线性代数 (IX)

Lecturer: 杨启哲 Last modified: 2025 年 4 月 10 日

1 最小二乘解

这一节我们首先还是聚焦于 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 这一线性方程，我们在之前已经从理论上讨论了**方程的解的情况**，但在现实情况中，很多时候方程并不存在一个解。

我们以研究人群受全日制教育的年数与收入是否存在关系这一具体问题为例。通过调查，我们得到了 n 个人的数据 $(t_1, y_1), \cdots, (t_n, y_n)$。这里 t_i 表示第 i 个人受全日制教育的年数，y_i 表示第 i 个人的年收入。

- 假设其满足**线性关系**，即 $y = f(t) = kt + b$，则我们需要求解下列方程:

$$\begin{cases} kt_1 + b = y_1 \\ \cdots \\ kt_n + b = y_n \end{cases}, \quad \text{即} \quad \begin{bmatrix} t_1 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ t_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

- 假设其满足**二次关系**，即 $y = f(t) = at^2 + bt + c$，则我们需要求解下列方程:

$$\begin{cases} at_1^2 + bt_1 + c = y_1 \\ \cdots \\ at_n^2 + bt_n + c = y_n \end{cases}, \quad \text{即} \quad \begin{bmatrix} t_1^2 & t_1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ t_n^2 & t_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

注意到，这类方程的特点是变元个数是固定的，但由于存在大量的数据，所以极有可能形成整个方程组无解的情况，如考虑 $(1,2), (1,3), (2,4), (2,5)$，则下述两个方程:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \\ 4 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix}$$

都**没有解**。

但对这类问题，我们也存在**实际的需求**。因此对这一类问题，求一个合适的**近似解** 也是非常重要的。令 A 是一个 $m \times n$ 的矩阵，所谓**近似解**，其实就是寻找到一个解 $\mathbf{x}$，使得:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|$$

尽可能的小，而这恰恰是求**$\mathbf{b}$ 到矩阵 A 的列空间 $\mathbf{C}(A)$ 的投影**。

$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\|\mathbf{b}-A\mathbf{x}\|$ 的计算尝试. 我们先参照计算投影的方式，给出上述近似解的计算：

1. 我们知道如果 $\hat{\mathbf{x}}\in\mathbb{R}$ 满足：

$$A^T(A\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{b})=\mathbf{0} \quad \text{即} \quad A^TA\hat{\mathbf{x}}=A^T\mathbf{b}$$

   则 $A\hat{\mathbf{x}}-\mathbf{b}$ 与 $\mathbf{C}(A)$ 正交。

2. 我们可以得到 $\hat{\mathbf{x}}$ 的表达式：

$$\hat{\mathbf{x}}=(A^TA)^{-1}A^T\mathbf{b}$$

   并且我们知道 $\hat{\mathbf{x}}$ 是唯一的。

我们称 $\hat{\mathbf{x}}$ 就是最小二乘解 (least square solution)，因为其误差的长度 $\|\mathbf{e}\|$

$$\mathbf{e}=\mathbf{b}-A\hat{\mathbf{x}}$$

是所有 $\mathbf{b}-A\mathbf{x}$ 中最小的。

但上述计算方法存在一个问题，我们假定了**rank**$(A)=n$，从而A^TA **是可逆的**，但事实上这并不一定成立。令 $A=\begin{bmatrix}1&1\\1&1\end{bmatrix}$，则 $A^TA=\begin{bmatrix}2&2\\2&2\end{bmatrix}$，则 $\text{rank}(A)=\text{rank}(A^TA)=1$，$A^TA$ 不可逆。

问题的解决方案在于上述求解过程实际上是求到**矩阵 A 的列空间 $\mathbf{C}(A)$ 的投影**，因此我们只需要找到一个矩阵 A' 满足：

$$\mathbf{C}(A')=\mathbf{C}(A) \quad \text{and} \quad (A')^T(A')\text{可逆。}$$

而这可以通过在矩阵 A 的列向量中选出一组**极大的线性无关向量** 来实现，即 $\mathbf{C}(A)$ 的一组基.

$\min_{x\in\mathbb{R}^n}\|\mathbf{b}-A\mathbf{x}\|$ 的计算. 我们现在来严格叙述这一过程。

1. 选择 $\mathbf{C}(A)$ 的一组基 $\{\mathbf{a}_{i_1},\cdots,\mathbf{a}_{i_r}\}$，其中 $r=\text{rank}(A)$。
2. 定义 $m\times r$ 的矩阵：

$$A'=\begin{bmatrix}\mathbf{a}_{i_1}&\cdots&\mathbf{a}_{i_r}\end{bmatrix}$$

   显然我们有：$\mathbf{C}(A)=\mathbf{C}(A')$，并且当 $\text{rank}(A)=n$ 时，A 可以就是 A 本身。

3. $\text{rank}(A')$ 是列满秩的，所以我们可以利用前面的方法来找到 $A'\mathbf{x}'=\mathbf{b}$ 的最优近似解，即：

$$\hat{\mathbf{x}}'=(A'^TA')^{-1}A'^T\mathbf{b}\in\mathbb{R}^r$$

   显然其误差 $\mathbf{e}=\mathbf{b}-A'\hat{\mathbf{x}}'$ 是所有 $\mathbf{b}-A\mathbf{x}$ 中长度最小的，即：

$$\|\mathbf{e}\|=\min_{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n}\|\mathbf{b}-A\mathbf{x}\|=\min\{\|\mathbf{b}-\mathbf{v}\| \mid \mathbf{v}\in\mathbf{C}(A')\}==\min\{\|\mathbf{b}-\mathbf{v}\| \mid \mathbf{v}\in\mathbf{C}(A)\}$$

