

线性代数二三事

Linear Algebra: A Few Stories

《线性代数二三事》编写人员名单

List of Contributors

Johansson

主笔

B 站: Johansson 莱茵

zhangjohnson729@gmail.com



正余弦

审核

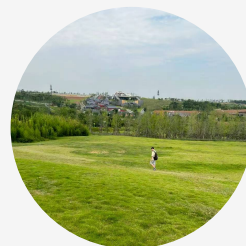
865128905@qq.com



Jiayu Wang

审核

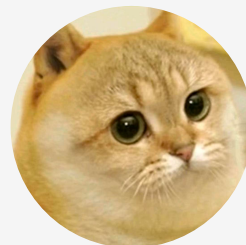
jiayuw794@gmail.com



W. Lv

审核

lwj123888thu@gmail.com



目录

1 线性方程组与向量	4
1.1 线性方程组的求解	4
1.2 向量组之间的关系	15
1.3 线性空间和向量组之间的关系	21
1.4 线性空间之间的关系	28
2 作用于线性空间之间的变换	34
2.1 线性变换和矩阵的关系	34
2.2 线性变换的函数性质	40
2.3 矩阵的乘法与线性变换的复合	45
2.4 逆矩阵与线性变换的逆变换	52
2.5 行列式变换	59
2.6 矩阵的初等变换	71
3 线性变换之间的转化	78
3.1 不同基底之间的转换	78
3.2 线性变换 (矩阵) 的特征向量与特征值	80
3.3 线性变换 (矩阵) 的对角化	88
3.4 线性递归系统	93
4 作用于内积空间的变换	101
4.1 内积空间的基本定义与性质	101
4.2 内积空间的正交性	106
4.3 矩阵的正交对角化	114
4.4 正定矩阵及矩阵的奇异值分解	122
5 标准形	126
5.1 广义特征向量	126
5.2 Jordan 标准形	131
6 线性代数与微分方程	136
6.1 常微分方程的基本理论	136
6.2 常数系数下的齐次线性系统	144
6.3 矩阵的指数与微分方程组的解	150
6.4 线性系统的稳定性与相图	158
6.5 非线性系统与线性化	168
6.6 特征函数与偏微分方程	173
7 线性回归分析初步	180
7.1 * 统计推断基础	180
7.2 线性回归与最小二乘	191
7.3 正则化与高维线性回归	201

线性方程组与向量

在线性代数中, 我愿把线性方程组称作是基础中的基础: 将线性方程组中各个未知数的系数组合在一起便构成了矩阵, 同时每一个矩阵也对应一个线性变换. 所以我认为线性代数也可以看作是一门解方程的课. 在我看来任何复杂的题目在它晦涩抽象的定义背后, 都有一个线性方程组在等待我们去探索. 只要找到这个方程组并将其求解, 我们便会得到最终的结果. 诚然, 众里寻它 (方程组) 谈何容易, 往往需要我们斩荆棘, 破巨浪, 通过对更多概念的深入学习和了解来一步步靠近真相. 最后蓦然回首, 就会发现我们想要的方程就在灯火阑珊处.

1.1 线性方程组的求解

我们知道, 二元一次方程组的解的几何意义是平面直角坐标系内两个方程对应的直线的交点. 我们有很多种方法去求出这个方程组的解, 但是当未知数的个数逐渐增多的时候, 方程组开始变得复杂且冗长, 使用传统的消元方法已经无法快速地计算出答案了. 因此, 在线性代数二三事里面的第一节内容中, 我会介绍一种独特的消元方法, 使得在求解多元一次方程组时可以快速, 准确地求出答案. 我们不妨考虑这样的 n 元一次方程组:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}.$$

在这个方程组中 $a_{ij} : 1 \leq i \leq m; 1 \leq j \leq n; b_k : 1 \leq k \leq m$ 均为常数, $x_1, x_2, \dots, x_n$ 为未知数. 如果要求解这个方程, 使用我们所熟知的代入消元法会变得十分繁琐, 我们不妨考虑把每个未知数前面所对应的系数进行整齐排列, 然后写到一个数表中, 如下图所示:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}.$$

在这个数表中, 其第 i 列正好就是原方程组中 x_i 的系数, 从第一个方程开始从上至下整齐排列. 这样的个数表我们称作是**矩阵 (Matrix)**, 通常用 A 表示, 其中 A 共有 m 行 n 列, 我们则称 A 为 m (行数) $\times$ n (列数) 矩阵, 位于该矩阵第 i 行第 j 列的元素我们写作 $(A)_{ij}$ (注意字母的顺序, 这点非常重要!). 我们同样可以将剩下的未知数 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 写进一个有 n 行和 1 列的数表中, 从上至下分别是未知数 $x_1, x_2, \dots$. 我们把形如这样的 n



行 1 列数表称作 $n \times 1$ 矩阵, 或向量. 通常我们用字母 $\mathbf{x}$ 来表示由未知数组成的向量, 即 $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$. 最后, 我们

运用同样的方法, 把 $b_1, b_2, \dots, b_m$ 按照相同的顺序写成一个 $m \times 1$ 向量, 一般用字母 $\mathbf{b}$ 来表示, 即 $\mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$.

然后, 我们考虑形如 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 的结构.

定义

定义 1.1. 设存在 $m \times n$ 矩阵 $\mathbf{A}$ 和 $k \times 1$ 向量 $\mathbf{x}$. 那么当且仅当 $k = n$ 时, 运算 $\mathbf{Ax}$ 有意义. 其运算结果为 $m \times 1$ 向量. 我们不妨设

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & a_{2n} \\ & & \vdots & \vdots & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix},$$

且 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, 那么

$$\begin{aligned} \mathbf{Ax} &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & a_{2n} \\ & & \vdots & \vdots & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = x_1 \cdot \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix} + x_2 \cdot \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ \vdots \\ a_{m2} \end{pmatrix} + \cdots + x_n \cdot \begin{pmatrix} a_{1n} \\ a_{2n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

同时, 我们设 $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ 为向量, c 为常数, 则矩阵与向量的乘法还满足以下性质:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \mathbf{Ax} + \mathbf{Ay}, \quad \mathbf{A}(c\mathbf{x}) = c\mathbf{Ax}.$$

