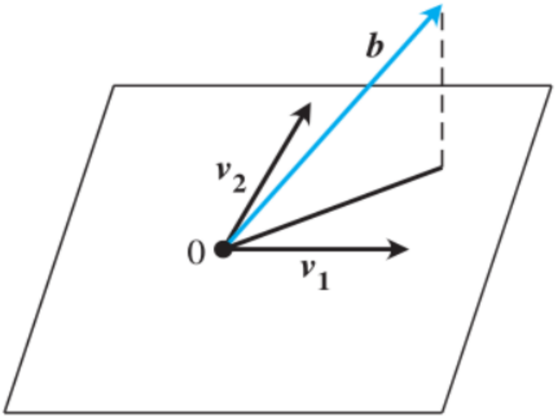
第四章重点（非线性方程组的求解）

最小二乘法

- **最小二乘解的来源推导**



    - $v_1x_1+v_2x_2$构成了一个在R^3内的平面
    - 但b处于平面之外
    - 没有解满足$v_1x_1+v_2x_2=b$
    - 一个特别的向量$\bar{x}$在$v_1x_1+v_2x_2$平面中最靠近b
    - 这个向量满足$b-v_1\bar{x}_1-v_2\bar{x}_2$垂直于平面$v_1x_1+v_2x_2$

  根据上述推导，我们可以设A是一个$m\times n$的矩阵，b是一个m维的向量，那么$Ax=b$的最小二乘解$\bar{x}$满足

$$(b-A\bar{x})\perp\{Ax|x\in R^n\}$$

- **最小二乘解的求解方法/计算公式**
    - 根据最小二乘解满足$(b-A\bar{x})\perp\{Ax|x\in R^n\}$
    - 对于任意$x\in R^n$，$(Ax)^\top(b-A\bar{x})=0$
    - 即对于任意$x\in R^n$，$x^\top A^\top(b-A\bar{x})=0$
    - 那么向量$A^\top(b-A\bar{x})$垂直于任意向量$x\in R^n$
    - 因此有$A^\top(b-A\bar{x})=0$
    - 化简得到解$Ax=b$的最小二乘解方程$A^\top A\bar{x}=A^\top b$，$A^\top A\bar{x}=A^\top b$也称为$Ax=b$的**标准方程（normal equations）**

  最小二乘定理：令A为一个$m\times n$的矩阵，b是一个m维的向量。令$\bar{x}$为$A^\top Ax=A^\top b$的解，那么当$x=\bar{x}$时，二范数$||Ax-b||_2$取得其最小值
- **最小二乘解的误差衡量方式**
  残差计算：

$$r=d-A\bar{x}$$

  三种方式：
    - **2-范数（2-norm）**：

$$||r||_2=\sqrt{r_1^2+\cdots+r_m^2}$$

    - **平方差（squared error/SE）**：

$$r_1^2+\cdots+r_m^2$$

    - **均方根误差（root mean squared error/RMSE）**：

$$\sqrt{\frac{r_1^2+\cdots+r_m^2}{m}}=\frac{||r||_2}{\sqrt{m}}$$

QR分解应用

- **矩阵的QR分解，$\mathbf{Q}$和$\mathbf{R}$**
    - 引入：当解最小二乘方程$A^\top Ax=A^\top b$时，$A^\top A$的条件数太大了（条件数定义为$||A^\top A||\cdot||(A^\top A)^{-1}||$）
    - **施密特正交化（Gram-Schmidt orthogonalization）**：
      记y_i为一个辅助向量，其垂直于$q_1,\ldots,q_{i-1}$
        - 令$y_1=A_1$，即A的第一列

