Chapter 1

正交射影和最小二乘法

1.1 内积和转置

Exercise 1.1.1

- 任给两个正数 x 和 y, 作向量 $b = (\sqrt{x}, \sqrt{y})$, 并取 $a = (\sqrt{y}, \sqrt{x})$. 利用 Schwarz 不等式比较 x 和 y 的算术平均值与它们的几何平均值的大小.

- 设我们有一个从原点到点 x 的向量, 再加上一个由 x 出发长度为 $||y||$ 的向量 $x+y$, 三角形的第三边直接由原点到 $x+y$ 连结而成, 三角不等式断言, 这个距离不大于前两者之和:

  $$||x+y|| \leq ||x|| + ||y||$$

  两边平方之后进行化简，由此推出 Schwarz 不等式.

Solution 1.1.1

- 由 Schwarz 不等式,

  $$b \cdot a = \sqrt{x}\sqrt{y} + \sqrt{y}\sqrt{x} \leq \sqrt{x+y}\sqrt{x+y} = ||b|| \cdot ||a||,$$

  所以

  $$\sqrt{xy} \leq \frac{x+y}{2}.$$

- $||x+y||^2 = x^2 + y^2 + 2x \cdot y \leq (||x|| + ||y||)^2 = x^2 + y^2 + 2||x|| \cdot ||y||$. 所以 $x \cdot y \leq ||x|| \cdot ||y||$.

Exercise 1.1.2

对图 3.3 中的三角形 Obp, 使用 (5) 式来求 bp 的长度, 从而验证勾股定理.

Solution 1.1.2
略.

Exercise 1.1.3
在连接原点与 $a = (1, 1, 1)$ 的射线上求一点 p, 使之距点 $b = (2, 4, 4)$ 最近. 同样地. 在过 b 的射线上求距 a 最近的点.

Solution 1.1.3

- $p = \frac{ab^T}{aa^T}a = (\frac{10}{3}, \frac{10}{3}, \frac{10}{3})$.
- $\frac{ab^T}{bb^T}b = (\frac{5}{9}, \frac{10}{9}, \frac{10}{9})$.

Exercise 1.1.4
解释一下为什么当 a, b 同时在一条过原点的直线上, 且仅在这种情况下,Schwarz 不等式成为等式. 如果它们分别位于原点的两边又如何?

Solution 1.1.4
略.

Exercise 1.1.5
在 n 维空间中, 向量 $(1, 1, \cdots, 1)$ 与各个坐标轴的夹角是什么?

Solution 1.1.5
$\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{n}}$. 所以 $\theta = \arccos\frac{1}{\sqrt{n}}$.

Exercise 1.1.6
如果把 a 和 b 事先化为单位向量的话,Schwarz 不等式还有另一个证明:

$$|a^Tb| = \left|\sum a_ib_i\right| \leq \sum |a_ib_i| \leq \sum \frac{a_i^2 + b_i^2}{2} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 = |a||b|$$

请验证中间的步骤.

Solution 1.1.6
略.

Exercise 1.1.7
通过把 $AA^{-1} = I$ 转置, 我们发现逆矩阵的转置等于转置的逆矩阵:$(A^{-1})^T = (A^T)^{-1}$. 证明: 若 A 对称, 则 A^{-1} 也是对称的.

Solution 1.1.7
当 A 是对称矩阵时,$(A^{-1})^T = (A^T)^{-1} = A^{-1}$. 所以 A^{-1} 也是对称矩阵.

Exercise 1.1.8
构造 2×2 对称矩阵 A 和 B, 使得它们的乘积不是对称的. 注意若 A 和 B 可交换, 则乘积仍是对称的.$(AB)^T = B^T A^T = BA = AB$.

Solution 1.1.8

$$\begin{pmatrix}1 & 2\\ 2 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -1\\ -1 & 2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-1 & 3\\ 1 & 0\end{pmatrix}.$$

Exercise 1.1.9
若 A 的秩为 r, 则矩阵 A^T(行秩 = 列秩),A^TA(由 3F) 和 AA^T(3F 应用于 A^T) 的秩也都是 r. 给出一个例子来说明即使当 A^TA 是可逆的,AA^T 完全可能不是可逆的.

