接下来, 我们看一下 Gram-Schmidt 正交化的理论性的应用.

定理 7.2.25 (可逆矩阵的 QR 分解). 对任意的 n 阶可逆实矩阵 A, 都存在一个 n 阶的 正交矩阵 Q 和一个 n 阶的主对角元素为正数的上三角矩阵 R, 使得 A = QR. 这称为 A 的 QR 分解, 并且这样的分解是唯一的.

证明. 先证分解的存在性. 对于 A 的列向量 $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$, 由于 A 可逆, 这组向量线性无关, 构成 \mathbb{R}^n 的一组基. 对这组向量使用 Gram-Schmidt 正交化方法, 我们会得到

$$egin{cases} eta_1 = oldsymbol{lpha}_1, \ eta_2 = oldsymbol{lpha}_2 - rac{(oldsymbol{lpha}_2,eta_1)}{(eta_1,eta_1)}oldsymbol{eta}_1, \ dots \ eta_n = oldsymbol{lpha}_n - \sum_{j=1}^{n-1} rac{(oldsymbol{lpha}_n,eta_j)}{(oldsymbol{eta}_j,eta_j)}oldsymbol{eta}_j. \end{cases}$$

上面的表达式换一种写法就是

$$\boldsymbol{\alpha}_s = \sum_{j=1}^{s-1} \frac{(\boldsymbol{\alpha}_s, \boldsymbol{\beta}_j)}{(\boldsymbol{\beta}_j, \boldsymbol{\beta}_j)} \boldsymbol{\beta}_j + \boldsymbol{\beta}_s, \qquad s = 1, 2, \dots, n.$$

将这些用矩阵表示, 于是有

$$\left(oldsymbol{lpha}_1 \quad oldsymbol{lpha}_2 \quad \cdots \quad oldsymbol{lpha}_n
ight) \left(egin{matrix} 1 & & * & \ & 1 & & \ & & \ddots & \ & & & \ddots & \ & & & & 1 \end{matrix}
ight).$$

再做归一化, 对于每个 s, 令 $\varepsilon_s = \frac{\beta_s}{\|\beta_s\|}$, 从而

$$\left(\boldsymbol{\beta}_{1} \quad \boldsymbol{\beta}_{2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{\beta}_{n}\right) = \left(\boldsymbol{\varepsilon}_{1} \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{2} \quad \cdots \quad \boldsymbol{\varepsilon}_{n}\right) \operatorname{diag}(\left\|\boldsymbol{\beta}_{1}\right\|, \left\|\boldsymbol{\beta}_{2}\right\|, \ldots, \left\|\boldsymbol{\beta}_{n}\right\|).$$

此时,

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1 & \boldsymbol{\alpha}_2 & \cdots & \boldsymbol{\alpha}_n \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_1 & \boldsymbol{\varepsilon}_2 & \cdots & \boldsymbol{\varepsilon}_n \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{Q}} \operatorname{diag}(\|\boldsymbol{\beta}_1\|, \|\boldsymbol{\beta}_2\|, \dots, \|\boldsymbol{\beta}_n\|) \begin{pmatrix} 1 & * & \\ & 1 & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{B}}.$$

可以直接验证, 上面定义的 Q 与 R 满足要求.

接下来证明分解的唯一性. 若有正交矩阵 Q_1, Q_2 和主对角线上为正数的上三角矩阵 R_1, R_2 满足

$$\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}_1=\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}_2\boldsymbol{R}_2,$$

那么

$$Q_1^{-1}Q_2 = R_1R_2^{-1}.$$

上式的左边是正交矩阵, 右边是主对角线上为正数的上三角矩阵. 由接下来的引理可知, 同时满足这两个条件的方阵仅为单位矩阵, 从而 $Q_1 = Q_2$ 以及 $R_1 = R_2$.

引理 7.2.26. 若一个正交矩阵 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.

证明. 由于 P 为正交矩阵, 它是可逆的, 且 $P^{-1} = P^{\mathsf{T}}$. 由初等变换求逆的方法可知, 作为上三角矩阵的逆, P^{-1} 必为上三角阵. 另一方面, 作为上三角矩阵的转置, P^{T} 是一个下三角阵. 综上可知, $P^{-1} = P^{\mathsf{T}}$ 为对角阵, 从而 P 也是对角阵. 此时, 不难验证 P 恰为 I.

之后我们会看到关于矩阵的 QR 分解的应用.