因此不难发现, 矩阵与向量的乘法运算 $\mathbf{Ax}$ 即为把矩阵第 i 列整体当成一个向量 $\mathbf{v}_i$, 然后用该向量去乘以 $\mathbf{x}$ 中第 i 个位置的元素, 最后加和. 这也是为什么我们要强调矩阵中的列数要等于向量中的行数, 否则会有无法被分配的项或元素, 从而无法求解. 最后得到的结果 $\mathbf{b}$ 则与矩阵中的行数有关 (通过观察上述推理过程, 与我们最开始引入的方程组做一下对比, 我们是否发现二者经过运算之后完全等价?). 回到刚才所提到的 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 的模



型当中,我们可以把这个系统进一步地简化,省略 $\mathbf{x}$ 向量,写成 $\mathbf{A}|\mathbf{b}$ 的形式,即:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & \cdots & a_{mn} & b_m \end{array} \right).$$

这样一来,我们便得到了一个 $m \times (n+1)$ 的矩阵,我们用一条竖线来区分原方程 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 中等式的左边和右边.我们把形如这样的矩阵 $(\mathbf{A} | \mathbf{b})$ 称作是 $\mathbf{A}$ 的**增广矩阵 (Augmented Matrix)**.到了这一步,我们所做的全部准备工作就已经完成了,接下来我们所关心的便是如何去进行消元,从而求出原方程的解.我们在这里引入这本书里面的第一个定理: **Gauss 消元定理 (Gauss Elimination Theorem)**:

定理

定理 1.1. 将线性方程组写成形如 $\mathbf{A}|\mathbf{b}$ 的矩阵后,我们可以进行下列三种变换,使得最后方程组的解不受影响:

- ① 交换任意两行;
- ② 将一行中的所有元素全部乘以同一非零常数 k ;
- ③ 将一行中的所有元素的 k 倍加到另外一行相对应的元素上,其中 k 为任意常数.

我们通过下面例子来看一下高斯消元法是如何运作的:

$$\begin{aligned} \textcircled{1} \quad & \left(\begin{array}{cc|c} a & b & c \\ d & e & f \end{array} \right) \xrightarrow{\text{交换第一,二行}} \left(\begin{array}{cc|c} d & e & f \\ a & b & c \end{array} \right); \\ \textcircled{2} \quad & \left(\begin{array}{cc|c} a & b & c \\ d & e & f \end{array} \right) \xrightarrow{\text{第一行乘以常数 } k} \left(\begin{array}{cc|c} ka & kb & kc \\ d & e & f \end{array} \right); \\ \textcircled{3} \quad & \left(\begin{array}{cc|c} a & b & c \\ d & e & f \end{array} \right) \xrightarrow{\text{第一行对应位置的数加到第二行上}} \left(\begin{array}{cc|c} a & b & c \\ d+a & e+b & f+c \end{array} \right). \end{aligned}$$

定理 1 的第二,三条运算尤为重要.我们这样做的目的是尽可能地通过行与行之间的各种运算,从而产生更多的 0,也就是我们所谓的消元.设想经过了一些变换,方程 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 被化简成为了这样的形式:

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & 6 \end{array} \right), \quad (1.1)$$

那么这样一来,我们便可以通过观察矩阵从而直接得出原方程组的解: $x_1 = 5, x_2 = 6$. 因为矩阵的第一行其实就是方程 $1x_1 + 0x_2 = 5$; 矩阵的第二行其实就是方程 $0x_1 + 1x_2 = 6$. 形如(1.1)的矩阵也是我们在进行化简消元时所想要的结果.当然,我们需要按照一定的顺序和规则进行消元,否则可能无法得到想要的结果.

消元的目标主要是把 $\mathbf{A}$ 的部分化为更简单的阶梯形或最简行阶梯形;但每一次行变换都必须同时作用在增广矩阵的整行上,包括右端的 $\mathbf{b}$ 列.右端列不是“解”,而是常数项.最终解需要从化简后的增广矩阵中读出.消元应该从矩阵 $\mathbf{A}$ 的第 1 列开始消元,然后按顺序依次往右.在对第 i 列进行消元时,我们的原则是将该列中从



上往下除去第 i 个元素外的其它元素化简成 0, 然后再进行下一列的消元. 那么当我们进行消元的时候, 我们怎样才能知道矩阵 A 已经化成最简形式了呢? 经过一系列初等行变换后, 如果矩阵满足以下三个条件, 我们称其为**最简行阶梯形矩阵 (Reduced Row Echelon Form)**.

定义

定义 1.2. 若 A 满足:

- ① 元素全部为零的行在矩阵的最下方;
- ② 若 A 的第 i 行中的元素不全为零, 则这一行的第一个非零元素为 1, 并且元素 1 所在的这一列的其它元素全部为 0;
- ③ 若 A 的第 i 行中的元素不全为零, 那么第一个非零元素 1 所在的列的下标应随行的下标的增大而严格增大.

我们则称 $m \times n$ 矩阵 A 为最简行阶梯矩阵.

为方便理解, 我们直接通过几个例子来对行最简形矩阵有着更加深入的理解.

例题

例题 1.1. 给出矩阵 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ 试问 A 是否为最简行阶梯矩阵?

解答 1.1. 通过观察矩阵 A , 我们需要将定义 1.2 中的三条性质全部带入矩阵中进行验证. 由于元素全部为 0 的行 (第三行) 在矩阵的最下面, 因此满足性质一; 在第一, 二行中, 从左往右第一个非零元素为 1, 并且所在列的其它元素全部为 0, 因此性质二成立; 第一行中第一个非零元素位于第 2 列; 第二行中第一个非零元素位于第 3 列, 因此现每一行中第一个非零元素所在的列标号随着行标号的增大而增大, 因此满足性质三. 故我们称 A 为最简行阶梯矩阵.

下面的几个例子同样最简行阶梯矩阵 (其中 * 代表该位置的元素可以为任何数):

$$\begin{pmatrix} 1 & * & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & * & 0 \\ 0 & 1 & * & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

下面的几个例子不是最简行阶梯矩阵:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

读者在这里应当自行验证上述这些矩阵为什么满足 (不满足) 最简行阶梯矩阵.



定义

定义 1.3. 任何一个矩阵 A 都可以通过定义 1.2 中的法则进行一定次数的运算化简, 从而得到最简行阶梯矩阵. 我们将矩阵 A 的最简行阶梯矩阵写作 $\mathbf{RREF}(A)$.

