第三讲　线性最小二乘问题

1 问题介绍
2 初等变换矩阵
3 QR 分解
4 奇异值分解
5 线性最小二乘问题的求解方法
6 广义逆 *, 扰动分析 *, 推广与应用 *

1 问题介绍

考虑 **线性最小二乘问题**

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax-b\|_2^2 \tag{3.1}$$

其中 $A\in\mathbb{R}^{m\times n}$, $b\in\mathbb{R}^m$. 问题 (3.1) 的解称为 **最小二乘解**.

- 当 $m=n$ 且 A 非奇异时, 这就是一个线性方程组, 解为 $x=A^{-1}b$;
- 当 $m<n$ 时, 未知量个数大于约束个数, **欠定** (或亚定) 方程组
- 当 $m>n$ 时, 约束个数大于未知量个数, **超定**方程组

为了讨论方便, 本讲总是假定 A 是满秩的.

欠定方程组

若 $m < n$, 则 $Ax = b$ 存在无穷多个解 (A 满秩).

这时我们通常寻求**最小范数解**, 转化为下面的**约束优化问题**:

$$\min_{Ax=b} \frac{1}{2}\|x\|_2^2 \tag{3.2}$$

对应的 **Lagrange 函数**为

$$\mathcal{L}(x, \lambda) = \frac{1}{2}\|x\|_2^2 + \lambda^{\mathsf{T}}(Ax - b),$$

其中 $\lambda = [\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m]^{\mathsf{T}}$ 是 **Lagrange 乘子**.

此时优化问题 (3.2) 的解就是 $\mathcal{L}(x,\lambda)$ 的**鞍点**:

$$(x_*,\lambda_*)=\arg\min_x\max_\lambda \mathcal{L}(x,\lambda),$$

也即是下面方程组的解:

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x}=x+A^{\mathsf{T}}\lambda=0,\quad \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\lambda}=Ax-b=0.$$

写成矩阵形式为

$$\begin{bmatrix} I & A^{\mathsf{T}} \\ A & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ \lambda \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ b \end{bmatrix}.$$

如果 A 满秩, 则系数矩阵非奇异, 上述方程组存在唯一解.

超定方程组

当 $m > n$ 时, 线性方程组 $Ax = b$ 的解可能不存在. 记

$$J(x) = \|Ax - b\|_2^2.$$

易知 $J(x)$ 是关于 x 的二次凸函数.

x_* 是问题 (3.1) 的解当且仅当 x_* 是 $J(x)$ 的稳定点.

本讲我们主要讨论 **超定** 线性最小二乘问题的求解.

2 初等变换矩阵

2.1 初等矩阵变换

2.2 Gauss 变换

2.3 Householder 变换

2.4 Givens 变换

2.5 正交变换的舍入误差分析

矩阵计算的基本思想

把复杂的问题转化为等价的较简单的且易于求解问题

矩阵变换

- 完成这个转化的基本工具就是矩阵变换
- 除了三类初等变换外, 矩阵计算中常用的矩阵变换还有:

Gauss 变换, Householder 变换 和 Givens 变换

2.1 初等矩阵变换

我们称矩阵

$$E(u,v,\tau)=I-\tau uv^*$$

为**初等矩阵变换**或**初等矩阵**, 其中 $u,v\in\mathbb{C}^n$ 是非零向量, τ 是一个非零复数.



- 初等矩阵是单位矩阵的一个秩 1 扰动/修正.
- 高等代数中的三类初等矩阵都可以表示上述形式

$$E_1=\begin{bmatrix}1&&&&&\\&\ddots&&&&\\&&0&1&&\\&&&\ddots&&\\&&1&0&&\\&&&&\ddots&\\&&&&&1\end{bmatrix},\ E_2=\begin{bmatrix}1&&&&&\\&\ddots&&&&\\&&1&&&\\&&&c&&\\&&&&1&\\&&&&&\ddots\\&&&&&1\end{bmatrix},\ E_3=\begin{bmatrix}1&&&&&\\&\ddots&&&&\\&&1&&&\\&&&\ddots&&\\&&c&&1&\\&&&&&\ddots\\&&&&&1\end{bmatrix}$$

定理 设 $E(u,v,\tau)$ 是一个初等变换矩阵, 我们有

(1) $\det(E(u,v,\tau)) = 1 - \tau v^* u$;

(2) 若 $1 - \tau v^* u \neq 0$, 则 $E(u,v,\tau)$ 非奇异, 且

$$(E(u,v,\tau))^{-1} = E(u,v,\gamma), \quad \text{其中 } \gamma = \frac{\tau}{\tau v^* u - 1}.$$

(板书)

更一般地, 我们有下面的结论.

Sylverster 降幂公式

设 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, $B \in \mathbb{C}^{n\times m}$, 其中 $m \geq n$, 则有

$$\det(\lambda I - AB) = \lambda^{m-n} \det(\lambda I - BA).$$

因此 AB 和 BA 具有相同的非零特征值.

(留作练习)

2.2 Gauss 变换

设 $l_j = [0, \ldots, 0, l_{j+1,j}, \ldots, l_{n,j}]^{\mathsf{T}}, j = 1, 2, \ldots, n$, 则 **Gauss 变换** 定义为

$$L(l_j) \triangleq E(l_j, e_j, -1) = I + l_j e_j^{\mathsf{T}} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & l_{j+1,j} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & l_{n,j} & & & 1 \end{bmatrix},$$

向量 l_j 称为 **Gauss 向量**.

✍ Gauss 变换主要用于矩阵的 LU 分解.

2.3 Householder 变换

定义 我们称矩阵

$$H = I - \beta v v^*, \quad 0 \neq v \in \mathbb{C}^n, \quad \beta = \frac{2}{v^* v} \tag{3.3}$$

为 **Householder 矩阵** 或 **Householder 变换**, 向量 v 称为 **Householder 向量**. 我们通常将矩阵 (3.3) 记为 $H(v)$.



- Householder 矩阵也是初等矩阵.
- 有时也将 Householder 变换定义为

$$H = I - 2vv^*, \quad v \in \mathbb{C}^n \text{ 且 } \|v\|_2 = 1.$$

- Householder 矩阵有时也称为**初等 Hermite 矩阵**.

几何意义

从几何上看, Householder 变换就是一个关于超平面 $\mathrm{span}\{v\}^\perp$ 的反射.

对任意一个向量 $x \in \mathbb{C}^n$, 可将其写为

$$x = \alpha v + x_{v^\perp}, \qquad \left(\text{with } \alpha = \frac{v^*x}{v^*v}\right)$$

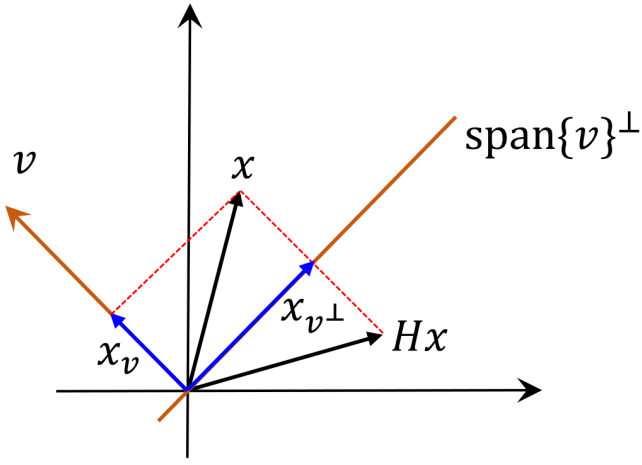
其中 $\alpha v \in \mathrm{span}\{v\}$, $x_{v^\perp} \in \mathrm{span}\{v\}^\perp$. 则

$$Hx = x - \frac{2}{v^*v} vv^*x = x - 2\alpha v = -\alpha v + x_{v^\perp},$$

即 Hx 与 x 在 $\mathrm{span}\{v\}^\perp$ 方向有相同分量, 而在 v 方向的分量相差一个符号.

也就是说, Hx 是 x 关于超平面 $\mathrm{span}\{v\}^\perp$ 的镜面反射.

因此, Householder 变换有时也称为 Householder 反射 或 反射变换 .



Householder 变换的几何意义

Householder 矩阵的基本性质

定理 设 $H \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 是一个 Householder 矩阵, 则

(1) $H^* = H$, 即 H 是 Hermite 的;

(2) $H^*H = I$, 即 H 是酉矩阵;

(3) $H^2 = I$, 所以 $H^{-1} = H$;

(4) $\det(H) = -1$;

(5) H 有两个互异的特征值: $\lambda = 1$ 和 $\lambda = -1$, 其中 $\lambda = 1$ 的代数重数为 $n-1$.

(留作课外自习)

Householder 矩阵的重要应用

Householder 变换可以将一个向量除第一个元素以外的所有元素都化为零

先给出一个一般性结论

引理 设 $x, y \in \mathbb{C}^n$ 为任意两个互异的向量, 则存在一个 Householder 矩阵 $H(v)$ 使得 $y = H(v)x$ 的充要条件是 $\|x\|_2 = \|y\|_2$ 且 $x^*y \in \mathbb{R}$.

(板书, 取 $v = x - y$ 即可)

✍ 若 x, y 都是实向量, 则 $x^*y \in \mathbb{R}$ 自然成立, 此时充要条件为 $\|x\|_2 = \|y\|_2$

定理 设 $x = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^{\mathsf{T}} \in \mathbb{R}^n$ 非零, 则存在 Householder 矩阵 $H(v)$ 使得 $H(v)x = \alpha e_1$, 其中 $\alpha = \|x\|_2$ (或 $\alpha = -\|x\|_2$), $e_1 = [1, 0, \ldots, 0]^{\mathsf{T}} \in \mathbb{R}^n$.

