

作者	生姜 DrGinger
脚本	生姜 DrGinger
视频	崔崔 CuiCui
开源学习资源	<a href="https://github.com/Visualize-ML">https://github.com/Visualize-ML</a>
平台	<a href="https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang">https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang</a> <a href="https://space.bilibili.com/3546865719052873">https://space.bilibili.com/3546865719052873</a> <a href="https://space.bilibili.com/513194466">https://space.bilibili.com/513194466</a>

# 9 Projection 投影

把正交投影、正交矩阵付诸实践

这一章是上一章第 5 节——正交投影——的延续。而正交矩阵在正交投影中扮演重要角色。正交矩阵本身也是规范正交基。我们还会在回归、谱分解、奇异值分解、主成分分析等话题中看到正交矩阵。这一章将先从理解  $2 \times 2$  和  $3 \times 3$  正交矩阵的几何视角开始，然后介绍正交矩阵的各种性质，最后介绍正交投影在格拉姆-施密特正交化、QR 分解、回归应用场景，

## 9.1 $2 \times 2$ 正交矩阵



### 本节你将掌握的核心技能：

- ▶ 单位矩阵、旋转矩阵、镜像矩阵、置换矩阵，以及它们的组合都是正交矩阵。
- ▶ 单位矩阵代表在标准正交基上的恒等变换。
- ▶ 用正交投影获得向量投影。
- ▶ 平面上，正交投影的向量之和，可以无损还原原始向量。
- ▶ 正交补空间包含了垂直于原空间的所有向量。

单位矩阵、旋转矩阵、镜像矩阵、置换矩阵，以及它们的复合矩阵，都是正交矩阵。正交矩阵广泛用于正交投影，我们会在各种常用几何分解中看到正交矩阵的应用场景。本节从单位矩阵、旋转矩阵两个实例入手，用平面几何视角理解  $2 \times 2$  正交矩阵。

### $2 \times 2$ 单位矩阵

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

让我们先看一个极其简单的矩阵乘法。

单位矩阵  $I$  乘列向量  $x$  的结果还是  $x$ ，即

$$Ix = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x \quad (1)$$

这个“简单”的矩阵乘法背后却别有洞天！

从矩阵乘法第三视角——列向量线性组合——来看，(1) 可以写成

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (2)$$

$e_1 \qquad e_2$

如图 1 所示， $(x_1, x_2)$  是向量  $x$  在标准正交基  $[e_1, e_2]$  下的坐标。

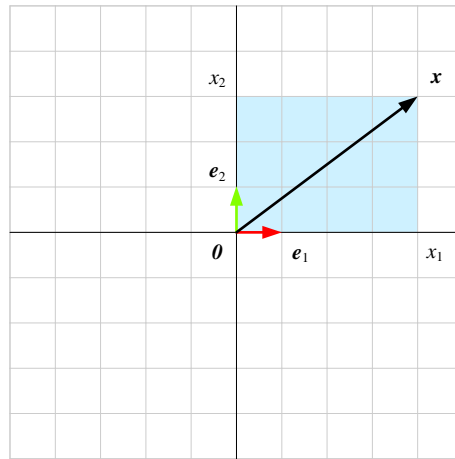


图 1.  $[e_1, e_2]$  线性组合张成的平面

再换个角度，在满足形状匹配前提下，矩阵乘法满足分配律，即

$$\begin{aligned} (A+B)C &= AC + BC \\ A(B+C) &= AB + AC \end{aligned} \quad (3)$$

