

**UMSS**

大学数学科学丛书 — 17

# 广义最小二乘问题的 理论和计算

魏木生 著



科学出版社  
[www.sciencep.com](http://www.sciencep.com)

大学数学科学丛书 17

# 广义最小二乘问题的 理论和计算

魏木生 著

科学出版社

北京

## 内 容 简 介

本书总结了各种广义的最小二乘问题的理论与计算的最新成果。主要包括最小二乘问题、总体最小二乘问题、等式约束最小二乘问题以及刚性加权最小二乘问题等的理论与科学计算问题。

由于各种广义奇异值分解在解决矩阵论和数值代数问题中有着重要的作用，书中也较详细地介绍了广义的奇异值分解，并应用于解决若干矩阵论和数值代数问题。本书需要的预备知识为数值代数和矩阵论。

本书可作为研究生和高年级本科生的教材，也可作为计算数学及应用学科中需要科学计算的科技工作者的参考书。

### 图书在版编目(CIP)数据

广义最小二乘问题的理论和计算/魏木生著. —北京：科学出版社，2006. 9  
(大学数学科学丛书; 17/李大潜主编)

ISBN 7-03-017798-3

I. 广… II. 魏… III. 最小二乘法 IV. O241. 5

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006) 第 092884 号

责任编辑：吕 虹 赵彦超 / 责任校对：朱光光

责任印制：安春生 / 封面设计：王 浩

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码：100717

<http://www.sciencep.com>

丽源印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2006 年 9 月第 一 版 开本：B5(720×1000)

2006 年 9 月第一次印刷 印张：23

印数：1—3 000 字数：430 000

定价：48.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换（环伟）)

## 《大学数学科学丛书》编委会 (以姓氏笔画为序)

顾 问: 王 元 谷超豪 姜伯驹

主 编: 李大潜

副主编: 龙以明 冯克勤 张继平 袁亚湘

编 委: 王维克 尹景学 叶向东 叶其孝

李安民 李克正 吴宗敏 吴喜之

张平文 范更华 郑学安 姜礼尚

徐宗本 彭实戈

## 作者简介



魏木生, 1982 年 1 月获南京大学数学系学士学位, 1986 年 5 月获美国布朗大学应用数学系博士学位, 现为华东师范大学终身教授, 博士生导师, 并享受国务院特殊津贴. 长期从事计算数学和科学计算方面的教学与科研工作, 先后进行了散射问题和散射频率的数值计算, 参数识别, 最小二乘, 总体最小二乘, 约束最小二乘, 刚性加权最小二乘, 加权广义逆的上确界和稳定性, 矩阵乘积反序律, 图像重构等问题的研究. 在国内外知名杂志上发表论文 80 余篇. 已出版书籍: “Supremum and Stability of Weighted Pseudo inverses and Weighted Least Squares Problems: Analysis and Computations” (Nova Science Publishers, New York, 2001), 《数学分析习题精解》(科学出版社, 2002).

## 《大学数学科学丛书》序

按照恩格斯的说法，数学是研究现实世界中数量关系和空间形式的科学。从恩格斯那时到现在，尽管数学的内涵已经大大拓展了，人们对现实世界中的数量关系和空间形式的认识和理解已今非昔比，数学科学已构成包括纯粹数学及应用数学内含的众多分支学科和许多新兴交叉学科的庞大的科学体系，但恩格斯的这一说法仍然是对数学的一个中肯而又相对来说易于为公众了解和接受的概括，科学地反映了数学这一学科的内涵。正由于忽略了物质的具体形态和属性、纯粹从数量关系和空间形式的角度来研究现实世界，数学表现出高度抽象性和应用广泛性的特点，具有特殊的公共基础地位，其重要性得到普遍的认同。

