

回顾上次课内容:

1. 实对称矩阵的谱定理: 特征值都是实数; 可由正交矩阵对角化 $S = Q\Lambda Q^T$
2. 对角化实对称矩阵的方法: 属于不同特征值的特征向量互相正交; 特征子空间内部 Gram-Schmidt正交化

3. 实对称矩阵正定的判定定理:

(1) 能量判定: 对所有非零向量 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x}^T S \mathbf{x} > 0$

(2) 特征值判定: S 的所有特征值 > 0 .

(3) 存在可逆矩阵 A 使得 $S = A^T A$.

(4) 主元判定: $S = LDL^T$, 且 D 的对角元均为正数。

L 为对角线元素均为1的下三角矩阵, D 为对角矩阵对角线元素为 S 的主元。

(5) 顺序主子式判定: S 的 n 个顺序主子式均 > 0 .

4. 对称性、正定性在合同变换下不变, $S \mapsto X^T S X$

半正定对称矩阵的判定定理:

定义: A 一个 **k 阶主子式** 是指去掉 i_1, \dots, i_{n-k} 行与 i_1, \dots, i_{n-k} 列剩下方阵的行列式。

对于对称实矩阵, 下列叙述等价:

- (1) $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{x}^T S \mathbf{x} \geq 0$;
- (2) S 的特征值均 ≥ 0 ;
- (3) $S = A^T A$, A 为 n 阶方阵;
- (4) S 所有主元非负;
- (5) S 的所有主子式均 ≥ 0 ;

注意: 在半正定下需要考虑所有主子式, 而不仅仅是顺序主子式。

例如: $\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ 半负定, 顺序主子式 ≥ 0

(c) Rayleigh商与特征值:

π 给定实矩阵 A 与非零向量 $x \in \mathbb{R}^n$, 实数 $\frac{x^T A x}{x^T x}$ 称为 x 对于 A 的**Rayleigh商**。

实对称矩阵的Rayleigh商与特征值的关系:

设实对称矩阵 S 的特征值为 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$, 相应的特征向量为 q_1, \dots, q_n , 则

$$\lambda_1 = \max_{x \neq 0} \frac{x^T S x}{x^T x}, \quad \lambda_i = \max_{x \neq 0, x \in \text{Span}(q_1, \dots, q_{i-1})^\perp} \frac{x^T S x}{x^T x}, \quad 2 \leq i \leq n.$$

$$\lambda_n = \min_{x \neq 0} \frac{x^T S x}{x^T x}, \quad \lambda_i = \min_{x \neq 0, x \in \text{Span}(q_{i+1}, \dots, q_n)^\perp} \frac{x^T S x}{x^T x}, \quad 1 \leq i \leq n-1.$$

证明:

$$\pi \quad S = Q \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{bmatrix} Q^T, Q = [\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n].$$

$$\max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\mathbf{x}^T S \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = \max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\mathbf{x}^T Q \Lambda Q^T \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T Q Q^T \mathbf{x}} = \max_{\mathbf{y} = Q^T \mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\mathbf{y}^T \Lambda \mathbf{y}}{\mathbf{y}^T \mathbf{y}} = \max_{\mathbf{y} \neq \mathbf{0}} \frac{\lambda_1 y_1^2 + \dots + \lambda_n y_n^2}{y_1^2 + \dots + y_n^2} \leq \frac{\lambda_1 (y_1^2 + \dots + y_n^2)}{y_1^2 + \dots + y_n^2} = \lambda_1.$$

令 $\mathbf{y} = [1, 0, \dots, 0]^T$ 可取得等号。

$$\begin{aligned} \max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}, \mathbf{x} \in \text{Span}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{i-1})^\perp} \frac{\mathbf{x}^T S \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} &= \max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}, \mathbf{x} \in \text{Span}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{i-1})^\perp} \frac{\mathbf{x}^T Q \Lambda Q^T \mathbf{x}}{\mathbf{x}^T Q Q^T \mathbf{x}} = \\ \max_{\mathbf{y} = Q^T \mathbf{x} \neq \mathbf{0}, y_1 = \dots = y_{i-1} = 0} \frac{\mathbf{y}^T \Lambda \mathbf{y}}{\mathbf{y}^T \mathbf{y}} &= \max_{\mathbf{y} \neq \mathbf{0}, y_1 = \dots = y_{i-1} = 0} \frac{\lambda_i y_i^2 + \dots + \lambda_n y_n^2}{y_i^2 + \dots + y_n^2} \leq \frac{\lambda_i (y_i^2 + \dots + y_n^2)}{y_i^2 + \dots + y_n^2} = \lambda_i. \end{aligned}$$

