最小二乘法与协方差矩阵

Shuyong Chen

2021 年 11 月 30 日

—题记：知识要乱搭，美味要乱炖。

1　简介

把涉及最小二乘法的知识乱搭在一起，龙卷风来随风飘。

2　柯西-施瓦兹不等式的向量形式

2.1　定理证明

柯西-施瓦兹不等式的向量形式：　若有向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$，则

$$\left|\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\right| \leq \|\boldsymbol{x}\|\,\|\boldsymbol{y}\|$$

$$-1 \leq \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{x}\|\,\|\boldsymbol{y}\|} \leq 1$$

当且仅当其中一个向量为 $\mathbf{0}$，或一个向量为另外一个向量的倍数时，等号成立。

证明：　有向量 $\boldsymbol{\epsilon} = \boldsymbol{x} - \lambda\boldsymbol{y}$，我们计算它的范数为：

$$
\begin{aligned}
\|\boldsymbol{\epsilon}\|^2 &\geq 0 \\
(\boldsymbol{x}-\lambda\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\lambda\boldsymbol{y}) &\geq 0 \\
\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}-\lambda\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\right)(\boldsymbol{x}-\lambda\boldsymbol{y}) &\geq 0 \\
\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\lambda\boldsymbol{y}-\lambda\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\lambda^2\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} &\geq 0 \\
\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-\lambda\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}+\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)+\lambda^2\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} &\geq 0 \\
\text{Let } a=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y},\ b=\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}+\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right),\ c=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}& \\
a\lambda^2-b\lambda+c &\geq 0
\end{aligned}
$$

对下式求极值

$$a\lambda^2 - b\lambda + c = 0$$

这是开口向上的抛物线函数，有极值

$$\begin{aligned} 2a\lambda - b &= 0 \\ \lambda &= \frac{b}{2a} \end{aligned}$$

将 λ 代入上式得

$$\begin{aligned} a\left(\frac{b}{2a}\right)^2 - b\left(\frac{b}{2a}\right) + c \geq 0 \\ \frac{b^2}{4a} - \frac{b^2}{2a} + c \geq 0 \\ c \geq \frac{b^2}{4a} \end{aligned}$$

根据向量的内积公式，我们有 $\boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}^\mathrm{T}\boldsymbol{x}$，并且向量 $\boldsymbol{x}$ 的欧几里德范数为：$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{\boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{x}}$。将上述数值代回公式得

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{x} &\geq \frac{\left(\boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{y} + \boldsymbol{y}^\mathrm{T}\boldsymbol{x}\right)^2}{4\boldsymbol{y}^\mathrm{T}\boldsymbol{y}} \\ &\because\ \boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}^\mathrm{T}\boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{x} &\geq \frac{4\left(\boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{y}\right)^2}{4\boldsymbol{y}^\mathrm{T}\boldsymbol{y}} \\ \left(\boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{x}\right)\left(\boldsymbol{y}^\mathrm{T}\boldsymbol{y}\right) &\geq \left(\boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{y}\right)^2 \\ \|\boldsymbol{x}\|^2\|\boldsymbol{y}\|^2 &\geq \left(\boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{y}\right)^2 \\ \|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\| &\geq \left\|\boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{y}\right\| \end{aligned}$$

同时有

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{b}{2a} \\ &= \left(\boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{y}\right)\left(\boldsymbol{y}^\mathrm{T}\boldsymbol{y}\right)^{-1} \\ &= \left(\boldsymbol{y}^\mathrm{T}\boldsymbol{x}\right)^\mathrm{T}\left(\boldsymbol{y}^\mathrm{T}\boldsymbol{y}\right)^{-1} \end{aligned}$$

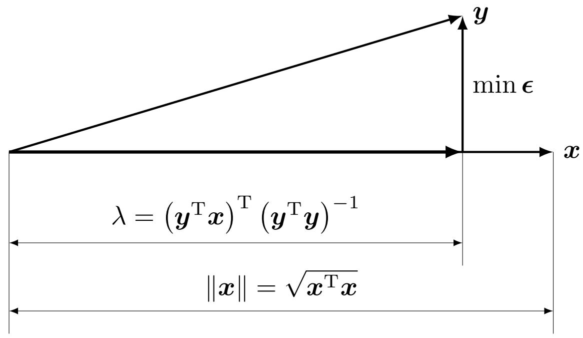
向量 $\boldsymbol{x}$ 到 $\boldsymbol{y}$ 的向量投影 (vector projection) 为 $\boldsymbol{p}$

$$\boldsymbol{p} = \frac{\boldsymbol{x}^\mathrm{T}\boldsymbol{y}}{\boldsymbol{y}^\mathrm{T}\boldsymbol{y}}\boldsymbol{y}$$

