

作者	生姜 DrGinger
脚本	生姜 DrGinger
视频	崔崔 CuiCui
开源学习资源	https://github.com/Visualize-ML
平台	https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang https://space.bilibili.com/3546865719052873 https://space.bilibili.com/513194466

9.3 正交矩阵性质



本节你将掌握的核心技能：

- ▶ 正交矩阵：方阵的逆等价于其转置。
- ▶ 正交矩阵的列向量、行向量都构成规范正交基。
- ▶ 矩阵乘法不同视角展开正交矩阵的格拉姆矩阵。
- ▶ 正交矩阵的规范正交基保持向量长度、夹角不变。
- ▶ 正交矩阵使求逆和投影计算变得简单且稳定。
- ▶ 半正交矩阵、正交矩阵关系。
- ▶ 伪逆是对非方阵或不可逆矩阵的一种“广义逆”。

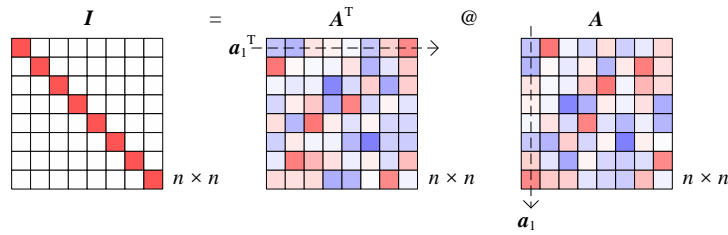
本节介绍正交矩阵的各种性质，内容过于“硬核”；这也是，为什么我们先用前两节做铺垫的原因。请大家务必掌握前两节内容，特别是几何视角理解正交矩阵之后，再学习本节。本节用到了前文各种线性代数工具，比如矩阵乘法第一、第二视角，格拉姆矩阵，逆矩阵，矩阵转置，正交投影，行列式，规范正交基，分块矩阵乘法等。

定义

如果实数 $n \times n$ 方阵 A 是正交矩阵，当且仅当

$$A^T A = A A^T = I \quad (1)$$

图 1 所示为 $A^T @ A = I$ 对应的热图， $A^T @ A$ 是矩阵 A 的格拉姆矩阵。

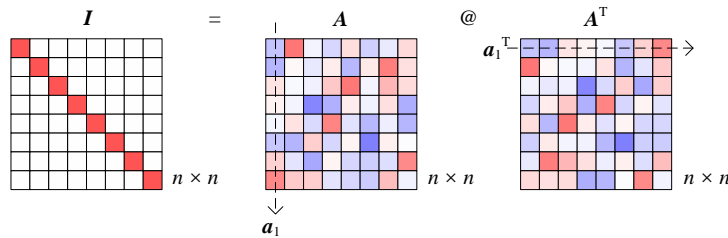
图 1. $A^T @ A = I$

(1) 还告诉我们 A 的逆矩阵等于它的转置矩阵

$$A^{-1} = A^T \quad (2)$$

正交矩阵这个特性让求逆变得特别方便。

此外, (1) 说明 A 和 A^T 都是正交矩阵, 具体如图 2 所示。 $A @ A^T$ 是矩阵 A^T 的格拉姆矩阵。

图 2. $A @ A^T = I$

下面让我们用本书前文介绍的矩阵乘法不同展开视角来分析图 1、图 2 对应的矩阵乘法。

矩阵乘法第一视角展开 $A^T @ A = I$

让我们先用矩阵乘法第一视角——内积视角——展开 $A^T @ A = I$, 即

$$A^T A = \begin{bmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ \vdots \\ a_n^T \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1^T @ a_1 & a_1^T @ a_2 & \cdots & a_1^T @ a_n \\ a_2^T @ a_1 & a_2^T @ a_2 & \cdots & a_2^T @ a_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n^T @ a_1 & a_n^T @ a_2 & \cdots & a_n^T @ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad (3)$$

我们也可以把 (3) 写成内积形式 (即内积视角)

$$A^T A = \begin{bmatrix} a_1 \cdot a_1 & a_1 \cdot a_2 & \cdots & a_1 \cdot a_n \\ a_2 \cdot a_1 & a_2 \cdot a_2 & \cdots & a_2 \cdot a_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n \cdot a_1 & a_n \cdot a_2 & \cdots & a_n \cdot a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad (4)$$

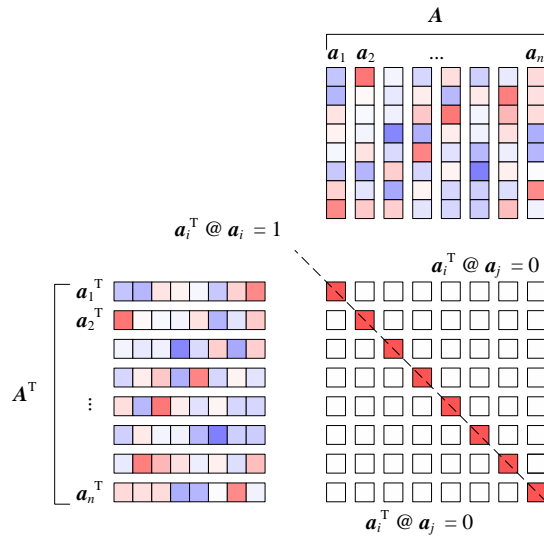
图 3. $A^T @ A = I$, 矩阵乘法第一视角 (内积视角)

