第五章 矩阵计算问题

第 15 讲 最小二乘问题

黄定江

DaSE @ ECNU
djhuang@dase.ecnu.edu.cn

最小二乘 (Least Squares，LS) 法起源于 18 世纪天文学和测地学的应用需要：有一组容易观测的量和一组不易观测的量，它们之间满足线性关系，如何根据易观测数据去估计不易观测的量 (它们称为模型的参数)。在计算上主要涉及超定线性方程组的求解。

- 欧拉 (L. Euler) 在 1749 年研究木星对土星轨道的影响时，得到 $n = 75$ 和 $k = 8$ 的一组方程，用方程分组的思想求解。
- 梅耶 (J. T. Mayer) 在 1750 年由确定地球上一点的经度问题，得到 $n = 27$ 和 $k = 3$ 的一组方程，用方程分组的思想求解。
- 勒让德 (A. M. Legendre) 于 1805 年在其著作《计算慧星轨道的新方法》中首次提出了最小二乘法。
- 高斯于 1809 年他的著作《天体运动论》中发表了最小二乘法的方法。

15.1.1 最小二乘问题：数据拟合引例

最小二乘问题多产生于数据拟合问题。

- 比如给定平面上 m 个点 $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_m, y_m)\}$，其中 $x_i \in \mathbb{R}$ 是输入 X 的观测值，$y_i \in \mathbb{R}$ 是输出 Y 的观测值。
- 我们要求给出一条直线 $y = kx + b$，k, b 是直线的参数，$k, b \in \mathbb{R}$，使得在所有输入观测值 x_i 上，$y = kx_i + b$ 能最佳地逼近这些输出观测值 y_i，也即使得输出观测值 y_i 与直线所预测的值的残差 $r(x_i; k, b) = y_i - y = y_i - (kx_i + b)$ 的平方和最小，即

$$\min_{k,b} \sum_{i=1}^{m} (y_i - (kx_i + b))^2 = \min_{k,b} \sum_{i=1}^{m} (r(x_i; k, b))^2.$$

- 这样实际上就是一个求解线性回归的参数 k, b 的问题。

在高维情况下，我们用一个超平面来拟合数据点 (在三维情况下就是用一个平面来拟合)。

- 我们用 $y = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + b$ 来表示超平面，其中 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$，$n$ 是输入 X 的特征数，$\boldsymbol{w} \in \mathbb{R}^n$ 是超平面预测函数中特征的权重向量参数，$b \in \mathbb{R}$ 是偏差参数。
- 希望所有输出观测值 y_i 与预测函数的预测值 $y(\mathbf{x}_i; \mathbf{w}, b)$ 的残差 $r(\mathbf{x}_i; \mathbf{w}, b) = y_i - y = y_i - (\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_i + b)$ 尽可能的小。
- 记 $\mathbf{x}_i$ 的第 j 个特征分量为 x_{ij}，残差向量 $\boldsymbol{r} \in \mathbb{R}^m$ 的第 i 个分量为 $r(\mathbf{x}_i; \mathbf{w}, b)$：

$$\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} y_1 - (w_1x_{11} + w_2x_{12} + \cdots + w_nx_{1n} + b) \\ y_2 - (w_1x_{21} + w_2x_{22} + \cdots + w_nx_{2n} + b) \\ y_3 - (w_1x_{31} + w_2x_{32} + \cdots + w_nx_{3n} + b) \\ \vdots \\ y_m - (w_1x_{m1} + w_2x_{m2} + \cdots + w_nx_{mn} + b) \end{pmatrix}$$

化成矩阵的形式表示为

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{A}\hat{\mathbf{w}},$$

其中：

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} & \dots & x_{1n} & 1 \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} & \dots & x_{2n} & 1 \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} & \dots & x_{3n} & 1 \\ \vdots & & & & & \\ x_{m1} & x_{m2} & x_{m3} & \dots & x_{mn} & 1 \end{pmatrix}, \hat{\mathbf{w}} = \begin{pmatrix} \mathbf{w} \\ b \end{pmatrix}, \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$$

问题就变为求参数 $\hat{\mathbf{w}}$，使得残差 $\boldsymbol{r}$ 尽可能的小。若使残差 $\boldsymbol{r}$ 在 2 范数意义下最小，也即，

$$\arg\min_{\hat{\mathbf{w}}} ||\boldsymbol{A}\hat{\mathbf{w}} - \boldsymbol{y}||_2$$

把上式中的符号调整成我们常用的符号：

$$\arg\min_{\mathbf{x}} ||\boldsymbol{A}\mathbf{x} - \boldsymbol{b}||_2 \tag{1}$$

这就是最小二乘问题。

最小二乘问题定义

定义 1

给定矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 和向量 $b \in \mathbb{R}^m$，确定 $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ 使得

$$\|b - A\mathbf{x}_0\|_2 = \|r(\mathbf{x}_0)\|_2 = \min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \|r(\mathbf{x})\|_2 = \min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n} \|A\mathbf{x} - b\|_2 \tag{2}$$

