

第十四讲：正交向量与子空间

在四个基本子空间中，提到对于秩为 r 的 $m \times n$ 矩阵，其行空间（ $\dim C(A^T) = r$ ）与零空间（ $\dim N(A) = n - r$ ）同属于 \mathbf{R}^n 空间，其列空间（ $\dim C(A) = r$ ）与左零空间（ $\dim N(A^T) = m - r$ ）同属于 \mathbf{R}^m 空间。

对于向量 x, y ，当 $x^T \cdot y = 0$ 即 $x_1y_1 + x_2y_2 + \cdots + x_ny_n = 0$ 时，有向量 x, y 正交（vector orthogonal）。

毕达哥拉斯定理（Pythagorean theorem）中提到，直角三角形的三条边满足：

$$\begin{aligned}\|\vec{x}\|^2 + \|\vec{y}\|^2 &= \|\vec{x+y}\|^2 \\ x^T x + y^T y &= (x+y)^T (x+y) \\ x^T x + y^T y &= x^T x + y^T y + x^T y + y^T x \\ 0 &= x^T y + y^T x \quad \text{对于向量点乘, } x^T y = y^T x \\ 0 &= 2x^T y \\ x^T y &= 0\end{aligned}$$

由此得出，两正交向量的点积为0。另外， x, y 可以为0向量，由于0向量与任意向量的点积均为零，所以0向量与任意向量正交。

举个例子： $x = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}, y = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}, x+y = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}$ ，有 $\|\vec{x}\|^2 = 14, \|\vec{y}\|^2 = 5, \|\vec{x+y}\|^2 = 19$ ，而 $x^T y = 1 \times 2 + 2 \times (-1) + 3 \times 0 = 0$ 。

向量 S 与向量 T 正交，则意味着 S 中的每一个向量都与 T 中的每一个向量正交。若两个子空间正交，则它们一定不会相交于某个非零向量。

现在观察行空间与零空间，零空间是 $Ax = 0$ 的解，即 x 若在零空间，则 Ax 为零向量；

而对于行空间，有 $\begin{bmatrix} \text{row}_1 \\ \text{row}_2 \\ \vdots \\ \text{row}_m \end{bmatrix} [x] = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$ ，可以看出：

$$[row_1][x] = 0$$

$$[row_2][x] = 0$$

\vdots

$$[row_m][x] = 0$$

所以这个等式告诉我们， x 同 A 中的所有行正交；

接下来还验证 x 是否与 A 中各行的线性组合正交，
$$\begin{cases} c_1(row_1)^T x = 0 \\ c_2(row_2)^T x = 0 \\ \vdots \\ c_n(row_m)^T x = 0 \end{cases}, \text{ 各式相加得}$$

 $(c_1row_1 + c_2row_2 + \cdots + c_nrow_m)^T x = 0$ ，得证。

我们可以说，行空间与零空间将 \mathbf{R}^n 分割为两个正交的子空间，同样的，列空间与左零空间将 \mathbf{R}^m 分割为两个正交的子空间。

举例， $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 5 \\ 2 & 4 & 10 \end{bmatrix}$ ，则可知 $m = 2, n = 3, rank(A) = 1, dimN(A) = 2$ 。

有 $Ax = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 5 \\ 2 & 4 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ ，解得零空间的一组基 $x_1 = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ $x_2 = \begin{bmatrix} -5 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ 。

而行空间的一组基为 $r = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 5 \end{bmatrix}$ ，零空间与行空间正交，在本例中行空间也是零空间的法向量。

补充一点，我们把行空间与零空间称为 n 维空间里的正交补（orthogonal complement），即零空间包含了所有与行空间正交的向量；同理列空间与左零空间为 m 维空间里的正交补，即左零空间包含了所有与零空间正交的向量。

接下来看长方矩阵， $m > n$ 。对于这种矩阵， $Ax = b$ 中经常混入一些包含“坏数据”的方程，虽然可以通过筛选的方法去掉一些我们不希望看到的方程，但是这并不是一个稳妥的方法。

于是，我们引入一个重要的矩阵： $A^T A$ 。这是一个 $n \times m$ 矩阵点乘 $m \times n$ 矩阵，其结果是一个 $n \times n$ 矩阵，应该注意的是，这也是一个对称矩阵，证明如下：

$$(A^T A)^T = A^T (A^T)^T = A^T A$$

这一章节的核心就是 $A^T A x = A^T b$ ，这个变换可以将“坏方程组”变为“好方程组”。

举例，有 $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$ ，只有当 $\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$ 在矩阵的列空间时，方程才有解。

现在来看 $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 8 \\ 8 & 30 \end{bmatrix}$ ，可以看出此例中 $A^T A$ 是可逆的。然而并非

所有 $A^T A$ 都是可逆的，如 $\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 1 & 3 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 9 \\ 9 & 27 \end{bmatrix}$ （注意到这是两个秩一矩阵相乘，其结果秩不会大于一）

先给出结论：

$$N(A^T A) = N(A)$$

$$\text{rank}(A^T A) = \text{rank}(A)$$

$A^T A$ 可逆当且仅当 $N(A)$ 为零向量，即 A 的列线性无关

下一讲涉及投影，很重要。