

## 第八章 广义逆矩阵

- 在线性代数中,如果 $A$ 是 $n$ 阶非奇异矩阵,则 $A$ 存在唯一的逆矩阵 $A^{-1}$ ,如果线性方程组 $Ax = b$ 的系数矩阵非奇异,则该方程组存在唯一解 $x = A^{-1}b$ .而在许多实际问题中, $A$ 往往是奇异方阵或长方阵,并且线性方程组 $Ax = b$ 可能是矛盾方程组.
- 问题:如何将该方程组在某种意义下的解通过矩阵 $A$ 的某种逆加以表示?
- 解决:设法将矩阵逆的概念、理论和方法推广到奇异方阵或长方阵的情形.
- 历史:
  - 1920年,E.H.Moore首先提出了广义逆矩阵的概念,但在其后30年并未引起人们的重视.
  - 1955年,R.Penrose利用四个矩阵方程给出广义逆矩阵的新的更简便实用的定义,广义逆矩阵的研究进入了一个新的时期,成为矩阵论的一个重要分支.
- 广义逆矩阵在数理统计、最优化理论、控制理论、系统识别和数字图像处理等许多领域都具有重要应用.
- 本章着重介绍几种常见的广义逆矩阵及其在解线性方程组中的应用,仅限于对实矩阵的讨论.

## 8.1 广义逆矩阵的概念

- **Penrose方程**: 对矩阵  $A \in R^{m \times n}$ , Penrose给出了四个条件
  1.  $AGA = A$
  2.  $GAG = G$
  3.  $(AG)^T = AG$
  4.  $(GA)^T = GA$
- **定义8.1.1** 对任意  $m \times n$  矩阵  $A$ , 如果存在某个  $n \times m$  矩阵  $G$ , 满足Penrose方程的一部分或全部, 则称  $G$  为  $A$  的**广义逆矩阵**.
- 如果广义逆矩阵  $G$  满足第  $i$  个条件, 则把  $G$  记作  $A^{(i)}$ , 并把这类矩阵的全体记作  $A\{i\}$ , 于是  $A^{(i)} \in A\{i\}$ . 类似地, 把满足第  $i, j$  两个条件的广义逆矩阵  $G$  记作  $A^{(i,j)}$ ; 满足第  $i, j, k$  三个条件的广义逆矩阵  $G$  记作  $A^{(i,j,k)}$ ; 满足全部4个条件的广义逆矩阵  $G$  记作  $A^{(1,2,3,4)}$ . 相应地, 分别有  $A\{i, j\}, A\{i, j, k\}, A\{1, 2, 3, 4\}$ .

- 由定义8.1.1可知，满足1个、2个、3个、4个Penrose方程的广义逆矩阵共有15种，但应用较多的是 $A^{(1)}$ ,  $A^{(1,3)}$ ,  $A^{(1,4)}$ 和 $A^{(1,2,3,4)}$ 四种广义逆，分别记为 $A^-$ ,  $A_l^-$ ,  $A_m^-$ 和 $A^+$ ，并称 $A^-$ 为减号逆或 $g$ -逆， $A_l^-$ 为最小二乘广义逆， $A_m^-$ 为极小范数广义逆， $A^+$ 为加号逆或Moore-Penrose广义逆。
- 本章分别介绍4种广义逆以及它们与线性方程组 $Ax = b$ 的关系。
  - 8.2 广义逆矩阵 $A^-$ 与线性方程组的解
  - 8.3 极小范数广义逆 $A_m^-$ 与线性方程组的极小范数解
  - 8.4 最小二乘广义逆 $A_l^-$ 与矛盾方程组的最小二乘解
  - 8.5 广义逆矩阵 $A^+$ 与线性方程组的极小最小二乘解

## 8.2 广义逆矩阵 $A^-$ 与线性方程组的解

- **定理8.2.1** 设 $A$ 是 $m \times n$ 矩阵且 $\text{rank}(A) = r \geq 1$ , 如果存在非奇异矩阵 $P$ 和 $Q$ 使得

$$PAQ = \begin{pmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

则 $G \in A\{1\}$ 的充分必要条件是

$$G = Q \begin{pmatrix} I_r & K \\ L & M \end{pmatrix} P$$

其中 $K \in R^{r \times (m-r)}$ ,  $L \in R^{(n-r) \times r}$ 和 $M \in R^{(n-r) \times (m-r)}$ 是任意的矩阵。