4. 我们需要的 $\hat{\mathbf{x}}\in\mathbb{R}^n$ 只要满足：

$$A\hat{\mathbf{x}}=A'\hat{\mathbf{x}}'.$$

例 1.1（一个例子）

考察如下的方程组 $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 8 & 1 & 9 \\ 8 & 1 & 9 \\ 20 & 1 & 21 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}$$

注意到 $\mathrm{rank}(A)=2<3$，A^TA 不可逆。我们可以选择 $\mathbf{C}(A)$ 的一组基为 $\{\mathbf{a}_1=\begin{bmatrix} 0 \\ 8 \\ 8 \\ 20 \end{bmatrix}, \mathbf{a}_2=\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}\}$,

定义 A:

$$A'=\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 8 & 1 \\ 8 & 1 \\ 20 & 1 \end{bmatrix}$$

则我们有:

$$\hat{\mathbf{x}}'=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}=(A'^TA')^{-1}A'^T\mathbf{b}=\begin{bmatrix} \frac{10}{51} \\ \frac{12}{51} \end{bmatrix}$$

我们可以定义:

$$\hat{\mathbf{x}}=\begin{bmatrix} \frac{10}{51} \\ \frac{12}{51} \\ 0 \end{bmatrix}$$

则 $A\hat{\mathbf{x}}=A\hat{\mathbf{x}}'$，且 $\hat{\mathbf{x}}$ 是 $\mathbf{b}$ 的最小二乘解。

最小二乘解的简化。 在这一部分的讨论中，我们不妨先假设 A 是可逆的，注意到此时最小二乘解 $\hat{\mathbf{x}}$ 满足:

$$\hat{\mathbf{x}}=(A^TA)^{-1}A^T\mathbf{b}$$

如果 $A^TA=E$，则解可以进一步简化为:

$$\hat{\mathbf{x}}=A^T\mathbf{b}$$

定理1.2给出了满足这一条件的矩阵条件:

定理 1.2

令 $A=\begin{bmatrix}\mathbf{a}_1,\cdots,\mathbf{a}_n\end{bmatrix}$ 是一个 $m\times n$ 的矩阵，则 $A^TA=I$ 当且仅当下列的两个条件满足:

1. 对于任意的 $i\neq j$ 有 $\mathbf{a}_i\perp\mathbf{a}_j$。
2. 对于任意的 $i\in[n]$，$\mathbf{a}_i$ 是单位向量，即 $\|\mathbf{a}_i\|=1$。

证明： 只要注意到：

$$A^TA = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{a}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T\mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{a}_1^T\mathbf{a}_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{a}_n^T\mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{a}_n^T\mathbf{a}_n \end{bmatrix}$$

从而：

$$A^TA = E \iff \mathbf{a}_i^T\mathbf{a}_j = \begin{cases} 1 & 当\ i = j \\ 0 & 当\ i \neq j \end{cases}$$

□

我们进一步讨论下该条件下的矩阵 A 的意义。注意到此时 A 中每个列向量 $\mathbf{a}_i$ 都满足 $\|\mathbf{a}_i\| = 1$，从而对于所有的 $i \neq [n]$，我们有：

$$\hat{x}_i = \mathbf{a}_i^T\mathbf{b} = \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b} = \frac{\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}}{\|\mathbf{a}_i\|\|\mathbf{b}\|}\|\mathbf{b}\| = \|\mathbf{b}\| \cos\theta_i$$

这里 θ_i 是 $\mathbf{b}$ 和 $\mathbf{a}_i$ 的夹角。从而 $\mathbf{b}$ 到 $\mathbf{C}(A)$ 的投影 $\mathbf{p}$ 可以表示为：

$$\mathbf{p} = \sum_{i=1}^n \hat{x}_i\mathbf{a}_i = \sum_{i=1}^n (\|\mathbf{b}\| \cos\theta_i)\mathbf{a}_i = \sum_{i=1}^n (\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}_i)\mathbf{a}_i$$

也就是：**$\mathbf{p}$ 是 $\mathbf{b}$ 分别到每条线 span($\{\mathbf{a}_i\}$) 上的投影的和**。

例 1.3（例子1.1的延续）

我们沿着例子1.1，考虑如下矩阵：

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & \frac{11}{\sqrt{187}} \\ \frac{2}{\sqrt{33}} & \frac{5}{\sqrt{187}} \\ \frac{2}{\sqrt{33}} & \frac{5}{\sqrt{187}} \\ \frac{5}{\sqrt{33}} & -\frac{4}{\sqrt{187}} \end{bmatrix}$$

记其列向量为 $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$，注意到：

$$\mathbf{q}_1 = 4\sqrt{33}\mathbf{a}_1$$

$$\frac{\sqrt{187}}{11}\mathbf{q}_2 = \mathbf{a}_1 - \frac{3}{44}\mathbf{a}_2$$

从而我们有 $\mathbf{C}(Q) = \mathbf{C}(A)$，且 $Q^TQ = E$。通过 Q 我们计算对应的最小二乘解为：

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{q}_1)\mathbf{q}_1 + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{q}_2)\mathbf{q}_2 = \begin{bmatrix} \frac{10}{51} \\ \frac{12}{51} \end{bmatrix}.$$

