定义 1

设 V 是实数域 $\mathbb{R}$ 上的线性空间. 如果对于 V 内任意两个向量 $\boldsymbol{a}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 都按照某一法则对应于一个实数, 记作 $(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) \in \mathbb{R}$, 满足:

- (对称性) $(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{b}, \boldsymbol{a})$,
- (对于第一位置的线性性) $\lambda(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = (\lambda\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ 以及 $(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}) = (\boldsymbol{a}, \boldsymbol{c}) + (\boldsymbol{b}, \boldsymbol{c})$,
- (正定性) 对于任意的 $\boldsymbol{a} \in V$ 有 $(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{a}) \geq 0$, 且不等式中等号成立的充要条件为 $\boldsymbol{a} = \mathbf{0}$,

则称该二元运算法则为 V 上的内积 (*inner product*), 而 $(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b})$ 称为 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{b}$ 的内积. 定义了内积的 $\mathbb{R}$ 上的线性空间称为内积空间 (*inner product space*) 或欧几里得空间, 简称为欧氏空间.

1. 设 $(\cdot,\cdot)$ 是 n 维欧氏空间 V 上的内积, $\alpha_1,\ldots,\alpha_n$ 是 V 的一组基. 若令 $g_{ij}=(\alpha_i,\alpha_j)$, 则 n 阶矩阵 $G=(g_{ij})_{n\times n}$ 称为内积在基 $\alpha_1,\ldots,\alpha_n$ 下的度量矩阵.
2. 在基给定的条件下, 内积空间 V 的内积与度量矩阵互相决定.
3. 任给 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in V$, 假定它们在基 $\alpha_1,\ldots,\alpha_n$ 下的坐标分别为 $\boldsymbol{X}=(x_1,\ldots,x_n)^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{Y}=(y_1,\ldots,y_n)^{\mathrm{T}}$, 那么 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{Y}$.
4. 对于 n 阶实对称阵 $\boldsymbol{A}$, 若是对于任意的非零列向量 $\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^n$, 皆有 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}>0$, 则称 $\boldsymbol{A}$ 是一个正定方阵.
5. 度量矩阵 $=$ 正定的实对称阵.

定义 2

给定两个同阶方阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$. 若存在可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$ 使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}^{\mathsf{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{P}$, 则称 $\boldsymbol{A}$ 是 $\boldsymbol{B}$ 由相合变换 (congruent transformation) 得到的, 称 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 是相合的.

注 3

1. 容易验证相合关系也是一个等价关系, 满足反身性, 对称性以及传递性.
2. 内积在不同基下的矩阵是相合的.
3. 假定有两个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是相合的, 而 $\boldsymbol{A}$ 是内积在某组基下的度量矩阵, 那么 $\boldsymbol{B}$ 必然是同样的内积在另外一组基下的度量矩阵. 并且, 用于做相合变换的可逆矩阵构成了从第一组基到第二组基的过渡矩阵.
4. 用正交矩阵来作相似变换与相合变换, 效果是一样的.
5. 我们一般是在实方阵的框架下讨论相合. 不难看出, 定义中的 $\boldsymbol{A}$ 是实对称的, 当且仅当 $\boldsymbol{B}$ 是实对称的.

定义 4

在欧氏空间 V 中，由两两正交的非零向量构成的向量组称为一个正交向量组，由正交向量组构成的基称为一组正交基，由单位向量构成的正交基称为一组标准正交基，单位正交基或规范正交基 (*orthonormal basis*).

例 5

1. $\mathbb{R}^n$ 的自然基在标准内积下是最常用的一组标准正交基.
2. $(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}})^\mathsf{T}, (-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0)^\mathsf{T}, (\frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}}, -\frac{2}{\sqrt{6}})^\mathsf{T}$ 是 $\mathbb{R}^3$ 的一组标准正交基.

3. 在 $C[-\pi,\pi]$ 上定义内积

$$(f,g) := \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)g(x)\,\mathrm{d}x.$$

对于任意给定的正整数 n, 不难验证集合

$$\left\{\frac{1}{\sqrt{2}}, \cos(x), \cos(2x), \ldots, \cos(nx), \sin(x), \sin(2x), \ldots, \sin(nx)\right\}$$

是一个由单位向量构成的正交向量组. 由于已知 $C[-\pi,\pi]$ 是实数域上的无穷维线性空间, 故这组向量不可能构成 $C[-\pi,\pi]$ 的标准正交基.

命题 6

若 $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_r$ 是欧氏空间的一个正交向量组，那么它一定是线性无关的，从而构成所生成的子空间的一组基.