可以看到，λ 是向量的投影系数。

2.2 几何解释

从几何上，有向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$，λ 代表比例因子，$\boldsymbol{\epsilon}=\boldsymbol{x}-\lambda\boldsymbol{y}$ 则代表从 $\lambda\boldsymbol{y}$ 指向 $\boldsymbol{x}$ 的向量。柯西-施瓦兹不等式的含义是调整 λ 的大小，找到向量 $\boldsymbol{x}-\lambda\boldsymbol{y}$ 的最小范数，就是向量 $\lambda\boldsymbol{y}$ 到向量 $\boldsymbol{x}$ 的最短距离。当向量 $\boldsymbol{x}$ 和向量 $\boldsymbol{y}$ 共线时，该距离为 0。而 $\lambda=\left(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\right)^{-1}$，则意味着当 $\lambda\boldsymbol{y}$ 为向量 $\boldsymbol{x}$ 到 $\boldsymbol{y}$ 的向量投影时 ($\boldsymbol{\epsilon}\perp\boldsymbol{y}$)，$\boldsymbol{\epsilon}$ 有最小范数。



根据向量的内积公式，有 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$，我们将公式 $\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)\left(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\right)\geq\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\right)^{2}$ 做变形，以待以后的比较：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} &\geq \frac{\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\right)^{2}}{\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}\\
\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} &\geq \frac{\left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\right)\left(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)}{\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}\\
\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} &\geq \left(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)
\end{aligned}$$

3 柯西-施瓦兹不等式的矩阵形式

3.1 定理证明

矩阵施瓦兹不等式 (Matrix Schwarz inequality)： 若 $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{Q}$ 分别是 $m\times n$ 和 $m\times l$ 矩阵，$\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}$ 非奇异，则

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\geq\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right)$$

此外，对于某些 $n\times l$ 矩阵 $\boldsymbol{S}$，当且仅当 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{S}$ 时，上式的等号成立。该定理来自于参考文献 [3]。

证明： 有矩阵 $\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{S}$，则 $(\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{S})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{S})$ 非负定，所以有

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{S})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{S}) &\geq \mathbf{0} \\
\left(\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\right)(\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{S}) &\geq \mathbf{0} \\
\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}+\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\boldsymbol{S} &\geq \mathbf{0} \\
\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q} \geq \boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right)+\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}-\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\right)\boldsymbol{S} \\
\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q} \geq \boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\left(\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right)-\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\right)\boldsymbol{S}\right)+\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}
\end{aligned}
$$

令

$$
\boldsymbol{S}=\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right)
$$

则

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q} \geq \boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}\left(\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right)-\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\right)\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right)\right)+\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right) \\
&\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q} \geq \left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right)^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\right)
\end{aligned}
$$

3.2 几何解释

该不等式粗略看起来很不直观。我们可以从 $\boldsymbol{Q}$ 的列向量的角度考虑，也就是 $\boldsymbol{Q}$ 的列向量之间的内积，要大于某一个向它投影的矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的列向量和它的列向量的内积。

其实 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}$ 是一个半正定的实对称矩阵，有十分广泛的应用，如协方差矩阵，权重矩阵 (增益矩阵) 等等。在后面该定理的在最小二乘的应用中，就有更直观的含义。

4 普通最小二乘法

4.1 定义

一个超定方程组含有的方程多于变量数。这种方程组通常是不相容的。因此，给定一个 $m \times n$ 的方程组 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其中 $m>n$，一般我们不能期望找到一个向量 $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^n$，使得 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$。事实上，可以寻找一个向量 $\boldsymbol{x}$，使得 $A\boldsymbol{x}$“最接近” $\boldsymbol{b}$。正如所期望的，正交性在求 $\boldsymbol{x}$ 的过程中扮演了重要的角色。

给定一个超定方程组 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其中 A 为一个 $m \times n\,(m>n)$ 矩阵，并且 $\boldsymbol{b} \in \boldsymbol{R}^m$，则对每一个 $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^n$，可以构造一个残差 (residual)

$$
r(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}
$$

则 $\boldsymbol{b}$ 和 $A\boldsymbol{x}$ 之间的距离为

$$
\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}\|=\|r(\boldsymbol{x})\|
$$

我们希望寻找一个向量 $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{R}^n$，使得 $\|r(\boldsymbol{x})\|$ 最小。最小化 $\|r(\boldsymbol{x})\|$ 等价于最小化 $\|r(\boldsymbol{x})\|^2$。达到最小值的向量 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 称为方程组 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘 (least squares) 解，这是一个近似解。

若 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 为方程组 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解，且 $\boldsymbol{p}=A\hat{\boldsymbol{x}}$，则 $\boldsymbol{p}$ 就是 A 的列空间中和 $\boldsymbol{b}$ 最接近的向量 (投影)。

4.2 证明

简单而快速证明如下：

- 最小化残差平方的范数，
$$\left\|r\left(\boldsymbol{x}\right)\right\|^{2}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$
把这看成是开口向上的抛物线函数，可以有极小值。