图 3 中主对角线元素为 1, 这说明正交矩阵的**列向量**均为单位向量 (方向向量), 向量长度 (大小、模、 L^2 范数、欧几里得范数) 为 1, 即

$$a_i^T @ a_i = a_i \cdot a_i = \langle a_i, a_i \rangle = \|a_i\|_2^2 = 1 \quad (5)$$

图 3 中非主对角线元素为 0, 这说明正交矩阵的**列向量**两两正交, 即

$$a_i^T @ a_j = a_j^T @ a_i = a_i \cdot a_j = a_j \cdot a_i = \langle a_i, a_j \rangle = \langle a_j, a_i \rangle = 0 \quad (6)$$

其中, i 不等于 j 。

综上, 正交矩阵 A **列向量**均为单位向量, 且两两正交。

矩阵乘法第二视角展开 $A^T @ A = I$

再用矩阵乘法第二视角——外积视角——展开 $A^T @ A = I$, 即

$$A^T A = \begin{bmatrix} a^{(1)T} & a^{(2)T} & \dots & a^{(n)T} \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} a^{(1)} \\ a^{(2)} \\ \vdots \\ a^{(n)} \end{bmatrix} = a^{(1)T} @ a^{(1)} + a^{(2)T} @ a^{(2)} + \dots + a^{(n)T} @ a^{(n)} = I \quad (7)$$

显然, A 的行向量都是非零向量, 因此, $a^{(i)T} @ a^{(i)}$ 也是秩一矩阵。

此外, $a^{(i)T} @ a^{(i)}$ 为对称矩阵, 即满足

$$\left(a^{(i)} @ a^{(i)T} \right)^T = a^{(i)T} @ a^{(i)} \quad (8)$$

如图 4 所示, n 个秩一矩阵之和为单位矩阵。

根据本章前两节内容，图 4 中每个秩一矩阵，即 $\mathbf{a}^{(i)\text{T}} @ \mathbf{a}^{(i)}$ ，都是投影矩阵。 $(\mathbf{a}^{(i)\text{T}} @ \mathbf{a}^{(i)}) @ \mathbf{x}$ 就是向量 \mathbf{x} 朝 $\mathbf{a}^{(i)\text{T}}$ 的正交投影。

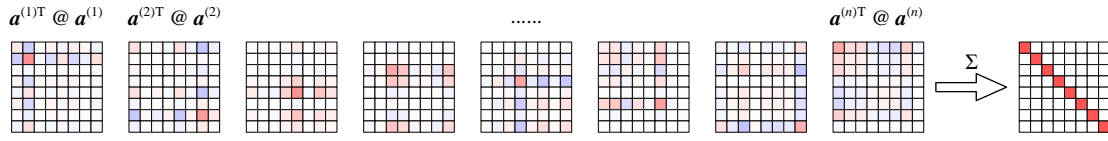


图 4. $\mathbf{A}^{\text{T}} @ \mathbf{A} = \mathbf{I}$ ，矩阵乘法第二视角 (外积视角)

矩阵乘法第一视角展开 $\mathbf{A} @ \mathbf{A}^{\text{T}} = \mathbf{I}$

对于矩阵乘法 $\mathbf{A} @ \mathbf{A}^{\text{T}} = \mathbf{I}$ ，让我们也先用矩阵乘法第一视角——内积视角——展开，即

$$\mathbf{A} \mathbf{A}^{\text{T}} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{(1)} \\ \mathbf{a}^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{a}^{(n)} \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{(1)\text{T}} & \mathbf{a}^{(2)\text{T}} & \dots & \mathbf{a}^{(n)\text{T}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{(1)} @ \mathbf{a}^{(1)\text{T}} & \mathbf{a}^{(1)} @ \mathbf{a}^{(2)\text{T}} & \dots & \mathbf{a}^{(1)} @ \mathbf{a}^{(n)\text{T}} \\ \mathbf{a}^{(2)} @ \mathbf{a}^{(1)\text{T}} & \mathbf{a}^{(2)} @ \mathbf{a}^{(2)\text{T}} & \dots & \mathbf{a}^{(2)} @ \mathbf{a}^{(n)\text{T}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{a}^{(n)} @ \mathbf{a}^{(1)\text{T}} & \mathbf{a}^{(n)} @ \mathbf{a}^{(2)\text{T}} & \dots & \mathbf{a}^{(n)} @ \mathbf{a}^{(n)\text{T}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (9)$$

把 (9) 写成内积形式 (即内积视角)

$$\mathbf{A} \mathbf{A}^{\text{T}} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{(1)} \cdot \mathbf{a}^{(1)} & \mathbf{a}^{(1)} \cdot \mathbf{a}^{(2)} & \dots & \mathbf{a}^{(1)} \cdot \mathbf{a}^{(n)} \\ \mathbf{a}^{(2)} \cdot \mathbf{a}^{(1)} & \mathbf{a}^{(2)} \cdot \mathbf{a}^{(2)} & \dots & \mathbf{a}^{(2)} \cdot \mathbf{a}^{(n)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{a}^{(n)} \cdot \mathbf{a}^{(1)} & \mathbf{a}^{(n)} \cdot \mathbf{a}^{(2)} & \dots & \mathbf{a}^{(n)} \cdot \mathbf{a}^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (10)$$

