

一来, N 个数据样本 $x(n), n = 0, 1, \dots, N-1$ 的离散 Fourier 变换 (DFT) 就可以用向量的典范内积表示为

$$X(f) = \sum_{n=0}^{N-1} x(n)e^{-j(\frac{2\pi}{N})nf} = e_{N-1}^H \mathbf{x} = \langle e_{N-1}, \mathbf{x} \rangle$$

其中, $\mathbf{x} = [x(0), x(1), \dots, x(N-1)]^T$ 常称为数据向量。

下面是内积空间的范数具备的一般性质。

定理 1.4.1 [40] 在实或复内积空间里, 范数具有以下性质:

- (1) $\|\mathbf{0}\| = 0$, 并且 $\|\mathbf{x}\| > 0, \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$;
- (2) $\|c\mathbf{x}\| = |c| \cdot \|\mathbf{x}\|$ 对所有向量 \mathbf{x} 和标量 c 成立;
- (3) 范数服从极化恒等式 (polarization identity)

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \frac{1}{4} (\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|^2 - \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2), \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \quad (\text{实内积空间}) \quad (1.4.4)$$

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \frac{1}{4} (\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|^2 - \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 - j\|\mathbf{x} + j\mathbf{y}\|^2 + j\|\mathbf{x} - j\mathbf{y}\|^2) \\ \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \quad (\text{复内积空间}) \quad (1.4.5)$$

- (4) 范数满足平行四边形法则 (parallelogram law)

$$\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|^2 + \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2 = 2(\|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2), \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \quad (1.4.6)$$

- (5) 范数满足三角不等式 $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y}$;

- (6) 范数服从 Cauchy-Schwartz 不等式

$$|\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle| \leq \|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\| \quad (1.4.7)$$

等号 $|\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle| = \|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\|$ 成立, 当且仅当 $\mathbf{y} = c\mathbf{x}$, 其中, c 为某个非零常数。

下面分别介绍常数向量、函数向量和随机向量的内积与范数。

1. 常数向量的典范内积与范数

常数向量的内积通常采用典范内积, 而常用的向量范数有以下几种。

- (1) L_0 范数 (也称 0 范数)

$$\|\mathbf{x}\|_0 \stackrel{\text{def}}{=} \text{非零元素的个数} \quad (1.4.8)$$

- (2) L_1 范数 (也称和范数或 1 范数)

$$\|\mathbf{x}\|_1 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^m |x_i| = |x_1| + \dots + |x_m| \quad (1.4.9)$$

- (3) L_2 范数 (常称 Euclidean 范数, 有时也称 Frobenius 范数)

$$\|\mathbf{x}\|_2 = (|x_1|^2 + \dots + |x_m|^2)^{1/2} \quad (1.4.10)$$

(4) L_∞ 范数 (也称无穷范数或极大范数)

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max\{|x_1|, \dots, |x_m|\} \quad (1.4.11)$$

(5) L_p 范数 (也称 Hölder 范数^[294])

$$\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^m |x_i|^p \right)^{1/p}, \quad p \geq 1 \quad (1.4.12)$$

注释 1 L_0 范数不满足范数公理中的齐次性 $\|c\mathbf{x}\|_0 = |c|\|\mathbf{x}\|_0$, 它只是一种虚拟的范数。然而, L_0 范数在稀疏向量与稀疏表示中却起着关键的作用, 详见 1.12 节。

注释 2 当 $p=2$ 时, L_p 范数与 Euclidean 范数完全等价。另外, 无穷范数是 L_p 范数的极限形式, 即有

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \left(\sum_{i=1}^m |x_i|^p \right)^{1/p} \quad (1.4.13)$$

范数 $\|\mathbf{x}\|$ 称为酉不变的, 若 $\|U\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|$ 对所有向量 $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^m$ 和所有酉矩阵 $U \in \mathbb{C}^{m \times m}$ 恒成立。

命题 1.4.1^[238] Euclidean 范数 $\|\cdot\|_2$ 是酉不变的。

假定向量 \mathbf{x} 和 \mathbf{y} 有共同的起点 (即原点 O), 它们的端点分别为 x 和 y , 则 $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2$ 度量两个向量 \mathbf{x}, \mathbf{y} 两端点 x, y 之间的标准 Euclidean 距离。特别地, 非负的标量 $\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle^{1/2}$ 称为向量 \mathbf{x} 的 Euclidean 长度。Euclidean 长度为 1 的向量叫做归一化 (或标准化) 向量。对于任何不为零的向量 $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^m$, 向量 $\mathbf{x}/\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle^{1/2}$ 都是归一化的, 并且它与 \mathbf{x} 同方向。