推论 7

在 n 维欧氏空间中两两正交的非零向量的个数不会超过 n 个.

回忆一下，单位阵可以写成 $\boldsymbol{I}_n=(\delta_{ij})_{n\times n}$，其中Kronecker 符号 δ_{ij} 是这样定义的：

$$\delta_{ij}=\begin{cases}1, & \text{当 } i=j,\\ 0, & \text{当 } i\neq j.\end{cases}$$

推论 8

向量组 $\boldsymbol{x}_1,\ldots,\boldsymbol{x}_n\in V$ 构成 n 维欧氏空间 V 的标准正交基的充要条件是对于任意的 i,j，有 $(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j)=\delta_{ij}$.

定义 9

对于欧氏空间 V 中的向量 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_m$，令 $\boldsymbol{G} = (g_{ij})_{m\times m}$，其中 $g_{ij} = (\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)$. 这样得到的对称矩阵 $\boldsymbol{G}$ 称为向量组 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_m$ 的 *Gram* 矩阵.

注 10

1. 内积在 V 的基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 下的度量矩阵是该向量组的 *Gram* 矩阵.
2. 由定义不难看出，向量组 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_m$ 是一组由单位向量构成的正交组的充要条件是对于任意的 i, j，有 $(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \delta_{ij}$. 用这儿的语言表述，这等价于说，它们的 *Gram* 矩阵为 m 阶的单位阵 $\boldsymbol{I}_m$.

3. 若 V 是具有标准内积的欧氏空间 $\mathbb{R}^n$, 设 $\boldsymbol{X}$ 是以 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_m$ 为列向量的 $n \times m$ 矩阵, 那么定义中的 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}$.

4. 在 (3) 中, 若 $m = n$ 时, 这意味着 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_n$ 是数组空间 $\mathbb{R}^n$ 的一组标准正交基的充要条件是以其为列向量组的矩阵 $\boldsymbol{X}$ 满足 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X} = \boldsymbol{I}_n$, 即 $\boldsymbol{X}$ 为正交矩阵. 进一步地, 由于 $\boldsymbol{X}$ 是正交矩阵当且仅当 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 也是一个正交矩阵, 故这也等价于说 $\boldsymbol{X}$ 的行向量组在数组空间 $\mathbb{R}^n$ 的标准内积下构成一个正交向量组.

5. 仍然考虑 (3) 中的情形. 在第五章中我们已经证明了 $\operatorname{rank}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}) = \operatorname{rank}(\boldsymbol{X})$. 由此可知, $\det(\boldsymbol{G}) \neq 0$ 当且仅当 $\boldsymbol{G}$ 是满秩矩阵, 当且仅当 $\boldsymbol{X}$ 是列满秩的, 而这也当且仅当 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_m$ 线性无关.

6. 一般而言, 欧氏空间 V 中的向量 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_m$ 的 Gram 矩阵 $\boldsymbol{G}$ 是半正定的对称矩阵, 并且 $\boldsymbol{G}$ 是正定的当且仅当向量组 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_m$ 线性无关 (参见教材最后一章最后一节的定义). 另外, 我们有 $\operatorname{rank}(\boldsymbol{G}) = \operatorname{rank}(\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_m)$.

为什么关心标准正交基?

注 11

若 $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ 是 V 的一组标准正交基, 向量 $\boldsymbol{x}$ 在这组基下的坐标为 $(x_1, \ldots, x_n)^{\mathrm{T}}$, 即有 $\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^n x_i \varepsilon_i$. 将该式与 ε_j 作内积, 我们得到

$$(\boldsymbol{x}, \varepsilon_j) = \left(\sum_{i=1}^n x_i \varepsilon_i, \varepsilon_j \right) = \sum_{i=1}^n x_i (\varepsilon_i, \varepsilon_j) = x_j.$$

这说明向量坐标的分量可以用内积表达:

$$\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^n (\boldsymbol{x}, \varepsilon_i) \varepsilon_i.$$

该式称为 $\boldsymbol{x}$ 的 *Fourier 展开*, 其中每个系数 $(\boldsymbol{x}, \varepsilon_i)$ 都称为 $\boldsymbol{x}$ 的 *Fourier 系数*.