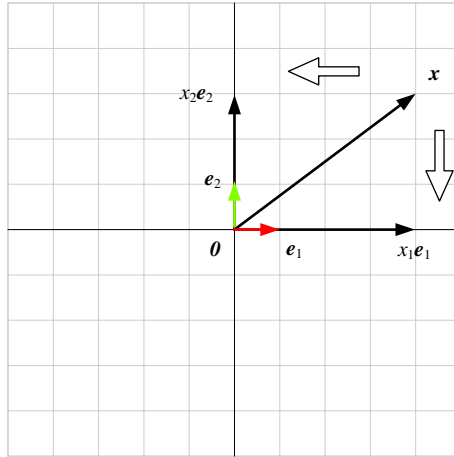
根据 (3) 第一个等式，(1) 可以写成

$$\left( \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (4)$$

根据矩阵乘法分配律展开

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (5)$$

如图 2 所示，我们发现这是  $x$  在  $[e_1, e_2]$  标准正交基中的正交投影。

图 2. 向量  $x$  在  $[e_1, e_2]$  标准正交基中的正交投影

### 朝 $e_1$ 方向正交投影

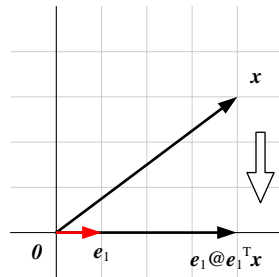
(5) 怎么和上一章第 5 节介绍的正交投影联系起来呢？

列向量  $x$  朝方向向量 (单位向量)  $e_1$  方向投影，对应的投影矩阵  $P_1$  为

$$P_1 = e_1 @ e_1^T = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6)$$

如图 3 所示，投影结果对应如下矩阵乘法

$$P_1 x = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}}_{e_1 @ e_1^T} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (7)$$

图 3. 二维列向量  $x$  在  $e_1$  方向正交投影

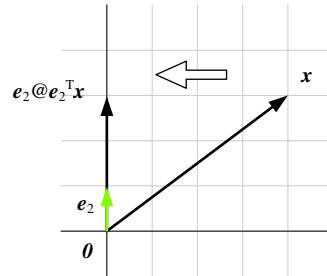
### 朝 $e_2$ 方向正交投影

列向量  $x$  朝方向向量 (单位向量)  $e_2$  方向投影，对应的投影矩阵  $P_2$  为

$$P_2 = e_2 @ e_2^T = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (8)$$

如图 4 所示，投影结果对应如下矩阵乘法

$$P_2 x = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{e_2 @ e_2^T} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (9)$$

图 4. 二维列向量  $x$  在  $e_2$  方向正交投影

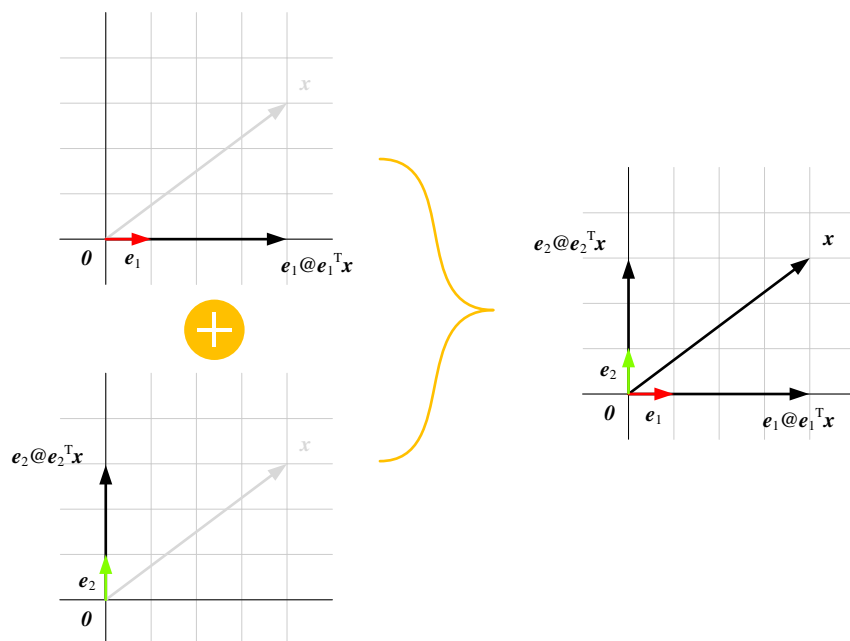
## 向量合成

(7) 和 (9) 正交投影是都是信息降维；而 (7) 和 (9) 结合却正好拼凑还原原始信息，即

$$P_1 x + P_2 x = (P_1 + P_2) x = (e_1 @ e_1^T + e_2 @ e_2^T) x = I @ x \quad (10)$$

如图 5 所示，我们还原了 (1)!