Euclidean 范数是应用最为广泛的向量范数定义。在本书后面的讨论中, 如无特别声明, 向量范数均指 Euclidean 范数。

利用向量的典范内积和 Euclidean 范数可以定义两个向量之间的夹角。

定义 1.4.1 两个向量之间的夹角定义为

$$\cos \theta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle}{\sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle} \sqrt{\langle \mathbf{y}, \mathbf{y} \rangle}} = \frac{\mathbf{x}^H \mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\| \cdot \|\mathbf{y}\|} \quad (1.4.14)$$

显然, 若 $\mathbf{x}^H \mathbf{y} = 0$, 则 $\theta = \pi/2$, 此时, 称常数向量 \mathbf{x} 和 \mathbf{y} 正交。因此, 两个常数向量正交的数学定义如下。

定义 1.4.2 两个常数向量 \mathbf{x} 和 \mathbf{y} 称为正交, 并记作 $\mathbf{x} \perp \mathbf{y}$, 若它们的内积等于零, 即 $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{x}^H \mathbf{y} = 0$ 。

由定义知, 零向量 $\mathbf{0}$ 与同一空间的任何向量都正交。

2. 函数向量的内积与范数

若 $\mathbf{x}(t)$ 和 $\mathbf{y}(t)$ 分别是变量 t 的函数向量, 则它们的内积定义为

$$\langle \mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t) \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b \mathbf{x}^H(t) \mathbf{y}(t) dt \quad (1.4.15)$$

分别为 M 个已知模式向量 \mathbf{s}_i 的样本均值向量和样本互协方差矩阵。于是, 未知模式向量 \mathbf{x} 到已知模式向量 \mathbf{s}_i 之间的 Mahalanobis 距离定义为

$$D_M(\mathbf{x}, \mathbf{s}_i) = \sqrt{(\mathbf{x} - \mathbf{s}_i)^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{s}_i)} \quad (1.4.29)$$

根据近邻分类法, 若

$$D_M(\mathbf{x}, \mathbf{s}_i) = \min_k D_M(\mathbf{x}, \mathbf{s}_k), \quad k = 1, \dots, M \quad (1.4.30)$$

则将未知模式向量 \mathbf{x} 归为 \mathbf{s}_i 所属的模式类型。

向量之间的相异度的测度不一定局限于距离函数。两个向量所夹锐角的余弦函数

$$D(\mathbf{x}, \mathbf{s}_i) = \cos(\theta_i) = \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{s}_i}{\|\mathbf{x}\|_2 \|\mathbf{s}_i\|_2} \quad (1.4.31)$$

也是相异度的一种有效测度。若 $\cos(\theta_i) < \cos(\theta_j), \forall j \neq i$ 成立, 则认为未知模式向量 \mathbf{x} 与样本模式向量 \mathbf{s}_i 最相似。式 (1.4.31) 的变型

$$D(\mathbf{x}, \mathbf{s}_i) = \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{s}_i}{\mathbf{x}^T \mathbf{x} + \mathbf{s}_i^T \mathbf{s}_i + \mathbf{x}^T \mathbf{s}_i} \quad (1.4.32)$$

称为 Tanimoto 测度^[477], 它广泛应用于信息恢复、疾病分类、动物和植物分类等。

待分类的信号称为目标信号, 分类通常是依据某种物理或几何概念进行的。令 X 为目标信号, A_i 代表第 i 类目标的分类概念。于是, 采用目标-概念距离 (object-concept distance) $D(X, A_i)$ 描述与目标之间的相异度^[457], 从而有类似于式 (1.4.22) 的关系

$$D(X, A_i) \leq D(X, A_j), \quad \forall i, j \quad (1.4.33)$$

因此, 将目标信号 X 归为目标-概念距离 $D(X, A_i)$ 最小的第 i 类目标 C_i 。

以上介绍了五种相异度: Euclidean 距离、Mahalanobis 距离、夹角余弦、Tanimoto 测度以及目标-概念距离。

1.4.3 矩阵的内积与范数

将向量的内积与范数加以推广, 即可引出矩阵的内积与范数。

令 $m \times n$ 复矩阵 $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n]$ 和 $\mathbf{B} = [\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n]$, 将这两个矩阵分别“拉长”为 $mn \times 1$ 向量

$$\mathbf{a} = \text{vec}(\mathbf{A}) = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \text{vec}(\mathbf{B}) = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{b}_n \end{bmatrix}$$

