第 16 课 投影矩阵和最小二乘法

> 本章将深入研究**投影矩阵**，同时对上一课最后引出的**最小二乘法**做进一步地讲解。最后引出**标准正交向量组**等概念。

投影矩阵

上一章已经介绍过**投影矩阵** $P=A(A^TA)^{-1}A^T$。我们知道，**投影矩阵 P 与向量 b 相乘将会把 b 投影到 A 的列空间中**。那么现在我们来考虑两个极端的例子，这两个极端的例子将会加深我们对投影矩阵的理解。

- **如果 b 在矩阵 A 的列空间里，那么 $Pb=b$**

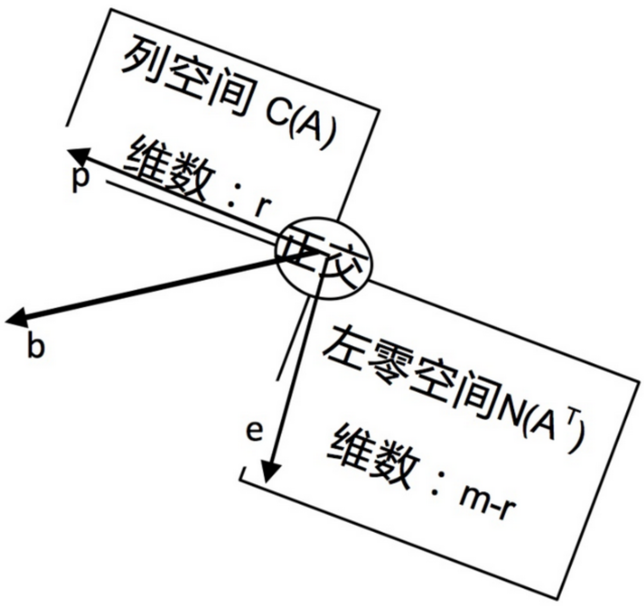
$$\text{证明：如果}b\text{在矩阵}A\text{的列空间里，那么必然有}Ax=b$$
$$Pb=A(A^TA)^{-1}A^Tb=A(A^TA)^{-1}A^TAx=AIx=Ax=b$$

- **如果 b 垂直于矩阵 A 的列空间，那么 $Pb=0$**

$$\text{证明：}b\text{垂直于}A\text{的列空间，根据正交补的概念}$$
$$\text{可知}b\text{是左零空间中的向量}$$
$$\therefore A^Tb=0$$
$$\therefore Pb=A(A^TA)^{-1}A^Tb=A(A^TA)^{-1}0=0$$

通过上面两个极端的例子，我们可以看出来，**向量 b 总可以分为两个分量，一个分量在 A 的列空间中，另一个分量垂直于 A 的列空间（也即在 A 的左零空间中）**。而**上述投影矩阵的作用就是保留列空间中的分量 p，去掉左零空间中的分量 e。**

可以通过一幅图来表示这个关系：

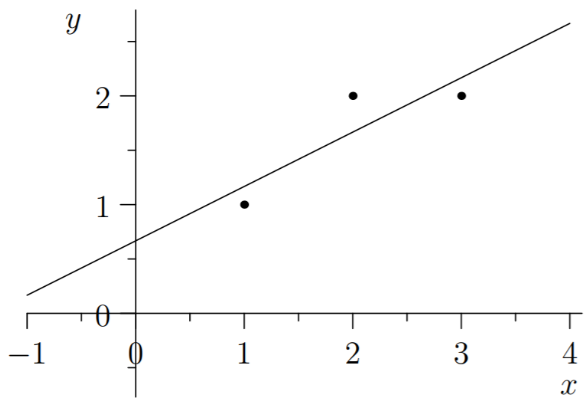


P 把 b 投影到 A 的列空间上得到 p。那么，是否存在另外一个投影矩阵把 b 投影到 A 的左零空间上得到 e 呢？**由** $b=e+p$，$p=Pb$ **可得** $e=b-p=b-Pb=(I-P)b$**。这里的 $I-P$ 就是 A 的左零空间上的投影矩阵，它具有和 P 一样的性质（对称性与平方不变性）。**

最小二乘法

回到上一讲最后我们提到的关于最小二乘法的例题：

没有直线能经过图中的三个点，所以我们需要找到一条最优的直线 $y = C + Dx$ 来拟合图中的三个点，这里的最优指的是该直线距离图中三个点 $(1,1)$ $(2,2)$ $(3,2)$ 的总误差最小!



根据以上条件可以得到方程组 $\begin{cases} C+D &= 1 \\ C+2D &= 2 \\ C+3D &= 2 \end{cases}$，写作矩阵形式有 $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}$，也就是我们的 $Ax = b$，显然该方程组无解。

在寻求最优解之前，我们需要先定义总误差是什么，因为总误差能够衡量直线是否是更优的，定义了总误差我们才能通过最小化这个量，来找到最好的 C 和 D（也即最优的直线）。

这里，我们定义误差为 $A\hat{x} - b = e$ 的模长的平方来作为误差，也即 $\|A\hat{x} - b\|^2 = \|e\|^2 = e_1^2 + e_2^2 + e_3^2$，我们要求其最小平方和（也即最小二乘）。

- 利用微积分的偏导来求最优解

  将误差展开用 C 和 D 的二元函数如下:

$$\begin{aligned} \|e\|^2 &= e_1^2 + e_2^2 + e_3^2 \\ &= (C+D-1)^2 + (C+2D-2)^2 + (C+3D-2)^2 \\ &= 3C^2 + 14D^2 + 9 - 10C - 22D + 12CD \end{aligned}$$