- 相对于 $\boldsymbol{x}$ 将梯度设置为 0：
$$\nabla_{\boldsymbol{x}}\left\|r\left(\boldsymbol{x}\right)\right\|^{2}=2A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x}-2A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}=0$$

- 得出正规方程：
$$A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x}=A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$

- 上述方程表示的 $n\times n$ 线性方程组称为正规方程组 (normal equations)。它有唯一解
$$\hat{\boldsymbol{x}}=\left(A^{\mathrm{T}}A\right)^{-1}A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$
且 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 为方程组 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 唯一的最小二乘解。

- 在上式中，
$$A^{\dagger}=\left(A^{\mathrm{T}}A\right)^{-1}A^{\mathrm{T}}$$
称为 A 的伪逆矩阵，并且 $A^{\dagger}$ 是矩阵 A 的 (满秩，瘦型) 左逆：
$$A^{\dagger}A=\left(A^{\mathrm{T}}A\right)^{-1}A^{\mathrm{T}}A=I$$

- 投影向量 $\boldsymbol{p}$
$$\boldsymbol{p}=A\hat{\boldsymbol{x}}=A\left(A^{\mathrm{T}}A\right)^{-1}A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$
为 A 的列空间中 $C(A)$ 中的元素，并在最小二乘意义下最接近 $\boldsymbol{b}$，也就是 $\boldsymbol{p}$ 是 $\boldsymbol{b}$ 在 A 的列空间中的投影，$\boldsymbol{\epsilon}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{p}$ 为残差 (误差) 向量。矩阵 $P=A\left(A^{\mathrm{T}}A\right)^{-1}A^{\mathrm{T}}$ 称为投影矩阵 (projection matrix)。

- 投影矩阵 P 为对称矩阵，并且有性质：$P^{2}=P$ 。

4.3 几何解释

我们可以基于 QR 分解去直观地理解最小二乘法：

- 矩阵 $A\in\boldsymbol{R}^{m\times n}$，$m>n$，是满秩，瘦型矩阵。

- 将其进行 QR 分解，$A=QR$，其中 $Q^{\mathrm{T}}Q=I$，并且 $R\in\boldsymbol{R}^{n\times n}$ 为上三角矩阵且可逆。

- 伪逆矩阵为

$$\left(A^{\mathrm{T}}A\right)^{-1}A^{\mathrm{T}}=\left(R^{\mathrm{T}}Q^{\mathrm{T}}QR\right)^{-1}R^{\mathrm{T}}Q^{\mathrm{T}}=R^{-1}Q^{\mathrm{T}}$$

  所以

$$\hat{\boldsymbol{x}}=R^{-1}Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$

- 投影到 A 的列空间 $C(A)$ 中的矩阵为

$$A\left(A^{\mathrm{T}}A\right)^{-1}A^{\mathrm{T}}=AR^{-1}Q^{\mathrm{T}}=QQ^{\mathrm{T}}$$

- 矩阵 A 的完全 QR 因子分解为：

$$A=\left[\begin{array}{cc}Q_1 & Q_2\end{array}\right]\left[\begin{array}{c}R_1\\0\end{array}\right]$$

  其中，$\left[\begin{array}{cc}Q_1 & Q_2\end{array}\right]\in\boldsymbol{R}^{m\times m}$ 且为正交矩阵，$R_1\in\boldsymbol{R}^{n\times n}$ 为上三角矩阵且可逆。

- 与正交矩阵相乘不改变矩阵范数，所以

$$\begin{aligned}\|A\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|^2&=\left\|\left[\begin{array}{cc}Q_1 & Q_2\end{array}\right]\left[\begin{array}{c}R_1\\0\end{array}\right]\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\right\|^2\\&=\left\|\left[\begin{array}{cc}Q_1 & Q_2\end{array}\right]^{\mathrm{T}}\left[\begin{array}{cc}Q_1 & Q_2\end{array}\right]\left[\begin{array}{c}R_1\\0\end{array}\right]\boldsymbol{x}-\left[\begin{array}{cc}Q_1 & Q_2\end{array}\right]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}\right\|^2\\&=\left\|\left[\begin{array}{c}R_1\boldsymbol{x}-Q_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}\\-Q_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}\end{array}\right]\right\|^2\\&=\left\|R_1\boldsymbol{x}-Q_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}\right\|^2+\left\|Q_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}\right\|^2\end{aligned}$$

- 这显然可以通过选择最小化 $\hat{\boldsymbol{x}}$，即上式左边第一项为 0：

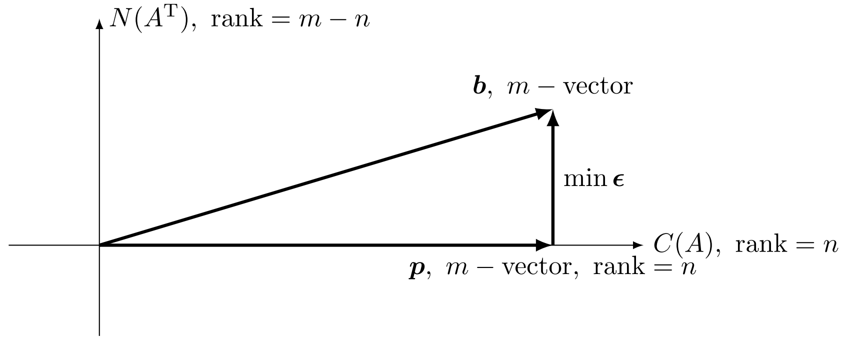
$$\hat{\boldsymbol{x}}=R_1^{-1}Q_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$