- **证明** 可以直接验证以上定义的 $G$ 满足 $AGA = A$ , 并且满足 $AGA = A$ 的 $G$ 具有形式 $Q \begin{pmatrix} I_r & K \\ L & M \end{pmatrix} P$ 。
- 定理8.2.1说明矩阵 $A$ 的广义逆矩阵 $A^-$ 一定存在, 但一般不唯一。 $A^-$ 唯一的充分必要条件是 $m = n = r$ , 即 $A$ 非奇异, 此时 $A^-$ 就是 $A$ 的逆矩阵 $A^{-1}$ 。

- 例 已知矩阵  $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & -2 & 2 & -2 & 6 \\ 0 & 1 & -1 & -2 & 3 \end{pmatrix}$ , 求  $A\{1\}$

- 解 可以求得

$$P = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 6 & 1 & -4 \end{pmatrix}, Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

使

$$PAQ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

于是

$$A\{1\} = \left\{ Q \begin{pmatrix} 1 & 0 & k_1 \\ 0 & 1 & k_2 \\ l_{11} & l_{12} & m_1 \\ l_{21} & l_{22} & m_2 \\ l_{31} & l_{32} & m_3 \end{pmatrix} P \mid k_i, l_{ij}, m_i, i = 1, 2, 3, j = 1, 2 \right\}$$

- **定理8.2.2** 设 $A$ 是 $m \times n$ 矩阵,  $P$ 和 $Q$ 分别是 $m$ 阶和 $n$ 阶非奇异方阵, 且 $B = PAQ$ ,  $A^-$ 是 $A$ 的减号逆, 则

(1)  $\text{rank}(A) \leq \text{rank}(A^-)$ ;

(2)  $AA^-$ 和 $A^-A$ 是幂等矩阵, 即

$$(AA^-)^2 = AA^-, (A^-A)^2 = A^-A$$

并且 $\text{rank}(AA^-) = \text{rank}(A^-A) = \text{rank}(A)$ ;

(3)  $Q^{-1}A^-P^{-1} \in B\{1\}$ .

- **证明** 由 $G = Q \begin{pmatrix} I_r & K \\ L & M \end{pmatrix} P$ 即得 (1) 和 (2) 。 因为

$$BQ^{-1}A^-P^{-1}B = PAQQ^{-1}A^-P^{-1}PAQ = PAA^-AQ = PAQ = B$$

所以 $Q^{-1}A^-P^{-1} \in B\{1\}$

- 如果线性方程组  $Ax = b$  有解，则称该方程组是**相容方程组**；否则称为**不相容或矛盾方程组**。
- 减号逆可以直接给出相容方程组  $Ax = b$  的解。
- **定理8.2.3** 设  $A \in R^{m \times n}, G \in R^{n \times m}$ ，则  $G \in A\{1\}$  的充分必要条件为，对于使得  $Ax = b$  相容的所有的  $b \in R^m$ ， $Gb$  是  $Ax = b$  的解。
- **证明**
  - 必要性。若  $G \in A\{1\}$ ，则  $G$  满足  $GAG = A$ 。因为  $Ax = b$  是相容方程，必存在  $y \in R^n$  使得  $Ay = b$ ，则  $Gb = G Ay$ ，进而  $AGb = AG Ay = Ay = b$ 。这说明  $x = Gb$  是  $Ax = b$  的解。
  - 充分性。记  $a_i$  是  $A$  的第  $i$  列 ( $i \in \{1, \dots, n\}$ )，则  $Ax = a_i$  都是相容方程组 ( $x = e_i$  是解)。由于

$$AGa_i = a_i \quad i \in \{1, \dots, n\}$$

从而

$$AGA = AG \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix} = A$$



- **定理8.2.4 (Penrose定理)** 设 $A, B, C$ 分别为 $m \times n$ ,  $p \times q$ ,  $m \times q$ 矩阵, 则矩阵方程