引理 7.2.27. 设 $\epsilon_1, \ldots, \epsilon_n$ 是欧氏空间 V 的一组标准正交基, 而 x_1, \ldots, 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 a_1, \ldots, a_m . 假定 $A = (a_1, \ldots, a_m) \in \mathbb{R}^{n \times m}$, 那么 x_1, \ldots, x_m 的 Gram 矩阵 G 恰为 A^TA .

证明. 设 $\mathbf{A} = (a_{ij})_{n \times m}$, 那么 $\mathbf{x}_j = \sum_p \boldsymbol{\varepsilon}_p a_{pj}$. 设 $\mathbf{G} = (g_{ij})_{n \times n}$. 依定义,

$$g_{ij} = (\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \left(\sum_p \boldsymbol{\varepsilon}_p a_{pi}, \sum_q \boldsymbol{\varepsilon}_q a_{qj}\right) = \sum_p \sum_q a_{pi} a_{qj} (\boldsymbol{\varepsilon}_p, \boldsymbol{\varepsilon}_q)$$

$$\frac{\boldsymbol{\varepsilon}_1, \dots, \boldsymbol{\varepsilon}_n}{\text{为标准正交基}} \sum_p a_{pi} a_{pj} = (\boldsymbol{A}^\mathsf{T} \boldsymbol{A})_{ij}.$$

这说明 $G = A^{\mathsf{T}}A$.

例 7.2.28. 在 n 维欧氏空间 V 中,设线性无关的向量组 $\alpha_1, \ldots, \alpha_m$ 经过 Schmidt 正交化方法,变成了与之等价的正交向量组 β_1, \ldots, β_m ,而这两组向量的 Gram 矩阵分别为 G 和 G'.证明: $|G| = |G'| = ||\beta_1||^2 \cdots ||\beta_m||^2 < ||\alpha_1||^2 \cdots ||\alpha_m||^2$.

证明. 我们的证明分三步走.

(1) 不妨设 $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ 是 V 中的一组标准正交基. 假定如下给出了 $\alpha_1, \ldots, \alpha_m$ 在 $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ 下的线性表示:

$$(\boldsymbol{\alpha}_1,\ldots,\boldsymbol{\alpha}_m)=(\boldsymbol{\varepsilon}_1,\ldots,\boldsymbol{\varepsilon}_n)\boldsymbol{P},$$

其中 $P \in \mathbb{R}^{n \times m}$. 与此同时, 我们在定理 7.2.25 的证明中看到,

$$(\boldsymbol{lpha}_1,\ldots,\boldsymbol{lpha}_m)=(oldsymbol{eta}_1,\ldots,oldsymbol{eta}_m)oldsymbol{Q},$$

其中 $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ 为上三角矩阵, 且对角线上的元素全为 1. 特别地, |Q| = 1. 此时,

$$(\boldsymbol{eta}_1,\ldots,\boldsymbol{eta}_m)=(oldsymbol{arepsilon}_1,\ldots,oldsymbol{arepsilon}_n)oldsymbol{P}oldsymbol{Q}^{-1}.$$

由引理 7.2.27 可知, $G = P^{\mathsf{T}}P$, $G' = (PQ^{-1})^{\mathsf{T}}(PQ^{-1})$. 显然,

$$|G'| = |(Q^{-1})^{\mathsf{T}} (P^{\mathsf{T}} P) Q^{-1}| = |Q^{-1}|^2 |P^{\mathsf{T}} P| = |G|.$$

- (2) 由于 $\beta_1, ..., \beta_m$ 为正交向量组, $G' = \text{diag}(\|\beta_1\|^2, ..., \|\beta_m\|^2)$, 从而 G' 的行列式的值由公式给出.
- (3) 只需注意到:

$$\boldsymbol{\alpha}_s = \sum_{j=1}^{s-1} \frac{(\boldsymbol{\alpha}_s, \boldsymbol{\beta}_j)}{(\boldsymbol{\beta}_j, \boldsymbol{\beta}_j)} \boldsymbol{\beta}_j + \boldsymbol{\beta}_s, \qquad s = 1, 2, \dots, n,$$

而 β_1, \ldots, β_m 为正交向量组, 于是,

$$\left\|oldsymbol{lpha}_s
ight\|^2 = \sum_{j=1}^{s-1} \left\|rac{(oldsymbol{lpha}_s, oldsymbol{eta}_j)}{(oldsymbol{eta}_j, oldsymbol{eta}_j)} oldsymbol{eta}_j
ight\|^2 + \left\|oldsymbol{eta}_s
ight\|^2 \geq \left\|oldsymbol{eta}_s
ight\|^2.$$

