## 0.1 Gran-Schmidt 正交化方法和正交补空间

设 $V$ 为 $n$ 维内积空间, 则由命题??可知, 任一 $n$ 阶正定实对称矩阵（正定 Hermite 矩阵）$H$ 都能成为 $V$ 的某组基的 Gram 矩阵. 特别地, 取 $H = I_n$, 则存在 $V$ 的一组基 $\{f_1, f_2, \cdots, f_n\}$, 使得它的 Gram 矩阵就是单位矩阵 $I_n$, 即 $\{f_1, f_2, \cdots, f_n\}$ 是 $V$ 的一组标准正交基. 由命题??我们也可以具体地构造出一组标准正交基, 以下不妨设 $V$ 是欧氏空间. 首先, 任取 $V$ 的一组基 $\{e_1, e_2, \cdots, e_n\}$, 设其 Gram 矩阵为 $G$, 则 $G$ 是正定实对称矩阵. 其次, 通过对称初等变换法可将 $G$ 化为单位矩阵 $I_n$, 即存在 $n$ 阶非异实矩阵 $C = (c_{ij})$, 使得 $C'GC = I_n$. 最后, 令

$$(f_1, f_2, \cdots, f_n) = (e_1, e_2, \cdots, e_n)C,$$

即 $f_j = \sum_{i=1}^{n} c_{ij}e_i$, 则 $\{f_1, f_2, \cdots, f_n\}$ 是 $V$ 的一组基, 并且它的 Gram 矩阵就是 $C'GC = I_n$. 从上述过程不难看出, 因为当 $n \geq 2$ 时, 过渡矩阵 $C$ 有无穷多种选法, 所以可构造出 $V$ 的无穷多组标准正交基.

从几何的层面上看, 上述构造标准正交基的代数方法虽然简单, 但缺乏几何直观和意义. 然而,Gram - Schmidt 方法却是一个从几何直观入手的向量组的正交化方法, 具有重要的几何意义.Gram - Schmidt 方法粗略地说就是, 如果前 $k-1$ 个向量 $v_1, \cdots, v_{k-1}$ 已经两两正交, 那么只要将第 $k$ 个向量 $u_k$ 减去其在 $v_1, \cdots, v_{k-1}$ 张成子空间上的正交投影, 即可得到与 $v_1, \cdots, v_{k-1}$ 都正交的向量 $v_k$. 特别地, 若 $\{u_1, u_2, \cdots, u_n\}$ 是欧氏空间 $V$ 的一组基, 则通过 Gram - Schmidt 方法可得到一组正交基 $\{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$, 再将每个基向量标准化, 即可得到 $V$ 的一组标准正交基 $\{w_1, w_2, \cdots, w_n\}$. 这 3 组基之间的关系为

$$(u_1, u_2, \cdots, u_n) = (v_1, v_2, \cdots, v_n)B = (w_1, w_2, \cdots, w_n)C,$$

其中 $B$ 是主对角元全为 1 的上三角矩阵,$C$ 是主对角元全为正实数的上三角矩阵. 设 $A = G(u_1, u_2, \cdots, u_n)$,$D = G(v_1, v_2, \cdots, v_n)$ 分别是对应的 Gram 矩阵, 则 $A$ 是正定实对称矩阵,$D$ 是正定对角矩阵, 由命题?? 可得 $A$ 的如下分解:

$$A = B'DB = C'C,$$

这就是命题?? 中关于正定实对称矩阵 $A$ 的两种分解, 再由命题?? 后面的注可知上述两种分解的唯一性. 因此, 基 $\{u_1, u_2, \cdots, u_n\}$ 的 Gram 矩阵的分解 $A = B'DB$ 一一对应于通过 Gram - Schmidt 方法得到的正交基 $\{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$, 而 Gram 矩阵的 Cholesky 分解 $A = C'C$ 则一一对应于通过 Gram - Schmidt 正交化和标准化得到的标准正交基 $\{w_1, w_2, \cdots, w_n\}$.

除了求标准正交基之外,Gram - Schmidt 方法还有许多其他的应用. 设 $V$ 是内积空间,$u$ 是 $V$ 中的向量,$\{w_1, \cdots, w_k\}$ 是子空间 $W$ 的一组标准正交基, 则由 Gram - Schmidt 方法可知 $v = u - \sum_{i=1}^{k}(u, w_i)w_i$ 与 $w_1, \cdots, w_k$ 正交. 令 $w = \sum_{i=1}^{k}(u, w_i)w_i$, 则 $u = v + w$ 且 $(v, w) = 0$, 于是 $\|u\|^2 = \|v\|^2 + \|w\|^2$. 由此可得

(1) Bessel 不等式: $\|u\|^2 \geq \|w\|^2 = \sum_{i=1}^{k}|(u, w_i)|^2$;

(2) 向量 $u$ 到子空间 $W$ 的距离为 $\|v\|$, 即 $\min_{x \in W}\|u - x\| = \|v\|$.

**例题 0.1** 设 $V = \mathbb{R}[x]_n$ 为次数小于等于 $n$ 的实系数多项式构成的欧氏空间, 对任意的 $f(x), g(x)$, 其内积定义为 $(f(x), g(x)) = \int_{-1}^{1} f(x)g(x)dx$(参考例题??(5)). 设 $u_0(x) = 1$,$u_k(x) = \dfrac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}[(x^2-1)^k]$（$k \geq 1$）,$m_k = \sqrt{\dfrac{2^{k+1}k!(2k)!}{(2k+1)!!}}$（$k \geq 0$）. 求证: 从基 $\{1, x, \cdots, x^n\}$ 出发, 由 Gram - Schmidt 正交化方法得到的标准正交基为 $\left\{\dfrac{u_k(x)}{m_k}, 0 \leq k \leq n\right\}$, 称之为 Legendre 多项式.

