最小二乘问题的求解

邓建松

2022 年 9 月 20 日

复习：数学分析中一个例题

- 题目：给定平面上n个数据点(x_i, y_i), $i = 1, 2, \ldots, n$, 求一条直线$y = ax + b$使得偏差

$$\varphi(a, b) = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2$$

最小

复习：数学分析中一个例题

- 题目：给定平面上n个数据点(x_i, y_i)，$i = 1, 2, \ldots, n$，求一条直线$y = ax + b$使得偏差

$$\varphi(a, b) = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2$$

最小

- 通过对$\varphi(a, b)$关于a，b求偏导，并令其等于0，得到关于a，b的线性方程组

复习：数学分析中一个例题

- 题目：给定平面上n个数据点(x_i, y_i), $i = 1, 2, \ldots, n$, 求一条直线$y = ax + b$使得偏差

$$\varphi(a, b) = \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2$$

最小

- 通过对$\varphi(a, b)$关于a, b求偏导，并令其等于0，得到关于a, b的线性方程组
- 系数矩阵可证当x_i互不相等时是非奇异的

答案

- a, b为下述方程组的解：

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i,$$

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i + nb = \sum_{i=1}^{n} y_i.$$

答案

- a, b为下述方程组的解：

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i,$$

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i + nb = \sum_{i=1}^{n} y_i.$$

- 所求直线的方程是

$$\begin{vmatrix} x & y & 1 \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} y_i & n \\ \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i y_i & \sum_{i=1}^{n} x_i \end{vmatrix} = 0.$$

数据拟合

- 最小二乘问题多产生于数据拟合

数据拟合

- 最小二乘问题多产生于数据拟合
  - 给定m个点$t_1, \ldots, t_m$和这m个点上的实验或观测数据$y_1, \ldots, y_m$

数据拟合

- 最小二乘问题多产生于数据拟合
  - 给定m个点$t_1, \dots, t_m$和这m个点上的实验或观测数据$y_1, \dots, y_m$
  - 给定在t_i上取值的n个已知函数

$$\psi_1(t), \dots, \psi_n(t)$$

数据拟合

- 最小二乘问题多产生于数据拟合
  - 给定m个点$t_1, \ldots, t_m$和这m个点上的实验或观测数据$y_1, \ldots, y_m$
  - 给定在t_i上取值的n个已知函数

$$\psi_1(t), \ldots, \psi_n(t)$$

  - 考虑ψ_i的线性组合

$$f(x; t) = x_1\psi_1(t) + \cdots + x_n\psi_n(t)$$

数据拟合

- 最小二乘问题多产生于数据拟合
  - 给定m个点$t_1, \ldots, t_m$和这m个点上的实验或观测数据$y_1, \ldots, y_m$
  - 给定在t_i上取值的n个已知函数
  $$\psi_1(t), \ldots, \psi_n(t)$$
  - 考虑ψ_i的线性组合
  $$f(x; t) = x_1\psi_1(t) + \cdots + x_n\psi_n(t)$$
  - 我们希望在$t_1, \ldots, t_m$上$f(x; t)$能最佳地逼近$y_1, \ldots, y_m$

残量与最佳逼近

- 定义残量

$$r_i(x) = y_i - \sum_{j=1}^{n} x_j \psi_j(t_i), i = 1, \dots, m$$

其中$x = (x_1, \dots, x_n)^T$

残量与最佳逼近

- 定义残量

$$r_i(x) = y_i - \sum_{j=1}^{n} x_j \psi_j(t_i), i = 1, \ldots, m$$

其中$x = (x_1, \ldots, x_n)^T$

- 此问题转化为：估计参数$x_1, \ldots, x_n$，使残量$r_1, \ldots, r_m$尽可能得小

矩阵-向量形式

- 上式的矩阵-向量形式为$r(x) = b - Ax$, 其中

$$
\begin{aligned}
A &= (\psi_j(t_i))_{m\times n} \\
b &= (y_1, \ldots, y_m)^T \\
x &= (x_1, \ldots, x_n)^T \\
r(x) &= (r_1(x), \ldots, r_m(x))^T
\end{aligned}
$$

求解

- $m = n$时，我们可以要求$r(x) = 0$，从而可以用第一章中的方法处理

求解

- $m = n$时，我们可以要求$r(x) = 0$，从而可以用第一章中的方法处理
- 当$m > n$时，一般不可能所有残量都为零，但可以要求$r(x)$在某种范数意义下最小

求解

- $m = n$时，我们可以要求$r(x) = 0$，从而可以用第一章中的方法处理
- 当$m > n$时，一般不可能所有残量都为零，但可以要求$r(x)$在某种范数意义下最小
- 最小二乘问题就是求x使得$r(x)$在2范数意义下最小

定义

- 给定矩阵$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$及向量$b \in \mathbb{R}^m$，确定$x \in \mathbb{R}^n$，使得

$$\|b - Ax\|_2 = \|r(x)\|_2 = \min_{y\in\mathbb{R}^n} \|r(y)\|_2 = \min_{y\in\mathbb{R}^n} \|Ay - b\|_2$$

这就是**最小二乘问题**，简记为LS(Least-Squares)问题，其中$r(x)$称为**残向量**

最小二乘解

- 最小二乘问题的解x又称作线性方程组

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

的最小二乘解

最小二乘解

- 最小二乘问题的解x又称作线性方程组

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

的最小二乘解

- 当$m > n$时，方程组称为超定方程组或矛盾方程组

最小二乘解

- 最小二乘问题的解x又称作线性方程组

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{m\times n}$$

的最小二乘解

- 当$m > n$时，方程组称为超定方程组或矛盾方程组
- 当$m < n$时，方程组称为欠定方程组

LS问题的种类

1. $m = n$:

LS问题的种类

1. $m = n$:
    1. $\operatorname{rank} A = m = n$

LS问题的种类

1. $m = n$:
    1. $\operatorname{rank} A = m = n$
    2. $\operatorname{rank} A = k < m = n$

LS问题的种类

1. $m = n$:
   1. $\operatorname{rank} A = m = n$
   2. $\operatorname{rank} A = k < m = n$
2. $m > n$:

LS问题的种类

1. $m = n$:
   1. $\operatorname{rank} A = m = n$
   2. $\operatorname{rank} A = k < m = n$
2. $m > n$:
   1. $\operatorname{rank} A = n < m$

LS问题的种类

1. $m = n$:
   1. $\operatorname{rank} A = m = n$
   2. $\operatorname{rank} A = k < m = n$
2. $m > n$:
   1. $\operatorname{rank} A = n < m$
   2. $\operatorname{rank} A = k < n < m$

LS问题的种类

1. $m = n$:
    1. $\operatorname{rank} A = m = n$
    2. $\operatorname{rank} A = k < m = n$
2. $m > n$:
    1. $\operatorname{rank} A = n < m$
    2. $\operatorname{rank} A = k < n < m$
3. $m < n$:

LS问题的种类

1. $m = n$:
   1. $\operatorname{rank} A = m = n$
   2. $\operatorname{rank} A = k < m = n$
2. $m > n$:
   1. $\operatorname{rank} A = n < m$
   2. $\operatorname{rank} A = k < n < m$
3. $m < n$:
   1. $\operatorname{rank} A = m < n$

LS问题的种类

1. $m = n$:
    1. $\operatorname{rank} A = m = n$
    2. $\operatorname{rank} A = k < m = n$
2. $m > n$:
    1. $\operatorname{rank} A = n < m$
    2. $\operatorname{rank} A = k < n < m$
3. $m < n$:
    1. $\operatorname{rank} A = m < n$
    2. $\operatorname{rank} A = k < m < n$

概念与记号

- 本章主要讨论(2-1)情形

概念与记号

- 本章主要讨论(2-1)情形
- 设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, A的值域定义为

$$\mathcal{R}(A) = \{y \in \mathbb{R}^m : y = Ax, x \in \mathbb{R}^n\}$$

概念与记号

- 本章主要讨论(2-1)情形
- 设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, A的值域定义为

$$\mathcal{R}(A) = \{y \in \mathbb{R}^m : y = Ax, x \in \mathbb{R}^n\}$$

- $\mathcal{R}(A) = \mathrm{span}(a_1, \ldots, a_n)$, 其中$a_i$为$A$的列向量

概念与记号

- 本章主要讨论(2-1)情形
- 设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, A的值域定义为

$$\mathcal{R}(A) = \{y \in \mathbb{R}^m : y = Ax, x \in \mathbb{R}^n\}$$

- $\mathcal{R}(A) = \mathrm{span}(a_1, \ldots, a_n)$, 其中$a_i$为$A$的列向量
- A的零空间定义为

$$\mathcal{N}(A) = \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = 0\}$$

其维数记为$\mathrm{null}(A)$

解的存在性

- 一个子空间$\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^n$的正交补定义为

$$\mathcal{S}^{\perp} = \{y \in \mathbb{R}^n : y^T x = 0, \forall x \in \mathcal{S}\}$$

解的存在性

- 一个子空间$\mathcal{S} \subset \mathbb{R}^n$的正交补定义为

$$\mathcal{S}^\perp = \{y \in \mathbb{R}^n : y^T x = 0, \forall x \in \mathcal{S}\}$$

- 方程组$Ax = b$的解存在的充分必要条件是

$$\operatorname{rank} A = \operatorname{rank}([A, b])$$

非齐次方程的全部解

- 假设$Ax = b$的解存在，x是其任一给定的解，则方程组的全部解是$x + \mathcal{N}(A)$

非齐次方程的全部解

- 假设$Ax = b$的解存在，x是其任一给定的解，则方程组的全部解是$x + \mathcal{N}(A)$
- 方程组$Ax = b$的解唯一的充分必要条件是$\mathcal{N}(A) = \{0\}$

- $m = 3$, $\operatorname{rank} A = 2$, 则$\mathcal{R}(A)$可以用一张平面表示

- $m = 3$, $\operatorname{rank} A = 2$, 则$\mathcal{R}(A)$可以用一张平面表示
- 当x取遍$\mathbb{R}^n$时，$y = Ax$就取遍整个$\mathcal{R}(A)$

- $m = 3$, $\mathrm{rank}\, A = 2$, 则$\mathcal{R}(A)$可以用一张平面表示
- 当x取遍$\mathbb{R}^n$时，$y = Ax$就取遍整个$\mathcal{R}(A)$
- LS问题等价于求$y_{\min} \in \mathcal{R}(A)$, 使得

$$\|b - y_{\min}\|_2 = \min\{\|b - y\|_2, y \in \mathcal{R}(A)\}$$

- 注意到b有分解：$b = b_1 + b_2$, $b_1 \in \mathcal{R}(A)$, $b_2 \in \mathcal{R}(A)^\perp$

- 注意到b有分解：$b = b_1 + b_2$, $b_1 \in \mathcal{R}(A)$, $b_2 \in \mathcal{R}(A)^\perp$
- 当$b-y$垂直于$\mathcal{R}(A)$时，$\|b-y\|_2$达到极小

- 注意到b有分解：$b = b_1 + b_2$, $b_1 \in \mathcal{R}(A)$, $b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$
- 当$b - y$垂直于$\mathcal{R}(A)$时，$\|b - y\|_2$达到极小
- 这时$y_{\min} = b_1$, 然后利用$Ax = y_{\min}$解出x即得到最小二乘解

解的存在性定理

定理

$Ax = b$对应的线性最小二乘问题的解总是存在的，而且其解唯一当且仅当

$$\mathcal{N}(A) = \{0\}$$

证明

- $\mathbb{R}^m = \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^\perp$

证明

- $\mathbb{R}^m = \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^\perp$
- 所以b具有唯一分解$b = b_1 + b_2$,
  $b_1 \in \mathcal{R}(A)$, $b_2 \in \mathcal{R}(A)^\perp$

证明

- $\mathbb{R}^m = \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^\perp$
- 所以b具有唯一分解$b = b_1 + b_2$, $b_1 \in \mathcal{R}(A)$, $b_2 \in \mathcal{R}(A)^\perp$
- 从而对$\forall x \in \mathbb{R}^n$, $b_1 - Ax \in \mathcal{R}(A)$且与$b_2$正交

证明

- 从而有

$$
\begin{aligned}
\|r(x)\|_2^2 = \|b - Ax\|_2^2 &= \|(b_1 - Ax) + b_2\|_2^2 \\
&= \|b_1 - Ax\|_2^2 + \|b_2\|^2
\end{aligned}
$$

证明

- 从而有

$$\begin{aligned}\|r(x)\|_2^2 = \|b - Ax\|_2^2 &= \|(b_1 - Ax) + b_2\|_2^2 \\ &= \|b_1 - Ax\|_2^2 + \|b_2\|^2\end{aligned}$$

- 所以$\|r(x)\|_2^2$达到极小当且仅当$\|b_1 - Ax\|_2^2$达到极小

证明

- 从而有

$$\begin{aligned}\|r(x)\|_2^2 = \|b - Ax\|_2^2 &= \|(b_1 - Ax) + b_2\|_2^2 \\ &= \|b_1 - Ax\|_2^2 + \|b_2\|^2\end{aligned}$$

- 所以$\|r(x)\|_2^2$达到极小当且仅当$\|b_1 - Ax\|_2^2$达到极小
- 由于$b_1 \in \mathcal{R}(A)$, 所以$\|b_1 - Ax\|_2^2$达到极小当且仅当$Ax = b_1$