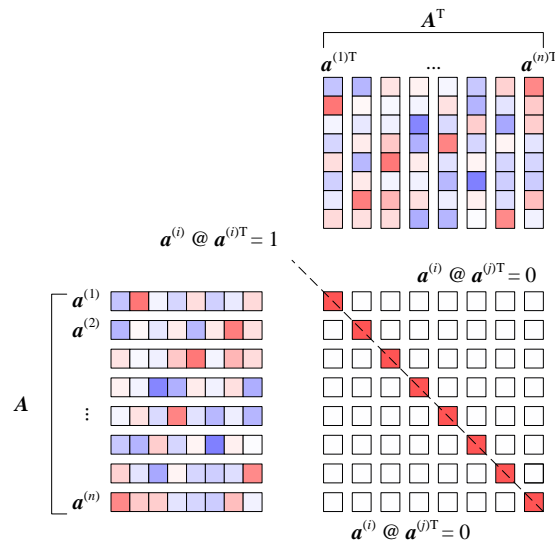


图 5. $\mathbf{A}^{\text{T}} @ \mathbf{A} = \mathbf{I}$ ，矩阵乘法第一视角 (内积视角)

图 5 中主对角线元素为 1，这说明正交矩阵 \mathbf{A} 的**行向量**均为单位向量 (方向向量)，向量长度 (大小、模、 L^2 范数、欧几里得范数) 为 1，即

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

$$\mathbf{a}^{(i)} @ \mathbf{a}^{(i)\top} = \mathbf{a}^{(i)} \cdot \mathbf{a}^{(i)} = \langle \mathbf{a}^{(i)}, \mathbf{a}^{(i)} \rangle = \|\mathbf{a}^{(i)}\|_2^2 = 1 \quad (11)$$

图 5 中非主对角线元素为 0，这说明正交矩阵的**行向量**两两正交，即

$$\mathbf{a}^{(i)} @ \mathbf{a}^{(j)\top} = \mathbf{a}^{(j)} @ \mathbf{a}^{(i)\top} = \mathbf{a}^{(i)} \cdot \mathbf{a}^{(j)} = \mathbf{a}^{(j)} \cdot \mathbf{a}^{(i)} = \langle \mathbf{a}^{(i)}, \mathbf{a}^{(j)} \rangle = \langle \mathbf{a}^{(j)}, \mathbf{a}^{(i)} \rangle = 0 \quad (12)$$

其中， i 不等于 j 。

综上，正交矩阵 A **行向量** 均为单位向量，且两两正交。

矩阵乘法第二视角展开 $A @ A^\top = I$

矩阵乘法第二视角——外积视角——展开 $A @ A^\top = I$ ，即

$$AA^\top = [\mathbf{a}_1 \quad \mathbf{a}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{a}_n] @ \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^\top \\ \mathbf{a}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n^\top \end{bmatrix} = \mathbf{a}_1 @ \mathbf{a}_1^\top + \mathbf{a}_2 @ \mathbf{a}_2^\top + \cdots + \mathbf{a}_n @ \mathbf{a}_n^\top = I \quad (13)$$

A 列向量都是非零向量，因此， $\mathbf{a}_i @ \mathbf{a}_i^\top$ 为秩一矩阵。

此外， $\mathbf{a}_i @ \mathbf{a}_i^\top$ 为对称矩阵，满足

$$(\mathbf{a}_i @ \mathbf{a}_i^\top)^\top = \mathbf{a}_i @ \mathbf{a}_i^\top \quad (14)$$

如图 6 所示， n 个秩一矩阵之和为单位矩阵。每个秩一矩阵也都是投影矩阵。

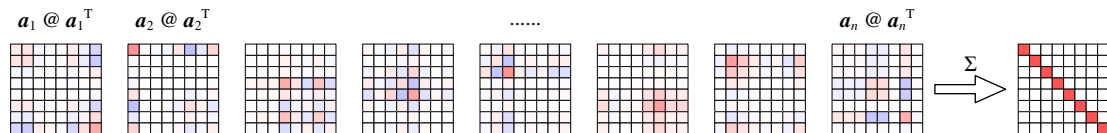


图 6. $A @ A^\top = I$ ，矩阵乘法第二视角（外积视角）

行列式绝对值为 1：面积保持不变

如果矩阵 A 为正交矩阵，它的行列式为 ± 1 。证明也很简单，具体如下

$$\det(A)^2 = \det(A^\top) \det(A) = \det(A^\top A) = \det(I) = 1 \quad (15)$$

本书前文提过，单位矩阵、旋转矩阵、置换矩阵、镜像矩阵，以及它们的组合都是正交矩阵。

显然单位矩阵满足 (1)，即

$$I^\top I = II^\top = I \quad (16)$$

比如，

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^\top @ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (17)$$

单位矩阵的行列式为 1。

平面 (绕原点) 逆时针旋转矩阵也满足 (1)

$$\begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}^T @ \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (18)$$

上式旋转矩阵的行列式为 1。

可以这样理解，交换单位矩阵的行或列，我们便得到置换矩阵。矩阵乘法中，置换矩阵的作用是调换行或列。置换矩阵也是正交矩阵，如下例

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^T @ \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (19)$$