✍ 在后面的讨论中, 我们把定理中的向量 v 称为 x 对应的 Householder 向量

Householder 向量的计算

设 $x = [x_1, x_2, \ldots, x_n]^{\mathsf{T}} \in \mathbb{R}^n$, 由引理证明过程可知, 对应的 Householder 向量为

$$v = x - \alpha e_1 = [x_1 - \alpha, x_2, \ldots, x_n]^{\mathsf{T}}.$$

在实际计算中, 为尽可能地减少舍入误差, 应避免两个相近的数湘减, 因此取

$$\alpha = -\operatorname{sign}(x_1) \cdot \|x\|_2$$



也可以取 $\alpha = \text{sign}(x_1)\|x\|_2$, 为了减少舍入误差, 可使用下面的公式

$$v_1 = x_1 - \alpha = \frac{x_1^2 - \|x\|_2^2}{x_1 + \alpha} = \frac{-(x_2^2 + x_3^2 + \cdots + x_n^2)}{x_1 + \alpha}.$$



在前面两种计算方法中, α 的取值都与 x_1 的符号有关. 但在某些应用中, 我们要**确保 α 非负**, 此时我们可以将这两种方法结合起来使用, 即:

$$v_1 = \begin{cases} x_1 - \alpha, & \text{if sign}(x_1) < 0 \\ \dfrac{-(x_2^2 + x_3^2 + \cdots + x_n^2)}{x_1 + \alpha}, & \text{otherwise} \end{cases}$$

无论怎样选取 α, 我们都有 $H = I - \beta vv^*$, 其中

$$\beta = \frac{2}{v^*v} = \frac{2}{(x_1 - \alpha)^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2} = \frac{2}{2\alpha^2 - 2\alpha x_1} = -\frac{1}{\alpha v_1}.$$

算法 1 计算 Householder 向量

function $[\beta, v]$ = **house**(x)
$n = \texttt{length}(x)$ (here $\texttt{length}(x)$ denotes the dimension of x)
$\sigma = x_2^2 + x_3^2 + \cdots + x_n^2, \quad v = x$
if $\sigma = 0$ **then**
    if $x_1 < 0$ **then** $v_1 = 2x_1, \beta = 2/v_1^2$
    else $v_1 = 0, \beta = 0$
    end if
else
    $\alpha = \sqrt{x_1^2 + \sigma}$ % $\alpha = \|x\|_2$
    if $x_1 < 0$ **then** $v_1 = x_1 - \alpha$
    else $v_1 = -\sigma/(x_1 + \alpha)$
    end if
    $\beta = 2/(v_1^2 + \sigma)$
end if

✍ 总运算量大约为 $2n$ (乘法 + 加法), 且具有很好的数值稳定性.



在实际计算时, 我们可以将向量 v 单位化, 使得 $v_1 = 1$. 这样, 我们就无需为 v 另外分配空间, 而是将 $v(2{:}n)$ 存放在 $x(2{:}n)$ 中, 因为变换后的向量 x 除第一个分量外, 其它都为零.



为了避免可能产生的溢出, 可事先将 x 单位化, 即令 $x = x/\|x\|_2$.

思考：这里要求 $v_1 \neq 0$, 那么什么情况下 $v_1 = 0$?

Householder 变换与矩阵的乘积

设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $H = I - \beta vv^* \in \mathbb{R}^{m\times m}$, 则

$$HA = (I - \beta vv^*)A = A - \beta v(v^*A)$$

因此, 在做 Householder 变换时, **不需要生成 Householder 矩阵, 只需存放 Householder 向量**.

✍ **总运算量大约为** $4mn$.

2.4 Givens 变换

$$G(i,j,\theta)=\begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & c & & s & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & -s & & c & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}\in\mathbb{R}^{n\times n} \qquad (\theta\in[0,2\pi],\ i\le j)$$

Givens 变换 (或 **Givens 旋转**, **Givens 矩阵**), 其中 $c=\cos(\theta)$, $s=\sin(\theta)$.

定理 $G(i,j,\theta)$ 是正交矩阵, 且 $\det(G(i,j,\theta))=1$.

✍ 左乘 Givens 矩阵: 只会影响第 i 行和第 j 行的元素.

✍ 右乘 Givens 矩阵: 只会影响第 i 列和第 j 列的元素.

例 设 $x = [x_1, x_2]^{\mathsf{T}} \in \mathbb{R}^2$, 则存在一个 Givens 变换 $G = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ 使得 $Gx = [r, 0]^{\mathsf{T}}$, 其中 c, s 和 r 的值如下:

$$c = \frac{x_1}{r}, \quad s = \frac{x_2}{r}, \quad r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2},$$

即 $G = \dfrac{1}{r}\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ -x_2 & x_1 \end{bmatrix}$

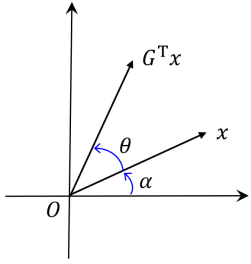
- 通过 Givens 变换, 可以将 $x \in \mathbb{R}^n$ 的任意一个分量化为 0. 通过若干个 Givens 变换, 可以将 x 中除某个分量外的所有分量都化为 0.
- Givens 变换不是初等矩阵变换, 事实上, 它是单位矩阵的一个秩 2 修正, 即

$$G(i, j, \theta) = I + [e_i, e_j] \begin{bmatrix} c-1 & s \\ -s & c-1 \end{bmatrix} [e_i, e_j]^{\mathsf{T}}.$$

例 (Givens 变换的几何意义)

设 $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r\cos\alpha \\ r\sin\alpha \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^2$, 其中 $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$, $\alpha = \arctan\dfrac{x_2}{x_1}$, 则

$$G^{\mathsf{T}}x = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} r\cos\alpha \\ r\sin\alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r(\cos\theta\cos\alpha - \sin\theta\sin\alpha) \\ r(\sin\theta\cos\alpha + \cos\theta\sin\alpha) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r\cos(\alpha+\theta) \\ r\sin(\alpha+\theta) \end{bmatrix}.$$



算法 2 Givens 变换

% Given $x = [a, b]^{\mathsf{T}}$, compute c, s such that $Gx = [r, 0]^{\mathsf{T}}$ where $r = \|x\|_2$

function $[c, s]$ = **givens**(a, b)
if $b = 0$ **then**
  if $a \geq 0$ **then**
    $c = 1, \quad s = 0$
  else
    $c = -1, \quad s = 0$
  end if
else
  if $|b| > |a|$ **then** % 考虑计算稳定性
    $\tau = a/b, \quad s = \text{sign}(b)/\sqrt{1+\tau^2}, \quad c = s\tau$
  else
    $\tau = b/a, \quad c = \text{sign}(a)/\sqrt{1+\tau^2}, \quad s = c\tau$
  end if
end if

2.5 正交变换的舍入误差分析

引理 设 $P \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是一个精确的 Householder 或 Givens 变换, $\tilde{P}$ 是其浮点运算近似, 则

$$\mathrm{fl}(\tilde{P}A) = P(A+E), \quad \mathrm{fl}(A\tilde{P}) = (A+F)P,$$

其中 $\|E\|_2 = \mathcal{O}(\varepsilon_u)\cdot\|A\|_2$, $\|F\|_2 = \mathcal{O}(\varepsilon_u)\cdot\|A\|_2$.

✍ 这说明对一个矩阵做 Householder 变换或 Givens 变换是 向后稳定的

考虑对矩阵 A 做一系列的正交变换, 则有

$$\mathrm{fl}(\tilde{P}_k\cdots\tilde{P}_1A\tilde{Q}_1\cdots\tilde{Q}_k) = P_k\cdots P_1(A+E)Q_1\cdots Q_k,$$

其中 $\|E\|_2 = \mathcal{O}(\varepsilon_u)\cdot(k\|A\|_2)$. 这说明整个计算过程是向后稳定的.

普通矩阵乘积浮点计算误差分析

设 X 是一个非奇异的线性变换（矩阵）, $\tilde{X}$ 是其浮点运算近似.

当 X 作用到 A 上时, 我们有

$$\mathrm{fl}(\tilde{X}A) = XA + E = X(A + X^{-1}E) \triangleq X(A + F),$$

其中 $\|E\|_2 = \mathcal{O}(\varepsilon_u)\|XA\|_2 \leq \mathcal{O}(\varepsilon_u)\|X\|_2\|A\|_2$, 故

$$\|F\|_2 = \|X^{-1}E\|_2 \leq \mathcal{O}(\varepsilon_u)\|X^{-1}\|_2\|X\|_2\|A\|_2 = \mathcal{O}(\varepsilon_u)\kappa_2(X)\|A\|_2,$$

因此, 舍入误差可能会被放大 $\kappa_2(X)$ 倍.

若 X 是正交变换, 则 $\kappa_2(X) = 1$, 因此在浮点运算中尽量使用正交变换

3 QR 分解

3.1 QR 分解的存在唯一性

3.2 基于 MGS 的 QR 分解

3.3 基于 Householder 变换的 QR 分解

3.4 列主元 QR 分解

3.5 基于 Givens 变换的 QR 分解

3.6 基于 Cholesky 分解的 QR 分解

3.7 QR 分解的稳定性

3.1 QR 分解的存在唯一性

定理 (QR 分解) 设 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$. 则存在一个单位列正交矩阵 $Q \in \mathbb{C}^{m\times n}$ 和一个上三角矩阵 $R \in \mathbb{C}^{n\times n}$, 使得

$$A = QR$$

证明. (构造法) 设 $A = [a_1, a_2, \ldots, a_n] \in \mathbb{C}^{m\times n}$.

