伪逆与最小二乘法

Pseudoinverse and Least Squares

问题的引入

考虑解线性方程组 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 的问题。我们知道当 A 是可逆方阵的时候，该线性方程组有唯一解 $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$.

当 A 没有逆的时候，有什么补救办法呢?

希望：定义一个伪逆（Pseudoinverse），记作 A^{+}, 使得当 A 可逆的时候，A 的伪逆就是它的逆，即

$$A^{+} = A^{-1}$$

如果可能的话，还要求当 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 无解时，$\mathbf{x} = A^{+}\mathbf{b}$ 是“近似程度”最好的“解”。

内容提要

矩阵的广义逆，Generalized Inverse

$m \times n$ 矩阵 A 的广义逆指的是一个 $n \times m$ 的矩阵 X, 满足

$$AXA = A$$

通常把 A 的广义逆记作 A^-.

广义逆的定义与性质

矩阵的广义逆，Generalized Inverse

$m \times n$ 矩阵 A 的广义逆指的是一个 $n \times m$ 的矩阵 X, 满足

$$AXA = A$$

通常把 A 的广义逆记作 A^-.

广义逆的普遍存在性

任意矩阵 A 的广义逆 A^- 总存在。设 P, Q 分别为 m 阶与 n 阶可逆阵，使得 $A = P \begin{pmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_{m\times n} Q$, 那么

$$A^- = Q^{-1} \begin{pmatrix} I_r & * \\ *' & *'' \end{pmatrix}_{n\times m} P^{-1}$$

其中 $r = r(A)$, $*, *', *''$ 分别是大小为 $r \times (m-r)$, $(n-r) \times r$, 以及 $(n-r) \times (m-r)$ 的块，块中元素可以任取。

广义逆与线性方程组的解

广义逆与齐次线性方程组

齐次线性方程组 $A\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 的解的全体为

$$\mathbf{x} = (I_n - A^- A)\mathbf{z},$$

其中 A^- 取遍 A 的所有广义逆，$\mathbf{z}$ 取遍所有的 n 维列向量。

广义逆与线性方程组的解

广义逆与齐次线性方程组

齐次线性方程组 $A\mathbf{x}=\mathbf{0}$ 的解的全体为

$$\mathbf{x}=(I_n-A^-A)\mathbf{z},$$

其中 A^- 取遍 A 的所有广义逆，$\mathbf{z}$ 取遍所有的 n 维列向量。

广义逆与非齐次线性方程组

非齐次线性方程组 $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$ 有解，当且仅当存在 A 的广义逆 A^- 使得

$$\mathbf{b}=AA^-\mathbf{b}.$$

有解时，它的解的全体为 $A^-\mathbf{b}$, A^- 取遍 A 的所有广义逆。

广义逆只解决了我们的第一部分要求，即它“像是”逆，而且当矩阵的确可逆的时候它就是矩阵通常意义下的逆。但是它并不唯一，而且仍然没有解决求“最佳近似解”的需求。

伪逆的定义

Moore-Penrose 伪逆，Pseudoinverse

$m \times n$ 矩阵 A 的 Moore-Penrose 伪逆，或简称伪逆，指的是同时满足如下四个条件的 $n \times m$ 矩阵 X

$$
\begin{cases}
AXA = A \\
XAX = X \\
(AX)^T = AX \\
(XA)^T = XA
\end{cases}
$$

通常，A 的伪逆被记作 A^+.

伪逆的性质

伪逆的存在性与唯一性

任意 $m \times n$ 矩阵 A 的伪逆 A^+ 都存在，而且

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

其中 $A = U\Sigma V^T$ 为矩阵 A 的奇异值分解，奇异值为 $\sigma_1, \ldots, \sigma_r$,

$$\Sigma^+ = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_1} & & & \\ & \ddots & & \\ & & \frac{1}{\sigma_r} & \\ & & & 0 \end{pmatrix}_{n \times m}$$

伪逆的性质

伪逆的另一种表达

A 的奇异值分解又可以写作 $A = U\Sigma V^T = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T$. 于是我们又有 A^+ 的另一种表达

$$A^+ = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i^{-1} \mathbf{v}_i \mathbf{u}_i^T$$

