数值线性代数与算法

第五章 线性最小二乘问题的数值解法

当给定的矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 非奇异时, 对任何向量 $\boldsymbol{b} \in \mathbb{C}^n$, 线性方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 总有唯一解 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$. 但在许多实际问题中, 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不是方阵, 甚至不是满秩的, 而且 $\boldsymbol{b} \notin \mathcal{R}(\boldsymbol{A})$. 此时, 方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 可能无解或者有无穷多个解. 本章将讨论这样的一类线性方程组的有关理论及数值方法.

§5.1 线性最小二乘问题的数学性质

本节讨论线性最小二乘问题的有关性质. 首先给出最小二乘问题的定义.

定义 5.1 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{C}^m$, 确定 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ 使得

$$\|\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b}\|_2 = \min_{\boldsymbol{z}\in\mathbb{C}^n} \|\boldsymbol{Az} - \boldsymbol{b}\|_2. \tag{5.1}$$

问题 (5.1) 称为线性最小二乘问题 (Least Squares, LS 问题), 而 $\boldsymbol{x}$

Back
Close

则称为最小二乘解或极小解. 称 $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为残差向量 (简称残量).

所有最小二乘解的集合记为 S_{LS}, 即

$$S_{\mathrm{LS}} = \left\{\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n : \boldsymbol{x}\ \text{满足}\ (5.1)\right\}. \tag{5.2}$$

S_{LS} 中 2–范数最小者称为极小范数解, 记为 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$, 即

$$\|\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}\|_2 = \min\left\{\|\boldsymbol{x}\|_2 : \boldsymbol{x} \in S_{\mathrm{LS}}\right\}.$$

线性最小二乘问题 (5.1) 的解 $\boldsymbol{x}$ 又可称为线性方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n},\ \boldsymbol{b} \in \mathbb{C}^m \tag{5.3}$$

的最小二乘解, 即 $\boldsymbol{x}$ 在残量 $\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的 2–范数最小的意义下满足方程组 (5.3). 当 $m > n$ 时称为超定方程组或矛盾方程组; 当 $m < n$ 时称为欠定方程组.

不难发现, 若将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 写成 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n]$, $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{C}^m$, $i = 1, 2, \cdots, n$, 则求解最小二乘问题 (5.1) 等价于求 $\{\boldsymbol{a}_i\}_{i=1}^n$ 的线性组合使之与向量 $\boldsymbol{b}$ 之差的 2–范数达到最小. 可分为两种情况: 第一种是 $\{\boldsymbol{a}_i\}_{i=1}^n$ 线性无关, 即 $\boldsymbol{A}$ 为列满秩; 第二种是 $\{\boldsymbol{a}_i\}_{i=1}^n$ 线性相关, 即 $\boldsymbol{A}$ 为秩亏的. 下面分别针对这两种情形讨论最小二乘问题 (5.1) 极小解的数值解法.

§5.1.1 最小二乘解的特征及一般表示

矩阵的广义逆是研究线性方程组 (5.3) 最小二乘解的一个重要而有力的工具. 下面讨论:

(1) 当方程组 (5.3) 有解时, 如何确定 $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{C}^n$, 使得

$$\|\boldsymbol{x}_0\|_2 = \min_{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}} \|\boldsymbol{x}\|_2,$$

称这样的 $\boldsymbol{x}_0$ 为方程组 (5.3) 的极小范数解.

(2) 当方程组 (5.3) 无解时, 如何确定 $\boldsymbol{x}_0 \in \mathbb{C}^n$, 使得

$$\|\boldsymbol{x}_0\|_2 = \min_{\min \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_2} \|\boldsymbol{x}\|_2,$$

称这样的 $\boldsymbol{x}_0$ 为方程组 (5.3) 的极小范数最小二乘解.

引理 5.1 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}$, 则有

(1) $[\mathcal{R}(\boldsymbol{A})]^{\perp} = \mathcal{N}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$, 并且 $\mathbb{C}^m = \mathcal{R}(\boldsymbol{A}) \bigoplus \mathcal{N}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$ (或 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A}) = [\mathcal{N}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})]^{\perp}$).

(2) $[\mathcal{R}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})]^{\perp} = \mathcal{N}(\boldsymbol{A})$, 并且 $\mathbb{C}^n = \mathcal{R}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}) \bigoplus \mathcal{N}(\boldsymbol{A})$ (或 $\mathcal{N}(\boldsymbol{A}) = [\mathcal{R}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})]^{\perp}$).

证明 (1) 将 $\boldsymbol{A}$ 按列划分为 $\boldsymbol{A} = \left[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\right]$, 其中 $\boldsymbol{a}_i \in \mathbb{C}^m \, (i = 1, 2, \cdots, n)$, 由于

$$\mathcal{R}(\boldsymbol{A}) = \operatorname{span}\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\},$$

所以

$$
\begin{aligned}
[\mathcal{R}(\boldsymbol{A})]^{\perp} &= \{\boldsymbol{x} : \boldsymbol{x} \perp \boldsymbol{a}_i,\ i = 1, 2, \cdots, n\} \\
&= \{\boldsymbol{x} : \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{H}} \boldsymbol{x} = 0,\ i = 1, 2, \cdots, n\ \} \\
&= \{\boldsymbol{x} : \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}\} = \mathcal{N}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}),
\end{aligned}
$$

即 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A}) \perp \mathcal{N}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$, 从而 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A}) + \mathcal{N}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$ 为直和. 再由

$$
\dim \mathcal{R}(\boldsymbol{A}) + \dim \mathcal{N}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}) = \operatorname{rank}(\boldsymbol{A}) + [m - \operatorname{rank}(\boldsymbol{A})] = m,
$$

可得 $\mathbb{C}^m = \mathcal{R}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}) \bigoplus \mathcal{N}(\boldsymbol{A})$.

(2) 在 (1) 中以 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \in \mathbb{C}^{n \times m}$ 代替 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m \times n}$ 即可得 (2). 证毕.

□

Back
Close

设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_r & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}},$$

式中: $\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2]$, $\boldsymbol{V}=[\boldsymbol{V}_1,\boldsymbol{V}_2]$ 为酉矩阵, $\boldsymbol{U}_1=[\boldsymbol{u}_1,\cdots,\boldsymbol{u}_r]$, $\boldsymbol{U}_2=[\boldsymbol{u}_{r+1},\cdots,\boldsymbol{u}_n]$, $\boldsymbol{V}_1=[\boldsymbol{v}_1,\cdots,\boldsymbol{v}_r]$, $\boldsymbol{V}_2=[\boldsymbol{v}_{r+1},\cdots,\boldsymbol{v}_n]$; $\boldsymbol{\Sigma}_r=\mathrm{diag}(\sigma_1,\cdots,\sigma_r)$, $\sigma_1\geqslant\cdots\geqslant\sigma_r>0$. 于是

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}_r\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}},\quad \boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}_r^{-1}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}},\quad \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}_r\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}.(5.4)$$

容易验证

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}},\quad \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}},\quad \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}_r^2\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}.(5.5)$$

由于 $\{\boldsymbol{u}_i\}_{i=1}^{r}$ 和 $\{\boldsymbol{v}_i\}_{i=r+1}^{n}$ 分别是 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 和 $\mathcal{N}(\boldsymbol{A})$ 的标准正交基,

故 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 和 $\mathcal{N}(\boldsymbol{A})$ 上的正交投影矩阵分别为:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}_{\mathcal{R}(\boldsymbol{A})} &= \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger},\\ \boldsymbol{P}_{\mathcal{N}(\boldsymbol{A})} &= \boldsymbol{V}_2\boldsymbol{V}_2^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{V}_1\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}.\end{aligned} \tag{5.6}$$

而 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})^{\perp} = \mathcal{N}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$ 和 $\mathcal{N}(\boldsymbol{A})^{\perp} = \mathcal{R}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$ 上的正交投影矩阵分别为

$$\boldsymbol{P}_{\mathcal{R}(\boldsymbol{A})^{\perp}} = \boldsymbol{I}_m - \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}, \quad \boldsymbol{P}_{\mathcal{N}(\boldsymbol{A})^{\perp}} = \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}. \tag{5.7}$$

有下面的定理.

定理 5.1 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{C}^m$, 则线性方程组 (5.3) 有解的充要条件是

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}, \tag{5.8}$$

并且在有解时, 其通解为

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b} + (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}, \tag{5.9}$$

其中 $\boldsymbol{z} \in \mathbb{C}^n$ 任意.

证明 若 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}$, 则显然方程组 (5.3) 有解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{b}$. 反之, 若 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$, 则

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{b}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}.$$

下面证明其通解为式 (5.9). 事实上, 根据式 (5.6), 有

$$\mathcal{N}(\boldsymbol{A})=\{(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}:\boldsymbol{z}\in\mathbb{C}^n\}.$$

故线性方程组 (5.3) 的通解可以表示为 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{b}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}$, 其中 $\boldsymbol{z}\in\mathbb{C}^n$ 任意. 证毕. □

注 5.1 式 (5.9) 表明: $\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{b}$ 是方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的一个解, 而 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}$ 是对应齐次方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 的通解.

定理 5.2 如果方程组 (5.3) 有解, 则它的极小范数解 $\boldsymbol{x}_0$ 唯一, 并且 $\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{b}$.

证明 先证 $\boldsymbol{x}_0 \in \mathcal{R}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$. 若 $\boldsymbol{x}_0 \notin \mathcal{R}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$, 则由引理 5.1 (2) 作向量分解, 得

$$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{y}_0 + \boldsymbol{y}_1, \quad \boldsymbol{y}_0 \in \mathcal{R}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}), \quad \boldsymbol{y}_1 \in \mathcal{N}(\boldsymbol{A}) = [\mathcal{R}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})]^{\perp}, \quad \boldsymbol{y}_1 \neq 0.$$

由于 $\boldsymbol{y}_0 \perp \boldsymbol{y}_1$, 所以

$$\|\boldsymbol{x}_0\|_2^2 = \|\boldsymbol{y}_0\|_2^2 + \|\boldsymbol{y}_1\|_2^2 > \|\boldsymbol{y}_0\|_2^2.$$

但是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}_0 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}_0 + \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}_1 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{b}$, 所以 $\boldsymbol{x}_0$ 不是方程组 (5.3) 的极小范数解. 这与前提冲突, 故 $\boldsymbol{x}_0 \in \mathcal{R}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$.

再证 $\boldsymbol{x}_0$ 唯一. 若 $\boldsymbol{z}_0$ 也是方程 (5.3) 的极小范数解, 则 $\boldsymbol{z}_0 \in \mathcal{R}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$, 从而

$$\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{z}_0 \in \mathcal{R}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}) = [\mathcal{N}(\boldsymbol{A})]^{\perp}.$$

另外, 由于 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{z}_0) = \boldsymbol{0}$, 所以 $\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{z}_0 \in \mathcal{N}(\boldsymbol{A})$, 故只能有 $\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{z}_0 = \boldsymbol{0}$. 即 $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{z}_0$.

最后证 $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{b}$. 根据定理 5.1 可得方程组 (5.3) 的通解为

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{b} + (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{A})\boldsymbol{z} \quad (\boldsymbol{z} \in \mathbb{C}^n \text{ 任意}).$$

取 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{0}$, 则 $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{b}$ 是方程组 (5.3) 的一个解. 因为

$$\begin{aligned}\big(\boldsymbol{x}_0, (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{A})\boldsymbol{z}\big) &= \boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{A})^{\mathrm{H}} \boldsymbol{x}_0 \\ &= \boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{A})\boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{b} \\ &= \boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^\dagger - \boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{A} \boldsymbol{A}^\dagger)\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0},\end{aligned}$$

所以

$$\|\boldsymbol{x}\|_2^2 = \|\boldsymbol{x}_0\|_2^2 + \|(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{A})\boldsymbol{z}\|_2^2 \geqslant \|\boldsymbol{x}_0\|_2^2.$$

故 $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{b}$ 是方程组 (5.3) 的极小范数解. 证毕. □

定理 5.3 如果线性方程组 (5.3) 无解, 则它的极小范数最小二乘解 $\boldsymbol{x}_0$ 唯一, 并且 $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{A}^\dagger \boldsymbol{b}$.

证明 由于方程组 (5.3) 无解, 所以 $\boldsymbol{b} \notin \mathcal{R}(\boldsymbol{A})$. 根据引理 5.1 (1) 作向量分解 $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2$, 其中 $\boldsymbol{b}_1 \in \mathcal{R}(\boldsymbol{A})$, $\boldsymbol{b}_2 \in \mathcal{N}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}) = [\mathcal{R}(\boldsymbol{A})]^{\perp}$ 且 $\boldsymbol{b}_2 \neq \boldsymbol{0}$. 注意到 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}_1 \in \mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 及 $\boldsymbol{b}_2 \in [\mathcal{R}(\boldsymbol{A})]^{\perp}$, 可得 $(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}_1) \perp \boldsymbol{b}_2$, 于是有

$$\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2^2 = \|(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}_1) + (-\boldsymbol{b}_2)\|_2^2 = \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}_1\|_2^2 + \|\boldsymbol{b}_2\|_2^2,$$

这表明 $\min \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2$ 等价于 $\min \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}_1\|_2$.