其中 $r(\mathbf{x}) = b - A\mathbf{x}$，称为残差向量，该问题称为最小二乘问题，简记为 *LS(Least Squares)* 问题，而 $\mathbf{x}_0$ 则称为最小二乘解或极小解。

在所讨论的问题中，若 $r(\mathbf{x})$ 线性地依赖于 $\mathbf{x}$，则称其为线性最小二乘问题；若 $r(\mathbf{x})$ 非线性地依赖于 $\mathbf{x}$，则称其为非线性最小二乘问题。
所有最小二乘解的集合记为 $\mathcal{X}_{LS}$，即

$$\mathcal{X}_{LS} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : \mathbf{x}\text{满足}(2)\}.$$

解集 $\mathcal{X}_{LS}$ 中 2 范数最小的解称为最小范数解，记为 $\mathbf{x}_{LS}$，即

$$\|\mathbf{x}_{LS}\|_2 = \min\{\|\mathbf{x}\|_2 : \mathbf{x} \in \mathcal{X}_{LS}\}.$$

两条有用的性质

下面给出关于列满秩或行满秩矩阵的 2 条有用的性质:

定理 1

1. $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 是一个列满秩矩阵 (*i.e.*, $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = n$) 当且仅当 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 是可逆的.
2. $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 是一个行满秩矩阵 (*i.e.* , $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = m$) 当且仅当 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 是可逆的.

证明.

对于第 1 条性质: 如果 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 不是可逆的, 则存在 $\boldsymbol{x} \neq 0$ 使得 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = 0$. $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = 0$, 因此 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = 0$. 所以 $\boldsymbol{A}$ 不是一个列满秩矩阵. 反之, 如果 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 是可逆的, 对于每个 $\boldsymbol{x} \neq 0, \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \neq 0$, 也能推出对于每一个非零的 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \neq 0$. 第 2 条性质的证明过程与第 1 条的证明过程相似. □

15.1.2 最小二乘问题与线性方程组

最小二乘问题(2)的解 $\boldsymbol{x}$ 又可称为线性方程组

$$\boldsymbol{A}\mathbf{x} = \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \quad \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{m} \tag{3}$$

的最小二乘解，即 $\boldsymbol{x}$ 在残差向量 $\boldsymbol{r}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\mathbf{x}$ 的 2 范数最小的意义下满足方程组(3)。因此与线性方程组的分类类似，根据 m 与 n 以及矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩的不同，最小二乘问题也可以分为下面几种情形：

1. $m = n$. 对应方阵系统，此时如果 $\boldsymbol{A}\mathbf{x} = \boldsymbol{b}$ 方程有解，那么方程的解显然使得 $\|\boldsymbol{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2$ 最小。
2. $m > n$. 对应超定方程组或矛盾方程组，在这种情况下，方程常发生无解的情况。
3. $m < n$. 对应欠定方程组，在这种情况下，方程常发生有无穷多解的情况。

每一种情形，根据矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列是线性无关或线性相关，也即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为列满秩或秩亏的，又可分为两种情形：满秩最小二乘问题或秩亏最小二乘问题。

最小范数解与最小范数最小二乘解

(1) 当方程组(3)有解时，显然也满足最小二乘问题(3)，如何确定 $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^n$，使得

$$\|\boldsymbol{x}_0\|_2 = \min_{\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}} \|\boldsymbol{x}\|_2$$

称这样的 $\boldsymbol{x}_0$ 为方程组(3)的最小范数解（特别对于欠定情形，方程组有无穷多解，我们总是对具有最小 2 范数的解感兴趣）。

(2) 当方程组(3)无解时，此时相应 LS 问题的最小二乘解不是方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的解，如何确定 $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{R}^n$，使得

$$\|\boldsymbol{x}_0\|_2 = \min_{\min \|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}\|_2} \|\boldsymbol{x}\|_2$$

称这样的 $\boldsymbol{x}_0$ 为方程组(3)的最小范数最小二乘解（方程组无解时相应的 LS 问题的最小二乘解可以看成方程组的近似解，我们总是对使得 2 范数最小的近似解感兴趣）。

最小范数解与最小范数最小二乘解的存在唯一性

矩阵的广义逆是研究一般线性方程组最小范数解和最小范数最小二乘解的强有力工具。

定理 2

如果方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 有解，则它的最小范数解 $\boldsymbol{x}_0$ 唯一，并且 $\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}$.

定理 3

如果线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 无解，则它的最小范数最小二乘解 $\boldsymbol{x}_0$ 唯一，并 $\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}$.

