第 6 章　奇异值分析

Beltrami (1835–1899) 和 Jordan (1838–1921) 二位学者被公认为是奇异值分解的创始人：Beltrami 于 1873 年发表了奇异值分解的第一篇论文 [38]，一年后 Jordan 发表了自己对奇异值分解的独立推导 [241]。现在，奇异值分解 (包括各种推广) 已是数值线性代数的最有用和最有效的工具之一，它在统计分析、信号与图像处理、系统理论和控制中被广泛地应用。

本章先在 6.1 节介绍数值算法的数值稳定性与条件数的概念，以引出矩阵的奇异值分解的必要性；然后在 6.2 节详细讨论奇异值分解 (定义、几何意义与唯一性)，奇异值的性质以及如何利用奇异值分解求解秩亏缺的最小二乘问题。6.3 节讨论奇异值分解的数值计算。从数值性能考虑，如果线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的形式，则 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解应该利用两个矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解进行计算，这正是 6.4 节的讨论焦点。6.5 节 ~ 6.7 节介绍奇异值分解的几种重要推广：6.5 节是矩阵对 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义奇异值分解，6.6 节是矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})$ 的约束奇异值分解，6.7 节则是结构奇异值。6.8 节分别专题介绍奇异值分解在电子线路、系统理论和信号处理中的几个典型应用。最后，6.9 节介绍广义奇异值分解的应用。

6.1　数值稳定性与条件数

在信息科学与工程等许多应用中，在对数据进行处理时，常常需要考虑一个重要问题：实际的观测数据存在某种程度的不确定性或误差，而且对数据进行的数值计算也总是伴随有误差。误差有何影响？数据处理和数值分析的算法稳定吗？为了回答这些问题，下面两个概念是极其重要的：

(1) 一种算法的数值稳定性；

(2) 所涉及问题的条件或扰动分析。

假定用 f 表示某个用数学定义的问题，此 f 作用于数据 $d\in D$ (D 表示某个数据组)，并产生一个解 $f(d)\in F$ (F 代表某个解集)。给定 $d\in D$，我们希望计算 $f(d)$。通常，只能够已知 d 的某个近似值 d^*，我们所能够做到的就是计算 $f(d^*)$。如果 $f(d^*)$ “逼近” $f(d)$，那么问题就是“良性”的。若 d^* 接近 d 时 $f(d^*)$ 有可能与 $f(d)$ 相差很大，我们就称问题是“病态”的。如果没有有关问题的更详细的信息，术语“逼近”就不可能准确地描述问题。

在扰动理论中，称求解 $f(d)$ 的某种算法是数值上稳定的，若它引入的对扰动的敏感

by szcf-weiya

度不会比原问题本身固有的敏感度更大。稳定性可以保证稍有扰动时问题的解接近无扰动时的解。更确切地说，令 f^* 表示用于实现或近似 f 的一算法，则 f^* 是稳定的，若对所有 $d \in D$，存在一接近 d 的 $d^* \in D$ 使得 $f(d^*)$ (稍有扰动的问题的解) 接近解 $f^*(d)$。

当然，我们不可能期望一求解病态问题的稳定算法会具有比数据无扰动时更高的精确度。然而，一种不稳定的算法甚至会对良性问题给出差的结果。因此，在确定某个解的精度时，有两个不同的因素必须考虑。首先，若算法是稳定的，则 $f^*(d)$ 应该接近 $f(d^*)$；其次，若问题是良性的，则 $f(d^*)$ 应该接近 $f(d)$。这样，$f^*(d)$ 就会接近 $f(d)$。

下面讨论数值稳定性的数学描述。

在工程中，经常会遇到线性方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$，其中，$n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是一个元素为已知数值的系数矩阵，$n \times 1$ 向量 $\boldsymbol{b}$ 为已知向量，而 $n \times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}$ 是一个待求解的未知参数向量。系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异时，由于独立的方程个数和未知参数的个数相等，故方程具有唯一的解，称为适定方程。很自然地，我们会对这个方程的解的稳定性产生兴趣：如果系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 (或) 向量 $\boldsymbol{b}$ 发生扰动，那么方程的解向量 $\boldsymbol{x}$ 会如何变化呢？还能够保持一定的稳定性吗？研究方程的解向量 $\boldsymbol{x}$ 如何受系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和系数向量 $\boldsymbol{b}$ 的元素微小变化 (扰动) 的影响，将得到描述矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个重要特征的数值，称为条件数 (condition number)。

为了分析的方便，先假定只存在向量 $\boldsymbol{b}$ 的扰动 $\delta\boldsymbol{b}$，而矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是稳定不变的。此时，精确的解向量 $\boldsymbol{x}$ 就会扰动为 $\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x}$，即有

跟A的奇异值有关

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} + \delta\boldsymbol{b} \tag{6.1.1}$$

这意味着

$$\delta\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\delta\boldsymbol{b} \tag{6.1.2}$$

因为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$。对式 (6.1.2) 应用矩阵范数的性质，得

$$\|\delta\boldsymbol{x}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}^{-1}\|\|\delta\boldsymbol{b}\| \tag{6.1.3}$$

对线性方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 也使用矩阵范数的相同性质，又有

$$\|\boldsymbol{b}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{x}\| \tag{6.1.4}$$

由式 (6.1.3) 和式 (6.1.4)，立即得到

$$\frac{\|\delta\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \leqslant (\|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{A}^{-1}\|)\frac{\|\delta\boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|} \tag{6.1.5}$$

然后，考虑扰动 $\delta\boldsymbol{A}$ 的影响。此时，线性方程变为

$$(\boldsymbol{A} + \delta\boldsymbol{A})(\boldsymbol{x} + \delta\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b}$$

by szcf-weiya

由上式可推导出

$$\begin{aligned}\delta\boldsymbol{x} &= [(\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A})^{-1}-\boldsymbol{A}^{-1}]\boldsymbol{b}\\ &= \{\boldsymbol{A}^{-1}[\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A})](\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A})^{-1}\}\boldsymbol{b}\\ &= -\boldsymbol{A}^{-1}\delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{b}\\ &= -\boldsymbol{A}^{-1}\delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x})\end{aligned}\tag{6.1.6}$$

由此得

$$\|\delta\boldsymbol{x}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}^{-1}\|\|\delta\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x}\|$$

即有

$$\frac{\|\delta\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x}\|} \leqslant (\|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{A}^{-1}\|)\frac{\|\delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|}\tag{6.1.7}$$

式 (6.1.5) 和式 (6.1.7) 表明，解向量 $\boldsymbol{x}$ 的相对误差与数值

$$\text{cond}(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|\cdot\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\tag{6.1.8}$$

成正比。式中，$\text{cond}(\boldsymbol{A})$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数，有时也用符号 $\kappa(\boldsymbol{A})$ 表示。

当系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 一个很小的扰动只引起解向量 $\boldsymbol{x}$ 很小的扰动时，就称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是“良态”矩阵 (well-conditioned matrix)。若系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 一个很小的扰动会引起解向量 $\boldsymbol{x}$ 很大的扰动，则称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是“病态”矩阵 (ill-conditioned matrix)。条件数刻画了求解线性方程时，误差经过矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的传播扩大为解向量的误差的程度，因此是衡量线性方程数值稳定性的一个重要指标。