因为 $\boldsymbol{b}_1 \in \mathcal{R}(\boldsymbol{A})$, 所以方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_1$ 有解, 根据定理 5.2 可得它的唯一极小范数解为 $\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}_1$. 由于 $\boldsymbol{b}_2 \in \mathcal{N}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$, 所以 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}_2 = \boldsymbol{0}$. 于是得

$$\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}_2 = \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}_2 = \boldsymbol{A}^{\dagger}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}_2 = \boldsymbol{A}^{\dagger}(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}_2 = \boldsymbol{0},$$

所以 $\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{A}^{\dagger}(\boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2) = \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}_1$ 是方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_1$ 的唯一极小范数解, 也是方程组 (5.3) 的唯一极小范数最小二乘解. 证毕.

□

§5.1.2 线性 LS 的等价性问题

1. 法方程

下面的定理给出了最小二乘问题极小解的一个刻画.

定理 5.4 $\boldsymbol{x}$ 是最小二乘问题 (5.1) 的极小解, 即 $\boldsymbol{x} \in S_{\mathrm{LS}}$ 的充分必要条件是 $\boldsymbol{x}$ 为方程

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b} \tag{5.10}$$

的解, 其中式 (5.10) 称为最小二乘问题的法方程.

证明 注意到最小二乘问题 (5.1) 等价于极小化问题

$$\min \varphi(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2^2 = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{x} - (\boldsymbol{b}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{x} + \frac{1}{2}\|\boldsymbol{b}\|_2^2.$$

由于 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 是半正定矩阵, 因此 n 元实函数 $\varphi(\boldsymbol{x})$ 是凸函数, 故 $\boldsymbol{x}$ 是最小二乘问题 (5.1) 的极小解等价于

$$\nabla\varphi(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}) = \boldsymbol{0}.$$

证毕. □

定理 5.4 说明最小二乘问题 (5.1) 与法方程 (5.10) 是等价的, 即法方程 (5.10) 与最小二乘问题 (5.1) 有相同的解集.

2. KKT 方程

下面的定理给出最小二乘问题 (5.1) 的另一个等价性问题.

定理 5.5 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$. 则 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 分别为最小二乘问题 (5.1) 的极小解和残量的充分必要条件是 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{r}$ 为鞍点系统

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r} \\ \boldsymbol{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix} \tag{5.11}$$

的解. 上述线性系统称为最小二乘问题的 Karush–Kuhn–Tucker 方程 (KKT 方程).

证明 若 $\boldsymbol{x}$ 为最小二乘问题 (5.1) 的极小解, 而 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为

其残量, 则

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z},\quad \boldsymbol{r}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger})\boldsymbol{b}.$$

由广义逆 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 的性质及等式 $\boldsymbol{r}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$, 得

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{r}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger})\boldsymbol{b}=\left[(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger})\boldsymbol{A}\right]^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{0}.$$

故式 (5.11) 是相容的线性系统, 且 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{r}$ 满足式 (5.11).

反之, 通过验证广义逆的四个条件, 可以验证

$$\boldsymbol{B}^{\dagger}\equiv\begin{bmatrix}\boldsymbol{I} & \boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}^{\dagger}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger} & (\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{A}^{\dagger} & -\boldsymbol{A}^{\dagger}(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}.$$

故式 (5.11) 的任一解向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{r}$ 有如下形式

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{r}\\ \boldsymbol{x}\end{bmatrix}=\boldsymbol{B}^{\dagger}\begin{bmatrix}\boldsymbol{b}\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}^{\dagger}\boldsymbol{B})\begin{bmatrix}\boldsymbol{y}\\ \boldsymbol{z}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger})\boldsymbol{b}\\ \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}-(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}\end{bmatrix},$$

式中: $\boldsymbol{y} \in \mathbb{C}^m$, $\boldsymbol{z} \in \mathbb{C}^n$ 为任意向量. 故满足式 (5.11) 的任一组向量 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{r}$ 分别为式 (5.1) 的极小解和残量. 证毕. $\square$

§5.1.3 线性最小二乘问题的正则化

设矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}_r^{m\times n}$ 的奇异值分解为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}, \tag{5.12}$$

式中: $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_m]$ 为 m 阶酉矩阵; $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_n]$ 为 n 阶酉矩阵; $l = \min\{m, n\}$; $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0 = \sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_l = 0$,

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{diag}\big(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_l\big). \tag{5.13}$$

则最小二乘问题 (5.1) 的极小范数最小二乘解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$ 可表示为

$$\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}} = \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b} = \sum_{i=1}^{r} \frac{\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}}{\sigma_i}\boldsymbol{v}_i. \tag{5.14}$$

由于舍入误差的存在, 所有用于计算 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 和 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$ 的算法, 实际上是计算某个扰动矩阵 $\widehat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{A} + \Delta\boldsymbol{A}$ 的广义逆 $\widehat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}$ 以及 $\widehat{\boldsymbol{x}}_{\mathrm{LS}} = \widehat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}\widehat{\boldsymbol{b}}$.

当 $\boldsymbol{A}$ 为病态的满秩矩阵, 即存在 $k\,(1 \leqslant k < l)$, 使得 $\sigma_k \gg \sigma_{k+1} \approx 0$. 由于在极小解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$ 的表达式中存在项

$$\frac{\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}}{\sigma_i}\boldsymbol{v}_i.\ i = k+1, \cdots, l,$$

因此, 对 $\boldsymbol{A}$ 的较小扰动, 将会使极小解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$ 产生很大的误差. 此时, 称 $\boldsymbol{A}$ 为*数值秩亏*的. 当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 秩亏而 $\Delta\boldsymbol{A}$ 很小, 则广义逆的不连续性表明了原来意义上的秩不再适用于数值计算. 当 $\widehat{\boldsymbol{A}}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 的秩不相同时, $\widehat{\boldsymbol{A}}^{\dagger}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$, $\widehat{\boldsymbol{x}}_{\mathrm{LS}}$ 和 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$ 可能会相差很大, 而且扰动 $\Delta\boldsymbol{A}$ 越小, 其相差的程度会越大.

1. *截断的 LS 问题*

最小二乘问题的第一种正则化方法是截断的 LS 问题. 首先给

出矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 δ 秩的定义.

定义 5.2 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}$ 和 $\delta > 0$ 给定. 称数

$$k = \min_{\boldsymbol{B}\in\mathbb{C}^{m\times n}} \{\operatorname{rank}(\boldsymbol{B}) : \|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|_2 \leqslant \delta\} \tag{5.15}$$

为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 δ 秩.

由定义 5.2 和矩阵的降秩最佳逼近定理, 当 $k < l$ 时, 有

$$\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}_k\|_2 = \min_{\operatorname{rank}(\boldsymbol{B})\leqslant k} \|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|_2 = \sigma_{k+1},$$

式中:

$$\boldsymbol{A}_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}.$$

因此, 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 δ 秩为 k 的充分必要条件是

$$\sigma_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_k > \sigma_{k+1} \geqslant \cdots \geqslant \sigma_l.$$

对于最小二乘问题 (5.1), 截断的 LS 问题为

$$\|\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_2=\min_{\boldsymbol{z}\in\mathbb{C}^n}\|\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{z}-\boldsymbol{b}\|_2, \tag{5.16}$$

式中: $\boldsymbol{A}_k$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的最佳秩-k 逼近. 此时, 式 (5.16) 的极小范数最小二乘解 $\bar{\boldsymbol{x}}_{\mathrm{LS}}$ 可表示为

$$\bar{\boldsymbol{x}}_{\mathrm{LS}}=\boldsymbol{A}_k^{\dagger}\boldsymbol{b}=\sum_{i=1}^{k}\frac{\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}}{\sigma_i}\boldsymbol{v}_i. \tag{5.17}$$

2. Tikhonov 正则化

最小二乘问题的另一种正则化方法是 Tikhonov 正则化, 即考虑如下的正则化问题:

$$\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_2^2+\tau^2\|\boldsymbol{D}\boldsymbol{x}\|_2^2=\min_{\boldsymbol{z}\in\mathbb{C}^n}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}-\boldsymbol{b}\|_2^2+\tau^2\|\boldsymbol{D}\boldsymbol{z}\|_2^2, \tag{5.18}$$

式中: $\tau>0$; $\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}\big(d_1,d_2,\cdots,d_n\big)$ 为正定的对角矩阵.

易见, 式 (5.18) 等价于

$$\left\| \begin{bmatrix} \tau \boldsymbol{D} \\ \boldsymbol{A} \end{bmatrix} \boldsymbol{x} - \begin{bmatrix} \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{b} \end{bmatrix} \right\|_2^2 = \min_{z \in \mathbb{C}^n} \left\| \begin{bmatrix} \tau \boldsymbol{D} \\ \boldsymbol{A} \end{bmatrix} \boldsymbol{z} - \begin{bmatrix} \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{b} \end{bmatrix} \right\|_2^2, \tag{5.19}$$

当 $\tau > 0$ 时, 系数矩阵是列满秩的, 因此有唯一的最小二乘解.

设 $m \geqslant n$. 则当 $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{I}$ 时, 式 (5.19) 系数矩阵的奇异值为 $\widetilde{\sigma}_i = \sqrt{\sigma_i + \tau^2}$, $i = 1, 2, \cdots, n$. 此时式 (5.18) 的解可表示为

$$\boldsymbol{x}(\tau) = \sum_{i=1}^{n} \frac{(\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}} \boldsymbol{b}) \sigma_i}{\sigma_i^2 + \tau^2} \boldsymbol{v}_i = \sum_{i=1}^{n} \frac{(\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}} \boldsymbol{b}) \eta_i}{\sigma_i} \boldsymbol{v}_i, \quad \eta_i = \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \tau^2}, \tag{5.20}$$

式中: η_i 为滤波因子. 当 $\tau \ll \sigma_i$ 时, $\eta_i \approx 1$; 当 $\tau \gg \sigma$ 时, $\eta_i \ll 1$.

正则化问题 (5.18) 的优点是它的解可以通过 QR 分解

$$\begin{bmatrix} \tau \boldsymbol{D} \\ \boldsymbol{A} \end{bmatrix} = \boldsymbol{Q} \begin{bmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix}$$

得到.

注 5.2 最小二乘问题的正则化已经把原来的最小二乘问题化为新的最小二乘问题. 事实上, 由式 (5.17) 和式 (5.20) 可以看出, 截断的 LS 问题和 Tikhonov 正则化的 LS 问题, 与最小二乘问题 (5.1) 的极小范数最小二乘解以及相应的残量各不相同. 正则化方法通常用于处理病态最小二乘问题和反问题等不适定问题.

§5.2 求解满秩最小二乘问题的数值方法

本节假定最小二乘问题 (5.1) 中的矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}\,(m \geqslant n)$ 为列满秩矩阵, 即 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = n$. 此时最小二乘问题 (5.1) 有唯一的极小范数最小二乘解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$, 并且连续地依赖给定的数据 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{b}$. 对于这类问题, 介绍两种最基本的数值方法.

§5.2.1 法方程方法

由定理 5.4, 最小二乘问题 (5.1) 等价于其法方程

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}.$$

当 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = n$ 时, $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 为 Hermite 正定矩阵, 法方程 (5.10) 的唯一解可以用 Cholesky 分解法求得. 写出算法步骤如下:

算法 5.1 (法方程 Cholesky 分解法) 给定 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{m\times n}\,(m \geqslant n)$ 为列满秩矩阵, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{C}^m$. 本算法计算 $\|\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b}\|_2$ 的极小解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$.

步 1, 对 n 阶 Hermite 正定矩阵 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 作 Cholesky 分解 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}$, 其中 $\boldsymbol{L}$ 为下三角矩阵.

步 2, 依次解 $\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ 得到最小二乘问题 (5.1) 的解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$.

n 阶 Hermite 正定矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的 Cholesky 分解需要 $O(n^3/3)$ 次乘法. 而计算 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 需要 mn^2 次乘法. 在算法 5.1 中第 2 步的计算量 (约 $O(n^2)$ 次乘法) 与第 1 步相比可以忽略. 所以该算法需要的乘法次数为 $O(mn^2 + n^3/3)$. 当 $m \gg n$ 时, 算法的主要工作量在于 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 的计算.

Back
Close

§5.2.2 QR 分解方法

本节考虑最小二乘问题 (5.1) 中的矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}\,(m \geqslant n)$ 的情形. 根据正交矩阵保持向量 2–范数不变的性质, 对于任意的正交矩阵 $\boldsymbol{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$, 最小二乘问题 (5.1) 等价于

$$\|\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b})\|_2 = \min\left\{\|\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}-\boldsymbol{b})\|_2 : \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^n\right\}. \tag{5.21}$$

这样, 就可望通过适当选取正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$, 使原问题 (5.1) 转化为较为容易求解的最小二乘问题 (5.21), 这就是正交化方法—QR 分解方法的基本思想.

设 $\boldsymbol{A}$ 有 QR 分解:

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix} = \boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}, \tag{5.22}$$

Back
Close

式中: $\boldsymbol{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ 为正交矩阵; $\boldsymbol{Q}_1$ 为 $\boldsymbol{Q}$ 的前 n 列组成的矩阵; $\boldsymbol{R} \in \mathbb{R}^{n\times}$ 为对角元均为正的上三角矩阵.

