

π

回顾上节课内容:

从正交投影出发, 得到

(1) Gram-Schmidt正交化:

线性无关向量组 \rightarrow 正交单位向量组

(2) 列满秩矩阵的QR分解:

列满秩矩阵 \rightarrow 列正交矩阵 \times 上三角矩阵(对角线元素 > 0)

QR分解可以简化正交投影的计算

A 列满秩矩阵, $P_A = P_Q = Q(Q^T Q)^{-1} Q^T = Q Q^T$

QR分解可以简化方程组求解

假设 A 为可逆方阵且有 QR 分解

方程 $Ax = b$ 转化为方程 $QRx = b$

于是, $Rx = Q^{-1}b = Q^T b$.

由于 Q 可逆, 方程 $Ax = b$ 与方程 $Rx = Q^{-1}b = Q^T b$ 同解


优势:

$Q^{-1} = Q^T$, 容易计算正交矩阵的逆

R 为上三角矩阵, 方程容易求解

QR分解在解方程上的应用:

假设 A 为列满秩矩阵, $A = QR$, Q 为列正交矩阵, R 为对角元 > 0 上三角矩阵。

方程组转化为 $QRx = b$, 左乘 Q^T , 得到 $Rx = Q^T b$  容易求解

问题: 方程 $Ax = b$ 是否与方程 $Rx = Q^T b$ 同解呢?

1. 在方程 $Ax = b$ 有解时, 方程 $Ax = b$ 与 $Rx = Q^T b$ 同解!

$Ax = b$ 解是 $QRx = b$ 的解, $Q^T Q = I$ 得到 $Rx = Q^T QRx = Q^T b$

反过来, 假设方程 $Ax = b$ 有解, 则 $b \in \mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(Q)$, 因此, $P_A b = P_Q b = b$

如果 x 满足 $Rx = Q^T b$,

则 $QRx = \underbrace{QQ^T}_{P_Q} b = P_Q b = b$

即 $Ax = b$

2. 方程 $Ax = b$ 无解时,

(A 为列满秩矩阵, $A = QR$, Q 为列正交矩阵, R 为对角元 > 0 上三角矩阵)

因为 R 可逆, 方程 $Rx = Q^T b$ 一定有解。

$$Rx = Q^T b \Rightarrow QRx = QQ^T b,$$

$$\text{即 } Ax = QQ^T b = P_Q b = p$$

于是, 方程 $Rx = Q^T b$ 的解是方程 $Ax = p$ 的解, 其中 p 是 b 在 $\mathcal{R}(A)$ 上的正交投影

综合以上两点, 方程 $Rx = Q^T b$ 与方程 $Ax = p$ 同解

3.3 最小二乘问题(least square)

主要内容:

- (a) 最小二乘问题的引入
- (b) 最小二乘问题的理论背景
- (c) 最小二乘问题示例

(a) 问题的引入—曲线拟合:

曲线拟合是指选择适当的曲线类型来拟合观测数据

有一组观测数据 $(t_1, b_1), \dots, (t_m, b_m)$, 即时间 $t = t_i$ 时观测值为 $b = b_i$.

假设我们选用直线拟合数据:

设直线方程为 $b = C + Dt$, 此时 C, D 为**待定量**

$$\text{测量数据给出 } m \text{ 个方程} \begin{cases} C + t_1 D = b_1 \\ C + t_2 D = b_2 \\ \vdots \\ C + t_m D = b_m \end{cases}$$

$$\text{写成矩阵形式 } A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \text{ 其中 } A = \begin{bmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_m \end{bmatrix}, \mathbf{x} = \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \text{ 其中 } A = \begin{bmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_m \end{bmatrix}, \mathbf{x} = \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

由于 $t_i \neq t_j$ (测量时间不同), A 列满秩, 方程**最多有一个解**, 且常常无解

问题: 什么是最佳近似的 (C, D) 呢? 怎么求?

注意: \mathbf{b} 是固定的; 当 C, D 变化时, $A\mathbf{x}$ 跑遍了 A 的列空间 $\mathcal{R}(A) \subseteq \mathbb{R}^m$.

