$T:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 定义为 $T(\boldsymbol{x})=\mathrm{proj}_W \boldsymbol{x}$，证明 T 是一个线性变换.

23. 设 $A=QR$ 是 $m\times n$ 矩阵 A（含有线性无关列）的一个 QR 分解. 把 A 划分成 $[A_1\ A_2]$，其中 A_1 有 p 列. 说明如何获得 A_1 的一个 QR 分解，并解释为什么这样的分解具有如此性质.

24. [M]像例 2 那样利用格拉姆–施密特方法构造下面矩阵 A 的列空间的正交基.

$$A=\begin{bmatrix}-10 & 13 & 7 & -11\\ 2 & 1 & -5 & 3\\ -6 & 3 & 13 & -3\\ 16 & -16 & -2 & 5\\ 2 & 1 & -5 & -7\end{bmatrix}$$

25. [M]利用本节中的方法给出习题 24 中矩阵 A 的一个 QR 分解.

26. [M]对矩阵程序，格拉姆–施密特方法比单位正交向量更有效. 从定理 11 中的 $\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_p$ 开始，取 $A=[\boldsymbol{x}_1\ \cdots\ \boldsymbol{x}_p]$. 若 $n\times k$ 矩阵 Q 的列构成矩阵 A 的前 k 列所生成的子空间 W_k 的一个标准正交基，那么对于 $\mathbb{R}^n$ 中的向量 $\boldsymbol{x}$，$QQ^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 是 $\boldsymbol{x}$ 在 W_k 上的正交投影(6.3 节定理 10). 如果 $\boldsymbol{x}_{k+1}$ 是 A 的下一列，则定理 11 证明中的方程（2）变成

$$\boldsymbol{v}_{k+1}=\boldsymbol{x}_{k+1}-Q(Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_{k+1})$$

（上面的括号可以减少算术运算.）取 $\boldsymbol{u}_{k+1}=\boldsymbol{v}_{k+1}/\|\boldsymbol{v}_{k+1}\|$，下一个步骤中的新 Q 是 $[Q\ \ \boldsymbol{u}_{k+1}]$. 利用这个步骤，计算习题 24 中矩阵的 QR 分解，写出你所用的键击内容或命令.

练习题答案

1. 设 $\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{x}_1=\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}$ 和 $\boldsymbol{v}_2=\boldsymbol{x}_2-\dfrac{\boldsymbol{x}_2\cdot\boldsymbol{v}_1}{\boldsymbol{v}_1\cdot\boldsymbol{v}_1}\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{x}_2-0\cdot\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{x}_2$，这样 $\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2\}$ 是正交向量，接下来需要将向量单位化. 设

$$\boldsymbol{u}_1=\frac{1}{\|\boldsymbol{v}_1\|}\boldsymbol{v}_1=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1/\sqrt{3}\\1/\sqrt{3}\\1/\sqrt{3}\end{bmatrix}$$

单位化 $\boldsymbol{v}_2'=3\boldsymbol{v}_2$ 代替直接单位化 $\boldsymbol{v}_2$：

$$\boldsymbol{u}_2=\frac{1}{\|\boldsymbol{v}_2'\|}\boldsymbol{v}_2'=\frac{1}{\sqrt{1^2+1^2+(-2)^2}}\begin{bmatrix}1\\1\\-2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1/\sqrt{6}\\1/\sqrt{6}\\-2/\sqrt{6}\end{bmatrix}$$

这样 $\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2\}$ 就是 W 的标准正交基.

2. 由于 A 的列向量是线性相关的，故存在一个非平凡向量 $\boldsymbol{x}$，使得 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$，从而 $QR\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$. 运用 6.2 节的定理 7，有 $\|R\boldsymbol{x}\|=\|QR\boldsymbol{x}\|=\|\boldsymbol{0}\|$. 但 $\|R\boldsymbol{x}\|=\boldsymbol{0}$ 蕴涵 $R\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$，这可由 6.1 节的定理 1 得到. 因此存在一个非平凡向量 $\boldsymbol{x}$，使得 $R\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$，于是由可逆矩阵定理知 R 不是可逆的.

