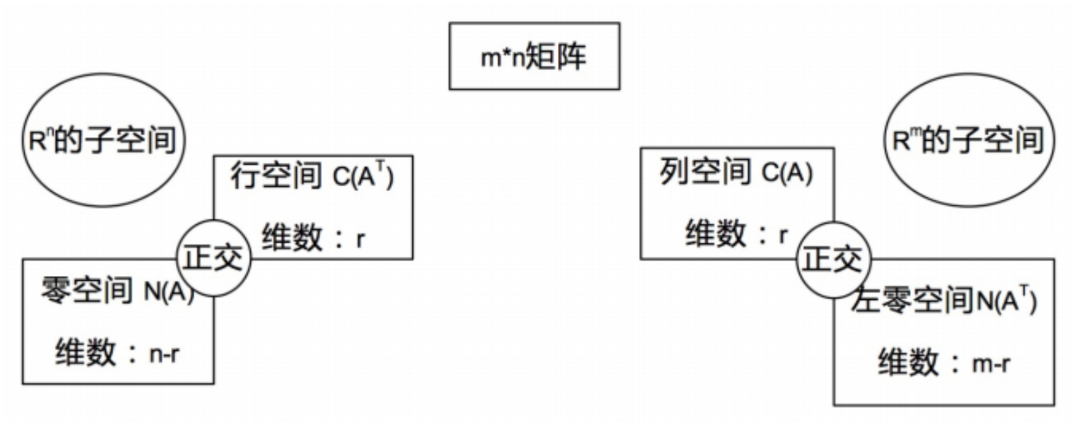
第 14 课 正交向量与子空间

本章我们研究的重点还是之前提到过的子空间，但是本章我们主要**从正交的角度来探讨这些子空间具有的性质**，主要内容见下图。

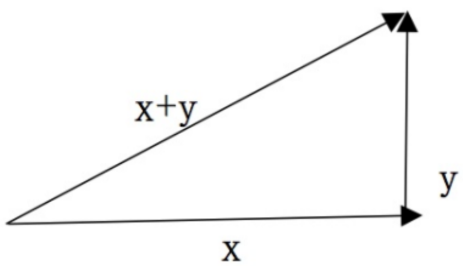


注意，上图指出了我们之前没有关注到的子空间的一些性质：**对于一个矩阵，其零空间与行空间正交，其列空间与左零空间正交。**

向量正交与空间正交

在线性代数中，正交就是垂直。无论我们讨论的是向量正交还是空间正交，都可以理解为垂直。

我们先研究最简单的**向量正交**：



如上图，其中 x 与 y 向量之间相互垂直（正交）。**根据垂直关系，可得** $x^Ty=0$，这是初高中的内容：**如果两个向量相互垂直（正交），那么这两个向量的数量积（内积）为** 0**。**

这个结论很漂亮，现在我们将证明这个结论。

$$\text{根据勾股定律有：}|x|^2+|y|^2=|x+y|^2$$
$$\text{用向量来表示上式有：}x^Tx+y^Ty=(x+y)^T(x+y)=(x^T+y^T)(x+y)$$
$$\text{化简得：}0=x^Ty+y^Tx$$
$$\because x^Ty=y^Tx\text{，都表示两个一维向量的数量积，所以可进一步化简得：}2x^Ty=0$$
$$\therefore x^Ty=0$$

如果两个向量中其中一个是零向量，则两个向量一定正交。

接下来我们讨论**空间正交**，**两个空间正交意味着：其中一个空间中的任意一个向量，都与另外一个空间中的任意一个向量正交。**

这里需要注意一种容易混淆的情况，比如以黑板和地板为例，这两者所处的空间并非是空间正交的，最直接的反例是黑板平面和地板平面的交线处，这个交线处上的向量既属于黑板平面，也属于地板平面，最简单地，取交线处上的向量的平方存在不为 0 的可能，所以黑板平面与地板平面不是空间正交的。

这同时也提醒我们：**两个平面若在非零向量处相交，则这两个平面一定是不正交的。**

最后我们探究子空间中的正交情况，先简单地以 R^2 的子空间为例，R^2 **的子空间有三种：整个平面** D **，过原点的直线** L**，零向量。**

就这三个子空间而言，显然 L 和 D 是不可能正交的，因为 L 就在平面 D 上，但 L 和零向量，D 和零向量是正交的。此外，L 和 L 之间也可能是正交的：两条直线需要在原点处互相垂直。

矩阵的子空间的正交情况

一个矩阵，其零空间与行空间是正交的，它们之间的关系类似于将一个空间一分为二所得到的两个子空间。

我们先证明为什么零空间和行空间是正交的，而这一点很容易从 $Ax=0$ 上找到答案。

$$Ax=\begin{bmatrix} row_1\ of\ A \\ row_2\ of\ A \\ \cdots \\ row_m\ of\ A \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} row_1\ of\ A\cdot x \\ row_2\ of\ A\cdot x \\ \cdots \\ row_m\ of\ A\cdot x \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \cdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