欠定方程组的最小范数解

考虑一类具体的方程组，针对欠定方程组的情形：当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列数比行数多：$m < n$。

- 假设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是行满秩，我们有 $\dim\{\mathsf{Null}(\boldsymbol{A})\} = n - m > 0$，因此得出 $\boldsymbol{A}\mathbf{x} = \boldsymbol{b}$ 有无数个解并且解的集合是 $\mathbb{S}_{\mathbf{x}} = \{\mathbf{x} : \mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}} + \boldsymbol{z}, \boldsymbol{z} \in \mathsf{Null}(\boldsymbol{A})\}$，其中 $\tilde{\mathbf{x}}$ 是任意满足 $\boldsymbol{A}\tilde{\mathbf{x}} = \boldsymbol{b}$ 的向量。
- 我们想从这个解的集合 $\mathbb{S}_{\mathbf{x}}$ 中挑选出一个 2 范数最小的解 $\boldsymbol{x}^*$。也即求解:
$$\min_{\mathbf{x}:\boldsymbol{A}\mathbf{x}=\boldsymbol{b}} \|\mathbf{x}\|_2$$
这个式子等价于 $\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{S}_{\mathbf{x}}} \|\mathbf{x}\|_2$.
- 因为（唯一的）解 $\boldsymbol{x}^*$ 必须与 $\mathsf{Null}(\boldsymbol{A})$ 相互垂直，等价地，$\boldsymbol{x}^* \in \mathsf{Col}\left(\boldsymbol{A}^T\right)$，这意味着存在 ζ，使得 $\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{A}^T\zeta$。因为 $\boldsymbol{x}^*$ 是方程组的解，必须满足 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{b}$，所以有 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T\zeta = \boldsymbol{b}$.
- 因为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是行满秩，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$ 是可逆的并且有唯一的 ζ 是方程组的解，所以有 $\zeta = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T)^{-1}\boldsymbol{b}$.

这样我们得到了唯一的最小范数解：

$$x^* = A^T(AA^T)^{-1}b. \tag{4}$$

因为 $A^T(AA^T)^{-1}$ 正是 A 是行满秩矩阵时的伪逆 $A^\dagger$，所以

$$x^* = A^\dagger b$$

定理 4

设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}, m \le n$ 是行满秩的，并且令 $b \in \mathbb{R}^m$。在线性方程组 $Ax = b$ 的所有解中，存在唯一的 2 范数最小的解，这个解由(4)给出。

15.1.3 最小二乘解的特征和一般表示：存在唯一性

定理 5

线性最小二乘问题(2)的解总是存在的，而且其解唯一的充分必要条件是 $\textit{nullity}\,(\boldsymbol{A}) = 0$.

因为 $\mathbb{R}^m = \mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A}) \oplus \mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})^{\perp}$, 所以向量 $\boldsymbol{b}$ 可以唯一地表示为 $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2$，其中 $\boldsymbol{b}_1 \in \mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})\,, \boldsymbol{b}_2 \in \mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})^{\perp}$. 于是对于任意 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n, \boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \in \mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})$ 且与 $\boldsymbol{b}_2$ 正交，从而

$$\|\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x})\|_2^2 = \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2 = \|(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{b}_2\|_2^2 = \|\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2 + \|\boldsymbol{b}_2\|_2^2$$

由此即知，$\|\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x})\|_2^2$ 达到极小当且仅当 $\|\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2$ 达到极小；
而 $\boldsymbol{b}_1 \in \mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})$ 又蕴涵着 $\|\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2$ 达到极小的充分与必要条件是

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_1$$

这样，由 $\boldsymbol{b}_1 \in \mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})$ 和 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_1$ 有唯一解的充要条件是 $\mathsf{nullity}\,(\boldsymbol{A}) = 0$。
立即推出定理的结论成立。

定理 6

$x \in \mathcal{X}_{LS}$ 当且仅当

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b} \tag{5}$$

其中方程组(5)称为最小二乘问题的正规化方程组或法方程组。

证明.

设 $x \in \mathcal{X}_{LS}$. 由定理5证明知 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_1$, 其中 $\boldsymbol{b}_1 \in \mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})$, 而且

$$\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}_1 = \boldsymbol{b}_2 \in \mathsf{Col}\,(\boldsymbol{A})^\perp$$

因而 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}_2 = 0$. 将 $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 代入 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}) = 0$ 即得(5). 反之, 设 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ 满足 $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$, 则对任意的 $\boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n$ 有

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{z})\|_2^2 &= \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2 - 2\boldsymbol{z}^T\boldsymbol{A}^T(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}) + \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}\|_2^2 \\ &= \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2 + \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}\|_2^2 \geq \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2^2\end{aligned}$$

由此即得 $x \in \mathcal{X}_{LS}$. □

由定理6可知，可以通过求解正规化方程组或法方程组 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 来求解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解。如果 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 可逆，那么最小二乘解为 $\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$。

推论 1

若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 列满秩，则线性最小二乘问题(2)的解是唯一的，并且解为

$$\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b},$$

其中 $\boldsymbol{A}^{\dagger}=(\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{T}$。