接下来, 我来完成一次完整的矩阵消元示范:

例题

例题 1.2. 已知矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 1 & -1 & 2 \\ 2 & 1 & -1 \end{pmatrix}$, 求 $\mathbf{RREF}(A)$.

解答 1.2. 根据消元法则, 我们应当从第一列开始消元. 在第一列中, 我们需要将位于第 2, 3 行位置的元素消去. 因此我们可以先用第二行减去第一行, 这样以来第二行第一个元素就会变成 $1 - 1 = 0$, 从而实现消元; 同时我们也可用第三行减去第一行的 2 倍实现第三行第一个元素的消元. 这个步骤我们写作 (我们为书写方便, 一般用 R_n 来指第 n 行, C_m 来指第 m 列):

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 1 & -1 & 2 \\ 2 & 1 & -1 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_2 - R_1; R_3 - 2R_1} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 1 - 1 & -1 - 2 & 2 - 2 \\ 2 - (1 \times 2) & 1 - (2 \times 2) & -1 - (2 \times 2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & -3 & -5 \end{pmatrix}.$$

经过这一步的运算, 第一列已消元完毕. 此时, 矩阵 A 是否为最简行阶梯矩阵? 如果是, 我们停止消元; 如果不是, 我们就继续进行第二列的消元, 然后依次类推, 直到所有列都消元完毕, 或者我们提前得出最简行阶梯矩阵为止. 在这里该矩阵还不为最简行阶梯矩阵 (读者应自行判断, 并给出依据), 所以我们进行第二列的消元: 在第二列中我们要消去位于第 1, 3 行位置的元素, 所以我们可以用第一行加上第二行; 同时用 2 倍的第三行减去 3 倍的第二行来实现对第二列的消元:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & -3 & -5 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_1 + R_2; 2R_3 + 3R_2} \begin{pmatrix} 1 + 0 & 2 + (-2) & 2 + 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 2 \times 0 + (3 \times 0) & 2 \times (-3) - 3 \times (-2) & 2 \times (-5) + 3 \times 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -10 \end{pmatrix}.$$

此时, 再进行第三列的消元 (A 仍不为最简行阶梯矩阵): 用第三行加上五倍的第一行:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -10 \end{pmatrix} \xrightarrow{5R_1 + R_3} \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -10 \end{pmatrix}.$$

此时, 矩阵 A 已经很像最简行阶梯矩阵了, 但是有一条性质还没有满足: 每一行中第一个非零元素不为 1, 所以我们再次进行化简, 即第一行元素同除以 5, 第二行同除以 -2, 第三行同除以 -10. 最终其最简行阶梯矩阵

即为 $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$.



在此,读者可以自行尝试去求解矩阵的最简行阶梯矩阵. 一个很好的素材便是(1.2)中的矩阵. 在最简行阶梯矩阵中,我们先笼统地引入一个非常重要的概念:

定义

定义 1.4. 定义矩阵 A 的秩 (rank) 为其最简行阶梯形矩阵中非零行的个数, 等价地, 也等于主元的个数.

定理

定理 1.2. 对任意矩阵 A 而言, $\text{rank}(A) = \text{rank}(\text{RREF}(A))$.

该定理的证明会在后面的章节涉及, 我们当下需要知道的仅仅是该定理的结论. 这个定理告诉我们使用高斯消元时得到的最简行阶梯矩阵的秩与原矩阵的秩相同.

定义

定义 1.5. 如果矩阵 A 的秩与 A 中列的数目相同, 我们称矩阵 A 是列满秩的.

满秩的概念我同样会到后续的章节中提到, 现阶段我们对满秩的定义不用做过多的理解, 只知道如何求解一个矩阵的秩, 以及如何判断该矩阵是否为满秩即可.

例题

例题 1.3. 假设矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1+2 & 1+2+3 & \cdots & \cdots & 1+2+3+\cdots+2024 \\ 2 & 2+2 & 2+2+3 & \cdots & \cdots & 2+2+3+\cdots+2024 \\ 3 & 3+2 & 3+2+3 & \cdots & \cdots & 3+2+3+\cdots+2024 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 2022 & 2022+2 & 2022+2+3 & \cdots & \cdots & 2022+2+3+\cdots+2024 \end{pmatrix}$, 试问 A 是否列满秩?

解答 1.3. 在本例题中由于矩阵过于复杂, 按照高斯消元法计算会变得非常繁琐, 所以我们直接从定义出发. 我们看到矩阵 A 由 2022 行, 2024 列组成, 根据定义, 该矩阵的秩等于其行最简形矩阵中所有非零行的数目, 因此无论如何矩阵 A 的秩无法超过 2022. 再看满秩的概念, 满秩意味着该矩阵的秩等于其矩阵的列数, 然而该矩阵有 2024 列, 大于其最大能达到的秩. 所以无论如何矩阵 A 也无法列满秩.

例题

例题 1.4. 求解由未知数 x, y, z 构成的方程组
$$\begin{cases} x + y - 2z = -3 \\ 2x + y + 2z = 0 \\ -x - y + 4z = 4 \end{cases}$$



解答 1.4. 运用前面所学的知识, 我们应该很容易能找出在这个方程组中与 A, x, b 相对应的元素, 即:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -2 \\ 2 & 1 & 2 \\ -1 & -1 & 4 \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} -3 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

随后, 我们便知道 A 的增广矩阵即

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -2 & -3 \\ 2 & 1 & 2 & 0 \\ -1 & -1 & 4 & 4 \end{array} \right).$$

随后, 我们在竖线左边部分进行消元, 使用 *Gauss* 消元法则, 先从第一列开始消元:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -2 & -3 \\ 2 & 1 & 2 & 0 \\ -1 & -1 & 4 & 4 \end{array} \right) \xrightarrow{R_2 - 2R_1; R_3 + R_1} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -2 & -3 \\ 0 & -1 & 6 & 6 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \end{array} \right);$$

注意到此时该矩阵还不为最简行阶梯矩阵, 所以继续对第二列进行消元:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -2 & -3 \\ 0 & -1 & 6 & 6 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \end{array} \right) \xrightarrow{R_1 + R_2} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 4 & 3 \\ 0 & -1 & 6 & 6 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \end{array} \right);$$

注意到此时该矩阵还不为最简行阶梯矩阵, 所以继续对第三列进行消元:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 4 & 3 \\ 0 & -1 & 6 & 6 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \end{array} \right) \xrightarrow{R_1 - 2R_3; R_2 - 3R_3} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \end{array} \right).$$

此时所有的三列全部消元完毕 (再次强调消元的时候我们只考虑对矩阵 A 中的列进行消元) 然后我们进行如下的最后一步化简:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \end{array} \right) \xrightarrow{(-1)R_2; (0.5)R_3} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -3 \\ 0 & 0 & 1 & 0.5 \end{array} \right).$$

至此, 我们已得到 $\mathbf{RREF}(A)$, 所以我们可以直接写出原方程组的解: $x = 1; y = -3; z = 0.5$.



