第七章 矩阵的广义逆

岳晓青

同济大学数学科学学院

xiaoqingyue@tongji.edu.cn

由线性代数的知识我们知道，每个可逆矩阵A都唯一的逆，记为A^{-1}，且满足$AA^{-1}=A^{-1}A=E$. 可逆矩阵又叫非奇异矩阵且一定是一个方阵.

这一章我们将研究奇异方阵或长方形矩阵（行数与列数不等的矩阵）的“逆”，这样的矩阵一般称为广义逆矩阵.

广义逆矩阵的背景介绍：

*E.H.Moore*于1920年首次对$m\times n$矩阵给出广义逆的概念，若$A\in C^{m\times n}$, A在*Moore*意义下的广义逆满足

$$AX=P_{R(A)},\quad XA=P_{R(X)}$$

的矩阵$X\in C^{n\times m}$, 这里

$$R(A)=\left\{y\in C^m \,\middle|\, \text{至少存在一个}x\in C^n, \text{使 } y=Ax\right\}$$

表示矩阵A的像子空间(将在第二节中给出具体的定义),
P_L 表示在子空间L上的正交投影.

1955年 *R.Penrose*以更明确的形式给出了它的等价定义:

$\forall A \in C^{m\times n}, \exists | X \in C^{n\times m}$, 满足下面四个方程:

$$AXA = A \qquad (1)$$

$$XAX = X \qquad (2)$$

$$\left(\overline{AX}\right)^T = AX \qquad (3)$$

$$\left(\overline{XA}\right)^T = XA \qquad (4)$$

这四个方程称为*Penrose*方程, X称为*Penrose*一*Moore*逆
记作A^+.

注：(1) 若A是可逆方阵，则$X=A^{-1}$满足上面四个方程，即$A^{+}=A^{-1}$.

(2) 在实际应用中，为着不同的目的，可以定义不同意义的广义逆，即可研究满足*Penrose*方程中部分方程的矩阵：

设矩阵$A\in C^{m\times n}$, 用记号 $A\{i,j,\cdots,l\}$ 表示满足*Penrose*方程中的第i，第j,…,第l 个方程的那些$n\times m$阶矩阵的集合.

用符号 $A^{(i,j,\cdots,l)}$ 表示集合 $A\{i,j,\cdots,l\}$ 中任何一个矩阵，称其为A的一个 $\{i,j,\cdots,l\}$逆.

(3) 在本章中主要讨论实矩阵的广义逆矩阵A^{-}, 广义逆矩阵$A\{1,2\}$, 广义逆矩阵A^{+}及这些广义逆矩阵在解方程方面的应用.

§7.1 广义逆矩阵A^-

定义： $\forall A\in R^{m\times n}$，若$\exists X\in R^{n\times m}$，使 $AXA=A$ 则 $X\in A\{1\}$，此时称X为A的一个$\{1\}$逆，记作A^-或$A^{(1)}$

A^-的性质：设 $A\in R^{m\times n}$，$\lambda\in R$，$A^-\in A\{1\}$ 是A的某一个$\{1\}$逆，则有：

(1) $\left(A^-\right)^T\in A^T\{1\}$;

证明： $A^T\left(A^-\right)^T A^T = A^T$?

$$\because\quad AA^-A=A$$

$$\therefore\ A^T\left(A^-\right)^T A^T=\left(AA^-A\right)^T=A^T$$

$$\therefore\ \left(A^-\right)^T\in A^T\{1\}.$$

(2) 若A可逆，**则$A^{-1}=A^{-}$, 此时A^{-}唯一.**

证明： $A^{-1}=A^{-1}AA^{-1}=A^{-1}\left(AA^{-}A\right)A^{-1}=A^{-}$

即 $\forall A^{-}\in A\{1\}$ 有 $A^{-}=A^{-1}$

所以当A可逆时，集合$A\{1\}$只有唯一的一个元素A^{-1}.

(3) $\lambda^{+}A^{-}\in(\lambda A)\{1\}$，其中 $\lambda^{+}=\begin{cases}\lambda^{-1}, & \lambda\neq 0,\\ 0, & \lambda=0;\end{cases}$

证明： 若$\lambda=0$, 得$\lambda^{+}=0$, $\lambda^{+}A^{-}=O_{n\times m}\in O_{m\times n}\{1\}$.

若$\lambda\neq 0$, 得$\lambda^{+}=\lambda^{-1}$,

$\because (\lambda A)\left(\lambda^{+}A^{-}\right)(\lambda A)=\lambda A\lambda^{-1}A^{-}\lambda A=\lambda AA^{-}A=\lambda A$

$\therefore$ 由A^{-} **的定义知** $\lambda^{+}A^{-}\in(\lambda A)\{1\}$.

(4) $rank(A^{-}) \geq rank(A)$;

证明: $rank(A) = rank(AA^{-}A)$

$$\leq rank(AA^{-}) \leq rank(A^{-})$$

两个矩阵乘积的秩一定小于等于其中任意一个矩阵的秩.

(5) 设矩阵P, Q可逆，则 $Q^{-1}A^{-}P^{-1} \in \left(PAQ\right)\{1\}$;

证明: $\left(PAQ\right)\left(Q^{-1}A^{-}P^{-1}\right)\left(PAQ\right)$

$$= PA(QQ^{-1})A^{-}(P^{-1}P)AQ = P(AA^{-}A)Q = PAQ$$

(6) $rank\left(AA^{-}\right) = rank\left(A^{-}A\right) = rank\left(A\right)$;

证明: $\because rank\left(A\right) = rank\left(AA^{-}A\right)$

$$\therefore rank\left(A\right) \leq rank\left(AA^{-}\right) \leq rank\left(A\right),$$

$$\therefore rank\left(A\right) \leq rank\left(A^{-}A\right) \leq rank\left(A\right).$$

(7) AA^-和A^-A都是幂等矩阵(若$B^2=B$则称B为幂等阵).

证明: $$\left(AA^-\right)^2 = AA^-AA^- = \left(AA^-A\right)A^- = AA^-$$
$$\left(A^-A\right)^2 = A^-AA^-A = A^-\left(AA^-A\right) = A^-A$$

下面讨论A的{1}逆A^-的计算方法:

例: 设 $A\in R^{m\times n}$,且A可写成如下分块矩阵 $A=\begin{bmatrix} E_r & O \\ O & O \end{bmatrix}$

其中E_r是r阶单位方阵, 求$A\{1\}$.

解: 设 $X\in A\{1\}$, 则 $X\in R^{n\times m}$,将X分块 $X=\begin{bmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix}$,

其中 $X_{11}\in R^{r\times r},\ X_{12}\in R^{r\times(m-r)},$
$X_{21}\in R^{(n-r)\times r},\ X_{22}\in R^{(n-r)\times(m-r)}.$

则有

$$AXA=\begin{bmatrix} E_r & O \\ O & O \end{bmatrix}\begin{bmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} E_r & O \\ O & O \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} X_{11} & X_{12} \\ O & O \end{bmatrix}\begin{bmatrix} E_r & O \\ O & O \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} X_{11} & O \\ O & O \end{bmatrix}.$$

$\because AXA=A \quad \therefore X_{11}=E_r$ 即

$$A\{1\}=\left\{X=\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix}\right\}$$

其中 $X_{12}\in R^{r\times(m-r)}$，$X_{21}\in R^{(n-r)\times r}$，$X_{22}\in R^{(n-r)\times(m-r)}$.

注： 若A是标准形时，我们已经求出$A\{1\}$, 那么若A是一般的矩阵, 则$A\{1\}$=?

定理: 设 $A\in R^{m\times n}$, $rank(A)=r$, $P\in R^{m\times m}$, $Q\in R^{n\times n}$,

其中P和Q均为可逆阵，且 $PAQ=\begin{bmatrix} E_r & O \\ O & O \end{bmatrix}$, 则$A\{1\}$中

任意矩阵可写成 $Q\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix}P$, 其中 $X_{12}\in R^{r\times(m-r)}$,

$X_{21}\in R^{(n-r)\times r}$, $X_{22}\in R^{(n-r)\times(m-r)}$ 为任意矩阵.

证明: 由上面例题知：$(PAQ)^{-}=\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix}$

再由性质(5)有：$Q^{-1}A^{-}P^{-1}\in(PAQ)\{1\}$,

$\therefore Q^{-1}A^{-}P^{-1}=\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix}$, 即 $A^{-}=Q\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix}P$.