关于正规化方程组的一点注解

对于最优化问题，正规化方程只不过是在求最优化问题：

$$\min_{x} f(x)$$

的解，其中 $f(x)=\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_2^2$. 稍后我们将知道，如果目标函数是可微，具有凸性并且问题是没有约束的，最优点由条件 $\nabla f(x)=0$ 决定。在我们这种情况下，函数 f 在一点 $\boldsymbol{x}$ 处的梯度是非常容易看出是 $\nabla f(x)=\boldsymbol{A}^{T}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b})$

列满秩和行满秩以外的情况

如果 $\boldsymbol{A}$ 既不是列满秩也不是行满秩，它的最小二乘解仍是方程：

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$

的解，但是，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 虽然是方阵，却并不一定可逆。
然而，这个方程是一定有解的，我们总可以通过初等行变换将其化为行满秩的方程组。
这样我们就可以利用求解欠定问题的最小范数解的方法，求得方程的最小范数最小二乘解。
实际上，可以通过 SVD 的方法，求得最小范数最小二乘解，这里不展开介绍。

15.1.4 最小二乘解的解释

根据应用的场景不同，可以给出最小二乘问题几种不同的解释。

- **线性方程组的近似解**：最小二乘问题的解，是使得残差 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{A}\mathbf{x} - \boldsymbol{b}$ 在 2 范数意义下最小的解。
- **在 Col $(\boldsymbol{A})$ 上的投影**：最小二乘问题的解，是 $\boldsymbol{b}$ 在 Col $(\boldsymbol{A})$ 上的投影。
- **线性回归模型**：最小二乘问题的解，是线性回归模型 $f(\mathbf{a}_i) = \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{a}_i$使得$f(\mathbf{a}_i) \approx y_i$，求解出的参数 $\mathbf{x}$。数据集表示为 $m \times (n+1)$ 大小的矩阵 $\boldsymbol{A}$，每一行对应一个实例，前 n 项对应实例的 n 个特征，最后一项为 1。$\boldsymbol{b}$ 是 m 维向量，每一行对应 $\mathbf{x}_i$ 是观测值。
- **最小程度地干扰可行性**：最小二乘问题的解，是使得 $\boldsymbol{A}\mathbf{x} = \boldsymbol{b}$ 右侧添加在 2 范数意义下的最小扰动项 $\delta\boldsymbol{b}$ 后 $\boldsymbol{A}\mathbf{x} = \boldsymbol{b} + \delta\boldsymbol{b}$ 有解时的方程组的解。
- **最好的线性无偏估计**：在统计估计的背景下，线性模型的最好无偏估计与最小二乘问题的解是一致的。

最小二乘问题的求解

最小二乘问题按照矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是否满秩，分为：

- 满秩最小二乘问题
- 秩亏最小二乘问题

本小节我们讨论在 $\boldsymbol{A}$ 为列满秩的情形下超定方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

的最小二乘解的求解方法：此时，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 可逆，我们的目标是求出方程组唯一的最小二乘解。

对于秩亏最小二乘问题的求解，我们并不涉及。

15.2.1 正规化方法（Cholesky 分解法）

方程组 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 称为最小二乘问题的正规化方程组或法方程组，这是一个含有 n 个变量 n 个方程的线性方程组。在 $\boldsymbol{A}$ 的列向量线性无关的条件下，$\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{A}$ 对称正定，故可用平方根法求解(5). 这样，我们就得到了求解最小二乘问题最古老的算法—正规化方法，其基本步骤如下：

1. 计算 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}, \boldsymbol{d}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$;
2. 用平方根法计算 $\boldsymbol{C}$ 的 Cholesky 分解：$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{T}$;
3. 求解三角方程组 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{d}$ 和 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$.

注意，正规化方程组 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 的解 $\boldsymbol{x}$ 可以表为

$$\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{T}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}$$

例 1

利用正规化方法求 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 得最小二乘解，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 4 & 5\\ 1 & -2 & 3\\ 1 & 4 & 1\\ 1 & -2 & -1\end{pmatrix},\ \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}6\\ 0\\ -4\\ 2\end{pmatrix}$$

解

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}4 & 4 & 8\\ 4 & 40 & 20\\ 8 & 20 & 36\end{pmatrix},\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}4\\ 4\\ 24\end{pmatrix}$$

对 $A^{\mathrm{T}}A$ 做 Cholesky 分解：

$$A^{\mathrm{T}}A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 2 & 6 & 0 \\ 4 & 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 0 & 6 & 2 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

解方程

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 2 & 6 & 0 \\ 4 & 2 & 4 \end{pmatrix} y = \begin{pmatrix} 4 \\ 4 \\ 24 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix}$$

再解方程

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 0 & 6 & 2 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} x^* = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix} \qquad \text{得} x^* = \begin{pmatrix} -2/3 \\ -1/3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