6.5　最小二乘问题

本章的介绍性实例中描述了一个解不存在的巨型方程组 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，实际应用中常出现这类不相容问题，尽管不会出现如此巨大的系数矩阵. 当方程组的解不存在但又需要求解时，最好的方法是寻找 $\boldsymbol{x}$，使得 $A\boldsymbol{x}$ 尽可能接近 $\boldsymbol{b}$.

考虑 $A\boldsymbol{x}$ 作为 $\boldsymbol{b}$ 的一个近似. $\boldsymbol{b}$ 和 $A\boldsymbol{x}$ 之间的距离越小，$\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}\|$ 近似程度越好. **一般的最小二乘问题**就是找出使 $\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}\|$ 尽量小的 $\boldsymbol{x}$，术语“最小二乘”来源于这样的事实，即 $\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}\|$ 是平方和的平方根.

定义 如果 $m\times n$ 矩阵 A 和向量 $\boldsymbol{b}$ 属于 $\mathbb{R}^m$，则 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的**最小二乘解**是 $\mathbb{R}^n$ 中的 $\hat{\boldsymbol{x}}$，使得

$$\|\boldsymbol{b}-A\hat{\boldsymbol{x}}\|\leqslant\|\boldsymbol{b}-A\boldsymbol{x}\|$$

对所有 $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$ 成立.

最小二乘问题最重要的特征是无论怎么选取 $\boldsymbol{x}$，向量 $A\boldsymbol{x}$ 必然属于列空间 $\mathrm{Col}\,A$. 因此我们寻求 $\boldsymbol{x}$，使得 $A\boldsymbol{x}$ 是 $\mathrm{Col}\,A$ 中最接近 $\boldsymbol{b}$ 的点，见图 6-23（当然，如果 $\boldsymbol{b}$ 恰好在 $\mathrm{Col}\,A$ 中，那么对于某个 $\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{b}$ 等于 $A\boldsymbol{x}$，且这样的 $\boldsymbol{x}$ 是一个"最小二乘解"）.

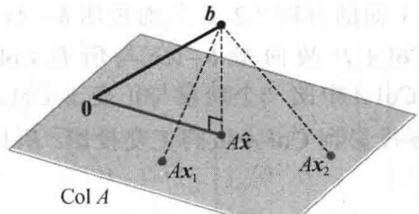

图 6-23 对 $\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{b}$ 与 $A\hat{\boldsymbol{x}}$ 的距离小于与 $A\boldsymbol{x}$ 的距离

一般最小二乘问题的解

对上面给定的 A 和 $\boldsymbol{b}$，应用 6.3 节的最佳逼近定理于子空间 $\mathrm{Col}\,A$. 取

$$\hat{\boldsymbol{b}}=\mathrm{proj}_{\mathrm{Col}\,A}\,\boldsymbol{b}$$

由于 $\hat{\boldsymbol{b}}$ 属于 A 的列空间，故方程 $A\boldsymbol{x}=\hat{\boldsymbol{b}}$ 是相容的且存在一个属于 $\mathbb{R}^n$ 的 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 使得

$$A\hat{\boldsymbol{x}}=\hat{\boldsymbol{b}} \tag{1}$$

由于 $\hat{\boldsymbol{b}}$ 是 $\mathrm{Col}\,A$ 中最接近 $\boldsymbol{b}$ 的点，因此一个向量 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 是 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的一个最小二乘解的充分必要条件是 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 满足（1）. 这个属于 $\mathbb{R}^n$ 的 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 是一系列由 A 的列构造的 $\hat{\boldsymbol{b}}$ 的权，见图 6-24（如果方程（1）有自由变量，则方程（1）会有多个解）.