注： 1. $\forall A \in R^{m\times n}$， $A\{1\} \neq \varnothing$.

2. $\because X_{12}, X_{21}, X_{22}$ 中的元素可任取，故当A不是可逆方阵时，A^-不唯一.

定理：设 $A \in R^{m\times n}$，$A^- \in A\{1\}$是A的某一个$\{1\}$逆，矩阵 $Y \in R^{n\times m}$ 是任意实矩阵，则

$$X = A^- + Y - A^- AYAA^- \in A\{1\},$$

且$A\{1\}$中任何一个矩阵都可表示成上述形式.

证明： 1) 需证 $X \in A\{1\}$;

$$\begin{aligned} AXA &= A(A^- + Y - A^- AYAA^-)A \\ &= AA^-A + AYA - (AA^-A)Y(AA^-A) \\ &= A + AYA - AYA \quad = A. \end{aligned}$$

2) $\forall B \in A\{1\}$, 要证 $B = A^{-} + Y - A^{-}AYAA^{-}$

取 $Y = B - A^{-}$, $AYA = A(B - A^{-})A = A - A = O$.

从而 $A^{-}AYAA^{-} = A^{-}(AYA)A^{-} = O$

$$B = A^{-} + Y = A^{-} + Y - A^{-}AYAA^{-}.$$

注：由定理可知，要计算A的$\{1\}$逆A^{-},必须求出可逆阵P, Q, 使PAQ为标准形，那么如何求可逆阵P和Q呢？

构造分块矩阵

$$B = \begin{bmatrix} A & E_m \\ E_n & O \end{bmatrix}_{(m+n)\times(m+n)} \qquad PAQ = \tilde{A} = \begin{bmatrix} E_r & O \\ O & O \end{bmatrix}_{m\times n}$$

$$\begin{bmatrix} P_{m\times m} & O \\ O & E_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A & E_m \\ E_n & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{n\times n} & O \\ O & E_m \end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix} PA & P \\ E_n & O \end{bmatrix}\begin{bmatrix} Q & O \\ O & E_m \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} PAQ & P \\ Q & O \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} \tilde{A} & P \\ Q & O \end{bmatrix}$$

即将A化为标准形 $\tilde{A}$的过程中，同时将E_m化为$P_{m\times m}$，E_n化为$Q_{n\times n}$.

由定理知$A\{1\}$中的矩阵可写为 $Q\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix}P$

例： 已知矩阵 $A=\begin{bmatrix} 0 & 2 & -4 \\ -1 & -4 & 5 \\ 3 & 1 & 7 \\ 0 & 5 & -10 \end{bmatrix}_{4\times 3}$ 求A的广义逆$A\{1\}$.

解：

$$B=\begin{bmatrix} A & E_4 \\ E_3 & O \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 & 2 & -4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & -4 & 5 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 7 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 5 & -10 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 1 & 0 & & & O_{3\times4} & \\ 0 & 0 & 1 & & & & \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[r_3-3r_2,\, r_4\times\frac{1}{5}]{r_1\times\frac{1}{2},\, r_2\times(-1)}\begin{bmatrix} 0 & 1 & -2 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & -5 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -11 & 22 & 0 & 3 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{5} \\ 1 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 1 & 0 & & & O_{3\times4} & \\ 0 & 0 & 1 & & & & \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[\substack{r_3+11r_1\\ r_4-r_1}]{r_2-4r_1}\begin{bmatrix} 0 & 1 & -2 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 3 & -2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{11}{2} & 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{5} \\ 1 & 0 & 0 & & & & \\ 0 & 1 & 0 & & & O_{3\times 4} & \\ 0 & 0 & 1 & & & & \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[\substack{c_3+2c_2 \\ r_4\times 5}]{c_3-3c_1}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{11}{2} & 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{5}{2} & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -3 & & & & \\ 0 & 1 & 2 & & & O_{3\times 4} & \\ 0 & 0 & 1 & & & & \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{11}{2} & 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{5}{2} & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -3 & & & & \\ 0 & 1 & 2 & & & O_{3\times 4} & \\ 0 & 0 & 1 & & & & \end{bmatrix}$$

$$\therefore P=\begin{bmatrix} -2 & -1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{11}{2} & 3 & 1 & 0 \\ -\frac{5}{2} & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad Q=\begin{bmatrix} 1 & 0 & -3 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

(可逆阵P和Q不唯一)

于是$A\{1\}$中的元素形如

$$A^{-}=Q\begin{bmatrix} E_2 & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix}P$$

其中

$$X_{12}\in R^{2\times 2}$$
$$X_{21}\in R^{1\times 2}$$
$$X_{22}\in R^{1\times 2}$$

§7.2 自反广义逆A{1,2}

定义： 设 $A \in R^{m\times n}$，若$X \in R^{n\times m}$， 且满足方程$AXA = A$和$XAX = X$，则称X是A的一个自反广义逆，记作$X=A^{(1,2)}$

A的所有自反广义逆的集合记为$A\{1,2\}$，显然，若X是A的自反广义逆，则A也是X的自反广义逆，这就是自反的含义.

定理： 任何矩阵$A \in R^{m\times n}$都有自反广义逆.

证明： 若$A=O_{m\times n}$，则$X=O_{n\times m}$就是A的自反广义逆.

若$A\neq O_{m\times n}$，则设rank(A)=r，存在可逆阵P和Q，使得

$$PAQ = \begin{bmatrix} E_r & O \\ O & O \end{bmatrix}$$

由第一节定理知：

$$X = Q\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix}_{n\times m} P \text{ 满足 } AXA = A$$

下设 $XAX=X$ 有

$$Q\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix} PP^{-1}\begin{bmatrix} E_r & O \\ O & O \end{bmatrix} Q^{-1}Q\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix} P$$

$$= Q\begin{bmatrix} E_r & O \\ X_{21} & O \end{bmatrix}\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix} P$$

$$= Q\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{21}X_{12} \end{bmatrix} P$$

$$X_{12} \in R^{r\times(m-r)}$$

$$X_{21} \in R^{(n-r)\times r}$$

$$X_{22} \in R^{(n-r)\times(n-r)}$$

即 $X_1 = Q\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{21}X_{12} \end{bmatrix}P$ 满足$AX_1A=A$，$X_1AX_1=X_1$为A 的自反广义逆.

注：任何矩阵的自反广义逆存在，但不一定唯一.

定理：$\forall A \in R^{m\times n}$，若$Y,Z \in A\{1\}$，那么$X = YAZ \in A\{1,2\}$

证明：
$$AXA = AYAZA = (AYA)ZA = AZA = A$$
$$XAX = YAZAYAZ = Y(AZA)YAZ = Y(AYA)Z$$
$$= YAZ = X$$

以下引进矩阵A的像子空间和核子空间的概念.

定义：设 $A\in R^{m\times n}$，令$R(A)=\{y \mid y\in R^m$，至少有一个 $x\in R^n$，使得 $y=Ax\}$ 称$R(A)$为矩阵A的像子空间.

注： $A=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n)$， $Ae_i=\alpha_i$ $\therefore \alpha_i\in R(A)$

定义：设 $A\in R^{m\times n}$，令$N(A)=\{x \mid x\in R^n, Ax=0\}$

称$N(A)$为矩阵A的核子空间.

$$\dim N(A)=n-rank(A)$$

引理7.2.1：像子空间$R(A)$的维数等于矩阵A的秩.

$$\dim R(A)=rank(A).$$

证明：设 $A=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n)$， $y\in R(A)$ 则存在

$$x=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in R^n \text{ 使得 } y = Ax = (\alpha_1, \alpha_n, \cdots, \alpha_n)\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

$$= x_1\alpha_1 + x_2\alpha_2 + \cdots + x_n\alpha_n$$

设 $rank(A) = r$, $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$ **的最大线性无关组为** $\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_r$. **则** $\forall y \in R(A)$, y可由 $\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_r$ **线性表示，又** $\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_r$ **线性无关，因此** $\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_r$ **构成**$R(A)$**的一个基，即**$R(A)$**的维数为**r,

$$\dim R(A) = rank(A).$$

引理7.2.2： 设 $A\in R^{m\times n}, X\in R^{n\times m}$，若$R(XA)=R(X)$，

则存在 $Y\in R^{n\times m}$，使得$XAY=X$.