整个数学的发展史是和人类物质文明和精神文明的发展史交融在一起的。作为一种先进的文化，数学不仅在人类文明的进程中一直起着积极的推动作用，而且是人类文明的一个重要的支柱。数学教育对于启迪心智、增进素质、提高全人类文明程度的必要性和重要性已得到空前普遍的重视。数学教育本质是一种素质教育；学习数学，不仅要学到许多重要的数学概念、方法和结论，更要着重领会到数学的精神实质和思想方法。在大学学习高等数学的阶段，更应该自觉地去意识并努力体现这一点。

作为面向大学本科生和研究生以及有关教师的教材，教学参考书或课外读物的系列，本丛书将努力贯彻加强基础、面向前沿、突出思想、关注应用和方便阅读的原则，力求为各专业的大学本科生或研究生（包括硕士生及博士生）走近数学科学、理解数学科学以及应用数学科学提供必要的指引和有力的帮助，并欢迎其中相当一些能被广大学校选用为教材，相信并希望在各方面的支持及帮助下，本丛书将会愈出愈好。

李大潜

2003年12月27日

## 前　　言

最小二乘方法的产生可以追溯到 1795 年。那一年，伟大的数学家 Gauss 年仅 18 岁，就应用了最小二乘方法准确地预测神谷星 (Ceres) 的运行轨道。然而，对于最小二乘问题的深入研究，从 20 世纪 60 年代才真正开始，而且随着计算机技术和计算速度的飞跃进步，以及科学计算问题的实际需要而有了长足的发展，各种广义的和修正的最小二乘问题的研究方兴未艾，各种相应的直接和迭代算法被提出。

1965 年，Golub 提出用 Householder 变换来实现矩阵的 QR 分解；1970 年，Kahan, Golub 和 Wilkinson 提出用隐式 QR 方法计算矩阵的奇异值分解。从那时开始，线性最小二乘和约束最小二乘问题的性质和算法的研究一直是数值代数的热门课题。Eldén, Wedin 等在 20 世纪 80 年代对等式约束最小二乘问题的扰动进行了分析。后来，人们又对加权约束最小二乘问题进行了研究。1980 年，Golub 和 Van Loan 提出了总体最小二乘问题，掀起了研究各种广义的总体最小二乘问题的性质和算法的研究热潮。1984 年，Karmarkar 提出的内点算法成功地计算了线性规划问题，同时对先前人们对数值分析的结果提出了挑战。1989 年，Stewart 首先研究了和 Karmarkar 算法相应的刚性加权矩阵的广义逆，证明了该加权广义逆是上有界的。现在，对刚性加权最小二乘问题的性质和算法的数值稳定性的研究正深入开展。另一方面，许多实际的科学计算问题最后都归纳到大型稀疏矩阵的线性方程组，或广义的最小二乘问题的求解。对于各种 Krylov 子空间和矩阵分裂迭代算法，包括预条件数方法等被提出并得到深入的研究。

广义最小二乘问题，在很多应用学科的科学计算中有着广泛的应用。本书的目的是总结各种广义最小二乘问题的最新成果，以利于这类问题研究的进一步发展，并满足应用学科的科学计算的实际需要。

本书共分十一章。第一章包括必要的矩阵论和数值代数的基本知识；第二章讨论奇异值和奇异子空间的扰动；第三章讨论最小二乘和加权最小二乘问题；第四章讨论广义的总体最小二乘问题；第五章讨论广义的约束最小二乘问题；第六章讨论加权 MP 逆和加权约束 MP 逆的上确界；第七章讨论加权 MP 逆和加权约束 MP 逆的稳定性条件和相应的加权最小二乘问题和等式约束加权最小二乘问题的稳定性和扰动分析；第八章讨论当加权矩阵给定，但是为刚性矩阵时，加权 MP 逆和对应的加权最小二乘问题的稳定性条件和扰动分析；第九章讨论广义最小二乘问题的直接算法；第十章讨论广义最小二乘问题的迭代算法；第十一章讨论非线性的最小二乘问题。

本书可以作为研究生和高年级本科生的教材, 也可以作为计算数学和应用学科中需要科学计算的科技工作者的参考资料. 本书需要的预备知识为数值代数和矩阵论.

