最小二乘法

张晓平

2016 年 11 月 15 日

给出 m 个点 t_1，$\cdots$，t_m 和这 m 个点上的实验或观测数据 y_1，$\cdots$，y_m，并假定给出 t_i 上取值的 n 个已知函数 $\psi_1(t), \cdots, \psi_n(t)$。考虑 ψ_i 的线性组合

$$f(x,t) = x_1\psi_1(t) + x_2\psi_2(t) + \cdots + x_n\psi_n(t)$$

希望在 t_1，$\cdots$，t_m 点上 $f(x,t)$ 能最佳地逼近这些数据 y_1，$\cdots$，y_m。

定义残量

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

则问题成为：估计参数 x_1，$\cdots$，x_n，使残量 r_1，$\cdots$，r_m 尽可能地小。

残量 (1) 的矩阵形式为

$$\boxed{r(x) = b - Ax}$$

其中

$$A = \begin{bmatrix} \psi_1(t_1) & \cdots & \psi_n(t_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_1(t_m) & \cdots & \psi_n(t_m) \end{bmatrix}, \; b = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}, \; x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \; r(x) = \begin{bmatrix} r_1(x) \\ \vdots \\ r_m(x) \end{bmatrix}.$$

- 当 $m = n$ 时，可要求 $r(x) = 0$.
- 当 $m > n$ 时，一般不可能使所有残量均为 0，但可要求残向量在某种意义下达到最小。

最小二乘问题就是求 x 使残向量 $r(x)$ 在 2 范数意义下最小。

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

$$\|r(x)\|_2 = \min_{y\in\mathbb{R}^n} \|r(y)\|_2 \tag{2}$$

该问题称为最小二乘问题 (LS, Least square)。最小二乘问题的解 x 又可称作

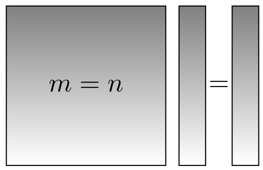
$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{m\times n} \tag{3}$$

的最小二乘解，即 x 在残向量 $r(x) = b - Ax$ 的 2 范数最小的意义下满足 (3).

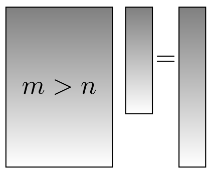
对于线性方程组 (3),

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

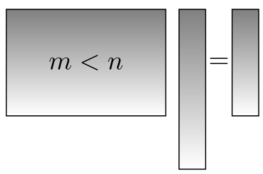
最小二乘问题的几种情形



$(1a)\ rank(A) = m = n$
$(1b)\ rank(A) = k < m = n$



$(2a)\ rank(A) = n < m$
$(2b)\ rank(A) = k < n < m$



$(3a)\ rank(A) = m < n$
$(3b)\ rank(A) = k < m < n$

设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，定义 A 的值域为

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

习题 1. $\mathcal{R}(A) = \mathit{span}\{a_1, \cdots, a_n\}$, 其中 a_i 为 A 的列向量。

定义 A 的零空间为

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

它的维数记为 $null(A)$.

定义一个子空间 $\mathcal{S} \in \mathbb{R}^n$ 的正交补为

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

定理 1. 线性方程组 (3) 的解存在的充分必要条件是

$$rank(A) = rank(A, b).$$

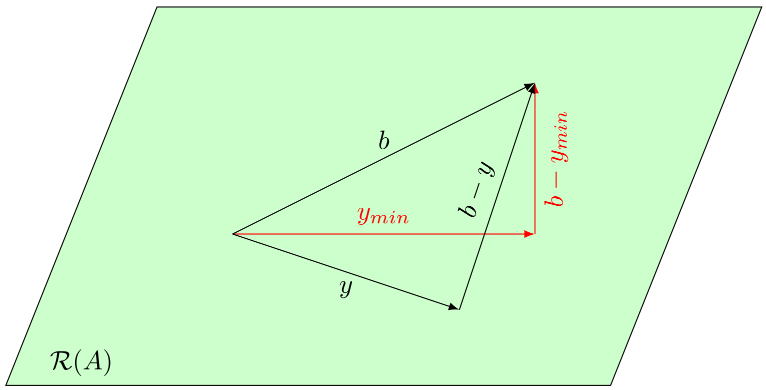


图 1: 几何解释（ $m=3,\ rank(A)=2$ ）

证明. (⇒) 设存在 x 使得 $Ax=b$，则 b 是 A 的列向量的线性组合，即有 $b\in\mathcal{R}(A)$，这说明 $\mathcal{R}(A,\ b)=\mathcal{R}(A)\ \Rightarrow\ rank(A)=rank(A,\ b)$.