$$AXB = C \quad (1)$$

有解的充分必要条件是

$$AA^{-}CB^{-}B = C \quad (2)$$

并且在有解的情况下, 其通解为

$$X = A^{-}CB^{-} + Y - A^{-}AYBB^{-} \quad (3)$$

其中 $Y \in R^{n \times p}$ 是任意的矩阵。

- **证明**

- **必要性** 如果矩阵方程(1)有解, 设 $X$ 是其任一解, 则

$$C = AXB = AA^{-}AXB B^{-}B = AA^{-}CB^{-}B$$

- **充分性** 如果(2)成立, 则 $X = A^{-}CB^{-}$ 是矩阵方程(1)的解, 即矩阵方程(1)有解。
- 下面证明(3)是矩阵方程(1)的通解。显然, (3)给出的 $X$ 满足方程 $AXB = C$ ; 另一方面, 设 $X_0$ 是(1)的任一解, 则有

$$X_0 = A^{-}CB^{-} + X_0 - A^{-}CB^{-} = A^{-}CB^{-} + X_0 - A^{-}AX_0BB^{-}$$

取 $Y = X_0$ 即具有(3)的形式。

- 把定理8.2.4应用于线性方程组  $Ax = b$ ，即得其可解性条件和通解表达式。
- **定理8.2.5** 设  $A \in R^{m \times n}$ ， $b \in R^m$ ，则线性方程组  $Ax = b$  有解的充分必要条件是

$$AA^{-}b = b$$

这时， $Ax = b$  的通解是

$$x = A^{-}b + (I - A^{-}A)y$$

其中  $y \in R^n$  是任意的。

- 应用定理8.2.4于矩阵方程  $AGA = A$ ，可得其通解为

$$G = A^{-}AA^{-} + Y - A^{-}AYAA^{-}$$

其中  $Y$  是任意的  $n \times m$  矩阵， $A^{-}$  是  $A$  的任一广义逆矩阵。令

$$Y = A^{-} + Z$$

其中  $Z$  是任意的  $n \times m$  矩阵，则

$$G = A^{-}AA^{-} + A^{-} + Z - A^{-}A(A^{-} + Z)AA^{-} = A^{-} + Z - A^{-}AZAZ^{-}$$

- **定理8.2.6** 设  $A \in R^{m \times n}$ ，则  $A\{1\}$  的通式为

$$A\{1\} = \{A^{-} + Z - A^{-}AZAA^{-} | Z \in R^{n \times m}\}$$

## 8.3 极小范数广义逆 $A_m^-$ 与线性方程组的极小范数解

- **定理8.3.1** 设 $m \times n$ 矩阵 $A$ 的奇异值分解为

$$A = U \begin{pmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} V^T$$

其中 $U \in R^{m \times m}$ 和 $V \in R^{n \times n}$ 是正交矩阵,  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r) > 0, r = \text{rank}(A) \geq 1$ 。则 $G \in A\{1, 4\}$ 的充分必要条件是

$$G = V \begin{pmatrix} \Sigma^{-1} & K \\ 0 & M \end{pmatrix} U^T \quad (4)$$

其中 $K \in R^{r \times (m-r)}$ ,  $M \in R^{(n-r) \times (m-r)}$ 是任意的矩阵。

- **证明** 容易验证(4)定义的 $G$ 满足 $AGA = A$ 和 $(GA)^T = GA$ , 并且满足 $AGA = A$ 和 $(GA)^T = GA$ 的 $G$ 具有形式(4).

