线性代数

-16 课　投影矩阵和最小二乘

一、知识概要

这一节主要在讲最小二乘法，并对上一节中的投影概念进行了深入研究，其实最小二乘法就是一种投影，最后保证了误差最小。另外，这里还牵涉到了矩阵列空间与矩阵左零空间的问题，向量的投影其实就是投在列空间中的最近一点，这也与最小二乘法联系了起来。最后引申了标准正交向量组的问题。

二．投影矩阵回顾

上一节中介绍过投影矩阵 P，即：

$$P = A(A^TA)^{-1}A^T。$$

记得上一节推导这个公式时，$A = [a_1 \quad a_2]$，其中的a_1，a_2是平面上的两个基，而 A 的列空间就是整个空间R^2。

所以，投影矩阵 P 与一向量 b 的乘积可以理解为：**将 b 向量投影到它在列空间中的最近一点上，**类似于上节课中，将 p 投影到平面上的过程。

那么这样两个问题的答案就很明显了：

（1）　如果 b 在矩阵 A 的列空间里，则 Pb ＝ ？

此时 Pb ＝ b，因为 b 本身就在 A 列空间中，类似于上节课中，b 就在平面上的情况，此时投影就是 b 本身。

【证明】：

- b 在 A 的列空间里，就一定可以写成：Ax ＝ b。
- 代入投影矩阵，$A(A^TA)^{-1}A^TAx = Ax = b$
- 得到答案，此时投影仍然为 b。

（2）如果 b 垂直于 A 的列空间，则 Pb ＝ ？

此时 Pb ＝ 0，此时没有投影，例如：上节课一个向量和一个平面情况中，向量与平面正好垂直穿过的情况。这个时候向量 b 在平面上没有分量，投影也就是 0。

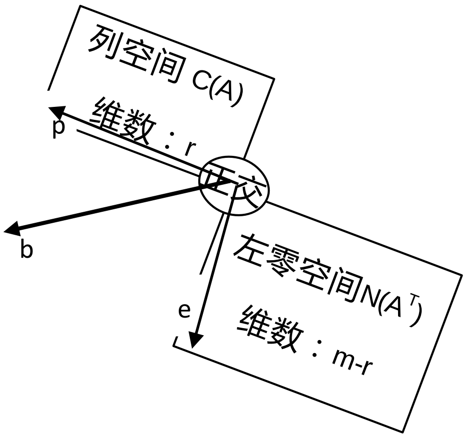
【证明】：

- b 垂直于 A 的列空间，也就垂直于 A 的所有列向量，故 b 在左零空间中。
- 代入投影矩阵，$A(A^TA)^{-1}A^T b$，由 $A^T b = 0$，化简。
- 得到答案，结果为 0。

通过上面两个问题，我们可以看出来，一个向量 b 总有两个分量，一个分量在 A 的列空间中，另一个分量垂直于 A 的列空间。而投影矩阵的作用就是保留列空间中的那个分量，拿掉垂直于列空间的分量。

可以通过一幅图来表示这个关系：

图中： b = p + e



p 就是投影矩阵作用于 b 上得到的向量，而 e 这个左零空间中的分量，如果也用类似投影矩阵来表示的话，就是：

$$p = Pb$$

$$e = b - p = b - Pb = (I - P)b$$

可以把(I-P)也看做一个投影矩阵，作用于 b 向量，投到左零空间中。

三、最小二乘法

3.1 最小二乘解题

还是上节课的例子，这节中我们继续探讨。

【例】

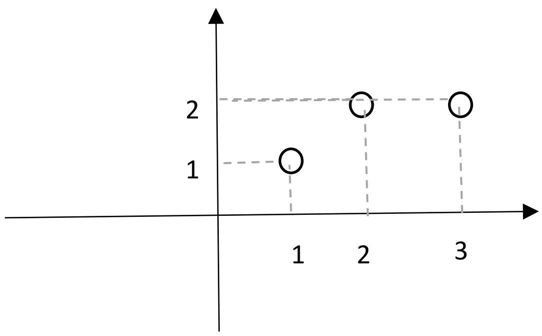
求解：三个点（1，1），（2,2），（3，2）拟合的直线方程

讲解：

- 我们假设最优直线方程：y = C+Dx，代入三个点列出方程。

$$\begin{cases} C + D = 1 \\ C + 2D = 2 \\ C + 3D = 2 \end{cases} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} (Ax = b)$$

很明显，这个方程无解，这三点根本不共线。示意图如下：



回到方程本身：$\begin{bmatrix}1 & 1\\1 & 2\\1 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C\\D\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\\2\\2\end{bmatrix}$，这是个 Ax = b 形式的方程。