Solution 1.1.9
反例: 令 $A = \begin{pmatrix}1 & 2\\ -1 & -2\\ 1 & -1\end{pmatrix}$. 则

$$A^TA = \begin{pmatrix}1 & -1 & 1\\ 2 & -2 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2\\ -1 & -2\\ 1 & -1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}3 & 3\\ 3 & 9\end{pmatrix},$$

该矩阵可逆.

$$AA^T = \begin{pmatrix}1 & 2\\ -1 & -2\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & -1 & 1\\ 2 & -2 & -1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}5 & -5 & -1\\ -5 & 5 & 1\\ -1 & 1 & 2\end{pmatrix}.$$

该矩阵不可逆. 事实上, 只要矩阵 A 的行数大于列数, 且矩阵 A 是列满秩矩阵, 构造出来的都是反例.

Exercise 1.1.10
甲烷分子排列成如下形式：碳原子位于一个正四面体的中心, 而四个氢原子位于顶点上. 如果顶点位于 $(0,0,0)$,$(1,1,0)$,$(1,0,1)$,$(0,1,1)$——注意所有的 6 条棱的棱长都等于 $\sqrt{2}$, 所以四面体是正四面体. 那么, 过中心 $(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$ 和顶点的连线之间的夹角是多少？

Solution 1.1.10
略.

1.2 到子空间上的射影和最小二乘逼近

Exercise 1.2.1
假设我们在四个不同的场合观察一个病人的重量, 其结果是 $b_1 = 150, b_2 = 153, b_3 = 150, b_4 = 151$, 问在最小二乘意义下, 我们可认定的体重最佳值是多少?

Solution 1.2.1
即求方程组

$$\begin{cases} x = 150 \\ x = 153 \\ x = 150 \\ x = 151 \end{cases}$$

的最小二乘解. 即求方程组

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 150 \\ 153 \\ 150 \\ 151 \end{pmatrix}$$

的最小二乘解. 该方程组的最小二乘解为

$$\overline{x} = \frac{150 \cdot 1 + 153 \cdot 1 + 150 \cdot 1 + 151 \cdot 1}{1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2} = 150.5.$$

Exercise 1.2.2
对 $3x = 10, 4x = 5$ 求最小二乘解.

Solution 1.2.2
即求线性方程组

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 10 \\ 5 \end{pmatrix}$$

的最小二乘解. 为

$$\overline{x} = \frac{10 \times 3 + 5 \times 4}{3^2 + 4^2} = 2.$$

Exercise 1.2.3
使用正规方程, 求下列不相容方程组在最小二乘意义下的最佳解:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

同样地, 求解方程组 $x = 1, x = 3, x = 5$ 或

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} (x) = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix}.$$

Solution 1.2.3

- $$\overline{x}=(A^TA)^{-1}A^Tb=\begin{pmatrix}\frac{2}{3} & -\frac{1}{3}\\ \frac{-1}{3} & \frac{2}{3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{3}\\ \frac{1}{3}\end{pmatrix}.$$

- $\overline{x}=(A^TA)^{-1}A^Tb=\frac{1}{3}(1,1,1)\begin{pmatrix}1\\3\\5\end{pmatrix}=\frac{1+3+5}{3}=3.$

Exercise 1.2.4

- 令 $A=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix},x=\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix},b=\begin{pmatrix}1\\3\\4\end{pmatrix}$. 记 $E^2=||Ax-b||^2$, 且令它关于 u,v 的导数趋于零, 比较一下所得方程与 $A^TA\overline{x}=A^Tb$, 从而证实微积分与几何一样可用来推导正规方程. 这些方程直接来源于 E^2 的极小化.
- 求出解 $\overline{x}$ 以及 b 在列空间上的射影 $p=A\overline{x}$.
- 验证 $b-p$ 垂直于 A 的列空间.

Solution 1.2.4

对此题的具体求解略. 更一般的探讨请见我的博文利用微分法推导最小二乘的正规方程

Exercise 1.2.5

设给定三维空间的子空间 S 的一组基 u_1,u_2, 以及 S 之外的一个向量 b:

$$u_1=\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix},u_2=\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix},b=\begin{pmatrix}0\\2\\1\end{pmatrix}$$

通过构造一个以 u_1,u_2 为列向量组的矩阵 A, 求出关于子空间 S 的射影矩阵 P. 计算 b 到 S 上的射影和它在正交补 $S^{\perp}$ 上的射影.

