



第六章 Orthogonality and Least Squares

§ 6.4 The Gram-Schmidt Process

Gram-Schmidt 过程

衡益

2020 年 12 月 23 日, 中山大学南校区



Gram-Schmidt 过程



Gram-Schmidt 过程

- 什么是Gram – Schmidt 过程?

目标：找到给定空间W的一组正交基

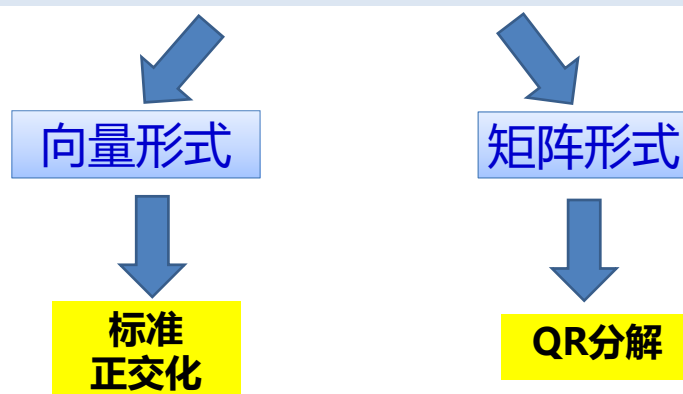
前提：已知该空间的一组非正交基

3



Gram-Schmidt 过程

Gram-Schmidt过程是用于产生 \mathbb{R}^n 的任何非零子空间的正交或标准正交基的简单算法。

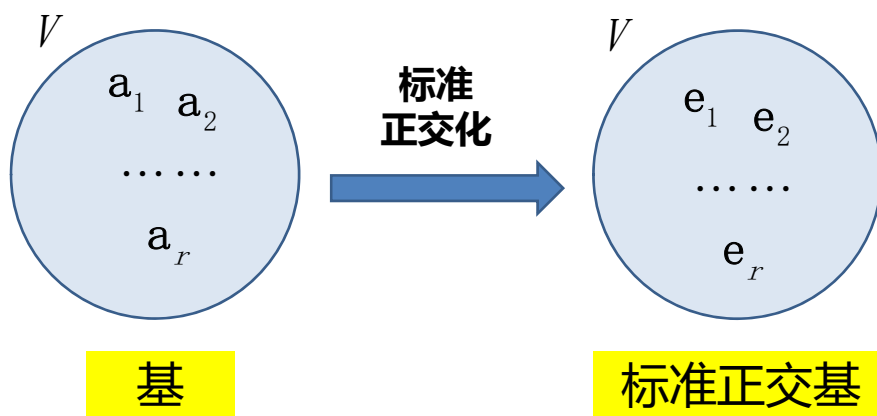


4



Gram-Schmidt 过程

向量形式



5



Gram-Schmidt 过程

定理 对 \mathbb{R}^n 中子空间 \mathcal{W} 的一个基 $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p\}$, 定义:

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{x}_1$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{x}_2 - \frac{\mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1} \mathbf{v}_1$$

$$\mathbf{v}_3 = \mathbf{x}_3 - \frac{\mathbf{x}_3 \cdot \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1} \mathbf{v}_1 - \frac{\mathbf{x}_3 \cdot \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}_2} \mathbf{v}_2$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{v}_p = \mathbf{x}_p - \frac{\mathbf{x}_p \cdot \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1} \mathbf{v}_1 - \frac{\mathbf{x}_p \cdot \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}_2} \mathbf{v}_2 - \dots - \frac{\mathbf{x}_p \cdot \mathbf{v}_{p-1}}{\mathbf{v}_{p-1} \cdot \mathbf{v}_{p-1}} \mathbf{v}_{p-1}$$

那么 $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p\}$ 是 \mathcal{W} 的一个正交基, 此外

$$\text{Span}\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p\} = \text{Span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p\}, \text{ 其中 } 1 \leq k \leq p$$

6



Gram-Schmidt 过程

定理 对 $1 \leq k \leq p$, 取 $W_k = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$.

证明 令 $\mathbf{v}_1 = \mathbf{x}_1$, 则有 $\text{Span}\{\mathbf{v}_1\} = \text{Span}\{\mathbf{x}_1\}$.

若对 $k < p$, 构造 $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k$, 使得 $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}$ 是 W_k 的一个正交基,

定义 $\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{x}_{k+1} - \text{proj}_{W_k} \mathbf{x}_{k+1}$,

注意向量 $\text{proj}_{W_k} \mathbf{x}_{k+1}$ 属于 W_k , 因而属于 W_{k+1} ,

故 \mathbf{v}_{k+1} 也属于 W_{k+1} (因为 W_{k+1} 是子空间, 且减法封闭).

更进一步, 由于 \mathbf{x}_{k+1} 不属于 W_k , 可得 $\mathbf{v}_{k+1} \neq \mathbf{0}$.

因而 $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{k+1}\}$ 是 $(k+1)$ 维空间 W_{k+1} 中非零向量形成的正交基.

