



Math Notes

My Math Note

Xia Wenxuan



Written by Xia Wenxuan, 2021

PUBLISHED BY MYSELF

<https://github.com/gegeji>

All the material in this document is taken from my textbook or video material, and some material uses optical character recognition (OCR) to aid input. It may contains typographical or content inaccuracies. This document is for my personal study only. I am not responsible for the accuracy of the content of the text.

Edited and Revised on October 30, 2021

Contents

I	Vectors	
1	对向量的介绍	10
1.1	Vector	10
1.2	Vector Space	11
1.3	向量运算	11
1.4	内积	12
1.4.1	常用的内积等式	13
1.5	Cauchy-Schwartz Inequality	14
1.6	浮点运算	14
2	Linear Function	16
2.1	Linear Function	16
2.2	泰勒展开	17
2.3	Regression Model	19
3	Norm and Distance	20
3.1	Vector Norm	20
3.2	Root Mean Square Value (RMS)	21
3.3	Chebyshev's Inequality	22
3.4	Distance	22
3.4.1	Feature Distance and Nearest Neighbor	23

3.5	Standard Derivation	23
3.6	Angle	23
3.6.1	相关系数	24
4	优化问题初步	25
4.1	优化问题引入	25
4.2	Convex Set	26
4.3	向量偏导	27
4.4	投影问题: 标量优化问题	28
4.5	Clustering	29
5	Linear Independence	31
5.1	线性相关、线性无关	31
5.2	Basis	32
5.3	标准正交向量	32
5.4	Gram-Schmidt Algorithm	34
5.4.1	The Analysis of Gram-Schmidt Algorithm	35

II

Matrices

6	Matrices	38
6.1	Matrices	38
6.2	矩阵运算	39
6.2.1	Matrix Power	42
6.2.2	矩阵乘法的算法复杂度	42
6.2.3	矩阵向量乘积复杂度	43
6.3	Special Matrices and Matrices in Different Applications	43
6.3.1	$f(x) = Ax$ 中的 A	44
6.3.2	Selectors	45
6.3.3	图论: 节点弧关联矩阵	45
6.3.4	Convolution	46
6.3.5	多项式	47
6.3.6	Fourier Transform	47
6.3.7	Semi-Definite Matrices	47
6.4	Gram 矩阵	49
7	Matrices Norms	50
7.1	矩阵范数	50
8	适定问题	53
8.1	The Definition of Well-posed Problem	53
8.2	绝对误差的界限	54
8.3	相对误差的界限	54

9	Inverse of Matrices	55
9.1	Left Inverse, Right Inverse, Inverse	55
9.2	Linear Equation Systems	56
9.2.1	线性方程组求解	56
9.3	Fundamental Theorem of Linear Algebra	57
9.4	Invertible Matrices	57
9.5	转置和共轭转置的逆	60
9.6	Gram Matrix 非奇异的性质	60
9.7	伪逆	60
10	Orthogonal Matrices	62
10.1	预备知识	62
10.1.1	标准正交向量	62
10.1.2	Gram 矩阵与标准正交的关系	62
10.1.3	矩阵-向量乘积与标准正交的关系	62
10.1.4	左可逆性与正交的关系	63
10.2	正交矩阵	64
10.3	Permutation Matrices	64
10.4	平面旋转	65
10.5	Householder Matrix	65
10.5.1	The Geometry of Householder Transformation	66
10.6	正交矩阵乘积	67
10.7	具有正交矩阵的线性方程	67
10.8	列标准正交的高矩阵	67
10.9	值域范围、列空间	67
10.9.1	投影到列标准正交的矩阵 A 的列空间	68
11	QR Factorization and Householder Transformation	70
11.1	高斯消元法	70
11.2	QR Factorization	71
11.3	QR 分解的应用	73
11.3.1	QR 分解和求解线性方程组 $Ax = b$	73
11.3.2	QR 分解和求解伪逆 A^\dagger 、逆 A^{-1}	74
11.3.3	A 的列空间与 Q 的关系	74
11.3.4	往 A 列空间上的投影也是往 Q 上的投影	75
11.4	复矩阵的 QR 分解	75
11.5	QR Algorithm Using Gram-Schmidt Algorithm	77
11.5.1	Gram-Schmidt Algorithm	78
11.5.2	基于 Gram-Schmidt 方法进行 QR 分解的时间复杂度	79
11.6	The Numerical Instability of QR Decomposition based on Gram-Schmidt Algorithm	79
11.7	QR Decomposition Using Householder Transformation	80
11.7.1	Householder Matrix	81
11.7.2	构造反射算子	82

11.7.3	Householder 三角化	83
11.7.4	An Example for Householder Algorithm	86
11.7.5	Complexity of Householder Algorithm	87
11.8	Q 因子	87
11.8.1	矩阵-向量积 $H_k x$ 算法复杂度	88

III

Extensive Reading

12	Fourier Series, Fourier Transform	90
12.1	基本概念	90
12.2	Fourier Series	92
12.3	Fourier transform	95
12.4	Discrete Fourier Transform	95
13	Factorization of Matrices	97

IV

Statistics

14	Random Variables	99
14.1	随机变量的引入	99
14.2	随机变量的特点	99
14.3	优势	99
14.4	常见随机变量	99
14.4.1	离散型随机变量	99
14.4.2	两点分布	100
14.4.3	(n 重) 伯努利试验, 二项分布	100
14.4.4	泊松分布	100
14.4.5	连续型随机变量	101
14.4.6	均匀分布	101
14.4.7	指数分布	101
14.4.8	正态分布	101
14.4.9	标准正态分布	101
14.5	随机变量的分布函数	101
14.6	随机变量的分布函数性质	101
14.7	连续型随机变量及其概率密度	101
14.8	随机变量的数字特征	102
14.8.1	方差	102
14.8.2	协方差	102
14.8.3	相关系数	103
14.8.4	X, Y 不相关时候的性质	103
15	大数定律和中心极限定理	104
15.1	辛钦大数定律	104
15.1.1	辛钦大数定律条件	104

15.2	伯努利大数定理	104
15.3	中心极限定理	105
16	Sampling Distribution	106
16.1	统计量	106
16.2	常见统计量	106
16.3	卡方分布	107
16.3.1	卡方分布性质	107
16.4	t 分布	108
16.4.1	t 分布性质	108
16.5	F 分布	109
16.5.1	F 分布性质	109
16.6	正态总体的样本均值和样本方差的分布	110
17	Hypothesis Testing	113
17.1	正态总体均值方差的检验法	113
17.2	经验分布函数	113
17.3	Q-Q 图 (Quantile-quantile Plot)	113
17.4	卡方拟合优度检验	115
17.5	柯尔莫哥洛夫 (Kolmogorov-Smirnov) 检验	115
17.6	秩和检验	115
17.7	方差分析 (Analysis of Variance, ANOVA)	117
17.7.1	单因素方差分析	117
17.7.2	双因素方差分析方法	119
17.7.3	无交互影响的双因素方差分析	120
17.7.4	关于交互效应的双因素方差分析	121
17.8	多元线性回归	122
17.8.1	回归模型的假设检验	122
17.8.2	回归系数的假设检验和区间估计	123
17.8.3	利用回归模型进行预测	123
17.9	逐步回归	123
17.9.1	前进法	124
17.9.2	后退法	124
18	Bootstrap	125
18.1	估计量的标准误差的 Bootstrap 估计	125
18.2	估计量的均方误差的 Bootstrap 估计	126
18.3	Bootstrap 置信区间	126
18.4	参数 Bootstrap 方法	127
	Index	139

Vectors

1	对向量的介绍	10
1.1	Vector	
1.2	Vector Space	
1.3	向量运算	
1.4	内积	
1.5	Cauchy-Schwartz Inequality	
1.6	浮点运算	
2	Linear Function	16
2.1	Linear Function	
2.2	泰勒展开	
2.3	Regression Model	
3	Norm and Distance	20
3.1	Vector Norm	
3.2	Root Mean Square Value (RMS)	
3.3	Chebyshev's Inequality	
3.4	Distance	
3.5	Standard Derivation	
3.6	Angle	
4	优化问题初步	25
4.1	优化问题引入	
4.2	Convex Set	
4.3	向量偏导	
4.4	投影问题: 标量优化问题	
4.5	Clustering	
5	Linear Independence	31
5.1	线性相关、线性无关	
5.2	Basis	
5.3	标准正交向量	
5.4	Gram-Schmidt Algorithm	

1. 对向量的介绍

1.1 Vector

Definition 1.1.1 — Vector. 一个有序的数字列表.

$$\begin{bmatrix} -1.1 \\ 0.0 \\ 3.6 \\ -7.2 \end{bmatrix} \text{ 或者 } \begin{pmatrix} -1.1 \\ 0.0 \\ 3.6 \\ -7.2 \end{pmatrix} \text{ 或者 } (-1.1, 0, 3.6, -7.2)$$

表中的数字是元素 (项、系数、分量). 元素的数量是向量的大小 (维数, 长度). 大小为 n 的向量称为 n 维向量. 向量中的数字通常被称作标量.

用符号来表示向量, 比如 α , b , 一般小写字母表示. 其它表示形式 g , \vec{a}

Definition 1.1.2 — n 维向量 a 的第 i 元素. n 维向量 a 的第 i 元素表示为 a_i .
有时 i 指的是向量列表中的第 i 个向量.

Definition 1.1.3 — $a = b$. 对于所有 i , 如果有 $a_i = b_i$, 则称两个相同大小的向量 a 和 b 是相等的, 可写成 $a = b$

Definition 1.1.4 — stacked vector. 假设 b 、 c 、 d 是大小为 m 、 n 、 p 的向量

$$a = \begin{bmatrix} b \\ c \\ d \end{bmatrix}$$

$$a = (b_1, b_2, \dots, b_m, c_1, c_2, \dots, c_n, d_1, d_2, \dots, d_p)$$

Definition 1.1.5 — 零向量. 所有项为 0 的 n 维向量表示为 0_n 或者 0.

Definition 1.1.6 — 全一向量. 所有项为 1 的 n 维向量表示为 1_n 或者 1.

Definition 1.1.7 — 单位向量. 当第 i 项为 1, 其余项为 0 时表示为 e_i

$$e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad e_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad e_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Definition 1.1.8 — 稀疏向量. 如果一个向量的许多项都是 0, 该向量为稀疏 (Sparse) 的. 稀疏向量能在计算机上高效地存储和操作.

$\text{nnz}(x)$ 是指向量 x 中非零的项数 (number of non-zeros), 有时用 ℓ_0 表示.

向量 $x = (x_1, x_2)$ 可以在二维中表示一个位置或一个位移、图像、单词统计、颜色等.

1.2 Vector Space

Definition 1.2.1 — 向量空间 V . 设 V 是非空子集, P 是一数域, 向量空间 V 满足:

1. 向量加法: $V + V \rightarrow V$, 记作 $\forall x, y \in V$, 则 $x + y \in V$ (加法封闭)
2. 标量乘法: $F \times V \rightarrow V$, 记作 $\forall x \in V, \lambda \in P$, 则 $\lambda x \in V$ (乘法封闭)

上述两个运算满足下列八条规则 ($\forall x, y, z \in V, \lambda, \mu \in P$)

1. $x + y = y + x$ (交换律)
2. $x + (y + z) = (x + y) + z$ (结合律)
3. V 存在一个零元素, 记作 0, $x + 0 = x$
4. 存在 x 的负元素, 记作 $-x$, 满足 $x + (-x) = 0$
5. $\forall x \in V$, 都有 $1x = x, 1 \in P$
6. $\lambda(\mu x) = (\lambda\mu)x$
7. $(\lambda + \mu)x = \lambda x + \mu x$
8. $\lambda(x + y) = \lambda x + \lambda y$

Corollary 1.2.1 向量空间也称为线性空间.

Corollary 1.2.2 如果 $x, y \in \mathbb{R}^2$, 则 $x + y \in \mathbb{R}^2, \lambda x \in \mathbb{R}^2 (\lambda \in \mathbb{R})$.

Definition 1.2.2 — 数域. 数的非空集合 P , 且其中任意两个数的和、差、积、商 (除数不为零) 仍属于该集合, 则称数集 P 为一个数域.

■ **Example 1.1** 有理数 \mathbb{Q} ■

■ **Example 1.2** 实数 \mathbb{R} ■

$x, y \in \mathbb{R}, x = 1, y = 2, x + y \in \mathbb{R}, x \times y \in \mathbb{R}$ ■

■ **Example 1.3** 复数 \mathbb{C} ■

1.3 向量运算

Definition 1.3.1 — 向量加法. n 维向量 a 和 b 可以相加, 求和形式表示为 $a + b$.

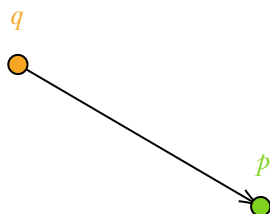
设向量 a, b, c 是向量空间 V 的元素, 即 $a, b, c \in V$.

1. 交换律: $a + b = b + a$
2. 结合律: $(a + b) + c = a + (b + c)$ (因此可写成 $a + b + c$)
3. $a + 0 = 0 + a = a$
4. $a - a = 0$

Corollary 1.3.1 — 向量位移相加. 如果二维向量 a 和 b 都表示位移, 则它们的位移之和为 $a + b$

■ **Example 1.4** 点 q 到点 p 的位移是 $p - q$.

Figure 1.1: The translation from q to p



Definition 1.3.2 — 标量与向量的乘法.

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

标量 β, γ 与向量 a, b 进行乘法, 有如下性质:

1. 结合律: $(\beta\gamma)a = \beta(\gamma a)$
2. 左分配律: $(\beta + \gamma)a = \beta a + \gamma a$
3. 右分配律: $\beta(a + b) = \beta a + \beta b$

Definition 1.3.3 — 线性组合. 对于向量 a_1, \dots, a_m 和标量 β_1, \dots, β_m ,

$$\beta_1 a_1 + \dots + \beta_m a_m$$

是向量的线性组合. β_1, \dots, β_m 是该向量的系数.

■ **Example 1.5** 对于任何向量 $b \in \mathbb{R}^n$, 有如下等式

$$b = b_1 e_1 + \dots + b_n e_n, b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

1.4 内积

Definition 1.4.1 — 内积. 在数域 \mathbb{R} 上的向量空间 V , 定义函数 $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$, 满足:

1. $\langle a, a \rangle \geq 0, \forall a \in V$, 当且仅当 $a = 0$ 时 $\langle a, a \rangle = 0$
2. $\langle \alpha a + \beta b, c \rangle = \alpha \langle a, c \rangle + \beta \langle b, c \rangle, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}$, 且 $a, b, c \in V$
3. $\langle a, b \rangle = \langle b, a \rangle, \forall a, b \in V$

函数 $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ 成为内积.

■ **Example 1.6** 在向量空间 \mathbb{R}^n 上, 计算两个向量对应项相乘之后求和函数

$$\langle a, b \rangle = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_n b_n = a_b^T$$

$$\text{where } a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n. \quad \blacksquare$$

Proof. $\langle a, a \rangle = a_1 a_1 + a_2 a_2 + \cdots + a_n a_n = \sum_{i=1}^n a_i^2 \geq 0$, $\langle a, a \rangle = 0$, 则 $a = 0$

$$\begin{aligned} \langle \alpha a + \beta b, c \rangle &= (\alpha a_1 + \beta b_1) c_1 + (\alpha a_2 + \beta b_2) c_2 + \cdots + (\alpha a_n + \beta b_n) c_n \\ &= \alpha \sum_{i=1}^n a_i c_i + \beta \sum_{i=1}^n b_i c_i \\ &= \alpha \langle a, c \rangle + \beta \langle b, c \rangle \end{aligned}$$

$$\langle a, b \rangle = a^T b = b^T a = \langle b, a \rangle \quad \blacksquare$$

内积的性质：交换律、结合律、分配律.

交换律： $a^T b = b^T a$

结合律： $(\gamma a)^T b = \gamma (a^T b)$

分配律： $(a + b)^T c = a^T c + b^T c$

1.4.1 常用的内积等式

Corollary 1.4.1 — 选出第 i 项.

$$e_i^T a = a_i$$

Corollary 1.4.2 — 向量每一项之和.

$$\mathbf{1}^T a = a_1 + \cdots + a_n$$

Corollary 1.4.3 — 向量每一项的平方和.

$$a^T a = a_1^2 + \cdots + a_n^2$$

Corollary 1.4.4 — 向量元素的平均值.

$$(\mathbf{1}/n)^T a = (a_1 + \cdots + a_n) / n$$

Corollary 1.4.5 — **Selective sum.** Let b be a vector all of whose entries are either 0 or 1 . Then

$$b^T a$$

is the sum of the elements in a for which $b_i = 1$.

Definition 1.4.2 — **The sum of block vectors.** If the vectors a and b are block vectors, and the corresponding blocks have the same sizes (in which case we say they *conform*), then

$$a^T b = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_k \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix} = a_1^T b_1 + \cdots + a_k^T b_k$$

内积用途很广。

■ **Example 1.7** — 计算同时出现的项目数。

$$a = (0, 1, 1, 1, 1, 1, 1), \quad b = (1, 0, 1, 0, 1, 0, 0)$$

Here we have $a^T b = 2$, which is the number of objects in both A and B (i.e., objects 3 and 5). ■

■ **Example 1.8** — **Weights, features, and score.** When the vector f represents a set of *features* of an object, and w is a vector of the same size (often called a *weight vector*), the inner product $w^T f$ is the sum of the feature values, scaled (or weighted) by the weights, and is sometimes called a *score*. ■

■ **Example 1.9**

$$p(x) = c_1 + c_2 x + \cdots + c_{n-1} x^{n-2} + c_n x^{n-1}$$

Let t be a number, $z = (1, t, t^2, \dots, t^{n-1})$ be the n -vector of powers of t . Then

$$c^T z = p(t)$$

■

1.5 Cauchy-Schwartz Inequality

Theorem 1.5.1 — **Cauchy-Schwartz Inequality.** 设 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 是向量空间 V 上的内积, $\forall x, y \in V$, 则有

$$|\langle x, y \rangle|^2 \leq \langle x, x \rangle \langle y, y \rangle$$

Proof. 令 $\lambda \in \mathbb{R}$, 则有 $0 \leq \langle x + \lambda y, x + \lambda y \rangle = \langle x, x \rangle + \lambda \langle y, x \rangle + \lambda \langle x, y \rangle + \lambda^2 \langle y, y \rangle = \langle x, x \rangle + 2\lambda \langle y, x \rangle + \lambda^2 \langle y, y \rangle$

则有 $\lambda^2 \langle y, y \rangle + 2\lambda \langle y, x \rangle + \langle x, x \rangle \geq 0, \forall \lambda \in \mathbb{R}$.

$$\Delta = (2\langle y, x \rangle)^2 - 4\langle y, y \rangle \langle x, x \rangle \leq 0$$

$$|\langle x, y \rangle|^2 \leq \langle x, x \rangle \langle y, y \rangle$$

当 $|\langle x, y \rangle|^2 = \langle x, x \rangle \langle y, y \rangle$ 时, 有 $\langle x, x \rangle^2 + 2\lambda \langle y, x \rangle + \lambda^2 \langle y, y \rangle = 0$

也即 $\langle x + \lambda y, x + \lambda y \rangle = 0$, 因此 $x + \lambda y = 0$, 即 $x = -\lambda y$. ■

1.6 浮点运算

计算机以浮点格式存储 (实) 数值.

基本的算术运算 (加法, 乘法等) 被称为浮点运算 (flop).

算法或操作的时间复杂度: 作为输入维数的函数所需要的浮点运算总数.

算法复杂度通常以非常粗略地近似估算.

(程序) 执行时间的粗略估计: 计算机速度/flops

目前的计算机大约是 1Gflops/秒 (10^9 flops/秒)

Corollary 1.6.1 假设有 n 维向量 x 和 y :

- $x + y$ 需要 n 次加法, 所以时间复杂度为 (n) flops.
- $x^T y$ 需要 n 次乘法和 $n - 1$ 次加法, 所以时间复杂度为 $(2n - 1)$ flops.

- 对于 $x^T y$, 通常将其时间复杂度简化为 $2n$, 甚至为 n .
- 当 x 或 y 是稀疏的时候, 算法的实际运算时间会比理论时间更少.

2. Linear Function

2.1 Linear Function

Definition 2.1.1 — Linear Function. f 是一个将 n 维向量映射成数的函数.

$$f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$$

线性函数 f 满足以下两个性质 ($k \in \mathbb{R}, x, y \in \mathbb{R}^n$) :

- 齐次性 (homogeneity): $f(kx) = kf(x)$
- 叠加性 (Additivity): $f(x + y) = f(x) + f(y)$

■ **Example 2.1** 求平均值: $f(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$ 为线性函数. ■

■ **Example 2.2** 求最大值: $f(x) = \max \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 并不是线性函数. ■

Proof. 令 $x = (1, -1), y = (-1, 1), \alpha = 0.5, \beta = 0.5$, 有

$$f(\alpha x + \beta y) = 0 \neq \alpha f(x) + \beta f(y) = 1$$

$$\begin{aligned} f(x + y) &= \max \{x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots, x_n + y_n\} \\ &\leq \max \{x_1, x_2, \dots, x_n\} + \max \{y_1, y_2, \dots, y_n\} \\ &\leq f(x) + f(y) \end{aligned}$$

Theorem 2.1.1 设 $\alpha_1, \dots, \alpha_m \in \mathbb{R}, u_1, \dots, u_m \in \mathbb{R}^n$, 则线性函数 f 满足

$$\begin{aligned} f(\alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2 + \dots + \alpha_m u_m) &= f(\alpha_1 u_1) + f(\alpha_2 u_2 + \dots + \alpha_m u_m) \\ &= \alpha_1 f(u_1) + f(\alpha_2 u_2 + \dots + \alpha_m u_m) \\ &= \alpha_1 f(u_1) + \alpha_2 f(u_2) + \dots + \alpha_m f(u_m) \end{aligned}$$

Definition 2.1.2 — 内积函数 (inner product function). 对于 n 维向量 a , 满足以下形式的函数被称为内积函数

$$f(x) = a^T x = a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_n x_n$$

上述 $f(x)$ 可以看作是每项 x_i 的加权之和.

Corollary 2.1.2 内积函数都是线性的.

Proof.

$$\begin{aligned} f(\alpha x + \beta y) &= a^T (\alpha x + \beta y) \\ &= a^T (\alpha x) + a^T (\beta y) \\ &= \alpha (a^T x) + \beta (a^T y) \\ &= \alpha f(x) + \beta f(y) \end{aligned}$$

■

Corollary 2.1.3 所有线性函数都是内积.

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_1 e_1 + x_2 e_2 + \dots + x_n e_n) \\ &= x_1 f(e_1) + x_2 f(e_2) + \dots + x_n f(e_n) \end{aligned}$$

Proof. 假设 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 是线性函数, 那么可用 $f(x) = a^T x$ 来表示, a 为常量.

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_1 e_1 + x_2 e_2 + \dots + x_n e_n) \\ &= x_1 f(e_1) + x_2 f(e_2) + \dots + x_n f(e_n) \end{aligned}$$

■

Definition 2.1.3 — 仿射函数 (affine function). 其一般形式为 $f(x) = a^T x + b$, 其中 $a \in \mathbb{R}^n$, $b \in \mathbb{R}$ 为标量.

Theorem 2.1.4 函数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ 为仿射函数需要满足

$$f(\alpha x + \beta y) = \alpha f(x) + \beta f(y), \alpha + \beta = 1, \alpha, \beta \in \mathbb{R}, x, y \in \mathbb{R}^n$$

2.2 泰勒展开

Definition 2.2.1 — 函数 f 第 i 个分量的一阶偏导数. 假设 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 函数 f 在 z 点可微

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial z_i}(z) &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(z_1, \dots, z_{i-1}, z_i + t, z_{i+1}, \dots, z_n) - f(z)}{t} \\ &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(z + t e_i) - f(z)}{t} \end{aligned}$$

Definition 2.2.2 — f 在点 z 的梯度.

$$\nabla f(z) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial z_1}(z) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial z_n}(z) \end{bmatrix}$$

Definition 2.2.3 — Taylor's Approximation. 假设 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 函数 f 在 z 点充分光滑, 即处处可导.

$$f(x) = f(z) + \frac{\partial f}{\partial x_1}(z)(x_1 - z_1) + \frac{\partial f}{\partial x_2}(z)(x_2 - z_2) + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_n}(z)(x_n - z_n) \\ + \frac{1}{2!} \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(z)(x_i - z_i)(x_j - z_j) + \cdots$$

■ **Example 2.3** 泰勒公式利用多项式在一点附近逼近函数

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \cdots + (-1)^{k-1} \frac{x^{2k-1}}{(2k-1)!} + \frac{\sin \left[\xi + (2k+1) \frac{\pi}{2} \right]}{(2k+1)!} x^{2k+1}$$

一次逼近: $\sin x \approx x$

三次逼近: $\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!}$ ■

Proof.

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x)$$

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)^2 + \cdots + a_n(x - x_0)^n$$

$$R_n(x) = o(x - x_0)^n$$

$$f(x) \approx P_n(x)$$

$$\therefore P_n(x_0) = f(x_0), P'_n(x_0) = f'(x_0), P''_n(x_0) = f''(x_0), \cdots, P_n^{(n)}(x_0) = f^{(n)}(x_0)$$

$$\text{要求 } P_n(x_0) = f(x_0) \Rightarrow a_0 = f(x_0)$$

$$P'_n(x) = a_1 + 2a_2(x - x_0) + \cdots + na_n(x - x_0)^{n-1} \Rightarrow a_1 = f'(x_0)$$

$$\text{依此类推. } a_n = \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} \quad \blacksquare$$

Corollary 2.2.1 — n 阶泰勒多项式.

$$P_n(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 \\ + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n$$

$$\text{where } a_n = \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}$$

Corollary 2.2.2 — 对于高阶余项的公式. 带拉格朗日余项的泰勒公式

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 \\ + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}$$

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1} \quad (\xi \text{ 在 } x_0 \text{ 与 } x \text{ 之间})$$

Corollary 2.2.3 — 麦克劳林 (Maclaurin) 公式. 在零点展开麦克劳林 (Maclaurin) 公式

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n + \frac{f^{(n+1)}(\theta x)}{(n+1)!}x^{n+1} \quad (0 < \theta < 1)$$

Definition 2.2.4 — 一阶泰勒公式. 假设 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 函数 f 在 z 点可导

$$\hat{f}(x) = f(z) + \frac{\partial f}{\partial x_1}(z)(x_1 - z_1) + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_n}(z)(x_n - z_n)$$

当 x 非常接近 z 时, $\hat{f}(x)$ 也非常接近 $f(z)$. $\hat{f}(x)$ 是关于 x 的一个仿射函数.

Corollary 2.2.4 — 一阶泰勒公式的内积形式.

$$\hat{f}(x) = f(z) + \nabla f(z)^T (x - z) \quad (\nabla f(z) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(z) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(z) \end{bmatrix})$$

一维时, $\hat{f}(x) = f(z) + f'(z)(x - z)$.

■ **Example 2.4**

$$f(x) = x_1 - 3x_2 + e^{2x_1+x_2-1}$$

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(x) \\ \frac{\partial f}{\partial x_2}(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + 2e^{2x_1+x_2-1} \\ -3 + e^{2x_1+x_2-1} \end{bmatrix}$$

函数 f 在 0 点的一阶泰勒公式为:

$$\hat{f}(x) = f(0) + \nabla f(0)^T (x - 0) = e^{-1} + (1 + 2e^{-1})x_1 + (-3 + e^{-1})x_2$$

■

2.3 Regression Model

Definition 2.3.1 — Regression Model. 回归模型 (regression model) 为关于 x 的仿射函数

$$\hat{y} = x^T \beta + v$$

x 是特征向量 (feature vector), 它的元素 x_i 称为回归元 (regressors). n 维向量 β 是权重向量 (weight vector). 标量 v 是偏移量 (offset). 标量 \hat{y} 是预测值 (prediction). 表示某个实际结果或因变量, 用 y 表示.

3. Norm and Distance

3.1 Vector Norm

Definition 3.1.1 — Vector Norm. 在向量空间中存在一个函数 $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, 且满足以下条件

- 齐次性: $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$, $\alpha \in \mathbb{R}$ 且 $x \in \mathbb{R}^n$;
- 三角不等式: $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$, $x, y \in \mathbb{R}^n$;
- 非负性: $\|x\| \geq 0$, $x \in \mathbb{R}^n$ 且 $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$;

则称 $\|\cdot\|$ 为向量范数.

■ **Example 3.1 — ℓ_1 -范数 (曼哈顿范数, Manhattan norm)** .

$$\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n| \quad x, y \in \mathbb{R}^n, \alpha \in \mathbb{R}$$

Proof.

$$\|\alpha x\|_1 = |\alpha x_1| + |\alpha x_2| + \dots + |\alpha x_n| = |\alpha| \|x\|_1 \geq 0$$

$$\|x + y\|_1 = |x_1 + y_1| + \dots + |x_n + y_n| \leq |x_1| + |y_1| + \dots + |x_n| + |y_n| = \|x\|_1 + \|y\|_1$$

■ **Example 3.2 — ℓ_2 -范数 (欧几里得范数, Euclidean norm)** .

$$\|x\|_2 = \sqrt{(x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2)} = \sqrt{x^T x} = (\langle x, x \rangle)^{\frac{1}{2}}$$

Proof.

$$\|\alpha x\|_2 = (\langle \alpha x, \alpha x \rangle)^{\frac{1}{2}} = |\alpha| (\langle x, x \rangle)^{\frac{1}{2}} = |\alpha| \|x\|_2$$

$$\begin{aligned}
\|x+y\|_2^2 &= \langle x+y, x+y \rangle = \langle x, x \rangle + \langle x, y \rangle + \langle y, x \rangle + \langle y, y \rangle \\
&= \|x\|_2^2 + 2\langle x, y \rangle + \|y\|_2^2 \leq \|x\|_2^2 + 2\|x\|_2\|y\|_2 + \|y\|_2^2 \\
&= (\|x\|_2 + \|y\|_2)^2
\end{aligned}$$

$$\|x+y\|_2 \leq \|x\|_2 + \|y\|_2$$

■

Corollary 3.1.1 — 柯西—施瓦茨不等式.

$$|\langle x, y \rangle|^2 \leq \langle x, x \rangle \langle y, y \rangle = \|x\|_2^2 \|y\|_2^2$$

Definition 3.1.2 — ℓ_∞ -范数.

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|, x \in \mathbb{R}^n$$

Proof.

$$\begin{aligned}
\max_{1 \leq i \leq n} |x_i| &\leq (|x_1|^p + \cdots + |x_i|^p + \cdots + |x_n|^p)^{1/p} \\
&\leq \left(n \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|^p \right)^{1/p} \\
&= n^{1/p} \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \\
&\rightarrow \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| \quad (p \rightarrow \infty)
\end{aligned}$$

■

Definition 3.1.3 — ℓ_p -范数.

$$\|x\|_p = \left(x_1^p + x_2^p + \cdots + x_n^p \right)^{\frac{1}{p}}, \quad x \in \mathbb{R}^n, p \geq 1$$

ℓ_1 范数 $\|x\|_1$, ℓ_2 -范数 $\|x\|_2$, ℓ_∞ -范数是 ℓ_p -范数的特例.

证明可以使用以下两条不等式

Theorem 3.1.2 — Minkowski Inequality.

$$\left(\sum_{i=1}^n |x_i + y_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \leq \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} + \left(\sum_{i=1}^n |y_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}, \quad p \geq 1, x, y \in \mathbb{R}^n$$

Theorem 3.1.3 — Hölder Inequality.

$$\sum_{i=1}^n |x_i y_i| \leq \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p} \left(\sum_{i=1}^n |y_i|^q \right)^{1/q}, \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1, 1 < p, q < \infty$$

3.2 Root Mean Square Value (RMS)

Definition 3.2.1 — 向量 x 的均方值 (mean-square value). 向量 $x \in \mathbb{R}^n$ 的均方值 (mean-square value)

$$\frac{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}{n} = \frac{\|x\|_2^2}{n}$$

Definition 3.2.2 — n 维向量 x 的均方根 (root-mean-square value, RMS).

$$\text{rms}(x) = \sqrt{\frac{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}{n}} = \frac{\|x\|_2}{\sqrt{n}}$$

$\text{rms}(x)$ 给出了 $|x_i|$ 的“典型” (typical) 值. 例如, $\text{rms}(\mathbf{1}) = 1$ (与 n 无关). 均方根 (RMS) 值对于比较不同长度的向量大小是比较有用的.

3.3 Chebyshev's Inequality

Theorem 3.3.1 — Chebyshev's Inequality.

$$P(|X - \mu| \geq \varepsilon) \leq \frac{\sigma^2}{\varepsilon^2}$$

$$P(|X - \mu| < \varepsilon) \geq 1 - \frac{\sigma^2}{\varepsilon^2}$$

Theorem 3.3.2 — Chebyshev's Inequality. 假设 k 为向量 x 分量满足条件 $|x_i| \geq a$ 的个数, 即 $x_i^2 \geq a^2$ 的个数.

因此: $\|x\|_2^2 = x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2 \geq ka^2$

将 a^2 移项, 可得到 $k \leq \frac{\|x\|_2^2}{a^2}$

满足 $|x_i| \geq a$ 的 x_i 数量不会超过 $\frac{\|x\|_2^2}{a^2}$

Corollary 3.3.3 — Chebyshev's Inequality Using RMS.

$$\text{rms}(x) = \sqrt{\frac{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}{n}} = \frac{\|x\|_2}{\sqrt{n}}$$

$|x_i| \geq a$ 的项数占整体的比例不会超过 $\left(\frac{\text{rms}(x)}{a}\right)^2$, 即 $\frac{k}{n} \leq \left(\frac{\text{rms}(x)}{a}\right)^2$

3.4 Distance

Definition 3.4.1 — Euclidean distance. n 维向量 a 和 b 之间的欧氏距离

$$\text{dist}(a, b) = \|a - b\|_2$$

Definition 3.4.2 — RMS deviation. $\text{rms}(a - b)$ 是 a 和 b 之间的均方根偏差.

Theorem 3.4.1 — Triangular Inequality.

$$\|a - c\|_2 = \|(a - b) + (b - c)\|_2 \leq \|a - b\|_2 + \|b - c\|_2$$

3.4.1 Feature Distance and Nearest Neighbor

Definition 3.4.3 — Feature Distance. 如果 x 和 y 分别为两个实体的特征向量, 那么它们的特征距离 (feature distance) 为 $\|x - y\|_2$

Definition 3.4.4 给定向量 x , 一个组向量 Z_1, \dots, Z_m , 当 \hat{q}_j 满足:

$$\|x - z_j\|_2 \leq \|x - z_i\|_2, \quad i = 1, \dots, m$$

则称 z_j 是 x 的最近邻 (nearest neighbor)

3.5 Standard Derivation

Definition 3.5.1 — 算术平均值. 对于 n 维向量 x

$$\text{avg}(x) = \frac{\mathbf{1}^T x}{n}$$

Definition 3.5.2 — De-meaned Vector.

$$\tilde{x} = x - \text{avg}(x)\mathbf{1}$$

因此 $\text{avg}(\tilde{x}) = 0$

Definition 3.5.3 — x 的标准差.

$$\text{std}(x) = \text{rms}(\tilde{x}) = \frac{\|x - (\mathbf{1}^T x/n)\mathbf{1}\|_2}{\sqrt{n}}$$

$\text{std}(x)$ 表示数据元素的变化程度. 对于常数 α , 当且仅当 $x = \alpha\mathbf{1}$ 时, $\text{std}(x) = 0$.