证明： 令 $q_1,q_2,\cdots,q_m$ 为R^m的一个基，$r_i=Xq_i$，

$i=1,2,\cdots,m$ 则由像子空间的定义知 $r_i\in R(X)$，

又 $R(XA)=R(X)$ $\therefore$ $r_i\in R(XA)$.

从而 $\exists p_i\in R^n$，使得$r_i=XAp_i, i=1,2,\cdots,m$

记 $P=(p_1,p_2,\cdots,p_m)\in R^{n\times m}$

$Q=(q_1,q_2,\cdots,q_m)\in R^{m\times m}$

$\because q_1,q_2,\cdots,q_m$为$R^m$的一个基， $\therefore$ Q可逆.

$\because r_i=Xq_i=XAp_i$ $\therefore$ $XQ=XAP$

又Q可逆有 $X=XAPQ^{-1}$

令$Y=PQ^{-1}$,于是 $X=XAY.$

下面我们可以证明$X\in A\{1,2\}$的充分必要条件.

定理： 设 $A\in R^{m\times n}, rank(A)=r, X\in R^{n\times m}$ 且$X\in A\{1\}$,

则 $X\in A\{1,2\} \Leftrightarrow rank(X)=rank(A)$

证明： $\Rightarrow$ 必要性：

$$\because X\in A\{1,2\} \qquad \therefore \quad AXA=A,\quad XAX=X$$

$$rank(A)=rank(AXA)\le rank(AX)\le rank(X)$$

$$rank(X)=rank(XAX)\le rank(XA)\le rank(A)$$

$$\therefore rank(X)=rank(A)$$

$\Leftarrow$ 充分性：（利用前面的两个引理证$XAX=X$）

1. 需证$R(XA)=R(X)$.

$\forall y\in R(XA)$, $\exists x\in R^n$ 使得 $y=XAx$,

令 $z=Ax$, 有 $y=Xz$, 即 $y\in R(X)$

$\therefore R(XA)\subseteq R(X)$.

又 $X\in A\{1\}$, 由A^-的性质6可得：

$$rank(AX)=rank(XA)=rank(A)=r$$

再由题设 $rank(X)=rank(A)=r$

得$rank(XA)=rank(X)$.

由引理1得 $\dim R(XA)=\dim R(X)$

因此有 $R(XA)=R(X)$.

2. 需证$XAX=X$.

由引理2得存在$Y\in R^{n\times m}$,

使得$XAY=X$, 左乘A有$AXAY=AY=AX$,

所以 $XAX=XAY=X$.

从而 $X\in A\{1,2\}$.

§7.3 广义逆矩阵A$^+$

定义： 设 $A\in R^{m\times n}$,若存在$X\in R^{n\times m}$, 满足$AXA=A \quad (1)$

$XAX=X \quad (2) \quad (AX)^T=AX \quad (3) \quad (XA)^T=XA \quad (4)$

则称X是A的彭罗斯一穆尔逆，又称A的“+”逆, 记作A^+

前面两节我们讲过$A\{1\}, A\{1,2\}$, 都非空，即A的$\{1\}$逆和自反逆均存在但不一定唯一.

$$X=Q\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix}P, \qquad X=Q\begin{bmatrix} E_r & X_{12} \\ X_{21} & X_{21}X_{12} \end{bmatrix}P,$$

定理： $\forall A\in R^{m\times n}$, A^+存在且唯一.

证明： 1. A^+的存在性;

若$A=O_{m\times n}$，则$X=O_{n\times m}$是A的一个A$^+$逆，故A$^+$存在.

若$A\neq O_{m\times n}$，设rank(A)=$r\neq 0$，由满秩分解

的定义知存在$m\times r$列满秩阵B 和$r\times n$行满秩阵C,
使$A=BC$. 即$rank(B)=rank(C)=r$

$\therefore$ CC^T, B^TB均为r 阶可逆阵.

令 $X=C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T$, 则 有

(1) $AXA=BCC^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^TBC=BC=A$

(2) $$XAX=C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^TBCC^T\left(CC^T\right)^{-1}$$
$$\times\left(B^TB\right)^{-1}B^T=C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T$$

(3) $$\left(AX\right)^T=\left(BCC^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T\right)^T$$
$$=\left(B\left(B^TB\right)^{-1}B^T\right)^T=B\left(\left(B^TB\right)^{-1}\right)^TB^T=B\left(B^TB\right)^{-1}B^T$$
$$=AX$$

(4) $(XA)^T = \left(C^T(CC^T)^{-1}(B^TB)^{-1}B^TBC\right)^T$

$$= \left(C^T(CC^T)^{-1}C\right)^T = C^T\left((CC^T)^{-1}\right)^T C$$

$$= C^T(CC^T)^{-1}C = XA$$

∴ X是A的一个A^+逆.

2. 下证唯一性;

设 X_1和X_2是A的A^+逆，需证X_1- X_2=O,即 $\forall x \in R^m$有

$(X_1 - X_2)x = 0$. 下设 $y = (X_1 - X_2)x$.

∵ X_1和X_2是A的A^+逆

$$\therefore \quad X_i = X_iAX_i = (X_iA)^T X_i = A^T X_i^T X_i \quad ,i = 1,2 \quad (1)$$

$$A = AX_iA = (AX_i)^T A \quad = X_i^T A^T A \quad ,i = 1,2 \quad (2)$$

由(1) 有 $X_1 - X_2 = A^T\left(X_1{}^T X_1 - X_2{}^T X_2\right)$

由(2) 有

$$\left(X_1{}^T - X_2{}^T\right)A^T A = O \xrightarrow{\text{取转置}} A^T A\left(X_1 - X_2\right) = O.$$

令 $z = \left(X_1{}^T X_1 - X_2{}^T X_2\right)x$ 有 $y = A^T z$

我们的目的是要证y =0, 即 $y^T y = 0$

而 $y^T y = y^T A^T z = \left(Ay\right)^T z$ 只需证 $Ay = 0,$

即 $\left(Ay\right)^T\left(Ay\right) = 0$

又 $\left(Ay\right)^T\left(Ay\right) = y^T A^T A y = y^T A^T A\left(X_1 - X_2\right)x = O.$

$$\therefore\ Ay = 0,\quad y^T y = 0 \quad \therefore\ y = 0$$

由x 的任意性知 $X_1 = X_2$ 即A^+的唯一性成立.

广义逆矩阵A^+的性质

(1) $\left(A^+\right)^+ = A,\ \left(A^T\right)^+ = \left(A^+\right)^T$

证:由定义 $A^+AA^+ = A^+ \qquad AA^+A = A$

$$\left(A^+A\right)^T = A^+A \qquad \left(AA^+\right)^T = AA^+$$

$$A^T\left(A^+\right)^T A^T = (AA^+A)^T = A^T$$

$$\left(A^+\right)^T A^T \left(A^+\right)^T = \left(A^+AA^+\right)^T = \left(A^+\right)^T$$

$$\left(A^T\left(A^+\right)^T\right)^T = A^+A = \left(A^+A\right)^T = A^T\left(A^+\right)^T$$

$$\left(\left(A^+\right)^T A^T\right)^T = AA^+ = \left(AA^+\right)^T = \left(A^+\right)^T A^T$$

广义逆矩阵A^+的性质

(2) 若A为可逆方阵，则 $A^+ = A^{-1}$

证：$A^{-1} = A^{-1}AA^{-1} = A^{-1}\left(AA^+A\right)A^{-1} = A^+$

(3) $(\lambda A)^+ = \lambda^+ A^+$, 其中 $\lambda^+ = \begin{cases} \lambda^{-1}, & \lambda \neq 0 \\ 0, & \lambda = 0 \end{cases}$.