所以不难看出, 对矩阵本身进行高斯消元和对 $\mathbf{A}|\mathbf{b}$ 进行消元所用到的方法完全一样, 只是需要注意当我们在进行消元运算时应当把 $\mathbf{b}$ 中对应的元素也考虑在内, 但消元仅限于 $\mathbf{A}$.

随后, 我们来看一下线性方程组所产生的解的情况. 我们知道一个二元一次方程组的解即为在平面内两条直线的交点, 因此研究二元一次方程组里解的个数也就等同于研究两条直线的位置关系. 如果两条直线平行且不重合, 意味着二者没有交点, 因此原方程组无解; 如果两条直线完全重合, 那么该直线上的每一个点都是满足条件的解, 此时原方程组有无穷多组解; 如果两条直线相交, 那么二者在平面直角坐标系内的唯一交点即为方程组的解, 此时原方程组有且仅有一个解. 因此我们发现, 对于二元一次方程组而言, 其解有且仅有三种情况: 无解; 有无穷多组解; 有且仅有一个解. 其实对于未知数更多的方程组而言, 该情况同样适用.

定理

定理 1.3. 对于任意一个线性方程组 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ 而言, 其解的个数有且仅有三种情况: 无解, 无穷多组解, 有且仅有一个解.

我们不难发现, 在未知数给定的情况下, 方程越少, 解的“随意性”就越高, 方程越多, 限制条件越苛刻, 解的“自由度”就越少, 如果方程数过多, 还可能会产生无解的情况. 我们之所以要进行高斯消元, 就是为了把原本复杂的方程结构得以简化, 使得我们一眼就能看出原方程中哪些方程是“多余的”, 从而大大简化我们的计算量.

假设我们有这样的一个三元一次方程组:
$$\begin{cases} x + 2y + z = 1 \\ 2x - y + 2z = 3 \\ x - 8y + z = 3 \end{cases}$$
, 我们可能会认为这个方程组有唯一解, 因为有三

个方程. 但其实这个方程有无穷多组解: 经过对这个方程组的第一列进行 Gauss 消元之后, 这个方程组可以写成形如下式的结构:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 1 \\ 0 & -5 & 0 & 1 \\ 0 & -10 & 0 & 2 \end{array} \right).$$

我们于是发现第二, 三行完全等价, 因此原方程组中看似有三个方程, 实际上对解集起作用的只有两个方程. 在这种情况下, 正如之前所讨论的情况, 这个方程组会有无穷多组解 (前提是两个平面相交). 我们继续进行消元, 得到最简行阶梯矩阵如下:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 1 & 7/5 \\ 0 & 1 & 0 & -0.2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right).$$

此时我们发现增广矩阵的第三行全部为零, 也就是说在原方程组中, 实际起作用的方程只有两个. 此时我们可以从第二行里面读出 $y = -0.2$, 但是在第一行中我们只有 $x + z = 7/5$ 这一关系. 将二者结合, 它代表了一条在 xoz 平面内的直线, 直线上的任何点均为满足条件的解. 此时原方程有无穷多组解, 我们要做的便是将解集用含参数的式子表示出来.

在增广矩阵的 RREF 中, 与主元列对应的未知数称为**前导变量 (Leading Variables)**, 与非主元列对应的未知数称为**自由变量 (Free Variables)**, 且每一个非主元列对应一个自由变量. 自由变量的个数等于未知数个数减去矩阵的秩, 即 $n - \text{rank}(\mathbf{A})$. 如果我们发现原方程组中有 n 个未知数, m 个方程, ($m < n$). 那么为了方便运算, 我们一般在矩阵中用 0 元素将行数与列数补齐. 在本题中因为第三列元素不为主元, 我们便将第三列对应的未知



数(z)选为参数,然后把其他列中的未知数用含这些参数的式子表示出来.此时我们就有: $\begin{cases} x+z=7/5 \\ y=-0.2 \end{cases}$,也

就是形如 $\begin{cases} x=-z+7/5 \\ y=-0.2 \\ z=z \end{cases}$ 的形式. 为了便于观察,我们一般把含有参数的项和常数分开,并且写成向量的形式.

同时为了防止参数 z 和原方程中的未知数发生混淆,我们往往用其他的字母(如 s, t, r, q 等)来表示参数.因此原方程组的解集如下:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7/5 \\ -0.2 \\ 0 \end{pmatrix} + s \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \text{ 其中 } s \text{ 为参数, } s \in \mathbb{R}.$$

这样一来,原方程组的解集就清晰可见了:它代表一条经过点 $(7/5, -1/5, 0)$ 的直线,并且该直线的方向向量为 $(-1, 0, 1)$.原方程组的解集即构成这条直线上所有的点.

例题

例题 1.5. 求出线性方程组 $\begin{cases} x+2y+z-w=0 \\ -x+y-2z+2w=0 \end{cases}$ 的解集.

解答 1.5. 我们直接写出相应的矩阵形式,同时将第三,四行用元素0补齐,即 $\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 2 & 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & -2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$, 经过

消元,我们得到其最简行阶梯矩阵为 $\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & \frac{5}{3} & -\frac{5}{3} & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right)$. 此时我们将 z, w (自由变量)作为参数,分别设

$z=s, w=t$, 那么我们有 $\begin{cases} x=-\frac{5}{3}s+\frac{5}{3}t \\ y=\frac{1}{3}s-\frac{1}{3}t \\ z=s \\ w=t \end{cases}$. 因此原方程组的解集为 $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ w \end{pmatrix} = s \begin{pmatrix} -\frac{5}{3} \\ \frac{1}{3} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} \frac{5}{3} \\ -\frac{1}{3} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

那么,无解的情况在矩阵里面是怎么表现出来的?

