第8章线性最小二乘问题

如对任意$x \in C^m$，都有$Ax - b \neq 0$，此时称$Ax = b$ 为矛盾方程组。对于矛盾方程组，我们希望找出这样的向量$x_0 \in C^m$，它使$\|Ax - b\|_2$ 达到最小，即

$$\|Ax_0 - b\|_2 = \min_{x \in C^m} \|Ax - b\|_2$$

称此问题为线性方程组$Ax = b$ 的最小二乘问题（或LS问题），称x_0 为矛盾方程组$Ax = b$ 的最小二乘解。

1. 定理：设$A \in C^{m\times n}$, $b \in C^{m}$, 则z 是矛盾方程组$Ax = b$ 的最小二乘解的充要条件为z 是方程组$Ax = AA^{+}b$ 的解。

1. 定理：设$A \in C^{m\times n}$, $b \in C^m$, 则z 是矛盾方程组$Ax = b$ 的最小二乘解的充要条件为z 是方程组$Ax = AA^+b$ 的解。

证明：对任意$x \in C^n$，可证

$$\begin{aligned}\|Ax - b\|_2^2 &= \|Ax - AA^+b + AA^+b - b\|_2^2 \\ &= \|Ax - AA^+b\|_2^2 + \|AA^+b - b\|_2^2,\end{aligned}$$

于是

$$\|Ax - b\|_2 \geq \|AA^+b - b\|_2.$$

当$Ax = AA^+b$ 时, $\|Ax - b\|_2$ 达到最小值$\|AA^+b - b\|_2$。

反之，若z_0 是$Ax = b$ 的任意最小二乘解，则有

$$\|Az_0 - b\|_2 = \|AA^+b - b\|_2.$$

与前面类似，有

$$\|Az_0 - b\|_2^2 = \|Az_0 - AA^+b\|_2^2 + \|AA^+b - b\|_2^2.$$

从而$\|Az_0 - AA^+b\|_2 = 0$，即$Az_0 = AA^+b$。所以z_0 是$Ax = AA^+b$ 的解。

2. 定理：设$A \in C^{m\times n}$, $b \in C^m$，则z 是矛盾方程组$Ax = AA^+b$ 的最小二乘解的充要条件为z 是方程组

$$A^HAx = A^Hb \tag{1}$$

的解。

证明：若z 是$Ax=b$ 的最小二乘解，则z 是$Ax=AA^+b$ 的解，于是

$$A^HAz=A^H(AA^+b)=A^H(AA^+)^Hb=(AA^+A)^Hb=A^Hb,$$

即z 是$A^HAx=A^Hb$ 的解。

反之，若z 是$A^HAx=A^Hb$ 的解，则有

$$\begin{aligned} Az &= AA^+Az=(AA^+)^HAz=(A^+)^H(A^HAz) \\ &=(A^+)^HA^Hb=(AA^+)^Hb=AA^+b, \end{aligned}$$

可见z 是$Ax=AA^+b$ 的解，从而是$Ax=b$ 的最小二乘解。

3. 推论：若$A = FG$ 分解中G 具行满秩，则(1) 等价于方程组

$$F^H A x = F^H b.$$

4. 推论：向量x 是(1) 的解当且仅当有向量$r \in C^m$ 使

$$\begin{pmatrix} -I & A \\ A^H & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}.$$

5. 定理：设$A \in C^{m\times n}$, $b \in C^m$. 矛盾方程组 $Ax = b$ 的全部最小二乘解为

$$z = A^{+}b + (\mathrm{I} - A^{+}A)y \quad (y \in C^n \text{ 任意}) \tag{2}$$

证明：因为$(AA^+)(AA^+b) = AA^+b$，则$Ax = AA^+b$ 有解，且其通解为

$$z = A^+b + (I - A^+A)y, \quad y \in C^n \text{ 任意}.$$

此即为矛盾方程组$Ax = b$ 的全部最小二乘解。

最小二乘解一般是不唯一的，在所有最小二乘解中，2-范数最小的解称为矛盾方程组$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的极小范数最小二乘解或最佳逼近解.

6. 定理：设$A \in C^{m\times n}$, $b \in C^m$, 则矛盾方程组$Ax = b$的唯一极小范数最小二乘解为 $x_0 = A^+b$.

7. 利用Moore-Penrose 逆 A^+ 求解 $Ax=b$ 的结论：

(1) $Ax=b$ 有解（或相容）的充要条件是 $AA^+b=b$;

(2) $x=A^+b+(\mathrm{I}-A^+A)y \quad (y\in C^n$ 任意) 是相容方程组 $Ax=b$ 的通解，或是矛盾方程组 $Ax=b$ 的全部最小二乘解;

(3) $x_0=A^+b$ 是相容方程组 $Ax=b$ 的唯一极小范数解，或是矛盾方程组 $Ax=b$ 的唯一极小范数最小二乘解.

例2：用满秩分解方法求矛盾线性方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + x_3 + x_4 = 10 \\ x_1 + 2x_2 - x_3 + 2x_4 = 6 \\ -x_1 - 2x_2 - 2x_3 + x_4 = -7 \end{cases}$$

的全部最小二乘解和极小范数最小二乘解.

例2：用满秩分解方法求矛盾线性方程组

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + x_3 + x_4 = 10 \\ x_1 + 2x_2 - x_3 + 2x_4 = 6 \\ -x_1 - 2x_2 - 2x_3 + x_4 = -7 \end{cases}$$

的全部最小二乘解和极小范数最小二乘解.

解：令 $A = \begin{pmatrix} 2 & 4 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & -1 & 2 \\ -1 & -2 & -2 & 1 \end{pmatrix}$, $b = \begin{pmatrix} 10 \\ 6 \\ -7 \end{pmatrix}$

计算A 的满秩分解得

$$A = FG = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -1 \\ -1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix},$$

于是

$$A^+ = G^T(GG^T)^{-1}(F^TF)^{-1}F^T = \frac{1}{33}\begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 \\ 4 & 2 & -2 \\ 1 & -5 & -6 \\ 1 & 6 & 5 \end{pmatrix}.$$

全部最小二乘解为

$$x = A^+b + (\mathrm{I} - A^+A)y = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix} + \frac{1}{11}\begin{pmatrix} 9 & -4 & -1 & -1 \\ -4 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -2 & 5 & 5 \\ -1 & -2 & 5 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix}$$

极小范数最小二乘解为

$$x_0 = A^+b = \left(1, 2, \frac{2}{3}, \frac{1}{3}\right)^T$$

列满秩LS 问题

设$A \in C^{m\times n}$, $b \in C^m$，且A 是列满秩矩阵，称对应的LS 问题为列满秩LS 问题。

8. 因为矛盾方程组$Ax = b$ 的最小二乘解x_{LS} 满足

$$A^H A x_{LS} = A^H b. \tag{3}$$

而$A^H A$ 为Hermite 正定矩阵，可进行Cholesky 分解，所以方程组(3) 有唯一的解，算法如下：

(1) 计算$G = A^H A$;

(2) 计算$d = A^H b$;

(3) 计算Cholesky 分解$G = LL^H$;

(4) 解$Ly = d$ 和$L^H x_{LS} = y$.