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

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, ..., 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

Givens变换

E交变换?

• 题目: 给定平面上n个数据点 (x_i, y_i) , i = 1, 2, ..., 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

Givens变换

E交变换法

• 题目: 给定平面上n个数据点 (x_i, y_i) , i = 1, 2, ..., 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;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

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

初笔正态变换

Householder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

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

最小二乘问题的求解

邓建枢

最小二乘问题

初等正交变物

Householder变热

Givens变换

• 最小二乘问题多产生于数据拟合

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等止父受!

Householder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, \ldots, t_m 和这m个点上的实验或观测数据 y_1, \ldots, y_m

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换

.....

Givens变换

E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, \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

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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换

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, \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

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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换

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, \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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初笔正立变换

Givens李維

• 定义残量

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

其中
$$x = (x_1, \ldots, x_n)^T$$

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

正态塞描词

• 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

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

.

• 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变担

Givens受换

- 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

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换 Givens变换

- 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

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

= $\min_{y \in \mathbb{R}^n} ||Ay - b||_2$

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

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

的最小二乘解

最小二乘解

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换 Householder变换

正衣亦協》

• 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<mark>超定方程</mark> 组或矛盾方程组

最小二乘解

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换 Householder变换

ar she she 44a A

• 最小二乘问题的解x又称作线性方程组

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

的最小二乘解

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



最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变物

11 11 202-60.

正交变换法

0 m = n:

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Givens李維

下交变换法

- $\mathbf{0}$ m=n:
 - $\mathbf{0}$ rank A = m = n

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Givens变换

- $\mathbf{0}$ m=n:
 - $\mathbf{0}$ rank A = m = n
 - 2 $\operatorname{rank} A = k < m = n$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等止父发换

Householder变换

Givens支换

 $\mathbf{0}$ m=n:

 $\mathbf{0}$ rank A = m = n

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

m > n:

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

$$\mathbf{0}$$
 $m=n$:

- \bigcirc rank A = m = n
- rank A = k < m = n
- m > n:
 - $\mathbf{0}$ rank A = n < m

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

- $\mathbf{0}$ m=n:
 - $\mathbf{0}$ rank A = m = n
- m > n:

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

11 11 20 40

Givens变换

$$\mathbf{0}$$
 $m=n$:

- $\mathbf{0}$ rank A = m = n
- 2 $\operatorname{rank} A = k < m = n$
- m > n:

 - 2 $\operatorname{rank} A = k < n < m$

最小二乘问题的求解

邓建枢

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

$$\mathbf{0}$$
 $m=n$:

- $\mathbf{0}$ rank A = m = n
- rank A = k < m = n
- m > n:
 - $\mathbf{0}$ rank A = n < m
- - $\mathbf{0}$ rank A = m < n

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

11 11 20 40

Givens变换

$$\mathbf{0}$$
 $m=n$:

- $\mathbf{0}$ rank A = m = n
- rank A = k < m = n
- m > n:
- - $\mathbf{0}$ rank A = m < n

最小二乘问题的求解

邓建杉

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变剂

-0.749

正交变换法

• 本章主要讨论(2-1)情形

最小二乘问题的求解

邓建枢

最小二乘问题

初等正交变换

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

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

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

.

● 本章主要讨论(2-1)情形

• 设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, A的<mark>值域</mark>定义为

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

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

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受打 Givens变换

E交变换法

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

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

- $\mathcal{R}(A) = \operatorname{span}(a_1, \ldots, a_n)$, 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

Givens变换

正交变换法

• 一个子空间S ⊂ \mathbb{R} "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

最小二乘问题

初等正交变换

Givens变换

正交变换法

• 一个子空间S ⊂ \mathbb{R} "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

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

E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

正态变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变物

Householder变换

正态变换法

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

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变扬

下心变换过

- m = 3, 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

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

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

正心变换过

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变的

Householder变换

- 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

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

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初笔正态变换

11 11 202-60

Givene李维

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初笔正态变换

Householder变

Givens变换

E交变换法

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

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初笔正交变描

Householder变

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

C:-----75-56

正态变换法

• 从而有

$$||r(x)||_2^2 = ||b - Ax||_2^2 = ||(b_1 - Ax) + b_2||_2^2$$

= $||b_1 - Ax||_2^2 + ||b_2||^2$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初寺正文文俠

Civone ###

正交变换法

• 从而有

$$||r(x)||_2^2 = ||b - Ax||_2^2 = ||(b_1 - Ax) + b_2||_2^2$$

= $||b_1 - Ax||_2^2 + ||b_2||^2$

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

最小二乘问题的求解

邓建村

最小二乘问题

N . 44. -- N . N . 14.