例题

例题 1.6. 求出线性方程组 $\begin{cases} x+2y+z-w=4 \\ 2x-y+2w=3 \\ 4x+3y+2z=5 \end{cases}$ 的解集.



解答 1.6. 我们直接写出相应的矩阵形式, 同时将第四行用元素 0 补齐, 即 $\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 2 & 1 & -1 & 4 \\ 2 & -1 & 0 & 2 & 3 \\ 4 & 3 & 2 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right)$. 我们对第

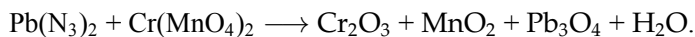
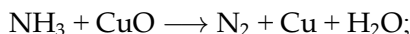
一列进行消元, 得到 $\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 2 & 1 & -1 & 4 \\ 0 & -5 & -2 & 4 & -5 \\ 0 & -5 & -2 & 4 & -9 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right)$. 此时我们注意到第二行和第三行中有形如 $-5y - 2z + 4w = -5$ 和 $-5y - 2z + 4w = -9$ 的两个平面的方程, 这两个平面相互平行, 因此没有交点, 由此也就得出原方程组无解.

至此, 我们已经学会了线性方程组的求解方法. 这一节是线性代数中的重中之重, 所以读者应做大量的练习, 让自己尽快熟能生巧.

1.1 练习

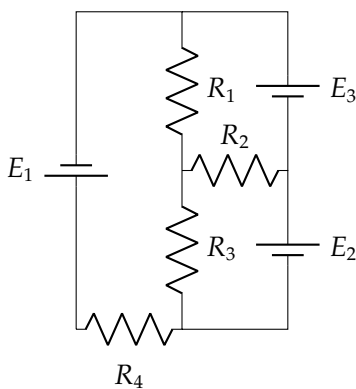
1. 设 $a \in \mathbb{R}$, 存在如下的线性方程组: $\begin{cases} x + y + 3z = a \\ ax + y + 5z = 4 \\ x + ay + 4z = a \end{cases}$ 分别找出所有满足条件的 a 的取值, 使得原方程组: ① 有唯一解; ② 有无穷多组解; ③ 无解.

2. 运用求解线性方程组的知识以及化学反应前后原子数目守恒的原则, 配平下列氧化还原反应方程式:

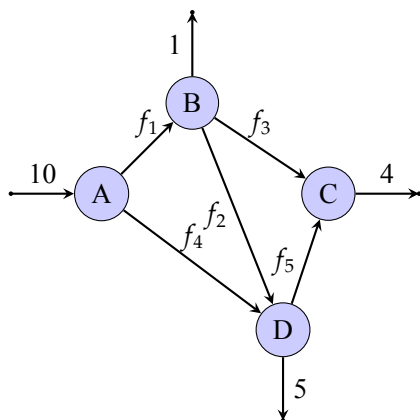


3. 设矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & a^2 \\ 1 & 1-a & 2 & 0 \\ 2 & 2-a & 6-a & 4 \end{pmatrix}$, 其中 $a \in \mathbb{R}$. 讨论 A 的秩的所有可能取值.

4. 在如下图所示的闭合电路中, 电源 E_1, E_2, E_3 的电动势均为 $1V$ 且内阻不计, 电阻 $R_1 = R_2 = R_3 = R_4 = 1\Omega$, 不考虑导线上的分压和热损失, 据此判断流经 E_1, E_2, E_3 的电流大小和方向.



5. 在如下图所示的网格中有 A, B, C, D 四个节点通过单向流连结, 由外界流入 A 节点的流量和由 B, C, D 节点流出至外界流量已知 (流量已在已在箭头上标出). 已知在此系统内部流入一节点的流量等于流出该节点的流量, 在本题中, 流量 $\tau \geq 0$.



(i) 据此求出流量 f_1, f_2, f_3, f_4, f_5 的所有可能取值;

(ii) 现规定 f_2 上的流量不得超过 3, 在此情况下可以流经 f_3, f_4 的最大流量之和是多少?



1.2 向量组之间的关系

在上一节中, 我们提出了形如 $Ax = b$ 的式子, 那么从这一节开始, 我们将从更加抽象的角度去理解这样一个式子所代表的意义. 我们曾提出过如下的运算法则:

设存在 $m \times n$ 矩阵 A 和 $k \times 1$ 向量 x , 当且仅当 $k = n$ 时, 乘法 Ax 有意义, 其结果为 $m \times 1$ 向量. 我们不妨设

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & a_{2n} \\ & & \vdots & \vdots & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}, x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix},$$

且 $Ax = b$, 那么

$$\begin{aligned} Ax &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & \cdots & a_{2n} \\ & & \vdots & \vdots & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = x_1 \cdot \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix} + x_2 \cdot \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ \vdots \\ a_{m2} \end{pmatrix} + \cdots + x_n \cdot \begin{pmatrix} a_{1n} \\ a_{2n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

我们可以发现, 在上述的表达式中矩阵 A 的每一列都可以当作一个向量看待, 我们将这些向量称作**列向量 (Column Vector)**, 这样一来, 我们就有了一种全新的书写矩阵的方式. 我们可以把矩阵写成是由若干列向量所构成的形式, 即 $A = (v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n)$. 这样一来, 我们可以将 Ax 书写成 $x_1v_1 + x_2v_2 + \cdots + x_nv_n$. 我们由此便可以引入本节的第一个重要定义:

定义

定义 1.6. 设 $v_1, v_2, \cdots, v_n$ 为行数 (维数) 相同的列向量. 如果存在另一个向量 u 和常数 $c_1, c_2, \cdots, c_n$, 使得

$$u = c_1v_1 + c_2v_2 + \cdots + c_nv_n,$$

我们则称 u 是由 $v_1, v_2, \cdots, v_n$ 所构成的一个**线性组合 (Linear Combination)**. 满足条件的所有由 $v_1, v_2, \cdots, v_n$ 构成的线性组合的集合我们记作 $\text{Span}(v_1, v_2, \cdots, v_n)$, 那么 $u \in \text{Span}(v_1, \cdots, v_n)$.

