矩阵的广义逆（一）：定义和基本性质

本文内容：

- 广义逆的定义
  - 定义
  - 存在性、唯一性以及表达式
- 广义逆的基本性质

需要的前置知识：

- Hermite转置，A^H，即A的**共轭转置**，就是对 A^T 的每一个元素再求共轭。在 A 是实矩阵时就是 A^T 。**Hermite矩阵**是指满足 $A^H = A$ 的矩阵，在 A 是实矩阵时就是指实对称矩阵）
- 奇异值分解/SVM。对于任何一个矩阵 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$，都存在矩阵 $U \in \mathbb{C}^{m\times m}, S_r \in \mathbb{R}^{r\times r}, V \in \mathbb{C}^{n\times n}$，使得

  $$A = U\begin{pmatrix} S_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_{m\times n} V^{-1}$$

  其中 $r = \mathrm{rank}(A)$； S_r 是对角矩阵，其对角元均为正实数，称为 A 的 r 个正奇异值； U, V 满足 $U^{-1} = U^H, V^{-1} = V^H$。当 A 是实矩阵时 U, V 也为实矩阵。

矩阵广义逆的定义

Def. 设 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$，若矩阵 $X \in \mathbb{C}^{n\times m}$ 满足4个Moore-Penrose方程：

> (1) $AXA = A$
>
> (2) $XAX = X$
>
> (3) $(AX)^H = AX$
>
> (4) $(XA)^H = XA$

的全部或一部分，则称 X 为 A 的**广义逆**矩阵。

具体而言，若 X 满足方程(i)，则记 $X = A^{(i)}$，全体 $A^{(i)}$ 的集合记作 $A\{i\}$。同理，定义 $A^{(i,j)}, A^{(i,j,k)}, A^{(1,2,3,4)}, A\{i,j\}, A\{i,j,k\}, A\{1,2,3,4\}$。其中 $A^{(1)}$ 也记作 A^-， $A^{(1,2,3,4)}$ 也记作 A^+ 。

由以上定义可以看出，一个矩阵一共有$2^4 - 1 = 15$种广义逆。不过，比较常(you)见(yong)的广义逆一般都需要满足方程(1)，一个简单的理解方式是 $0 \in A\{2,3,4\}$，这说明若没有方程(1)的存在，则零矩阵是任何矩阵的广义逆，所以我们很难得到许多有意义的结果。

另外一个观察是：如果 A 可逆，那么 $A^{-1} = A^+$。（直接验证A^{-1}满足方程(1)-(4)即可）这说明矩阵广义逆的确是矩阵逆的推广。

A^+的存在唯一性

有了广义逆的定义之后，第一个问题就应该是——矩阵的各类广义逆是否存在？这个答案是肯定的。而且，对于满足全部MP方程的 A^+ ，它不仅存在，而且唯一。

Thm 1. $\forall A \in \mathbb{C}^{m\times n}$， A^+ 存在且唯一。

proof: （存在性）对 A 做奇异值分解

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

则令

$$X = V\begin{pmatrix} S_r^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}U^{-1}$$

验证方程(1)-(4)即可知 $X = A^+$。

（唯一性）反复利用方程(1)-(4)可得：

$$\begin{aligned} X &\overset{(2)}{=} XAX \overset{(3)}{=} X(AX)^H = XX^HA^H \\ &\overset{(1)}{=} XX^H(AYA)^H = XX^HA^HY^HA^H = X(AX)^H(AY)^H \overset{(3)}{=} XAXAY \overset{(2)}{=} XAY \end{aligned}$$

通过“左右颠倒”的操作可得：

$$\begin{aligned} Y &\overset{(2)}{=} YAY \overset{(4)}{=} (YA)^HY = A^HY^HY \\ &\overset{(1)}{=} (AXA)^HY^HY = A^HX^HA^HY^HY = (XA)^H(YA)^HY \\ &\overset{(4)}{=} XAYAY \overset{(2)}{=} XAY \end{aligned}$$

所以 $X = Y$，即 A^+ 唯一。 $\square$.

以上证明的正确性毋庸置疑。但美中不足在于“不好想”：为什么能够直接设出 A^+ 的表达式，又是如何想到后面眼花缭乱的等式变形的呢？秉承*追求简单粗暴，拒绝花里胡哨*的理念，我决定给出另一个证明。思路是简单地使用奇异值分解后根据4个MP方程直接计算求解。使用SVM是因为SVM可以把一个复杂的任意矩阵 A 转变为简单的可逆对角阵 S_r 从而简化计算。

Thm $1'$. $\forall K \in \mathbb{C}^{m\times n}$，若 K 的奇异值分解为

$$K = U\begin{pmatrix} S_r & \\ & 0 \end{pmatrix}V^{-1}$$

则

$$K^+ = V\begin{pmatrix} S_r^{-1} & \\ & 0 \end{pmatrix}U^{-1}$$

存在且唯一。

proof: 我们假设

$$V^{-1}K^+U = X = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$$

由于 U, V 可逆，故

$$K^+ = V\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}U^{-1}$$

接下来只需求出 X 。我们将上式代入方程(1)，得：

$$KK^+K = U\begin{pmatrix} S_r & \\ & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}\begin{pmatrix} S_r & \\ & 0 \end{pmatrix}V^{-1} = U\begin{pmatrix} S_r & \\ & 0 \end{pmatrix}V^{-1} = K$$

$$\iff \quad \begin{pmatrix} S_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_rAS_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

