计算方法

刘景铖

计算机软件新技术国家重点实验室
南京大学

回顾

上节课：

- Chebyshev**插值**
- Chebyshev**多**项式
- **由函数/多**项式亦可组成的向量空间

这节课：

- **最小二乘法**-离散线性版本：给定矩阵A，向量b，求x使得$\|Ax-b\|_2^2$**最小**

课程计划

最小二乘法

- **建模和应用讨论：图像拼接**
- **三角级数近似**

最小二乘法—求解线性方程

给定矩阵$A \in \mathbb{R}^{m\times n}$，向量$b \in \mathbb{R}^m$，求$x \in \mathbb{R}^n$**使得**$Ax = b$

只有三种情况

- 对任意的向量b，**存在唯一解**
- 不可解，或方程不一致 (inconsistent, over-determined)
- **存在无**穷多组解 (under-determined)

性质：只要存在两个不同的解，则一定存在无穷多组解。

接下来：对于方程不一致的情况，我们讨论**最小二乘法**

最佳平方逼近

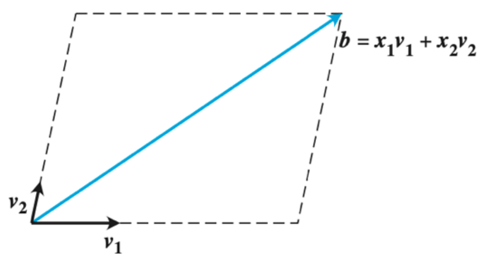
最小二乘法-离散线性版本

从最简单的设定开始。我们想要找出一个线性拟合，使误差的2-**范数最小化**：

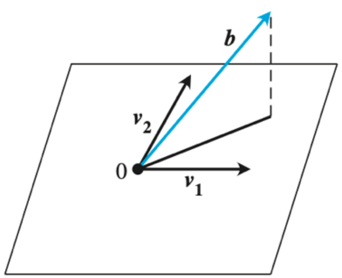
- 给定矩阵A，向量b，求x使得$\|Ax-b\|_2^2$**最小**

$$\begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_1 & A_2 & A_3 & \dots & A_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = x_1A_1 + x_2A_2 + \cdots + x_nA_n$$

- **右边是** $A_1, A_2, \dots, A_n$ **能**够生成的线性子空间



(a)



(b)

向量b不一定在该子空间内，此时，应该找“最接近”的

最小二乘法建模：图像拼接

照片来源：由本人拍摄于2022-03-18

最小二乘法建模：图像拼接

- 在图片上选取一些参考点（比如同一个建筑，对应的树）
- 希望找到矩阵$A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$和向量 $b \in \mathbb{R}^2$
- 使得对于每一个参考点都有

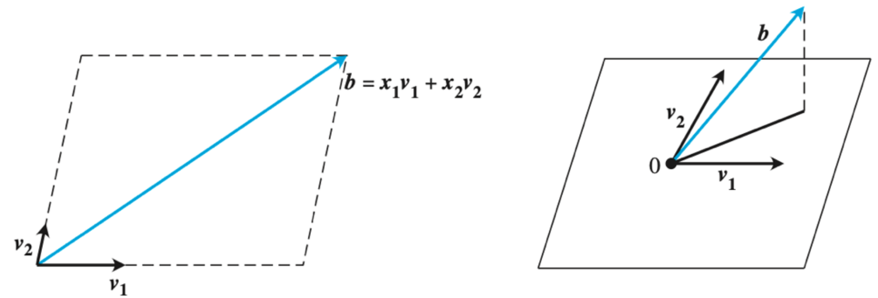
$\approx A \times$

$+b$

- **未知量是什么？**
- **思考：**值得注意的是这里的量词的顺序
  - 如果，对于每一个参考点，都要求找到一个矩阵$A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$和向量 $b \in \mathbb{R}^2$最小化误差呢？

最小二乘法-几何解释

从最简单的设定开始。我们想要找出一个线性拟合，使误差的2-**范数最小化：**



(a) (b)

最接近的点记为$A\bar{x}$，则$(A\bar{x} - b) \perp \{A\,x: x \in R^n\}$

即$\forall x \in R^n, (A\,x)^\top(A\bar{x} - b) = 0$，或者$x^\top A^\top(A\bar{x} - b) = 0$

