17. Orthogonal Matrices and Gram-Schmidt

1. Overview.

- 标准正交向量
- Gram-Schmidt 正交化.

2. Orthonormal Vector.

2.1 回顾标准正交向量

设 q 是标准正交向量组的任意向量:

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

2.2 标准正交矩阵 Q

所谓标准正交矩阵 Q,就是将标准正交向量组中的 $q_1, q_2, \cdots, q_n$ 列在同一矩阵中:

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

标准正交矩阵有一个很好的性质:

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

当 Q 是 Square Matrix,且 Column Vectors 是 Orthonormal Vectors,
Q 被称为: Orthogonal Matrix

- Orthogonal Matrix Q 的特殊性:

  Q 是方阵,又因为 Q 的列是 Orthonormal Vectors,它们是线性无关的,所以 Q 是可逆的。

  结合: $Q^TQ = I$ 可得: $\boxed{Q^T = Q^{-1}}$

注: Orthogonal Matrix 的两个要点:
1、各列是正交的
2、单位化向量.

例1:

$$Q = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad Q^T = Q^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

此时 $\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = I$

例2:

$$Q = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

例3:

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

单位化

2.3 Orthogonal Matrix 的作用

- 上面介绍的 Projection Matrix $P = A(A^TA)^{-1}A^T$，如果投影到 $C(Q)$，已知 $Q^TQ=I$，有：

$$P = Q(\underbrace{Q^TQ}_{I})^{-1}Q^T = QQ^T$$

P 满足 Projection Matrix 的 2 个性质：

1. $P^T = P$ 对称矩阵
2. $P^2 = P$

- Least Squares. $A^TA\hat{x} = A^Tb$

当使用标准正交基，即 $A=Q$ 时，

$$Q^TQ\hat{x} = Q^Tb$$
$$\Rightarrow I\hat{x} = Q^Tb$$
$$\Rightarrow \hat{x} = Q^Tb \qquad Q\hat{x}=b.$$

$\hat{x}$ 的每个分量都是 Q 对应列向量与 b 的 dot product：

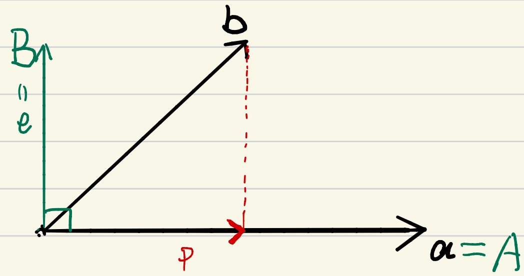
$$\hat{x}_i = q_i^Tb$$

所以，将 $A \rightarrow Q$ 可以简化很多问题。
那怎么把 A 变为 Orthogonal Matrix？由此引入 Gram-Schmit.

3. Gram-Schmit：

Independent Vectors $\longrightarrow$ Orthogonal $\longrightarrow$ Orthonormal

$a, b \qquad A, B \qquad q_1 = \frac{A}{\|A\|} \quad q_2 = \frac{B}{\|B\|}$



$$B = b - p$$
$$= b - xA$$
$$= b - \frac{A^Tb}{A^TA}A$$

Independent Vectors $\longrightarrow$ Orthogonal $\longrightarrow$ Orthonormal

$a, b, c \qquad A, B, C \qquad q_1 = \frac{A}{\|A\|} \quad q_2 = \frac{B}{\|B\|} \quad q_3 = \frac{C}{\|C\|}$

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

例: $a=\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}$, $b=\begin{bmatrix}1\\0\\2\end{bmatrix}$, 求 Orthogonal Q.

注: 向量 $A=a=\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}$

$$B=b-\frac{A^Tb}{A^TA}A=\begin{bmatrix}1\\0\\2\end{bmatrix}-\frac{3}{3}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\-1\\1\end{bmatrix}$$

进行单位化, 得到 Q

$$Q=[q_1 \;\; q_2]=\begin{bmatrix}1/\sqrt{3} & 0\\1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{2}\\1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2}\end{bmatrix}$$

已知原始矩阵 $A=\begin{bmatrix}1 & 1\\1 & 0\\1 & 2\end{bmatrix}$, $Q=\begin{bmatrix}1/\sqrt{3} & 0\\1/\sqrt{3} & -1/\sqrt{2}\\1/\sqrt{3} & 1/\sqrt{2}\end{bmatrix}$

A 和 Q 在同一个 column space 中, Gram-Schmit 是在同一空间中进行的, 那么类似于 $A=LU$ 分解, A 也可以分解为 Q 和 R.

$$A=QR$$

$$A=[a \;\; b]$$
$$Q=[q_1 \;\; q_2]$$

$$R=\begin{bmatrix}a^Tq_1 & b^Tq_1\\ \boxed{a^Tq_2} & b^Tq_2\end{bmatrix}$$

其中 $a^Tq_2=0$, 因为 $a=A$ 且 $B\perp A$
所以 R 是一个 upper triangular matrix.