解集

- 最小二乘问题的解集记为χ_{LS}

解集

- 最小二乘问题的解集记为$\chi_{\rm LS}$
- 根据前面的定理，$\chi_{\rm LS} \neq \emptyset$

解集

- 最小二乘问题的解集记为χ_{LS}
- 根据前面的定理，$\chi_{\mathrm{LS}} \neq \emptyset$
- $\sharp\chi_{\mathrm{LS}} = 1 \iff A$的列线性无关

解集

- 最小二乘问题的解集记为χ_{LS}
- 根据前面的定理，$\chi_{\mathrm{LS}} \neq \emptyset$
- $\sharp\chi_{\mathrm{LS}} = 1 \iff A$的列线性无关
- χ_{LS}中有且仅有一个解其2范数最小（为什么？），这称为最小2 范数解，用x_{LS}表示

解集

- 最小二乘问题的解集记为χ_{LS}
- 根据前面的定理，$\chi_{\mathrm{LS}} \neq \emptyset$
- $\sharp\chi_{\mathrm{LS}} = 1 \iff A$的列线性无关
- χ_{LS}中有且仅有一个解其2范数最小（为什么？），这称为最小2 范数解，用x_{LS}表示
  - 点集的凸性以及范数的严格凸性

定理

定理

$x \in \chi_{\mathrm{LS}}$当且仅当

$$A^T A x = A^T b$$

证明：必要性

- $x \in \chi_{\mathrm{LS}} \Longrightarrow Ax = b_1$, 其中$b_1 \in \mathcal{R}(A)$

证明：必要性

- $x \in \chi_{\mathrm{LS}} \Longrightarrow Ax = b_1$, 其中$b_1 \in \mathcal{R}(A)$
- $r(x) = b - Ax = b - b_1 = b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$

证明：必要性

- $x \in \chi_{\mathrm{LS}} \Longrightarrow Ax = b_1$, 其中$b_1 \in \mathcal{R}(A)$
- $r(x) = b - Ax = b - b_1 = b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$
- $b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$意味着对任意$x \in \mathbb{R}^n$, $b_2^T Ax = 0$, 所以$(b_2^T A)^T = A^T b_2$是$\mathbb{R}^n$中的零向量

证明：必要性

- $x \in \chi_{\mathrm{LS}} \Longrightarrow Ax = b_1$, 其中$b_1 \in \mathcal{R}(A)$
- $r(x) = b - Ax = b - b_1 = b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$
- $b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$意味着对任意$x \in \mathbb{R}^n$, $b_2^T Ax = 0$, 所以$(b_2^T A)^T = A^T b_2$是$\mathbb{R}^n$中的零向量
- 从而$A^T r(x) = A^T b_2 = 0$

证明：必要性

- $x \in \chi_{\mathrm{LS}} \Longrightarrow Ax = b_1$, 其中$b_1 \in \mathcal{R}(A)$
- $r(x) = b - Ax = b - b_1 = b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$
- $b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$意味着对任意$x \in \mathbb{R}^n$, $b_2^T Ax = 0$, 所以$(b_2^T A)^T = A^T b_2$是$\mathbb{R}^n$中的零向量
- 从而$A^T r(x) = A^T b_2 = 0$
- 把$r(x) = b - Ax$代入即得$A^T Ax = A^T b$

证明：充分性

- 设$x \in \mathbb{R}^n$满足$A^TAx = A^Tb$

证明：充分性

- 设$x \in \mathbb{R}^n$满足$A^TAx = A^Tb$
- 则对$\forall y \in \mathbb{R}^n$,

$$
\begin{aligned}
&\|b - A(x+y)\|_2^2 \\
=&\|b - Ax\|_2^2 - 2y^TA^T(b - Ax) + \|Ay\|_2^2 \\
=&\|b - Ax\|_2^2 + \|Ay\|_2^2 \\
\geqslant&\|b - Ax\|_2^2
\end{aligned}
$$

这就证明了$x \in \chi_{\mathrm{LS}}$

正则化方程组

- $A^TAx = A^Tb$称为LS问题的正则化方程组或者法方程组

正则化方程组

- $A^TAx = A^Tb$称为LS问题的正则化方程组或者法方程组
- 它一般是一个含有n个变量和n个方程的线性方程组

正则化方程组

- $A^TAx = A^Tb$称为LS问题的正则化方程组或者法方程组
- 它一般是一个含有n个变量和n个方程的线性方程组
- 如果A的列向量线性无关，那么A^TA 对称正定，从而可以采用平方根法求解方程组

正则化方法

求解LS问题的最古老的算法:

- 计算$C = A^T A$, $d = A^T b$

正则化方法

求解LS问题的最古老的算法：

- 计算$C = A^T A$, $d = A^T b$
- 用平方根法计算C的Cholesky分解：$C = LL^T$

正则化方法

求解LS问题的最古老的算法：

- 计算$C = A^T A$, $d = A^T b$
- 用平方根法计算C的Cholesky分解：$C = LL^T$
- 求解三角方程组$Ly = d$和$L^T x = y$

注解

- 在A^TA的计算中，如果不使用足够的精度，A中的一些精度可能会丢失

注解

- 在A^TA的计算中，如果不使用足够的精度，A中的一些精度可能会丢失
- 例：

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}, A^TA = \begin{pmatrix} c & 1 & 1 \\ 1 & c & 1 \\ 1 & 1 & c \end{pmatrix}$$

其中$c = 1 + \varepsilon^2$

Moore-Penrose广义逆

- 正则化方程组的解可以写为$x = (A^TA)^{-1}A^Tb$

Moore-Penrose广义逆

- 正则化方程组的解可以写为$x = (A^T A)^{-1} A^T b$
- 定义$A^{\dagger} = (A^T A)^{-1} A^T$

Moore-Penrose广义逆

- 正则化方程组的解可以写为$x = (A^T A)^{-1} A^T b$
- 定义$A^\dagger = (A^T A)^{-1} A^T$
- 则LS问题的解可以写为$x = A^\dagger b$

Moore-Penrose广义逆

- 正则化方程组的解可以写为$x = (A^T A)^{-1} A^T b$
- 定义$A^\dagger = (A^T A)^{-1} A^T$
- 则LS问题的解可以写为$x = A^\dagger b$
- $n \times m$阶矩阵$A^\dagger$就是A的Moore-Penrose广义逆