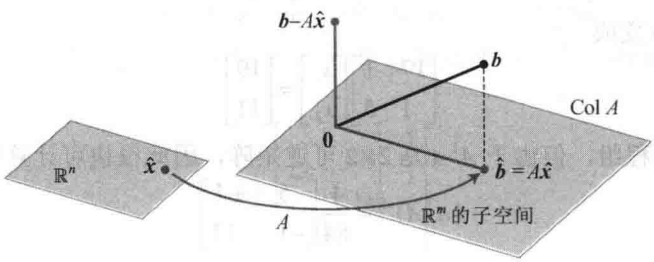

图 6-24 $\mathbb{R}^n$ 中的最小二乘解 $\hat{\boldsymbol{x}}$

若 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 满足 $A\hat{\boldsymbol{x}}=\hat{\boldsymbol{b}}$，则由 6.3 节的正交分解定理，投影 $\hat{\boldsymbol{b}}$ 具有性质 $\boldsymbol{b}-\hat{\boldsymbol{b}}$ 与 $\mathrm{Col}\,A$ 正交，即 $\boldsymbol{b}-A\hat{\boldsymbol{x}}$ 正交于 A 的每一列. 如果 $\boldsymbol{a}_j$ 是 A 的任意列，那么 $\boldsymbol{a}_j\cdot(\boldsymbol{b}-A\hat{\boldsymbol{x}})=0$ 且 $\boldsymbol{a}_j^{\mathrm{T}}\cdot(\boldsymbol{b}-A\hat{\boldsymbol{x}})=0$. 由于每一个 $\boldsymbol{a}_j^{\mathrm{T}}$ 是 A^{T} 的行，因此

$$A^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}-A\hat{\boldsymbol{x}})=\boldsymbol{0} \tag{2}$$

（方程（2）也可由 6.1 节中的定理 3 推出.）故有

$$A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}-A^{\mathrm{T}}A\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{0}$$

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

此计算表明 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的每个最小二乘解满足方程

$$A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x} = A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} \tag{3}$$

矩阵方程（3）表示的线性方程组常称为 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的**法方程**，（3）的解通常用 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 表示.

定理 13　*方程 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解集和法方程 $A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x}=A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 的非空解集一致.*

证　如上所述，最小二乘解集是非空的，且每个最小二乘解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 满足法方程. 相反，假若 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 满足 $A^{\mathrm{T}}A\hat{\boldsymbol{x}}=A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$，那么 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 满足上面的方程（2），从而说明 $\boldsymbol{b}-A\hat{\boldsymbol{x}}$ 与 A^{T} 的行正交，因此与 A 的列正交. 因为 A 的列生成 $\mathrm{Col}\,A$，故向量 $\boldsymbol{b}-A\hat{\boldsymbol{x}}$ 与所有 $\mathrm{Col}\,A$ 的向量正交，因此方程 $\boldsymbol{b}=A\hat{\boldsymbol{x}}+(\boldsymbol{b}-A\hat{\boldsymbol{x}})$ 是将 $\boldsymbol{b}$ 分解成 $\mathrm{Col}\,A$ 中的一个向量与正交于 $\mathrm{Col}\,A$ 的一个向量之和. 根据正交分解的唯一性，$A\hat{\boldsymbol{x}}$ 必须是将 $\boldsymbol{b}$ 投影到 $\mathrm{Col}\,A$ 上的正交投影. 所以，$A\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{b}$ 成立，且 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 是一个最小二乘解. ■

例 1　求不相容方程组 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解，其中

$$A=\begin{bmatrix}4 & 0\\ 0 & 2\\ 1 & 1\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}2\\ 0\\ 11\end{bmatrix}$$

解　利用法方程（3）计算

$$A^{\mathrm{T}}A=\begin{bmatrix}4 & 0 & 1\\ 0 & 2 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4 & 0\\ 0 & 2\\ 1 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}17 & 1\\ 1 & 5\end{bmatrix}$$

$$A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}4 & 0 & 1\\ 0 & 2 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2\\ 0\\ 11\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}19\\ 11\end{bmatrix}$$