要$\forall x \in R^n$同时成立，只有一种可能:$A^\top(A\bar{x} - b) = 0$

因此$A^\top A\bar{x} = A^\top b$ **法线方程**

最小二乘法-微积分解释

注意到最小化 $\|x\|_2$ **和最小化**$\|x\|_2^2$**是等价的**（单调性）

记$\overline{x} = \underset{x}{\operatorname{argmin}} \|Ax - b\|_2^2$

对x**求梯度**

$$\nabla \|Ax - b\|_2^2 = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right) \|Ax - b\|_2^2$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right) (x^\top A^\top Ax + b^\top b - b^\top Ax - x^\top A^\top b)$$

$$= 2A^\top A\, x - 2A^\top b$$

把梯度设为0，亦可得到法线方程$A^\top A\overline{x} = A^\top b$

注：一般不会直接通过$\overline{x} = (A^\top A)^{-1}A^\top b$来运算

解线性方程组，与矩阵求逆是两回事，以后会展开讨论

最小二乘法-变分法解释

记误差函数为$E(x) \coloneqq \|Ax-b\|_2^2$
则$\bar{x}$满足法线方程$A^\top A\bar{x} = A^T b$当且仅当

$$\forall y, E(\bar{x}) \le E(\bar{x}+y)$$

证明(Sketch)：

$$E(\bar{x}+y) = E(x) + (Ay)^\top(Ay) + 2y^\top A^\top(A\bar{x}-b)$$

注意到

$$(\forall y, y^\top A^\top(A\bar{x}-b)=0) \iff A^\top(A\bar{x}-b)=0$$

考虑逆反命题：

$$(\exists y, y^\top A^\top(A\bar{x}-b)\neq 0) \Leftrightarrow \left(\exists y, y^\top A^\top(A\bar{x}-b) < 0\right)$$

进而，**通**过取足够**短的向量**y，可以令

$$(Ay)^\top(Ay) + 2y^\top A^\top(A\bar{x}-b) < 0$$

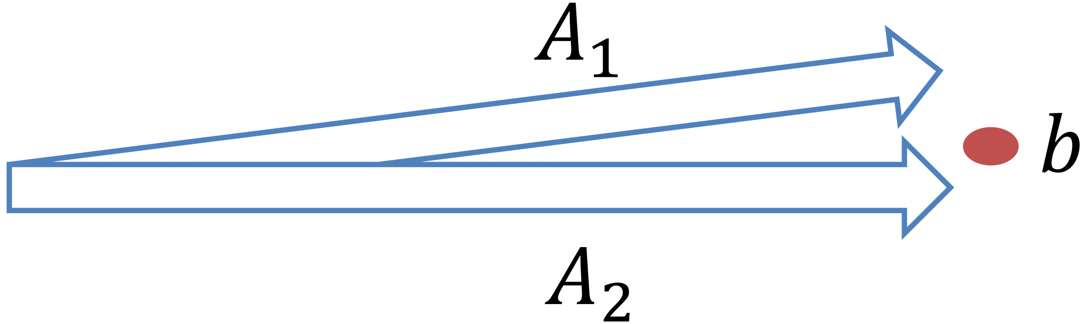
进而得到$E(\bar{x}) > E(\bar{x}+y)$

最小二乘法与正交性

给定矩阵A，向量b，求x使得$\|Ax-b\|_2^2$**最小**。

由法线方程 $A^\top A\overline{x}=A^\top b$，**得出**$\overline{x}=(A^\top A)^{-1}A^\top b$

- **但是**，一般数值算法中不会<u>直接</u>求解法线方程
- 更不会求$(A^\top A)^{-1}$



- **如**图所示，不管选A_1还是 A_2，都能给出对b**不**错的近似，但是对应的x**是非常不一**样的

最小二乘法-Gram-Schmidt正交化

一个更好的做法是通过Gram-Schmidt求$A = QR$分解

- 如果A的每一列是正规化的(orthonormal)?

$$A = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_1 & A_2 & A_3 & \dots & A_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

$$A_i^\top A_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

则$A^\top A = I$

法线方程$A^\top A\overline{x} = A^\top b$简化为$\overline{x} = A^\top b$

最小二乘法-Gram-Schmidt正交化

- 给定A，**如何找出一组正规化的(orthonormal)基**？

$$A = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_1 & A_2 & A_3 & \cdots & A_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

- $y_1 = A_1, q_1 = y_1/\|y_1\|_2$
- $y_2 = A_2 - q_1(A_2^\top q_1), q_2 = y_2/\|y_2\|_2$
- 类似地
- $y_j = A_j - q_1\left(A_j^\top q_1\right) - q_2\left(A_j^\top q_2\right) - \cdots, q_j = y_j/\left\|y_j\right\|_2$

最小二乘法-Gram-Schmidt正交化

- 给定A，**如何找出**一组正规化的(orthonormal)基？

$$A = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_1 & A_2 & A_3 & \cdots & A_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