回忆：Moore-Penrose广义逆

- 若$X \in \mathbb{R}^{m\times n}$满足

$$AXA = A, XAX = X,$$
$$(AX)^T = AX, (XA)^T = XA$$

则X就是A的Moore-Penrose广义逆

回忆：Moore-Penrose广义逆

- 若$X \in \mathbb{R}^{m\times n}$满足

$$AXA = A, XAX = X,$$
$$(AX)^T = AX, (XA)^T = XA$$

则X就是A的Moore-Penrose广义逆

- 通常记作$A^\dagger$

扰动对解的影响

- 设b有扰动δb, 且x和$x+\delta x$分别是最小二乘问题

$$\min \|b-Ax\|_2 \text{和} \min \|(b+\delta b)-Ax\|_2$$

的解，即

$$x = A^{\dagger} b,$$
$$x+\delta x = A^{\dagger}(b+\delta b) = A^{\dagger}\tilde{b}$$

其中$\tilde{b} = b+\delta b$

定理

定理

设b_1和$\tilde{b}_1$分别是b和$\tilde{b}$在$\mathcal{R}(A)$上的正交投影。

若$b_1 \neq 0$，则

$$\frac{\|\delta x\|_2}{\|x\|_2} \leqslant \kappa_2(A)\frac{\|b_1 - \tilde{b}_1\|_2}{\|b_1\|_2}$$

其中$\kappa_2(A) = \|A\|_2\|A^\dagger\|_2$

注：A非方阵，其范数与方阵的算子范数定义相同，从而满足对向量乘法的相容性；A的2范数等于A的最大奇异值

证明

- 设b在$\mathcal{R}^{\perp}$上的正交投影为b_2，则$A^T b_2 = 0$

证明

- 设b在$\mathcal{R}^{\perp}$上的正交投影为b_2，则$A^T b_2 = 0$
- 由$b = b_1 + b_2$可有

$$\begin{aligned} A^{\dagger} b &= A^{\dagger} b_1 + A^{\dagger} b_2 \\ &= A^{\dagger} b_1 + (A^T A)^{-1} A^T b_2 = A^{\dagger} b_1 \end{aligned}$$

证明

- 设b在$\mathcal{R}^{\perp}$上的正交投影为b_2，则$A^T b_2 = 0$
- 由$b = b_1 + b_2$可有

$$\begin{aligned} A^{\dagger} b &= A^{\dagger} b_1 + A^{\dagger} b_2 \\ &= A^{\dagger} b_1 + (A^T A)^{-1} A^T b_2 = A^{\dagger} b_1 \end{aligned}$$

- 同理$A^{\dagger}\tilde{b} = A^{\dagger}\tilde{b}_1$

证明

- 所以

$$
\begin{aligned}
\|\delta x\|_2 &= \|A^\dagger b - A^\dagger \tilde{b}\|_2 = \|A^\dagger (b_1 - \tilde{b}_1)\|_2 \\
&\leqslant \|A^\dagger\|_2 \|b_1 - \tilde{b}_1\|_2
\end{aligned}
$$

证明

- 所以

$$\begin{aligned}\|\delta x\|_2 &= \|A^\dagger b - A^\dagger \tilde{b}\|_2 = \|A^\dagger (b_1 - \tilde{b}_1)\|_2 \\ &\leqslant \|A^\dagger\|_2 \|b_1 - \tilde{b}_1\|_2\end{aligned}$$

- 由$Ax = b_1$得$\|b_1\|_2 \leqslant \|A\|_2 \|x\|_2$

证明

- 所以
$$\begin{aligned}\|\delta x\|_2 &= \|A^\dagger b - A^\dagger \tilde{b}\|_2 = \|A^\dagger (b_1 - \tilde{b}_1)\|_2 \\ &\leqslant \|A^\dagger\|_2 \|b_1 - \tilde{b}_1\|_2\end{aligned}$$
- 由$Ax = b_1$得$\|b_1\|_2 \leqslant \|A\|_2 \|x\|_2$
- 根据上述两式立得结论

注解

- 若b有变化，只有它在$\mathcal{R}(A)$上的投影对x的相对误差产生影响

注解

- 若b有变化，只有它在$\mathcal{R}(A)$上的投影对x的相对误差产生影响
- LS问题解的敏感性依赖于$\kappa_2(A)$ 的大小

注解

- 若b有变化，只有它在$\mathcal{R}(A)$上的投影对x的相对误差产生影响
- LS问题解的敏感性依赖于$\kappa_2(A)$ 的大小
- 我们称$\kappa_2(A)$为LS问题的条件数

注解

- 若b有变化，只有它在$\mathcal{R}(A)$上的投影对x的相对误差产生影响
- LS问题解的敏感性依赖于$\kappa_2(A)$ 的大小
- 我们称$\kappa_2(A)$为LS问题的条件数
- 若$\kappa_2(A)$很大，则称LS问题是病态的；否则称为良态的

注解

- 若b有变化，只有它在$\mathcal{R}(A)$上的投影对x的相对误差产生影响
- LS问题解的敏感性依赖于$\kappa_2(A)$ 的大小
- 我们称$\kappa_2(A)$为LS问题的条件数
- 若$\kappa_2(A)$很大，则称LS问题是病态的；否则称为良态的
- 同时考虑A和b的扰动对解的影响就非常复杂，我们在此不讨论

条件数

定理

设A的列向量线性无关，则

$$\kappa_2(A)^2 = \kappa_2(A^T A)$$

证明：

- 根据定义，我们有

$$\|A\|_2^2 = \|A^T A\|_2,$$

$$\|A^\dagger\|_2^2 = \|A^\dagger (A^\dagger)^T\|_2 = \|(A^T A)^{-1}\|_2$$

证明

- 于是我们得到

$$
\begin{aligned}
\kappa_2(A)^2 &= \|A\|_2^2 \|A^\dagger\|_2^2 \\
&= \|A^T A\|_2 \|(A^T A)^{-1}\|_2 \\
&= \kappa_2(A^T A)
\end{aligned}
$$

注解

- 最小二乘问题在化为正则化方程组后，条件数是原来的平方

注解

- 最小二乘问题在化为正则化方程组后，条件数是原来的平方
- 这就使得求解过程增加了对舍入误差的敏感性

注解

- 最小二乘问题在化为正则化方程组后，条件数是原来的平方
- 这就使得求解过程增加了对舍入误差的敏感性
- 在使用正则化方法时，一定要注意这一点

更实用的算法

- 为了给出求解最小二乘问题的更实用的算法，我们本节介绍初等正交变换

更实用的算法

- 为了给出求解最小二乘问题的更实用的算法，我们本节介绍初等正交变换
  - 因为正交变换不改变向量和矩阵的2范数

更实用的算法

- 为了给出求解最小二乘问题的更实用的算法，我们本节介绍初等正交变换
  - 因为正交变换不改变向量和矩阵的2范数
- 第一种是Householder变换

更实用的算法

- 为了给出求解最小二乘问题的更实用的算法，我们本节介绍初等正交变换
  - 因为正交变换不改变向量和矩阵的2范数
- 第一种是Householder变换
- 第二种是Givens变换