上式置换矩阵的行列式为-1。

⚠ 注意，置换矩阵的行列式可以是-1，也可以是 1；取决于置换次数的奇偶数。这也告诉我们正交矩阵的行列式可以是 1，也可以是-1。

镜像矩阵也是正交矩阵，比如

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^T @ \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (20)$$

⚠ 注意，镜像矩阵的行列式也是-1。

规范正交基

既然 A 和 A^T 都是正交矩阵， A 和 A^T 也都是规范正交基。

首先， A 的列向量线性组合 $\text{span}(a_1, a_2, \dots, a_n)$ 张成 \mathbb{R}^n 。

用前两节的思路，给定 n 维列向量 x ，如下乘法代表 x 向 A 的列向量分别投影，再求和

$$Ix = AA^T x = (a_1 @ a_1^T + a_2 @ a_2^T + \dots + a_n @ a_n^T) x = (a_1 @ a_1^T) @ x + (a_2 @ a_2^T) @ x + \dots + (a_n @ a_n^T) @ x \quad (21)$$

图 6 中每个秩一矩阵，即 $a_i @ a_i^T$ ，都是正交投影矩阵。

$(a_i @ a_i^T) @ x$ 就是向量 x 朝 a_i 的正交投影。

类似地， A^T 的列向量线性组合 $\text{span}(a^{(1)T}, a^{(2)T}, \dots, a^{(n)T})$ 也张成 \mathbb{R}^n 。请大家试着解释如下等式

$$Ix = A^T A x = (a^{(1)T} @ a^{(1)}) @ x + (a^{(2)T} @ a^{(2)}) @ x + \dots + (a^{(n)T} @ a^{(n)}) @ x \quad (22)$$

图 4 中每个秩一矩阵，即 $a^{(i)T} @ a^{(i)}$ ，也都是投影矩阵。 $(a^{(i)T} @ a^{(i)}) @ x$ 就是向量 x 朝 $a^{(i)T}$ 的正交投影。

保持向量长度不变

对任意 n 维向量 x ， Ax 的模等于 x 的模，即

$$\|Ax\| = \|x\| \quad (23)$$

本 PDF 文件为作者草稿，发布目的为方便读者在移动终端学习，终稿内容以清华大学出版社纸质出版物为准。

版权归清华大学出版社所有，请勿商用，引用请注明出处。

代码及 PDF 文件下载：<https://github.com/Visualize-ML>

本书配套微视频均发布在 B 站——生姜 DrGinger：<https://space.bilibili.com/513194466>

欢迎大家批评指教，本书专属邮箱：jiang.visualize.ml@gmail.com

证明很简单，具体如下

$$\|Ax\|^2 = (Ax)^T (Ax) = x^T \underset{I}{A^T A} x = x^T x = \|x\|^2 \quad (24)$$

以旋转为例，如图 7 所示，几何角度来看，旋转不会改变向量的长度。

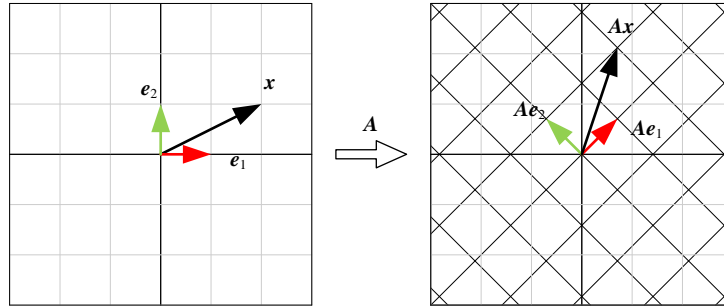


图 7. 正交变换不改变向量长度

对任意 n 维向量， $A^T x$ 的模等于 x 的模，即

$$\|A^T x\| = \|x\| \quad (25)$$

? 请大家自行证明 (25)，并解释几何角度意味着什么。

保持角度与内积不变

如果 A 为正交矩阵，对两个 n 维向量 x, y ， Ax, Ay 的夹角等于 x, y 夹角。

证明也很简单，我们已经知道 Ax 的模等于 x 的模， Ay 的模等于 y 的模。只需要证明 Ax, Ay 的内积等于 x, y 的内积，即

$$(Ax) \cdot (Ay) = x \cdot y \quad (26)$$

用矩阵乘法计算上述内积

$$(Ax)^T @ (Ay) = x^T @ y \quad (27)$$

整理使得证

$$(Ax)^T @ (Ay) = x^T \underset{I}{A^T A} y = x^T y \quad (28)$$

如图 8 所示，几何角度来看，正交变换不会改变向量之间夹角。

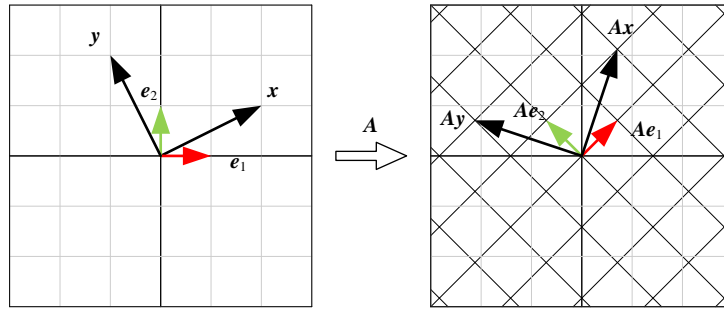


图 8. 正交变换不改变向量之间夹角

正交矩阵的连乘仍然是正交矩阵

如果 A_1 、 A_2 都是正交矩阵，则

$$(A_1 A_2)^T @ (A_1 A_2) = A_2^T A_1^T A_1 A_2 = A_2^T A_2 = I \quad (29)$$

同样

$$(A_1 A_2) @ (A_1 A_2)^T = A_1 \underbrace{A_2 A_2^T}_{I} A_1^T = A_1 A_1^T = I \quad (30)$$