根据这个定义, 我们知道在上一页所展示的运算法则中, b 则为矩阵 A 中列向量所构成的线性组合. 我们通过观察线性组合的定义, 很容易将其与线性方程组的解所联系起来, 这种联系便是一个重要的定理:



定理

定理 1.4. 设 $A = (v_1 \cdots v_n)$, 线性方程组 $Ax = b$ 有解的充要条件为 $b \in \text{Span}(v_1, \cdots, v_n)$.

我们通过一个三元一次方程组的例子来加深我们对定理 1.4 的理解: 假设一个三元一次方程组的解集为

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = s \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} : s, t \in \mathbb{R},$$

那么我们知道, 这个解集代表一个经过原点的平面, 平面上的点即为所有满足条件的解. 因此, 这个三元一次方程组其实完全可以简化成一个方程, 那就是表示该平面的方程. 不难求出这个平面所表示的方程为 $x - y + z = 0$.

0. 根据定理 1.4, 我们知道该方程有解的充要条件是 $b \in \text{Span} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right)$, 也就是说任何在该平面以外的

的点都不是原方程组的解. 我们取在平面以外的点 $u = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, 将其带入方程 $x - y + z = 0$ 发现 $2 - 1 + 1 =$

$2 \neq 0$, 即原方程组无解. 如果我们取平面以内的任意点 $\begin{pmatrix} s+t \\ t \\ -s \end{pmatrix} : s, t \in \mathbb{R}$ 将其带入方程 $x - y + z = 0$, 则发现 $(s+t) - t - s = 0$ 成立.

我们也可以通过一个生活中的例子来理解线性组合, 在美术学中我们经常把红色, 黄色和蓝色称作是色彩的三原色. 我们可以将这三种颜色通过一定比例的混合从而得到其他的颜色. 比如绿色可以由一份蓝色和一份黄色通过均匀混合得到. 因此我们可以说绿色是由红色, 蓝色和黄色三种颜色组成的一个‘线性组合’. 之所以将红色, 黄色和蓝色称作是三原色, 是因为其中的任意一种颜色都不能由另外两种颜色混合而得到, 所以我们可以说蓝色不是由红色和黄色两种颜色组成的一个线性组合. 一种很常见的题目便是给出向量 $v_1, v_2, \cdots, v_n$, 然后我们需判断另一个向量 u 是否为这几个向量的一个线性组合. 这种题型往往可以参照线性方程组的解法, 写成矩阵的形式 $(v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n \mid u)$, 然后运用 Gauss 消元法进行求解. 如果该方程组无解, 那么 u 则不是 $v_1, \cdots, v_n$ 所组成的一个线性组合; 如果有解, 那么 u 则是 $v_1, \cdots, v_n$ 所组成的一个线性组合.

例题

例题 1.7. 已知向量 $v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, v_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, v_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$, 那么 $u = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$ 是否为 v_1, v_2, v_3 的一个线性组合?



解答 1.7. 我们重点研究线性方程组 $\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & | & 1 \\ 0 & 1 & -1 & | & 0 \\ -1 & 0 & 1 & | & 3 \end{pmatrix}$. 我们对第一列进行消元, 随后发现我们得到

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & | & 1 \\ 0 & 1 & -1 & | & 0 \\ 0 & -1 & 1 & | & 4 \end{pmatrix}.$$

注意到第二行和第三行中我们得出了无解的情况, 因此 $\mathbf{u}$ 不是 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ 的一个线性组合.

我们不妨再看一个例子:

例题

例题 1.8. 已知向量 $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\mathbf{v}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, 那么 $\mathbf{u} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$ 是否为 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ 的一个线性组合?

解答 1.8. 我们重点研究线性方程组 $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & | & 1 \\ 0 & 1 & 1 & | & 0 \\ 1 & 0 & 1 & | & 3 \end{pmatrix}$. 我们按照消元法则进行消元, 得到最后的行最简形矩阵:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & | & 2 \\ 0 & 1 & 0 & | & -1 \\ 0 & 0 & 1 & | & 1 \end{pmatrix}. \text{ 因此我们不难发现, 存在 } \mathbf{u} = 2\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_3 \text{ 的线性组合.}$$

在上面的两个例子中, 为什么在 $\mathbf{u}$ 相同的情况下, 第一个例子无法构成线性组合, 而第二个例子却可以构成线性组合呢? 我们自然而然地想到可能和 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ 的选取有关. 但是它们之间到底有着怎么样的关系? 我们又该如何更加快速地判断线性组合地存在与否呢? 那么接下来我会提出一个截止目前最为重要的一个定义:

定义

定义 1.7. 设存在维数相同的向量组 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$. 我们称该向量组彼此 **线性无关 (Linearly Independent)**, 当且仅当线性组合

$$c_1\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2 + \dots + c_n\mathbf{v}_n = \mathbf{0}$$

的唯一解是 $c_1 = c_2 = \dots = c_n = 0$. 否则, 我们称向量组彼此 **线性相关 (Linearly Dependent)**.

当我们了解这个定义之后, 再回看例上面的例子: 我们先判断例题 1.7 中 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ 彼此是否线性无关. 为了解决这个问题, 我们自然要考虑下列方程组的解:

$$c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + c_3 \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$



然后, 我们可以自然而然地把上述式子写成如下式的一个矩阵中:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \end{array} \right),$$

经过高斯消元, 我们得到其行最简形矩阵为

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right).$$

那么我们可以得到原方程组的解为 $\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = s \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} : s \in \mathbb{R}$. 因此我们看到原方程组的解集是一条经过原

点的直线, 且直线上所有的点都是满足条件的解. 这与线性无关的概念不符: 在线性无关中我们要求唯一解必须是 $c_1 = c_2 = c_3 = 0$, 但显然在此我们有无穷多组非零解, 因此 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ 线性相关. 而在例题 1.8 中, 我们可以验证向量组 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3$ 线性无关. 到了这里, 我们能否说如果这些向量彼此线性无关, 就一定能构成另外一个向量的线性组合; 如果这些向量彼此线性相关, 就一定不能构成另一个向量的线性组合呢? 非也. 这些奥秘我们会在下一节的内容中进行详细地探索, 读者到时候便会豁然开朗.