其中这些 $\mathbf{v}_i, \mathbf{u}_i$ 分别是正交阵 V 与 U 的列。

伪逆与线性方程组

伪逆与线性方程组解的关系

对于线性方程组 $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$（$\mathbf{b}$ 可以是零向量也可以不是），它若有解，则解可以由系数矩阵 A 的 Moore-Penrose 伪逆统一给出：

$$A^{+}\mathbf{b}+(I-A^{+}A)\mathbf{w}$$

其中 $\mathbf{w}$ 是任意一个 n 维列向量。当然，$A\mathbf{x}=\mathbf{b}$ 有解的充要条件为

$$AA^{+}\mathbf{b}=\mathbf{b}$$

最小二乘法

最小二乘法：问题分析

我们来考虑非齐次线性方程组 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 无解的情况，A 是一个 $m \times n$ 矩阵。此时，我们有

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}\text{无解} \Longleftrightarrow \mathbf{b} \notin C(A)$$

转而：在 $C(A)$ 中寻找 $A\hat{\mathbf{x}}$, 使得它与 $\mathbf{b}$ 最接近，即求

$$\underset{\hat{\mathbf{x}}}{\operatorname{argmin}} \|A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\|,$$

并称其为一个最小二乘解。

可以将以上结果与之前的广义逆相关的结果对比来看。

最小二乘法：法方程组

事实： $\mathbb{R}^m$ 中的一个点，与一个线性子空间中距离最短的点是这个点在这个子空间上的投影。于是

$$\begin{aligned} \|A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\| \text{取得最小值} &\iff A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \perp C(A) \\ &\iff A^T(A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) = \mathbf{0} \\ &\iff A^T A\hat{\mathbf{x}} = A^T\mathbf{b} \end{aligned}$$

于是问题转化为了求解非齐次线性方程组

$$A^T A\hat{\mathbf{x}} = A^T\mathbf{b}$$

最小二乘法：法方程组

事实： $\mathbb{R}^m$ 中的一个点，与一个线性子空间中距离最短的点是这个点在这个子空间上的投影。于是

$$\begin{aligned} \|A\widehat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\| \text{取得最小值} &\iff A\widehat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \perp C(A) \\ &\iff A^T(A\widehat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) = \mathbf{0} \\ &\iff A^T A\widehat{\mathbf{x}} = A^T\mathbf{b} \end{aligned}$$

于是问题转化为了求解非齐次线性方程组

$$A^T A\widehat{\mathbf{x}} = A^T\mathbf{b}$$

以上方程组（被称作法方程组，Normal Equations）的特点：

- 总有解；
- 即使解 $\widehat{\mathbf{x}}$ 不唯一，投影 $A\widehat{\mathbf{x}}$ 是唯一的。

最小二乘法

最小二乘解

- 若 $r(A) = n$, 那么 $r(A^T) = r(A) = n$. 此时 A^TA 可逆, $A^TA\widehat{\mathbf{x}} = A^T\mathbf{b}$ 有唯一解。于是我们得到唯一的最小二乘解

$$\widehat{\mathbf{x}} = (A^TA)^{-1}A^T\mathbf{b}.$$

最小二乘法

最小二乘解

- 若 $r(A)=n$, 那么 $r(A^T)=r(A)=n$. 此时 A^TA 可逆, $A^TA\hat{\mathbf{x}}=A^T\mathbf{b}$ 有唯一解。于是我们得到唯一的最小二乘解

$$\hat{\mathbf{x}}=(A^TA)^{-1}A^T\mathbf{b}.$$

- 若 $r(A)<n$, 那么 $r(A^T)=r(A)<n$. 此时 A^TA 不可逆, $A^TA\hat{\mathbf{x}}=A^T\mathbf{b}$ 有无穷多组解，亦即最小二乘解有无穷多组。

最小二乘法

最小二乘解

重要： $\mathbf{x}^+ := A^+\mathbf{b}$ 是长度最小的最小二乘解。其中 A^+ 为矩阵 A 的 Moore-Penrose 伪逆。

最小二乘法

最小二乘解

重要： $\mathbf{x}^+ := A^+\mathbf{b}$ 是长度最小的最小二乘解。其中 A^+ 为矩阵 A 的 Moore-Penrose 伪逆。

证明：以下设 A 的奇异值分解为 $A = U\Sigma V^T$.
（1）$\mathbf{x}^+$ 是最小二乘解：将其代入法方程组 $A^TA\hat{\mathbf{x}} = A^T\mathbf{b}$ 左边有

$$
\begin{aligned}
A^TA\cdot\mathbf{x}^+ &= A^TAA^+\cdot\mathbf{b} \\
&= (V\Sigma^TU^T)(U\Sigma V^T)(V\Sigma^+U^T)\mathbf{b} = V\Sigma^T\Sigma\Sigma^+U^T\cdot\mathbf{b} \\
&= V\begin{pmatrix}\Sigma_0^T & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Sigma_0 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Sigma_0^{-1} & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}U^T\cdot\mathbf{b} \\
&= V\Sigma^TU^T\cdot\mathbf{b} = A^T\cdot\mathbf{b} = \text{法方程组右边}
\end{aligned}
$$