更实用的算法

- 为了给出求解最小二乘问题的更实用的算法，我们本节介绍初等正交变换
    - 因为正交变换不改变向量和矩阵的2范数
- 第一种是Householder变换
- 第二种是Givens变换
- 它们是数值线性代数中许多重要算法的基础

更实用的算法

- 为了给出求解最小二乘问题的更实用的算法，我们本节介绍初等正交变换
  - 因为正交变换不改变向量和矩阵的2范数
- 第一种是Householder变换
- 第二种是Givens变换
- 它们是数值线性代数中许多重要算法的基础
  - 例：在计算矩阵特征值和特征向量的QR方法中，就大量应用上述两种变换

回忆：初等变换

- 应用Gauss变换可以把一个矩阵约化为上三角形式

回忆：初等变换

- 应用Gauss变换可以把一个矩阵约化为上三角形式
- 这是基于事实：对任意向量x，可以构造一个初等下三角阵L，使得$Lx = \alpha e_1$

回忆：初等变换

- 应用Gauss变换可以把一个矩阵约化为上三角形式
- 这是基于事实：对任意向量x, 可以构造一个初等下三角阵L, 使得$Lx = \alpha e_1$
- 本节我们讨论如何求一个初等正交矩阵，使其具有L同样的功能

镜像对称向量的计算

- 在$\mathbb{R}^n$中给定一个向量x和一张单位法向量为w的超平面π，那么x关于π的镜像对称向量是什么？

镜像对称向量的计算

- 在$\mathbb{R}^n$中给定一个向量x和一张单位法向量为w的超平面π，那么x关于π的镜像对称向量是什么？
- 显然x在单位法向量上的投影向量为$(x \cdot w)w = ww^T x$

镜像对称向量的计算

- 在$\mathbb{R}^n$中给定一个向量x和一张单位法向量为w的超平面π，那么x关于π的镜像对称向量是什么？
- 显然x在单位法向量上的投影向量为$(x \cdot w)w = ww^T x$
- 所以对称向量是

$$x - 2ww^T x = (I - 2ww^T)x$$

Householder变换

- 设$w \in \mathbb{R}^n$满足$\|w\|_2 = 1$. 定义$n \times n$矩阵

$$H = I - 2ww^T$$

其称为Householder变换

Householder变换

- 设$w \in \mathbb{R}^n$满足$\|w\|_2 = 1$. 定义$n \times n$矩阵

$$H = I - 2ww^T$$

其称为Householder变换

- 也称为初等反射矩阵或镜像矩阵

Householder变换

- 设$w \in \mathbb{R}^n$满足$\|w\|_2 = 1$. 定义$n \times n$矩阵

$$H = I - 2ww^T$$

其称为Householder变换

- 也称为初等反射矩阵或镜像矩阵
- 这一变换最早是由A.C. Aitken在1932年提出，后由数值分析专家Alston S. Householder在1958年应用到数值线性代数中

变换的性质

- 对称性：$H^T = H$

变换的性质

- 对称性：$H^T = H$
- 正交性：$H^T H = I$

变换的性质

- 对称性：$H^T = H$
- 正交性：$H^T H = I$
- 对合性：$H^2 = I$

变换的性质

- 对称性：$H^T = H$
- 正交性：$H^T H = I$
- 对合性：$H^2 = I$
- 反射性：对$\forall x \in \mathbb{R}^n$，$Hx$是$x$关于$w$的垂直超平面$\mathrm{span}\{w\}^\perp$的镜像反射

证明

- 第一条显然

证明

- 第一条显然
- 后两条可由第一条导出。事实上，

$$
\begin{aligned}
H^T H = H^2 &= (I - 2ww^T)(I - 2ww^T) \\
&= I - 4ww^T + 4ww^T ww^T = I
\end{aligned}
$$

证明

- 设$x \in \mathbb{R}^n$写为$x = u + \alpha w$，其中$u \in \operatorname{span}\{w\}^\perp$，$\alpha \in \mathbb{R}$

证明

- 设$x \in \mathbb{R}^n$写为$x = u + \alpha w$，其中$u \in \mathrm{span}\{w\}^\perp$，$\alpha \in \mathbb{R}$
- 由$u^T w = 0$，$w^T w = 1$可得

$$
\begin{aligned}
Hx &= (I - 2ww^T)(u + \alpha w) \\
&= u + \alpha w - 2ww^T u - 2\alpha ww^T w \\
&= u - \alpha w
\end{aligned}
$$

定理

定理

设$0 \neq x \in \mathbb{R}^n$, 可以构造单位向量$w \in \mathbb{R}^n$ 使得Householder变换H满足

$$Hx = \alpha e_1$$

其中$\alpha = \pm\|x\|_2$

证明

- 注意到

$$Hx = (I - 2ww^T)x = x - 2(w^Tx)w$$

证明

- 注意到

$$Hx = (I - 2ww^T)x = x - 2(w^Tx)w$$

- 为使$Hx = \alpha e_1$, 则w应取为

$$w = \frac{x - \alpha e_1}{\|x - \alpha e_1\|_2}$$

证明

- 注意到

$$Hx = (I - 2ww^T)x = x - 2(w^Tx)w$$

- 为使$Hx = \alpha e_1$, 则w应取为

$$w = \frac{x - \alpha e_1}{\|x - \alpha e_1\|_2}$$

- 当$\alpha = \pm\|x\|_2$时，可以直接验证如此定义的w满足定理的要求

验证

- $\alpha^2 = x^T x$

验证

- $\alpha^2 = x^T x$
- 分母为

$$
\begin{aligned}
&\|x-\alpha e_1\|_2^2\\
=&x^Tx-2\alpha x^Te_1+\alpha^2\\
=&2(x^Tx-\alpha x^Te_1)
\end{aligned}
$$

验证

- $\alpha^2 = x^T x$
- 分母为

$$\begin{aligned}&\|x-\alpha e_1\|_2^2\\=&x^T x - 2\alpha x^T e_1 + \alpha^2\\=&2(x^T x - \alpha x^T e_1)\end{aligned}$$

- 分母即为$2(x^T - \alpha e_1^T)x$, 由此易得

$$2(w^T x)w = x - \alpha e_1$$

注解

- 定理告诉我们，对于$\forall x \in \mathbb{R}^n$（$x \neq 0$），我们都可以构造出Householder变换$H$，使得$Hx$的后$n-1$个分量为零

注解

- 定理告诉我们，对于$\forall x \in \mathbb{R}^n$（$x \neq 0$），我们都可以构造出Householder变换$H$，使得$Hx$的后$n-1$个分量为零
- 证明步骤同时告诉我们w的构造方法如下：

注解

- 定理告诉我们，对于$\forall x \in \mathbb{R}^n$（$x \neq 0$），我们都可以构造出Householder变换$H$，使得$Hx$的后$n-1$个分量为零
- 证明步骤同时告诉我们w的构造方法如下：
  - 计算$v = x \pm \|x\|_2 e_1$

