接下来，我们看一下 Gram–Schmidt 正交化的一个理论性的应用.

定理 1 (可逆矩阵的 QR 分解)

对任意的 n 阶可逆实矩阵 $\boldsymbol{A}$, 都存在一个 n 阶的正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和一个 n 阶的主对角元素为正数的上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$, 使得 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR}$. 这称为 $\boldsymbol{A}$ 的 ***QR* 分解**, 并且这样的分解是唯一的.

引理 2

若一个正交矩阵 $\boldsymbol{P}$ 同时是主对角线上为正数的上三角矩阵, 那么它必定是一个单位阵.

之后我们会看到关于矩阵的 QR 分解的应用.

引理 3

设 $\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_n$ 是欧氏空间 V 的一组标准正交基，而 $\boldsymbol{x}_1,\dots,\boldsymbol{x}_m$ 是 V 中的一组向量，并且在这组基的坐标列向量依次为 $\boldsymbol{a}_1,\dots,\boldsymbol{a}_m$. 假定 $\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{a}_1,\dots,\boldsymbol{a}_m)\in\mathbb{R}^{n\times m}$，那么 $\boldsymbol{x}_1,\dots,\boldsymbol{x}_m$ 的 *Gram* 矩阵 $\boldsymbol{G}$ 恰为 $\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}$.

例 4

在 n 维欧氏空间 V 中，设线性无关的向量组 $\alpha_1,\dots,\alpha_m$ 经过 *Schmidt* 正交化方法，变成了与之等价的正交向量组 $\beta_1,\dots,\beta_m$，而这两组向量的 *Gram* 矩阵分别为 $\boldsymbol{G}$ 和 $\boldsymbol{G}'$. 证明: $|\boldsymbol{G}|=|\boldsymbol{G}'|=\|\beta_1\|^2\cdots\|\beta_m\|^2\le\|\alpha_1\|^2\cdots\|\alpha_m\|^2$.

欧几里得空间中的线性变换

在这一节中，我们将线性变换的讨论与欧氏空间的内积联系起来

正交变换与正交矩阵

定义 5

设 $\mathscr{A}$ 是欧氏空间 V 上的线性变换. 若对于任意的 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in V$, 有 $(\mathscr{A}(\boldsymbol{a}), \mathscr{A}(\boldsymbol{b})) = (\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$, 则称 $\mathscr{A}$ 为 V 上的正交变换 (*orthogonal transformation*).

简言之, 正交变换是保持内积不变的线性变换.

例 6

1. 恒等变换是 V 上的正交变换. 若线性空间 V 不是零空间, 则零变换不是正交变换.
2. 对于具有标准内积的欧氏空间 $\mathbb{R}^2$, 以原点为中心, 逆时针旋转角度 θ 的变换 $\mathscr{A}_\theta$ 是 $\mathbb{R}^2$ 上的线性变换. 这儿, 我们验证旋转变换 $\mathscr{A}_\theta$ 是 $\mathbb{R}^2$ 上相对于标准内积的正交变换.

注 7

在欧氏空间中，向量的长度和向量之间的夹角由空间的内积来决定：

- $\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{(\boldsymbol{a},\boldsymbol{a})}$;
- 非零向量 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{b}$ 之间的夹角的余弦为 $\frac{(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})}{\sqrt{(\boldsymbol{a},\boldsymbol{a})}\sqrt{(\boldsymbol{b},\boldsymbol{b})}}$.

故正交变换保持向量的长度和向量之间的夹角不变，即 $\|\mathscr{A}(\boldsymbol{a})\| = \|\boldsymbol{a}\|$，且 $\mathscr{A}(\boldsymbol{a})$ 与 $\mathscr{A}(\boldsymbol{b})$ 之间的夹角与 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{b}$ 之间的夹角一致. 特别地，正交变换把正交的向量组变成正交的向量组，把标准正交基变成标准正交基.

事实上, 我们有更多的刻划:

定理 8

设 $\mathscr{A}$ 是 n 维欧氏空间 V 上的一个线性变换, 则以下几个条件等价:

1. $\mathscr{A}$ 是正交变换;
2. $\mathscr{A}$ 保持向量的模不变;
3. $\mathscr{A}$ 将任意的标准正交基变为标准正交基;
4. $\mathscr{A}$ 将给定的一组标准正交基变为标准正交基.

例 9

设 $\mathscr{A}$ 是平面 $\mathbb{R}^2$ 上的线性变化, 将 $(1,0)^{\mathsf{T}}$ 变成了 $(1,0)^{\mathsf{T}}$ 自身, 将 $(0,1)^{\mathsf{T}}$ 变成了 $(1/\sqrt{2},1/\sqrt{2})^{\mathsf{T}}$. $\mathscr{A}$ 虽然将 $\mathbb{R}^2$ 的一组由单位向量构成的基变成了另外一组由单位向量构成的基, 但是 $\mathscr{A}$ 不是正交变换.

定理 10

设 $\mathscr{A}$ 为 n 维欧氏空间 V 上的线性变换, 在 V 的一组标准正交基 $\varepsilon_1,\ldots,\varepsilon_n$ 下的矩阵为 $\boldsymbol{A}$. 那么, $\mathscr{A}$ 为正交变换的充要条件是 $\boldsymbol{A}$ 为正交矩阵.

