假如使用齐次坐标表示直线的话,则两条二维直线得交点可以使用它们之间得叉乘乘积来表示,即: $\tilde{x} = \tilde{l_1} \times \tilde{l_2}$ 。

问题 1: (最小平方交点)

一、问题描述

如果已知多条直线且希望找到与每条直线距离的平方和最小的点x,

$$D = \sum_{i} \left(\tilde{x} \cdot \tilde{l_i} \right)^2$$

计算D

二、基本思路

首先假设在一个二维空间上, 可知直线的表达式为

$$l: ax + by + c = 0$$

则空间内一点 (x_0, y_0) 到直线的最短距离为

$$d = \frac{|ax_0 + by_0 + c|}{\sqrt{a^2 + b^2}}$$

所以,点 (x_0,y_0) 到平面上多条直线的距离的平方和组成了一个关于x,y的二元二次函数f(x,y)。根据二元二次函数求极值的数学原理,问题即为所求,进而可以将图形空间推广到更多维度上。问题即为所求。

三、问题求解

解:假设在一个二维空间上,已知有 n 条直线

$$l_1$$
: $a_1x + b_1y + c_1 = 0$
 l_2 : $a_2x + b_2y + c_2 = 0$
.....

$$l_n$$
: $a_n x + b_n y + c_n = 0$

则空间内一点(x,y)到各条直线的距离的平方为

$$d_1^2 = \left(\frac{|a_1x + b_1y + c_1|}{\sqrt{a_1^2 + b_1^2}}\right)^2 = \frac{a_1^2x^2 + b_1^2y^2 + 2a_1b_1xy + 2a_1c_1x + 2b_1c_1y + c_1^2}{a_1^2 + b_1^2}$$

$$d_2^2 = \left(\frac{|a_2x + b_2y + c_2|}{\sqrt{a_2^2 + b_2^2}}\right)^2 = \frac{a_2^2x^2 + b_2^2y^2 + 2a_2b_2xy + 2a_2c_2x + 2b_2c_2y + c_2^2}{a_2^2 + b_2^2}$$

.....

$$d_n^2 = \left(\frac{|a_n x + b_n y + c_n|}{\sqrt{a_n^2 + b_n^2}}\right)^2 = \frac{a_n^2 x^2 + b_n^2 y^2 + 2a_n b_n xy + 2a_n c_n x + 2b_n c_n y + c_n^2}{a_n^2 + b_n^2}$$

因此, 设 $D = f(x,y) = d_1^2 + d_2^2 + \dots + d_n^2$, 得到如下公式

$$f(x,y) = \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{a_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right) x^2 + \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{b_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right) y^2 + \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{2a_ib_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) xy + \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{2a_ic_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) xy + \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{2b_ic_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) y + \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{c_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right) xy + \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{2b_ic_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) xy + \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{c_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right) xy + \left$$

之后将f(x,y)分别对 x 和 y 求导得

$$f_x(x,y) = \left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right) x + \left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_ib_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) y + \left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_ic_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) x$$

$$f_y(x,y) = \left(\sum_{i=1}^n \frac{2b_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right) y + \left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_ib_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) x + \left(\sum_{i=1}^n \frac{2b_ic_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) x$$

令

$$A = f_{xx}(x, y) = \sum_{i=1}^{n} \frac{2a_i^2}{a_i^2 + b_i^2}$$

$$B = f_{xy}(x, y) = \sum_{i=1}^{n} \frac{2a_ib_i}{a_i^2 + b_i^2}$$

$$C = f_{yy}(x, y) = \sum_{i=1}^{n} \frac{2b_i^2}{a_i^2 + b_i^2}$$

因为易验证 $AC - B^2 > 0$,且A > 0,所以当 $f_x(x,y) = f_y(x,y) = 0$ 时,原函数取得极小值。

因此令 $f_y(x,y)=0$,求得y,代入 $f_x(x,y)=0$;令 $f_x(x,y)=0$,求得x,代入 $f_y(x,y)=0$ 即可求得使f(x,y)取得极小值的点 (x_0,y_0) 。所求 x_0 , y_0 如下:

$$x_0 = \frac{\left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_ib_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) \left(\sum_{i=1}^n \frac{2b_ic_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) - \left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_ic_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) \left(\sum_{i=1}^n \frac{2b_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right)}{\left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right) \left(\sum_{i=1}^n \frac{2b_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right) - \left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_ib_i}{a_i^2 + b_i^2}\right)^2}$$

$$y_0 = \frac{\left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_ib_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) \left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_ic_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) - \left(\sum_{i=1}^n \frac{2b_ic_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) \left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right)}{\left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right) \left(\sum_{i=1}^n \frac{2b_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right) - \left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_ib_i}{a_i^2 + b_i^2}\right)^2}$$

于是

$$D_0 = f(x_0, y_0) = \left(\sum_{i=1}^n \frac{a_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right) x_0^2 + \left(\sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right) y_0^2 + \left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_ib_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) x_0 y_0$$

$$+ \left(\sum_{i=1}^n \frac{2a_ic_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) x_0 + \left(\sum_{i=1}^n \frac{2b_ic_i}{a_i^2 + b_i^2}\right) y_0 + \left(\sum_{i=1}^n \frac{c_i^2}{a_i^2 + b_i^2}\right)$$

同理,可以推广到更高维度空间上。

问题 2: (直线拟合)

一、问题描述

为了将一群点拟合为一条直线,可以计算这些点的均值和围绕这个均值的协方差矩阵, 试证明:经过均值且沿着协方差椭球长轴(最大特征矢量)方向的直线将最小化到这些点的 距离平方和。