关于各种广义最小二乘问题研究的文献非常丰富, 本书不可能包括所有的参考文献, 主要包括最新的和最精练的内容, 而且列出的参考文献也不太全面. 因此对未能列入参考文献的作者表示歉意.

作者在编写本书时, 得到蒋尔雄教授, 孙继广教授, 曹志浩教授, 王国荣教授, 袁亚湘教授的热情鼓励和支持, 白中治教授和贾仲孝教授提供了他们出色的研究材料, 作者的学生们也帮助进行了大量的文字处理和编排工作, 作者在此深表谢意.

科学出版社的吕虹编审对本书的编排和出版进行了精心指导, 在这里表示衷心的感谢.

本书得到国家自然科学基金 (编号: 10371044), 上海市基础研究重点项目 (编号: 04JC14031), 华东师范大学研究生教材基金和华东师范大学数学系的资助.

编写本书时, 作者的家人毫无怨言地全力支持, 使得作者可以全身心地投入该专著的编写.

由于本人水平的限制, 书中难免有错误和不妥之处, 希望读者能及时指出, 便于以后纠正.

魏木生

2006 年 8 月于华东师范大学

# 符 号 表

$\mathbf{C}^{m \times n}$	所有 $m \times n$ 复元素矩阵的全体
$\mathbf{R}^{m \times n}$	所有 $m \times n$ 实元素矩阵的全体
$\mathbf{C}_r^{m \times n}$	$\mathbf{C}^{m \times n}$ 中所有秩为 $r$ 的矩阵的全体
$\mathcal{U}_n$	所有 $n \times n$ 正矩阵的全体
$\mathbf{R}_0$	非负实数的集合
$\bar{A}$	矩阵 $A$ 的共轭
$A^T$	矩阵 $A$ 的转置
$A^H$	矩阵 $A$ 的共轭转置 (即 $\bar{A}^T$ )
$A^{-1}$	矩阵 $A$ 的逆
$A^\dagger$	矩阵 $A$ 的 MP 逆 (即 $A$ 的 Moore-Penrose 广义逆)
$A > 0$	指矩阵 $A$ 是正定的 Hermite 矩阵
$A \geqslant 0$	指矩阵 $A$ 是半正定的 Hermite 矩阵
$I_n$	$n \times n$ 单位矩阵. 当不会引起混淆时, 也记为 $I$
$0_{m \times n}$	$m \times n$ 零矩阵. 当不会引起混淆时, 也记为 0
$\mathcal{R}(A)$	由矩阵 $A$ 的所有列向量所张成的子空间
$\text{span}(u_1, \dots, u_i)$	表示由向量 $u_1, \dots, u_i$ 张成的子空间
$\mathcal{N}(A)$	矩阵 $A$ 的零空间
$P_A$	到 $\mathcal{R}(A)$ 上的正交投影算子
$\det(A)$	矩阵 $A$ 的行列式
$\text{rank}(A)$	矩阵 $A$ 的秩
$\text{tr}(A)$	矩阵 $A$ 的迹
$\rho(A)$	矩阵 $A$ 的谱半径
$\lambda(A)$	矩阵 $A$ 的所有特征值全体
$\sigma(A)$	矩阵 $A$ 的所有奇异值的全体
$\sigma_{\min+}(A)$	矩阵 $A$ 的最小正奇异值
$\ x\ _2$	向量 $x$ 的 Euclid 范数
$\ A\ _2$	矩阵 $A$ 的谱范数
$\ A\ _F$	矩阵 $A$ 的 Frobenius 范数

---

$ x $	由向量 $x$ 的每个元素取绝对值得到的新 向量
$ A $	由矩阵 $A$ 的每个元素取绝对值得到的新 矩阵
$A \geq B$	表示同阶矩阵 $A$ 和 $B$ 的每个元素满足 $a_{ij} \geq b_{ij}$