$\text{vec}(\mathbf{A})$ 称为矩阵 \mathbf{A} 的 (列) 向量化。矩阵的向量化将在 1.11 节中作详细介绍。

矩阵的内积记作 $\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle: \mathbb{C}^{m \times n} \times \mathbb{C}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{C}$, 定义为两个“拉长向量” \mathbf{a} 和 \mathbf{b} 之间的内积

$$\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle = \langle \text{vec}(\mathbf{A}), \text{vec}(\mathbf{B}) \rangle = \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i^H \mathbf{b}_i = \sum_{i=1}^n \langle \mathbf{a}_i, \mathbf{b}_i \rangle \quad (1.4.34)$$

或等价写作

$$\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle = \text{vec}(\mathbf{A})^H \text{vec}(\mathbf{B}) = \text{tr}(\mathbf{A}^H \mathbf{B}) \quad (1.4.35)$$

式中 $\text{tr}(\mathbf{C})$ 表示正方形矩阵 \mathbf{C} 的迹函数, 定义为该矩阵对角元素之和。

令 \mathbb{K} 表示一实数域或复数域, $\mathbb{K}^{m \times n}$ 表示 $m \times n$ 实数或复数矩阵的集合。

矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{K}^{m \times n}$ 的范数记作 $\|\mathbf{A}\|$, 它是矩阵 \mathbf{A} 的实值函数, 必须具有以下性质:

(1) 正值性: 对于任何非零矩阵 $\mathbf{A} \neq \mathbf{O}$, 其范数大于零, 即 $\|\mathbf{A}\| > 0$ 若 $\mathbf{A} \neq \mathbf{O}$ (零矩阵); 并且 $\|\mathbf{A}\| = 0$ 当且仅当 $\mathbf{A} = \mathbf{O}$ 。

(2) 正比例性: 对于任意 $c \in \mathbb{K}$, 有 $\|c\mathbf{A}\| = |c| \cdot \|\mathbf{A}\|$ 。

(3) 三角不等式: $\|\mathbf{A} + \mathbf{B}\| \leq \|\mathbf{A}\| + \|\mathbf{B}\|$ 。

(4) 两个矩阵乘积的范数小于或等于两个矩阵范数的乘积, 即 $\|\mathbf{AB}\| \leq \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{B}\|$ 。

例 1.4.2 考查 $n \times n$ 矩阵 \mathbf{A} 的实值函数 $f(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$ 。容易验证:

(1) $f(\mathbf{A}) \geq 0$, 并且当 $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ 即 $a_{ij} \equiv 0$ 时 $f(\mathbf{A}) = 0$ 。

(2) $f(c\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |ca_{ij}| = |c| \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}| = |c|f(\mathbf{A})$ 。

(3) $f(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (|a_{ij} + b_{ij}|) \leq \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (|a_{ij}| + |b_{ij}|) = f(\mathbf{A}) + f(\mathbf{B})$ 。

(4) 对于两个矩阵的乘积, 有

$$\begin{aligned} f(\mathbf{AB}) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left| \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj} \right| \leq \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n |a_{ik}| |b_{kj}| \\ &\leq \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left(\sum_{k=1}^n |a_{ik}| \sum_{l=1}^n |b_{kl}| \right) = f(\mathbf{A})f(\mathbf{B}) \end{aligned}$$

因此, 实函数 $f(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$ 是一种矩阵范数。

矩阵的范数有三种主要类型: 诱导范数、元素形式范数和 Schatten 范数。

1. 诱导范数 (induced norm)