现取式 (5.21) 中的正交矩阵为分解式 (5.22) 中的 $\boldsymbol{Q}$, 并记

$$\boldsymbol{f} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \boldsymbol{b} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} \boldsymbol{f}_1 \\ \boldsymbol{f}_2 \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{l} n \\ m-n \end{array}, \tag{5.23}$$

则对任意的 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$, 有

$$\begin{aligned} \left\|\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b})\right\|_2^2 &= \left\| \begin{bmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \boldsymbol{x} - \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} \right\|_2^2 = \left\| \begin{bmatrix} \boldsymbol{R} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \boldsymbol{x} - \begin{bmatrix} \boldsymbol{f}_1 \\ \boldsymbol{f}_2 \end{bmatrix} \right\|_2^2 \\ &= \|\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{f}_1\|_2^2 + \|\boldsymbol{f}_2\|_2^2 . \end{aligned}$$

由此可知, $\boldsymbol{x}$ 是最小二乘问题 (5.1) 的解, 当且仅当 $\boldsymbol{x}$ 是上三角形方程组 $\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{f}_1$ 的解.

Back
Close

根据上述讨论, 有如下的 QR 分解算法. 在实施过程中, 采取对增广矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{A}}=[\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}]$ 进行 QR 分解:

$$\boldsymbol{H}_n\cdots\boldsymbol{H}_2\boldsymbol{H}_1\big[\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}\big]=\big[\boldsymbol{R},\widetilde{\boldsymbol{b}}\big]\Longrightarrow\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\big[\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}\big]=\big[\boldsymbol{R},\widetilde{\boldsymbol{b}}\big],\quad(5.24)$$

得

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{R},\quad\widetilde{\boldsymbol{b}}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b},$$

式中: $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{H}_2\cdots\boldsymbol{H}_n$. 式 (5.24) 表明, 对增广矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{A}}=[\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}]$ 实施 QR 分解, 当把矩阵 $\boldsymbol{A}$ 约化为上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$ 时, 向量 $\boldsymbol{b}$ 约化成了 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$, 这正是所需要的.

算法 5.2 (LS 问题 QR 分解法) 给定 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{m\times n}\,(m\geqslant n)$ 为列满秩矩阵, $\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}^m$. 本算法计算 $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_2$ 的极小解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$.

步 1, 计算增广矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{A}}=[\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}]$ 的 QR 分解并覆盖 $\widetilde{\boldsymbol{A}}$.

步 2, 用回代法求解上三角形方程组 $\mathrm{triu}(\widetilde{\boldsymbol{A}}(1:n,1:n))\boldsymbol{x}=\widetilde{\boldsymbol{A}}(1:n,n+1)$, 得到最小二乘解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$, 其中记号 $\mathrm{triu}(\boldsymbol{B})$ 表示提取矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的上三角部分组成的上三角形矩阵.

用算法 5.2 求解满秩最小二乘问题需要 $2mn^2 - 2n^3/3$ 个 flop. 更新 $\boldsymbol{b}$ 所需的 $O(mn)$ 个 flop 和回代法所需的 $O(n^2)$ 个 flop 与分解 $\boldsymbol{A}$ 所需的工作量相比是微不足道的.

注 5.3 算法 5.2 的主要工作量集中在增广矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{A}}$ 的 QR 分解. 可用如下三种方法之一实现这一分解:

(1) Householder 方法.

(2) Givens 正交化方法.

(3) 修正的 Gram–Schmit 方法.

根据算法 5.2, 采用 Householder 变换 QR 分解编制 MATLAB 程序如下:

```
function [x]=ls_houseqr(A,b)
%用Householder变换QR分解求最小二乘问题min||Ax-b||
[m,n]=size(A);
```

```
[A]=house_qr([A,b]);  %调用Householder变换QR分解程序
x=triu(A(1:n,1:n))\A(1:n,n+1);
```

例 5.1 用 MATLAB 程序 ls_houseqr.m 求解最小二乘问题 $\min \|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}\|_2$, 其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \\ 4 & 5 & 6 & 7 \\ 9 & 5 & 7 & 2 \\ 4 & 2 & 5 & 3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix} 20 \\ 22 \\ 35 \\ 42 \\ 50 \end{bmatrix}.$$

解 在 MATLAB 命令窗口输入:

```
>> A=[2 3 4 5; 4 3 2 1; 4 5 6 7; 9 5 7 2; 4 2 5 3];
>> b=[20 22 35 42 50]'; x=ls_houseqr(A,b)
```

即可得计算结果.

§5.3 求解秩亏最小二乘问题的数值解法

本节讨论秩亏最小二乘问题 $\min \|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}\|_2$ 的数值解法. 如果 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}_r^{m\times n}\,(m\geqslant n)$ 是秩亏损的, 即 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=r<n$, 此时, 最小二乘问题 (5.1) 有无穷多个解, 且 5.2 节所介绍的处理满秩最小二乘问题的法方程方法和 QR 分解法都不再有效. 因此, 本节专门讨论秩亏最小二乘问题的数值求解方法.

§5.3.1 列主元 QR 分解法

当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 秩亏损时, 其 QR 分解不一定能给出列空间 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 的一组标准正交基. 此时可计算经过列置换之后的矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{AP}$ 的 QR 分解来解决, 即 $\boldsymbol{AP}=\boldsymbol{QR}$, 其中 $\boldsymbol{P}$ 是置换矩阵.

下面介绍列主元 QR 分解法来解决秩亏的最小二乘问题. 设

Back
Close

最小二乘问题 (5.1) 中的已知向量 $\boldsymbol{b}$ 分解为

$$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2, \quad \boldsymbol{b}_1 \in \mathcal{R}(\boldsymbol{A}), \ \boldsymbol{b}_2 \in \mathcal{R}(\boldsymbol{A})^{\perp}. \tag{5.25}$$

易证问题 (5.1) 等价于

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_1. \tag{5.26}$$

现假定 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A}) = \mathcal{R}(\boldsymbol{Q}_1)$, 其中 $\boldsymbol{Q}_1 \in \mathbb{R}^{m\times r}$ 且 $\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_1 = \boldsymbol{I}_r$, 即 $\boldsymbol{Q}_1$ 的列构成 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 的一组标准正交基. 则存在矩阵 $\boldsymbol{S} \in \mathbb{R}^{r\times n}$ 和向量 $\boldsymbol{h} \in \mathbb{R}^r$, 使得

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{S}, \quad \boldsymbol{b}_1 = \boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{h}. \tag{5.27}$$

将式 (5.27) 代入式 (5.26), 并注意到 $\boldsymbol{Q}_1$ 的列线性无关, 可知 (5.26) 等价于

$$\boldsymbol{S}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{h}. \tag{5.28}$$

显然方程组 (5.28) 总是有解的. 进一步, 由式 (5.27) 可知

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{h} = \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_1 = \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}_2) = \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}. \tag{5.29}$$

因此, 只要求得 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 的一组标准正交基, 就可以通过式 (5.29) 和式 (5.28) 求得最小二乘问题 (5.1) 的任一解.

现由于 $\operatorname{rank}(\boldsymbol{A}) = r < n$, 2.2 节介绍的 QR 分解式 (2.9) 一般不能产生 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 的一组标准正交基. 但如果先对 $\boldsymbol{A}$ 的列进行适当的排列使其前 r 列线性无关, 然后再进行 QR 分解, 则仍然可以产生 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 的一组标准正交基.

设有分解式

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{Q}\begin{array}{cc} \left[\begin{array}{cc} \boldsymbol{R}_{11} & \boldsymbol{R}_{12} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{array}\right] & \begin{array}{l} r \\ m-r \end{array} \\ \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} & \end{array}, \tag{5.30}$$

式中: $\boldsymbol{P}$ 为置换矩阵; $\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵; $\boldsymbol{R}_{11}$ 为非奇异的上三角矩阵. 则 $\boldsymbol{Q}$ 的前 r 列就是 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 的一组标准正交基.

一旦求出式 (5.30) 的分解式, 则由式 (5.26), 有

$$(\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P})(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_1,$$

由式 (5.30) 并令 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{w} \\ \boldsymbol{z} \end{bmatrix}$, 得

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_{11} & \boldsymbol{R}_{12} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{w} \\ \boldsymbol{z} \end{bmatrix} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_1 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{h} \\ \boldsymbol{g} \end{bmatrix},$$

即

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_{11}\boldsymbol{w} + \boldsymbol{R}_{12}\boldsymbol{z} \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{h} \\ \boldsymbol{g} \end{bmatrix}.$$

由此, 得

$$\boldsymbol{w} = \boldsymbol{R}_{11}^{-1}(\boldsymbol{h} - \boldsymbol{R}_{12}\boldsymbol{z}), \quad \boldsymbol{g} = \boldsymbol{0}.$$

故

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{P}\begin{bmatrix} \boldsymbol{w} \\ \boldsymbol{z} \end{bmatrix} = \boldsymbol{P}\begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_{11}^{-1}(\boldsymbol{h} - \boldsymbol{R}_{12}\boldsymbol{z}) \\ \boldsymbol{z} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^{n-r},$$

这就是最小二乘问题 (5.1) 的通解. 注意到上式还可以写为

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x} &= \boldsymbol{x}_b + \boldsymbol{P}\begin{bmatrix} -\boldsymbol{R}_{11}^{-1}\boldsymbol{R}_{12} \\ \boldsymbol{I}_{n-r} \end{bmatrix}\boldsymbol{z}, \\ \boldsymbol{x}_b &= \boldsymbol{P}\begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_{11}^{-1}\boldsymbol{h} \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{z} \in \mathbb{R}^{n-r}, \end{aligned} \tag{5.31}$$

式中: $\boldsymbol{x}_b$ 为最小二乘问题的基本解.

下面讨论分解式 (5.30) 的具体实施过程. 类似于分解式 (2.9) 的计算过程, 这一分解可用 Householder 变换和适当的初等列变换相结合逐步求得. 假设对某一正整数 k, 已经求得 $k-1$ 个 Householder 变换 $\boldsymbol{H}_1, \boldsymbol{H}_2, \cdots, \boldsymbol{H}_{k-1}$ 和 $k-1$ 个初等变换矩阵 $\boldsymbol{P}_1, \boldsymbol{P}_2, \cdots, \boldsymbol{P}_{k-1}$, 使得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}_{k-1} &= (\boldsymbol{H}_{k-1} \cdots \boldsymbol{H}_2 \boldsymbol{H}_1) \boldsymbol{A} (\boldsymbol{P}_1 \boldsymbol{P}_2 \cdots \boldsymbol{P}_{k-1}) \\ &= \begin{array}{cl} \left[\begin{array}{cc} \boldsymbol{R}_{11}^{(k-1)} & \boldsymbol{R}_{12}^{(k-1)} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{R}_{22}^{(k-1)} \end{array}\right] & \begin{array}{l} k-1 \\ m-k+1 \end{array} \\ \begin{array}{cc} \;\; k-1 \quad & \quad n-k+1 \end{array} & \end{array},\end{aligned} \tag{5.32}$$

式中: $\boldsymbol{R}_{11}^{(k-1)}$ 为非奇异的上三角矩阵. 现记

$$\boldsymbol{R}_{22}^{(k-1)} = \left[\boldsymbol{v}_k^{(k-1)}, \boldsymbol{v}_{k+1}^{(k-1)}, \cdots, \boldsymbol{v}_n^{(k-1)}\right],$$

即 $\boldsymbol{v}_i^{(k-1)}$ 表示 $\boldsymbol{R}_{22}^{(k-1)}$ 的第 $i-k+1$ 列. 下一步是首先确定指标

$p\,(k \leqslant p \leqslant n)$ 满足

$$\left\|\boldsymbol{v}_p^{(k-1)}\right\|_2 = \max\left\{\|\boldsymbol{v}_k^{(k-1)}\|_2, \|\boldsymbol{v}_{k+1}^{(k-1)}\|_2, \cdots, \|\boldsymbol{v}_n^{(k-1)}\|_2\right\}. \tag{5.33}$$

若 $\|\boldsymbol{v}_p^{(k-1)}\|_2 = 0$, 停止计算. 否则取 $\boldsymbol{P}_k$ 为第 k 列与第 p 列交换的初等变换矩阵, 并确定一个 Householder 变换 $\widetilde{\boldsymbol{H}}_k \in \mathbb{R}^{(m-k+1)\times(m-k+1)}$, 使得

$$\widetilde{\boldsymbol{H}}_k \boldsymbol{v}_p^{(k-1)} = \gamma_{kk}\boldsymbol{e}_1.$$

令 $\boldsymbol{H}_k = \mathrm{diag}(\boldsymbol{I}_{k-1}, \widetilde{\boldsymbol{H}}_k)$, 则有

$$\boldsymbol{R}_k = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_{11}^{(k)} & \boldsymbol{R}_{12}^{(k)} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{R}_{22}^{(k)} \end{bmatrix} & \begin{array}{l} k \\ m-k \end{array} \\ \begin{array}{cc} k & \quad n-k \end{array} & \end{array}, \tag{5.34}$$

式中: $\boldsymbol{R}_{11}^{(k)}$ 为 $k \times k$ 阶非奇异上三角矩阵.