取 $\mathbf{y} = \mathbf{e}_i$ 得到等号。

(d) 合同标准形与惯性定理

回顾：合同关系是一个等价关系， $B = X^T A X$ ， X 可逆

实对称矩阵的合同标准形：对实对称矩阵 S ，存在可逆矩阵 X ，使得

$$X^T S X = \begin{bmatrix} I_p & & \\ & -I_{r-p} & \\ & & 0 \end{bmatrix} =: J \text{ 称为 } S \text{ 的合同标准形。}$$

证明：

设 S 的特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_p > 0, \lambda_{p+1}, \dots, \lambda_r < 0, \lambda_{r+1}, \dots, \lambda_n = 0$

$$Q^T S Q = \Lambda = \text{Diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p, \lambda_{p+1}, \dots, \lambda_r, 0, \dots, 0)$$

$$\text{令 } Y = \text{diag}\left(\frac{1}{\sqrt{|\lambda_1|}}, \dots, \frac{1}{\sqrt{|\lambda_r|}}, 1, \dots, 1\right)$$

$$Y^T \Lambda Y = J.$$

$$\text{令 } X = QY, \text{ 则 } X^T S X = (QY)^T S Q Y = J.$$

Sylvester惯性定理:

实对称矩阵的合同标准形唯一, 且它的合同标准形中正、负、零对角元的个数分别和它的正、负、零特征值的个数相等。

$$X^T S X = \begin{bmatrix} I_p & & \\ & -I_{r-p} & \\ & & 0 \end{bmatrix}$$

p = 正惯性指数

$r - p$ = 负惯性指数

证明见教材定理6.2.9

实对称矩阵总结:

1. 实对称矩阵的谱定理
2. 对角化实对称矩阵的方法
3. 对称正定矩阵的判定定理
4. 对称性、正定性在合同变换下不变, $S \mapsto X^T S X$
5. 实对称矩阵Rayleigh商与特征值的关系
6. 合同标准形与惯性定理

6.3 奇异值分解 Singular Value Decomposition

奇异值分解在现实生活中有许多应用，例如图像处理等

奇异值考虑的矩阵都是 $m \times n$ 阶实矩阵

主要内容：

- (a) 奇异值分解定理 (SVD)
- (b) 奇异值分解的几何解释
- (c) 广义逆及其应用
- (d) 矩阵的谱范数与低秩逼近
- (e) 线性代数基本定理 (v.2.0)

(a) 奇异值分解定理(SVD):

给定 $A \in M_{m \times n}(\mathbb{R})$ 秩为 r , 存在 m 阶正交矩阵 U 和 n 阶正交矩阵 V 使得 $A = U\Sigma V^T$,

$$\text{其中, } \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_r & O_{r \times (n-r)} \\ O_{(m-r) \times r} & O_{(m-r) \times (n-r)} \end{bmatrix}, \Sigma_r = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \end{bmatrix} \in M_r(\mathbb{R})$$

且 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$.  按重要性顺序对奇异值排序

$\sigma_1, \dots, \sigma_r$ 称为 A 的奇异值,

注意: 分解中正交矩阵 U, V 不唯一, 但是奇异值 σ_i 由 A 唯一决定。

$$\Sigma^T \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_r^T \Sigma_r & O_{r \times (n-r)} \\ O_{(n-r) \times r} & O_{(n-r) \times (n-r)} \end{bmatrix} \text{ 为对角阵}$$

证明思路:


π

假设如果有定理中的分解 $A = U\Sigma V^T$, 那么 $A^T A = V\Sigma^T \Sigma V^T$,

$$\Sigma^T \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_r^T \Sigma_r & O_{r \times (n-r)} \\ O_{(n-r) \times r} & O_{(n-r) \times (n-r)} \end{bmatrix}, \quad \Sigma_r^T \Sigma_r = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r^2 \end{bmatrix} \text{ 对角线元素} > 0.$$