Solution 1.2.5

$$A=\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}.$$

$$P=A(A^TA)^{-1}A^T=\begin{pmatrix}\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3}\\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{-1}{3}\\ \frac{1}{3} & \frac{-1}{3} & \frac{2}{3}\end{pmatrix}.$$

b 到 S 上的射影为

$$Pb=\begin{pmatrix}\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3}\\ \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{-1}{3}\\ \frac{1}{3} & \frac{-1}{3} & \frac{2}{3}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\2\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}.$$

b 在正交补 $S^{\perp}$ 上的射影为 $b - Pb = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Exercise 1.2.6
证明若 P 是一个射影矩阵, 使得它有性质 (1) 和 (2), 则 $I - P$ 也有这些性质.

Solution 1.2.6

$$(I-P)^2 = (I-P)(I-P) = I - P - P + P^2 = 1 - P - P + P = 1 - P.$$

$$(I-P)^T = I^T - P^T = I - P.$$

Exercise 1.2.7
若 P 是到 $x - y$ 平面内一条直线上的射影, 画一个图来描述"反射矩阵" $H = I - 2P$ 的作用. 从几何和代数上分别解释为什么 $H^2 = I$.

Solution 1.2.7
从代数上解释,

$$(I-2P)^2 = (I-2P)(I-2P) = I-2P-2P+4P^2 = I-4P+4P^2 = I-4P+4P = I.$$

从几何上解释, 图是容易画的. 如图(1.1)所示, 是等腰三角形 ABC, 其中 $AC = BC$, 且 M 是线段 AB 中点. 则 $\overrightarrow{AC}$ 在 H 作用下变为 $\overrightarrow{BC}$.$\overrightarrow{BC}$ 在 H 作用下变回 $\overrightarrow{AC}$.

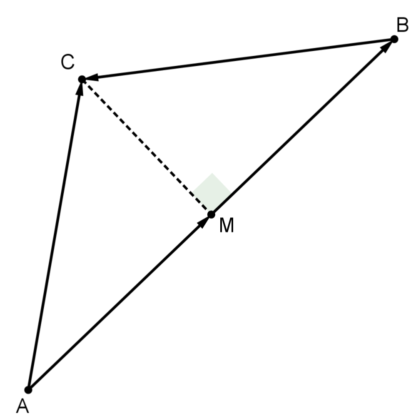

Figure 1.1

Exercise 1.2.8
证明：若 u 是单位向量, 则秩一矩阵 $P = uu^T$ 是一个射影矩阵. 它有性质 (i) 和 (ii). 选取 $u = \frac{a}{||a||}$,P 成为到 a 张成的直线上的射影, 且 Pb 是点 $p = \overline{x}a$: 秩一的射影恰恰对应着一个未知量的最小二乘问题.

Solution 1.2.8

我们知道,$u(u^Tu)^{-1}u^T$ 是到 u 张成的子空间上的射影矩阵. 由于 u 是单位向量, 因此 $u^Tu = 1$. 因此 $u(u^Tu)^{-1}u^T = uu^T$ 是到 u 张成的子空间上的射影矩阵.

Exercise 1.2.9

把 $x - y$ 平面射影到 y 轴上的 2×2 矩阵是什么？

Solution 1.2.9

$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$.

Exercise 1.2.10

证明：对一组测量值 $y_1, y_2, \cdots, y_m$, 用一条水平直线 (换句话说，用一个常值函数 $y = C$) 得到的最小二乘意义下的最佳拟合, 是它们的平均值

$$C = \frac{y_1 + y_2 + \cdots + y_m}{m}$$

(与练习 3.2.1 比较) 用统计术语来说，使 $E^2 = (y_1 - y)^2 + \cdots + (y_m - y)^2$ 极小化的选择 $\overline{y}$ 是样本的均值, 而所得的 E^2 是均方差 σ^2.

Solution 1.2.10

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}.$$

矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$, 射影矩阵 P 是个 $m \times m$ 矩阵, 且

$$\overline{D} = (A^TA)^{-1}A^Tb = \frac{1}{m}A^Tb = \frac{y_1 + y_2 + \cdots + y_m}{m}.$$

Exercise 1.2.11

求下列测量值的最佳直线拟合，并简述解答: 当 $t = -1$ 时 $y = 2$,$t = 0$ 时 $y = 0$,$t = 1$ 时 $y = -3$,$t = 2$ 时 $y = -5$.