15.2.2 QR 分解法

由 2-范数的正交不变性，即若 $\boldsymbol{Q}$ 是正交矩阵，$||\boldsymbol{Q}\mathbf{x}||_2 = ||\mathbf{x}||_2$。
可以使用 QR 分解求解最小二乘问题。对于 $\boldsymbol{A}^{m\times n}$ 的列满秩矩阵，其 QR 分解后

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\begin{pmatrix} \boldsymbol{R}^{n\times n} \\ \boldsymbol{O}^{(m-n)\times n} \end{pmatrix},$$

$$||\boldsymbol{A}\mathbf{x} - \boldsymbol{b}||_2 = \left\|\begin{pmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{O} \end{pmatrix}\mathbf{x} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}\right\|_2 = \left\|\begin{pmatrix} \boldsymbol{R}\mathbf{x} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}\right\|_2$$

我们把 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 拆成 $\begin{pmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \end{pmatrix}$，其中 $\boldsymbol{b}_1$ 是 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 的前 n 项，$\boldsymbol{b}_2$ 是 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 的后 $m-n$ 项。那么

$$\arg\min_{\mathbf{x}} ||\boldsymbol{A}\mathbf{x} - \boldsymbol{b}||_2^2 = \arg\min_{\mathbf{x}}(||\boldsymbol{R}\mathbf{x} - \boldsymbol{b}_1||_2^2 + ||\boldsymbol{b}_2||_2^2) = \arg\min_{\mathbf{x}} ||\boldsymbol{R}\mathbf{x} - \boldsymbol{b}_1||_2^2$$

通过之前最小二乘问题和方程组的关系，我们只需要求 $\boldsymbol{R}\mathbf{x} = \boldsymbol{b}_1$ 的解即可。

QR 分解法求解最小二乘问题的基本步骤如下:

(1) 计算 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解: $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{R}\\\boldsymbol{O}\end{pmatrix}$;

(2) 计算 $\boldsymbol{b}_1=(\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{b})[1:n]$;

(3) 求解上三角方程组 $\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}_1$。

在矩阵分解部分，我们介绍过 Gram-Schmidt 正交化、Hoseholder 变换、Givens 变换三种方法进行 QR 分解。

在计算机中一般使用基于 Householder 变换的 QR 分解，该算法有良好地数值性态，结果通常要比正规化方法精确。但是运算量也比较大，大约为 $2mn^2-\frac{2}{3}n^3$。

我们也可以使用 Givens 变换来实现 QR 分解，所需的运算量大约是 Householder 方法的两倍，但是如果 $\boldsymbol{A}$ 有较多的零元素，则灵活地使用 Givens 变换会使运算量大为减少。

例 2

利用 QR 分解求 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 得最小二乘解，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 4 & 5\\ 1 & -2 & 3\\ 1 & 4 & 1\\ 1 & -2 & -1\end{pmatrix},\boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}6\\ 0\\ -4\\ 2\end{pmatrix}$$

解

求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\begin{pmatrix}\boldsymbol{R}\\ \boldsymbol{O}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1/2 & 1/2 & 1/2 & 1/2\\ 1/2 & -1/2 & 1/2 & -1/2\\ 1/2 & 1/2 & -1/2 & -1/2\\ 1/2 & -1/2 & -1/2 & 1/2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2 & 2 & 4\\ 0 & 6 & 2\\ 0 & 0 & 4\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{Q} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & -1/2 & 1/2 & -1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 & -1/2 \\ 1/2 & -1/2 & -1/2 & 1/2 \end{pmatrix}, \boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 0 & 6 & 2 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix}, \boldsymbol{b}^* = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix}$$

解方程

$$\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{b}^*$$

得

$$\boldsymbol{x}^* = \begin{pmatrix} -2/3 \\ -1/3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

15.2.3 奇异值分解法

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}(m \geq n)$ 列满秩，$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix}\boldsymbol{V}^T$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解，令 $\boldsymbol{U}_n$ 为 $\boldsymbol{U}$ 的前 n 列组成的矩阵，即 $\boldsymbol{U} = \left[\boldsymbol{U}_n, \tilde{\boldsymbol{U}}\right]$，其中 $\boldsymbol{U}$ 是正交矩阵，根据 2 范数的正交不变性得

$$
\begin{aligned}
\|\boldsymbol{A}\mathbf{x} - \boldsymbol{b}\|_2^2 &= \left\|\boldsymbol{U}\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix}\boldsymbol{V}^T\mathbf{x} - \boldsymbol{b}\right\|_2^2 = \left\|\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix}\boldsymbol{V}^T\mathbf{x} - \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_n^{\mathrm{T}} \\ \tilde{\boldsymbol{U}}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}\boldsymbol{b}\right\|_2^2 \\
&= \left\|\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T\mathbf{x} - \boldsymbol{U}_n^T\boldsymbol{b} \\ -\tilde{\boldsymbol{U}}^T\boldsymbol{b} \end{bmatrix}\right\|_2^2 = \left\|\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T\mathbf{x} - \boldsymbol{U}_n^T\boldsymbol{b}\right\|_2^2 + \left\|\tilde{\boldsymbol{U}}^T\boldsymbol{b}\right\|_2^2 \\
&\geq \left\|\tilde{\boldsymbol{U}}^T\boldsymbol{b}\right\|_2^2
\end{aligned}
$$