诱导范数又称 $m \times n$ 矩阵空间上的算子范数 (operator norm), 定义为

$$\|\mathbf{A}\| = \max\{\|\mathbf{Ax}\| : \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n, \|\mathbf{x}\| = 1\} \quad (1.4.36)$$

$$= \max\left\{\frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{x}\|} : \mathbf{x} \in \mathbb{K}^n, \mathbf{x} \neq \mathbf{0}\right\} \quad (1.4.37)$$

常用的诱导范数为 p -范数

$$\|\mathbf{A}\|_p \stackrel{\text{def}}{=} \max_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\|\mathbf{Ax}\|_p}{\|\mathbf{x}\|_p} \quad (1.4.38)$$

p 范数也称 Minkowski p 范数或者 L_p 范数。特别地, $p = 1, 2, \infty$ 时, 对应的诱导范数分

别为

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}| \quad (1.4.39)$$

$$\|\mathbf{A}\|_{\text{spec}} = \|\mathbf{A}\|_2 \quad (1.4.40)$$

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad (1.4.41)$$

也就是说, 诱导 L_1 和 L_∞ 范数分别直接是该矩阵的各列元素绝对值之和的最大值 (最大绝对列和) 及最大绝对行和; 而诱导 L_2 范数则是矩阵 \mathbf{A} 的最大奇异值。

诱导 L_1 范数 $\|\mathbf{A}\|_1$ 和诱导 L_∞ 范数 $\|\mathbf{A}\|_\infty$ 也分别称为绝对列和范数 (column-sum norm) 及绝对行和范数 (row-sum norm)。诱导 L_2 范数习惯称为谱范数 (spectrum norm)。

例如, 矩阵

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 3 \\ -4 & 5 & -6 \\ 7 & -8 & -9 \\ -10 & 11 & 12 \end{bmatrix}$$

的绝对列和范数与绝对行和范数分别为

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max\{22, 26, 30\} = 30, \quad \|\mathbf{A}\|_\infty = \max\{6, 15, 24, 33\} = 33$$

2. “元素形式”范数 (“entrywise” norm)

将 $m \times n$ 矩阵先按照列堆栈的形式, 排列成一个 $mn \times 1$ 向量, 然后采用向量的范数定义, 即得到矩阵的范数。由于这类范数是使用矩阵的元素表示的, 故称为元素形式范数。元素形式范数是下面的 p 矩阵范数

$$\|\mathbf{A}\|_p \stackrel{\text{def}}{=} \left(\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^p \right)^{1/p} \quad (1.4.42)$$

以下是三种典型的元素形式 p 范数:

(1) L_1 范数 (和范数) ($p = 1$)

$$\|\mathbf{A}\|_1 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad (1.4.43)$$

(2) Frobenius 范数 ($p = 2$)

$$\|\mathbf{A}\|_F \stackrel{\text{def}}{=} \left(\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2 \right)^{1/2} \quad (1.4.44)$$

(3) 最大范数 (max norm) 即 $p = \infty$ 的 p 范数, 定义为

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{i=1, \dots, m; j=1, \dots, n} \{|a_{ij}|\} \quad (1.4.45)$$

Frobenius 范数可以视为向量的 Euclidean 范数对按照矩阵各列依次排列的“拉长向量” $\mathbf{x} = [a_{11}, \dots, a_{m1}, a_{12}, \dots, a_{m2}, \dots, a_{1n}, \dots, a_{mn}]^T$ 的推广。矩阵的 Frobenius 范数有时也称 Euclidean 范数、Schur 范数、Hilbert-Schmidt 范数或者 L_2 范数。

Frobenius 范数又可写作迹函数的形式

$$\|\mathbf{A}\|_F \stackrel{\text{def}}{=} \langle \mathbf{A}, \mathbf{A} \rangle^{1/2} = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{A}^H \mathbf{A})} \quad (1.4.46)$$

由正定的矩阵 $\mathbf{\Omega}$ 进行加权的 Frobenius 范数

$$\|\mathbf{A}\|_{\Omega} = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{A}^H \mathbf{\Omega} \mathbf{A})} \quad (1.4.47)$$