证：$\lambda \neq 0$

$$(\lambda A)\left(\lambda^+ A^+\right)(\lambda A) = \lambda\lambda^+\lambda\left(AA^+A\right) = \lambda A$$

$$\left(\lambda^+ A^+\right)(\lambda A)\left(\lambda^+ A^+\right) = \lambda^+\lambda\lambda^+\left(A^+AA^+\right) = \lambda^+ A^+$$

$$\left(\lambda A\lambda^+ A^+\right)^T = \left(\lambda\lambda^+ AA^+\right)^T = \left(AA^+\right)^T = AA^+$$

$$= (\lambda A)\left(\lambda^+ A^+\right)$$

$$\left(\lambda^+A^+\lambda A\right)^T=\left(\lambda^+\lambda A^+A\right)^T=\left(A^+A\right)^T=A^+A$$

$$=\left(\lambda^+A^+\right)\left(\lambda A\right)$$

(4) $rank\left(A^+\right)=rank\left(A^+A\right)=rank\left(AA^+\right)=rank\left(A\right)$

证明:

由定理7.2.3 $A^+\in A\{1,2\}, rank\left(A^+\right)=rank\left(A\right),$

$A^+\in A\{1\}$ 性质6 $rank\left(A\right)=rank\left(A^+A\right)=rank\left(AA^+\right)$

$$rank\left(A^+\right)=rank\left(A^+AA^+\right)\le rank\left(A^+A\right)\le rank\left(A\right)$$

$$\le rank\left(AA^+\right)$$

$$rank\left(A\right)=rank\left(AA^+A\right)\le rank\left(AA^+\right)\le rank\left(A^+\right)$$

$$\le rank\left(AA^+\right)$$

(5) $A^{+}=\left(A^{T}A\right)^{+}A^{T}=A^{T}\left(AA^{T}\right)^{+}$

证明：$A_{m\times n}=B_{m\times r}C_{r\times n}$ 为A的满秩分解，其中B为列满秩矩阵，C 为行满秩矩阵，则由定理1的证明知：

$$A^{+}=C^{T}\left(CC^{T}\right)^{-1}\left(B^{T}B\right)^{-1}B^{T},$$

$A^{T}A=C^{T}B^{T}BC=\left(C^{T}B^{T}B\right)C$为$A^{T}A$的一个满秩分解.

$\because rank\left(A^{T}A\right)=rank\left(A\right),\ \left(C^{T}B^{T}B\right)_{n\times r}$为列满秩矩阵，

$C_{r\times n}$为行满秩矩阵；

$\therefore A^{T}A=\left(C^{T}B^{T}B\right)C$ 可看作为$A^{T}A$的一个满秩分解.

$$\left(A^TA\right)^+=C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(\left(C^TB^TB\right)^TC^TB^TB\right)^{-1}\left(C^TB^TB\right)^T$$

$$=C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TBCC^TB^TB\right)^{-1}B^TBC$$

$$=C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^TBC$$

$$=C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}\left(CC^T\right)^{-1}C$$

$$\left(A^TA\right)^+A^T=C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}\left(CC^T\right)^{-1}CC^TB^T$$

$$=C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T$$

$$=A^+$$

同理：$A^+=C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T$，

$AA^T=BCC^TB^T=B\left(CC^TB^T\right)$ 为AA^T的一个满秩分解.

$$\left(AA^T\right)^+ = \left(CC^TB^T\right)^T\left(\left(CC^TB^T\right)\left(CC^TB^T\right)^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T$$

$$= BCC^T\left(CC^TB^TBCC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T$$

$$= BCC^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T$$

$$= B\left(B^TB\right)^{-1}\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T$$

$$A^T\left(AA^T\right)^+ = C^TB^TB\left(B^TB\right)^{-1}\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T$$

$$= C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T$$

$$= A^+$$

$$\therefore\ A^+ = \left(A^TA\right)^+A^T = A^T\left(AA^T\right)^+$$

特别: 当$rank(A)=m$时, AA^T可逆 $\left(AA^T\right)^+=\left(AA^T\right)^{-1}$,从而

$$A^+=A^T\left(AA^T\right)^{-1}$$

当$rank(A)=n$ 时, A^TA可逆 $\left(A^TA\right)^+=\left(A^TA\right)^{-1}$,从而

$$A^+=\left(A^TA\right)^{-1}A^T$$

(6) $R\left(AA^+\right)=R(A),\ R\left(A^+A\right)=R\left(A^+\right)=R\left(A^T\right)$

证明: $\forall y\in R\left(AA^+\right),\exists x\in R^m$,使得 $y=AA^+x$

记 $A^+x=z$ 有 $y=Az\in R(A)$, 即$R\left(AA^+\right)\subseteq R(A)$

同理有 $R\left(A^+A\right)\subseteq R\left(A^+\right)$

$$R\left(A^+\right)=R\left(A^T\left(AA^T\right)^+\right)\subseteq R\left(A^T\right)$$

由性质4有 $rank\left(AA^+\right)=rank(A)$

$$rank\left(A^+A\right)=rank\left(A^+\right)=rank(A)=rank\left(A^T\right)$$

$$\therefore \dim R\left(AA^{+}\right)=\dim R(A)$$

$$\dim R\left(A^{+}A\right)=\dim R\left(A^{+}\right)=\dim R\left(A^{T}\right)$$

$$\therefore\ R\left(AA^{+}\right)=R(A),\ \ R\left(A^{+}A\right)=R\left(A^{+}\right)=R\left(A^{T}\right)$$

(7) $\left(A^{T}A\right)^{+}=A^{+}\left(A^{T}\right)^{+},\left(AA^{T}\right)^{+}=\left(A^{T}\right)^{+}A^{+}$

证明： $A^{+}\left(A^{T}\right)^{+}=A^{+}\left(A^{+}\right)^{T}=\left(A^{T}A\right)^{+}A^{T}\left(\left(A^{T}A\right)^{+}A^{T}\right)^{T}$

$$=\left(A^{T}A\right)^{+}\left(A^{T}A\right)\left(A^{T}A\right)^{+}$$

$$=\left(A^{T}A\right)^{+}$$

$$\left(A^{T}\right)^{+}A^{+}=\left(A^{+}\right)^{T}A^{+}=\left(A^{T}\left(AA^{T}\right)^{+}\right)^{T}A^{+}$$

$$=\left(AA^{T}\right)^{+}AA^{T}\left(AA^{T}\right)^{+}$$

$$=\left(AA^{T}\right)^{+}$$

(8) 若A为实对称方阵时，则 $AA^+ = A^+A$;

证：$A^+A = \left(A^+A\right)^T = A^T\left(A^+\right)^T = A^T\left(A^T\right)^+ = AA^+$

(9) ① $A = AA^T\left(A^+\right)^T = \left(A^+\right)^T A^T A$;

② $A^T = A^T AA^+ = A^+AA^T$ (由①取转置得)

证：$A = AA^+A = A\left(A^+A\right)^T = AA^T\left(A^+\right)^T$

$$A = AA^+A = \left(AA^+\right)^T A = \left(A^+\right)^T A^T A$$

定理：设 $A \in R^{m\times n}$, 若 $A = UBV^T$, 其中 $U \in R^{m\times m}$, $B \in R^{m\times n}$, $V \in R^{n\times n}$, 且U与V为正交矩阵，则 $A^+ = VB^+U^T$.

证明：记 $X = VB^+U^T$. 用定义来证明

(1) $AXA = UBV^TVB^+U^TUBV^T = UBB^+BV^T = UBV^T = A$

$$(2)\quad XAX = VB^{+}U^{T}UBV^{T}VB^{+}U^{T} = VB^{+}BB^{+}U^{T}$$

$$= VB^{+}U^{T} = A^{+} = X$$

$$(3)\quad \left(AX\right)^{T} = \left(UBV^{T}VB^{+}U^{T}\right)^{T} = \left(UBB^{+}U^{T}\right)^{T}$$

$$= U\left(BB^{+}\right)^{T}U^{T} = AX$$

$$\left(XA\right)^{T} = \left(VB^{+}U^{T}UBV^{T}\right)^{T} = \left(VB^{+}BV^{T}\right)^{T}$$

$$= V\left(B^{+}B\right)^{T}V^{T} = VB^{+}BV^{T} = \left(VB^{+}U^{T}\right)\left(UB^{+}V^{T}\right)$$

$$= XA$$

$$\therefore X = A^{+} = VB^{+}U^{T}$$

例：已知矩阵A的奇异值分解为 $A=U\Sigma V^T$，其中

$U\in R^{m\times m}, V\in R^{n\times n}$，$U$和$V$是正交矩阵，

$$\Sigma=\begin{bmatrix} D & O \\ O & O \end{bmatrix}\in R^{m\times n},$$

其中D是由矩阵A的非零奇异值构成的对角阵，求A^+

解：Σ的广义逆

$$\Sigma^+=\begin{bmatrix} D^{-1} & O \\ O & O \end{bmatrix}\in R^{n\times m},$$

由上面的定理知

$$A^+=V\Sigma^+U^T.$$

§7.4 A^+的计算方法

一、 当A为某些特殊矩阵时，A^+的计算方法：

1. A为行满秩矩阵，此时AA^T是可逆矩阵，

$$\left(AA^T\right)^+=\left(AA^T\right)^{-1}$$

由性质5：$A^+=A^T\left(AA^T\right)^+=A^T\left(AA^T\right)^{-1}$

例： 已知 $A=\left(a_1,a_2,\cdots\cdots,a_n\right)$为非零向量，求$A^+$.