$A^T A V = V \Sigma^T \Sigma$ 得到 $V = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n]$ 满足 $A^T A \mathbf{v}_i = \sigma_i^2 \mathbf{v}_i$.  找 σ_i 和 V

因此, \mathbf{v}_i 为半正定对称矩阵 $A^T A$ 的特征值为 σ_i^2 的特征向量

由 $AV = U\Sigma$ 表明: $1 \leq i \leq r$ 时, $A\mathbf{v}_i = \sigma_i \mathbf{u}_i$, 即 $\mathbf{u}_i = \frac{A\mathbf{v}_i}{\sigma_i}$.  找 U

因此, 我们证明的思路即是从半正定矩阵 $A^T A$ 的对角化开始。

奇异值分解定理的证明:

π 记 $r = \text{rank}(A^T A) = \text{rank}(A)$. 考查对称半正定矩阵 $A^T A$ (特征值 ≥ 0)

令 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > 0$ 为 $A^T A$ 的所有非零特征值

由对称矩阵的谱定理, 有正交矩阵 $V = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n]$ 使得

$$A^T A V = V \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \lambda_r & \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

于是 $A^T A \mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i, 1 \leq i \leq r, A^T A \mathbf{v}_i = \mathbf{0}, r+1 \leq i \leq n$.

由于 $\mathcal{N}(A^T A) = \mathcal{N}(A), A \mathbf{v}_i = \mathbf{0}, r+1 \leq i \leq n$.

令 $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}, 1 \leq i \leq r$. 定义 $\mathbf{u}_i = \frac{A \mathbf{v}_i}{\sigma_i}, 1 \leq i \leq r$.

验证 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r \in \mathbb{R}^m$ 为正交单位向量组

验证 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r \in \mathbb{R}^m$ 为正交单位向量组, 即

$$(1) \|\mathbf{u}_i\| = 1. \text{ 这是因为 } \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i = \frac{\mathbf{v}_i^T A^T A \mathbf{v}_i}{\sigma_i^2} = \frac{\mathbf{v}_i^T \sigma_i^2 \mathbf{v}_i}{\sigma_i^2} = 1.$$

$$(2) \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = 0, i \neq j. \text{ 这是因为 } \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = \frac{\mathbf{v}_i^T A^T A \mathbf{v}_j}{\sigma_i \sigma_j} = \frac{\lambda_j \mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_j}{\sigma_i \sigma_j} = 0.$$

将 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r$ 扩充为 \mathbb{R}^m 一组标准正交基 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m$.

令 $U = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m]$.

$$\text{我们有 } A[\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n] = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m] \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_r & \\ & & & 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{即 } A = U \Sigma V^T.$$

简化奇异值分解:

$A \in M_{m \times n}(\mathbb{R})$ 秩为 r . 由奇异值分解

$$A = U \Sigma V^T = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m] \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \\ & & & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n^T \end{bmatrix}$$

$$= \sigma_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^T + \sigma_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{v}_2^T + \dots + \sigma_r \mathbf{u}_r \mathbf{v}_r^T.$$

A 为 r 个秩1矩阵的和。

$$\text{令 } U_r = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r], \Sigma_r = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \\ & & & 0 \end{bmatrix}, V_r = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r]$$

$A = U_r \Sigma_r V_r^T$ 称为 A 的**简化奇异值分解**

例: 求 $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$ 的奇异值分解。

$$A^T A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9 \end{bmatrix}, \sigma_1 = 3 > \sigma_2 = 2 > \sigma_3 = 1.$$

$$\text{求解 } A^T A \mathbf{v} = \sigma^2 \mathbf{v} \text{ 得到 } \mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{v}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

$$\text{求解 } A^T A \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ 得到 } \mathbf{v}_4 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

π

$$\text{令 } \mathbf{u} = \frac{A\mathbf{v}}{\sigma} \text{ 得到 } \mathbf{u}_1 = \frac{A\mathbf{v}_1}{\sigma_1} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \mathbf{u}_2 = \frac{A\mathbf{v}_2}{\sigma_2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{u}_3 = \frac{A\mathbf{v}_3}{\sigma_3} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} = U\Sigma V^T$$