Theorem 3.5.1

$$\text{rms}(x)^2 = \text{avg}(x)^2 + \text{std}(x)^2$$

3.6 Angle

Definition 3.6.1 — 两个非零向量 a 和 b 之间的角 (angle).

$$\angle(a, b) = \arccos\left(\frac{a^T b}{\|a\|_2 \|b\|_2}\right)$$

$\angle(a, b)$ 的取值范围为 $[0, \pi]$, 且满足

$$a^T b = \|a\|_2 \|b\|_2 \cos(\angle(a, b))$$

在二维和三维向量之中, 这里的角与普通角度 (ordinary angle) 是一致的.

- $\theta = \frac{\pi}{2} = 90^\circ$: a 和 b 为正交, 写作 $a \perp b$ ($a^T b = 0$).
- $\theta = 0$: a 和 b 为同向的 ($a^T b = ab$).
- $\theta = \pi = 180^\circ$: a 和 b 为反向的 ($a^T b = -ab$).
- $\theta < \frac{\pi}{2} = 90^\circ$: a 和 b 成锐角 ($a^T b > 0$).
- $\theta > \frac{\pi}{2} = 90^\circ$: a 和 b 成钝角 ($a^T b < 0$).

Definition 3.6.2 — 球面的距离.

$$\text{R}\angle(a, b)$$

3.6.1 相关系数

给定向量 a 和 b , 其去均值向量为:

$$\tilde{a} = a - \text{avg}(a)1, \tilde{b} = b - \text{avg}(b)1$$

Definition 3.6.3 — a 和 b 的相关系数.

$$\rho = \frac{\tilde{a}^T \tilde{b}}{\|\tilde{a}\|_2 \|\tilde{b}\|_2} = \cos \angle(\tilde{a}, \tilde{b})$$

where $\tilde{a} \neq 0, \tilde{b} \neq 0$.

■ **Example 3.3** 高度相关的向量:

- 邻近地区的降雨时间序列.
- 类型密切相关文档的单词计数向量.
- 同行业中类似公司的日收益.

比较不相关的向量:

- 无关的向量.
- 音频信号 (比如, 在多轨录音中的不同轨).

负相关的向量:

- 深圳与墨尔本的每天气温变化

■

4. 优化问题初步

4.1 优化问题引入

Problem 4.1 假设 N 个样本向量 $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{R}^n$, 需要找到中心向量 z 满足

$$\min_{z \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^N \|x_i - z\|_2^2$$

Definition 4.1.1 — 高阶无穷小记号 o . 设 x, y 是同一变化过程中的无穷小, 即 $x \rightarrow 0, y \rightarrow 0$, 如果它们极限

$$\lim \frac{y}{x} = 0$$

则称 y 是 x 的高阶无穷小, 记作 $y = o(x)$.

Corollary 4.1.1

$$\lim \frac{y}{Cx} = \frac{1}{C} \lim \frac{y}{x} = 0$$

也即则称 y 是 Cx 的高阶无穷小, 记作 $y = o(Cx)$.

Proposition 4.1.2 — 优化求解的必要条件. 假设函数 f 在 \hat{x} 可微, 则有

$$\hat{x} = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \Rightarrow \nabla f(\hat{x}) = 0$$

Proof. 假设函数 f 在 \hat{x} 一阶泰勒展开, 有

$$f(x) = f(\hat{x}) + \langle \nabla f(\hat{x}), x - \hat{x} \rangle + o(\|x - \hat{x}\|_2)$$

假设 $\delta f(\hat{x}) \neq 0$, 则令 $\tilde{x} = \hat{x} - t \nabla f(\hat{x}), t > 0$, 可得

$$f(\tilde{x}) = f(\hat{x}) - t \|\nabla f(\hat{x})\|_2^2 + o(t \|\nabla f(\hat{x})\|_2)$$

当 $t \rightarrow 0$ 则 $t\|\nabla f(\hat{x})\|_2 \rightarrow 0$, 高阶无穷小 $o'(t\|\nabla f(\hat{x})\|_2) \rightarrow 0$
 当 t 足够小时, 存在 $t\|\nabla f(\hat{x})\|_2 \geq o(t\|\nabla f(\hat{x})\|_2)$, 即

$$-t\|\nabla f(\hat{x})\|_2^2 + o(t\|\nabla f(\hat{x})\|_2) \leq 0$$

$$f(\tilde{x}) = f(\hat{x}) - t\|\nabla f(\hat{x})\|_2^2 + o(t\|\nabla f(\hat{x})\|_2) \leq f(\hat{x})$$

与 $\hat{x} = \arg \min_{\mathbf{R}^n} f(x)$ 矛盾.

$\nabla f(\hat{x}) = 0$, 是最优问题解的必要条件. 通常 $\nabla f(\hat{x}) = 0 \Leftrightarrow \hat{x} = \arg \min_{\mathbf{R}^n} f(x)$. ■

■ Example 4.1

$$f(x) = -x^2, \quad x \in \mathbf{R}, \hat{x} = \operatorname{argmin}_{\mathbf{R}} f(x)$$

$\nabla f(\hat{x}) = 0$, 则有 $-2\hat{x} = 0$, 即 $\hat{x} = 0$

$$f(\hat{x}) = 0 \geq f(x), \quad x \in \mathbf{R}$$

(最大值!) ■

4.2 Convex Set

Definition 4.2.1 — 凸集. $\forall x, y \in \Omega, \alpha \in \mathbf{R}, 0 \leq \alpha \leq 1$ 有

$$\alpha x + (1 - \alpha)y \in \Omega$$

则定义域 $\Omega \in \mathbf{R}^n$ 称为凸的 (Convex) 集合
 (域内两点连线之间都属于这个域)

Definition 4.2.2 — 凸函数. 设函数 $f(x)$ 定义于称为凸的定义域 $\Omega \in \mathbf{R}^n$ 满足

$$f(\alpha x + (1 - \alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y), \quad \forall x, y \in \Omega, \alpha \in \mathbf{R}, 0 \leq \alpha \leq 1$$

称其为凸函数.

■ Example 4.2

$$f(x) = x^2, \quad x \in \mathbf{R}$$

$$\begin{aligned} f(\alpha x + (1 - \alpha)y) &= (\alpha x + (1 - \alpha)y)^2 \\ &= \alpha^2 x^2 + 2\alpha(1 - \alpha)xy + (1 - \alpha)^2 y^2 \\ &= \alpha x^2 + (1 - \alpha)y^2 + (\alpha^2 - \alpha)x^2 + (\alpha^2 - \alpha)y^2 + 2\alpha(1 - \alpha)xy \\ &= \alpha x^2 + (1 - \alpha)y^2 - \alpha(1 - \alpha)(x - y)^2 \\ &\leq \alpha x^2 + (1 - \alpha)y^2 = \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) \end{aligned}$$

■ Example 4.3 $f(x) = \|x\|$, 其中 $\| \cdot \|$ 表示 \mathbf{R}^n 上的向量范数, $x \in \mathbf{R}^n$. ■

Proof.

$$\|\alpha x + (1 - \alpha)y\| \leq \|\alpha x\| + \|(1 - \alpha)y\| = |\alpha|\|x\| + |1 - \alpha|\|y\|$$

■ Example 4.4

$$f(x) = \|x\|_2^2, x \in \mathbb{R}^n$$

Theorem 4.2.1 — 可微函数 f 是凸函数的充要条件.

$$f(y) \geq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle, \quad \forall x, y$$

Proof. 首先, 证明一维情况 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, \alpha \in [0, 1]$.

\Rightarrow 充分条件: $f(\alpha x + (1 - \alpha)y) = f(x + (1 - \alpha)(y - x)) \leq \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y)$, 有

$$f(y) \geq f(x) + \frac{f(x + (1 - \alpha)(y - x)) - f(x)}{(1 - \alpha)(y - x)}(y - x)$$

令 $\alpha \rightarrow 1^-$, 则有 $f(y) \geq f(x) + f'(x)(y - x)$.

\Leftarrow 必要条件: 令 $y \neq x, z = \alpha x + (1 - \alpha)y$ 则有

$$f(x) \geq f(z) + f'(z)(x - z), f(y) \geq f(z) + f'(z)(y - z)$$

可得

$$\begin{aligned} \alpha f(x) + (1 - \alpha)f(y) &\geq f(z) + \alpha f'(z)(x - z) + (1 - \alpha)f'(z)(y - z) \\ &= f(z) + f'(z)(\alpha x + (1 - \alpha)y - z) \\ &= f(z) \end{aligned}$$

证明 n 维情况 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

\Rightarrow 充分条件: 令 $g(t) = f(tx + (1 - t)y), t \in \mathbb{R}$, 则 $g'(t) = \langle \nabla f(tx + (1 - t)y), x - y \rangle$ 由于 f 是凸函数, 证明 $g(t)$ 也是凸函数; 并可得 $g(0) \geq g(1) + g'(1)(-1)$, 得证.

\Leftarrow 必要条件: 与一维类似. (将 f' 改为 $\nabla f(z)^T$)

Theorem 4.2.2 如果可微函数 f 是凸函数, 则有

$$\hat{x} = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \Leftrightarrow \nabla f(\hat{x}) = 0$$

Proof. 已证 $\hat{x} = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \Rightarrow$ 可得 $\nabla f(\hat{x}) = 0$

只需证 $\nabla f(\hat{x}) = 0 \Rightarrow \hat{x} = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$.

由于函数 f 是可微凸的, 则有 $\forall x \in \mathbb{R}^n$,

$$\begin{aligned} f(x) &\geq f(\hat{x}) + \langle \nabla f(\hat{x}), x - \hat{x} \rangle \\ &\geq f(\hat{x}) + \langle 0, x - \hat{x} \rangle \geq f(\hat{x}) \end{aligned}$$

可得 $f(x) \geq f(\hat{x}), \hat{x} = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$.

4.3 向量偏导

Definition 4.3.1 — 向量对向量的导数.

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, z = \begin{bmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix}$$

$$\nabla f(z) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(z)}{\partial z_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(z)}{\partial z_n} \end{bmatrix}$$

■ **Example 4.5**

$$f(z) = x^T z + z^T z = \sum_{i=1}^n \{x_i z_i + z_i^2\}$$

$$\nabla f(z) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(z)}{\partial z_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(z)}{\partial z_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 + 2z_1 \\ \vdots \\ x_n + 2z_n \end{bmatrix} = x + 2z$$

问题4.1中已知目标函数是凸函数。（见4.2, 4.3, 4.2）
则可以求解

$$f(z) = \sum_{i=1}^N \|x_i - z\|_2^2 = \sum_{i=1}^N \langle x_i - z, x_i - z \rangle = \sum_{i=1}^N \{x_i^T x_i - 2x_i^T z + z^T z\}$$

利用等价条件4.2.1

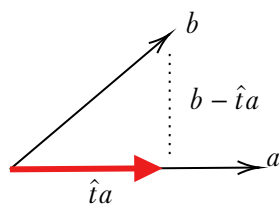
$$\nabla f(z) = \sum_{i=1}^N \{-2x_i + 2z\} = 0$$

(求导 4.3.1)

$$z = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

4.4 投影问题: 标量优化问题

Figure 4.1: Projection onto a line



Problem 4.2 假设 $a, b \in \mathbb{R}^n$, $a \neq 0$, $t \in \mathbb{R}$, 当 t 多大时, ta 到 b 之间的距离最小

$$\hat{t} = \min_t \|ta - b\|_2^2$$

定义

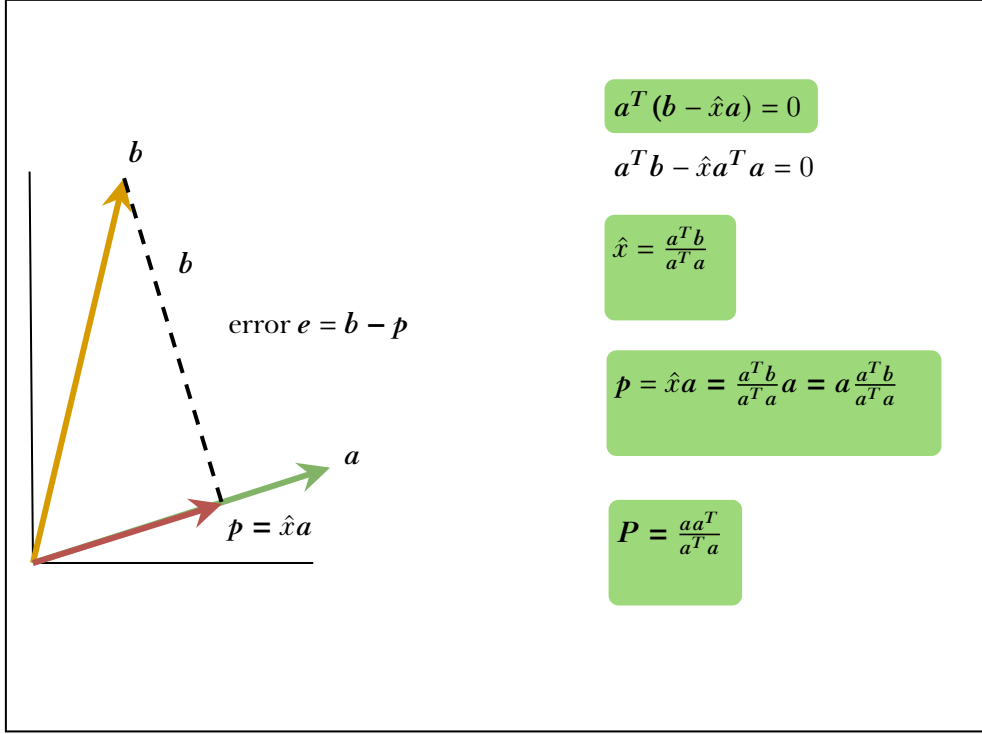
$$f(t) = \|ta - b\|_2^2 = \langle ta - b, ta - b \rangle = t^2 a^T a - 2ta^T b + b^T b$$

可以验证 $f(t)$ 满足凸函数的定义。

$$\nabla f(t) = 2ta^T a - 2a^T b = 0$$

$$\hat{t} = \frac{a^T b}{a^T a} = \frac{a^T b}{\|a\|_2^2}$$

Figure 4.2: Projection onto a line from the prospective of linear algebra.



4.5 Clustering

将物理或抽象对象的集合分成由类似特征组成的多个类的过程称为聚类 (*clustering*).

目标: 分成 k 个集合, 尽量使得同一个集合中的向量彼此接近.

Notation 4.1. 给定 N 个 n 维向量 $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{R}^n$

- 标签 $c_i \in \{1, 2, \dots, k\}$ 表示向量 x_i 所属类别, 例如 $c_i = 2$ 表示 x_i 属于第 2 类.
- 对于 $j = 1, \dots, k$, $G_j = \{i : c_i = j\}$ 表示属于第 j 类的向量 x_i 的下标集合.
- 向量 $z_j, j = 1, \dots, k$, 表示同属于 j 类的向量 $x_i, i \in G_j$ 的聚类中心.

聚类目标是找到向量 x_i 的“标签 c_i ”和“聚类中心 z_j ”

Problem 4.3

$$\min_{z_j} \sum_{i \in G_j} \|x_i - z_j\|_2^2, j = 1, \dots, k$$

$$c_i = \operatorname{argmin}_{j \in \{1, \dots, k\}} \|x_i - z_j\|_2^2, i = 1, 2, \dots, N$$

k -means 算法是将 N 向量 $x_i \in \mathbb{R}^n$ 划分成 k 类的迭代聚类算法.

Proof. 更新聚类标签 c_i :

$$\|x_i - z_j\|_2^2 = \operatorname{argmin} \{\|x_i - z_1\|_2^2, \|x_i - z_2\|_2^2, \dots, \|x_i - z_k\|_2^2\}$$

更新聚类中心 z_j :

Algorithm 1: k -means Algorithm

- 1 在 N 个点中随机选取 k 个点, 分别作为聚类中心 z_j
- 2 更新聚类标签 c_i : 计算每个点 x_i 到 k 个聚类中心 z_j 的距离, 并将其分配到最近的聚类中心 z_j 所在的聚类中 $c_i = j$
- 3 更新聚类中心 z_j : 重新计算每个聚类现在的质心, 并以其作为新的聚类中心, 根据更新标签 c_i , 更新属于第 j 类下标集合 $G_j = \{i : c_i = j\}$, 重新计算 c_i 类的聚类中心 z_j
- 4 重复步骤 2、3, 直到所有聚类中心不再变化

$$\nabla f_j(z_j) = \sum_{i \in G_j} 2(x_i - z_j) = 0$$

$$z_j = \frac{1}{|G_j|} \sum_{i \in G_j} x_i$$

$|G_j|$ 表示集合 G_j 中元素的数目. ■

在每一次迭代中目标函数 J 都会下降, 直到聚类中心 z_1, \dots, z_k 和划分聚类标签集合 G_1, \dots, G_k 不再变化.

但是 k -means 算法依赖于初始随机生成的聚类中心, 只可得到目标函数 J 的局部局部最优.

解决方案: 使用不同的 (随机的) 初始聚类中心运行 k -means 算法若干次, 取目标函数 J 值最小的一次作为最终的聚类结果.

5. Linear Independence

5.1 线性相关、线性无关

Definition 5.1.1 — 线性相关 (linearly dependent). 定义：对于向量 $a_1, \dots, a_m \in \mathbb{R}^n$, 如果存在不全为零的数 $\beta_1, \dots, \beta_m \in \mathbb{R}$, 使得

$$\beta_1 a_1 + \dots + \beta_m a_m = 0$$

则称向量 a_1, \dots, a_m 是线性相关 (linearly dependent).

线性相关等价于至少有一个向量 a_i 是其它向量的线性组合.

Corollary 5.1.1 向量集 $\{a_1\}$ 是线性相关的, 当且仅当 $a_1 = 0$.

向量集 $\{a_1, a_2\}$ 是线性相关的, 当且仅当其中一个 $a_1 = \beta a_2, \beta \neq 0$.

Definition 5.1.2 — 线性独立 (linearly independent). 如果 n 维向量集 $\{a_1, \dots, a_m\}$ 不是线性相关的, 即线性独立 (linearly independent), 也称线性无关, 即:

$$\beta_1 a_1 + \dots + \beta_m a_m = 0$$

当且仅当 $\beta_1 = \dots = \beta_m = 0$, 上述等式成立.

线性无关等价于不存在一个向量 a_i 是其它向量的线性组合.

Corollary 5.1.2 注：一个 n 维向量集最多有 n 个线性无关的向量, 也就是说如果 n 维向量集有 $n+1$ 个向量, 那它们必线性相关

■ **Example 5.1** n 维单位向量 e_1, \dots, e_n 是线性独立的. ■

■ **Example 5.2**

$$a_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad a_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad a_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\beta_1 a_1 + \beta_2 a_2 + \beta_3 a_3 = \begin{bmatrix} \beta_1 - \beta_2 \\ -2\beta_1 + \beta_3 \\ \beta_2 + \beta_3 \end{bmatrix} = 0$$

$$\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = 0$$

■

Theorem 5.1.3 假设 x 是线性无关向量 a_1, \dots, a_k 的线性组合:

$$x = \beta_1 a_1 + \dots + \beta_k a_k$$

则其系数 β_1, \dots, β_k 是唯一的, 即如果有:

$$x = \gamma_1 a_1 + \dots + \gamma_k a_k$$

则对于 $i = 1, \dots, k$, 有 $\beta_i = \gamma_i$.

Proof. 系数是唯一的原因:

$$(\beta_1 - \gamma_1) a_1 + \dots + (\beta_k - \gamma_k) a_k = x - x = 0$$

由于向量 a_1, \dots, a_k 线性无关, 有 $\beta_1 - \gamma_1 = \beta_k - \gamma_k = 0$.

■

5.2 Basis

Definition 5.2.1 — 基 (basis). n 个线性独立的 n 维向量 a_1, \dots, a_n 的集合

Definition 5.2.2 — 向量 b 在基底 a_1, \dots, a_n 下的分解. 任何一个 n 维向量 b 都可以用它们的线性组合来表示

$$b = \beta_1 a_1 + \dots + \beta_n a_n$$

Proof. 同一向量的系数是唯一的.

■

■ **Example 5.3** e_1, \dots, e_n 是一组基, 那么 b 在此基底下的分解为

$$b = b_1 e_1 + \dots + b_n e_n, b = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

■

5.3 标准正交向量

Definition 5.3.1 — Orthogonal Vectors. 在 n 维向量集 a_1, \dots, a_k 中, 如果对于 $i \neq j$, 都有 $a_i \perp a_j$, 则称它们相互正交 (orthogonal).

Definition 5.3.2 — Orthonormal Vectors. 如果 n 维向量集 a_1, \dots, a_k 相互正交, 且每个向量的模长都为单位长度 1, 即对于 $i = 1, \dots, k$, 有 $\|a_i\|_2^2 = 1$, 则称它们是标准正交 (orthonormal) 的.

$$a_i^T a_j = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

Corollary 5.3.1 标准正交的向量集是线性无关的.

Corollary 5.3.2 根据线性无关的性质, 必有向量集向量个数 $k \leq n$.

Proof. The proof is by induction on the dimension n .

First consider a linearly independent collection a_1, \dots, a_k of 1-vectors. We must have $a_1 \neq 0$. This means that every element a_i of the collection can be expressed as a multiple $a_i = (a_i/a_1) a_1$ of the first element a_1 . This contradicts linear independence unless $k = 1$.

Next suppose $n \geq 2$ and the independence-dimension inequality holds for dimension $n-1$.

Let a_1, \dots, a_k be a linearly independent list of n -vectors. We need to show that $k \leq n$. We partition the vectors as

$$a_i = \begin{bmatrix} b_i \\ \alpha_i \end{bmatrix}, \quad i = 1, \dots, k$$

where b_i is an $(n-1)$ -vector and α_i is a scalar.

First suppose that $\alpha_1 = \dots = \alpha_k = 0$. Then the vectors b_1, \dots, b_k are linearly independent: $\sum_{i=1}^k \beta_i b_i = 0$ holds if and only if $\sum_{i=1}^k \beta_i a_i = 0$, which is only possible for $\beta_1 = \dots = \beta_k = 0$ because the vectors a_i are linearly independent. The vectors b_1, \dots, b_k therefore form a linearly independent collection of $(n-1)$ -vectors. By the induction hypothesis we have $k \leq n-1$, so certainly $k \leq n$.

Next suppose that the scalars α_i are not all zero. Assume $\alpha_j \neq 0$. We define a collection of $k-1$ vectors c_i of length $n-1$ as follows:

$$c_i = \begin{cases} b_i - \frac{\alpha_i}{\alpha_j} b_j, & i = 1, \dots, j-1 \\ b_{i+1} - \frac{\alpha_{i+1}}{\alpha_j} b_j, & i = j, \dots, k-1 \end{cases}$$

These $k-1$ vectors are linearly independent: If $\sum_{i=1}^{k-1} \beta_i c_i = 0$ then

$$\sum_{i=1}^{j-1} \beta_i \begin{bmatrix} b_i \\ \alpha_i \end{bmatrix} + \gamma \begin{bmatrix} b_j \\ \alpha_j \end{bmatrix} + \sum_{i=j+1}^k \beta_{i-1} \begin{bmatrix} b_i \\ \alpha_i \end{bmatrix} = 0 \quad (5.1)$$

with

$$\gamma = -\frac{1}{\alpha_j} \left(\sum_{i=1}^{j-1} \beta_i \alpha_i + \sum_{i=j+1}^k \beta_{i-1} \alpha_i \right)$$

Since the vectors $a_i = (b_i, \alpha_i)$ are linearly independent, the eq. (5.1) only holds when all the coefficients β_i and γ are all zero. This in turns implies that the vectors c_1, \dots, c_{k-1} are linearly independent. By the induction hypothesis $k-1 \leq n-1$ so we have established that $k \leq n$ ■

Definition 5.3.3 — n 维向量的一个标准正交基. 当 $k = n$ 时, a_1, \dots, a_n 是 n 维向量的一个标准正交基.

Definition 5.3.4 — x 在标准正交基下的标准正交分解. 如果 a_1, \dots, a_n 是一个标准正交基, 对于任意维向量 x ;

$$x = \begin{pmatrix} a_1^T x \end{pmatrix} a_1 + \dots + \begin{pmatrix} a_n^T x \end{pmatrix} a_n$$

则称其为 x 在标准正交基下的标准正交分解.

这个分解可以用于计算不同标准正交基下的系数.

Proof.

$$a_i^T x = \begin{pmatrix} a_1^T x \end{pmatrix} a_i^T a_1 + \dots + \begin{pmatrix} a_i^T x \end{pmatrix} a_i^T a_i + \dots + \begin{pmatrix} a_n^T x \end{pmatrix} a_i^T a_n = a_i^T x$$

■

5.4 Gram-Schmidt Algorithm

Algorithm 2: Gram-Schmidt Algorithm

Input: n 维向量 a_1, \dots, a_k

Output: 若这些向量线性无关时 q_1, \dots, q_k (标准正交基); 若线性相关时判断 a_j 是 a_1, \dots, a_{j-1} 的线性组合

```

1  $q_1 = a_1 / \|a_1\|_2$ 
2 while  $i = 2, \dots, k$  do
3   正交化:  $\tilde{q}_i = a_i - (q_1^T a_i) q_1 - \dots - (q_{i-1}^T a_i) q_{i-1}$ 
4   检验线性相关: 如果  $\tilde{q}_i = 0$ , 提前退出迭代
5   单位化:  $q_i = \tilde{q}_i / \|\tilde{q}_i\|_2$ 
6 end
```

如果步骤 2 中未提前结束迭代, 那么 a_1, \dots, a_k 是线性独立的, 而且 q_1, \dots, q_k 是标准正交基.

如果在第 j 次迭代中提前结束, 说明 a_j 是 a_1, \dots, a_{j-1} 的线性组合, 因此 a_1, \dots, a_k 是线性相关的.

Theorem 5.4.1 q_1, \dots, q_{i-1}, q_i 是标准正交的.

Proof. 假设第 $i-1$ 次迭代成立, 即: $q_r \perp q_s, \forall r, s < i$.

正交化步骤保证有以下关系成立

$$\tilde{q}_i = a_i - \begin{pmatrix} q_1^T a_i \end{pmatrix} q_1 - \dots - \begin{pmatrix} q_{i-1}^T a_i \end{pmatrix} q_{i-1}$$

等式两边同时乘以 $q_j^T, j = 1, \dots, i-1$

$$\begin{aligned} q_j^T \tilde{q}_i &= q_j^T a_i - \begin{pmatrix} q_1^T a_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_j^T q_1 \end{pmatrix} - \dots - \begin{pmatrix} q_{i-1}^T a_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_j^T q_{i-1} \end{pmatrix} \\ &= q_j^T a_i - q_j^T a_i = 0 \end{aligned}$$

$$\because q_j^T q_r = 0, j \neq r, q_j^T q_j = 1$$

$$\therefore \tilde{q}_i \perp q_1, \dots, \tilde{q}_i \perp q_{i-1}.$$

单位化步骤保证了 $q_i = \tilde{q}_i / \|\tilde{q}_i\|_2$, 即 q_1, \dots, q_i 是标准正交. ■

Algorithm 3: Gram-Schmidt Algorithm for Three Vectors**Input:** Three independent vectors a, b, c **Output:** Three orthonormal vectors $q_1 = A/\|A\|, q_2 = B/\|B\|, q_3 = C/\|C\|$.1 Choose $A = a$

2

$$B = b - \frac{A^T b}{A^T A} A$$

3

$$C = c - \frac{A^T c}{A^T A} A - \frac{B^T c}{B^T B} B$$

4 单位化

5.4.1 The Analysis of Gram-Schmidt Algorithm假设 Gram-Schmidt 正交法未在第 i 次迭代提前终止:**Corollary 5.4.2** a_i 是 q_1, \dots, q_i 的一个线性组合.

$$a_i = \|\tilde{q}_i\|_2 q_i + (q_1^T a_i) q_1 + \dots + (q_{i-1}^T a_i) q_{i-1}$$

Proof.

$$\tilde{q}_i = a_i - (q_1^T a_i) q_1 - \dots - (q_{i-1}^T a_i) q_{i-1}$$

$$a_i = \tilde{q}_i + (q_1^T a_i) q_1 + \dots + (q_{i-1}^T a_i) q_{i-1}$$

注意有性质: $q_i = \tilde{q}_i / \|\tilde{q}_i\|_2$.

$$a_i = \|\tilde{q}_i\|_2 q_i + (q_1^T a_i) q_1 + \dots + (q_{i-1}^T a_i) q_{i-1}$$

■

则有

Corollary 5.4.3

$$q_i = \frac{a_i - (q_1^T a_i) q_1 - \dots - (q_{i-1}^T a_i) q_{i-1}}{\|\tilde{q}_i\|_2}$$

Corollary 5.4.4 q_i 是 a_1, \dots, a_i 的一个线性组合.*Proof.* 归纳假设, 每个 q_{i-1} 都是 a_1, \dots, a_{i-1} 的线性组合:

$$\begin{aligned} q_2 &= \frac{a_2 - (q_1^T a_2) q_1}{\|\tilde{q}_2\|_2} \\ &= \frac{a_2 - (q_1^T a_2) \frac{a_1}{\|a_1\|_2}}{\|\tilde{q}_2\|_2} \end{aligned}$$

$$q_3 = \frac{a_3 - (q_1^T a_3) q_1 - (q_2^T a_3) q_2}{\|\tilde{q}_3\|_2}$$

通过对 i 的归纳证明, 可得 q_i 是 a_1, \dots, a_i 的线性组合. ■

假设 Schmidt 正交法在第 j 次迭代提前终止:

Corollary 5.4.5 a_j 是 q_1, \dots, q_{j-1} 的一个线性组合.

$$a_j = (q_1^T a_j) q_1 + \dots + (q_{j-1}^T a_j) q_{j-1}$$

Proof.

$$\tilde{q}_i = a_i - (q_1^T a_i) q_1 - \dots - (q_{i-1}^T a_i) q_{i-1}$$

$$0 = a_i - (q_1^T a_i) q_1 - \dots - (q_{i-1}^T a_i) q_{i-1}$$

$$a_i = \|\tilde{q}_i\|_2 q_i + (q_1^T a_i) q_1 + \dots + (q_{i-1}^T a_i) q_{i-1}$$

■

Corollary 5.4.6 a_j 是 a_1, \dots, a_{j-1} 的线性组合.

Proof. 每一个 q_1, \dots, q_{j-1} 都是 a_1, \dots, a_{j-1} 的线性组合.

因此 a_j 是 a_1, \dots, a_{j-1} 的线性组合. ■

Matrices

6	Matrices	38
6.1	Matrices	
6.2	矩阵运算	
6.3	Special Matrices and Matrices in Different Applications	
6.4	Gram 矩阵	
7	Matrices Norms	50
7.1	矩阵范数	
8	适定问题	53
8.1	The Definition of Well-posed Problem	
8.2	绝对误差的界限	
8.3	相对误差的界限	
9	Inverse of Matrices	55
9.1	Left Inverse, Right Inverse, Inverse	
9.2	Linear Equation Systems	
9.3	Fundamental Theorem of Linear Algebra	
9.4	Invertible Matrices	
9.5	转置和共轭转置的逆	
9.6	Gram Matrix 非奇异的性质	
9.7	伪逆	
10	Orthogonal Matrices	62
10.1	预备知识	
10.2	正交矩阵	
10.3	Permutation Matrices	
10.4	平面旋转	
10.5	Householder Matrix	
10.6	正交矩阵乘积	
10.7	具有正交矩阵的线性方程	
10.8	列标准正交的高矩阵	
10.9	值域范围、列空间	
11	QR Factorization and Householder Transformation	70
11.1	高斯消元法	
11.2	QR Factorization	
11.3	QR 分解的应用	
11.4	复矩阵的 QR 分解	
11.5	QR Algorithm Using Gram-Schmidt Algorithm	
11.6	The Numerical Instability of QR Decomposition based on Gram-Schmidt Algorithm	
11.7	QR Decomposition Using Householder Transformation	
11.8	Q 因子	

6. Matrices

6.1 Matrices

Definition 6.1.1 — **矩阵**. 矩阵是一个由数字构成的矩阵数组.

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & -2.3 & 0.1 \\ 1.3 & 4 & -0.1 & 0 \\ 4.1 & -1 & 0 & 1.7 \end{bmatrix} \quad \left(\begin{array}{cccc} 0 & 1 & -2.3 & 0.1 \\ 1.3 & 4 & -0.1 & 0 \\ 4.1 & -1 & 0 & 1.7 \end{array} \right)$$

上述矩阵大小 (*size*) 为 3×4 , 矩阵的每一个元素 (*element*) 又称为系数 (*coefficient*);

Notation 6.1. 设 B_{ij} 表示矩阵 B 中第 i 行第 j 的元素

实数域中大小为 $m \times n$ 的矩阵集合写为 $\mathbb{R}^{m \times n}$

复数域中大小为 $m \times n$ 的矩阵集合写为 $\mathbb{C}^{m \times n}$

Definition 6.1.2 — **标量**. 不区分一个 1×1 矩阵和一个标量.

Definition 6.1.3 — **向量**. 不区分一个 $n \times 1$ 矩阵和一个向量.

Definition 6.1.4 — **行向量, 列向量**. 一个 $1 \times n$ 矩阵被称为一个行向量.
一个 $n \times 1$ 矩阵被称为一个列向量.

Definition 6.1.5 — **高形, 宽形和方形矩阵**. 一个大小为 $m \times n$ 的矩阵为:

- 高的, 如果 $m > n$
- 宽的, 如果 $m < n$
- 方的, 如果 $m = n$

Definition 6.1.6 — **分块矩阵**. 分块矩阵的每一个元都是一个矩阵.

$$A = \begin{bmatrix} B & C \\ D & E \end{bmatrix}$$

其中 B, C, D, E 都是矩阵 (被称为矩阵 A 的子矩阵).

分块矩阵位于同一行的子矩阵行维度必须相等, 位于同一列的子矩阵列维度必须相等.

Definition 6.1.7 矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 可通过其列向量 (m -vector) 进行表示, 假设其列向量为 $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}^m$, 则有

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_n \end{bmatrix}$$

Definition 6.1.8 矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 通过其行向量 b_1, \dots, b_m 进行表示

$$A = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}, b_i^T \in \mathbb{R}^n, i = 1, \dots, m$$

6.2 矩阵运算

Definition 6.2.1 — 矩阵数乘. 设矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$

$$\beta A = \begin{bmatrix} \beta A_{11} & \beta A_{12} & \cdots & \beta A_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta A_{m1} & \beta A_{m2} & \cdots & \beta A_{mn} \end{bmatrix}, \beta \in \mathbb{R}$$

Definition 6.2.2 — 矩阵加法. 矩阵 $A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 的和为

$$A + B = \begin{bmatrix} A_{11} + B_{11} & A_{12} + B_{12} & \cdots & A_{1n} + B_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} + B_{m1} & A_{m2} + B_{m2} & \cdots & A_{mn} + B_{mn} \end{bmatrix}$$

Definition 6.2.3 — Transpose. 矩阵 A 的转置表示为 A^T

若 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 则 $A^T \in \mathbb{R}^{n \times m}$, 其被定义为: $(A^T)_{ij} = A_{ji}, i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m$

转置将原矩阵的行向量转化为列向量.