在  $[e_1, e_2]$  中， $x$  完成向量正交分解；反向来看，向量加法相当于合成还原  $x$ 。

图 5. 还原二维列向量  $x$ 

## 合成单位矩阵

在 (10) 中我们还发现了一个等式

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：[jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

$$\mathbf{e}_1 @ \mathbf{e}_1^T + \mathbf{e}_2 @ \mathbf{e}_2^T = \mathbf{I} \quad (11)$$

这个等式又是怎么来的呢？

让我们看一个更加“奇怪”的矩阵乘法

$$\mathbf{I} @ \mathbf{I}^T = \mathbf{I}_{2 \times 2} \quad (12)$$

把单位向量写成行向量形式，即  $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]$ ，上式展开得到

$$[\mathbf{e}_1 \quad \mathbf{e}_2] @ \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1^T \\ \mathbf{e}_2^T \end{bmatrix} = \mathbf{e}_1 @ \mathbf{e}_1^T + \mathbf{e}_2 @ \mathbf{e}_2^T = \mathbf{I} \quad (13)$$

这实际上用到的是矩阵乘法第二视角——外积视角。

如图 6 所示，我们实际上还原了单位矩阵。

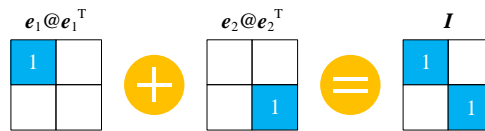


图 6. 还原单位矩阵

再看一个同样“奇怪”的矩阵乘法

$$\mathbf{I}^T @ \mathbf{I} = \mathbf{I}_{2 \times 2} \quad (14)$$

把单位向量写成行向量形式，即  $[\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2]$ ，上式展开

$$\begin{bmatrix} \mathbf{e}_1^T \\ \mathbf{e}_2^T \end{bmatrix} @ [\mathbf{e}_1 \quad \mathbf{e}_2] = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1^T @ \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_1^T @ \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{e}_2^T @ \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2^T @ \mathbf{e}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2 \\ \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \|\mathbf{e}_1\|_2^2 & 0 \\ 0 & \|\mathbf{e}_2\|_2^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I} \quad (15)$$

上式用到的是矩阵乘法第一视角——内积视角。

(14) 就是单位矩阵  $\mathbf{I}$  的格拉姆矩阵。主对角线元素是  $\mathbf{e}_1$ 、 $\mathbf{e}_2$  向量与自身的内积，即  $L^2$  范数的平方；非主对角线元素是两两向量内积。

至此，我们看到了标准正交基的“魅力”！同时，我们也看到了格拉姆矩阵的广泛用途。

标准正交基基底向量都是单位向量，且两两正交；更重要的是，它们构成的网格是最自然的单位正方形网格。

整合 (12)、(14) 得到

$$\mathbf{I}_{2 \times 2} @ \mathbf{I}_{2 \times 2}^T = \mathbf{I}_{2 \times 2}^T @ \mathbf{I}_{2 \times 2} = \mathbf{I}_{2 \times 2} \quad (16)$$

这告诉我们单位矩阵也是正交矩阵！

(11) 还可以写成

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 @ \mathbf{e}_1^T &= \mathbf{I} - \mathbf{e}_2 @ \mathbf{e}_2^T \\ \mathbf{e}_2 @ \mathbf{e}_2^T &= \mathbf{I} - \mathbf{e}_1 @ \mathbf{e}_1^T \end{aligned} \quad (17)$$

? 这是否让大家想起正交投影中用法向量定义正交投影矩阵？

上式告诉我们平面上横轴  $x_2 = 1$  对应的法向量为  $e_2$ ，而纵轴  $x_1 = 1$  对应的法向量为  $e_1$ 。

这一点在平面上还不是很容易看清楚，下一节会在  $3 \times 3$  单位矩阵上看得更清楚。

此外，如图 7 所示， $\text{span}(e_1)$ 、 $\text{span}(e_2)$  互为正交补。简单来说，正交补空间包含了垂直于原空间的所有向量。

