第三章 矩阵分解

§3.1 三角分解

一. Doolittle分解

1. 定义 3.1 设$A \in C^{n\times n}$，若存在下三角阵$L \in C^{n\times n}$和上三角阵$U \in C^{n\times n}$使得$A = LU$，则称A可以做三角分解。

一. Doolittle分解

1. 定义 3.1 设$A \in C^{n\times n}$，若存在下三角阵$L \in C^{n\times n}$和上三角阵$U \in C^{n\times n}$使得$A = LU$，则称A可以做三角分解。

注 1. 若定义中的L为对角元素为1的下三角阵（单位下三角阵）， U为上三角阵，则称三角分解为Doolittle分解。

2. 定理 3.1 设 $A \in C^{n\times n}$，若其前 $n-1$ 阶顺序主子式均不为0，则 A 存在三角分解 $A = LU$， 其中 L 为单位下三角阵，U 为上三角阵。 此外，若 A 非奇异，则分解唯一。

3. 计算公式：

$$\begin{cases} u_{kj} = a_{kj} - \sum\limits_{t=1}^{k-1} l_{kt} u_{tj} & (j = k, \cdots, n) \\ l_{ik} = (a_{ik} - \sum\limits_{t=1}^{k-1} l_{it} u_{tk}) / u_{kk} & (i = k+1, \cdots, n), \\ & (k = 1, 2, \cdots, n) \end{cases}$$

4. 例. 求矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 5 & -6 \\ 4 & 13 & -19 \\ -6 & -3 & -6 \end{pmatrix}$$

的Doolittle分解。

(1) $u_{11} = a_{11} = 2, u_{12} = a_{12} = 5, u_{13} = a_{13} = -6;$

(2) $l_{21} = a_{21}/u_{11} = 2, l_{31} = a_{31}/u_{11} = -3;$

(3) $u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12} = 3; u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13} = -7;$

(4) $l_{32} = (a_{32} - l_{31}u_{12})/u_{22} = 4;$

(5) $u_{33} = a_{33} - (l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23}) = 4.$

(1) $u_{11} = a_{11} = 2, u_{12} = a_{12} = 5, u_{13} = a_{13} = -6;$

(2) $l_{21} = a_{21}/u_{11} = 2, l_{31} = a_{31}/u_{11} = -3;$

(3) $u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12} = 3; u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13} = -7;$

(4) $l_{32} = (a_{32} - l_{31}u_{12})/u_{22} = 4;$

(5) $u_{33} = a_{33} - (l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23}) = 4.$

则A的Doolittle分解为

$$A = LU = \begin{pmatrix} 1 & & \\ 2 & 1 & \\ -3 & 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 5 & -6 \\ & 3 & -7 \\ & & 4 \end{pmatrix}$$

二. 选列主元Doolittle分解

问题： 若$u_{ii}=0$或$|u_{ii}|$很小时，分解将出现中断或溢出。

二. 选列主元Doolittle分解

问题： 若$u_{ii}=0$或$|u_{ii}|$很小时，分解将出现中断或溢出。

选列主元Doolittle分解：在分解过程中加入选列主元步骤。

5. 定义 3.2　以 n 阶单位矩阵 I_n 的 n 个列向量 $e_1, e_2, \cdots, e_n$ 为列构成的 n 阶方阵 $P = (e_{i_1}\ e_{i_2}\ \cdots e_{i_n})$ 称为 n 阶置换阵，这里 $i_1, i_2, \cdots, i_n$ 是 $1, 2, \cdots, n$ 的一个全排列。
6. 定理3.2　设 A 为非奇异矩阵，则存在置换阵 P，使得 $PA = LU$，其中 L 为单位下三角阵，U 为上三角阵。

设A已经过$k-1$步列主元分解，即有

$$A \longrightarrow \bar{A} = \begin{pmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1,k-1} & u_{1,k} & \cdots & u_{1,n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{k-1,1} & \cdots & u_{k-1,k-1} & u_{k-1,k} & \cdots & u_{k-1.n} \\ l_{k,1} & \cdots & l_{k,k-1} & \bar{a}_{k,k} & \cdots & \bar{a}_{k,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_{i,1} & \cdots & l_{i,k-1} & \bar{a}_{i,k} & \cdots & \bar{a}_{i,n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{n,1} & \cdots & l_{n,k-1} & \bar{a}_{n,k} & \cdots & \bar{a}_{n,n} \end{pmatrix}.$$