Corollary 6.2.1 — 转置的性质. 有如下性质:

- $(A^T)^T = A$
- 对称矩阵满足 $A^T = A$
- $(\beta A)^T = \beta A^T, (A + B)^T = A^T + B^T$

Definition 6.2.4 — 共轭转置. 矩阵 A 的共轭转置表示为 A^H

若 $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, 则 $A^H \in \mathbb{C}^{n \times m}$, 其被定义为: $(A^H)_{ij} = \bar{A}_{ji}, i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m$;
设矩阵 $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, 则其共轭转置为一个 $n \times m$ 矩阵

$$A^H = \begin{bmatrix} \bar{A}_{11} & \bar{A}_{21} & \cdots & \bar{A}_{m1} \\ \bar{A}_{12} & \bar{A}_{22} & \cdots & \bar{A}_{m2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{A}_{1n} & \bar{A}_{2n} & \cdots & \bar{A}_{mn} \end{bmatrix}$$

Corollary 6.2.2 — 共轭转置的性质. 有如下性质:

- $(A^H)^H = A$

- Hermitian 矩阵满足 $A = A^H$
- $(\beta A)^H = \beta A^H, (A + B)^H = A^H + B^H$

Definition 6.2.5 — 矩阵乘法. 设矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times p}, B \in \mathbb{R}^{p \times n}$, 那么矩阵 A 与 B 的乘积, 记作 $C = AB$, 矩阵 $C \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 的第 i 行第 j 列元素 C_{ij}

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^p A_{ik} B_{kj}$$

注意: 矩阵 A 的列大小必须等于 B 的行大小.

Corollary 6.2.3 — 矩阵乘法性质. 有如下性质:

- 结合律: $(AB)C = A(BC)$
- 分配律: $A(B + C) = AB + AC$
-

$$(AB)^T = B^T A^T, \quad (AB)^H = B^H A^H$$

- 一般情况下 $AB \neq BA$
- 对于方阵 A 有, $IA = AI = A$

Definition 6.2.6 — 分块矩阵乘法.

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} W & Y \\ X & Z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} AW + BX & AY + BZ \\ CW + DX & CY + DZ \end{bmatrix}$$

Definition 6.2.7 — 矩阵-向量乘积 Ax . 矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 和一个向量 $x \in \mathbb{R}^n$ 的积为

$$Ax = \begin{bmatrix} A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + \cdots + A_{1n}x_n \\ A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + \cdots + A_{2n}x_n \\ \vdots \\ A_{m1}x_1 + A_{m2}x_2 + \cdots + A_{mn}x_n \end{bmatrix}$$

Corollary 6.2.4 Ax 是矩阵 A 列向量的线性组合.

$$Ax = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = x_1 a_1 + \cdots + x_n a_n$$

可以引出 A 的 Row Picture 和 Column Picture 的概念。

■ Example 6.1

$$\begin{cases} x - 2y = 1 \\ 3x + 2y = 11 \end{cases}$$

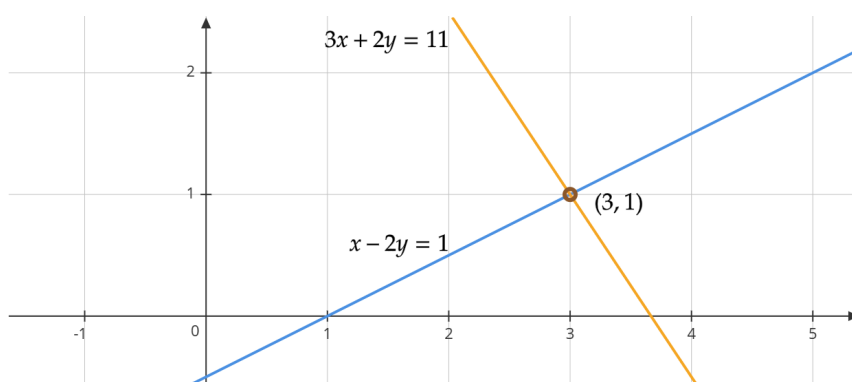
Definition 6.2.8 — 矩阵-向量乘积函数 $f(x) = Ax$. 给定矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 定义函数 $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m, f(x) = Ax$, 其中 $A = [f(e_1) \cdots f(e_n)]$.

Proof. 该函数为一个线性函数:

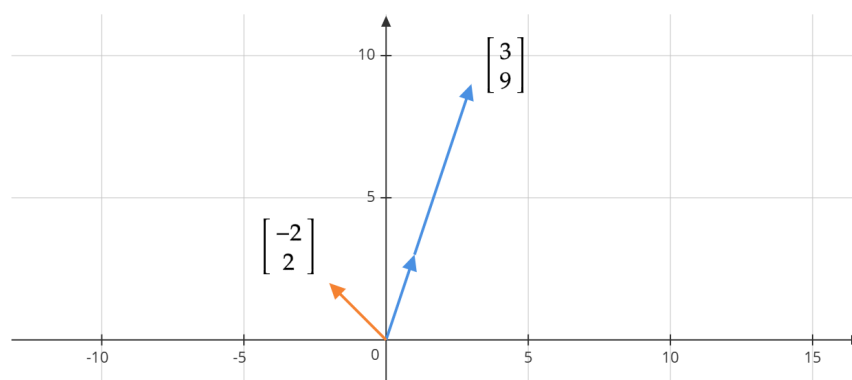
$$A(\alpha x + \beta y) = \alpha(Ax) + \beta(Ay)$$

Figure 6.1: Row Picture and Column Picture for 6.1

(a) Row Picture



(b) Column Picture



任意一个线性函数都可以写成矩阵-向量乘积函数的形式

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_1 e_1 + x_2 e_2 + \cdots + x_n e_n) \\ &= x_1 f(e_1) + x_2 f(e_2) + \cdots + x_n f(e_n) \\ &= \begin{bmatrix} f(e_1) & \cdots & f(e_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \end{aligned}$$

因此 $f(x) = Ax$, 其中 $A = [f(e_1) \dots f(e_n)]$ ■

6.2.1 Matrix Power

Definition 6.2.9 — Matrix Power. It makes sense to multiply a square matrix A by itself to form AA . We refer to this matrix as A^2 . Similarly, if k is a positive integer, then k copies of A multiplied together is denoted A^k . If k and l are positive integers, and A is square, then $A^k A^l = A^{k+l}$ and $(A^k)^l = A^{kl}$.

$$(A^{\ell+1})_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ik} (A^{\ell})_{kj}$$

By convention we take $A^0 = I$, which makes the formulas above hold for all nonnegative integer values of k and l .

■ **Example 6.2 — Paths in a directed graph.**

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{there is an edge from vertex } j \text{ to vertex } i \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

■ **Example 6.3 — Linear dynamical system.**

$$x_{t+\ell} = A^{\ell} x_t$$

6.2.2 矩阵乘法的算法复杂度

一般矩阵的乘法

$C = AB$ with A of size $m \times p$ and B of size $p \times n$

The product matrix C has size $m \times n$, so there are mn elements to compute.

The i, j element of C is the inner product of row i of A with column j of B . This is an inner product of vectors of length p and requires $2p - 1$ flops. Therefore the total is $mn(2p - 1)$ flops, which we approximate as $2mnp$ flops. $O(mnp)$

稀疏矩阵的乘法

Suppose that A is $m \times p$ and sparse, and B is $p \times n$, but not necessarily sparse.

The inner product of the i th row a_i^T of A with the j th column of B requires no more than $2 \text{nnz}(a_i^T)$ flops.

Summing over $i = 1, \dots, m$ and $j = 1, \dots, n$ we get $2 \text{nnz}(A)n$ flops.

If B is sparse, the total number of flops is no more than $2 \text{nnz}(B)m$ flops.



Note that these formulas agree with the one given above, $2mnp$, when the sparse matrices have all entries nonzero.

三重矩阵相乘

$$D = ABC$$

with A of size $m \times n$, B of size $n \times p$, and C of size $p \times q$.

The matrix D can be computed in two ways, as $(AB)C$ and as $A(BC)$.

In the first method we start with AB ($2mn$ flops) and then form $D = (AB)C$ ($2mpq$ flops), for a total of $2mp(n+q)$ flops.

In the second method we compute the product BC ($2npq$ flops) and then form $D = A(BC)$ ($2mnq$ flops), for a total of $2nq(m+p)$ flops.



You might guess that the total number of flops required is the same with the two methods, but it turns out it is not. The first method is less expensive when $2mp(n+q) < 2nq(m+p)$, i.e., when

$$\frac{1}{n} + \frac{1}{q} < \frac{1}{m} + \frac{1}{p}$$

■ **Example 6.4** As a more specific example, consider the product

$$ab^T c$$

where a, b, c are n vectors.

If we first evaluate the outer product ab^T , the cost is n^2 flops, and we need to store n^2 values. We then multiply the vector c by this $n \times n$ matrix, which costs $2n^2$ flops. The total cost is $3n^2$ flops.

If we first evaluate the inner product $b^T c$, the cost is $2n$ flops, and we only need to store one number (the result). Multiplying the vector a by this number costs n flops, so the total cost is $3n$ flops. For n large, there is a dramatic difference between $3n$ and $3n^2$ flops.

(The storage requirements are also dramatically different for the two methods of evaluating $ab^T c$: 1 number versus n^2 numbers.) ■

6.2.3 矩阵向量乘积复杂度

矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 和向量 $x \in \mathbb{R}^n$ 的乘积 $y = Ax$, 需要 $(2n-1)m$ flops;

乘积 $y \in \mathbb{R}^m$, 每个元素需要做向量内积, 需要 $2n-1$ flops;

当 n 足够大时, 复杂度近似于 $2mn$;

特殊情况:

- A 为对角矩阵: n flops
- A 为下三角矩阵: n^2 flops
- A 为稀疏矩阵时: flops $\ll 2mn$

6.3 Special Matrices and Matrices in Different Applications

Definition 6.3.1 — Zero Matrix. 所有元素都为 0 的矩阵.

记作

$$0, 0_{m \times n}$$

Definition 6.3.2 — 单位矩阵. 为方形矩阵, 其中对角线元素为 1, 其它元素为 0.

记作 I 或者 I_n .

Corollary 6.3.1 I_n 的每一列是一个单位向量, 例如

$$I_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = [e_1 \quad e_2 \quad e_3]$$

Definition 6.3.3 — Symmetric Matrices.

$$A_{ij} = A_{ji}, A^T = A$$

Definition 6.3.4 — Hermitian Matrices. $A_{ij} = \bar{A}_{ji}, A^H = A$ (共轭复数).

Definition 6.3.5 — Diagonal Matrices. 对角线上元素不全为 0, 其余元素全为 0.

对角矩阵用于膨胀 (dilation).

Definition 6.3.6 — 下三角矩阵. 方形矩阵且当 $i < j$ 时 $A_{ij} = 0$.

Definition 6.3.7 — 上三角矩阵. 方形矩阵且当 $i > j$ 时 $A_{ij} = 0$

通过 Gram-Schmidt 正交化算法可以化为上三角或者下三角矩阵。

6.3.1 $f(x) = Ax$ 中的 A

引入上节 $f(x) = Ax$ (矩阵-向量乘积函数) 的概念,

■ **Example 6.5 — Permutation Matrices.** f 颠倒向量 x 中的元素的顺序, 一个线性函数 $f(x) = Ax$

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

是一个置换矩阵. ■

Proof.

$$Ax = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_3 \\ x_2 \\ x_1 \end{bmatrix}$$

■ **Example 6.6** f 对向量 x 中的元素进行升序排序, 非线性; ■

■ **Example 6.7** f 将向量 x 中的元素替换成相应的绝对值, 非线性; ■

■ **Example 6.8 — 反转矩阵.**

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

■

Proof.

$$Ax = \begin{bmatrix} x_n \\ x_{n-1} \\ \vdots \\ x_2 \\ x_1 \end{bmatrix}$$

■

■ **Example 6.9 — 循环移位矩阵.**

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

■

Proof.

$$Ax = \begin{bmatrix} x_n \\ x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \end{bmatrix}$$

■

■ **Example 6.10 — 旋转矩阵.**

$$A = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

Ax 将向量 x 进行旋转, 角度为 θ .

■

■ **Example 6.11 — Reflection Matrices.** Suppose that y is the vector obtained by reflecting x through the line that passes through the origin, inclined θ radians with respect to horizontal. Then

$$y = \begin{bmatrix} \cos(2\theta) & \sin(2\theta) \\ \sin(2\theta) & -\cos(2\theta) \end{bmatrix} x$$

■

6.3.2 Selectors

■ **Definition 6.3.8 — Selector matrices.**

■ **Definition 6.3.9 — Downsampling.**

6.3.3 图论: 节点弧关联矩阵

■ **Definition 6.3.10 — 关联矩阵.** 假设有向图 G 有 m 个顶点, n 条弧, 则关联矩阵 A 大小为 $m \times n$, 其中

■

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{如果点 } i \text{ 是弧 } j \text{ 的终点} \\ -1 & \text{如果点 } i \text{ 是弧 } j \text{ 的起点} \\ 0 & \text{其它} \end{cases}$$

6.3.4 Convolution

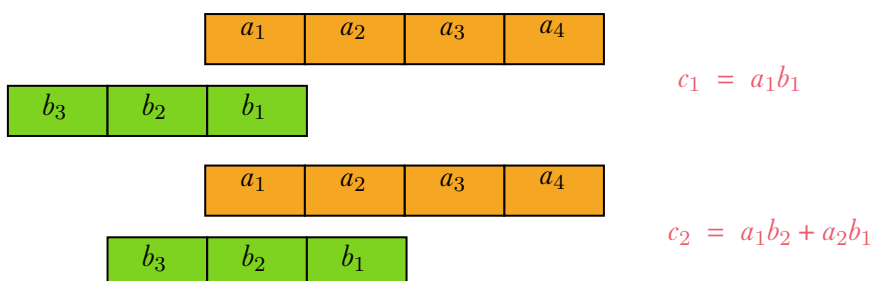
Definition 6.3.11 — 一维卷积. 向量 $a \in \mathbb{R}^n$ 和向量 $b \in \mathbb{R}^m$ 的卷积是一个 $(n + m - 1)$ 维向量 $c \in \mathbb{R}^{m+n-1}$

$$c_k = \sum_{i+j=k+1} a_i b_j, \quad k = 1, \dots, n + m - 1$$

记为 $c = a * b$

■ **Example 6.12** 设 $n = 4, m = 3$

Figure 6.2: An example of convolution



$$\begin{aligned} c_1 &= a_1 b_1 \\ c_2 &= a_1 b_2 + a_2 b_1 \\ c_3 &= a_1 b_3 + a_2 b_2 + a_3 b_1 \\ c_4 &= a_2 b_3 + a_3 b_2 + a_4 b_1 \\ c_5 &= a_3 b_3 + a_4 b_2 \\ c_6 &= a_4 b_3 \end{aligned}$$

Corollary 6.3.2 假设向量 a 和 b 分别是以下多项式的系数

$$p(x) = a_1 + a_2 x + \dots + a_n x^{n-1}, \quad q(x) = b_1 + b_2 x + \dots + b_m x^{m-1}$$

则 $c = a * b$ 是多项式 $p(x)q(x)$ 的系数.

$$p(x)q(x) = c_1 + c_2 x + \dots + c_{m+n-1} x^{m+n-2}$$

Corollary 6.3.3 — 卷积性质. 有如下性质:

- 对称性: $a * b = b * a$
- 结合律: $(a * b) * c = a * (b * c)$
- 如果 $a * b = 0$, 则 $a = 0$, 或者 $b = 0$

Corollary 6.3.4 如果固定 a 或 b , 则 $c = a * b$ 是一个线性函数

■ **Example 6.13 — Toeplitz Matrix.** 4 维向量 a 和 3 维向量 b , 则 $c = a * b$

$$\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \\ c_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ a_2 & a_1 & 0 \\ a_3 & a_2 & a_1 \\ a_4 & a_3 & a_2 \\ 0 & a_4 & a_3 \\ 0 & 0 & a_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & b_1 & 0 & 0 \\ b_3 & b_2 & b_1 & 0 \\ 0 & b_3 & b_2 & b_1 \\ 0 & 0 & b_3 & b_2 \\ 0 & 0 & 0 & b_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix}$$

6.3.5 多项式

Definition 6.3.12 — 多项式. 多项式 $p(t)$, 度为 $n-1$, 系数为 x_1, x_2, \dots, x_n

$$p(t) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2 + \dots + x_n t^{n-1}$$

Definition 6.3.13 — Vandermonde Matrices. $p(t)$ 在 m 个点中 t_1, t_2, \dots, t_m 的值为

$$\begin{bmatrix} p(t_1) \\ p(t_2) \\ \vdots \\ p(t_m) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & t_1 & \dots & t_1^{n-1} \\ 1 & t_2 & \dots & t_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & t_m & \dots & t_m^{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = Ax$$

矩阵 A 被称为 *Vandermonde* 矩阵.

6.3.6 Fourier Transform

Definition 6.3.14 — Discrete Fourier Transform (DFT). DFT 将 n 维复向量 x 映射为 n 维复向量 y ($\mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^n$)

$$y_k = \sum_{\ell=1}^n x_\ell e^{-i \frac{2\pi}{n} (k-1)(\ell-1)}, k = 1, \dots, n$$

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & \omega^{-1} & \omega^{-2} & \dots & \omega^{-(n-1)} \\ 1 & \omega^{-2} & \omega^{-4} & \dots & \omega^{-2(n-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{-(n-1)} & \omega^{-2(n-1)} & \dots & \omega^{-(n-1)(n-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

其中 $\omega = e^{2\pi i/n}$.

DFT 矩阵 W 的第 k 行第 l 列的元素为 $W_{kl} = \omega^{-(k-1)(l-1)}$.

Definition 6.3.15 — Discrete Inverse Fourier Transform.

$$x_\ell = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k e^{i \frac{2\pi}{n} (k-1)(\ell-1)}, \ell = 1, \dots, n$$

6.3.7 Semi-Definite Matrices

Definition 6.3.16 — 半正定矩阵. 对称矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 称为半正定矩阵, 满足以下条件

$$x^T A x \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

Definition 6.3.17 — 正定矩阵. 对称矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 称为正定矩阵, 满足以下条件

$$x^T A x > 0 \quad \forall x \neq 0$$

Definition 6.3.18 — 二次型. 如果对称矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 则 $x^T A x$ 是二次型

Proof.

$$x^T A x = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i A_{ij} x_j = \sum_{i=1}^n A_{ii} x_i^2 + 2 \sum_{i>j} A_{ij} x_i x_j$$

■

■ **Example 6.14**

$$A = \begin{bmatrix} 9 & 6 \\ 6 & a \end{bmatrix}$$

$$x^T A x = 9x_1^2 + 12x_1x_2 + ax_2^2 = (3x_1 + 2x_2)^2 + (a - 4)x_2^2$$

如果 $a > 4$, 矩阵 A 为正定矩阵:

$$x^T A x > 0 \quad \forall x \neq 0$$

如果 $a = 4$, 矩阵 A 为半正定矩阵, 但不是正定矩阵:

$$x^T A x \geq 0 \quad \forall x, \quad x^T A x = 0 \quad \exists x = \begin{bmatrix} 2 \\ -3 \end{bmatrix}$$

如果 $a < 4$, 矩阵 A 不是半正定矩阵:

$$x^T A x < 0 \quad \exists x = \begin{bmatrix} 2 \\ -3 \end{bmatrix}$$

■

Corollary 6.3.5 正定矩阵 A 都是非奇异的.

Proof.

$$Ax = 0 \quad \Rightarrow \quad x^T A x = 0 \quad \Rightarrow \quad x = 0$$

最后一步由正定性得到的. ($x^T A x > 0 \quad \forall x \neq 0$)

■

Theorem 6.3.6 — 正定矩阵对角元素性质. 正定矩阵 A 有正的对角元素.

$$A_{ii} = e_i^T A e_i > 0$$

Theorem 6.3.7 — 半正定矩阵对角元素性质. 每个半正定矩阵 A 都有非负的对角元素.

$$A_{ii} = e_i^T A e_i \geq 0$$

6.4 Gram 矩阵

Definition 6.4.1 — 实矩阵 A 的 Gram 矩阵.

$$G = A^T A = \begin{bmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ \vdots \\ a_n^T \end{bmatrix} [a_1, a_2, \dots, a_n] = \begin{bmatrix} a_1^T a_1 & a_1^T a_2 & \cdots & a_1^T a_n \\ a_2^T a_1 & a_2^T a_2 & \cdots & a_2^T a_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n^T a_1 & a_n^T a_2 & \cdots & a_n^T a_n \end{bmatrix}$$

Definition 6.4.2 — 复矩阵的 A 的 Gram 矩阵.

$$G = A^H A = \begin{bmatrix} a_1^H a_1 & a_1^H a_2 & \cdots & a_1^H a_n \\ a_2^H a_1 & a_2^H a_2 & \cdots & a_2^H a_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n^H a_1 & a_n^H a_2 & \cdots & a_n^H a_n \end{bmatrix}$$

Theorem 6.4.1 每个 Gram 矩阵都是半正定的.

Proof.

$$x^T A x = x^T B^T B x = \|Bx\|_2^2 \geq 0, \forall x$$

■

Theorem 6.4.2 如果 Gram 矩阵是正定的, 则要满足

$$x^T A x = x^T B^T B x = \|Bx\|_2^2 > 0 (\forall x \neq 0)$$

Corollary 6.4.3 如果 Gram 矩阵是正定的, 则 B 的列向量是线性无关的.

Proof.

$$\|Bx\|_2^2 > 0 (\forall x \neq 0)$$

所以 $\forall x \neq 0, Bx \neq 0$.

注意和线性无关 5.1.2 的定义进行参照.

■

7. Matrices Norms

7.1 矩阵范数

Definition 7.1.1 — Matrix Norm. 向量空间中存在一个函数 $\|\cdot\| : \mathbb{R}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ 且满足以下条件:

- 齐次性: $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|$, $\alpha \in \mathbb{R}$ 且 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$;
 - 三角不等式: $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$, $A, B \in \mathbb{R}^{m \times n}$;
 - 非负性: $\|A\| \geq 0$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 且 $\|A\| = 0 \Leftrightarrow A = 0$;
- 则称 $\|\cdot\|$ 为矩阵范数.

向量空间 $\mathbb{R}^{m \times n}$ 矩阵范数:

■ **Example 7.1 — F-范数 (Frobenius norm).**

$$\|A\|_F = \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

Proof.

$$\|A\|_F \geq 0$$

$$\|\alpha A\|_F = |\alpha| \|A\|_F, \alpha \in \mathbb{R}$$

$$\begin{aligned} \|A + B\|_F &= \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (a_{ij} + b_{ij})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (a_{ij})^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (b_{ij})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \|A\|_F + \|B\|_F \end{aligned}$$

Definition 7.1.2 — 从属于给定向量范数 $\|x\|_v$ 的矩阵范数. 设 $x \in \mathbb{R}^n, A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \|\cdot\|_v$ 为一种向量范数. 则 $\frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v}$ 对所有 $x \neq 0$ 有最大值, 令

$$\|A\|_v = \max_{x \neq 0} \left\{ \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} \right\} = \max_{x \neq 0} \left\{ \left\| A \frac{x}{\|x\|_v} \right\|_v \right\} = \max_{\|y\|_v=1} \{\|Ay\|_v\}$$

即

$$\|A\|_v = \max_{x \neq 0} \left\{ \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} \right\}$$

$\|A\|_v$ 称为从属于给定向量范数 $\|x\|_v$ 的矩阵范数, 简称为从属范数或算子范数.

Proof. 可以验证 $\|A\|_v$ 满足矩阵范数定义.

$$\|A\|_v \geq 0$$

$$\|\alpha A\|_v = |\alpha| \|A\|_v, \alpha \in \mathbb{R}$$

$$\begin{aligned} \|A+B\|_v &= \max_{\|y\|_v=1} \|(A+B)y\|_v \\ &\leq \max_{\|y\|_v=1} \{\|Ay\|_v + \|By\|_v\} \\ &\leq \max_{\|y\|_v=1} \|Ay\|_v + \max_{\|y\|_v=1} \|By\|_v \\ &= \|A\|_v + \|B\|_v \end{aligned}$$

■



在本书中若未明确说明, $\|A\|$ 表示的是算子范数.

由定义 $\|A\|_v = \max_{x \neq 0} \left\{ \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} \right\}$ 可得

Definition 7.1.3 — 向量范数和算子范数相容.

$$\frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} \leq \|A\|_v \Rightarrow \|Ax\|_v \leq \|A\|_v \|x\|_v$$

称向量范数和算子范数相容.

Theorem 7.1.1 — 算子范数服从乘法范数相容性. 对于 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, B \in \mathbb{R}^{n \times p}$

$$\begin{aligned} \|AB\|_v &= \max_{x \neq 0} \left\{ \frac{\|ABx\|_v}{\|x\|_v} \right\} \\ &\leq \max_{x \neq 0} \left\{ \frac{\|A\|_v \|Bx\|_v}{\|x\|_v} \right\} \\ &\leq \|A\|_v \max_{x \neq 0} \left\{ \frac{\|B\|_v \|x\|_v}{\|x\|_v} \right\} \\ &= \|A\|_v \|B\|_v \end{aligned}$$

算子范数服从乘法范数相容性.

根据向量的常用范数可以导出矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 的算子范数

Definition 7.1.4 — A 的列范数.

$$\|A\|_1 = \max_{x \neq 0} \left(\frac{\|Ax\|_1}{\|x\|_1} \right) = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|$$

Definition 7.1.5 — A 的行范数.

$$\|A\|_\infty = \max_{x \neq 0} \left(\frac{\|Ax\|_\infty}{\|x\|_\infty} \right) = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$

Definition 7.1.6 — A 的 2 范数.

$$\|A\|_2 = \max_{x \neq 0} \left(\frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} \right) = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$$

■ **Example 7.2** 求矩阵 A 的各种常用范数

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

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| = \max_{1 \leq j \leq n} \{2, 5, 2\} = 5$$

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| = \max_{1 \leq i \leq n} \{3, 4, 2\} = 4$$

由于 $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$, 因此先求 $A^T A$ 的特征值

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 2 & 2 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 9 & -1 \\ 1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

特征方程为

$$\det(\lambda I - A^T A) = \begin{vmatrix} \lambda - 2 & 0 & -1 \\ 0 & \lambda - 9 & 1 \\ -1 & 1 & \lambda - 2 \end{vmatrix} = 0$$

可得 $A^T A$ 的特征值

$$\lambda_1 = 9.1428, \lambda_2 = 2.9211, \lambda_3 = 0.9361$$

■



对于 $\|A\|_2$ 需要计算 $\lambda_{\max}(A^T A)$, 直接根据特征方程计算特征值的算法复杂度太高.

8. 适定问题

8.1 The Definition of Well-posed Problem

In 1923, the French mathematician Hadamard introduced the notion of well-posed (适定) problem:

- A solution for the problem exists;
- The solution is unique;
- Perturbations in the data should cause small perturbations in the solution.

One of these conditions is not satisfied, the problem is said to be ill-posed (病态) and demands a special consideration.

■ **Example 8.1** 假设 A 是非奇异矩阵

$$Ax = b$$

如果将 b 为 $b + \Delta b$, 方程新的解 $x + \Delta x$, 则有:

$$A(x + \Delta x) = b + \Delta b$$

即

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

如果小的变化 Δb 导致小变化 Δx , 则称解是稳定的. 如果小的变化 Δb 导致大变化 Δx , 则称解不稳定的.

设

$$A = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 + 10^{-10} & 1 - 10^{-10} \end{bmatrix}, \quad A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 - 10^{10} & 10^{10} \\ 1 + 10^{10} & -10^{10} \end{bmatrix}$$

若 $b = (1, 1)$, 方程 Ax 的解 $x = (1, 1)$. 如果将 b 改为 $b + \Delta b$, 那么 x 的变化量为

$$\Delta x = A^{-1} \Delta b = \begin{bmatrix} \Delta b_1 - 10^{10} (\Delta b_1 - \Delta b_2) \\ \Delta b_1 + 10^{10} (\Delta b_1 - \Delta b_2) \end{bmatrix}$$

很小变化 Δb 会导致非常大变化 Δx ! 由矩阵 A 定义的问题, 称为适定问题或病态问题. ■

8.2 绝对误差的界限

假设 A 是非奇异的, 并给出定义:

Notation 8.1.

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

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

$\|\Delta x\|$ 的上界为:

$$\|\Delta x\|_2 \leq \|A^{-1}\|_2 \|\Delta b\|_2$$

矩阵范数 $\|A^{-1}\|_2$ 小时, 当 $\|\Delta b\|_2$ 变化很小, $\|\Delta x\|_2$ 也很小; $\|A^{-1}\|_2$ 大时, $\|\Delta x\|_2$ 可能很大, 即使 $\|\Delta b\|_2$ 很小.

8.3 相对误差的界限

假设 $b \neq 0$; 因此 $x \neq 0$

$\|\Delta x\|_2/\|x\|_2$ 的上界为:

$$\begin{aligned} \|\Delta x\|_2 &= \|A^{-1}\Delta b\|_2 \leq \|A^{-1}\|_2 \|\Delta b\|_2 \text{ (向量范数和算子范数相容)} \\ \Rightarrow \frac{\|\Delta x\|_2}{\|x\|_2} &\leq \frac{\|A^{-1}\|_2 \|\Delta b\|_2}{\|x\|_2} = \frac{\|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 \|\Delta b\|_2}{\|x\|_2 \|A\|_2} \leq \frac{\|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 \|\Delta b\|_2}{\|b\|_2} \end{aligned}$$

由 $\|b\|_2 = \|Ax\|_2 \leq \|A\|_2 \|x\|_2$, 可得

$$\frac{\|\Delta x\|_2}{\|x\|_2} \leq \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b\|_2}$$

$\|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$ 小, 当 $\frac{\|\Delta b\|_2}{\|b\|_2}$ 相对变化很小时, $\frac{\|\Delta x\|_2}{\|x\|_2}$ 也变化很小;

$\|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$ 大, $\frac{\|\Delta x\|_2}{\|x\|_2}$ 可远远大于 $\frac{\|\Delta b\|_2}{\|b\|_2}$.

Definition 8.3.1 — 非奇异矩阵 A 的条件数 (condition number).

$$\kappa(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$$

Corollary 8.3.1 — 非奇异矩阵 A 的条件数 (condition number) 性质. 有如下性质:

- 对于所有 A , 有 $\kappa(A) \geq 1$;
- 如果 $\kappa(A)$ 比较小 (接近 1), x 的相对误差接近 b 的相对误差;
- 如果 $\kappa(A)$ 比较大 (超过 100), x 的相对误差比 b 的相对误差大得多.

9. Inverse of Matrices

9.1 Left Inverse, Right Inverse, Inverse

Definition 9.1.1 — A 的左逆. 当一个矩阵 X 满足

$$XA = I$$

X 被称为 A 的左逆; 当左逆存在时, 则称 A 是可左逆的;

如果左逆矩阵存在, 则左逆矩阵有无穷多个.

■ **Example 9.1**

$$A = \begin{bmatrix} -3 & -4 \\ 4 & 6 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

矩阵 A 是可左逆的, 其左逆矩阵有两个

$$B = \frac{1}{9} \begin{bmatrix} -11 & -10 & 16 \\ 7 & 8 & -11 \end{bmatrix} \quad C = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 6 \\ 0 & 1 & -4 \end{bmatrix}$$

■ **Definition 9.1.2** — A 的右逆. 当左逆存在时, 则称 A 是可左逆的;

如果右逆矩阵存在, 则右逆矩阵有无穷多个.

■ **Example 9.2**

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

矩阵 B 可右逆, 以下矩阵都是 B 的右逆

$$D = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, E = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, G = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

一个大小为 $m \times n$ 的矩阵, 其左逆或右逆的维度为 $n \times m$.

Theorem 9.1.1 A 的左逆为 X 当且仅当 X^T 是 A^T 的右逆.

Proof.

$$A^T X^T = (XA)^T = I$$

Theorem 9.1.2 A 的右逆为 X 当且仅当 X^T 是 A^T 的左逆.

Proof.

$$X^T A^T = (AX)^T = I$$

Theorem 9.1.3 如果矩阵 A 存在左逆和右逆, 则左逆和右逆一定相等

Proof.

$$\begin{aligned} XA &= I, AY = I \\ \Rightarrow X &= XI = X(AY) = (XA)Y = Y \\ \Rightarrow X &= Y \end{aligned}$$

Definition 9.1.3 如果矩阵 A 存在左逆和右逆, 此时 X 称为矩阵的逆, 记作 A^{-1} 当矩阵的逆存在时, 则称矩阵 A 可逆.

9.2 Linear Equation Systems

Definition 9.2.1 有 n 个变量的 m 个方程为

$$\begin{cases} A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + \cdots + A_{1n}x_n = b_1 \\ A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + \cdots + A_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ A_{m1}x_1 + A_{m2}x_2 + \cdots + A_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

写成矩阵形式为: $Ax = b$. 其中 A 为系数矩阵, x 为 n 维列向量.

该方程组可能无解, 有唯一解和无穷解.

9.2.1 线性方程组求解

Theorem 9.2.1 如果矩阵 A 可左逆, 假设 X 是矩阵 A 的左逆, 则至多一个解, 如有解则 $x = Xb$.

Proof.

$$Ax = b \Rightarrow x = XAx = Xb$$

列满秩时 (下面证明), 列向量线性无关, 所以其零空间中只有零解, 方程 $Ax = b$ 可能有一个唯一解 (b 在 A 的列空间中, 此特解就是全部解, 因为通常的特解可以通过零空间中的向量扩展出一组解集, 而此时零空间只有 0 向量), 也可能无解 (b 不在 A 的列空间中)

Theorem 9.2.2 如果矩阵 A 可右逆, 假设 Y 是矩阵 A 的右逆, 则至少一个解, 即 $x = Yb$.

Proof. 设 $x = Yb$

$$x = Yb \Rightarrow Ax = AYb = b$$

右逆就是研究 $m \times n$ 矩阵 A 行满秩的情况, 此时 $n > m = \text{rank}(A)$. 对称的, 其左零空间中仅有零向量, 即没有行向量的线性组合能够得到零向量. ($N(A^T) = \{0\}$) ■

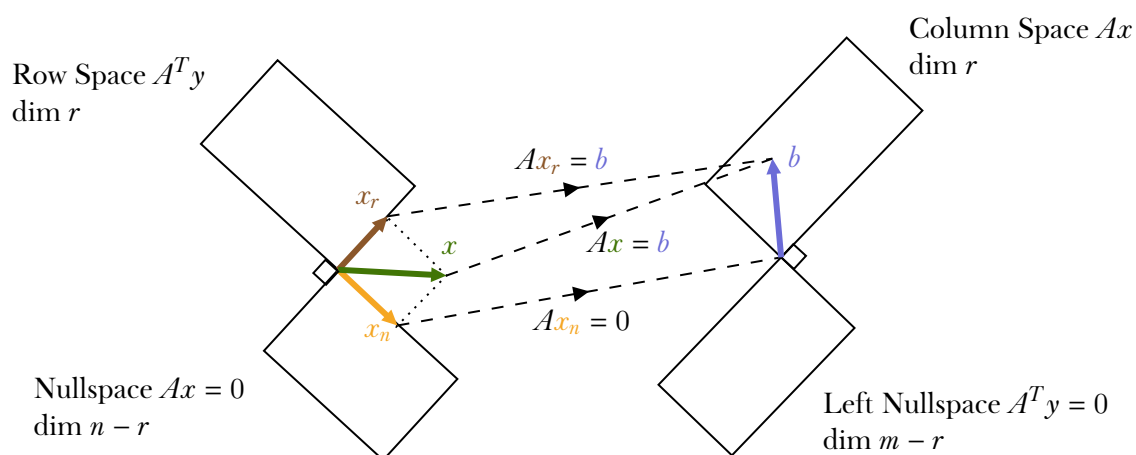
Theorem 9.2.3 如果矩阵 A 可逆的, 假设 X 是矩阵 A 的逆, 则

$$Ax = b \Rightarrow x = A^{-1}b$$

唯一解.