假定 A 列满秩, 即 $\operatorname{rank}(A) = n$

则 QR 分解就是对 A 的列向量组进行 Gram-Schmidt 正交化过程.

算法 3 Gram-Schmidt (GS) 正交化过程

1: $r_{11} = \|a_1\|_2$

2: $q_1 = a_1/r_{11}$

3: **for** $j = 2$ to n **do**

4: $\quad q_j = a_j$

5: $\quad$ **for** $i = 1$ to $j - 1$ **do**

6: $\quad\quad r_{ij} = (a_j, q_i) = q_i^* a_j$ % q_i^* 表示共轭转置

7: $\quad\quad q_j = q_j - r_{ij} q_i$

8: $\quad$ **end for**

9: $\quad r_{jj} = \|q_j\|_2$

10: $\quad q_j = q_j / r_{jj}$

11: **end for**

由 Gram-Schmidt 正交化过程可知

$$a_1 = r_{11}q_1, \quad a_j = r_{1j}q_1 + r_{2j}q_2 + \cdots + r_{jj}q_j = [q_1, q_2, \ldots, q_j] \begin{bmatrix} r_{1j} \\ r_{2j} \\ \vdots \\ r_{jj} \end{bmatrix}$$

记 $Q = [q_1, q_2, \ldots, q_n]$, $R = [r_{ij}]_{n\times n}$, 其中

$$r_{ij} = \begin{cases} q_i^* a_j, & \text{for } i \le j \\ 0, & \text{for } i > j \end{cases}$$

则

$$[a_1, a_2, \ldots, a_n] = [q_1, q_2, \ldots, q_n] \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ & & \ddots & r_{n-1,n} \\ & & & r_{nn} \end{bmatrix}, \text{ 即 } A = QR$$

不满秩情形

我们可以通过下面的方式做类似的正交化过程:

- 如果 $a_1 = 0$, 则令 $q_1 = 0$; 否则令 $q_1 = a_1/\|a_1\|_2$;
- 对于 $j = 2, 3, \ldots, n$, 计算 $\tilde{q}_j = a_j - \sum_{i=1}^{j-1}(q_i^* a_j)q_i$.

  如果 $\tilde{q}_j = 0$, 则表明 a_j 可以由 $a_1, a_2, \ldots, a_{j-1}$ 线性表出, 令 $q_j = 0$.

  否则令 $q_j = \tilde{q}_j/\|\tilde{q}_j\|_2$.

于是我们有

$$A = QR,$$

其中 $Q = [q_1, q_2, \ldots, q_n]$ 列正交且有为零的列向量.

✍ 注意: 如果 Q 的某一列 $q_k = 0$, 则 R 中对应的第 k 行就全部为 0.

设 $\operatorname{rank}(A) = l < n$, 则 $\operatorname{rank}(Q) = l$, 即 Q 有 l 个非零列, 设为 $q_{i_1}, q_{i_2}, \ldots, q_{i_l}$, 它们构成 $\mathbb{C}^m$ 中的一个单位正交向量组.

将其扩展成 $\mathbb{C}^m$ 中的一组标准正交基, 即

$$q_{i_1}, q_{i_2}, \ldots, q_{i_l}, \quad \tilde{q}_1, \ldots, \tilde{q}_{m-l}.$$

然后我们用 $\tilde{q}_1$ 替换 Q 中的第一个零列, 用 $\tilde{q}_2$ 替换 Q 中的第二个零列.

依此类推, 将所有零列都替换, 最后得到的矩阵记为 $\tilde{Q} \in \mathbb{C}^{m\times n}$ (单位列正交).

由于 $\tilde{Q}$ 中新添加的列向量正好与 R 中的零行相对应, 所以

$$\tilde{Q}R = QR = A \quad \Longrightarrow \quad A \text{ 的 QR 分解}$$

□

满秩矩阵 QR 分解的存在唯一性

定理 若 A 列满秩且 R 的对角线元素都为正, 则 A 的 QR 分解存在且唯一.

(板书)

若 A 是实矩阵, 则所有运算都是实运算, 因此 Q 和 R 都是实矩阵

QR 分解的另一种形式

有时也将 QR 分解定义为: 存在酉矩阵 $Q \in \mathbb{C}^{m\times m}$ 使得

$$A = QR,$$

其中 $R = \begin{bmatrix} R_{11} \\ 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{m\times n}$ 是上三角矩阵.

(这里的 Q 是方阵, 而 R 是长方阵)



如果 A 是非奇异方阵, 则 QR 分解可用来求解方程组 $Ax = b$.

思考: 基于 GS 正交化的 QR 分解的运算量大约是多少?

3.2 基于 MGS 的 QR 分解

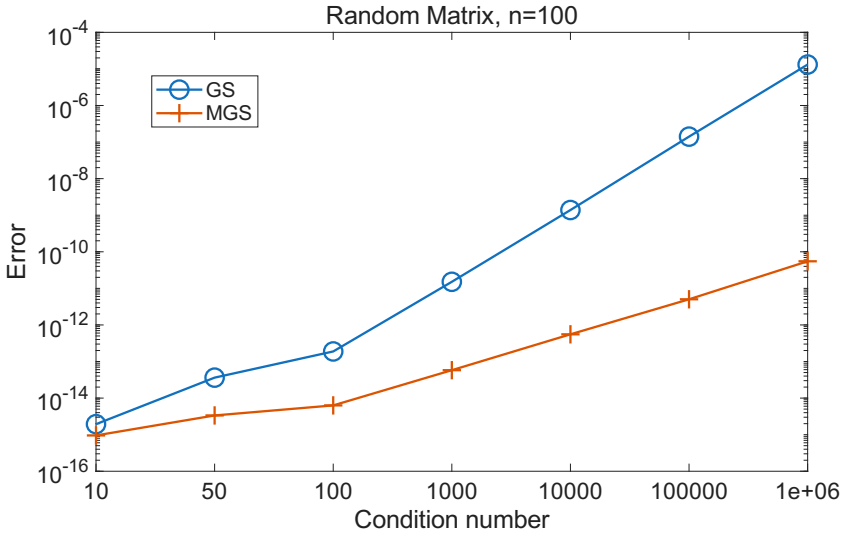
为了保证算法的数值稳定性, 实际计算中需采用 **修正的 GS 过程** (MGS)

- Gram-Schmidt 过程的第 j 步: (适合并行, 但稳定性差)
  (1) 计算 $r_{ij} = q_i^* a_j, \quad i = 1, 2, \ldots, j-1$;
  (2) 计算 $\tilde{q}_j = a_j - r_{1j}q_1 - r_{2j}q_2 - \cdots - r_{j-1,j}q_{j-1}$;
  (3) 计算 $r_{jj} = \|\tilde{q}_j\|, \quad q_j = \tilde{q}_j / r_{jj}$;
- Modified Gram-Schmidt 过程的第 j 步: (向后稳定)
  (1) 令 $\tilde{q}_j = a_j$;
  (2) 计算 $r_{ij} = q_i^* \tilde{q}_j, \quad \tilde{q}_j = \tilde{q}_j - r_{ij}q_i, \quad i = 1, 2, \ldots, j-1$;
  (3) 计算 $r_{jj} = \|\tilde{q}_j\|, \quad q_j = \tilde{q}_j / r_{jj}$;

算法 4 基于 MGS 的 QR 分解

Set $R = [r_{ij}] = 0_{n\times n}$ (the $n \times n$ zero matrix)
if $a_1 = 0$ **then**
    $q_1 = 0$
else
    $r_{11} = \|a_1\|_2, \quad q_1 = a_1/\|a_1\|_2$
end if
for $j = 2$ to n **do**
    $q_j = a_j$
    for $i = 1$ to $j - 1$ **do**
        $r_{ij} = q_i^* q_j, \quad q_j = q_j - r_{ij} q_i$ % 注意与 GS 的区别
    end for
    if $q_j \neq 0$ **then**
        $r_{jj} = \|q_j\|_2, \quad q_j = q_j/r_j$
    end if
end for

例 比较基于 GS-QR 和 MGS-QR 的稳定性, 即观察 $\|\tilde{Q}^{\mathsf{T}}\tilde{Q} - I\|_2$ 的值 (不同条件数)



3.3 基于 Householder 变换的 QR 分解

Householder 变换：可以将任意非零变量除第一个元素外其它都化为零.

