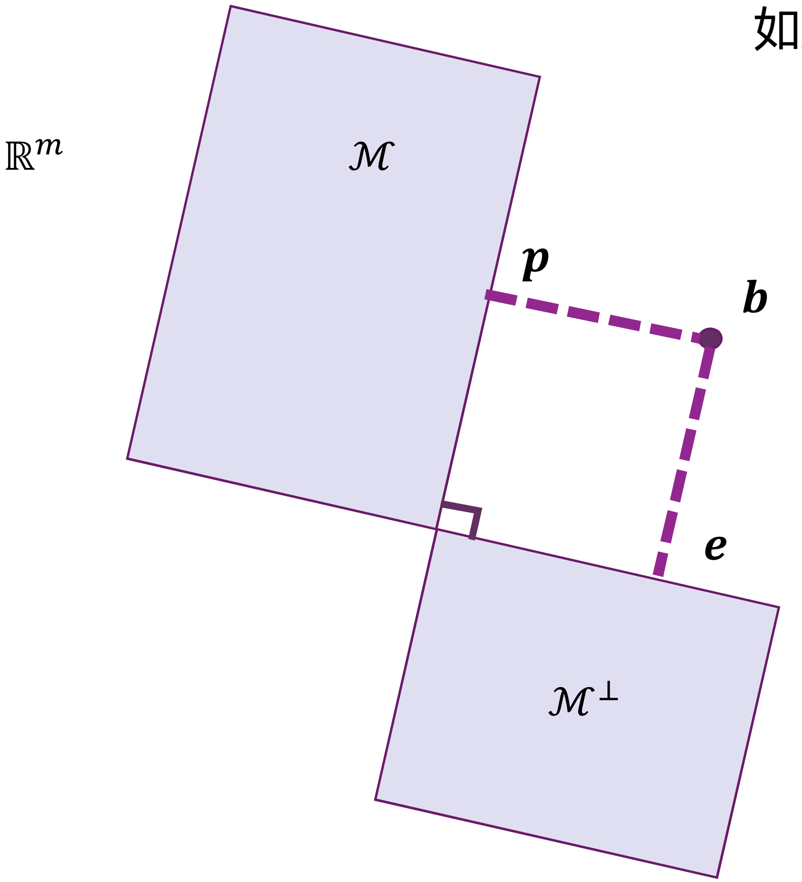
正交投影回顾：



设$\mathcal{M} = Span\ (\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \dots, \boldsymbol{a}_n)$.
考虑$m \times n$阶矩阵$A = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \dots, \boldsymbol{a}_n]$，因此$\mathcal{M} = \mathcal{R}(A)$.
如果取$\mathcal{M}$的一组基$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \dots, \boldsymbol{a}_n$，则$A$是列满秩矩阵

令$\boldsymbol{p} = A\boldsymbol{x} \in \mathcal{R}(A)$.
$\boldsymbol{e} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{p} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x} \in \mathcal{N}(A^T)$, 即$A^T\boldsymbol{e} = \boldsymbol{0}$
因此, 得到方程

$$A^T(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$$
$$A^TA\boldsymbol{x} = A^T\boldsymbol{b}$$

正规方程，总有解！

如果A是列满秩矩阵，A^TA可逆
$\boldsymbol{b}$在子空间$\mathcal{M} = \mathcal{R}(A)$上的投影为

$$\boldsymbol{p} = A\hat{\boldsymbol{x}} = A\left(A^TA\right)^{-1}A^T\boldsymbol{b}$$

正交投影矩阵

$$P_A = P_{\mathcal{R}(A)} = A\left(A^TA\right)^{-1}A^T$$

注意： $\boldsymbol{p}$是$\mathcal{M}$中距离$\boldsymbol{b}$最近的向量，即
$\| \boldsymbol{b} - \boldsymbol{p} \| \le \| \boldsymbol{b} - \boldsymbol{v} \|, \forall \boldsymbol{v} \in \mathcal{R}(A)$

回顾例子：矩阵列空间上的正交投影

$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3]$. 求子空间$\mathcal{R}(A)$上的正交投影矩阵。