- 定理8.3.1说明矩阵 $A$ 的极小范数广义逆 $A_m^-$ 存在但不唯一。 $A$ 的极小范数广义逆的全体 $A\{1, 4\}$ 由下列定理表征。
- **定理8.3.2** 设 $A \in R^{m \times n}$ ,  $G \in A\{1, 4\}$ 的充分必要条件是 $G$ 满足

$$GAA^T = A^T \quad (5)$$

- **证明** 如果 $G \in A\{1, 4\}$ ,  $GAA^T = (GA)^T A^T = A^T G^T A^T = A^T$ 。反过来, 如果 $G$ 满足(5), 则 $GAA^T G^T = A^T G^T$ , 即 $GA(GA)^T = (GA)^T$ 。因此,  $GA$ 是对称矩阵, 即

$$(GA)^T = GA \quad (6)$$

由(5)和(6), 有

$$\begin{aligned} (AGA - A)^T (AGA - A) &= ((GA)^T A^T - A^T)(AGA - A) \\ &= (GAA^T - A^T)(AGA - A) = 0 \end{aligned}$$

则 $AGA = A$ , 于是 $G \in A\{1, 4\}$ .

- **定理8.3.3** 设  $A \in R^{m \times n}$ ,  $A_m^-$  是  $A$  的任一极小范数广义逆, 则

$$A\{1, 4\} = \{G \in R^{n \times m} | GA = A_m^- A\}$$

- **证明** 如果  $G$  满足

$$GA = A_m^- A \quad (7)$$

则

$$\begin{aligned} AGA &= AA_m^- A = A \\ (GA)^T &= (A_m^- A)^T = A_m^- A = GA \end{aligned}$$

所以  $G \in A\{1, 4\}$ 。另一方面, 对任一  $G \in A\{1, 4\}$ , 则

$$\begin{aligned} A_m^- A &= A_m^- AGA = (A_m^- A)^T (GA)^T \\ &= A^T (A_m^-)^T A^T G^T = A^T G^T = (GA)^T = GA \end{aligned}$$

- 应用定理8.2.4（Penrose定理）于矩阵方程(7)，即得 $A\{1, 4\}$ 的通式。
- **定理8.3.4** 设 $A \in R^{m \times n}$ ， $A^-$ 是 $A$ 的任一广义逆矩阵， $A_m^-$ 是 $A$ 的任一极小范数广义逆，则

$$A\{1, 4\} = \{G \in R^{n \times m} | G = A_m^- + Z(I - AA^-), Z \in R^{n \times m}\}$$

- **证明** 由定理8.2.4知,矩阵方程(7)有解，并且其通解为

$$G = A_m^- AA^- + Y - YAA^-$$

其中 $Y \in R^{n \times m}$ 。令

$$Y = A_m^- + Z, Z \in R^{n \times m}$$

则

$$G = A_m^- + Z(I - AA^-)$$

- 由定理8.2.5，相容线性方程组  $Ax = b$  的解可以用广义逆矩阵  $A^-$  表示为

$$x = A^-b$$

并且给出了通解表达式

$$x = A^-b + (I - A^-A)y$$

- 现在我们要在相容线性方程组  $Ax = b$  的解集合中求范数最小的解，即求广义逆矩阵  $G$  使得

$$\|Gb\|_2 = \min_{Ax=b} \|x\|_2 \quad (8)$$

- 我们称具有这种性质的解为相容线性方程组  $Ax = b$  的**极小范数解**。
- 以下的定理证明与这种极小范数解相对应的广义逆矩阵就是上面讨论的极小范数广义逆。

- **定理8.3.5** 设 $A$ 是 $m \times n$ 矩阵, 则 $G \in A\{1, 4\}$  的充分必要条件是任意的 $b \in R(A)$ ,  $Gb$ 是 $Ax = b$ 的极小范数解。
- **证明** 必要性。若 $G \in A\{1\}$ , 则相容线性方程组 $Ax = b$ 的通解为

$$x = Gb + (I - GA)y$$

如果 $G$ 还满足 $(GA)^T = GA$ , 则 $x = Gb$ 是 $Ax = b$ 的极小范数解。  
事实上, 由于

$$\begin{aligned}\|x\|_2^2 &= \|Gb + (I - GA)y\|_2^2 = (Gb + (I - GA)y)^T (Gb + (I - GA)y) \\ &= \|Gb\|_2^2 + \|(I - GA)y\|_2^2 + (Gb)^T (I - GA)y + ((I - GA)y)^T Gb\end{aligned}$$

