§4.5　矩阵的Moore-Penrose广义逆

广义逆矩阵在**数理统计、系统理论、最优化理论、现代控制理论**等领域中都有重要应用

矩阵的广义逆: 概述

线性方程组求解中最常见的最小二乘问题。

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots\cdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

可能无解，即，方程组是不相容的。

即使相容，也可能有无数多解。

因此，希望寻求具有极小范数的最小二乘解。

方程组 $AX = b$ 有解 $\Leftrightarrow b \in R(A)$, 此时方程组称相容的.

矩阵的广义逆: 概述

问题归结为求出解$x_1, x_2, \dots, x_n$，使

$$Q = \sum_{i=1}^{m} (a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \cdots + a_{in}x_n - b_i)^2$$

取得最小值，这就是一种最小二乘问题。

相应的解$x_1, x_2, \dots, x_n$为最小二乘解。

矩阵的广义逆: 概述

广义逆矩阵起源于线性方程组的求解，旨在对一般的矩阵 $A_{m\times n}$ 推广矩阵逆的概念。

1920年，穆尔（Moore）首先引入了广义逆矩阵的概念，但其后30年未能引起人们的重视。直到1955年，彭罗斯（Penrose）以4个矩阵方程的形式明确了Moore广义逆矩阵的定义之后，广义逆矩阵的研究才进入一个新时期。

Penrose: (1955) 对任意 $A \in C^{m\times n}$, 有唯一的矩阵 $G \in C^{n\times m}$ 满足

(1) $AGA = A$;　　(2) $GAG = G$;

(3) $(AG)^H = AG$;　　(4) $(GA)^H = GA$.

- 减号逆: $A\{1\}$
- M-P逆/加号逆: $A\{1,2,3,4\}$

§4.5.1 矩阵的左逆与右逆

(Left Inverse & Right Inverse)

一、满秩矩阵与单侧逆

定义 设 $A \in C^{m\times n}$, 若存在矩阵 $B \in C^{n\times m}$, 使得

$$BA = I_{n\times n},$$

则称 A 左可逆, 称 B 为 A 的一个左逆矩阵, 记为 A_L^{-1};

若存在矩阵 $C \in C^{n\times m}$, 使得

$$AC = I_{m\times m},$$

则称 A 右可逆, 称 C 为 A 的一个右逆矩阵, 记为 A_R^{-1}.

例1 分析矩阵 $A = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ 的左、右逆.

解 待定系数法, A 的左逆为

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & 0 & b_{11}+1 \\ b_{21} & 1 & b_{21} \end{bmatrix}, \quad b_{11}, b_{21} \in R.$$ 左逆无穷多个!

而 $r(A) = 2$, 不存在右逆. ■

一、满秩矩阵与单侧逆

例2： 设$A=\begin{bmatrix}1 & 2 & -1\\ 0 & -1 & 2\end{bmatrix}$，求A的右逆$A_R^{-1}$。

解：
$$\begin{bmatrix}1 & 2 & -1\\ 0 & -1 & 2\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\rightarrow\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2\\ 1 & -2 & 1\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\rightarrow\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 1 & 2 & -3\\ 0 & -1 & 2\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

因此，A的一个右逆$\begin{bmatrix}1 & 2\\ 0 & -1\\ 0 & 0\end{bmatrix}$。

A的右逆:
$$\begin{bmatrix}1 & 2 & -3\\ 0 & -1 & 2\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\\ k_1 & k_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1-3k_1 & 2-3k_2\\ 2k_1 & -1+2k_2\\ k_1 & k_2\end{bmatrix},k_1,k_2\in R.\blacksquare$$