设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geq n)$, 令 $H_1 \in \mathbb{R}^{m\times m}$ 为 Householder 变换, 满足

$$H_1 \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \Longrightarrow H_1 A = \left[\begin{array}{c|ccc} r_1 & \tilde{a}_{12} & \cdots & \tilde{a}_{1n} \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{A}_2 & \\ 0 & & & \end{array}\right], \quad \tilde{A}_2 \in \mathbb{R}^{(m-1)\times(n-1)}$$

同样, 构造 Householder 变换 $\tilde{H}_2 \in \mathbb{R}^{(m-1)\times(m-1)}$, 使得

$$\tilde{H}_2\tilde{A}_2 = \left[\begin{array}{c|ccc} r_2 & \tilde{a}_{23} & \cdots & \tilde{a}_{2n} \\ \hline 0 & & & \\ \vdots & & \tilde{A}_3 & \\ 0 & & & \end{array}\right], \quad \text{其中 } \tilde{A}_3 \in \mathbb{R}^{(m-2)\times(n-2)}.$$

令 $H_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{H}_2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times m}$, 则

$$H_2H_1A = \left[\begin{array}{cc|ccc} r_1 & \tilde{a}_{12} & \tilde{a}_{13} & \cdots & \tilde{a}_{1n} \\ 0 & r_2 & \tilde{a}_{23} & \cdots & \tilde{a}_{2n} \\ \hline 0 & 0 & & & \\ \vdots & \vdots & & \tilde{A}_3 & \\ 0 & 0 & & & \end{array}\right].$$

不断重复上述过程, 可得一系列矩阵 $H_k = \begin{bmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & \tilde{H}_k \end{bmatrix}$, $k = 3, 4, \ldots, n$, 使得

$$H_n \cdots H_2 H_1 A = \begin{bmatrix} r_1 & \tilde{a}_{12} & \cdots & \tilde{a}_{1n} \\ 0 & r_2 & \cdots & \tilde{a}_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_n \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \triangleq R.$$

令 $Q = (H_n \cdots H_2 H_1)^{-1} = H_1 H_2 \cdots H_n$, 则

$$A = (H_n \cdots H_2 H_1)^{-1} R = QR$$

✍ 如果不需要生成 Q, 则运算量大约为 $2mn^2 - \frac{2}{3}n^3$

矩阵 Q 的计算

方法一 在 QR 分解过程中直接计算, 即

$$Q = I_m, \quad Q = QH_k, \quad k = 1, 2, \ldots, n.$$

方法二 向后累积法 （需保留所有 Householder 向量）

$$Q = I_m, \quad Q = H_k Q, \quad k = n, n-1, \ldots, 1.$$



- 向后累积法的优点：一开始 Q 会比较稀疏, 计算效率较高, 通常采用该方法.
- 计算 Q 的运算量大约为 $4(m^2 n - mn^2 + \frac{1}{3}n^3)$.
- 如果只计算 Q 的前 n 列, 则运算量为 $2mn^2 - \frac{2}{3}n^3$.

算法 5 基于 Householder 变换的 QR 分解

% Given $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, compute $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $R \in \mathbb{R}^{m\times n}$ such that $A = QR$

% The upper triangular part of R is stored in the upper triangular part of A

Set $Q = I_{m\times m}$

for $k = 1$ to n **do**

  $x = A(k:m, k)$

  $[\beta_k, v_k]$ = **House**(x)

  $A(k:m, k:n) = (I_{m-k+1} - \beta_k v_k v_k^{\mathsf{T}}) A(k:m, k:n)$

  $= A(k:m, k:n) - \beta_k v_k \big(v_k^{\mathsf{T}} A(k:m, k:n)\big)$

  $Q(:, k:m) = Q(:, k:m)(I_{m-k+1} - \beta_k v_k v_k^{\mathsf{T}})$

  $= Q(:, k:m) - \beta_k \big(Q(:, k:m) v_k\big) v_k^{\mathsf{T}}$

end for

✍ 注：这里只是算法的一个简单描述，并没有考虑运算量问题.

注记

在实际计算时, 我们通常会保留所有的 Householder 向量 (用于向后累积法计算 Q). 由于第 k 步中 $\tilde{H}_k$ 所对应的 Householder 向量 v_k 的长度为 $m-k+1$, 因此我们先把 v_k 单位化, 使得 v_k 的第一元素为 1, 这样就只要存储 $v_k(2:end)$, 共 $m-k$ 个元素. 于是我们就可以把所有的 Householder 向量存放在 A 的严格下三角部分. 而 A 的上三角部分仍然存放 R.

事实上, 如果没有明确要求生成 Q, 通常只需存储 v_k 和 β_k, 即以因式分解 (Factored-Form) 形式存储 Q.

实际应用中可以考虑块 Householder QR 分解, 以便充分利用 3 级 BLAS 运算, 提高计算效率.

3.4 列主元 QR 分解

当 A 不是满秩时, 我们可以进行**列主元 QR 分解**.

定理 (列主元 QR 分解) 设 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$, 且 $\mathrm{rank}(A) = l < n$. 则存在置换矩阵 P, 正交矩阵 $Q \in \mathbb{C}^{m\times m}$, 使得

$$AP = Q \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}_{m\times n},$$

其中 $R_{11} \in \mathbb{C}^{l\times l}$ 是非奇异上三角矩阵, 且对角线元素满足

$$r_{11} \geq r_{22} \geq \cdots \geq r_{ll} > 0.$$

✍ 实现过程与 QR 分解类似, 只是在每一步需要选列主元, 同时做一个列交换.

满秩分解

推论 设 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ 且 $\mathrm{rank}(A) = l \leq \min\{m, n\}$, 则存在满秩矩阵 $F \in \mathbb{C}^{m\times l}$ 和 $G \in \mathbb{C}^{l\times n}$, 使得

$$A = FG.$$

列主元 QR 分解的实现

从第 $k-1$ 步到第 k 步 假设经过 $k-1$ 步后, 我们得到下面的分解

$$AP^{(k-1)} = Q^{(k-1)} \begin{bmatrix} R_{11}^{(k-1)} & R_{12}^{(k-1)} \\ 0 & R_{22}^{(k-1)} \end{bmatrix} \triangleq Q^{(k-1)} R^{(k-1)},$$

其中 $P^{(k-1)}$ 是置换矩阵, $Q^{(k-1)}$ 是正交矩阵, $R_{11}^{(k-1)} \in \mathbb{R}^{(k-1)\times(k-1)}$ 是非奇异上三角矩阵. 于是有

$$\left(Q^{(k-1)}\right)^{\mathsf{T}} AP^{(k-1)} = R^{(k-1)}.$$

下面考虑第 k 步

(1) 计算 $R_{22}^{(k-1)}$ 所有列的范数, 如果都为 0, 则 $R_{22}^{(k-1)}=0$, 算法结束.

(2) 当 $k \le l$ 时, $R_{22}^{(k-1)} \neq 0$, 记范数最大的列为第 i_k 列.

若 $i_k \neq 1$, 则**交换 $R^{(k-1)}$ 的第 k 列与第 i_k+k-1 列**, 相应置换矩阵记为 P_k.

(3) 由于列交换不影响 $R^{(k-1)}$ 的前 $k-1$ 列, 因此列交换后的矩阵可记为

$$R^{(k-1)}P_k \triangleq \begin{bmatrix} R_{11}^{(k-1)} & \tilde{R}_{12}^{(k-1)} \\ 0 & \tilde{R}_{22}^{(k-1)} \end{bmatrix}.$$

构造 $\tilde{R}_{22}^{(k-1)}$ 的第 1 列所对应的 Householder 变换 $\tilde{H}_k$, 并令

$$H_k = \begin{bmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & \tilde{H}_k \end{bmatrix}, \quad P^{(k)} = P^{(k-1)}P_k.$$

于是

$$H_k\left(Q^{(k-1)}\right)^{\mathsf{T}}AP^{(k)} = H_kR^{(k-1)}P_k = \begin{bmatrix} R_{11}^{(k-1)} & \tilde{R}_{12}^{(k-1)} \\ 0 & \tilde{H}_k\tilde{R}_{22}^{(k-1)} \end{bmatrix} \triangleq R^{(k)},$$

其中 $\tilde{H}_k\tilde{R}_{22}^{(k-1)}$ 的第一列除第一个元素外, 其余都是零.

记 $Q^{(k)} \triangleq Q^{(k-1)}H_k^{\mathsf{T}}$, 则

$$AP^{(k)} = Q^{(k)}R^{(k)} \triangleq \begin{bmatrix} R_{11}^{(k)} & R_{12}^{(k)} \\ 0 & R_{22}^{(k)} \end{bmatrix},$$

其中 $R_{11}^{(k)} \in \mathbb{R}^{k\times k}$ 为非奇异上三角矩阵.

依此类推, 直到第 l 步, 我们就可以得到 A 的列主元 QR 分解.

✍ 由列主元的选取方法可知, R_{11} 的对角线元素非负且按降序排列.

3.5 基于 Givens 变换的 QR 分解

QR 分解也可以通过 Givens 变换来实现

设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 构造 Givens 变换 G_{21}, 作用在 A 的第 1 行和第 2 行上, 使得其第一列变为

$$G_{21}\begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{a}_{11} \\ 0 \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{bmatrix} \quad \Longrightarrow \text{将 } a_{21} \text{ 化为 } 0$$

构造 Givens 变换 G_{31}, 作用在 $G_{21}A$ 的第 1 行和第 3 行上, 将 a_{31} 化为零.

由于 G_{31} 只影响第 1 行和第 3 行, 所以第二行的零元素维持不变.

以此类推, 我们可以构造一系列的 Givens 变换 $G_{41}, G_{51}, \ldots, G_{m1}$, 使得

$$G_{m1} \cdots G_{21} A = \begin{bmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{bmatrix}.$$

类似地, 我们可以构造 Givens 变换 $G_{32}, G_{42}, \ldots, G_{m2}$, 将第二列的第 3 至第 m 个元素全化为零, 同时保持第一列不变.

以此类推, 对其他列做类似的处理, 最后将 A 转化成一个上三角矩阵

$$A = (G_{m,n} \cdots G_{21})^{\mathsf{T}} R \triangleq QR$$



- 与 Householder 变换一样, 在进行 Givens 变换时, 我们不需要显式地写出 Givens 矩阵.
- 对于稠密矩阵而言, 基于 Givens 变换的 QR 分解的运算量比 Householder 变换要多很多, 因此 该方法主要用于当矩阵的非零下三角元素相对较少时的情形, 比如上 Hessenberg 矩阵的 QR 分解.