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

奇异值与特征值比较:

1. 奇异值对任意实矩阵定义, 特征值对任意复方阵定义
2. 奇异值均为正数, 特征值可正、负、零
3. 奇异值对矩阵的微扰比特征值稳定

小结: SVD的求法

1. 对半正定对称矩阵 $A^T A$ 做谱分解, 特征值 λ , 特征向量 v
2. 令 $\sigma = \sqrt{\lambda}$, 得到奇异值
3. 令 $u = \frac{Av}{\sigma}$
4. 将 u 扩充为 \mathbb{R}^m 的一组标准正交基

π

(b) 奇异值分解的几何的解释

1. 映射复合的角度
2. 空间分解的角度

1. 映射复合的角度看待SVD:

π

由奇异值分解, 矩阵 A 写成 (正交) \times (对角) \times (正交)

以 $A \in M_2(\mathbb{R})$ 为例, **为简单起见假定两个正交矩阵都为旋转矩阵**

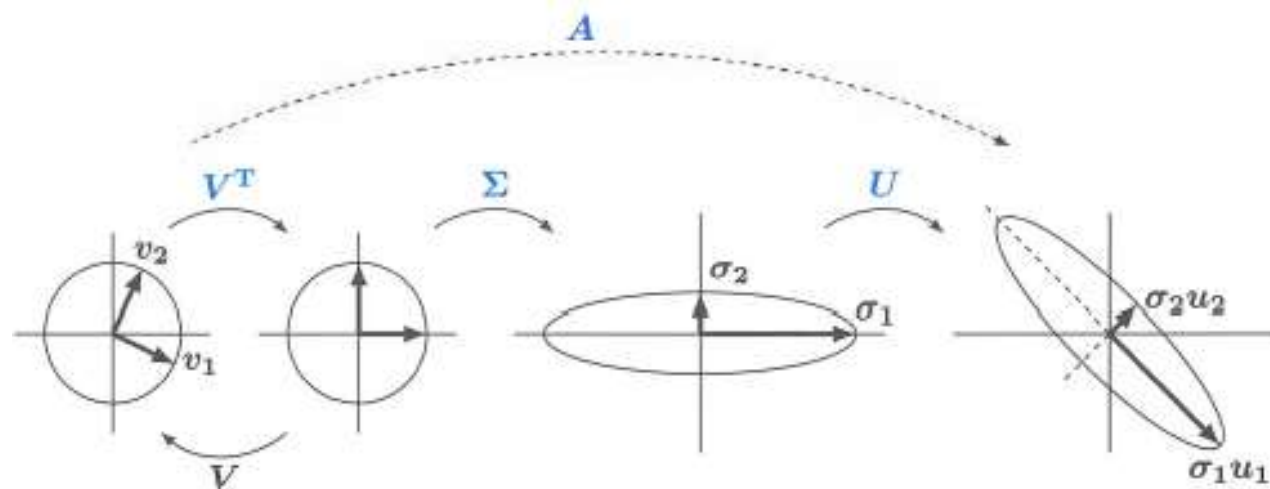
$U = [\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2], V = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2]$ 分别为逆时针旋转 θ, ϕ 角。

$$U = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}, V = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix}$$

$$A = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 & \\ & \sigma_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix}$$