• 那么既然无法共线，先找它的误差，很明显，可以先得到直线与各点之间的误差（偏移量）：

$$|Ax - b|$$

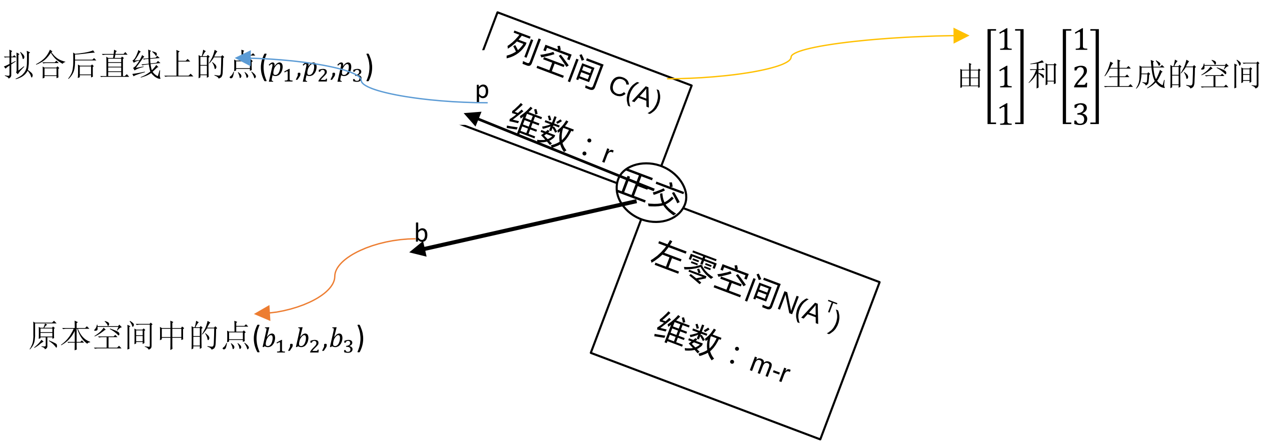
为了便于计算，研究它们的平方和：

$$|e|^2 = |Ax - b|^2$$

将这些偏移量反映在图像上：（以（1,1）点为例）

其中的 b 代表着该点真实位置，e 代表着偏移量，p 代表着拟合后的位置。

反映到刚刚学过的图像上：



本质就是将 b 投影到 A 列空间中，用还记得上面说过，投影意义是**将 b 向量投影到它在列空间中的最近一点上。**也就是说，这个过程是将三个点投到满足方程条件的最近的一条直线上去。

• 接下来关键在于如何拟合：

使用上节课中我们介绍的方程：

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

对应方程：$\begin{bmatrix}1 & 1\\1 & 2\\1 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C\\D\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\\2\\2\end{bmatrix}$，其中 A = $\begin{bmatrix}1 & 1\\1 & 2\\1 & 3\end{bmatrix}$，$\hat{x} = \begin{bmatrix}\hat{C}\\\hat{D}\end{bmatrix}$，b = $\begin{bmatrix}1\\2\\2\end{bmatrix}$。

代入方程，解得：

$$\hat{C} = 2/3，\hat{D} = 1/2$$

得到的直线即为：y = $\hat{C}+\hat{D}$x = 2/3 + 1/2x

• 检验：分别将(1，1)，(2,2)，(3，2)三个点的横坐标代入，可以得到拟合直线上各点对应位置，即是 p 的位置。

注：以上能使用最小二乘法是因为没有误差过大的量。

3.2 性质讨论

上面这个问题还可以用误差最小来计算，将误差化为：

$$|e_1|^2 + |e_2|^2 + |e_3|^2 = (C+D-1)^2 + \cdots\cdots\cdots$$

求偏导，求极值，从导数的角度也可以求得拟合直线。

我们将误差向量记为 e，对应的投影向量记为 P（对应为拟合直线上的 y 值）

于是有：b = p+e（ b 为给定的点的实际 y 值）

$$b = \begin{bmatrix}1\\2\\2\end{bmatrix},\ p = \begin{bmatrix}7/6\\10/6\\13/6\end{bmatrix},\ e = \begin{bmatrix}-1/6\\2/6\\-1/6\end{bmatrix}$$

得到如下性质：

• 误差向量与投影向量 p 垂直（二者点乘为 0 ）

• 误差向量不仅仅垂直于 p，它还垂直于列空间中的每一个向量

这些性质也印证了我们在上文关于投影的介绍。

3.3 结论证明

在我们解方程的过程中，用到了这样一个结论：

如果矩阵 A 各列线性无关，则矩阵A^TA 可逆。

这个结论我们之前给出过，但是没证明，接下来我们给出它的证明，来结束最小二乘法这部分内容。

证明：

写出零空间方程形式：$A^TAx = 0$，寻找零空间内的向量。

引入之前几节的结论：

- 如果矩阵可逆，则其对应的零空间仅为零向量。
- x^Tx对应是在求 x 的长度（x 是列向量）
- 如果$x^Tx = 0$，则 x = 0（x 是列向量）

于是，下面只要证明 x 向量必为零向量。

首先将方程两边同时乘上x^T

$$x^TA^TAx = 0$$

$$(Ax)^TAx = 0$$

可推得：

$$Ax = 0$$

因为 A 各列线性无关，所以也就推得了 x 必为零向量。

综上即证得：

$$A^TA\text{可逆}$$

也就得到了我们的结论：

如果矩阵 A 各列线性无关，则矩阵A^TA 可逆。

四、标准正交基

这部分是引出下节的部分，内容较少，了解即可。

之前见过$\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$，$\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}$这组基，它们显然是正交的，但是它们还有更特殊的性质，即它们都是单位向量，长度为 1。所以这里我们引入一个新名词：标准正交向量组，其中的“标准”表示单位向量。

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

五. 学习感悟

这部分内容互相关联较多，最小二乘法与投影矩阵两者有着千丝万缕的联系，可以从多个角度来理解，但是最重要的还是记住那张将向量投影到列空间与左零空间的图，它能帮我们将这部分知识记得更牢。