解：

$$AA^T=\left(a_1,a_2,\cdots,a_n\right)\begin{bmatrix}a_1\\a_2\\\vdots\\a_n\end{bmatrix}=a_1^2+a_2^2+\cdots\cdots+a_n^2\neq 0$$

$$A^{+} = A^{T}\left(AA^{T}\right)^{-1} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \left(a_1^2 + a_2^2 + \cdots\cdots + a_n^2\right)^{-1}$$

$$= \left(\sum_{i=1}^{n} a_i^2\right)^{-1} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}.$$

2. A为列满秩矩阵，此时A^TA是可逆矩阵，

$$\left(A^T A\right)^+ = \left(A^T A\right)^{-1},$$

由性质5可得

$$A^+ = \left(A^T A\right)^{-1} A^T$$

例：已知 $A = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$ 为非零列向量，求A^+.

解：

$$A^T A = (a_1, a_2, \cdots, a_n)\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = a_1^2 + a_2^2 + \cdots\cdots + a_n^2 \neq 0$$

$$A^{+}=\left(A^{T}A\right)^{-1}A^{T}=\left(\sum_{i=1}^{n}a_i^2\right)^{-1}\left(a_1,a_2,\cdots,a_n\right).$$

注：对列满秩矩阵A, 也可以先把A的n列标准正交化, 得 $A=QR$， 其中Q为正交矩阵，R是n阶具有正对角元的上三角阵，于是

$$A^{+}=\left(A^{T}A\right)^{-1}A^{T}=\left(\left(QR\right)^{T}QR\right)^{-1}\left(QR\right)^{T}$$

$$=\left(R^{T}Q^{T}QR\right)^{-1}R^{T}Q^{T}=\left(R^{T}R\right)^{-1}R^{T}Q^{T}$$

$$=R^{-1}\left(R^{T}\right)^{-1}R^{T}Q^{T}=R^{-1}Q^{T}$$

即 $$A^{+}=R^{-1}Q^{T}.$$

例：已知 $A=\begin{bmatrix}1&3\\0&0\\2&1\end{bmatrix}$ 求A^{+}.

解：

$A=(\alpha_1,\alpha_2)$ 即 α_1,α_2 线性无关，令$\alpha_1=\beta_1$,即$\beta_1=\alpha_1$

$$\beta_2=\alpha_2-\frac{(\alpha_2,\beta_1)}{(\beta_1,\beta_1)}\beta_1=\begin{bmatrix}3\\0\\1\end{bmatrix}-\frac{5}{5}\begin{bmatrix}1\\0\\2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\0\\-1\end{bmatrix}$$ 则β_1,β_2正交.

令 $\gamma_1=\frac{\beta_1}{\|\beta_1\|},\gamma_2=\frac{\beta_2}{\|\beta_2\|}$, 则 $\gamma_1=\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix}1\\0\\2\end{bmatrix},\gamma_2=\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix}2\\0\\-1\end{bmatrix}$.

$$A=(\alpha_1,\alpha_2)\ =(\beta_1,\beta_2)\begin{bmatrix}1 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

$$=(\gamma_1,\gamma_2)\begin{bmatrix}\sqrt{5} & \\ & \sqrt{5}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}$$

令 $Q=(\gamma_1,\gamma_2)=\dfrac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix}1 & 2\\ 0 & 0\\ 2 & -1\end{bmatrix}$, $R=\sqrt{5}\begin{bmatrix}1 & 1\\ 0 & 1\end{bmatrix}$

$$A^{+}=R^{-1}Q^{T}=\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix}1 & -1\\ 0 & 1\end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix}1 & 0 & 2\\ 2 & 0 & -1\end{bmatrix}$$

$$=\frac{1}{5}\begin{bmatrix}-1 & 0 & 3\\ 2 & 0 & -1\end{bmatrix}$$

3. A是对角矩阵，$A=\operatorname{diag}\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\}$，则

$A^{+}=\operatorname{diag}\{\lambda_1^{+},\lambda_2^{+},\cdots,\lambda_n^{+}\}$，这里

$$\lambda_i^{+}=\begin{cases}\lambda_i^{-1}, & \lambda_i\neq 0,\\ 0, & \lambda_i=0;\end{cases}\qquad i=1,2,\cdots,n.$$

例：已知 $A=\begin{bmatrix}4 & & \\ & 2 & \\ & & 0\end{bmatrix}$ 求A^{+}.

解：

$$A^{+}=\begin{bmatrix}\frac{1}{4} & & \\ & \frac{1}{2} & \\ & & 0\end{bmatrix}$$

4. A是分块对角矩阵，$A=\operatorname{diag}\{A_1, A_2, \cdots, A_t\}$，其中 $A_1, A_2, \cdots, A_t$ 是任意实矩阵，则

$$A^+=\operatorname{diag}\{A_1^+, A_2^+, \cdots, A_t^+\}.$$

5. A是实对称矩阵，$A^T=A$，故存在正交矩阵Q，使得 $A=Q\Lambda Q^T$，其中 $\Lambda=\operatorname{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n\}$，

$\Lambda^+=\operatorname{diag}\{\lambda_1^+, \lambda_2^+, \cdots, \lambda_n^+\}$，于是 $A^+=Q\Lambda^+Q^T$.

例：已知 $A=\begin{bmatrix}4 & 2\\ 2 & 1\end{bmatrix}$ 求A^+.

解：

$$\lambda E-A=\begin{bmatrix}\lambda-4 & -2\\ -2 & \lambda-1\end{bmatrix},$$

$$|\lambda E-A|=\lambda^2-5\lambda=\lambda(\lambda-5),\ \lambda_1=0, \lambda_2=5.$$

$$\begin{bmatrix} -4 & -2 \\ -2 & -1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad p_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 \\ -2 & 4 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad p_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\beta_1 = p_1$$

$$\beta_2 = p_2 - \frac{(p_2, p_1)}{(p_1, p_1)} p_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} - O = p_2$$

p_1, p_2单位化有 $\gamma_1 = \dfrac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix}, \gamma_2 = \dfrac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix},$

$$\therefore Q = (\gamma_1, \gamma_2) = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 1 \end{bmatrix},$$

$$A = Q\begin{bmatrix} 0 & \\ & 5 \end{bmatrix}Q^T, \ \Lambda = \begin{bmatrix} 0 & \\ & 5 \end{bmatrix}, \ \Lambda^+ = \begin{bmatrix} 0 & \\ & \frac{1}{5} \end{bmatrix}.$$

$$\therefore A^+ = Q\Lambda^+Q^T = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & \\ & \frac{1}{5} \end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{25}\begin{bmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

二、当A为一般矩阵时，A^+的计算方法：

1. 用满秩分解方法计算A^+.

设 $A\in R^{m\times n}, rank(A)=r, A=BC$ 为A的满秩分解，其中 $B\in R^{m\times r}, C\in R^{r\times n}$ 由定理6.3.1知

$$A^+=C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T$$

例：求 A^+，其中

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

解：

$$A=(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)=\begin{bmatrix}1&0&1\\2&1&3\\0&1&1\end{bmatrix}\xrightarrow{r_2-2r_1}\begin{bmatrix}1&0&1\\0&1&1\\0&1&1\end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_3-r_2}\begin{bmatrix}1&0&1\\0&1&1\\0&0&0\end{bmatrix}=(\beta_1,\beta_2,\beta_3)=\begin{bmatrix}C\\O\end{bmatrix}$$

其中 $C=\begin{bmatrix}1&0&1\\0&1&1\end{bmatrix}$.

β_1,β_2线性无关, $\beta_3=\beta_1+\beta_2$, 因此α_1,α_2线性无关，且 $\alpha_3=\alpha_1+\alpha_2$.

取$B=(\alpha_1,\alpha_2)=\begin{bmatrix}1&0\\2&1\\0&1\end{bmatrix}$ 则有A的满秩分解为

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

$$CC^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\left(CC^T\right)^{-1} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$B^T B = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\left(B^T B\right)^{-1} = \frac{1}{6}\begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{bmatrix}$$

$$\therefore A^{+} = C^T \left(CC^T\right)^{-1} \left(B^T B\right)^{-1} B^T$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{6}\begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{6}\begin{bmatrix} 2 & 1 & -3 \\ -2 & 0 & 4 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

二、当A为一般矩阵时，A^+的计算方法：

2. 利用A^+的性质5 $A^+=\left(A^TA\right)^+A^T=A^T\left(AA^T\right)^+$ 来计算A^+.