由 4.5 节 **基定理** 可知, 这个集合是 W_{k+1} 的正交基,

从而 $W_{k+1} = \text{Span}\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{k+1}\}$ 当 $k+1 = p$ 时成立,

归纳证明结束 \checkmark .

7



Gram-Schmidt 过程

4.5 节基定理回顾

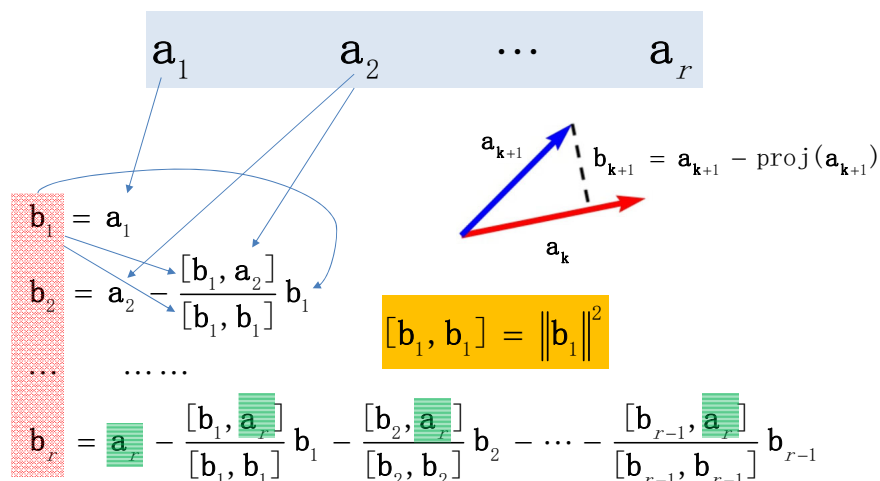
(基定理)

✓ 若 V 是一个 p 维向量空间, $p \geq 1$, V 中任意含有 p 个元素的线性无关集必然是 V 的一个基。任意含有 p 个元素且生成 V 的集合必然是 V 的一个基。

8



Gram-Schmidt 过程

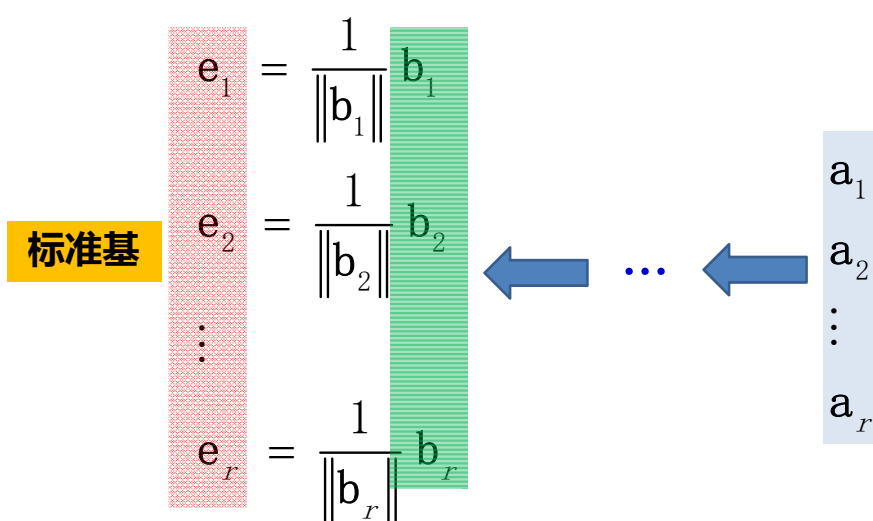


Schmidt orthogonalization

9



Gram-Schmidt 过程



10



Gram-Schmidt 过程举例

设 $\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}$, $\mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\mathbf{a}_3 = \begin{pmatrix} 4 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$, 用Gram-Schmidt过程将该向量组正交化

解:

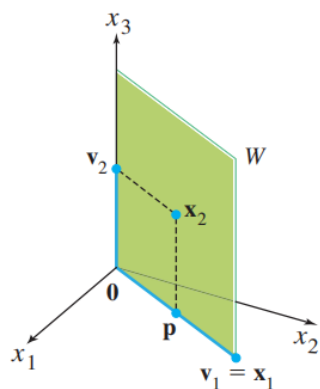
$$\begin{aligned}
 \mathbf{b}_1 &= \mathbf{a}_1 = \frac{5}{3} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 \mathbf{b}_3 &= \mathbf{a}_3 - \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{b}_1]}{[\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_1]} \mathbf{b}_1 - \frac{[\mathbf{a}_3, \mathbf{b}_2]}{[\mathbf{b}_2, \mathbf{b}_2]} \mathbf{b}_2 = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
 \Rightarrow \mathbf{e}_1 &= \frac{1}{\sqrt{6}}
 \end{aligned}$$

11



Gram-Schmidt 过程举例

设 $W = \text{span}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\}$, $\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 6 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$, 利用Schmidt为 W 构造正交基 $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$.