注意$\mathcal{R}(A) = Span(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2) = Span(\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_3) = Span(\boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3)$

(a) 使用列满秩矩阵$B = [\boldsymbol{a}_1 \ \ \boldsymbol{a}_2]$计算, $P_{\mathcal{R}(A)} = P_{\mathcal{R}(B)} = B\left(B^T B\right)^{-1} B^T$

(b) 使用列满秩矩阵$C = [\boldsymbol{a}_1 \ \ \boldsymbol{a}_3]$计算, $P_{\mathcal{R}(A)} = P_{\mathcal{R}(C)} = C\left(C^T C\right)^{-1} C^T$

注意$\boldsymbol{a}_1 \perp \boldsymbol{a}_3, C^T C = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$是对角阵，容易求逆！

实际上$\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_3$构成$\mathcal{R}(A)$的一组正交基（一组基，且两两正交）

因此，取子空间的一组正交基可以简化投影的计算！

回顾命题:

设$\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_n \in \mathbb{R}^m$均非零且$\boldsymbol{u}_i^T \boldsymbol{u}_j = 0, i \neq j$。

(1) $\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_n$线性无关，因此$[\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_n]$是列满秩矩阵；

(2) 设P为$\mathbb{R}^m$在子空间$Span(\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_n)$上的正交投影矩阵，则

$$P = P_{\boldsymbol{u}_1} + \cdots + P_{\boldsymbol{u}_n},$$

其中，$P_{\boldsymbol{u}_i}$为在子空间$Span(\boldsymbol{u}_i) = \mathbb{R}\boldsymbol{u}_i$上的正交投影矩阵$P_{\boldsymbol{u}_i} = \frac{\boldsymbol{u}_i \boldsymbol{u}_i^T}{\boldsymbol{u}_i^T \boldsymbol{u}_i}$。

3.2 Gram-Schmidt正交化与矩阵的QR分解

——正交投影的两个应用

主要内容：

（a） 向量组的Gram-Schmidt正交化

（b） 矩阵的QR分解

（c） QR分解的应用

（a）向量组的Gram-Schmidt正交化

向量组的一些定义：

设$\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_k$是$\mathbb{R}^m$中的向量组，如果这些向量都非零且两两正交，则称该向量组为**正交向量组。**

如果正交向量组中的向量都是单位向量，则称为**正交单位向量组。**

设$\mathcal{M}$是$\mathbb{R}^m$的子空间，如果它的一组基是正交向量组，则称之为$\mathcal{M}$的一组**正交基。**

如果一组基是正交单位向量组，则称之为$\mathcal{M}$的一组**标准正交基。**

问题：

设$\mathcal{M}$是$\mathbb{R}^m$的子空间，如何找到它的一组标准正交基?

不妨假设$\mathcal{M} = \mathcal{R}(A)$， $A \in M_{m\times n}(\mathbb{R})$

回顾第二章，我们学习了如何使用高斯消元找$\mathcal{R}(A)$一组基，

即A的列向量极大线性无关部分组

Gram-Schmidt正交化：

将线性无关向量组化为**正交单位向量组**

由此可以找到$\mathcal{M} = \mathcal{R}(A)$的一组标准正交基

Gram-Schmidt正交化：将线性无关向量组化为**正交单位向量组**

以三个线性无关的向量$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$为例：

分两步：首先化为正交向量组，然后再单位化。

Gram-Schmidt正交化：将线性无关向量组化为**正交单位向量组**

以三个线性无关的向量$\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3$为例：

分两步：首先化为正交向量组，然后再单位化。

(Ⅰ) 令$\boldsymbol{u}_1=\boldsymbol{a}_1$.