对任意的 $b \in R(A)$ , 存在 $z \in R^n$ 使得 $Az = b$ , 则

$$\begin{aligned}(Gb)^T (I - GA)y &= (GAz)^T (I - GA)y = z^T (GA)^T (I - GA)y \\ &= z^T GA(I - GA)y = z^T (GA - GAGA)y = z^T (GA - GA)y = 0\end{aligned}$$

同理可证 $((I - GA)y)^T Gb = 0$ 。因此有

$$\|x\|_2^2 = \|Gb\|_2^2 + \|(I - GA)y\|_2^2 \geq \|Gb\|_2^2$$

这说明 $x = Gb$ 是 $Ax = b$ 的极小范数解。



充分性。若 $x = Gb$ 是相容线性方程组 $Ax = b$ 的极小范数解，则由定理8.2.3知 $G \in A\{1\}$ ，从而 $Ax = b$ 的通解为 $x = Gb + (I - GA)y$ 。因为 $Gb$ 是 $Ax = b$ 的极小范数解，则 $\forall b \in R(A)$ ， $\forall y \in R^n$ ，有

$$\|Gb\|_2 \leq \|Gb + (I - GA)y\|_2$$

令 $b = Az$ ， $z \in R^n$ ，则

$$\|GAz\|_2 \leq \|GAz + (I - GA)y\|_2$$

欲使上述不等式成立，其充分必要条件是

$$(GAz)^T(I - GA)y = 0$$

由 $y, z$ 的任意性，即得

$$(GA)^T(I - GA) = 0, (GA)^T = (GA)^T GA$$

这表明 $GA$ 是对称阵，从而 $(GA)^T = GA$ ，因此 $G \in A\{1, 4\}$ 。

- **定理8.3.6** 相容线性方程组  $Ax = b$  的极小范数解是唯一的。
- **证明**  $\forall b \in R(A)$ , 存在  $z \in R^n$  使得  $Az = b$ 。设  $G_1, G_2$  是矩阵  $A$  的两个不同的极小范数广义逆, 则

$$x_1 = G_1 b = G_1 A z$$

和

$$x_2 = G_2 b = G_2 A z$$

均为  $Ax = b$  的极小范数解。由定理8.3.2, 由

$$(G_1 - G_2) A A^T = 0$$

上式两边右乘  $(G_1 - G_2)^T$ , 得

$$[(G_1 - G_2) A] [(G_1 - G_2) A]^T = 0$$

则有  $(G_1 - G_2) A = 0$ , 从而

$$x_1 - x_2 = (G_1 - G_2) A z = 0$$

因此,  $x_1 = x_2$

## 8.4 最小二乘广义逆 $A_l^-$ 与线性方程组的最小二乘解

- **定理8.4.1** 设  $m \times n$  矩阵  $A$  的奇异值分解为

$$A = U \begin{pmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} V^T$$

其中  $U \in R^{m \times m}$  和  $V \in R^{n \times n}$  是正交矩阵,  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r) > 0$ ,  $r = \text{rank}(A) \geq 1$ 。则  $G \in A\{1, 3\}$  的充分必要条件是

$$G = V \begin{pmatrix} \Sigma^{-1} & 0 \\ L & M \end{pmatrix} U^T$$

其中  $L \in R^{(n-r) \times r}$  和  $M \in R^{(n-r) \times (m-r)}$  是任意的矩阵。

- **定理8.4.2** 设  $A \in R^{m \times n}$ ,  $G \in A\{1, 3\}$  的充分必要条件是  $G$  满足

$$A^T A G = A^T$$

- **定理8.4.3** 设  $A \in R^{m \times n}$ ,  $A_l^-$  是  $A$  的任一最小二乘逆, 则

$$A\{1, 3\} = \{G \in R^{n \times m} | AG = AA_l^-\}$$

- **定理8.4.4** 设  $A \in R^{m \times n}$ ,  $A^-$  是  $A$  的任一广义逆矩阵,  $A_l^-$  是  $A$  的任一最小二乘逆, 则

$$A\{1, 3\} = \{G \in R^{n \times m} | A_l^- + (I - A^-A)Z, Z \in R^{n \times m}\}$$

- **线性最小二乘问题:** 如果线性方程组  $Ax = b$  不相容, 则它没有通常意义下的解, 残量  $b - Ax$  不等于零。求这样的解, 使它的残量范数最小:

$$\|Ax - b\|_2 = \min$$

即求  $b \in R^m$  在  $\text{span}(A)$  上的最佳逼近.