77 7 227 227 2

Givens变换

正交变换法

• 从而有

$$||r(x)||_2^2 = ||b - Ax||_2^2 = ||(b_1 - Ax) + b_2||_2^2$$

= $||b_1 - Ax||_2^2 + ||b_2||^2$

- 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 $Ax = b_1$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变物

Householder变换

正存本格员

• 最小二乘问题的解集记为 $\chi_{\rm LS}$

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变扬

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

Householder变

E交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

Householder变换

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

Householder变换

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

初等止交变换

Givens变换

F交变换法

定理

 $x \in \chi_{LS}$ 当且仅当

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

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

•
$$x \in \chi_{LS} \Longrightarrow Ax = b_1$$
, $\sharp \vdash b_1 \in \mathcal{R}(A)$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变物

Hamadalda 285 W

Givens变换

F交变换法

•
$$x \in \chi_{LS} \Longrightarrow Ax = b_1$$
, $\sharp \vdash b_1 \in \mathcal{R}(A)$

•
$$r(x) = b - Ax = b - b_1 = b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正态变换

Householder变

- $x \in \chi_{LS} \Longrightarrow Ax = b_1$, $\not\exists \vdash b_1 \in \mathcal{R}(A)$
- $r(x) = b Ax = b b_1 = b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$
- $b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$ 意味着对任意 $x \in \mathbb{R}^n$, $b_2^T A x = 0$, 所以 $(b_2^T A)^T = A^T b_2$ 是 \mathbb{R}^n 中的零向量

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初笔正交变拉

Householder变

- $x \in \chi_{LS} \Longrightarrow Ax = b_1$, $\not \exists + b_1 \in \mathcal{R}(A)$
- $r(x) = b Ax = b b_1 = b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$
- $b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$ 意味着对任意 $x \in \mathbb{R}^n$, $b_2^T A x = 0$, 所以 $(b_2^T A)^T = A^T b_2$ 是 \mathbb{R}^n 中的零向量
- 从而 $A^T r(x) = A^T b_2 = 0$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初笔正交变拉

Householder受社

- $x \in \chi_{LS} \Longrightarrow Ax = b_1$, $\not \exists + b_1 \in \mathcal{R}(A)$
- $r(x) = b Ax = b b_1 = b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$
- $b_2 \in \mathcal{R}(A)^{\perp}$ 意味着对任意 $x \in \mathbb{R}^n$, $b_2^T A x = 0$, 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: 充分性

最小二乘问题的求解

邓建枢

最小二乘问题

初等正交变的

Householder变换

Givens李維

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

邓建林

最小二乘问题

初等正交变换

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 $\forall y \in \mathbb{R}^n$,

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

$$||b - A(x + y)||_{2}^{2}$$

$$= ||b - Ax||_{2}^{2} - 2y^{T}A^{T}(b - Ax) + ||Ay||_{2}^{2}$$

$$= ||b - Ax||_{2}^{2} + ||Ay||_{2}^{2}$$

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

初笔正态变换

......

Givens夸棒

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

初笙正春本描

彻守正义文铁

Civane都指

正交变换剂

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

最小二乘问题

初等正态变换

Givens变换

正交变换剂

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Ciuone William

E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

E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

E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 $Ly = d \pi L^T x = y$

注解

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初寺正义文1

Householder变换

正交变换法

• 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

最小二乘问题的求解

邓建林

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变热

Givens变换

E交变换法

- 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:

$$A=\left(egin{array}{ccc}1&1&1\arepsilon&0&0\0&arepsilon&0&arepsilon\0&0&arepsilon\end{array}
ight),A^{\mathcal{T}}A=\left(egin{array}{ccc}c&1&1\1&c&1\1&1&c\end{array}
ight)$$

其中
$$c = 1 + \varepsilon^2$$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

N G ILL XIX

Givens李維

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

......

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

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 $x = A^{\dagger}b$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

........

Givens变换

- 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 × m阶矩阵A[†]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

最小二乘问题

初等正交变换

Givens变换

正交变换法

• 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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换

Givens变换

正交变换法

• 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[†]

扰动对解的影响

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换

Householder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

$$\min \|b - Ax\|_2$$
 $\min \|(b + \delta b) - Ax\|_2$

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

邓建林

最小二乘问题

Householder变换

Givens变换

正交变换法

定理

设 $b_1 \rightarrow \tilde{b}_1$ 分别是 $b \rightarrow \tilde{b}$ 在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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初笔正态变换

24 4 22 22 22

Givens李維

正交变换法

• 设b在 \mathcal{R}^{\perp} 上的正交投影为 b_2 , 则 $A^Tb_2=0$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初笙正心变换

Householder受

E交变换?

