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



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 2×2 和 3×3 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 分解的应用。

9.1_{2×2}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 2×2 正交矩阵。

2×2单位矩阵

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

$$Ix = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = x \tag{1}$$

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

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。

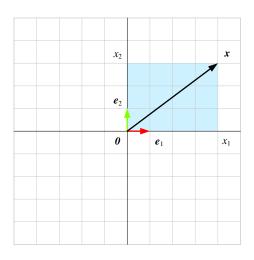


图 1. $[e_1, e_2]$ 线性组合张成的平面

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

$$(A+B)C = AC + BC$$

$$A(B+C) = AB + AC$$
(3)

根据(3)第一个等式,(1)可以写成

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

根据矩阵乘法分配律展开

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$
 (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。

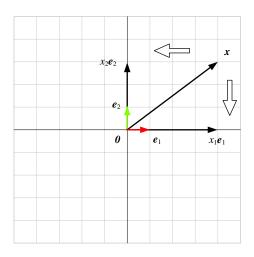


图 2. 向量 x 在 $[e_1, e_2]$ 标准正交基中的正交投影

朝 色 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

$$\boldsymbol{P}_{1} = \boldsymbol{e}_{1} @ \boldsymbol{e}_{1}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$(6)$$

如图 3 所示,投影结果对应如下矩阵乘法

$$\mathbf{P}_{1}\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ e_{1} @ e_{1}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1} \\ x_{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1} \\ 0 \end{bmatrix}$$
 (7)

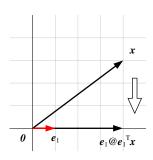


图 3. 二维列向量 x 在 e_1 方向正交投影

朝 🕰 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

$$\boldsymbol{P}_{2} = \boldsymbol{e}_{2} @ \boldsymbol{e}_{2}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 0 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$(8)$$

如图4所示,投影结果对应如下矩阵乘法

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

$$\boldsymbol{P}_{2}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1} \\ x_{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ x_{2} \end{bmatrix}$$

$$(9)$$

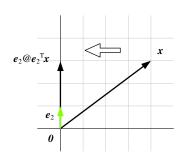


图 4. 二维列向量 x 在 e_2 方向正交投影

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

$$\mathbf{P}_{1}\mathbf{x} + \mathbf{P}_{2}\mathbf{x} = (\mathbf{P}_{1} + \mathbf{P}_{2})\mathbf{x} = (\mathbf{e}_{1} \otimes \mathbf{e}_{1}^{\mathsf{T}} + \mathbf{e}_{2} \otimes \mathbf{e}_{2}^{\mathsf{T}})\mathbf{x} = \mathbf{I} \otimes \mathbf{x}$$

$$(10)$$

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。

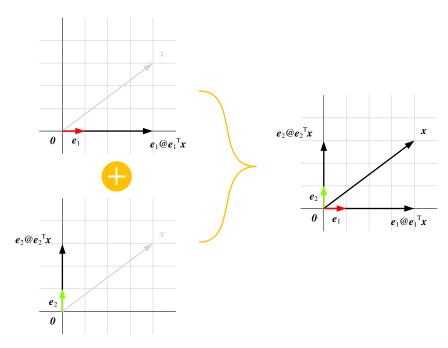


图 5. 还原二维列向量 x

合成单位矩阵

在(10)中我们还发现了一个等式

$$\boldsymbol{e}_{1} @ \boldsymbol{e}_{1}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{e}_{2} @ \boldsymbol{e}_{2}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}$$
 (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

$$\boldsymbol{I} @ \boldsymbol{I}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}_{2 \times 2} \tag{12}$$

把单位向量写成行向量形式,即 $[e_1,e_2]$,上式展开得到

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_1^T \\ \boldsymbol{e}_2^T \end{bmatrix} = \boldsymbol{e}_1 @ \boldsymbol{e}_1^T + \boldsymbol{e}_2 @ \boldsymbol{e}_2^T = \boldsymbol{I}$$
(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。

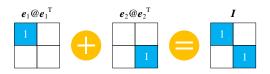


图 6. 还原单位矩阵

再看一个同样"奇怪"的矩阵乘法

$$\boldsymbol{I}^{\mathrm{T}} @ \boldsymbol{I} = \boldsymbol{I}_{2\times 2} \tag{14}$$