9.3 Fundamental Theorem of Linear Algebra

Figure 9.1: Four Subspace of Matrix A



$r = m$	$r = n$	Square and invertible	$Ax = b$ has 1 solution
$r = m$	$r < n$	Short and wide	$Ax = b$ has ∞ solutions
$r < m$	$r = n$	Tall and thin	$Ax = b$ has 0 or 1 solution
$r < m$	$r < n$	Not full rank	$Ax = b$ has 0 or ∞ solutions

The set of linear equations is called *over-determined* if $m > n$, *under-determined* if $m \leq n$, and *square* if $m = n$.

A set of equations with zero right-hand side, $Ax = 0$, is called a *homogeneous* set of equations. Any homogeneous set of equations has $x = 0$ as a solution.

9.4 Invertible Matrices

Theorem 9.4.1 对于方阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 以下条件都是等价的:

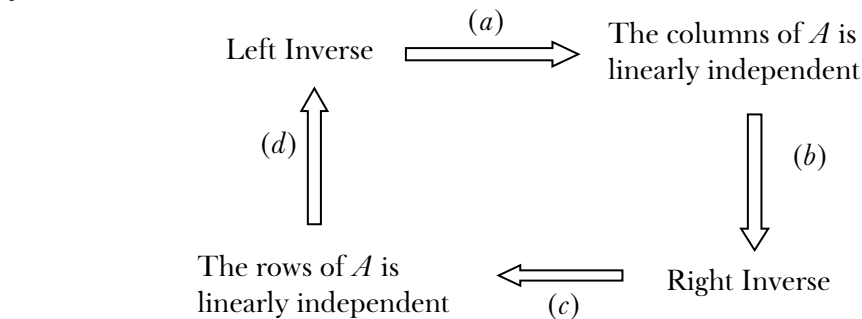
1. A 可左逆
2. A 的列向量线性无关
3. A 可右逆

4. A 的行向量线性无关

5. A 可逆

此时矩阵 A 为非奇异矩阵, 由条件 1 与 3, 可得 A 为可逆矩阵.

Proof. 可以通过以下方式证明:



- 性质 (a) 对任意矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 都成立
- 性质 (b) 对方阵矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 都成立
- 对于性质 (c) 与 (d), 可利用 A^T 证明

■

Theorem 9.4.2 (a): A 可左逆, 则 A 列向量线性无关.

Proof. 假设 A 的左逆是 B , 则

$$\begin{aligned} Ax = 0 &\Rightarrow BAx = 0 \\ &\Rightarrow Ix = 0 \end{aligned}$$

假设 A 的列向量 $A = [a_1, a_2, \dots, a_n]$

$$Ax = x_1 a_1 + x_2 a_2 + \dots + x_n a_n = 0$$

则当该等式 $Ax = 0$ 成立时, 其解 $x = 0$, 则 A 的列向量线性无关.

Corollary 9.4.3 如果 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 有左逆, 则有 $m \geq n = r$.

即 A 是高或方的矩阵, 如 $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$.

此时 A 的行向量可能线性相关, 而 A 的列向量线性无关. $N(A) = \{0\}$.

假设 A 的列向量 $A = [a_1, a_2, \dots, a_n]$

$$Ax = x_1 a_1 + x_2 a_2 + \dots + x_n a_n = b$$

$$Ay = y_1 a_1 + y_2 a_2 + \dots + y_n a_n = b$$

$$Ax - Ay = A(x - y) = 0 \Rightarrow x = y$$

当 $b \in \mathbb{R}^m$, $b \notin \{y \mid y = Ax, x \in \mathbb{R}^n\}$ 时 (即 b 不在 A 的列空间, $m \geq n$ 时), 线性方程组无解. $Ax = b$ 至多一个解, 如有解则 $x = Xb$. ■

Theorem 9.4.4 矩阵的行秩等于列秩.

Proof. 令 A 是一个 $m \times n$ 的矩阵, 其列秩为 r . 因此矩阵 A 的列空间的维度是 r .

令 c_1, c_2, \dots, c_r 是 A 的列空间的一组基, 构成 $m \times r$ 矩阵 C 的列向量 $C = [c_1, c_2, \dots, c_r]$, 并使得 A 的每个列向量是 C 的 r 个列向量的线性组合.

由矩阵乘法的定义, 存在一个 $r \times n$ 矩阵 R , 使得 $A = CR$. (A 的 (i, j) 元素是 c_i 与 R 的第 j 个行向量的点积.)

现在, 由于 $A = CR$, A 的每个行向量是 R 的行向量的线性组合, 这意味着 A 的行向量空间被包含于 R 的行向量空间之中. 因此 A 的行秩 $\leq R$ 的行秩. 但 R 仅有 r 行, 所以 R 的行秩 $\leq r = A$ 的列秩. 这就证明了 A 的行秩 $\leq A$ 的列秩.

把上述证明过程中的“行”与“列”交换, 利用对偶性质同样可证 A 的列秩 $\leq A$ 的行秩. 更简单的方法是考虑 A 的转置矩阵 A^T , 则 A 的列秩 $= A^T$ 的行秩 $\leq A^T$ 的列秩 $= A$ 的行秩. 这证明了 A 的列秩等于 A 的行秩. 证毕. ■

Theorem 9.4.5 (c): 矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 有右逆 X , 则 A 行向量线性无关.

Proof.

$$X^T A^T = (AX)^T = I$$

则有 X^T 是 A^T 的左逆, A^T 的列向量线性无关.

即 $A^T \in \mathbb{R}^{n \times m}$.

Corollary 9.4.6 如果 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 有左逆, 则有 $r = m \leq n$.

即 A 是宽或方的矩阵.

此时 A 的列向量可能线性相关, 而 A 的行向量线性无关.

$N(A^T) = \{0\}$, $\dim N(A) = n - r$, $r = m$. ($Ax = b$ 有无穷解)

根据定理“矩阵的行秩等于列秩”, A^T 的列向量线性无关, 则矩阵 A 有 m 个线性无关列向量 (行向量), 即通过 Gram-Schmidt 正交化可得 m 个正交基.

$\forall b \in \mathbb{R}^m$, 有 $b \in \{y \mid y = Ax, x \in \mathbb{R}^n\}$ ($m \leq n$), 方程 $Ax = b$ 有解, 其解为 $x = Xb$. ■

Theorem 9.4.7 (b): 若方阵 A 列向量线性无关, 则 A 可右逆.

Proof. 假设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 为方阵且列向量线性无关

$$A = [a_1, a_2, \dots, a_n]$$

则对于任意向量 $b \in \mathbb{R}^n$, 则向量组 $[a_1, a_2, \dots, a_n, b]$ 线性相关, 存在不全为 0 的系数, 使得以下等式成立

$$x_1 a_1 + x_2 a_2 + \dots + x_n a_n + x_{n+1} b = 0$$

因为 A 列向量线性无关, 则 $x_{n+1} \neq 0$ (假设 $x_{n+1} = 0$ 会推出违反线性无关假设的结论), 即 b 是 A 列向量的线性组合;

$$b = -\frac{x_1}{x_{n+1}} a_1 - \frac{x_2}{x_{n+1}} a_2 - \dots - \frac{x_n}{x_{n+1}} a_n$$

存在向量 $c_1, \dots, c_n \in \mathbb{R}^n$, 使得

$$Ac_1 = e_1$$

$$Ac_2 = e_2$$

$$\dots$$

$$Ac_n = e_n$$

则矩阵 $C = [c_1 c_2 \dots c_n]$ 是矩阵 A 的右逆, $AC = I$.

■

9.5 转置和共轭转置的逆

Theorem 9.5.1 — 转置 A^T 和共轭转置 A^H . 如果矩阵 A 为非奇异矩阵, 则其转置 A^T 和共轭转置 A^H 都为非奇异矩阵, 则有

$$(A^T)^{-1} = (A^{-1})^T, \quad (A^H)^{-1} = (A^{-1})^H$$

Proof.

$$(AA^{-1})^T = I \Rightarrow \underbrace{(A^{-1})^T}_{\text{the inverse of } A^T} A^T = I$$

■

Corollary 9.5.2 如果矩阵 A 和矩阵 B 都为非奇异矩阵, 则乘积 AB 也为非奇异矩阵

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$$

Proof.

$$(AB) \underbrace{B^{-1}A^{-1}}_{\text{the inverse of } AB} = I$$

■

9.6 Gram Matrix 非奇异的性质

Gram 矩阵的定义见 6.4.1.

Corollary 9.6.1 矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $G = A^T A$
矩阵 A 列向量线性无关 \Leftrightarrow Gram 矩阵 G 非奇异.

Proof. " \Rightarrow ":

假设矩阵 A 列向量线性无关, $A^T A$ 奇异. 则存在 $A^T A x = 0, x \neq 0$, 可得 $x^T A^T A x = \|Ax\|_2^2 = 0$, 即 $Ax = 0$ 与列向量线性无关矛盾.

" \Leftarrow ":

假设 $A^T A$ 非奇异, 矩阵 A 列向量线性相关. 则有 $Ax = 0, x \neq 0$, 可得 $A^T A x = 0$, 即 $A^T A$ 是奇异矩阵. ■

9.7 伪逆

Definition 9.7.1 — Pseudo-inverse.

$$A^\dagger = A^T (AA^T)^{-1}$$

$$A^\dagger = V \Sigma^+ U^T$$

Theorem 9.7.1 伪逆 A^\dagger 为 A 的右逆

Proof.

$$AA^\dagger = AA^T (AA^T)^{-1} = (AA^T)^{-1} (AA^T) = I$$

■

Theorem 9.7.2 当 A 为方阵时，右逆等于矩阵的逆

Proof.

$$A^\dagger = A^T (AA^T)^{-1} = A^T A^{-T} A^{-1} = A^{-1}$$

■

Corollary 9.7.3 以下三个结论为等价的，对于实矩阵 A

- A 是可左逆的
- A 的列向量线性无关
- $A^T A$ 为非奇异矩阵

Corollary 9.7.4 以下三个结论为等价的，对于实矩阵 A

- A 是可右逆的
- A 的行向量线性无关
- AA^T 为非奇异矩阵

10. Orthogonal Matrices

10.1 预备知识

10.1.1 标准正交向量

参见 5.3.2。

10.1.2 Gram 矩阵与标准正交的关系

For the definition of Gram matrices, refer to 6.4.1. 关于它与非奇异的性质, 参见 9.6.

Theorem 10.1.1 如果 A 的 Gram 矩阵为单位矩阵, 则 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 具有标准正交列.

Proof.

$$\begin{aligned} A^T A &= \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} a_1^T a_1 & a_1^T a_2 & \cdots & a_1^T a_n \\ a_2^T a_1 & a_2^T a_2 & \cdots & a_2^T a_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n^T a_1 & a_n^T a_2 & \cdots & a_n^T a_n \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \\ &= I \end{aligned}$$

■

10.1.3 矩阵-向量乘积与标准正交的关系

如果 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 具有标准正交列, 则线性函数 $f(x) = Ax$

Theorem 10.1.2 保持原内积.

$$\langle Ax, Ay \rangle = x^T y$$

Proof.

$$\langle Ax, Ay \rangle = (Ax)^T (Ay) = x^T A^T Ay = x^T y$$

■

Theorem 10.1.3 保持原范数.

$$\|Ax\|_2 = \|x\|_2$$

Proof.

$$\|Ax\|_2 = \left((Ax)^T (Ax) \right)^{1/2} = \left(x^T x \right)^{1/2} = \|x\|_2$$

■

Theorem 10.1.4 保持原距离.

$$\|Ax - Ay\|_2 = \|x - y\|_2$$

Proof.

$$\|Ax - Ay\|_2 = \left((Ax - Ay)^T (Ax - Ay) \right)^{1/2} = \left((x - y)^T (x - y) \right)^{1/2} = \|x - y\|_2$$

■

Theorem 10.1.5 保持原角度.

$$\angle(Ax, Ay) = \angle(x, y)$$

Proof.

$$\angle(Ax, Ay) = \arccos \left(\frac{(Ax)^T (Ay)}{\|Ax\|_2 \|Ay\|_2} \right) = \arccos \left(\frac{x^T y}{\|x\|_2 \|y\|_2} \right) = \angle(x, y)$$

■

10.1.4 左可逆性与正交的关系

如果矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 有标准正交列，则：

Theorem 10.1.6 A 是左可逆的，其左逆为 A^T .

Proof. 根据定义：

$$A^T A = I$$

■

Theorem 10.1.7 A 有线性无关的列向量.

Proof.

$$Ax = 0 \Rightarrow A^T Ax = x = 0$$

■

Theorem 10.1.8 A 是高的或者方的, 即 $m \geq n$.

Proof. 列向量 $a_1, a_2, \dots, a_n \in \mathbb{R}^m$, 由维度定理可得 $n \leq m$. ■

10.2 正交矩阵

Definition 10.2.1 — 正交矩阵. 所有列两两相互正交的方形实矩阵。

Theorem 10.2.1 正交矩阵满足非奇异性.

即如果矩阵 A 是正交的, 则 A 是可逆的, 左逆等于右逆, 且它的逆为 A^T .

$$\left. \begin{array}{l} A^T A = I \\ A \text{ 是方的} \end{array} \right\} \Rightarrow A A^T = I$$

Corollary 10.2.2 A^T 也是一个正交矩阵。

Corollary 10.2.3 A 的行是标准正交的, 即范数为 1 且相互正交。



如果 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 有标准正交列以及 $m > n$, 则 $A A^T \neq I$ 。

10.3 Permutation Matrices

Notation 10.1. $\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_n)$ 为 $(1, 2, \dots, n)$ 的一个重新排序的排列。

将 π 与一个置换矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 联系起来:

$$A_{i\pi_i} = 1, \quad A_{ij} = 0 \text{ 如果 } j \neq \pi_i$$

Definition 10.3.1 — 置换. Ax 是 x 的一个置换:

$$Ax = (x_{\pi_1}, x_{\pi_2}, \dots, x_{\pi_n})$$

A 在每一行和每一列中都有一个等于 1 的元素。

Theorem 10.3.1 置换矩阵满足正交性, 即所有置换矩阵都是正交的.

Corollary 10.3.2

$$A^T A = I$$

Proof. 因为 A 的每一行有一个元素等于 1

$$(A^T A)_{ij} = \sum_{k=1}^n A_{ki} A_{kj} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & \text{其它} \end{cases}$$

■

Corollary 10.3.3 $A^T = A^{-1}$ 是逆置换矩阵.

■ **Example 10.1** 若 $\{1, 2, 3, 4\}$ 的置换为:

$$(\pi_1, \pi_2, \pi_3, \pi_4) = (2, 4, 1, 3)$$

相应的置换矩阵及其逆矩阵为

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, A^{-1} = A^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

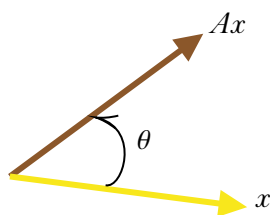
A^T 是与置换相关的置换矩阵

$$(\tilde{\pi}_1, \tilde{\pi}_2, \tilde{\pi}_3, \tilde{\pi}_4) = (3, 1, 4, 2)$$

■

10.4 平面旋转

Figure 10.1: An example of rotation



■ **Example 10.2 — Rotation Matrices in \mathbb{R}^2 .** 在一个 2 维平面的旋转可以用矩阵表示为

$$A = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}$$

■

■ **Example 10.3 — Rotation Matrices in \mathbb{R}^3 .**

$$A = \begin{bmatrix} \cos \theta & 0 & -\sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{bmatrix}$$

描述了在 \mathbb{R}^3 中 (x_1, x_3) 平面的旋转。

■

10.5 Householder Matrix

Definition 10.5.1 — Householder matrix, reflator matrix.

$$A = I - 2aa^T$$

其中, 向量 a 满足 $\|a\|_2 = 1$ 。

Theorem 10.5.1 反射矩阵 (reflector matrix) 是对称的.

$$A^T = A$$

Theorem 10.5.2 反射矩阵 (reflector matrix) 是正交的。

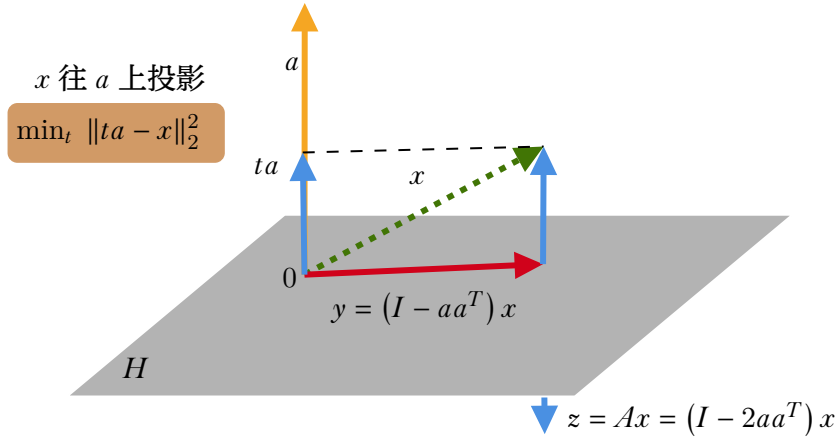
Proof.

$$A^T A = (I - 2aa^T)(I - 2aa^T) = I - 4aa^T + 4aa^T aa^T = I$$

■

10.5.1 The Geometry of Householder Transformation

Figure 10.2: Elementary Reflection



$H = \{u \mid a^T u = 0\}$ 是与 a 正交的向量的 (超) 平面。

Corollary 10.5.3 如果 $\|a\|_2 = 1$, x 在 H 上的投影为

$$y = x - (a^T x) a = x - a (a^T x) = (I - aa^T) x$$

Proof. 1. $y \in H$.

$$a^T y = a^T (x - a (a^T x)) = a^T x - (a^T a) (a^T x) = a^T x - a^T x = 0$$

2. 考虑任意 $z \in H (z \neq y)$, 证明 $\|x - z\| > \|x - y\|$

$$\begin{aligned} \|x - z\|_2^2 &= \|x - y + y - z\|_2^2 \\ &= \|x - y\|_2^2 + 2(x - y)^T (y - z) + \|y - z\|_2^2 \\ &= \|x - y\|_2^2 + 2(a^T x) a^T (y - z) + \|y - z\|_2^2 \\ &= \|x - y\|_2^2 + \|y - z\|_2^2 \quad (\text{因为 } a^T y = a^T z = 0) \\ &\geq \|x - y\|_2^2 \end{aligned}$$

■

Corollary 10.5.4 x 通过超平面的反射由反射算子的乘积给出

$$z = y + (y - x) = (I - 2aa^T)x$$

10.6 正交矩阵乘积

若 $A_1, \dots, A_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 是正交矩阵, 那么它们的乘积为:

$$A = A_1 A_2 \cdots A_k$$

Corollary 10.6.1 — 正交矩阵乘积的正交性.

$$\begin{aligned} A^T A &= (A_1 A_2 \cdots A_k)^T (A_1 A_2 \cdots A_k) \\ &= A_k^T \cdots A_2^T A_1^T A_1 A_2 \cdots A_k \\ &= I \end{aligned}$$

10.7 具有正交矩阵的线性方程

系数正交矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 的线性方程;

$$Ax = b$$

解为:

$$x = A^{-1}b = A^T b$$

可以在 $2n^2$ 个 flop 内计算矩阵向量乘法。

如果 A 有特殊性质, 代价将会小于 n^2 。例如,

- 置换矩阵: 0 flop。
- 反射算子 (给定 a): $4n$ flops。
- 平面旋转: $O(1)$ flop。

10.8 列标准正交的高矩阵

Theorem 10.8.1 假设矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 是高的 ($m > n$), 具有标准正交列, 则有 A^T 具有标准正交行。

Theorem 10.8.2 A^T 是 A 的一个左逆。

$$A^T A = I$$

Theorem 10.8.3 A 没有右逆。

10.9 值域范围、列空间

Definition 10.9.1 — 向量集合张成的空间. 一个向量集合张成的空间是其所有线性组合的集合

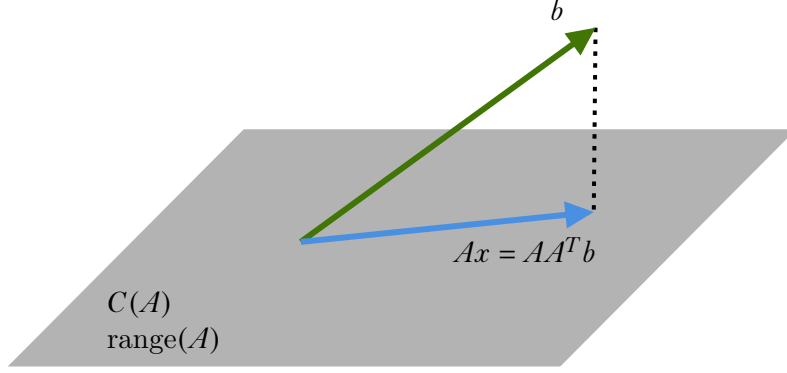
$$\text{span}(a_1, a_2, \dots, a_n) = \{x_1 a_1 + x_2 a_2 + \cdots + x_n a_n \mid x \in \mathbb{R}^n\}$$

Definition 10.9.2 — A 的范围 (列空间) .

$$\text{range}(A) = \{Ax \mid x \in \mathbb{R}^n\}$$

10.9.1 投影到列标准正交的矩阵 A 的列空间

Figure 10.3: Projection onto the column space of A , A has orthonormal columns



Problem 10.1 假设矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 具有标准正交列, 求投影 b 在 $C(A)$ 上的投影。
即向量 Ax 与 b 有最短距离

$$\min_x \|Ax - b\|_2^2$$

$$\begin{aligned} f(x) &= \|Ax - b\|_2^2 \\ &= (Ax - b)^T (Ax - b) = x^T A^T Ax - 2x^T A^T b + b^T b \\ &= x^T x - 2x^T A^T b + b^T b \quad (\because A^T A = I) \end{aligned}$$

$$\nabla f(x) = 2x - 2A^T b = 0 \Rightarrow x = A^T b$$

$AA^T b$ 称为向量 $b \in \mathbb{R}^m$ 在 $\text{range}(A)$ 上的正交投影。

Theorem 10.9.1

$$Ax = AA^T b \in \text{range}(A)$$

且是 b 在 $C(A)$ 上的投影。

Proof. 1.

$$Ax = AA^T b \in \text{range}(A)$$

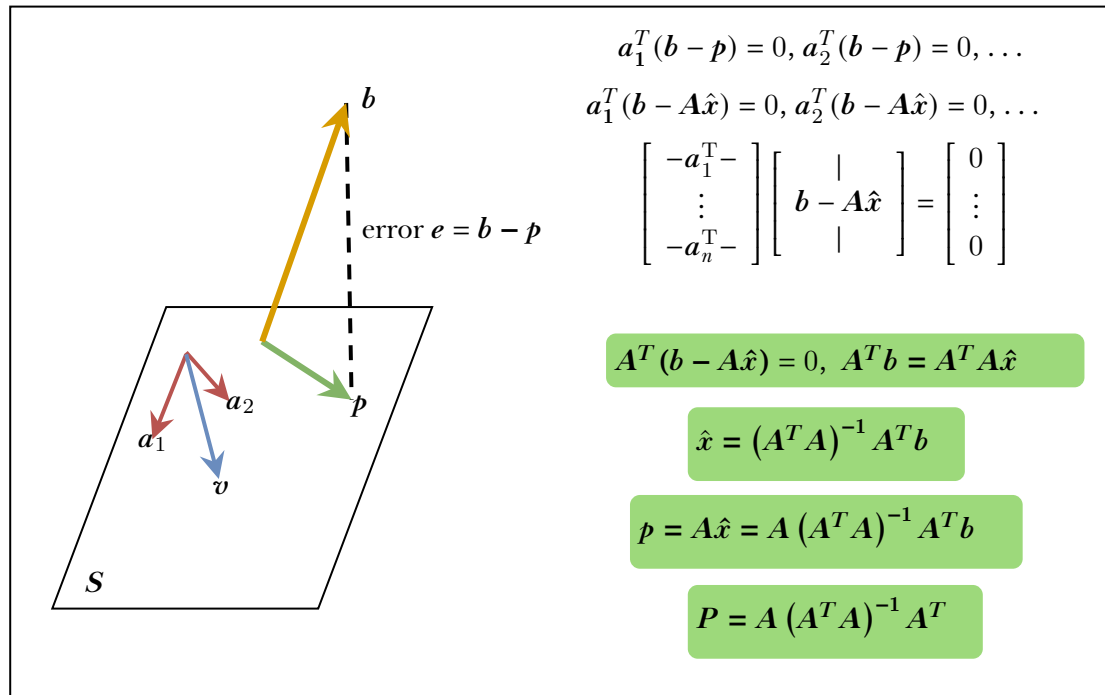
2. 可以证明 $\hat{x} = A^T b$ 满足 $\|A\hat{x} - b\| < \|Ax - b\|$, 对于所有 $x \neq \hat{x}$ 。
 b 到 $\text{range}(A)$ 内任意点 Ax 的距离的平方和为:

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|_2^2 &= \|A(x - \hat{x}) + A\hat{x} - b\|_2^2 \quad (\text{其中 } \hat{x} = A^T b) \\ &= \|A(x - \hat{x})\|_2^2 + \|A\hat{x} - b\|_2^2 + 2(x - \hat{x})^T A^T (A\hat{x} - b) \\ &= \|A(x - \hat{x})\|_2^2 + \|A\hat{x} - b\|_2^2 \\ &= \|(x - \hat{x})\|_2^2 + \|A\hat{x} - b\|_2^2 \\ &\geq \|A\hat{x} - b\|_2^2 \end{aligned}$$

当且仅当 $x = \hat{x}$, 等号成立。

第 3 行成立是因为 $A^T (A\hat{x} - b) = \hat{x} - A^T b = 0$ 。

■

Figure 10.4: Projection of b into the column space of A , A is any matrix. Sourced from [1]

11. QR Factorization and Householder Transformation

Definition 11.0.1 — Lower Triangular Matrices. 矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 为下三角 (Lower Triangular) 矩阵, $A_{ij} = 0, j > i$ 。

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ A_{n-1,1} & A_{n-1,2} & \cdots & A_{n-1,n-1} & 0 \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{n,n-1} & A_{nn} \end{bmatrix}$$

Definition 11.0.2 — Upper Triangular Matrices. A^T 为上三角 (Upper Triangular) 矩阵。

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1,n-1} & A_{1,n} \\ 0 & A_{22} & \cdots & A_{2,n-1} & A_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & A_{n-1,n-1} & A_{n-1,n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & A_{nn} \end{bmatrix}$$

Definition 11.0.3 — 单位上三角矩阵, 单位下三角矩阵. 对角元素 a_{ii} 都等于 1 的上 (下) 三角矩阵。

11.1 高斯消元法

Problem 11.1 当 A 是具有非零对角元素的下三角矩阵时, 解 $Ax = b$ 。

使用前向回代 (Forward Substitution) 算法求解。

时间复杂度: $1 + 3 + 5 + \dots + (2n - 1) = n^2$ flops

Problem 11.2 当 A 是具有非零对角元素的上三角矩阵, 解 $Ax = b$ 。

使用后向回代 (Back Substitution) 算法来求解。

时间复杂度: $1 + 3 + \dots + 2n - 1 = n^2$ flops

Algorithm 4: Forward Substitution

$$\begin{aligned}
1 \quad x_1 &= \frac{b_1}{A_{11}} \\
2 \quad x_2 &= \frac{b_2 - A_{21}x_1}{A_{22}} \\
3 \quad x_3 &= \frac{b_3 - A_{31}x_1 - A_{32}x_2}{A_{33}} \\
4 \quad &\dots \\
5 \quad x_n &= \frac{b_n - A_{n1}x_1 - A_{n2}x_2 - \dots - A_{n,n-1}x_{n-1}}{A_{nn}}
\end{aligned}$$

Algorithm 5: Backward Substitution

$$\begin{aligned}
1 \quad x_n &= \frac{b_n}{A_{nn}} \\
2 \quad x_{n-1} &= \frac{b_{n-1} - A_{n-1,n}x_n}{A_{n-1,n-1}} \\
3 \quad x_{n-2} &= \frac{b_{n-2} - A_{n-2,n-1}x_{n-1} - A_{n-2,n}x_n}{A_{n-2,n-2}} \\
4 \quad &\dots \\
5 \quad x_1 &= \frac{b_1 - A_{12}x_2 - A_{13}x_3 - \dots - A_{1n}x_n}{A_{11}}
\end{aligned}$$

Theorem 11.1.1 对角元素非零的三角矩阵 A 是非奇异的，即：

$$Ax = 0 \quad \Rightarrow \quad x = 0$$

Theorem 11.1.2 — 高斯消元法. A 的逆可以通过逐列解方程 $AX = I$ 来计算得到

$$A \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e_1 & e_2 & \dots & e_n \end{bmatrix}$$

Theorem 11.1.3 下三角矩阵的逆是下三角矩阵，上三角矩阵的逆是上三角矩阵。

上/下三角矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 逆的复杂度

$$n^2 + (n-1)^2 + \dots + 1 \approx \frac{1}{3}n^3 \text{ flops}$$

11.2 QR Factorization

如果矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 的列向量线性无关，则可以将其分解为

Definition 11.2.1 — QR Factorization.

$$\begin{aligned}
A &= \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & \cdots & R_{1n} \\ 0 & R_{22} & \cdots & R_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & R_{nn} \end{bmatrix} \\
&= QR
\end{aligned}$$

向量 $q_1, \dots, q_n \in \mathbb{R}^m$ 是标准正交向量:

$$\|q_i\|_2 = 1, \quad q_i^T q_j = 0, \text{ if } i \neq j$$

对角元素 R_{ii} 是非零的。若 $R_{ii} < 0$, 改变 R_{ii}, \dots, R_{in} 和向量 q_i 的符号。大多数定义要求 $R_{ii} > 0$, 使得 Q 和 R 是唯一的。

QR 分解依赖于 Gram-Schmidt 正交化法。(参见 5.4)



Gram-Schmidt(正交化)

$$\begin{aligned}
\tilde{q}_i &= a_i - (q_1^T a_i) q_1 - \cdots - (q_{i-1}^T a_i) q_{i-1} \\
a_i &= (q_1^T a_i) q_1 + \cdots + (q_{i-1}^T a_i) q_{i-1} + \|\tilde{q}_i\|_2 q_i \\
&= R_{1i} q_1 + \cdots + R_{ii} q_i
\end{aligned}$$

Corollary 11.2.1 $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 具有标准正交列 ($Q^T Q = I$).

Corollary 11.2.2 如果 A 是方阵 ($m = n$), 则 Q 是正交的 ($Q^T Q = Q Q^T = I$).

Corollary 11.2.3 $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 的上三角矩阵.

Corollary 11.2.4 R 是非奇异的 (对角元素是非零的).

Algorithm 6: QR Decomposition Algorithm

- 1 设矩阵 A 的列向量依次为 a_1, a_2, \dots, a_n , 由于 A 为非奇异矩阵, 则列向量线性无关
- 2 对列向量 a_1, a_2, \dots, a_n 按照 Gram-Schmidt 方法进行正交化, 然后单位化
- 3 单位化得到的标准正交向量 q_1, q_2, \dots, q_n , 即得到标准正交矩阵 Q
- 4 根据 $R = Q^{-1}A \Rightarrow R = Q^T A$, 得到上三角矩阵 R
- 5 QR 分解 $A = QR$

■ **Example 11.1** 矩阵 A 的 QR 分解过程

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

令 $a_1 = (1, 1, 0)^T$, $a_2 = (1, -1, 0)^T$, $a_3 = (0, 1, 2)^T$, 由 Schmidt 方法正交单位化后, 得到 $q_1 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right)^T$, $q_2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right)^T$, $q_3 = (0, 0, 1)^T$ 。

所以 $a_1 = \sqrt{2}q_1$, $a_2 = \sqrt{2}q_2$, $a_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}q_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}q_2 + 2q_3$ 。

$$\begin{aligned}
 A = QR &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{2} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \sqrt{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \\
 \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & 3 \\ -1 & -1 & 5 \\ 1 & 3 & 7 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} -1/2 & 1/2 & -1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 8 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ 0 & R_{22} & R_{23} \\ 0 & 0 & R_{33} \end{bmatrix} \\
 &= QR
 \end{aligned}$$

■ Example 11.2

$$\begin{aligned}
 \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & 3 \\ -1 & -1 & 5 \\ 1 & 3 & 7 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} -1/2 & 1/2 & -1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 8 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ 0 & R_{22} & R_{23} \\ 0 & 0 & R_{33} \end{bmatrix} \\
 &= QR
 \end{aligned}$$

11.3 QR 分解的应用

可用 QR 分解求解以下问题:

- 线性方程
- 最小二乘问题
- 带约束的最小二乘问题

11.3.1 QR 分解和求解线性方程组 $Ax = b$

QR 分解的思想可以用于加快求逆矩阵速度。

Corollary 11.3.1

$$\begin{aligned}
 Ax = b &\Rightarrow x = A^{-1}b \\
 QRx = b &\Rightarrow x = R^{-1}(Q^T b)
 \end{aligned}$$

对于普通矩阵使用 QR 分解求解线性方程组, 正交分解需要 $2n^3$ flops, 计算 $Q^T b$ 需要 $2n^2$ flops, 第三步回代求解 $Rx = Q^T b$ 需要 n^2 flops. (总时间复杂度是 $O(n^3)$).