⋆ 选主元:

- 第 k 步时，令

$$\bar{a}_{ik} \longleftarrow c_i = \bar{a}_{ik} - \sum_{t=1}^{k-1} \bar{a}_{it}\bar{a}_{tk} = \bar{a}_{ik} - \sum_{t=1}^{k-1} l_{it}u_{tk}$$

$$(i = k, k+1, \cdots n).$$

- 取

$$|c_{i_k}| = \max_{k \le i \le n} |c_i|$$

如果 $i_k \neq k$，则交换上述矩阵 $\bar{A}$ 中的第 k 行与第 i_k 行，即 $\bar{a}_{kj} \longleftrightarrow \bar{a}_{i_k j}$，得矩阵 $\tilde{A}$.

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1,k-1} & u_{1,k} & \cdots & u_{1,n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{k-1,1} & \cdots & u_{k-1,k-1} & u_{k-1,k} & \cdots & u_{k-1.n} \\ l_{i_k,1} & \cdots & l_{i_k,k-1} & c_{i_k} & \cdots & \bar{a}_{i_k,n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{i,1} & \cdots & l_{i,k-1} & c_i & \cdots & \bar{a}_{i,n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{k,1} & \cdots & l_{k,k-1} & c_k & \cdots & \bar{a}_{k,n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{n,1} & \cdots & l_{n,k-1} & c_n & \cdots & \bar{a}_{n,n} \end{pmatrix}.$$

⋆ 计算 l_{ik} $(i=k+1,\cdots,n)$, u_{kj} $(j=k,k+1,\cdots,n)$.

$$\begin{cases} \tilde{a}_{kk} \longleftarrow u_{kk}=\tilde{a}_{kk}, \\ \tilde{a}_{ik} \longleftarrow l_{ik}=\frac{\tilde{a}_{ik}}{\tilde{a}_{kk}} \quad (i=k+1,\cdots,n), \\ \tilde{a}_{kj} \longleftarrow u_{kj}=\tilde{a}_{kj}-\sum\limits_{t=1}^{k-1}\tilde{a}_{kt}\tilde{a}_{tj} \quad (j=k+1,\cdots,n). \end{cases}$$

其中

$$\tilde{a}_{kk}=c_{i_k},\ \tilde{a}_{i_k,k}=c_k,$$

$$\tilde{a}_{ik}=c_i\ (i=k+1,\cdots,n;i\neq k,i\neq i_k),$$

$$\tilde{a}_{kj}=\bar{a}_{i_k,j}\ (j=k+1,\cdots,n).$$

例：　用选列主元Doolittle法分解矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 0.5 & 1 & 0 \\ 2 & 1.5 & 1 \\ 0.2 & 1 & 2.5 \end{pmatrix}.$$

$$A \xrightarrow{k=1} \begin{pmatrix} 2 & 1.5 & 1 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ 0.2 & 1 & 2.5 \end{pmatrix} \xrightarrow{k=1} A^{(1)} = \begin{pmatrix} 2 & 1.5 & 1 \\ 0.25 & 1 & 0 \\ 0.1 & 1 & 2.5 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{k=2} \begin{pmatrix} 2 & 1.5 & 1 \\ 0.1 & 0.85 & 2.5 \\ 0.25 & 0.625 & 0 \end{pmatrix} \xrightarrow{k=2} A^{(2)} = \begin{pmatrix} 2 & 1.5 & 1 \\ 0.1 & 0.85 & 2.4 \\ 0.25 & \frac{25}{34} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{k=3} A^{(3)} = \begin{pmatrix} 2 & 1.5 & 1 \\ 0.1 & 0.85 & 2.4 \\ 0.25 & \frac{25}{34} & -\frac{137}{68} \end{pmatrix}$$

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0.1 & 1 & 0 \\ 0.25 & \frac{25}{34} & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 2 & 1.5 & 1 \\ 0 & 0.85 & 2.4 \\ 0 & 0 & -\frac{137}{68} \end{pmatrix}.$$