π

\mathbb{R}^n

$\mathcal{R}(A^T)$

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

\mathcal{A}

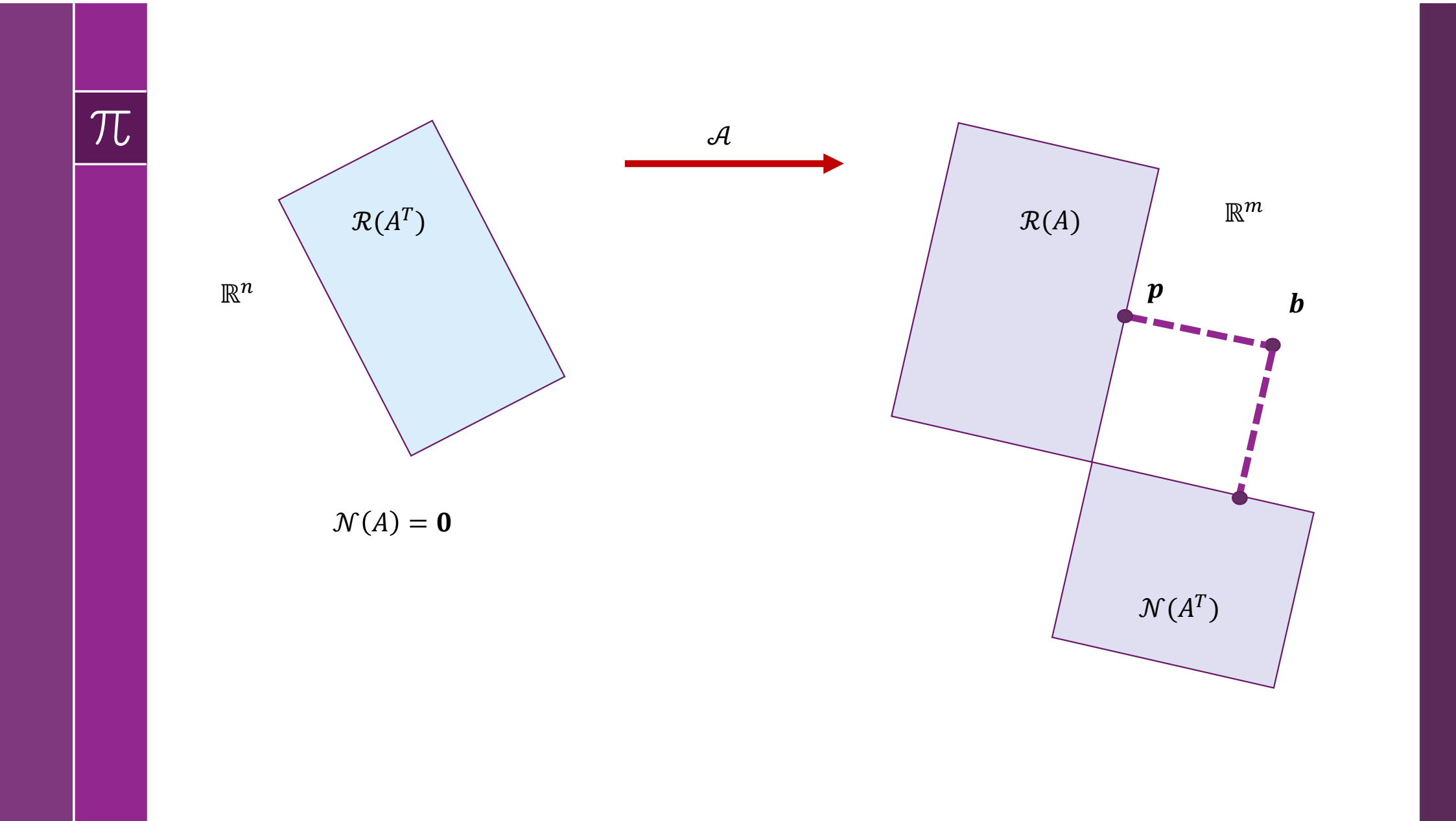
$\mathcal{R}(A)$

\mathbb{R}^m

p

b

$\mathcal{N}(A^T)$



$$Ax = \mathbf{b}, \text{ 其中 } A = \begin{bmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & t_m \end{bmatrix}, \mathbf{x} = \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

由于 $t_i \neq t_j$ (测量时间不同), A 列满秩, 方程**最多有一个解**, 且常常无解

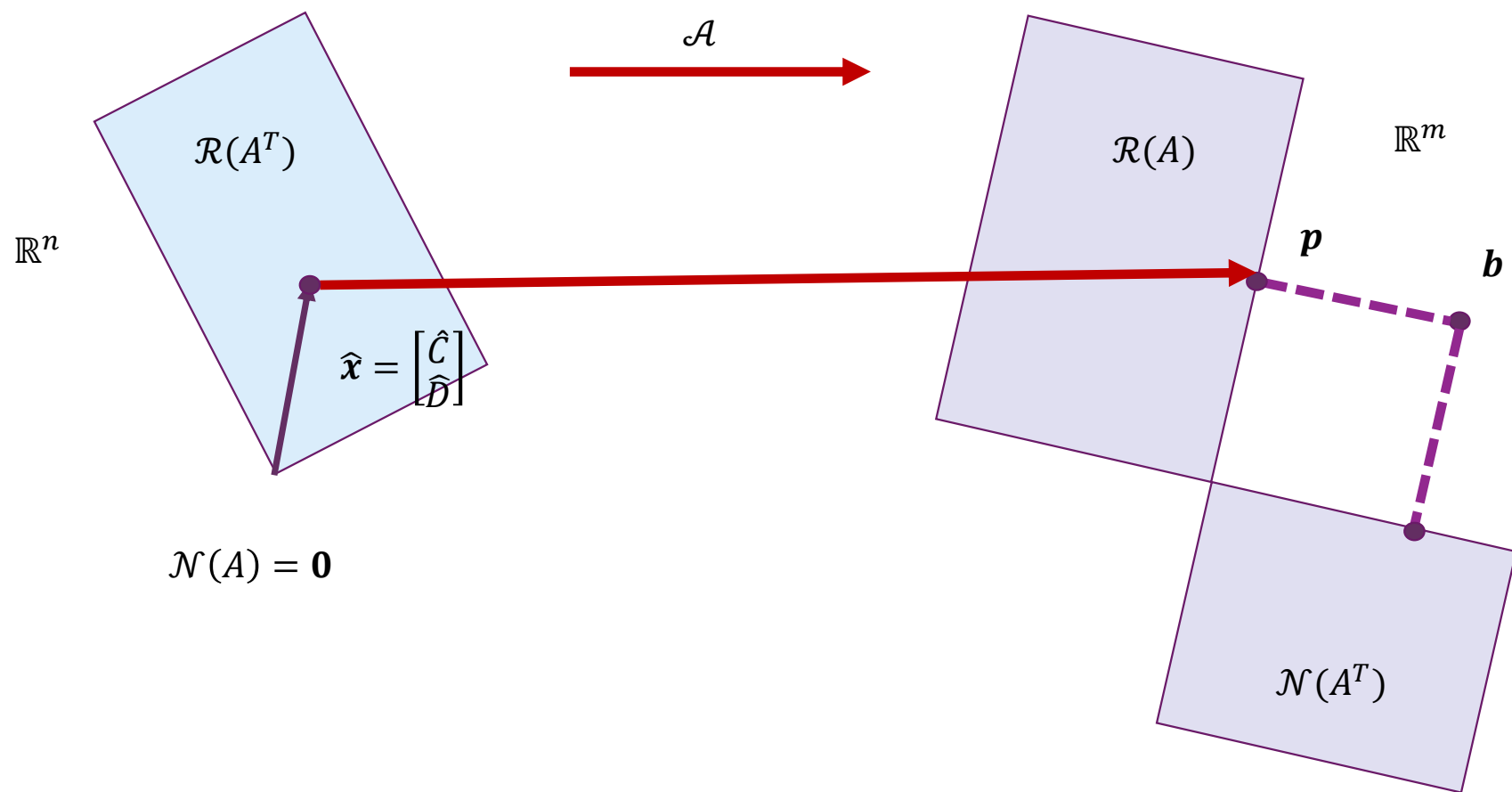
问题: 什么是最佳近似的 (C, D) 呢? 怎么求?

