F 乘以 A 的那些前 r 个线性无关的列，得到其 $n-r$ 个相关列。然后 F 揭示了原矩阵 A 的行空间和零空间的基。而 F 是列-行分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{C}\boldsymbol{R}$ 的关键。

1. 消元几乎是线性代数中最古老的算法。通过系统地在矩阵中产生零，它简化了 m 方程 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的求解。我们以这个 3 乘 4 矩阵 A 为例，其行 $1+$ 行 $2=$行 3。然后它的秩是 $r=2$，我们执行熟悉的消元步骤来找到它的简化行阶梯形 Z:

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&2&11&17\\3&7&37&57\\4&9&48&74\end{bmatrix}\rightarrow\boldsymbol{Z}=\begin{bmatrix}1&0&3&5\\0&1&4&6\\0&0&0&0\end{bmatrix}.$$

此时，我们暂停算法，提出一个问题： $\boldsymbol{Z}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 有什么关系？答案之一来自与 $\boldsymbol{A}$相关的基本子空间:

1) $\boldsymbol{Z}$ 的两个非零行（称为 $\boldsymbol{R}$）是$\boldsymbol{A}$ 的行空间的一组基。2) $\boldsymbol{A}$ 的前两列（称为 $\boldsymbol{C}$）是 $\boldsymbol{A}$ 的列空间的一组基。3) $\boldsymbol{Z}$ 的零空间等于 $\boldsymbol{A}$ 的零空间（与同一个行空间正交）。

这就是我们一开始进行消元的原因。“简化矩阵A 而不丢失其中包含的信息。”通过应用相同的步骤对

将 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$的右侧代入后，我们得到方程 $Z\boldsymbol{x}=\boldsymbol{d}$——它具有相同的解 $\boldsymbol{x}$ 和更简单的矩阵 Z。

这篇短文的目的是以另一种方式表达消元的结果。这个因式分解不可能是新的，但值得重新强调。

消元因子 $\boldsymbol{A}$ 分解为 $\boldsymbol{C}$ 乘以 $\boldsymbol{R}=(\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{r})$ 乘以 $(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{n})$

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&2&11&17\\3&7&37&57\\4&9&48&74\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&2\\3&7\\4&9\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0&3&5\\0&1&4&6\end{bmatrix}=\boldsymbol{CR}$$

C 具有满列秩 $r=2$，且 R 具有满行秩 $r=2$。当我们证明 $A=CR$ 对每个矩阵 A都成立时，这种分解也同时给出了线性代数中的第一个伟大定理的证明：列秩等于行秩。

2. 下面给出 C 和 R 的描述，该描述独立于计算它们的算法（行运算）。

假设 $\boldsymbol{A}$ 的前 $\boldsymbol{r}$ 线性无关的列进入 $\boldsymbol{C}$。那么， $\boldsymbol{A}$ 的其他 $\boldsymbol{n-r}$ 列必然是 $\boldsymbol{C}$中那些线性无关的列的组合 $\boldsymbol{CF}$。那个关键矩阵 $\boldsymbol{F}$ 是行因子 $\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}&\boldsymbol{F}\end{bmatrix}\boldsymbol{P}$的一部分，其中有 $\boldsymbol{r}$ 线性无关的行。于是我们立即得到 $A=CR$:

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{CR}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{C}&\boldsymbol{CF}\end{bmatrix}\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}\textbf{Indep cols}&\textbf{Dep cols}\end{bmatrix}\textbf{Permute cols}\qquad(1)$$

如果 A中的 r 线性无关的列位于最前面，那么置换矩阵就是 $P=I$。否则，我们需要 P 对 C 中的 n 列进行置换，并在 A中将它们 CF调整到正确位置。下面是 $A=C\begin{bmatrix}I&F\end{bmatrix}P$的一个例子，其中 P交换第 2 列和第 3 列:

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&2&3&4\\1&2&4&5\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&3\\1&4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&2&0&1\\0&0&1&1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&3\\1&4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&0&2&1\\0&1&0&1\end{bmatrix}P=\boldsymbol{CR}.\ (2)$$

rref（A）中的关键信息是 A的 r 线性无关的列，以及矩阵 F（r乘 $n-r$），它将这些线性无关的列组合起来，得到 A中 CF的 $n-r$ 相关列。这唯一确定了 rref（A）。

3. 分解 $A=CR$ 已得到验证。但我们如何确定 A 中最前面的 r 线性无关的列（它们将进入 C），以及其余 $n-r$ 列 CF之间的依赖关系呢? 此时就要对 A进行行运算。允许进行三种运算，将 A 化为其简化行阶梯形$Z=$ rref（A）:

（a）将一行的若干倍数从另一行中减去（可从上方或下方的行减去）

(b) 交换两行 (c) 将一行除以其第一个非零元素

所有线性代数教师以及相当一部分学生都知道这些步骤及其结果 rref(A)。其中包含一个 $r \times r$ 单位矩阵 I （只有零可以位于那些 1之前）。 I 的位置揭示了前 r 个线性无关的列。上面的方程（1）揭示了 F 的含义！它告诉我们，$n-r$ 相关列 CF 如何由 A 中的线性无关列生成。 C中剩余的 $m-r$ 相关行 A 必须在 Z 中变为零行：

$$\textbf{Elimination reduces } \boldsymbol{A} \textbf{ to } \boldsymbol{Z} = \textbf{rref}(A) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{F} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} \end{bmatrix} \boldsymbol{P} \tag{3}$$

我们所有的行运算 (a)(b)(c) 都是可逆的。(这是高斯-约当消元法：对主元行上方以及下方的行进行运算。) 但将 A 化为这种阶梯形的矩阵不如它在方程 (1) 中揭示的分解$\boldsymbol{A = CR}$ 重要。

4. 在我们应用 $A = CR$ 求解 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$之前，我们想要逐列（从左到右）说明如何从 A构造 rref(A)。对k 列进行消元后，矩阵的那一部分已经处于其自身的rref形式。我们已经准备好对当前列 $k+1$进行消元。这一新列有一个上部$\boldsymbol{u}$ 和一个下部 $\boldsymbol{\ell}$:

$$\text{前 } \boldsymbol{k+1} \text{ 列} \qquad \begin{bmatrix} I_k & F_k \\ 0 & 0 \end{bmatrix} P_k \text{ followed by } \begin{bmatrix} \boldsymbol{u} \\ \boldsymbol{\ell} \end{bmatrix}. \tag{4}$$

核心问题是：这个新列 $\boldsymbol{k+1}$ 是与 $\boldsymbol{I_k}$ 还是与 $\boldsymbol{F_k}$ 连接?

如果 $\boldsymbol{\ell}$ 全为零，则新列依赖于前 k 列。然后，在下一步中， $\boldsymbol{u}$ 与 F_k 合并，生成第 $k+2$ 列中的 F_{k+1}。

如果 $\boldsymbol{\ell}$ 不全为零，则新列与前 k 列线性无关。在 $\boldsymbol{\ell}$ 中选取任意非零元（最好是最大的）作为主元。将该 A的行移到 $\boldsymbol{\ell}$的顶部。然后使用该主元行通过标准消元将第 $k+1$列的其余部分全部化为零。（该步骤预计会改变$k+1$之后的列。）第 $k+1$ 列与 I_k 结合产生 I_{k+1}。我们调整 P_k 并准备处理第 $k+2$列。

消元结束时，我们得到一份最理想的列编号列表。它们告诉我们 $\boldsymbol{A}$的前 $\boldsymbol{r}$ 个线性无关的列。那些就是 C的列。它们通过行因子 R 中的 r 导致了单位矩阵I_r 通过 r。

5. 将 A 化为rref(A)实现了什么？行空间没有改变！然后其正交补（ $\boldsymbol{A}$的零空间）没有改变。 CF 的每一列告诉我们 A 的一个相关列如何是 C中线性无关列的组合。实际上， $\boldsymbol{F}$ 的列告诉我们$\boldsymbol{n-r}$ 个 $\boldsymbol{A\boldsymbol{x} = 0}$的解。

通过第1节中的例子最容易看出这一点：

$$\begin{matrix} x_1 + 2x_2 + 11x_3 + 17x_4 = 0 \\ 3x_1 + 7x_2 + 37x_3 + 57x_4 = 0 \end{matrix} \quad \text{reduces to} \quad \begin{matrix} x_1 + 3x_3 + 5x_4 = 0 \\ x_2 + 4x_3 + 6x_4 = 0 \end{matrix}$$

带有 $x_3 = 1$ 和 $x_4 = 0$ 的解是 $\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} -3 & -4 & 1 & 0 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$。注意来自 F的3和4。带有 $x_3 = 0$ 和 $x_4 = 1$ 的第二个解是 $\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} -5 & -6 & 0 & 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$。这些解是 $\boldsymbol{AX = 0}$中 $\boldsymbol{X}$ 的两列。（此例有$P = I$。） $\boldsymbol{X}$ 的 $\boldsymbol{n - r}$ 列是 $\boldsymbol{A}$零空间的自然基：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{C}\begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{F} \end{bmatrix}\boldsymbol{P} \text{ multiplies } \boldsymbol{X} = \boldsymbol{P^{\mathrm{T}}}\begin{bmatrix} \boldsymbol{-F} \\ \boldsymbol{I_{n-r}} \end{bmatrix} \text{ to give}$$

$$\boldsymbol{AX = -CF + CF = 0}. \tag{5}$$

对于置换，借助 $PP^{\mathrm{T}} = I$， X的每一列都满足 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$。这些$n - r$ X 中的解告诉我们已知信息： A的每个相关列都是 C中线性无关的列的组合。在该例中，第$3 = 3$列（第 1 列） $+ 4$（第 2 列）。