注意到这**不是对任意矩阵 A 都成立**，回顾定理1.2，实际上 A 满足：

1. 对于任意的 $i \neq j$ 有 $\mathbf{a}_i \perp \mathbf{a}_j$。
2. 对于任意的 $i \in [n]$，$\mathbf{a}_i$ 是单位向量，即 $\|\mathbf{a}_i\| = 1$。

这恰恰是一组 $\mathbf{C}(A)$ 上一组特殊的基，我们称之为**标准正交基 (standard orthogonal basis)**，在这组基之下，我们可以将 $\mathbf{b}$ 在 $\mathbf{C}(A)$ 上的投影表示为：

$$\mathbf{p}=\sum_{i=1}^{n}(\mathbf{b}\cdot\mathbf{a}_i)\mathbf{a}_i$$

我们会在下一部分进一步讨论这一概念。

2 标准正交基和 Gram-Schmidt 正交化

正交矩阵。 我们首先给出**标准正交**的概念。

定义 2.1（正交向量，Orthonormal Vectors）

$\mathbf{q}_1,\cdots,\mathbf{q}_n\in\mathbb{R}^m$ 是标准正交的 (orthonormal)，如果：

$$\mathbf{q}_i^T\mathbf{q}_j=\begin{cases}0 & \text{当 } i\neq j\text{，即 }\mathbf{q}_i\text{ 和 }\mathbf{q}_j\text{ 是正交的}\\ 1 & \text{当 } i=j\text{，即 }\mathbf{q}_i\text{ 是单位向量}\end{cases}$$

我们将**列向量是标准正交的**矩阵记为 Q，显然我们有：

$$Q^TQ=E$$

但 QQ^T 则不一定为单位矩阵，比如考虑 $Q=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\\0&0\end{bmatrix}$，我们有：$QQ^T=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&0\end{bmatrix}$。而我们关注的是满足**标准正交的方阵**，我们称之为**正交矩阵**：

定义 2.2（正交矩阵，Orthogonal Matrix）

称一个 $n\times n$ 的矩阵 Q 是正交矩阵 (Orthogonal Matrix)，如果：

$$Q^TQ=E$$

或者等价的说，其列向量 $\mathbf{q}_1,\cdots,\mathbf{q}_n\in\mathbb{R}^n$ 也是标准正交的。

我们先来通过几个例子来理解下正交矩阵的概念：

1. **旋转矩阵。**第一个例子是 $\mathbb{R}^2$ 上的旋转矩阵 Q_1：

$$Q_1=\begin{bmatrix}\cos\theta&-\sin\theta\\\sin\theta&\cos\theta\end{bmatrix},\quad Q_1^{-1}=Q_1^T=\begin{bmatrix}\cos\theta&\sin\theta\\-\sin\theta&\cos\theta\end{bmatrix}$$

   Q_1 如图1所示，其也可以推广到高维的情况，相应的旋转被称作Givens 变换。

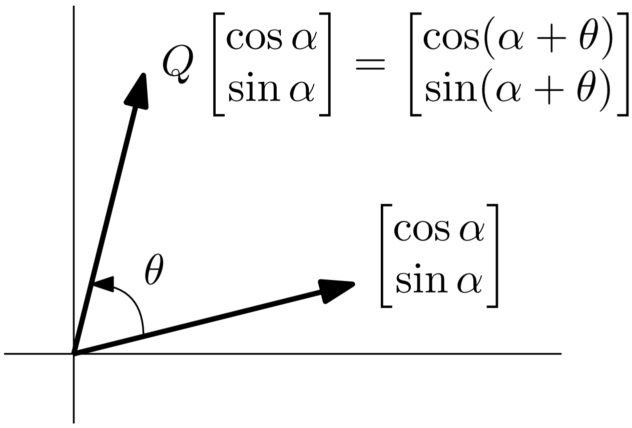

图 1　$\mathbb{R}^2$ 上的旋转矩阵

2. **转置矩阵。**第二个例子是 $\mathbb{R}^3$ 上的置换矩阵 Q_2:

$$Q_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad Q_2^{-1} = Q_2^T = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

   不难验证，其是一个正交矩阵。事实上，对于任意 $n \times n$ 上的置换矩阵 P，其都是正交矩阵。

3. **反射矩阵。**第三个例子是 $\mathbb{R}^n$ 上的反射矩阵，令 $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ 是一个单位向量，定义矩阵 Q_3:

$$Q_3 = 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T - E$$

   则我们有:

$$Q_3^T Q_3 = (2\mathbf{u}\mathbf{u}^T - E)^T(2\mathbf{u}\mathbf{u}^T - E) = 4\mathbf{u}\mathbf{u}^T - 4\mathbf{u}\mathbf{u}^T + E = E, \quad 即\ Q_3^{-1} = Q_3^T = Q_3$$