- 则 $\boldsymbol{x}$ 的最优化的残差为

$$\boldsymbol{\epsilon}=A\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{b}=-Q_2Q_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$

- 矩阵 $Q_1Q_1^{\mathrm{T}}$ 给出了到 A 的列空间 $C(A)$ 中的的投影。
- 矩阵 $Q_2Q_2^{\mathrm{T}}$ 给出了到列空间的正交空间 $C(A)^{\perp}$，即 A^{T} 的零空间 $N(A^{\mathrm{T}})$ 的投影。
- 列空间 $C(A)$ 的满秩为 n，则零空间 $N(A^{\mathrm{T}})$ 的秩为 $m-n$，两者的秩之和为 m。

上述关系的示意图如下：



$$\begin{cases} A = \begin{bmatrix} Q_1 & Q_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix} & \\ \boldsymbol{p} = A\hat{\boldsymbol{x}} = Q_1 Q_1^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b} & \mathrm{rank}\left(Q_1 Q_1^{\mathrm{T}}\right) = n \\ \boldsymbol{\epsilon} = A\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b} = -Q_2 Q_2^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b} & \mathrm{rank}\left(Q_2 Q_2^{\mathrm{T}}\right) = m - n \\ Q_1 Q_1^{\mathrm{T}} \text{ gives projection onto } C(A) & \\ Q_2 Q_2^{\mathrm{T}} \text{ gives projection onto } N(A^{\mathrm{T}}) & \end{cases}$$

5 基于权重的最小二乘法

令 $\left\{\underline{\boldsymbol{\xi}}_k\right\}$ 为一系列的随机向量，称为**随机序列** (*random sequence*)。符号表示 $E\left(\underline{\boldsymbol{\xi}}_k\right) = \underline{\boldsymbol{\mu}}_k, \mathrm{Cov}\left(\underline{\boldsymbol{\xi}}_k, \underline{\boldsymbol{\xi}}_j\right) = R_{kj}$，则 $\mathrm{Var}\left(\underline{\boldsymbol{\xi}}_k\right) = R_{kk} := R_k$。如果随机向量有协方差矩阵 $\mathrm{Cov}\left(\underline{\boldsymbol{\xi}}_k, \underline{\boldsymbol{\xi}}_j\right) = R_{kj} = R_k \delta_{kj}$，其中当 $k = j$ 时，$\delta_{kj} = 1$，当 $k \neq j$ 时，$\delta_{kj} = 0$，则该随机向量 $\left\{\underline{\boldsymbol{\xi}}_k\right\}$ 称为**白噪声序列** (*white noise sequence*)。如果每个 $\underline{\boldsymbol{\xi}}_k$ 都是白色且正态的，则 $\left\{\underline{\boldsymbol{\xi}}_k\right\}$ 称为**高斯或正态白噪声序列** (*sequence of Gaussian or normal white noise*)。

考虑观测数据受噪声污染的线性系统的观测方程，即：

$$\mathbf{v}_k = C_k \mathbf{x}_k + D_k \mathbf{u}_k + \underline{\boldsymbol{\xi}}_k,$$

其中，$\{\mathbf{x}_k\}$ 通常是状态序列，$\{\mathbf{u}_k\}$ 是控制序列，$\{\mathbf{v}_k\}$ 是量测数据序列。我们假设，对于每个 k，$q \times n$ 常数矩阵 C_k、即量测矩阵，$q \times p$ 常数矩阵 D_k、即控制矩阵，以及确定性控制的 p 维控制向量 $\mathbf{u}_k$ 是给定的。通常，系统噪声 $\left\{\underline{\boldsymbol{\xi}}_k\right\}$ 未知，但将其假定为一个零均值高斯白噪声序列，即：对于 $k, j = 1, 2, \cdots$，$E\left(\underline{\boldsymbol{\xi}}_k\right) = 0$ 并且 $E\left(\underline{\boldsymbol{\xi}}_k \underline{\boldsymbol{\xi}}_j^{\top}\right) = R_{kj}\delta_{kj}$，其中系统噪声协方差矩阵 R_k 是对称且正定的矩阵。

