詳細解答

STEP II 1987，第 9 題

純數學 • 正交矩陣

> **STEP II 1987，第 9 題**
>
> 繼續閱讀之前，請先看題目（原題為英文）。題目載於 STEP Support Programme 的試題資料庫：
>
> step.maths.org/questions/87-s2-q9

關鍵思路

把 $\mathbf{B}$ 轉置（transpose）之後，條件 $\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B} = \mathbf{I}$ 的最左和最右兩端各有一個逆矩陣（inverse matrix）。由於這些逆矩陣本身可逆（invertible），我們可以左乘 $\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$、右乘 $\mathbf{I} - \mathbf{A}$，而不會損失任何資訊。餘下的是一條關於 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ 的多項式恆等式，幾乎立刻就能化簡。要小心的是每一步都必須可以逆推，因為我們要證明的是「若且僅若」（if and only if）。

解答

我們會用到以下標準結果：

- $(\mathbf{XY})^{\mathrm{T}} = \mathbf{Y}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}$，而且轉置是線性（linear）的，所以 $(\mathbf{I} \pm \mathbf{A})^{\mathrm{T}} = \mathbf{I} \pm \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$（因為 $\mathbf{I}^{\mathrm{T}} = \mathbf{I}$）；
- 若 $\mathbf{X}$ 是非奇異（non-singular）的，則 $\mathbf{X}^{\mathrm{T}}$ 也是，並且 $(\mathbf{X}^{-1})^{\mathrm{T}} = (\mathbf{X}^{\mathrm{T}})^{-1}$。

第 1 步：$\mathbf{B}$ 的轉置。 由於 $\mathbf{I} - \mathbf{A}$ 是非奇異的，它的轉置 $\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ 也是非奇異的。把乘積的次序倒轉，

$$\mathbf{B}^{\mathrm{T}} = \left((\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\right)^{\mathrm{T}}(\mathbf{I} + \mathbf{A})^{\mathrm{T}} = (\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}})^{-1}(\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}).$$

因此

$$\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B} = (\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}})^{-1}\,(\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} + \mathbf{A})\,(\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}.$$

第 2 步：以可逆推的方式消去逆矩陣。 設 $\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$、$\mathbf{Q} = \mathbf{I} - \mathbf{A}$ 及 $\mathbf{M} = (\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} + \mathbf{A})$，於是 $\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{Q}^{-1}$。我們斷言

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{I} \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{M} = \mathbf{P}\mathbf{Q}.$$

（⇒）左乘 $\mathbf{P}$、右乘 $\mathbf{Q}$：$\mathbf{M} = \mathbf{PIQ} = \mathbf{PQ}$。
（⇐）左乘 $\mathbf{P}^{-1}$、右乘 $\mathbf{Q}^{-1}$：$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{P}\mathbf{Q}\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{I}$。

> ? **想一想** 為甚麼不能只是「兩邊同乘」就了事？

把一條等式乘以一個矩陣，得到的必定仍是正確的等式，但這一步一般不能還原：由 $\mathbf{XY} = \mathbf{XZ}$ 不能推斷 $\mathbf{Y} = \mathbf{Z}$，除非 $\mathbf{X}$ 可逆。這裏反方向之所以成立，全因 $\mathbf{P}$ 和 $\mathbf{Q}$ 都有逆矩陣，而這正是用上「$\mathbf{I} - \mathbf{A}$ 是非奇異的」（因而 $\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ 也是）這個假設的地方。還要留意，$\mathbf{P}$ 必須保持在左邊，$\mathbf{Q}$ 必須保持在右邊，因為矩陣乘法不符合交換律（commutative）。

第 3 步：展開。 把 $\mathbf{M} = \mathbf{PQ}$ 的兩邊展開，並小心保持各因子的次序，

$$(\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} + \mathbf{A}) = \mathbf{I} + \mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A},$$
$$(\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} - \mathbf{A}) = \mathbf{I} - \mathbf{A} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}.$$