   Q_3 如图2所示，其也可以推广到高维的情况。

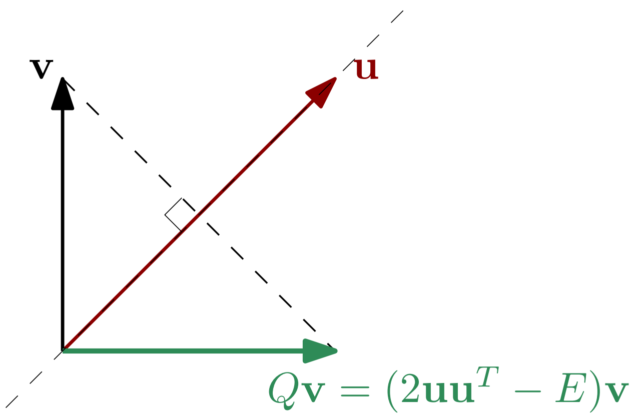

图 2　$\mathbb{R}^2$ 上的反射矩阵

正交矩阵的性质。 我们可以很容易的得到正交矩阵的一些性质:

定理 2.3

令 Q 是一个 $n \times n$ 的矩阵，则:

1. Q 是正交矩阵 $\iff$ Q 是可逆的并且 $Q^{-1} = Q^T$.
2. 若 Q 是一个正交矩阵，则其行向量也是标准正交的。

证明： 由正交矩阵的定义可直接得到。 □

正交矩阵另一重要的性质体现在几何直观上，即其**不会改变向量的长度和夹角**:

定理 2.4

令 Q 是一个 $n \times n$ 的正交矩阵，则对于任意的 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$，我们有:

1. $\|Q\mathbf{x}\| = \|\mathbf{x}\|$
2. $Q\mathbf{x} \cdot Q\mathbf{y} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$

证明：

1. $\|Q\mathbf{x}\|^2 = Q\mathbf{x} \cdot Q\mathbf{x} = \mathbf{x}^T Q^T Q\mathbf{x} = \mathbf{x}^T\mathbf{x} = \|\mathbf{x}\|^2$.
2. $Q\mathbf{x} \cdot Q\mathbf{y} = \mathbf{x}^T Q^T Q\mathbf{y} = \mathbf{x}^T\mathbf{y} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$

□

利用正交矩阵投影。 现在我们考虑到一个正交矩阵 Q 的列空间的投影。令 $\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_n \in \mathbb{R}^m$ 是标准正交的，并且:

$$Q = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \cdots & \mathbf{q}_n \end{bmatrix}$$

显然 $\text{rank}(Q) = n$。从而 $Q\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 的最小二乘解为: $\hat{\mathbf{x}} = Q^T\mathbf{b}$，对应的投影矩阵为 QQ^T，从而 $\mathbf{b}$ 到 $\mathbf{C}(Q)$ 的投影 $\mathbf{p}$ 为:

$$\mathbf{p} = Q\hat{\mathbf{x}} = QQ^T\mathbf{b} = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \cdots & \mathbf{q}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1^T\mathbf{b} \\ \vdots \\ \mathbf{q}_n^T\mathbf{b} \end{bmatrix} = \mathbf{q}_1\mathbf{q}_1^T\mathbf{b} + \cdots + \mathbf{q}_n\mathbf{q}_n^T\mathbf{b}$$

也就是: **$\mathbf{p}$ 是 $\mathbf{b}$ 分别到每条线 span($\{\mathbf{q}_i\}$) 上的投影的和**。

我们在前一节中提到了当 $A^TA = E$ 时，**$\mathbf{b}$ 到 $\mathbf{C}(A)$ 的投影可被认为是到每个 span$\{a_i\}$ 上的投影之和。**

注 2.5

我们再讨论一个简化的情况,即 $A^TA \neq E$ 但 A 的列向量是两两正交的,即假设其列向量 $\mathbf{a}_1, \cdots, \mathbf{a}_n \in$

$\mathbb{R}^m \setminus \{0\}$ 只是两两正交的，则：

$$\frac{a_1}{\|a_1\|}, \cdots, \frac{a_1}{\|a_1\|}$$

是标准正交的，并且：

$$\text{span}(\{a_1, \cdots, a_n\}) = \text{span}(\{\frac{a_1}{\|a_1\|}, \cdots, \frac{a_1}{\|a_1\|}\})$$

从而 b 到 $C(A)$ 上的投影 p 可以表示为：

$$\begin{aligned} p &= \frac{a_1}{\|a_1\|}\left(\frac{a_1}{\|a_1\|}\right)^T b + \cdots + \frac{a_n}{\|a_n\|}\left(\frac{a_n}{\|a_n\|}\right)^T b \\ &= \sum_{i\in[n]} \frac{a_i a_i^T}{a_i^T a_i} b = \sum_{i\in[n]} \frac{a_i^T b}{a_i^T a_i} a_i = \sum_{i\in[n]} \frac{\|b\| \cos\theta_i}{\|a_i\|} a_i = \sum_{i\in[n]} \frac{b \cdot a_i}{\|a_i\|^2} a_i \end{aligned}$$

这里 θ_i 是 b 和 a_i 的夹角。此时投影依旧是到每个 $\text{span}\{a_i\}$ 上的投影之和。**这说明这一结论的成立条件是对应向量两两正交**。

Gram-Schmidt 正交化 在上述求投影的过程中，当 A 不是正交矩阵，即 $A^T A \neq E$ 时，如果可以找到一个正交矩阵 Q，使得 $C(Q) = C(A)$，那么计算投影的方式也会化成简单的形式，这一问题本质上问的是，**能否从任意一组基内转化出一组标准正交基？**