注意: \mathbf{b} 是固定的; 当 C, D 变化时, $A\mathbf{x}$ 跑遍了 A 的列空间 $\mathcal{R}(A) \subseteq \mathbb{R}^m$.

求最佳近似的一组 (C, D) (记为 (\hat{C}, \hat{D})), 实际上是在 $\mathcal{R}(A)$ 上找到距离 \mathbf{b} 最近的点

这等价于 $\mathbf{p} = A \begin{bmatrix} \hat{C} \\ \hat{D} \end{bmatrix}$ 为 \mathbf{b} 在子空间 $\mathcal{R}(A)$ 上的正交投影!

π



(b) 最小二乘问题的理论背景

问题：当方程 $Ax = b$ 无解时，如何找近似解？



不假设列满秩

定义：令 $e(x) = b - Ax$.

$E(x) = \|e(x)\|^2 = \|b - Ax\|^2$ 为 \mathbb{R}^n 上的函数

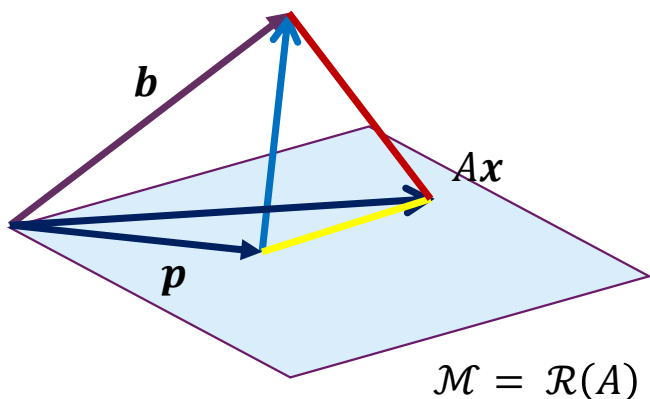
(1) 满足 $E(x) = \|b - Ax\|^2$ 最小的解 \hat{x} 称为**最小二乘解**(least square solution).

(2) 最小二乘解中长度最短的解称为**最优最小二乘解**(best solution), 记为 x^+ .

命题:

- (1) \hat{x} 为方程 $Ax = b$ 的最小二乘解当且仅当 $A\hat{x}$ 为向量 b 在 $\mathcal{R}(A)$ 上的正交投影。
- (2) \hat{x} 为最小二乘解当且仅当 $A^T A\hat{x} = A^T b$.

证明:



(1) 令 $p \in \mathcal{R}(A)$ 为 b 在 $\mathcal{R}(A)$ 上的正交投影。由勾股定理

$$E(x) = \|b - Ax\|^2 = \|Ax - p\|^2 + \|b - p\|^2$$

因此, $E(x) = \|b - Ax\|^2 \geq \|b - p\|^2$.

取等号当且仅当 $Ax = p$.

(2) 由于正交投影的知识, $A\hat{x}$ 为 b 在 $\mathcal{R}(A)$ 上的正交投影当且仅当 \hat{x} 满足正规方程 $A^T A\hat{x} = A^T b$.

因此, 正规方程 $A^T Ax = A^T b$ 的一个解就是最小二乘解

命题:

设 $\hat{\mathbf{x}}$ 为一个最小二乘解, 方程的所有最小二乘解为 $\hat{\mathbf{x}} + \mathcal{N}(A)$.