那么方程 $A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x}=A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 变成

$$\begin{bmatrix}17 & 1\\ 1 & 5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}19\\ 11\end{bmatrix}$$

行变换可用于解此方程组，但由于 $A^{\mathrm{T}}A$ 是 2×2 可逆矩阵，因此很快可计算出

$$(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}=\frac{1}{84}\begin{bmatrix}5 & -1\\ -1 & 17\end{bmatrix}$$

那么可解 $A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x}=A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 如下：

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{x}}&=(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}\\ &=\frac{1}{84}\begin{bmatrix}5 & -1\\ -1 & 17\end{bmatrix}\begin{bmatrix}19\\ 11\end{bmatrix}=\frac{1}{84}\begin{bmatrix}84\\ 168\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1\\ 2\end{bmatrix}\end{aligned}$$ ■

在许多计算中，$A^{\mathrm{T}}A$ 是可逆的，但并不总是这样. 下面例子中的矩阵出现于统计学中的方差分析问题中.

例 2　求 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解，其中

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

解 计算

$$A^{\mathrm{T}}A=\begin{bmatrix}1&1&1&1&1&1\\1&1&0&0&0&0\\0&0&1&1&0&0\\0&0&0&0&1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&1&0&0\\1&1&0&0\\1&0&1&0\\1&0&1&0\\1&0&0&1\\1&0&0&1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}6&2&2&2\\2&2&0&0\\2&0&2&0\\2&0&0&2\end{bmatrix}$$

$$A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1&1&1&1&1&1\\1&1&0&0&0&0\\0&0&1&1&0&0\\0&0&0&0&1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-3\\-1\\0\\2\\5\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}4\\-4\\2\\6\end{bmatrix}$$

矩阵方程 $A^{\mathrm{T}}A\boldsymbol{x}=A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 的增广矩阵是

$$\begin{bmatrix}6&2&2&2&4\\2&2&0&0&-4\\2&0&2&0&2\\2&0&0&2&6\end{bmatrix}\sim\begin{bmatrix}1&0&0&1&3\\0&1&0&-1&-5\\0&0&1&-1&-2\\0&0&0&0&0\end{bmatrix}$$

通解是 $x_1=3-x_4$，$x_2=-5+x_4$，$x_3=-2+x_4$，x_4 是自由变量. 所以，$A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘通解具有下面形式：

$$\hat{\boldsymbol{x}}=\begin{bmatrix}3\\-5\\-2\\0\end{bmatrix}+x_4\begin{bmatrix}-1\\1\\1\\1\end{bmatrix}$$

■

下面的定理给出判定准则：在什么条件下，方程 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解是唯一的.（当然，正交投影 $\hat{\boldsymbol{b}}$ 总是唯一的.）

定理 14 设 A 是 $m\times n$ 矩阵. 下面的条件是逻辑等价的：

a）对于 $\mathbb{R}^m$ 中的每个 $\boldsymbol{b}$，方程 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 有唯一最小二乘解.

b）A 的列是线性无关的.

c）矩阵 $A^{\mathrm{T}}A$ 是可逆的.

当这些条件成立时，最小二乘解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 有下面的表示：

$$\hat{\boldsymbol{x}}=(A^{\mathrm{T}}A)^{-1}A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} \tag{4}$$

定理 14 证明的主要部分在习题 19~21 中给出，证明的同时也复习了第 4 章的概念. 用公式（4）计算 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 的方法主要具有理论意义，当 $A^{\mathrm{T}}A$ 是 2×2 可逆矩阵时可用手工计算.

当最小二乘解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 用于产生 $\boldsymbol{b}$ 的近似 $A\hat{\boldsymbol{x}}$ 时，从 $\boldsymbol{b}$ 到 $A\hat{\boldsymbol{x}}$ 的距离称为这个近似的**最小二乘误差**.

例 3　如例 1 给出的 A 和 $\boldsymbol{b}$，确定 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 最小二乘解的最小二乘误差.