一、满秩矩阵与单侧逆

例3： 设$A=\begin{bmatrix}1 & -2\\0 & 1\\2 & 0\end{bmatrix}$，求A的左逆$A_L^{-1}$。

解：

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

因此，A的一个左逆$\begin{bmatrix}1 & 2 & 0\\0 & 1 & 0\end{bmatrix}$。

A的右逆:

$$\begin{bmatrix}1 & 0 & k_1\\0 & 1 & k_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 2 & 0\\0 & 1 & 0\\-2 & -4 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1-2k_1 & 2-4k_1 & k_1\\-2k_2 & 1-4k_2 & k_2\end{bmatrix},k_1,k_2\in R.\blacksquare$$

一、满秩矩阵与单侧逆

定理 令 $A \in C^{m\times n}$,则以下条件等价:

(1) A 左可逆;

(2) A 的零空间 $N(A) = \{0\}$;

(3) $m \geq n, r(A) = n$, 即 A 列满秩;

(4) $A^H A$ 可逆;

补 (5) $(A^H A)^{-1} A^H$ 为 A 的一个左逆.

定理 令 $A \in C^{m\times n}$,则以下条件等价:

(1) A 右可逆;

(2) A 的列空间 $R(A) = C^m$;

(3) $m \leq n, r(A) = m$, 即 A 行满秩;

(4) $A A^H$ 可逆;

补 (5) $A^H (A A^H)^{-1}$ 为 A 的一个右逆.

二、单侧逆与解线性方程组

定理3　设 $A \in C^{m\times n}$ 左可逆, $AX = b$ 是线性方程组. 则

(1) $AX = b$ 若有解, 必有唯一解 $X = (A^H A)^{-1}A^H b$.

(2) 设 $B \in C^{n\times m}$ 是 A 的任意左逆, 则 $AX = b$ 的唯一解存在的充要条件是

$$(I_m - AB)b = 0,$$

此时, 其唯一解具有形式 $X = Bb$.

证明　(1) 因为 A 左可逆, $r(A) = n$, 故解若存在, 必唯一.

若 X_0 是解, $\mathrm{i.e.}$, $AX_0 = b$, 则

$$X_0 = (A^H A)^{-1}A^H AX_0 = (A^H A)^{-1}A^H b.$$

二、单侧逆与解线性方程组

定理3　设 $A \in C^{m\times n}$ 左可逆, $AX=b$ 是线性方程组. 则

(1) $AX=b$ 若有解, 必有唯一解 $X=(A^HA)^{-1}A^Hb$.

(2) 设 $B \in C^{n\times m}$ 是 A 的任意左逆, 则 $AX=b$ 的唯一解存在的充要条件是

$$(I_m - AB)b = 0,$$

此时, 其唯一解具有形式 $X = Bb$.

证明 (2) ($\Rightarrow$) 若 X_0 是解, i.e., $AX_0=b$, B 为 A 的左逆, 则

$$b = AX_0 = ABAX_0 = ABb,$$

因此, $(I_m - AB)b = 0$.

此时, $X_0 = BAX_0 = Bb$.

($\Leftarrow$) 若 $(I_m - AB)b = 0$, 则

$ABb = b$, 故有解 $X = Bb$, 且为唯一解. ■

二、单侧逆与解线性方程组

定理4　设 $A \in C^{m\times n}$ 右可逆, $AX = b$ 是线性方程组.

(1) $AX = b$ 必有解 $X = A^H(AA^H)^{-1}b$.

(2) 若 $C \in C^{n\times m}$ 是 A 的任意右逆, 则

$$X = Cb$$

亦是 $AX = b$ 的解.