我们的目标是从量测数据 $\{\mathbf{v}_k\}$ 的信息中获得状态向量 $\mathbf{x}_k$ 的最优估计 $\hat{\mathbf{y}}_k$。如果没有噪音，那么很明显 $\mathbf{z}_k - C_k \hat{\mathbf{y}}_k = 0$，其中 $\mathbf{z}_k := \mathbf{v}_k - D_k \mathbf{u}_k$，每当线性系统有解时；否则，一些测量误差 $\mathbf{z}_k - C_k \mathbf{y}_k$ 必须在所有 $\mathbf{y}_k$ 中最小化。一般来说，当数据被噪声污染时，我们将在所有 n 维向量 $\mathbf{y}_k$ 上，最小化测量误差 (残差) 的平方范数的数量：

$$F\left(\mathbf{y}_k, W_k\right) = E\left(\mathbf{z}_k - C_k \mathbf{y}_k\right)^{\top} W_k \left(\mathbf{z}_k - C_k \mathbf{y}_k\right)$$

其中 W_k 是正定对称 $q \times q$ 矩阵，称为**权重矩阵** (*weight matrix*)，也称**增益矩阵** (*gain matrix*) G_k。也

就是说，我们希望找到一个 $\hat{\mathbf{y}}_k = \hat{\mathbf{y}}_k(W_k)$，使得

$$F(\hat{\mathbf{y}}_k, W_k) = \min_{\mathbf{y}_k} F(\mathbf{y}_k, W_k).$$

另外，我们希望确定**最优权重** (*optimal weight*) $\hat{W}_k$。为了找到 $\hat{\mathbf{y}}_k = \hat{\mathbf{y}}_k(W_k)$，假设 $\left(C_k^\top W_k C_k\right)$ 是非奇异的，我们重写方程

$$\begin{aligned}
F(\mathbf{y}_k, W_k) &= E(\mathbf{z}_k - C_k\mathbf{y}_k)^\top W_k(\mathbf{z}_k - C_k\mathbf{y}_k) \\
&= E\left[\left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k - C_k^\top W_k\mathbf{z}_k\right]^\top \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1}\left[\left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k - C_k^\top W_k\mathbf{z}_k\right] \\
&\quad + E\left(\mathbf{z}_k^\top\left[I - W_k C_k\left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top\right] W_k\mathbf{z}_k\right),
\end{aligned}$$

其中右边的第一项为非负定项。为了最小化 $F(\mathbf{y}_k, W_k)$，右边的第一项必须消失，则

$$\hat{\mathbf{y}}_k = \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top W_k\mathbf{z}_k.$$

注意，如果 $\left(C_k^\top W_k C_k\right)$ 是奇异的，则 $\hat{\mathbf{y}}_k$ 不是唯一的。为了找到最优的权重 $\hat{W}_k$，让我们考虑

$$F(\hat{\mathbf{y}}_k, W_k) = E(\mathbf{z}_k - C_k\hat{\mathbf{y}}_k)^\top W_k(\mathbf{z}_k - C_k\hat{\mathbf{y}}_k).$$

很明显，在正定权重 W_k 下，该数量不会达到最小值，因为 $W_k = 0$ 会导致该最小值。因此，我们需要另一个测量量来确定最优 $\hat{W}_k$。注意到原始问题是用 $\hat{\mathbf{y}}_k(W_k)$ 估计状态向量 $\mathbf{x}_k$，考虑误差 $(\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{y}}_k(W_k))$ 的测量量是自然的。但是，由于对 $\mathbf{x}_k$ 的所知不多，并且只能测量带噪声的数据，因此应通过误差的方差来确定该测量量。也就是说，在所有正定对称矩阵 W_k 之上，我们将最小化 $\mathrm{Var}(\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{y}}_k(W_k))$。我们简记 $\hat{\mathbf{y}}_k = \hat{\mathbf{y}}_k(W_k)$ 并有

$$\begin{aligned}
\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{y}}_k &= \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1}\left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{x}_k - \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top W_k\mathbf{z}_k \\
&= \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top W_k(C_k\mathbf{x}_k - \mathbf{z}_k) \\
&= -\left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top W_k\underline{\boldsymbol{\xi}}_k.
\end{aligned}$$

因此，通过期望运算的线性特性，我们有

$$\begin{aligned}
\mathrm{Var}(\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{y}}_k) &= \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top W_k E\left(\underline{\boldsymbol{\xi}}_k\underline{\boldsymbol{\xi}}_k^\top\right) W_k C_k\left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} \\
&= \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top W_k R_k W_k C_k\left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1}.
\end{aligned}$$

这就是要最小化的数量，即误差的方差与系统噪声的方差正相关。为了把它写成一个完全平方方程，我们需要正定对称矩阵 R_k 的**正平方根** (*positive square root*)，定义如下：设系统噪声的协方差矩阵 R_k 的特征值为 $\lambda_1, \cdots, \lambda_n$，它们都是正值，并且写为 $R_k = U^\top \mathrm{diag}[\lambda_1, \cdots, \lambda_n] U$，其中 U 是酉矩阵 (由 $\lambda_i, i = 1, \cdots, n$ 对应的正规化特征向量组成)。然后我们定义 $R_k^{1/2} = U^\top \mathrm{diag}\left[\sqrt{\lambda}_1, \cdots, \sqrt{\lambda}_n\right] U$，其给出 $\left(R_k^{1/2}\right)\left(R_k^{1/2}\right)^\top = R_k$。因此

$$\mathrm{Var}(\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{y}}_k) = Q^\top Q,$$