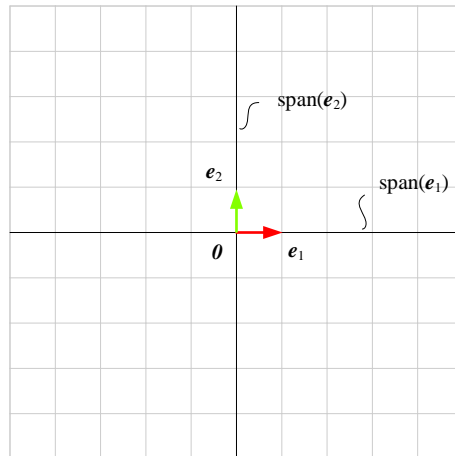


图 7.  $\text{span}(e_1)$ 、 $\text{span}(e_2)$  互为正交补

## 2 × 2 旋转矩阵

本身前文提过旋转矩阵也是正交矩阵。让我们先看看  $2 \times 2$  旋转矩阵  $V$ ，具体实例为

$$V = \begin{bmatrix} 4/5 & -3/5 \\ 3/5 & 4/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4/5 \\ 3/5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -3/5 \\ 4/5 \end{bmatrix} \quad (18)$$

$\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{v_1} \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{v_2}$

如图 8 所示，向量  $x$  在  $[v_1, v_2]$  这个规范正交基也有自己的坐标。

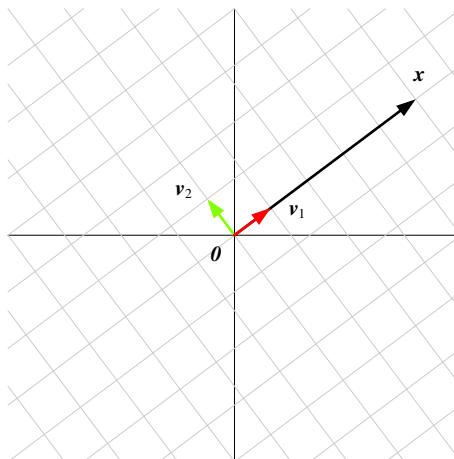


图 8.  $[v_1, v_2]$  线性组合张成平面

## 合成单位矩阵

由于  $V$  为正交矩阵，其满足

$$VV^T = V^TV = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I \quad (19)$$

先看格拉姆矩阵  $V^TV$ ，把  $V$  写成  $[v_1, v_2]$ ，用矩阵乘法第一视角展开

$$\begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \end{bmatrix} @ [v_1 \ v_2] = \begin{bmatrix} v_1^T @ v_1 & v_1^T @ v_2 \\ v_2^T @ v_1 & v_2^T @ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \cdot v_1 & v_1 \cdot v_2 \\ v_2 \cdot v_1 & v_2 \cdot v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I_{2 \times 2} \quad (20)$$

请大家自行分析 (20) 方阵主对角线元素、非主对角线元素的特点。

再看  $VV^T$ ，用矩阵乘法第二视角展开

$$[v_1 \ v_2] @ \begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \end{bmatrix} = v_1 @ v_1^T + v_2 @ v_2^T = I_{2 \times 2} \quad (21)$$

我们看到的是两个正交投影矩阵的叠加，结果是单位矩阵。

## 朝 $v_1$ 方向正交投影

二维列向量  $x$  朝方向向量 (单位向量)  $v_1$  方向投影，对应的投影矩阵  $P_1$  为

$$P_1 = v_1 @ v_1^T = \begin{bmatrix} 4/5 \\ 3/5 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 4/5 \\ 3/5 \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 16/25 & 12/25 \\ 12/25 & 9/25 \end{bmatrix} \quad (22)$$

投影结果对应如下矩阵乘法

$$P_1 x = \underbrace{\begin{bmatrix} 16/25 & 12/25 \\ 12/25 & 9/25 \end{bmatrix}}_{v_1 @ v_1^T} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 16x_1/25 + 12x_2/25 \\ 12x_1/25 + 9x_2/25 \end{bmatrix} \quad (23)$$