设 $A\in R^{m\times n}$，于是A^TA是正定或半正定矩阵，故存在正交矩阵Q使得 $Q^TA^TAQ=\Lambda=\mathrm{diag}\left\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n\right\}$，其中 $\lambda_i\geq 0\left(i=1,2,\cdots,n\right)$是$A^TA$的特征值. 于是 $A^TA=Q\Lambda Q^T$ 为实对称矩阵，由定理7.3.2有

$$\left(A^TA\right)^+=Q\Lambda^+Q^T.$$

$$\therefore A^+=\left(A^TA\right)^+A^T=Q\Lambda^+Q^TA^T.$$

例： 已知矩阵 $A = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \\ 2 & -2 \end{bmatrix}$，求$A^+$.

解：

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ -1 & -1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \\ 2 & -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & -6 \\ -6 & 6 \end{bmatrix}$$

$$|\lambda E - A^T A| = \begin{vmatrix} \lambda - 6 & 6 \\ 6 & \lambda - 6 \end{vmatrix} = \lambda(\lambda - 12),$$

$$\therefore \lambda_1 = 0, \lambda_2 = 12.$$

$$\lambda_1 = 0 \quad (\lambda_1 E - A^T A) x = 0, \quad \begin{bmatrix} -6 & 6 \\ 6 & -6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = 0$$

$$\therefore q_1=\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix},\quad q_1'=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix},$$

$$\lambda_2=12,\quad \left(\lambda_2 E-A^T A\right)x=0,\quad \begin{bmatrix}6&6\\6&6\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=0$$

$$\therefore q_2=\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix},\quad q_2'=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\-1\end{bmatrix},$$

令 $Q=\left(q_1,q_2\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1&1\\1&-1\end{bmatrix}$,则有

$$A^T A=Q^T\begin{bmatrix}0&\\&12\end{bmatrix}Q$$

$$\Lambda = \begin{bmatrix} 0 & \\ & 12 \end{bmatrix}, \quad \Lambda^{+} = \begin{bmatrix} 0 & \\ & \frac{1}{12} \end{bmatrix},$$

$$\therefore A^{+} = Q\Lambda^{+}Q^{T}A^{T}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & \\ & \frac{1}{12} \end{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ -1 & -1 & -2 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{24}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{12}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ -1 & -1 & -2 \end{bmatrix}.$$

当$m< n$时，AA^T的阶数小于矩阵A^TA的阶数，为了运算简单，运用下面的公式：

$$A^{+}=A^T\left(AA^T\right)^{+}=A^TQ\Lambda^{+}Q^T.$$

$\wedge$是由AA^T的特征值构成的对角阵，$Q^T\left(AA^T\right)Q=\Lambda$，$Q$为正交矩阵.

例： 已知矩阵 $A=\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -2 & -2 & 2 \end{bmatrix}$，求$A^{+}$.

解：

$$AA^T=\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -2 & -2 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -2 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 3 & -6 \\ -6 & 12 \end{bmatrix}$$

$$|\lambda E - AA^T| = \begin{vmatrix} \lambda-3 & 6 \\ 6 & \lambda-12 \end{vmatrix} = \lambda(\lambda-15),$$

$$\therefore \lambda_1 = 0, \lambda_2 = 15.$$

$$\lambda_1 = 0 \qquad q_1 = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix};$$

$$\lambda_2 = 15, \quad q_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix};$$

$$\therefore Q = (q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix},$$ 则有

$$\Lambda = \begin{bmatrix} 0 & \\ & 15 \end{bmatrix}, \Lambda^+ = \begin{bmatrix} 0 & \\ & \frac{1}{15} \end{bmatrix}.$$

$$\therefore A^{+} = A^{T} Q \Lambda^{+} Q^{T}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -2 \\ -1 & 2 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \\ & \frac{1}{15} \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{15} \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -2 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}.$$

3. 用奇异值分解求A^+的计算方法：

设A有奇异值分解 $A=U\sum V^T$ 则 $A^+ = V\Sigma^+ U^T$.

例：已知矩阵 $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$, 用奇异值分解求$A^+$.

解：

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$$

$$|\lambda E - A^T A| = \begin{vmatrix} \lambda - 2 & -2 \\ -2 & \lambda - 2 \end{vmatrix} = \lambda(\lambda - 4),$$

$\therefore \lambda_1 = 4, \lambda_2 = 0.$ 故A的奇异值为2.

$$\begin{bmatrix} 4-2 & -2 \\ -2 & 4-2 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \qquad p_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -2 & -2 \\ -2 & -2 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad p_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$A^T A$ 的正交单位特征向量为 $\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}.$

于是D=2, $V = V^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, \quad \sum = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$

$$U_1 = AV_1D^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \times \frac{1}{2} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

解线性方程 $x_1 + x_2 = 0$ 得通解

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} k_1 + k_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

于是 $U=\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$,

$$A=U\Sigma_{3\times 2}V^T,$$

$$\therefore A^+=V\Sigma_{2\times 3}^+U^T.$$

$$A^+=V\Sigma^+U^T=\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$=\frac{1}{4}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

7.5 广义逆的应用

一、广义逆在解线性方程组上的应用

定理1：设 $A\in R^{m\times n}, B\in R^{p\times q}, D\in R^{m\times q}$ 为已知矩阵，$X\in R^{n\times p}$ 为未知矩阵，则

(1) 矩阵方程 $AXB=D$ 有解 $\Leftrightarrow AA^{+}DB^{+}B=D.$

(2) 当矩阵方程 $AXB=D$ 有解时，$A^{+}DB^{+}$ 是方程的一个特解，其通解为 $X=A^{+}DB^{+}+Y-A^{+}AYBB^{+}$，其中 $Y\in R^{n\times p}$ 为任意矩阵.

证明：(1) $\Leftarrow$ 令 $X_0=A^{+}DB^{+}$ 则 $AX_0B=D$ 即 X_0 为 $AXB=D$ 的一个解.

$\Rightarrow$ 若 $AXB=D$ 有解, 不妨设 X_0 为它的一个解, 则

$$D = AX_0B = \left(AA^+A\right)X_0\left(BB^+B\right)$$
$$= AA^+\left(AX_0B\right)B^+B = AA^+DB^+B$$

(2) 由(1)证明知$X_0=A^+DB^+$是矩阵方程的一个特解.

若$X = A^+DB^+ + Y - A^+AYBB^+, \ Y \in R^{n\times p}$ 则

$$AXB = AA^+DB^+B + AYB - AA^+AYBB^+B$$
$$= D$$ 即X是矩阵方程 $AXB=D$的解.

若X_1是矩阵方程 $AXB=D$的解, $AX_1B=D$,于是

$$X_1 = A^+DB^+ + X_1 - A^+DB^+$$
$$= A^+DB^+ + X_1 - A^+AX_1BB^+$$

即矩阵方程 $AXB=D$的解均可写成X的这种形式,

从而X即为方程的通解.

定理2：设 $A\in R^{m\times n}$，向量$b\in R^{m}$ 为已知，向量$X\in R^{n}$ 为未知矩阵，则

(1) 线性方程组$Ax=b$ 有解 $\Leftrightarrow$ $AA^{+}b=b$;

(2) 当$Ax=b$ 有解时，$A^{+}b$为它的一个特解，方程组的通解为 $x=A^{+}b+\left(E-A^{+}A\right)y$，其中 $y\in R^{n}$ 为任意列向量.

证明：令 $p=1, q=1, B=1, D=b$ 即可得到定理的结论.

引理：设矩阵 $A\in R^{m\times n}$，则 $R^{n}=R(A^{T})\oplus N\left(A\right)$.

证明：

$$R(A^{T})=\left\{y\in R^{n} \mid \exists x\in R^{m}\text{使}y=A^{T}x\right\}$$

$$N(A)=\left\{x\in R^{n} \mid Ax=0\right\}$$

设W是内积空间V的子空间，由$chap4$可知 $V=W\oplus W^{\perp}$.