证明　(直接带入验证, 略)

二、Moore-Penrose 广义逆 (加号广义逆)

定义 设 $A \in C^{m\times n}$,若矩阵 $G \in C^{n\times m}$ 满足

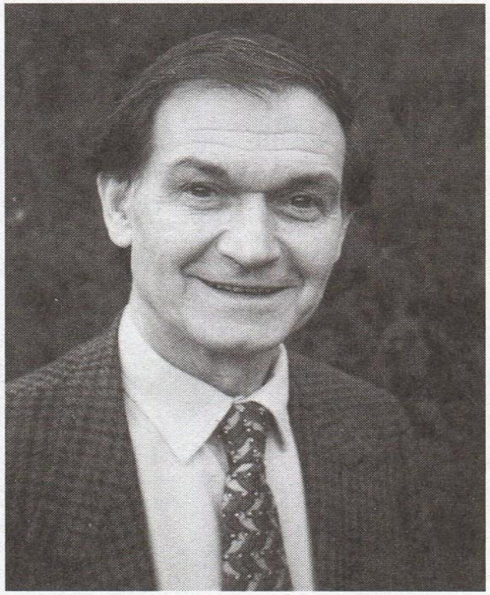
$$(1)\ AGA = A; \qquad (2)\ GAG = G;$$

$$(3)\ (AG)^H = AG; \qquad (4)\ (GA)^H = GA.$$

则称 G 为 A 的 M-P 广义逆或加号广义逆，记为 A^+.

so $\Sigma^+ = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$

One of those who was unaware of Moore's work on matrix inverses was Roger Penrose (b.1931), who introduced his own notion of a generalized matrix inverse in 1955. Penrose has made many contributions to geometry and theoretical physics. He is also the inventor of a type of *nonperiodic tiling* that covers the plane with only two different shapes of tile, yet has no repeating pattern. He has received many awards, including the 1988 Wolf Prize in Physics, which he shared with Stephen Hawking. In 1994, he was knighted for services to science. Sir Roger Penrose is currently the Emeritus Rouse Ball Professor of Mathematics at the University of Oxford.



Roger Penrose

二、Moore-Penrose 广义逆 (加号广义逆) ★

定理 (存在唯一性定理I)

任何矩阵 $A \in C^{m\times n}$ 都有唯一的 M-P 逆 A^+.

-1

如果 A 的奇异值分解为 $A = U\begin{bmatrix}\Delta & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}V^H$, 则

$$A^+ = V\begin{bmatrix}\Delta^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}U^H.$$

证明 (存在性)

$A = 0$ 时, $A^+ = 0$ 即为 A 的一个 M-P 逆.

$A \neq 0$ 时, A 有SVD: $A = U\begin{bmatrix}\Delta & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}V^H$,

其中, U, V 为酉矩阵, $\Delta = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r)$.

令 $G = V\begin{bmatrix}\Delta^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}U^H$,

则容易验证 G 即为 A 的一个 M-P 逆.

二、Moore-Penrose 广义逆 (加号广义逆)

定理 (存在唯一性定理I)

任何矩阵 $A \in C^{m\times n}$ 都有唯一的 M-P 逆 A^+.

如果 A 的奇异值分解为 $A = U\begin{bmatrix}\Delta & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}V^H$, 则

$$A^+ = V\begin{bmatrix}\Delta^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}U^H.$$

证明 (唯一性) 设 G 和 G' 为 A 的任意两个 M-P 逆, 则

$$G = GAG = (GA)^H G = A^H G^H G = (AG'A)^H G^H G$$

$$= A^H G'^H A^H G^H G = (G'A)^H (GA)^H G = G'AGAG = G'AG,$$

同理, $G' = GAG'$. 又

$$G = GAG = G(AG)^H = GG^H A^H = GG^H (AG'A)^H$$

$$= GG^H A^H G'^H A^H = G(AG)(AG') = GAG' = G'. \ \blacksquare$$

二、Moore-Penrose 广义逆 (加号广义逆) ★

定理 (存在唯一性定理II)

任何矩阵 $A \in C^{m\times n}$ 都有唯一的 M-P 逆 A^+.