称为 Mahalanobis 范数。

Schatten 范数就是用矩阵的奇异值定义的范数，将在第 5 章 (奇异值分析) 中介绍。

注意，向量 \mathbf{x} 的 L_p 范数 $\|\mathbf{x}\|_p$ 相当于该向量的长度。当矩阵 \mathbf{A} 作用于长度为 $\|\mathbf{x}\|_p$ 的向量 \mathbf{x} 时，得到线性变换结果为向量 $\mathbf{A}\mathbf{x}$ ，其长度为 $\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_p$ 。线性变换矩阵 \mathbf{A} 可视为一线性放大器算子。因此，比率 $\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_p / \|\mathbf{x}\|_p$ 提供了线性变换 $\mathbf{A}\mathbf{x}$ 相对于 \mathbf{x} 的放大倍数，而矩阵 \mathbf{A} 的 p 范数 $\|\mathbf{A}\|_p$ 是由 \mathbf{A} 产生的最大放大倍数。类似地，放大器算子 \mathbf{A} 的最小放大倍数由

$$\min |\mathbf{A}|_p \stackrel{\text{def}}{=} \min_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_p}{\|\mathbf{x}\|_p} \quad (1.4.48)$$

给出。比率 $\|\mathbf{A}\|_p / \min |\mathbf{A}|_p$ 描述放大器算子 \mathbf{A} 的“动态范围”。

若 \mathbf{A}, \mathbf{B} 是 $m \times n$ 矩阵，则矩阵的范数具有以下性质

$$\|\mathbf{A} + \mathbf{B}\| + \|\mathbf{A} - \mathbf{B}\| = 2(\|\mathbf{A}\|^2 + \|\mathbf{B}\|^2) \quad (\text{平行四边形法则}) \quad (1.4.49)$$

$$\|\mathbf{A} + \mathbf{B}\| \cdot \|\mathbf{A} - \mathbf{B}\| \leq \|\mathbf{A}\|^2 + \|\mathbf{B}\|^2 \quad (1.4.50)$$

以下是矩阵的内积与范数之间的关系^[238]。

(1) Cauchy-Schwartz 不等式

$$|\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle|^2 \leq \|\mathbf{A}\|^2 \|\mathbf{B}\|^2 \quad (1.4.51)$$

等号成立，当且仅当 $\mathbf{A} = c\mathbf{B}$ ，其中， c 是某个复常数。

(2) Pathagoras 定理: $\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle = 0 \Rightarrow \|\mathbf{A} + \mathbf{B}\|^2 = \|\mathbf{A}\|^2 + \|\mathbf{B}\|^2$

(3) 极化恒等式

$$\text{Re}(\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle) = \frac{1}{4} (\|\mathbf{A} + \mathbf{B}\|^2 - \|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|^2) \quad (1.4.52)$$

$$\text{Re}(\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle) = \frac{1}{2} (\|\mathbf{A} + \mathbf{B}\|^2 - \|\mathbf{A}\|^2 - \|\mathbf{B}\|^2) \quad (1.4.53)$$

式中 $\text{Re}(\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle)$ 表示 $\mathbf{A}^H \mathbf{B}$ 的实部。

$\min\{m, n\}$ 。若 $p \times q$ 矩阵 B 是 A 的子矩阵, 其奇异值 $\gamma_1 \geq \dots \geq \gamma_{\min\{p, q\}}$, 则

$$\sigma_i \geq \gamma_i, \quad i = 1, \dots, \min\{p, q\} \quad (5.2.23)$$

并且

$$\gamma_i \geq \sigma_{i+(m-p)+(n-q)}, \quad i \leq \min\{p+q-m, p+q-n\} \quad (5.2.24)$$

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 A 的谱范数等于 A 的最大奇异值, 即

$$\|A\|_{\text{spec}} = \sigma_1 \quad (5.2.25)$$

注意到矩阵 A 的 Frobenius 范数 $\|A\|_F$ 是酉不变的, 即 $\|U^H A V\|_F = \|A\|_F$, 故有

$$\|A\|_F = \left[\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2 \right]^{1/2} = \|U^H A V\|_F = \|\Sigma\|_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \dots + \sigma_r^2} \quad (5.2.26)$$

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。

2. 奇异值与行列式的关系

设 A 是 $n \times n$ 正方形矩阵。由于酉矩阵的行列式之绝对值等于 1, 所以由定理 5.2.1 有

$$|\det(A)| = |\det \Sigma| = \sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_n \quad (5.2.27)$$