线性映射 A 由它在标准正交基 $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$ 上的作用决定

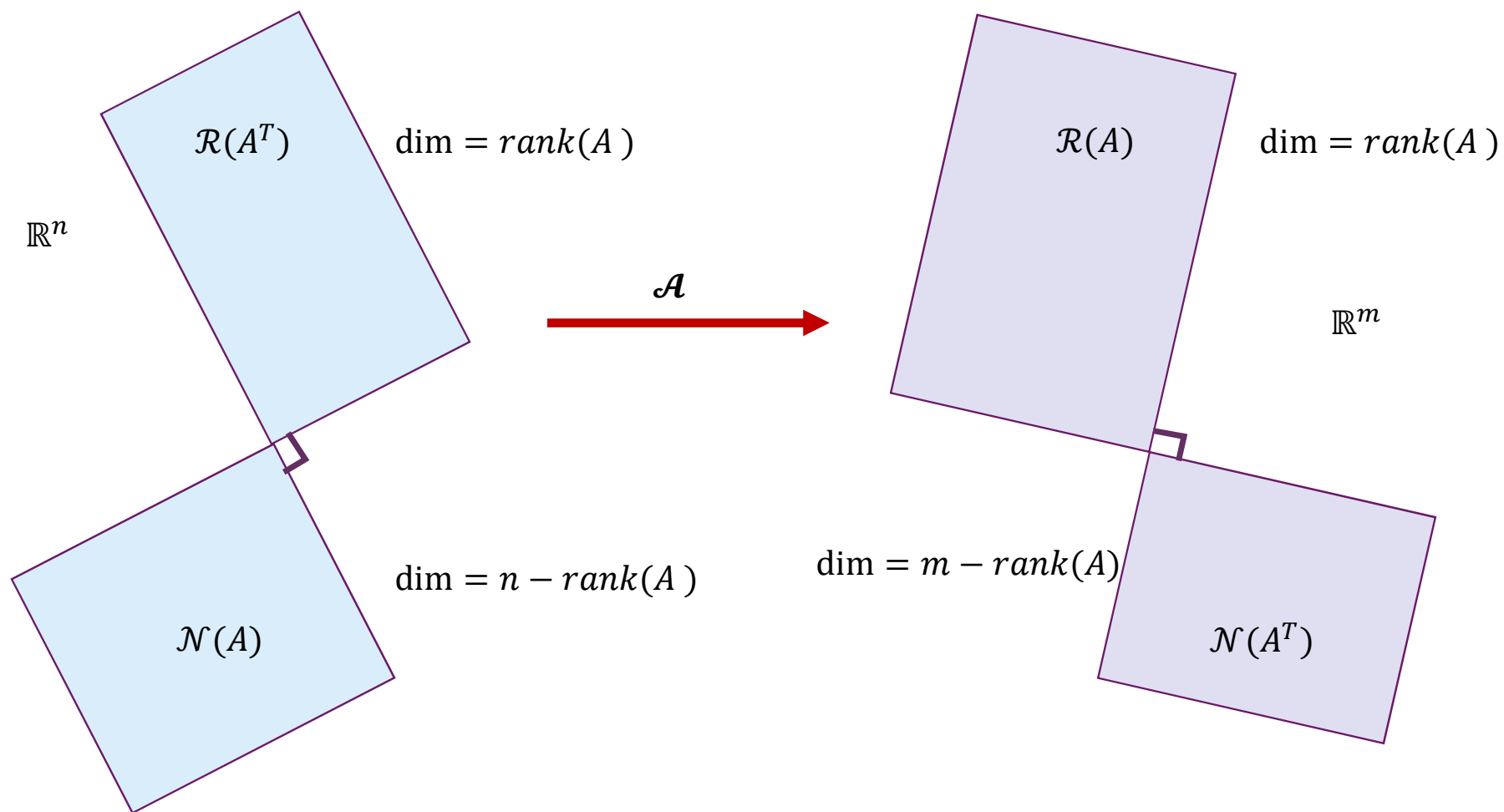
$$A[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2] = U\Sigma V^T[\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2].$$



A 的作用分解为3步:

1. V^T 将 v_1, v_2 顺时针旋转 ϕ 角, 分别映为 e_1, e_2 ;
2. Σ 将 e_1, e_2 分别拉伸 σ_1, σ_2 倍, 分别映为 $\sigma_1 e_1, \sigma_2 e_2$;
3. U 将 $\sigma_1 e_1, \sigma_2 e_2$ 逆时针旋转 θ 角, 分别映为 $\sigma_1 u_1, \sigma_2 u_2$.

2. 空间分解的角度看待SVD:



A 的奇异值分解给出四个基本子空间的标准正交基:

$$A \in M_{m \times n}(\mathbb{R}), r = \text{rank}(A). A = U\Sigma V^T \longrightarrow AV = U\Sigma$$

令 $V = [v_1, \dots, v_n], U = [u_1, \dots, u_m]$.