Solution 1.2.11

设拟合这些点的最佳直线是 $y = Dx + C$. 我们得到不相容的线性方程组:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -3 \\ -5 \end{pmatrix}.$$

令矩阵 $A=\begin{pmatrix}1&-1\\1&0\\1&1\\1&2\end{pmatrix}$,$b=\begin{pmatrix}2\\0\\-3\\-5\end{pmatrix}$，解得

$$\begin{pmatrix}\overline{C}\\\overline{D}\end{pmatrix}=(A^TA)^{-1}A^Tb=\begin{pmatrix}-\frac{3}{10}\\-\frac{12}{5}\end{pmatrix}.$$

所以最佳拟合直线的方程是 $y=-\frac{12}{5}x-\frac{3}{10}$.

Exercise 1.2.12
假如不用直线而改用抛物线 $y=C+Dt+Et^2$ 来拟合上述练习中的数据，那么在由四组测量值得到的不相容方程组 $Ax=b$ 中，系数矩阵 A, 未知向量 x 和数据向量 b 各是什么？不要求计算 $\overline{x}$.

Solution 1.2.12
$A=\begin{pmatrix}1&-1&1\\1&0&0\\1&1&1\\1&2&4\end{pmatrix}$，未知向量 $x=\begin{pmatrix}C\\D\\E\end{pmatrix}$，数据向量 $b=\begin{pmatrix}2\\0\\-3\\-5\end{pmatrix}$.

1.3 正交基, 正交矩阵和 Gram-Schmidt 正交化

Exercise 1.3.1

- 写出对下述数据的关于 $y=C+Dt$ 拟合的四个方程

$$y=-4, 当t=-2; y=-3, 当t=-1$$

$$y=-1, 当t=1; y=0, 当t=2$$

  证明这些列向量是正交的并化成单位向量. 在新的问题 $Ax=b$ 中未知数 c 和 d 是什么？

- 找出最佳直线. 作图并写出误差 E^2.
- 用原来的两个未知数，四个方程组成的方程组来解释误差为零的事实，右边的 b 相应的列空间在什么地方？它的射影 P 是什么？

Solution 1.3.1

$$\begin{pmatrix}1&-2\\1&-1\\1&1\\1&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C\\D\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-4\\-3\\-1\\0\end{pmatrix}.$$

因为

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

所以这些列向量是正交的. 将这些向量化成单位向量, 可得依次为

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{-2}{\sqrt{10}} \\ \frac{-1}{\sqrt{10}} \\ \frac{1}{\sqrt{10}} \\ \frac{2}{\sqrt{10}} \end{pmatrix}.$$

新的问题是

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{-2}{\sqrt{10}} \\ \frac{1}{2} & \frac{-1}{\sqrt{10}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{10}} \\ \frac{1}{2} & \frac{2}{\sqrt{10}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -4 \\ -3 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

其中 $c = 2C, d = \sqrt{10}D$. 下面我们来解这个新的最小二乘问题. 易得

$$\overline{c} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -4 \\ -3 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = -4,$$

$$d = \begin{pmatrix} \frac{-2}{\sqrt{10}} & \frac{-1}{\sqrt{10}} & \frac{1}{\sqrt{10}} & \frac{2}{\sqrt{10}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -4 \\ -3 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = \sqrt{10}.$$

所以 $\overline{C} = -2, \overline{D} = 1$. 所以最佳直线是 $y = x - 2$. 我们发现这条直线恰好过四个点, 因此误差 $E^2 = 0$. 事实上, 向量 $\begin{pmatrix} -4 \\ -3 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 就在矩阵 $\begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ 的列空间中. 它的射影 P 就是向量 $\begin{pmatrix} -4 \\ -3 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 本身.

Exercise 1.3.2

把向量 $b = (0, 3, 0)$ 投影到单位正交向量 $a_1 = (\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, \frac{-1}{3})$ 和 $a_2 = (-\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{2}{3})$ 上去, 并求出它在 a_1, a_2 所在平面上的射影.