解　从例 1 可知，

$$\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}2\\0\\11\end{bmatrix},\quad A\hat{\boldsymbol{x}}=\begin{bmatrix}4&0\\0&2\\1&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}4\\4\\3\end{bmatrix}$$

因此

$$\boldsymbol{b}-A\hat{\boldsymbol{x}}=\begin{bmatrix}2\\0\\11\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}4\\4\\3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2\\-4\\8\end{bmatrix}$$

$$\|\boldsymbol{b}-A\hat{\boldsymbol{x}}\|=\sqrt{(-2)^2+(-4)^2+8^2}=\sqrt{84}$$

最小二乘误差是 $\sqrt{84}$. 对任意属于 $\mathbb{R}^2$ 的 $\boldsymbol{x}$，从 $\boldsymbol{b}$ 到向量 $A\boldsymbol{x}$ 的最小距离是 $\sqrt{84}$，见图 6-25. 注意最小二乘解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 自身并没有在图中出现.

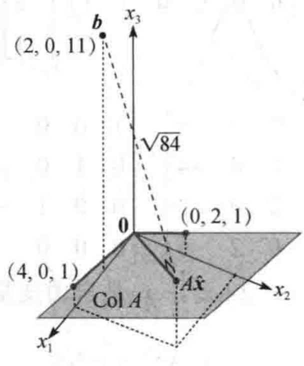

图　6-25　■

最小二乘解的另一个计算

下面的例子表明，当 A 的列向量正交时，如何求出 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解. 这类矩阵常出现在下节要讨论的线性回归问题中.

例 4　求出 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解，其中

$$A=\begin{bmatrix}1&-6\\1&-2\\1&1\\1&7\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}-1\\2\\1\\6\end{bmatrix}$$

解　由于 A 的列 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 相互正交，因此 $\boldsymbol{b}$ 在 Col A 上的正交投影如下：

$$\hat{\boldsymbol{b}}=\frac{\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a}_1}{\boldsymbol{a}_1\cdot\boldsymbol{a}_1}\cdot\boldsymbol{a}_1+\frac{\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{a}_2\cdot\boldsymbol{a}_2}\cdot\boldsymbol{a}_2=\frac{8}{4}\boldsymbol{a}_1+\frac{45}{90}\boldsymbol{a}_2 \tag{5}$$

$$=\begin{bmatrix}2\\2\\2\\2\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}-3\\-1\\1/2\\7/2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-1\\1\\5/2\\11/2\end{bmatrix}$$

既然 $\hat{\boldsymbol{b}}$ 已知，我们可以解 $A\hat{\boldsymbol{x}}=\hat{\boldsymbol{b}}$．这个很容易，因为我们已经知道 $\hat{\boldsymbol{b}}$ 用 A 的列线性表示时的权．从（5）立刻得到

$$\hat{\boldsymbol{x}}=\begin{bmatrix}8/4\\45/90\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2\\1/2\end{bmatrix}$$ ■

某些时候，最小二乘解问题的法方程可能是病态的，也就是 $A^{\mathrm{T}}A$ 的元素在计算中出现的小误差有时可导致解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 中出现较大的误差．如果 A 的列线性无关，则最小二乘解常常可通过 A 的 QR 分解更可靠地求出（见 6.4 节的描述）．[⊖]

定理 15 给定一个 $m\times n$ 矩阵 A，它具有线性无关的列，取 $A=QR$ 是 A 类似定理 12 的 QR 分解，那么对每一个属于 $\mathbb{R}^m$ 的 $\boldsymbol{b}$，方程 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 有唯一的最小二乘解，其解为

$$\hat{\boldsymbol{x}}=R^{-1}Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} \tag{6}$$

证 取 $\hat{\boldsymbol{x}}=R^{-1}Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$，那么 $A\hat{\boldsymbol{x}}=QR\hat{\boldsymbol{x}}=QRR^{-1}Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}=QQ^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$．