- 设b在 \mathcal{R}^{\perp} 上的正交投影为 b_2 ,则 $A^Tb_2=0$
- 由 $b = b_1 + b_2$ 可有

$$A^{\dagger}b = A^{\dagger}b_1 + A^{\dagger}b_2$$

= $A^{\dagger}b_1 + (A^TA)^{-1}A^Tb_2 = A^{\dagger}b_1$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Maucahaldar高級

Givens变换

E交变换法

- 设b在 \mathcal{R}^{\perp} 上的正交投影为 b_2 ,则 $A^Tb_2=0$
- 由 $b = b_1 + b_2$ 可有

$$A^{\dagger}b = A^{\dagger}b_1 + A^{\dagger}b_2$$

= $A^{\dagger}b_1 + (A^TA)^{-1}A^Tb_2 = A^{\dagger}b_1$

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

.....

Givens变换

正交变换法

• 所以

$$\|\delta x\|_2 = \|A^{\dagger}b - A^{\dagger}\tilde{b}\|_2 = \|A^{\dagger}(b_1 - \tilde{b}_1)\|_2$$

 $\leq \|A^{\dagger}\|_2 \|b_1 - \tilde{b}_1\|_2$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

......

Givens李維

正交变换法

• 所以

$$\|\delta x\|_2 = \|A^{\dagger}b - A^{\dagger}\tilde{b}\|_2 = \|A^{\dagger}(b_1 - \tilde{b}_1)\|_2$$

 $\leq \|A^{\dagger}\|_2 \|b_1 - \tilde{b}_1\|_2$

• $\triangle Ax = b_1 + \|b_1\|_2 \leq \|A\|_2 \|x\|_2$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Givens变换

正交变换法

• 所以

$$\|\delta x\|_2 = \|A^{\dagger}b - A^{\dagger}\tilde{b}\|_2 = \|A^{\dagger}(b_1 - \tilde{b}_1)\|_2$$

 $\leq \|A^{\dagger}\|_2 \|b_1 - \tilde{b}_1\|_2$

- $\triangle Ax = b_1 + \|b_1\|_2 \le \|A\|_2 \|x\|_2$
- 根据上述两式立得结论

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

Householder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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Givens变换

E交变换法

- 若*b*有变化,只有它在*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

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

T she she 46. A

- 若*b*有变化,只有它在*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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换 Householder变换

正态变描》

- 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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换 Householder变换

正交变换污

- 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

邓建村

最小二乘问题

Householder ##

Givens变换

E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

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

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

加笙正方亦加

Householder变换

Givens变换

F交变换法

• 于是我们得到

$$\kappa_2(A)^2 = ||A||_2^2 ||A^{\dagger}||_2^2$$

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

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

......

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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

Householder变换

Givens变换

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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初寺正文文書 Householder变換 Givens变換

正交变换

- 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

最小二乘问题的求解

AP XETA

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变

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

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 Givens变换

- 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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变 Givens变换

- 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

最小二乘问题的求解

A P XE TA

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变 Givens变换

- 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

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 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

最小二乘问题的求解 邓建松 最小二乘问题 初等正交变换

- 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

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 Householder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

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

- 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

在ℝ"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

初等正交变热

Householder变换

Givens变换

- 在ℝ"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

初等正交变接 Householder变换

Givens变换

- 在ℝ"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

邓建枢

最小二乘问题

知笙正态恋描

Householder变换

. . .

Givens X 195

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

邓建枢

最小二乘问题

初等正交变物

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

Householder变换

Civone都維

Givens受换

• 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



最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

Householder变换

riousenoider x

Givens 2 19

正交变换法

• 对称性: $H^T = H$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初笔正态变换

Householder变换

Givens变换

正交变换法

• 对称性: $H^T = H$

• 正交性: $H^T H = I$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

M 寸止 人文か Householder変換

Givens变换

正交变换法

• 对称性: $H^T = H$

• 正交性: $H^TH = I$

• 对合性: $H^2 = I$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Givens变换

Householder变换

• 对称性: $H^T = H$

• 正交性: $H^TH = I$

对合性: H² = I

● 反射性: $\forall x \in \mathbb{R}^n$, Hx是x关于w的垂直超平面span{w} $^\perp$ 的镜像反射

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初笙正春本

oucoboldor部類

Givens变扬

正交变换法

• 第一条显然

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变的

Householder变换

Givens变换

- 第一条显然
- 后两条可由第一条导出。事实上,

$$H^{T}H = H^{2} = (I - 2ww^{T})(I - 2ww^{T})$$

= $I - 4ww^{T} + 4ww^{T}ww^{T} = I$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