这样, 从 $k=1$ 出发, 依次进行 $r\,(=\operatorname{rank}(\boldsymbol{A}))$ 次“列选主元”的 Householder 变换, 即可得到分解式 (5.30). 值得一提的是, 如果只是利用这一分解来求秩亏的最小二乘问题的解 (通常是用来求基本解), 那么正交矩阵 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{H}_2\cdots\boldsymbol{H}_r$ 没有必要显式地计算, 只需将计算过程中每一步的 Householder 变换同步地作用在向量 $\boldsymbol{b}$ 上即可.

此外, 为了减少“列选主元”的计算量, 不必每一步都按照 2–范数的定义去计算式 (5.33) 中的范数, 因为对于任何正交矩阵 $\boldsymbol{Q}\in\mathbb{R}^{l\times l}$ 均成立

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\begin{array}{c@{}l}\begin{bmatrix}\alpha\\[1ex]\boldsymbol{z}\end{bmatrix}&\begin{array}{l}1\\[1ex]l-1\end{array}\end{array}\quad\Longrightarrow\|\boldsymbol{z}\|_2^2=\|\boldsymbol{x}\|_2^2-\alpha^2.$$

这样, 可以通过修正旧的范数来得到新的范数, 即

$$\|\boldsymbol{x}^{(j)}\|_2^2=\|\boldsymbol{x}^{(j-1)}\|_2^2-a_{kj}^2.$$

综上所述, 可写出计算分解式 (5.30) 的算法并用以求解秩亏最小二乘问题的详细步骤如下.

算法 5.3 (秩亏最小二乘问题的列主元 QR 分解法)

步 1, 输入矩阵 $\boldsymbol{A}=(a_{ij})\in\mathbb{R}^{m\times n}$, $\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}^{m}$. 计算

$$p(j):=j,\quad \sigma_j=\boldsymbol{A}(:,j)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(:,j),\quad j=1,2,\cdots,n.$$

置 $k:=1$.

步 2, 确定 r 使满足 $\sigma_r=\max\limits_{k\leqslant j\leqslant n}\sigma_j$. 若 $\sigma_r=0$, 停算.

步 3, 交换 $p(r)$ 与 $p(k)$, σ_r 与 σ_k 以及 $\boldsymbol{A}(:,r)$ 与 $\boldsymbol{A}(:,k)$.

步 4, 确定一个 Householder 矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{H}}_k$ 使得

$$\widetilde{\boldsymbol{H}}_k\boldsymbol{A}(k:m,k)=\gamma_{kk}\boldsymbol{e}_1,$$

并计算

$$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}]:=\mathrm{diag}(\boldsymbol{I}_{k-1},\widetilde{\boldsymbol{H}}_k)[\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}],\quad \sigma_j:=\sigma_j-a_{kj}^2,\quad j=k+1,\cdots,n.$$

步 5, 置 $k:=k+1$, 转步 2.

Back
Close

算法 5.3 的运算量是 $2mnr - r^2(m+n) + 2r^3/3$ 次乘除法, 其中 $r = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$. 分解式 (5.30) 中的上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$ 存储在 $\boldsymbol{A}$ 的上三角部分, 初等变换矩阵 $\boldsymbol{P}$ 由整数向量 $\boldsymbol{p}(1:n)$ 来记录, 即 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}_1\boldsymbol{P}_2\cdots\boldsymbol{P}_r$, 其中 $\boldsymbol{P}_k$ 是通过单位矩阵交换第 k 列与第 $p(k)$ 列而得到. 而第 k 个 Householder 向量的 $k+1:n$ 分量存储在 $\boldsymbol{A}(k+1:m,k)$ 中.

根据算法 5.3 编制 MATLAB 程序如下:

```
function [x,fval,P]=piv_house_qr(A,b)
%秩亏最小二乘问题的列主元QR分解法
[m,n]=size(A); %Q=eye(m);
A1=A; b1=b;
P=eye(n);
for j=1:n
```

```
        c(j)=A(1:m,j)'*A(1:m,j);
end
[cr,r]=max(c);
for k=1:n
        if (cr<=0), break; end
        c([k r])=c([r k]);
        P(:,[k r])=P(:,[r k]);
        A(1:m,[k r])= A(1:m,[r k]);
        [v,beta]=house(A(k:m,k));
        H=eye(m-k+1)-beta*v*v';
        A(k:m,k:n)=H*A(k:m,k:n);
        b(k:m)=H*b(k:m);
        for j=k+1:n
```

```
        c(j)=c(j)-A(k,j)^2;
    end
    [cr,r]=max(c(k+1:n));
    r=r+k;
end
for i=1:m
    if sum(abs(A(i,:)))<1.0e-10
        rank=i-1; break;
    end
end
R11=A(1:rank,1:rank); c=b(1:rank);
x=P*[R11\c; zeros(rank,1)];
fval=norm(A1*x-b1);
```

例 5.2 用 MATLAB 程序 piv_house_qr.m 求解超定方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解, 其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 5 & 6 & 7 \\ 1 & 8 & 9 & 10 \\ 1 & 11 & 12 & 13 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix} 11 \\ 13 \\ 15 \\ 18 \\ 20 \end{bmatrix}.$$

解 在 MATLAB 命令窗口输入:

```
>> A=[1 2 3 4; 1 4 5 6; 1 5 6 7; 1 8 9 10; 1 11 12 13];
>> b=[11 13 15 18 20]';
>> [x,fval,P]=piv_house_qr(A,b)
```

即可得计算结果.

此外, 如果希望求出秩亏最小二乘问题的极小范数解, 则还需

将分解式 (5.30) 中的 $\boldsymbol{R}_{12}$ 约化为零矩阵. 这可通过 r 次 Householder 变换来完成. 即确定 r 个 Householder 变换 $\boldsymbol{Z}_1, \cdots, \boldsymbol{Z}_r$ 和一个置换矩阵 $\widetilde{\boldsymbol{P}}$ 使得

$$\left[\boldsymbol{R}_{11}, \boldsymbol{R}_{12}\right] \boldsymbol{Z}_1 \cdots \boldsymbol{Z}_r \widetilde{\boldsymbol{P}} = \left[\boldsymbol{T}, \boldsymbol{O}\right],$$

式中: $\boldsymbol{T} \in \mathbb{R}^{r \times r}$ 为上三角矩阵.

现令 $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{P} \boldsymbol{Z}_1 \cdots \boldsymbol{Z}_r \widetilde{\boldsymbol{P}}$, 则有

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{Z} = \begin{array}{c} \left[\begin{array}{cc} \boldsymbol{T} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{array}\right] \begin{array}{l} r \\ m-r \end{array} \\ \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} \end{array}, \tag{5.35}$$

由此, 得

$$\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}} = \boldsymbol{Z} \left[\begin{array}{c} \boldsymbol{T}^{-1} \boldsymbol{c} \\ \boldsymbol{0} \end{array}\right],$$

式中: $\boldsymbol{c}$ 为由 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{b}$ 前 r 个分量构成的 r 维向量.

§5.3.2 奇异值分解法

设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}\,(m > n)$ 的奇异值分解为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_r & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} & \begin{array}{l} r \\ m-r \end{array} \\ \begin{array}{cc} r & n-r \end{array} & \end{array}, \tag{5.36}$$

式中: $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_m]$ 和 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_n]$ 为正交矩阵; $\boldsymbol{\Sigma}_r = \mathrm{diag}(\sigma_1, \cdots, \sigma_r)$, $\sigma_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0$. 则由定理 5.2 和定理 5.3 可知

$$\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}} = \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{V}\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_r^{-1} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} = \sum_{i=1}^{r} \frac{\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}}{\sigma_i}\boldsymbol{v}_i. \tag{5.37}$$

因此, 一旦求出分解式 (5.36), 就可由式 (5.37) 容易地求出最小二乘问题 (5.1) 的极小范数解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$.

例 5.3 用 MATLAB 系统自带的奇异值分解函数 svd.m 求解超定方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$, 其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 5 & 6 & 7 \\ 1 & 8 & 9 & 10 \\ 1 & 11 & 12 & 13 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 11 \\ 13 \\ 15 \\ 18 \\ 20 \end{bmatrix}.$$

解 编制 MATLAB 程序, 并存成文件名 ex53.m:

```
%例5.3 ex53.m
A=[1 2 3 4; 1 4 5 6; 1 5 6 7; 1 8 9 10; 1 11 12 13];
b=[11 13 15 18 20]';
[m,n]=size(A);
[U,S,V]=svd(A);
```

```
% x=(V*pinv(S)*U')*b;
for i=1:n
    if abs(S(i,i))<1.0e-6
        r=i-1; break;
    end
end     %r=rank(S);
x=zeros(n,1);
for i=1:r
    x=x+(U(:,i)'*b/S(i,i))*V(:,i);
end
x
fval=norm(A*x-b)
```

然后在命令窗口输入 ex53 即可得计算结果.

观察到求出的最小二乘解与例 5.2 不一样. 原因是本例求出的是极小范数解, 而例 5.2 只是一个基解. 但它们对应的最优值是相同的.

§5.4 求解最小二乘问题的迭代方法

对于某些大型稀疏的最小二乘问题, 前面介绍的直接解法不一定有效. 此时, 迭代法应该是最好的选择. 本节讨论大型稀疏最小二乘问题

$$\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_2=\min_{\boldsymbol{z}\in\mathbb{R}^n}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}-\boldsymbol{b}\|_2 \tag{5.38}$$

解的迭代算法, 包括矩阵分裂迭代法和 Krylov 子空间迭代法. 本节假定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是 $m\times n\,(m\geqslant n)$ 阶的列满秩实矩阵, $\boldsymbol{b}$ 是 m 维实向量, 即 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}_n^{m\times n}$, $\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}^m$. 于是, 最小二乘问题 (5.38) 有唯一的最小二乘解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$. 这里所考虑的迭代算法基于最小二乘问题的法方程

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}, \tag{5.39}$$

或基于其 KKT 方程

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_m & \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r} \\ \boldsymbol{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix}. \tag{5.40}$$

§5.4.1 基于法方程的矩阵分裂迭代法

由于 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 是列满秩的, 因此, 原则上讲, 任何适用于求解对称正定方程组的迭代方法都可用于求解最小二乘问题的法方程 (5.39), 从而得到相应的求解最小二乘问题 (5.38) 的迭代算法.

为了方便起见, 将 $\boldsymbol{A}$ 按列分块为 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n]$, 并记 $d_i = \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_i$, $i = 1, 2, \cdots, n$. $\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n)$. 于是可将矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 分裂为

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}, \tag{5.41}$$

这里 $-\boldsymbol{L}$ 是其严格下三角部分.

1. Jacobi 迭代法

在分裂 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{M} - \boldsymbol{N}$ 中, 令 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{D}$, $\boldsymbol{N} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$, 则得到 Jacobi 迭代格式为

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{D}^{-1}\left[(\boldsymbol{D} - \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}\right], \quad k = 0, 1, \cdots, \tag{5.42}$$

或等价地, 有

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}), \quad k = 0, 1, \cdots. \tag{5.43}$$

显然, Jacobi 迭代法的迭代矩阵为 $\boldsymbol{G}_J = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$, 且迭代过程不需要显式地计算 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$.

在实际计算中, 可以对每个分量进行迭代. 令 $\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}$, 执行下面的算法:

$\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)}$; $k = 0$;

while $(\|\boldsymbol{r}^{(k)}\|_2/\|\boldsymbol{r}^{(0)}\|_2 \leqslant \varepsilon)$

for $i = 1 : n$

$$d_i = \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{a}_i;$$

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{r}^{(k)} / d_i;$$

end

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k+1)};$$

$$k = k + 1;$$

end

Jacobi 迭代法的 MATLAB 程序如下:

```
function [x,fval,k,time]=nls_jacobi(A,b,x,tol,max_it)
%Jacobi算法求解法方程A'Ax=A'b
tic; n=size(A,2); r=b-A*x;
d=zeros(n,1); nr=norm(A'*r); k=0;
for i=1:n
```

```
    d(i)=A(:,i)'*A(:,i);
end
while (k<=max_it)
    k=k+1;
    for i=1:n
       x(i)=x(i)+A(:,i)'*r/d(i);
    end
    r=b-A*x; s=A'*r;
    if (norm(s)/nr<tol)
        break;
    end
end
fval=norm(r); time=toc;
```

例 5.4 利用 Jacobi 迭代法的 MATLAB 程序, 计算最小二乘问题 $\min \|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2$ 的极小解, 其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \\ 1 & 3 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 3 \\ 8 & 2 & 3 & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix} 9 \\ 12 \\ 11 \\ 13 \\ 17 \\ 15 \\ 19 \end{bmatrix}.$$

取初始点为零向量, 容许误差为 10^{-10}.