满足上式的  $x$  称为不相容线性方程组  $Ax = b$  的**最小二乘解**

如果线性方程组  $Ax = b$  相容, 则方程组的所有解都是最小二乘解

下面的定理建立了 $A$ 的最小二乘广义逆 $A_l^-$ 与线性方程组 $Ax = b$ 的最小二乘解之间的关系。

- **定理8.4.5** 设 $A$ 是 $m \times n$ 矩阵, 则 $G \in A\{1, 3\}$ 的充分必要条件是对任意的 $b \in R^m$ ,  $Gb$ 是 $Ax = b$ 的最小二乘解。
- **证明** 必要性。若 $G \in A\{1, 3\}$ , 则 $x = Gb$ 是 $Ax = b$ 的最小二乘解。事实上, 对任意的 $x \in R^n$ , 有

$$\|Ax - b\|_2^2 = \|(AGb - b) + A(x - Gb)\|_2^2 \quad (9)$$

$$= \|AGb - b\|_2^2 + \|A(x - Gb)\|_2^2 + 2(A(x - Gb))^T(AGb - b) \quad (10)$$

由定理8.4.2可得,

$$(A(x - Gb))^T(AGb - b) = (x - Gb)^T A^T(AG - I)b = 0 \quad (11)$$

因此, 有

$$\|Ax - b\|_2^2 = \|AGb - b\|_2^2 + \|A(x - Gb)\|_2^2 \geq \|AGb - b\|_2^2$$

这说明 $x = Gb$ 是 $Ax = b$ 的最小二乘解。

- 充分性。若  $x = Gb$  是线性方程组  $Ax = b$  的最小二乘解，则对任意的  $x \in R^n$ ,  $b \in R^m$ , 都有

$$\|AGb - b\|_2^2 \leq \|Ax - b\|_2^2 \quad (12)$$

由(9)知，不等式(12)恒成立的充分必要条件是对任意的  $x \in R^n$ ,  $b \in R^m$ , 等式(11)恒成立。由  $b$  和  $x - Gb$  的任意性，可得  $A^T(AG - I) = 0$ . 由定理8.4.2知， $G \in A\{1, 3\}$

- **定理8.4.6** 线性方程组  $Ax = b$  的最小二乘解必为相容线性方程组

$$A^T Ax = A^T b \quad (13)$$

的解，反之亦然。

- 由定理8.4.6可知，当  $A$  为列满秩时，方程组  $Ax = b$  的最小二乘解是唯一的。

- **定理8.4.7**  $x$ 是线性方程组 $Ax = b$ 的最小二乘解当且仅当 $x$ 是相容线性方程组

$$Ax = AA_l^-b \quad (14)$$

的解，并且 $Ax = b$ 的最小二乘解的通式为

$$x = A_l^-b + (I - A^-A)y$$

其中 $y \in R^n$ 是任意的。

- **证明** 由定理8.4.5知， $x = A_l^-b$ 是线性方程组 $Ax = b$ 的最小二乘解，并且 $x = A_l^-b$ 满足(14)，因此线性方程组 $Ax = AA_l^-b$ 相容。设 $x$ 为 $Ax = b$ 的任一最小二乘解，则有 $\|Ax - b\|_2 = \|AA_l^-b - b\|_2 = \min$ . 由于

$$\|Ax - b\|_2^2 - \|AA_l^-b - b\|_2^2 = \|A(x - A_l^-b)\|_2^2 + 2(x - A_l^-b)^T A^T (AA_l^- - I)b$$

由定理8.4.2及 $\|Ax - b\|_2 = \|AA_l^-b - b\|_2$ ，可得

$$\|A(x - A_l^-b)\|_2 = 0$$

则 $A(x - A_l^-b)=0$ ,这说明 $x$ 是线性方程组 $Ax = AA_l^-b$ 的解。



- 反过来, 如果 $x$ 是相容线性方程组 $Ax = AA_l^-b$ 的解,则由定理8.4.2有

$$A^T Ax = A^T AA_l^-b = A^T b$$

由定理8.4.6知 $x$ 为 $Ax = b$ 的最小二乘解.