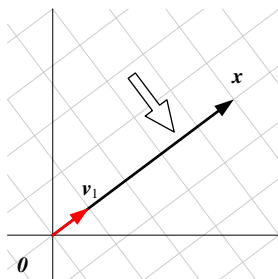
图 9. 二维列向量  $x$  在  $v_1$  方向正交投影

图 9 所示为二维列向量  $x$  在  $v_1$  方向正交投影。带入具体数值，投影结果为

$$P_1 \mathbf{x} = \underbrace{\begin{bmatrix} 16/25 & 12/25 \\ 12/25 & 9/25 \end{bmatrix}}_{\mathbf{v}_1 @ \mathbf{v}_1^T} \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} \quad (24)$$

? 大家是否感到奇怪，为什么向量  $\mathbf{x}$  在  $\mathbf{v}_1$  的正交投影结果为  $\mathbf{x}$  本身？原因很简单， $\mathbf{x}$  平行  $\mathbf{v}_1$ ，也就是说  $\mathbf{x}$  在  $\text{span}(\mathbf{v}_1)$  中。

想要计算  $\mathbf{x}$  在  $\text{span}(\mathbf{v}_1)$  的坐标，我们用标量投影即可，即

$$\mathbf{v}_1^T \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 4/5 \\ 3/5 \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} = 5 \quad (25)$$

这个标量值相当于向量  $\mathbf{x}$  在  $\mathbf{v}_1$  的坐标，再乘以  $\mathbf{v}_1$  就相当于“二次投影”到平面。

### 朝 $\mathbf{v}_2$ 方向正交投影

二维列向量  $\mathbf{x}$  朝方向向量（单位向量） $\mathbf{v}_2$  方向投影，对应的投影矩阵  $\mathbf{P}_2$  为

$$\mathbf{P}_2 = \mathbf{v}_2 @ \mathbf{v}_2^T = \begin{bmatrix} -3/5 \\ 4/5 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} -3/5 \\ 4/5 \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 9/25 & -12/25 \\ -12/25 & 16/25 \end{bmatrix} \quad (26)$$

投影结果对应如下矩阵乘法

$$\mathbf{P}_2 \mathbf{x} = \underbrace{\begin{bmatrix} 9/25 & -12/25 \\ -12/25 & 16/25 \end{bmatrix}}_{\mathbf{v}_2 @ \mathbf{v}_2^T} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9x_1/25 - 12x_2/25 \\ -12x_1/25 + 16x_2/25 \end{bmatrix} \quad (27)$$

图 10 所示为二维列向量  $\mathbf{x}$  在  $\mathbf{v}_2$  方向正交投影。带入具体数值，投影结果为

$$\mathbf{P}_2 \mathbf{x} = \underbrace{\begin{bmatrix} 9/25 & -12/25 \\ -12/25 & 16/25 \end{bmatrix}}_{\mathbf{v}_2 @ \mathbf{v}_2^T} \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (28)$$

由于  $\mathbf{x}$  和  $\mathbf{v}_2$  正交， $\mathbf{x}$  在  $\mathbf{v}_2$  正交投影为零向量  $\mathbf{0}$ 。

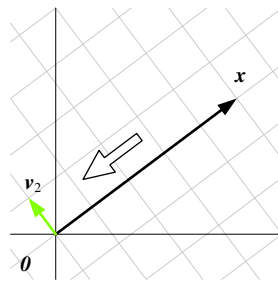


图 10. 二维列向量  $\mathbf{x}$  在  $\mathbf{v}_2$  方向正交投影

### 向量合成

如图 11 所示，把 (24)、(28) 两者叠加还原  $\mathbf{x}$  所有信息



$$(P_1 + P_2)x = (v_1 @ v_1^T + v_2 @ v_2^T)x = \begin{bmatrix} 16x_1/25 + 12x_2/25 \\ 12x_1/25 + 9x_2/25 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 9x_1/25 - 12x_2/25 \\ -12x_1/25 + 16x_2/25 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \quad (29)$$