二、基本思路

该问题的求解即为对最小平方误差理论的求证。由题意所给条件(均值和最大特征矢量方向)可知,证明本题主要有两个步骤:

- ① 确定中心点
- ② 确定过点的一个单位方向

三、问题求解

证明:设空间中有 n 个样本点 $(x_1, x_2, \dots x_n)$,每个样本点为 m 维,将样本点 x_k 在直线上的投影记为 x_k' ,则题目需要最小化的目标公式为

$$D = \sum_{k=1}^{n} \|x_k' - x_k\|^2$$
 (1)

为了确定一条直线,则需要确定一个点以及在该点确定的方向即可。

① 确定点:

假设要在空间中找一点 x_0 来代表 n 个样本点,则该 m 维的点需满足如下公式结果最小。

$$J_0(x_0) = \sum_{k=1}^n ||x_0 - x_k||^2$$
 (2)

假设 \bar{x} 为 n 个样本点的均值

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} x_k \tag{3}$$

那么

$$J_{0}(x_{0}) = \sum_{k=1}^{n} \|(x_{0} - \bar{x}) - (x_{k} - \bar{x})\|^{2}$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \|x_{0} - \bar{x}\|^{2} - 2\sum_{k=1}^{n} (x_{0} - \bar{x})^{T} (x_{k} - \bar{x}) + \sum_{k=1}^{n} \|x_{k} - \bar{x}\|^{2}$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \|x_{0} - \bar{x}\|^{2} - 2(x_{0} - \bar{x})^{T} \sum_{k=1}^{n} (x_{k} - \bar{x}) + \sum_{k=1}^{n} \|x_{k} - \bar{x}\|^{2}$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \|x_{0} - \bar{x}\|^{2} + \sum_{k=1}^{n} \|x_{k} - \bar{x}\|^{2}$$

$$(4)$$

因为后一项与 x_0 无关,可以看作常量,而 $J_0(x_0)\geq 0$,因此,若最小化 $J_0(x_0)$, $x_0=\bar{x}$ 。因此需要确定的点 x_0 即为样本点均值。

② 确定方向: (为了方便观察,该步将向量加粗)

由上一步骤可知所求直线必过样本均值点。假设直线的方向是单位向量e。则该直线上的任一点 x_k' 可以用均值点 \bar{x} 和e(单位向量)来表示

$$x'_{k} = \overline{x} + a_{k}e$$

其中, $a_k \ge x'_k$ 到点 \bar{x} 的距离。

则可以重新定义D如下式,即为即为最小化目标公式

$$J_1(a_1, \dots, a_n, \mathbf{e}) = \sum_{k=1}^n \|\mathbf{x}_k' - \mathbf{x}_k\|^2 = \sum_{k=1}^n \|(\overline{\mathbf{x}} + a_k \mathbf{e}) - \mathbf{x}_k\|^2$$
 (5)

将上式展开

$$J_{1}(a_{1}, \dots, a_{n}, \mathbf{e}) = \sum_{k=1}^{n} \|(\overline{\mathbf{x}} + a_{k}\mathbf{e}) - \mathbf{x}_{k}\|^{2} = \sum_{k=1}^{n} \|a_{k}\mathbf{e} - (\mathbf{x}_{k} - \overline{\mathbf{x}})\|^{2}$$

$$= \sum_{k=1}^{n} a_{k}^{2} \|\mathbf{e}\|^{2} - 2 \sum_{k=1}^{n} a_{k}\mathbf{e}^{T} (\mathbf{x}_{k} - \overline{\mathbf{x}}) + \sum_{k=1}^{n} \|\mathbf{x}_{k} - \overline{\mathbf{x}}\|^{2}$$
(6)

首先,将e固定,看作常量,然后对 a_k 进行求导,得

$$a_k = e^T (x_k - \overline{x}) \tag{7}$$

然后,固定 a_k ,对e求偏导数,首先将公式(7)代入 J_1 ,得

$$J_1(\mathbf{e}) = \sum_{k=1}^n a_k^2 \|\mathbf{e}\|^2 - 2 \sum_{k=1}^n a_k \mathbf{e}^T (\mathbf{x}_k - \overline{\mathbf{x}}) + \sum_{k=1}^n \|\mathbf{x}_k - \overline{\mathbf{x}}\|^2$$

$$= -\sum_{k=1}^{n} [e^{T}(x_{k} - \overline{x})]^{2} + \sum_{k=1}^{n} ||x_{k} - \overline{x}||^{2}$$

$$= -\sum_{k=1}^{n} e^{T}(x_{k} - \overline{x})(x_{k} - \overline{x})^{T} e + \sum_{k=1}^{n} ||x_{k} - \overline{x}||^{2}$$

$$= -e^{T} S e + \sum_{k=1}^{n} ||x_{k} - \overline{x}||^{2}$$
(8)

其中 $S = \sum_{k=1}^n (x_k - \overline{x})(x_k - \overline{x})^T$,与协方差矩阵类似,只是缺少分母 n-1。S 为散列矩阵。

然后对e求偏导数,但e需要首先满足 $\|e\|^2=1$,引入拉格朗日乘子 λ ,来使 e^TSe 最大,即 J_1 最小,令

$$\mathbf{u} = \mathbf{e}^T \mathbf{S} \mathbf{e} - \lambda (\mathbf{e}^T \mathbf{e} - 1) \tag{9}$$

则

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{e}} = 2\mathbf{S}\mathbf{e} - 2\lambda\mathbf{e} \tag{10}$$

所以, 当导数为0时, 得

$$Se = \lambda e \tag{11}$$

两边除以 n-1 就变成了对协方差矩阵求特征值向量了。因此**e**为最大特征矢量的方向向量即为所求。