即 $A = S_r^{-1}$，B, C, D 任取。

同理，代入方程(2)，得：

$$K^+KK^+ = V\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}\begin{pmatrix} S_r & \\ & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}U^{-1} = V\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}U^{-1} = K^+$$

$$\iff \quad \begin{pmatrix} AS_rA & AS_rB \\ CS_rA & CS_rB \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$$

同理，代入方程(3)，得：

$$(KK^+)^H = U\begin{pmatrix} A^H & C^H \\ B^H & D^H \end{pmatrix}\begin{pmatrix} S_r & \\ & 0 \end{pmatrix}U^H = U\begin{pmatrix} S_r & \\ & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}U^{-1} = KK^+$$

$$\iff \quad \begin{pmatrix} A^HS_r & 0 \\ B^HS_r & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_rA & S_rB \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

即 $A^HS_r = S_rA,\ B = 0$，C, D 任取。

同理，代入方程(4)，得：

$$(K^+K)^H = V\begin{pmatrix} S_r & \\ & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A^H & C^H \\ B^H & D^H \end{pmatrix}V^H = V\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}\begin{pmatrix} S_r & \\ & 0 \end{pmatrix}V^{-1} = K^+K$$

$$\iff \quad \begin{pmatrix} S_rA^H & S_rC^H \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} AS_r & 0 \\ CS_r & 0 \end{pmatrix}$$

即 $S_rA^H = AS_r,\ C = 0$，B, D 任取。

综上，由方程(1)知 $A = S_r^{-1}$，由方程(3)知 $B = 0$，由方程(4)知 $C = 0$，由方程(2)知 $D = CS_rB = 0$ 。

即满足方程(1)(2)(3)(4)的解为且仅为

$$K^+ = V\begin{pmatrix} S_r^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}U^{-1}$$

这就同时证明了存在性和唯一性。□.

事实上，通过这个“笨”方法，我们能得到更多的结论，精确得出各类广义逆的通式：

$$K\{1\}=\left\{V\begin{pmatrix}S_r^{-1} & B\\ C & D\end{pmatrix}U^{-1}\,\middle|\, B\in\mathbb{C}^{r\times(m-r)},C\in\mathbb{C}^{(n-r)\times r},D\in\mathbb{C}^{(n-r)\times(m-r)}\right\}$$

$$K\{1,2\}=\left\{V\begin{pmatrix}S_r^{-1} & B\\ C & D\end{pmatrix}U^{-1}\,\middle|\, CS_rB=D\right\}$$
$$K\{1,3\}=\left\{V\begin{pmatrix}S_r^{-1} & 0\\ C & D\end{pmatrix}U^{-1}\,\middle|\, C\in\mathbb{C}^{(n-r)\times r},D\in\mathbb{C}^{(n-r)\times(m-r)}\right\}$$
$$K\{1,4\}=\left\{V\begin{pmatrix}S_r^{-1} & B\\ 0 & D\end{pmatrix}U^{-1}\,\middle|\, B\in\mathbb{C}^{r\times(m-r)},D\in\mathbb{C}^{(n-r)\times(m-r)}\right\}$$

$$K\{1,2,3\}=\left\{V\begin{pmatrix}S_r^{-1} & 0\\ C & 0\end{pmatrix}U^{-1}\,\middle|\, C\in\mathbb{C}^{(n-r)\times r}\right\}$$
$$K\{1,2,4\}=\left\{V\begin{pmatrix}S_r^{-1} & B\\ 0 & 0\end{pmatrix}U^{-1}\,\middle|\, B\in\mathbb{C}^{r\times(m-r)}\right\}$$
$$K\{1,3,4\}=\left\{V\begin{pmatrix}S_r^{-1} & 0\\ 0 & D\end{pmatrix}U^{-1}\,\middle|\, D\in\mathbb{C}^{(n-r)\times(m-r)}\right\}$$

广义逆的基本性质

Prop.

1. $(A^+)^+=A$
2. $(A^H)^+=(A^+)^H,\quad (A^T)^+=(A^+)^T$
3. A^+A, AA^+ 均为幂等的Hermite矩阵
4. rank(A) = rank(A^+)
5. $(A^HA)^+=A^+(A^H)^+,\quad (AA^H)^+=(A^H)^+A^+$
6. $A^+=(A^HA)^+A^H=A^H(AA^H)^+$
7. Im(A^+) $=$ Im(A^H)，Ker(A^+) $=$ Ker(A^H)

证明我懒得详细写了，在我们既有4个MP方程，又知道 A^+ 的具体表达式的情况下，验证正确性没有太大难度，可以当做练习。提示一下，性质1、2、4观察方程(1)-(4)或者直接看 A^+ 具体表达式都可以得到；性质3验证一下显然；性质5、6代入4个MP方程验证即可，剩下的就是计算能力了；性质7利用方程(1)(2)和像与核的维数公式。

比起计算为主的证明，我觉得理解与记忆更重要，特别是看上去很奇怪的性质5和6。性质5的意思就是A和A^H相乘时求加号逆可以像求一般逆一样满足逆向分配律（这个律叫什么名字我不记得了……），注意这一点对一般的两个矩阵是未必成立的，$(AB)^+\neq B^+A^+$ 。性质6其实就是当A存在左/右侧逆时，对单侧逆计算公式的推广。