把单位向量写成行向量形式,即 $[e_1,e_2]$,上式展开

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_{1}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{e}_{2}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_{1} & \boldsymbol{e}_{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_{1}^{\mathrm{T}} @ \boldsymbol{e}_{1} & \boldsymbol{e}_{1}^{\mathrm{T}} @ \boldsymbol{e}_{2} \\ \boldsymbol{e}_{2}^{\mathrm{T}} @ \boldsymbol{e}_{1} & \boldsymbol{e}_{2}^{\mathrm{T}} @ \boldsymbol{e}_{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{e}_{1} \cdot \boldsymbol{e}_{1} & \boldsymbol{e}_{1} \cdot \boldsymbol{e}_{2} \\ \boldsymbol{e}_{2} \cdot \boldsymbol{e}_{1} & \boldsymbol{e}_{2} \cdot \boldsymbol{e}_{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \|\boldsymbol{e}_{1}\|_{2}^{2} & 0 \\ 0 & \|\boldsymbol{e}_{2}\|_{2}^{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{I}$$
 (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 I 的格拉姆矩阵。主对角线元素是 e_1 、 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

$$I_{2\times 2} @ I_{2\times 2}^{T} = I_{2\times 2}^{T} @ I_{2\times 2} = I_{2\times 2}$$
(16)

这告诉我们单位矩阵也是正交矩阵!

(11) 还可以写成

$$\mathbf{e}_{1} \otimes \mathbf{e}_{1}^{\mathrm{T}} = \mathbf{I} - \mathbf{e}_{2} \otimes \mathbf{e}_{2}^{\mathrm{T}}$$

$$\mathbf{e}_{2} \otimes \mathbf{e}_{2}^{\mathrm{T}} = \mathbf{I} - \mathbf{e}_{1} \otimes \mathbf{e}_{1}^{\mathrm{T}}$$
(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3×3单位矩阵上看得更清楚。

此外,如图 7 所示, $span(e_1)$ 、 $span(e_2)$ 互为正交补。 $span(e_1)$ 、 $span(e_2)$ 这两个空间都是一维空间。简单 来说,正交补空间包含了垂直于原空间的所有向量。

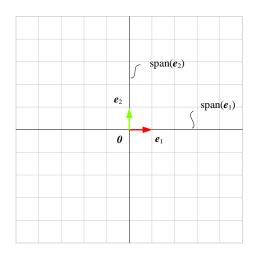


图 7. $span(e_1)$ 、 $span(e_2)$ 互为正交补

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 2×2 旋转矩阵 V,具体实例为

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} 4/5 & -3/5 \\ 3/5 & 4/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4/5 \\ 3/5 \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} -3/5 \\ 4/5 \end{bmatrix}}_{\mathbf{v}_1} \underbrace{\begin{bmatrix} -3/5 \\ 4/5 \end{bmatrix}}_{\mathbf{v}_2}$$
 (18)

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。

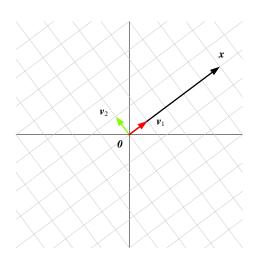


图 8. [v1, v2] 线性组合张成平面

合成单位矩阵

由于V为正交矩阵,其满足

$$\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{I}$$
 (19)

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

$$\begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{v}_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^{\mathrm{T}} @ \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_1^{\mathrm{T}} @ \mathbf{v}_2 \\ \mathbf{v}_2^{\mathrm{T}} @ \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2^{\mathrm{T}} @ \mathbf{v}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 \\ \mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I}_{2 \times 2}$$

$$(20)$$

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

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1 & \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} \boldsymbol{v}_1^T \\ \boldsymbol{v}_2^T \end{bmatrix} = \boldsymbol{v}_1 @ \boldsymbol{v}_1^T + \boldsymbol{v}_2 @ \boldsymbol{v}_2^T = \boldsymbol{I}_{2 \times 2}$$
 (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 45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

$$\mathbf{P}_{1} = \mathbf{v}_{1} @ \mathbf{v}_{1}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 4/5 \\ 3/5 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 4/5 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 16/25 & 12/25 \\ 3/5 \end{bmatrix}$$
(22)

投影结果对应如下矩阵乘法

$$\mathbf{P}_{1}\mathbf{x} = \underbrace{\begin{bmatrix} 16/25 & 12/25 \\ 12/25 & 9/25 \end{bmatrix}}_{\mathbf{v}_{1} \oplus \mathbf{v}_{1}^{\mathrm{T}}} \begin{bmatrix} x_{1} \\ x_{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 16x_{1}/25 + 12x_{2}/25 \\ 12x_{1}/25 + 9x_{2}/25 \end{bmatrix}$$
(23)