  误差对 C 求偏导为 $6C - 10 + 12D = 0$，说明单看 C 的话，随着 C 的增长，总误差的斜率先为负数后为正数，也即总误差先下降后上升。误差对 D 求偏导为 $28D - 22 + 12C = 0$，说明单看 D 的话，随着 D 的增长，总误差的斜率先为负数后为正数，也即总误差先下降后上升。因此，总误差的驻点显然也即总误差的最小值（最优值）

  求解方程组 $\begin{cases} 3C - 5 + 6D = 0 \\ 14D - 11 + 6C = 0 \end{cases}$ 得 $\hat{C} = \frac{2}{3}, \hat{D} = \frac{1}{2}$，因此最优直线为 $y = \frac{2}{3} + \frac{1}{2}x$，代入 x 可求得 $p_1 = \frac{7}{6}, p_2 = \frac{5}{3}, p_3 = \frac{13}{6}$，自然 $e_1 = -\frac{1}{6}, e_2 = \frac{1}{3}, e_3 = -\frac{1}{6}$。

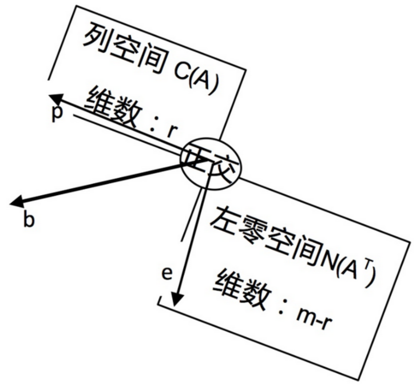
  于是我们得到 $p = \begin{bmatrix} \frac{7}{6} \\ \frac{5}{3} \\ \frac{13}{6} \end{bmatrix}, e = \begin{bmatrix} -\frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{6} \end{bmatrix}$，易看出 $b = p + e$，且 $p^T e = 0$（也即 $p \perp e$）。

$$p^T e = \frac{7}{6} \cdot (-\frac{1}{6}) + \frac{5}{3} \cdot \frac{1}{3} + \frac{13}{6} \cdot (-\frac{1}{6}) = 0$$
$$e^T a_1 = -\frac{1}{6} \cdot 1 + \frac{1}{3} \cdot 1 + (-\frac{1}{6}) \cdot 1 = 0$$
$$e^T a_1 = -\frac{1}{6} \cdot 1 + \frac{1}{3} \cdot 2 + (-\frac{1}{6}) \cdot 3 = 0$$

  综上可知，我们所求得的误差向量 e 确实垂直于整个列空间，如 $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$（投影向量 p 也在 A 的列空间中）。

- 利用线性代数的投影来求最优解

  为了方便理解，我们需要再次搬出这张图：



  $A\hat{x}$ 也即 A 的列空间中的向量，那么 $A\hat{x}-b$ 就表示了将列空间中的向量与 b 相减，相减所得的向量，或许垂直于列空间，或许不垂直与列空间。

  但注意到，只有在相减所得的向量垂直于列空间的时候，$A\hat{x}-b$ 其模长的平方才最小，这也即让 b 对列空间做投影，投影所得向量 Pb 才是列空间中距离 b 最近的向量。此时求解 $A\hat{x}=Pb$ 所得的 $\hat{x}$ 即为最优解！

$$A\hat{x}=Pb=A(A^TA)^{-1}A^Tb$$
$$\text{方程两边同乘以}A^T\text{有：}A^TA\hat{x}=A^TA(A^TA)^{-1}A^Tb=IA^Tb=A^Tb$$
$$\text{整理有：}A^TA\hat{x}=A^Tb$$
$$\text{易得}A^TA=\begin{bmatrix}3&6\\6&14\end{bmatrix},A^Tb=\begin{bmatrix}5\\11\end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix}3&6\\6&14\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{C}\\\hat{D}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5\\11\end{bmatrix}$$

  写成方程组形式为 $\begin{cases}3\hat{C}+16\hat{D}&=5\\6\hat{C}+14\hat{D}&=11\end{cases}$，也称其为 $\text{正规方程组（}normal\ equations\text{）}$。

  注意到该正规方程组正是先前求偏导所得的方程组。故所求得的结果也都是一样的：$\hat{C}=\frac{2}{3},\hat{D}=\frac{1}{2}$。

我们现在所做的运算实际上也称为 $\text{线性回归（}linear\ regression\text{）}$。

此外，还需要补充说明一点，如果在上述例题中，还有另外一个点如 $(0,100)$，那么最小二乘法就很容易被这个明显离群的值影响，通常使用最小二乘的时候要先去除掉明显离群的点！

标准正交向量组

有一种线性无关的情况是比较特殊的：**互相垂直的各列一定是线性无关的。**

更特殊地，我们会要求互相垂直的单位向量（**标准正交**），比如 $\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix},\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix},\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}$，这些向量所组成的向量组一般被称为标准正交向量组，**标准正交向量组中的向量互相垂直（正交）且为单位向量（标准）**！

同样的标准正交向量组还有：$\begin{bmatrix}\cos\theta\\\sin\theta\end{bmatrix},\begin{bmatrix}-\sin\theta\\\cos\theta\end{bmatrix}$。