(⇐) 若 $rank(A,\ b)=rank(A)$ 成立，则 $b\in\mathcal{R}(A)$，即 b 可表示为

$$b=\sum_{i=1}^{n}x_ia_i$$

这里 $A=[a_1,\ \cdots,\ a_n]$。于是，令 $x=(x_1,\ \cdots,\ x_n)^T$，即有 $Ax=b$。 □

定理 2. *若线性方程组 (3) 的解存在，且假定 x 是其任一给定的解，则 (3) 的全部解的集合是*

$$x+\mathcal{N}(A).$$

证明. 若 y 满足 (3)，则 $A(y-x)=0$，即 $y-x\in\mathcal{N}(A)$，于是有 $y=x+(y-x)\in x+\mathcal{N}(A)$。

反之，若 $y\in x+\mathcal{N}(A)$，则存在 $z\in\mathcal{N}(A)$，使 $y=x+z$，从而有 $Ay=Ax+Az=Ax=b$。 □

上述定理告诉我们，只要知道线性方程组 (3) 的一个解，便可以用它及 $\mathcal{N}(A)$ 中的向量得到 (3) 的全部解，由此可知，(3) 的解要想唯一，只有当 $\mathcal{N}(A)$ 中仅有零向量。

推论 1. *线性方程组 (3) 的解唯一的充分必要条件是 **null**$(A)=0$。*

定理 3. *线性最小二乘问题 (2) 的解总是存在的，而且其解唯一的充分必要条件是 **null**$(A)=0$。*

证明. 因为 $\mathbb{R}^m=\mathcal{R}(A)\oplus\mathcal{R}(A)^{\perp}$, 所以 b 可唯一表示为

$$b=b_1+b_2,\ \ b_1\in\mathcal{R}(A),\ b_2\in\mathcal{R}(A)^{\perp}.$$

于是 $\forall x\in\mathbb{R}^n$，$\mathcal{R}(A)\ni b_1-Ax\perp b_2$，从而

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

由此可知，$\|r(x)\|_2^2$ 达到最小当且仅当 $\|b_1-Ax\|_2^2$ 达到最小。而 $b_1\in\mathcal{R}(A)$ 意味着 $\|b_1-Ax\|_2^2$ 达到最小当且仅当 $Ax=b_1$。这样，由 $b_1\in\mathcal{R}(A)$ 和推论 1可得定理结论。 □

记最小二乘问题的解集为 $\mathcal{X}_{LS}$，即

$$\mathcal{X}_{LS}=\{x\in\mathbb{R}^n:\ x\text{是 LS 问题 (2) 的解}\}.$$

由定理 3知，$\mathcal{X}_{LS}$ 非空，且它仅有一个元素的充要条件是 A 的列向量线性无关。

定理 4. $x\in\mathcal{X}_{LS}$ 当且仅当

$$A^TAx=A^Tb. \tag{4}$$

证明. (⇒) 设 $x\in\mathcal{X}_{LS}$。由定理 3的证明知 $Ax=b_1$，其中 $b_1\in\mathcal{R}(A)$，且

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

从而 $A^Tr(x)=A^Tb_2=0\Rightarrow A^TAx=Ab$。

(⇐) 设 $x\in\mathbb{R}^n$ 满足 $A^TAx=A^Tb$，则 $\forall y\in\mathbb{R}^n$，

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

由此即得 $x\in\mathcal{X}_{LS}$。 □

(4) 称为最小二乘问题

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

的正则化方程组或法方程组。

在 A 的列向量线性无关的条件下，A^TA 对称正定，可用平方根法求解。

求解最小二乘问题的正则化方法

1. 计算$C=A^TA$，$d=A^Tb$
2. 用平方根法计算C的Cholesky分解： $C=LL^T$
3. 求解三角方程组$Ly=d$和$L^Tx=y$