若所有 σ_i 都不等于零, 则 $|\det(A)| \neq 0$, 这表明 A 是非奇异的。若至少有一个 $\sigma_i (i > r)$ 等于零, 则 $\det(A) = 0$, 即 A 奇异。这就是之所以把全部 σ_i 值统称为奇异值的原因。

3. 奇异值与条件数的关系

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

$$\text{cond}(A) = \sigma_1 / \sigma_p, \quad p = \min\{m, n\} \quad (5.2.28)$$

由定义式 (5.2.28) 可以看出, 条件数是一个大于或等于 1 的正数, 因为 $\sigma_1 \geq \sigma_p$ 。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, 但很大时, 就称 A 是接近奇异的。这意味着, 当条件数很大时, A 的行向量或列向量的线性相关性很强。另由定义式 (5.1.8) 易知, 正交或酉矩阵 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 (5.2.28) 也可用作条件数 $\text{cond}(A)$ 的评价。

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

$$A^H A = V \Sigma^2 V^H \quad (5.2.29)$$

式中, $\mathcal{P}_\Omega: \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$ 是到指标集 Ω 的投影

$$[\mathcal{P}_\Omega(\mathbf{D})]_{ij} = \begin{cases} D_{ij}, & (i, j) \in \Omega \\ 0, & \text{否则} \end{cases} \quad (5.6.4)$$

若令 $\mathbf{D} = \mathbf{A} + \mathbf{E}$ 中的“噪声矩阵” $\mathbf{E} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 的平均平方元素值 $\sigma^2 = \frac{1}{mn} \|\mathbf{E}\|_2^2$, 并且被恢复的矩阵为 \mathbf{X} , 则矩阵恢复分为以下四种类型^[174]:

(1) 低秩矩阵 \mathbf{A} 的精确恢复 (exact recovery) $\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{A}^*$.

(2) 低秩矩阵 \mathbf{A} 的近精确恢复 (near-exact recovery) $\frac{1}{mn} \|\hat{\mathbf{X}} - \mathbf{A}^*\|_2^2 \leq \epsilon \cdot \sigma^2$.

(3) 低秩矩阵 \mathbf{A} 的逼近恢复 (approximate recovery) $\frac{1}{mn} \|\hat{\mathbf{X}} - \mathbf{A}^*\|_2^2 \leq \epsilon \cdot \text{scale}(\mathbf{A})$, 其中 $\text{scale}(\mathbf{A}) = \frac{1}{mn} \|\mathbf{A}\|_F^2$ (平均平方元素幅值) 或者 $\text{scale}(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_\infty = \max\{A_{ij}\}$ (最大元素幅值)。

(4) 样本矩阵 \mathbf{D} 的逼近恢复 $\frac{1}{mn} \|\hat{\mathbf{X}} - \mathbf{D}\|_2^2 \leq \sigma^2 + \epsilon \cdot \text{scale}(\mathbf{A})$.

注意, 精确和近精确恢复要求低秩矩阵 \mathbf{A} 满足严格的非相干性假设, 而一般的低秩矩阵很难满足这一条件。因此, 对于不满足严格的非相干条件的低秩矩阵, 只能实现逼近恢复。

式 (5.6.3) 所示矩阵完备问题是一个 NP 难题 (NP-hard problem)。为了使矩阵完备问题可解, 必须将矩阵的秩最小化予以松弛。这一松弛与矩阵的 Schatten 范数密切相关。

若 $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{m \times m}$ 和 $\mathbf{V} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 是两个酉矩阵, 满足 $\|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{UAV}\|$ 的范数称为酉不变范数 (unitarily invariant norms)^[505, 314]。

令矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{m \times n}$ 有奇异值分解 $\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^H$ 。显然, $\|\mathbf{A}\| = \|\mathbf{U}^H\mathbf{A}\mathbf{V}\| = \|\Sigma\|$ 是一酉不变范数。

令 $\boldsymbol{\sigma} = [\sigma_1, \dots, \sigma_k]^T, k = \min\{m, n\}$ 表示全部奇异值组成的向量, 则酉不变范数 $\|\mathbf{A}\| = \|\Sigma\|$ 可以用奇异值向量的范数形式定义: $\|\mathbf{A}\| = \|\boldsymbol{\sigma}\|$ 。特别地, 称

$$\|\mathbf{A}\|_p = \|\boldsymbol{\sigma}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{\min\{m, n\}} \sigma_i^p \right)^{1/p} \quad (5.6.5)$$