(Ⅱ) 向量$\boldsymbol{a}_2$在子空间$Span(\boldsymbol{u}_1)$上的正交投影 $=\boldsymbol{u}_1\left(\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1\right)^{-1}\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2=\dfrac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1}\boldsymbol{u}_1$

令$\boldsymbol{u}_2=\boldsymbol{a}_2-\frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1}\boldsymbol{u}_1$. $[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2]=[\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2]\begin{bmatrix}1 & \dfrac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1}\\0 & 1\end{bmatrix}$

由于$\begin{bmatrix}1 & \frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1}\\0 & 1\end{bmatrix}$可逆且$[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2]$线性无关，向量组$\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2$线性无关。

$\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_2=\boldsymbol{u}_1^T\left(\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{u}_1\frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1}\right)=0$，于是$\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2$为（非零）正交向量组。

并且$Span(\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2)=Span(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2)$.

(Ⅲ) 由于$\boldsymbol{u}_1$与$\boldsymbol{u}_2$正交，向量$\boldsymbol{a}_3$在子空间 $Span(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2)$上的正交投影为

$$P_{Span(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2)}(\boldsymbol{a}_3)=P_{Span(\boldsymbol{u}_1)}(\boldsymbol{a}_3)+P_{Span(\boldsymbol{u}_2)}(\boldsymbol{a}_3)=\boldsymbol{u}_1\frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1}+\boldsymbol{u}_2\frac{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{u}_2}.$$

令$\boldsymbol{u}_3=\boldsymbol{a}_3-P_{Span(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2)}(\boldsymbol{a}_3)=\boldsymbol{a}_3-\left(\boldsymbol{u}_1\frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1}+\boldsymbol{u}_2\frac{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{u}_2}\right)$

因此，$[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3]=[\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\boldsymbol{u}_3]\begin{bmatrix}1 & \frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1} & \frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1}\\ 0 & 1 & \frac{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{u}_2}\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$

于是$\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\boldsymbol{u}_3$线性无关，且$Span(\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3)=Span(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\boldsymbol{u}_3)$.

由于$\boldsymbol{u}_1\perp\boldsymbol{u}_2$，直接计算得到$\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_3=\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{u}_3=0$,即$\boldsymbol{u}_3\perp Span(\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2)$.

(Ⅳ) 对$\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\boldsymbol{u}_3$做单位化，得到单位正交向量组 $\boldsymbol{q}_1=\frac{\boldsymbol{u}_1}{\|\boldsymbol{u}_1\|}$，$\boldsymbol{q}_2=\frac{\boldsymbol{u}_2}{\|\boldsymbol{u}_2\|}$，$\boldsymbol{q}_3=\frac{\boldsymbol{u}_3}{\|\boldsymbol{u}_3\|}$

$$[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3] = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3]\begin{bmatrix} 1 & \frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1} & \frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1} \\ 0 & 1 & \frac{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{u}_2} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \frac{\boldsymbol{u}_i}{\|\boldsymbol{u}_i\|} = \boldsymbol{q}_i$$

$$= \underbrace{[\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3]}_{Q} \underbrace{\begin{bmatrix} \|\boldsymbol{u}_1\| & 0 & 0 \\ 0 & \|\boldsymbol{u}_2\| & 0 \\ 0 & 0 & \|\boldsymbol{u}_3\| \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & \frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1} & \frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1} \\ 0 & 1 & \frac{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{u}_2} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{R}$$

$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$构成的平行六面体的体积为$\|\boldsymbol{u}_1\| \cdot \|\boldsymbol{u}_2\| \cdot \|\boldsymbol{u}_3\|$。

小结：Gram-Schmidt正交化

线性无关组$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ ➡ 正交向量组$\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3$ ➡ 单位之间向量组$\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3$

$\forall k$，三组向量前k 个向量张成的子空间相同。并且

$[\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_k] = [\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_k]U_k, U_k$是单位上三角矩阵。

$[\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_k] = [\boldsymbol{q}_1, \dots, \boldsymbol{q}_k]R_k, R_k$是一个上三角矩阵，对角线元素都$> 0$

$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_{2,} \boldsymbol{a}_3$构成的平行六面体的体积为$\|\boldsymbol{u}_1\| \cdot \|\boldsymbol{u}_2\| \cdot \|\boldsymbol{u}_3\|$。

Gram-Schmidt正交化:

π

上面对三个向量正交化的过程可以推广到任意有限个线性无关向量

设$\boldsymbol{a}_1, \dots \boldsymbol{a}_n$为$n$个线性无关的向量。对$1 \le k \le n$，归纳定义

$$\boxed{\boldsymbol{u}_k = \boldsymbol{a}_k - \frac{\boldsymbol{u}_1^T \boldsymbol{a}_k}{\boldsymbol{u}_1^T \boldsymbol{u}_1} \boldsymbol{u}_1 - \cdots - \frac{\boldsymbol{u}_{k-1}^T \boldsymbol{a}_k}{\boldsymbol{u}_{k-1}^T \boldsymbol{u}_{k-1}} \boldsymbol{u}_{k-1}.}$$

我们有

(1) $\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_n$为非零正交向量组

(2) $\forall k, [\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_k] = [\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_k] U_k, U_k$是单位上三角矩阵

(3) $\forall k, Span(\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_k) = Span(\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_k)$.

(4) 令$\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{u}_1 / \|\boldsymbol{u}_1\|, \dots, \boldsymbol{q}_n = \boldsymbol{u}_n / \|\boldsymbol{u}_n\|$,得到单位正交向量组$\boldsymbol{q}_1, \dots, \boldsymbol{q}_n$.

且有$\forall k, [\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_k] = [\boldsymbol{q}_1, \dots, \boldsymbol{q}_k] R_k$,其中$R_k$是上三角矩阵，对角线元素都$> 0$

例:

$A=[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3]=\begin{bmatrix}2&-1&0\\-1&2&-1\\0&-1&2\end{bmatrix}$.对向量组$\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3$做$Gram-Schmidt$正交化.

$$\boldsymbol{u}_1=\boldsymbol{a}_1=\begin{bmatrix}2\\-1\\0\end{bmatrix},\|\boldsymbol{u}_1\|=\sqrt{2^2+(-1)^2+0^2}=\sqrt{5}.$$

$$\boldsymbol{u}_2=\boldsymbol{a}_2-\frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1}\boldsymbol{u}_1=\begin{bmatrix}3/5\\6/5\\-1\end{bmatrix},\|\boldsymbol{u}_2\|=\sqrt{(3/5)^2+(6/5)^2+(-1)^2}=\sqrt{14/5}.$$

$$\boldsymbol{u}_3=\boldsymbol{a}_3-\frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1}u_1-\frac{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{u}_2}\boldsymbol{u}_2=\begin{bmatrix}2/7\\4/7\\6/7\end{bmatrix},\|\boldsymbol{u}_3\|=\sqrt{(2/7)^2+(4/7)^2+(6/7)^2}=\sqrt{8/7}.$$

$$\boldsymbol{q}_1=\frac{\boldsymbol{u}_1}{\|\boldsymbol{u}_1\|}=\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{bmatrix}2\\-1\\0\end{bmatrix},\boldsymbol{q}_2=\sqrt{5/14}\begin{bmatrix}3/5\\6/5\\-1\end{bmatrix},\boldsymbol{q}_3=\sqrt{7/8}\begin{bmatrix}2/7\\4/7\\6/7\end{bmatrix}.$$

于是

$Q = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3]$

$$R = \begin{bmatrix} \|\boldsymbol{u}_1\| & 0 & 0 \\ 0 & \|\boldsymbol{u}_2\| & 0 \\ 0 & 0 & \|\boldsymbol{u}_3\| \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1} & \frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1} \\ 0 & 1 & \frac{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{u}_2} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{5} & -4\sqrt{5}/5 & 1/\sqrt{5} \\ 0 & \sqrt{14/5} & -\sqrt{14/5} \times 8/7 \\ 0 & 0 & \sqrt{8/7} \end{bmatrix}$$

$A = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3] = QR$

$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$构成的平行六面体的体积为$\sqrt{5}\sqrt{14/5}\sqrt{8/7} = 4$

命题:

设$\mathcal{M}$是$\mathbb{R}^m$的子空间, 则$\mathcal{M}$存在一组标准正交基.

证明:

取$\mathcal{M}$的任意一组基, 通过Gram-Schmidt正交化化为**正交单位向量组**. 这个正交单位向量组是$\mathcal{M}$的一组标准正交基.