        - 标准化y_1得到$q_1 = \frac{y_1}{||y_1||_2}$，即使得$q_1^\top q_1 = 1$
        - 通过正交化得到$y_2 = A_2 - q_1 q_1^\top A_2$
            - $q_1^\top y_2 = q_1^\top (A_2 - q_1 q_1^\top A_2) = q_1^\top A_2 - q_1^\top A_2 = 0$
        - 标准化y_2得到$q_2 = \frac{y_2}{||y_2||_2}$
        - $\vdots$
        - 通过正交化得到$y_j = A_j - q_1(q_1^\top A_j) - \cdots - q_{j-1}(q_{j-1}^\top A_j)$
        - 标准化y_j得到$q_j = \frac{y_j}{||y_j||_2}$
        - 最终直到得到q_n的结果
    - **QR分解的关系**：
        - $$(A_1|\cdots|A_n) = (q_1|\cdots|q_n)\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \end{bmatrix}$$
        - $r_{jj} = ||y_j||_2$
        - $r_{ij} = q_i^\top A_j$
        - $A_j = r_{1j}q_1 + \cdots + r_{j-1,j}q_{j-1} + r_{jj}q_j$
        - 此时的QR分解是**简化QR分解（reduced QR factorization）**
    - **完全QR分解**：
      给原有的矩阵补上线性无关的列使其变成一个$m \times m$的矩阵，再对其进行QR分解可得完全QR分解的结果
        - 在简化QR分解中，Q是$m \times n$的，R是$n \times n$的
        - 在完全QR分解中，Q是$m \times m$的，R是$m \times n$的
    - **施密特正交化的QR分解算法表示**：

$$
\begin{aligned}
&\textbf{Input: } A\text{: An } m \times n \text{ matrix} \\
&\textbf{Output: } Q\text{: An orthogonal matrix} \\
&\qquad\qquad\;\; R\text{: An upper triangular matrix s.t. } A = QR \\
&\textbf{for } j = 1, 2, \ldots, n \textbf{ do} \\
&\quad y = A_j \\
&\quad \textbf{for } i = 1, 2, \ldots, j-1 \textbf{ do} \\
&\qquad r_{ij} = q_i^\top A_j \\
&\qquad y = y - r_{ij} q_i \\
&\quad r_{jj} = ||y||_2 \\
&\quad q_j = \frac{y}{r_{jj}}
\end{aligned}
$$

- **利用QR分解实现对非齐次线性方程组的估计计算**
    - **算法转化**：
        - 最小二乘法的目标：最小化$||Ax - b||_2$
        - 转化为最小化$||QRx - b||_2$（$A = QR$）
        - 再转化为$||Rx - Q^\top b||_2$（$||Rx - Q^\top b||_2 = ||QRx - b||_2$
    - **算法应用**：
      $Rx - Q^\top b = e$，$||e||_2$是Ax与b之间的误差：

$$\begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & r_{nn} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} d_1 \\ \vdots \\ d_n \\ d_{n+1} \\ \vdots \\ d_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_1 \\ \vdots \\ e_n \\ e_{n+1} \\ \vdots \\ e_m \end{bmatrix}$$

      此时$d = Q^\top b$，$\bar{x}$直接以R的上半部分（非零行）进行计算得到，$||e||_2^2 = d_{n+1}^2 + \cdots + d_m^2$是最小二乘误差
- **Householder reflect方法的证明**
    - **Householder reflector的定义**：
      令v是一个n维的单位向量，那么矩阵$H = I - 2vv^\top$就是一个Householder reflector，H是对称且正交的：
        - 对称性：

$$
\begin{aligned}
H^\top &= (I-2vv^\top)^\top = I^\top - 2(vv^\top)^\top \\
&= I - 2[(v^\top)^\top v^\top] = I - 2vv^\top = H
\end{aligned}
$$

- 正交性：

$$
\begin{aligned}
HH^\top &= (I-2vv^\top)(I-2vv^\top) \\
&= I - 2vv^\top - 2vv^\top + 4vv^\top vv^\top \\
&= I - 4vv^\top + 4vv^\top = I
\end{aligned}
$$

Householder reflector可用于投影一个n维的向量到$n-1$维的平面上，同时不改变该向量的长度

- **Householder reflector形式的证明**
  - **引理**：令x和w为两个向量且$||x||_2 = ||w||_2$，那么$w-x$和$w+x$是垂直的
    - 证明：

$$
(w-x)^\top (w+x) = w^\top w - x^\top w + w^\top x - x^\top x = ||w||_2 - ||x||_2 = 0
$$