进一步地，我们来分析误差在线性最小二乘问题中对解的影响。考虑超定的线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的求解，与前面的适定方程 (即方程的个数与未知数个数相同的方程) 不同，这里 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，且 $m>n$。由于方程个数多于未知参数个数，这类方程统称超定方程。超定方程存在唯一的线性最小二乘解，由

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}\tag{6.1.9}$$

即 $\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}$ 给出。容易证明 (详见后面的 6.2.2 小节)

$$\text{cond}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}) = [\text{cond}(\boldsymbol{A})]^2\tag{6.1.10}$$

由式 (6.1.5) 和式 (6.1.7) 可知，$\boldsymbol{b}$ 的误差 $\delta\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 的误差 $\delta\boldsymbol{A}$ 对超定方程式 (6.1.9) 的解 $\boldsymbol{x}$ 的误差的影响分别与 $\boldsymbol{A}$ 的条件数的平方成正比。就是说，超定方程 (6.1.9) 的条件数将呈平方关系增大。例如，考虑

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix}1 & 1\\ \delta & 0\\ 0 & \delta\end{bmatrix}$$

的情况，其中，δ 很小。$\boldsymbol{A}$ 的条件数为 $\delta\boldsymbol{A}^{-1}$ 数量级。由于

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix}1+\delta^2 & 1\\ 1 & 1+\delta^2\end{bmatrix}$$

by szcf-weiya

因而条件数变为 δ^{-2} 数量级。

另外一方面，如果我们利用 A 的 QR 分解来解超定方程 $Ax=b$ 的话，那么由于 $Q^{\mathrm{H}}Q=I$，所以

$$\mathrm{cond}(Q)=1 \tag{6.1.11}$$

$$\mathrm{cond}(A)=\mathrm{cond}(AQ)=\mathrm{cond}(A) \tag{6.1.12}$$

此时，b 和 A 的误差的影响将分别如式 (6.1.5) 和式 (6.1.7) 所示，与 A 的条件数成正比。

以上事实告诉我们，求解超定方程问题的 QR 分解方法具有比最小二乘方法更好的数值稳定性 (更小的条件数)。

若条件数“很大”，线性方程问题便称为 (相对于范数 $\|\cdot\|$) 病态的。此时，对于一接近真实 b 的 b^*，由于条件数很大，所以与 b^* 对应的解就会远离对应于 b 的解。解决这类病态问题的一种比 QR 分解更加有效的方法是总体最小二乘法 (将在第 7 章介绍)，它的基础就是下一节要讨论的矩阵的奇异值分解。事实上，正如以后几节将看到的那样，矩阵的奇异值分解已被广泛应用于解决工程学科中的许多重要问题。

6.2 奇异值分解

奇异值分解 (singular value decomposition, SVD) 是现代数值分析 (尤其是数值计算) 的最基本和最重要的工具之一。本节介绍奇异值分解的定义、几何解释以及奇异值的性质。

6.2.1 奇异值分解及其解释

奇异值分解最早是由 Beltrami 在 1873 年对实正方矩阵提出来的 [38]。Beltrami 从双线性函数

$$f(x,y)=\underset{1\times n}{x^{\mathrm{T}}}A\underset{n\times 1}{y},\quad A\in R^{n\times n}$$

出发，通过引入线性变换

$$x=\underset{n\times n\ \ n\times 1}{U\xi},\qquad y=V\eta$$

将双线性函数变为

$$f(x,y)=\xi^{\mathrm{T}}S\eta$$

式中

$$S=U^{\mathrm{T}}AV \qquad U^{\mathrm{T}}=U^{-1} \tag{6.2.1}$$

Beltrami 观测到，如果约束 U 和 V 为正交矩阵，则它们的选择各存在 n^2-n 个自由度。他提出利用这些自由度使矩阵 S 的对角线以外的元素全部为零，即矩阵 $S=\Sigma=\mathrm{diag}(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_n)$ 为对角矩阵。于是，用 U 和 V^{T} 分别左乘和右乘式 (6.2.1)，并利用 U 和 V 的正交性，立即得到

$$A=U\Sigma V^{\mathrm{T}} \tag{6.2.2}$$

by szcf-weiya

这就是 Beltrami 于 1873 年得到的实正方矩阵的奇异值分解 [38]。1874 年，Jordan 也独立地推导出了实正方矩阵的奇异值分解 [241]。有关奇异值分解的这段发明历史，可参见 MacDuffee 的书 [294,p.78] 或 Stewart 的评述论文 [433]。文献 [433] 还详细地评述了奇异值分解的整个早期历史。

后来，Autonne [22] 于 1902 年把奇异值分解推广到复正方矩阵；Eckart 与 Young [141] 于 1939 年又进一步把它推广到一般的长方形矩阵。因此，现在常将任意复长方矩阵的奇异值分解定理称为 Autonee-Eckart-Young 定理，详见下述。

定理 6.2.1 (矩阵的奇异值分解)　令 $\boldsymbol{A} \in R^{m\times n}$(或 $C^{m\times n}$)，则存在正交 (或酉) 矩阵 $\boldsymbol{U} \in R^{m\times m}$(或 $C^{m\times m}$) 和 $\boldsymbol{V} \in R^{n\times n}$(或 $C^{n\times n}$) 使得　对任何矩阵都成立

$$\underline{\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{T}}\ (\text{或}\,\boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}})} \tag{6.2.3}$$

式中

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \tag{6.2.4}$$

且 $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r)$，其对角元素按照顺序　矩阵$A^TA$的特征值的平方根

$$\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0, \qquad r = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) \tag{6.2.5}$$

排列。

以上定理最早是 Eckart 与 Young [141] 于 1939 年证明的，但证明较繁杂。下面采用的是 Klema 与 Laub [256] 的比较简单的证明。

证明　因为 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} \geqslant 0$，所以 $\sigma(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}) \subseteq [0, +\infty)$。记 $\sigma(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}) = \{\sigma_1^2, \sigma_2^2, \cdots, \sigma_n^2\}$，并将它们的顺序安排成 $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0 = \sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_n$。令 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_n$ 是对应的正交特征向量组，而且

$A^HA = V\Sigma^T\Sigma V^T$

$\underline{n\times n}$

$$\boldsymbol{V}_1 = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_r] \tag{6.2.6}$$

$$\boldsymbol{V}_2 = [\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{v}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{v}_n] \tag{6.2.7}$$

于是，若 $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r)$，则有 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AV}_1 = \boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}_1^2$，由此得到

$AA^H = U\Sigma\Sigma^TU^T$

$$\boldsymbol{\Sigma}_1^{-1}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AV}_1\boldsymbol{\Sigma}_1^{-1} = \boldsymbol{I} \tag{6.2.8}$$

$m\times m$

另有 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AV}_2 = \boldsymbol{V}_2 \times \boldsymbol{O}$ 使得 $\boldsymbol{V}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AV}_2 = \boldsymbol{O}$，因此 $\boldsymbol{AV}_2 = \boldsymbol{O}$。令 $\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{AV}_1\boldsymbol{\Sigma}_1^{-1}$，则由式 (6.2.8)，我们有 $\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{I}$。选择任意一 $\boldsymbol{U}_2$，使得 $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{U}_1, \boldsymbol{U}_2]$ 正交。于是