# 目 录

<b>第一章 预备知识 .....</b>	<b>1</b>
§ 1.1 引言 .....	1
§ 1.2 特征值和特征向量 .....	2
§ 1.3 矩阵分解 .....	4
1.3.1 若干基本分解 .....	4
1.3.2 SVD 的推广 .....	6
§ 1.4 Hermite 矩阵的特征值和矩阵的奇异值 .....	13
1.4.1 Hermite 矩阵特征值的极小极大定理 .....	13
1.4.2 矩阵奇异值的极小极大定理 .....	15
§ 1.5 广义逆 .....	16
1.5.1 Moore-Penrose 逆 .....	16
1.5.2 其他广义逆 .....	19
§ 1.6 投影 .....	20
1.6.1 幂等矩阵和投影 .....	21
1.6.2 正交投影 .....	23
1.6.3 投影 $AA^\dagger$ 和 $A^\dagger A$ 的几何意义 .....	24
§ 1.7 范数 .....	25
1.7.1 向量范数 .....	25
1.7.2 矩阵范数 .....	28
§ 1.8 行列式, Hadamard 不等式和 Kronecker 乘积 .....	34
1.8.1 Binet-Cauchy 公式 .....	34
1.8.2 Hadamard 不等式 .....	36
1.8.3 Kronecker 乘积 .....	37
§ 1.9 矩阵广义逆的进一步讨论 .....	39
1.9.1 矩阵乘积广义逆的反序律 .....	40
1.9.2 加边矩阵的广义逆 .....	43
1.9.3 矩阵加权广义逆的结构 .....	46
习题一 .....	53

---

<b>第二章 奇异值, 奇异子空间和 MP 逆的扰动</b>	57
§ 2.1 西不变范数的性质	57
2.1.1 von Neumann 定理	57
2.1.2 SG 函数	60
2.1.3 西不变范数的性质	62
§ 2.2 奇异值的扰动和降秩最佳逼近	64
2.2.1 奇异值的扰动	64
2.2.2 降秩最佳逼近	65
§ 2.3 正交投影和奇异子空间的扰动	68
§ 2.4 MP 逆的扰动	77
习题二	80
<b>第三章 线性最小二乘问题</b>	84
§ 3.1 线性最小二乘问题	84
3.1.1 线性最小二乘及其等价性问题	85
3.1.2 LS 问题的正则化	87
§ 3.2 LS 问题的扰动	89
§ 3.3 若干矩阵方程的 LS 解	94
§ 3.4 加权最小二乘问题	98
§ 3.5 WLS 问题的误差估计	101
3.5.1 第一种类型的误差界	102
3.5.2 第二种类型的误差界	104
习题三	105
<b>第四章 总体最小二乘问题</b>	107
§ 4.1 总体最小二乘问题及其解集	107
4.1.1 总体最小二乘问题的定义	107
4.1.2 TLS 问题的解集	114
§ 4.2 TLS 和截断的 LS 问题的扰动	116
4.2.1 TLS 问题的扰动	117
4.2.2 截断的 LS 问题的扰动	123
§ 4.3 TLS 和截断的 LS 问题的比较	125
4.3.1 TLS 和截断的 LS 问题的解的比较	126
4.3.2 TLS 和截断的 LS 问题残量的比较	128