设向量 $\boldsymbol{y} \in V$ 在这组标准正交基下的坐标为 $(y_1, \ldots, y_n)^{\mathrm{T}}$，即有 $\boldsymbol{y} = \sum_{j=1}^{n} y_j \varepsilon_j$. 此时，

$$\boxed{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})} = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i \varepsilon_i, \sum_{j=1}^{n} y_j \varepsilon_j\right) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} x_i y_j (\varepsilon_i, \varepsilon_j) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} x_i y_j \delta_{ij} = \boxed{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i}.$$

特别地，我们有帕塞瓦尔等式

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} x_i^2,$$

即向量的模满足勾股定理:

$$\|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}.$$

既然标准正交基有这么好的性质，它是否一定存在呢？

注 12

设 V 是 $\mathbb{R}$ 上的 n 维线性空间，$\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 为 V 的一组基. 对于任意的 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$, 设它们在 $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 下的坐标分别为 $\boldsymbol{X} = (x_1, \ldots, x_n)^{\mathsf{T}}$ 和 $\boldsymbol{Y} = (y_1, \ldots, y_n)^{\mathsf{T}}$, 即 $\boldsymbol{x} = \sum_i x_i \boldsymbol{\alpha}_i$, $\boldsymbol{y} = \sum_i y_i \boldsymbol{\alpha}_i$. 定义

$$(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) := \sum_i x_i y_i,$$

即 $\mathbb{R}^n$ 中的向量 $\boldsymbol{X}$ 与 $\boldsymbol{Y}$ 之间的标准内积. 不难验证，这给出了 V 上的一个内积. 这表明，相对于有限维实线性空间 V 的任意一组基 $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_n$, V 上都存在一个相应的内积，使得这组基在该内积下成为一组标准正交基.

显然，前面的注并没有解答前页中提出的疑问．接下来我们说明，有限维的欧氏空间在给定的内积下，也必然存在一组标准正交基．

回忆

有限维线性空间的任意一组线性无关的向量都可以扩充为向量空间的一组基．

类似地，有限维欧氏空间的任意一个正交向量组都可以扩充为该欧氏空间的一组正交基．为此，我们打算证明如下的定理．

定理 13

从 n 维欧氏空间 V 的任意一组基出发，可以构造出一组标准正交基．特别地，V 的标准正交基一定存在．

一点准备

1. 若向量 $\boldsymbol{\alpha} \in V$ 非零, 对其做归一化 (也称作标准化或单位化), 可以得到单位向量:

$$\boldsymbol{\alpha} \mapsto \frac{\boldsymbol{\alpha}}{\|\boldsymbol{\alpha}\|}.$$

新得到的向量, 从几何意义上来说, 与原向量具有相同的方向.

2. 在欧氏空间 V 中任意取定一个非零向量 $\boldsymbol{\alpha}$, 对于 V 的中任意向量 $\boldsymbol{\beta}$, 我们希望找到

正交分解 $\boldsymbol{\beta}=\boldsymbol{\beta}_1+\boldsymbol{\beta}_2$, 其中 $\boldsymbol{\beta}_1$ 与 $\boldsymbol{\alpha}$ 平行, 而 $\boldsymbol{\beta}_2$ 与 $\boldsymbol{\alpha}$ 垂直.

不难直接验证, (验证!)

$$\boldsymbol{\beta}_1=\frac{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}\boldsymbol{\alpha},\qquad \boldsymbol{\beta}_2=\boldsymbol{\beta}-\frac{(\boldsymbol{\beta},\boldsymbol{\alpha})}{(\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\alpha})}\boldsymbol{\alpha}$$

符合要求, 并且满足要求的分解是唯一的. 这样得到的 $\boldsymbol{\beta}_1$ 被称为 $\boldsymbol{\beta}$ 到向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 上的向量投影 (vector projection), 或简称为投影. 而 $\boldsymbol{\beta}_2$ 将被称作 $\boldsymbol{\beta}$ 的与 $\boldsymbol{\alpha}$ 正交的分量.

一点准备

3. 若前面讨论中的向量 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}$ 线性无关, 那么 $\boldsymbol{\beta}_2 = \boldsymbol{\beta} - k\boldsymbol{\alpha} \neq \mathbf{0}$, 从而我们得到了正交向量组 $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}_2$.

4. 更一般地, 设 $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m$ 是欧氏空间 V 中的一个正交向量组, 对于任意的 $\boldsymbol{\beta} \in V$, 我们可以考虑分解 $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}_1 + \boldsymbol{\beta}_2$, 其中

$$\boldsymbol{\beta}_1 = \sum_{i=1}^{m} \frac{(\boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha}_i)}{(\boldsymbol{\alpha}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)} \boldsymbol{\alpha}_i, \qquad \boldsymbol{\beta}_2 = \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}_1.$$

显然, $\boldsymbol{\beta}_1$ 属于线性子空间 $\langle \boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m \rangle$, 并且对于任意的 $\boldsymbol{\gamma} \in \langle \boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m \rangle$, 我们有 $(\boldsymbol{\beta}_2, \boldsymbol{\gamma}) = 0$, (验证!) 这说明上面构造的 $\boldsymbol{\beta}_2$ 与子空间 $\langle \boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m \rangle$ 中的所有向量都正交. 由此, 我们称 $\boldsymbol{\beta}_1$ 为向量 $\boldsymbol{\beta}$ 到子空间 $\langle \boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m \rangle$ 的向量投影.

