第 17 课 正交矩阵和 Gram-Schmidt 正交化

> 上一课最后我们简单介绍了标准正交向量组的概念，这一课中，我们将深入介绍**标准正交向量组的性质和优点**，以及将一组向量化为标准正交向量组的方法：**Gram-Schmidt 正交化**。

标准正交向量与正交矩阵

上一节我们介绍过标准正交向量，我们通过一个式子进行回顾。设 q 是标准正交向量组中的任意向量，则

$$q_i^T q_j \begin{cases} 0 \ldots\ldots (i \neq j) \\ 1 \ldots\ldots (i = j) \end{cases}$$

这很好地表现了标准正交向量组内各向量的性质：**不同向量之间相互垂直（正交），向量长度都为 1（标准）。**

标准正交向量组又被称为标准正交基，显然，相互垂直的各列一定是线性无关的。

为什么我们这么执着于标准正交向量呢？在后续我们就能看到**标准正交向量能够极大的简化计算**，许多数值线性代数都建立在标准正交向量的基础上，因为它们容易操控，它们从不上溢或下溢。

我们再介绍另外一个概念，标准正交矩阵。**所谓标准正交矩阵 Q，就是将标准正交向量组中的向量 $q_1, q_2, \cdots, q_n$ 列到一个矩阵中去**：

$$Q = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{bmatrix}$$

这样的标准正交矩阵有一个很好的性质：

$$Q^TQ = \begin{bmatrix} q_1^T \\ q_2^T \\ \vdots \\ q_n^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} = I$$

注意，是 $Q^TQ = I$ 而非 $QQ^T = I$。

特别地，当 Q 是方阵时，我们将这样的矩阵 Q 称为正交矩阵。

为什么我们要单独将 Q 是方阵的情况拎出来呢？**这是因为当标准正交矩阵 Q 为方阵时，其必有逆矩阵，很明显，由上面的 $Q^TQ = I$ 可知，Q 若为正交矩阵，其逆矩阵正是 Q^T，也即 $Q^T = Q^{-1}$。**可以举一些例子：

- 回想我们在很久之前提到过的置换矩阵，当时也说明了置换矩阵 P 具有性质：$P^T = P^{-1}$，而显然置换矩阵正是一个正交矩阵：$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$，则 $Q^T = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$，易得 $Q^TQ = I$。
- 另一个例子是我们上一讲介绍过的标准正交向量组：$\begin{bmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -\sin\theta \\ \cos\theta \end{bmatrix}$。写成矩阵形式即为 $Q = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$，显然该矩阵也有 $Q^TQ = I$。
- $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$ 是正交矩阵吗？不是，因为虽然这个矩阵内各列正交，但列向量长度不为 1，我们还需要再对其进行单位化（标准化），单位化以后得到 $Q = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$，这个矩阵是正交矩阵。

- 使用上一个例子中的矩阵 $Q=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1&1\\1&-1\end{bmatrix}$，令 $Q'=c\begin{bmatrix}Q&Q\\Q&-Q\end{bmatrix}$，取合适的 c 以使得向量长度为 1 也可以构造出一个正交矩阵：$Q=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}1&1&1&1\\1&-1&1&-1\\1&1&-1&-1\\1&-1&-1&1\end{bmatrix}$，这种构造方法以阿德玛（Adhemar）命名，我们现在知道的是这种构造方法在 Q 为 $2,4,16,64,\cdots$ 维矩阵时是有效的，但是没有人知道，究竟哪些维数的正交矩阵可以由 1 和 -1 们构成，阿德玛矩阵是一种只有 1 和 -1 的正交矩阵，有些维度可以，但有些维度就不行，比如说 5 维的矩阵就不可能是阿德玛矩阵，这个比较简单，但有些大小没人能确切地说，能不能由 1 和 -1 构成。

