

MIT 18.06 线性代数

第十五讲：子空间投影

整理自 MIT 18.06 课程及相关公开笔记

引言

在解方程 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 时，常会遇到无解的情况（方程数量多于未知数），此时需要求解**最优解**。本讲利用上一讲介绍的“正交”概念，通过将向量投影到子空间，推导出投影矩阵与正规方程，为解决此类最优解问题（如最小二乘法）奠定了严格的代数基础。

1 向量的投影

1.1 向量的投影

给定两个向量 $\mathbf{a}$ 和 $\mathbf{b}$ ，若要将 $\mathbf{b}$ 投影到向量 $\mathbf{a}$ 所在的直线上，投影点记为 $\mathbf{p}$ 。由于 $\mathbf{p}$ 在直线 $\mathbf{a}$ 上，可以表示为其倍数： $\mathbf{p} = x\mathbf{a}$ （其中 x 为某个实数值）。

向量 $\mathbf{e} = \mathbf{b} - \mathbf{p} = \mathbf{b} - x\mathbf{a}$ 表示从投影点 $\mathbf{p}$ 指向原向量 $\mathbf{b}$ 的误差向量。根据正交的定义，向量 $\mathbf{a}$ 与误差向量 $\mathbf{e}$ 正交，因此它们的点积为零：

$$\mathbf{a}^T \mathbf{e} = 0 \implies \mathbf{a}^T (\mathbf{b} - x\mathbf{a}) = 0$$

将此式展开：

$$\mathbf{a}^T \mathbf{b} - x\mathbf{a}^T \mathbf{a} = 0$$

解得系数 x ：

$$x = \frac{\mathbf{a}^T \mathbf{b}}{\mathbf{a}^T \mathbf{a}}$$

进而得到投影向量 $\mathbf{p}$ 的表达式：

$$\mathbf{p} = x\mathbf{a} = \frac{\mathbf{a}^T \mathbf{b}}{\mathbf{a}^T \mathbf{a}} \mathbf{a}$$

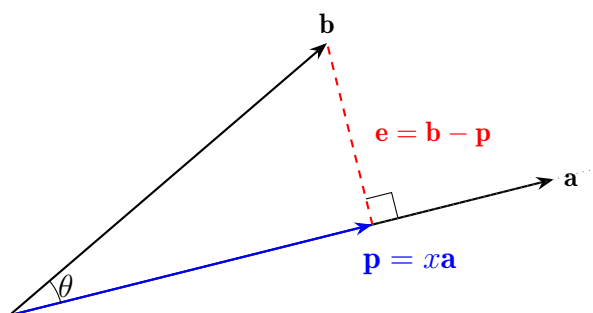


图 1: 向量 $\mathbf{b}$ 在向量 $\mathbf{a}$ 方向上的投影

1.2 投影矩阵

上述投影 (projection) 关系可视为一个线性变换, 即存在矩阵 P 使得 $\mathbf{p} = P\mathbf{b}$ 。由 $\mathbf{p}$ 的表达式:

$$P = \frac{\mathbf{a}\mathbf{a}^T}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}}$$

此处的 $\mathbf{a}\mathbf{a}^T$ 是一个 $n \times n$ 的矩阵, 而分母 $\mathbf{a}^T\mathbf{a}$ 是一个标量数值。投影矩阵 P 具有两个重要的性质:

- **对称性** (symmetric): $P^T = P$ 。对 P 整体转置, 由于分母是标量, 分子 $(\mathbf{a}\mathbf{a}^T)^T = \mathbf{a}\mathbf{a}^T$ 。
- **幂等性** (idempotent): $P^2 = P$ 。对同一个向量做两次投影, 其结果与只做一次投影相同。

$$P^2 = \left(\frac{\mathbf{a}\mathbf{a}^T}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}} \right) \cdot \left(\frac{\mathbf{a}\mathbf{a}^T}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}} \right) = \frac{\mathbf{a}(\mathbf{a}^T\mathbf{a})\mathbf{a}^T}{(\mathbf{a}^T\mathbf{a})^2} = \frac{(\mathbf{a}^T\mathbf{a}) \cdot \mathbf{a}\mathbf{a}^T}{(\mathbf{a}^T\mathbf{a})^2} = \frac{\mathbf{a}\mathbf{a}^T}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}} = P$$

2 子空间上的投影

2.1 为什么要投影

对于方程 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, 如果 $\mathbf{b}$ 不在矩阵 A 的列空间 $C(A)$ 内, 那么该方程无解。向量 $A\mathbf{x}$ 始终属于列空间 $C(A)$, 因此求**最优解**的思路是: 找到列空间 $C(A)$ 中距离 $\mathbf{b}$ 最近的向量 $\mathbf{p}$, 即 $\mathbf{b}$ 在列空间上的投影, 然后求解 $A\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{p}$, 这里 $\hat{\mathbf{x}}$ 即为原方程的最优解。