证明:

回顾方程解集=特解+零空间;

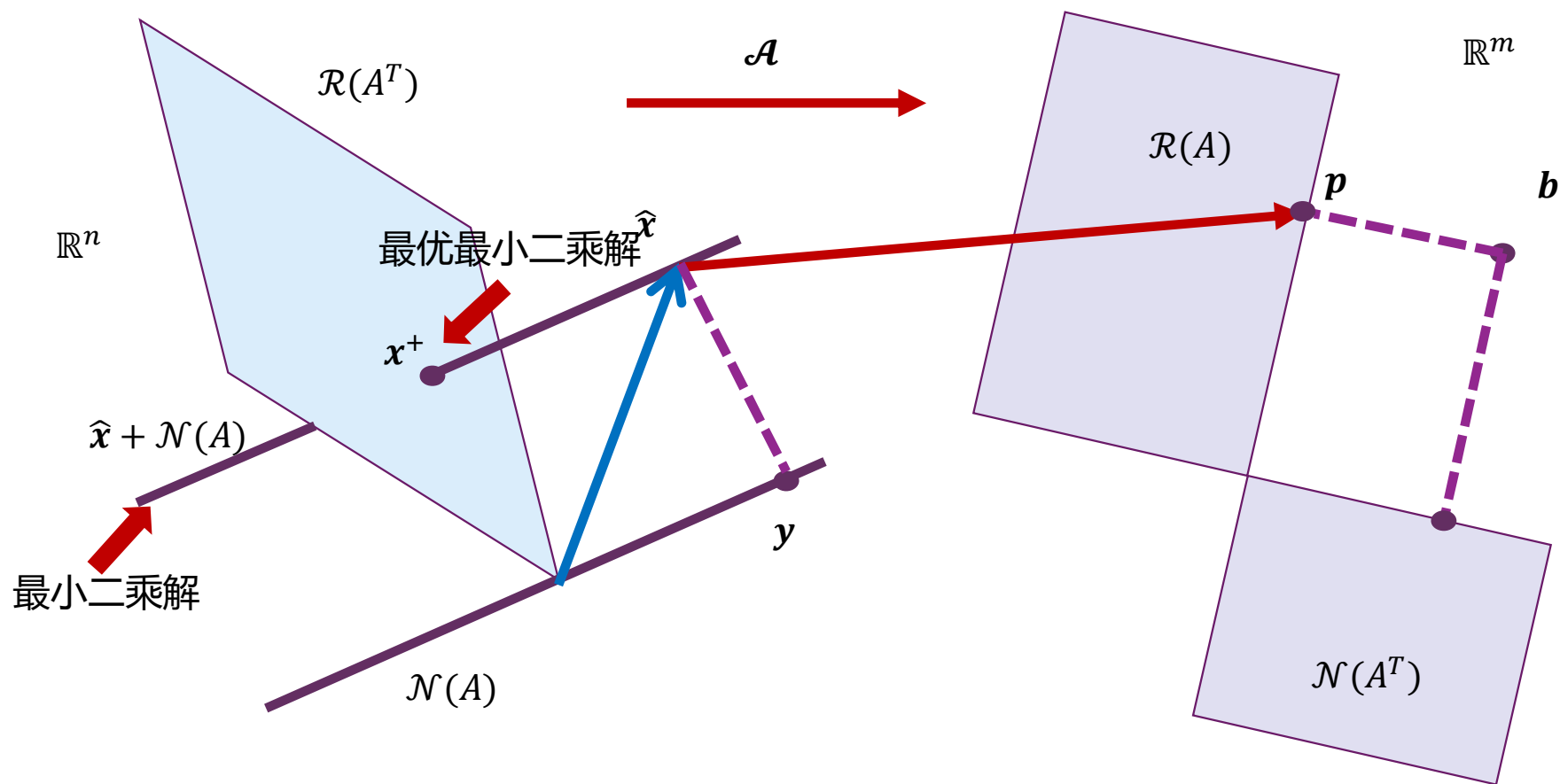
$\mathcal{N}(A^T A) = \mathcal{N}(A)$. 于是,

最小二乘解 $= \hat{\mathbf{x}} + \mathcal{N}(A^T A) = \hat{\mathbf{x}} + \mathcal{N}(A)$.

如果 A 为列满秩矩阵, 方程 $A^T A \mathbf{x} = A^T \mathbf{b}$ 有唯一解 $\hat{\mathbf{x}} = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}$.

此时最小二乘解唯一, 也是最优最小二乘解.

小结:



问题: \hat{x} 在 $\mathcal{R}(A^T)$ 上的正交投影是哪个向量?

命题:

设 \hat{x} 为一个最小二乘解。令 x^+ 为 \hat{x} 在 $\mathcal{R}(A^T)$ 上的正交投影, 则

- (1) x^+ 为最小二乘解且不依赖 \hat{x} 的选取
- (2) x^+ 为最小二乘解中长度最短的解, 即它是最优最小二乘解。

证明:

两个最小二乘解相差一个 $\mathcal{N}(A)$ 中的向量 e , e 在 $\mathcal{R}(A^T)$ 上的正交投影为零向量
于是任意两个最小二乘解在 $\mathcal{R}(A^T)$ 上的正交投影相同, 记为 x^+ .

