

设 A 是一个 $m \times n$ 的实矩阵。对于线性方程组 $AX = \beta$ ，我们知道其最小二乘解与其法方程 $A^T AX = A\beta$ 的解一致。当 $r(A) = n$ ，即 A 列满秩时， $r(A^T A) = r(A) = n$ 是满秩矩阵，所以 $A^T AX = A\beta$ 的解唯一。从而 $AX = \beta$ 的最小二乘解也是唯一的。我们的问题是：当 $r(A^T A) = r(A) < n$ 时，法方程 $A^T AX = A\beta$ 的解有无穷多，哪一个是最好的？

根据我们最小二乘问题的提法，我们提出极小最小二乘问题：在 $AX = \beta$ 的所有最小二乘解中，哪一个 x 使得 $x^T x$ 极小？下面我们提供另一个方法来证明法方程 $A^T AX = A\beta$ 总是有解，在过程中把极小最小二乘解找出来。

命题0.1. 法方程 $A^T AX = A\beta$ 总是有解。

Proof. 我们在习题里证明了如下结果：设 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 且 $r(A) = r$ ，则存在 $P \in \mathbb{R}^{m \times r}$ 和 $Q \in \mathbb{R}^{r \times n}$ ，满足 $r(P) = r(Q) = r$ 且 $A = PQ$ 。

让 P 和 Q 是如上的矩阵，则 $r(P^T P) = r(P) = r = r(Q) = r(QQ^T)$ ，从而 $P^T P$ 和 QQ^T 都是可逆矩阵。令

$$x = Q^T (QQ^T)^{-1} (P^T P)^{-1} P^T \beta,$$

容易验证这个 x 是法方程的解，从而是一个最小二乘解。 $\square$

命题0.2. 上面找到的最小二乘解是一个极小最小二乘解。

Proof. 假设我们还有另外一个最小二乘解 y ，于是

$$\begin{aligned} A^T Ax &= A^T \beta & A^T Ay &= A^T \beta \\ \Rightarrow \theta &= A^T A(y - x) = Q^T P^T PQ(y - x) = \theta \\ \Rightarrow QQ^T P^T PQ(y - x) &= Q(Q^T P^T PQ(y - x)) = Q\theta = \theta \\ \Rightarrow Q(y - x) &= (P^T P)^{-1} (QQ^T)^{-1} \theta = \theta \\ \Rightarrow x^T (y - x) &= (Q^T (QQ^T)^{-1} (P^T P)^{-1} P^T \beta)^T (y - x) = 0 \\ \Rightarrow y^T y &= (x + (y - x))^T (x + (y - x)) = x^T x + (y - x)^T (y - x) \geq x^T x. \end{aligned}$$

最后一个不等式说明 x 是极小最小二乘解。（同时也可以看出极小最小二乘解是唯一的，从某种意义上说我们有一个最好的拟合办法。） $\square$