这意味着“旋转 → 镜像”、“置换 → 镜像”、“旋转 → 置换 → 镜像”等等复合几何变换矩阵也都是正交矩阵。

半正交矩阵

一个非方阵 A_1 ，满足

$$A_1^T A_1 = I \quad (31)$$

但不满足

$$A_1 A_1^T = I \quad (32)$$

我们称其为半正交 (semi-orthogonal matrix)。这个矩阵的列向量也构成规范正交基。

实际上，图 1 中的矩阵 A 任意去掉若干列剩下的矩阵就是半正交矩阵 A_1 ，具体如图 9 所示。

⚠ 注意，删除的列向量不必连续。

图 9. 正交矩阵删去若干列得到半正交矩阵

如图 10 所示， \mathbf{A} 矩阵取消的部分 (\mathbf{A}_2) 和保留的子矩阵 (\mathbf{A}_1) 张成的空间互为正交补。

把 \mathbf{A} 写成 $[\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2]$ ，根据本书前文介绍的分块矩阵乘法，矩阵乘法 $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ 可以展开

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^T \mathbf{A} &= [\mathbf{A}_1 \quad \mathbf{A}_2]^T [\mathbf{A}_1 \quad \mathbf{A}_2] \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1^T \\ \mathbf{A}_2^T \end{bmatrix} [\mathbf{A}_1 \quad \mathbf{A}_2] = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1^T \mathbf{A}_1 & \mathbf{A}_1^T \mathbf{A}_2 \\ \mathbf{A}_2^T \mathbf{A}_1 & \mathbf{A}_2^T \mathbf{A}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{I} \end{bmatrix}\end{aligned}\quad (33)$$

上式中， $\mathbf{A}_1^T \mathbf{A}_1$ 、 $\mathbf{A}_2^T \mathbf{A}_2$ 均为半正交矩阵的格拉姆矩阵。

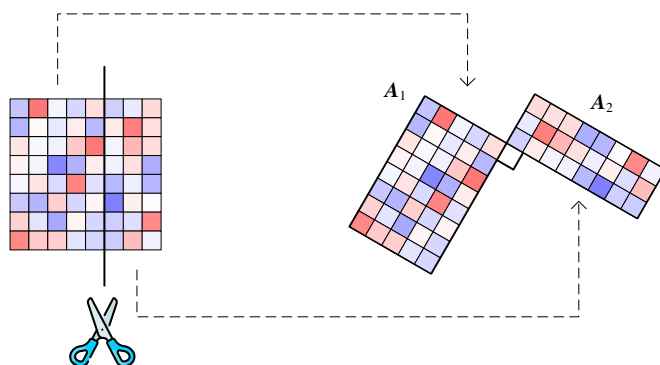


图 10. 张成的空间互为正交补

举个例子，给定 3×2 矩阵 \mathbf{A}

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\quad (34)$$

再计算 (34) 的 $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\quad (35)$$

结果为单位矩阵。这意味着 \mathbf{A} 的列向量均为单位向量，并且两两正交。

再计算 (34) 的 $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$

$$\mathbf{A} \mathbf{A}^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\quad (36)$$

这个结果不是单位矩阵。

因此， \mathbf{A} 是半正定矩阵， \mathbf{A} 的列向量为规范正交基；但是， \mathbf{A} 不是正定矩阵。

也请大家注意，如果矩阵 \mathbf{A} 满足 $\mathbf{A} \mathbf{A}^T = \mathbf{I}$ ，但是不满足 $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}$ ，这意味着矩阵 \mathbf{A} 的行向量构成规范正交基。有些时候，我们管这个矩阵 \mathbf{A} 也叫做半正定矩阵。

举个例子，比如 2×3 矩阵 A

$$A = \begin{bmatrix} 4/5 & 0 & 3/5 \\ -3/5 & 0 & 4/5 \end{bmatrix} \quad (37)$$

再计算 (37) 的 $A^T A$

$$A^T A = \begin{bmatrix} 4/5 & -3/5 \\ 0 & 0 \\ 3/5 & 4/5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4/5 & 0 & 3/5 \\ -3/5 & 0 & 4/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (38)$$

结果不是单位矩阵。

再计算 (37) 中 AA^T

$$AA^T = \begin{bmatrix} 4/5 & 0 & 3/5 \\ -3/5 & 0 & 4/5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4/5 & -3/5 \\ 0 & 0 \\ 3/5 & 4/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (39)$$