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AV} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AV}_1 & \boldsymbol{U}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AV}_2 \\ \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AV}_1 & \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AV}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} = \boldsymbol{\Sigma}$$

从而得到所希望的结果 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{T}}$。 ■

数值 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r$ 连同 $\sigma_{r+1} = \sigma_{r+2} = \cdots = \sigma_n = 0$ 一起称作矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值。

定义 6.2.1　矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的奇异值 σ_i 称为单奇异值，若 $\sigma_i \neq \sigma_j$, $\forall\, j \neq i$。

by szcf-weiya

下面是关于奇异值和奇异值分解的几点解释和标记。

(1) $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{V}$ 为酉矩阵，用 $\boldsymbol{V}$ 右乘式 (6.2.3)，得 $\boldsymbol{AV} = \boldsymbol{U\Sigma}$，其列向量形式为

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i = \begin{cases} \sigma_i \boldsymbol{u}_i, & i = 1, 2, \cdots, r \\ 0, & i = r+1, r+2, \cdots, n \end{cases} \tag{6.2.9}$$

因此，$\boldsymbol{V}$ 的列向量 $\boldsymbol{v}_i$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的右奇异向量 (right singular vector)，$\boldsymbol{V}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的右奇异向量矩阵 (right singular vector matrix)。

(2) $m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{U}$ 是酉矩阵，用 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$ 左乘式 (6.2.3)，得 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{\Sigma V}$，其列向量形式为

$$\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \begin{cases} \sigma_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}, & i = 1, 2, \cdots, r \\ 0, & i = r+1, r+2, \cdots, n \end{cases} \tag{6.2.10}$$

因此，$\boldsymbol{U}$ 的列向量 $\boldsymbol{u}_i$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的左奇异向量 (left singular vector)，并称 $\boldsymbol{U}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的左奇异向量矩阵 (left singular vector matrix)。

(3) 用 $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}$ 左乘式 (6.2.9)，并注意到 $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i = 1$，易得

$$\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i = \sigma_i, \quad i = 1, 2, \cdots, \min\{m, n\} \tag{6.2.11}$$

或用矩阵形式写成

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma}_1 = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_n \end{bmatrix} \tag{6.2.12}$$

式 (6.2.3) 和式 (6.2.11) 是矩阵奇异值分解的两种定义方式。事实上，式 (6.2.3) 很容易由式 (6.2.11) 导出。由于 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 分别是 $m \times m$ 和 $n \times n$ 酉矩阵，满足 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}_m$ 和 $\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}_n$，所以在式 (6.2.11) 两边左乘 $\boldsymbol{U}$ 和右乘 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$ 后，立即得式 (6.2.3)。这也可以看作是定理 6.2.1 的另一种推导。

(4) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解式 (6.2.3) 可以改写成向量表达形式：

$$\boldsymbol{A} = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}} \tag{6.2.13}$$

这种表达有时称为 $\boldsymbol{A}$ 的并向量 (奇异值) 分解 (dyadic decomposition) [184]。

(5) 由式 (6.2.3) 易得

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}^2\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.14}$$

这表明，$m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值 σ_i 是矩阵乘积 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的特征值 (这些特征值是非负的) 的正平方根。

(6) 当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩 $r = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) < \min\{m, n\}$ 时，由于奇异值 $\sigma_{r+1} = \sigma_{r+2} = \cdots = \sigma_h = 0$，$h = \min\{m, n\}$，故奇异值分解公式 (6.2.3) 可以简化为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}_r\boldsymbol{\Sigma}_r\boldsymbol{V}_r^{\mathrm{H}} \tag{6.2.15}$$

by szcf-weiya

式中

$$U_r=[u_1,u_2,\cdots,u_r],\quad V_r=[v_1,v_2,\cdots,v_r],\quad \Sigma_r=\mathrm{diag}(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_r)$$

式 (6.2.15) 称为矩阵 A 的截尾奇异值分解 (truncated SVD) 或薄奇异值分解 (thin SVD)。与之形成对照，式 (6.2.3) 则称为全奇异值分解 (full SVD)。

(7) 如果矩阵 $A_{m\times n}$ 具有秩 r，则

① $m\times m$ 酉矩阵 U 的前 r 列组成矩阵 A 的列空间的标准正交基。

② $n\times n$ 酉矩阵 V 的前 r 列组成矩阵 A 的行空间 (或 A^{H} 的列空间) 的标准正交基。

③ V 的后 $n-r$ 列组成矩阵 A 的零空间的标准正交基。

④ U 的后 $m-r$ 列组成矩阵 A^{H} 的零空间的标准正交基。

顾名思义，矩阵 A 的奇异值应该能够描述 A 的奇异性质。下面的定理从数学上严格地叙述了这一事实。

定理 6.2.2 [184] 令 $A\in C^{m\times n}$ $(m>n)$ 的奇异值为

$$\sigma_1\geqslant\sigma_2\geqslant\cdots\geqslant\sigma_n\geqslant 0$$

则

$$\sigma_k=\min_{E\in C^{m\times n}}\{\|E\|_{\mathrm{F}}:\mathrm{rank}(A+E)\leqslant k-1\},\qquad k=1,2,\cdots,n \tag{6.2.16}$$

并且存在一满足 $\|E_k\|_{\mathrm{F}}=\sigma_k$ 的误差矩阵 E 使得

$$\mathrm{rank}(A+E_k)=k-1,\qquad k=1,2,\cdots,n$$

定理 6.2.2 表明，奇异值与使得原矩阵 A 的秩减小 1 的误差矩阵 E_k 的 Frobenius 范数相等。如果原 $n\times n$ 矩阵 A 是正方的，并且具有一个零奇异值，则定理 6.2.2 表明，该矩阵的秩减小 1 的误差矩阵 E 的 Frobenius 范数等于零。这意味着，误差矩阵必然是一个零矩阵。换句话说，根据定理 6.2.2，当原 $n\times n$ 矩阵 A 有一个零奇异值时，该矩阵的秩 $\mathrm{rank}(A)\leqslant n-1$，即原矩阵 A 本来就不是满秩的。因此，如果一个正方矩阵具有零奇异值，则该矩阵必定是奇异矩阵。从这个角度讲，零奇异值刻画了矩阵 A 的奇异性质。一个正方矩阵只要有一个奇异值接近零，那么这个矩阵就接近于奇异矩阵。推而广之，一个非正方的矩阵如果有奇异值为零，则说明这个长方矩阵一定不是列满秩的或者行满秩的。这种情况称为矩阵的秩亏缺，它相对于矩阵的满秩是一种奇异现象。总之，无论是正方还是长方矩阵，零奇异值都刻画矩阵的奇异性。这就是矩阵奇异值的内在涵义。