上面我们介绍了标准正交矩阵 Q 的各种性质，这是一种新的性质优良的矩阵，**这样的矩阵能够极大地简化计算，比如：投影矩阵！**

上一讲中，我们提到，投影矩阵 $P=A(A^TA)^{-1}A^T$，那么到 A 是标准正交矩阵 Q 的时候，根据标准正交矩阵的性质易得：$Q(Q^TQ)^{-1}Q^T=QIQ^T=QQ^T$。特别地，当 Q 还是方阵的时候，由于此时 $Q^T=Q^{-1}$，所以投影矩阵能够进一步化简为 I。

$$P=A(A^TA)^{-1}A^T\xrightarrow{A\text{是标准正交矩阵}Q}P=QQ^T\xrightarrow{A\text{还是方阵（也即}A\text{是正交矩阵）}}P=I$$

化为 $P=QQ^T$ 之后，我们很容易验证投影矩阵的两条性质：

- **投影矩阵为对称矩阵：**$(QQ^T)^T=(Q^T)^TQ^T=QQ^T$**。**
- **投影两次等于投影一次：**$(QQ^T)(QQ^T)=Q(Q^TQ)Q^T=QQ^T$**。**

可以看到 P 的形式得到的极大的化简，实际上很多复杂的方程，在使用标准正交基之后都会变得非常简单。

考虑我们最近讲过的最重要的方程，**正规方程** $A^TA\hat{x}=A^Tb$**，现在变为了** $Q^TQ\hat{x}=Q^Tb$**，也就是** $\hat{x}=Q^Tb$**，分解开来看就是** $\hat{x}_i=q_i^Tb$**，这个式子在很多数学领域都有重要作用。当我们知道标准正交基，则在第** i **个基方向上的投影等于** q_i^Tb**。**

Gram-Schmidt 正交化

我们已经看到标准正交向量的性质特别好，但更多时候我们见到的是线性无关向量组，有没有一种方法能够**将线性无关向量组转换为标准正交基**呢？这也即今天要讲的第二个内容，**Gram-Schmidt 正交化。**

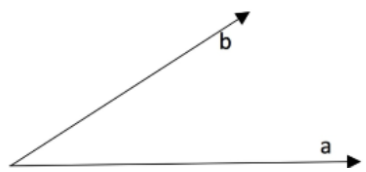
在介绍它之前，我们需要先说明，**格拉姆-施密特正交化的缺点在于，由于要求的单位向量，我们不可避免地要除以向量的长度，而这个过程很容易产生根号，所以最终产生的标准正交向量组经常会带有根号。**

Gram-Schmidt 正交化的过程如下：

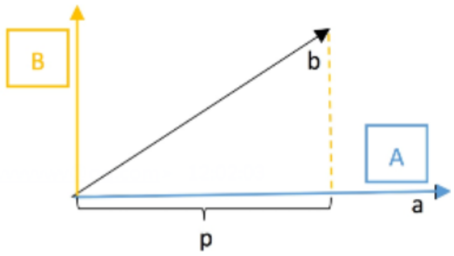
$$\text{线性无关向量}a,b\xrightarrow{Graham}\text{正交向量}A,B\xrightarrow{Schmidt}\text{标准正交向量}q_1=\frac{A}{\|A\|},q_2=\frac{B}{\|B\|}$$

可以看到 Schmidt 也即单位化的过程是很简单的，正交化的关键在于找到 A,B。

我们先从简单的情况开始，假设有两个线性无关的向量 a,b：



怎样将其转换为两个相互正交的向量呢？容易联想到我们之前学习的投影，我们可以这样做：



直接将 a 向量定为 A 向量，而后，我们将 b 向量投影到 a 向量上得到 p，注意到，此时误差向量 $e=b-p$ 恰好就垂直于 A 向量，故令 $B=b-p$ 有：

$$B=b-p=b-Pb=b-A(A^TA)^{-1}A^Tb$$

需要强调的是，上述公式中的 A,B 指的都是向量，故有 $B=b-\frac{AA^Tb}{A^TA}$，其中 A^TA 是一个内积标量值，而 AA^T 是一个矩阵，注意到 $\frac{AA^Tb}{A^TA}$ 中标红部分都是内积标量值，故我们更倾向于让分子中的 A^Tb 先相乘，把 A 向量放到后面，也即写成这样的形式 $B=b-\frac{A^Tb}{A^TA}A$。