这个结果是单位矩阵。

这意味着 A 的行向量均为单位向量，并且两两正交。

因此， A 也可以叫做半正定矩阵， A 的行向量为规范正交基；但是， A 不是正定矩阵。

一般矩阵的正交投影

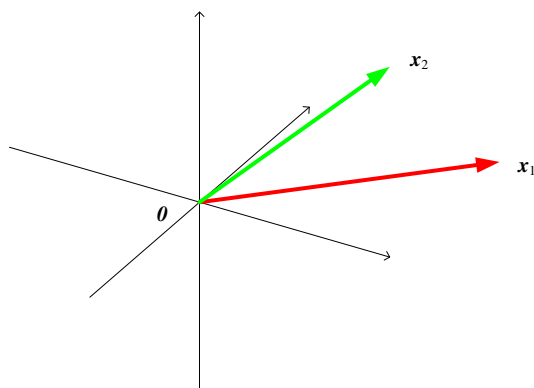
我们这么“渴望”正交矩阵，是因为在处理正交投影问题时，一般矩阵的运算很麻烦！

下面让我们举个例子看一下。

给定如下两个三维列向量

$$\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (40)$$

如图 11 所示，显然 \mathbf{x}_1 、 \mathbf{x}_2 不共线，非正交基 $[\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2]$ 在三维空间张成平面 $\text{span}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 。

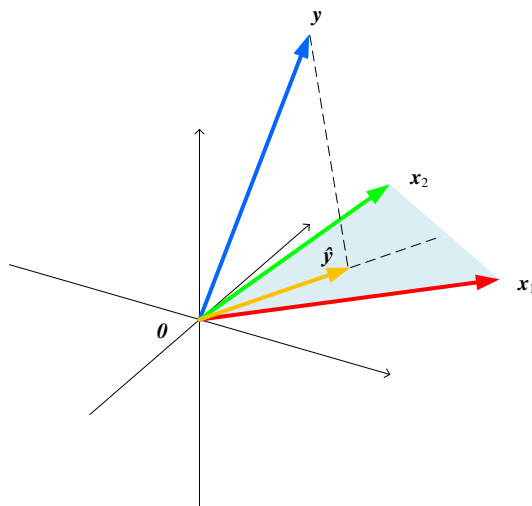
图 11. x_1 、 x_2 具体位置

再给定三维列向量 y

$$y = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (41)$$

如图 12 所示，向量 y 不在平面 $\text{span}(x_1, x_2)$ 上。

向量 y 向 $\text{span}(x_1, x_2)$ 正交投影，结果为 \hat{y} 。 \hat{y} 显然在 $\text{span}(x_1, x_2)$ 平面上！

图 12. y 向 $\text{span}(x_1, x_2)$ 平面投影

由于 $[x_1, x_2]$ 是 $\text{span}(x_1, x_2)$ 的非正交基；也就是说， \hat{y} 可以写成 x_1 、 x_2 的线性组合

$$\hat{\mathbf{y}} = b_1 \mathbf{x}_1 + b_2 \mathbf{x}_2 = b_1 \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix} + b_2 \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (42)$$

想求得 $\hat{\mathbf{y}}$ ，我们就需要计算 b_1 、 b_2 。

把 (42) 写成矩阵乘法形式

$$\hat{\mathbf{y}} = \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{X}} \underbrace{\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ 2 \end{bmatrix} \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{b} = \mathbf{X}\mathbf{b} \quad (43)$$

矩阵 \mathbf{X} 为非方阵，显然不可逆！

让我们想想其他办法！

如图 13 所示，向量 \mathbf{y} 可以正交分解成两部分：

a) $\hat{\mathbf{y}}$ ，在 $\text{span}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 平面上；

b) $\boldsymbol{\varepsilon}$ ，垂直于 $\text{span}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 。

$\boldsymbol{\varepsilon}$ 为 \mathbf{y} 、 $\hat{\mathbf{y}}$ 两者之差

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b} \quad (44)$$

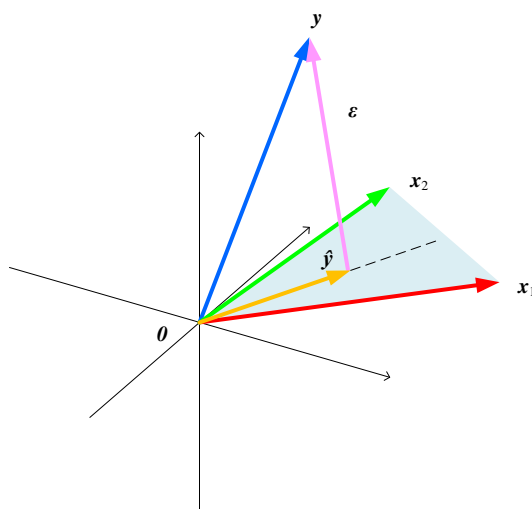


图 13. \mathbf{y} 正交分解成两部分

让我们从 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 入手！

既然， $\boldsymbol{\varepsilon}$ 垂直于 $\text{span}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ ， $\boldsymbol{\varepsilon}$ 必然分别垂直于 \mathbf{x}_1 、 \mathbf{x}_2 ，于是有

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1^T @ \boldsymbol{\varepsilon} &= 0 \\ \mathbf{x}_2^T @ \boldsymbol{\varepsilon} &= 0 \end{aligned} \quad (45)$$

把这两个式子合并

$$\begin{bmatrix} \mathbf{x}_1^T \\ \mathbf{x}_2^T \end{bmatrix} @ \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{X}^T \boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{0} \quad (46)$$

将 (44) 带入 (46)

$$\mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\mathbf{b}) = \mathbf{0} \quad (47)$$