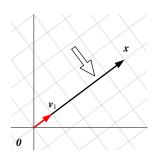


图 9. 二维列向量 x 在 v_1 方向正交投影

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

$$\mathbf{P}_{1}\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 16/25 & 12/25 \\ 12/25 & 9/25 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix}$$
 (24)

大家是否感到奇怪,为什么向量x 在 v_1 的正交投影结果为x 本身?原因很简单,x 平行 v_1 ,也就是说 x 在 $\mathrm{span}(v_1)$ 中。

想要计算x在 span(v_1)的坐标,我们用标量投影即可,即

$$\mathbf{v}_1^{\mathrm{T}} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 4/5 \\ 3/5 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} = 5 \tag{25}$$

这个标量值相当于向量x在 v_1 的坐标,再乘以 v_1 就相当于"二次投影"到平面。

朝 1/2方向正交投影

二维列向量x朝方向向量(单位向量) v_2 方向投影,对应的投影矩阵 P_2 为

$$\mathbf{P}_{2} = \mathbf{v}_{2} @ \mathbf{v}_{2}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} -3/5 \\ 4/5 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} -3/5 \\ 4/5 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 9/25 & -12/25 \\ -12/25 & 16/25 \end{bmatrix}$$
 (26)

投影结果对应如下矩阵乘法

$$\mathbf{P}_{2}\mathbf{x} = \underbrace{\begin{bmatrix} 9/25 & -12/25 \\ -12/25 & 16/25 \end{bmatrix}}_{\mathbf{y}_{1} \oplus \mathbf{y}_{1}^{\mathrm{T}}} \begin{bmatrix} x_{1} \\ x_{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9x_{1}/25 - 12x_{2}/25 \\ -12x_{1}/25 + 16x_{2}/25 \end{bmatrix}$$
(27)

图 10 所示为二维列向量 x 在 v_2 方向正交投影。带入具体数值,投影结果为

$$P_{2}x = \underbrace{\begin{bmatrix} 9/25 & -12/25 \\ -12/25 & 16/25 \end{bmatrix}}_{v_{2}@v_{2}^{\mathrm{T}}} \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$
 (28)

由于x和 v_2 正交,x在 v_2 正交投影为零向量 θ 。

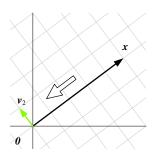


图 10. 二维列向量 x 在 v_2 方向正交投影

向量合成

如图 11 所示,把(24)、(28) 两者叠加还原x 所有信息

$$(\mathbf{P}_{1} + \mathbf{P}_{2}) \mathbf{x} = (\mathbf{v}_{1} \otimes \mathbf{v}_{1}^{\mathsf{T}} + \mathbf{v}_{2} \otimes \mathbf{v}_{2}^{\mathsf{T}}) \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 16x_{1}/25 + 12x_{2}/25 \\ 12x_{1}/25 + 9x_{2}/25 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 9x_{1}/25 - 12x_{2}/25 \\ -12x_{1}/25 + 16x_{2}/25 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1} \\ x_{2} \end{bmatrix}$$
 (29)

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

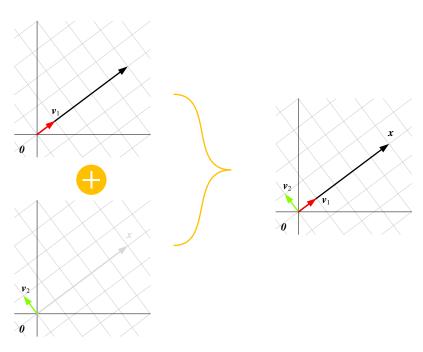


图 11. $[v_1, v_2]$ 中还原二维列向量 x

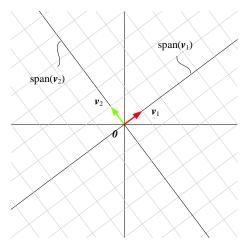


图 12. $span(v_1)$ 、 $span(v_2)$ 互为正交补

下一节升维, 我们会从三维几何视角继续分析 3×3 正交矩阵。



请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

- Q1. 判断哪些矩阵为正交矩阵。
- $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$
- $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

- $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
- $\blacktriangleright \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$
- 02. 几何角度来看, 01 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?

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

- **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。