Solution 1.3.2

向量 b 在 a_1 上的投影:

$$a_1^T a_1 b^T = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{-1}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \frac{-1}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4}{9} & \frac{4}{9} & \frac{-2}{9} \\ \frac{4}{9} & \frac{4}{9} & \frac{-2}{9} \\ \frac{-2}{9} & \frac{-2}{9} & \frac{1}{9} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{4}{3} \\ \frac{4}{3} \\ \frac{-2}{3} \end{pmatrix}.$$

向量 b 在 a_2 上的投影:

$$a_2^T a_2 b^T = \begin{pmatrix} \frac{-1}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{-1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{9} & \frac{-2}{9} & \frac{-2}{9} \\ \frac{-2}{9} & \frac{4}{9} & \frac{4}{9} \\ \frac{-2}{9} & \frac{4}{9} & \frac{4}{9} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ \frac{4}{3} \\ \frac{4}{3} \end{pmatrix}.$$

所以向量 b 在 a_1, a_2 所在平面上的射影是

$$\begin{pmatrix} \frac{4}{3} \\ \frac{4}{3} \\ \frac{-2}{3} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{-2}{3} \\ \frac{4}{3} \\ \frac{4}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{8}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}.$$

Exercise 1.3.3

求出 $b = (0, 3, 0)$ 到 $a_3 = (\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}, \frac{2}{3})$ 上的射影, 把三个一维射影加起来并解释得到的结果. 为什么 $P = a_1 a_1^T + a_2 a_2^T + a_3 a_3^T$ 是单位阵?

Solution 1.3.3

$a_3^T a_3 b^T = \begin{pmatrix} \frac{4}{9} & \frac{-2}{9} & \frac{4}{9} \\ \frac{-2}{9} & \frac{1}{9} & \frac{-2}{9} \\ \frac{4}{9} & \frac{-2}{9} & \frac{4}{9} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix}$. 三个一维射影加起来的结果是向量 b. 这是肯定的, 因为向量 b 就在向量 a_1, a_2, a_3 张成的线性空间内. 事实上, 由于 a_1, a_2, a_3 形成 $\mathbf{R}^3$ 中的标准正交基, 所以任何三维向量都在 a_1, a_2, a_3 张成的空间中. 所以任意三维向量在射影矩阵 $a_1 a_1^T + a_2 a_2^T + a_3 a_3^T$ 的作用下必为本身, 因此 $a_1 a_1^T + a_2 a_2^T + a_3 a_3^T$ 必为单位矩阵.

Exercise 1.3.4

若 Q_1, Q_2 都是正交矩阵, 从而都满足 (36), 证明 $Q_1 Q_2$ 也是正交矩阵.

Solution 1.3.4

$$(Q_1 Q_2)^T (Q_1 Q_2) = Q_2^T Q_1^T Q_1 Q_2 = Q_2^T Q_2 = I.$$

所以 $Q_1 Q_2$ 也是正交矩阵.

Exercise 1.3.5

若 u 是一个单位向量, 证明 $Q = I - 2uu^T$ 是一个正交矩阵 (它就是所谓 Householder 变换). 当 $u = (1, 1, 1)/\sqrt{3}$, 具体算出 Q 来.

Solution 1.3.5

$Q^T Q = (I - 2uu^T)^T (I - 2uu^T) = (I - 2uu^T)(I - 2uu^T) = I - 4uu^T + 4(uu^T)(uu^T) = I - 4uu^T + 4u(u^T u)u^T =$

所以 $Q = I - 2uu^T$ 是正交矩阵. 事实上, 此题的几何意义可参见题 3.2.7. 当 $u = (1, 1, 1)/\sqrt{3}$ 时,

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - 2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} \\ -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

Exercise 1.3.6
求一个位于第三列的向量, 使得矩阵

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \end{pmatrix}$$

成为正交矩阵. 这个向量必是一个单位向量而且与其它两个列向量正交. 这个列向量的选取有多大的自由度? 验证 Q 的行向量同时自动成为标准正交的.

Solution 1.3.6
该列向量的选取有两个自由度. 该列向量可以是 $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ -\frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}$, 也可以是 $\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}$.

Exercise 1.3.7
通过直接计算 v^Tv 来验证: 对于标准正交向量组的任何组合 $v = x_1q_1 + x_2q_2 + \cdots + x_nq_n$, 勾股定理均成立:

$$||v||^2 = x_1^2 + \cdots + x_n^2$$

用矩阵的形式来写, 就是 $v = Qx$, 因此这就给出长度保持不变:$||Qx||^2 = ||x||^2$ 这个事实的一个新的且更清楚的证明.

Solution 1.3.7
题目本身几乎就是解答. 因此解答略.

Exercise 1.3.8
下列矩阵是正交的吗?