对于稀疏矩阵求解线性方程组, 时间复杂度接近 $\text{nnz}(A)$ 。内存使用和复杂度在很大程度上取决于系数矩阵的稀疏模式。按照顺序, 存储器使用量通常是 $\text{nnz}(A) + n$ 的适度倍数, $\text{nnz}(A) + n$ 是指定问题数据 A 和 b 所需的标量数量, 通常远小于 $n^2 + n$, (如果 A 和

Algorithm 8: Solving linear equations via QR factorization**Input:** $n \times n$ invertible matrix A

- 1 QR factorization. Compute the QR factorization $A = QR$
- 2 Compute $Q^T b$
- 3 Back substitution. Solve the triangular equation $Rx = Q^T b$ using back substitution

b 不是稀疏时存储它们所需的标量数)。求解稀疏线性方程的 flop 数通常也更接近 $\text{nnz}(A)$ ，而不是 n^3 （矩阵 A 不稀疏时的阶数）。

11.3.2 QR 分解和求解伪逆 A^\dagger 、逆 A^{-1} **Definition 11.3.1** — 线性无关列向量的矩阵 A 的伪逆。

$$A^\dagger = (A^T A)^{-1} A^T$$

Theorem 11.3.2

$$\begin{aligned}
 A^\dagger &= ((QR)^T (QR))^{-1} (QR)^T \\
 &= (R^T Q^T Q R)^{-1} R^T Q^T \\
 &= (R^T R)^{-1} R^T Q^T \quad (Q^T Q = I) \\
 &= R^{-1} R^{-T} R^T Q^T \quad (R \text{ 是非奇异的}) \\
 &= R^{-1} Q^T
 \end{aligned}$$

Corollary 11.3.3 对于方阵非奇异矩阵 A ，其逆为

$$A^{-1} = (QR)^{-1} = R^{-1} Q^T$$

Corollary 11.3.4 对于方阵非奇异矩阵 $A = QR$

$$RB = Q^T$$

Proof.

$$\begin{aligned}
 A &= QR \\
 \Rightarrow AA^{-1} &= QRA^{-1} \\
 \Rightarrow I &= Q \underbrace{RA^{-1}}_{Q^{-1}}
 \end{aligned}$$

■

对于通过 QR 分解求 A^{-1} ，QR 分解需要 $2n^3$ flops， n 次回代需要 n^3 flops，时间复杂度是 $O(3n^3)$ 。

11.3.3 A 的列空间与 Q 的关系矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 的值域范围定义为：

$$\text{range}(A) = \{Ax \mid x \in \mathbb{R}^n\}$$

Algorithm 9: Computing the inverse via QR factorization

Input: $n \times n$ invertible matrix A

- 1 QR factorization. Compute the QR factorization $A = QR$
- 2 **for** $i = 1, \dots, n$ **do**
- 3 Solve the triangular equation $Rb_i = \tilde{q}_i$ using back substitution.
- 4 **end**

Theorem 11.3.5 假设 A 有线性无关的列向量, 且其 QR 因子为 Q, R
 Q 和 A 的值域范围相同 (有相同的列空间)。

即 Q 的列向量是标准正交的, 并且和 A 的列向量张成相同的空间。

Proof.

$$\begin{aligned} y \in \text{range}(A) &\Leftrightarrow y = Ax, x \in \mathbb{R}^n \\ &\Leftrightarrow y = QRx, z = Rx \\ &\Leftrightarrow y = Qz, z \in \mathbb{R}^n \\ &\Leftrightarrow y \in \text{range}(Q) \end{aligned}$$

■

11.3.4 往 A 列空间上的投影也是往 Q 上的投影

结合 $A = QR$ 和 $A^\dagger = R^{-1}Q^T$, 可得:

$$AA^\dagger = QRR^{-1}Q^T = QQ^T$$



注意在 AA^\dagger 中乘积的顺序与 $A^\dagger A =$ 的差异。

$$\begin{aligned} &\min_y \|Qy - x\|_2^2 \\ &\Rightarrow Q^T(Qy - x) = 0 \\ &\Rightarrow Q^T Qy = Q^T x \\ &\Rightarrow y = Q^T x \end{aligned}$$

$QQ^T x$ 是 x 在 Q 值域上的投影。

The pseudoinverse A^\dagger is the n by m matrix that makes AA^\dagger and $A^\dagger A$ into projections.



Trying for $AA^{-1} = A^{-1}A = I$, AA^\dagger = projection matrix onto the column space of A (refer to ??)

$A^\dagger A$ = projection matrix onto the row space of A

11.4 复矩阵的 QR 分解

Theorem 11.4.1 如果 $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ 的列向量是线性无关的, 则可以将其分解为

$$A = QR$$

$Q \in \mathbb{C}^{m \times n}$ 具有正交列。($Q^H Q = I$)

Figure 11.1: Projecting onto the column space of A is also projecting onto the column space of Q

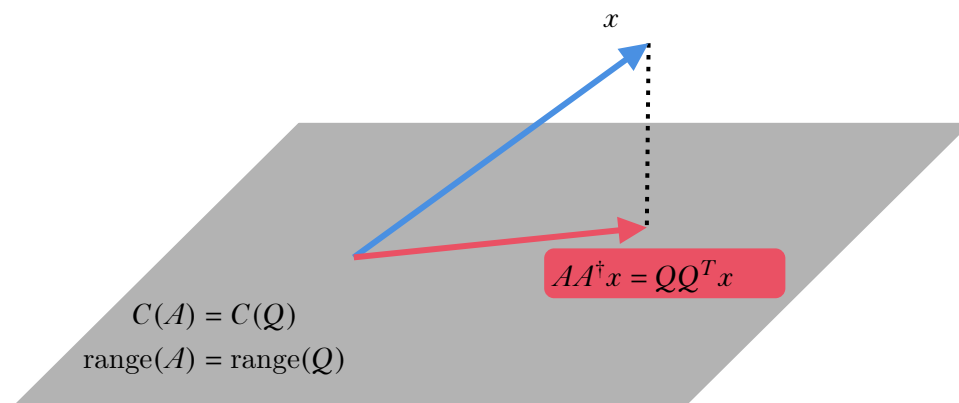
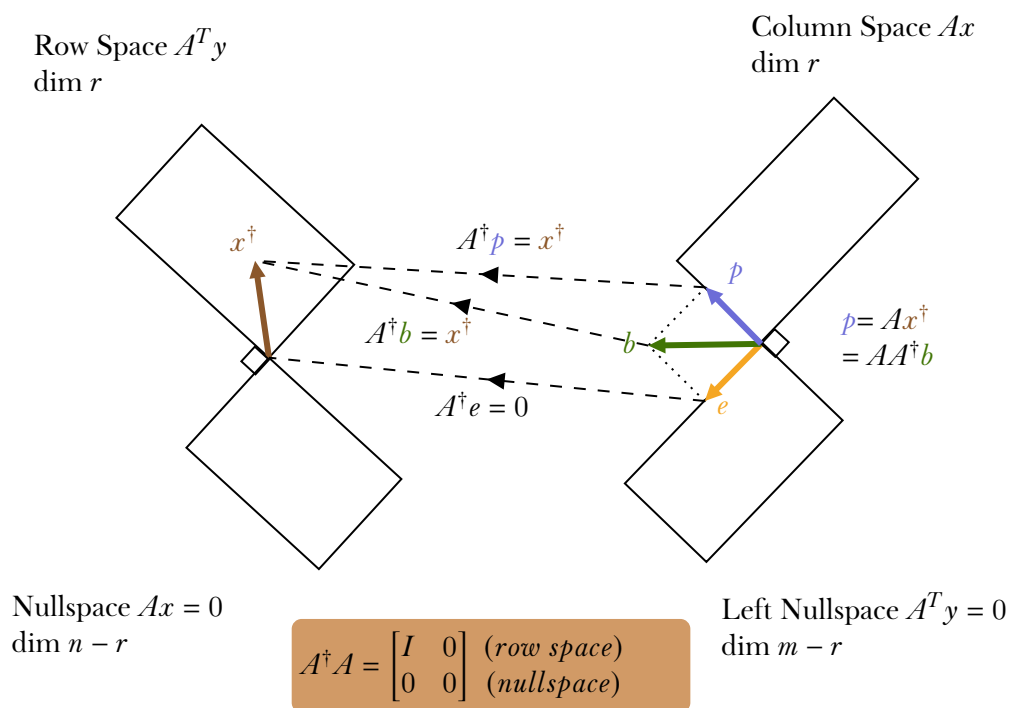


Figure 11.2: Ax^\dagger in the column space goes back to $A^\dagger Ax^\dagger = x^\dagger$ in the row space



$R \in \mathbb{C}^{n \times n}$ 具有实非零对角元素的上三角矩阵。

大多数情况下，会优先选择对角线元素 R_{ii} 为正数。

如果没有特别说明，之后默认矩阵 A 都是实数的。

11.5 QR Algorithm Using Gram-Schmidt Algorithm

k 步后我们得到了 QR 的部分分解：

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & \cdots & R_{1k} \\ 0 & R_{22} & \cdots & R_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & R_{kk} \end{bmatrix}$$

Corollary 11.5.1 QR 的部分分解列向量 q_1, \dots, q_k 是标准正交的。

Corollary 11.5.2 对角线元素 $R_{11}, R_{22}, \dots, R_{kk}$ 是正的。

Corollary 11.5.3 列向量 q_1, \dots, q_k 和 a_1, \dots, a_k 张成的空间相同。

Theorem 11.5.4 $A = QR$ 矩阵中的 R 矩阵为

$$R_{1k} = q_1^T a_k, R_{2k} = q_2^T a_k, \dots, R_{k-1,k} = q_{k-1}^T a_k$$

Proof. 假设已经实现 $k-1$ 列的因数分解，方程 $A = QR$ 的第 k 列可以计算为：

$$a_k = R_{1k}q_1 + R_{2k}q_2 + \cdots + R_{k-1,k}q_{k-1} + R_{kk}q_k$$

无论如何选择 $R_{1k}, \dots, R_{k-1,k}$ ，向量

$$\tilde{q}_k = a_k - R_{1k}q_1 - R_{2k}q_2 - \cdots - R_{k-1,k}q_{k-1} \neq 0$$

都将是非零的。

a_1, \dots, a_k 是线性无关的。

因此：

$$a_k \notin \text{span}\{q_1, \dots, q_{k-1}\} = \text{span}\{a_1, \dots, a_{k-1}\}$$

q_k 是 \tilde{q}_k 的单位化：选择 $R_{kk} = \|\tilde{q}_k\|_2$ ，以及 $q_k = (1/R_{kk})\tilde{q}_k$ 。

\tilde{q}_k 和 q_k 正交于 q_1, \dots, q_{k-1} ，则 $R_{1k}, \dots, R_{k-1,k}$ 为：

$$R_{1k} = q_1^T a_k, R_{2k} = q_2^T a_k, \dots, R_{k-1,k} = q_{k-1}^T a_k$$

■

Algorithm 10: QR Decomposition Using Gram-Schmidt Algorithm

Input: 矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 列向量 a_1, \dots, a_n 线性无关

```

1  $R_{11} = \|a_1\|_2$ 
2  $q_1 = \frac{1}{R_{11}}a_1$ 
3 for  $k = 2$  to  $n$  do
4    $R_{1k} = q_1^T a_k$ 
5    $R_{2k} = q_2^T a_k$ 
6    $\vdots$ 
7    $R_{k-1,k} = q_{k-1}^T a_k$ 
8    $\tilde{q}_k = a_k - (R_{1k}q_1 + R_{2k}q_2 + \dots + R_{k-1,k}q_{k-1})$ 
9    $R_{kk} = \|\tilde{q}_k\|_2$ 
10   $q_k = \frac{1}{R_{kk}}\tilde{q}_k$ 
11 end
```

11.5.1 Gram-Schmidt Algorithm■ **Example 11.3**

$$\begin{aligned}
 \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & 3 \\ -1 & -1 & 5 \\ 1 & 3 & 7 \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ 0 & R_{22} & R_{23} \\ 0 & 0 & R_{33} \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Q 和 R 的第一列:

$$\tilde{q}_1 = a_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, R_{11} = \|\tilde{q}_1\| = 2, q_1 = \frac{1}{R_{11}}\tilde{q}_1 = \begin{bmatrix} -1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}$$

Q 和 R 的第二列: 计算得到 $R_{12} = q_1^T a_2 = 4$ 。

正交化计算:

$$\tilde{q}_2 = a_2 - R_{12}q_1 = \begin{bmatrix} -1 \\ 3 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix} - 4 \begin{bmatrix} -1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

将其单位化得到:

$$R_{22} = \|\tilde{q}_2\| = 2, \quad q_2 = \frac{1}{R_{22}}\tilde{q}_2 = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}$$

Q 和 R 的第三列: 计算得到 $R_{13} = q_1^T a_3 = 2$ 以及 $R_{23} = q_2^T a_3 = 8$ 。

正交化计算: $\tilde{q}_3 = a_3 - R_{13}q_1 - R_{23}q_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} -1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix} - 8 \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}$ 将其单

位化得到:

$$R_{33} = \|\tilde{q}_3\| = 4, \quad q_3 = \frac{1}{R_{33}}\tilde{q}_3 = \begin{bmatrix} -1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix}$$

最终结果:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & 3 \\ -1 & -1 & 5 \\ 1 & 3 & 7 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ 0 & R_{22} & R_{23} \\ 0 & 0 & R_{33} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} -1/2 & 1/2 & -1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 8 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

■

11.5.2 基于 Gram-Schmidt 方法进行 QR 分解的时间复杂度

Gram-Schmidt 方法第 k 次循环的复杂度:

- a_k 有 $k-1$ 个 $q_i^T a_k$ 内积操作: $(k-1)(2m-1)$ flops
- 计算 \tilde{q}_k : $2(k-1)m$ flops.

$$\tilde{q}_k = a_k - a_k^T q_1 q_1 - a_k^T q_2 q_2 - \cdots - a_k^T q_{k-1} q_{k-1}$$

- 计算 R_{kk} 和 q_k : $3m$ flops。 $R_{kk} = \|\tilde{q}_k\|_2$, $q_k = \tilde{q}_k / R_{kk}$

第 k 次循环的总和: $(4m-1)(k-1) + 3m$ flops

$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 分解的复杂度:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n ((4m-1)(k-1) + 3m) &= (4m-1) \frac{n(n-1)}{2} + 3mn \\ &\approx 2mn^2 \text{ flops} \end{aligned}$$

对于稀疏矩阵 (空间存储小于 $m \times n$) 的 QR 分解, 时间复杂度可以低于 $O(2mn^2)$.

11.6 The Numerical Instability of QR Decomposition based on Gram-Schmidt Algorithm

Gram Schmidt 算法复杂度为 $2mn^2$ flops. 在实际情况中**不推荐使用** (容易被舍入误差影响)。

修正 Gram Schmidt 算法复杂度为 $2mn^2$ flops, 有更好的数值计算性能。

Householder 算法复杂度为 $2mn^2 - (2/3)n^3$ flops。将 Q 表示为初等正交矩阵的乘积。是最广泛使用的算法 (在 MATLAB 和 JULIA 中的 QR 函数使用该算法)。

本书中认为 QR 分解的复杂度为 $O(2mn^2)$ 。

■ Example 11.4

```

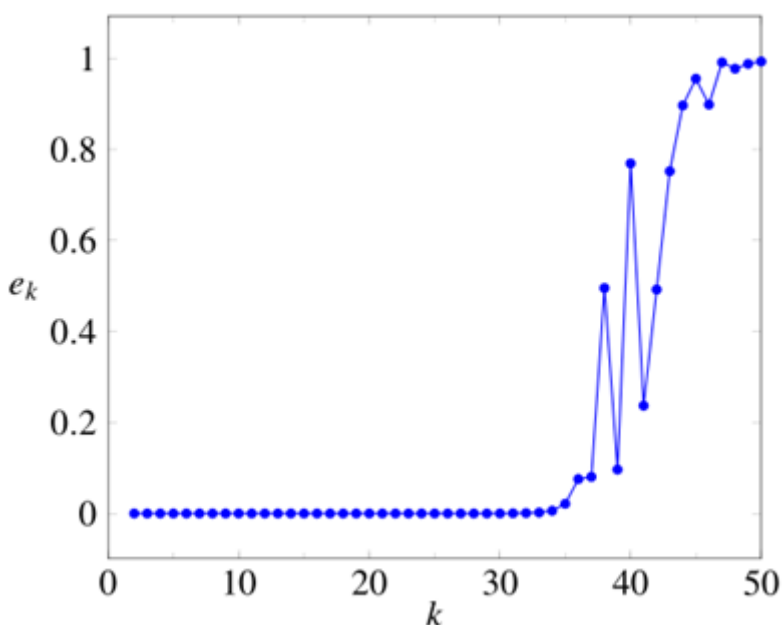
[m,n]=size(A);
Q = zeros(m,n);
R = zeros(n,n);
for k = 1:n
    R(1:k-1,k)=Q(:,1:k-1)'*A(:,k);
    v= A(:,k)-Q(:,1:k-1)*R(1:k-1,k);
    R(k,k) = norm(v);
    Q(:,k)=v/R(k,k);
end;

```

矩阵 $A = USV$, 其中 U 和 V 是正交矩阵, S 是对角矩阵, 即:

$$S_{ii} = 10^{-10(i-1)/(n-1)}, \quad i = 1, \dots, n$$

把 Gram Schmidt 算法应用到一个大小为 $m = n = 50$ 的方形矩阵 A 上。



图中显示了 q_k 与前面列之间的正交性的偏差:

$$e_k = \max_{1 \leq i < k} |q_i^T q_k|, \quad k = 2, \dots, n$$

失去正交性是由于浮点数存储的舍入误差。 ■

11.7 QR Decomposition Using Householder Transformation

Householder 算法是 QR 分解常用的算法 (MATLAB 和 Julia 中的 qr 函数)。与 Gram-Schmidt 相比, 对舍入误差更有鲁棒性。

Householder 算法计算一个“完整的”QR 因数分解:

$$A = [Q \quad \tilde{Q}] \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}, \quad [Q \quad \tilde{Q}] \text{ 是正交的矩阵}$$

Proof.

$$\begin{aligned} A &= [Q \quad \tilde{Q}] \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= QR + \tilde{Q}0 \\ &= QR \end{aligned}$$

■

完整的 Q 因子被构造成正交矩阵的乘积：

$$[Q \quad \tilde{Q}] = H_1 H_2 \cdots H_n$$

每个 $H_i \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 是对称的正交的“反射算子” (reflector)。

11.7.1 Householder Matrix

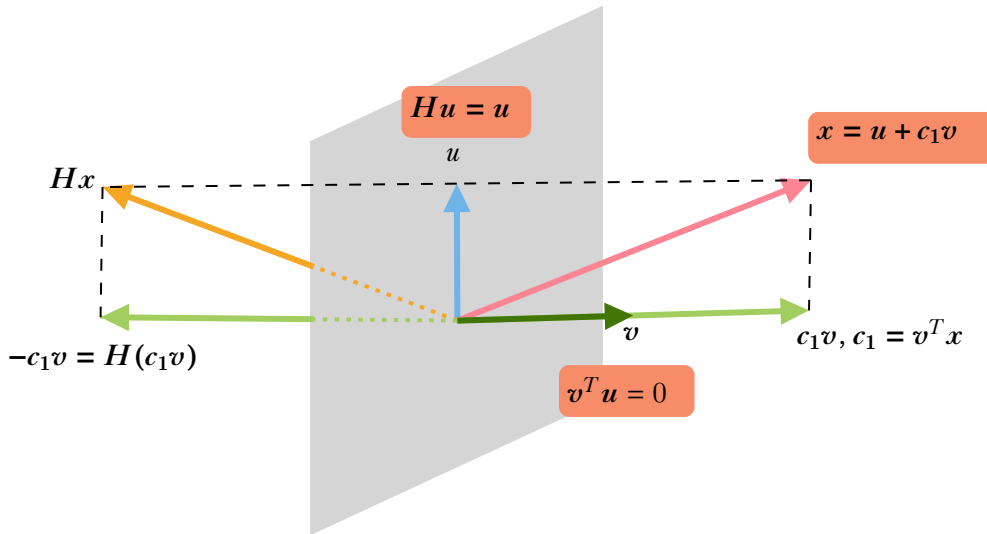
Theorem 11.7.1 $H = I - 2vv^T$, 其中 $\|v\|_2 = 1$, Hx 是 x 关于超平面 $\{u \mid v^T u = 0\}$ 反对称。
 H 是对称的

$$H^T = H$$

H 是正交的

$$H^T H = I$$

Figure 11.3: Reflection of x



Proof.

$$\begin{aligned} Hv &= (I - 2vv^T)(c_1v) \\ &= c_1v - 2vv^T c_1v \\ &= c_1v - 2c_1vv^T v \\ &= -c_1v \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Hu &= (I - 2vv^T)u \\ &= u - 2vv^T u \\ &= u \quad (v^T u = 0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Hx &= H(u + c_1 v) \\
&= u - c_1 v \\
&= x - 2(v^T x)v
\end{aligned}$$

■

矩阵向量积 Hx 能化简为:

$$Hx = x - 2(v^T x)v$$

Hx 的算法复杂度

Theorem 11.7.2 如果 v 和 x 的长度是 p , 复杂度是 $4p$ flops。

11.7.2 构造反射算子

给定非零 p 维向量 $y = (y_1, y_2, \dots, y_p)$, 定义

Definition 11.7.1

$$\begin{aligned}
w &= \begin{bmatrix} y_1 + \text{sign}(y_1) \|y\|_2 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_p \end{bmatrix} \\
v &= \frac{1}{\|w\|_2} w
\end{aligned}$$

$\text{sign}(x)$ 是符号函数, $\text{sign}(0) = 0$ 。

Theorem 11.7.3 向量 w 满足

$$\|w\|_2^2 = 2y^T w$$

$$\begin{aligned}
\|w\|_2^2 &= w^T w \\
&= 2 \left(\|y\|_2^2 + |y_1| \|y\|_2 \right) \\
&= 2y^T (y + \text{sign}(y_1) \|y\|_2 e_1) \\
&= 2y^T w
\end{aligned}$$

Definition 11.7.2 — Constructed Householder Matrix. 将 y 变换为单位基向量 $e = [1, 0, 0, \dots, 0]^T$ 乘以一个常数的 Householder 矩阵为

$$H = I - 2 \frac{ww^T}{\|w\|_2^2}$$

Proof.

$$H = I - 2vv^T = I - 2 \frac{ww^T}{\|w\|_2^2} \quad (v = \frac{1}{\|w\|_2} w)$$

■

Theorem 11.7.4 Householder 矩阵 $H = I - 2vv^T = I - 2 \frac{ww^T}{\|w\|_2^2}$ 将 y 映射为

$$Hy = \begin{bmatrix} -\operatorname{sign}(y_1) \|y\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Proof.

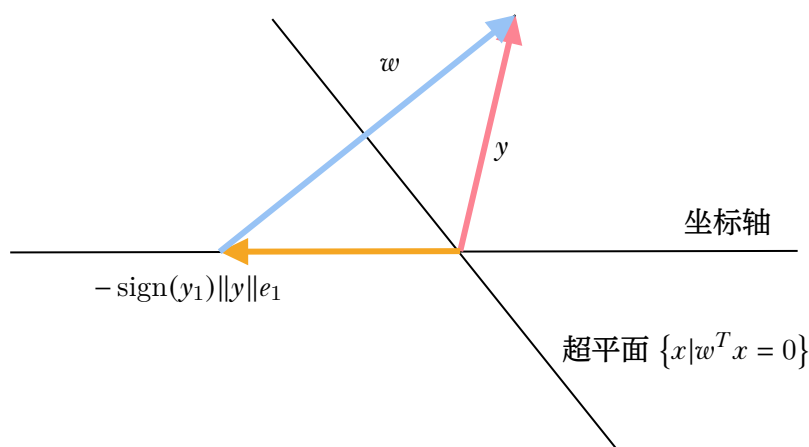
$$\begin{aligned} Hy &= y - \frac{2(w^T y)}{\|w\|_2^2} w \\ &= y - w \\ &= -\operatorname{sign}(y_1) \|y\|_2 e_1 \\ &= \begin{bmatrix} -\operatorname{sign}(y_1) \|y\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

■

即 Householder 变换的结果 Hy 只保留一个元素的值，其余元素的值变为 0。又因为 H 是正交、对称的，它与向量正交化有一定联系。

构造的 Householder 矩阵几何意义

Figure 11.4: 构造的 Householder 矩阵的几何图示



关于超平面 $\{x \mid w^T x = 0\}$, 其法向量:

$$v = \frac{w}{\|w\|_2}, w = y + \operatorname{sign}(y_1) \|y\|_2 e_1$$

反射算子 H 将 y 映射到向量 $-\operatorname{sign}(y_1) \|y\|_2 e_1$ 。

11.7.3 Householder 三角化

计算反射算子 H_1, \dots, H_n 将 A 简化为上三角矩阵形式:

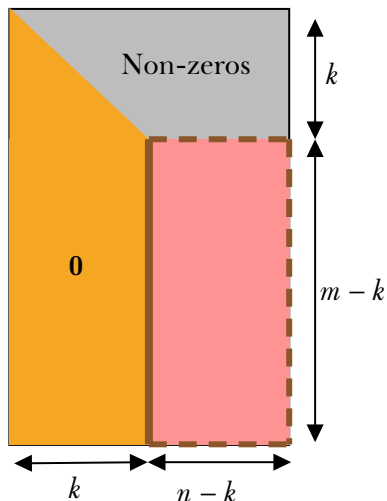
$$H_n H_{n-1} \cdots H_1 A = \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}$$

第 k 个步骤之后, 矩阵 $H_k H_{k-1} \cdots H_1 A$ 具有以下结构

Theorem 11.7.5 第 k 个步骤之后, 矩阵 $H_k H_{k-1} \dots H_1 A$ 具有以下结构:
对于 $i > j$ 和 $j \leq k$, 第 i, j 个位置的元素为零.

下面的算法用 $\begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}$ 来代替 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$.

Figure 11.6: A 的结构



Algorithm 11: QR Decomposition Using Householder Transformation

```

1 for  $k$  in  $1 : n$  do
2   令  $y = A_{k:m,k} \in \mathbb{R}^{m-k+1}$ , 计算向量  $v_k$ 

       $w = y + \text{sign}(y_1) \|y\| e_1, \quad v_k = \frac{1}{\|w\|} w$ 

3   将  $A_{k:m,k:n} \in \mathbb{R}^{(m-k+1) \times (n-k+1)}$  与反射矩阵  $I - 2v_k v_k^T$  相乘

       $A_{k:m,k:n} := A_{k:m,k:n} - 2v_k (v_k^T A_{k:m,k:n})$ 

4 end

```

Proof. 在步骤 2 中, 将 $A_{k:m,k:n}$ 与反射算子 $I - 2v_k v_k^T$ 相乘

$$(I - 2v_k v_k^T) A_{k:m,k:n} = A_{k:m,k:n} - 2v_k (v_k^T A_{k:m,k:n})$$

等价于用 $H_k \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 乘以 A

$$H_k = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I - 2v_k v_k^T \end{bmatrix} = I - 2 \begin{bmatrix} 0 \\ v_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & v_k \end{bmatrix}^T$$

算法将下列矩阵来代替 A

$$\begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}$$

返回向量 v_1, \dots, v_n , 其中 v_k 的长度为 $m - k + 1$ 。 ■

11.7.4 An Example for Householder Algorithm

Problem 11.3

$$A = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 \\ 1 & 3 & 3 \\ -1 & -1 & 5 \\ 1 & 3 & 7 \end{bmatrix} = H_1 H_2 H_3 \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix}$$

计算反射算子 H_1, H_2, H_3 来将矩阵 A 三角化

$$H_3 H_2 H_1 A = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ 0 & R_{22} & R_{23} \\ 0 & 0 & R_{33} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

R 的第一列: 计算将 A 的第一列映射到 e_1 乘积的反射算子

$$y = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad w = y - \|y\|_2 e_1 = \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad v_1 = \frac{1}{\|w\|_2} w = \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

用 $I - 2v_1 v_1^T$ 和 A 的乘积代替 A :

$$A := (I - 2v_1 v_1^T) A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & 4/3 & 8/3 \\ 0 & 2/3 & 16/3 \\ 0 & 4/3 & 20/3 \end{bmatrix}$$

R 的第二列: 计算将 $A_{2:4,2}$ 映射到 e_1 乘积的反射算子

$$y = \begin{bmatrix} 4/3 \\ 2/3 \\ 4/3 \end{bmatrix}, \quad w = y + \|y\|_2 e_1 = \begin{bmatrix} 10/3 \\ 2/3 \\ 4/3 \end{bmatrix}, \quad v_2 = \frac{1}{\|w\|_2} w = \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{bmatrix} 5 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

用 $I - 2v_2 v_2^T$ 和 $A_{2:4,2:3}$ 的乘积代替 $A_{2:4,2:3}$:

$$A := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & I - 2v_2 v_2^T \end{bmatrix} A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & -2 & -8 \\ 0 & 0 & 16/5 \\ 0 & 0 & 12/5 \end{bmatrix}$$

R 的第三列: 计算将 $A_{3:4,3}$ 映射到 e_1 乘积的反射算子

$$y = \begin{bmatrix} 16/5 \\ 12/5 \end{bmatrix}, \quad w = y + \|y\|_2 e_1 = \begin{bmatrix} 36/5 \\ 12/5 \end{bmatrix}, \quad v_3 = \frac{1}{\|w\|_2} w = \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

用 $I - 2v_3 v_3^T$ 和 $A_{3:4,3}$ 的乘积代替 $A_{3:4,3}$:

$$A := \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & I - 2v_3 v_3^T \end{bmatrix} A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & -2 & -8 \\ 0 & 0 & -4 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
H_3 H_2 H_1 A &= \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 - 2v_3 v_3^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_1 & 0 \\ 0 & I_3 - 2v_2 v_2^T \end{bmatrix} (I_4 - 2v_1 v_1^T) A \\
&= \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 - 2v_3 v_3^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_1 & 0 \\ 0 & I_3 - 2v_2 v_2^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & 4/3 & 8/3 \\ 0 & 2/3 & 16/3 \\ 0 & 4/3 & 20/3 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 - 2v_3 v_3^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & -2 & -8 \\ 0 & 0 & 16/5 \\ 0 & 0 & 12/5 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & -2 & -8 \\ 0 & 0 & -4 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

11.7.5 Complexity of Householder Algorithm

Householder 方法第 k 次循环的复杂度:

- $v_k^T A_{k:m,k:n}$ 的乘积: $(2(m-k+1)-1)(n-k+1)$ flops
- v_k 的外积: $(m-k+1)(n-k+1)$ flops
- $A_{k:m,k:n}$ 的减法: $(m-k+1)(n-k+1)$ flops

第 k 次循环的总和: $4(m-k+1)(n-k+1)$ flops

计算 R 和 v_1, \dots, v_n 的总复杂度

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^n 4(m-k+1)(n-k+1) &\approx \int_0^n 4(m-t)(n-t+1)dt \\
&\approx 2mn^2 - \frac{2}{3}n^3 \text{ flops}
\end{aligned}$$

11.8 Q 因子

Householder 算法返回向量 v_1, \dots, v_n , 其定义为:

Definition 11.8.1 — v_1, \dots, v_n 的完整表示.

$$[Q \quad \tilde{Q}] = H_1 H_2 \cdots H_n$$

通常不需计算矩阵 $[Q \quad \tilde{Q}]$ 。向量 v_1, \dots, v_n 是 $[Q \quad \tilde{Q}]$ 简单表示 (economical representation)。

Theorem 11.8.1 $[Q \quad \tilde{Q}]$ 或其转置的乘积可以计算为:

$$\begin{aligned}
[Q \quad \tilde{Q}]x &= H_1 H_2 \cdots H_n x \\
[Q \quad \tilde{Q}]^T y &= H_n H_{n-1} \cdots H_1 y
\end{aligned}$$

Definition 11.8.2 矩阵-向量积 $H_k x$ 定义为:

$$H_k x = \begin{bmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & I - 2v_k v_k^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1:k-1} \\ x_{k:m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1:k-1} \\ x_{k:m} - 2(v_k^T x_{k:m})v_k \end{bmatrix}$$

11.8.1 矩阵-向量积 $H_k x$ 算法复杂度

$H_k x$ 乘积的复杂度为: $4(m - k + 1)$ flops。

$H_1 H_2, \dots, H_n$ 或其转置的乘积的复杂度为:

$$\sum_{k=1}^n 4(m - k + 1) \approx 4mn - 2n^2 \text{ flops}$$

其复杂度约等于 $m \times n$ 矩阵的矩阵-向量乘积 ($2mn$ flops)。



Extensive Reading

12	Fourier Series, Fourier Transform	90
12.1	基本概念	
12.2	Fourier Series	
12.3	Fourier transform	
12.4	Discrete Fourier Transform	
13	Factorization of Matrices	97

12. Fourier Series, Fourier Transform

12.1 基本概念

Definition 12.1.1 — Complex Numbers.

$$C = R + jI$$

where R and I are real numbers and $j = \sqrt{-1}$. Here, R denotes the real part of the complex number and I its imaginary part.

Real numbers are a subset of complex numbers in which $I = 0$.

Definition 12.1.2 — Complex Number in Polar Coordinates.

$$C = |C|(\cos \theta + j \sin \theta) = |C|e^{j\theta}$$

where $|C| = \sqrt{R^2 + I^2}$ is the length of the vector extending from the origin of the complex plane to point (R, I) , and θ is the angle between the vector and the real axis.

上式使用了欧拉公式

Theorem 12.1.1 — Euler's Formular.

$$e^{j\theta} = \cos \theta + j \sin \theta$$

Corollary 12.1.2 $e^{2\pi it}$ 可以表示每秒 1 圈的旋转.

Definition 12.1.3 — 正弦函数.

$$y = A \sin(\omega t + \varphi)$$

就是一个以 $\frac{2\pi}{\omega}$ 为周期的正弦函数, 其中 y 表示动点的位置, t 表示时间, A 为振幅, ω 为角频率, φ 为初相.

如何深入研究非正弦周期函数呢? 将周期函数展开成由简单的周期函数例如三角函数

组成的级数. 具体地说, 将周期为 $T (= \frac{2\pi}{\omega})$ 的周期函数用一系列以 T 为周期的正弦函数 $A_n \sin(n\omega t + \varphi_n)$ 组成的级数来表示, 记为

$$f(t) = A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin(n\omega t + \varphi_n)$$

其中 $A_0, A_n, \varphi_n (n = 1, 2, 3, \dots)$ 都是常数.

将周期函数按上述方式展开, 它的物理意义是很明确的, 这就是把一个比较复杂的周期运动看成是许多不同频率的简谐振动的叠加. 在电工学上, 这种展开称为谐波分析, 其中常数项 A_0 称为 $f(t)$ 的直流分量, $A_1 \sin(\omega t + \varphi_1)$ 称为一次谐波 (又叫做基波), $A_2 \sin(2\omega t + \varphi_2), A_3 \sin(3\omega t + \varphi_3), \dots$ 依次称为二次谐波, 三次谐波, 等等.

Definition 12.1.4 — 三角级数. 令 $\frac{a_0}{2} = A_0, a_n = A_n \sin \varphi_n, b_n = A_n \cos \varphi_n, \omega = \frac{\pi}{l}$ (即 $T = 2l$), 则 $f(t) = A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin(n\omega t + \varphi_n)$ 可以改写为

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi t}{l} + b_n \sin \frac{n\pi t}{l} \right)$$

其中 $a_0, a_n, b_n (n = 1, 2, 3, \dots)$ 都是常数.

Definition 12.1.5 — 三角函数系.

$$1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \dots, \cos nx, \sin nx, \dots$$

在区间 $[-\pi, \pi]$ 上正交, 就是指在三角函数系 (7-4) 中任何不同的两个函数的乘积在区间 $[-\pi, \pi]$ 上的积分等于零, 即

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \, dx &= 0 \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \\ \int_{-\pi}^{\pi} \sin nx \, dx &= 0 \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \\ &\dots \end{aligned}$$

Definition 12.1.6 — 复数域的 Gram 矩阵. 如果 $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ 的 Gram 矩阵为单位矩阵, 则 A 具有正交列:

$$\begin{aligned} A^H A &= \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^H \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} a_1^H a_1 & a_1^H a_2 & \cdots & a_1^H a_n \\ a_2^H a_1 & a_2^H a_2 & \cdots & a_2^H a_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n^H a_1 & a_n^H a_2 & \cdots & a_n^H a_n \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \\ &= I \end{aligned}$$

Gram 矩阵列有单位范数: $\|a_i\|_2^2 = a_i^H a_i = 1$ 。

Gram 矩阵列是相互正交的: 对于 $i \neq j, a_i^H a_j = 0$ 。

Definition 12.1.7 — 酉矩阵. 列正交的方形复数矩阵称为酉矩阵。

Definition 12.1.8 — 酉矩阵的逆.

$$\left. \begin{array}{l} A^H A = I \\ A \text{ 是方的} \end{array} \right\} \Rightarrow A A^H = I$$

酉矩阵是具有逆 A^H 的非奇异矩阵。如果 A 是酉矩阵, 那么 A^H 也是酉矩阵。

12.2 Fourier Series

Definition 12.2.1 — 傅里叶级数.