  - **定理**：给定如下量
    - x和w为两个向量且$||x||_2 = ||w||_2$
    - $u = w - x$且$v = \dfrac{u}{||u||_2}$
    - $H = I - 2vv^\top$

    那么$Hx = w$且$Hw = x$
    - 证明：
      首先证明$Hx = w$：

$$
\begin{aligned}
Hx &= x - 2vv^\top x \\
&= w - u - 2\frac{uu^\top x}{||u||_2^2} \\
&= w - \frac{uu^\top u}{||u||_2^2} - \frac{uu^\top x}{||u||_2^2} - \frac{uu^\top (w-u)}{||u||_2^2} \\
&= w - \frac{uu^\top (w+x)}{||u||_2^2} \\
&= w - \frac{u(w-x)^\top (w+x)}{||u||_2^2} \\
&= w
\end{aligned}
$$

      再证明$Hw = x$：

$$
\begin{aligned}
Hx &= w \\
H^{-1}Hx &= H^{-1}w \\
x &= H^\top w
\end{aligned}
$$

- **Householder reflector的计算方式**
  - **计算Householder reflector**：
    给定两个向量x和w，需要找到H使得$Hx = w$且$Hw = x$
    令$u = w - x$，$v = \dfrac{u}{||u||_2}$，那么$H = I - 2vv^\top$
  - **QR分解**：
    给定一个$m \times n$的矩阵：

$$
A = \begin{bmatrix} A_1 & A_2 & \cdots & A_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}
$$

    - 令$x_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{m1} \end{bmatrix}^\top$
    - 令$w_1 = \begin{bmatrix} \mathrm{sgn}(x_{11})||x_1||_2 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}^\top$
      - $\mathrm{sgn}(\cdot)$函数代表输入大于0则为1，小于0则为-1，等于0则为0
    - 因此$u_1 = w_1 - x_1$，$v_1 = \dfrac{u_1}{||u_1||_2}$且$H_1 = I - 2v_1v_1^\top$
    - 接下来我们得到矩阵B：

$$B = H_1 A = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ 0 & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & b_{m2} & \cdots & b_{mn} \end{bmatrix}$$

- 接下来我们对B进行运算，令$x_2 = \begin{bmatrix} b_{22} & b_{23} & \cdots & b_{2m} \end{bmatrix}^\top$
- 令$w_2 = \begin{bmatrix} \operatorname{sgn}(x_{21})||x_2||_2 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}^\top$
- 因此$u_2 = w_2 - x_2$，$v_2 = \dfrac{u_2}{||u_2||_2}$且$\hat{H}_2 = I - 2v_2v_2^\top$（注意这里得到的是$\hat{H}$，它的尺寸并不匹配）
- 接下来我们得到矩阵C：

$$C = H_2 B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & \hat{H}_2 & \\ 0 & & & \end{bmatrix} B = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & \cdots & c_{1n} \\ 0 & c_{22} & c_{23} & \cdots & c_{2n} \\ 0 & 0 & c_{33} & \cdots & c_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & c_{m3} & \cdots & c_{mn} \end{bmatrix}$$

- 接下来根据上述步骤，我们可以不断递推，令$x_n = \begin{bmatrix} z_{nn} & \cdots & z_{nm} \end{bmatrix}^\top$
- 令$w_n = \begin{bmatrix} \operatorname{sgn}(x_{n1})||x_n||_2 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}^\top$
- 因此$u_n = w_n - x_n$，$v_n = \dfrac{u_n}{||u_n||_2}$且$\hat{H}_n = I - 2v_nv_n^\top$
- 接下来我们得到最终的R矩阵：

$$R = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \hat{H}_n & \\ 0 & \cdots & 0 & & \end{bmatrix} H_{n-1} \cdots H_1 A = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & r_{nn} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & 0 & \vdots \end{bmatrix}$$

- 最终，$Q = H_1 \cdots H_n$，$R = H_n \cdots H_1 A$