算法 6 基于 Givens 变换的 QR 分解

% Given $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, compute $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ and $R \in \mathbb{R}^{m\times n}$ such that $A = QR$

% The upper triangular part of R is stored in the upper triangular part of A

Set $Q = I_{m\times m}$

for $k = 1$ to n **do**

  for $i = k+1$ to m **do**

    $[c, s]$=**givens**(a_{kk}, a_{ik})

$$\begin{bmatrix} A(k, k:n) \\ A(i, k:n) \end{bmatrix} = G \begin{bmatrix} A(k, k:n) \\ A(i, k:n) \end{bmatrix} \text{ where } G = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}$$

    $[Q(1:m, k), Q(1:m, i)] = [Q(1:m, k), Q(1:m, i)]G^{\mathsf{T}}$

  end for

end for

3.6 基于 Cholesky 分解的 QR 分解

设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 列满秩, 则 $A^{\mathsf{T}}A$ 对称正定, 因此存在 Cholesky 分解, 设为 $A^{\mathsf{T}}A = R^{\mathsf{T}}R$, 其中 $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是对角线都为正数的上三角矩阵. 令

$$Q \triangleq AR^{-1},$$

则有 $A = QR$, 且

$$Q^{\mathsf{T}}Q = (R^{-1})^{\mathsf{T}}A^{\mathsf{T}}AR^{-1} = (R^{-1})^{\mathsf{T}}(R^{\mathsf{T}}R)R^{-1} = I.$$

由此, 我们就可以得到 A 的 QR 分解.

算法 7 基于 Cholesky 分解的 QR 分解 (Cholesky-QR)

1: Compute $B = A^{\mathsf{T}}A$

2: Compute the Cholesky decomposition of B: $B = R^{\mathsf{T}}R$

3: Compute $Q = AR^{-1}$.



- Cholesky-QR 的运算量大约为 $2mn^2 + \frac{2}{3}n^3 + 2mn$. 当 $m \gg n$ 时, 运算量与 MGS 基本相当. 但主要运算是矩阵-矩阵乘积, 因此可以借助 3 级 BLAS 运算提升计算效率.
- 由于 Cholesky-QR 中涉及计算 $A^{\mathsf{T}}A$, 且 $A^{\mathsf{T}}A$ 的条件数是 A 的条件数的平方, 因此当 A 的条件数较大时, 该算法不建议直接使用.

3.7 QR 分解的稳定性

基于 Householder 变换和 Givens 变换的 QR 分解都具有很好的数值稳定性:

$$Q^{\mathsf{T}}Q = I + E_H \quad \text{其中} \quad \|E_H\|_2 \approx \varepsilon_u.$$

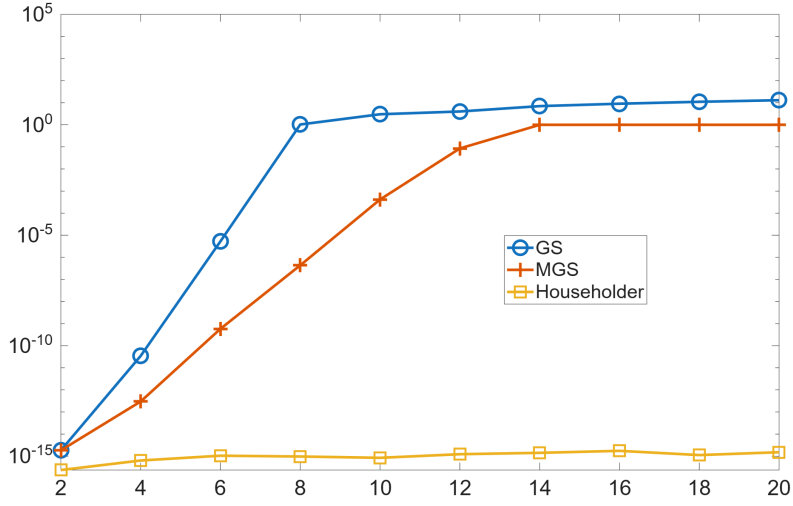
基于 MGS 的 QR 分解也是向后稳定的:

$$Q^{\mathsf{T}}Q = I + E_{MGS} \quad \text{其中} \quad \|E_{MGS}\|_2 \approx \varepsilon_u \kappa_2(A).$$

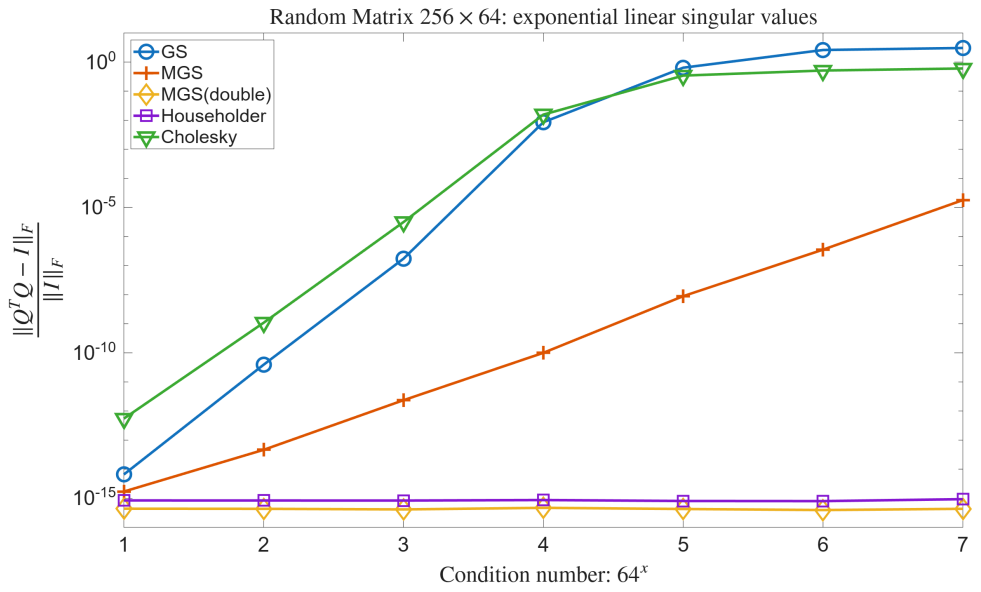
若正交性至关重要, 建议用 Householder 变换, 特别是 A 的列向量接近线性相关时.

如果需要计算 Q, 则 MGS 的运算量相对较少, 因此当 A 的列向量具有很好的线性无关性时, 可以使用 MGS 来计算 QR 分解. 但 MGS 得到的 Q 不是方阵 (除非 A 是方阵).

例 比较基于 GS, MGS 和 Householder 变换 QR 分解算法的稳定性, 即观察 $\|\tilde{Q}^{\mathsf{T}}\tilde{Q} - I\|_2$ 的值 (以 Hilbert 矩阵为例) (QR_3methods.m)



也可以通过重正交来提升 MGS 的稳定性, 即进行两次 MGS. (QR_3methods_256_64.m)



4 奇异值分解

4.1 奇异值, 奇异向量和奇异值分解

4.2 奇异值基本性质

4.3 奇异值更多性质

4.4 奇异值扰动分析

4.1 奇异值, 奇异向量和奇异值分解

奇异值分解 (SVD) 分解是矩阵计算中非常有用的工具之一.

定理 (SVD) 设 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$, 则存在酉矩阵 $U \in \mathbb{C}^{m\times m}$ 和 $V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 使得

$$U^*AV = \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{或} \quad A = U \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} V^*,$$

其中 $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n) \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 且 $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_n \geq 0$.

上述分解称为 A 的**奇异值分解 (SVD)**, $\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n$ 称为 A 的**奇异值**, 它们是矩阵 A^*A 的特征值的平方根. (板书)

- 在不做特别说明的情况下, 我们总是假定 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n \geq 0$.
- 如果 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 是实矩阵, 则 U, V 也都可以是实矩阵.

奇异向量

矩阵 $U=[u_1,u_2,\ldots,u_m]$ 和 $V=[v_1,v_2,\ldots,v_n]$ 的列向量分别称为 A 的

左奇异向量 和 **右奇异向量**, 即存在关系式

$$
\begin{aligned}
&Av_i=\sigma_i u_i, \quad i=1,2,\ldots,n,\\
&A^*u_i=\sigma_i v_i, \quad i=1,2,\ldots,n,\\
&A^*u_i=0, \quad i=n+1,n+2,\ldots,m.
\end{aligned}
$$

细 SVD / 降阶 SVD

$$A = U \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} V^* = \sigma_1 u_1 v_1^* + \sigma_2 u_2 v_2^* + \cdots + \sigma_n u_n v_n^*$$

记 $U_n = [u_1, u_2, \ldots, u_n] \in \mathbb{C}^{m\times n}$, 则 U_n 是单位列正交矩阵, 且

$$A = U_n \Sigma V^* \tag{3.4}$$

这就是所谓的 细 SVD (thin SVD) **或** 降阶 SVD (reduced SVD).



有的文献将 (3.4) 称为奇异值分解.

截断 SVD

当 $k < n$ 时, 我们称

$$A_k = \sigma_1 u_1 v_1^* + \sigma_2 u_2 v_2^* + \cdots + \sigma_k u_k v_k^*$$

为 A 的 截断 SVD (truncated SVD).

SVD 的应用

奇异值的应用:

- 计算矩阵范数, 条件数, 数值秩 (numerical rank)
- 求解最小二乘问题
- 矩阵和张量的低秩分解
- 主成分分析, 图像压缩, 数据降维, ...