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx).$$

where

$$\begin{cases} a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx \, dx & (n = 0, 1, 2, 3, \dots), \\ b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx \, dx & (n = 1, 2, 3, \dots). \end{cases}$$

Proof. 设 $f(x)$ 是周期为 2π 的周期函数, 且能展开成三角级数

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kx + b_k \sin kx).$$

先求 a_0 . 上式一从 $-\pi$ 到 π 积分, 由于假设式右端级数可逐项积分, 因此有

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{a_0}{2} dx + \sum_{k=1}^{\infty} \left[a_k \int_{-\pi}^{\pi} \cos kx \, dx + b_k \int_{-\pi}^{\pi} \sin kx \, dx \right]$$

根据三角函数系的正交性, 等式右端除第一项外, 其余各项均为零, 所以

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx = \frac{a_0}{2} \cdot 2\pi$$

于是得

$$a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) dx$$

其次求 a_n . 用 $\cos nx$ 乘式两端, 再从 $-\pi$ 到 π 积分, 得到

$$\begin{aligned} & \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx \, dx \\ &= \frac{a_0}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \cos nx \, dx + \sum_{k=1}^{\infty} \left[a_k \int_{-\pi}^{\pi} \cos kx \cos nx \, dx + b_k \int_{-\pi}^{\pi} \sin kx \cos nx \, dx \right] \end{aligned}$$

根据三角函数系的正交性, 等式右端除 $k = n$ 的一项外, 其余各项均为 0. 所以

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx \, dx = a_n \int_{-\pi}^{\pi} \cos^2 nx \, dx = a_n \pi$$

于是得

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx \, dx \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

类似地, 用 $\sin nx$ 乘 (7-5) 式的两端, 再从 $-\pi$ 到 π 积分, 可得

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx \, dx \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

■

Theorem 12.2.1 — 收敛定理, 狄利克雷 (Dirichlet) 充分条件. 设 $f(x)$ 是周期为 2π 的周期函数, 如果它满足:

1. 在一个周期内连续或只有有限个第一类间断点,
2. 在一个周期内至多只有有限个极值点

那么 $f(x)$ 的傅里叶级数收敛, 并且

- 当 x 是 $f(x)$ 的连续点时, 级数收敛于 $f(x)$;
- 当 x 是 $f(x)$ 的间断点时, 级数收敛于 $\frac{1}{2} [f(x^-) + f(x^+)]$.

收敛定理告诉我们: 只要函数在 $[-\pi, \pi]$ 上至多有有限个第一类间断点, 并且不作无限次振动, 函数的傅里叶级数在连续点处就收敛于该点的函数值, 在间断点处收敛于该点左极限与右极限的算术平均值. 可见, 函数展开成傅里叶级数的条件比展开成幂级数的条件低得多.

Corollary 12.2.2 记 $C = \{x \mid f(x) = \frac{1}{2} [f(x^-) + f(x^+)]\}$
在 C 上就成立 $f(x)$ 的傅里叶级数展开式

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx), \quad x \in C$$

Definition 12.2.2 — 正弦级数. 当 $f(x)$ 为奇函数时, $f(x) \cos nx$ 是奇函数, $f(x) \sin nx$ 是偶函数, 故

$$\left. \begin{aligned} a_n &= 0 \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \\ b_n &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \sin nx \, dx \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \end{aligned} \right\}$$

即知奇函数的傅里叶级数是只含有正弦项的正弦级数.

$$\sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin nx$$

Definition 12.2.3 — 余弦级数. 当 $f(x)$ 为偶函数时, $f(x) \cos nx$ 是偶函数, $f(x) \sin nx$ 是奇函数, 故

$$\left. \begin{aligned} a_n &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \cos nx \, dx \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \\ b_n &= 0 \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \end{aligned} \right\}$$

即知偶函数的傅里叶级数是只含常数项和余弦项的余弦级数

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos nx$$

在实际应用 (如研究某种波动问题, 热的传导、扩散问题) 中, 有时还需要把定义在区间 $[0, \pi]$ 上的函数 $f(x)$ 展开成正弦级数或余弦级数.

根据前面讨论的结果, 这类展开问题可以按如下的方法解决: 设函数 $f(x)$ 定义在区间 $[0, \pi]$ 上并且满足收敛定理的条件, 我们在开区间 $(-\pi, 0)$ 内补充函数 $f(x)$ 的定义, 得到定义在 $(-\pi, \pi]$ 上的函数 $F(x)$, 使它在 $(-\pi, \pi)$ 上成为奇函数 (偶函数). 按这种方式拓广函

数定义域的过程称为奇延拓 (偶延拓). 然后将奇延拓 (偶延拓) 后的函数展开成傅里叶级数, 这个级数必定是正弦级数 (余弦级数). 再限制 x 在 $(0, \pi]$ 上, 此时 $F(x) \equiv f(x)$, 这样便得到 $f(x)$ 的正弦级数 (余弦级数) 展开式.

Theorem 12.2.3 设周期为 $2l$ 的周期函数 $f(x)$ 满足收敛定理的条件, 则它的傅里叶级数展开式为

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{l} + b_n \sin \frac{n\pi x}{l} \right) \quad (x \in C), \quad (8-1)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} a_n &= \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \cos \frac{n\pi x}{l} dx \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \\ b_n &= \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \\ C &= \{x \mid f(x) = \frac{1}{2} [f(x^-) + f(x^+)]\} \end{aligned} \right\}$$

当 $f(x)$ 为奇函数时,

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin \frac{n\pi x}{l} \quad (x \in C)$$

其中

$$b_n = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

当 $f(x)$ 为偶函数时,

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos \frac{n\pi x}{l} \quad (x \in C)$$

其中

$$a_n = \frac{2}{l} \int_0^l f(x) \cos \frac{n\pi x}{l} dx \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

Definition 12.2.4 — 傅里叶级数的复数形式.

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{\frac{n\pi x}{l} j}$$

where $c_n = \frac{1}{2l} \int_{-l}^l f(x) e^{-\frac{n\pi x}{l} j} dx \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$.

Proof. 设周期为 $2l$ 的周期函数 $f(x)$ 的傅里叶级数为

$$\frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(a_n \cos \frac{n\pi x}{l} + b_n \sin \frac{n\pi x}{l} \right)$$

其中系数 a_n 与 b_n 为

$$\left. \begin{aligned} a_n &= \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \cos \frac{n\pi x}{l} dx \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \\ b_n &= \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \end{aligned} \right\}$$

利用欧拉公式

$$\cos t = \frac{e^{ti} + e^{-ti}}{2}, \quad \sin t = \frac{e^{ti} - e^{-ti}}{2i}$$

记

$$\frac{a_0}{2} = c_0, \quad \frac{a_n - b_n i}{2} = c_n, \quad \frac{a_n + b_n i}{2} = c_{-n} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

则表示为

$$c_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(c_n e^{\frac{n\pi x}{l} i} + c_{-n} e^{-\frac{n\pi x}{l} i} \right) = \left(c_n e^{\frac{n\pi x}{l} i} \right)_{n=0} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(c_n e^{\frac{n\pi x}{l} i} + c_{-n} e^{-\frac{n\pi x}{l} i} \right)$$

$$c_0 = \frac{a_0}{2} = \frac{1}{2l} \int_{-l}^l f(x) dx$$

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{a_n - b_n i}{2} \\ &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \cos \frac{n\pi x}{l} dx - \frac{i}{l} \int_{-l}^l f(x) \sin \frac{n\pi x}{l} dx \right] \\ &= \frac{1}{2l} \int_{-l}^l f(x) \left(\cos \frac{n\pi x}{l} - i \sin \frac{n\pi x}{l} \right) dx \\ &= \frac{1}{2l} \int_{-l}^l f(x) e^{-\frac{n\pi x}{l} i} dx \quad (n = 1, 2, 3, \dots); \\ c_{-n} &= \frac{a_n + b_n i}{2} = \frac{1}{2l} \int_{-l}^l f(x) e^{\frac{n\pi x}{l} i} dx \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \end{aligned}$$

将已得的结果合并写为

$$c_n = \frac{1}{2l} \int_{-l}^l f(x) e^{-\frac{n\pi x}{l} i} dx \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

■

12.3 Fourier transform

Definition 12.3.1 — The Fourier transform of a continuous function $f(t)$ of a continuous variable t .

$$F(\mu) = \mathfrak{F}\{f(t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-j2\pi\mu t} dt$$

Using Euler's formula, we can write as

$$F(\mu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) [\cos(2\pi\mu t) - j \sin(2\pi\mu t)] dt$$

Definition 12.3.2 — inverse Fourier transform.

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\mu) e^{j2\pi\mu t} d\mu$$

12.4 Discrete Fourier Transform

Definition 12.4.1 — Discrete Fourier Transform.

$$F_m = \sum_{n=0}^{M-1} f_n e^{-j2\pi mn/M} \quad m = 0, 1, 2, \dots, M-1$$

Definition 12.4.2 — inverse discrete Fourier transform (IDFT).

$$f_n = \frac{1}{M} \sum_{m=0}^{M-1} F_m e^{j2\pi mn/M} \quad n = 0, 1, 2, \dots, M-1$$

Definition 12.4.3 — 离散傅里叶变换矩阵 W .

$$W = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega^{-1} & \omega^{-2} & \cdots & \omega^{-(n-1)} \\ 1 & \omega^{-2} & \omega^{-4} & \cdots & \omega^{-2(n-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{-(n-1)} & \omega^{-2(n-1)} & \cdots & \omega^{-(n-1)(n-1)} \end{bmatrix}$$

where $\omega = e^{2\pi j/n}$, $j = \sqrt{-1}$

Corollary 12.4.1 矩阵 $(1/\sqrt{n})W$ 是酉矩阵:

$$\frac{1}{n} W^H W = \frac{1}{n} W W^H = I$$

Corollary 12.4.2 W 的逆 $W^{-1} = (1/n)W^H$ 。

Corollary 12.4.3 W 的共轭转置为

$$W^H = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & \omega^1 & \omega^2 & \cdots & \omega^{n-1} \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \cdots & \omega^{2(n-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{n-1} & \omega^{2(n-1)} & \cdots & \omega^{(n-1)(n-1)} \end{bmatrix}$$

Corollary 12.4.4 Gram 矩阵的第 i, j 个元素为

$$(W^H W)_{ij} = 1 + \omega^{i-j} + \omega^{2(i-j)} + \cdots + \omega^{(n-1)(i-j)}$$

$(W^H W)_{ii} = n$, $(W^H W)_{ij} = \frac{\omega^{n(i-j)} - 1}{\omega^{i-j} - 1} = 0$ 如果 $i \neq j$
最后一步因为 $\omega^n = 1$ 。

Definition 12.4.4 — 离散傅里叶反变换. n 维向量 x 的离散傅里叶反变换是

$$W^{-1}x = (1/n)W^H x$$



13. Factorization of Matrices

$$A = LU$$

$$A = LPU$$

$$A = QR$$

$$A = X\Lambda X^{-1}$$

$$S = Q\Lambda Q^T$$

$$A = U\Sigma V^T$$

$$A = CMR$$



Statistics

14	Random Variables	99
14.1	随机变量的引入	
14.2	随机变量的特点	
14.3	优势	
14.4	常见随机变量	
14.5	随机变量的分布函数	
14.6	随机变量的分布函数性质	
14.7	连续型随机变量及其概率密度	
14.8	随机变量的数字特征	
15	大数定律和中心极限定理	104
15.1	辛钦大数定律	
15.2	伯努利大数定理	
15.3	中心极限定理	
16	Sampling Distribution	106
16.1	统计量	
16.2	常见统计量	
16.3	卡方分布	
16.4	t 分布	
16.5	F 分布	
16.6	正态总体的样本均值和样本方差的分布	
17	Hypothesis Testing	113
17.1	正态总体均值方差的检验法	
17.2	经验分布函数	
17.3	Q-Q 图 (Quantile-quantile Plot)	
17.4	卡方拟合优度检验	
17.5	柯尔莫哥洛夫 (Kolmogorov-Smirnov) 检验	
17.6	秩和检验	
17.7	方差分析 (Analysis of Variance, ANOVA)	
17.8	多元线性回归	
17.9	逐步回归	
18	Bootstrap	125
18.1	估计量的标准误差的 Bootstrap 估计	
18.2	估计量的均方误差的 Bootstrap 估计	
18.3	Bootstrap 置信区间	
18.4	参数 Bootstrap 方法	
	Index	139



14. Random Variables

14.1 随机变量的引入

在实际问题中, 随机试验的结果可以用数量来表示, 由此就产生了随机变量的概念.

有些试验结果本身与数值有关 (本身就是一个数); 在有些试验中, 试验结果看来与数值无关, 但我们可以引进一个变量来表示它的各种结果. 也就是说, 把试验结果数值化. 这种对应关系在数学上理解为定义了一种实值单值函数

14.2 随机变量的特点

它随试验结果的不同而取不同的值, 因而在试验之前只知道它可能取值的范围, 而不能预先肯定它将取哪个值.

由于试验结果的出现具有一定的概率, 于是这种实值函数取每个值和每个确定范围内的值也有一定的概率, 所以称这种定义在样本空间 S 上的实值单值函数 $X = X(e)$ 为随机变量

14.3 优势

1. 引入随机变量后, 对随机现象统计规律的研究, 就由对事件及事件概率的研究扩大为对随机变量及其取值规律的研究
2. 易于表示
3. 和原来集合的表示等价

14.4 常见随机变量

14.4.1 离散型随机变量

公式法

$$P\{X = x_k\} = p_k, k = 1, 2, \dots$$

列表法

$$X \sim \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_n & \cdots \\ p_1 & p_2 & \cdots & p_n & \cdots \end{pmatrix}$$

X	x_1	x_2	\cdots	$x_n \cdots$
p_k	p_1	p_2	\cdots	$p_n \cdots$

14.4.2 两点分布

特殊的二项分布 ($n = 1$)

X	0	1
p_k	$1 - p$	p

14.4.3 (n 重) 伯努利试验, 二项分布

$$P\{X = k\} = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

X	0	1	\cdots	k	\cdots	n
p_k	q^n	$\binom{n}{1} p q^{n-1}$	\cdots	$\binom{n}{k} p^k q^{n-k}$	\cdots	p^n

二项分布性质

- 将伯努利试验 E 独立地重复地进行 n 次, 则称这一串重复的独立试验为 n 重伯努利试验. 伯努利试验对试验结果没有等可能的要求“重复”是指这 n 次试验中 $P(A) = p$ 保持不变. “独立”是指各次试验的结果互不影响.
- 每次试验条件相同
- 每次试验只考虑两个互逆结果 A 或 \bar{A}
- 各次试验相互独立
- 二项分布描述的是 n 重伯努利试验中事件 A 出现的次数 X 的分布律

二项分布单峰性质

若在 k_0 处, 概率 $P\{X = k\}$ 达到最大 (称 k_0 为随机变量 X 的最可能值)

$$\begin{cases} \frac{P\{X=k_0\}}{P\{X=k_0+1\}} \geq 1 \\ \frac{P\{X=k_0\}}{P\{X=k_0-1\}} \geq 1 \end{cases}$$

得

$$(n+1)p - 1 \leq k_0 \leq (n+1)p$$

$$k_0 = \begin{cases} (n+1)p \text{ 和 } (n+1)p - 1, & \text{当 } (n+1)p \text{ 为整数,} \\ [(n+1)p], & \text{其它,} \end{cases}$$

14.4.4 泊松分布

$$P\{X = k\} = \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!}, \quad k = 0, 1, 2, \cdots$$

其中 $\lambda > 0$ 是常数, 则称 X 服从参数为 λ 的泊松分布, 记作

$$X \sim \pi(\lambda)$$

Theorem 14.4.1 — 泊松定理. 泊松分布是作为二项分布的近似, 于 1837 年由法国数学家泊松引入的.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} C_n^k p_n^k (1 - p_n)^{n-k} = e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!} \quad (\lambda = np)$$

14.4.5 连续型随机变量

14.4.6 均匀分布

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & a < x < b \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

$$X \sim U(a, b)$$

$$F(x) = P\{X \leq x\} = \begin{cases} 0, & x < a \\ \frac{x-a}{b-a}, & a \leq x < b \\ 1, & x \geq b \end{cases}$$

14.4.7 指数分布

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\theta} e^{-x/\theta}, & x > 0 \\ 0, & \text{其它}, \end{cases}$$

$$F(x) = P\{X \leq x\} = \begin{cases} 1 - e^{-x/\theta}, & x > 0 \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

14.4.8 正态分布

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}, \quad -\infty < x < \infty$$

14.4.9 标准正态分布

$$\text{若 } X \sim N(\mu, \sigma^2), \text{ 则 } Z = \frac{X - \mu}{\sigma} \sim N(0, 1)$$

14.5 随机变量的分布函数

14.6 随机变量的分布函数性质

对任意实数 $x_1 < x_2$, 随机点落在区间 $(x_1, x_2]$ 内的概率为:

$$P\{x_1 < X \leq x_2\} = P\{X \leq x_2\} - P\{X \leq x_1\} = F(x_2) - F(x_1)$$

$$F(-\infty) = \lim_{x \rightarrow -\infty} F(x) = 0$$

$$F(+\infty) = \lim_{x \rightarrow +\infty} F(x) = 1$$

14.7 连续型随机变量及其概率密度

$$f(x) \geq 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1$$

14.8 随机变量的数字特征

14.8.1 方差

$$D(X) = E\{[x - E(X)]\}$$

$$D(X) = E(X^2) - [E(X)]^2$$

方差性质

$$D(C) = 0$$

$$D(CX) = C^2 D(X)$$

$$D(X + C) = D(X)$$

X 和 Y 相互独立时,

$$D(X + Y) = D(X) + D(Y)$$

$D(X) = 0$ 等价于 $P[X = E(X)] = 1$

Theorem 14.8.1 — 切比雪夫不等式.

$$P(|X - \mu| \geq \varepsilon) \leq \frac{\sigma^2}{\varepsilon^2}$$

$$P(|X - \mu| < \varepsilon) \geq 1 - \frac{\sigma^2}{\varepsilon^2}$$

14.8.2 协方差

$$Cov(X, Y) = E\{[X - E(X)][Y - E(Y)]\}$$

$$Cov(X, Y) = E(XY) - E(X)E(Y)$$

协方差性质

$$D(X + Y) = D(X) + D(Y) + 2Cov(X, Y)$$

$$Cov(X, Y) = Cov(Y, X)$$

$$Cov(X, X) = D(X)$$

$$Cov(X, c) = 0$$

$$Cov(aX + b, Y) = aCov(X, Y)$$

$$Cov(aX, bY) = abCov(X, Y)$$

$$Cov(X_1 + X_2, Y) = Cov(X_1, Y) + Cov(X_2, Y)$$

对于随机变量序列 X_1, \dots, X_n 与 Y_1, \dots, Y_m , 有

$$\text{cov} \left(\sum_{i=1}^n X_i, \sum_{j=1}^m Y_j \right) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \text{cov} (X_i, Y_j)$$

对于随机变量序列 X_1, \dots, X_n , 有

$$\text{var} \left(\sum_{i=1}^n X_i \right) = \sum_{i=1}^n \text{var} (X_i) + 2 \sum_{i,j:i < j} \text{cov} (X_i, X_j)$$

14.8.3 相关系数

$$\rho_{XY} = \frac{\text{Cov}(X, Y)}{\sqrt{D(X)}\sqrt{D(Y)}}$$

相关系数是刻画两个变量间线性相关程度的一个重要的数字特征. 相关系数也可以看成协方差: 一种剔除了两个变量量纲影响、标准化后的特殊协方差.

14.8.4 X, Y 不相关时候的性质

若 $\rho_{XY} = 0$, 称 X 和 Y 不(线性)相关.

Corollary 14.8.2 独立一定是不相关, 不相关不一定独立.

Theorem 14.8.3 若随机变量 X 与 Y 的方差都存在, 且均不为零; 则下列四个命题等价.

1. $\rho_{XY} = 0$
2. $\text{Cov}(X, Y) = 0$
3. $E(XY) = E(X)E(Y)$
4. $D(X \pm Y) = DX + DY$.

15. 大数定律和中心极限定理

15.1 辛钦大数定律

Theorem 15.1.1 — 辛钦大数定律. 设随机变量序列 X_1, X_2, \dots 相互独立, 服从同一分布, 具有数学期 $E(X_i) = \mu, i = 1, 2, \dots$, 则对于任意正数 ε , 有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left\{ \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i - \mu \right| < \varepsilon \right\} = 1$$

则序列 $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$ 依概率收敛于 μ (很可能接近于 μ).

另一表述:

$$\bar{X} \xrightarrow{P} \mu$$

15.1.1 辛钦大数定律条件

- X_1, X_2, \dots 相互独立
- X_1, X_2, \dots 服从同一分布
- 不要求方差存在.

Corollary 15.1.2 设 $X_n \xrightarrow{P} a, Y_n \xrightarrow{P} b$ 则

$$g(X_n, Y_n) \xrightarrow{P} g(a, b)$$

15.2 伯努利大数定理

Theorem 15.2.1 — 伯努利大数定理. 设 f_A 是 n 次独立重复试验中事件 A 的发生次数, p 是每次试验中发生的概率, 则对于任意的正数 ε .

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \{ |f_A/n - p| < \varepsilon \} = 1$$

贝努里大数定律表明, 当重复试验次数 n 充分大时, 事件 A 发生的频率 nA/n 与事件 A 的概率 p 有较大偏差的概率很小.

15.3 中心极限定理

Theorem 15.3.1 — Lyapunov 中心极限定理. 设 X_1, X_2, \dots 相互独立, 他们拥有数学期望和方差

$$E(X_k) = \mu_k$$

$$D(X_k) = \sigma_k^2$$

则有

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} F_n(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} P \left\{ \frac{\sum_{k=1}^n X_k - \sum_{k=1}^n \mu_k}{B_n} \leq x \right\} \\ &= \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-t^2/2} dt \\ &= \Phi(x) \end{aligned}$$

$$\text{其中 } B_n = \sqrt{D(\sum_{k=1}^n X_k)}$$

Theorem 15.3.2 设 X_1, X_2, \dots 相互独立, 他们服从同一分布, 拥有数学期望和方差

$$E(X_k) = \mu$$

$$D(X_k) = \sigma^2$$

则有

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} F_n(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} P \left\{ \frac{\sum_{i=1}^n X_i - n\mu}{\sigma\sqrt{n}} \leq x \right\} \\ &= \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-t^2/2} dt \\ &= \Phi(x) \end{aligned}$$

Theorem 15.3.3 — De Moivre-Laplace 定理. 设 η_n 服从参数为 n, p 的二项分布, 则对于任意 x , 有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P \left\{ \frac{\eta_n - np}{\sqrt{np(1-p)}} \leq x \right\} = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-t^2/2} dt = \Phi(x)$$

Proof. 将 η_n 拆分成 n 个相互独立, 服从同一分布的随机变量 X_1, X_2, \dots 之和

■

16. Sampling Distribution

16.1 统计量

不含任何未知参数的样本的函数称为统计量. 它是完全由样本决定的量.

16.2 常见统计量

Definition 16.2.1 — 样本平均值.

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$$

Definition 16.2.2 — 样本方差.

$$S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$$

Definition 16.2.3 — 样本标准差.

$$S = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}$$

Definition 16.2.4 — 样本 k 阶原点矩.

$$A_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^k$$

Definition 16.2.5 — 样本 k 阶中心矩.

$$B_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^k$$

Definition 16.2.6 — X 和 Y 的 $k+p$ 阶混合原点矩. 若

$$E \left\{ \left(X^k \right) \left(Y^p \right) \right\}, k, p = 1, 2, \dots$$

存在, 则称它为 X 和 Y 的 $k+p$ 阶混合原点矩

Definition 16.2.7 — X 和 Y 的 $k+l$ 阶混合中心矩. 若

$$E \left\{ [X - E(X)]^k [Y - E(Y)]^l \right\}, k, l = 1, 2, \dots$$

存在, 则称它为 X 和 Y 的 $k+l$ 阶混合中心矩

16.3 卡方分布

Definition 16.3.1 — 卡方分布. 设 X_1, X_2, \dots, X_n 相互独立, 都服从正态分布 $N(0, 1)$ (都是来自总体 $N(0, 1)$ 的样本), 则称随机变量:

$$\chi^2 = X_1^2 + X_2^2 + \dots + X_n^2$$

所服从的分布为自由度为 n 的 χ^2 分布. 记作 $\chi^2 \sim \chi^2(n)$

16.3.1 卡方分布性质

Corollary 16.3.1 $\chi^2(1) \sim X^2(1)$

Corollary 16.3.2 — χ^2 分布的可加性. 若 $X_1 \sim \chi^2(n_1), X_2 \sim \chi^2(n_2)$, 且 X_1 与 X_2 相互独立, 则

$$X_1 + X_2 \sim \chi^2(n_1 + n_2)$$

Proof. 事实上, 卡方分布是 Gamma 分布的特殊情况. 自由度为 n 的卡方分布 χ_n^2 其实就是 $\Gamma\left(\frac{n}{2}, \frac{1}{2}\right)$.

根据 Gamma 分布的矩生成函数 (Moment Generating Function, MGF), 若 $X_1 \sim \chi_{n_1}^2$, $X_2 \sim \chi_{n_2}^2$,

那么 X_1, X_2 对应的 MGF 分别为

$$M_{X_1}(t) = (1 - 2t)^{-n_1/2}$$

$$M_{X_2}(t) = (1 - 2t)^{-n_2/2}$$

因为 X_1, X_2 相互独立, 那么 $Y = X_1 + X_2$ 的 MGF 为

$$M_Y(t) = M_{X_1}(t)M_{X_2}(t) = (1 - 2t)^{-(n_1+n_2)/2}$$

由 MGF 的唯一性,

$$Y \sim \Gamma\left(\frac{n_1 + n_2}{2}, \frac{1}{2}\right) = \chi_{n_1+n_2}^2$$

■

Corollary 16.3.3 — χ^2 分布的数学期望和方差.

$$E(\chi^2) = n$$

$$D(\chi^2) = 2n$$

Proof.

$$E(X) = 0, D(X) = 1, E(X_i^2) = 1, D(X_i^2) = 2$$

■

Corollary 16.3.4 — 卡方分布中心极限定理. 设 X_1, X_2, \dots, X_n 相互独立, 都服从正态分布 $N(0,1)$, $E(X) = \mu, D(X) = \sigma^2$, 则有

$$P\left(\frac{\chi^2(n) - n}{\sqrt{2n}} \leq x\right) \sim \Phi(x)$$

Proof.

$$E(X) = 0, D(X) = 1, E(X_i^2) = 1, D(X_i^2) = 2$$

■

Corollary 16.3.5

$$\frac{\chi^2(n)}{n} \leftarrow \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^2 = 1$$

Proof.

$$E(X_i^2) = 1$$

■

Definition 16.3.2 — 卡方分布的上分位点.

$$p(\chi^2 > \chi_\alpha^2(n)) = \alpha$$

16.4 t 分布

Definition 16.4.1 — 自由度为 t 的 t 分布. 设 $X \sim N(0, 1), Y \sim \chi^2(n)$, 且 X, Y 相互独立, 则称随机变量

$$t = \frac{X}{\sqrt{Y/n}}$$

为自由度为 n 的 t 分布, 记作 $t \sim t(n)$

16.4.1 t 分布性质

Corollary 16.4.1 — t 分布数学期望和方差.

$$E(t) = 0$$

$$D(t(n)) = \frac{n}{n-2}$$

Corollary 16.4.2 — t 分布的概率密度函数. $n = 1$ 时

$$f(t) = \frac{1}{\pi(1+t^2)} \text{ (柯西密度)}$$

数学期望不存在. $n > 1$ 时, $h(t)$ 的图形关于 $t = 0$ 对称.

Corollary 16.4.3 n 足够大时 t 分布近似于 $N(0, 1)$ 分布. 由于卡方分布

$$n \rightarrow \infty \text{ 时, } \frac{\chi^2(n)}{n} \rightarrow 1$$

所以

$$t(n) = \frac{N(0, 1)}{\sqrt{\frac{\chi^2(n)}{n}}} \rightarrow n \rightarrow \infty N(0, 1)$$

Corollary 16.4.4 — 与 F 分布的关系.

$$\begin{aligned} t^2(n) &= \frac{N(0, 1)^2}{\chi^2(n)/n} \\ &= \frac{\chi^2(1)/1}{\chi^2(n)/n} \sim F(1, n) \\ \frac{1}{t^2(n)} &\sim F(n, 1) \end{aligned}$$

Definition 16.4.2 — t 分布的上分位点.

$$t_{1-\alpha}(n) = -t_{\alpha}(n)$$

16.5 F 分布

Definition 16.5.1 — F 分布. 设 $U \sim \chi^2(n_1)$, $V \sim \chi^2(n_2)$, 且 U, V 相互独立, 则称随机变量

$$F = \frac{U/n_1}{V/n_2}$$

服从自由度为 n_1, n_2 的 F 分布. 记作 $F \sim F(n_1, n_2)$

16.5.1 F 分布性质

Corollary 16.5.1 — F 分布数学期望.

$$E(F) = \frac{n_2}{n_2 - 2}$$

即与 n_1 无关.

Corollary 16.5.2 — $F(n_1, n_2), F(n_2, n_1)$ 的关系.

$$\frac{1}{F(n_1, n_2)} \sim F(n_2, n_1)$$

Corollary 16.5.3 — 与 t 分布的关系.

$$\begin{aligned} t^2(n) &= \frac{N(0, 1)^2}{\chi^2(n)/n} \\ &= \frac{\chi^2(1)/1}{\chi^2(n)/n} \sim F(1, n) \\ \frac{1}{t^2(n)} &\sim F(n, 1) \end{aligned}$$

Corollary 16.5.4 — F 分布上 分位点的性质.

$$F_{1-\alpha}(n_1, n_2) = \frac{1}{F_{\alpha}(n_2, n_1)}$$

16.6 正态总体的样本均值和样本方差的分布

Definition 16.6.1 — 正态总体的样本均值的数学期望、方差和样本方差的数学期望. 设总体 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ 的均值为 μ , 方差为 σ^2 .

X_1, X_2, \dots, X_n 是来自 X 的一个样本, 样本均值是 \bar{X} , 样本方差是 S^2 , 则有

$$E(\bar{X}) = \mu$$

$$D(\bar{X}) = \frac{\sigma^2}{n}$$

$$E(S^2) = \sigma^2$$

Corollary 16.6.1 — 矩估计法原理.

$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \rightarrow E(X)$$

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^2 - \bar{X}^2 \rightarrow D(X) = E(X^2) - E(X)^2$$

Theorem 16.6.2 — 样本均值的分布. 设总体 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ 的均值为 μ , 方差为 σ^2 , X_1, X_2, \dots, X_n 是来自 X 的一个样本, 样本均值是 \bar{X} , 则有

$$\bar{X} \sim N(\mu, \sigma^2/n)$$

Proof.

$$\sum_{i=1}^n X_i = X_1 + X_2 + \dots \sim N(n\mu, n\sigma^2)$$

■

Corollary 16.6.3

$$\frac{\bar{X} - \mu}{\sigma^2/n} = \frac{\sqrt{n}(\bar{X} - \mu)}{\sigma} \sim N(0, 1)$$

Theorem 16.6.4 — 样本方差的分布. 设总体 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ 的均值为 μ , 方差为 σ^2 , X_1, X_2, \dots, X_n 是来自 X 的一个样本, 样本均值是 \bar{X} , 样本方差是 S^2 , 则有

$$\frac{(n-1)S^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-1)$$

而且 \bar{X} 与 S^2 相互独立.

Theorem 16.6.5 — 样本均值和样本方差的关系. 设 X_1, X_2, \dots, X_n 是总体 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$ 的样本, 样本均值是 \bar{X} , 样本方差是 S^2 , 则有

$$\frac{\bar{X} - \mu}{S/\sqrt{n}} = \frac{\sqrt{n}(\bar{X} - \mu)}{S} \sim t(n-1)$$

对比

$$\frac{\bar{X} - \mu}{\sigma^2/n} = \frac{\sqrt{n}(\bar{X} - \mu)}{\sigma} \sim N(0, 1)$$

但是 n 很大时

$$S^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i - (\bar{X})^2$$

$$S^2 \rightarrow E(X^2) - E(X)^2 = \sigma^2$$

$$\therefore S \rightarrow \sigma$$

Theorem 16.6.6 — 两总体样本均值差、样本方差比的分布. 设 $X \sim N(\mu_1, \sigma_1^2)$, $Y \sim N(\mu_2, \sigma_2^2)$, 且 X 与 Y 独立,

X_1, X_2, \dots, X_n 是来自 X 的样本, Y_1, Y_2, \dots, Y_{n_2} 是取自 Y 的样本,

\bar{X} 和 \bar{Y} 分别是这两个样本的样本均值, S_1^2 和 S_2^2 分别是这两个样本的样本方差, 则有

1. $\frac{S_1^2/S_2^2}{\sigma_1^2/\sigma_2^2}$ 的分布

$$\frac{S_1^2/S_2^2}{\sigma_1^2/\sigma_2^2} \sim F(n_1-1, n_2-1)$$

2.

$$\frac{\bar{X} - \bar{Y} - (\mu_1 - \mu_2)}{\sqrt{\frac{(n_1-1)S_1^2 + (n_2-1)S_2^2}{\sigma^2(n_1+n_2-2)}}} \sim t(n_1+n_2-2)$$

Proof. 1. $\frac{S_1^2/S_2^2}{\sigma_1^2/\sigma_2^2}$ 的分布

$$\frac{S_1^2/S_2^2}{\sigma_1^2/\sigma_2^2} \sim F(n_1-1, n_2-1)$$

当 $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma^2$ 时

$$\bar{X} - \bar{Y} = N(\mu_1 - \mu_2, \sigma^2/n_1 + \sigma^2/n_2)$$

$$\therefore U = \frac{\bar{X} - \bar{Y} - (\mu_1 - \mu_2)}{\sigma \sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}}} \sim N(0, 1)$$

又因为

$$\frac{n_1 - 1}{\sigma^2} S_1^2 \sim \chi^2(n_1 - 1)$$

$$\frac{n_2 - 1}{\sigma^2} S_2^2 \sim \chi^2(n_2 - 1)$$

$$\therefore V = \frac{n_1 - 1}{\sigma^2} S_1^2 + \frac{n_2 - 1}{\sigma^2} S_2^2 \sim \chi^2(n_1 + n_2 - 2)$$

2 和 3 相互独立, 根据 t 分布定义, 因此有

$$\frac{\bar{X} - \bar{Y} - (\mu_1 - \mu_2)}{S_w \sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}}} \sim t(n_1 + n_2 - 2)$$

代入 $S_w^2 = \frac{(n_1-1)S_1^2 + (n_2-1)S_2^2}{(n_1+n_2-2)}$

$$\frac{\bar{X} - \bar{Y} - (\mu_1 - \mu_2)}{\sqrt{\frac{(n_1-1)S_1^2 + (n_2-1)S_2^2}{\sigma^2(n_1+n_2-2)}}} \sim t(n_1 + n_2 - 2)$$

■

17. Hypothesis Testing

17.1 正态总体均值方差的检验法

假设显著性水平为 α . 参阅17.1.