等号当且仅当 $\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T\mathbf{x} - \boldsymbol{U}_n^T\boldsymbol{b} = 0$ 时成立，即

$$
\boldsymbol{x} = \left(\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T\right)^{-1}\boldsymbol{U}_n^T\boldsymbol{b} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{U}_n^T\boldsymbol{b}
$$

例 3

利用 *SVD* 分解求 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 得最小二乘解，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 4 & 5\\ 1 & -2 & 3\\ 1 & 4 & 1\\ 1 & -2 & -1\end{pmatrix},\ \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}6\\ 0\\ -4\\ 2\end{pmatrix}$$

这里，我们直接使用 Matlab 计算 $\boldsymbol{A}$ 的 SVD，并利用

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{U}_n^T\boldsymbol{b}$$

求解。

```
>> [U,Sigma,V]=svd(A)

U =

   -0.8321    0.2178    0.1010    0.5000
   -0.0929    0.8517   -0.1263   -0.5000
   -0.4831   -0.4314   -0.5749   -0.5000
    0.2561    0.2025   -0.8021    0.5000


Sigma =

    7.7046         0         0
         0    4.3066         0
         0         0    1.4466
         0         0         0
```

```
V =

   -0.1495    0.1952   -0.9693
   -0.7252   -0.6880   -0.0267
   -0.6721    0.6990    0.2444


>> V*diag(1./diag(Sigma))*U(:,1:3)'*b

ans =

   -0.6667
   -0.3333
    1.0000
```

也可以在 Python 中使用 NumPy 库中的 linalg.svd() 函数，计算 SVD，注意这个函数返回的是 $\boldsymbol{U}, \boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$。

```
In [1]: import numpy as np

In [2]: A = np.matrix("1,4,5;1,-2,3;1,4,1;1,-2,-1")

In [3]: b = np.matrix("6;0;-4;2")

In [4]: U,Sigma,Vt = np.linalg.svd(A)

In [5]: V=Vt.T

In [6]: print(U)

[[-0.83208589  0.21778105  0.10101724  0.5       ]
 [-0.0928553   0.8517268  -0.12625113 -0.5       ]
 [-0.48314949 -0.43140465 -0.57485354 -0.5       ]
 [ 0.2560811   0.2025411  -0.80212192  0.5       ]]
```

```
In [7]: print(np.diag(Sigma))

[[7.70455139 0.         0.        ]
 [0.         4.3066429  0.        ]
 [0.         0.         1.44662184]]

In [8]: print(V)

[[-0.14952325  0.19519712 -0.96929917]
 [-0.72520681 -0.68801391 -0.02668222]
 [-0.67209961  0.69895275  0.24443236]]

In [9]: V*np.diag(1./Sigma)*U[:,0:3].T*b

Out[9]: matrix([[-0.66666667],
        [-0.33333333],
        [ 1.        ]])
```

15.3.1 加权最小二乘

对基本的最小二乘问题(2)进行扩展，可得到其他形式的最小二乘问题。
在普通的最小二乘法中，我们想要最小化误差向量各项的平方和：

$$\|\boldsymbol{A}\mathbf{x}-\boldsymbol{y}\|_2^2=\sum_{i=1}^{m} r_i^2,\quad r_i=\mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{x}-y_i$$

其中 $\mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}, i=1,\cdots,m$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的各列。但是，在某些情形下，方程的残差项并不是同样重要的，相比其他方程，有可能满足某一个方程更重要，这样，我们需要在残差项赋予权重：

$$f_0(\mathbf{x})=\sum_{i=1}^{m} w_i^2 r_i^2,$$

其中 $w_i\geq 0$ 是给定的权重。

这样最小化目标函数重写为:

$$f_0(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{W}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})\|_2^2 = \|\boldsymbol{A}_w\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}_w\|_2^2$$

其中

$$\boldsymbol{W} = diag(w_1, \cdots, w_m), \boldsymbol{A}_w \doteq \boldsymbol{W}\boldsymbol{A}, \boldsymbol{y}_w \doteq \boldsymbol{W}\boldsymbol{y}$$

加权最小二乘仍然是普通最小二乘的形式，其权重最小二乘解为:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{x}}_{\mathsf{WLS}} &= (\boldsymbol{A}_w^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_w)^{-1}\boldsymbol{A}_w^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_w \\ &= (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{y}\end{aligned}$$