三. Cholesky分解

7. 定理3.3 设 $A \in C^{n\times n}$ 是Hermite正定矩阵，则存在唯一分解 $A = LL^H$，其中 $L \in C^{n\times n}$ 为具有主对角元素为正数的下三角阵。

⋆ 计算公式:

$$\begin{cases} l_{jj} = (a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} |l_{jk}|^2)^{\frac{1}{2}}, & \\ l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}\bar{l}_{jk})/l_{jj} & (i = j+1, \cdots, n) \\ & (j = 1, 2, \cdots, n). \end{cases}$$

已知矩阵 $A=\begin{pmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -1 & 2 & -2 \\ 1 & -2 & 3 \end{pmatrix}$，求 A 的Cholesky分解。

$$l_{11}=\sqrt{a_{11}}=2,\quad l_{21}=\frac{a_{21}}{l_{11}}=-\frac{1}{2},\quad l_{31}=\frac{a_{31}}{l_{11}}=\frac{1}{2},$$
$$l_{22}=\sqrt{a_{22}-|l_{21}|^2}=\frac{\sqrt{7}}{2},\quad l_{32}=(a_{32}-l_{31}\bar{l}_{21})=-\frac{\sqrt{7}}{2},$$
$$l_{33}=\sqrt{a_{33}-|l_{31}|^2-|l_{32}|^2}=1$$

故

$$A=\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{7}}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{7}}{2} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{7}}{2} & -\frac{\sqrt{7}}{2} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

§3.4 矩阵的满秩分解

一. 基本概念

1. 定义3.7 设 $A \in C_r^{m\times n}(r > 0)$. 如果存在 $F \in C_r^{m\times r}$ 和 $G_r^{r\times n}$ 使得 $A = FG$，则称之为 A 的满秩分解。

2. 定义： 设 $A, B \in C^{m\times n}$， 若 A 经有限次初等变换变成矩阵 B， 则称 A 与 B 等价。

3. 定理：设 $A \in C_r^{m\times n}$ $(r>0)$, 则存在 $S \in C_m^{m\times m}$ 和 $T \in C_n^{n\times n}$ 使得

$$SAT = \begin{pmatrix} \mathrm{I_r} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

右边的矩阵为 A 的等价标准形。

二. 存在性

4. 定理 3.12 设 $A \in C_r^{m\times n}(r>0)$, 则总存在 $F \in C_r^{m\times r}$ 和 $G_r^{r\times n}$ 使得 $A = FG$，即 A 的满秩分解总是存在的。

证明：当 $r=m$ 时， $A=\mathrm{I}_m A$ 是 A 的满秩分解; 当 $r=n$ 时， $A=A\mathrm{I}_n$ 是 A 的满秩分解;

当 $0<r<\min\{m,n\}$ 时，有 $S\in C_m^{m\times m}$, $T\in C_n^{n\times n}$ 使得

$$SAT=\begin{pmatrix}\mathrm{I}_r & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}$$

于是

$$A=S^{-1}\begin{pmatrix}\mathrm{I}_r & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}T^{-1}=S^{-1}\begin{pmatrix}\mathrm{I}_r\\ 0\end{pmatrix}(\mathrm{I}_r\ \ 0)T^{-1}=FG$$

三. Hermite标准形及其S,T的求法

5. 定理： 设 $A \in C_r^{m\times n}$ $(r>0)$. 则 A 可经初等行变换化为满足如下条件的矩阵 H:

(1) H 的前 r 行中每一行至少含一个非零元素， 且第一个非零元素是 1， 而后 $m-r$ 行元素仍为 0;

(2) 若 H 中第 i 行的第一个非零元素 1 位于第 j_i 列 $(i=1,2,\cdots,r)$， 则 $j_1<j_2<\cdots<j_r$;

(3) H 的第 $j_1, j_2, \cdots, j_r$ 列为 I_m 的前 r 列， 即有

$$
H = \begin{array}{c}
\left(\begin{array}{cccccccccccccc}
0 & \cdots & 0 & 1 & * & \cdots & * & 0 & * & \cdots & 0 & * & \cdots & * \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & * & \cdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
\vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & 0 & * & \cdots & * \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & * & \cdots & * \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0
\end{array}\right) \\
\begin{array}{cccccccccccccc}
 & & & j_1 & & & & j_2 & & \cdots & j_r & & &
\end{array}
\end{array}
\begin{array}{l}
\left.\rule{0pt}{5em}\right\} (r\text{行}) \\
\rule{0pt}{8em}
\end{array}
$$

称 H 为 A 的 Hermite 标准形。也就是说，存在 $S \in C_m^{m \times m}$ 使得 $SA = H$.