令 y 为 \hat{x} 在 $\mathcal{N}(A)$ 上的正交投影。由勾股定理, $\|y\|^2 + \|x^+\|^2 = \|\hat{x}\|^2$.

因此, x^+ 为最小二乘解中长度最短的解, 它是最优最小二乘解。

在第六章我们将介绍用奇异值分解, 广义逆求最优最小二乘解。

回顾：QR分解在解方程上的应用

假设 A 列满秩 $A = QR$ ， Q 为列正交矩阵， R 为上三角矩阵对角元 > 0 。

方程组转化为 $QRx = b$ ，左乘 Q^T ，得到 $Rx = Q^T b$

1. 方程 $Ax = b$ 有解时，方程 $Ax = b$ 与 $Rx = Q^T b$ 同解
2. 方程 $Ax = b$ 无解时，方程 $Rx = Q^T b$ 的解是方程 $Ax = p$ 的解，其中 p 是 b 在 $\mathcal{R}(A)$ 上的正交投影

因此，方程 $Rx = Q^T b$ 的解是方程 $Ax = b$ 的最小二乘解

QR分解计算最小二乘解:

设 A 为列满秩矩阵, $A = QR$ 为 A 的QR分解。设 $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, 则方程 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 的最小二乘解为 $\hat{\mathbf{x}} = R^{-1}Q^T\mathbf{b}$.

证明:

$\hat{\mathbf{x}}$ 满足正规方程 $A^T A\hat{\mathbf{x}} = A^T \mathbf{b}$ 。于是 $R^T Q^T QR\hat{\mathbf{x}} = R^T Q^T \mathbf{b}$ 。

由于 Q 满足 $Q^T Q = I$, $R^T R\hat{\mathbf{x}} = R^T Q^T \mathbf{b}$

由于 R 可逆, R^T 也可逆, 因此 $R\hat{\mathbf{x}} = Q^T \mathbf{b}$,

于是 $\hat{\mathbf{x}} = R^{-1}Q^T \mathbf{b}$.

(c) 最小二乘问题示例: 直线拟合

有一组数据 $(t_1, b_1) = (0, 6), (t_2, b_2) = (1, 0), (t_3, b_3) = (2, 0)$,

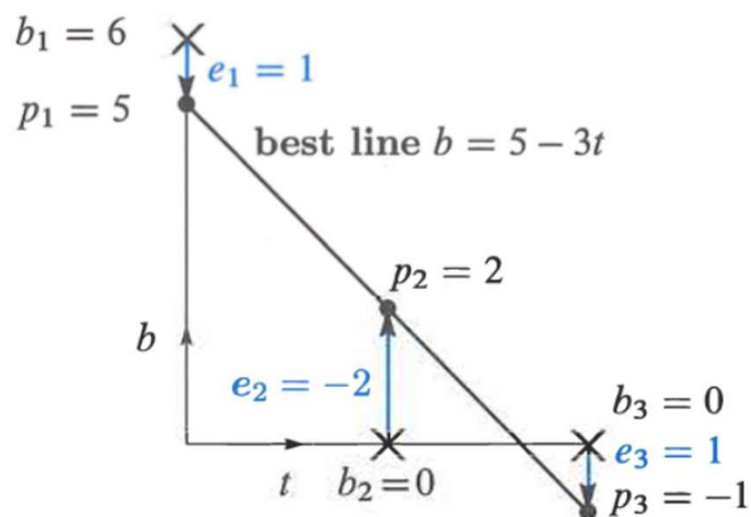
求最小二乘意义下的最佳拟合直线。

设直线方程为 $b = C + Dt$

测量数据给出方程 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, 其中, $A = \begin{bmatrix} 1 & t_1 \\ 1 & t_2 \\ 1 & t_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \mathbf{x} = \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$

最佳拟合直线的系数满足 $\hat{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \hat{C} \\ \hat{D} \end{bmatrix} = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 5 \\ -3 \end{bmatrix}$

向量 \mathbf{b} 在 $\mathcal{R}(A)$ 上的正交投影为 $\mathbf{p} = A\hat{\mathbf{x}} = 5\mathbf{a}_1 - 3\mathbf{a}_2$.



errors = vertical distances to line

从误差的角度看, 令 $\begin{bmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{bmatrix} = \mathbf{b} - A\mathbf{x} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} C + t_1 D \\ C + t_2 D \\ C + t_3 D \end{bmatrix}$ 为误差项, 即

最小二乘解 (或最佳近似解) (\hat{C}, \hat{D}) 满足 $e_1^2 + e_2^2 + e_3^2$ 最小。

最小二乘问题示例: 二次曲线拟合

有一组数据 $(t_1, b_1), \dots, (t_m, b_m)$, 求最小二乘意义下的最佳抛物拟合曲线。

假设这条抛物线为 $b = C + Dt + Et^2$

$$\text{测量数据给出 } m \text{ 个方程} \begin{cases} C + t_1 D + t_1^2 E = b_1 \\ \vdots \\ C + t_m D + t_m^2 E = b_m \end{cases}$$

$$\text{写成矩阵形式 } A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \text{ 其中 } A = \begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & t_m & t_m^2 \end{bmatrix}, \mathbf{x} = \begin{bmatrix} C \\ D \\ E \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

由于测量时间 t_i 不同, A 列满秩。最小二乘解 $\hat{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \hat{C} \\ \hat{D} \\ \hat{E} \end{bmatrix} = (A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}$

从误差上看, 令 $e_i = e_i(\mathbf{x}) = b_i - (C + t_i D + t_i^2 E)$.