如图 12 所示,  $\text{span}(v_1)$ 、 $\text{span}(v_2)$  互为正交补。

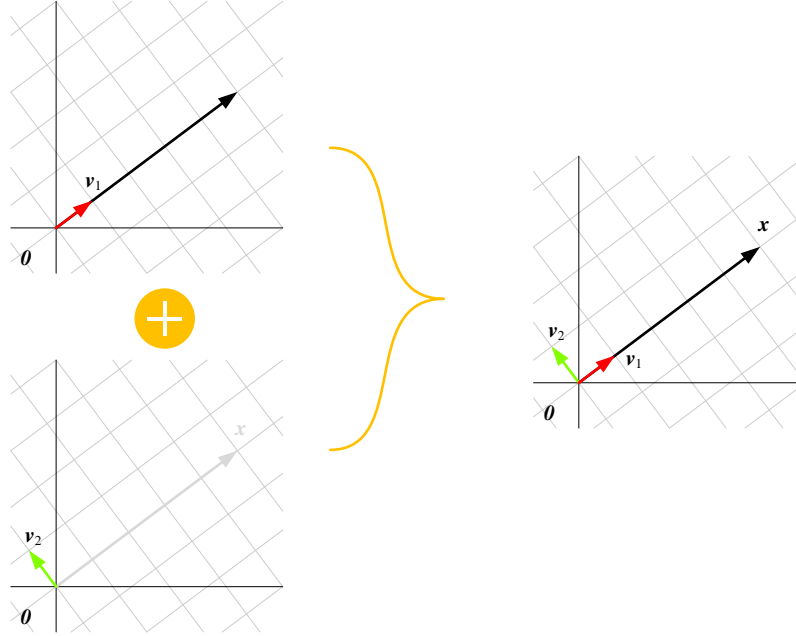


图 11.  $[v_1, v_2]$  中还原二维列向量  $x$

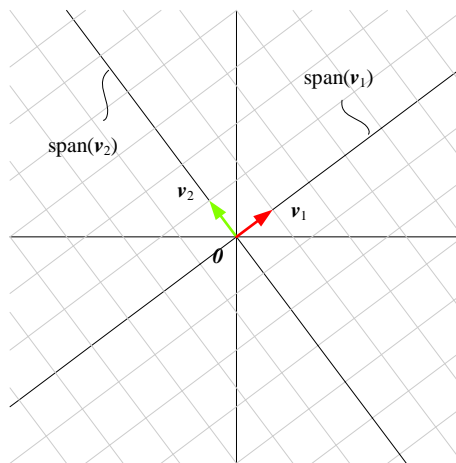


图 12.  $\text{span}(v_1)$ 、 $\text{span}(v_2)$  互为正交补

下一节升维, 我们会从三维几何视角继续分析  $3 \times 3$  正交矩阵。



请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

本 PDF 文件为作者草稿, 发布目的为方便读者在移动终端学习, 终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有, 请勿商用, 引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载: <https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微课视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger: <https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教, 本书专属邮箱: [jiang.visualize.ml@gmail.com](mailto:jiang.visualize.ml@gmail.com)

**Q1.** 判断哪些矩阵为正交矩阵。

▶  $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

▶  $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

▶  $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

▶  $\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

▶  $\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

▶  $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$

▶  $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

▶  $\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$

▶  $\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$

**Q2.** 几何角度来看，**Q1** 中的正交矩阵对应怎样的几何变换？

**Q3.** 计算 **Q1** 中的正交矩阵的行列式。

**Q4.** 如下成对矩阵中 **A**、**B** 均为正交矩阵，请判断 **A@B**、**B@A** 是否均为正交矩阵？

▶  $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$

▶  $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$

▶  $A = \begin{bmatrix} 3/5 & -4/5 \\ 4/5 & 3/5 \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$

**Q5.** 几何角度来看，**Q4** 中 **A@B**、**B@A** 对应怎样的几何变换？

**Q6.** 分别计算如下正交矩阵的逆、转置，大家可以得到怎样的结论？

▶  $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

▶  $\begin{bmatrix} 3/5 & -4/5 \\ 4/5 & 3/5 \end{bmatrix}$

▶  $\begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 & -1/2 \\ 1/2 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}$

**Q7.** 计算平面上  $[2, 3]^T$  朝  $e_1$  标量投影、向量投影结果。

**Q8.** 计算平面上  $[2, 3]^T$  朝  $e_2$  标量投影、向量投影结果。

**Q9.** 将  $[2, 3]^T$  分别朝  $e_1$ 、 $e_2$  向量投影，然后再合成。