7.3 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 7.3.1. 设 \mathscr{A} 是欧氏空间 V 上的线性变换. 若对于任意的 $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in V$, 有 $(\mathscr{A}(\mathbf{a}), \mathscr{A}(\mathbf{b})) = (\mathbf{a}, \mathbf{b})$, 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 7.3.2. (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) 在例 6.2.6 中我们已经见到, 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 \mathcal{A}_{θ} 是 \mathbb{R}^2 上的线性变换, 它在 \mathbb{R}^2 的自然基下的矩阵为

$$m{A}_{ heta} = egin{pmatrix} \cos(heta) & -\sin(heta) \ \sin(heta) & \cos(heta) \end{pmatrix}.$$

任取向量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^\mathsf{T}, \mathbf{y} = (y_1, y_2)^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^2$, 我们有

$$(\mathscr{A}_{\theta}(\boldsymbol{x}), \mathscr{A}_{\theta}(\boldsymbol{y})) = (\boldsymbol{A}_{\theta}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}_{\theta}\boldsymbol{y})$$

$$= \left(\begin{pmatrix} \cos(\theta)x_1 - \sin(\theta)x_2 \\ \sin(\theta)x_1 + \cos(\theta)x_2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \cos(\theta)y_1 - \sin(\theta)y_2 \\ \sin(\theta)y_1 + \cos(\theta)y_2 \end{pmatrix} \right)$$

$$= (\cos(\theta)x_1 - \sin(\theta)x_2)(\cos(\theta)y_1 - \sin(\theta)y_2)$$

$$+ (\sin(\theta)x_1 + \cos(\theta)x_2)(\sin(\theta)y_1 + \cos(\theta)y_2)$$

$$= x_1y_1 + x_2y_2 = (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}).$$

这说明, 旋转变换 \mathcal{A}_{h} 是 \mathbb{R}^{2} 上相对于标准内积的正交变换. 当然, 这一点用旋转的几何意义来解释也是很容易的.

注 7.3.3. 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 a 与 b 之间的夹角的余弦为 $\frac{(a,b)}{\sqrt{(a,a)}\sqrt{(b,b)}}$.

故正交变换保持向量的长度和向量之间的夹角不变,即 $\|\mathscr{A}(a)\| = \|a\|$,且 $\mathscr{A}(a)$ 与 $\mathscr{A}(b)$ 之间的夹角与 a 与 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 7.3.4. 设 \mathcal{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:

教材定理 7.3.1

- (3) ৶ 将任意的标准正交基变为标准正交基:
- (4) ℳ 将给定的一组标准正交基变为标准正交基.

证明. 我们已经看到了 $(1)\Rightarrow(2)$ 以及 $(3)\Rightarrow(4)$. 关于 $(2)\Rightarrow(3)$, 我们只需注意到之前提到的事实: $\mathbf{a}\perp\mathbf{b}$ 当且仅当 $\|\mathbf{a}+\mathbf{b}\|^2=\|\mathbf{a}\|^2+\|\mathbf{b}\|^2$. 接下来, 我们证明 $(4)\Rightarrow(1)$:

设 $\boldsymbol{\varepsilon}_1, \dots, \boldsymbol{\varepsilon}_n$ 是欧氏空间 V 上给定的一组标准正交基. 对于任意的 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in V$, 设 $(a_1, \dots, a_n)^\mathsf{T}$ 与 $(b_1, \dots, b_n)^\mathsf{T}$ 是它们在这组基下的坐标. 此时

$$\begin{split} (\mathscr{A}(\boldsymbol{a}),\mathscr{A}(\boldsymbol{b})) &= \left(\mathscr{A}\left(\sum_{i=1}^n a_i \boldsymbol{\varepsilon}_i\right),\mathscr{A}\left(\sum_{j=1}^n b_j \boldsymbol{\varepsilon}_j\right)\right) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i b_j (\mathscr{A}(\boldsymbol{\varepsilon}_i),\mathscr{A}(\boldsymbol{\varepsilon}_j)) & \text{ 请回忆} \\ & \frac{\mathscr{A}(\boldsymbol{\varepsilon}_1),\dots,\mathscr{A}(\boldsymbol{\varepsilon}_n)}{\text{为标准正交基}} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i b_j \delta_{ij} = \sum_{i=1}^n a_i b_i & \frac{\boldsymbol{\varepsilon}_1,\dots,\boldsymbol{\varepsilon}_n}{\text{为标准正交基}} \left(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\right). \end{split}$$

故 & 是一个正交变换.

例 7.3.5. 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 7.3.6. 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 $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ 数 $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ 7.3.2 下的矩阵为 A. 那么, \mathscr{A} 为正交变换的充要条件是 A 为正交矩阵.