整理上式得到

$$\mathbf{X}^T \mathbf{y} = \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{b} \quad (48)$$

上式实际上就是在 $\mathbf{y} = \mathbf{X}\mathbf{b}$ 等式两侧左边分别乘 \mathbf{X}^T 。

由于 \mathbf{X} 列满秩 (列向量不共线), $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 这个格拉姆矩阵可逆, 因此

$$\mathbf{b} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (49)$$

实际上, 如图 14 所似乎, $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$ 叫**伪逆** (pseudo-inverse), 也叫**广义逆** (generalized inverse)。

⚠ 注意, 本书前文提过矩阵逆存在 $(\mathbf{A}\mathbf{B})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$ 这一性质; 等式成立的前提是 \mathbf{A} 、 \mathbf{B} 均可逆。(49) 中的矩阵 \mathbf{X} 一般为细高矩阵, 显然不可逆。

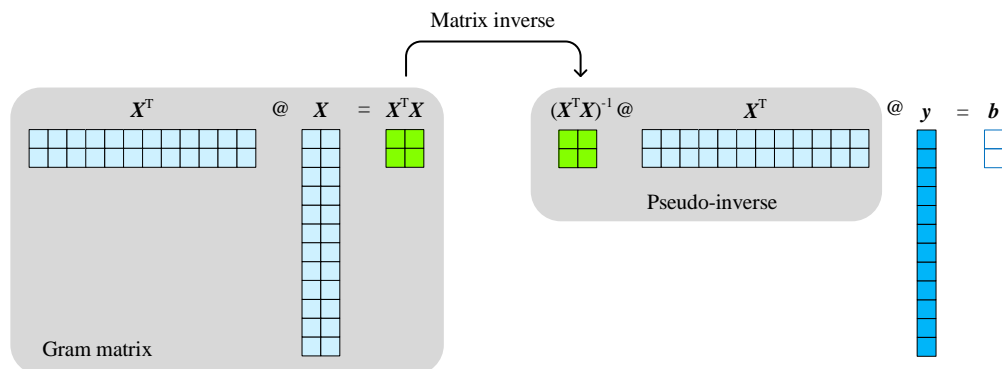


图 14. 计算 \mathbf{b}

简单来说, 伪逆是对非方阵 (比如 \mathbf{X}) 或不可逆矩阵的一种“广义逆”, 用于在无法直接求逆时近似求解。

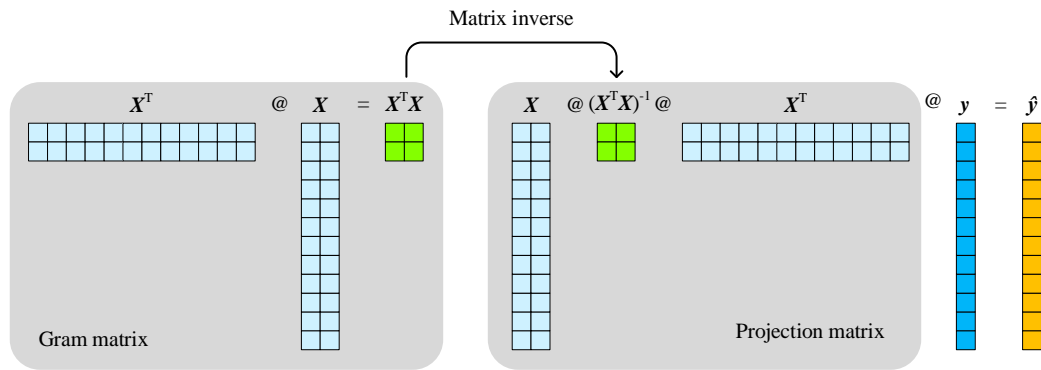
⚠ 必须强调一点, 只有 \mathbf{X} 为列满秩时, $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 才存在逆。

这样就求得 \mathbf{y} 在 $\text{span}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 平面上的投影结果 $\hat{\mathbf{y}}$ 可以写成

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (50)$$

其中, $\mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$ 就是 $\hat{\mathbf{y}}$ 向 \mathbf{X} 列项构造的向量空间正交投影的投影矩阵。

上式中, $\mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$ 常被称作**帽子矩阵** (hat matrix)。

图 15. 计算 \hat{y}

$X(X^T X)^{-1} X^T$ 是**幂等矩阵** (idempotent matrix)。

本书前文提过，投影矩阵也是幂等矩阵；幂等矩阵与自身相乘仍等于自身，即

$$\left(X (X^T X)^{-1} X^T \right)^2 = X \underbrace{(X^T X)^{-1} X^T X}_{I} (X^T X)^{-1} X^T = X (X^T X)^{-1} X^T \quad (51)$$

半正交矩阵的正交投影

如果我们在 $\text{span}(x_1, x_2)$ 平面找到一个规范正交基，它们同样张成 $\text{span}(x_1, x_2)$ 平面的话，完成上述投影运算便“易如反掌”！

通过某个特殊的方法，我们还真找到了一个规范正交基

$$Q_1 = [q_1 \quad q_2] = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & \sqrt{6}/6 \\ \sqrt{2}/2 & -\sqrt{6}/6 \\ 0 & \sqrt{6}/3 \end{bmatrix} \quad (52)$$

如图 16 所示，列向量 q_1 、 q_2 张成的平面 $\text{span}(q_1, q_2)$ 等价于 $\text{span}(x_1, x_2)$ 。