下面首先证明：$N(A)=R(A^T)^{\perp}$.

$$R(A^T)=\left\{y\in R^n \mid \exists x\in R^m 使 y=A^T x\right\}$$

$$N(A)=\left\{x\in R^n \mid Ax=0\right\}$$

$\forall x\in R^m$, 若$y\in R(A^T)^{\perp}$, $\because A^T x\in R(A^T)$, $\therefore \left(y,A^T x\right)=0.$

$$\because \left(y,A^T x\right)=\left(A^T x\right)^T y=x^T Ay=\left(Ay,x\right)$$

$$\therefore \left(Ay,x\right)=0$$

由x的任意性知：$Ay=0$, 即$y\in N(A)$, 于是有

$$R(A^T)^{\perp}\subseteq N(A).$$

反之，若 $y\in N(A)$, 有$Ay=0$,

$$\left(Ay,x\right)=0=\left(y,A^T x\right)\quad \therefore y\in R(A^T)^{\perp}.$$

因此我们有 $R(A^T)^{\perp} = N(A)$. 从而

$$R^n = R(A^T) \oplus R(A^T)^{\perp} = R(A^T) \oplus N(A).$$

定理3: 设矩阵 $A \in R^{m\times n}$, 方程组$Ax=b$有解，则 $x_0 = A^+ b$ 为$Ax=b$的唯一属于 $R(A^T)$ 的解，且是全部解中长度最小的解，即x为$Ax=b$任一解时, $\|x_0\| \le \|x\|$.

证明: 1）由广义逆A^+的性质6: $R(A^+) = R(A^T)$.

$\because x_0 = A^+ b \in R(A^+)$.

$\therefore x_0 \in R(A^T)$.

2）唯一性：设 $u, v \in R(A^T)$ 方程组$Ax=b$的两个解，下证 $u=v$.

$$u-v\in R(A^T),\quad A(u-v)=Au-Av=b-b=0$$

$\therefore u-v\in N(A)$. 由引理知 $R(A^T)\cap N(A)=\{O\}$,

$\therefore u-v=0$, 从而得 $u=v$

3）设x为$Ax=b$的任一解，记作 $y=x\text{-}x_0$, 则

$$Ay=A(x-x_0)=Ax-Ax_0=b-b=0$$

$$\therefore y\in N(A)=R(A^T)^{\perp}$$

即y与x_0正交.

$$\|x\|^2=\|x_0+y\|^2=\|x_0\|^2+\|y\|^2\geq\|x_0\|^2$$

即

$$\|x_0\|\le\|x\|.$$

例：已知线性方程组$Ax=b$ 中

$$A=\begin{bmatrix}1 & 1 & -1\\ -2 & -2 & 2\end{bmatrix}, b=\begin{bmatrix}-1\\ 2\end{bmatrix}, x=\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}$$

求该方程组的最小长度解和通解.

解：

$$A=(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)=\begin{bmatrix}1 & 1 & -1\\ -2 & -2 & 2\end{bmatrix}\xrightarrow{r_2+2r_1}\begin{bmatrix}1 & 1 & -1\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

$$C=(1,1,-1),\quad B=\alpha_1=\begin{bmatrix}1\\ -2\end{bmatrix}$$

$A=BC$ 为A的满秩分解

$$CC^T=3,\quad (CC^T)^{-1}=\frac{1}{3},\quad B^TB=5,\quad (B^TB)^{-1}=\frac{1}{5},$$

$$\therefore A^{+} = C^{T}\left(CC^{T}\right)^{-1}\left(B^{T}B\right)^{-1}B^{T} = \frac{1}{15}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}(1,-2)$$

$$= \frac{1}{15}\begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -2 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}$$

$\therefore$方程组的最小长度解为

$$x_0 = A^{+}b = \frac{1}{15}\begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -2 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 \\ 2 \end{bmatrix} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

∴方程组的通解为

$$x = A^{+}b + \left(E - A^{+}A\right)y$$

$$= \frac{1}{3}\begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} - \frac{1}{15}\begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -2 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ -2 & -2 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 3y_1 - 1 \\ 3y_2 - 1 \\ 3y_3 + 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{3}\begin{bmatrix} y_1 + y_2 - y_3 \\ y_1 + y_2 - y_3 \\ -y_1 - y_2 + y_3 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2y_1 - y_2 + y_3 - 1 \\ -y_1 + 2y_2 + y_3 - 1 \\ y_1 + y_2 + 2y_3 + 1 \end{bmatrix}.$$

二、广义逆在解线性最小二乘问题上的应用

设矩阵 $A\in R^{m\times n}$,向量$b\in R^m$,线性方程组$Ax=b$, 当且仅当 $b\in R(A)$ 时有解，定理讲过$Ax=b$有解 $\Leftrightarrow AA^{+}b=b$; $A^{+}b$为$Ax=b$的一个特解，通解为

$$x=A^{+}b+\left(E-A^{+}A\right)y$$

当 $b\notin R\left(A\right)=\left\{a\in R^m \mid \exists x\in R^n 使得 a=Ax\right\}$,不存在 $x\in R^n$使得$Ax=b$成立, 此时$Ax=b$称为矛盾方程组.

若给定了矩阵A和向量b，对一切 $x\in R^n$, 残差向量 $r=b-Ax$都不等于零向量，希望能够找到一个 $x_*\in R^n$, 使得

$$\|b-Ax_*\|=\min_{x\in R^n}\|b-Ax\|,$$

这里的 x_*称为线性方程组$Ax=b$的最小二乘解.

定理1： x 为线性方程组 $Ax=b$ 的最小二乘解

$\Leftrightarrow$ x为方程组$A^T(Ax-b)=0$的解.

（法方程组或正规方程组）

证明： $\Leftarrow$ 充分性. 设x 满足$A^T(Ax-b)=0$ $\forall y\in R^n$ 需证

$$\|Ay-b\|^2 \geq \|Ax-b\|^2$$

$$\|Ay-b\|^2 = \|Ax-b+A(y-x)\|^2$$

$$=\|Ax-b\|^2+\|A(y-x)\|^2+2(Ax-b,A(y-x))$$

$$=\|Ax-b\|^2+\|A(y-x)\|^2+2(A^T(Ax-b),y-x)$$

$\geq \|Ax-b\|^2$ 即x 是方程组 $Ax=b$ 的最小二乘解.

$\Rightarrow$ 必要性.（反证法）

设x 是线性方程组$Ax=b$的最小二乘解,

但$A^T(Ax-b)=u\neq 0$. 令 $y=x-\varepsilon u$, 其中ε为任意正实数.

$$\|Ay-b\|^2=\|Ax-b-\varepsilon Au\|^2$$

$$=\|Ax-b\|^2+\varepsilon^2\|Au\|^2-2\varepsilon\left(Ax-b,Au\right)$$

$$=\|Ax-b\|^2+\varepsilon^2\|Au\|^2-2\varepsilon\left(A^T\left(Ax-b\right),u\right)$$

$$=\|Ax-b\|^2+\varepsilon^2\|Au\|^2-2\varepsilon\|u\|^2$$

$\because u\neq 0,\quad \therefore\|u\|^2>0,$取$\varepsilon$充分小，使得

$$\varepsilon^2\|Au\|^2-2\varepsilon\|u\|^2=\varepsilon\left(\varepsilon\|Au\|^2-2\|u\|^2\right)<0$$

从而 $\|Ay-b\|<\|Ax-b\|$,

这与x为最小二乘解矛盾.

注：

1）正规方程组$A^T(Ax-b)=0$，可写成$A^TAx=A^Tb$.

$$\because \left(A^TA\right)\left(A^TA\right)^{+}\left(A^Tb\right)=A^TA\left(\left(A^TA\right)^{+}A^T\right)b$$

$$=A^TAA^{+}b=A^T\left(AA^{+}\right)^Tb$$

$$=\left(AA^{+}A\right)^Tb=A^Tb$$

由定理$Ax=b$有解 $\Leftrightarrow$ $AA^{+}b=b$ 知正规方程组恒有解.

2）由定理可以利用$A^T(Ax-b)=0$来求最小二乘解，但实际计算可能造成误差较大，我们利用广义逆来计算最小二乘解.