注解

- 定理告诉我们，对于$\forall x \in \mathbb{R}^n$ ($x \neq 0$)，我们都可以构造出Householder变换H，使得Hx的后$n-1$个分量为零
- 证明步骤同时告诉我们w的构造方法如下：
  - 计算$v = x \pm \|x\|_2 e_1$
  - 计算$w = v/\|v\|_2$

符号的选择

- 为了使变换后得到的α为正数，我们应取$v = x - \|x\|_2 e_1$

符号的选择

- 为了使变换后得到的α为正数，我们应取$v = x - \|x\|_2 e_1$
- 问题：如果x是一个很接近于e_1的向量，计算$v_1 = x_1 - \|x\|_2$时会出现两个相近的数相减，从而严重地损失有效数字

符号的选择

- 为了使变换后得到的α为正数，我们应取$v = x - \|x\|_2 e_1$
- 问题：如果x是一个很接近于e_1的向量，计算$v_1 = x_1 - \|x\|_2$时会出现两个相近的数相减，从而严重地损失有效数字
- 变形以避免这一问题：$(x_1 > 0)$

$$v_1 = x_1 - \|x\|_2 = \frac{x_1^2 - \|x\|_2^2}{x_1 + \|x\|_2} = \frac{-(x_2^2 + \cdots + x_n^2)}{x_1 + \|x\|_2}$$

w不需要计算

- 由于

$$H = I - 2ww^T = I - \frac{2}{v^Tv}vv^T = I - 2\beta vv^T$$

其中$\beta = 2/(v^Tv)$, 因此我们不必求出w，而只需求出β和v, 从而避免了开方运算

w不需要计算

- 由于

$$H = I - 2ww^T = I - \frac{2}{v^Tv}vv^T = I - 2\beta vv^T$$

其中$\beta = 2/(v^Tv)$, 因此我们不必求出w，而只需求出β和v, 从而避免了开方运算

- 在实际计算时，可以把v规范化为第一个分量为1（第一个分量原值肯定不为零），这样可以恰好把v的后$n-1$分量放在x的后$n-1$个化为零的分量位置上

下溢和上溢

- 当下溢发生时，计算机有可能把结果置为零，这可能会出现v^Tv为零的情形

下溢和上溢

- 当下溢发生时，计算机有可能把结果置为零，这可能会出现v^Tv为零的情形
- 如果x的分量太大，那么该分量平方时，会出现上溢

下溢和上溢

- 当下溢发生时，计算机有可能把结果置为零，这可能会出现v^Tv为零的情形
- 如果x的分量太大，那么该分量平方时，会出现上溢
- 由于$\forall\alpha$, αv和v的单位化向量相同，因此为了避免溢出现象的出现，我们可以用$x/\|x\|_\infty$代替x来构造v, 这相当于在原来的v之前乘了常数$1/\|x\|_\infty$

化其它元素为零

- Householder变换结果的形式并不需要局限于αe_1

化其它元素为零

- Householder变换结果的形式并不需要局限于αe_1
- 它可以把向量中任何若干相邻的元素化为零

化其它元素为零

- Householder变换结果的形式并不需要局限于αe_1
- 它可以把向量中任何若干相邻的元素化为零
- 例如，欲在$x \in \mathbb{R}^n$中从$k+1$至j位置引入零元素，只要定义

$$v = (0, \ldots, 0, x_k - \alpha, x_{k+1}, \ldots, x_j, 0, \ldots, 0)$$

即可，其中$\alpha^2 = \sum_{i=k}^{j} x_i^2$

HA的计算

- 应用Householder变换，主要的工作量是计算矩阵乘法HA，其中$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$H \in \mathbb{R}^m$，

$$HA = (I - \beta vv^T)A = A - vw^T$$

其中$w = \beta A^T v$

HA的计算

- 应用Householder变换，主要的工作量是计算矩阵乘法HA，其中$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，$H \in \mathbb{R}^m$，

$$HA = (I - \beta vv^T)A = A - vw^T$$

其中$w = \beta A^T v$

- 计算w的一个元素需要$n + (n-1) + 1 = 2n$ 次运算；从而计算w需要$2mn$次运算

HA的计算

- 应用Householder变换，主要的工作量是计算矩阵乘法HA，其中$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$，$H \in \mathbb{R}^m$，

$$HA = (I - \beta vv^T)A = A - vw^T$$

其中$w = \beta A^T v$

- 计算w的一个元素需要$n + (n-1) + 1 = 2n$ 次运算；从而计算w需要$2mn$次运算
- 计算$A - vw^T$的一个元素需要两次运算

HA的计算

- 应用Householder变换，主要的工作量是计算矩阵乘法HA，其中$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $H \in \mathbb{R}^m$,
$$HA = (I - \beta vv^T)A = A - vw^T$$
其中$w = \beta A^T v$
- 计算w的一个元素需要$n + (n-1) + 1 = 2n$ 次运算；从而计算w需要$2mn$次运算
- 计算$A - vw^T$的一个元素需要两次运算
- 所以计算HA的总运算量为$4mn$

Givens变换

- Householder变换把一个向量中许多分量化为零

Givens变换

- Householder变换把一个向量中许多分量化为零
- Givens变换则只是把向量中一个分量化为零

$$
\begin{aligned}
G(i,k,\theta) = I &+ s(e_i e_k^T - e_k e_i^T) \\
&+ (c-1)(e_i e_i^T + e_k e_k^T)
\end{aligned}
$$

其中$c = \cos\theta$, $s = \sin\theta$

Givens变换

- Householder变换把一个向量中许多分量化为零
- Givens变换则只是把向量中一个分量化为零

$$\begin{aligned} G(i,k,\theta) = I &+ s(e_i e_k^T - e_k e_i^T) \\ &+ (c-1)(e_i e_i^T + e_k e_k^T) \end{aligned}$$

其中$c=\cos\theta$, $s=\sin\theta$

- 这一变换是由Wallace Givens于上世纪五十年代引入到数值分析领域，也称为Jacobi变换(C.G.J. Jacobi, 1804–1851)

$G(i,k,\theta)$的结构

$$G(i,k,\theta)=\begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & c & \cdots & s & & \\ & & \vdots & & \vdots & & \\ & & -s & \cdots & c & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

置零时的取值

- 取$x \in \mathbb{R}$, $y = G(i, k, \theta)x$, 则

$$y_i = cx_i + sx_k, y_k = -sx_i + cx_k, y_j = x_j, j \neq i,$$

置零时的取值

- 取$x \in \mathbb{R}$, $y = G(i,k,\theta)x$, 则

$$y_i = cx_i + sx_k, y_k = -sx_i + cx_k, y_j = x_j, j \neq i,$$

- 若要$y_k = 0$, 只要取

$$c = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_k^2}}, s = \frac{x_k}{\sqrt{x_i^2 + x_k^2}}$$