⋆ 求 S 的方法：根据 $S(A, \mathrm{I_m}) = (SA, S) = (H, S)$ 求解， 即

$$(A, \mathrm{I_m}) \xrightarrow{\text{初等行变换}} (H, S)$$

6. 定理：设 $A \in C_r^{m\times n}$ $(r>0)$, 则存在 $S \in C_m^{m\times m}$ 和 n 阶置换矩阵 P 使得

$$SAP = \begin{pmatrix} \mathrm{I_r} & K \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad (K \in C^{r\times(n-r)})$$

⋆ 求 T 的方法

$$\begin{pmatrix} H \\ \mathrm{I_n} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{初等列变换}} \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{I_r} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ T \end{pmatrix}$$

例 1：设 $A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ -1 & 1 & 5 & 0 \end{pmatrix}$

(1) 求出 H, S； (2) 求出 P； (3) 求 T； (4) 求A的满秩分解.

例 1：设 $A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ -1 & 1 & 5 & 0 \end{pmatrix}$

(1) 求出 H, S; (2) 求出 P; (3) 求 T; (4) 求A的满秩分解.

解：(1) 因为

$$(A, \mathrm{I}_3) = \left(\begin{array}{cccc|ccc} 1 & -1 & -1 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 5 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \xrightarrow{r_3 + r_1}$$

$$\left(\begin{array}{cccc|ccc} 1 & -1 & -1 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 4 & 1 & 1 & 1 \end{array}\right) \xrightarrow{r_2 \times \frac{1}{2}}$$

$$\left(\begin{array}{cccc|ccc} 1 & -1 & -1 & 4 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 4 & 1 & 0 & 1 \end{array}\right) \xrightarrow{r_3 - r_2 \times 4}$$

$$\left(\begin{array}{cccc|ccc} 1 & -1 & -1 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \end{array}\right) \xrightarrow{r_1+r_2}$$

$$\left(\begin{array}{cccc|ccc} 1 & -1 & 0 & 5 & 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \end{array}\right)$$

所以

$$H = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$

(2) 取 $P = (e_1, e_3, e_2, e_4)$, 则

$$SAP = \begin{pmatrix} \mathrm{I}_2 & K \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & -1 & 5 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right)$$

(3) 由

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{c_2 \leftrightarrow c_3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 5 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow[\substack{c_4+c_1\times(-5)\\ c_4-c_2}]{c_3+c_1} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 0 & 1 & -5 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

从而

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

由例(3)已求出 S, T, 可得

$$S^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 5 & 1 \end{pmatrix}, \quad T^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

由(1)可知，$r_A = 2$，故取 S^{-1} 的前 2 列为 F， T^{-1} 的前 2 行为 G， 故

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

由(1)可知，$r_A = 2$，故取 S^{-1} 的前 2 列为 F， T^{-1} 的前 2 行为 G， 故

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

注：A 的满秩分解不唯一。

四、 改进方法

3. 定理：设 $A \in C_r^{m\times n}\,(r>0)$，且 A 的 Hermite 标准形为 H，取 A 的第 $j_1, j_2, \cdots, j_r$ 列构成 F，取 H 的前 r 行构成 G，则 $A = FG$ 即为 A 的一个满秩分解。

证明：取 $P_1 = (e_{j_1}, e_{j_2}, \cdots, e_{j_r})$, 则 $GP_1 = \mathrm{I_r}$. 从式 $A = FG$ 两边右乘 P_1， 得 $F = AP_1$， 可见 F 由 A 的第 $j_1, j_2, \cdots, j_r$ 列构成。又

$$r = \mathrm{rank}A = \mathrm{rank}(FG) \leq \mathrm{rank}F \leq r$$

， 所以 $F \in C_r^{m\times r}$. 显然 $G \in C_r^{r\times n}$.