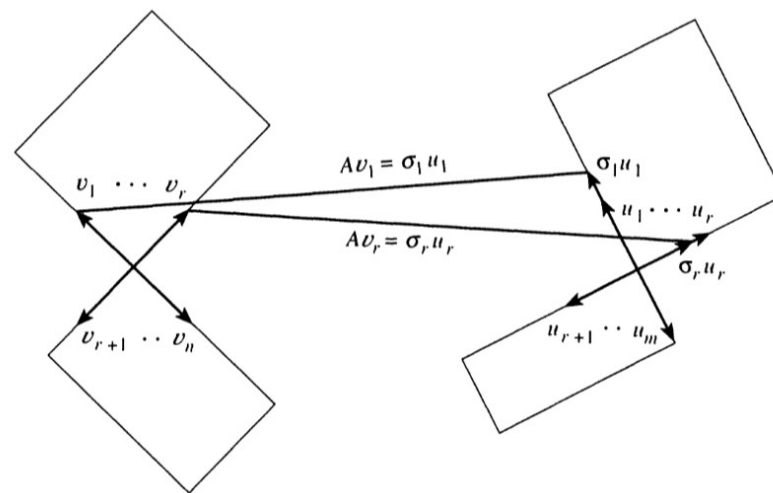
v_1, \dots, v_n 构成 \mathbb{R}^n 一组标准正交基, u_1, \dots, u_m 构成 \mathbb{R}^m 一组标准正交基

(1) v_1, \dots, v_r 构成 $\mathcal{R}(A^T)$ 一组标准正交基

(2) v_{r+1}, \dots, v_n 构成 $\mathcal{N}(A)$ 一组标准正交基

(3) u_1, \dots, u_r 构成 $\mathcal{R}(A)$ 一组标准正交基

(4) u_{r+1}, \dots, u_m 构成 $\mathcal{N}(A^T)$ 一组标准正交基



证明:

$$A\mathbf{v}_{r+1} = \mathbf{0}, \dots, A\mathbf{v}_n = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{v}_{r+1}, \dots, \mathbf{v}_n \in \mathcal{N}(A)$$

由 $\dim \mathcal{N}(A) = n - r$ 得到

$$\mathcal{N}(A) = \text{Span}(\mathbf{v}_{r+1}, \dots, \mathbf{v}_n).$$

$$\mathcal{R}(A^T) = \mathcal{N}(A)^\perp = \text{Span}(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r).$$

$$\text{当 } 1 \leq i \leq r \text{ 时, } \mathbf{u}_i = \frac{A\mathbf{v}_i}{\sigma_i} \in \mathcal{R}(A)$$

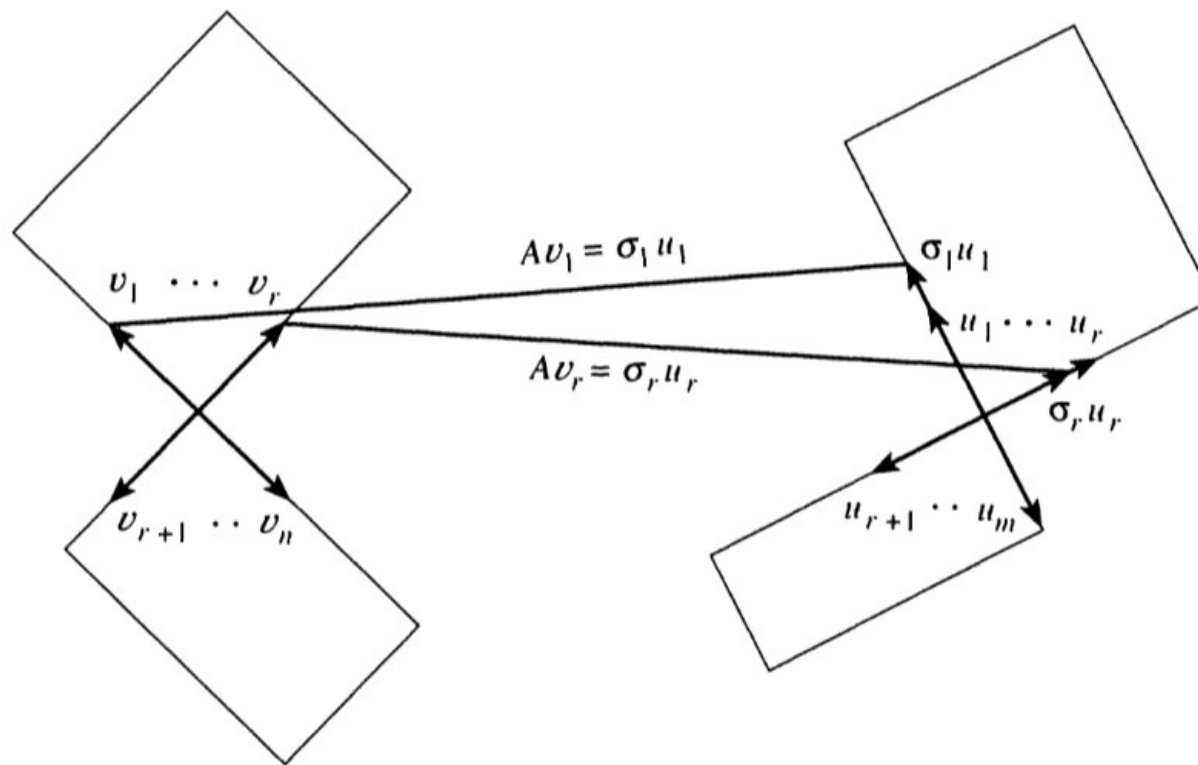
由于 $\dim \text{Span}(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r) = r = \dim \mathcal{R}(A)$, $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r$ 构成 $\mathcal{R}(A)$ 一组标准正交基