17.2 经验分布函数

设 X_1, X_2, \dots, X_n 是总体 F 的一个样本, 用 $S(x)$ ($-\infty < x < \infty$) 表示 X_1, X_2, \dots, X_n 中不大于 x 的随机变量

$$F_n(x) = \frac{1}{n}S(x), -\infty < x < \infty.$$

容易得到的 ($F_n(x)$ 的观察值仍以 $F_n(x)$ 表示). 一般地, 设 x_1, x_2, \dots, x_n 是总体 F 的一个容量为 n 的样本值先将 x_1, x_2, \dots, x_n 按自小到大的次序排列, 并重新编号.

设为

$$x_{(1)} \leq x_{(2)} \leq \dots \leq x_{(n)}$$

则经验分布函数 $F_n(x)$ 的观察值为

$$F_n(x) = \begin{cases} 0, & \text{若 } x < x_{(1)} \\ \frac{k}{n}, & \text{若 } x_{(k)} \leq x < x_{(k+1)} \\ 1, & \text{若 } x \geq x_{(n)} \end{cases}$$

经验分布函数的任一个观察值 $F_n(x)$ 与总体分布函数 $F(x)$ 只有微小的差别, 从而在实际上当作 $F(x)$ 来使用.

17.3 Q-Q 图 (Quantile-quantile Plot)

Q-Q 图是 Quantile-Quantile Plot 的简称, 是检验拟合优度的好方法, 目前在国外被广泛使用, 它的图示方法简单直观, 易于使用.

现在我们希望知道观测数据与分布模型的拟合效果如何. 如果拟合效果好, 观测数据的经验分布就应当非常接近分布模型的理论分布, 而经验分布函数的分位数自然也应当与分布模型的理论分位数近似相等.

Table 17.1: 正态总体均值方差的检验法

	原假设 H_0	检验统计量	备择假设 H_1	拒绝域
1	$\mu \leq \mu_0, \mu \geq \mu_0,$ $\mu = \mu_0$ (σ^2 已知)	$Z = \frac{\bar{X} - \mu_0}{\sigma/\sqrt{n}}$	$\mu > \mu_0, \mu < \mu_0,$ $\mu \neq \mu_0$	$z \geq z_\alpha, z \leq -z_\alpha,$ $ z \geq z_{\alpha/2}$
2	$\mu \leq \mu_0, \mu \geq \mu_0,$ $\mu = \mu_0$ (σ^2 未知)	$t = \frac{\bar{X} - \mu_0}{S/\sqrt{n}}$	$\mu > \mu_0, \mu < \mu_0,$ $\mu \neq \mu_0$	$t \geq t_\alpha(n-1),$ $t \leq -t_\alpha(n-1),$ $ t \geq t_{\alpha/2}(n-1)$
3	$\mu_1 - \mu_2 \leq \delta,$ $\mu_1 - \mu_2 \geq \delta,$ $\mu_1 - \mu_2 = \delta$ (σ_1^2, σ_2^2 已知)	$Z = \frac{\bar{X} - \bar{Y} - \delta}{\sqrt{\frac{\sigma_1^2}{n_1} + \frac{\sigma_2^2}{n_2}}}$	$\mu - \mu_0 > \delta,$ $\mu - \mu_0 < \delta,$ $\mu - \mu_0 \neq \delta$	$z \geq z_\alpha, z \leq -z_\alpha,$ $ z \geq z_{\alpha/2}$
4	$\mu_1 - \mu_2 \leq \delta,$ $\mu_1 - \mu_2 \geq \delta,$ $\mu_1 - \mu_2 = \delta$ ($\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma^2$ 未知)	$t = \frac{\bar{X} - \bar{Y} - \delta}{S_w \sqrt{\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}}}, S_w^2 = \frac{(n_1-1)S_1^2 + (n_2-2)S_2^2}{n_1+n_2-2}$	$\mu - \mu_0 > \delta$ $\mu - \mu_0 < \delta$ $\mu - \mu_0 \neq \delta$	$t \geq t_\alpha(n_1+n_2-2),$ $t \leq -t_\alpha(n_1+n_2-2),$ $ t \geq t_{\alpha/2}(n_1+n_2-1)$
5	$\sigma^2 \leq \sigma_0^2, \sigma^2 \geq \sigma_0^2,$ $\sigma^2 = \sigma_0^2$ (μ 未知)	$\chi^2 = \frac{(n-1)S^2}{\sigma_0^2}$	$\sigma^2 > \sigma_0^2$ $\sigma^2 < \sigma_0^2$ $\sigma^2 \neq \sigma_0^2$	$\chi^2 \geq \chi_\alpha^2(n-1),$ $\chi^2 \leq \chi_{1-\alpha}^2(n-1),$ $\chi^2 \geq \chi_{\alpha/2}^2(n-1)$ 或 $\chi^2 \leq \chi_{1-\alpha/2}^2(n-1)$
6	$\sigma_1^2 \leq \sigma_2^2, \sigma_1^2 \geq \sigma_2^2,$ $\sigma_1^2 = \sigma_2^2$ (μ_1, μ_2 未知)	$F = \frac{S_1^2}{S_2^2}$	$\sigma_1^2 > \sigma_2^2$ $\sigma_1^2 < \sigma_2^2$ $\sigma_1^2 \neq \sigma_2^2$	$F \geq F_\alpha(n_1-1, n_2-1),$ $F \leq F_{1-\alpha}(n_1-1, n_2-1),$ $F \geq F_{\alpha/2}(n_1-1, n_2-1)$ 或 $F \geq F_{1-\alpha/2}(n_1-1, n_2-1)$
7	$\mu_D \leq 0, \mu_D \geq 0,$ $\mu_D = 0$ (成对数据)	$t = \frac{\bar{D}-0}{S_D/\sqrt{n}}$	$\mu_D > 0, \mu_D < 0,$ $\mu_D \neq 0$	$t \geq t_\alpha(n-1),$ $t \leq -t_\alpha(n-1),$ $ t \geq t_{\alpha/2}(n-1)$

Algorithm 12: 作 Q-Q 图**Input:** 观测数据 x_1, x_2, \dots, x_n

- 1 将 x_1, x_2, \dots, x_n 依大小顺序排列成: $x_{(1)} \leq x_{(2)} \leq \dots \leq x_{(n)}$
- 2 取 $y_i = F^{-1}((i-1/2)/n), i = 1, 2, \dots, n$
- 3 将 $(y_i, x_{(i)}), i = 1, 2, \dots, n$, 这 n 个点画在直角坐标图上
- 4 如果这 n 个点看起来呈一条 45° 角的直线, 从 $(0, 0)$ 到 $(1, 1)$ 分布, 我们就相信 x_1, x_2, \dots, x_n 拟合分布 $F(x)$ 的效果很好.

17.4 卡方拟合优度检验

可按照下面的五个步骤进行检验:

Algorithm 13: χ^2 拟合优度检验

- 1 建立待检假设 H_0 : 总体 X 的分布函数为 $F(x)$
- 2 在数轴上选取 $k-1$ 个分点 t_1, t_2, \dots, t_{k-1} , 将数轴分成 k 个区间:
 $(-\infty, t_1), [t_1, t_2), \dots, [t_{k-2}, t_{k-1}), [t_{k-1}, +\infty)$, 令 p_i 为分布函数 $F(x)$ 的总体 X 在第 i 个区间内取值的概率, 设 m_i 为 n 个样本观察值中落入第 i 个区间上的个数, 也称为组频数
- 3 选取统计量 $\chi^2 = \sum_{i=1}^k \frac{(m_i - np_i)^2}{np_i} = \sum_{i=1}^k \frac{m_i^2}{np_i} - n$, 如果 H_0 为真, 则 $\chi^2 \sim \chi^2(k-1-r)$, 其中 r 为分布函数 $F(x)$ 中未知参数的个数
- 4 对于给定的显著性水平 α , 确定 χ_{α}^2 , 使其满足 $P\{\chi^2(k-1-r) > \chi_{\alpha}^2\} = \alpha$.
- 5 依据样本计算统计量 χ^2 的观察值, 作出判为总体 X 的分布函数为 $F(x)$

17.5 柯尔莫哥洛夫 (Kolmogorov-Smirnov) 检验

χ^2 拟合优度检验实际上是检验 $p_i = F_0(a_i) - F_0(a_{i-1}) = p_{i0}$ ($i = 1, 2, \dots, k$) 的正确性, 并未直接检验原假设的分布函数 $F_0(x)$ 的正确性, 柯尔莫哥洛夫检验直接针对原假设 $H_0: F(x) = F_0(x)$, 这里分布函数 $F_0(x)$ 必须是连续型分布. 柯尔莫哥洛夫检验基于经验分布函数 (或称样本分布函数) 作为检验统计量, 检验理论分布函数与样本分布函数的拟合优度.

设总体 X 服从连续分布, X_1, X_2, \dots, X_n 是来自总体 X 的简单随机样本, F_n 为经验分布函数. 当 H_0 为真时, 根据大数定律, 当 n 趋于无穷大时, 经验分布函数 $F_n(x)$ 依概率收敛总体分布函数 $F_0(x)$. 定义 $F_n(x)$ 到 $F_0(x)$ 的距离为

$$D_n = \sup_{-\infty < x < +\infty} |F_n(x) - F_0(x)|$$

, 当 n 趋于无穷大时, D_n 依概率收敛到 0.

Theorem 17.5.1 — Kolmogorov 定理. 在 $F_0(x)$ 为连续分布的假定下, 当原假设为真时, $\sqrt{n}D_n$ 的极限分布为

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P\{\sqrt{n}D_n \leq t\} = 1 - 2 \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^{i-1} e^{-2i^2 t^2}, t > 0$$

在显著性水平 α 下, 一个合理的检验是: 如果 $\sqrt{n}D_n > k$, 则拒绝原假设, 其中 k 是合适的常数.

注: 对于固定的 α 值, 我们需要知道该 α 值下检验的临界值. 常用的是在统计量为 D_n 时, 各个 α 值所对应的临界值如下: 在 $\alpha = 0.1$ 的显著性水平下, 检验的临界值是 $1.22/\sqrt{n}$; 在 $\alpha = 0.05$ 的显著性水平下, 检验的临界值是 $1.36/\sqrt{n}$; 在 $\alpha = 0.01$ 的显著性水平下, 检验的临界值是 $1.63/\sqrt{n}$. 这里 n 为样本的个数. 当由样本计算出来的 D_n 值小于临界值时, 说明不能拒绝原假设, 所假设的分布是可以接受的; 当由样本计算出来的 D_n 值大于临界值时, 拒绝原假设, 即所假设的分布是不能接受的.

17.6 秩和检验

秩和检验的依据是, 如果两总体分布无显著差异, 那么 T 不应太大或太小, 以 T_1 和 T_2 为上、下界的话, 则 T 应在这两者之间, 如果 T 太大或太小, 则认为两总体的分布有显著差异.

Algorithm 14: 柯尔莫哥洛夫检验

1 (1) 原假设和备择假设

$$H_0 : F(x) = F_0(x), H_1 : F(x) \neq F_0(x)$$

2 (2) 选取检验统计量

$$D_n = \sup_{-\infty < x < +\infty} |F_n(x) - F_0(x)|$$

, 当 H_0 为真时, D_n 有偏小趋势, 则拟合得越好; 当 H_0 不真时, D_n 有偏大趋势, 则拟合得越差.

3 (3) 确定拒绝域给定显著性水平 α , 查 D_n 极限分布表, 求出 t_α 满足

$P\sqrt{n}D_n \geq t_\alpha = \alpha$, 作为临界值, 即拒绝域为 $[t_\alpha, +\infty)$.

4 (4) 作判断计算统计量的观察值, 如果检验统计量 $\sqrt{n}D_n$ 的观察值落在拒绝域中, 则拒绝原假设, 否则不拒绝原假设.**Algorithm 15: 秩和检验**

Input: 设分别从 X 、 Y 两总体中独立抽取大小为 n_1 和 n_2 的样本, 设 $n_1 \leq n_2$

1 将两个样本混合起来, 按照数值大小统一编序由小到大, 每个数据对应的序数称为秩.

2 计算取自总体 X 的样本所对应的秩之和, 用 T 表示3 根据 n_1, n_2 与水平 α , 查秩和检验表, 得秩和下限 T_1 与上限 T_2 4 两总体分布有显著差异. 否则认为 X 、 Y 两总体分布在水平 α 下无显著差异

Table 17.2: 所有试验数据

A_1	X_{11}	X_{12}	\dots	X_{1n_1}
A_2	X_{21}	X_{22}	\dots	X_{2n_2}
\dots	\dots	\dots	\dots	\dots
A_r	X_{r1}	X_{r2}	\dots	X_{rn_r}

17.7 方差分析 (Analysis of Variance, ANOVA)

在现实问题中, 经常会遇到类似考察两台机床生产的零件尺寸是否相等, 病人和正常人的某个生理指标是否一样, 采用两种不同的治疗方案对同一类病人的治疗效果比较等问题. 这类问题通常会归纳为检验两个不同总体的均值是否相等, 对这类问题的解决可以采用两个总体的均值检验方法. 但若检验总体多于两个, 仍采用多总体均值检验方法会遇到困难.

17.7.1 单因素方差分析

只考虑一个因素 A 所关心的指标的影响, A 取几个水平在每个水平上作若干个试验, 假定试验过程中除因素自身外其他影响指标的因素都保持不变 (只有随机因素存在). 我们的任务是从试验结果推断, 因素 A 对指标有无显著影响, 即当 A 取不同水平时指标有无显著差异. A 取某个水平下的指标视为随机变量, 判断 A 取不同水平时指标有无显著差别, 相当于检验若干总体的均值是否相等.

不妨设 A 取 r 个水平, 分别记为 A_1, A_2, \dots, A_r . 若在水平 A_i 下总体 $X_i \sim N(\mu_i, \sigma^2)$, $i = 1, 2, \dots, r$, 这里 μ_i, σ^2 未知, μ_i 可以互不相同, 但假定 X_i 有相同的方差. 设在水平 A_i 下作了 n_i 次独立试验, 即从总体 X_i 中抽取样本容量为 n_i 的样本, 记作

$$X_{ij}, j = 1, 2, \dots, n_i$$

其中, $X_{ij} \sim N(\mu_i, \sigma^2)$, $i = 1, 2, \dots, r, j = 1, 2, \dots, n_i$, 且相互独立.

将所有试验数据列成表格

表 17.2 中对应 A_i 行的数据称为第 i 组数据. 判断 A 的 r 个水平对指标有无显著影响, 相当于作以下的假设检验:

原假设 $H_0: \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_r$; 备择假设 $H_1: \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_r$ 不全相等.

由于 X_{ij} 的取值既受不同水平 A_i 的影响, 又受 A_i 固定下随机因素的影响, 所以将它分解为

$$X_{ij} = \mu_i + \varepsilon_{ij}, i = 1, 2, \dots, r, j = 1, 2, \dots, n_i$$

其中 $\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2)$, 且相互独立. 引入记号

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^r n_i \mu_i, \quad n = \sum_{i=1}^r n_i, \quad \alpha_i = \mu_i - \mu, \quad i = 1, \dots, r$$

称 μ 为总均值, α_i 是水平 A_i 下总体的平均值 μ_i 与总评均值 μ 的差异, 习惯上称为指标 A_i 的效应.

Definition 17.7.1 原假设 $H_0: \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_r$; 备择假设 $H_1: \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_r$ 不全相等.

为检验 H_0 , 给定显著性水平 α , 记

$$F = \frac{S_A/(r-1)}{S_E/(n-r)} \sim F(r-1, n-r)$$

分布的上 α 分位数为 $F_\alpha(r-1, n-r)$, 检验规则为

$F < F_\alpha(r-1, n-r)$ 时接受 H_0 , 否则拒绝.

Proof. 由 section 17.7.1 式, 模型可表为

$$\begin{cases} X_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij} \\ \sum_{i=1}^r n_i \alpha_i = 0 \\ \varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2), i = 1, \dots, r, j = 1, \dots, n_i \end{cases}$$

原假设是

$$H_0 : \alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_r = 0$$

记

$$\bar{X}_{i\cdot} = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} X_{ij}, \bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^{n_i} X_{ij}$$

$\bar{X}_{i\cdot}$ 是第 i 组数据的组平均值, \bar{X} 是全体数据的总平均值. 考察全体数据对 \bar{X} 的偏差平方和

$$S_T = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^{n_i} (X_{ij} - \bar{X})^2$$

$$S_T = \sum_{i=1}^r n_i (\bar{X}_{i\cdot} - \bar{X})^2 + \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^{n_i} (X_{ij} - \bar{X}_{i\cdot})^2.$$

$$\text{记 } S_A = \sum_{i=1}^r n_i (\bar{X}_{i\cdot} - \bar{X})^2,$$

$$S_E = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^{n_i} (X_{ij} - \bar{X}_{i\cdot})^2,$$

$$\text{则 } S_T = S_A + S_E,$$

S_A 是各组均值对总平均值的偏差平方和, 反映 A 不同水平间的差异, 称为组间平方和; S_E 是各组内的数据对样本均值偏差平方和的总和, 反映了样本观测值与样本均值的差异, 称为组内平方和, 而这种差异认为是由随机误差引起的, 因此也称为误差平方和.

注意到 $\sum_{j=1}^{n_i} (X_{ij} - \bar{X}_{i\cdot})^2$ 是总体 $N(\mu_i, \sigma^2)$ 的样本方差的 $n_i - 1$ 倍, 于是有

$$\sum_{j=1}^{n_i} (X_{ij} - \bar{X}_{i\cdot})^2 / \sigma^2 \sim \chi^2(n_i - 1)$$

由 χ^2 分布的可加性知

$$S_E / \sigma^2 \sim \chi^2 \left(\sum_{i=1}^r (n_i - 1) \right),$$

即

$$S_E / \sigma^2 \sim \chi^2(n - r),$$

且有

$$ES_E = (n - r) \sigma^2$$

对 S_A 作进一步分析可得

$$ES_A = (r - 1) \sigma^2 + \sum_{i=1}^r n_i \alpha_i^2. (7.10)$$

方差来源	离差平方和	自由度	均方	F 值	概率
因素 A (组间)	S_A	$r - 1$	$S_A/(r - 1)$	$F = \frac{S_A/(r-1)}{S_E/(n-r)}p$	
误差 (组内)	S_E	$n - r$	$S_E/(n - r)$		
总和	S_T	$n - 1$			

Table 17.3: 双因素试验数据表

	A_1	A_2	\cdots	A_s
B_1	X_{111}, \cdots, X_{11t}	X_{121}, \cdots, X_{12t}	\cdots	X_{1s1}, \cdots, X_{1st}
B_2	X_{211}, \cdots, X_{21t}	X_{221}, \cdots, X_{22t}	\cdots	X_{2s1}, \cdots, X_{2st}
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
B_r	X_{r11}, \cdots, X_{r1t}	X_{r21}, \cdots, X_{r2t}	\cdots	X_{rs1}, \cdots, X_{rst}

$$ES_A = (r - 1)\sigma^2$$

可知若 H_0 成立, S_A 只反映随机波动, 而若 H_0 不成立, 那它就还反映了 A 的不同水平的效应 α_i . 单从数值上

$$\frac{S_A/(r - 1)}{S_E/(n - r)} \approx 1$$

该比值服从自由度 $n_1 = r - 1, n_2 = (n - r)$ 的 F 分布, 即

$$F = \frac{S_A/(r - 1)}{S_E/(n - r)} \sim F(r - 1, n - r)$$

以上对

$$S_A, S_E$$

的分析相当于对组间、组内方差的分析. ■

若白实验数据算得结果有 $F > F_\alpha(r - 1, n - r)$, 则拒绝 H_0 , 即认为因素 A 对试验结果有显著影响; 若 $F < F_\alpha(r - 1, n - r)$, 则接受 H_0 , 即认为因素 A 对试验结果没有显著影响.

$F > F_{0.01}(r - 1, n - r)$, 则称因素 A 的影响高度显著.

如果取 $\alpha = 0.01$ 时拒绝 H_0 如果取 $\alpha = 0.05$ 时拒绝 H_0 , 但取 $\alpha = 0.01$ 时不拒绝 H_0 , 即

$$F_{0.01}(r - 1, n - r) \geq F > F_{0.05}(r - 1, n - r)$$

则称因素 A 的影响显著.

17.7.2 双因素方差分析方法

如果要考虑两个因素对指标的影响, 就要采用双因素方差分析. 它的基本思想是: 对每个因素各取几个水平然后对各因素不同水平的每个组合作一次或若干次试验对所得数据进行方差分析. 对双因素方差分析可分为无重复和等重复试验两种情况, 无重复试验只需检验两因素是否分别对指标有显著影响; 而对等重复试验还要进步检验两因素是否对指标有显著的交互影响.

设 A 取 s 个水平 A_1, A_2, \cdots, A_s , B 取 r 个水平 B_1, B_2, \cdots, B_r , 在水平组合 (B_i, A_j) 下总体 X_{ij} 服从正态分布 $N(\mu_{ij}, \sigma^2), i = 1, \cdots, r, j = 1, \cdots, s$. 又设在水平组合 (B_i, A_j) 下作了 t 个试验, 所得结果记作 X_{ijk}, X_{ijk} 服从 $N(\mu_{ij}, \sigma^2), i = 1, \cdots, r, j = 1, \cdots, s, k = 1, \cdots, t$, 且相互独立

将 X_{ijk} 分解为

$$X_{ijk} = \mu_{ij} + \varepsilon_{ijk}, \quad i = 1, \cdots, r, \quad j = 1, \cdots, s, \\ k = 1, \cdots, t,$$

其中 $\varepsilon_{ijk} \sim N(0, \sigma^2)$, 且相互独立. 记

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{1}{rs} \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s \mu_{ij}, \\ \mu_{\cdot j} &= \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \mu_{ij}, \\ \alpha_j &= \mu_{\cdot j} - \mu, & \gamma_{ij} &= (\mu_{ij} - \mu) - \alpha_i - \beta_j \\ \mu_{i \cdot} &= \frac{1}{s} \sum_{j=1}^s \mu_{ij}, \\ \beta_i &= \mu_{i \cdot} - \mu\end{aligned}$$

μ 是总均值, α_j 是水平 A_j 对指标的效应, β_i 是水平 B_i 对指标的效应, γ_{ij} 是水平 B_i 与 A_j 对指标的交互效应.

模型为

$$\begin{cases} X_{ijk} = \mu + \alpha_j + \beta_i + \gamma_{ij} + \varepsilon_{ijk} \\ \sum_{j=1}^s \alpha_j = 0, \sum_{i=1}^r \beta_i = 0, \sum_{i=1}^r \gamma_{ij} = \sum_{j=1}^s \gamma_{ij} = 0 \\ \varepsilon_{ijk} \sim N(0, \sigma^2), i = 1, \dots, r, j = 1, \dots, s, k = 1, \dots, t \end{cases}$$

原假设为

$$\begin{aligned}H_{01} &: \alpha_j = 0 (j = 1, \dots, s) \\ H_{02} &: \beta_i = 0 (i = 1, \dots, r) \\ H_{03} &: \gamma_{ij} = 0 (i = 1, \dots, r; j = 1, \dots, s).\end{aligned}$$

17.7.3 无交互影响的双因素方差分析

没有交互影响, 每组试验就不必重复, 即可令 $t = 1$, 过程大为简化.

$$\mu_{ij} = \mu + \alpha_j + \beta_i, \quad i = 1, \dots, r, \quad j = 1, \dots, s$$

$$\begin{cases} X_{ij} = \mu + \alpha_j + \beta_i + \varepsilon_{ij} \\ \sum_{j=1}^s \alpha_j = 0, \sum_{i=1}^r \beta_i = 0 \\ \varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2), i = 1, \dots, r, j = 1, \dots, s \end{cases}$$

采用与单因素方差分析模型类似的方法导出检验统计量. 记

$$\begin{aligned}\bar{X} &= \frac{1}{rs} \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s X_{ij}, \bar{X}_{i \cdot} = \frac{1}{s} \sum_{j=1}^s X_{ij}, \bar{X}_{\cdot j} = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r X_{ij} \\ S_T &= \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s (X_{ij} - \bar{X})^2\end{aligned}$$

其中 S_T 为全部试验数据的总变差, 称为总平方和

对其进行分解

$$\begin{aligned}S_T &= \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s (X_{ij} - \bar{X})^2 \\ &= \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s (X_{ij} - \bar{X}_{i \cdot} - \bar{X}_{\cdot j} + \bar{X})^2 + s \sum_{i=1}^r (\bar{X}_{i \cdot} - \bar{X})^2 + r \sum_{j=1}^s (\bar{X}_{\cdot j} - \bar{X})^2 \\ &= S_E + S_A + S_B\end{aligned}$$

可以验证, 在上述平方和分解中交叉项均为 0, 其中

$$\begin{aligned}S_E &= \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s (X_{ij} - \bar{X}_{i \cdot} - \bar{X}_{\cdot j} + \bar{X})^2 \\ S_A &= r \sum_{j=1}^s (\bar{X}_{\cdot j} - \bar{X})^2, \\ S_B &= s \sum_{i=1}^r (\bar{X}_{i \cdot} - \bar{X})^2\end{aligned}$$

方差来源	离差平方和	自由度	均方	F 值
因素 A	S_A	$s - 1$	$\frac{S_A}{s-1}$	$F_A = \frac{S_A/(s-1)}{S_E/[(r-1)(s-1)]}$
因素 B	S_B	$r - 1$	$\frac{S_B}{r-1}$	$F_B = \frac{S_B/(r-1)}{S_E/[(r-1)(s-1)]}$
误差	S_E	$(r-1)(s-1)$	$\frac{S_E}{(r-1)(s-1)}$	
总和	S_T	$rs - 1$		

我们先来看看 S_A 的统计意义. 因为 $\bar{X}_{\cdot j}$ 是水平 A_j 下所有观测值的平均, 所以 $\sum_{j=1}^s (\bar{X}_{\cdot j} - \bar{X})^2$ 反映了 $\bar{X}_{\cdot 1}, \bar{X}_{\cdot 2}, \dots, \bar{X}_{\cdot s}$ 差异的程度. 这种差异是由于因素 A 的不同水平所引起的, 因此 S_A 称为因素 A 的平方和. 类似地, S_B 称为因素 B 的平方和. 至于 S_E 的意义不甚明显, 我们可以这样来理解:

因为 $S_E = S_T - S_A - S_B$, 在我们所考虑的两因素问题中, 除了因素 A 和 B 之外, 剩余的再没有其它系统性因素的影响, 因此从总平方和中减去 S_A 和 S_B 之后, 剩下的数据变差只能归入随机误差, 故 S_E 反映了试验的随机误差.

有了总平方和的分解式 $S_T = S_E + S_A + S_B$, 以及各个验统计量应取为 S_A 与 S_E 的比.

$$F_A = \frac{\frac{S_A}{s-1}}{\frac{S_E}{(r-1)(s-1)}} \sim F(s-1, (r-1)(s-1))$$

$$F_B = \frac{\frac{S_B}{r-1}}{\frac{S_E}{(r-1)(s-1)}} \sim F(r-1, (r-1)(s-1))$$

检验规则为

$F_A < F_{\alpha}(s-1, (r-1)(s-1))$ 时接受 H_{01} , 否则拒绝 H_{01} ; $F_B < F_{\alpha}(r-1, (r-1)(s-1))$ 时接受 H_{02} , 否则拒绝 H_{02} ;

17.7.4 关于交互效应的双因素方差分析

与前面方法类似, 记

$$\bar{X} = \frac{1}{rst} \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s \sum_{k=1}^t X_{ijk}, \quad \bar{X}_{ij\cdot} = \frac{1}{t} \sum_{k=1}^t X_{ijk},$$

$$\bar{X}_{i\cdot\cdot} = \frac{1}{st} \sum_{j=1}^s \sum_{k=1}^t X_{ijk}, \quad \bar{X}_{\cdot j\cdot} = \frac{1}{rt} \sum_{i=1}^r \sum_{k=1}^t X_{ijk}$$

将全体数据对 \bar{X} 的偏差平方和

$$S_T = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s \sum_{k=1}^t (X_{ijk} - \bar{X})^2$$

进行分解, 可待

$$S_T = S_E + S_A + S_B + S_{AB},$$

其中

$$S_E = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s \sum_{k=1}^t (X_{ijk} - \bar{X}_{ij\cdot})^2$$

$$S_A = rt \sum_{j=1}^s (\bar{X}_{\cdot j\cdot} - \bar{X})^2$$

$$S_B = st \sum_{i=1}^r (\bar{X}_{i\cdot\cdot} - \bar{X})^2$$

$$S_{AB} = t \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s (\bar{X}_{ij\cdot} - \bar{X}_{i\cdot\cdot} - \bar{X}_{\cdot j\cdot} + \bar{X})^2$$

称 S_E 为误差平方和, S_A 为因素 A 的平方和 (或列间平方和), S_B 为因素 B 的平方和 (或行间平方和), S_{AB} 为交互作用的平方和 (或格间平方和).

$$F_{AB} = \frac{\frac{S_{AB}}{(r-1)(s-1)}}{\frac{S_E}{rs(t-1)}} \sim F((r-1)(s-1), rs(t-1))$$

据此统计量, 可以检验 H_{03} .

水平 α , 检验的结论为: 为交互作用显著. 将试验数据按上述分析、计算的结果排成表 7.20 的形式, 称为双因素方差分析表.

方差来源	离差平方和	自由度	均方	F 值
因素 A	S_A	$s-1$	$\frac{S_A}{s-1}$	$F_A = \frac{S_A/(s-1)}{S_E/[rs(t-1)]}$
因素 B	S_B	$r-1$	$\frac{S_B}{r-1}$	$F_B = \frac{S_B/(r-1)}{S_E/[rs(t-1)]}$
交互效应	S_{AB}	$(r-1)(s-1)$	$\frac{S_{AB}}{(r-1)(s-1)}$	$F_{AB} = \frac{S_{AB}/[(r-1)(s-1)]}{S_E/[rs(t-1)]}$
误差	S_E	$rs(t-1)$		
总和	$\frac{S_E}{rs(t-1)}, S_T$	$rst-1$		

17.8 多元线性回归

多元线性回归分析的模型为

$$\begin{cases} y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_m x_m + \varepsilon \\ \varepsilon \sim N(0, \sigma^2) \end{cases}$$

式中 $\beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_m, \sigma^2$ 都是与 x_1, x_2, \cdots, x_m 无关的未知参数其中 $\beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_m$ 称为回归系数.

现得到 n 个独立观测数据 $[b_i, a_{i1}, \cdots, a_{im}]$, 其中 b_i 为 y 的观察值, a_{i1}, \cdots, a_{im} 分别为 x_1, x_2, \cdots, x_m 的观察值, $i = 1, \cdots, n, n > m$, 可得

$$\begin{cases} b_i = \beta_0 + \beta_1 a_{i1} + \cdots + \beta_m a_{im} + \varepsilon_i \\ \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2), \quad i = 1, \cdots, n. \end{cases}$$

$$\text{记 } X = \begin{bmatrix} 1 & a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & a_{n1} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}, \quad 7.21 \quad \varepsilon = [\varepsilon_1, \cdots, \varepsilon_n]^T, \quad \beta = [\beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_m]^T$$

(7.19) 表示为

$$\begin{cases} Y = X\beta + \varepsilon \\ \varepsilon \sim N(0, \sigma^2 E_n) \end{cases}$$

17.8.1 回归模型的假设检验

因变量 y 与自变量 x_1, \cdots, x_m 之间是否存在如模型式 (7.19) 所示的线性关系是雪 巾雨 检验的, 显然, 如果所有的 $|\hat{\beta}_j|$ ($j = 1, \cdots, m$) 都很小, y 与 x_1, \cdots, x_m 的线性关

$$H_0: \beta_j = 0, \quad j = 1, \cdots, m$$

$$F = \frac{U/m}{Q/(n-m-1)} \sim F(m, n-m-1),$$

在显著性水平 α 下, 对于上 α 分位数 $F_{\alpha}(m, n-m-1)$, 注: 接受 H_0 只说明 y 与 x_1, \cdots, x_m 的线性关系不明显, 可能存在非线性关系, 如平方关系. 还有一些衡量 y 与 x_1, \cdots, x_m 相关程度的指标, 如用回归平方和在总平方和中的比值定义复判定系数

$$R^2 = \frac{U}{SST}$$

$R = \sqrt{R^2}$ 称为复相关系数, R 越大, y 与 x_1, \dots, x_m 相关关系越密切, 通常, R 大于 0.8 (或 0.9) 才认为相关关系成立.

17.8.2 回归系数的假设检验和区间估计

其中若干个等于零. 所以应进一步作如下 $m+1$ 个检验

$$H_0^{(j)}: \beta_j = 0, \quad j = 0, 1, \dots, m$$

由式 (7.30), $\hat{\beta}_j \sim N(\beta_j, \sigma^2 c_{jj})$, c_{jj} 是 $(X^T X)^{-1}$ 中的第 (j, j) 元素, 用 s^2 代替 σ^2
 $H_0^{(j)}$ 成立时

$$t_j = \frac{\hat{\beta}_j / \sqrt{c_{jj}}}{\sqrt{Q/(n-m-1)}} \sim t(n-m-1)$$

对给定的 α , 若 $|t_j| < t_{\frac{\alpha}{2}}(n-m-1)$, 接受 $H_0^{(j)}$; 否则拒绝. 式也可用于对 β_j 作区间估计, 在置信水平 $1-\alpha$ 下, β_j 的置信区间为

$$\left[\hat{\beta}_j - t_{\frac{\alpha}{2}}(n-m-1)s\sqrt{c_{jj}}, \hat{\beta}_j + t_{\frac{\alpha}{2}}(n-m-1)s\sqrt{c_{jj}} \right]$$

式中, $s = \sqrt{\frac{Q}{n-m-1}}$

17.8.3 利用回归模型进行预测

$[x_1, \dots, x_m]$ 的取值 $[a_{01}, \dots, a_{0m}]$ 预测 y 的取值 b_0 , b_0 是随机的, 显然其预测值 (点估计) 为

$$\hat{b}_0 = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 a_{01} + \dots + \hat{\beta}_m a_{0m}$$

给定 α 可以算出 b_0 的预测区间 (区间估计), 结果较复杂简化为

$$\left[\hat{b}_0 - z_{\frac{\alpha}{2}} s, \hat{b}_0 + z_{\frac{\alpha}{2}} s \right]$$

式中, z_{α} 是标准正态分布的上 $\frac{\alpha}{2}$ 分位数. 对 b_0 的区间估计方法可用于给出已知数据残差 $e_i = b_i - \hat{b}_i (i = 1, \dots, n)$ 的置信区间, e_i 服从均值为零的正态分布, 所以若某个 e_i 的置信区间不包含零点, 则认为这个数据是异常的, 可予以剔除.

17.9 逐步回归

实际问题中影响因变量的因素可能很多, 有些可能关联性强一些, 而有些可能影响弱一些. 人们总希望从中挑选出对因变量影响显著的自变量来建立回归模型, 逐步回归是一种从众多变量中有效地选择重要变量的方法. 以下只讨论多元线性回归模型的情形.

简单地说, 就是所有对因变量影响显著的变量都应选入模型, 而影响不显著的变量都不应选入模型; 从便于应用的角度, 变量的选择应使模型中变量个数尽可能少.