其中 $Q=\left(R_k^{1/2}\right)^{\top}W_kC_k\left(C_k^{\top}W_kC_k\right)^{-1}$。根据**矩阵施瓦兹不等式**（*matrix Schwarz inequality*），参见第 3 章，在假设 P 是 $q\times n$ 矩阵且 $P^{\top}P$ 非奇异的情况下，我们有

$$Q^{\top}Q\geq\left(P^{\top}Q\right)^{\top}\left(P^{\top}P\right)^{-1}\left(P^{\top}Q\right).$$

因此，如果 $\left(C_k^{\top}R_k^{-1}C_k\right)$ 是非奇异的，我们可以选择 $P=\left(R_k^{1/2}\right)^{-1}C_k$，以便

$$P^{\top}P=C_k^{\top}\left(\left(R_k^{1/2}\right)^{\top}\right)^{-1}\left(R_k^{1/2}\right)^{-1}C_k=C_k^{\top}R_k^{-1}C_k$$

是非奇异的，并且不等式的等号成立，则

$$\begin{aligned}\left(P^{\top}Q\right)^{\top}\left(P^{\top}P\right)^{-1}\left(P^{\top}Q\right)&=\left[C_k^{\top}\left(\left(R_k^{1/2}\right)^{-1}\right)^{\top}\left(R_k^{1/2}\right)^{\top}W_kC_k\left(C_k^{\top}W_kC_k\right)^{-1}\right]^{\top}\left(C_k^{\top}R_k^{-1}C_k\right)^{-1}\\&\quad\cdot\left[C_k^{\top}\left(\left(R_k^{1/2}\right)^{-1}\right)^{\top}\left(R_k^{1/2}\right)^{\top}W_kC_k\left(C_k^{\top}W_kC_k\right)^{-1}\right]\\&=\left(C_k^{\top}R_k^{-1}C_k\right)^{-1}\\&=\operatorname{Var}\left(\mathbf{x}_k-\hat{\mathbf{y}}_k\left(R_k^{-1}\right)\right).\end{aligned}$$

因此，对于所有正定对称权重矩阵 W_k，有 $\operatorname{Var}\left(\mathbf{x}_k-\hat{\mathbf{y}}_k\left(W_k\right)\right)\geq\operatorname{Var}\left(\mathbf{x}_k-\hat{\mathbf{y}}_k\left(R_k^{-1}\right)\right)$。因此，最优权重矩阵为 $\hat{W}_k=R_k^{-1}$，即协方差矩阵 R_k 的逆矩阵，使用该最优权重的状态向量 $\mathbf{x}_k$ 的最优估计为

$$\hat{\mathbf{x}}_k:=\hat{\mathbf{y}}_k\left(R_k^{-1}\right)=\left(C_k^{\top}R_k^{-1}C_k\right)^{-1}C_k^{\top}R_k^{-1}\left(\mathbf{v}_k-D_k\mathbf{u}_k\right)$$

我们称 $\hat{\mathbf{x}}_k$ 为 $\mathbf{x}_k$ 的**最小二乘最优估计**（*least-squares optimal estimate*）。注意，$\hat{\mathbf{x}}_k$ 是 $\mathbf{x}_k$ 的**线性估计**（*linear estimate*）。作为数据 $\mathbf{v}_k-D_k\mathbf{u}_k$ 的线性变换的图像，它给出了在 $E\hat{\mathbf{x}}_k=E\mathbf{x}_k$ 意义上的 $\mathbf{x}_k$ 的**无偏估计**（*unbiased estimate*），即

$$\begin{aligned}E\hat{\mathbf{x}}_k&=\left(C_k^{\top}R_k^{-1}C_k\right)^{-1}C_k^{\top}R_k^{-1}E\left(\mathbf{v}_k-D_k\mathbf{u}_k\right)\\&=\left(C_k^{\top}R_k^{-1}C_k\right)^{-1}C_k^{\top}R_k^{-1}E\left(C_k\mathbf{x}_k-\boldsymbol{\eta}_k\right)\\&=E\mathbf{x}_k\end{aligned}$$

其中 $\boldsymbol{\eta}_k$ 为测量噪声向量，并且它还给出了 $\mathbf{x}_k$ 的**最小方差估计**（*minimum variance estimate*），因为