4.2 奇异值基本性质

定理 设 $A = U \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} V^*$ 是 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ 的奇异值分解, 则

(1) A^*A 的特征值是 σ_i^2, 对应的特征向量是 v_i

(2) AA^* 的特征值是 σ_i^2 和 $m-n$ 个零, 对应的特征向量是 u_i

(3) $\|A\|_2 = \sigma_1$, $\|A\|_F = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_n^2}$;

(4) 若 $\mathrm{rank}(A) = r \leq n$, 则 $\mathrm{Ran}(A) = \mathrm{span}\{u_1, u_2, \ldots, u_r\}$,

$\mathrm{Ker}(A) = \mathrm{span}\{v_{r+1}, v_{r+2}, \ldots, v_n\}$

(5) 设 $x \in \mathbb{C}^n$ 且 $\|x\|_2 = 1$, 则 $\sigma_n \leq \|Ax\|_2 \leq \sigma_1$;

(6) (酉不变性) 设 $X \in \mathbb{C}^{m\times m}$ 和 $Y \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 是酉矩阵, 则 $\sigma_i(X^*AY) = \sigma_i(A)$.

(留作练习)

定理 设 $A = U\Sigma V^*$ 是 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 的奇异值分解, 则:

(1) $|\det(A)| = \sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_n$;

(2) 若 A 非奇异, 则 $\|A^{-1}\|_2 = \sigma_n^{-1}$, $\kappa_2(A) = \sigma_1/\sigma_n$;

(3) 若 A 是 Hermite 的, 且 $A = U\Lambda U^*$ 是 A 的酉特征值分解, 设 $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$, 则 $A = U\Sigma V$ 是 A 的奇异值分解, 其中 $\sigma_i = |\lambda_i|$, $v_i = \text{sign}(\lambda_i)u_i$, 若 $\lambda_i = 0$, 则取 $v_i = u_i$;

(4) 矩阵 $\begin{bmatrix} 0 & A^* \\ A & 0 \end{bmatrix}$ 的特征值是 $\pm\sigma_i$, 对应单位特征向量 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} v_i \\ \pm u_i \end{bmatrix}$.

(留作练习)



矩阵条件数取决于奇异值, 不是特征值

例 矩阵的谱条件数取决于最大奇异值和最小奇异值的比值.

那么, 谱条件数与特征值有没有直接关系?

如果 A 对称, 则谱条件数为模最大特征值与模最小特征值的比值.

但一般矩阵没有这个性质.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{1}{2} & \cdots & -\frac{1}{2} \\ & 1 & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -\frac{1}{2} \\ & & & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n},$$

易知 A 的所有特征值都是 1, 但谱条件数却随着矩阵规模的增长而快速变大:

n	10	20	30	40	50	60	70	80
$\kappa_2(A)$	6.3e+01	7.6e+03	6.8e+05	5.3e+07	3.9e+09	2.7e+11	1.8e+13	1.2e+15

另外, 通过直接计算可知

$$A^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1.5}{2} & \frac{1.5^2}{2} & \cdots & \frac{1.5^{n-2}}{2} \\ & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1.5}{2} & \ddots & \vdots \\ & & 1 & \ddots & \ddots & \frac{1.5^2}{2} \\ & & & \ddots & \frac{1}{2} & \frac{1.5}{2} \\ & & & & 1 & \frac{1}{2} \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}.$$

因此, $\kappa_1(A)$ 和 $\kappa_\infty(A)$ 都是矩阵维数 n 的幂函数.

4.3 奇异值更多性质

低秩逼近

定理 设 $A = U_n \Sigma V^*$ 是 A 的细奇异值分解, 令 $A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i u_i v_i^*$, 则 A_k 是

$$\min_{B \in \mathbb{C}^{m\times n},\ \mathrm{rank}(B)=k} \|A - B\|_2 \tag{3.5}$$

的一个解, 且

$$\|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}.$$

此时, 我们称 A_k 是 A 的一个**秩 k 逼近**. (板书)

- 最值问题 (3.5) 中的约束条件可放宽为 $\mathrm{rank}(B) \le k$
- 对于 Frobenius 范数, 我们有类似的结论 (留作练习)

Weyl 定理

定理 设 $A, B \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$, 且 $\mathrm{rank}(B) = k$, 则有

$$\max_{x\in \mathrm{Ker}(B),\ \|x\|_2=1} \|Ax\|_2 \geq \sigma_{k+1}(A), \qquad \min_{x\in \mathrm{Ker}(B),\ \|x\|_2=1} \|Ax\|_2 \leq \sigma_{n-k}(A).$$

因此,

$$\sigma_1(A-B) \geq \sigma_{k+1}(A), \quad \sigma_n(A-B) \leq \sigma_{n-k}(A).$$

(板书)

- 不等式 (??) 和 (??) 也可以写为: 设 $\mathcal{L}$ 是 $\mathbb{C}^n$ 中的任意一个 $n-k$ 维子空间, 则有

$$\max_{x\in\mathcal{L},\ \|x\|_2=1} \|Ax\|_2 \geq \sigma_{k+1}(A), \qquad \min_{x\in\mathcal{L},\ \|x\|_2=1} \|Ax\|_2 \leq \sigma_{n-k}(A).$$

特别地, 当 $k=0$ 时 $\mathcal{L}=\mathbb{R}^n$, 因此

$$\max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 \geq \sigma_1(A), \qquad \min_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 \leq \sigma_n(A).$$



事实上, 我们有 (第一个等式就是 2-范数的定义, 第二个等式留作自行练习)

$$\max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sigma_1(A), \qquad \min_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sigma_n(A).$$

- 从该结论可知, 如果通过对 A 进行秩 k $(1 \leq k \leq \dfrac{n}{2})$ 修正来改善其谱条件数, 则最佳情况是降低到 $\dfrac{\sigma_{n-k}(A)}{\sigma_{k+1}}$.

定理 设 $A, B \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$, 则有

$$\sigma_{i+j-1}(A+B) \leq \sigma_i(A) + \sigma_j(B), \quad i = 1, 2, \ldots, n,\ j = 1, 2, \ldots, n-i+1.$$

(板书)



令 $A = X - Y, B = Y$, 则该结论也可以描述为

$$\sigma_i(X-Y) \geq \sigma_{i+j-1}(X) - \sigma_j(Y), \quad i = 1, 2, \ldots, n,\ j = 1, 2, \ldots, n-i+1.$$

奇异值的最小最大定理

根据 Weyl 定理, 我们可以得到矩阵奇异值的最小最大定理.

定理 设 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n \geq 0$ 是矩阵 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ 的奇异值, 则

$$\sigma_k(A) = \min_{\dim(\mathcal{L})=n-k+1} \max_{x\in\mathcal{L},\ \|x\|_2=1} \|Ax\|_2, \quad k = 1, 2, \ldots, n$$

和

$$\sigma_k(A) = \max_{\dim(\mathcal{L})=k} \min_{x\in\mathcal{L},\ \|x\|_2=1} \|Ax\|_2, \quad k = 1, 2, \ldots, n,$$

其中 $\mathcal{L}$ 表示 $\mathbb{C}^n$ 的一个子空间. (留作练习, 直接运用 Weyl 定理即可)

特别地, 我们有

$$\sigma_1(A) = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2, \quad \sigma_n(A) = \min_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2.$$

交错不等式

引理 设 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, A_r 是由 A 去除 r 列 (或 r 行) 后得到的子矩阵, 则

$$\sigma_i(A) \geq \sigma_i(A_r) \geq \sigma_{i+r}(A), \quad i = 1, 2, \ldots, \min\{m, n\}.$$

这里, 当下标 k 大于矩阵的维数时, 我们令 $\sigma_k = 0$.

更进一步, 如果 $B \in \mathbb{C}^{(m-r)\times(n-s)}$ 是 A 的子矩阵, 则

$$\sigma_i(A) \geq \sigma_i(B) \geq \sigma_{i+r+s}(A).$$

(留作课外自习)

交错不等式的推广

设 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, 对任意两个酉矩阵 $U, V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 有

$$\sigma_i(U^*AV) = \sigma_i(A),$$

而 $U_k^*AV_k$ 是 U^*AV 的子矩阵, 因此有下面的结论.

引理 设 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $1 \le k \le n$, 则对任意的单位列正交矩阵 $U_k \in \mathbb{C}^{n\times k}$ 和 $V_k \in \mathbb{C}^{n\times k}$, 有

$$\sigma_i(U_k^*AV_k) \le \sigma_i(A), \quad i = 1, 2, \ldots, k. \tag{3.6}$$

因此,

$$|\det(U_k^*AV_k)| \le \sigma_1(A)\sigma_2(A)\cdots\sigma_k(A). \tag{3.7}$$

(留作课外自习)

Weyl 不等式

定理 设 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, 其奇异值和特征值分别为 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n \geq 0$ 和 $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$, 则

$$|\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_k| \leq \sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_k, \quad k = 1, 2, \ldots, n$$

且当 $k = n$ 时, 等号成立.

(留作课外自习)

4.4 奇异值扰动分析

定理 设 $A, E \in \mathbb{C}^{m\times n}$ $(m \geq n)$, 则

$$|\sigma_i(A+E) - \sigma_i(A)| \leq \|E\|_2, \quad i = 1, 2, \ldots, n.$$

(留作练习)

5 线性最小二乘问题的求解方法

5.1 正规方程

5.2 Cholesky 分解法

5.3 QR 分解法

5.4 奇异值分解法

5.1 正规方程

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geq n)$. 则 $x_* \in \mathbb{R}^n$ 是线性最小二乘问题 (3.1) 的解当且仅当残量 $r = b - Ax_*$ 与 $\mathrm{Ran}(A)$ 正交, 即 x_* 是下面的**正规方程**的解

$$A^{\mathsf{T}}(b - Ax) = 0 \quad \text{或} \quad A^{\mathsf{T}}Ax = A^{\mathsf{T}}b. \tag{3.8}$$

(板书)



由于

$$A^{\mathsf{T}}b \in \mathrm{Ran}(A^{\mathsf{T}}) = \mathrm{Ran}(A^{\mathsf{T}}A)$$

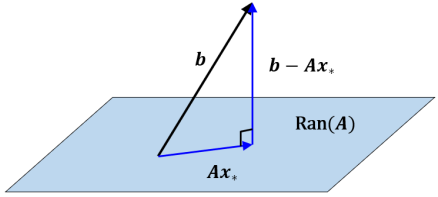
因此正规方程 $A^{\mathsf{T}}Ax = A^{\mathsf{T}}b$ 总是相容的, 即最小二乘解总是存在的.