解 编写 MATLAB 脚本文件 ex54.m, 并在命令窗口运行之, 迭代 708 次, 得到极小解和极小值

$$\boldsymbol{x}^*=(1.1019, 2.7905, 1.9907, 2.6509)^{\mathrm{T}}, \quad \|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*\|_2=9.2279.$$

2. Gauss–Seidel 迭代法

在分裂 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{M}-\boldsymbol{N}$ 中, 令 $\boldsymbol{M}=\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{N}=\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$, 则得到 Gauss–Seidel 迭代格式为

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{D}^{-1}\left[\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}^{(k+1)}+(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}\right],\quad k=0,1,\cdots, \tag{5.44}$$

或等价地, 有

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}+(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}),\quad k=0,1,\cdots. \tag{5.45}$$

不难发现, Gauss–Seidel 迭代法的迭代矩阵为 $\boldsymbol{G}_S=(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})=(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$, 并需要显式地计算 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$.

为了避免 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的显式计算, 可在第 k 步引入辅助变量 $\boldsymbol{z}_1=$

$\boldsymbol{x}^{(k)}$, $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}^{(k)}$, 则式 (5.44) 可化为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{(k+1)} &= \boldsymbol{D}^{-1}\left[\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}^{(k+1)} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} + (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{L} - \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}^{(k)}\right] \\ &= \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{D}^{-1}\left[\boldsymbol{L}(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}) + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)})\right] \\ &= \boldsymbol{z}_1 + \boldsymbol{D}^{-1}\left[\boldsymbol{L}(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{z}_1) + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_1\right]. \end{aligned} \tag{5.46}$$

详细的算法步骤如下:

$\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)}$; $k = 0$;

while $(\|\boldsymbol{r}^{(k)}\|_2/\|\boldsymbol{r}^{(0)}\|_2 \leqslant \varepsilon)$

$\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}^{(k)}$; $\boldsymbol{z}_1 = \boldsymbol{x}^{(k)}$;

for $i = 1 : n$

$d_i = \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_i$; $\alpha_i = \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_i/d_i$;

$\boldsymbol{z}_{i+1} = \boldsymbol{z}_i + \alpha_i\boldsymbol{e}^{(i)}$;

$\boldsymbol{r}_{i+1} = \boldsymbol{r}_i - \alpha_i\boldsymbol{a}_i$;

end

$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{z}_{n+1};$

$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}_{n+1};$

$k = k + 1;$

end

以上算法不再需要显式地计算 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$.

Gauss–Seidel 迭代法的 MATLAB 程序如下:

```
function [x,fval,k,time]=nls_seidel(A,b,x,tol,max_it)
%Gauss--Seidel算法求解法方程A'Ax=A'b
tic;n=size(A,2);
r=b-A*x;d=zeros(n,1);
nr=norm(A'*r);k=0;E=eye(n);
for (i=1:n
```


Back
Close

```
    d(i)=A(:,i)'*A(:,i);
end
D=diag(d); Z=[x]; R=[r];
while (k<=max_it)
    k=k+1;
    for i=1:n
        delta=A(:,i)'*R(:,i)/d(i);
        z=Z(:,i)+delta*E(:,i);
        r=R(:,i)-delta*A(:,i);
        Z=[Z,z]; R=[R,r];
    end
    x=Z(:,n+1);r=b-A*x;
    Z=[x];R=[r];
```

```
    if(norm(A'*r)/nr<tol),break;end
end
fval=norm(r); time=toc;
```

例 5.5 利用 Gauss–Seidel 迭代法的 MATLAB 程序, 计算例 5.4 中的最小二乘问题 $\min\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2$ 的极小解. 取初始点为零向量, 容许误差为 10^{-10}.

解 编写 MATLAB 脚本文件 ex55.m, 并在命令窗口运行之, 迭代 19 次, 得到极小解和极小值

$$\boldsymbol{x}^* = (1.1019, 2.7905, 1.9907, 2.6509)^{\mathrm{T}},$$

$$\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*\|_2 = 9.2279.$$

3. SOR 迭代法

在分裂 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{M} - \boldsymbol{N}$ 中, 令

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{\omega}(\boldsymbol{D} - \omega\boldsymbol{L}),\ \boldsymbol{N} = \frac{1}{\omega}\big[(1-\omega)\boldsymbol{D} + \omega\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}})\big],\ \ \omega \neq 0,$$

则得到 SOR 迭代格式为

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \omega\boldsymbol{D}^{-1}\big(\boldsymbol{L}\boldsymbol{x}^{(k+1)}+\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^{(k)}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}\big)+(1-\omega)\boldsymbol{x}^{(k)},\ \ k=0,1,\cdots, \tag{5.47}$$

式中: ω 为松弛因子. 或等价地, 有

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)}+\omega\boldsymbol{D}^{-1}\big[\boldsymbol{L}(\boldsymbol{x}^{(k+1)}-\boldsymbol{x}^{(k)})+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)})\big],\ \ k=0,1,\cdots. \tag{5.48}$$

上述迭代法也需要显式地计算 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$, 其迭代矩阵为 $\boldsymbol{G}_\omega = (\boldsymbol{D} - \omega\boldsymbol{L})^{-1}\big[(1-\omega)\boldsymbol{D} + \omega\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\big)$.

同样, 为了避免显式计算 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$, 可在第 k 步引入辅助变量

$\boldsymbol{z}_1 = \boldsymbol{x}^{(k)}$, $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}^{(k)}$, 则式 (5.47) 可化为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{(k+1)} &= \boldsymbol{x}^{(k)} + \omega \boldsymbol{D}^{-1}\left[\boldsymbol{L}(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}) + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)})\right] \\ &= \boldsymbol{z}_1 + \omega \boldsymbol{D}^{-1}\left[\boldsymbol{L}(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{z}_1) + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_1\right]. \qquad (5.49)\end{aligned}$$

详细的算法步骤如下:

$\boldsymbol{r}^{(0)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)}$; $k = 0$;

while $(\|\boldsymbol{r}^{(k)}\|_2/\|\boldsymbol{r}^{(0)}\|_2 \leqslant \varepsilon)$

$\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}^{(k)}$; $\boldsymbol{z}_1 = \boldsymbol{x}^{(k)}$;

for $i = 1 : n$

$d_i = \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}_i$; $\alpha_i = \omega \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_i/d_i$;

$\boldsymbol{z}_{i+1} = \boldsymbol{z}_i + \alpha_i \boldsymbol{e}^{(i)}$;

$\boldsymbol{r}_{i+1} = \boldsymbol{r}_i - \alpha_i \boldsymbol{a}_i$;

end

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{z}_{n+1},\ \boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}_{n+1};$$

$$k = k + 1;$$

end

注 5.4 关于上述三种迭代法的收敛性定理, 跟第 3 章中求解线性方程组的 Jacobi 迭代法、Gauss–Seidel 迭代法和 SOR 迭代法相类似, 只需将此处的 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$ 分别视作方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 中的 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 即可得到类似的结论.

SOR **迭代法的** MATLAB **程序如下**:

```
function [x,fval,k,time]=nls_sor(A,b,w,x,tol,max_it)
%SOR迭代法求解法方程A'Ax=A'b
tic;n=size(A,2);r=b-A*x;d=zeros(n,1);
nr=norm(A'*r);k=0; E=eye(n);
for(i=1:n),d(i)=A(:,i)'*A(:,i);end
```

```
D=diag(d);Z=[x];R=[r];
while (k<=max_it)
    k=k+1;
    for i=1:n
        delta=w*A(:,i)'*R(:,i)/d(i);
        z=Z(:,i)+delta*E(:,i);
        r=R(:,i)-delta*A(:,i);
        Z=[Z,z]; R=[R,r];
    end
    x=Z(:,n+1);r=b-A*x;Z=[x];R=[r];
    if(norm(A'*r)/nr<tol),break;end
end
fval=norm(r);time=toc;
```


Back
Close

例 5.6 利用 SOR 迭代法的 MATLAB 程序, 计算最小二乘问题 $\min \|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2$ 的极小解, 其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 1 & 23.73 & 5.49 & 1.21 \\ 1 & 22.34 & 4.32 & 1.35 \\ 1 & 28.84 & 5.04 & 1.92 \\ 1 & 27.67 & 4.72 & 1.49 \\ 1 & 20.83 & 5.35 & 1.56 \\ 1 & 22.27 & 4.27 & 1.50 \\ 1 & 27.57 & 5.25 & 1.85 \\ 1 & 28.01 & 4.62 & 1.51 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix} 15.02 \\ 12.62 \\ 14.86 \\ 13.98 \\ 15.91 \\ 12.47 \\ 15.80 \\ 14.32 \end{bmatrix}.$$

取初始点为零向量, 松弛因子 $\omega=1.06$, 容许误差为 10^{-6}.

解 编写 MATLAB 脚本文件 ex56.m, 并在命令窗口运行之, 迭

代 1134 次, 得到极小解和极小值

$$\boldsymbol{x}^* = (-0.0054, 0.0169, 2.4468, 1.2954)^{\mathrm{T}},$$

$$\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*\|_2 = 0.9959.$$

§5.4.2 基于法方程的共轭梯度法

由于 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}\,(m \geqslant n)$ 列满秩, 故最小二乘问题的法方程 (5.39) 是对称正定方程组. 因此, 法方程 (5.39) 等价于极小化问题

$$\min f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{x} - (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}. \tag{5.50}$$

事实上, $f(\boldsymbol{x})$ 的梯度为

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b},$$

且对任意给定的非零向量 $\boldsymbol{p}$ 和实数 α, 有

$$f(\boldsymbol{x}+\alpha\boldsymbol{p}) = f(\boldsymbol{x}) + \alpha\nabla f(\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p} + \frac{1}{2}\alpha^2\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}.$$

若 $\boldsymbol{x}^*$ 是法方程 (5.39) 的解, 则有 $\nabla f(\boldsymbol{x}^*)=\mathbf{0}$. 因此, 对任意非零向量 $\boldsymbol{p}\in\mathbb{R}^n$, 有

$$f(\boldsymbol{x}^*+\alpha\boldsymbol{p})\begin{cases}>f(\boldsymbol{x}^*), & \alpha\neq 0,\\ =f(\boldsymbol{x}^*), & \alpha=0.\end{cases}$$

故 $\boldsymbol{x}^*$ 是 $f(\boldsymbol{x})$ 的极小点. 反之, 因 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 对称正定, 可知 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\mathbb{R}^n$ 中有唯一的极小点. 若 $\boldsymbol{x}^*$ 是 $f(\boldsymbol{x})$ 的极小点, 则必有 $\nabla f(\boldsymbol{x}^*)=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^*-\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}=\mathbf{0}$, 即 $\boldsymbol{x}^*$ 是法方程 (5.39) 的解.

类似于用共轭梯度法求解对称正定方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的思想, 设 $\boldsymbol{x}^{(0)}\in\mathbb{R}^n$ 是任意给定的一个初始向量, 对于 $k=0,1,2,\cdots$, 从 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 出发, 沿方向 $\boldsymbol{p}^{(k)}$ 求函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在直线 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha\boldsymbol{p}^{(k)}$ 上的极小点, 得

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)}=\boldsymbol{x}^{(k)}+\alpha_k\boldsymbol{p}^{(k)},\quad \boldsymbol{r}^{(k)}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}, \qquad (5.51)$$

$$\boldsymbol{s}^{(k)}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k)},\quad \alpha_k=\frac{\left(\boldsymbol{s}^{(k)},\boldsymbol{p}^{(k)}\right)}{\left(\boldsymbol{p}^{(k)},\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}\right)}, \tag{5.52}$$

称向量 $\boldsymbol{p}^{(k)}$ 为*搜索方向*. 若向量组 $\boldsymbol{p}^{(0)},\boldsymbol{p}^{(1)},\cdots,\boldsymbol{p}^{(k-1)}$ 满足

$$\left(\boldsymbol{p}^{(i)},\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(j)}\right)=0,\ i\neq j, \tag{5.53}$$

且 $\boldsymbol{p}^{(k)}\neq\mathbf{0}$, $k=0,1,\cdots,n-1$, 则称向量组 $\{\boldsymbol{p}^{(k)}\}$ 为 $\mathbb{R}^n$ 中关于 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的一个共轭向量组, 称迭代法 (5.51) 为*共轭方向法*. 特别地, 若取 $\boldsymbol{p}^{(0)}=\boldsymbol{s}^{(0)}$,

$$\boldsymbol{p}^{(k+1)}=\boldsymbol{s}^{(k+1)}+\beta_k\boldsymbol{p}^{(k)},\quad \beta_k=-\frac{\left(\boldsymbol{s}^{(k+1)},\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}\right)}{\left(\boldsymbol{p}^{(k)},\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}\right)}, \tag{5.54}$$

则称为*共轭梯度法*.

由式 (5.51)、式 (5.52) 及式 (5.54) 可知, 若存在 $k\geqslant 0$, 使得 $\boldsymbol{s}^{(k)}=\mathbf{0}$, 则 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 为最小二乘问题的解, 且有 $\alpha_k=\beta_k=0$, $\boldsymbol{s}^{(k+1)}=\boldsymbol{p}^{(k+1)}=\mathbf{0}$. 此外, 在上述的共轭梯度法中每次迭代需要计

算 4 次矩阵与向量的乘法, 因此有必要对 α_k 和 β_k 的计算公式进行化简.