命题:

设$\mathcal{M}, \mathcal{N}$是$\mathbb{R}^m$的子空间, 如果$\mathcal{M} \subseteq \mathcal{N}$, 则$\mathcal{M}$的任意一组标准正交基都可以扩充成$\mathcal{N}$的一组标准正交基.

（b）矩阵的QR分解：

Q : 正交矩阵，列正交矩阵

R : 上三角矩阵

回顾正交矩阵:

n 阶方阵Q称为正交矩阵，如果$Q^TQ = QQ^T = I_n$.

$$Q = [\boldsymbol{q}_1, \dots, \boldsymbol{q}_n], Q^T = \begin{bmatrix} \boldsymbol{q}_1^T \\ \vdots \\ \boldsymbol{q}_n^T \end{bmatrix}.$$

$$\left(Q^TQ\right)_{ij} = \boldsymbol{q}_i^T\boldsymbol{q}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, i = j; \\ 0, i \neq j. \end{cases}$$

正交矩阵的等价描述：

Q可逆，且$Q^{-1} = Q^T$

Q^T是正交矩阵

Q的列向量组成$\mathbb{R}^n$的一组标准正交基

Q的行向量转置后组成$\mathbb{R}^n$的一组标准正交基

Q为保矩变换，即$\|Q\boldsymbol{x}\| = \|\boldsymbol{x}\|, \forall \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

Q为保内积变换，即$(Q\boldsymbol{x})^T Q\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{y}, \forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^n$

列正交矩阵

定义：

矩阵$Q \in M_{m\times n}(\mathbb{R})$如果满足$Q^TQ = I_n$，则称为**列正交矩阵。**

$Q = [\boldsymbol{q}_1, \dots, \boldsymbol{q}_n]$，$Q^TQ = I_n$说明：

Q为列正交矩阵当且仅当Q的列向量组构成$\mathbb{R}^m$的一个正交单位向量组。

列满秩矩阵A的QR分解：

$A = QR$， Q**列正交矩阵**，R对角线元素**均为正数**的上三角矩阵

本质：

A的列向量做Gram-Schmidt正交化的矩阵描述

列满秩矩阵的QR分解：
设$A \in M_{m\times n}(\mathbb{R})$为列满秩矩阵，则存在唯一的列正交矩阵$Q \in M_{m\times n}(\mathbb{R})$与对角线元素为正数的$n$阶上三角矩阵$R$使得$A = QR$.
存在性：以$n = 3$为例。设矩阵$A = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3]$为列满秩矩阵。
$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$线性无关，由Gram-Schmidt正交化：

$$A = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3] = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3]\begin{bmatrix} 1 & \dfrac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1} & \dfrac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1} \\ 0 & 1 & \dfrac{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{u}_2} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$= [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \boldsymbol{q}_3]\begin{bmatrix} \|\boldsymbol{u}_1\| & 0 & 0 \\ 0 & \|\boldsymbol{u}_2\| & 0 \\ 0 & 0 & \|\boldsymbol{u}_3\| \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & \dfrac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1} & \dfrac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1} \\ 0 & 1 & \dfrac{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{u}_2} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

令$Q=[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3]$,$R=\begin{bmatrix}\|\boldsymbol{u}_1\| & 0 & 0\\ 0 & \|\boldsymbol{u}_2\| & 0\\ 0 & 0 & \|\boldsymbol{u}_3\|\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & \frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1} & \frac{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_1^T\boldsymbol{u}_1}\\ 0 & 1 & \frac{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{u}_2^T\boldsymbol{u}_2}\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$. $A=QR$.

由于$\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3$为正交单位向量组，$Q$为列正交矩阵；$R$为对角线元素均为正数的上三角矩阵。

实际上，列满秩矩阵的QR分解就是矩阵列向量Gran-Schmidt正交化过程的矩阵描述

唯一性:

如果A为可逆方阵，$A=QR=Q'R'$.则$Q'^TQ=R'R^{-1}$

Q'^TQ为正交矩阵，$R'R^{-1}$为对角线元素均为正数的上三角矩阵。

因此，$R'R^{-1}$上三角矩阵且列向量组构成正交单位向量组。

$R'R^{-1}$一定是单位阵。因此, $Q=Q',R=R'$.