因为 $A_l^-b$ 是相容线性方程组 $Ax = AA_l^-b$ 的一个特解,而齐次线性方程组 $Ax = 0$ 的通解为 $(I - A^-A)y$ , 因此 $x = A_l^-b + (I - A^-A)y$ 是 $Ax = b$ 的最小二乘解的通式。

## 8.5 广义逆矩阵 $A^+$ 与线性方程组的极小最小二乘解

- **定理8.5.1** 设 $A$ 是任意的 $m \times n$ 矩阵,  $A^+$ 存在并且唯一。
- **证明** 设 $A$ 的奇异值分解为

$$A = U \begin{pmatrix} \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} V^T$$

其中 $U \in R^{m \times n}$ 和 $V \in R^{n \times n}$ 是正交矩阵,  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r) > 0$ . 令

$$A^+ = V \begin{pmatrix} \Sigma^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} U^T$$

直接验证可知, 上式定义的 $A^+$ 满足定义8.1.1中的4个Penrose方程, 故 $A^+$ 存在。再证唯一性。设矩阵 $G_1, G_2$ 都是 $A$ 的Moore-Penrose广义逆, 则

$$\begin{aligned} G_1 &= G_1 A G_1 = G_1 (A G_1)^T = G_1 G_1^T A^T = G_1 G_1^T (A G_2 A)^T = G_1 G_1^T A^T (A G_2)^T \\ &= G_1 (A G_1)^T A G_2 = G_1 A G_1 A G_2 = G_1 A G_2 = G_1 A G_2 A G_2 \\ &= (G_1 A)^T (G_2 A)^T G_2 = (G_2 A G_1 A)^T G_2 = (G_2 A)^T G_2 = G_2 A G_2 = G_2 \end{aligned}$$

- 定理8.5.1的证明同时也给出了计算 $A^+$ 的一个方法。
- 利用 $A$ 的满秩分解，可以给出 $A^+$ 的另一个表达式。
- **定理8.5.2** 设 $A$ 是 $m \times n$ 矩阵，其满秩分解为

$$A = BC$$

其中 $B$ 是 $m \times r$ 矩阵， $C$ 是 $r \times n$ 矩阵， $\text{rank}(B) = \text{rank}(C) = \text{rank}(A) = r$ ，则

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

- **证明** 直接验证上式所定义的 $A^+$ 满足定义8.1.1中的四个Penrose方程。

Moore-Penrose广义逆 $A^+$ 的基本性质可概述为如下定理。

● **定理8.5.3** 设 $A$ 是 $m \times n$ 矩阵, 则

$$(1) (A^+)^+ = A$$

$$(2) (A^+)^T = (A^T)^+$$

$$(3) A^+AA^T = A^T = A^TAA^+$$

$$(4) (A^TA)^+ = A^+(A^T)^+ = A^+(A^+)^T$$

$$(5) A^+ = (A^TA)^+A^T = A^T(AA^T)^+$$

$$(6) A^+ = A_m^-AA_l^-$$

$$(7) \text{rank}(A) = \text{rank}(A^+) = \text{rank}(AA^+) = \text{rank}(A^+A)$$

$$(8) \text{若} \text{rank}(A) = n, \text{ 则} A^+ = (A^TA)^{-1}A^T$$

$$(9) \text{若} \text{rank}(A) = m, \text{ 则} A^+ = A^T(AA^T)^{-1}$$

(10) 若 $U, V$ 分别为 $m, n$ 阶正交矩阵, 则 $(UAV)^+ = V^T A^+ U^T$

(11) 若 $A = \begin{pmatrix} R & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ , 其中 $R$ 为 $r$ 阶非奇异矩阵, 则 $A^+ = \begin{pmatrix} R^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_{n \times m}$