如果 A 有满秩分解 $A = BC$, 则

$$A^+ = C^H(CC^H)^{-1}(B^HB)^{-1}B^H \, .$$

定理(性质) 设 $A \in C^{m\times n}, \lambda \in C$. 则 A^+ 满足

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

(2) $(A^+)^H = (A^H)^+$;

(3) $(kA)^+ = k^+A^+$, 其中 $k^+ = k^{-1}$ $(0^+ = 0)$;

(4) 若 A 列满秩, $A^+ = (A^HA)^{-1}A^H$;
若 A 行满秩, $A^+ = A^H(AA^H)^{-1}$;

(5) 若 A 有满秩分解 $A = BC$, 则 $A^+ = C^+B^+$.

一般地, $(BC)^+ \neq C^+B^+$; $(A^+)^k \neq (A^k)^+$.

二、Moore-Penrose 广义逆 (加号广义逆)

例5 设 $A \in C^{m\times n}$, 则

$$(1)\ r(A) = r(A^+);$$

$$(2)\ r(A^+A) = r(AA^+) = r(A).$$

证明 (1) $r(A) = r(AA^+A) \le r(A^+) = r(A^+AA^+) \le r(A)$;

(2) $r(A^+A) \le r(A) = r(AA^+A) \le r(A^+A)$. ■

最佳的最小二乘解

方程组 $AX = b$ 有解 $\Leftrightarrow b \in R(A)$, 此时方程组称相容的.

当方程组不相容, 即 $b \notin R(A)$ 时, 考虑最小二乘解来逼近.

定义4.6 设 $A \in C^{m\times n}$, $b \in C^m$, 如果存在 $u \in C^n$, 使得

$$\| Au - b \| \leq \| Ax - b \|, \quad \forall x \in C^n,$$

则称 u 是方程组 $AX = b$ 的一个最小二乘解.

范数最小的最小二乘解称为最佳的最小二乘解

或最佳逼近解.

注：一般地，最小二乘解不是唯一的，

但最佳的最小二乘解是唯一的。

最佳的最小二乘解

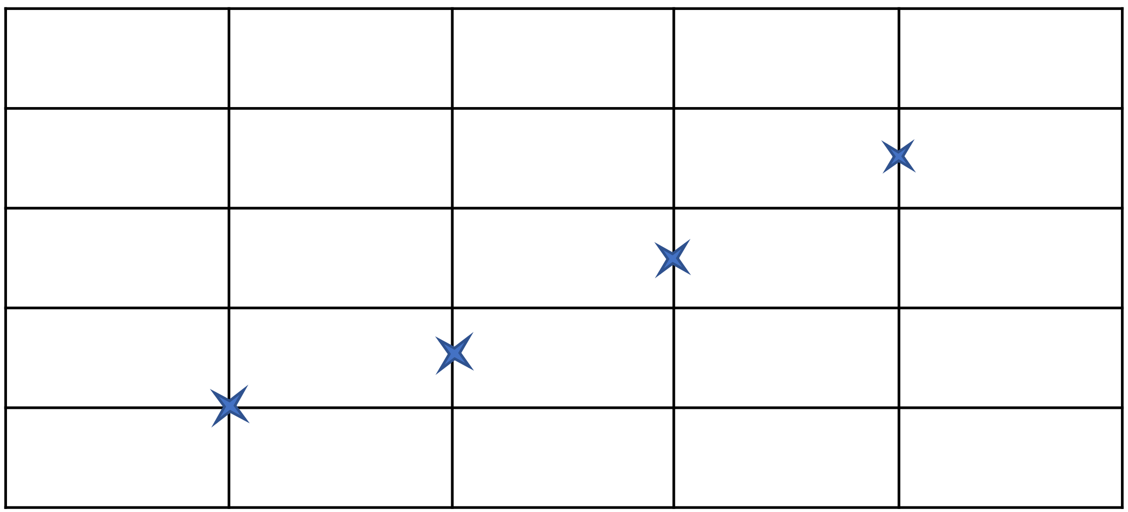
定理 设 $A \in C^{m\times n}$, $b \in C^m$, 则 $x_0 = A^+b$ 是方程组 $Ax = b$ 唯一的最佳的最小二乘解.