定理 5.6 在共轭梯度法 (5.51)、(5.52) 和 (5.54) 中, 若 $k>0$, $\boldsymbol{s}^{(k)} \neq \mathbf{0}$, 则有

$$\begin{cases} (\boldsymbol{s}^{(k)}, \boldsymbol{s}^{(i)}) = (\boldsymbol{s}^{(k)}, \boldsymbol{p}^{(i)}) = (\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(i)}) = 0, \quad 0 \leqslant i < k, \\ (\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{s}^{(i)}) = (\boldsymbol{s}^{(k)}, \boldsymbol{s}^{(k)}), \quad 0 \leqslant i \leqslant k. \end{cases} \tag{5.55}$$

证明 由定理的条件, 有 $\alpha_i \neq 0, i=0,1,\cdots,k$. 根据迭代公式, 得

$$\begin{cases} \boldsymbol{s}^{(k+1)} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k+1)}) = \boldsymbol{s}^{(k)} - \alpha_k \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}, \\ \boldsymbol{p}^{(k+1)} = \boldsymbol{s}^{(k+1)} + \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)} = \boldsymbol{s}^{(k)} - \alpha_k \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)} + \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)}. \end{cases} \tag{5.56}$$

下面用归纳法证明定理的结论. 注意到

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{s}^{(1)}, \boldsymbol{s}^{(0)}) &= (\boldsymbol{s}^{(1)}, \boldsymbol{p}^{(0)}) = (\boldsymbol{s}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(0)}) - \alpha_0(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{p}^{(0)}) = 0, \\
(\boldsymbol{p}^{(1)}, \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}) &= (\boldsymbol{s}^{(1)}, \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}) + \beta_0(\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}) = 0, \\
(\boldsymbol{p}^{(1)}, \boldsymbol{s}^{(0)}) &= (\boldsymbol{p}^{(1)}, \boldsymbol{s}^{(1)} + \alpha_0\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(0)}) = (\boldsymbol{p}^{(1)}, \boldsymbol{s}^{(1)}) \\
&= (\boldsymbol{s}^{(1)} + \beta_0\boldsymbol{p}^{(0)}, \boldsymbol{s}^{(1)}) = (\boldsymbol{s}^{(1)}, \boldsymbol{s}^{(1)}),
\end{aligned}
$$

即 $k=1$ 时结论成立. 现假定一直到 $k\,(>1)$ 时, 结论成立. 则

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{s}^{(k+1)}, \boldsymbol{p}^{(k)}) &= (\boldsymbol{s}^{(k)}, \boldsymbol{p}^{(k)}) - \alpha_k(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{p}^{(k)}) = 0, \\
(\boldsymbol{p}^{(k+1)}, \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}) &= (\boldsymbol{s}^{(k+1)}, \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}) + \beta_k(\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}) = 0, \\
(\boldsymbol{s}^{(k+1)}, \boldsymbol{s}^{(k)}) &= (\boldsymbol{s}^{(k+1)}, \boldsymbol{p}^{(k)} - \beta_{k-1}\boldsymbol{p}^{(k-1)}) = -\beta_{k-1}(\boldsymbol{s}^{(k+1)}, \boldsymbol{p}^{(k-1)}) \\
&= -\beta_{k-1}(\boldsymbol{s}^{(k)} - \alpha_k\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}, \boldsymbol{p}^{(k-1)}) = 0.
\end{aligned}
$$

当 $i<k$ 时, 有

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{s}^{(k+1)},\boldsymbol{p}^{(i)}) &= (\boldsymbol{s}^{(k)},\boldsymbol{p}^{(i)})-\alpha_k(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)},\boldsymbol{p}^{(i)})=0,\\
(\boldsymbol{p}^{(k+1)},\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(i)}) &= (\boldsymbol{s}^{(k+1)},\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(i)})+\beta_k(\boldsymbol{p}^{(k)},\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(i)})\\
&= (\boldsymbol{s}^{(k+1)},\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(i)})=(\boldsymbol{s}^{(k+1)},(\boldsymbol{s}^{(i)}-\boldsymbol{s}^{(i+1)})/\alpha_i)=0,\\
(\boldsymbol{s}^{(k+1)},\boldsymbol{s}^{(i)}) &= (\boldsymbol{s}^{(k+1)},\boldsymbol{p}^{(i)}-\beta_{i-1}\boldsymbol{p}^{(i-1)})=-\beta_{i-1}(\boldsymbol{s}^{(k+1)},\boldsymbol{p}^{(i-1)})\\
&= -\beta_{i-1}(\boldsymbol{s}^{(k)}-\alpha_k\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)},\boldsymbol{p}^{(i-1)})=0.
\end{aligned}
$$

又当 $i\leqslant k+1$ 时, 有

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{p}^{(k+1)},\boldsymbol{s}^{(i)}) &= \left(\boldsymbol{p}^{(k+1)},\boldsymbol{s}^{(k+1)}+\sum_{l=i}^{k}\alpha_l\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(l)}\right)=(\boldsymbol{p}^{(k+1)},\boldsymbol{s}^{(k+1)})\\
&= (\boldsymbol{s}^{(k+1)}+\beta_k\boldsymbol{p}^{(k)},\boldsymbol{s}^{(k+1)})=(\boldsymbol{s}^{(k+1)},\boldsymbol{s}^{(k+1)}).
\end{aligned}
$$

由归纳法原理, 定理得证. $\square$

Back
Close

利用式 (5.56) 的第 1 式, 当 $\alpha_k \neq 0$ 时, 有

$$A^{\mathrm{T}} A p^{(k)} = \frac{s^{(k)} - s^{(k+1)}}{\alpha_k},$$

代入 α_k 和 β_k 的表达式并化简, 得

$$\alpha_k = \frac{\|s^{(k)}\|_2^2}{\|Ap^{(k)}\|_2^2}, \quad \beta_k = \frac{\|s^{(k+1)}\|_2^2}{\|s^{(k)}\|_2^2}. \tag{5.57}$$

算法 5.4 (CGLS) 给定矩阵 $A \in \mathbb{R}_n^{m\times n}$, 向量 $b \in \mathbb{R}^m$ 和容许误差 $\varepsilon > 0$. 本算法计算向量 $x^{(k)}$, 使得 $\|s^{(k)}\|_2/\|s^{(0)}\|_2 \leqslant \varepsilon$, 其中 $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$, $s^{(k)} = A^{\mathrm{T}} r^{(k)}$.

取初始向量 $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$;

计算 $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$; $p^{(0)} = s^{(0)} = A^{\mathrm{T}} r^{(0)}$; $\gamma_0 = \|s^{(0)}\|_2^2$; $k = 0$;

while $(\|s^{(k)}\|_2/\|s^{(0)}\|_2 \leqslant \varepsilon)$

$\boldsymbol{q}^{(k)} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}^{(k)}$; $\alpha_k = \gamma_k / \|\boldsymbol{q}^{(k)}\|_2^2$;

$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha_k \boldsymbol{p}^{(k)}$;

$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha_k \boldsymbol{q}^{(k)}$; $\boldsymbol{s}^{(k+1)} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{r}^{(k+1)}$;

$\gamma_{k+1} = \|\boldsymbol{s}^{(k+1)}\|_2^2$; $\beta_k = \gamma_{k+1} / \gamma_k$;

$\boldsymbol{p}^{(k+1)} = \boldsymbol{s}^{(k+1)} + \beta_k \boldsymbol{p}^{(k)}$;

$k = k + 1$;

end

算法 5.4 的有限终止性、收敛性和收敛速度的分析与求解对称正定方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的共轭梯度法相类似, 此处不再赘述. 此外, 不难发现算法 5.4 的每次迭代已经减少到只需计算两次矩阵与向量的乘法.

算法 5.4 的 MATLAB 程序如下:

```
function [x,fval,k,time]=nls_cg(A,b,x,tol,max_it)
%CG算法求解法方程A'Ax=A'b
tic; n=size(A,2); r=b-A*x;
s=A'*r; p=s; gama=s'*s;
nr=norm(s); k=0;
while (k<=max_it)
    k=k+1; q=A*p; alpha=gama/(q'*q);
    x=x+alpha*p; r=r-alpha*q; s=A'*r;
    if (norm(s)/nr<tol), break; end
    gama1=s'*s; beta=gama1/gama;
    p=s+beta*p; gama=gama1;
end
fval=norm(r); time=toc;
```

例 5.7 利用 CG 迭代法的 MATLAB 程序, 计算例 5.6 中的最小二乘问题 $\min \|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2$ 的极小解, 并与 SOR 迭代法进行比较 (取初始点为零向量, 松弛因子 $\omega = 1.06$, 容许误差 $\varepsilon = 10^{-10}$).

解 编写 MATLAB 脚本文件 ex57.m, 并在命令窗口运行之, 得到数值结果如表 5.1 所示.

表 5.1 CG 法与 SOR 法的数值结果

算法	迭代次数	CPU时间	极小解	极小值
SOR	2889	0.2275	$(-0.0309, 0.0171, 2.4509, 1.2954)^{\mathrm{T}}$	0.9959
CG	5	0.0031	$(-0.0309, 0.0171, 2.4509, 1.2954)^{\mathrm{T}}$	0.9959

§5.4.3 基于 KKT 方程的 SOR 类迭代法

由于 SOR 迭代法要求方程组系数矩阵的对角元均不为零, 故不能直接将 SOR 迭代法用于求解最小二乘问题 (5.38) 的 KKT 方

程 (5.40), 但可以通过适当的等价变形使之满足 SOR 迭代法的条件.

事实上, KKT 方程 (5.40) 等价于

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{I}_m \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{r} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix}. \tag{5.58}$$

由于 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}_n^{m\times n}$, 不失一般性, 可将 $\boldsymbol{A}$ 进行如下分块:

$$\boldsymbol{A} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1 \\ \boldsymbol{A}_2 \end{bmatrix} \begin{array}{l} n \\ m-n \end{array} \end{array}, \tag{5.59}$$

式中: $\boldsymbol{A}_1 \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 为非奇异阵. 再将 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 进行相应的分块, 即

$$\boldsymbol{r} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{v} \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \end{bmatrix},$$

Back
Close

式中: $\boldsymbol{v}, \boldsymbol{b}_1 \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{w}, \boldsymbol{b}_2 \in \mathbb{R}^{m-n}$. 则式 (5.58) 变成

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{I}_n & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{m-n} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{v} \\ \boldsymbol{w} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix}. \tag{5.60}$$

式 (5.60) 可进一步等价变形为

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_n \\ \boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{I}_{m-n} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{w} \\ \boldsymbol{v} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix}. \tag{5.61}$$

记

$$\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_n \\ \boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{I}_{m-n} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{w} \\ \boldsymbol{v} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix},$$

则方程组 (5.61) 可写成

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{c}. \tag{5.62}$$

由于 $\boldsymbol{A}_1$ 是非奇异的, 不难验证矩阵 $\boldsymbol{B}$ 也是非奇异的.
现按照矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的自然分块, 有

$$\boldsymbol{D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{m-n} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\end{bmatrix},\ \boldsymbol{L}=-\begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix},\ \boldsymbol{U}=-\begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_n\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}. \tag{5.63}$$

以及

$$\mathcal{L}=\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\\ -\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & -\boldsymbol{A}_1^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix},$$

$$\mathcal{U}=\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & -\boldsymbol{A}_1^{-1}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}. \tag{5.64}$$

由此, 可得以下结论:

(1) Jacobi 迭代格式为

$$\boldsymbol{y}^{(k+1)} = \mathcal{G}_J \boldsymbol{y}^{(k)} + \boldsymbol{f}_J, \tag{5.65}$$

式中: 迭代矩阵 $\mathcal{G}_J$ 和右端向量 $\boldsymbol{f}_J$ 分别为

$$\mathcal{G}_J = \mathcal{L}+\mathcal{U} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & -\boldsymbol{A}_1^{-1} \\ -\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & -(\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{A}_1^{-1})^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}, \ \boldsymbol{f}_J = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{c} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix}. \tag{5.66}$$

详细的迭代格式为

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{A}_1^{-1}(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{v}^{(k)}), \\ \boldsymbol{w}^{(k+1)} = \boldsymbol{b}_2 - \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x}^{(k)}, \qquad k = 0, 1, 2, \cdots . \\ \boldsymbol{v}^{(k+1)} = -\boldsymbol{A}_1^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}^{(k)}, \end{cases} \tag{5.67}$$

此外, 若记 $\boldsymbol{A}_3 = \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{A}_1^{-1}$, 直接计算, 得

$$\mathcal{G}_J^3 = -\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{A}_1^{-1} \end{bmatrix}$$

$$= -\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_3\boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_3\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_3 \end{bmatrix}. \tag{5.68}$$

(2) SOR 迭代格式为

$$\boldsymbol{y}^{(k+1)} = \mathcal{G}_\omega \boldsymbol{y}^{(k)} + \boldsymbol{f}_\omega, \tag{5.69}$$