我们先来看一下两个的情况：假设 $x, y \in \mathbb{R}^m \setminus \{0\}$，则 x 到 $\text{span}(\{y\})$ 上的投影为：

$$p = \frac{y^T x}{y^T y} y$$

其误差 $e = x - p$ 满足 $e \perp y$。从而我们有：

$$\text{span}(\{x, y\}) = \text{span}(\{e, y\})$$

上述方法也可以推广到更多的情况，而这就是 Gram-Schmidt 正交化方法：

定理 2.6

令 $a_1, \cdots, a_n \in \mathbb{R}^m$ 是线性无关的。则存在一组向量 $q_1, \cdots, q_n \in \mathbb{R}^m$，满足：

1. 对于任意的 $i \neq j \in [n]$，$q_i \perp q_j$。
2. $\text{span}(\{a_1, \cdots, a_n\}) = \text{span}(\{q_1, \cdots, q_n\})$

由定理2.6，并将得到这组两两正交的向量 $q_1, \cdots, q_n$ 单位化，即可得到一组标准正交基：

推论 2.7

一组 $\text{span}(\{a_1, \cdots, a_n\})$ 的标准正交基为：

$$\frac{q_1}{\|q_1\|}, \cdots, \frac{q_n}{\|q_n\|}.$$

证明: [定理2.6的证明] 我们通过归纳的方式来获取 $\mathbf{q}_1, \cdots, \mathbf{q}_n$。令 $\mathbf{q}_1 = \mathbf{a}_1$，假设对于 $k < n$，我们已经找到了 $\mathbf{q}_1, \cdots, \mathbf{q}_k$，满足:

R1. 对于任意的 $i \neq j \in [k]$，$\mathbf{q}_i \perp \mathbf{q}_j$。

R2. $\text{span}(\{\mathbf{a}_1, \cdots, \mathbf{a}_k\}) = \text{span}(\{\mathbf{q}_1, \cdots, \mathbf{q}_k\})$。

由于 $\mathbf{a}_1, \cdots, \mathbf{a}_k$ 是线性无关的，从而 $\mathbf{q}_1, \cdots, \mathbf{q}_k$ 也是线性无关的，并且 $\mathbf{q}_i \neq 0$. 我们定义:

$$\mathbf{q}_{k+1} = \mathbf{a}_{k+1} - \sum_{i=1}^{k} \frac{\mathbf{q}_i^T \mathbf{a}_{k+1}}{\mathbf{q}_i^T \mathbf{q}_i} \mathbf{q}_i$$

注意到，事实上 $\sum_{i=1}^{k} \frac{\mathbf{q}_i^T \mathbf{a}_{k+1}}{\mathbf{q}_i^T \mathbf{q}_i} \mathbf{q}_i$ 就是 $\mathbf{a}_{k+1}$ 到 $\text{span}(\{\mathbf{q}_1, \cdots, \mathbf{q}_k\})$ 的投影 $\mathbf{p}$:

$$\mathbf{p} = \sum_{i=1}^{k} \frac{\mathbf{q}_i^T \mathbf{q}_i^T}{\mathbf{q}_i^T \mathbf{q}_i} \mathbf{a}_{k+1} = \sum_{i=1}^{k} \frac{\mathbf{q}_i^T \mathbf{a}_{k+1}}{\mathbf{q}_i^T \mathbf{q}_i} \mathbf{q}_i = \sum_{i \in [k]} \frac{\|\mathbf{a}_{k+1}\| \cos \theta_i}{\|\mathbf{q}_i\|} \mathbf{q}_i$$

这里 θ_i 是 $\mathbf{a}_{k+1}$ 与 θ_i 的夹角。从而:

1. $\mathbf{q}_{k+1} = \mathbf{a}_{k+1} - \mathbf{p}$ 与每个向量 $\mathbf{q}_i (i \in [k])$ 正交。
2. $\text{span}(\{\mathbf{q}_1, \cdots, \mathbf{q}_k, \mathbf{a}_{k+1}\}) = \text{span}(\{\mathbf{q}_1, \cdots, \mathbf{q}_k, \mathbf{a}_{k+1} - \mathbf{p}\}) = \text{span}(\{\mathbf{q}_1, \cdots, \mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}\})$

□

例 2.8 (一个例子)

考察如下三个 $\mathbb{R}^3$ 中的向量:

$$\mathbf{a} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix}, \mathbf{c} = \begin{bmatrix} 3 \\ -3 \\ 3 \end{bmatrix}$$

我们可以通过 Gram-Schmidt 正交化来找到一组正交的向量组:

1. $\mathbf{q}_1 = \mathbf{a} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$
2. $\mathbf{q}_2 = \mathbf{b} - \frac{\mathbf{q}_1^T \mathbf{b}}{\mathbf{q}_1^T \mathbf{q}_1} \mathbf{q}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -2 \end{bmatrix}$
3. $\mathbf{q}_3 = \mathbf{c} - \frac{\mathbf{q}_1^T \mathbf{c}}{\mathbf{q}_1^T \mathbf{q}_1} \mathbf{q}_1 - \frac{\mathbf{q}_2^T \mathbf{c}}{\mathbf{q}_2^T \mathbf{q}_2} \mathbf{q}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

单位化后即可得到一组标准正交基: $\{\frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{q}_1, \frac{1}{\sqrt{6}} \mathbf{q}_2, \frac{1}{\sqrt{3}} \mathbf{q}_3\}$.