例 11

在例6 (2) 中的旋转变换 $\mathscr{A}_\theta$ 为正交变换，从而 $\mathscr{A}_\theta$ 在自然基下的矩阵 $\boldsymbol{A}_\theta$ 为正交矩阵. 当然，我们可以很轻松地利用定义 (旋转变换保持内积) 来直接验证这一点.

注 12

在定理 10 中的基 $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ 为标准正交基这一条件非常重要，因为一般而言，正交变换在非标准正交基的基下的矩阵不为正交矩阵，即，正交矩阵在相似变换下一般不再是正交矩阵了.

例如, 考虑正交矩阵 $\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}\cos(\theta) & -\sin(\theta)\\ \sin(\theta) & \cos(\theta)\end{pmatrix}$ 和可逆矩阵 $\boldsymbol{T}=\begin{pmatrix}1 & a\\ 0 & 1\end{pmatrix}$, 其中 $\theta, a\in\mathbb{R}$. 此时,

$$\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}=\begin{pmatrix}\cos(\theta)-a\sin(\theta) & -a\left(a\sin(\theta)+\cos(\theta)\right)-\sin(\theta)+a\cos(\theta)\\ \sin(\theta) & a\sin(\theta)+\cos(\theta)\end{pmatrix}.$$

若其为正交矩阵, 其第一个列向量必为单位向量. 可是并不是所有的 $a,\theta\in\mathbb{R}$ 都使得

$$\left(\cos(\theta)-a\sin(\theta)\right)^2+\sin^2(\theta)=1.$$

故 $\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}$ 一般而言不再是正交矩阵了.

与定理 10 相关的是下面的一个命题，它告诉我们，在有限维欧氏空间 V 中，给定了一组标准正交基，则 V 的所有标准正交基与正交矩阵一一对应.

命题 13

若欧氏空间 V 的一组标准正交基 $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ 到另外一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 的过渡矩阵为 $\boldsymbol{P}$，则 $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 仍然是 V 的标准正交基的充要条件是 $\boldsymbol{P}$ 为正交方阵. (注意，若 V 是数组空间 $\mathbb{R}^n$，$\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ 是它的自然基，那么 $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 是 $\boldsymbol{P}$ 的列向量)

小结一下正交矩阵的常见性质

注 14

1. 若 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 为两个同阶的正交矩阵, 则 $\boldsymbol{AB}$ 也是正交矩阵:

$$(\boldsymbol{AB})^{\mathsf{T}}(\boldsymbol{AB}) = \boldsymbol{B}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{B}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{I}.$$

2. 若 $\boldsymbol{A}$ 为正交矩阵, 则 $\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}$ 也是正交矩阵:

$$(\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}})^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}} = \boldsymbol{AA}^{\mathsf{T}} = \boldsymbol{AA}^{-1} = \boldsymbol{I}.$$

3. 若 $\boldsymbol{A}$ 为正交矩阵, 则 $\det(\boldsymbol{A}) = \pm 1$. 这是由于

$$1 = \|\boldsymbol{I}\| = \|\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{A}\| = \|\boldsymbol{A}^{\mathsf{T}}\| \cdot \|\boldsymbol{A}\| = \|\boldsymbol{A}\|^2,$$

而 $\|\boldsymbol{A}\| \in \mathbb{R}$. 由此, 若 $|\boldsymbol{A}| = 1$, 则称 $\boldsymbol{A}$ 为第一类正交阵, 否则, 则称之为第二类正交阵. 注意, 线性变换的行列式不依赖于具体基的选取, 故我们有如下的定义.

- 若正交变换 $\mathscr{A}$ 的行列式为 1, 则称 $\mathscr{A}$ 为第一类变换. 典型的例子是平面的关于原点的旋转变换.
- 若正交变换 $\mathscr{A}$ 的行列式为 -1, 则称 $\mathscr{A}$ 为第二类变换. 典型的例子是平面的关于任何一条指定的过原点的直线的镜面反射.

可以证明, 上面指出的旋转变换与镜面反射是平面 $\mathbb{R}^2$ 上所有的正交变换 (教材作业 P221#14).

小结一下正交矩阵的常见性质

4. 若 $\boldsymbol{A}$ 是正交矩阵, 则伴随矩阵 $\boldsymbol{A}^*$ 也是正交矩阵. 这是因为

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^* = \det(\boldsymbol{A})\boldsymbol{I} = \pm\boldsymbol{I},$$

从而 $\boldsymbol{A}^* = \pm\boldsymbol{A}^{-1}$.

5. 我们再复习一下正交矩阵的常见判定准则. 对于 n 阶实方阵 $\boldsymbol{A}$, 假定它的行向量组为 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \ldots, \boldsymbol{x}_n$, 它的列向量组为 $\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \ldots, \boldsymbol{y}_n$. 那么, 以下几条等价:
   - a. $\boldsymbol{A}$ 为正交矩阵;
   - b. 对任意的 i, j 有 $\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_j^{\mathsf{T}} = \delta_{ij}$;
   - c. 对任意的 i, j 有 $\boldsymbol{y}_i^{\mathsf{T}}\boldsymbol{y}_j = \delta_{ij}$;
   - d. $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n$ 是 $\mathbb{R}^n$ 在标准内积下的一组标准正交基;
   - e. $\boldsymbol{y}_1, \ldots, \boldsymbol{y}_n$ 是 $\mathbb{R}^n$ 在标准内积下的一组标准正交基.