由定理 12，Q 的列形成 $\mathrm{Col}\,A$ 的标准正交基，因此，由定理 10，$QQ^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 是 $\boldsymbol{b}$ 在 $\mathrm{Col}\,A$ 上的正交投影 $\hat{\boldsymbol{b}}$，那么 $A\hat{\boldsymbol{x}}=\hat{\boldsymbol{b}}$ 说明 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 是 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解．$\hat{\boldsymbol{x}}$ 的唯一性可从定理 14 得出． ■

数值计算的注解 由于定理 15 中的 R 是上三角形矩阵，故 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 可从方程

$$R\boldsymbol{x}=Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} \tag{7}$$

计算得到．求解方程（7）时，通过回代过程或行变换比利用（6）计算 R^{-1} 更快．

例 5 求出 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解，其中

$$A=\begin{bmatrix}1&3&5\\1&1&0\\1&1&2\\1&3&3\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}3\\5\\7\\-3\end{bmatrix}$$

解 利用 6.4 节可得 A 的 QR 分解．

$$A=QR=\begin{bmatrix}1/2&1/2&1/2\\1/2&-1/2&-1/2\\1/2&-1/2&1/2\\1/2&1/2&-1/2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&4&5\\0&2&3\\0&0&2\end{bmatrix}$$

⊖ 在 G. Golub and C. Van Loan, *Matrix Computations*, 3rd ed.(Baltimore: Johns Hopkins Press,1996), pp. 230-231 中给出 QR 分解方法和标准法方程方法的比较.

那么

$$Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1/2 & 1/2 & 1/2 & 1/2\\ 1/2 & -1/2 & -1/2 & 1/2\\ 1/2 & -1/2 & 1/2 & -1/2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3\\5\\7\\-3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}6\\-6\\4\end{bmatrix}$$

满足 $R\boldsymbol{x}=Q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解是 $\hat{\boldsymbol{x}}$，也就是说，

$$\begin{bmatrix}2 & 4 & 5\\ 0 & 2 & 3\\ 0 & 0 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\\x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}6\\-6\\4\end{bmatrix}$$

这个方程很容易解出，得 $\hat{\boldsymbol{x}}=\begin{bmatrix}10\\-6\\2\end{bmatrix}$. ■

练习题

1. 令 $A=\begin{bmatrix}1 & -3 & -3\\ 1 & 5 & 1\\ 1 & 7 & 2\end{bmatrix}$ 和 $\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}5\\-3\\-5\end{bmatrix}$，求 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的一个最小二乘解，并且计算最小二乘解的误差.

2. 当 $\boldsymbol{b}$ 与 A 的列正交时，对 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解，你可得出什么结论？

习题 6.5

在习题 1~4 中，求 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解.

(a) 通过构造法方程求 $\hat{\boldsymbol{x}}$，(b) 直接解 $\hat{\boldsymbol{x}}$.

1. $A=\begin{bmatrix}-1 & 2\\ 2 & -3\\ -1 & 3\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}4\\1\\2\end{bmatrix}$

2. $A=\begin{bmatrix}2 & 1\\ -2 & 0\\ 2 & 3\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}-5\\8\\1\end{bmatrix}$

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

4. $A=\begin{bmatrix}1 & 3\\ 1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}5\\1\\0\end{bmatrix}$

在习题 5~6 中，求方程 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的所有最小二乘解.

5. $A=\begin{bmatrix}1 & 1 & 0\\ 1 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 1\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\3\\8\\2\end{bmatrix}$

6. $A=\begin{bmatrix}1 & 1 & 0\\ 1 & 1 & 0\\ 1 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 1\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}7\\2\\3\\6\\5\\4\end{bmatrix}$

7. 计算习题 3 中与最小二乘解相关的最小二乘误差.

8. 计算习题 4 中与最小二乘解相关的最小二乘误差.

在习题 9~12 中，求：(a) $\boldsymbol{b}$ 在 Col A 上的正交投影，(b) $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解.