就有$y_i = \sqrt{x_i^2 + x_k^2}$, $y_k = 0$

旋转

- 从几何上看，$G(i,k,\theta)x$是在(i,k)坐标平面内将x按顺时针方向旋转θ角

旋转

- 从几何上看，$G(i,k,\theta)x$是在(i,k)坐标平面内将x按顺时针方向旋转θ角
- 所以Givens变换也称为平面旋转变换

旋转

- 从几何上看，$G(i,k,\theta)x$是在(i,k)坐标平面内将x按顺时针方向旋转θ角
- 所以Givens变换也称为平面旋转变换
- Givens变换左（或右）乘矩阵A, 则它只改变A的第i,k行（或列），其余元素保持不变

溢出的避免

- 利用c, s的定义进行计算，有可能发生溢出

溢出的避免

- 利用c, s的定义进行计算，有可能发生溢出
- 为了防止溢出，在实现时可以采用一些小技巧，见书上算法中的描述

正交变换与LS问题

- 本节讨论LS问题求解的新方法

正交变换与LS问题

- 本节讨论LS问题求解的新方法
- 由于2范数具有正交不变性，所以对任意正交矩阵$Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$，

$$\|Ax - b\|_2 = \|Q^T(Ax - b)\|_2$$

正交变换与LS问题

- 本节讨论LS问题求解的新方法
- 由于2范数具有正交不变性，所以对任意正交矩阵$Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$，

$$\|Ax - b\|_2 = \|Q^T(Ax - b)\|_2$$

- 从而LS问题$\min \|Q^TAx - Q^Tb\|_2$就等价于原问题$\min \|Ax - b\|_2$

正交变换与LS问题

- 本节讨论LS问题求解的新方法
- 由于2范数具有正交不变性，所以对任意正交矩阵$Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$,
$$\|Ax-b\|_2 = \|Q^T(Ax-b)\|_2$$
- 从而LS问题$\min\|Q^TAx-Q^Tb\|_2$就等价于原问题$\min\|Ax-b\|_2$
- 期望通过适当选取正交矩阵Q, 使原问题转化为较容易求解的LS问题。这就是正交变换法的基本思想

QR分解定理

定理

设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geqslant n)$, 则A有**QR分解**

$$A = Q\begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}$$

其中$Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$是正交矩阵，$R \in \mathbb{R}^{n\times n}$是具有非负对角元的上三角阵；而且当$m = n$且$A$非奇异时，上述分解是唯一的

证明：存在性

- 对n进行数学归纳法

证明：存在性

- 对n进行数学归纳法
- 当$n = 1$时这就是前一节关于Householder 变换的定理

证明：存在性

- 对n进行数学归纳法
- 当$n = 1$时这就是前一节关于Householder 变换的定理
- 假设已经证明了定理对所有的$p \times (n-1)$矩阵成立，$p \geqslant n-1$

证明：存在性

- 对n进行数学归纳法
- 当$n=1$时这就是前一节关于Householder 变换的定理
- 假设已经证明了定理对所有的$p\times(n-1)$矩阵成立，$p\geqslant n-1$
- 设$A\in\mathbb{R}^{m\times n}$的第一列是$a_1$

证明：存在性

- 由Householder变换定理，存在正交矩阵$Q_1 \in \mathbb{R}^{m\times m}$使得$Q_1^T a_1 = \|a_1\|_2 e_1$

证明：存在性

- 由Householder变换定理，存在正交矩阵$Q_1 \in \mathbb{R}^{m\times m}$使得$Q_1^T a_1 = \|a_1\|_2 e_1$
- 于是我们有

$$Q_1^T A = \begin{pmatrix} \|a_1\|_2 & v^T \\ 0 & A_1 \end{pmatrix}$$

证明：存在性

- 对$(m-1)\times(n-1)$阶矩阵A_1应用归纳假设，有

$$A_1 = Q_2 \begin{pmatrix} R_2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

其中Q_2是$(m-1)\times(m-1)$阶正交矩阵，R_2是具有非负对角元的$(n-1)\times(n-1)$ 上三角阵

证明：存在性

- 令

$$Q = Q_1 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q_2 \end{pmatrix}, R = \begin{pmatrix} \|a_1\|_2 & v^T \\ 0 & R_2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

则Q和R满足定理的要求。存在性得证

证明：唯一性

- 设$m = n$，A非奇异

证明：唯一性

- 设$m = n$，A非奇异
- 设$A = QR = \tilde{Q}\tilde{R}$，其中$Q, \tilde{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$是正交矩阵，$R, \tilde{R} \in \mathbb{R}^{m\times m}$是具有非负对角元的上三角阵

证明：唯一性

- 设$m = n$，A非奇异
- 设$A = QR = \tilde{Q}\tilde{R}$，其中$Q, \tilde{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$是正交矩阵，$R, \tilde{R} \in \mathbb{R}^{m\times m}$是具有非负对角元的上三角阵
- A非奇异，所以$R, \tilde{R}$的对角元均为正数，所以

$$\tilde{Q}^T Q = \tilde{R} R^{-1}$$

证明：唯一性

- 上式左边是正交矩阵

证明：唯一性

- 上式左边是正交矩阵
- 上式右边是对角元均为正数的上三角阵

证明：唯一性

- 上式左边是正交矩阵
- 上式右边是对角元均为正数的上三角阵
- 所以两边只能是单位阵，从而必有$Q = \tilde{Q}$, $R = \tilde{R}$

LS问题的正交变换法

- 设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geqslant n)$有线性无关的列，$b \in \mathbb{R}^m$

LS问题的正交变换法

- 设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geqslant n)$有线性无关的列，$b \in \mathbb{R}^m$
- A有QR分解，并且把Q分块为$Q = (Q_1, Q_2)$, 其中Q_1有n 列

LS问题的正交变换法

- 设$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geqslant n)$有线性无关的列，$b \in \mathbb{R}^m$
- A有QR分解，并且把Q分块为$Q = (Q_1, Q_2)$, 其中Q_1有n 列
- 令

$$Q^T b = \begin{pmatrix} Q_1^T \\ Q_2^T \end{pmatrix} b = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

- 那么

$$
\begin{aligned}
\|Ax - b\|_2^2 &= \|Q^T Ax - Q^T b\|_2^2 \\
&= \|Rx - c_1\|_2^2 + \|c_2\|_2^2
\end{aligned}
$$

- 那么

$$\begin{aligned}\|Ax-b\|_2^2 &= \|Q^TAx-Q^Tb\|_2^2\\ &= \|Rx-c_1\|_2^2+\|c_2\|_2^2\end{aligned}$$