是矩阵 \mathbf{A} 的 Schatten p 范数。

最常用的 Schatten 范数是 $p = 1, 2, \infty$ 三种情况:

(1) $p = 1$ 时的 Schatten 范数称为核范数 (nuclear norm), 定义为一矩阵的所有奇异值之和

$$\|\mathbf{A}\|_* = \sum_{i=1}^{\min\{m, n\}} \sigma_i = \text{tr} \left(\sqrt{\mathbf{A}^H \mathbf{A}} \right) \quad (5.6.6)$$

式中, $\mathbf{B} = \sqrt{\mathbf{A}^H \mathbf{A}}$ 满足 $\mathbf{B}^H \mathbf{B} = \mathbf{A}^H \mathbf{A}$ 。

(2) $p = 2$ 时的 Schatten 范数与 Frobenius 范数等价

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{\min\{m, n\}} \sigma_i^2} = \sqrt{\text{tr}(\mathbf{A}^H \mathbf{A})} = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2} \quad (5.6.7)$$

(3) $p = \infty$ 时的 Schatten 范数与诱导 l_2 范数 (谱范数) 相同, 即 $\|A\|_\infty = \sigma_{\max}(A)$ 。

因此, 核范数、Frobenius 范数和谱范数都是酉不变范数。

下面是精确地恢复低秩矩阵 A 和稀疏矩阵 E 的两个要点:

(1) 大多数的低秩矩阵都可以由样本元素的集合精确恢复, 这些集合甚至可以只有少得惊人的元素数目。

(2) 秩 r 的矩阵 $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 可以通过求解下列优化问题完好地恢复

$$\min \|X\|_* \quad \text{subject to } X_{ij} = M_{ij}, \quad (i, j) \in \Omega \quad (5.6.8)$$

只要样本元素的个数

$$m \geq Cn^{6/5}r \log n \quad (5.6.9)$$

对某个正的常数 C 成立。式 (5.6.8) 中, $\|X\|_* = \sum_i \sigma_i(X)$ 表示矩阵的核范数即矩阵所有奇异值之和。

令 P_Ω 是到矩阵 X 的列空间的正交投影矩阵

$$P_\Omega = X(X^T X)^\dagger X^T, \quad X \in \Omega$$

则有 $P_\Omega X = X, X \in \Omega$, 相应的元素形式为

$$[P_\Omega X]_{ij} = \begin{cases} X_{ij}, & X_{ij} \in \Omega \\ 0, & X_{ij} \notin \Omega \end{cases} \quad (5.6.10)$$

于是, 核范数最小化问题式 (5.6.8) 可以等价写作

$$\min \|X\|_* \quad \text{subject to } P_\Omega X = P_\Omega M \quad (5.6.11)$$

为了解矩阵完备问题, Candès 等人^[88]提出了稳健主分量分析 (robust principal component analysis) 法: 将 NP 难题的秩最小化松弛为核范数的最小化, 利用主分量追踪 (principal component pursuit), 通过求解约束最小化问题

$$\min_{A, E} f(A, E) = \|A\|_* + \lambda \|E\|_1 \quad \text{subject to } D = A + E \quad (5.6.12)$$

从数据矩阵 $D \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 恢复一个未知的低秩矩阵 A 与一个未知的稀疏矩阵 E 。式中, $\|A\|_* = \sum_i^{\min\{m, n\}} \sigma_i(A)$ 表示矩阵的核范数即所有奇异值之和, 反映低秩矩阵的代价或者成本; $\|E\|_1 = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |E_{ij}|$ 为矩阵 E 的所有元素的绝对值之和, 描述稀疏矩阵的代价; 常数 $\lambda > 0$ 的作用是平衡低秩要求与稀疏要求之间的矛盾。

在没有关于稀疏模式与/或矩阵秩的附加信息的情况下, 矩阵分解 $D = A + E$ 无疑是一个病态问题, 存在着低秩与稀疏之间的不确定性, 从而引发下面两个可辨识性问题:

(1) 低秩矩阵本身有可能是非常稀疏的。

(2) 稀疏矩阵的非零元素有可能只集中在矩阵的某个列, 该列元素就有可能否定低秩矩阵的对应列的元素, 从而改变低秩矩阵的秩。