2.2 子空间上的投影

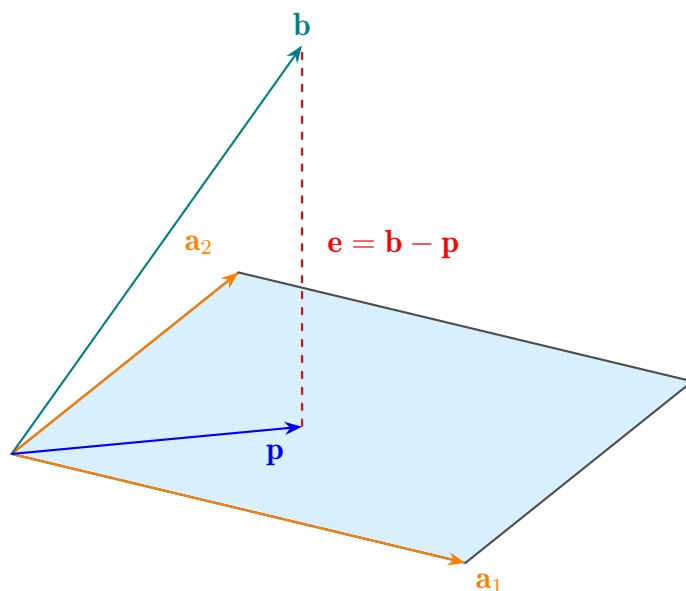


图 2: 向量 $\mathbf{b}$ 到平面 $C(A)$ 上的投影

设 A 的列空间由线性无关的列向量 $\mathbf{a}_1$ 和 $\mathbf{a}_2$ 张成, 即 $A = [\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2]$, $\mathbf{b}$ 在平面 $C(A)$ 上的投影 $\mathbf{p}$ 可以表示为:

$$\mathbf{p} = \hat{x}_1\mathbf{a}_1 + \hat{x}_2\mathbf{a}_2 = A\hat{\mathbf{x}}$$

其中 $\hat{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{bmatrix}$ 是最优解向量。此时误差向量为 $\mathbf{e} = \mathbf{b} - \mathbf{p} = \mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}$ 。由于 $\mathbf{e}$ 与投影平面正交，因此 $\mathbf{e}$ 分别与平面内的任意向量（包括基向量 $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ ）垂直：

$$\mathbf{a}_1^T(\mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}) = 0, \quad \mathbf{a}_2^T(\mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}) = 0$$

将这两个方程合并为矩阵形式，即为：

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

这个公式揭示了一个关键的几何结论：误差向量 $\mathbf{e} = \mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}$ 位于 A^T 的零空间（即 A 的左零空间）中。根据上一讲关于正交补的结论，左零空间与列空间正交，因此误差向量与投影平面正交，这与几何上完全吻合。

2.3 高维投影矩阵与正规方程

将公式 $A^T(\mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{0}$ 展开：

$$A^T\mathbf{b} - A^TA\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{0} \implies A^TA\hat{\mathbf{x}} = A^T\mathbf{b}$$

在列向量 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ 线性无关的情况下，矩阵 A^TA 是可逆的，因此可以左乘 $(A^TA)^{-1}$ 求得最优解：

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

将此解代回投影表达式，得到投影向量：

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

由此得到投影矩阵：

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

这个投影矩阵同样具备与一维情况相同的两个性质： $P^T = P$ （对称性）以及 $P^2 = P$ （幂等性）。

3 最小二乘法初探

投影的应用之一是解决数据拟合问题。例如，已知三个数据点 $(1, 1)$ 、 $(2, 2)$ 、 $(3, 2)$ ，求一条最接近这三个点的直线 $y = \beta + \alpha x$ 。

将三组数据代入直线方程：

$$\beta + 1\alpha = 1$$

$$\beta + 2\alpha = 2$$

$$\beta + 3\alpha = 2$$

将上述方程写成矩阵形式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ ：

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

由于三点不共线，此方程组无精确解。求解其**最优解**，等价于求解正规方程 $A^TA\hat{\mathbf{x}} = A^T\mathbf{b}$ 。通过此方程计算出的 β 和 α 即使无法使直线通过所有数据点，但能使所有点与直线的垂直距离平方和达到最小，这正是“最小二乘法”名称的由来。

总结

本讲基于上一讲的正交概念，推导并完善了子空间投影的代数工具：

- 一个向量投影到另一个向量上的投影矩阵为 $P = \frac{\mathbf{a}\mathbf{a}^T}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}}$ ，具有 $P^2 = P$ 与 $P^T = P$ 的性质。
- 向量投影到列空间 $C(A)$ 的高维投影矩阵为 $P = A(A^T A)^{-1}A^T$ 。正规方程 $A^T A\hat{\mathbf{x}} = A^T \mathbf{b}$ 将无解的原问题转换为了可以求得最优解的系统。
- 最小二乘法是投影在高维空间中的直接应用，它处理了实际数据拟合中常见的方程无解问题。