下面以矩阵方程 (6.1.2) 的求解为例，考查奇异值分解的几何意义。

首先，我们可以把

$$\tilde{x}=V^{\mathrm{H}}x\qquad\text{或}\qquad x=V\tilde{x} \tag{6.2.17}$$

看作是利用 V 进行的一种正交变换 (也可认为是一种旋转)，将 x 的各点旋转为 $\tilde{x}$ 的各点。同样地，我们也可以利用 U^{H} 对 b 作正交变换：

$$\tilde{b}=U^{\mathrm{H}}b \tag{6.2.18}$$

by szcf-weiya

即将 b 的各点旋转一定角度后变为 $\tilde{b}$ 上的各点。现在，将奇异值分解式 (6.2.3) 代入式 (6.1.2)，并利用式 (6.2.17) 和式 (6.2.18)，可得到

$$\tilde{\boldsymbol{b}} = \boldsymbol{\Sigma}\tilde{\boldsymbol{x}} \longrightarrow \tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\tilde{\boldsymbol{b}}$$

于是，线性方程组 (6.1.2) 的求解过程可以解释为一系列的线性变换操作，即

$$\boldsymbol{b} \xrightarrow{\boldsymbol{U}} \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b} = \tilde{\boldsymbol{b}} \xrightarrow{\boldsymbol{\Sigma}} \boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\tilde{\boldsymbol{b}} = \tilde{\boldsymbol{x}} \xrightarrow{\boldsymbol{V}} \boldsymbol{V}\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x}$$

注意，$\boldsymbol{\Sigma}$ 的广义逆矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}$ 可直接计算为

$$\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \tag{6.2.19}$$

其中

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \mathrm{diag}(1/\sigma_1, 1/\sigma_2, \cdots, 1/\sigma_r) \tag{6.2.20}$$

C^n C^m $x \to Ax$

把 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 视作从 n 维 (复数) 向量空间 C^n 到 m 维 (复数) 向量空间 C^m 的线性映射有时是很方便的。此时，关于奇异值分解的唯一性，有以下结果 [518]。

(1) 非零奇异值的个数 r 和它们的值 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r$ 相对于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是唯一确定的。

(2) 若 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = r$，则满足 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$ 的 $\boldsymbol{x}(\in C^n)$ 的集合即 $\boldsymbol{A}$ 的零空间 Null $\boldsymbol{A}(\subseteq C^n)$ 是 $n-r$ 维的，因此可选择正交基 $\{\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{v}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{v}_n\}$ 作为 $\boldsymbol{A}$ 在 C^n 内的零空间。从这个意义上讲，$\boldsymbol{V}$ 的列向量张成的 C^n 的子空间 Null($\boldsymbol{A}$) 是唯一确定的，但是各个向量只要能组成该子空间的正交基，它们就可以自由地选择。

(3) 可以表示成 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{Ax}$ 的 $\boldsymbol{y}(\in C^m)$ 的集合组成 $\boldsymbol{A}$ 的像空间 Im$\boldsymbol{A}$，它是 r 维的，而 Im$\boldsymbol{A}$ 的正交补空间 $(\mathrm{Im}\boldsymbol{A})^{\perp}$ 是 $m-r$ 维的，因此可选择 $\{\boldsymbol{u}_{r+1}, \boldsymbol{u}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{u}_m\}$ 作为 Im$\boldsymbol{A}$ 在 C^m 内的正交补空间内的正交基。由 $\boldsymbol{U}$ 的列向量 $\boldsymbol{u}_{r+1}, \boldsymbol{u}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{u}_m$ 张成的 C^m 的子空间 $(\mathrm{Im}\boldsymbol{A})^{\perp}$ 是唯一确定的。

(4) 若 σ_i 是单奇异值 (即 $\sigma_i \neq \sigma_j$, $\forall\, j \neq i$)，则 $\boldsymbol{v}_i$ 和 $\boldsymbol{u}_i$ 除相差一相角 ($\boldsymbol{A}$ 为实数矩阵时，相差一符号) 外是唯一确定的。也就是说，$\boldsymbol{v}_i$ 和 $\boldsymbol{u}_i$ 同时乘以 $\mathrm{e}^{\mathrm{j}\theta}$ ($\mathrm{j} = \sqrt{-1}$，且 θ 为实数) 后，它们仍然分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的右和左奇异向量。

6.2.2 奇异值的性质

下面分几种情况，分别详细讨论奇异值的各种性质。为统一计，令矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为 $m \times n$ 矩阵，并且 $r_A = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$，$p = \min\{m, n\}$。

设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值排列为

$$\sigma_{\max} = \sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_{p-1} \geqslant \sigma_p = \sigma_{\min} \geqslant 0 \tag{6.2.21}$$

并且用 $\sigma_i(\boldsymbol{B})$ 表示矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的第 i 个大奇异值。

矩阵的各种变形与奇异值的变化有以下关系。

by szcf-weiya

(1) $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的共轭转置 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的奇异值分解为

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.22}$$

即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 具有完全相同的奇异值。

(2) $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{Q}$ 分别为 $m \times m$ 和 $n \times n$ 酉矩阵时，$\boldsymbol{PAQ}^{\mathrm{H}}$ 的奇异值分解由

$$\boldsymbol{PAQ}^{\mathrm{H}} = \tilde{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{\Sigma}\tilde{\boldsymbol{V}}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.23}$$

给出，其中，$\tilde{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{PU}$，$\tilde{\boldsymbol{V}} = \boldsymbol{QV}$。就是说，矩阵 $\boldsymbol{PAQ}^{\mathrm{H}}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 具有相同的奇异值，即奇异值具有酉不变性，但奇异向量不同。

(3) $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}$ 的奇异值分解分别为

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}, \qquad \boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.24}$$

其中

$$\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \cdots, \sigma_r^2, \overbrace{0, \cdots, 0}^{n-r\uparrow}) \tag{6.2.25}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}} = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \cdots, \sigma_r^2, \overbrace{0, \cdots, 0}^{m-r\uparrow}) \tag{6.2.26}$$

注：$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}$ 均为 Hermitian 矩阵。Hermitian 矩阵的奇异值分解与特征值分解是一致的。

(4) $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解与 $n \times m$ 维 Moore-Penrose 广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 之间存在下列关系：

$$\boldsymbol{A}^{\dagger} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.27}$$

其中，$\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}$ 由式 (6.2.19) 给定。

证明　前三个性质显然。为了证明性质 (4)，令 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$。于是，有

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{AGA} &= (\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}) \\
&= \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A} \\
\boldsymbol{GAG} &= (\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}) \\
&= \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{G} \\
\boldsymbol{AG} &= \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = (\boldsymbol{AG})^{\mathrm{H}} \\
\boldsymbol{GA} &= \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} = (\boldsymbol{GA})^{\mathrm{H}}
\end{aligned}$$

即 G 满足 Moore-Penrose 广义逆矩阵的定义。因此，$\boldsymbol{G}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 广义逆矩阵，即性质 (4) 成立。 ■

虽然 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 相对于 $\boldsymbol{A}$ 不是唯一确定的，但广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 是唯一确定的。特别地，若 A 是一个正方的非奇异矩阵，则 $\boldsymbol{A}^{\dagger} = \boldsymbol{A}^{-1}$。因此，在这一情况下，如果 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值是 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n$，那么 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的奇异值就是 $1/\sigma_1, 1/\sigma_2, \cdots, 1/\sigma_n$。

by szcf-weiya

关于矩阵和它的子矩阵的奇异值之间的关系，有下面的定理，常被称为奇异值交织定理 (interlacing theorem for singular values)。