定理2：x 为线性方程组 $Ax=b$ 的最小二乘解

$\Leftrightarrow$ x为方程组$Ax=AA^+b$ 的解, 且此时有

$$\min_x \|b-Ax\|=\|(E-AA^+)b\|.$$

证明： 显然，$Ax=AA^+b$恒有解，这是因为

$$AA^+\left(AA^+b\right)=AA^+b$$

记 $y=AA^+b-Ax, z=b-AA^+b,$

$\forall x\in R^n$, 有 $b-Ax=\left(AA^+b-Ax\right)+\left(b-AA^+b\right)=y+z.$

$$\begin{aligned}(y,z)&=\left(AA^+b-Ax, b-AA^+b\right)\\&=\left(AA^+b,b\right)-\left(Ax,b\right)-\left(AA^+b,AA^+b\right)+\left(Ax,AA^+b\right)\\&=\left(AA^+b,b\right)-\left(Ax,b\right)-\left(\left(AA^+\right)^T\left(AA^+\right)b,b\right)\\&\quad+\left(\left(AA^+\right)^T Ax,b\right)\end{aligned}$$

$$\because \left(AA^{+}\right)^{T}\left(AA^{+}\right)b=\left(A^{+}\right)^{T}A^{T}AA^{+}b = AA^{+}b$$

$$\left(AA^{+}\right)^{T}Ax=\left(A^{+}\right)^{T}A^{T}Ax = Ax$$

$\therefore \left(y,z\right)=0$ 即向量y与z正交.

$$\|b-Ax\|^{2}=\|y+z\|^{2}=\|y\|^{2}+\|z\|^{2}$$

$$\geq \|z\|^{2}=\|b-AA^{+}b\|^{2}=\|(E-AA^{+})b\|^{2}.$$

于是

$$\min_{x}\|b-Ax\|=\|(E-AA^{+})b\|.$$

$$\Leftrightarrow \quad y=0 \quad \Leftrightarrow \quad Ax=AA^{+}b.$$

定理3： $x_0 = A^+ b$ 是线性方程组 $Ax = b$ 的一个最小二乘解，最小二乘解的通解为 $x = A^+ b + \left(E - A^+ A\right) y$ 其中，E 为 n 阶单位阵，$y \in R^n$ 为任意向量.

证明： $\because Ax_0 = AA^+ b$，即 x_0 为 $Ax = AA^+ b$ 的解.

$\therefore$ 由定理2知 x_0 为 $Ax = b$ 的一个最小二乘解.

$\because Ax = AA^+ b$，恒有解，x_0 为它的特解.

$\therefore$ 线性方程组 $Ax = AA^+ b$ 的通解为

$$x = A^+ b + \left(E - A^+ A\right) y$$

由定理2知线性方程组 $Ax = b$ 的通解为

$$x = A^+ b + \left(E - A^+ A\right) y$$

定理4： $x_0 = A^+ b$ 是线性方程组 $Ax = b$ 的唯一属于 $R(A^{\mathrm{T}})$ 的最小二乘解，且是长度最小的最小二乘解.

证明：由定理2知只需验证 x_0 是线性方程组$Ax=AA^+b$的唯一属于$R(A^T)$的解，且是长度最小的解即可.

$$x_0 = A^+\left(AA^+b\right) = \left(A^+AA^+\right)b = A^+b.$$

由前面讲的定理即得结论.

上述定理表明了给定方程组 $Ax=b$, 向量 A^+b 给出了方程组各种意义下的解：

1．当$Ax=b$有解时，A^+b为方程组的唯一属于$R(A^T)$的解，且是全部解中长度最小的解；或是方程组的唯一解.

2. 当$Ax=b$为矛盾方程时，A^+b为它的唯一属于$R(A^T)$的最小二乘解，且是长度最小的最小二乘解；或是矛盾方程组的唯一最小二乘解.

例： 验证线性方程组$Ax=b$ 为矛盾方程组，其中

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 0 & 0\\ 2 & 4\end{bmatrix}, b=\begin{bmatrix}1\\ 1\\ 2\end{bmatrix}, x=\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}$$

并求该方程组的最小二乘解和最小长度二乘解.

解：

$$A=(\alpha_1,\alpha_2)=BC,\ B=\alpha_1=\begin{bmatrix}1\\ 0\\ 2\end{bmatrix},\ \ C=(1,2),$$

$A=BC$ 为A的满秩分解.

$$CC^T=5, \left(CC^T\right)^{-1}=\frac{1}{5},\ B^TB=5, \left(B^TB\right)^{-1}=\frac{1}{5},$$

$$\therefore A^+=C^T\left(CC^T\right)^{-1}\left(B^TB\right)^{-1}B^T=\frac{1}{25}\begin{bmatrix}1\\ 2\end{bmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 2\end{pmatrix}$$

$$\therefore A^{+} = \frac{1}{25}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 4 \end{bmatrix}.$$

$$AA^{+}b = \frac{1}{25}\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 0 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 4 \end{bmatrix} b = \frac{1}{25}\begin{bmatrix} 5 & 0 & 10 \\ 0 & 0 & 0 \\ 10 & 0 & 20 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix} \neq b,$$ 即方程组$Ax=b$无解.

$\therefore$方程组$Ax=b$为矛盾方程组，其最小长度最小二乘解为

$$x_0 = A^{+}b = \frac{1}{25}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \frac{1}{5}\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

∴方程组$Ax=b$的最小二乘解的通解为

$$x = A^{+}b + \left(E - A^{+}A\right)y$$

$$= \frac{1}{5}\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} + (E - \frac{1}{25}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 0 \\ 2 & 4 \end{bmatrix})\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{5}\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} + \frac{1}{5}\begin{bmatrix} 4 & -2 \\ -2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{5}\begin{bmatrix} 1 + 4y_1 - 2y_2 \\ 2 - 2y_1 + y_2 \end{bmatrix}.$$

例： 设线性方程组 $\begin{cases} x_1 - 2x_2 + x_3 = 0 \\ -2x_1 + 4x_2 - 2x_3 = 1, \\ 3x_1 - 6x_2 + 3x_3 = -2. \end{cases}$

用广义逆验证它是矛盾方程并求它的最小二乘解的通解.

解：

$$令 A = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ -2 & 4 & -2 \\ 3 & -6 & 3 \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$A=BC$ 为A的满秩分解. $B = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 3 \end{bmatrix}, \quad C = (1, -2, 1),$

$$\left(CC^T\right)^{-1} = \frac{1}{6}, \quad \left(B^T B\right)^{-1} = \frac{1}{14},$$

$$\therefore A^{+}=C^{T}\left(CC^{T}\right)^{-1}\left(B^{T}B\right)^{-1}B^{T}=\frac{1}{84}\begin{bmatrix}1\\-2\\1\end{bmatrix}\begin{pmatrix}1 & -2 & 3\end{pmatrix}$$

$$=\frac{1}{84}\begin{bmatrix}1 & -2 & 3\\-2 & 4 & -6\\1 & -2 & 3\end{bmatrix}$$

$$AA^{+}b=\begin{bmatrix}1 & -2 & 1\\-2 & 4 & -2\\3 & -6 & 3\end{bmatrix}\times\frac{1}{84}\begin{bmatrix}1 & -2 & 3\\-2 & 4 & -6\\1 & -2 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\\-2\end{bmatrix}$$

$$=\frac{1}{84}\begin{bmatrix}1 & -2 & 1\\-2 & 4 & -2\\3 & -6 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-8\\16\\-8\end{bmatrix}=\frac{1}{7}\begin{bmatrix}-4\\8\\-12\end{bmatrix}\neq b,$$

$\therefore$方程组$Ax=b$为矛盾方程组.

$$A^{+}A=\frac{1}{84}\begin{bmatrix}1&-2&3\\-2&4&-6\\1&-2&3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&-2&1\\-2&4&-2\\3&-6&3\end{bmatrix}$$

$$=\frac{1}{84}\begin{bmatrix}14&-28&14\\-28&56&-28\\14&-28&14\end{bmatrix}=\frac{1}{6}\begin{bmatrix}1&-2&1\\-2&4&-2\\1&-2&1\end{bmatrix}$$

$$E-A^{+}A=\frac{1}{6}\begin{bmatrix}5&2&-1\\2&2&2\\-1&2&5\end{bmatrix}$$

∴方程组$Ax=b$的最小二乘解的通解为

$$x = A^{+}b + \left(E - A^{+}A\right)y$$

$$= \frac{1}{21}\begin{bmatrix} -2 \\ 4 \\ -2 \end{bmatrix} + \frac{1}{6}\begin{bmatrix} 5y_1 + 2y_2 - y_3 \\ 2y_1 + 2y_2 + 2y_3 \\ -y_1 + 2y_2 + 5y_3 \end{bmatrix}.$$