令 $\mathbf{v}_1 = \mathbf{x}_1$,

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{x}_2 - \mathbf{p} = \mathbf{x}_2 - \frac{\mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{x}_1}{\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_1} \mathbf{x}_1$$

$$= \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} - \frac{15}{45} \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix}$$

12



Gram-Schmidt 过程举例

MATLAB算法-向量形式

```
function v=Schmidt_orthogonalization(a)
[m,n] = size(a);
b=zeros(m,n);
%正交化
b(:,1)=a(:,1);
for i=2:n
    for j=1:i-1
        b(:,i)=b(:,i)-dot(a(:,i),b(:,j))/dot(b(:,j),b(:,j))*b(:,j);
    end
    b(:,i)=b(:,i)+a(:,i);
end
%单位化
for k=1:n
    v(:,k)=b(:,k)/norm(b(:,k));
end
```

13



Gram-Schmidt 过程

定理

如果 $m \times n$ 矩阵 A 的列线性无关，那么 A 可以分解为 $A=QR$ ，其中 Q 是一个 $m \times n$ 矩阵，其列形成 $\text{Col}A$ 的一个标准正交基， R 是一个 $m \times n$ 上三角可逆矩阵且在对角线上的元素为正数。

可以看做是Gram-schmidt过程的推论

14



Gram-Schmidt 过程

矩阵形式

Q: 标准正交矩阵; R: 上三角矩阵

$$\begin{bmatrix} \blacksquare & \blacksquare & \dots & \blacksquare \\ \blacksquare & \blacksquare & \dots & \blacksquare \\ \blacksquare & \blacksquare & \dots & \blacksquare \end{bmatrix} \xrightarrow[\text{分解}]{\text{QR}} \begin{bmatrix} | & | & \dots & | \\ q_1 & q_2 & \dots & q_n \\ | & | & \dots & | \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \blacksquare & \blacksquare & \dots & \blacksquare \\ & \blacksquare & \blacksquare & \dots \\ & & \blacksquare & \blacksquare \\ & & & \blacksquare \end{bmatrix}$$

A

Q

R

$$Q = [e_1, \dots, e_n]$$

$$R = \begin{pmatrix} \langle e_1, a_1 \rangle & \langle e_1, a_2 \rangle & \langle e_1, a_3 \rangle & \dots \\ 0 & \langle e_2, a_2 \rangle & \langle e_2, a_3 \rangle & \dots \\ 0 & 0 & \langle e_3, a_3 \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^{15}$$

Q的计算参考后两页



Gram-Schmidt 过程举例

例题

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \text{ 利用Gram-Schmidt正交化对A进行QR分解}$$



Gram-Schmidt 过程举例

解析

利用Gram-Schmidt正交化求得A的标准向量基，

$$\therefore Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{3}{\sqrt{12}} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{12}} & -\frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix},$$

$$\therefore Q^T A = Q^T (QR) = IR = R,$$

$$\therefore R = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{3}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{12}} & \frac{1}{\sqrt{12}} \\ 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & \frac{3}{2} & 1 \\ 0 & \frac{3}{\sqrt{12}} & \frac{2}{\sqrt{12}} \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix}.$$

17



Gram-Schmidt 过程举例

MATLAB算法-矩阵形式

```
for j=1:n                                % Gram-Schmidt orthogonalization
    v=A(:,j);                            % v begins as column j of A
    for i=1:j-1
        R(i,j)=Q(:,i)'\*A(:,j);          % modify A(:,j) to v for more accuracy
        v=v-R(i,j)*Q(:,i);              % subtract the projection (q_i^T a_j)q_i = (q_i^T v)q_i
    end                                  % v is now perpendicular to all of q_1, ..., q_{j-1}
    R(j,j)=norm(v);
    Q(:,j)=v/R(j,j);                    % normalize v to be the next unit vector q_j
end
```

18

线性代数 (Linear Algebra)



第六章 Orthogonality and Least Squares

§ 6.5 Least Squares Problems

最小二乘问题

衡益

2021 年 12 月 23 日, 中山大学南校区



最小二乘估计

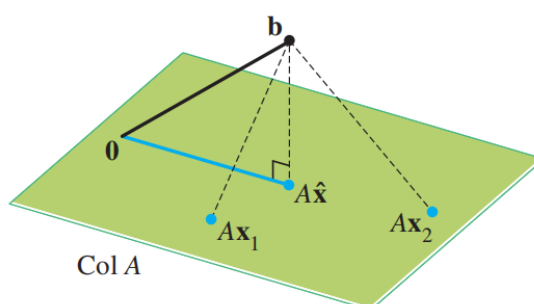


最小二乘估计

定义

对于 $A_{m \times n}$ 和 $b \in \mathbb{R}^m$, 方程 $Ax = b$ 的最小二乘解是 \hat{x} , 使得:

$$\|b - A\hat{x}\| \leq \|b - Ax\|.$$



21



最小二乘估计

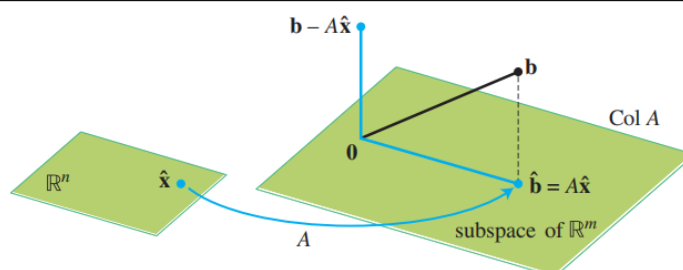
推导

假设 \hat{x} 满足 $A\hat{x} = \hat{b}$.

由正交分解定理可知 $b - \hat{b}$ 正交于 A 的列向量, 即 $b - A\hat{x}$ 正交于 A 的所有列向量, 故

$$A^T(b - A\hat{x}) = 0.$$

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



22

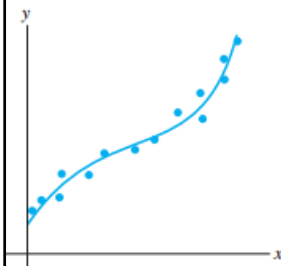


最小二乘估计

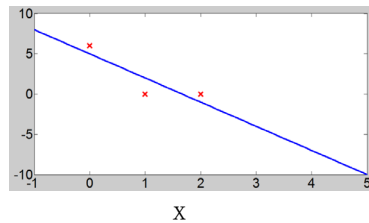
定理

由上页推导可知,

$Ax = b$ 的最小二乘解与 $A^T A \hat{x} = A^T b$ 的非空解集一致



线性方程



非线性方程

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

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

对于QR分解:

$$\hat{x} = R^{-1} Q^T b$$

23



最小二乘估计

定理

矩阵 $A^T A$ 是可逆的充分必要条件是:

A 的列是线性无关的, 在这种情形下,

方程 $Ax=b$ 有唯一最小二乘解 \hat{x} 且它有下面的表示:

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

24



最小二乘估计

线性方程 例题

举例1: 找出离点 $(0, 6)$, $(1, 0)$ 和 $(2, 0)$ 最“近”的线。

设有直线 $b = C + Dt$ 经过这三点

$$\Rightarrow A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \mathbf{x} = \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 无解

$$A^T A \mathbf{x} = A^T \mathbf{b} \Rightarrow \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow C = 5, D = -3$$

25



最小二乘估计

线性方程 例题

举例2:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} -3 \\ -1 \\ 0 \\ 2 \\ 5 \\ 1 \end{pmatrix}, \text{求 } A\mathbf{x} = \mathbf{b} \text{ 的最小二乘解}$$

26



最小二乘估计

线性方程 例题

解:

$$A^T A = \begin{pmatrix} 6 & 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad A^T b = \begin{pmatrix} 4 \\ -4 \\ 2 \\ 6 \end{pmatrix}$$

$A^T A x = A^T b$ 的增广矩阵为:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 6 & 2 & 2 & 2 & 4 \\ 2 & 2 & 0 & 0 & -4 \\ 2 & 0 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & 0 & 0 & 2 & 6 \end{array} \right) \sim \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \quad \text{故: } \hat{x} = \begin{pmatrix} 3 \\ -5 \\ -2 \\ 0 \end{pmatrix} + x_4 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

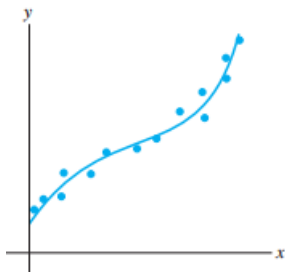
即 $x_1 = 3 - x_4$, $x_2 = -5 + x_4$, $x_3 = -2 + x_4$, 其中 x_4 是不受约束的.

27



最小二乘估计

非线性方程



目的: 我们尝试将数据组

$$(x_1, y_1), \dots, (x_k, y_k)$$

拟合到某个多项式 $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n$ 上。

理想中, 我们希望

$$\begin{aligned} a_0 + a_1 x_1 + \dots + a_n x_1^n &= y_1 \\ a_0 + a_1 x_2 + \dots + a_n x_2^n &= y_2 \\ &\vdots \\ a_0 + a_1 x_k + \dots + a_n x_k^n &= y_k \end{aligned}$$

28



最小二乘估计

非线性方程

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n$$

观测向量

$$\vec{b} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_k \end{bmatrix}$$

设计矩阵

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_k & x_k^2 & \cdots & x_k^n \end{bmatrix}$$

系数矩阵

$$\vec{a} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$$

29



最小二乘估计

非线性方程

现在只需解方程

$$X\vec{a} = \vec{b}$$

但是基于数据组， $X\vec{a} = \vec{b}$ 可能矛盾，因此我们尝试寻找一个最佳拟合的多项式（也就是当 $\|X\vec{a} - \vec{b}\|$ 被最小化时的多项式）。