定理 6.2.3[225, Eq. (3.1.3)],[233] 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，其奇异值 $\sigma_1\geqslant\sigma_2\geqslant\cdots\geqslant\sigma_r$，其中，$r=\min\{m,n\}$。若 $p\times q$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的子矩阵，其奇异值 $\gamma_1\geqslant\gamma_2\geqslant\cdots\geqslant\gamma_{\min\{p,q\}}$，则

$$\sigma_i\geqslant\gamma_i,\quad i=1,2,\cdots,\min\{p,q\} \tag{6.2.28}$$

并且

$$\gamma_i\geqslant\sigma_{i+(m-p)+(n-q)},\quad i\leqslant\min\{p+q-m,p+q-n\} \tag{6.2.29}$$

矩阵的奇异值与矩阵的范数、行列式、条件数、特征值等有着密切的关系。

1/ 奇异值与范数的关系

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱范数等于 $\boldsymbol{A}$ 的最大奇异值，即

$$\|\boldsymbol{A}\|_{\text{spec}}=\sigma_1 \tag{6.2.30}$$

根据矩阵的奇异值分解定理，并注意到矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Frobenius 范数 $\|\boldsymbol{A}\|_{\text{F}}$ 是酉不变的，即 $\|\boldsymbol{U}^{\text{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}\|_{\text{F}}=\|\boldsymbol{A}\|_{\text{F}}$，故有

$$\|\boldsymbol{A}\|_{\text{F}}=\left[\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\right]^{1/2} \tag{6.2.31}$$

$$=\|\boldsymbol{U}^{\text{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}\|_{\text{F}}=\|\boldsymbol{\Sigma}\|_{\text{F}}$$

$$=\sqrt{\sigma_1^2+\sigma_2^2+\cdots+\sigma_r^2} \tag{6.2.32}$$

即是说，任何一个矩阵的 Frobenius 范数等于该矩阵所有非零奇异值平方和的正平方根。

考虑矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩 k 近似，并将其记作 $\boldsymbol{A}_k$，其中，$k<r=\text{rank}(\boldsymbol{A})$。矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 定义如下：

$$\boldsymbol{A}_k=\sum_{i=1}^{k}\sigma_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\text{H}},\qquad k<r$$

则 $\boldsymbol{A}$ 与秩为 k 的任一矩阵 $\boldsymbol{B}$ 之差的 l_1 和 Frobineus 范数分别为

$$\min_{\text{rank}(\boldsymbol{B})=k}\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|_1=\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}_k\|_1=\sigma_{k+1} \tag{6.2.33}$$

和

$$\min_{\text{rank}(\boldsymbol{B})=k}\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|_{\text{F}}^2=\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}_k\|_{\text{F}}^2=\sigma_{k+1}^2+\sigma_{k+2}^2+\cdots+\sigma_r^2 \tag{6.2.34}$$

这一重要结果是许多概念和应用的基础。例如，总体最小二乘、数据压缩、图像增强、动态系统实现理论，以及线性方程的求解等问题都需要用一个低秩矩阵近似 $\boldsymbol{A}$。

by szcf-weiya

2. 奇异值与行列式的关系

→ 酉矩阵 $|\det(A)|=1$

设 $\boldsymbol{A}$ 是 $n\times n$ 正方矩阵。由于酉矩阵的行列式之绝对值等于 1，所以由定理 6.2.1 有

$$|\det(\boldsymbol{A})| = |\det \boldsymbol{\Sigma}| = \sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_n \tag{6.2.35}$$

若所有 σ_i 都不等于零，则 $|\det(\boldsymbol{A})|\neq 0$，这表明 $\boldsymbol{A}$ 是非奇异的。如果至少有一个 $\sigma_i(i>r)$ 等于零，便有 $\det(\boldsymbol{A})=0$，即 $\boldsymbol{A}$ 是奇异的。这就是之所以把全部 σ_i 值统称为奇异值的原因。综合式 (6.2.34) 和式 (6.2.35)，对于一个 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，下列不等式成立：

$$\left.\begin{aligned}
n\sigma_1 &\geqslant \|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}} \geqslant \sigma_1\\
\sigma_1^n &\geqslant \sigma_1^{n-1}\sigma_n \geqslant |\det(\boldsymbol{A})| \geqslant \sigma_n^n\\
\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}} &\geqslant \sigma_1 \geqslant |\det(\boldsymbol{A})|^{1/n}\\
|\det(\boldsymbol{A})|^{1/n} &\geqslant \sigma_n \geqslant |\det(\boldsymbol{A})|/\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}}^{n-1}\\
\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}}^n/|\det(\boldsymbol{A})| &\geqslant \sigma_1/\sigma_n \geqslant \max\left\{1, \frac{1}{n}\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}}/|\det(\boldsymbol{A})|^{1/n}\right\}
\end{aligned}\right\} \tag{6.2.36}$$

这些不等式虽然是粗略的评价，但有时是有用的。

3. 奇异值与条件数的关系

对于一个 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，其条件数也可以利用奇异值定义为

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}) = \sigma_1/\sigma_p,\qquad p=\min\{m,n\} \tag{6.2.37}$$

由定义式 (6.2.37) 可以看出，条件数是一个大于或等于 1 的正数，因为 $\sigma_1\geqslant\sigma_p$。显然，由于至少有一个奇异值 $\sigma_p=0$，故奇异矩阵的条件数为无穷大，而条件数虽然不是无穷大，但却很大时，就称 $\boldsymbol{A}$ 是接近奇异的。这意味着，当条件数很大时，$\boldsymbol{A}$ 的行向量或列向量的线性相关性很强。另由定义式 (6.1.8) 易知，正交或酉矩阵 $\boldsymbol{V}$ 的条件数等于 1。从这个意义上讲，正交或酉矩阵是“理想条件”的。式 (6.2.37) 也可用作条件数 $\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})$ 的评价。

$|\det(A)|=1$

考虑超定方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$。此时，由于 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解为

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^2\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.38}$$

即矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 的最大和最小奇异值分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最大和最小奇异值的平方，故

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}) = \frac{\sigma_1^2}{\sigma_n^2} = [\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})]^2 \tag{6.2.39}$$

换言之，矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 的条件数是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数的平方倍。

4. 奇异值与特征值的关系

设 $n\times n$ 正方对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ $(|\lambda_1|\geqslant|\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant|\lambda_n|)$，奇异值为 $\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_n$ $(\sigma_1\geqslant\sigma_2\geqslant\cdots\geqslant\sigma_n\geqslant 0)$，则 $\sigma_1\geqslant|\lambda_i|\geqslant\sigma_n\,(i=1,2,\cdots,n)$，$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})\geqslant|\lambda_1|/|\lambda_n|$。

特别值得指出的是，奇异值分解提供了在实际信号处理中发生的一些重要问题的定量答案。

问题 1：一矩阵与低秩矩阵是如何接近的？

答案：如果 $A \in C^{m\times n}$ 具有奇异值

$$\sigma_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > \sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_n = 0$$