其中 $\Sigma_0 = diag(\sigma_1,\ldots,\sigma_r)$. 由上式即知，$\mathbf{x}^+$ 是最小二乘解。

最小二乘法

最小二乘解

（2）$\mathbf{x}^+$ 是最小二乘解中长度最小者：设 $\widehat{\mathbf{x}}_0$ 也是一个最小二乘解，即满足 $A^TA\widehat{\mathbf{x}}_0 = A^T\mathbf{b}$. 于是

$$
\begin{aligned}
& A^TA(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = A^T\mathbf{b} - A^T\mathbf{b} = \mathbf{0} \\
\Longrightarrow & \|A(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+)\| = (\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+)^T A^T A(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = 0 \\
\Longrightarrow & A(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = \mathbf{0}
\end{aligned}
$$

最小二乘解

（2）$\mathbf{x}^+$ 是最小二乘解中长度最小者：设 $\widehat{\mathbf{x}}_0$ 也是一个最小二乘解，即满足 $A^TA\widehat{\mathbf{x}}_0 = A^T\mathbf{b}$. 于是

$$A^TA(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = A^T\mathbf{b} - A^T\mathbf{b} = \mathbf{0}$$
$$\Longrightarrow \|A(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+)\| = (\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+)^T A^T A(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = 0$$
$$\Longrightarrow A(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = \mathbf{0}$$

A 用其奇异值分解又可写作 $A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T$. 于是从上式我们有

$$A(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = \mathbf{0} \Longrightarrow \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T (\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = \mathbf{0}$$
$$\Longrightarrow \sum_{i=1}^{r} \left(\sigma_i \cdot \left(\mathbf{v}_i^T (\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+)\right)\right) \mathbf{u}_i = \mathbf{0}$$

最小二乘解

但是，我们知道 $\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_r$ 是线性无关的（甚至是相互正交的），而且 $\sigma_1, \ldots, \sigma_r$ 都是大于 0 的实数。于是

$$\mathbf{v}_1^T(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = \cdots = \mathbf{v}_r^T(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = 0.$$

那么

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{x}^+, \widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+ \rangle &= (\mathbf{x}^+)^T(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = (A^+\mathbf{b})^T(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) \\
&= \mathbf{b}^T(A^+)^T(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) \\
&= \mathbf{b}^T\left(\sum_{i=1}^r \sigma_i^{-1}\mathbf{v}_i\mathbf{u}_i^T\right)^T(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) \\
&= \mathbf{b}^T\left(\sum_{i=1}^r \sigma_i^{-1}\mathbf{u}_i \underbrace{\mathbf{v}_i^T(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+)}_{=\mathbf{0}}\right) = 0
\end{aligned}$$

最小二乘解

因此，我们有

$$\|\widehat{\mathbf{x}}_0\|^2 = \|\mathbf{x}^+ + (\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+)\|^2 = \|\mathbf{x}^+\|^2 + \|(\widehat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+)\|^2 \geqslant \|\mathbf{x}^+\|^2$$

也就是说 $\mathbf{x}^+ = A^+\mathbf{b}$ 的确是长度最小的最小二乘解。

最小二乘解

注意！最小二乘解 $\mathbf{x}^+ = A^+\mathbf{b}$ 包含了 A^TA 可逆时的唯一最小二乘解 $(A^TA)^{-1}A^T\mathbf{b}$.

最小二乘解

注意！最小二乘解 $\mathbf{x}^+ = A^+\mathbf{b}$ 包含了 A^TA 可逆时的唯一最小二乘解 $(A^TA)^{-1}A^T\mathbf{b}$.

根据矩阵乘积的秩关系

$$A^TA\text{可逆} \Longrightarrow n = r(A^TA) = r(A) = r(\Sigma),$$

于是，Σ 就必须形如 $\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_0 \\ 0 \end{pmatrix}$, 其中 $\Sigma_0 = diag(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)$. 于是

$$A^+ = V \begin{pmatrix} \Sigma_0^{-1} & 0 \end{pmatrix} U^T$$

另一方面，

$$\begin{aligned}(A^TA)^{-1}A^T &= (V\Sigma^TU^TU\Sigma V^T)^{-1}V\Sigma^TU^T \\ &= V\Sigma_0^{-2}V^TV\Sigma^TU^T = V \begin{pmatrix} \Sigma_0^{-1} & 0 \end{pmatrix} U^T\end{aligned}$$