对于 $Ax=0$，有 A 的每一行与 x 相乘结果为零，这也即表明 A 中的每一行与 x 正交。x 对应的是零空间中的任意向量，现 A 中的每一行与 x 相乘结果为零，那么显然 A 中的行的线性组合与 x 相乘结果依然为零，而 A 中的行的线性组合对应的是行空间中的任意向量，所以，矩阵零空间与行空间正交。

同样地，**根据 $A^Ty=0$，我们能以相同的方法证明矩阵的列空间和左零空间是正交的。**

然后我们再回到之前所说的“它们之间的关系类似于将一个空间一分为二所得到的两个子空间”，这一点很重要，**因为行空间和零空间的维数之和恰好为 n**。举个例子：

$$\text{设}\ A=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 5 \\ 2 & 4 & 10 \end{bmatrix}$$
$$Ax=0\text{可写为：}\begin{bmatrix} 1 & 2 & 5 \\ 2 & 4 & 10 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

一眼就可以看出，A 的秩为 1，所以其行空间的是 1 维的，其零空间是 2 维的（可以理解为垂直于向量 $\begin{bmatrix} 1 & 2 & 5 \end{bmatrix}^T$ 的一个平面），行空间维数与零空间维数相加为 3。而有意思的是行空间和零空间中的向量都是 3 维的。

为了更加确切地讲述一分为二，我们引入**正交补**这个概念。**称行空间和列空间是 n 维空间里的正交补，是因为行空间和列空间正交且这两个子空间的维数之和为 n**。举个简单的例子，**三维空间中两条过原点的互相垂直的直线显然是相互正交的，但这两条直线对应的空间却不能被称为正交补，正交补的补就意味着，对于其中一个向量空间 S，另外一个向量空间 T 则包含了所有垂直于 S 的向量而不是部分。一分为二描述了一种彻底的程度。**

无解方程 $Ax=b$ 的最优解

在上一课中我们看到了，矩阵的数据来源于实际测量，既然是测量，那么就存在测量不准确的情况，从而导致 $Ax=b$ 无解。此外，测量过程中极其细微的误差也可能导致无解。

除了测量因素以外，有时候 A 是一个长方形矩阵，其行数 m 很多，列数 n 很少（也即较少的未知数要满足非常多的方程），这时候有些方程得到的结果可能是有很大误差的，这个误差来自 b，也即 b 中有一部分是“坏数据”，这些“坏数据”使得方程无解。

我们可以不断去掉一些方程，用以剔除“坏数据”，最后得到一个可逆的方阵然后进行求解，但这种方法是不实际的，因为对于所有测量值而言，我们很难判断哪些是有效的好数据，哪些是无效的坏数据。一般我们希望**利用所有的测量值求出“最优值”，类似于一种拟合。**

一种常用的方法是在方程两侧乘以 A^T，方程从而改写成 $A^TA\hat{x}=A^Tb$，求解新方程的解 $\hat{x}$ 即为最优解，注意，这个解 $\hat{x}$ 并非是 $Ax=b$ 的解。

这种方法的原理我们将在下一章中进行详细的解析，彼时我们将明白为什么所得的解被称为“最优解”。

实际上，就算我们不懂原理，我们也大概能发现，乘以 A^T 给方程带来了什么好的变化。**乘以 A^T 以后，我们得到矩阵 A^TA，这个矩阵是一个对称方阵，至少我们已经避免了长方矩阵的情况。一旦 A^TA 是可逆的，那么解 $\hat{x}$ 就很容易求得了。**

但实际上 A^TA **未必是可逆的，当 A 的各列线性相关的时候，A^TA 就不可逆了。**

为了证明这一点，我们需要给出两个性质（实际上只用第一个就够了）：

- **性质一：$N(A^TA)=N(A)$：A^TA 与 A 的零空间相同。**

$$\begin{gathered}\text{证明：对于} A^TAx=0\text{，方程两边同乘以} x^T \\ \text{则有 } x^TA^TAx=(Ax)^TAx=0 \\ \therefore Ax=0 \\ \therefore \text{对于给定} x\text{，若} A^TAx=0\text{，那么有} Ax=0\text{，反之亦然} \\ \therefore A\text{和 } A^TA\text{具有相同的零空间}\end{gathered}$$

- **性质二：$rank(A^TA)=rank(A)$：A^TA 与 A 的秩相同。**

  这个结论的证明是简单的，**利用已经证明的性质一可得：**
  $dim(N(A^TA))=A^TA\text{的列数}-A^TA\text{的秩}=dim(N(A))=A\text{的列数}-A\text{的秩}$**，又因为 A^TA 和 A 的列数相同，所以 A^TA 与 A 的秩相同。**

显然，如果 A 的各列线性相关，那么 A 的零空间就存在非零向量使得 A 的各列线性组合为零向量。因为 A^TA 与 A 的零空间相同，所以 A^TA 的零空间就存在非零向量使得 A^TA 的各列线性组合为零向量，既然存在这样的非零向量，那么 A^TA 就不是一个可逆矩阵。