$\mathbf{I}$ 和 $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$ 這兩項在兩邊都出現，所以相減後得

$$\mathbf{M} = \mathbf{PQ} \iff 2(\mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}) = \mathbf{O} \iff \mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}} = \mathbf{O}.$$

以上每一步都可以逆推：兩邊同時加上或減去同一個矩陣，以及乘以非零純量（scalar）2 或 $\frac{1}{2}$。

結論。 把第 1 至第 3 步串連起來，每一環都是等價關係，

$$\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B} = \mathbf{I} \iff (\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} + \mathbf{A}) = (\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} - \mathbf{A}) \iff \mathbf{A} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}} = \mathbf{O},$$

這正是我們要證明的結果。用文字表達：$\mathbf{B}$ 是正交矩陣（orthogonal matrix），當且僅當 $\mathbf{A}$ 是斜對稱矩陣（skew-symmetric matrix）。

驗算

- 取 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & t \\ -t & 0 \end{pmatrix}$，它是斜對稱的。這時 $\det(\mathbf{I} - \mathbf{A}) = 1 + t^2 \neq 0$，而

  $$\mathbf{B} = \frac{1}{1+t^2}\begin{pmatrix} 1 - t^2 & 2t \\ -2t & 1 - t^2 \end{pmatrix},$$

  這是一個旋轉矩陣（rotation matrix）（代入 $t = \tan\frac{\theta}{2}$），所以一如所料 $\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B} = \mathbf{I}$。
- 1×1 的情況：$\mathbf{A} = (a)$，其中 $a \neq 1$，得 $\mathbf{B} = \left(\frac{1+a}{1-a}\right)$，而 $\mathbf{B}^2 = 1$ 迫使 $1 + a = \pm(1 - a)$，即 $a = 0$（另一個符號不可能成立）。這與 $2a = 0$ 吻合。

- 我們以精確的有理數運算測試了約 2000 個大小由 1 至 5 的隨機矩陣：每一個斜對稱的 $\mathbf{A}$ 都準確地給出 $\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B} = \mathbf{I}$，其餘的則全部不成立。

常見錯誤

- 沒有倒轉次序就寫 $\mathbf{B}^{\mathrm{T}} = (\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}})^{-1}$。（這條式子碰巧是對的，因為 $\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ 與 $(\mathbf{I} - \mathbf{A}^{\mathrm{T}})^{-1}$ 可交換，但這一點需要另行說明理由。）
- 展開 $(\mathbf{I} + \mathbf{A}^{\mathrm{T}})(\mathbf{I} + \mathbf{A})$ 時寫成 $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ 而不是 $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$。在這一題裏兩種寫法都會抵銷，但前提是兩邊的展開方式必須一致。
- 只證明了一個方向。題目要求的是「若且僅若」，所以要說明每一步為何可以逆推。

STEP 之外

映射 $\mathbf{A} \mapsto (\mathbf{I} + \mathbf{A})(\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$ 稱為凱萊變換（Cayley transform）。它把構成一個向量空間（vector space）的斜對稱矩陣，變成構成一個羣（group）的正交矩陣，從而給出旋轉的有理參數化（rational parametrisation）。（可以證明，當 $\mathbf{A}$ 是實斜對稱矩陣時，$\mathbf{I} - \mathbf{A}$ 必定可逆，而且所得到的正交矩陣恰好是那些沒有特徵值（eigenvalue）-1 的正交矩陣。）這讓我們初次窺見李羣（Lie group）與它的李代數（Lie algebra）之間的關係。想進一步了解正交矩陣和斜對稱矩陣，Strang 的 *Introduction to Linear Algebra*（線性代數入門）是很好的讀物。

Beyond STEP 詳細解答：https://beyondstep.keithmcnulty.org/zh-hant/。解答文字採用 CC0 1.0；題目本身版權屬 Cambridge University Press & Assessment 所有（©），本文件不予轉載。由機器從英文翻譯而成；尚未經審閱。