则 $\text{rank}(A) = r$，且

$$\min_{\text{rank}(B)\leqslant r} \|A - B\|_F^2 = \sigma_{r+1}^2$$

特别地，若 $A \in C^{n\times n}$ 非奇异，则 σ_n 是到奇异矩阵集合的距离。因此，$1/\text{cond}(A) = \sigma_n/\sigma_1 = \sigma_n/\|A\|_F$ 是 A 接近奇异的相对测度。

问题 2：一矩阵的值域与零空间是什么？

答案：如果 $U = [u_1, u_2, \cdots, u_m]$ 和 $V = [v_1, v_2, \cdots, v_n]$ 分别是左和右奇异向量矩阵的列分块，并且 $\text{rank}(A) = r$，则 $\text{Null}(A) = \text{Span}\{v_{r+1}, v_{r+2}, \cdots, v_n\}$，$\text{Range}(A) = \text{Span}\{u_1, u_2, \cdots, u_r\}$。即是说，一矩阵的值域是与非零奇异值对应的奇异向量张成的子空间，而零空间则是与零奇异值对应的奇异向量张成的子空间。

问题 3：怎样度量 C^n 中两个 k 维子空间是否接近？

答案：假定 $n \times k$ 矩阵 $Y = [y_1, y_2, \cdots, y_k]$ 和 $Z = [z_1, z_2, \cdots, z_k]$ 具有正交列，并且 $S_1 = \text{Span}(Y)$ 和 $S_2 = \text{Span}(Z)$ 分别是矩阵 Y 和 Z 的列向量张成的子空间。若 $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_k$ 是 $Y^H Z$ 的奇异值，则

$$\text{dist}(S_1, S_2) = \min_{y\in S_1,\, z\in S_2,\, \|z\|_2=1} \|y - z\|_2 = \sqrt{1 - \sigma_1^2}$$

上述问题答案的证明可在文献 [184] 中找到。

6.2.3 奇异值的性质汇总

为了方便读者参考，下面汇总了矩阵的奇异值的性质。

1. 奇异值服从的等式关系 [290] 对实对称，即 $A^T = A^H$

(1) 矩阵 $A_{m\times n}$ 和其复共轭转置矩阵 A^H 具有相同的奇异值。

(2) 矩阵 $A_{m\times n}$ 的非零奇异值是 AA^H 或者 $A^H A$ 的非零特征值的正平方根。

(3) $\sigma > 0$ 是矩阵 $A_{m\times n}$ 的单奇异值，当且仅当 σ^2 是 AA^H 或 $A^H A$ 的单特征值。

(4) 若 $p = \min\{m, n\}$，且 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_p$ 是矩阵 $A_{m\times n}$ 的奇异值，则

$$\text{tr}\left(A^H A\right) = \sum_{i=1}^{p} \sigma_i^2$$

(5) 矩阵行列式的绝对值等于矩阵奇异值之乘积，即 $|\det(A)| = \sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_n$。

(6) 矩阵 A 的谱范数等于 A 的最大奇异值，即 $\|A\|_{\text{spec}} = \sigma_{\max}$。

by szcf-weiya

(7) 若 $m \geqslant n$，则对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$，有

$$\sigma_{\min}(\boldsymbol{A}) = \min\left\{\left(\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}\right)^{1/2} : \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}\right\}$$
$$= \min\left\{(\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^{1/2} : \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x} = 1,\ \boldsymbol{x} \in C^n\right\}$$

(8) 若 $m \geqslant n$，则对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$，有

$$\sigma_{\max}(\boldsymbol{A}) = \max\left\{\left(\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}\right)^{1/2} : \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}\right\}$$
$$= \max\left\{(\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^{1/2} : \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x} = 1,\ \boldsymbol{x} \in C^n\right\}$$

(9) 若 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则

$$\frac{1}{\sigma_{\min}(\boldsymbol{A})} = \max\left\{\left(\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}\right)^{1/2} : \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0},\ \boldsymbol{x} \in C^n\right\}$$

(10) 若 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$ 是 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解，则 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵

$$\boldsymbol{A}^{\dagger} = \boldsymbol{V}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_1^{-1} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$$

(11) 若 $\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_p$ 是 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的非零奇异值 (其中，$p=\min\{m,n\}$)，则矩阵 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$ 具有 $2p$ 个非零奇异值 $\sigma_1,\cdots,\sigma_p,-\sigma_1,\cdots,-\sigma_p$ 和 $|m-n|$ 个零奇异值。

2. 奇异值服从的不等式关系 [224],[225],[270],[81],[290]

(1) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是 $m\times n$ 矩阵，则对于 $1\leqslant i,j\leqslant p$, $i+j\leqslant p+1$ ($p=\min\{m,n\}$)，有

$$\sigma_{i+j-1}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \leqslant \sigma_i(\boldsymbol{A}) + \sigma_j(\boldsymbol{B})$$

特别地，当 $j=1$ 时，$\sigma_i(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \leqslant \sigma_i(\boldsymbol{A}) + \sigma_1(\boldsymbol{B})$, $i=1,2,\cdots,p$ 成立。

(2) 对矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n},\boldsymbol{B}_{m\times n}$，有

$$\sigma_{\max}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \leqslant \sigma_{\max}(\boldsymbol{A}) + \sigma_{\max}(\boldsymbol{B})$$

(3) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是 $m\times n$ 矩阵，则

$$\sum_{j=1}^{p}[\sigma_j(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) - \sigma_j(\boldsymbol{A})]^2 \leqslant \|\boldsymbol{B}\|_{\mathrm{F}}^2, \quad p=\min\{m,n\}$$

by szcf-weiya

(4) 若 $\boldsymbol{A}_{m\times m}=[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_m]$ 的奇异值 $\sigma_1(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{A})\geqslant\cdots\geqslant\sigma_m(\boldsymbol{A})$，则

$$\sum_{j=1}^{k}[\sigma_{m-k+j}(\boldsymbol{A})]^2\leqslant\sum_{j=1}^{k}\boldsymbol{a}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_j\leqslant\sum_{j=1}^{k}[\sigma_j(\boldsymbol{A})]^2,\quad k=1,2,\cdots,m$$

(5) 若 $p=\min\{m,n\}$，且 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 和 $\boldsymbol{B}_{m\times n}$ 的奇异值排列为 $\sigma_1(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{A})\geqslant\cdots\geqslant\sigma_p(\boldsymbol{A})$，$\sigma_1(\boldsymbol{B})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{B})\geqslant\cdots\geqslant\sigma_p(\boldsymbol{B})$ 和 $\sigma_1(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\geqslant\cdots\geqslant\sigma_p(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})$，则

$$\sigma_{i+j-1}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}})\leqslant\sigma_i(\boldsymbol{A})\sigma_j(\boldsymbol{B}),\quad 1\leqslant i,j\leqslant p,\ i+j\leqslant p+1$$

(6) 设 $m\times(n-1)$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是删去 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 任意一列得到的矩阵，并且它们的奇异值都按照非降顺序排列，则

$$\sigma_1(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_1(\boldsymbol{B})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{B})\geqslant\cdots\geqslant\sigma_h(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_h(\boldsymbol{B})\geqslant 0$$