- **证明** 这里仅给出 (6) 的证明。记 $G = A_m^- A A_l^-$ , 由 $A_m^-$ 和 $A_l^-$ 的性质, 可得

$$\begin{aligned}AGA &= AA_m^- AA_l^- A = AA_l^- A = A \\GAG &= A_m^- AA_l^- AA_m^- AA_l^- = A_m^- AA_m^- AA_l^- = A_m^- AA_l^- = G \\(AG)^T &= (AA_m^- AA_l^-)^T = (AA_l^-)^T = AA_l^- = AG \\(GA)^T &= (A_m^- AA_l^- A)^T = (A_m^- A)^T = A_m^- A = GA\end{aligned}$$

由Moore-Penrose广义逆的唯一性即得 $A^+ = G = A_m^- A A_l^-$

- 需要指出,  $A^{-1}$ 的许多性质,  $A^+$ 并不具备。

(1) 对任意  $m \times n$  矩阵  $A$  和  $n \times p$  矩阵  $B$ , 等式  $(AB)^+ = B^+ A^+$  一般不成立。

(2) 对任意  $m \times n$  矩阵,  $AA^+ \neq A^+A$

(3) 对任意  $m \times n$  矩阵, 若  $P, Q$  分别为  $m, n$  阶非奇异矩阵, 则

$$(PAQ)^+ \neq Q^{-1}A^+P^{-1}$$

(4) 对任意  $n$  阶奇异矩阵  $A$  和正整数  $k$ ,  $(A^k)^+ \neq (A^+)^k$

- 利用Moore-Penrose广义逆可以给出线性方程组 $Ax = b$ 的可解性条件。
- **定理8.5.4** 设 $A \in R^{m \times n}$ ,  $b \in R^m$ , 则线性方程组 $Ax = b$ 有解的充分必要条件是

$$AA^+b = b$$

- **定理8.5.5** 设  $A \in R^{m \times n}, b \in R^m$ , 则线性方程组  $Ax = b$  的最小二乘解的通式为

$$x = A^+b + (I - A^+A)y$$

其中  $y \in R^n$  是任意的。

- **证明** 由定理8.4.6知, 线性方程组  $Ax = b$  的最小二乘解与相容线性方程组  $A^T Ax = A^T b$  的解一致。由定理8.5.4知,  $A^T Ax = A^T b$  的通解为

$$x = (A^T A)^+ A^T b + [I - (A^T A)^+ (A^T A)]y$$

由定理8.5.3 (5)  $A^+ = (A^T A)^+ A^T$  即得  $x = A^+b + (I - A^+A)y$



- 线性方程组  $Ax = b$  的最小二乘解一般是不唯一的。
- 设  $x_0$  是  $Ax = b$  的一个最小二乘解，如果对于任意的最小二乘解  $x$  都有

$$\|x_0\|_2 \leq \|x\|_2$$

则称  $x_0$  为  $Ax = b$  的极小最小二乘解。

- 因为线性方程组  $Ax = b$  的最小二乘通解为  $x = A^+b + (I - A^+A)y$ ，并且

$$\|A^+b + (I - A^+A)y\|_2^2 = \|A^+b\|_2^2 + \|(I - A^+A)y\|_2^2 \geq \|A^+b\|_2^2$$

且等号成立当且仅当  $(I - A^+A)y = 0$ ，所以  $Ax = b$  的极小最小二乘解唯一，且为  $x = A^+b$ 。

- **定理8.5.6** 设 $A$ 是 $m \times n$ 矩阵, 则 $G$ 是Moore-Penrose广义逆 $A^+$  的充分必要条件是  
对任意 $b \in R^m, Gb$  是 $Ax = b$ 的极小最小二乘解。
- **证明** 由定理8.4.7知, 方程组 $Ax = b$ 的最小二乘解与相容方程组

$$Ax = AA_l^-b$$

的解一致。因此,  $Ax = b$ 的极小最小二乘解就是方程组 $Ax = AA_l^-b$ 的极小范数解, 并且是唯一的, 即有

$$x = A_m^-AA_l^-b$$

由定理8.5.3 (6)  $A^+ = A_m^-AA_l^-$ , 可得 $G = A_m^-AA_l^- = A^+$ .  
注意到上述论证是可逆的, 从而得到结论。

*Thank you!*