回到例题 1.7, 我们已经发现 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ 彼此线性相关, 那么我们假设存在如下的线性组合:

$$c_1 \mathbf{v}_1 + c_2 \mathbf{v}_2 + c_3 \mathbf{v}_3 = \mathbf{0}, \quad (1.3)$$

通过移项便可以得到 $c_1 \mathbf{v}_1 = -c_2 \mathbf{v}_2 - c_3 \mathbf{v}_3$.

因为我们知道原方程有无穷多组解, 那么我们可以选取满足 $c_1 \neq 0$ 的一组解. 于是我们等式两边同时除以 c_1 , 可以得到

$$\mathbf{v}_1 = -\frac{c_2}{c_1} \mathbf{v}_2 - \frac{c_3}{c_1} \mathbf{v}_3.$$

根据定义, 我们便可以推出 $\mathbf{v}_1 \in \text{Span}(\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3)$. 随后在(1.3)中我们同样可以把 $\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ 移到等式一侧, 然后任意取一组使得 c_2, c_3 不为零的解, 同样可以得到 $\mathbf{v}_2 \in \text{Span}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3); \mathbf{v}_3 \in \text{Span}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$.

值得注意的是, 在例题 1.8 中由于 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ 彼此线性无关, 因此线性组合 $c_1 \mathbf{v}_1 + c_2 \mathbf{v}_2 + c_3 \mathbf{v}_3 = \mathbf{0}$ 的唯一解是 $c_1 = c_2 = c_3 = 0$, 所以我们没有办法作上述式子里面的变形. 运用线性组合和方程组的解的关系, 我们可以得到 $\mathbf{v}_1 \notin \text{Span}(\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3); \mathbf{v}_2 \notin \text{Span}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3); \mathbf{v}_3 \notin \text{Span}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)$.

定理

定理 1.5. 设向量组 $\beta = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$, 则:

- ① 向量组 β 线性无关的充要条件是: 对任意的 $\mathbf{v}_i \in \beta$, $\mathbf{v}_i$ 均不为剩余向量的线性组合.
- ② 向量组 β 线性相关的充要条件是: 存在 $\mathbf{v}_i \in \beta$, 使得 $\mathbf{v}_i$ 为剩余向量的线性组合.



这个定理的证明在上面就有所涉及, 只不过上一页中我着重讨论了只有三个向量的情况. 我们发现如果向量 v_1, v_2, v_3 彼此线性相关, 这便意味着其中一个或多个向量都是剩下两个向量构成的线性组合. 这也告诉我们这三个向量所表达的内容和删去一个特定向量之后所剩的两个向量所表达的内容相同.

定理

定理 1.6. 设向量组 $\beta = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 彼此线性无关, 则由这些列向量构成的矩阵 $A = \begin{pmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_n \end{pmatrix}$ 满秩.

推论

推论 1.1. 在任意矩阵 A 中, A 的秩等于该矩阵中彼此线性无关的列向量的最大数目.

其实我们也可以把矩阵 A 中的每一行当成一个**行向量 (Row Vectors)**, 这样一来矩阵也可以记作

$$A = \begin{pmatrix} \text{---} & v_1 & \text{---} \\ & \vdots & \\ \text{---} & v_n & \text{---} \end{pmatrix}.$$

正是因为有这两种不同的表达方式, 当我们在谈论矩阵中的向量时一定要说明是行向量还是列向量. 我们回想矩阵的秩的定义, 在上一节里面我们只给出了一个笼统的定义, 那么现在我们可以用本节的知识来重新定义矩阵的秩: 矩阵的秩为该矩阵中线性无关的列向量的最大数目, 这也被称作是矩阵的**列秩 (Column Rank)**. 我们可以类比这个定义再给出一个**行秩 (Row Rank)**的定义: 我们定义矩阵的行秩等于该矩阵中线性无关的行向量的最大数目.

定理

定理 1.7. 对于任意矩阵 A 而言, 其行秩与列秩相等.

所以通常我们直接用矩阵的秩来泛指行秩与列秩.

随后, 我们还想再研究一种特殊的方程组, 即 $Ax = 0$. 形如这样的方程组我们将其称作**线性齐次方程组 (Linear Homogeneous System)**. 那么很显然, $x = 0$ 为该方程组的一个解. 我们称其为**平凡解 (Trivial Solution)**, 其余的解我们称之为**非平凡解 (Non-trivial Solution)**.

定理

定理 1.8. 若线性齐次方程组 $Ax = 0$ 有唯一解 $x = 0$, 则矩阵 A 中的列向量彼此线性无关.

证明. 假设存在 $y \neq 0$, 使得 $Ay = 0$. 设 $A = (v_1 \ \cdots \ v_n)$, $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \neq 0$. 那么不失一般性地讲, 我们不妨设 $y_1 \neq 0$. 这样一来我们有

$$Ay = y_1 v_1 + \cdots + y_n v_n = 0,$$



即

$$v_1 = -\frac{y_2}{y_1}v_2 - \cdots - \frac{y_n}{y_1}v_n.$$

因此 $v_1 \in \text{Span}(v_2, \cdots, v_n)$, 则 A 中的列向量彼此线性相关. ■

例题

例题 1.9. 假设向量组 $v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ k \\ -1 \end{pmatrix}, v_3 = \begin{pmatrix} k \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 彼此线性无关, 求满足条件的所有 k 的取值.

解答 1.9. 我们先构造由 v_1, v_2, v_3 组成的线性齐次方程组 $c_1v_1 + c_2v_2 + c_3v_3 = 0$. 由于这三个向量彼此线性无关, 因此根据定义我们得知该方程组的唯一解为 $c_1 = 0; c_2 = 0, c_3 = 0$. 于是我们可以把原方程组写成如下所示

的方程组: $\begin{cases} c_1 + kc_3 = 0 \\ kc_2 + c_3 = 0 \\ c_1 - c_2 = 0 \end{cases}$, 再将其写进矩阵中, 有 $\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & k & 0 \\ 0 & k & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \end{array} \right)$. 首先若 $k = 0$, 不难发现 v_1, v_2, v_3 彼此

线性无关. 当 $k \neq 0$ 时利用 Gauss 消元法, 我们最终得到

$$\left(\begin{array}{ccc|c} \frac{1}{k} - k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k(1 - k^2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - k^2 & 0 \end{array} \right).$$

根据定义, 我们应满足 $\frac{1}{k} - k \neq 0; k(1 - k^2) \neq 0; 1 - k^2 \neq 0$, 因此我们解得 $k \neq 1, -1$.

