

Pseudoinverse
and Least
Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

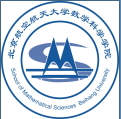
Moore-
Penrose 伪
逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

伪逆与最小二乘法

Pseudoinverse and Least Squares



问题的引入

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore-
Penrose 伪
逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

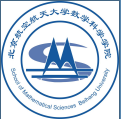
考虑解线性方程组 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 的问题。我们知道当 A 是可逆方阵的时候，该线性方程组有唯一解 $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$ 。

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

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore-
Penrose 伪
逆

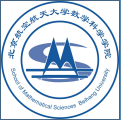
伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

1 广义逆

2 Moore-Penrose 伪逆

3 最小二乘法



Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

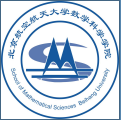
伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

1 广义逆

2 Moore-Penrose 伪逆

3 最小二乘法



广义逆的定义与性质

Pseudoinverse
and Least
Squares

广义逆

广义逆的定义与性质

广义逆与线性方程组
的解

Moore-
Penrose 伪
逆

伪逆的定义与性质

伪逆与线性方程组

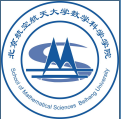
最小二乘法

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

Pseudoinverse
and Least
Squares

广义逆

广义逆的定义与性质

广义逆与线性方程组
的解

Moore-
Penrose 伪
逆

伪逆的定义与性质

伪逆与线性方程组

最小二乘法

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

$$AXA = A$$

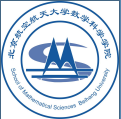
通常把 A 的广义逆记作 A^- .

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 $A = P \begin{pmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} Q$, 那么

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

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

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

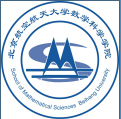
最小二乘法

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

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

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

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

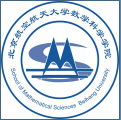
其中 A^- 取遍 A 的所有广义逆, \mathbf{z} 取遍所有的 n 维列向量。

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。



Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

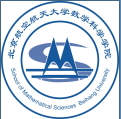
广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

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。



Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

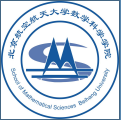
伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

1 广义逆

2 Moore-Penrose 伪逆

3 最小二乘法



伪逆的定义

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

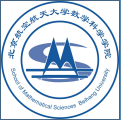
最小二乘法

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

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

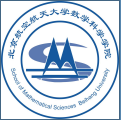
伪逆的存在性与唯一性

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 $\sigma_1, \dots, \sigma_r$,

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



伪逆的性质

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

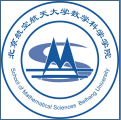
最小二乘法

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

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

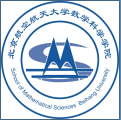
伪逆与线性方程组解的关系

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

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



Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

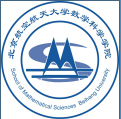
伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

1 广义逆

2 Moore-Penrose 伪逆

3 最小二乘法



最小二乘法

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

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

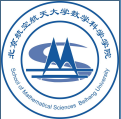
$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \text{ 无解} \iff \mathbf{b} \notin C(A)$$

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

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

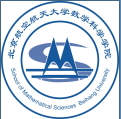
最小二乘法：法方程组

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

Pseudoinverse
and Least
Squares

广义逆

广义逆的定义与性质

广义逆与线性方程组
的解

Moore-
Penrose 伪
逆

伪逆的定义与性质

伪逆与线性方程组

最小二乘法

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

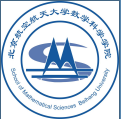
$$\begin{aligned}\|A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\| \text{取得最小值} &\iff A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b} \perp C(A) \\ &\iff A^T(A\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{b}) = \mathbf{0} \\ &\iff A^T A\hat{\mathbf{x}} = A^T \mathbf{b}\end{aligned}$$

于是问题转化为了求解非齐次线性方程组

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

以上方程组（被称作法方程组，Normal Equations）的特点：

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



最小二乘法

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

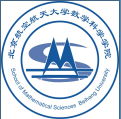
伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

最小二乘解

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

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



最小二乘法

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

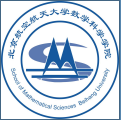
最小二乘法

最小二乘解

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

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

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



最小二乘法

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

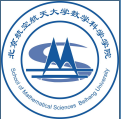
Moore- Penrose 伪 逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

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

Pseudoinverse
and Least
Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore-
Penrose 伪
逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

最小二乘解

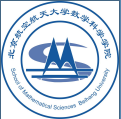
重要: $\mathbf{x}^+ := A^+ \mathbf{b}$ 是长度最小的最小二乘解。其中 A^+ 为矩阵 A 的 Moore-Penrose 伪逆。

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

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

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



最小二乘法

Pseudoinverse
and Least
Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore-
Penrose 伪
逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

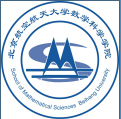
最小二乘解

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

$$A^T A(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = A^T \mathbf{b} - A^T \mathbf{b} = \mathbf{0}$$

$$\Rightarrow \|A(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+)\| = (\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+)^T A^T A(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = 0$$

$$\Rightarrow A(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = \mathbf{0}$$



最小二乘法

Pseudoinverse
and Least
Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore-
Penrose 伪
逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

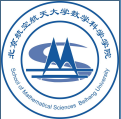
最小二乘解

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

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

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

$$\begin{aligned} A(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = \mathbf{0} &\implies \sum_{i=1}^r \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T (\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+) = \mathbf{0} \\ &\implies \sum_{i=1}^r (\sigma_i \cdot (\mathbf{v}_i^T (\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+))) \mathbf{u}_i = \mathbf{0} \end{aligned}$$



最小二乘法

Pseudoinverse
and Least
Squares

广义逆

广义逆的定义与性质

广义逆与线性方程组
的解

Moore-
Penrose 伪
逆

伪逆的定义与性质

伪逆与线性方程组

最小二乘法

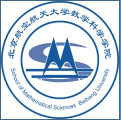
最小二乘解

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

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

那么

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



最小二乘法

Pseudoinverse and Least Squares

广义逆

广义逆的定义与性质

广义逆与线性方程组
的解

Moore- Penrose 伪 逆

伪逆的定义与性质

伪逆与线性方程组

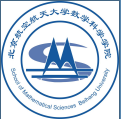
最小二乘法

最小二乘解

因此，我们有

$$\|\hat{\mathbf{x}}_0\|^2 = \|\mathbf{x}^+ + (\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+)\|^2 = \|\mathbf{x}^+\|^2 + \|(\hat{\mathbf{x}}_0 - \mathbf{x}^+)\|^2 \geq \|\mathbf{x}^+\|^2$$

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



最小二乘法

Pseudoinverse
and Least
Squares

广义逆

广义逆的定义与性质

广义逆与线性方程组
的解

Moore-
Penrose 伪
逆

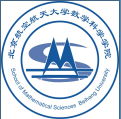
伪逆的定义与性质

伪逆与线性方程组

最小二乘法

最小二乘解

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



最小二乘法

Pseudoinverse
and Least
Squares

广义逆

广义逆的定义与性质
广义逆与线性方程组
的解

Moore-
Penrose 伪
逆

伪逆的定义与性质
伪逆与线性方程组

最小二乘法

最小二乘解

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

根据矩阵乘积的秩关系

$$A^T A \text{ 可逆} \implies n = r(A^T A) = r(A) = r(\Sigma),$$

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

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

另一方面,

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