---

4.3.3 TLS 和截断的 LS 问题极小 $F$ 范数修正矩阵的比较 .....	130
4.3.4 一个实例 .....	133
§ 4.4 推广的降秩最佳逼近定理 .....	134
§ 4.5 LS-TLS 问题 .....	141
§ 4.6 约束总体最小二乘问题 .....	146
习题四 .....	150
<b>第五章 等式约束最小二乘问题 .....</b>	<b>153</b>
§ 5.1 等式约束最小二乘问题 .....	153
5.1.1 等式约束最小二乘问题的定义与解集 .....	153
5.1.2 等式约束最小二乘问题的等价性问题 .....	155
§ 5.2 关于 KKT 方程 .....	161
5.2.1 WLS 问题的 KKT 方程 .....	161
5.2.2 LSE 和 WLS 问题的 KKT 方程解的比较 .....	163
5.2.3 对应于 $B$ 和 $B(\tau)$ 零特征值的特征子空间 .....	165
§ 5.3 LSE 问题的误差估计 .....	165
§ 5.4 等式约束加权最小二乘问题 .....	175
5.4.1 等式约束加权最小二乘问题的定义与解集 .....	175
5.4.2 加权最小二乘问题的等价性问题 .....	176
§ 5.5 WLSE 问题的扰动 .....	178
§ 5.6 多重约束 MP 逆和多重约束最小二乘问题 .....	182
§ 5.7 嵌入总体最小二乘问题 .....	186
习题五 .....	193
<b>第六章 加权 MP 逆和约束加权 MP 逆的上确界 .....</b>	<b>195</b>
§ 6.1 基本问题 .....	195
§ 6.2 加权 MP 逆的上确界 .....	198
§ 6.3 约束加权 MP 逆的上确界 .....	203
§ 6.4 双侧加权 MP 逆的上确界 .....	210
习题六 .....	213
<b>第七章 WLS 问题和 WLSE 问题的稳定性扰动 .....</b>	<b>215</b>
§ 7.1 加权 MP 逆和约束加权 MP 逆的稳定性 .....	215
7.1.1 加权 MP 逆的稳定性 .....	215
7.1.2 约束加权 MP 逆的稳定性 .....	218
7.1.3 双侧加权 MP 逆的稳定性 .....	222

---

§ 7.2 加权投影矩阵的扰动上界 .....	224
§ 7.3 加权最小二乘问题的稳定性扰动 .....	232
§ 7.4 约束加权最小二乘问题的稳定性扰动 .....	235
习题七 .....	240
<b>第八章 刚性加权最小二乘问题 .....</b>	<b>242</b>
§ 8.1 预备知识 .....	242
§ 8.2 刚性加权最小二乘和多重约束最小二乘问题 .....	245
§ 8.3 刚性加权投影矩阵和刚性加权 MP <sup>-1</sup> 的扰动 .....	248
§ 8.4 刚性加权最小二乘问题的扰动 .....	256
习题八 .....	257
<b>第九章 广义最小二乘问题的直接解法 .....</b>	<b>258</b>
§ 9.1 基本知识 .....	258
9.1.1 算法和浮点运算 .....	258
9.1.2 正定矩阵线性方程组的数值计算 .....	259
9.1.3 矩阵的预条件处理 .....	261
§ 9.2 正交分解的数值计算 .....	262
9.2.1 QR 分解 .....	262
9.2.2 完全正交分解 .....	272
9.2.3 奇异值分解 .....	274
§ 9.3 最小二乘问题的直接解法 .....	276
9.3.1 QR 分解方法 .....	276
9.3.2 法方程法 .....	277
9.3.3 完全正交分解方法 .....	277
9.3.4 SVD 方法 .....	278
§ 9.4 总体最小二乘问题的直接解法 .....	278
9.4.1 基本 SVD 方法 .....	278
9.4.2 完全正交方法 .....	279
9.4.3 Cholesky 分解法 .....	279
§ 9.5 约束最小二乘问题的数值解法 .....	280
9.5.1 零空间法 .....	280
9.5.2 加权 LS 法 .....	281
9.5.3 直接消去法 .....	281