计算 A^TA 需使用足够的精度，否则 A 的一些信息可能会丧失。如

$$A=\begin{bmatrix}1&1&1\\ \epsilon&0&0\\ 0&\epsilon&0\\ 0&0&\epsilon\end{bmatrix}$$

$$A^TA=\begin{bmatrix} 1+\epsilon^2 & 1 & 1 \\ 1 & 1+\epsilon^2 & 1 \\ 1 & 1 & 1+\epsilon^2 \end{bmatrix}$$

正则化方程组 $A^TAx=A^Tb$ 的解 x 可表示为

$$x=(A^TA)^{-1}Ab$$

定义

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

则最小二乘问题的解 x 可表示为

$$x=A^\dagger b,$$

而 $n\times m$ 矩阵 $A^\dagger$ 正好是 $m\times n$ 矩阵 A 的Moore-Penrose 广义逆。

定义 1. 若 $X\in\mathbb{R}^{n\times m}$ 满足

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

则称 X 是 A 的*Moore-Penrose 广义逆*，通常记为 $A^\dagger$。

设 b 有扰动 δb,

$$\begin{cases} x & \to & \min\|b-Ax\|_2 \\ x+\delta x & \to & \min\|(b+\delta b)-Ax\|_2 \end{cases}$$
$$\Rightarrow \begin{cases} x & = & A^\dagger b \\ x+\delta x & = & A^\dagger(b+\delta b)=A^\dagger\tilde{b} \end{cases}$$

定理 5. 设 b_1, $\tilde{b}_1$ 分别是 b, $\tilde{b}$ 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 $\kappa_2(A)=\|A\|_2\|A^\dagger\|_2$.

证明. 设 $b=b_1+b_2$ 且 $b_2\in\mathcal{R}(A)^\perp$，则 $A^Tb_2=0$。于是

$$A^\dagger b=A^\dagger b_1+A^\dagger b_2=A^\dagger b_1+(A^TA)^{-1}A^Tb_2=A^\dagger b_1.$$

同理可证

$$A^\dagger\tilde{b}=A^\dagger\tilde{b}_1.$$

从而

$$\|\delta x\|_2=\|A^\dagger\tilde{b}-A^\dagger b\|_2=\|A^\dagger(\tilde{b}_1-b_1)\|_2\leq\|A^\dagger\|_2\|\tilde{b}_1-b_1\|_2 \tag{5}$$

由 $Ax = b_1$ 得

$$\|b_1\|_2 \le \|A\|_2 \|x\|_2$$

即

$$\frac{1}{\|x\|_2} \le \|A\|_2 \frac{1}{\|b_1\|_2} \tag{6}$$

联立(5)和(6)可得定理结论。 □

注 1. 值得注意的是:

1. 考虑 x 的相对误差时，如果 b 有扰动，那么只有它在 $\mathcal{R}(A)$ 上的投影 b_1 会对解产生影响。
2. 最小二乘问题的解的敏感性依赖于 $\kappa_2(A)$ 的大小，称它为最小二乘问题的条件数。

   若 $\kappa_2(A)$ 很大，则称最小二乘问题是病态的；否则称为良态的。

定理 6. 设 A 的列向量线性无关，则 $\kappa_2(A)^2 = \kappa_2(A^TA)$。

证明. 一方面，因为

$$\|A\|_2^2 = \lambda_{\max}(A^TA),$$

而

$$\|A^TA\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}((A^TA)^T(A^TA))} = \sqrt{\lambda_{\max}((A^TA)^2)} = \lambda_{\max}(A^TA),$$

故

$$\|A\|_2^2 = \|A^TA\|_2.$$

另一方面，因

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

故

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

综上可知，

$$\kappa_2(A)^2 = \|A\|_2^2\|A^\dagger\|_2^2 = \|A^TA\|_2^2\|(A^TA)^{-1}\|_2^2 = \kappa_2(A^TA)$$

□

注 2. 用正则化方法求解最小二乘问题的条件数是原问题的平方，这使得求解过程增加了对舍入误差的敏感性。