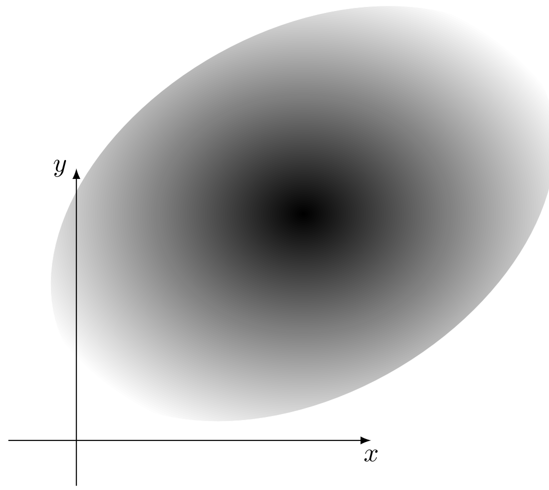
$$\operatorname{Var}\left(\mathbf{x}_k-\hat{\mathbf{x}}_k\right)\leq\operatorname{Var}\left(\mathbf{x}_k-\hat{\mathbf{y}}_k\left(W_k\right)\right)$$

对于所有正定对称权重矩阵 W_k 成立。

6 几何解释

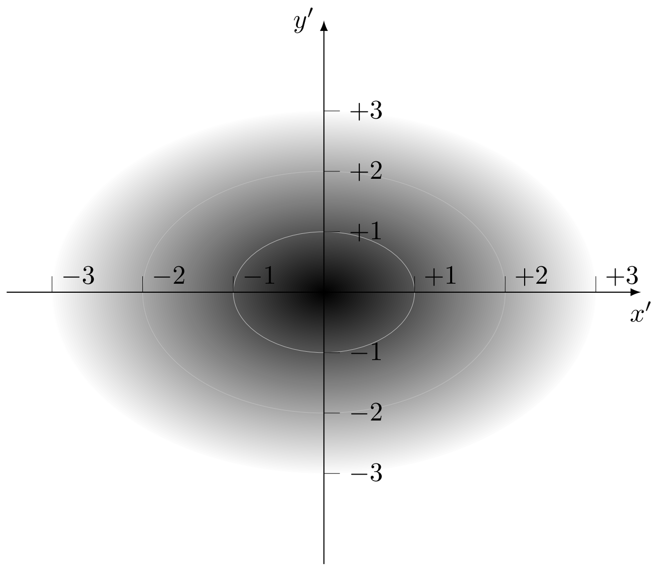
基于权重的最小二乘法的算法相当复杂，不容易理解。但是如果从协方差矩阵的角度去理解，就相当明了了。

我们测量得到这样的数据集合



我们知道一些这个系统的状态变量和变换方程。但是因为各种原因，系统存在误差，因此这是一个超定方程，没有解析解。但是我们可以用最小二乘法计算得出近似解。

我们假定数据按照高斯分布，并且系统噪声为零均值的白高斯噪声。我们知道，是变量自身的方差在坐标轴上拉伸了图像，是变量之间的协方差旋转了图像，但是该旋转并没有改变各数据点到数据中心的距离，因此我们可以在算法中直接忽略变量之间的协方差，并在数据中心建立新的坐标系。

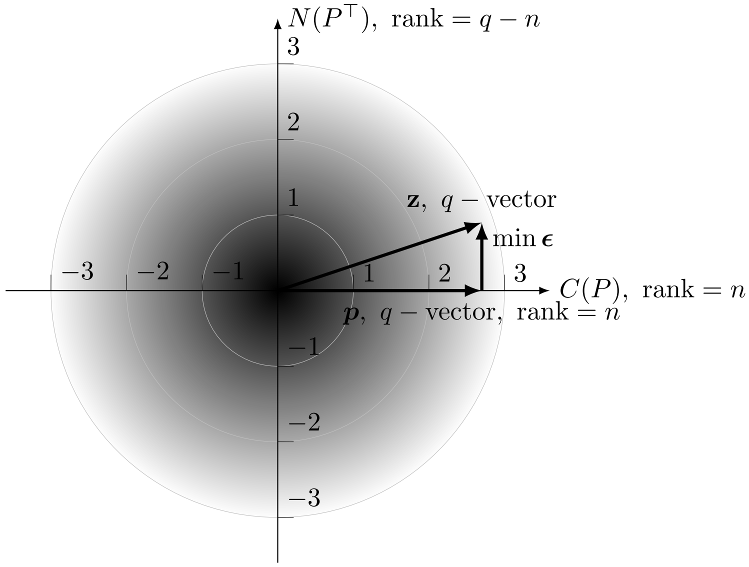


注意，因为各轴的方差不一样，因此各轴的数据变形程度也不一样，体现在数据刻度不一样。这时直接在这样的数据集合上进行估计并不是最优估计。因此我们需要引入权重矩阵 W 以校正这种变形。经过推导，数据的误差的方差和系统噪声的方差正相关。根据矩阵施瓦兹不等式，我们有

$$Q^\top Q \geq \left(P^\top Q\right)^\top \left(P^\top P\right)^{-1} \left(P^\top Q\right)$$