例 3：求 $A=\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 4 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ -1 & 1 & 5 & 0 \end{pmatrix}$ 的满秩分解。

解：由例 1 已求得

$$A \xrightarrow{\text{初等行变换}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

可见，$j_1 = 1, j_2 = 3$, 故 A 的满秩分解为

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

§3.5 矩阵的奇异值分解

1. 定义3.9： 设 $A \in C_r^{m\times n}\,(r>0)$, A^HA 的特征值为

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > \lambda_{r+1} = \cdots = \lambda_n = 0$$

则称 $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}\,(i=1,2,\cdots,n)$ 为 A 的奇异值.

§3.5 矩阵的奇异值分解

1. 定义3.9： 设 $A \in C_r^{m\times n}$ $(r > 0)$, A^HA 的特征值为

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > \lambda_{r+1} = \cdots = \lambda_n = 0$$

   则称 $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$ 为 A 的奇异值.

2. 定义3.10： 设 $A, B \in C^{m\times n}$， 若存在 m 阶酉矩阵 U 和 n 阶酉矩阵 V， 使得 $U^HAV = B$， 则称 A 与 B 酉等价。

定理3.16 酉等价矩阵有相同的奇异值。

定理3.16 酉等价矩阵有相同的奇异值。

证明： 设 $U^HAV = B$， 则

$$B^HB = (U^HAV)^H(U^HAV) = V^HA^HAV$$

即 $B^HB \sim A^HA$, 从而他们有相同的特征值，所以 A 与 B 有相同的奇异值。

4. 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

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

其中 $\Sigma = diag(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r)$, σ_i 为 A 的非零奇异值。 而

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

称之为 A 的奇异值分解。

证明：存在 n 阶酉矩阵 V 使得

$$V^H A^H AV = diag(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n) = \begin{pmatrix} \Sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

将 V 分块为

$$V = (V_1, V_2), \quad (V_1 \in C^{n\times r},\ V_2 \in C^{n\times(n-r)})$$

得 $V_1^H A^H AV_1 = \Sigma^2$, $V_2^H A^H AV_2 = 0$, 于是

$$\Sigma^{-1} V_1^H A^H AV_1 \Sigma^{-1} = \mathrm{I_r},\ \ (AV_2)^H (AV_2) = 0$$

从而 $AV_2 = 0$.

又记 $U_1 = AV_1\Sigma^{-1}$, 则 $U_1^H U_1 = \mathrm{I_r}$, 即 U_1 的 r 个列是两两正交的单位向量，取 $U_2 \in C^{m\times(m-r)}$ 使 $U = (U_1, U_2)$ 为 m 阶酉矩阵, 即 $U_2^H U_1 = 0,\ U_2^H U_2 = \mathrm{I_{m-r}}$, 则有

$$U^H AV = \begin{pmatrix} U_1^H \\ U_2^H \end{pmatrix} A(V_1, V_2) = \begin{pmatrix} U_1^H AV_1 & U_1^H AV_2 \\ U_2^H AV_1 & U_2^H AV_2 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} U_1^H(U_1\Sigma) & 0 \\ U_2^H(U_1\Sigma) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

求 A 的奇异值分解步骤:

(1) 求酉矩阵 V 使 $V^H A^H A V = \begin{pmatrix} \Sigma^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$;

(2) 将 V 分块为

$$V = (V_1, V_2), \quad (V_1 \in C^{n\times r},\ V_2 \in C^{n\times(n-r)})$$

计算 $U_1 = AV_1\Sigma^{-1}$;

(3) 取 U_1 使 $U = (U_1, U_2)$ 为 m 阶酉矩, 则 $A = U \begin{pmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} V^H$ 为 A 的奇异值分解.

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

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

所以 A^TA 的特征值为 $\lambda_1=3$， $\lambda_2=1$， $\lambda_3=0$， 对应的特征向量为

$$p_1=\begin{pmatrix}2\\1\\1\end{pmatrix},\quad p_2=\begin{pmatrix}0\\-1\\1\end{pmatrix},\quad p_3=\begin{pmatrix}-1\\1\\1\end{pmatrix}$$

标准化得

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

使得 $V^HA^HAV=\begin{pmatrix}3 & & \\ & 1 & \\ & & 0\end{pmatrix}$.

计算

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

取$U = U_1$ 是酉矩阵。 故 A 的奇异值分解为

$$A = U\left(\Sigma\ 0\right)V^H = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$