最佳二次拟合曲线 $\hat{C} + \hat{D}t + \hat{E}t^2$ 满足 $e_1^2 + \cdots + e_m^2$ 最小。

第3章回顾

1. 正交投影：解正规方程 $A^T A \mathbf{x} = A^T \mathbf{b}$;

$$A \text{ 列满秩时, } \mathbf{p} = A(A^T A)^{-1} A^T \mathbf{b}$$

2. Gram-Schmidt正交化与QR分解

(1) Gram-Schmidt正交化:

线性无关向量组 \rightarrow 正交单位向量组

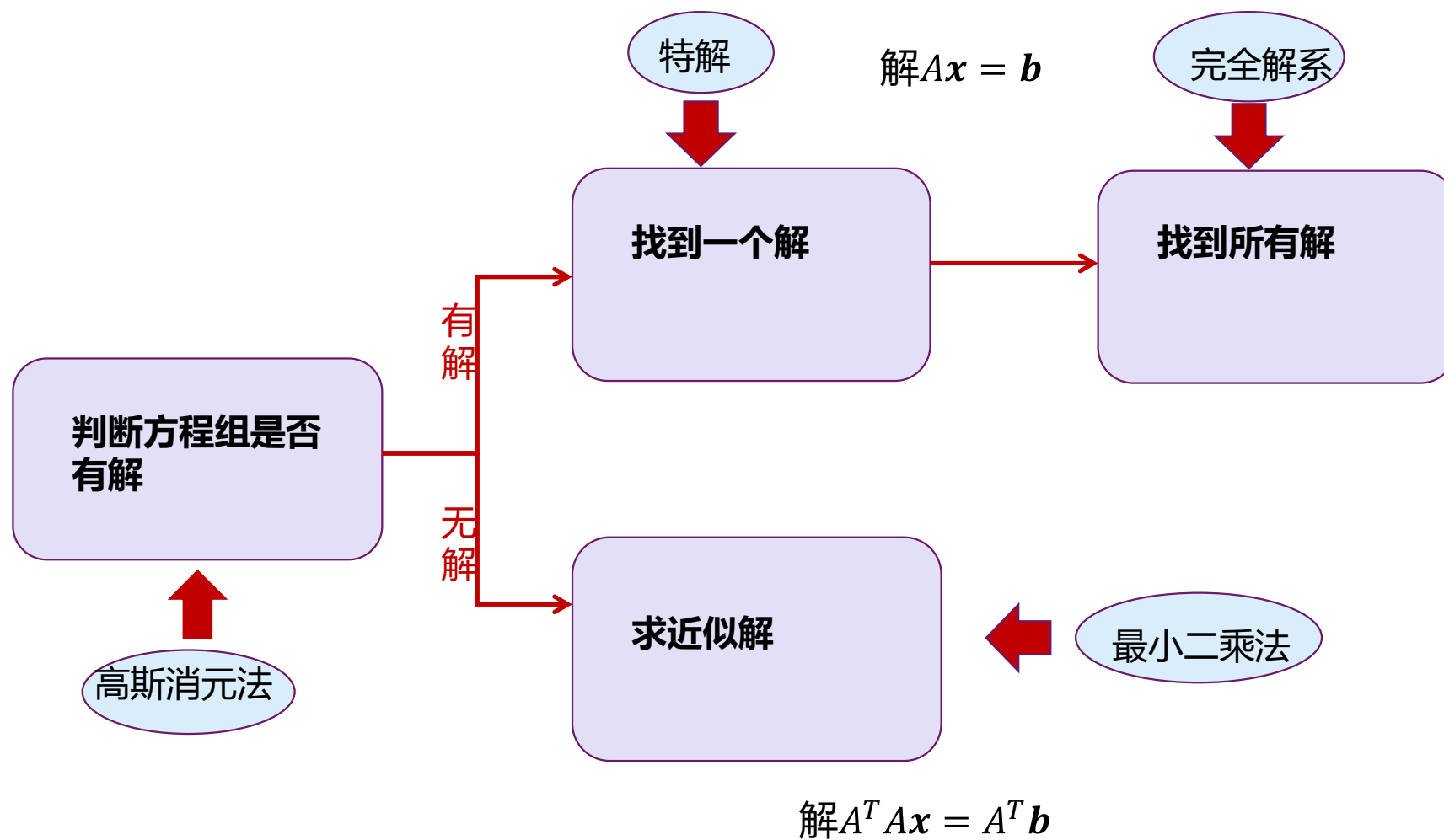
(2) 列满秩矩阵的QR分解:

列满秩矩阵 \rightarrow 列正交矩阵 \times 上三角矩阵(对角线元素 > 0)