若 A 列满秩, $A^+ = (A^H A)^{-1} A^H$;

若 A 行满秩, $A^+ = A^H (A A^H)^{-1}$;

最佳的最小二乘解

例9　设有一组实验数据: (1,2), (2,3), (3,5), (4,7). 从数据点的走向看接近一条直线, 实验者希望用直线 $y = a_0 + a_1 x$ 来拟合数据点, 求最佳拟合直线.



最佳的最小二乘解

例9　设有一组实验数据：(1,2), (2,3), (3,5), (4,7). 从数据点的走向看接近一条直线, 实验者希望用直线 $y = a_0 + a_1 x$ 来拟合数据点, 求最佳拟合直线.

解　把实验数据带入直线方程, 得 $\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}}_{A} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix}}_{b}$.

因系数矩阵 A 列满秩,

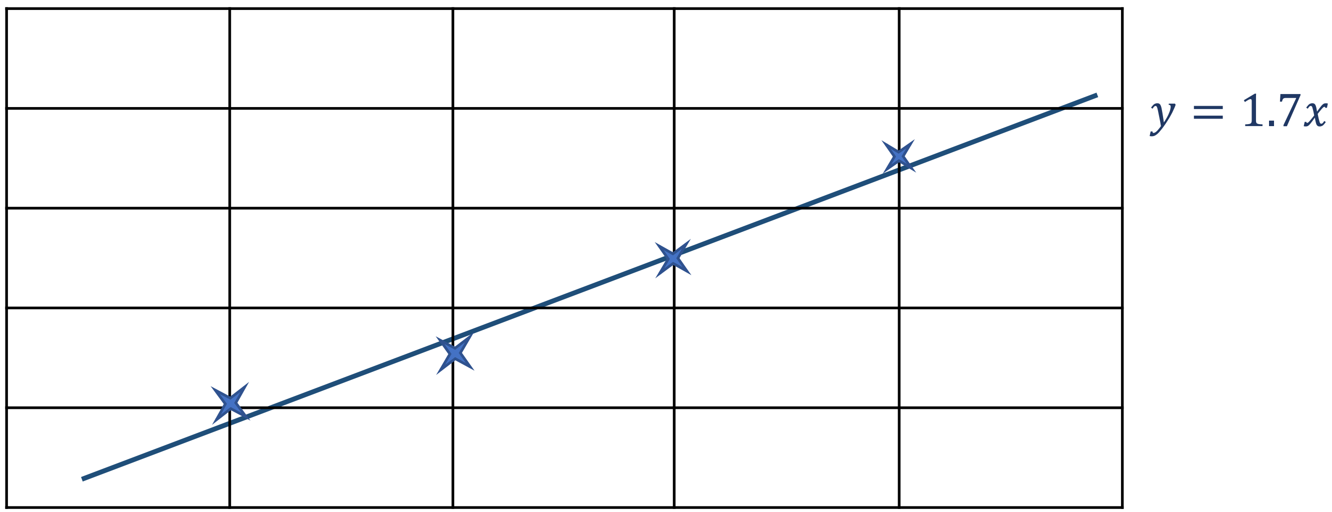
$$A^+ = (A^H A)^{-1} A^H = \frac{1}{20} \begin{bmatrix} 20 & 10 & 0 & -10 \\ -6 & -2 & 2 & 6 \end{bmatrix}.$$

取最佳的最小二乘解 $\alpha = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = A^+ b = \begin{bmatrix} 0 \\ 1.7 \end{bmatrix}$,