15.3.2 约束最小二乘

考虑带有约束的最小二乘问题

$$\min_{\boldsymbol{x}} \frac{1}{2}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_2^2$$
$$s.t. \quad \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{f}$$

其中 $\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{f}$ 是约束条件。求解需要凸优化知识，在这里只列出解。如果 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 非奇异，且 $\boldsymbol{B}$ 行满秩，则

$$\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}-\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda})$$

其中 $\boldsymbol{\lambda}=\left[\boldsymbol{B}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\right]^{-1}\left[\boldsymbol{B}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}-\boldsymbol{f}\right]$

15.3.3 总体最小二乘

考虑得到的数据矩阵和数据向量 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}$ 都有误差，设实际观测的数据矩阵和数据向量

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_0 + \boldsymbol{E}, \quad \boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}_0 + \boldsymbol{e}$$

其中 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{e}$ 分别表示误差数据矩阵和误差数据向量。总体最小二乘的基本思想是：不仅用校正向量 $\Delta\boldsymbol{b}$ 去干扰数据向量 $\boldsymbol{b}$，同时用校正矩阵 $\Delta\boldsymbol{A}$ 去干扰数据矩阵 $\boldsymbol{A}$，以便对 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 二者内存在的误差或噪声进行联合补偿

$$\boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}_0 + \boldsymbol{e} + \Delta\boldsymbol{b} \to \boldsymbol{b}_0$$

$$\boldsymbol{A} + \Delta\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_0 + \boldsymbol{E} + \Delta\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A}_0$$

以抑制观测误差或噪声对矩阵方程求解的影响，从而实现从有误差的矩阵方程到精确矩阵方程的求解的转换

$$(\boldsymbol{A} + \Delta\boldsymbol{A})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b} \to \boldsymbol{A}_0\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_0 \tag{6}$$

自然地，我们希望矫正数据矩阵和校正数据向量都尽量小。因此，总体最小二乘问题可以用约束优化问题叙述为：

$$\text{TLS:}\quad \min_{\Delta \boldsymbol{A}, \Delta \boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}} \|[\Delta \boldsymbol{A}, \Delta \boldsymbol{b}]\|_{\mathsf{F}}^2 = \|\Delta \boldsymbol{A}\|_{\mathsf{F}}^2 + \|\Delta \boldsymbol{b}\|_2^2$$

$$\text{subject to}\quad (\boldsymbol{A} + \Delta \boldsymbol{A})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} + \Delta \boldsymbol{b}$$

约束条件有时也表示为 $(\boldsymbol{b} + \Delta \boldsymbol{b}) \in \mathrm{Col}\,(\boldsymbol{A} + \Delta \boldsymbol{A})$

由(6)：$(\boldsymbol{A} + \Delta\boldsymbol{A})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} + \Delta\boldsymbol{b}$，校正过方程的解满足：

$$([\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}] + [\Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{b}]) \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ -1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{0} \tag{7}$$

如果 $([\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}] + [\Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{b}])$ 是列满秩的矩阵，记 $\hat{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ -1 \end{bmatrix}$，则以 $\hat{\mathbf{x}}$ 为未知量的方程：

$$([\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}] + [\Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{b}])\hat{\mathbf{x}} = \boldsymbol{0} \tag{8}$$

只有零解，与 $\hat{\mathbf{x}}$ 的最后一个分量为 -1 矛盾。因此，$([\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}] + [\Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{b}])$ 是一个列不满秩的矩阵。

问题转化为求一个最接近 $[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}]$ 的列不满秩的矩阵。设 $[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}]$ 的奇异值分解为

$$[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}] = \sum_{i=1}^{n+1} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}$$

其中 σ_i 为 $[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}]$ 的第 i 个奇异值，$\boldsymbol{u}_i, \mathbf{v}_i$ 分别为对应的左右奇异向量。
根据我们在学习奇异值分解时的讨论，最接近 $[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}]$ 的秩不超过 n 的矩阵是 $\sum_{i=1}^{n} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \mathbf{v}_i^{\mathrm{T}}$。
那么 $[\Delta \boldsymbol{A}, \Delta \boldsymbol{b}] = \sigma_{n+1} \boldsymbol{u}_{n+1} \mathbf{v}_{n+1}^{\mathrm{T}}$
设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$，其总体最小二乘解为:

$$\hat{\mathbf{x}}_{\mathsf{TLS}} = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} - \sigma_{n+1}^2 \boldsymbol{I})^{-1} \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b}$$

其中 σ_{n+1} 为 $[-\boldsymbol{b}, \boldsymbol{A}]$ 的第 $n+1$ 个奇异值，$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_{n+1}$。