导致 $A = CR$ 的高斯-约旦消元不如直接求解 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$的高斯过程高效。后者在三角系统$U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{c}$处停止：回代得到 $\boldsymbol{x}$。高斯-约旦还需额外进行向上消元。如果我们只想求解方程，停在三角分解处会更快。

6.分块消元 将 A 化为阶梯形的行运算一次产生一个零元素。该阶梯形的一个关键部分是一个 $r \times r$ 单位矩阵。如果我们从更大的尺度来思考——而不是一次处理一行——那么该输出 $\boldsymbol{I}$ 告诉我们，某个 $\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{r}$ 矩阵已经被求逆。沿着这一思路，我们便能从“矩阵理解”的角度认识消元。

假设 A 前 r 行和列中的矩阵 $\boldsymbol{W}$ 是可逆的。那么，消元会从 W中获取全部指令！逐个元素地操作——或者通过“分块消元”一次性操作——$\boldsymbol{W}$ 将变为 $\boldsymbol{I}$。换句话说， A的前 r行将产生 I和 F。这表明 $\boldsymbol{F}$就是 $\boldsymbol{W^{-1}H}$。而最后 $m - r$ 行将变为零行。

$$\textbf{Block elimination} \quad \boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{W} & \boldsymbol{H} \\ \boldsymbol{J} & \boldsymbol{K} \end{bmatrix} \text{ reduces to } \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{F} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} \end{bmatrix} = \textbf{rref}(\boldsymbol{A}). \tag{6}$$

这只是表达了线性代数中的事实：如果 A 以 r 个线性无关的行开头且其秩为 r，那么剩余的 $m - r$ 行是前 r 行的组合： $\begin{bmatrix} J & K \end{bmatrix} = JW^{-1}\begin{bmatrix} W & H \end{bmatrix}$。那些 $m - r$ 行会在消元中变为零行。

一般来说，第一个 r 乘 r 块可能不可逆。但消元会找到 W。我们可以通过行置换和列置换 $\boldsymbol{P_r}$ 和 $\boldsymbol{P_c}$ 将 W 移到左上角。

那么，将分块消元化为简化行阶梯形的完整表达式为

$$\boldsymbol{P_r A P_c} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{W} & \boldsymbol{H} \\ \boldsymbol{J} & \boldsymbol{K} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{W^{-1}H} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{0} \end{bmatrix} \tag{7}$$

7. 这引出了一个有趣的问题。由于 A 的秩为 r，我们知道它有r 条线性无关的行和 r 列。假设这些行位于子矩阵 B 中，而这些列位于子矩阵 C中。那么，由这些行与这些列的“交集” W 组成的 r 乘 r 矩阵是否总是可逆的？（每个人都同意，在 A 中的某处存在一个 r 乘 r 的可逆子矩阵。问题是，是否可以指望 $B \cap C$ 提供这样一个子矩阵。） W 是否自动为满秩？

答案是肯定的。由 $\boldsymbol{A}$ 的 $\boldsymbol{r}$ 线性无关的行与 $\boldsymbol{r}$ 的线性无关的列相交得到的矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的秩为 $\boldsymbol{r}$。 $\boldsymbol{W}$ 可逆。

证明 [3]: A 的每一列都是 C的 r 列的线性组合。 r 行 n 列矩阵 B 的每一列都是 W的 r 列的相同线性组合。由于 B 的秩为 r，它的列空间就是整个 $\mathbf{R}^r$。

因此， W 的列空间也是 $\mathbf{R}^r$，且方形子矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的秩为 $\boldsymbol{r}$。

关键词：列-行分解、 $A = CR$、消元、阶梯形 R

参考文献

[1] Eric Grinberg, 《关于行最简阶梯形及其唯一性的左视角》, 《美国数学月刊》, 129（2022）364–373。[2] GilbertStrang 和 Cleve Moler, LU 和 CR 消元, 《SIAM 评论》, 64（2022）181–190。[3] GilbertStrang 和 Daniel Drucker, 从消元步骤得到的三种矩阵分解, 《分析与应用》, 20（2022）1147–1157。[4] Gilbert Strang, 《线性代数导论》, 第6版（2023）, Wellesley-Cambridge 出版社。