Classical Gram–Schmidt orthogonalization

Let $A_j, j = 1, \ldots, n$ be linearly independent vectors.

for $j = 1, 2, \ldots, n$
　　$y = A_j$
　　for $i = 1, 2, \ldots, j-1$
　　　　$r_{ij} = q_i^T A_j$
　　　　$y = y - r_{ij} q_i$
　　end
　　$r_{jj} = ||y||_2$
　　$q_j = y / r_{jj}$
end

最小二乘法-Gram-Schmidt正交化

- 给定A，**如何找出一组正规化的(orthonormal)基**？

$$A = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_1 & A_2 & A_3 & \cdots & A_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

Modified Gram–Schmidt orthogonalization

Let $A_j, j = 1, \ldots, n$ be linearly independent vectors.

for $j = 1, 2, \ldots, n$
    $y = A_j$
    for $i = 1, 2, \ldots, j-1$
        $r_{ij} = q_i^T y$
        $y = y - r_{ij} q_i$
    end
    $r_{jj} = ||y||_2$
    $q_j = y / r_{jj}$
end

最小二乘法与正交性

通过Gram-Schmidt求$A=QR$分解

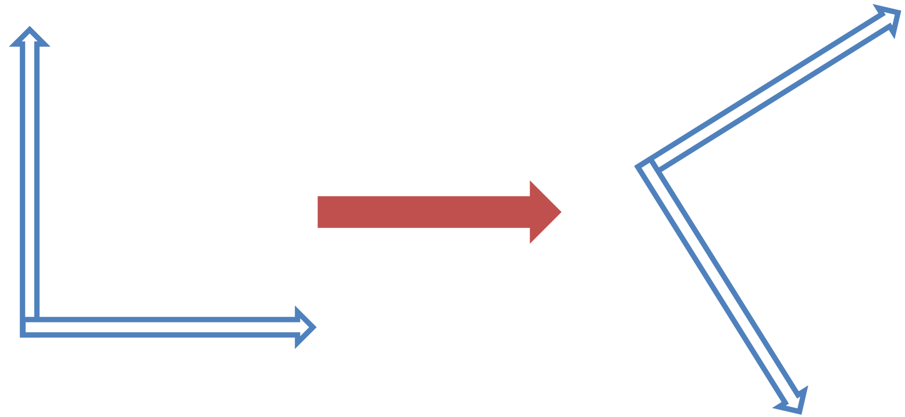
$$\begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_1 & A_2 & A_3 & \dots & A_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ q_1 & q_2 & q_3 & \dots & q_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{11} & \dots & r_{1n} \\ 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & r_{nn} \end{pmatrix}$$

- 其中Q为正交阵：$Q^\top Q = I$
  - 这意味着$\langle q_i, q_j \rangle = \begin{cases} 1, & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$
- R为上三角阵

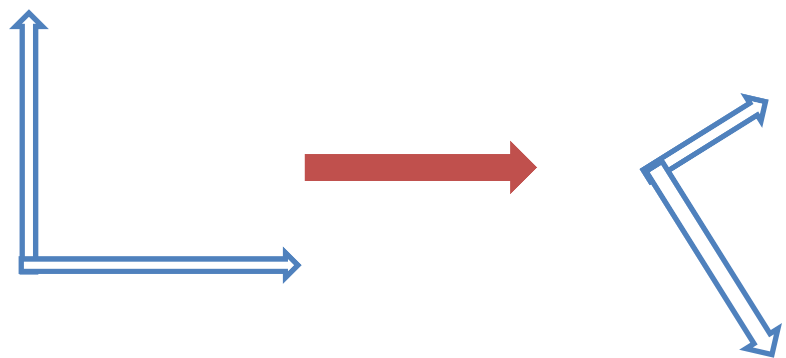
通过QR分解，$A^\top A\overline{x} = A^\top b \Rightarrow \overline{x} = R^{-1}Q^\top b$
并不需要计算 $A^\top A$
实践中，更常用，更数值稳定的是Householder反射子，而不是Gram-Schmidt

最小二乘法与正交性

正交变换



非正交变换



最小二乘法与正交性

若Q为正交阵：$Q^\top Q = I$，则$\|Qx\|_2 = \|x\|_2$

Isometry：保距映射

思考：除了长度，还可以考虑角度

$$\langle Qx, Qy\rangle = ?$$

最小二乘法-方程不一致的情形

- $(A^\top A)^{-1}A^\top$是A的一个$pseudoinverse$

只要A的列是线性无关的，则$A^\top A$可逆

$$\overline{x} = (A^\top A)^{-1}A^\top b$$

思考：如果是方程数不足呢 (under-determined)?