式中，$h=\min\{m,n-1\}$。

(7) 设 $(m-1)\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是删去 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 任意一行得到的矩阵，并且它们的奇异值都按照非降顺序排列，则

$$\sigma_1(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_1(\boldsymbol{B})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{B})\geqslant\cdots\geqslant\sigma_h(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_h(\boldsymbol{B})\geqslant 0$$

式中，$h=\min\{m,n-1\}$。

(8) 矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的最大奇异值满足不等式

$$\sigma_{\max}(\boldsymbol{A})\geqslant\left[\frac{1}{n}\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})\right]^{1/2}$$

6.2.4 秩亏缺最小二乘解

在奇异值分析的应用中，常常需要用一个低秩的矩阵逼近一个含噪声或扰动的矩阵。下面的定理给出了逼近质量的评价。

定理 6.2.4 令 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n}$ 的奇异值分解由 $\boldsymbol{A}=\sum_{i=1}^{p}\sigma_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ 给出，其中，$p=\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$。

若 $k<p$，并且 $\boldsymbol{A}_k=\sum_{i=1}^{k}\sigma_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$，则逼近质量可分别使用谱范数和 Frobenius 范数度量：

$$\min_{\mathrm{rank}(\boldsymbol{B})=k}\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|_{\mathrm{spec}}=\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}_k\|_{\mathrm{spec}}=\sigma_{k+1}\tag{6.2.40}$$

$$\min_{\mathrm{rank}(\boldsymbol{B})=k}\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|_{\mathrm{F}}=\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}_k\|_{\mathrm{F}}=\sqrt{\sum_{i=k+1}^{q}\sigma_i^2}\tag{6.2.41}$$

式中，$q=\min\{m,n\}$。

证明 详见文献 [140]，[315] 或 [233]。

在信号处理和系统理论中，最常见的线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 是超定的和非满秩即秩亏缺的，也就是说，矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{m\times n}$ 的行数 m 比列数 n 大，且 $r=\text{rank}(\boldsymbol{A})<n$。令 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解由式 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Sigma V}^{\text{H}}$ 给出，其中，$\boldsymbol{\Sigma}=\text{diag}(\sigma_1,\cdots,\sigma_r,0,\cdots,0)$。考察

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{V\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\text{H}} \tag{6.2.42}$$

式中，$\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}=\text{diag}(1/\sigma_1,\cdots,1/\sigma_r,0,\cdots,0)$。由奇异值的性质 (4) 知，$\boldsymbol{G}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 广义逆矩阵。因此，

AGIZB

$$\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{Gb}=\boldsymbol{V\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\text{H}}\boldsymbol{b} \tag{6.2.43}$$

给出最小二乘最小范数解。此时，解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 的误差矩阵由

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\hat{\boldsymbol{x}}}=(\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A})^{-1}=\boldsymbol{V}(\boldsymbol{\Sigma}^{\text{T}}\boldsymbol{\Sigma})^{\dagger}\boldsymbol{V}^{\text{H}} \tag{6.2.44}$$

给出。式 (6.2.43) 可表示为

$$\boldsymbol{x}_{\text{LS}}=\sum_{i=1}^{r}(\boldsymbol{u}_i^{\text{H}}\boldsymbol{b}/\sigma_i)\boldsymbol{v}_i$$

它是最小二乘问题

$$\min\|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}\|_2 \tag{6.2.45}$$

的最小范数解，相应的最小残差为

$$\rho_{\text{LS}}=\|\boldsymbol{Ax}_{\text{LS}}-\boldsymbol{b}\|_2=\|[\boldsymbol{u}_{r+1},\cdots,\boldsymbol{u}_m]^{\text{H}}\boldsymbol{b}\|_2 \tag{6.2.46}$$

应用奇异值分解求解最小二乘问题的方法常简称为奇异值分解方法。虽然在理论上，当 $i>r$ 时奇异值 $\sigma_i=0$，但是计算出来的奇异值 $\hat{\sigma}_i$，$i>r$ 并不会等于零，有时甚至表现出比较大的扰动。因此，需要有计算秩 r 的估计值 $\hat{r}$ 的方法。在信号处理和系统理论中，常将该估计值称为“有效秩”。

有效秩确定有以下两种常用方法。

1. *归一化奇异值方法*

计算归一化奇异值

$$\bar{\sigma}_i=\frac{\hat{\sigma}_i}{\hat{\sigma}_1} \tag{6.2.47}$$

选择满足准则

$$\bar{\sigma}_i\geqslant\epsilon \tag{6.2.48}$$

的最大整数作为有效秩的估计值 $\hat{r}$。显然，这一准则等价于选择满足

$$\hat{\sigma}_i\geqslant\epsilon\cdot\hat{\sigma}_1 \tag{6.2.49}$$

的最大整数 $\hat{r}$。式中，ϵ 是某个很小的正数，它根据计算机精度与 (或) 数据精度选取。例如，选取 $\epsilon=0.1$ 或者 $\epsilon=0.05$ 等。

by szcf-weiya

2. 范数比方法

令 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 是原 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩 k 近似，定义该近似矩阵与原矩阵的 Frobenius 范数比为

$$\nu(k) = \frac{\|\boldsymbol{A}_k\|_{\mathrm{F}}}{\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}}} = \frac{\sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_k^2}}{\sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_h^2}}, \qquad h = \min\{m, n\} \tag{6.2.50}$$

并选择满足

$$\nu(k) \geqslant \alpha \tag{6.2.51}$$

的最大整数作为有效秩估计 $\hat{r}$，其中，α 是接近于 1 的阈值，例如 $\alpha = 0.997$ 等。

采用以上两种准则确定出有效秩 $\hat{r}$ 后，可将

$$\hat{\boldsymbol{x}}_{\mathrm{LS}} = \sum_{i=1}^{\hat{r}} (\hat{\boldsymbol{u}}_i^{\mathrm{H}} \boldsymbol{b} / \hat{\sigma}_i) \hat{\boldsymbol{v}}_i \tag{6.2.52}$$

看作是真实最小二乘解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$ 的一个合理近似。显而易见，这种解就是方程组 $\boldsymbol{A}_{\hat{r}} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的最小二乘解，其中

$$\boldsymbol{A}_{\hat{r}} = \sum_{i=1}^{\hat{r}} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}} \tag{6.2.53}$$

在最小二乘问题中，用 $\boldsymbol{A}_{\hat{r}}$ 代替 $\boldsymbol{A}$ 相当于过滤掉小的奇异值。当 $\boldsymbol{A}$ 是从有噪声的观测数据得到时，这种过滤能够起很大的作用。容易观察出，式 (6.2.52) 给出的最小二乘解 $\hat{\boldsymbol{x}}_{\mathrm{LS}}$ 仍然包含了 n 个参数。然而，由于线性方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 秩亏缺意味着 $\boldsymbol{x}$ 中只有 r 个参数是独立的，其他参数是这 r 个独立参数的重复作用或线性相关的结果。在许多应用中，当然希望能够求出这 r 个线性无关的参数，而不是包含了冗余因素的 n 个参数。换言之，我们的目的是只估计主要因素，并剔除掉次要因素。在线性代数中，这相当于如何从矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 n 列中挑选出 r 个线性无关的列来。怎样挑选这些线性无关的列称为子集选择问题。