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Solution 1.3.8
是.

Exercise 1.3.9
应用 Gram-Schmidt 正交化过程于

$$a_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, a_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, a_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

并把结果写成 $A = QR$ 的形式.

Solution 1.3.9

令 $v_1 = a_1$.

$$v_2 = a_2 - \frac{a_2^T a_1}{a_1^T a_1} a_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

$$v_3 = a_3 - \frac{a_3^T v_1}{v_1^T v_1} v_1 - \frac{a_3^T v_2}{v_2^T v_2} v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{1} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

且 $q_1 = \frac{v_1}{1} = v_1, q_2 = \frac{v_2}{1} = v_2, q_3 = \frac{v_3}{1} = v_3$. 结果,

$$a_1 = q_1, a_2 = q_2 + q_1, a_3 = q_3 + q_2 + q_1,$$

因此

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

即

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Exercise 1.3.10

把 $A = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}$ 分解成 QR.

Solution 1.3.10

令 $a_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$,$a_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 5 \end{pmatrix}$, 且令 $v_1 = a_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$,

$$v_2 = a_2 - \frac{a_2^T a_1}{a_1^T a_1} a_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 5 \end{pmatrix} - \frac{20}{25} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{12}{5} \\ \frac{9}{5} \end{pmatrix}.$$

令 $q_1 = \frac{v_1}{||v_1||} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} \\ \frac{4}{5} \end{pmatrix}$,$q_2 = \frac{v_2}{||v_2||} = \begin{pmatrix} -\frac{4}{5} \\ \frac{3}{5} \end{pmatrix}$. 因此

$$a_1 = v_1 = ||v_1|| q_1 = 5q_1, a_2 = v_2 + \frac{4}{5} v_1 = ||v_2|| q_2 + \frac{4}{5} ||v_1|| q_1 = 3q_2 + 4q_1.$$

即

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_1 & q_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

即

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Exercise 1.3.11
把

$$a_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}, a_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

的 Gram-Schmidt 正交化过程表为 A=QR 的形式. 给定 n 个具有 m 个分量的向量 a_i,A,Q 和 R 的形状各是什么样?

Solution 1.3.11
令 $v_1 = a_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$,$v_2 = a_2 - \frac{a_2^T v_1}{v_1^T v_1} v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{9}{9} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. 令

$$q_1 = \frac{v_1}{||v_1||} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}, q_2 = \frac{v_2}{||v_2||} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

因此,

$$a_1 = v_1 = ||v_1||q_1 = 3q_1, a_2 = v_1 + v_2 = ||v_1||q_1 + ||v_2||q_2 = 3q_1 + \sqrt{2}q_2,$$

即

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_1 & q_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

因此

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 3 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{2}{3} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{2}{3} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

给定 n 个具有 m 个分量的向量 a_i,A 是 $m \times n$ 矩阵,Q 是 $m \times n$ 矩阵,R 是 $n \times n$ 矩阵.

Exercise 1.3.12
对上题的 A 及 $b = (1, 1, 1)^T$, 使用 $A = QR$ 来解最小二乘问题 $Ax = b$.

Solution 1.3.12

$$\overline{x} = R^{-1}Q^T b = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Exercise 1.3.13
若 $A = QR$, 求出 A 的列向量空间的射影矩阵 P 的简单公式.

Solution 1.3.13

$$\begin{aligned} P &= A(A^TA)^{-1}A^T \\ &= QR[(QR)^TQR]^{-1}(QR)^T \\ &= QR(R^TQ^TQR)^{-1}R^TQ^T \\ &= QR(R^TR)^{-1}R^TQ^T \\ &= QRR^{-1}(R^T)^{-1}R^TQ^T \\ &= QQ^T. \end{aligned}$$

Exercise 1.3.14
证明下述两个步骤

$$w = c - \frac{v_1^Tc}{v_1^Tv_1}v_1, v_3 = w - \frac{v_2^Tw}{v_2^Tv_2}v_2$$

得出与公式 (40) 相同的第三个方向 v_3. 这是一个修改了的 Gram-Schimidt 正交化过程的例子. 在这个过程中为保证数值稳定, 一次只减去一个射影.

