定理：设 $A \in C_r^{m\times n}$，$\alpha_1 \geq \alpha_2 \geq \cdots \geq \alpha_r$ 是 A 的 r 个奇异值，那么存在 m 阶酉矩阵 U 和 n 阶酉矩阵 V 使得

$$U^H A V = \begin{bmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

其中 $\Delta = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & \\ & \alpha_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \alpha_r \end{bmatrix}$ 且满足 $\alpha_1 \geq \alpha_2 \geq \cdots \geq \alpha_r > 0$.

证明： 由于 $\mathrm{Rank}(A)=r$ ，所以 AA^H 的特征值为

$$\alpha_1^{\,2}\ge\alpha_2^{\,2}\ge\cdots\ge\alpha_r^{\,2}>0,\alpha_{r+1}^{\,2}=\alpha_{r+2}^{\,2}=\cdots=\alpha_m^{\,2}=0$$

因为 AA^H 是一个 H-阵，所以存在 m 阶酉矩阵 U 且满足

$$U^HAA^HU=\begin{bmatrix}\Delta^2 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}$$

将酉矩阵 U 按列进行分块，记 $U=\begin{bmatrix}U_1 & U_2\end{bmatrix}$，其中

$U_1\in U_r^{\,m\times r},U_2\in U_{m-r}^{\,m\times(m-r)}$.

于是有 $$\begin{bmatrix} U_1^H \\ U_2^H \end{bmatrix} AA^H \begin{bmatrix} U_1 & U_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Delta^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

从而有 $U_1^H AA^H U_1 = \Delta^2$， $U_2^H AA^H U_2 = 0$

$$U_2^H A = 0.$$

令 $\boxed{V_1 = A^H U_1 \Delta^{-1}}$ ，那么容易验证

$$V_1 \in U_r^{n\times r}, \quad V_1^H V_1 = I_r$$

选取 V_2 使得 $V=\begin{bmatrix} V_1 & V_2 \end{bmatrix}$ 是酉矩阵，则

$$0=V_1^H V_2=\Delta^{-1}U_1^H AV_2 \longrightarrow U_1^H AV_2=0$$

由上式可得

$$U^H AV=\begin{bmatrix} U_1^H \\ U_2^H \end{bmatrix} A\begin{bmatrix} V_1 & V_2 \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} U_1^H AV_1 & U_1^H AV_2 \\ U_2^H AV_1 & U_2^H AV_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$ 这里 $U_2^H A=0.$

我们称此定理为**奇异值分解定理**. 称表达式

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\begin{bmatrix} \Delta & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\boldsymbol{V}^H$$

为**矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解式 (SVD)**.

特别注意关系式 $\boxed{A=U\begin{bmatrix}\Delta & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}V^H}$

$$AA^H=U\begin{bmatrix}\Delta^2 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}_{m\times m}U^H \Longrightarrow AA^HU=U\begin{bmatrix}\Delta^2 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}_{m\times m}$$

$$A^HA=V\begin{bmatrix}\Delta^2 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}_{n\times n}V^H \Longrightarrow A^HAV=V\begin{bmatrix}\Delta^2 & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}_{n\times n},$$

由此可知 U 的列向量就是 AA^H 的标准正交特征向量；而 V 的列向量就是 A^HA 的标准正交特征向量，并且需满足 $V_1=A^HU_1\Delta^{-1}$. A 的奇异值分解不唯一！