15.4 最小二乘问题的解的敏感性

现在考虑向量 $\boldsymbol{b}$ 的扰动对最小二乘解的影响。假定 $\boldsymbol{b}$ 有扰动 $\Delta\boldsymbol{b}$ 且 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}$ 分别是最小二乘问题

$$\min \|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2 \quad \text{和} \quad \min \|(\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b})-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2$$

的解，即

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x} &= \boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{b}, \\ \boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{A}^\dagger(\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}) = \boldsymbol{A}^\dagger\tilde{\boldsymbol{b}} \end{aligned}$$

其中 $\tilde{\boldsymbol{b}}=\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}$。下面的定理给出了由于 $\boldsymbol{b}$ 的扰动而引起的 $\boldsymbol{x}$ 的相对误差的界。

定理 7

设 $\boldsymbol{b}_1$ 和 $\tilde{\boldsymbol{b}}_1$ 分别是 $\boldsymbol{b}$ 和 $\tilde{\boldsymbol{b}}$ 在 $Col(\boldsymbol{A})$ 上的正交投影。若 $\boldsymbol{b}_1 \neq 0$，则

$$\frac{\|\Delta \boldsymbol{x}\|_2}{\|x\|_2} \leq \kappa_2(\boldsymbol{A}) \frac{\|\boldsymbol{b}_1 - \tilde{\boldsymbol{b}}_1\|_2}{\|\boldsymbol{b}_1\|_2}$$

其中 $\kappa_2(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\|_2 \|\boldsymbol{A}^\dagger\|_2$。

证明.

证明：设 b 在 $\text{Col}\,(A)^{\perp}$ 上的正交投影为 b_2，则 $A^{\mathrm{T}}b_2 = 0$。由 $b = b_1 + b_2$ 可得

$$A^{\dagger}b = A^{\dagger}b_1 + A^{\dagger}b_2 = A^{\dagger}b_1 + (A^{\mathrm{T}}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}b_2 = A^{\dagger}b_1$$

同理可证 $A^{\dagger}\tilde{b} = A^{\dagger}\tilde{b}_1$。因此

$$\|\Delta x\|_2 = \|A^{\dagger}b - A^{\dagger}\tilde{b}\|_2 = \|A^{\dagger}(b_1 - \tilde{b}_1)\|_2 \tag{9}$$

$$\leq \|A^{\dagger}\|_2\|b_1 - \tilde{b}_1\|_2 \tag{10}$$

由 $Ax = b_1$ 得

$$\|b_1\|_2 \leq \|A\|_2\|x\|_2 \tag{11}$$

由 (10) 和 (11) 立即得到定理的结论。 □

这个定理告诉我们，在考虑 x 的相差误差时，若 b 有变化，只有它在 $\text{Col}\,(A)$ 上的投影会对解产生影响。此外，这个定理还告诉我们，最小二乘问题之解的敏感性依赖于数 $\kappa_2(A)$ 的大小。因此，我们称它为最小二乘问题的条件数。若 $\kappa_2(A)$ 很大，则称最小二乘问题是病态的；否则称为良态的。

作为本节的结束，我们给出 $\kappa_2(\boldsymbol{A})$ 与方阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的条件数之间的关系。

定理 8

设 $\boldsymbol{A}$ 的列向量线性无关，则 $\kappa_2(\boldsymbol{A})^2 = \kappa(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})$。

证明：

$$\|\boldsymbol{A}\|_2^2 = \lambda_{max}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\|_2,$$
$$\|\boldsymbol{A}^{\dagger}\|_2^2 = \|\boldsymbol{A}^{\dagger}(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{T}}\|_2 = \|(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\|_2$$

于是，有

$$\kappa_2(\boldsymbol{A})^2 = \|\boldsymbol{A}\|_2^2\|\boldsymbol{A}^{\dagger}\|_2^2 = \|\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\|_2\|(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\|_2 = \kappa(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}).$$

刚才我们仅仅考虑了 $\boldsymbol{b}$ 的扰动对最小二乘解的影响问题，而要全面讨论最小二乘问题的敏感性问题，就必须考虑 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 同时都有微小扰动时，最小二乘解将有何变化，而这是一个非常复杂的问题，由于篇幅所限这里将不再进行讨论。

本讲小结

最小二乘问题

- 方阵：满秩和秩亏
- 超定：满秩和秩亏
- 欠定：满秩和秩亏
- 最小二乘解、最小范数解、最小范数解最小二乘解

列满秩超定最小二乘问题的求解方法

- 正规化：Cholosky 分解法
- QR 分解法
- SVD 法
- $\cdots$

此外，我们还讨论了最小二乘问题的一些变体，并分析了最小二乘问题解的敏感性，讨论了输入 b 对解的影响。

对于秩亏超定最小二乘问题的求解方法：列主元的 QR 分解，SVD 方法。对于大型稀疏的最小二乘问题，还可以使用迭代方法。

最小二乘问题的线性无偏估计解释和 l_2 正则化最小二乘变体将在概率和优化部分进行介绍。