其中，$Q^{\top}Q$ 为数据的误差协方差矩阵，因此 Q 为误差的标准差矩阵，矩阵 P 为经过权重矩阵 W 校正过后的量测矩阵，以抵消系统噪声的协方差矩阵 R 的影响。

其它的推导就是复杂且累人的矩阵代数运算，根据实对称矩阵的一些特性以及一些配元的技巧，最终得到的最优权重矩阵为 $\hat{W}=R^{-1}$，因此对冲了系统噪声的影响，这很符合直觉。这时上述不等式的等号成立，数据的误差最小。最终，我们是在校正后的数据集合上进行最小二乘估计，并且此时的估计为无偏估计。



该算法如果应用在动态递归的估计系统中，就成了卡尔曼滤波器的核心部分。

7 参考文献

1. 《线性代数》Steven J.Leon —第 5 章正交性

2. Lecture 5 —Least-squares

3. 《卡尔曼滤波及其实时应用》—第 1.3 节最小二乘初步

8 草稿纸

整理并验证方程相等

$$
\begin{aligned}
&\left(\mathbf{z}_k - C_k\mathbf{y}_k\right)^\top W_k \left(\mathbf{z}_k - C_k\mathbf{y}_k\right) \\
&= \left[\left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k - C_k^\top W_k \mathbf{z}_k\right]^\top \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} \left[\left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k - C_k^\top W_k \mathbf{z}_k\right] \\
&\quad + \left(\mathbf{z}_k^\top \left[I - W_k C_k \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top\right] W_k \mathbf{z}_k\right)
\end{aligned}
$$

展开等式左边

$$
\begin{aligned}
\left(\mathbf{z}_k - C_k\mathbf{y}_k\right)^\top W_k \left(\mathbf{z}_k - C_k\mathbf{y}_k\right) &= \mathbf{z}_k^\top W_k \mathbf{z}_k \\
&- \left(C_k\mathbf{y}_k\right)^\top W_k \mathbf{z}_k \\
&- \mathbf{z}_k^\top W_k \left(C_k\mathbf{y}_k\right) \\
&+ \left(C_k\mathbf{y}_k\right)^\top W_k \left(C_k\mathbf{y}_k\right)
\end{aligned}
$$

展开等式右边

$$
\begin{aligned}
&\left[\left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k - C_k^\top W_k \mathbf{z}_k\right]^\top \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} \left[\left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k - C_k^\top W_k \mathbf{z}_k\right] \\
&= \left(\left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k\right)^\top \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} \left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k \\
&- \left(\left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k\right)^\top \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top W_k \mathbf{z}_k \\
&- \left(C_k^\top W_k \mathbf{z}_k\right)^\top \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} \left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k \\
&+ \left(C_k^\top W_k \mathbf{z}_k\right)^\top \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top W_k \mathbf{z}_k
\end{aligned}
$$

并有余项

$$
\mathbf{z}_k^\top \left[I - W_k C_k \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top\right] W_k \mathbf{z}_k
$$

利用对称矩阵 $W_k = W_k^\top$ 展开各项并整理

1. 右边第 1 项

$$
\begin{aligned}
&\left(\left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k\right)^\top \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} \left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k \\
&= \left(\left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k\right)^\top \mathbf{y}_k \\
&= \left(C_k\mathbf{y}_k\right)^\top W_k \left(C_k\mathbf{y}_k\right)
\end{aligned}
$$

   与左边第 4 项相等。

2. 右边第 2 项

$$
\begin{aligned}
&- \left(\left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k\right)^\top \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top W_k \mathbf{z}_k \\
&= - \left(C_k\mathbf{y}_k\right)^\top W_k C_k \left(W_k C_k\right)^{-1} \left(C_k^\top\right)^{-1} C_k^\top W_k \mathbf{z}_k \\
&= - \left(C_k\mathbf{y}_k\right)^\top W_k \mathbf{z}_k
\end{aligned}
$$

   与左边第 2 项相等。

3. 右边第 3 项

$$
\begin{aligned}
&- \left(C_k^\top W_k \mathbf{z}_k\right)^\top \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} \left(C_k^\top W_k C_k\right)\mathbf{y}_k \\
&= - \left(C_k^\top W_k \mathbf{z}_k\right)^\top \mathbf{y}_k \\
&= -\mathbf{z}_k^\top W_k \left(C_k\mathbf{y}_k\right)
\end{aligned}
$$

与左边第 3 项相等。

4. 剩下各项凑成余项

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{z}_k^\top W_k \mathbf{z}_k - \left(C_k^\top W_k \mathbf{z}_k\right)^\top \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top W_k \mathbf{z}_k \\
&= \mathbf{z}_k^\top W_k \mathbf{z}_k - \mathbf{z}_k^\top W_k C_k \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top W_k \mathbf{z}_k \\
&= \mathbf{z}_k^\top \left(I - W_k C_k \left(C_k^\top W_k C_k\right)^{-1} C_k^\top\right) W_k \mathbf{z}_k
\end{aligned}
$$

所以两式相等。