式中: 迭代矩阵 $\mathcal{G}_\omega$ 和右端向量 $\boldsymbol{f}_\omega$ 分别为

$$\mathcal{G}_\omega = (\boldsymbol{I} - \omega\mathcal{L})^{-1}\big[(1-\omega)\boldsymbol{I} + \omega\mathcal{U}\big], \quad \boldsymbol{f}_\omega = \omega(\boldsymbol{I} - \omega\mathcal{L})^{-1}\boldsymbol{f}_J. \tag{5.70}$$

Back
Close

仍记 $\boldsymbol{A}_3=\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{A}_1^{-1}$, 直接计算, 得

$$
\begin{aligned}
\mathcal{G}_\omega &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ \omega\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \omega\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} (1-\omega)\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & -\omega\boldsymbol{A}_1^{-1} \\ \boldsymbol{O} & (1-\omega)\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & (1-\omega)\boldsymbol{I} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ -\omega\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \omega^2\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & -\omega\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (1-\omega)\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & -\omega\boldsymbol{A}_1^{-1} \\ \boldsymbol{O} & (1-\omega)\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & (1-\omega)\boldsymbol{I} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} (1-\omega)\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & -\omega\boldsymbol{A}_1^{-1} \\ -\omega(1-\omega)\boldsymbol{A}_2 & (1-\omega)\boldsymbol{I} & \omega^2\boldsymbol{A}_3 \\ \omega(1-\omega)^2\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & -\omega(1-\omega)\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} & (1-\omega)\boldsymbol{I}-\omega^3\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_3 \end{bmatrix} \\
&:= (1-\omega)\boldsymbol{I}+\mathcal{K}_\omega,
\end{aligned}
$$

这里

$$\mathcal{K}_\omega = \begin{bmatrix} \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & -\omega \boldsymbol{A}_1^{-1} \\ -\omega(1-\omega)\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{O} & \omega^2 \boldsymbol{A}_3 \\ \omega(1-\omega)^2 \boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}_2 & -\omega(1-\omega)\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} & -\omega^3 \boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}_3 \end{bmatrix},$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{f}_\omega &= \omega \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ \omega \boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \omega \boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix} \\ &= \omega \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ -\omega \boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \omega^2 \boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A}_2 & -\omega \boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \omega \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b}_1 \\ \omega(\boldsymbol{b}_2 - \omega \boldsymbol{A}_3 \boldsymbol{b}_1) \\ -\omega^2 \boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}_2 - \omega \boldsymbol{A}_3 \boldsymbol{b}_1) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

则详细的 SOR 迭代格式为

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{x}^{(k+1)} = (1-\omega)\boldsymbol{x}^{(k)} + \omega \boldsymbol{A}_1^{-1}(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{v}^{(k)}), \\
\boldsymbol{w}^{(k+1)} = (1-\omega)\boldsymbol{w}^{(k)} - \omega(1-\omega)\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x}^{(k)} - \omega^2\boldsymbol{A}_3(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{v}^{(k)}) + \omega\boldsymbol{b}_2, \\
\boldsymbol{v}^{(k+1)} = (1-\omega)\boldsymbol{v}^{(k)} + \omega(1-\omega)^2\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2\boldsymbol{x}^{(k)} - \omega(1-\omega)\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}^{(k)} \\
\qquad\qquad -\omega^2\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\left[\boldsymbol{b}_2 - \omega\boldsymbol{A}_3(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{v}^{(k)})\right], \quad k = 0, 1, 2, \cdots .
\end{cases}
\tag{5.71}
$$

特别地, 在上式中取 $\omega = 1$, 可得 Gauss–Seidel 迭代格式:

$$
\begin{cases}
\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{A}_1^{-1}(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{v}^{(k)}), \\
\boldsymbol{w}^{(k+1)} = \boldsymbol{b}_2 - \boldsymbol{A}_3(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{v}^{(k)}), \\
\boldsymbol{v}^{(k+1)} = -\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\left[\boldsymbol{b}_2 - \boldsymbol{A}_3(\boldsymbol{b}_1 - \boldsymbol{v}^{(k)})\right], \quad k = 0, 1, 2, \cdots .
\end{cases}
\tag{5.72}
$$

(3) SSOR 的迭代矩阵 $\mathcal{H}_\omega$ 和右端向量 $\boldsymbol{g}_\omega$ 分别为

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_\omega &= (\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{U})^{-1}\left[(1-\omega)\boldsymbol{I}+\omega\mathcal{L}\right](\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{L})^{-1}\left[(1-\omega)\boldsymbol{I}+\omega\mathcal{U}\right]\\ &= (\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{U})^{-1}(\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{L})^{-1}\left[(1-\omega)\boldsymbol{I}+\omega\mathcal{L}\right]\left[(1-\omega)\boldsymbol{I}+\omega\mathcal{U}\right],\end{aligned} \tag{5.73}$$

$$\boldsymbol{g}_\omega = \omega(2-\omega)(\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{U})^{-1}(\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{L})^{-1}\boldsymbol{f}_J. \tag{5.74}$$

显然, $\mathcal{H}_\omega$ 相似于

$$\begin{aligned}\widehat{\mathcal{H}}_\omega &= (\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{L})^{-1}\left[(1-\omega)\boldsymbol{I}+\omega\mathcal{L}\right]\left[(1-\omega)\boldsymbol{I}+\omega\mathcal{U}\right](\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{U})^{-1}\\ &= (\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{L})^{-1}\left[(1-\omega)\boldsymbol{I}+\omega\mathcal{L}\right](\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{U})^{-1}\left[(1-\omega)\boldsymbol{I}+\omega\mathcal{U}\right]\\ &:= \mathcal{W}(\mathcal{L})\mathcal{W}(\mathcal{U}),\end{aligned} \tag{5.75}$$

这里

$$\mathcal{W}(\mathcal{Z}) = (\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{Z})^{-1}\left[(1-\omega)\boldsymbol{I}+\omega\mathcal{Z}\right]. \tag{5.76}$$

直接计算, 得

$$\mathcal{W}(\mathcal{L}) = \begin{bmatrix} (1-\omega)\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ -\omega(2-\omega)\boldsymbol{A}_2 & (1-\omega)\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \omega^2(2-\omega)\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & -\omega(2-\omega)\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} & (1-\omega)\boldsymbol{I} \end{bmatrix},$$

$$\mathcal{W}(\mathcal{U}) = \begin{bmatrix} (1-\omega)\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & -\omega(2-\omega)\boldsymbol{A}_1^{-1} \\ \boldsymbol{O} & (1-\omega)\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & (1-\omega)\boldsymbol{I} \end{bmatrix}.$$

于是, 有

$$\widehat{\mathcal{H}}_\omega = \mathcal{W}(\mathcal{L})\mathcal{W}(\mathcal{U}) = (1-\omega)^2\boldsymbol{I} + \mathcal{T}_\omega, \tag{5.77}$$

式中:

$$\mathcal{T}_\omega = \begin{bmatrix} \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & -\sigma\boldsymbol{A}_1^{-1} \\ -\sigma\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{O} & \omega^2(2-\omega^2)\boldsymbol{A}_3 \\ \omega\sigma\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & -\sigma\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} & -\omega^2(2-\omega)^2\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_3 \end{bmatrix},$$

这里 $\sigma = \omega(1-\omega)(2-\omega)$.

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{g}_\omega &= \omega(2-\omega)(\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{U})^{-1}(\boldsymbol{I}-\omega\mathcal{L})^{-1}\boldsymbol{f}_J \\
&= \omega(2-\omega)\begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & \omega\boldsymbol{A}_1^{-1} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ \omega\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \omega\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix}^{-1} \boldsymbol{f}_J \\
&= \omega(2-\omega)\begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & -\omega\boldsymbol{A}_1^{-1} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ -\omega\boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \omega^2\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_2 & -\omega\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix} \boldsymbol{f}_J \\
&= \omega(2-\omega)\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{b}_1 + \omega^2\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_3\boldsymbol{b}_1 + \omega^2\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_2 \\ \boldsymbol{b} - \omega\boldsymbol{A}_3\boldsymbol{b}_1 \\ \omega^2\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_3\boldsymbol{b}_1 - \omega\boldsymbol{A}_3^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}_2 \end{bmatrix}.
\end{aligned}
$$

据此即可写出 SSOR 迭代法的迭代格式

$$\boldsymbol{y}^{(k+1)} = \mathcal{T}_{\omega}\boldsymbol{y}^{(k)} + \boldsymbol{g}_{\omega}. \tag{5.78}$$

上述 Jacobi 迭代、SOR 迭代和 SSOR 迭代的收敛性分析可参考文献 [23].

§5.4.4 基于 KKT 方程的 HSS 迭代法

现在考虑最小二乘问题 (5.38) 的 KKT 方程

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r} \\ \boldsymbol{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix} \tag{5.79}$$

的迭代解法. 由于式 (5.79) 的系数矩阵是对称不定的, 为了设计更

有效的迭代算法, 将其改成成如下的等价形式:

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{z} := \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{A} \\ -\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r} \\ \boldsymbol{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix} := \boldsymbol{f}, \tag{5.80}$$

此时的 KKT 矩阵是非奇异的非对称半正定矩阵.

下面将白中治等学者提出的关于非对称正定线性方程组的 HSS (Hermite/skew-Hermite Splitting) 迭代法应用于求解上述 KKT 方程组 (5.80).

选取参数 $\alpha > 0$, 将矩阵 $\boldsymbol{B}$ 分裂成

$$\boldsymbol{B} = (\alpha\boldsymbol{I} + \boldsymbol{H}) - (\alpha\boldsymbol{I} - \boldsymbol{S}) = (\alpha\boldsymbol{I} + \boldsymbol{S}) - (\alpha\boldsymbol{I} - \boldsymbol{H}),$$

式中:

$$\boldsymbol{H} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{S} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A} \\ -\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}.$$

则针对 KKT 方程组 (5.80) 的 HSS 迭代格式为

$$\begin{cases} (\alpha\boldsymbol{I}+\boldsymbol{H})\boldsymbol{z}^{(k+\frac{1}{2})}=(\alpha\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S})\boldsymbol{z}^{(k)}+\boldsymbol{f}, \\ (\alpha\boldsymbol{I}+\boldsymbol{S})\boldsymbol{z}^{(k+1)}=(\alpha\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H})\boldsymbol{z}^{(k+\frac{1}{2})}+\boldsymbol{f}. \end{cases} \tag{5.81}$$

更详细地, 即

$$\begin{cases} \begin{bmatrix} (\alpha+1)\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \alpha\boldsymbol{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}^{(k+\frac{1}{2})} \\ \boldsymbol{x}^{(k+\frac{1}{2})} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha\boldsymbol{I} & -\boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} & \alpha\boldsymbol{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}^{(k)} \\ \boldsymbol{x}^{(k)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix}, \\ \begin{bmatrix} \alpha\boldsymbol{I} & \boldsymbol{A} \\ -\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} & \alpha\boldsymbol{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}^{(k+1)} \\ \boldsymbol{x}^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\alpha-1)\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \alpha\boldsymbol{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{r}^{(k+\frac{1}{2})} \\ \boldsymbol{x}^{(k+\frac{1}{2})} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{b} \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix}. \end{cases} \tag{5.82}$$

应用 HSS 迭代法 (5.81) 时, 求解两个子问题可采用直接法或内迭代法进行计算. 此外, 不难发现, 迭代法 (5.81) 的迭代矩阵为

$$\mathcal{L}(\alpha)=(\alpha\boldsymbol{I}+\boldsymbol{S})^{-1}(\alpha\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H})(\alpha\boldsymbol{I}+\boldsymbol{H})^{-1}(\alpha\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S}). \tag{5.83}$$

收敛性定理如下.

定理 5.7 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}_n^{m\times n}$, $\sigma_k\,(k=1,2,\cdots,n)$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的(正) 奇异值. 则 HSS 迭代法 (5.82) 的迭代矩阵 $\mathcal{L}(\alpha)$ 有 $m-n$ 重特征值为 $\dfrac{\alpha-1}{\alpha+1}$, 和 $2n$ 个特征值为

$$\frac{1}{(\alpha+1)(\alpha^2+\sigma_k^2)}\left[\alpha(\alpha^2-\sigma_k^2)\pm\sqrt{(\alpha^2+\sigma_k^2)^2-4\alpha^4\sigma_k^2}\right],\quad k=1,2,\cdots,n.$$

因此, 有

$$\rho(\mathcal{L}(\alpha))<1,\quad \forall\ \alpha>0,$$

即 HSS 迭代收敛到 KKT 方程组 (5.79) 的准确解.