得最佳拟合直线 $y = 1.7x$. 误差 $\| A\alpha - b \| = \sqrt{0.3}$. ■

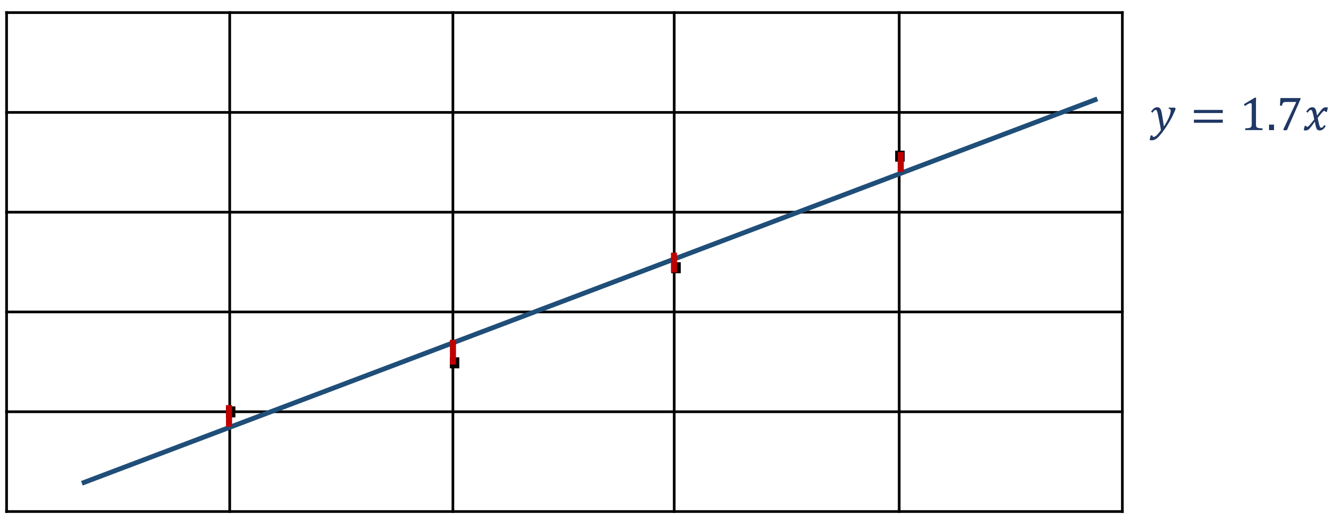
最佳的最小二乘解

例9　设有一组实验数据: (1,2), (2,3), (3,5), (4,7). 从数据点的走向看接近一条直线, 实验者希望用直线 $y = a_0 + a_1 x$ 来拟合数据点, 求最佳拟合直线.



最佳的最小二乘解

例9　设有一组实验数据: (1,2), (2,3), (3,5), (4,7). 从数据点的走向看接近一条直线, 实验者希望用直线 $y = a_0 + a_1 x$ 来拟合数据点, 求最佳拟合直线.



注：误差 $\sqrt{0.3}$ 为红线段长度的和，即实验数据与理论值的误差之和。

最佳的最小二乘解

例10　设某质点的运动轨道是椭圆, 观察到的位置坐标为

$$(1,1),\qquad (0,2),\qquad (-1,1),\qquad (-1,-2).$$

求最佳拟合椭圆方程 $\beta_1 x^2 + \beta_2 y^2 = 1$.

解　把实验数据带入方程, 得 $\underbrace{\begin{bmatrix}1 & 1\\ 0 & 4\\ 1 & 1\\ 1 & 4\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{A}}\begin{bmatrix}\beta_1\\ \beta_2\end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix}1\\ 1\\ 1\\ 1\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{b}}$.

因系数矩阵 A 列满秩,

$$A^+ = (A^H A)^{-1} A^H = \frac{1}{66}\begin{bmatrix}28 & -24 & 28 & 10\\ -3 & 12 & -3 & 6\end{bmatrix}.$$

取 $\beta = \begin{bmatrix}\beta_1\\ \beta_2\end{bmatrix} = A^+ b = \frac{1}{11}\begin{bmatrix}7\\ 2\end{bmatrix}$, 得 $\frac{7}{11}x^2 + \frac{2}{11}y^2 = 1$.

误差为 $\| A\beta - b \| = 0.5$. ■