最小二乘解的几何含义

我们可以把 b 写成

$$b = Ax_* + r, \quad \text{其中} \quad r \perp \mathrm{Ran}(A). \tag{3.9}$$

所以 Ax_* 就是 b 在 $\mathrm{Ran}(A)$ 上的正交投影:





最小二乘解可能并不唯一, 但分解 (3.9) 总是唯一的.

5.2 Cholesky 分解法

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m > n)$, 则 $A^{\mathsf{T}}A$ 对称正定当且仅当 A 是列满秩的, 即 $\operatorname{rank}(A) = n$. 此时, 线性最小二乘问题存在唯一解:

$$x = (A^{\mathsf{T}}A)^{-1}A^{\mathsf{T}}b$$

Cholesky 分解法

当 A 列满秩时, 可以使用 Cholesky 分解来求解正规方程, 总运算量大约为 $mn^2 + \frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$, 其中大部分运算量 (即 mn^2) 是用来计算 $A^{\mathsf{T}}A$.

注记

- 通过 Cholesky 分解求解正规方程, 运算量小, 而且简单直观, 具体实现时可利用 3 级 BLAS 运算, 计算效率非常高.
- 但由于 $\kappa(A^{\mathsf{T}}A) = \kappa^2(A)$, 因此对于病态情形, 不建议使用该方法.

例 下面的例子说明, 计算 $A^{\mathsf{T}}A$ 可能会损失计算精度: 设

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \varepsilon & & \\ & \varepsilon & \\ & & \varepsilon \end{bmatrix},$$

则

$$A^{\mathsf{T}}A = \begin{bmatrix} 1+\varepsilon^2 & 1 & 1 \\ 1 & 1+\varepsilon^2 & 1 \\ 1 & 1 & 1+\varepsilon^2 \end{bmatrix}.$$

记 ε_u 为机器精度, 则当 $\varepsilon_u < \varepsilon < \sqrt{\varepsilon_u}$ 时有 $\varepsilon^2 < \varepsilon_u$, 由于舍入误差的原因, 通过浮点运算计算得到的 $A^{\mathsf{T}}A$ 是奇异的. 但我们注意到 A 是满秩的.

5.3 QR 分解法

假定 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ 满秩, 设 $A = QR$ 是 A 的 QR 分解, 代入正规方程可得

$$x_* = (A^\mathsf{T}A)^{-1}A^\mathsf{T}b = (R^\mathsf{T}Q^\mathsf{T}QR)^{-1}R^\mathsf{T}Q^\mathsf{T}b = (R^\mathsf{T}R)^{-1}R^\mathsf{T}Q^\mathsf{T}b = R^{-1}Q^\mathsf{T}b.$$



- 用 MGS-QR 求解最小二乘问题时的运算量大约为 $2mn^2$.
- 用 Householder-QR 求解需 $2mn^2 - 2n^3/3$ (无需显式计算 Q, 只需将 Householder 变换直接作用到 b 上即可计算出 $Q^\mathsf{T}b$).
- 因此当 $m \gg n$ 时, QR 分解法的计算量大约是 Cholesky 分解法的两倍. 当 $m = n$ 时, 几乎相同.

- 实际计算时不需要计算 $A^\mathsf{T}A$.
- 通常 QR 算法比较稳定, 是当前求解最小二乘问题的首选方法, 特别是当 A 条件数较大 (病态) 时.

5.4 奇异值分解法

设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 列满秩, $A = U_n\Sigma V^{\mathsf{T}}$ 是 A 的降阶奇异值分解, 则

$$\begin{aligned} x_* = (A^{\mathsf{T}}A)^{-1}A^{\mathsf{T}}b &= \left(V\Sigma U_n^{\mathsf{T}}U_n\Sigma V^{\mathsf{T}}\right)^{-1}V\Sigma U_n^{\mathsf{T}}b \\ &= (V\Sigma^{-2}V^{\mathsf{T}})V\Sigma U_n^{\mathsf{T}}b \\ &= V\Sigma^{-1}U_n^{\mathsf{T}}b. \end{aligned}$$



相比于 Cholesky 分解法和 QR 分解, 用 SVD 求解最小二乘问题具有更高的健壮性, 但由于需要计算系数矩阵的 SVD, 运算量远超 Cholesky 分解法和 QR 分解. 所以只有当系数矩阵秩亏或者接近秩亏时才使用 (此时 QR 分解法可能会失效).

例 分别用三种方法求解最小二乘问题, 比较运算时间. (LS_3methods.m)

n	Cholesky 分解法	QR 分解法	奇异值分解法
2000	0.0870	0.2070	1.4840
2500	0.1910	0.4430	3.1160
3000	0.2500	0.6950	5.9600
3500	0.4640	1.2130	10.0500
4000	0.4940	1.5700	14.8750
4500	0.6690	2.1680	20.6410
5000	1.0720	2.9350	28.6360

✍ 注: 这里的计算时间可能受软硬件的影响, 并不一定能准确反映实际计算效率.

求解线性最小二乘问题

- Cholesky 分解法最快 (不仅运算量少, 而且计算效率高), 但精度最差, 适合条件数比较小的情形.
- QR 分解法的运算量大约是 Cholesky 分解法的 2 倍, 但算法稳定.
- SVD 法精度最高, 但运算量是前面两个方法的好几倍, 一般用于特别病态 (接近秩亏) 情形, 或者秩亏情形.

6 广义逆与最小二乘 *

6.1 广义逆的定义

6.2 广义逆的基本性质

6.3 广义逆的计算

6.4 广义逆与线性最小二乘

6.1 广义逆的定义

广义逆的概念最早由 Moore 于 1920 年提出:

设 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, 若 $X \in \mathbb{C}^{n\times m}$ 满足

$$AX = P_{\mathrm{Ran}(A)}, \quad XA = P_{\mathrm{Ran}(X)}, \tag{3.10}$$

即 AX 和 XA 分别为 $\mathrm{Ran}(A)$ 和 $\mathrm{Ran}(X)$ 上的正交投影, 则称 X 是 A 的广义逆.

1955 年, Penrose 利用四个矩阵方程给出了广义逆的定义.

定义 设 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, 若 $X \in \mathbb{C}^{n\times m}$ 满足

$$AXA = A \tag{3.11}$$

$$XAX = X \tag{3.12}$$

$$(AX)^* = AX \tag{3.13}$$

$$(XA)^* = XA. \tag{3.14}$$

则称 X 为 A 的**广义逆** (或 **Moore-Penrose 逆**, 简称 **MP 逆**), 记为 $A^\dagger$.

- 满足方程 (3.11)-(3.14) 的 X 存在且唯一, 即广义逆存在且唯一
- 以上两种定义是等价的, 若 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 且非奇异, 则 $A^\dagger = A^{-1}$

广义逆与 SVD

设 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, $\mathrm{rank}(A) = r > 0$, A 的 SVD 为

$$A = U \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^*, \quad \Sigma_1 = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_r) \in \mathbb{R}^{r\times r}.$$

则容易验证

$$A^\dagger = V \begin{bmatrix} \Sigma_1^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^*.$$

即广义逆可以由 SVD 直接表示出来

6.2 广义逆的基本性质

定理 设 $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, 则

(1) $(A^\dagger)^\dagger = A$;

(2) $(A^{\mathsf{T}})^\dagger = (A^\dagger)^{\mathsf{T}}$, $(A^*)^\dagger = (A^\dagger)^*$;

(3) $\mathrm{rank}(A) = \mathrm{rank}(A^\dagger) = \mathrm{rank}(A^\dagger A)$;

(4) $(AA^*)^\dagger = (A^*)^\dagger A^\dagger$, $(A^*A)^\dagger = A^\dagger (A^*)^\dagger$;

(5) $(AA^*)^\dagger AA^* = AA^\dagger$, $(A^*A)^\dagger A^* A = A^\dagger A$;

(6) $A^\dagger = (A^*A)^\dagger A^* = A^*(AA^*)^\dagger$, 特别地, 若 A 列满秩, 则 $A^\dagger = (A^*A)^{-1}A^*$, 若 A 行满秩, 则 $A^\dagger = A^*(AA^*)^{-1}$;

(7) 若 U, V 是酉矩阵, 则 $(UAV)^\dagger = V^* A^\dagger U^*$.

6.3 广义逆的计算

- 利用 SVD, 但运算量较大.
- 利用满秩分解

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$.

(1) 若 A 是列满秩矩阵, 则 $A^{\dagger} = (A^*A)^{-1}A^*$;

(2) 若 A 是行满秩矩阵, 则 $A^{\dagger} = A^*(AA^*)^{-1}$;

(3) 若 A 的秩是 $r \leq \min\{m,n\}$, 且其满秩分解为 $A = FG$, 其中 $F \in \mathbb{R}^{m\times r}, G \in \mathbb{R}^{r\times n}$, 则

$$A^{\dagger} = G^{\dagger}F^{\dagger} = G^*(GG^*)^{-1}(F^*F)^{-1}F^*.$$

利用 QR 分解

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ 是列满秩矩阵, 其 QR 分解为 $A = QR$, 其中 $Q \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$, 则

$$A^{\dagger} = R^{-1}Q^{*}.$$

其他算法

其他比较重要的算法有: **Greville 递推算法**, **Cline 算法**等.