---

9.5.4 QR 分解和 Q-SVD 方法 .....	284
§ 9.6 刚性 WLS 问题和刚性 WLSL 问题的直接解法 .....	285
9.6.1 行稳定的 QR 分解 .....	285
9.6.2 刚性 WLS 问题的稳定解法 .....	287
9.6.3 刚性 WLSE 问题的稳定解法 .....	290
习题九 .....	290
<b>第十章 广义最小二乘问题的迭代解法 .....</b>	<b>292</b>
§ 10.1 基本知识 .....	292
10.1.1 Chebyshev 多项式 .....	292
10.1.2 分裂迭代法的基本理论 .....	295
10.1.3 实对称三对角矩阵的特征值的范围 .....	299
§ 10.2 最小二乘解的迭代算法 .....	301
10.2.1 分裂迭代法 .....	301
10.2.2 Krylov 子空间法 .....	306
10.2.3 预条件对称-反对称分裂迭代法 .....	314
§ 10.3 总体最小二乘问题的迭代解法 .....	318
10.3.1 部分 SVD 方法 .....	318
10.3.2 双对角化方法 .....	319
§ 10.4 刚性加权最小二乘问题的迭代解法 .....	321
习题十 .....	323
<b>第十一章 非线性最小二乘问题的迭代解法 .....</b>	<b>325</b>
§ 11.1 基本知识 .....	325
11.1.1 Gateaux 导数和 Frechet 导数 .....	325
11.1.2 基本算法 .....	327
§ 11.2 Gauss-Newton 型方法 .....	327
11.2.1 Gauss-Newton 方法 .....	328
11.2.2 阻尼 Gauss-Newton 方法 .....	328
11.2.3 信赖域方法 .....	330
§ 11.3 Newton 型方法 .....	331
11.3.1 Newton 迭代法 .....	331
11.3.2 混合 Newton 迭代法 .....	331
11.3.3 拟 Newton 迭代法 .....	332

§ 11.4 可分离问题和约束问题 .....	333
11.4.1 可分离问题 .....	333
11.4.2 约束非线性最小二乘问题 .....	334
习题十一 .....	336
参考文献 .....	338
* * *	
《大学数学科学丛书》已出版书目 .....	351

# 第一章 预备知识

## § 1.1 引言

各种广义的最小二乘问题, 包括最小二乘问题, 总体最小二乘问题, 等式约束最小二乘问题, 刚性加权最小二乘问题等, 是计算数学研究的一个重要领域, 也是一个非常活跃的研究领域. 它在统计学, 最优化问题, 材料和结构力学, 大地测量, 摄影测量, 卫星定位, 信号处理, 控制理论和经济学, 计算物理, 计算化学, 地球物理, 通信网络及信息科学的科学计算中均有广泛的应用.

由于在最近二十多年以来, 各种新的广义的最小二乘问题的方法被提出, 相应问题的研究成果不断涌现. 在包括作者在内的许多科技工作者的不懈努力下, 这些问题的研究得到了丰富的结果, 现有的国内外有关专著已经不能反映广义最小二乘问题的最新进展. 另一方面, 实际的科学计算要求全面反映广义最小二乘问题的理论和计算算法的论著. 本书的目的是总结各种广义的最小二乘问题的最新成果, 以利于这类问题研究的进一步发展和应用学科的科技工作者的科学计算的需要. 这是一件十分有意义的工作, 也是一件很重要的工作.

本书包含了各种广义最小二乘问题的理论研究和稳定、快速的计算方法, 为计算数学和其他应用学科的科学计算的科技工作者提供了系统而全面的参考资料. 本书不但有重要的理论价值, 并且有广泛的应用前景.

本书需要的预备知识为数值代数和矩阵论方面的基本知识. 同时, 根据作者多年研究的体会, 发现各种广义的奇异值分解在解决矩阵论和数值代数问题中有重要作用, 因此较详细地介绍了广义的奇异值分解, 并应用于解决若干矩阵论和数值代数问题.

为了便于读者阅读, 本章包含了线性代数, 数值代数和矩阵论方面的必要内容. §1.2 介绍特征值和特征向量方面的基本概念; §1.3 介绍各种矩阵分解, 并较详细地推导了广义的奇异值分解; §1.4 介绍 Hermite 矩阵的特征值和奇异值的极大极小定理, 以及奇异值的分隔定理; §1.5 介绍了 MP 逆和其他广义逆的概念和性质; §1.6 讨论投影和正交投影的性质; §1.7 介绍向量范数和矩阵范数的概念和基本性质; §1.8 介绍 Binet-Cauchy 公式, Hadamard 不等式, 和 Kronecker 乘积; §1.9 介绍作者应用广义奇异值分解解决的矩阵广义逆理论中若干困难问题, 像矩阵乘积广义逆的反序律, 加边矩阵的广义逆及加权广义逆的结构等.