考虑正交补, $\mathbf{u}_{r+1}, \dots, \mathbf{u}_m$ 构成 $\mathcal{N}(A^T)$ 一组标准正交基

$\mathcal{R}(A^T), \mathcal{N}(A), \mathcal{R}(A), \mathcal{N}(A^T)$ 分别存在标准正交基

$\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r\}, \{\mathbf{v}_{r+1}, \dots, \mathbf{v}_n\}, \{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r\}, \{\mathbf{u}_{r+1}, \dots, \mathbf{u}_m\}$ 使得有 $\sigma_i > 0, 1 \leq i \leq r$ 满足

$$A\mathbf{v}_1 = \sigma_1 \mathbf{u}_1, A\mathbf{v}_2 = \sigma_2 \mathbf{u}_2, \dots, A\mathbf{v}_r = \sigma_r \mathbf{u}_r, A\mathbf{v}_{r+1} = \mathbf{0}, \dots, A\mathbf{v}_n = \mathbf{0}$$



(c) 广义逆与最小二乘法

矩阵的逆只能对可逆方阵谈论

广义逆可以对任意 $m \times n$ 阶矩阵谈论

广义逆是矩阵逆的推广

内容：

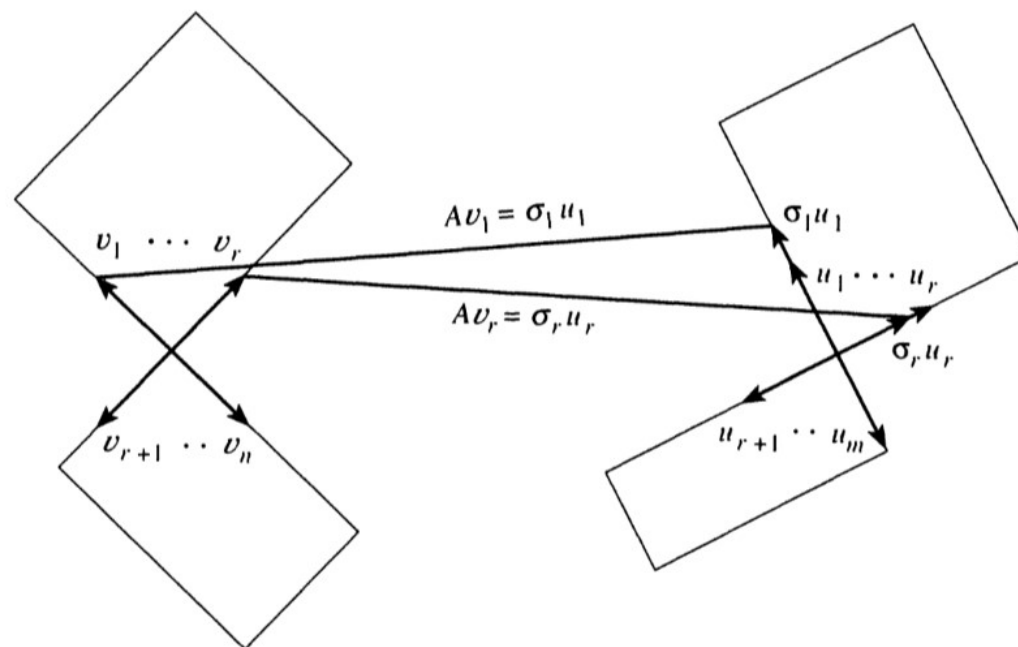
1. 广义逆的定义

2. 广义逆的应用：正交投影矩阵，最优最小二乘解

$$A \in M_{m \times n}(\mathbb{R}) \rightsquigarrow A^+ \in M_{n \times m}(\mathbb{R})$$

$$\text{线性映射角度 } A: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m \rightsquigarrow A^+: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$$

广义逆的定义:



$A^+: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ 应该满足

$$A^+(\sigma_1 \mathbf{u}_1) = \mathbf{v}_1, \dots, A^+(\sigma_r \mathbf{u}_r) = \mathbf{v}_r; A^+(\mathbf{u}_{r+1}) = \dots = A^+(\mathbf{u}_m) = \mathbf{0}$$

$$\text{于是 } A^+(\mathbf{u}_1) = \frac{\mathbf{v}_1}{\sigma_1}, \dots, A^+(\mathbf{u}_r) = \frac{\mathbf{v}_r}{\sigma_r}; A^+(\mathbf{u}_{r+1}) = \dots = A^+(\mathbf{u}_m) = \mathbf{0}.$$

写成分块乘法的形式:

$$A^+[\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m] = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n] \begin{bmatrix} \sigma_1^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r^{-1} \end{bmatrix}$$