6.4 广义逆与线性最小二乘

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 则线性最小二乘问题 (3.1) 的解为

$$x = A^{\dagger}b + (I - P_{A^{\mathrm{T}}})z, \quad \forall\, z \in \mathbb{R}^n. \tag{3.15}$$



通常, 线性最小二乘问题的解 (3.15) 不是唯一的. 但当 A 列满秩时, $P_{A^{\mathrm{T}}} = I$, 此时解唯一.

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, 记线性最小二乘问题 (3.1) 的解集为 $\mathcal{S}$, 则

$$\min_{x\in\mathcal{S}} \|x\|_2 \tag{3.16}$$

存在唯一解, 即线性最小二乘问题 (3.1) 存在唯一的最小范数解.

7 最小二乘扰动分析 *

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ 且 $\mathrm{rank}(A) = n$. 设 x 是线性最小二乘问题 (3.1) 的解, $\tilde{x}$ 极小化 $\|(A+\delta A)\tilde{x} - (b+\delta b)\|_2$, 则

$$\frac{\|\tilde{x}-x\|_2}{\|x\|_2} \leq \varepsilon \cdot \left\{ \frac{2\kappa_2(A)}{\cos\theta} + \kappa_2^2(A)\tan\theta \right\} + \mathcal{O}(\varepsilon^2),$$

其中 $\kappa_2(A) = \sigma_1(A)/\sigma_n(A)$, θ 为 b 与 $\mathrm{Ran}(A)$ 的夹角,

$$\varepsilon \triangleq \max\left\{ \frac{\|\delta A\|_2}{\|A\|_2}, \frac{\|\delta b\|_2}{\|b\|_2} \right\},$$

并假定 $\varepsilon \cdot \kappa_2(A) < 1$ (确保 $A+\delta A$ 满秩, 从而 $\tilde{x}$ 唯一确定).

8 最小二乘问题的推广及其应用 *

推广: 正则化 – 不适定问题

对于欠定最小二乘, 由于解不唯一, 我们往往还需要极小化 $\|x\|_2^2$, 合起来就是

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2 + \frac{\alpha}{2}\|x\|_2^2 \quad , \quad \text{其中 } \alpha > 0 \text{ 是正则化系数}$$

将目标函数记为

$$J(x) = \frac{1}{2}\left(\|Ax-b\|_2^2 + \alpha\|x\|_2^2\right).$$

由于 $J(x)$ 是严格凸的二次函数, 因此存在唯一的最小值点.

推广: 加权正则化

一类应用更广泛的问题是下面的加权正则化问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2 + \frac{\alpha}{2}\|Wx\|_2^2 ,$$

其中 $W \in \mathbb{R}^{p\times n}$ 是广义加权矩阵, 可以是非负对角矩阵, 对称正定矩阵, 也可以是一般矩阵 (如一阶差分算子, 二阶差分算子等). 注意, W 不一定要求是方阵.

经过类似的推导, 问题的解满足

$$(A^{\mathsf{T}}A + \alpha W^{\mathsf{T}}W)x = A^{\mathsf{T}}b.$$

如果 $A^{\mathsf{T}}A + \alpha W^{\mathsf{T}}W$ 非奇异, 则存在唯一解

$$x_* = (A^{\mathsf{T}}A + \alpha W^{\mathsf{T}}W)^{-1}A^T b$$

推广: 约束最小二乘

考虑带有约束的最小二乘问题

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2 \tag{3.17}$$
$$\text{s.t.} \quad Bx = f$$

其中 $Bx = f$ 是约束条件. 对应的 Lagrange 函数为

$$J(x) = \frac{1}{2}\|Ax-b\|_2^2 + \lambda^{\mathsf{T}}(Bx-f).$$

分别对 x 和 λ 求一阶导数, 并令其等于零, 可得

$$\begin{bmatrix} A^{\mathsf{T}}A & B^{\mathsf{T}} \\ B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^{\mathsf{T}}b \\ f \end{bmatrix}.$$

应用: 多项式数据拟合

已知 n 个点 $\left\{(t_i, f_i)\right\}_{i=1}^{n}$, 寻找一个低次多项式来拟合这些数据.

设拟合多项式为 $p(t) = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + \cdots + a_m t^m$

通常 $m \ll n$. 将上述 n 个点代入可得

$$\begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 & \cdots & t_1^m \\ 1 & t_2 & t_2^2 & \cdots & t_2^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & t_n & t_n^2 & \cdots & t_n^m \end{bmatrix}_{n\times(m+1)} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix} \quad \text{或} \quad Ax = f,$$

$$\min_{x\in\mathbb{R}^{m+1}} \|f - Ax\|_2^2$$

应用: 线性预测

预测一个时间序列的未来走向, 一个常用方法就是线性预测: 假定在 t_k 时刻的值 f_k 线性依赖于其前 m 个时刻的值 $f_{k-1}, \ldots, f_{k-m}$, 即

$$f_k = a_1 f_{k-1} + a_2 f_{k-2} + \cdots + a_m f_{k-m}. \tag{3.18}$$

现已测得前 n 个值 $f_0, f_1, \ldots, f_{n-1}$, 其中 $n \gg m$, 如何预测未来的值?

将现有的数据代入关系式 (3.18) 可得

$$\begin{bmatrix} f_{m-1} & f_{m-2} & f_{m-3} & \cdots & f_0 \\ f_m & f_{m-1} & f_{m-2} & \cdots & f_1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_{n-2} & f_{n-3} & f_{n-4} & \cdots & f_{n-m-1} \end{bmatrix}_{(n-m)\times m} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_m \\ f_{m+1} \\ \vdots \\ f_{n-1} \end{bmatrix} \text{ 或 } Ax = f,$$

这也是一个超定问题, 因此需要求解最小二乘 $\min_{x\in\mathbb{R}^m} \|f - Ax\|_2^2$

应用: 数字信号去噪

在获取数字信号时, 由于各种各样的原因, 最后得到的信号总会带有一定的噪声, 即

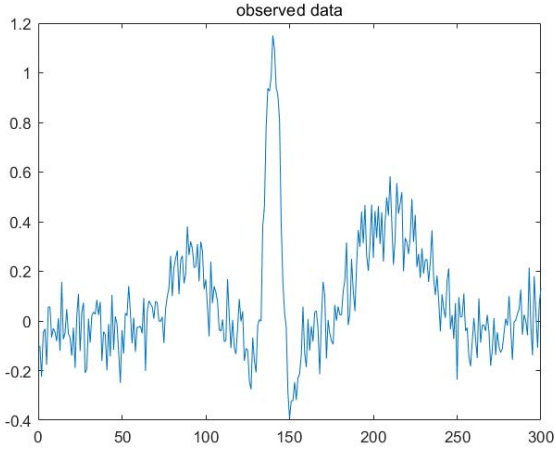
$$b = x + \eta$$

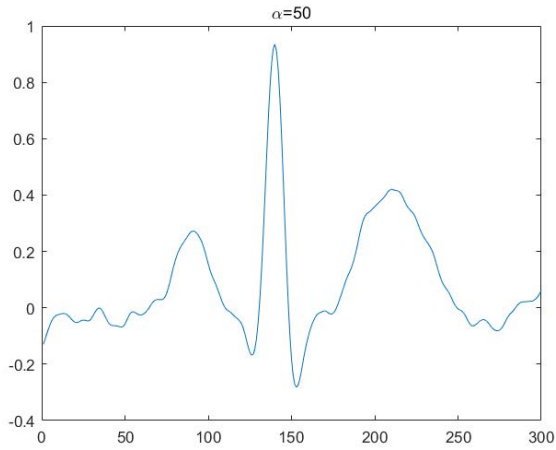
其中 x 是真实的信号, b 是观察到的信号, η 是噪声.

去噪 是数字信号和图像处理中的一个基本问题, 其中一个有效方法就是加权最小二乘法, 即

$$\min_x \frac{1}{2}\|x - b\|_2^2 + \frac{1}{2}\alpha\|Dx\|_2^2$$

其中 D 是离散的二阶导算子或 TV 算子.


observed data
1.2
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
0
50
100
150
200
250
300


α=50
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
0
50
100
150
200
250
300

应用: 数字图像去噪与去模糊

数字图像的获取模型

$$f = \mathcal{B}(x) + \eta$$

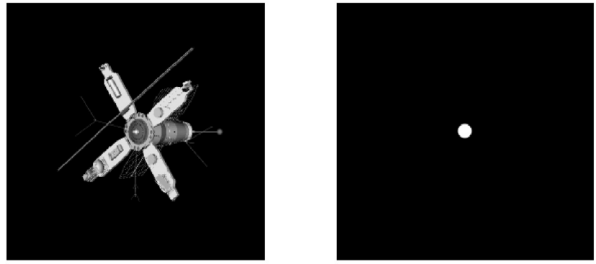
其中 x 是真实图像, f 是观察到的图像, $\mathcal{B}(\cdot)$ 是卷积算子 (模糊机制), η 是噪声.

Tikhonov regularization model

$$\min \|\mathcal{B}(x) - f\|_2^2 + \mu^2 \|x\|_2^2$$

Weighted regularization model

$$\min \|\mathcal{B}(x) - f\|_2^2 + \mu^2 \|Dx\|_2^2, \quad \text{with } D \text{ being a diagonal matrix}$$



(a) (b)

(a) The original satellite image; (b) the out-of-focus blurring function.



(a) (b) (c)

(a) The blurred and noisy image (b) the restored image using the spatial invariant model; (c) the restored image using the spatial variant model


谢 谢
THANK YOU