Householder变换

Givens变

正交变换法

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

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

T 75 76 46 8

- 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

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

$$= u + \alpha w - 2ww^{T}u - 2\alpha ww^{T}w$$

$$= u - \alpha w$$

定理

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变数

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
$$\alpha = \pm ||x||_2$$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初笔正态变换

Householder变换

. ..

正交变换法

• 注意到

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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

カロケム エーシェッド・4次

Householder变换

Givens受换

→ 注意到

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

• 为使 $Hx = \alpha e_1$,则w应取为

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

Householder变换

Givens变换

正交变换法

• 注意到

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

• 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

最小二乘问题

初等正交变技

Householder变

Givens变排

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

正态变换法

•
$$\alpha^2 = x^T x$$

• 分母为

$$||x - \alpha e_1||_2^2$$

$$= x^T x - 2\alpha x^T e_1 + \alpha^2$$

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

验证

最小二乘问题的求解

邓建林

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

$$||x - \alpha e_1||_2^2$$

$$= x^T x - 2\alpha x^T e_1 + \alpha^2$$

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

• 分母即为 $2(x^T - \alpha e_1^T)x$, 由此易得

$$2(\mathbf{w}^T \mathbf{x})\mathbf{w} = \mathbf{x} - \alpha \mathbf{e}_1$$

```
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
```

• 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

```
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
```

- 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:

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

- 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 $v = x \pm ||x||_2 e_1$

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

- 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

初等正交变挂

Householder变换

- - - to - A/r

• 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

Householder变换

- 为了使变换后得到的α为正数,我们应
- 问题: 如果x是一个很接近于e₁的向量,计 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: $(x_1 > 0)$

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

w不需要计算

最小二乘问题的求解

Householder变换

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 ν ,从而避免了开方运算

w不需要计算

最小二乘问题的求解

具ま一番に販

油空正水水塩

Householder变换

Givens李維

Givens受换

• 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

小连位

最小二乘问题

初等正交变排

Householder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^Tv为零的情形

下溢和上溢

最小二乘问题的求解

ル建松

最小二乘问题

初笔正态变换

Householder变换

Givens变换

- 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

小姓仏

最小二乘问题

初等正交变物

Householder变换

Givens变换

- 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 $\forall \alpha$, 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变

Householder变换

Givens X 190

正交变换法

• Householder变换结果的形式并不需要局限于 αe_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

初等正交变的

Householder变换

Givens李維

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

化其它元素为零

最小二乘问题的求解

最小二栗问是

初等正交变挑

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

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

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

正交变换注

• 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

最小二乘问是

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

最小二乘问是

初笙正春本描

初寺上父安扨

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

初坐正态亦能

11 11 202-60

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

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

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

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

Givens变换

最小二乘问题的求解

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

最小一乘问题

初等正交变换

Givens变换

F 存 本 格 辻

置零时的取值

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等止父发换

Householder变换

Givens变换

• 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

Givens变换

正交变换》

• 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

最小二乘问题的求解 邓建松

初等正交变换

Householder变换

• 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夸换

- 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夸换

- 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

......

Givens变换

• 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

最小二乘问是

初等正交变换

Householders Givens夸换

正交变换》

- 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

最小二乘问题的求解

邓建杉

最小二乘问题

Householder变形

Givens变换

正交变换法

● 本节讨论LS问题求解的新方法

最小二乘问题的求解

小斑红

最小二乘问题

如马正文文:

Householder变换

- 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 $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$,

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

最小二乘问题的求解

是小一乖问题

Managhaldan St W

Householder受换

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 $\min \|Ax - b\|_2$

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

7月111.又又8

Householder变换

- 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

最小一乘问题

初笙正春恋拍

彻寺正父受办

Givens变换

正交变换法

定理

设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ($m \ge n$), 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 3m = n且A非奇异时,上述分解是唯一的

最小二乘问题的求解

邓建松

最小一乘问题

初等正交变换

r tousenoider x y

正交变换法

• 对n进行数学归纳法

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受换法

- 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

最小二乘问题的求解

最小二乘问是

初等正交变换 Householder变换

- 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, $p \ge n-1$

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换 Householder变换

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

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

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 $Q_1^T a_1 = \|a_1\|_2 e_1$