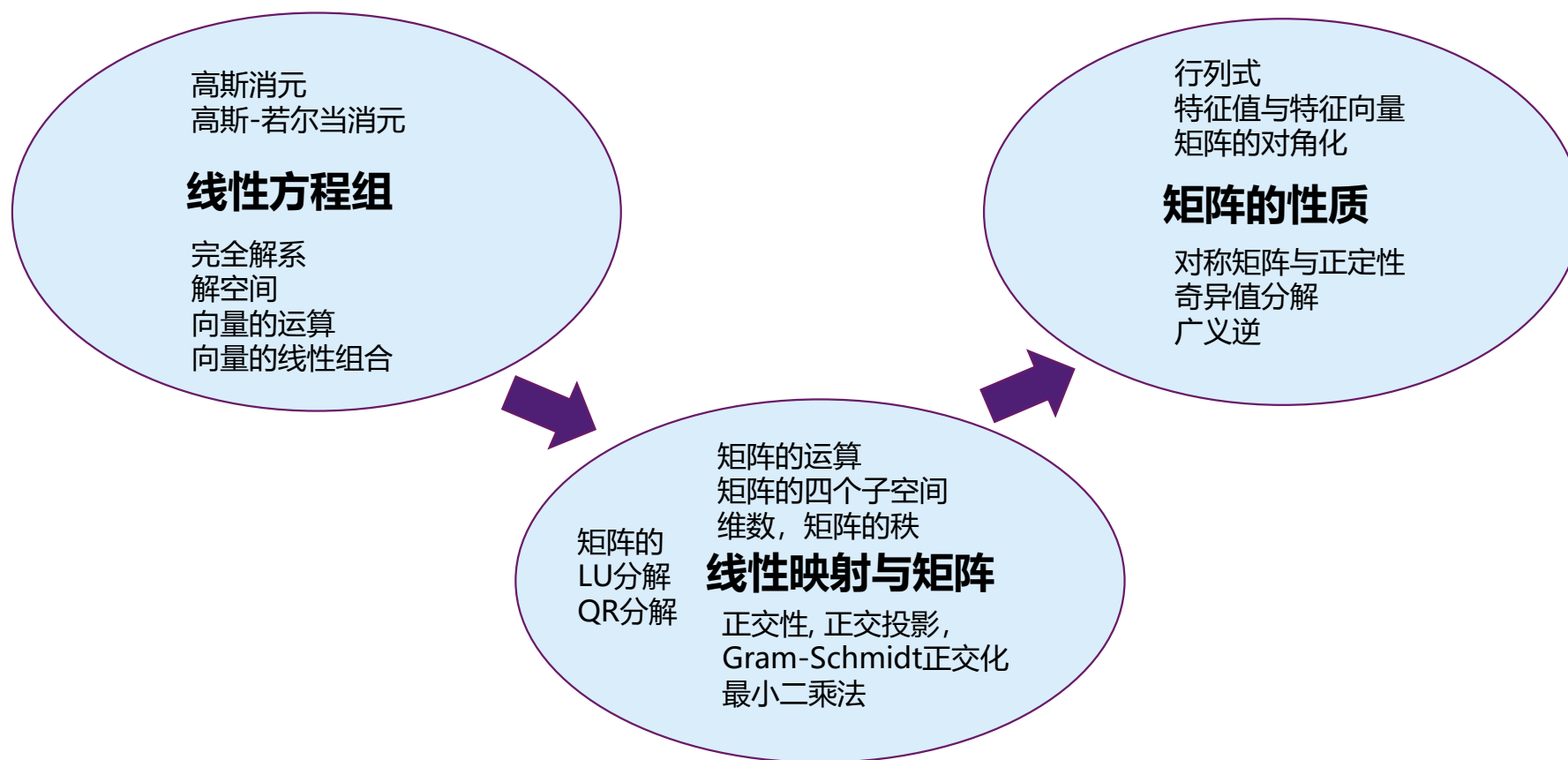
3. 最小二乘法：求解正规方程 $A^T A \mathbf{x} = A^T \mathbf{b}$; $R \mathbf{x} = Q^T \mathbf{b}$

4. QR分解简化正交投影计算、简化最小二乘解、简化方程求解；计算（高维）
平行多面体体积

前3章课程内容总结（方程组问题角度）



课程主线



剩余章节内容简介

第四章 行列式

第五章 特征值和特征向量（核心内容）

第六章 实对称矩阵（核心内容）

第七章 线性空间和线性映射

第四章 行列式

π

主要内容

4.1 行列式函数

4.2 行列式的展开式

注意：行列式只对方阵有定义

目的：

给出方阵可逆的等价条件

第五章用来计算方阵的特征值

多元微积分：雅可比行列式

行列式(determinant)的历史

历史上最早出现的**行列式**(determinant)是关于线性方程组 $Ax = b$ 的行列式, 其中 A 是方阵.

$Ax = b$ 的行列式是一个数, 它**决定 (determines)**了方程 $Ax = b$ 是否有唯一解. 有唯一解当且仅当行列式非零.

在矩阵出现后我们称其为矩阵 A 的行列式, 记为 $|A|$ 或 $\det(A)$. 因此, $\det(A) \neq 0$ 当且仅当 A 可逆.