可逆矩阵的 QR 分解。 我们再来回顾一下 Gram-Schmidt 正交化的过程。令 $\mathbf{a}_1, \cdots, \mathbf{a}_n \in \mathbb{R}^m$ 是线性无关的一组向量，我们利用 Gram-Schmidt 正交化得到一组正交的向量组 $\mathbf{q}_1, \cdots, \mathbf{q}_n$：

$$
\begin{aligned}
\mathbf{q}_1 &= \mathbf{a}_1 \\
\mathbf{q}_2 &= \mathbf{a}_2 - \frac{\mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_2}{\mathbf{q}_1^T \mathbf{q}_1}\mathbf{q}_1 \\
\mathbf{q}_3 &= \mathbf{a}_3 - \frac{\mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_3}{\mathbf{q}_1^T \mathbf{q}_1}\mathbf{q}_1 - \frac{\mathbf{q}_2^T \mathbf{a}_3}{\mathbf{q}_2^T \mathbf{q}_2}\mathbf{q}_2 \\
&\ \vdots \\
\mathbf{q}_n &= \mathbf{a}_n - \frac{\mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_n}{\mathbf{q}_1^T \mathbf{q}_1}\mathbf{q}_1 - \frac{\mathbf{q}_2^T \mathbf{a}_n}{\mathbf{q}_2^T \mathbf{q}_2}\mathbf{q}_2 - \cdots - \frac{\mathbf{q}_{n-1}^T \mathbf{a}_n}{\mathbf{q}_{n-1}^T \mathbf{q}_{n-1}}\mathbf{q}_{n-1}
\end{aligned}
$$

从而定义下列矩阵：

$$
A = \left[\mathbf{a}_1, \cdots, \mathbf{a}_n\right], \quad \hat{Q} = \left[\mathbf{q}_1, \cdots, \mathbf{q}_n\right], \quad Q = \left[\frac{\mathbf{q}_1}{\|\mathbf{q}_1\|}, \cdots, \frac{\mathbf{q}_n}{\|\mathbf{q}_n\|}\right]
$$

则我们有：

$$
A = \hat{Q}R = \begin{bmatrix} \mathbf{q}_1 & \cdots & \mathbf{q}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_2}{\mathbf{q}_1^T \mathbf{q}_1} & \cdots & \frac{\mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_n}{\mathbf{q}_1^T \mathbf{q}_1} \\ 0 & 1 & \cdots & \frac{\mathbf{q}_2^T \mathbf{a}_n}{\mathbf{q}_2^T \mathbf{q}_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}
$$

$$
A = QR = \begin{bmatrix} \frac{\mathbf{q}_1}{\|\mathbf{q}_1\|} & \cdots & \frac{\mathbf{q}_n}{\|\mathbf{q}_n\|} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \|\mathbf{q}_1\| & \frac{\mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_2}{\|\mathbf{q}_1\|} & \cdots & \frac{\mathbf{q}_1^T \mathbf{a}_n}{\|\mathbf{q}_1\|} \\ 0 & \|\mathbf{q}_2\| & \cdots & \frac{\mathbf{q}_2^T \mathbf{a}_n}{\|\mathbf{q}_2\|} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \|\mathbf{q}_n\| \end{bmatrix}
$$

这意味着任何一个可逆矩阵 A 都可以分解为一个正交矩阵 Q 和一个主对角线上是正数的上三角矩阵 R 的乘积，即 QR 分解。

定理 2.9

令 A 是一个 $n \times n$ 的可逆矩阵，则存在一个正交矩阵 Q 和一个主对角线上是正数的上三角矩阵 R，使得

$$
A = QR.
$$

特别的，该分解是唯一的。

证明： 存在性的证明已有上述过程给出，我们下给出唯一性的证明。反设其中存在两个 QR 分解 $A = Q_1R_1 = Q_2R_2$，其中 Q_1, Q_2 是正交矩阵，R_1, R_2 是上三角矩阵，我们有：

$$
Q_2^{-1}Q_1 = R_2R_1^{-1}.
$$

这意味着 $R' = R_2R_1^{-1}$ 是一个正交矩阵并且是一个上三角矩阵。下用数学归纳法证明 R' 的第 i 列是 $\mathbf{e}_i$，即只有第 i 个元素是 1，其余元素都是 0 的向量。

- 当 $i=1$ 时，由上三角矩阵的定义及 R 的每一列都是单位向量可得 R' 的第一列是 $\boldsymbol{e}_1$，显然成立。
- 假设当 $i=k$ 时成立，即 R' 的第 k 列是 $\boldsymbol{e}_k$，则考虑 R' 的第 $k+1$ 列 $\mathbf{r}_{k+1}$，则我们有：
  1. 对于 $i>k+1$，$\mathbf{r}_{k+1}(i)=0$.
  2. 对于 $i<k+1$，注意到 R' 是正交矩阵，从而第 $k+1$ 列和第 i 列是正交的，从而 $\mathbf{r}_{k+1}(i)=0$.
  3. 对于 $i=k+1$，注意到 R' 是一个正对角元的上三角矩阵，从而 $\mathbf{r}_{k+1}(k+1)=1$.