- x是原LS问题的解当且仅当x是$Rx=c_1$的解

- 那么

$$\begin{aligned}\|Ax-b\|_2^2 &= \|Q^TAx-Q^Tb\|_2^2\\ &= \|Rx-c_1\|_2^2+\|c_2\|_2^2\end{aligned}$$

- x是原LS问题的解当且仅当x是$Rx=c_1$的解
- LS问题的求解转化为很容易求解的上三角方程组求解

- 那么
$$\begin{aligned}\|Ax-b\|_2^2 &= \|Q^TAx-Q^Tb\|_2^2 \\ &= \|Rx-c_1\|_2^2+\|c_2\|_2^2\end{aligned}$$
- x是原LS问题的解当且仅当x是$Rx=c_1$的解
- LS问题的求解转化为很容易求解的上三角方程组求解
- 问题的关键是如何实现QR分解

QR分解的Householder方法

- 用Householder方法计算QR分解与不选主元的Gauss消去法非常类似

QR分解的Householder方法

- 用Householder方法计算QR分解与不选主元的Gauss消去法非常类似
- 对一般矩阵$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 假设我们已进行了$k-1$步，得到了Householder变换$H_1, \ldots, H_{k-1}$, 使得

$$A_k = H_{k-1}\cdots H_1 A = \begin{pmatrix} A_{11}^{(k)} & A_{12}^{(k)} \\ 0 & A_{22}^{(k)} \end{pmatrix}$$

其中$A_{11}^{(k)}$是$k-1$阶上三角阵

第k步

- 设$A_{22}^{(k)} = (u_k, \ldots, u_n)$

第k步

- 设$A_{22}^{(k)} = (u_k, \ldots, u_n)$
- 在第k步中，先确定Householder变换：

$$\tilde{H}_k = I_{m-k+1} - \beta_k v_k v_k^T \in \mathbb{R}^{(m-k+1)\times(m-k+1)}$$

使得$\tilde{H}_k u_k = r_{kk} e_1$，其中$r_{kk} \geqslant 0$

第k步

- 设$A_{22}^{(k)} = (u_k, \ldots, u_n)$
- 在第k步中，先确定Householder变换：

$$\tilde{H}_k = I_{m-k+1} - \beta_k v_k v_k^T \in \mathbb{R}^{(m-k+1)\times(m-k+1)}$$

使得$\tilde{H}_k u_k = r_{kk} e_1$, 其中$r_{kk} \geqslant 0$

- 然后计算$\tilde{H}_k A_{22}^{(k)}$

- 令$H_k = \mathrm{diag}(I_{k-1}, \tilde{H}_k)$

- 令$H_k = \mathrm{diag}(I_{k-1}, \tilde{H}_k)$
- 则我们有

$$A_{k+1} = H_k A_k = \begin{pmatrix} A_{11}^{(k)} & A_{12}^{(k)} \\ 0 & \tilde{H}_k A_{22}^{(k)} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} A_{11}^{(k+1)} & A_{12}^{(k+1)} \\ 0 & A_{22}^{(k+1)} \end{pmatrix}$$

其中$A_{11}^{(k+1)}$是上三角阵

- 如此从$k=1$出发，对A依次进行n次Householder变换，我们就可以将A约化为上三角阵

- 如此从$k=1$出发，对A依次进行n次Householder变换，我们就可以将A约化为上三角阵
- 记$R=A_{11}^{(n)}$, $Q=H_1\cdots H_n$, 则有

$$A=Q\begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}$$

- 如此从$k=1$出发，对A依次进行n次Householder变换，我们就可以将A约化为上三角阵
- 记$R=A_{11}^{(n)}$, $Q=H_1\cdots H_n$, 则有

$$A=Q\begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}$$

- 如此得到的上三角阵R的对角元都是非负的

QR分解的存储

- 可以在A中存放Q与R

QR分解的存储

- 可以在A中存放Q与R
- 通常并不是将Q算出，而是只存放构成它的n个Householder变换H_k

QR分解的存储

- 可以在A中存放Q与R
- 通常并不是将Q算出，而是只存放构成它的n个Householder变换H_k
- 对于每个H_k, 我们只需要保存v_k和β_k

QR分解的存储

- 可以在A中存放Q与R
- 通常并不是将Q算出，而是只存放构成它的n个Householder变换H_k
- 对于每个H_k, 我们只需要保存v_k和β_k
- $v_k = (1, *, \dots, *)$，可把除首位的1外的元素存放在A的对角元以下位置上

QR分解的存储

- 可以在A中存放Q与R
- 通常并不是将Q算出，而是只存放构成它的n个Householder变换H_k
- 对于每个H_k, 我们只需要保存v_k和β_k
- $v_k = (1, *, \dots, *)$，可把除首位的1外的元素存放在A的对角元以下位置上
- β_k存放在单独一个向量中

注解

- 算法的运算量为$2n^2(m - n/3)$

注解

- 算法的运算量为$2n^2(m-n/3)$
  - 当$m=n$时，LU分解相比于QR分解，运算量约只有一半

注解

- 算法的运算量为$2n^2(m-n/3)$
    - 当$m=n$时，LU分解相比于QR分解，运算量约只有一半
- 其数值性态良好

注解

- 算法的运算量为$2n^2(m-n/3)$
  - 当$m=n$时，LU分解相比于QR分解，运算量约只有一半
- 其数值性态良好
  - 对于正交阵，相互累积相乘时，结果矩阵的元素仍是有界的

注解

- 算法的运算量为$2n^2(m-n/3)$
  - 当$m=n$时，LU分解相比于QR分解，运算量约只有一半
- 其数值性态良好
  - 对于正交阵，相互累积相乘时，结果矩阵的元素仍是有界的
- 利用这一算法求解LS问题所得到的计算解通常要比正则化方法精确得多

注解

- 算法的运算量为$2n^2(m-n/3)$
  - 当$m=n$时，LU分解相比于QR分解，运算量约只有一半
- 其数值性态良好
  - 对于正交阵，相互累积相乘时，结果矩阵的元素仍是有界的
- 利用这一算法求解LS问题所得到的计算解通常要比正则化方法精确得多
- 当然付出的代价也是不容忽视的：$m \gg n$时

注解

- 也可以利用Givens变换或者Gram-Schimidt正交化实现QR分解

注解

- 也可以利用Givens变换或者Gram-Schimidt正交化实现QR分解
- 通常Givens变换来实现QR分解的运算量大约是Householder方法的两倍。但如果A稀疏，则使用Givens变换可能会比较有效

注解

- 也可以利用Givens变换或者Gram-Schimidt正交化实现QR分解
- 通常Givens变换来实现QR分解的运算量大约是Householder方法的两倍。但如果A稀疏，则使用Givens变换可能会比较有效
- 也可以用QR分解进行特征值求解或者解线性方程组，对病态方程组可能有效，但运算量大得多