根据之前提到的正则系引理，我们看到 $\|X\vec{a} - \vec{b}\|$ 被最小化当且仅当

$$X^T X \vec{a} = X^T \vec{b}$$

30



最小二乘估计

最小二乘与QR分解法

给定一个 $m \times n$ 矩阵 A ，且具有线性无关的列，
取 $A = QR$ ，那么对每一个属于 \mathbb{R}^m 的 b ，矩阵
 $Ax = b$ 有唯一的最小二乘解，其解为：

$$\hat{x} = R^{-1}Q^T b$$

$$\text{取 } \hat{x} = R^{-1}Q^T b,$$

$$\text{那么 } A\hat{x} = QR\hat{x} = QR R^{-1}Q^T b = QQ^T b$$

31



最小二乘估计

最小二乘与QR分解法MATLAB代码

```
[m,n] = size(A);
[Q,R,P] = qr(A);
c = Q'*b;
% Determine rank of A (as before).
tol = max(size(A))*eps*abs(R(1,1));
r = 1;
while ( abs(R(r+1,r+1)) >= tol & r < n ); r = r+1; end
% Solve least squares problem to get y2
S = [ R(1:r,1:r) \ R(1:r,r+1:n);
eye(n-r) ];
t = [ R(1:r,1:r) \ c(1:r);
zeros(n-r,1) ];
y2 = S \ t; % solve least squares problem using backslash
% Compute x
y1 = R(1:r,1:r) \ ( c(1:r) - R(1:r,r+1:n) * y2 );
x = P*[y1;y2];
```

32



最小二乘估计

QR分解例题

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 3 \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 7 \\ -3 \end{pmatrix}, \text{ 用QR分解和最小二乘法求 } A\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

33



最小二乘估计

解析

$$\therefore A = QR = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 4 & 5 \\ 0 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix},$$

$$Q^T \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 7 \\ -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -6 \\ 4 \end{pmatrix},$$

$$\therefore R\hat{\mathbf{x}} = Q^T \mathbf{b},$$

$$\therefore \begin{pmatrix} 2 & 4 & 5 \\ 0 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -6 \\ 4 \end{pmatrix}, \hat{\mathbf{x}} = \begin{pmatrix} 10 \\ -6 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

34



模型参数估计

数学模型

$$y(t) = m_1 + m_2 t - \frac{1}{2} m_3 t^2$$

含噪数据

$$\begin{aligned} t = 1, y &= 106.1 \quad (105.1) \\ t = 2, y &= 189.4 \quad (190.4) \\ t = 3, y &= 266.9 \quad (265.9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_1 &= 10 \\ m_2 &= 100 \\ m_3 &= 9.8 \end{aligned}$$

测试参数!

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -0.5 \\ 1 & 2 & -2.0 \\ 1 & 3 & -4.5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 106.1 \\ 189.4 \\ 266.9 \end{pmatrix}$$

A **x** **b**

逆矩阵求解

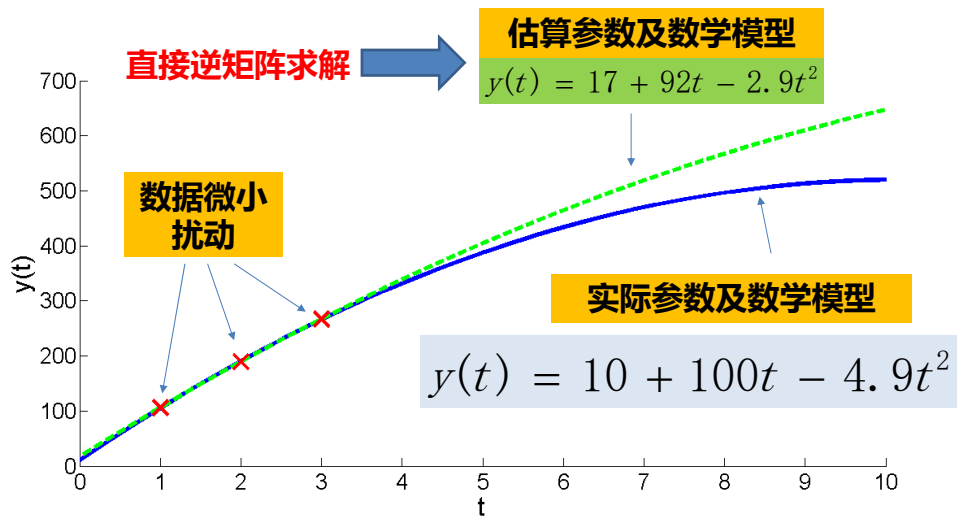
$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$$

$$\begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 17 \\ 92 \\ 5.8 \end{pmatrix}$$