□

例 2.10（一个例子）

考察矩阵：

$$A=\begin{bmatrix}1&2&4\\0&0&5\\0&3&6\end{bmatrix}$$

其 $\text{rank}(A)=3$，将其列向量进行 Gram-Schmidt 正交化，得到：

1. $\mathbf{q}_1=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}$.
2. $\mathbf{q}_2=\begin{bmatrix}2\\0\\3\end{bmatrix}-\frac{(1,0,0)\cdot(2,0,3)}{(1,0,0)\cdot(1,0,0)}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\\3\end{bmatrix}$
3. $\mathbf{q}_3=\begin{bmatrix}4\\5\\6\end{bmatrix}-\frac{(1,0,0)\cdot(4,5,6)}{(1,0,0)\cdot(1,0,0)}\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}-\frac{(0,0,3)\cdot(4,5,6)}{(0,0,3)\cdot(0,0,3)}\begin{bmatrix}0\\0\\3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\5\\0\end{bmatrix}$

从而我们有：

$$A=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&5\\0&3&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&2&4\\0&1&2\\0&0&1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&2&4\\0&3&6\\0&0&5\end{bmatrix}(=QR).$$

我们再利用矩阵的 QR 分解来观察一下投影的计算。注意到：

$$A^TA=R^TQ^TQR=R^TR$$

从而：

$$A^TA\hat{x}=A^T\mathbf{b}\implies R^TR\hat{x}=R^TQ^T\mathbf{b}\implies R\hat{x}=Q^T\mathbf{b}$$

这意味着：

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

这里 R^{-1} 是一个上三角矩阵，从而 $\hat{x}$ 可以通过回代法求解。

最小二乘解的进一步讨论。 最后我们想再展现一下" 求最小距离" 的一个理解。事实上，我们上述所讨论的，是与**内积定义** 无关的性质，这意味着，我们可以在别的内积空间中进行类似的讨论，如之前我们提到，我们可以定义在 $[\pi, \pi]$ 上的实值函数所构成的线性空间 F 上的内积：

$$f \cdot g \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\pi}^{\pi} f(x)g(x)dx$$

考察 F 上的一个子空间 V，其由在 $[\pi, \pi]$ 上不超过 5 次的实系数多项式构成，显然 V 是 F 上的一个子空间。现在考虑如下一个问题，我们希望求一个 $f = \sin x$ 在 V 上的投影 g，即：

$$\min_{g \in V} \|f - g\| = \min_{g \in V} \sqrt{\int_{-\pi}^{\pi} (\sin x - g(x))^2 dx}$$

注意到：$1, x, x^2, x^3, x^4, x^5$ 实际上是 V 的一组基，我们可以通过 Gram-Schmidt 正交化将其转化为一组正交基 $\hat{\boldsymbol{e}}_1, \ldots, \hat{\boldsymbol{e}}_6$：

$$\begin{aligned}
&\hat{\boldsymbol{e}}_1 = 1\\
&\hat{\boldsymbol{e}}_2 = x - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x dx}{\int_{-\pi}^{\pi} dx} = x\\
&\hat{\boldsymbol{e}}_3 = x^2 - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^2 dx}{\int_{-\pi}^{\pi} dx} - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^3 dx}{\int_{-\pi}^{\pi} x^2 dx} x = x^2 - \frac{1}{3}\pi^2\\
&\hat{\boldsymbol{e}}_4 = x^3 - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^3 dx}{\int_{-\pi}^{\pi} dx} - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^4 dx}{\int_{-\pi}^{\pi} x^2 dx} x^2 - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^3(x^2 - \frac{1}{3}\pi^2) dx}{\int_{-\pi}^{\pi} (x^2 - \frac{1}{3}\pi^2)^2 dx}(x^2 - \frac{1}{3}\pi^2) = x^3 - \frac{3}{5}\pi^2 x\\
&\hat{\boldsymbol{e}}_5 = x^4 - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^4 dx}{\int_{-\pi}^{\pi} dx} - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^5 dx}{\int_{-\pi}^{\pi} x^2 dx} - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^4(x^2 - \frac{1}{3}\pi^2) dx}{\int_{-\pi}^{\pi} (x^2 - \frac{1}{3}\pi^2)^2 dx}(x^2 - \frac{1}{3}\pi^2) - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^4(x^3 - \frac{3}{5}\pi^2 x) dx}{\int_{-\pi}^{\pi} (x^3 - \frac{3}{5}\pi^2 x)^2 dx}(x^3 - \frac{3}{5}\pi^2 x)\\
&\quad = x^4 - \frac{3}{5}\pi^2 x^2 + \frac{3}{35}\pi^4\\
&\hat{\boldsymbol{e}}_6 = x^5 - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^5 dx}{\int_{-\pi}^{\pi} dx} - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^6 dx}{\int_{-\pi}^{\pi} x^2 dx} - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^5(x^2 - \frac{1}{3}\pi^2) dx}{\int_{-\pi}^{\pi} (x^2 - \frac{1}{3}\pi^2)^2 dx}(x^2 - \frac{1}{3}\pi^2) - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^5(x^3 - \frac{3}{5}\pi^2 x) dx}{\int_{-\pi}^{\pi} (x^3 - \frac{3}{5}\pi^2 x)^2 dx}(x^3 - \frac{3}{5}\pi^2 x)\\
&\quad - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} x^5(x^4 - \frac{3}{5}\pi^2 x^2 + \frac{3}{35}\pi^4) dx}{\int_{-\pi}^{\pi} (x^4 - \frac{3}{5}\pi^2 x^2 + \frac{3}{35}\pi^4)^2 dx}(x^4 - \frac{3}{5}\pi^2 x^2 + \frac{3}{35}\pi^4)\\
&\quad = x^5 - \frac{5}{2}\pi^2 x^3 + \frac{15}{14}\pi^4 x
\end{aligned}$$