证明. 由定理 7.3.4, \mathscr{A} 为正交变换当仅当 $\mathscr{A}(\varepsilon_1), \dots, \mathscr{A}(\varepsilon_n)$ 为标准正交基. 而由注 7.2.16 可知, 这又当且仅当 $\mathscr{A}(\varepsilon_1), \dots, \mathscr{A}(\varepsilon_n)$ 的 Gram 矩阵为 I_n . 另一方面, 由定义, A 的第 i 个列向量是 $\mathscr{A}(\varepsilon_i)$ 在标准正交基 $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$ 下的坐标. 故由引理 7.2.27 可知, $\mathscr{A}(\varepsilon_1), \dots, \mathscr{A}(\varepsilon_n)$ 的 Gram 矩阵为 A^TA . 综上可知, 定理的结论成立.

例 7.3.7. 在例 7.3.2 (2) 中的旋转变换 \mathcal{A}_{θ} 为正交变换, 从而 \mathcal{A}_{θ} 在自然基下的矩阵 \mathbf{A}_{θ} 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 7.3.8. 在定理 7.3.6 中的基 $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$ 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 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$ 和可逆矩阵

$$T = \begin{pmatrix} 1 & a \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
, 其中 $\theta, a \in \mathbb{R}$. 此时,

$$T^{-1}AT = \begin{pmatrix} \cos(\theta) - a\sin(\theta) & -a(a\sin(\theta) + \cos(\theta)) - \sin(\theta) + a\cos(\theta) \\ \sin(\theta) & a\sin(\theta) + \cos(\theta) \end{pmatrix}$$

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

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

故 $T^{-1}AT$ 一般而言不再是正交矩阵了.

与定理 7.3.6 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 7.3.9. 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 $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ 的过渡矩阵为 P, 则 $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ 仍然是 V 的标准正交基的充要条件是 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 $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ 是 P 的列向量)

证明. (证法一) 由注 7.2.16 可知, $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ 仍然是 V 的标准正交基的充要条件是 $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ 的 Gram 矩阵 G 为 I_n . 而由引理 7.2.27 可知, $G = P^T P$. 综上可知, 命 题的结论成立.

(证法二) 对于 V 的另外一组基 $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$,存在唯一的 V 上的线性映射 \mathscr{A} ,使得 $\mathscr{A}(\varepsilon_i) = \alpha_i \ (1 \le i \le n)$. 此时, \mathscr{A} 在基 $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ 下的矩阵 (记作 A) 就是 $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ 到 $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ 的过渡矩阵 (记作 P). 于是, $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ 是一组标准正交基,当且仅当线性变换 \mathscr{A} 把已知的标准正交基 $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ 变为标准正交基,当且仅当 \mathscr{A} 为正交变换,当且仅当线性变换 \mathscr{A} 在已知的标准正交基 $\varepsilon_1, \ldots, \varepsilon_n$ 的矩阵 A 为正交矩阵,即过渡矩阵 P 为正交矩阵.

注 7.3.10. 我们再小结一下正交矩阵的常见性质.

(1) 若 A,B 为两个同阶的正交矩阵,则 AB 也是正交矩阵:

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

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

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

(3) 若 A 为正交矩阵,则 $\det(A) = \pm 1$. 这是由于 $1 = \|I\| = \|A^{\mathsf{T}}A\| = \|A^{\mathsf{T}}\| \cdot \|A\| = \|A\|^2$, 而 $\|A\| \in \mathbb{R}$.

由此, 若 |A| = 1, 则称 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 Ø 的行列式为 1, 则称 Ø 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 ☑ 的行列式为 -1, 则称 ☑ 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).

(4) 若 A 是正交矩阵, 则伴随矩阵 A* 也是正交矩阵. 这是因为

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

从而 $A^* = \pm A^{-1}$.

- (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 A, 假定它的行向量组为 x_1, x_2, \ldots, x_n , 它的列向量组为 y_1, y_2, \ldots, y_n . 那么, 以下几条等价:
 - (a) A 为正交矩阵;
 - (b) 对任意的 i, j 有 $\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{x}_i^{\mathsf{T}} = \delta_{ij}$;
 - (c) 对任意的 i, j 有 $\mathbf{y}_i^{\mathsf{T}} \mathbf{y}_i = \delta_{ij}$;
 - (d) x_1, \ldots, x_n 是 \mathbb{R}^n 在标准内积下的一组标准正交基;
 - (e) y_1, \ldots, y_n 是 \mathbb{R}^n 在标准内积下的一组标准正交基.