检查一下是否满足 $A\perp B$：

$$A^TB=A^Tb-A^T\frac{A^Tb}{A^TA}A=A^Tb-\frac{A^TA}{A^TA}A^Tb=0$$

A,B 正交，求得 A,B 之后，剩下的内容就只是简单的单位化了：$q_1=\frac{A}{\|A\|},q_2=\frac{B}{\|B\|}$。

同样的道理，如果我们有三个线性无关的向量 a,b,c，我们如何进行 Gram-Schmidt 正交化呢？

按照流程，我们首先要得到 A,B,C，前两个向量 A,B 我们已经得到了，现在我们要求第三个向量同时垂直于 A,B。

我们依然可以按照上面的思想来求解，也即从 c 中减去其在 A,B 上的分量，即可得到与 A,B 正交的 C：

$$C=c-\frac{A^Tc}{A^TA}A-\frac{B^Tc}{B^TB}B$$

再把它们单位化：$q_1=\frac{A}{\|A\|},q_2=\frac{B}{\|B\|},q_3=\frac{C}{\|C\|}$。

下面我们通过一个简单的例子来试验一遍：

假设 $a=\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix},b=\begin{bmatrix}1\\0\\2\end{bmatrix}$，求标准正交矩阵 Q。

$$\text{首先，}\quad A=a=\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}$$

$$\text{根据公式有，}\quad B=b-\frac{A^Tb}{A^TA}A=\begin{bmatrix}1\\0\\2\end{bmatrix}-\frac{3}{3}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\-1\\1\end{bmatrix}$$

$$\text{验证正交性有，}\quad A^TB=0$$

$$\text{最后再进行单位化，}\quad q_1=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix},\quad q_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\0\\2\end{bmatrix}$$

$$\text{则标准正交矩阵为}\quad Q=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{3}} & 0\\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}$$

这就是 Gram-Schmidt 正交化方法。对比原始矩阵 $A=\begin{bmatrix}1&1\\1&0\\1&2\end{bmatrix}$ 和标准正交矩阵 $Q=\begin{bmatrix}1/\sqrt{3}&0\\1/\sqrt{3}&-1/\sqrt{2}\\1/\sqrt{3}&1/\sqrt{2}\end{bmatrix}$，观察两个矩阵的列空间，它们是相同的，也就是说我们的正交化过程从头到尾都是在同一个空间（列空间）中进行的，正交化过程本质不过是矩阵各列的列变换（比如 $B=b-\frac{A^Tb}{A^TA}A$，其中 b 是原始的列向量，$\frac{A^Tb}{A^TA}$ 是标量值，A 是原始的列向量 a），最后得到了一个更好的标准正交基。

QR 分解

我们曾经用矩阵的眼光审视消元法，故有 $A=LU$，这即是消元法的矩阵表示。

以同样的眼光来看待 Gram-Schmidt 正交化，故有 $A=QR$，这既是 Gram-Schmidt 正交化的矩阵表示。

设 A 有两个列向量：$\begin{bmatrix}a_1 & a_2\end{bmatrix}$，标准正交化后有 $\begin{bmatrix}a_1 & a_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}q_1 & q_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_1^Tq_1 & a_2^Tq_1\\a_1^Tq_2 & a_2^Tq_2\end{bmatrix}$，而左下角的 $a_1^Tq_2$ 为 0。$A=QR$ 的重点在于，R 是一个上三角矩阵，这是因为后来构造的向量总是正交于先前的向量。