单位化后便可得到一组标准正交基 $\boldsymbol{e}_1, \ldots, \boldsymbol{e}_6$，计算 $\sin x$ 到对应元素的投影可得：

$$\begin{aligned}
&(\boldsymbol{e}_1 \cdot \sin x)\boldsymbol{e}_1 = \frac{1}{\int_{-\pi}^{\pi} dx} \int_{-\pi}^{\pi} \sin x dx = 0\\
&(\boldsymbol{e}_2 \cdot \sin x)\boldsymbol{e}_2 = \left(\frac{1}{\int_{-\pi}^{\pi} x^2 dx} \int_{-\pi}^{\pi} x \sin x dx\right) x = \left(\frac{3}{2\pi^3} \int_{-\pi}^{\pi} x \sin x dx\right) x = \frac{3}{\pi^2} x\\
&(\boldsymbol{e}_3 \cdot \sin x)\boldsymbol{e}_3 = \left(\frac{1}{\int_{-\pi}^{\pi} (x^2 - \frac{1}{3}\pi^2)^2 dx} \int_{-\pi}^{\pi} (x^2 - \frac{1}{3}\pi^2) \sin x dx\right)(x^2 - \frac{1}{3}\pi^2) = 0\\
&(\boldsymbol{e}_4 \cdot \sin x)\boldsymbol{e}_4 = \left(\frac{1}{\int_{-\pi}^{\pi} (x^3 - \frac{3}{5}\pi^2 x)^2 dx} \int_{-\pi}^{\pi} (x^3 - \frac{3}{5}\pi^2 x) \sin x dx\right)(x^3 - \frac{3}{5}\pi^2 x) = (\frac{35}{2\pi^4} - \frac{525}{2\pi^6})(x^3 - \frac{3}{5}\pi^2 x)
\end{aligned}$$

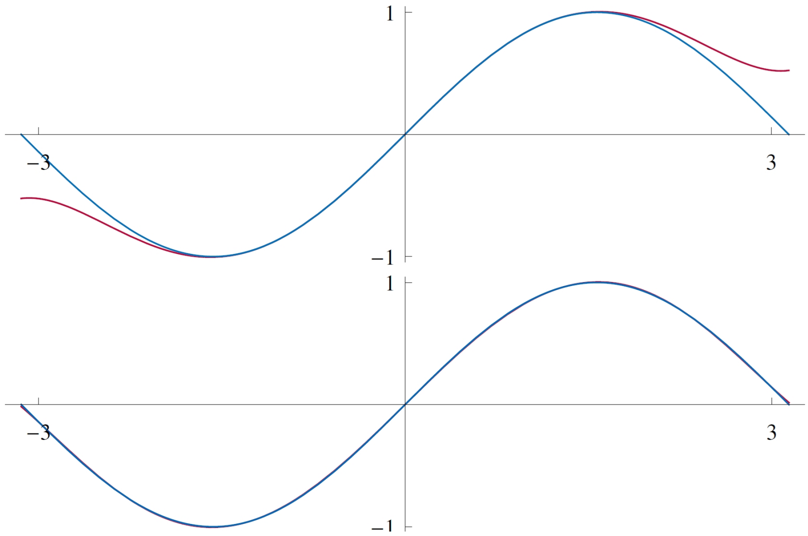

图 3　$\sin x$ 和由上述两个五次多项式的比较，上图为 $\sin x$ 和由泰勒多项式展开得到的多项式的比较，下图为 $\sin x$ 和由 Gram-Schmidt 正交化得到的多项式的比较，图中蓝色曲线表示的是 $\sin x$。

$$(\boldsymbol{e}_5\cdot\sin x)\boldsymbol{e}_5=\left(\frac{1}{\int_{-\pi}^{\pi}(x^4-\frac{3}{5}\pi^2x^2+\frac{3}{35}\pi^4)^2\mathrm{d}x}\int_{-\pi}^{\pi}(x^4-\frac{3}{5}\pi^2x^2+\frac{3}{35}\pi^4)\sin x\mathrm{d}x\right)(x^4-\frac{3}{5}\pi^2x^2+\frac{3}{35}\pi^4)=0$$

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{e}_6\cdot\sin x)\boldsymbol{e}_6&=\left(\frac{1}{\int_{-\pi}^{\pi}(x^5-\frac{5}{2}\pi^2x^3+\frac{15}{14}\pi^4x)^2\mathrm{d}x}\int_{-\pi}^{\pi}(x^5-\frac{5}{2}\pi^2x^3+\frac{15}{14}\pi^4x)\sin x\mathrm{d}x\right)(x^5-\frac{5}{2}\pi^2x^3+\frac{15}{14}\pi^4x)\\&=-\frac{1386}{937\pi^{10}}(3\pi^4+35\pi^2-840)(x^5-\frac{5}{2}\pi^2x^3+\frac{15}{14}\pi^4x)\end{aligned}$$

从而，我们可以计算 g:

$$g(x)=\sum_{i=1}^{6}((\sin x)\cdot\boldsymbol{e}_i)\boldsymbol{e}_i\approx 0.987862x-0.155271x^3+0.00564312x^5.$$

而这恰恰是比由泰勒多项式展开的五次多项式逼近:

$$x-\frac{x^3}{6}+\frac{x^5}{120}$$

更接近 $\sin x$ 的多项式，见图3所示。

注 2.11

该例与图3来源于《Linear Algebra Done Right》的第 3 版，作者是 Sheldon Axler。其中的计算则由笔者完成，如有错误，欢迎指正。