Solution 1.3.14

$$v_3 = w - \frac{v_2^Tw}{v_2^Tv_2}v_2 = \left(c - \frac{v_1^Tc}{v_1^Tv_1}v_1\right) - \frac{v_2^T\left(c - \frac{v_1^Tc}{v_1^Tv_1}v_1\right)}{v_2^Tv_2}v_2 = c - \frac{v_1^Tc}{v_1^Tv_1}v_1 - \frac{v_2^Tc}{v_2^Tv_2}v_2.$$

Exercise 1.3.15
求向量 $v = (\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{4}}, \frac{1}{\sqrt{8}}, \cdots)$ 的长度以及函数 $f(x) = e^x$(在区间 $0 \le x \le 1$ 上) 的长度. 在这个区间内 e^x 与 e^{-x} 的内积是什么?

Solution 1.3.15

$$||v|| = \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} + \cdots} = 1.$$

$f(x) = e^x$ 在 $[0,1]$ 上的长度为

$$\int_0^1 (e^x)^2dx = \frac{1}{2}e^2 - \frac{1}{2}.$$

在区间 $[0,1]$ 上 e^x 与 e^{-x} 的内积是

$$\int_0^1 e^xe^{-x}dx = 1.$$

Exercise 1.3.16
用令导数为 0 的方法求 b_1 的值使得下式极小化:

$$||b_1 \sin x - y||^2 = \int_0^{2\pi} (b_1 \sin x - y(x))^2 dx$$

请与 Fourier 系数 (47) 做一比较. 若 $y(x) = \cos x$,b_1 等于什么?

Solution 1.3.16
令 $E(x)^2 = ||b_1 \sin x - y||^2 = \int_0^{2\pi} [b_1^2 \sin^2 x + y(x)^2 - 2b_1 y(x) \sin x] dx$. 则令

$$\frac{\partial E(x)^2}{\partial b_1} = 2b_1 \int_0^{2\pi} \sin^2 x dx - 2 \int_0^{2\pi} y(x) \sin x dx = 0,$$

解得

$$b_1 = \frac{\int_0^{2\pi} y(x) \sin x dx}{\int_0^{2\pi} \sin^2 x dx}.$$

若 $y(x) = \cos x$,$b_1 = 0$.

Exercise 1.3.17
求分段函数 $y(x)$ 的 Fourier 系数 a_0, a_1 和 b_1,$y(x)$ 在区间 $0 \le x \le \pi$ 上等于 1 而在区间 $\pi < x \le 2\pi$ 上等于 0:

$$a_0 = \frac{y^T 1}{1^T 1}, a_1 = \frac{y^T \cos x}{(\cos x)^T (\cos x)}, b_1 = \frac{y^T \sin x}{(\sin x)^T \sin x}.$$

Solution 1.3.17

$$a_0 = \frac{y^T 1}{1^T 1} = \frac{\int_0^{2\pi} y(x) dx}{\int_0^{2\pi} 1 dx} = \frac{\pi}{2\pi} = \frac{1}{2}.$$

$$a_1 = \frac{y^T \cos x}{(\cos x)^T (\cos x)} = \frac{\int_0^{2\pi} y(x) \cos x dx}{\int_0^{2\pi} \cos^2 x dx} = 0,$$

$$b_1 = \frac{y^T \sin x}{(\sin x)^T \sin x} = \frac{\int_0^{2\pi} y(x) \sin x dx}{\int_0^{2\pi} \sin^2 x dx} = \frac{2}{\pi}.$$

Exercise 1.3.18
求下一个 Legendre 多项式——一个与 1,x 和 $x^2 - \frac{1}{3}$ 正交的多项式.

Solution 1.3.18

$$x^3 - \frac{(x^3)^T 1}{1^T 1} 1 - \frac{(x^3)^T x}{x^T x} x - \frac{(x^3)^T (x^2 - \frac{1}{3})}{(x^2 - \frac{1}{3})^T (x^2 - \frac{1}{3})} (x^2 - \frac{1}{3}) = x^3 - \frac{3}{5} x.$$

Exercise 1.3.19
对区间 $-1 \leq x \leq 1$ 上的抛物线 $y = x^2$ 来说, 与它最接近的直线是什么?

Solution 1.3.19
首先,1 与 x 在 $[-1,1]$ 上是正交的. 由 Gram-Schmidt 正交化过程, 可得欲求直线为

$$\frac{(x^2)^T 1}{1^T 1} 1 + \frac{(x^2)^T x}{x^T x} x = \frac{1}{3}.$$

所以直线为 $y = \frac{1}{3}$.