基本思想: 记 $S = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ 为候选的自变量集合 $S_1 \subset S$ 是从集合 S 中选出的一个子集. 设 S_1 中有 l 个自变量 ($1 \leq l \leq m$), 由 S_1 和因变量 y 构造的回归模型的残差平方和为 Q , 则模型的残差方差 $s^2 = Q/(n-l-1)$, n 为数据样本容量. 所选子集 S_1 应使 s^2 尽量小. 通常若模型中包含有对 y 影响很小的变量, 那么 Q 不会由于包含这些变量在内减少多少, 却因 l 的增加可能使 s^2 反而增大, 同时这些对 y 影响不显著的变量也会影响模型的稳定性, 因此可将残差方差 s^2 最小作为衡量变量选择的一个数量标准.

可以从另外一个角度考虑自变量 x_j 的显著性. y 对自变量 x_1, x_2, \dots, x_m 线性回归的残差平方和为 Q , 回归平方和为 U , 在剔除掉 x_j 后, 用 y 对其余的 $m-1$ 个自变量做回归, 记所得的残差平方和为 $Q_{(j)}$, 回归平方和为 $U_{(j)}$, 则自变量 x_j 对回归的贡献为

$$\Delta U_{(j)} = U - U_{(j)}$$

称为 x_j 的偏回归平方和. 由此构造偏 F 统计量

$$F_j = \frac{\Delta U_{(j)}/1}{Q/(n-m-1)}$$

F_i 服从自由度为 $(1, n-m-1)$ 的 F 分布, 此 F 检验与式方程中剔除变元时, 回归平方和减少, 残差平方和增加. 根据平方和分解式可知

$$\Delta U_{(j)} = \Delta Q_{(j)} = Q_{(j)} - Q$$

残差平方和减少, 两者的增减量同样相等.

当自变量的个数较多时, 求出所有可能的回归方程是非常困难的. 为此, 人们提出了一些较为简便、实用、快速的选择自变量的方法. 这些方法各有优缺点, 至今还没有绝对最优的方法, 目前常用的方法有前进法、后退法、逐步回归法, 而逐步回归法最受推崇.

17.9.1 前进法

前进法的思想是变量由少到多, 每次增加一个, 直至没有可引入的变量为止. 具体做法是首先将全部 m 个自变量分别对因变量 y 建立一元线性回归方程, 利用归系数的 F 检验值, 记为 $\{F_1^1, F_2^1, \dots, F_m^1\}$, 选其最大者记为

$$F_j^1 = \max \{F_1^1, F_2^1, \dots, F_m^1\}$$

给定显著性水平 α , 若 $F_j^1 \geq F_\alpha(1, n-2)$, 则首先将 x_j 引入回归方程, 为了方便, 不妨设 x_j 就是 x_1 .

接下来因变量 y 分别与 $(x_1, x_2), (x_1, x_3), \dots, (x_1, x_m)$ 建立二元线性回归方程, 对这 $m-1$ 个回归方程中 x_2, x_3, \dots, x_m 的回归系数进行 F 检验, 利用 (7.43) 式计算 F 值, 记为 $\{F_2^2, F_3^2, \dots, F_m^2\}$, 选其最大者记为

$$F_j^2 = \max \{F_2^2, F_3^2, \dots, F_m^2\}$$

若 $F_j^2 \geq F_\alpha(1, n-3)$, 则接着将 x_j 引入回归方程.

依上述方法接着做下去, 直至所有未被引入方程的变量的个数. 这时, 得到的回归方程就是确定的方程. 有关, 在用软件计算时, 我们实际是使用显著性 P 值做检验.

17.9.2 后退法

后退法易于掌握, 我们使用 t 统计量做检验, 与 F 统计量做检验是等价的. 具体步骤如下:

Algorithm 16: 后退法

- 1 以全部自变量作为解释变量拟合方程
- 2 每一步都在未通过 t 检验的自变量中选择一个 t_j 值最小的变量 x_j , 将它从模型中删除
- 3 直至所有的自变量均通过 t 检验, 则算法终止

18. Bootstrap

设总体的分布 F 未知, 但已知有一个容量为 n 的来自分布 F 的数据样本, 自这一样本按放回抽样的方法抽取一个容量为 n 的样本, 这种样本称为 bootstrap 样本或称为自助样本. 相继地, 独立地自原始样本中取很多个 Bootstrap 样本, 利用这些样本对总体 F 进行统计推断, 这种方法称为非参数 Bootstrap 方法, 又称自助法. 这一方法可以用于当人们对总体知之甚少的情况, 它是近代统计中的一种用于数据处理的重要实用方法. 这种方法的实现需要在计算机上作大量的计算, 随着计算机威力的增长, 它已成为一种流行的方法.

18.1 估计量的标准误差的 Bootstrap 估计

在估计总体未知参数 θ 时, 人们不但要给出 θ 的估计 $\hat{\theta}$, 还需指出这一估计 $\hat{\theta}$ 的精度. 通常我们用估计量 $\hat{\theta}$ 的标准差 $\sqrt{D(\hat{\theta})}$ 来度量估计的精度. 估计量 $\hat{\theta}$ 的标准差 $\sigma_{\hat{\theta}} = \sqrt{D(\hat{\theta})}$ 也称为估计量 $\hat{\theta}$ 的标准误差.

设 X_1, X_2, \dots, X_n 是来自 $\mathcal{F}(x)$ 为分布函数的总体的样本, θ 是我们感兴趣的未知参数, 用 $\hat{\theta} = \hat{\theta}(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 作为 θ 的估计量, 在应用中 $\hat{\theta}$ 的抽样分布常是很难处理的, 这样, $\sqrt{D(\hat{\theta})}$ 常没有一个简单的表达式, 不过我们可以用计算机模拟的方法来求得 $\sqrt{D(\hat{\theta})}$ 的估计.

为此, 自 F 产生很多容量为 n 的样本 (例如 B 个), 对于每一个样本计算 $\hat{\theta}$ 的值, 得 $\hat{\theta}_1, \hat{\theta}_2, \dots, \hat{\theta}_B$, 则 $\sqrt{D(\hat{\theta})}$ 可以用

$$\hat{\sigma}_{\hat{\theta}} = \sqrt{\frac{1}{B-1} \sum_{i=1}^B (\hat{\theta}_i - \bar{\theta})^2}$$

来估计, 其中 $\bar{\theta} = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B \hat{\theta}_i$.

然而 F 常常是未知的, 这样就无法产生模拟样本, 需要另外的方法.

设分布 F 未知, x_1, x_2, \dots, x_n 是来自 F 的样本值, F_n 是相应的经验分布函数. 当 n 很大时, F_n 接近 F . 1 用 F_n 代替上一段中的 F , 在 F_n 中抽样. 在 F_n 中抽样, 就是在原始样本 x_1, x_2, \dots, x_n 中每次随机地取一个个体作放回抽样. 如此得到一个容量为 n 的样本

$x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$, 这就是第一段中所说的 Bootstrap 样本. 用 Bootstrap 样本按上一段中计算估计 $\hat{\theta}(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 那样求出 θ 的估计 $\hat{\theta}^* = \hat{\theta}(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ 估计 $\hat{\theta}^*$ 称为 θ 的 Bootstrap 估计.

相应地、独立地抽得 B 个 Bootstrap 样本, 以这些样本分别求出 θ 的相应的 Bootstrap 估计如下:

Bootstrap 样本 1 $x_1^{*1}, x_2^{*1}, \dots, x_n^{*1}$, Bootstrap 估计 $\hat{\theta}_1^*$;

Bootstrap 样本 2 $x_1^{*2}, x_2^{*2}, \dots, x_n^{*2}$, Bootstrap 估计 $\hat{\theta}_2^*$;

Bootstrap 样本 B $x_1^{*B}, x_2^{*B}, \dots, x_n^{*B}$, Bootstrap 估计 $\hat{\theta}_B^*$.

则 $\hat{\theta}$ 的标准误差 $\sqrt{D(\hat{\theta})}$, 就以

$$\hat{\sigma}_{\hat{\theta}} = \sqrt{\frac{1}{B-1} \sum_{i=1}^B (\hat{\theta}_i^* - \bar{\theta}^*)^2}$$

来估计, 其中 $\bar{\theta}^* = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B \hat{\theta}_i^*$, 上式就是 $\sqrt{D(\hat{\theta})}$ 的 Bootstrap 估计.

Algorithm 17: 求 $\sqrt{D(\hat{\theta})}$ 的 Bootstrap 估计

- 1 自原始数据样本 x_1, x_2, \dots, x_n 按放回抽样的方法, 抽得容量为 n 的样本 $x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*$ (称为 Bootstrap 样本)
- 2 相继地、独立地求出 B ($B \geq 1000$) 个容量为 n 的 Bootstrap 样本, $x_1^{*i}, x_2^{*i}, \dots, x_n^{*i}, i = 1, 2, \dots, B$. 对于第 i 个 Bootstrap 样本, 计算 $\hat{\theta}_i^* = \hat{\theta}(x_1^{*i}, x_2^{*i}, \dots, x_n^{*i}), i = 1, 2, \dots, B$ ($\hat{\theta}_i^*$ 称为 θ 的第 i 个 Bootstrap 估计)
- 3 计算 $\hat{\sigma}_{\hat{\theta}} = \sqrt{\frac{1}{B-1} \sum_{i=1}^B (\hat{\theta}_i^* - \bar{\theta}^*)^2}$, 其中 $\bar{\theta}^* = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B \hat{\theta}_i^*$

18.2 估计量的均方误差的 Bootstrap 估计

设 $X = (X_1, X_2, \dots, X_n)$ 是来自总体 F 的样本, F 未知, $R = R(X)$ 是感兴趣的随机变量, 它依赖于样本 X . 假设我们去估计 R 的分布的某些特征. 例如 R 的数学期望 $E_F(R)$, 就可以按照上面所说的三个步骤 1°, 2° 3° 进行, 只是在 2° 中对于第 i 个 Bootstrap 样本 $x_i^* = (x_1^{*i}, x_2^{*i}, \dots, x_n^{*i})$, 计算 $R_i^* = R^*(x_i^*)$ 代替计算 θ_i^* , 且在 3° 中计算感兴趣的 R 的特征. 例如如果希望估计 $E_F(R)$ 就计算

$$E_*(R^*) = \frac{1}{B} \sum_{i=1}^B R_i^*$$

18.3 Bootstrap 置信区间

设 $X = (X_1, X_2, \dots, X_n)$ 是来自总体 F 容量为 n 的样本 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 是一个已知的样本值. F 中含有未知参数 θ , $\hat{\theta} = \hat{\theta}(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 是 θ 的估计量. 现在来求 θ 的置信水平为 $1 - \alpha$ 的置信区间.

相继地, 独立地从样本 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 中抽出 B 个容量为 n 的 Bootstrap 样本, 对于每个 Bootstrap 样本求出 θ 的 Bootstrap 估计: $\hat{\theta}_1^*, \hat{\theta}_2^*, \dots, \hat{\theta}_B^*$. 将它们自小到大排序, 得

$$\hat{\theta}_{(1)}^* \leq \hat{\theta}_{(2)}^* \leq \dots \leq \hat{\theta}_{(B)}^*$$

取 $R(X) = \hat{\theta}$, 用对应的 $R(X^*) = \hat{\theta}^*$ 的分布作为 $R(X)$ 的分布的近似, 求出 $R(X^*)$ 的分布的近似分位数 $\hat{\theta}_{\alpha/2}^*$ 和 $\hat{\theta}_{1-\alpha/2}^*$ 使

$$P\left\{\hat{\theta}_{\alpha/2}^* < \hat{\theta}^* < \hat{\theta}_{1-\alpha/2}^*\right\} = 1 - \alpha$$

于是近似地有

$$P\left\{\hat{\theta}_{\alpha/2}^* < \theta < \hat{\theta}_{1-\alpha/2}^*\right\} = 1 - \alpha.$$

记 $k_1 = [B \times \frac{\alpha}{2}]$, $k_2 = [B \times (1 - \frac{\alpha}{2})]$, 在上式中以 $\hat{\theta}_{(k_1)}^*$ 和 $\hat{\theta}_{(k_2)}^*$ 分别作为分位数 $\hat{\theta}_{\alpha/2}^*$ 和 $\hat{\theta}_{1-\alpha/2}^*$ 的估计, 得到近似等式

$$P\left\{\hat{\theta}_{(k_1)}^* < \theta < \hat{\theta}_{(k_2)}^*\right\} = 1 - \alpha$$

于是由上式就得到 θ 的置信水平为 $1 - \alpha$ 的近似置信区间 $(\hat{\theta}_{(k_1)}^*, \hat{\theta}_{(k_2)}^*)$, 这一区间称为 θ 的置信水平为 $1 - \alpha$ 的 Bootstrap 置信区间. 这种求置信区间的方法称为分位数法.

18.4 参数 Bootstrap 方法

假设所研究的总体的分布函数 $F(x; \beta)$ 的形式已知, 但其中包含未知参数 β (β 可以是向量). 现在已知有一个来自 $F(x; \beta)$ 的样本

$$X_1, X_2, \dots, X_n$$

利用这一样本求出 β 的最大似然估计 $\hat{\beta}$. 在 $F(x; \beta)$ 中以 $\hat{\beta}$ 代替 β 得到 $F(x; \hat{\beta})$, 接着在 $F(x; \hat{\beta})$ 中产生容量为 n 的样本

$$X_1^*, X_2^*, \dots, X_n^* \sim F(x; \hat{\beta})$$

这种样本可以产生很多个, 例如产生 B ($B \geq 1000$) 个, 就可以利用这些样本对总体进行统计推断, 其做法与非参数 Bootstrap 方法一样. 这种方法称为参数 Bootstrap 方法.



Bibliography

- [1] G Strang. “Introduction to Linear Algebra”. In: 1993 (cited on page 69).



List of Figures

1.1	The translation from q to p	12
4.1	Projection onto a line	28
4.2	Projection onto a line from the perspective of linear algebra.	29
6.1	Row Picture and Column Picture for 6.1	41
6.2	An example of convolution	46
9.1	Four Subspace of Matrix A	57
10.1	An example of rotation	65
10.2	Elementary Reflection	66
10.3	Projection onto the column space of A , A has orthonormal columns	68
10.4	Projection of b into the column space of A , A is any matrix. Sourced from [1] . . .	69
11.1	Projecting onto the column space of A is also projecting onto the column space of Q	76
11.2	Ax^\dagger in the column space goes back to $A^\dagger Ax^\dagger = x^\dagger$ in the row space	76
11.3	Reflection of x	81
11.4	构造的 Householder 矩阵的几何图示	83
11.5	The structure of $H_k H_{k-1} \dots H_1 A$	84
11.6	A 的结构	85

Definition 1.1.1 (Vector)	10
Definition 1.1.2 (n 维向量 a 的第 i 元素)	10
Definition 1.1.3 ($a = b$)	10
Definition 1.1.4 (stacked vector)	10
Definition 1.1.5 (零向量)	10
Definition 1.1.6 (全一向量)	10
Definition 1.1.7 (单位向量)	11
Definition 1.1.8 (稀疏向量)	11
Definition 1.2.1 (向量空间 V)	11
Corollary 1.2.1	11
Corollary 1.2.2	11
Definition 1.2.2 (数域)	11
Example 1.1	11
Example 1.2	11
Example 1.3	11
Definition 1.3.1 (向量加法)	11
Corollary 1.3.1 (向量位移相加)	12
Example 1.4	12
Definition 1.3.2 (标量与向量的乘法)	12
Definition 1.3.3 (线性组合)	12
Example 1.5	12
Definition 1.4.1 (内积)	12
Example 1.6	12
Corollary 1.4.1 (选出第 i 项)	13
Corollary 1.4.2 (向量每一项之和)	13
Corollary 1.4.3 (向量每一项的平方和)	13
Corollary 1.4.4 (向量元素的平均值)	13
Corollary 1.4.5 (Selective sum)	13

Definition 1.4.2 (The sum of block vectors)	13
Example 1.7 (计算同时出现的项目数)	14
Example 1.8 (Weights, features, and score)	14
Example 1.9	14
Theorem 1.5.1 (Cauchy-Schwartz Inequality)	14
Corollary 1.6.1	14
Definition 2.1.1 (Linear Function)	16
Example 2.1	16
Example 2.2	16
Theorem 2.1.1	16
Definition 2.1.2 (内积函数 (inner product function))	17
Corollary 2.1.2	17
Corollary 2.1.3	17
Definition 2.1.3 (仿射函数 (affine function))	17
Theorem 2.1.4	17
Definition 2.2.1 (函数 f 第 i 个分量的一阶偏导数)	17
Definition 2.2.2 (f 在点 z 的梯度)	17
Definition 2.2.3 (Taylor's Approximation)	18
Example 2.3	18
Corollary 2.2.1 (n 阶泰勒多项式)	18
Corollary 2.2.2 (对于高阶余项的公式)	18
Corollary 2.2.3 (麦克劳林 (Maclaurin) 公式)	19
Definition 2.2.4 (一阶泰勒公式)	19
Corollary 2.2.4 (一阶泰勒公式的内积形式)	19
Example 2.4	19
Definition 2.3.1 (Regression Model)	19
Definition 3.1.1 (Vector Norm)	20
Example 3.1 (ℓ_1 -范数 (曼哈顿范数, Manhattan norm))	20
Example 3.2 (ℓ_2 -范数 (欧几里得范数, Euclidean norm))	20
Corollary 3.1.1 (柯西—施瓦茨不等式)	21
Definition 3.1.2 (ℓ_∞ -范数)	21
Definition 3.1.3 (ℓ_p -范数)	21
Theorem 3.1.2 (Minkowski Inequality)	21
Theorem 3.1.3 (Hölder Inequality)	21
Definition 3.2.1 (向量 x 的均方值 (mean-square value))	22
Definition 3.2.2 (n 维向量 x 的均方根 (root-mean-square value, RMS))	22
Theorem 3.3.1 (Chebyshev's Inequality)	22
Theorem 3.3.2 (Chebyshev's Inequality)	22
Corollary 3.3.3 (Chebyshev's Inequality Using RMS)	22
Definition 3.4.1 (Euclidean distance)	22
Definition 3.4.2 (RMS deviation)	22
Theorem 3.4.1 (Triangular Inequality)	22
Definition 3.4.3 (Feature Distance)	23
Definition 3.4.4	23
Definition 3.5.1 (算术平均值)	23
Definition 3.5.2 (De-meanned Vector)	23
Definition 3.5.3 (x 的标准差)	23
Theorem 3.5.1	23

Definition 3.6.1 (两个非零向量 a 和 b 之间的角 (angle))	23
Definition 3.6.2 (球面的距离)	23
Definition 3.6.3 (a 和 b 的相关系数)	24
Example 3.3	24
Problem 4.1	25
Definition 4.1.1 (高阶无穷小记号 o)	25
Corollary 4.1.1	25
Proposition 4.1.2 (优化求解的必要条件)	25
Example 4.1	26
Definition 4.2.1 (凸集)	26
Definition 4.2.2 (凸函数)	26
Example 4.2	26
Example 4.3	26
Example 4.4	27
Theorem 4.2.1 (可微函数 f 是凸函数的充要条件)	27
Theorem 4.2.2	27
Definition 4.3.1 (向量对向量的导数)	27
Example 4.5	28
Problem 4.2	28
Notation 4.1	29
Problem 4.3	29
Definition 5.1.1 (线性相关 (linearly dependent))	31
Corollary 5.1.1	31
Definition 5.1.2 (线性独立 (linearly independent))	31
Corollary 5.1.2	31
Example 5.1	31
Example 5.2	31
Theorem 5.1.3	32
Definition 5.2.1 (基 (basis))	32
Definition 5.2.2 (向量 b 在基底 a_1, \dots, a_n 下的分解)	32
Example 5.3	32
Definition 5.3.1 (Orthogonal Vectors)	32
Definition 5.3.2 (Orthonormal Vectors)	32
Corollary 5.3.1	33
Corollary 5.3.2	33
Definition 5.3.3 (n 维向量的一个标准正交基)	33
Definition 5.3.4 (x 在标准正交基下的标准正交分解)	34
Theorem 5.4.1	34
Corollary 5.4.2	35
Corollary 5.4.3	35
Corollary 5.4.4	35
Corollary 5.4.5	36
Corollary 5.4.6	36
Definition 6.1.1 (矩阵)	38
Notation 6.1	38
Definition 6.1.2 (标量)	38
Definition 6.1.3 (向量)	38

Definition 6.1.4 (行向量, 列向量)	38
Definition 6.1.5 (高形, 宽形和方形矩阵)	38
Definition 6.1.6 (分块矩阵)	38
Definition 6.1.7	39
Definition 6.1.8	39
Definition 6.2.1 (矩阵数乘)	39
Definition 6.2.2 (矩阵加法)	39
Definition 6.2.3 (Transpose)	39
Corollary 6.2.1 (转置的性质)	39
Definition 6.2.4 (共轭转置)	39
Corollary 6.2.2 (共轭转置的性质)	39
Definition 6.2.5 (矩阵乘法)	40
Corollary 6.2.3 (矩阵乘法性质)	40
Definition 6.2.6 (分块矩阵乘法)	40
Definition 6.2.7 (矩阵-向量乘积 Ax)	40
Corollary 6.2.4	40
Example 6.1	40
Definition 6.2.8 (矩阵-向量乘积函数 $f(x) = Ax$)	40
Definition 6.2.9 (Matrix Power)	42
Example 6.2 (Paths in a directed graph)	42
Example 6.3 (Linear dynamical system)	42
Example 6.4	43
Definition 6.3.1 (Zero Matrix)	43
Definition 6.3.2 (单位矩阵)	43
Corollary 6.3.1	43
Definition 6.3.3 (Symmetric Matrices)	44
Definition 6.3.4 (Hermitian Matrices)	44
Definition 6.3.5 (Diagonal Matrices)	44
Definition 6.3.6 (下三角矩阵)	44
Definition 6.3.7 (上三角矩阵)	44
Example 6.5 (Permutation Matrices)	44
Example 6.6	44
Example 6.7	44
Example 6.8 (反转矩阵)	44
Example 6.9 (循环移位矩阵)	45
Example 6.10 (旋转矩阵)	45
Example 6.11 (Reflection Matrices)	45
Definition 6.3.8 (Selector matrices)	45
Definition 6.3.9 (Downsampling)	45
Definition 6.3.10 (关联矩阵)	45
Definition 6.3.11 (一维卷积)	46
Example 6.12	46
Corollary 6.3.2	46
Corollary 6.3.3 (卷积性质)	46
Corollary 6.3.4	47
Example 6.13 (Toeplitz Matrix)	47
Definition 6.3.12 (多项式)	47
Definition 6.3.13 (Vandermonde Matrices)	47
Definition 6.3.14 (Discrete Fourier Transform (DFT))	47

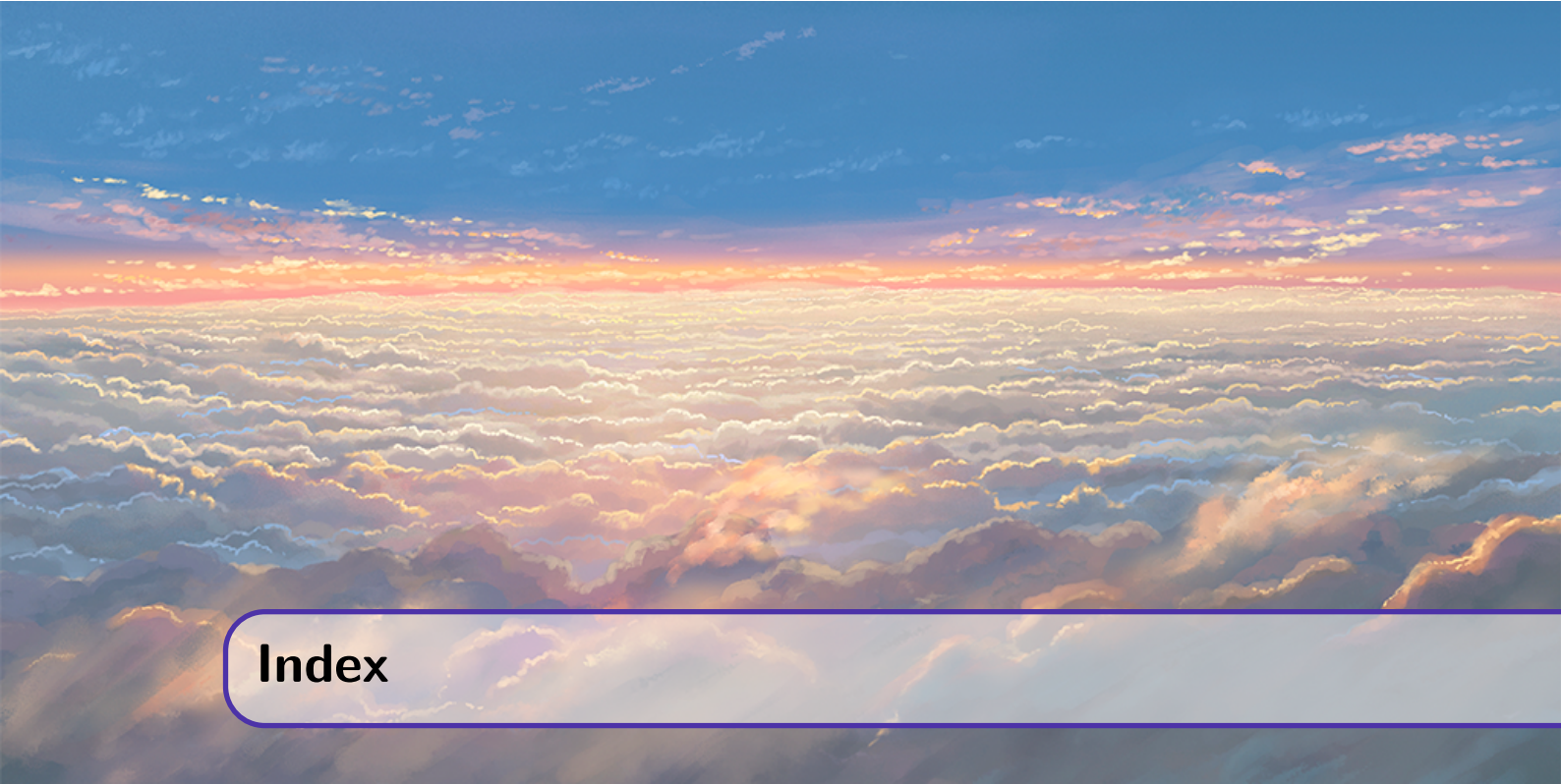
Definition 6.3.15 (Discrete Inverse Fourier Transform)	47
Definition 6.3.16 (半正定矩阵)	48
Definition 6.3.17 (正定矩阵)	48
Definition 6.3.18 (二次型)	48
Example 6.14	48
Corollary 6.3.5	48
Theorem 6.3.6 (正定矩阵对角元素性质)	48
Theorem 6.3.7 (半正定矩阵对角元素性质)	48
Definition 6.4.1 (实矩阵 A 的 Gram 矩阵)	49
Definition 6.4.2 (复矩阵的 A 的 Gram 矩阵)	49
Theorem 6.4.1	49
Theorem 6.4.2	49
Corollary 6.4.3	49
Definition 7.1.1 (Matrix Norm)	50
Example 7.1 (F-范数 (Frobenius norm))	50
Definition 7.1.2 (从属于给定向量范数 $\ x\ _v$ 的矩阵范数)	51
Definition 7.1.3 (向量范数和算子范数相容)	51
Theorem 7.1.1 (算子范数服从乘法范数相容性)	51
Definition 7.1.4 (A 的列范数)	52
Definition 7.1.5 (A 的行范数)	52
Definition 7.1.6 (A 的 2 范数)	52
Example 7.2	52
Example 8.1	53
Notation 8.1	54
Definition 8.3.1 (非奇异矩阵 A 的条件数 (condition number))	54
Corollary 8.3.1 (非奇异矩阵 A 的条件数 (condition number) 性质)	54
Definition 9.1.1 (A 的左逆)	55
Example 9.1	55
Definition 9.1.2 (A 的右逆)	55
Example 9.2	55
Theorem 9.1.1	56
Theorem 9.1.2	56
Theorem 9.1.3	56
Definition 9.1.3	56
Definition 9.2.1	56
Theorem 9.2.1	56
Theorem 9.2.2	57
Theorem 9.2.3	57
Theorem 9.4.1	57
Theorem 9.4.2	58
Corollary 9.4.3	58
Theorem 9.4.4	59
Theorem 9.4.5	59
Corollary 9.4.6	59
Theorem 9.4.7	59
Theorem 9.5.1 (转置 A^T 和共轭转置 A^H)	60
Corollary 9.5.2	60

Corollary 9.6.1	60
Definition 9.7.1 (Pseudo-inverse)	60
Theorem 9.7.1	61
Theorem 9.7.2	61
Corollary 9.7.3	61
Corollary 9.7.4	61
Theorem 10.1.1	62
Theorem 10.1.2	63
Theorem 10.1.3	63
Theorem 10.1.4	63
Theorem 10.1.5	63
Theorem 10.1.6	63
Theorem 10.1.7	63
Theorem 10.1.8	64
Definition 10.2.1 (正交矩阵)	64
Theorem 10.2.1	64
Corollary 10.2.2	64
Corollary 10.2.3	64
Notation 10.1	64
Definition 10.3.1 (置换)	64
Theorem 10.3.1	64
Corollary 10.3.2	64
Corollary 10.3.3	65
Example 10.1	65
Example 10.2 (Rotation Matrices in \mathbb{R}^2)	65
Example 10.3 (Rotation Matrices in \mathbb{R}^3)	65
Definition 10.5.1 (Householder matrix, reflator matrix)	65
Theorem 10.5.1	66
Theorem 10.5.2	66
Corollary 10.5.3	66
Corollary 10.5.4	67
Corollary 10.6.1 (正交矩阵乘积的正交性)	67
Theorem 10.8.1	67
Theorem 10.8.2	67
Theorem 10.8.3	67
Definition 10.9.1 (向量集合张成的空间)	67
Definition 10.9.2 (A 的范围 (列空间))	68
Problem 10.1	68
Theorem 10.9.1	68
Definition 11.0.1 (Lower Triangular Matrices)	70
Definition 11.0.2 (Upper Triangular Matrices)	70
Definition 11.0.3 (单位上三角矩阵, 单位下三角矩阵)	70
Problem 11.1	70
Problem 11.2	70
Theorem 11.1.1	71
Theorem 11.1.2 (高斯消元法)	71
Theorem 11.1.3	71
Definition 11.2.1 (QR Factorization)	72

Corollary 11.2.1	72
Corollary 11.2.2	72
Corollary 11.2.3	72
Corollary 11.2.4	72
Example 11.1	72
Example 11.2	73
Corollary 11.3.1	73
Definition 11.3.1 (线性无关列向量的矩阵 A 的伪逆)	74
Theorem 11.3.2	74
Corollary 11.3.3	74
Corollary 11.3.4	74
Theorem 11.3.5	75
Theorem 11.4.1	75
Corollary 11.5.1	77
Corollary 11.5.2	77
Corollary 11.5.3	77
Theorem 11.5.4	77
Example 11.3	78
Example 11.4	80
Theorem 11.7.1	81
Theorem 11.7.2	82
Definition 11.7.1	82
Theorem 11.7.3	82
Definition 11.7.2 (Constructed Householder Matrix)	82
Theorem 11.7.4	82
Theorem 11.7.5	85
Problem 11.3	86
Definition 11.8.1 (v_1, \dots, v_n 的完整表示)	87
Theorem 11.8.1	87
Definition 11.8.2	87
Definition 12.1.1 (Complex Numbers)	90
Definition 12.1.2 (Complex Number in Polar Coordinates)	90
Theorem 12.1.1 (Euler's Formular)	90
Corollary 12.1.2	90
Definition 12.1.3 (正弦函数)	90
Definition 12.1.4 (三角级数)	91
Definition 12.1.5 (三角函数系)	91
Definition 12.1.6 (复数域的 Gram 矩阵)	91
Definition 12.1.7 (酉矩阵)	91
Definition 12.1.8 (酉矩阵的逆)	92
Definition 12.2.1 (傅里叶级数)	92
Theorem 12.2.1 (收敛定理, 狄利克雷 (Dirichlet) 充分条件)	93
Corollary 12.2.2	93
Definition 12.2.2 (正弦级数)	93
Definition 12.2.3 (余弦级数)	93
Theorem 12.2.3	94
Definition 12.2.4 (傅里叶级数的复数形式)	94
Definition 12.3.1 (The Fourier transform of a continuous function $f(t)$ of a continuous variable t)	95

Definition 12.3.2 (inverse Fourier transform)	95
Definition 12.4.1 (Discrete Fourier Transform)	95
Definition 12.4.2 (inverse discrete Fourier transform (IDFT))	96
Definition 12.4.3 (离散傅里叶变换矩阵 W)	96
Corollary 12.4.1	96
Corollary 12.4.2	96
Corollary 12.4.3	96
Corollary 12.4.4	96
Definition 12.4.4 (离散傅里叶反变换)	96
Theorem 14.4.1 (泊松定理)	101
Theorem 14.8.1 (切比雪夫不等式)	102
Corollary 14.8.2	103
Theorem 14.8.3	103
Theorem 15.1.1 (辛钦大数定律)	104
Corollary 15.1.2	104
Theorem 15.2.1 (伯努利大数定律)	104
Theorem 15.3.1 (Lyapunov 中心极限定理)	105
Theorem 15.3.2	105
Theorem 15.3.3 (De Moivre-Laplace 定理)	105
Definition 16.2.1 (样本平均值)	106
Definition 16.2.2 (样本方差)	106
Definition 16.2.3 (样本标准差)	106
Definition 16.2.4 (样本 k 阶原点矩)	106
Definition 16.2.5 (样本 k 阶中心矩)	106
Definition 16.2.6 (X 和 Y 的 $k+p$ 阶混合原点矩)	107
Definition 16.2.7 (X 和 Y 的 $k+l$ 阶混合中心矩)	107
Definition 16.3.1 (卡方分布)	107
Corollary 16.3.1	107
Corollary 16.3.2 (χ^2 分布的可加性)	107
Corollary 16.3.3 (χ^2 分布的数学期望和方差)	107
Corollary 16.3.4 (卡方分布中心极限定理)	108
Corollary 16.3.5	108
Definition 16.3.2 (卡方分布的上分位点)	108
Definition 16.4.1 (自由度为 t 的 t 分布)	108
Corollary 16.4.1 (t 分布数学期望和方差)	108
Corollary 16.4.2 (t 分布的概率密度函数)	108
Corollary 16.4.3	109
Corollary 16.4.4 (与 F 分布的关系)	109
Definition 16.4.2 (t 分布的上分位点)	109
Definition 16.5.1 (F 分布)	109
Corollary 16.5.1 (F 分布数学期望)	109
Corollary 16.5.2 ($F(n_1, n_2), F(n_2, n_1)$ 的关系)	109
Corollary 16.5.3 (与 t 分布的关系)	110
Corollary 16.5.4 (F 分布上分位点的性质)	110
Definition 16.6.1 (正态总体的样本均值的数学期望、方差和样本方差的数学期望)	110
Corollary 16.6.1 (矩估计法原理)	110
Theorem 16.6.2 (样本均值的分布)	110

Corollary 16.6.3	111
Theorem 16.6.4 (样本方差的分布)	111
Theorem 16.6.5 (样本均值和样本方差的关系)	111
Theorem 16.6.6 (两总体样本均值差、样本方差比的分布)	111
 Theorem 17.5.1 (Kolmogorov 定理)	 115
Definition 17.7.1	117



Index

H

homogeneous.....57

O

over-determined.....57

S

square.....57

U

under-determined 57

上三角 (Upper Triangular) 矩阵 70

下三角 (Lower Triangular) 矩阵 70

从属范数.....51

算子范数.....51