4.1 行列式函数

- (a) 行列式函数的定义
- (b) 行列式函数的性质

(a) 行列式函数的定义

例： $n = 2$ 时的行列式函数

$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \in M_2(\mathbb{R})$, 方程组 $\begin{cases} ax + by = b_1 \\ cx + dy = b_2 \end{cases}$ 有唯一解当且仅当 $ad - bc \neq$

0. 这里 $ad - bc$ 即为 A 的行列式。

$|ad - bc|$ 也是 \mathbb{R}^2 中两个向量 $\mathbf{a}_1 = \begin{bmatrix} a \\ c \end{bmatrix}$, $\mathbf{a}_2 = \begin{bmatrix} b \\ d \end{bmatrix}$ 构成的平行四边形的面积

因此, $n = 2$, 行列式函数 = 有向面积

高维情形, 行列式函数是有向面积、有向体积的推广

$n = 2$ 时行列式函数的性质

令 $S(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$ 为 \mathbb{R}^2 中两向量 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ 构成的平行四边形的有向面积,

$S(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$ 满足下面3条:

(1) 双线性性: $S(\mathbf{a}_1, \ell \mathbf{a}_2) = \ell S(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$, $S(\mathbf{a}, \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) = S(\mathbf{a}, \mathbf{a}_1) + S(\mathbf{a}, \mathbf{a}_2)$,

$S(\ell \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) = \ell S(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$, $S(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2, \mathbf{a}) = S(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}) + S(\mathbf{a}_2, \mathbf{a})$.

(2) 共线为零: $S(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = 0$,

(3) 归一化条件: $S(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) = 1$,

实际上, 行列式由上述三条刻画。

命题:

如果 $\delta: M_2(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$ 满足:

(1) 双线性性: $\delta([\mathbf{a}, \ell_1 \mathbf{a}_1 + \ell_2 \mathbf{a}_2]) = \ell_1 \delta([\mathbf{a}, \mathbf{a}_1]) + \ell_2 \delta([\mathbf{a}, \mathbf{a}_2]),$

$\delta([\ell_1 \mathbf{a}_1 + \ell_2 \mathbf{a}_2, \mathbf{a}]) = \ell_1 \delta([\mathbf{a}_1, \mathbf{a}]) + \ell_2 \delta([\mathbf{a}_2, \mathbf{a}]).$

(2) 共线为零 $\delta([\mathbf{a}, \mathbf{a}]) = 0, \forall \mathbf{a} \in \mathbb{R}^2,$

(3) 归一化 $\delta(I_2) = 1,$

则对 $A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}, \delta(A) = ad - bc.$

证明:

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = [\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2] \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = [a\mathbf{e}_1 + c\mathbf{e}_2, b\mathbf{e}_1 + d\mathbf{e}_2].$$

$$\begin{aligned} \delta(A) &= \delta([a\mathbf{e}_1 + c\mathbf{e}_2, b\mathbf{e}_1 + d\mathbf{e}_2]) \\ &= ab\delta([\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_1]) + ad\delta([\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]) + cb\delta([\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1]) + cd\delta([\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_2]) \\ &= ad - bc. \end{aligned}$$

只需说明 $\delta([\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1]) = -\delta([\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]) = -1$

对于实矩阵，在双线性性条件下，以下两条等价

$$(2) \quad \delta([a, a]) = 0, \forall a \in \mathbb{R}^2$$

$$(2') \quad \delta(a_1, a_2) = -\delta(a_2, a_1), \forall a_1, a_2$$

假设 (2) 成立，考虑 $\delta([a_1 + a_2, a_1 + a_2]) = 0$ 。由双线性性展开得到

$$\delta([a_1, a_1]) + \delta([a_1, a_2]) + \delta([a_2, a_1]) + \delta([a_2, a_2]) = 0$$

由于 $\delta([a_1, a_1]) = \delta([a_2, a_2]) = 0$ ，得到 (2')。

(2') 中取 $a_1 = a_2 = a$ 得到 $\delta([a, a]) = -\delta([a, a])$ ，于是 $2\delta([a, a]) = 0$ ，得到 (2)

教材定义行列式函数时采用 (2')。

$n = 2$ 时行列式函数的性质

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix},$$

$$\det A^T = \det \begin{bmatrix} a & c \\ b & d \end{bmatrix} = ad - bc = \det A$$

于是行列式函数对矩阵的行有双线性性和反对称性

行列式函数的定义:

令 $n \geq 1$. 如果函数 $\delta: M_n(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$ 满足如下3条, 则 δ 称为**行列式函数**

$$(1) \delta(I_n) = 1$$

$$(2) \delta([\dots, \mathbf{a}_i, \dots, \mathbf{a}_j, \dots]) = -\delta([\dots, \mathbf{a}_j, \dots, \mathbf{a}_i, \dots])$$

(3) δ 对于矩阵的一列是线性的,

$$\text{即 } \delta([\dots, \ell_1 \mathbf{a}_i + \ell_2 \mathbf{a}'_i, \dots]) = \ell_1 \delta([\dots, \mathbf{a}_i, \dots]) + \ell_2 \delta([\dots, \mathbf{a}'_i, \dots])$$

利用初等列变换的矩阵表达, 我们有

$$\delta(AP_{ij}) = -\delta(A)$$

$$\delta(AE_{ii}(k)) = k\delta(A)$$

定理:

对每个自然数 n , 行列式函数存在且唯一.

4.1节: 行列式函数的唯一性

→ 行列式的性质

4.2节: 行列式函数的存在性

→ 行列式的计算公式