35



模型参数估计



36



模型参数估计

含噪数据

$t = 1, y = 106.1; t = 4, y = 332.6;$
 $t = 2, y = 189.4; t = 5, y = 387.7;$
 $t = 3, y = 266.9; t = 6, y = 432.6;$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -0.5 \\ 1 & 2 & -2.0 \\ 1 & 3 & -4.5 \\ 1 & 4 & -8.0 \\ 1 & 5 & -12.5 \\ 1 & 6 & -18.0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 106.1 \\ 189.4 \\ 266.9 \\ 332.6 \\ 387.7 \\ 432.6 \end{pmatrix}$$

最小二乘解
(Least Square)

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

$$\begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.64 \\ 100.7171 \\ 10.0571 \end{pmatrix}$$

37

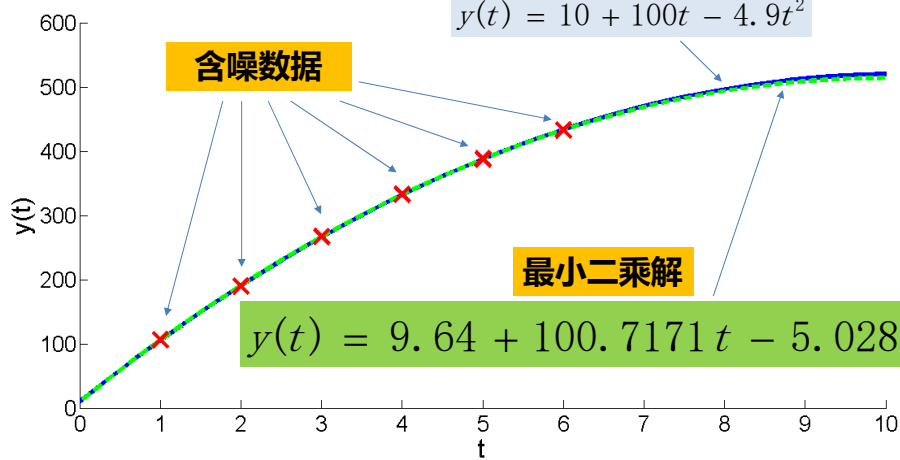


模型参数估计

目标参数及数学模型

$$y(t) = 10 + 100t - 4.9t^2$$

含噪数据



38



内积空间

39



内积空间

定义

内积空间是具有内积运算的线性空间。

在向量空间 V 中，对向量 u, v 内积运算满足下列公理：

1. $\langle u, v \rangle = \langle v, u \rangle$
2. $\langle u + v, w \rangle = \langle u, w \rangle + \langle v, w \rangle$
3. $\langle cu, v \rangle = c\langle u, v \rangle$
4. $\langle u, u \rangle \geq 0$ ，当且仅当 $u=0$ 时 $\langle u, u \rangle=0$

40



内积空间举例

例题1. $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = 4u_1v_1 + 5u_2v_2$, 证明该式定义的是内积运算

证明: 1. $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = 4u_1v_1 + 5u_2v_2 = 5u_2v_2 + 4u_1v_1 = \langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle$

$$\begin{aligned} 2. \langle \mathbf{u} + \mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle &= 4(u_1 + v_1)w_1 + 5(u_2 + v_2)w_2 \\ &= 4u_1w_1 + 4v_1w_1 + 5u_2w_2 + 5v_2w_2 \\ &= \langle \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle + \langle \mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 3. \langle c\mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle &= 4(cu_1)v_1 + 5(cu_2)v_2 \\ &= c(4u_1v_1 + 5u_2v_2) \\ &= c\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle \end{aligned}$$

$$4. \langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle = 4u_1^2 + 5u_2^2 \geq 0,$$

当且仅当 $u_1 = u_2 = 0$ 时 $4u_1^2 + 5u_2^2 = 0$.

41



内积空间

定义

内积空间中:

$$1. \text{范数 (norm): } \|\mathbf{v}\| = \sqrt{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle}$$

$$2. \mathbf{u}, \mathbf{v} \text{ 间距离 (distance): } \|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|$$

$$3. \mathbf{u} \perp \mathbf{v}: \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = 0$$

42



内积空间

例题

定义内积空间 P_n , 对于 P_n 中的 p, q , 满足:

$$\langle p, q \rangle = p(t_0)q(t_0) + p(t_1)q(t_1) + \dots + p(t_n)q(t_n).$$

$$\text{令 } p(t) = 12t^2, q(t) = 2t - 1.$$

$t_0 = 0, t_1 = \frac{1}{2}, t_2 = 1$, 求向量 p, q 的长度.

$$\begin{aligned} \text{解: } \|p\|^2 &= \langle p, p \rangle = [p(0)]^2 + [p(\frac{1}{2})]^2 + [p(1)]^2 \\ &= 0 + [3]^2 + [12]^2 = 153, \end{aligned}$$

$$\therefore \|p\| = \sqrt{153}.$$

$$\text{同理 } \langle q, q \rangle = 2, \|q\| = \sqrt{2}.$$

43



内积空间

例题

同上对于内积空间 P_2 ,

$$\text{令 } p(t) = 1, q(t) = t, r(t) = t^2.$$

$$t_0 = -2, t_1 = -1, t_2 = 0, t_3 = 1, t_4 = 2,$$

利用Gram-Schmidt正交化构造 P_2 空间的正交基.