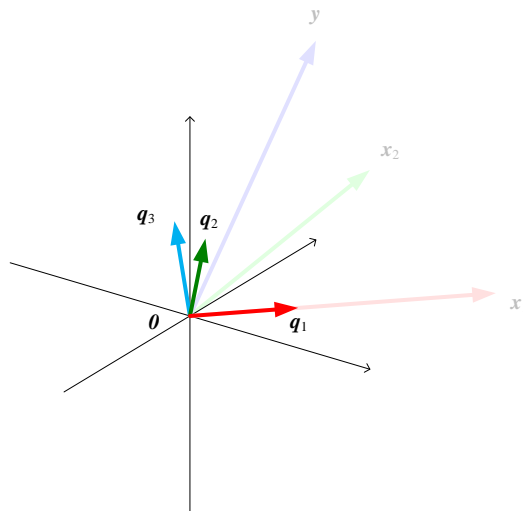



图 16. 规范正交基 $[q_1, q_2, q_3]$

 $\text{span}(q_1, q_2)$ 为什么等价 $\text{span}(x_1, x_2)$? 我们如何计算得到 q_1, q_2 ? 这些问题将在下一节得到解答。

列向量 q_1, q_2 都在 $\text{span}(x_1, x_2)$ 平面上; q_1, q_2 均为单位向量, 且正交。因此, $[q_1, q_2]$ 为规范正交基。

这也告诉我们, (52) 中 Q_1 是半正交矩阵, 即满足 $Q_1^T Q_1 = I$ 。

用 Q_1 替换 (50) 中的 X , 我们可以得到

$$\begin{aligned}\hat{y} &= Q_1 \underbrace{(Q_1^T Q_1)^{-1}}_I Q_1^T y \\ &= Q_1 Q_1^T y\end{aligned}\quad (53)$$

把 Q_1 写成 $[q_1, q_2]$, 展开上式矩阵乘法

$$\begin{aligned}\hat{y} &= Q_1 Q_1^T y \\ &= [q_1 \quad q_2] \begin{bmatrix} q_1^T \\ q_2^T \end{bmatrix} y \\ &= (q_1 @ q_1^T + q_2 @ q_2^T) y \\ &= q_1 @ q_1^T y + q_2 @ q_2^T y\end{aligned}\quad (54)$$

这相当于 y 向 q_1, q_2 分别正交投影, 然后再合成!

半正交矩阵 Q_1 的 $Q_1^T Q_1 = I$ 这个性质起到了至关重要的作用!

细心的读者可能已经发现, 撑起三维空间需要三根线性无关的“棍子”。


而撑起三维空间的规范正交基要求三个“棍子”的长度为 1, 且两两正交。

现在有了正交单位向量 q_1, q_2 , 还缺一根 q_1, q_2 和均正交的单位向量, 我们管它叫 q_3 。

而 q_3 可以用下式求解

$$q_3 @ q_3^T = I - q_1 @ q_1^T - q_2 @ q_2^T \quad (55)$$

显然, q_3 为 $\text{span}(q_1, q_2)$ 平面法向量; 这也说明 q_3 平行图 13 中的 ε 。

 大家很快就会发现, 以上这个算例, 实际上给格拉姆-施密特正交化、QR 分解、线性回归这三个话题做铺垫! 格拉姆-施密特正交化, 便是获得本例中 q_1, q_2, q_3 的方法!

怎么获得正交矩阵?

既然正交矩阵 (甚至半正交矩阵) 有这么多“优异”的特性, 该如何获得正交矩阵呢?

本书后续介绍 QR 分解、谱分解、奇异值分解都会得到正交矩阵。

 注意, 此处大家不需要掌握这几个矩阵分解, 本书后续会展开讲解这些矩阵分解。

用 QR 分解, 任意实数矩阵 A 可以分解为

$$A = QR \quad (56)$$

其中， Q 为正交矩阵。

⚠ 注意，有些场合 Q 为半正交矩阵。



下一节先介绍的格拉姆-施密特正交化本质上就是把 A 的列向量转换成 Q 的列向量的过程。

用谱分解，对称矩阵 A 可以分解为

$$A = V\Lambda V^T \quad (57)$$

其中， V 为正交矩阵。

用奇异值分解，任意实数矩阵 A 可以分解为

$$A = USV^T \quad (58)$$

其中， U 、 V 均为正交矩阵。

⚠ 注意，有些场合 U 、 V 也可以是半正交矩阵。

这三个矩阵分解都是本书后续要重点介绍的话题；显然，正交矩阵在其中扮演重要角色。这就是我们要拿出来三节内容介绍正交矩阵的原因。



请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

Q1. 如下矩阵 A 均为正交矩阵，请分别用矩阵乘法第一、第二视角展开 $A^T A = A A^T = I$ 。

▶ $\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$

Q2. 如下矩阵 A 均为半正交矩阵，请分别用矩阵乘法第一、第二视角展开 $A^T A = I$ 、 $A A^T = I$ 。

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$

► $\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

Q3. 给定如下三个列向量，请大家计算 \mathbf{a}_3 向 $\text{span}(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$ 正交投影的坐标。

$$\mathbf{a}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{a}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Q4. 请用伪逆求解如下线性方程组。

► $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

► $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$

► $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$