特别地, 若 $\boldsymbol{\beta} \notin \langle \boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m \rangle$, 那么 $\boldsymbol{\beta}_2 \neq \mathbf{0}$, 从而得到更大的正交向量组 $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_m, \boldsymbol{\beta}_2$.

我们首先来看 Gram–Schmidt 正交化过程 (orthogonalization).

定理 14

设 $\boldsymbol{\alpha}_1, \boldsymbol{\alpha}_2, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_s$ 是欧氏空间 V 的一个线性无关的向量组，令

$$\begin{cases} \boldsymbol{\beta}_1 = \boldsymbol{\alpha}_1, \\ \boldsymbol{\beta}_2 = \boldsymbol{\alpha}_2 - \frac{(\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\beta}_1)}{(\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_1)} \boldsymbol{\beta}_1, \\ \qquad \vdots \\ \boldsymbol{\beta}_s = \boldsymbol{\alpha}_s - \sum_{j=1}^{s-1} \frac{(\boldsymbol{\alpha}_s, \boldsymbol{\beta}_j)}{(\boldsymbol{\beta}_j, \boldsymbol{\beta}_j)} \boldsymbol{\beta}_j, \end{cases}$$

则 $\boldsymbol{\beta}_1, \boldsymbol{\beta}_2, \ldots, \boldsymbol{\beta}_s$ 是一个正交向量组，并且与 $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_s$ 等价.

定理 13 的证明.

设 $\boldsymbol{\alpha}_1, \ldots, \boldsymbol{\alpha}_n$ 是 n 维欧氏空间 V 的一组基. 由上面的 Gram–Schmidt 正交化过程, 我们得到 V 的一组正交基 $\boldsymbol{\beta}_1, \ldots, \boldsymbol{\beta}_n$. 对于每个 i, 令 $\boldsymbol{\varepsilon}_i = \frac{\boldsymbol{\beta}_i}{\|\boldsymbol{\beta}_i\|}$. 则 $\boldsymbol{\varepsilon}_1, \ldots, \boldsymbol{\varepsilon}_n$ 构成了 V 的一组标准正交基. $\square$

注 15

若是将 *Gram–Schmidt* 正交化过程与归一化过程结合在一起，则算法大致如下

$$\begin{array}{rcl}
\boldsymbol{\beta}_1 = \boldsymbol{\alpha}_1 & \longrightarrow & \boldsymbol{\varepsilon}_1 = \boldsymbol{\beta}_1/\|\boldsymbol{\beta}_1\| \\
\boldsymbol{\beta}_2 = \boldsymbol{\alpha}_2 - (\boldsymbol{\alpha}_2, \boldsymbol{\varepsilon}_1)\boldsymbol{\varepsilon}_1 & \longrightarrow & \boldsymbol{\varepsilon}_2 = \boldsymbol{\beta}_2/\|\boldsymbol{\beta}_2\| \\
\boldsymbol{\beta}_3 = \boldsymbol{\alpha}_3 - (\boldsymbol{\alpha}_3, \boldsymbol{\varepsilon}_1)\boldsymbol{\varepsilon}_1 - (\boldsymbol{\alpha}_3, \boldsymbol{\varepsilon}_2)\boldsymbol{\varepsilon}_2 & \longrightarrow & \boldsymbol{\varepsilon}_3 = \boldsymbol{\beta}_3/\|\boldsymbol{\beta}_3\| \\
\boldsymbol{\beta}_n = \boldsymbol{\alpha}_n - \sum_{j=1}^{n-1}(\boldsymbol{\alpha}_s, \boldsymbol{\varepsilon}_j)\boldsymbol{\varepsilon}_j & \longrightarrow & \boldsymbol{\varepsilon}_n = \boldsymbol{\beta}_n/\|\boldsymbol{\beta}_n\|
\end{array}$$

例 16

用 *Gram–Schmidt* 正交化方法把 $\mathbb{R}^3$ 的一组基

$$\boldsymbol{\alpha}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha}_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

化成一组标准正交基.

类似于上面的正交化的计算方法, 必须熟练掌握.