一般情形QR分解的唯一性: 以$n=3$为例

从另一个角度计算R：用$\mathcal{R}(A)$的标准正交基$[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3]$表出$[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3]$:

$[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3]$=$[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3]R$

(1) 由于$Span(\boldsymbol{a}_1)=Span(\boldsymbol{q}_1)$, $\boldsymbol{a}_1$等于$\boldsymbol{a}_1$向$Span(\boldsymbol{q}_1)$的投影

$$\boldsymbol{a}_1=\boldsymbol{q}_1\frac{\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_1}{\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{q}_1}=(\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_1)\boldsymbol{q}_1.$$

(2) 由于$\boldsymbol{a}_2\in Span(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2)$，$\boldsymbol{a}_2$等于$\boldsymbol{a}_2$向$Span(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2)$的投影，又由于$\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2$正交，

$$\boldsymbol{a}_2=P_{Span(\boldsymbol{q}_1)}(\boldsymbol{a}_2)+P_{Span(\boldsymbol{q}_2)}(\boldsymbol{a}_2)=\boldsymbol{q}_1\frac{\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{q}_1}+\boldsymbol{q}_2\frac{\boldsymbol{q}_2^T\boldsymbol{a}_2}{\boldsymbol{q}_2^T\boldsymbol{q}_2}=\boldsymbol{q}_1(\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_2)+\boldsymbol{q}_2(\boldsymbol{q}_2^T\boldsymbol{a}_2).$$

(3) 类似地，由于$\boldsymbol{a}_3\in Span(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3)$,且$\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3$正交

$$\boldsymbol{a}_3=P_{Span(\boldsymbol{q}_1)}(\boldsymbol{a}_3)+P_{Span(\boldsymbol{q}_2)}(\boldsymbol{a}_3)+P_{Span(\boldsymbol{q}_3)}(\boldsymbol{a}_3)=\boldsymbol{q}_1(\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_3)+\boldsymbol{q}_2(\boldsymbol{q}_2^T\boldsymbol{a}_3)+\boldsymbol{q}_3(\boldsymbol{q}_3^T\boldsymbol{a}_3)$$

(4)因此，我们得到

$$[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3]=[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3]\begin{bmatrix}\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_3\\ 0 & \boldsymbol{q}_2^T\boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{q}_2^T\boldsymbol{a}_3\\ 0 & 0 & \boldsymbol{q}_3^T\boldsymbol{a}_3\end{bmatrix}=QR.$$

若有$A=QR=Q'R'$

对角线元素均为正数的上三角矩阵

$$[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3]=[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\boldsymbol{q}_3]\begin{bmatrix}\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_3\\ 0 & \boldsymbol{q}_2^T\boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{q}_2^T\boldsymbol{a}_3\\ 0 & 0 & \boldsymbol{q}_3^T\boldsymbol{a}_3\end{bmatrix}=[\boldsymbol{q}_1',\boldsymbol{q}_2',\boldsymbol{q}_3']\begin{bmatrix}\boldsymbol{q}_1'^T\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{q}_1'^T\boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{q}_1'^T\boldsymbol{a}_3\\ 0 & \boldsymbol{q}_2'^T\boldsymbol{a}_2 & \boldsymbol{q}_2'^T\boldsymbol{a}_3\\ 0 & 0 & \boldsymbol{q}_3'^T\boldsymbol{a}_3\end{bmatrix}$$

比较第一列$\boldsymbol{q}_1(\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_1)=\boldsymbol{q}_1'(\boldsymbol{q}_1'^T\boldsymbol{a}_1)$，其中$\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_1$和 $\boldsymbol{q}_1'^T\boldsymbol{a}_1$为正数，$\boldsymbol{q}_1$和$\boldsymbol{q}_1'$为单位向量，