这提示我们定义 $A^+ = V \begin{bmatrix} \sigma_1^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r^{-1} \end{bmatrix} U^T$

广义逆的定义:

$$\text{设 } \Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_r & O_{r \times (n-r)} \\ O_{(m-r) \times r} & O_{(m-r) \times (n-r)} \end{bmatrix} \in M_{m \times n}(\mathbb{R}), \text{ 其中 } \Sigma_r = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r \end{bmatrix} \in M_r(\mathbb{R})$$

$$\text{令 } \Sigma^+ = \begin{bmatrix} \Sigma_r^+ & O_{r \times (m-r)} \\ O_{(n-r) \times r} & O_{(n-r) \times (m-r)} \end{bmatrix} \in M_{n \times m}(\mathbb{R}), \text{ 其中 } \Sigma_r^+ = \begin{bmatrix} \sigma_1^{-1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_r^{-1} \end{bmatrix} \in M_r(\mathbb{R})$$

$$\Sigma \Sigma^+ = \begin{bmatrix} I_r & O_{r \times (m-r)} \\ O_{(m-r) \times r} & O_{(m-r) \times (m-r)} \end{bmatrix} \in M_m(\mathbb{R}), \Sigma^+ \Sigma = \begin{bmatrix} I_r & O_{r \times (n-r)} \\ O_{(n-r) \times r} & O_{(n-r) \times (n-r)} \end{bmatrix} \in M_n(\mathbb{R}),$$

给定 $A \in M_{m \times n}(\mathbb{R})$, 有奇异值分解 $A = U \Sigma V^T$ 。定义 A 的广义逆:

$$A^+ = V \Sigma^+ U^T \in M_{n \times m}(\mathbb{R}).$$

广义逆唯一, 与 A 的奇异值分解选取无关。

广义逆与逆:

π

当 A 为 n 阶可逆方阵时, $r = n$, $\Sigma\Sigma^+ = \Sigma^+\Sigma = I_n$

$$AA^+ = (U\Sigma V^T)(V\Sigma^+ U^T) = I_n$$

$$A^+A = (V\Sigma^+ U^T)(U\Sigma V^T) = I_n$$

于是对于可逆方阵, 广义逆就是矩阵的逆。

例: 矩阵的奇异值分解与广义逆

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} = U\Sigma V^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

$$A^+ = V\Sigma^+U^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 \end{bmatrix}$$