- $Ax = b$**的解并不唯一**，有无穷多组解
- **能否找到**长度最短的解？
- 下次作业：A的行是线性无关的话，亦可写出一个pseudoinverse
- Bonus: 验证这样找到的，**是**长度最短的解

回顾：向量空间的范数

$\mathbb{R}^n$ **上的**无穷范数，对于向量$x=(x_1,x_2,\dots,x_n)^\top$

$$\|x\|_\infty \coloneqq \max_i |x_i|$$

$\mathbb{R}^n$ 上的**2-范数**，对于向量$x=(x_1,x_2,\dots,x_n)^\top$

$$\|x\|_2 \coloneqq \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\langle x, x\rangle}$$

函数f的无穷范数 (∞-norm)：

$$\|f\|_\infty \coloneqq \sup |f|$$

函数f的2-范数 (2-norm)：

$$\|f\|_2 \coloneqq \sqrt{\int |f(x)|^2\, dx}$$

如果要找到函数f的最佳2-范数近似（最佳平方逼近），要比最佳无穷范数的近似容易得多：最小二乘法

内积空间

内积$\langle \cdot,\cdot \rangle$

- 对称性 $\langle x, y\rangle = \langle y, x\rangle$
- 线性$\langle a\, x + b\, y, z\rangle = a\langle x, z\rangle + b\langle y, z\rangle$
- **正定性**$\langle x, x\rangle > 0, \forall x \neq 0$

函数的内积：

$$\langle f, g\rangle := \int f(x) g(x) dx$$

带权重的函数内积

$$\langle f, g\rangle_w := \int f(x) g(x)\, w(x) dx$$

内积天然自带范数的定义: $\|x\| = \sqrt{\langle x, x\rangle}$

正交函数族与正交多项式

称函数族$\phi_1(x), \phi_2(x), \ldots$是正交化的，如果它们满足：

$$\langle \phi_i, \phi_j \rangle = \begin{cases} C_i, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

- **如果** $\phi_1(x), \phi_2(x), \ldots$**是多**项式，也称之为正交多项式

Chebyshev**多**项式也是多项式的一组基

它关于$w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$**所定**义的内积是正交的：

$$\langle f, g \rangle_w := \int_{-1}^{1} f(x) g(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$$

正交系统中的最小二乘法：傅里叶级数

给定函数 f 和一组基函数ϕ_i，能否找到系数$\{c_i\}$使得

$$f(x) \approx \sum_i c_i \, \phi_i(x)$$

设 $\phi_0 = \frac{1}{2}$,

$$\phi_k(x) = \cos(kx)\,, k = 1,2,\ldots,n,$$
$$\phi_{n+k}(x) = \sin(kx)\,, k = 1,2,\ldots,n-1$$

则函数族$\phi_0(x), \phi_1(x), \ldots$在$[-\pi, \pi]$上是正交的

证明： $\cos(kx)$和 $\sin(kx)$ 在$[-\pi, \pi]$上的积分都为0，再由积化和差公式即可得：

$$\sin(y)\cos(x) = \frac{1}{2}(\sin(y-x) + \sin(y+x))$$
$$\cos(y)\cos(x) = \frac{1}{2}(\cos(y-x) + \cos(y+x))$$
$$\sin(y)\sin(x) = \frac{1}{2}(\cos(y-x) - \cos(y+x))$$

正交系统中的最小二乘法：傅里叶级数（选讲）

给定函数 f，能否找到系数$\{a_i, b_i\}$使得

$$f(x) \approx \frac{a_0}{2} + a_n \cos nx + \sum_{k=1}^{n-1} (a_k \cos kx + b_k \sin kx)$$

这里也可以使用最小二乘法（sketch）：

- 记误差函数为

$$E(x) := f(x) - \left(\frac{a_0}{2} + a_n \cos nx + \sum_{k=1}^{n-1} (a_k \cos kx + b_k \sin kx) \right)$$

- 考虑 $\|E(x)\|_2^2 = \langle E(x), E(x) \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} E(x)^2 dx$
- 对 $\|E(x)\|_2^2$关于系数 $\{a_i, b_i\}$求偏导并设为0，即得到法线方程
- 由于正交性，可推导得

$$a_k = \frac{\langle f, \cos kx \rangle}{\langle \cos kx, \cos kx \rangle}$$

$$b_k = \frac{\langle f, \sin kx \rangle}{\langle \sin kx, \sin kx \rangle}$$