

最小二乘问题的求解

邓建松

复习：数学分析中一个例题

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 题目：给定平面上 n 个数据点 (x_i, y_i) ,
 $i = 1, 2, \dots, n$, 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 题目：给定平面上 n 个数据点 (x_i, y_i) , $i = 1, 2, \dots, n$, 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 题目：给定平面上 n 个数据点 (x_i, y_i) , $i = 1, 2, \dots, n$, 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

数据拟合

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

数据拟合

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

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

- 考虑 ψ_i 的线性组合

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

数据拟合

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

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

- 考虑 ψ_i 的线性组合

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

- 我们希望在 t_1, \dots, t_m 上 $f(x; t)$ 能最佳地逼近 y_1, \dots, y_m

残量与最佳逼近

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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 $x = (x_1, \dots, x_n)^T$

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

矩阵-向量形式

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 上式的矩阵-向量形式为 $r(x) = b - Ax$, 其中

$$A = (\psi_j(t_i))_{m \times n}$$

$$b = (y_1, \dots, y_m)^T$$

$$x = (x_1, \dots, x_n)^T$$

$$r(x) = (r_1(x), \dots, r_m(x))^T$$

求解

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- $m = n$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- $m = n$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- $m = n$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

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

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

① $m = n:$

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

LS问题的种类

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

① $m = n:$

① $\text{rank } A = m = n$

LS问题的种类

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

① $m = n$:

① $\text{rank } A = m = n$

② $\text{rank } A = k < m = n$

LS问题的种类

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

① $m = n$:

① $\text{rank } A = m = n$

② $\text{rank } A = k < m = n$

② $m > n$:

LS问题的种类

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

① $m = n$:

① $\text{rank } A = m = n$

② $\text{rank } A = k < m = n$

② $m > n$:

① $\text{rank } A = n < m$

LS问题的种类

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

① $m = n$:

① $\text{rank } A = m = n$

② $\text{rank } A = k < m = n$

② $m > n$:

① $\text{rank } A = n < m$

② $\text{rank } A = k < n < m$

LS问题的种类

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

① $m = n$:

① $\text{rank } A = m = n$

② $\text{rank } A = k < m = n$

② $m > n$:

① $\text{rank } A = n < m$

② $\text{rank } A = k < n < m$

③ $m < n$:

LS问题的种类

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

① $m = n$:

① $\text{rank } A = m = n$

② $\text{rank } A = k < m = n$

② $m > n$:

① $\text{rank } A = n < m$

② $\text{rank } A = k < n < m$

③ $m < n$:

① $\text{rank } A = m < n$

LS问题的种类

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

① $m = n$:

① $\text{rank } A = m = n$

② $\text{rank } A = k < m = n$

② $m > n$:

① $\text{rank } A = n < m$

② $\text{rank } A = k < n < m$

③ $m < n$:

① $\text{rank } A = m < n$

② $\text{rank } A = k < m < n$

概念与记号

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 本章主要讨论(2-1)情形

概念与记号

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

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

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

概念与记号

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

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

- $\mathcal{R}(A) = \text{span}(a_1, \dots, a_n)$, 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 $\text{null}(A)$

解的存在性

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

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

非齐次方程的全部解

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

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

- $m = 3, \text{rank } A = 2$, 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 $\mathcal{R}(A)$

- $m = 3, \text{rank } A = 2$, 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

证明

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 最小二乘问题的解集记为 χ_{LS}

解集

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

解集

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

解集

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 最小二乘问题的解集记为 χ_{LS}
- 根据前面的定理, $\chi_{LS} \neq \emptyset$
- $\dim \chi_{LS} = 1 \iff A$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 最小二乘问题的解集记为 χ_{LS}
- 根据前面的定理, $\chi_{LS} \neq \emptyset$
- $\dim \chi_{LS} = 1 \iff A$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

定理

$x \in \chi_{LS}$ 当且仅当

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

证明：必要性

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

证明：必要性

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- $x \in \chi_{LS} \implies Ax = b_1$, 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- $x \in \chi_{LS} \implies Ax = b_1$, 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- $x \in \chi_{\text{LS}} \implies Ax = b_1$, 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- $x \in \chi_{\text{LS}} \implies Ax = b_1$, 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 设 $x \in \mathbb{R}^n$ 满足 $A^T A x = A^T b$