于是$\boldsymbol{q}_1=\boldsymbol{q}_1'$

比较第二列$\boldsymbol{q}_1(\boldsymbol{q}_1^T\boldsymbol{a}_2)+\boldsymbol{q}_2(\boldsymbol{q}_2^T\boldsymbol{a}_2)=\boldsymbol{q}_1'(\boldsymbol{q}_1'^T\boldsymbol{a}_1)+\boldsymbol{q}_2'(\boldsymbol{q}_2'^T\boldsymbol{a}_2)$，得到$\boldsymbol{q}_2(\boldsymbol{q}_2^T\boldsymbol{a}_2)=\boldsymbol{q}_2'(\boldsymbol{q}_2'^T\boldsymbol{a}_2)$

由于$\boldsymbol{q}_2^T\boldsymbol{a}_2$和$\boldsymbol{q}_2'^T\boldsymbol{a}_2$为正数，$\boldsymbol{q}_2$和$\boldsymbol{q}_2'$为单位向量，得到$\boldsymbol{q}_2=\boldsymbol{q}_2'$

同理，我们可以得到$\boldsymbol{q}_3=\boldsymbol{q}_3'$

小结：Gram-Schmidt正交化与列满秩矩阵的QR分解

Gram-Schmidt正交化:

线性无关向量组 ➡ 正交单位向量组

(列满秩)矩阵的QR分解:

列满秩矩阵 ➡ 列正交矩阵×上三角矩阵(对角线元素>0)

实际上，矩阵的QR分解对$m \times n$阶矩阵A（$m \geq n$）都可以进行。

$A = QR$, Q为$m \times n$阶列正交矩阵， R为具有非负对角元的n阶上三角矩阵。详见教材定理3.2.10。

我们只考虑列满秩矩阵

（c）QR分解的应用

回顾命题:

设$\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_n \in \mathbb{R}^m$为正交单位向量组

设P为$\mathbb{R}^m$在子空间$Span(\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_n)$上的正交投影矩阵，则

$$P = P_{\boldsymbol{u}_1} + \cdots + P_{\boldsymbol{u}_n} = \boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_1^T + \cdots + \boldsymbol{u}_n\boldsymbol{u}_n^T = [\boldsymbol{u}_1, \dots, \boldsymbol{u}_n]\begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_1^T \\ \vdots \\ \boldsymbol{u}_n^T \end{bmatrix},$$

我们可以通过QR分解来思考这个问题

QR分解与正交投影矩阵：

$\mathcal{M}$为$\mathbb{R}^m$的子空间，取$\mathcal{M}$的一组基$\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_n$，构成列满秩矩阵$A = [\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_n]$

子空间$\mathcal{M}$上的正交投影$P_{\mathcal{M}} = P_A = A(A^TA)^{-1}A^T$

对A做QR分解$A = QR$ $\Longleftrightarrow$ 对向量组$\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_n$做Gram-Schmidt正交化

$$P_A = (QR)\left(R^TQ^TQR\right)^{-1}R^TQ^T$$

$$= (QR)R^{-1}\left(R^T\right)^{-1}R^TQ^T = QQ^T$$

另一种理解角度：由于向量组$\boldsymbol{a}_1, \dots, \boldsymbol{a}_n$与$\boldsymbol{q}_1, \dots, \boldsymbol{q}_n$线性等价（$Q = [\boldsymbol{q}_1, \dots, \boldsymbol{q}_n]$）

我们有：$\mathcal{R}(A) = \mathcal{R}(Q)$

于是，$P_A = P_Q = Q\underbrace{\left(Q^TQ\right)}_{I_n}{}^{-1}Q^T = QQ^T$

QR分解在解方程上的应用：

求解方程$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$.

假设A为方阵且有QR分解，则方程组转化为

$QR\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$

于是，$R\boldsymbol{x} = Q^{-1}\boldsymbol{b}$.

由于$\boldsymbol{Q}$为正交矩阵，$\boldsymbol{Q^{-1} = Q^{T}}$,

因此, $R\boldsymbol{x} = Q^{T}\boldsymbol{b}$. R为上三角矩阵，方程容易求解

正交矩阵的优势：相当于一般矩阵求逆正交矩阵只需取转置，计算容易！