在秩亏缺的情况下，利用 SVD 进行子集选择是必要的。Golub 等人曾提出过一种基于 SVD 的子集选择方法 [183]。

算法 6.2.1 (子集选择算法)

步骤 1　计算 $\boldsymbol{A}$ 的 SVD，并确定 $\boldsymbol{A}$ 的有效秩 $\hat{r}$。

步骤 2　计算置换矩阵 $\boldsymbol{P}$，使得在 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = [\boldsymbol{B}_1, \boldsymbol{B}_2]$ 中的矩阵 $\boldsymbol{B}_1 \in C^{m \times \hat{r}}$ 的列是“足够线性无关的”。

步骤 3　将 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的 LS 问题变换为求 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}\begin{bmatrix}\boldsymbol{z}\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix} = \boldsymbol{b}$ 的 LS 解 $\boldsymbol{z} \in C^{\hat{r}}$，即求 $\|\boldsymbol{B}_1 \boldsymbol{z} - \boldsymbol{b}\|_2$ 的极小化变量 $\boldsymbol{z}$。

由于

$$\min_{\boldsymbol{z} \in C^{\hat{r}}} \|\boldsymbol{B}_1 \boldsymbol{z} - \boldsymbol{b}\|_2 \geqslant \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2$$

by szcf-weiya

所以置换矩阵 $\boldsymbol{P}$ 应选得使残差 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{B}_1^{\dagger})\boldsymbol{b}$ 的范数尽可能小。但是，这有可能产生不稳定的解。例如，对于

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 0\\ 1 & 1+\epsilon & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\ -1\\ 0\end{bmatrix}$$

若取 $\hat{r}=2$ 和 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{I}$，则 $\min\|\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{z}-\boldsymbol{b}\|_2=0$，但 $\|\boldsymbol{B}_1^{\dagger}\boldsymbol{b}\|_2=O(1/\epsilon)$，即 LS 解 $\boldsymbol{z}=\boldsymbol{B}_1^{\dagger}\boldsymbol{b}$ 不稳定。这个例子说明，应该在选择列的线性无关性和它给出的残差范数 (即解的稳定性) 之间取折衷。考虑到这些因素，Golub 等人利用基于 SVD 的子集选择，提出了求方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 中 $\boldsymbol{x}$ 的独立参数的最小二乘解的下述实际算法 [183]，称之为低秩 LS 方法。

算法 6.2.2 (低秩 LS 方法) 给定 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n},\boldsymbol{b}\in R^m$，本算法计算

$$\boldsymbol{x}=\arg\min_{\boldsymbol{z}}\left\|\boldsymbol{AP}\begin{bmatrix}\boldsymbol{z}\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix}-\boldsymbol{b}\right\|_2$$

步骤 1 计算 SVD 即 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AV}=\mathrm{diag}(\sigma_1,\cdots,\sigma_n)$，确定有效秩 $\hat{r}$，并根据 $\hat{r}$ 将 $\boldsymbol{V}$ 分块为

$$\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{V}_{11} & \boldsymbol{V}_{12}\\ \boldsymbol{V}_{21} & \boldsymbol{V}_{22}\end{bmatrix}$$

其中，$\boldsymbol{V}_{11}\in R^{\hat{r}\times\hat{r}}$，然后存储 $\boldsymbol{V}_{11}$ 和 $\boldsymbol{V}_{21}$。

步骤 2 利用列主元 QR 算法 (算法 6.2.3) 计算 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{V}_{11}^{\mathrm{T}},\ \boldsymbol{V}_{21}^{\mathrm{T}}]\boldsymbol{P}=[\boldsymbol{R}_{11},\boldsymbol{R}_{12}]$，然后计算 $\boldsymbol{AP}=[\boldsymbol{B}_1,\ \boldsymbol{B}_2]$，其中，$\boldsymbol{B}_1\in R^{m\times\hat{r}}$。

步骤 3 计算 $\boldsymbol{z}=(\boldsymbol{B}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}_1)^{-1}\boldsymbol{B}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$。

下面是步骤 2 用到的列主元 QR 算法。

算法 6.2.3 (列主元 QR 分解) [184] 给定矩阵 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n}$，其中，$m\geqslant n$。下面的算法计算 $r=\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$ 和列主元 QR 分解

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AP}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_{11} & \boldsymbol{R}_{12}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$$

其中，$\boldsymbol{R}_{11}\in R^{r\times r}$ 是上三角的非奇异矩阵。作为输出结果，$\boldsymbol{A}$ 的上三角部分存放 $\boldsymbol{R}$ 的上三角部分，置换矩阵 $\boldsymbol{P}$ 用整数向量 piv 编码 (若 piv 的第 j 个元素等于整数 m，则 $\boldsymbol{P}$ 的第 j 列仅第 m 个元素为 1，而其他元素皆为零)。

```
for j = 1, 2, ··· , n
    c(j) = A(1 : m, j)^T A(1 : m, j)
end
r = 0; τ = max{c(j), ··· , c(n)}
求满足 c(k) = τ 的最小整数 k (1 ⩽ k ⩽ n)
while τ > 0
    r = r + 1
    piv(r) = k;  A(1 : m, r) ↔ A(1 : m, k);  c(r) ↔ c(k)
    v(r : m) = house(A(r : m, r))
    A(r : m, r : n) = row.house(A(r : m, r : n), v(r : m))
```

$A(r+1:m,r)=v(r+1:m)$

for $i=r+1:n$

$\quad c(i)=c(i)-A(r,i)^2$

end

if $r<n$

$\quad \tau=\max\{c(r+1),\cdots,c(n)\}$

$\quad$ 求满足 $c(k)=\tau$ 的最小整数 $k\,(r+1\leqslant k\leqslant n)$

else

$\tau=0$

end

end

例 6.2.1 [184] 假定

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}3 & 4 & -1\\ 7 & 4 & -3\\ 2 & 5 & 3\\ -1 & 4 & 5\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\1\\1\\1\end{bmatrix}$$

得到 $\text{rank}(\boldsymbol{A})=2$ 和

$$\boldsymbol{x}_{\text{LS}}=\begin{bmatrix}0.0815\\0.1545\\0.0730\end{bmatrix}$$

应用算法 6.2.2，则得到

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\1 & 0 & 0\\0 & 0 & 1\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}0.0845\\0.2275\\0.0000\end{bmatrix}$$

顺便指出，$\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{\text{LS}}\|_2\approx\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2=0.1966$。

有必要指出，上述最小二乘解只考虑了线性方程一边的误差，它的数值性能比不上同时考虑方程两边误差的总体最小二乘方法 (详见第 7 章)。与低秩最小二乘方法一样，也有低秩总体最小二乘方法，但是它们的子集选择方法明显不同。

6.3 奇异值分解的数值计算

前面介绍了奇异值分解的定义、性质及求解线性方程的奇异值分解方法。本节讨论奇异值分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\text{T}}$ 的数值计算：给定矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$，如何用尽可能高的精度计算其奇异值，右奇异向量矩阵 $\boldsymbol{V}_{n\times n}$ 与 (或) 左奇异向量矩阵 $\boldsymbol{U}_{m\times m}$。

求解一般矩阵的奇异值问题的最常用算法可以分为两大类：

(1) QR 分解

(2) Jacobi 旋转