证明：充分性

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

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

这就证明了 $x \in \chi_{LS}$

正则化方程组

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- $A^T A x = A^T b$ 称为LS问题的正则化方程组或者法方程组

正则化方程组

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- $A^T A x = A^T b$ 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 $A^T A$ 对称正定, 从而可以采用平方根法求解方程组

正则化方法

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 在 $A^T A$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 在 $A^T A$ 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:

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

其中 $c = 1 + \varepsilon^2$

Moore-Penrose广义逆

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

Moore-Penrose广义逆

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 若 $X \in \mathbb{R}^{n \times m}$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 若 $X \in \mathbb{R}^{n \times m}$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

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

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

证明

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 设 b 在 $\mathcal{R}(A)^\perp$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 设 b 在 $\mathcal{R}(A)^\perp$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

• 所以

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

证明

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 所以

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

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

证明

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 所以

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

- 由 $Ax = b_1$ 得 $\|b_1\|_2 \leq \|A\|_2 \|x\|_2$
- 根据上述两式立得结论

注解

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 对称性: $H^T = H$

变换的性质

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 对称性: $H^T = H$
- 正交性: $H^T H = I$

变换的性质

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

变换的性质

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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 $\text{span}\{w\}^\perp$ 的镜像反射

证明

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 第一条显然

证明

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

证明

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

- 注意到

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

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

证明

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

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

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

验证

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- $\alpha^2 = x^T x$
- 分母为

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

验证

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 由于

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

其中 $\beta = 2/(v^T v)$, 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 由于

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

其中 $\beta = 2/(v^T v)$, 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 当下溢发生时，计算机有可能把结果置为零，这可能会出现 $v^T v$ 为零的情形

下溢和上溢

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 当下溢发生时，计算机有可能把结果置为零，这可能会出现 $v^T v$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 当下溢发生时，计算机有可能把结果置为零，这可能会出现 $v^T v$ 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 $\forall \alpha, \alpha v$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- Householder变换结果的形式并不需要局限于 $\alpha \mathbf{e}_1$

化其它元素为零

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- Householder变换结果的形式并不需要局限于 $\alpha \mathbf{e}_1$
- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

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

即可，其中 $\alpha^2 = \sum_{i=k}^j x_i^2$

HA的计算

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- Householder变换把一个向量中许多分量化为零

Givens变换

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

$$G(i, k, \theta) = I + s(e_i e_k^T - e_k e_i^T) \\ + (c - 1)(e_i e_i^T + e_k e_k^T)$$

其中 $c = \cos \theta$, $s = \sin \theta$

Givens变换

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

$$G(i, k, \theta) = I + s(e_i e_k^T - e_k e_i^T) + (c - 1)(e_i e_i^T + e_k e_k^T)$$

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

置零时的取值

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

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

置零时的取值

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

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

- 若要 $y_k = 0$, 只要取

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

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

旋转

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 利用 c, s 的定义进行计算，有可能发生溢出

溢出的避免

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 本节讨论LS问题求解的新方法

正交变换与LS问题

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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 $\min \|Q^T Ax - Q^T b\|_2$ 就等价于原问题 $\min \|Ax - b\|_2$

正交变换与LS问题

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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 $\min \|Q^T Ax - Q^T b\|_2$ 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

定理

设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$), 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 对 n 进行数学归纳法

证明：存在性

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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, $p \geq n - 1$

证明：存在性

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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 $p \times (n - 1)$ 矩阵成立, $p \geq n - 1$
- 设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 的第一列是 a_1

证明：存在性

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

• 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

最小二乘问题的求解

邓建松

- 设 $m = n$, A 非奇异

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

证明：唯一性

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 上式左边是正交矩阵

证明：唯一性

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

LS问题的正交变换法

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$) 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \geq n$) 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

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

- x 是原LS问题的解当且仅当
当 x 是 $Rx = c_1$ 的解

- 那么

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

- 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

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

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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, \dots, 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

第 k 步

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

- 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 $r_{kk} \geq 0$

第 k 步

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

- 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 $r_{kk} \geq 0$

- 然后计算 $\tilde{H}_k A_{22}^{(k)}$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

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

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

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 可以在 A 中存放 Q 与 R

QR分解的存储

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 算法的运算量为 $2n^2(m - n/3)$

注解

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

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

注解

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 也可以利用Givens变换或者Gram-Schmidt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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

- 也可以利用Givens变换或者Gram-Schmidt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