44



内积空间

解: $\because p = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, q = \begin{bmatrix} -2 \\ -1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}, r = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 0 \\ 4 \end{bmatrix}.$

构造 P_2 空间正交基 v_0, v_1, v_2 ,

令 $v_0 = p, \because \langle p, q \rangle = 0, \therefore v_1 = q,$

由 Gram-Schmidt 可得 $v_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ -2 \\ 2 \end{bmatrix}.$

45



内积空间性质

性质

Cauchy-Schwarz 不等式: $|\langle u, v \rangle| \leq \|u\| \|v\|$

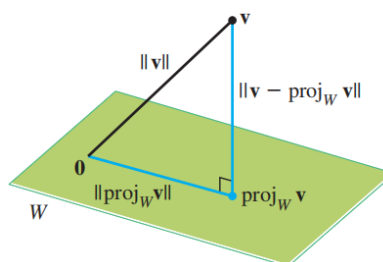
证明: (1) $u = 0$ 时, 上式显然成立;

(2) $u \neq 0$ 时, 设 W 是 u 张成的子空间, 有:

$$\|\text{proj}_W v\| = \left\| \frac{\langle v, u \rangle}{\langle u, u \rangle} u \right\| = \frac{|\langle v, u \rangle|}{|\langle u, u \rangle|} \|u\| = \frac{|\langle v, u \rangle|}{\|u\|^2} \|u\| = \frac{|\langle u, v \rangle|}{\|u\|}.$$

$$\because \|\text{proj}_W v\| \leq \|v\|, \therefore \frac{|\langle u, v \rangle|}{\|u\|} \leq \|v\|,$$

$|\langle u, v \rangle| \leq \|u\| \|v\|$ 得证.





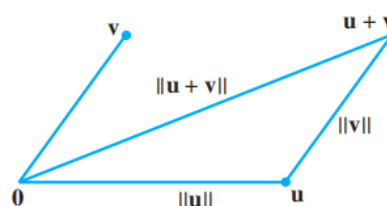
内积空间性质

性质

$$\text{三角不等式: } \|u+v\| \leq \|u\| + \|v\|$$

证明:

$$\begin{aligned} \|u+v\|^2 &= \langle u+v, u+v \rangle = \langle u, u \rangle + 2\langle u, v \rangle + \langle v, v \rangle \\ &\leq \|u\|^2 + 2|\langle u, v \rangle| + \|v\|^2 \\ &\leq \|u\|^2 + 2\|u\| \|v\| + \|v\|^2 \quad \text{Cauchy-Schwarz} \\ &= (\|u\| + \|v\|)^2 \end{aligned}$$

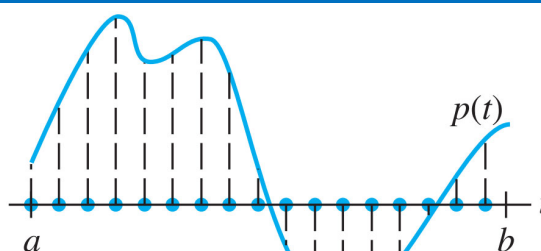


47



内积空间与微积分

内积与微积分



$$\begin{aligned} \langle p, q \rangle &= \frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^n p(t_j) q(t_j) \\ &= \frac{1}{b-a} \left[\sum_{j=0}^n p(t_j) q(t_j) \Delta t \right] \end{aligned}$$



$$\frac{1}{b-a} \int_a^b p(t) q(t) dt$$

48



内积空间与微积分

例题

定义内积空间 $C[0, 1]$, 对于 $f, g \in C[0, 1]$ 满足:

$$\langle f, g \rangle = \int_0^1 f(t)g(t)dt, \langle f, f \rangle = \int_0^1 [f(t)]^2 dt \geq 0;$$

设 W 为 $C[0, 1]$ 的子空间, 由 $p_1(t) = 1, p_2(t) = 2t - 1, p_3(t) = 12t^2$. 利用 Gram-Schmidt 正交化过程求 W 空间正交基。

49



内积空间与微积分

解: 令 $q_1 = p_1$,

$$\therefore \langle p_2, q_1 \rangle = \int_0^1 (2t - 1)(1)dt = (t^2 - t) \Big|_0^1 = 0,$$

\therefore 令 $q_2 = p_2$.

$$\langle p_3, q_1 \rangle = \int_0^1 (12t^2)(1)dt = 4, \langle q_1, q_1 \rangle = \int_0^1 (1)(1)dt = 1,$$

$$\langle p_3, q_2 \rangle = \int_0^1 (12t^2)(2t - 1)dt = 2, \langle q_2, q_2 \rangle = \int_0^1 (2t - 1)^2 dt = 1/3.$$

$$\therefore \text{proj}_{q_1} p_3 = \frac{\langle p_3, q_1 \rangle}{\langle q_1, q_1 \rangle} q_1 + \frac{\langle p_3, q_2 \rangle}{\langle q_2, q_2 \rangle} q_2 = 4q_1 + 6q_2,$$

$$\therefore q_3 = p_3 - 4q_1 - 6q_2 = 12t^2 - 12t + 2.$$



内积空间应用

加权最小二乘法

实际值: y , 拟合值: \hat{y} ;