最小二乘问题的求解

最小一乘问题

初笙正春本描

初寺正义文8

Givens变换

- 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

$$Q_1^T A = \left(\begin{array}{cc} \|a_1\|_2 & v^T \\ 0 & A_1 \end{array}\right)$$

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问是

初等正交变物

四寸止人又万

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

$$A_1 = Q_2 \left(\begin{array}{c} R_2 \\ 0 \end{array} \right)$$

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



最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初笔正交变拉

Householder变数

正交变换法

• 💠

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

则Q和R满足定理的要求。存在性得证

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变物

正交变换法

● 设*m* = *n*, *A*非奇异

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

- 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

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

- 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

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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小一乘问题

初等正态变制

· · · ·

正交变换法

• 上式左边是正交矩阵

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

VI (1 11 X X X V

Givens零棒

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

......

Givens参

- 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

最小二乘问是

初坐正存亦詞

Givens变换

正交变换法

• 设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ $(m \ge n)$ 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

最小二乘问是

初等正交变换 Householder变换 Givens变换

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

最小二乘问是

初等正交变换 Householder变换 Givens变换

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

$$Q^{\mathsf{T}}b = \left(egin{array}{c} Q_1^{\mathsf{T}} \ Q_2^{\mathsf{T}} \end{array}
ight)b = \left(egin{array}{c} c_1 \ c_2 \end{array}
ight)$$

正交变换法

那么

$$||Ax - b||_2^2 = ||Q^T Ax - Q^T b||_2^2$$

= $||Rx - c_1||_2^2 + ||c_2||_2^2$

Householder变换

正交变换法

那么

$$||Ax - b||_2^2 = ||Q^T Ax - Q^T b||_2^2$$

= $||Rx - c_1||_2^2 + ||c_2||_2^2$

正交变换法

• 那么

$$||Ax - b||_2^2 = ||Q^T Ax - Q^T b||_2^2$$

= $||Rx - c_1||_2^2 + ||c_2||_2^2$

- 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

正交变换法

那么

$$||Ax - b||_2^2 = ||Q^T Ax - Q^T b||_2^2$$

= $||Rx - c_1||_2^2 + ||c_2||_2^2$

- 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

最小一乘问题

加垒正态本地

......

Givens零換

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

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, \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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

11 11 20 30 40.

•
$$\mbox{i}_{\mathcal{A}}^{(k)} = (u_k, \ldots, u_n)$$

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

Givens零档

正交变换法

• 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

最小二乘问题的求解

小廷松

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变

正交变换法

• 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*H̃_kA*^(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李維

正交变换法

初等正交变换

Householder变换 Givens变换

正交变换法

• $\diamondsuit H_k = \operatorname{diag}(I_{k-1}, \tilde{H}_k)$

• 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

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

正交变换法

• 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

最小二乘问题

初等正交变热

Householder变换 Givens变换

正交变换法

 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

$$A = Q \left(\begin{array}{c} R \\ 0 \end{array} \right)$$

- 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

$$A = Q \left(\begin{array}{c} R \\ 0 \end{array} \right)$$

• 如此得到的上三角阵*R*的对角元都是非 负的



最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

3m 4d5 (1° 275 a16 H

正交变换法

• 可以在A中存放Q与R

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受换 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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变换

- 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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换

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
- $v_k = (1, *, ..., *)$,可把除首位的1外的元素存放在A的对角元以下位置上

最小二乘问题的求解 邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

- 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
- $v_k = (1, *, ..., *)$,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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初等正交变物

. . .

正交变换法

● 算法的运算量为2n²(m - n/3)

最小二乘问题的求解

小姓化

最小二乘问题

初等正交变数

.....

Givens变换

- 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

最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

彻寺正父受#

Householder变换

- 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

最小二乘问题的求解

小妊14

最小二乘问题

初等正交变换

Hamadala - 2856

Givens变换

- 算法的运算量为2n²(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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变数

Householder变换

Givens变换

- 算法的运算量为2n²(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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初笙正方亦:

Householder变换

- 算法的运算量为2n²(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* ≫ *n*时



最小二乘问题的求解

邓建松

最小二乘问题

初笙正春春』

Givens李維

正交变换法

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

最小二乘问题的求解

最小二乘问题

初等正交变换

Householder变

正交变换法

 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

最小二乘问题的求解 邓建松

最小二乘问题

初等正交变换

. ..

Givens变换

- 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