**证明** 由 Gram - Schmidt 正交化方法, 从 $1, x, x^2, x^3$ 可得标准正交基中前 4 个基向量分别为 $w_0(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$,$w_1(x) = \sqrt{\dfrac{3}{2}}x$,$w_2(x) = \sqrt{\dfrac{5}{8}}(3x^2-1)$,$w_3(x) = \sqrt{\dfrac{7}{8}}(5x^3-3x)$, 读者不难验证这就是 Legendre 多项式的前 4 个多项式. 不过这样的计算很难推广到一般的情形, 但我们可以通过验证 $\{u_k(x)\}$ 是一组正交基以及 Cholesky 分解与 Gram - Schmidt 正交化和标准化之间的一一对应来证明结论.

首先注意到, 对任意的 $j<k$, 有 $\dfrac{\mathrm{d}^j}{\mathrm{d}x^j}[(x^2-1)^k]\Big|_{x=\pm1}=0$, 故由分部积分可得

$$(u_k(x),x^j)=\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}[(x^2-1)^k]x^j\,\mathrm{d}x=-j\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}^{k-1}}{\mathrm{d}x^{k-1}}[(x^2-1)^k]x^{j-1}\mathrm{d}x.$$

不断做下去可知, 当 $j<k$ 时,$(u_k(x),x^j)=0;(u_k(x),x^k)=(-1)^kk!\int_{-1}^{1}(x^2-1)^k\mathrm{d}x$. 注意到 $u_k(x)$ 是一个 $k$ 次多项式且首项系数为 $2k(2k-1)\cdots(k+1)$, 由上述结果并且经过进一步的计算可知,

$$\|u_k(x)\|^2=\frac{2^{k+1}k!(2k)!}{(2k+1)!!},\quad (u_k(x),u_l(x))=0\ (k>l),$$

因此 $\left\{\dfrac{u_k(x)}{m_k},0\le k\le n\right\}$ 是 $V$ 的一组标准正交基. 设从基 $\{1,x,\cdots,x^n\}$ 到基 $\left\{\dfrac{u_k(x)}{m_k},0\le k\le n\right\}$ 的过渡矩阵为 $P$, 基 $\{1,x,\cdots,x^n\}$ 的 Gram 矩阵为 $A$, 则 $P$ 是一个主对角元全大于零的上三角矩阵, 且由命题**??**可得 $I_{n+1}=P'AP$, 从而 $A=(P^{-1})'P^{-1}$ 是 Cholesky 分解. 由 Cholesky 分解的唯一性以及它与 Gram - Schmidt 正交化和标准化之间的一一对应可知,$\left\{\dfrac{u_k(x)}{m_k},0\le k\le n\right\}$ 就是从基 $\{1,x,\cdots,x^n\}$ 出发由 Gram - Schmidt 正交化方法得到的标准正交基.
□

**例题 0.2** 设 $V=\mathbb{R}[x]_3$ 为次数小于等于 3 的实系数多项式构成的欧氏空间, 其内积定义同例题 0.1, 试求 $\min\limits_{f(x)\in V}\int_{-1}^{1}(e^x-f(x))^2\mathrm{d}x$.

**解** 本题即求 $\min\limits_{f(x)\in V}\|e^x-f(x)\|^2$. 由例题 0.1 可知,$V$ 的一组标准正交基为 $w_0(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2}}$,$w_1(x)=\sqrt{\dfrac{3}{2}}x$,$w_2(x)=\sqrt{\dfrac{5}{8}}(3x^2-1)$,$w_3(x)=\sqrt{\dfrac{7}{8}}(5x^3-3x)$, 经计算可得 $(e^x,w_0(x))=\dfrac{\sqrt{2}}{2}(e-e^{-1})$,$(e^x,w_1(x))=\sqrt{6}e^{-1}$,$(e^x,w_2(x))=\dfrac{\sqrt{10}}{2}(e-7e^{-1})$,$(e^x,w_3(x))=\dfrac{\sqrt{14}}{2}(37e^{-1}-5e)$. 因此, 由 Gram - Schmidt 方法的几何意义可得

$$\begin{aligned}\min_{f(x)\in V}\|e^x-f(x)\|^2&=\|e^x-\sum_{i=0}^{3}(e^x,w_i(x))w_i(x)\|^2\\&=\|e^x-\frac{1}{2}(e-e^{-1})-3e^{-1}x-\frac{5}{4}(e-7e^{-1})(3x^2-1)-\frac{7}{4}(37e^{-1}-5e)(5x^3-3x)\|^2\\&\approx 0.00002228887.\end{aligned}$$

□

**命题 0.1**

设 $V$ 是 $n$ 维欧氏空间,$A$ 是 $m$ 阶半正定实对称矩阵且 $\mathrm{r}(A)=r\le n$, 求证: 必存在 $V$ 上的向量组 $\{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_m\}$, 使得其 Gram 矩阵就是 $A$.

**证明** 因为 $A$ 是秩为 $r$ 的 $m$ 阶半正定阵, 故由命题**??**可知, 存在 $r\times m$ 实矩阵 $T$, 使得 $A=T'T$. 取 $V$ 的一组标准正交基 $\{e_1,e_2,\cdots,e_n\}$, 令

$$(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_m)=(e_1,e_2,\cdots,e_r)T,$$

则由推论**??**即得

$$G(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_m)=T'G(e_1,e_2,\cdots,e_r)T=T'T=A.$$

□