均方误差 (sum of the squares for error):

$$SS(E) = (y_1 - \hat{y}_1)^2 + \cdots + (y_n - \hat{y}_n)^2;$$

加权均方误差:

$$WSS(E) = w_1^2 (y_1 - \hat{y}_1)^2 + \cdots + w_n^2 (y_n - \hat{y}_n)^2;$$

51



内积空间应用

加权最小二乘法

$$Wy = \begin{pmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & & w_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 y_1 \\ w_2 y_2 \\ \vdots \\ w_n y_n \end{pmatrix}$$

$$\Downarrow$$

$$\|Wy - W\hat{y}\|^2 = \|Wy - WA\hat{x}\|^2$$

$$\Downarrow$$

$$WAx = Wy$$

$$\Downarrow$$

$$(WA)^T WAx = (WA)^T Wy$$

52



内积空间应用

例题

找数据点 $(-2, 3), (-1, 5), (0, 5), (1, 4), (2, 3)$ 的最优拟合线 $y = \beta_0 + \beta_1 x$. 由于最后两个点的测量误差较大, 权重设为其他点的一半。

53



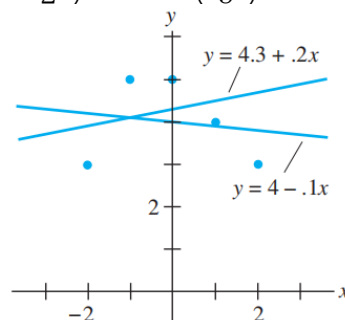
内积空间应用

$$\text{解: } X = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 5 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix}; \quad WX = \begin{pmatrix} 2 & -4 \\ 2 & -2 \\ 2 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad Wy = \begin{pmatrix} 6 \\ 10 \\ 10 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix};$$

$$(WX)^T WX = \begin{pmatrix} 14 & -9 \\ -9 & 25 \end{pmatrix}, \quad (WX)^T Wy = \begin{pmatrix} 59 \\ -34 \end{pmatrix};$$

$$\text{求解 } \begin{pmatrix} 14 & -9 \\ -9 & 25 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 59 \\ -34 \end{pmatrix}, \text{ 得到拟合直线:}$$

$$y = 4.3 + 0.2x \quad (\text{未加权的拟合直线为 } y = 4 - 0.1x)$$

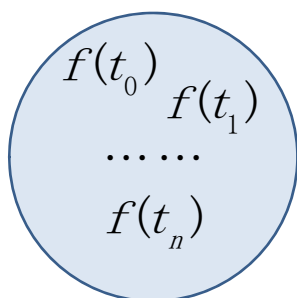




内积空间应用

数据趋势分析

已知数据点



函数趋势分析

一次型?

$$y = \beta_0 + \beta_1 t$$

二次型?

$$y = \beta_0 + \beta_1 t + \beta_2 t^2$$

三次型?

$$y = \beta_0 + \beta_1 t + \beta_2 t^2 + \beta_3 t^3$$



内积空间应用

数据趋势分析

趋势系数

$$\hat{g} = c_0 p_0 + c_1 p_1 + c_2 p_2 + c_3 p_3$$

趋势函数

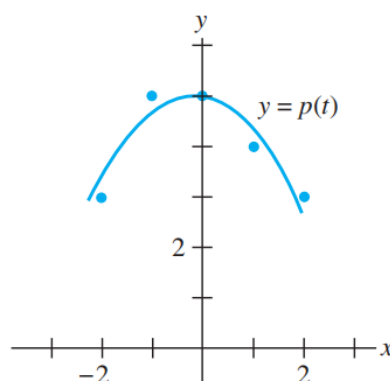
P_3 空间正交基



内积空间应用

例题

对 $(-2, 3), (-1, 5), (0, 5), (1, 4), (2, 3)$ 进行二次型函数拟合。



57



内积空间应用

解析

Polynomial: p_0 p_1 p_2 Data: g

Vector of values: $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -2 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ -2 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \\ 5 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix}$

$$\hat{p} = \frac{\langle g, p_0 \rangle}{\langle p_0, p_0 \rangle} p_0 + \frac{\langle g, p_1 \rangle}{\langle p_1, p_1 \rangle} p_1 + \frac{\langle g, p_2 \rangle}{\langle p_2, p_2 \rangle} p_2$$

$$= \frac{20}{5} p_0 - \frac{1}{10} p_1 - \frac{7}{14} p_2$$

$$\hat{p}(t) = 4 - .1t - .5(t^2 - 2)$$

58



Q & A