证明 由于

$$\alpha\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{H}=\begin{bmatrix}(\alpha\pm1)\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \alpha\boldsymbol{I}\end{bmatrix},\quad \alpha\boldsymbol{I}\pm\boldsymbol{S}=\begin{bmatrix}\alpha\boldsymbol{I} & \pm\boldsymbol{A}\\ \mp\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} & \alpha\boldsymbol{I}\end{bmatrix},$$

且有

$$\alpha \boldsymbol{I}+\boldsymbol{S}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ -\alpha^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha\boldsymbol{I} & \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{S}(\alpha) \end{bmatrix},$$

这里 $\boldsymbol{S}(\alpha)=\alpha\boldsymbol{I}+\dfrac{1}{\alpha}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$. 直接计算, 得

$$\mathcal{L}(\alpha)=\begin{bmatrix} \mathcal{L}_1(\alpha) & \mathcal{L}_2(\alpha) \\ \mathcal{L}_3(\alpha) & \mathcal{L}_4(\alpha) \end{bmatrix},$$

式中:

$$\mathcal{L}_1(\alpha)=\frac{\alpha-1}{\alpha+1}\boldsymbol{I}-\frac{2}{\alpha+1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}(\alpha)^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}},\quad \mathcal{L}_2(\alpha)=-\frac{2\alpha}{\alpha+1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}(\alpha)^{-1},$$

$$\mathcal{L}_3(\alpha)=\frac{2\alpha}{\alpha+1}\boldsymbol{S}(\alpha)^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}},\quad \mathcal{L}_4(\alpha)=-\frac{\alpha-1}{\alpha+1}\boldsymbol{I}+\frac{2\alpha^2}{\alpha+1}\boldsymbol{S}(\alpha)^{-1}.$$

Back
Close

设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{\Sigma}=\operatorname{diag}(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_n),$$

式中: $\boldsymbol{U}\in\mathbb{R}^{m\times m}$, $\boldsymbol{V}\in\mathbb{R}^{n\times n}$ 为正交矩阵. 于是有

$$\boldsymbol{S}(\alpha)=\alpha\boldsymbol{I}+\frac{1}{\alpha}\boldsymbol{V}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{V}\left(\alpha\boldsymbol{I}+\frac{1}{\alpha}\boldsymbol{\Sigma}^2\right)\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}},$$

及

$$\mathcal{L}_1(\alpha)=\boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\frac{\alpha-1}{\alpha+1}\boldsymbol{I}-\frac{2}{\alpha+1}(\alpha\boldsymbol{I}+\frac{1}{\alpha}\boldsymbol{\Sigma}^2)^{-1}\boldsymbol{\Sigma}^2 & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \frac{\alpha-1}{\alpha+1}\boldsymbol{I}\end{bmatrix}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}},$$

$$\mathcal{L}_2(\alpha)=\boldsymbol{U}\begin{bmatrix}-\frac{2\alpha}{\alpha+1}\boldsymbol{\Sigma}(\alpha\boldsymbol{I}+\frac{1}{\alpha}\boldsymbol{\Sigma}^2)^{-1}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}},$$

$$\mathcal{L}_3(\alpha) = \boldsymbol{V}\left[\ \frac{2\alpha}{\alpha+1}\boldsymbol{\Sigma}\big(\alpha\boldsymbol{I}+\frac{1}{\alpha}\boldsymbol{\Sigma}^2\big)^{-1},\ \boldsymbol{O}\ \right]\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}},$$

$$\mathcal{L}_4(\alpha) = \boldsymbol{V}\left[-\frac{\alpha-1}{\alpha+1}\boldsymbol{I}+\frac{2\alpha^2}{\alpha+1}\big(\alpha\boldsymbol{I}+\frac{1}{\alpha}\boldsymbol{\Sigma}^2\big)^{-1}\right]\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}.$$

令

$$\boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{U} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{V} \end{bmatrix},$$

则 $\mathcal{L}(\alpha)$ 经过正交相似变换 $\widetilde{\mathcal{L}}(\alpha) = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\mathcal{L}(\alpha)\boldsymbol{Q}$ 后, 化为

$$\widetilde{\mathcal{L}}(\alpha) = \begin{bmatrix} \frac{\alpha-1}{\alpha+1}\boldsymbol{I}-\frac{2}{\alpha+1}\big(\alpha\boldsymbol{I}+\frac{1}{\alpha}\boldsymbol{\Sigma}^2\big)^{-1}\boldsymbol{\Sigma}^2 & \boldsymbol{O} & -\frac{2\alpha}{\alpha+1}\boldsymbol{\Sigma}\big(\alpha\boldsymbol{I}+\frac{1}{\alpha}\boldsymbol{\Sigma}^2\big)^{-1} \\ \boldsymbol{O} & \frac{\alpha-1}{\alpha+1}\boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \frac{2\alpha}{\alpha+1}\boldsymbol{\Sigma}\big(\alpha\boldsymbol{I}+\frac{1}{\alpha}\boldsymbol{\Sigma}^2\big)^{-1} & \boldsymbol{O} & -\frac{\alpha-1}{\alpha+1}\boldsymbol{I}+\frac{2\alpha^2}{\alpha+1}\big(\alpha\boldsymbol{I}+\frac{1}{\alpha}\boldsymbol{\Sigma}^2\big)^{-1} \end{bmatrix},$$

从而可得 $\mathcal{L}(\alpha)$ 有 $m-n$ 重特征值 $\dfrac{\alpha-1}{\alpha+1}$ (显然其绝对值<1), 和

矩阵

$$\mathcal{L}_k(\alpha) = \begin{bmatrix} \dfrac{\alpha-1}{\alpha+1} - \dfrac{2}{\alpha+1}\Big(\alpha+\dfrac{1}{\alpha}\sigma_k^2\Big)^{-1}\sigma_k^2 & -\dfrac{2\alpha}{\alpha+1}\sigma_k\Big(\alpha+\dfrac{1}{\alpha}\sigma_k^2\Big)^{-1} \\ \dfrac{2\alpha}{\alpha+1}\sigma_k\Big(\alpha+\dfrac{1}{\alpha}\sigma_k^2\Big)^{-1} & -\dfrac{\alpha-1}{\alpha+1} + \dfrac{2\alpha^2}{\alpha+1}\Big(\alpha+\dfrac{1}{\alpha}\sigma_k^2\Big)^{-1} \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{(\alpha+1)(\alpha^2+\sigma_k^2)} \begin{bmatrix} (\alpha-1)\alpha^2-(\alpha+1)\sigma_k^2 & -2\alpha^2\sigma_k \\ 2\alpha^2\sigma_k & (\alpha+1)\alpha^2-(\alpha-1)\sigma_k^2 \end{bmatrix}$$

的特征值, $k=1,2,\cdots,n$. 而二阶矩阵 $\mathcal{L}_k(\alpha)$ 的特征方程为

$$\left(\lambda - \frac{(\alpha-1)\alpha^2-(\alpha+1)\sigma_k^2}{(\alpha+1)(\alpha^2+\sigma_k^2)}\right)\left(\lambda - \frac{(\alpha+1)\alpha^2-(\alpha-1)\sigma_k^2}{(\alpha+1)(\alpha^2+\sigma_k^2)}\right) + \frac{4\alpha^4\sigma_k^2}{(\alpha+1)^2(\alpha^2+\sigma_k^2)^2} = 0,$$

化简, 得

$$\lambda^2 - \frac{2\alpha(\alpha^2-\sigma_k^2)}{(\alpha+1)(\alpha^2+\sigma_k^2)}\lambda + \frac{\alpha-1}{\alpha+1} = 0. \tag{5.84}$$

它的两个根为

$$\lambda_{1,2}^{(k)} = \frac{\alpha(\alpha^2-\sigma_k^2) \pm \sqrt{(\alpha^2+\sigma_k^2)^2 - 4\alpha^4\sigma_k^2}}{(\alpha+1)(\alpha^2+\sigma_k^2)}. \tag{5.85}$$

Back
Close

不难验证, 当 $\alpha^2+\sigma_k^2>2\alpha^2\sigma_k$ 时, 有

$$
\begin{aligned}
|\lambda_{1,2}^{(k)}| &\leqslant \frac{1}{(\alpha+1)(\alpha^2+\sigma_k^2)}\left[\alpha|\alpha^2-\sigma_k^2|+\sqrt{(\alpha^2+\sigma_k^2)^2-4\alpha^4\sigma_k^2}\right] \\
&= \frac{\alpha}{\alpha+1}\left[\frac{|\alpha^2-\sigma_k^2|}{\alpha^2+\sigma_k^2}+\sqrt{\frac{1}{\alpha^2}-\frac{4\alpha^2\sigma_k^2}{(\alpha^2+\sigma_k^2)^2}}\right] \\
&< \frac{\alpha}{\alpha+1}\left(1+\frac{1}{\alpha}\right)=1.
\end{aligned}
$$

当 $\alpha^2+\sigma_k^2=2\alpha^2\sigma_k$ 时, 有

$$
|\lambda_{1,2}^{(k)}|=\frac{\alpha|\alpha^2-\sigma_k^2|}{(\alpha+1)(\alpha^2+\sigma_k^2)}\leq\frac{\alpha}{\alpha+1}<1.
$$

当 $\alpha^2+\sigma_k^2<2\alpha^2\sigma_k$ 时, $\lambda_{1,2}^{(k)}$ 为一对共轭复根, 此时有

$$
|\lambda_{1,2}^{(k)}|=\sqrt{\lambda_1^{(k)}\lambda_2^{(k)}}=\frac{|\alpha-1|}{\alpha+1}<1.
$$

综合上述, $\rho(\mathcal{L}(\alpha))<1,\ \forall\ \alpha>0$. 证毕. $\square$

Back
Close

此外, 还可以讨论 HSS 迭代法 (5.81) 中的最优参数 α 的选取, 详细的分析过程可参考文献 [22], 其结论如下.

定理 5.8 设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 列满秩, $\alpha > 0$ 是给定的常数. 若 $\sigma_k\,(k = 1, 2, \cdots, n)$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的正奇异值, $\sigma_{\min} = \min\limits_{1\leqslant k\leqslant n}\{\sigma_k\}$, $\sigma_{\max} = \max\limits_{1\leqslant k\leqslant n}\{\sigma_k\}$, 则解线性方程组 (5.80) 的 HSS 迭代法的最优参数 α 为

$$\alpha^* = \arg\min_{\alpha>0} \rho(\mathcal{L}(\alpha)) = \sqrt{\sigma_{\min}\sigma_{\max}},$$

并且

$$\rho(\mathcal{L}(\alpha^*)) = \frac{\sigma_{\max} - \sigma_{\min}}{\sigma_{\max} + \sigma_{\min}}.$$

下面考虑迭代法 (5.82) 的执行. 这一算法的计算量主要集中在求解第 2 个子方程组, 因为其系数矩阵是一个分块的反对称矩阵. 但由于其对角块的特殊性, 可以将其降阶处理. 具体迭代格式

如下:

$$\begin{cases} \boldsymbol{r}^{(k+\frac{1}{2})} = \dfrac{1}{\alpha+1}\big(\alpha \boldsymbol{r}^{(k)} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{b}\big), \\ \boldsymbol{x}^{(k+\frac{1}{2})} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \dfrac{1}{\alpha}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k)}, \\ \Big(\alpha \boldsymbol{I} + \dfrac{1}{\alpha}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\Big)\boldsymbol{r}^{(k+1)} = (\alpha-1)\boldsymbol{r}^{(k+\frac{1}{2})} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \boldsymbol{b}, \\ \boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k+\frac{1}{2})} + \dfrac{1}{\alpha}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}^{(k+1)}. \end{cases} \tag{5.86}$$

迭代格式 (5.86) 的主要工作量集中在第 3 式, 即求解以 $\alpha \boldsymbol{I} + \dfrac{1}{\alpha}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 为系数矩阵的方程组. 但由于该矩阵是对称正定的, 故可使用共轭梯度法进行非精确求解, 相应的迭代格式称为非精确 HSS 迭代法 (简记为 IHSS).

IHSS 迭代格式的 MATLAB 程序如下:

```
function [x,fval,k,time]=kkt_ihss(A,b,alpha,x,tol,max_it)
%IHSS算法求解KKT方程r=b-Ax, A'r=0
```

```
if nargin<6, max_it=1000; end
if nargin<5, tol=1.e-6; end
if nargin<4, x=zeros(size(A,2),1); end
tic; m=size(A,1); r=b-A*x;
s=A'*r; nr=norm(s); k=0;
B=alpha*eye(m)+A*A'/alpha;
while (k<=max_it)
    k=k+1;
    r=(alpha*r-A*x+b)/(alpha+1);
    x=x+s/alpha;
    c=(alpha-1)*r-A*x+b;
    r=eq_cg(B,c);  %CG法求解子问题
    s=A'*r; x=x+s/alpha;
```

```
    if (norm(s)/nr<tol), break; end
end
fval=norm(r);
time=toc;
```

例 5.8 利用 HSS 迭代法的 MATLAB 程序，计算例 5.6 中的最小二乘问题 $\min \|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2$ 的极小解，并与 CG 迭代法进行比较 (取初始点为零向量，参数 $\alpha=6.0$，容许误差 $\varepsilon=10^{-10}$).

解 编写 MATLAB 脚本文件 ex58.m，并在命令窗口运行之，得到数值结果如表 5.2 所示.

表 5.2 IHSS, HSS 与 CG 方法的数值结果

算法	迭代次数	CPU时间	极小解	极小值
IHSS	741	0.0003	$(-0.0303, 0.0171, 2.4508, 1.2953)^{\mathrm{T}}$	0.9959
HSS	743	0.0159	$(-0.0303, 0.0171, 2.4508, 1.2953)^{\mathrm{T}}$	0.9959
CG	5	0.0031	$(-0.0309, 0.0171, 2.4509, 1.2954)^{\mathrm{T}}$	0.9959