例题

例题 1.10. 设向量 u, v, w 彼此线性无关, 证明向量 $u; u + v; u + v + w$ 彼此同样线性无关.

解答 1.10. 首先根据定义, 我们知道

$$c_1u + c_2v + c_3w = 0 \quad (1.4)$$

的唯一解是 $c_1 = c_2 = c_3 = 0$. 我们随后假设存在这样的线性齐次方程: $\lambda_1u + \lambda_2(u + v) + \lambda_3(u + v + w) = 0$, 将该方程整理, 移项之后我们得到

$$(\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3)u + (\lambda_2 + \lambda_3)v + \lambda_3w = 0. \quad (1.5)$$

通过将(1.4), (1.5)二式对比, 我们发现二者除了向量之前的系数不同之外其余均等价. 又因为 u, v, w 彼此线性无关, 因此这些系数只能取零. 所以我们有这样的线性齐次方程组:

$$\begin{cases} \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 0 \\ \lambda_2 + \lambda_3 = 0 \\ \lambda_3 = 0 \end{cases} \quad \text{解得} \quad \begin{cases} \lambda_1 = 0 \\ \lambda_2 = 0 \\ \lambda_3 = 0 \end{cases}.$$

因此, 线性齐次方程 $\lambda_1u + \lambda_2(u + v) + \lambda_3(u + v + w) = 0$ 有唯一平凡解, 因此 $u, u + v, u + v + w$ 彼此线



性无关.

1.2 练习

1. (单项选择题) 假设向量组 x, y, z 线性无关, 则下列选项中线性无关的向量组为

(A) $x, x - y, x - y - z$

(B) $x + y, y + z, x + z$

(C) $x - y, y - z, z - x$

(D) $x + y, y - z, x + 2z$

2. 给出向量 $v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$, 试写出任意一个向量 v_3 , 使得 v_1, v_2, v_3 线性无关.

3. 证明 $1; 1+x; 1+x+x^2; 1+x+x^2+x^3; \cdots; 1+x+\cdots+x^n$ 彼此线性无关.

1.3 线性空间和向量组之间的关系

在上一节中, 我们重点学习了向量组之间的关系, 也就由此引出了这样的话题: 向量从哪里来? 我们知道在平面向量的知识中, 向量代表平面直角坐标系内的一条有向线段, 因此平面向量的载体便是平面直角坐标系, 我们也把平面直角坐标系所构成的全部区域称为是一个**线性空间 (又称作向量空间 (Vector Space))**. 我们可以把线性空间理解为满足一定条件的向量所构成的集合. 那么这些向量之间要满足什么条件呢?

定义

定义 1.8. 设 V 为由向量构成的集合, $\mathbb{F}$ 为数域 (目前阶段我们默认 $\mathbb{F} = \mathbb{R}$). 如果对于任意的 $u, v, w \in V; a, b \in \mathbb{F}$, 有

(A1) $u + v = v + u$

(A2) $(u + v) + w = u + (v + w)$

(A3) $0 \in V$, 使得对任意的 $v \in V, 0 + v = v$

(A4) $v + (-v) = 0$

(M1) $v \cdot 1 = 1 \cdot v = v$

(M2) $(ab)v = a(bv)$

(M3) $a(u + v) = au + av$

(M4) $(a + b)v = av + bv$

我们则称 V 是在数域 $\mathbb{F}$ 上的线性空间.



其中 $A1 - A4; M1 - M4$ 便是判断 V 是否为线性空间的“八大条”. 其中我们对 $(A3)$ 稍作强调: $\mathbf{0}$ 为 V 中的零向量, 我们通常记作 $\mathbf{0}_V$. 我们会在本书中重点研究两到三种线性空间 (这些线性空间的数域目前统一确定为 $\mathbb{R}$).

- 第一种是线性空间 $\mathbb{R}^n$, 该线性空间代表了全部 n 维向量所构成的集合, 比如 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3; \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$ 等.
- 第二种是线性空间 $\mathbb{P}_n(x)$, 即为全部不超过次数 n 的多项式所构成的集合, 比如 $x^2 - 3x + 4 \in \mathbb{P}_2(x)$, $x^5 + x^2 + 2 \in \mathbb{P}_5(x)$ 等.
- 第三种是线性空间 M_{mn} , 即为全部 $m \times n$ 矩阵所构成的集合, 比如 $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \end{pmatrix} \in M_{23}$ 等.

读者如果感兴趣可以利用定义中的四条性质来自行验证为什么 $\mathbb{R}^n, \mathbb{P}_n(x), M_{mn}$ 满足定义在实数域上的线性空间. 通过上面的例子, 我们发现线性空间里面的元素无穷无尽. 那么对于给定的线性空间, 我们如何才能更好地研究其性质呢? 我们知道线性空间中既然有这么多的向量, 那么一定会有一些线性相关的元素存在吧? 比如在 $\mathbb{P}_2(x)$ 中, 我们知道 $x^2 + 2x + 1$ 与 $2x^2 + 4x + 2$ 彼此线性相关. 如同这样的例子不胜枚举, 那么我们是否可以进一步地“压缩”线性空间里面的向量个数, 使得线性空间的结构可以大幅简化呢?

定义

定义 1.9. 设 V 为定义在数域 $\mathbb{F}$ 上的线性空间, $v_1, \dots, v_n \in V$. 我们称集合 $\beta = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 为线性空间 V 的一组**基底 (Basis)** 当且仅当:

- ① β 中的向量彼此线性无关;
- ② 对任意的 $u \in V$, 存在 $c_1, \dots, c_n \in \mathbb{F}$, 使得 $u = c_1 v_1 + \dots + c_n v_n$.

我们可以简单地从“不多不少”这两个角度来理解线性空间的基底, “不多”对应着定义中的第一条, 意味着没有“多余”的向量, 每一个向量都起到了至关重要的作用; “不少”对应着定义中的第二条, 意味着线性空间的完整性要得到保障, 使得这些向量可以没有遗漏地将每一个线性空间中的向量表示出来. 在有了基底的定义之后, 我们便能够定义线性空间的维数:

定义

定义 1.10. 设 V 为定义在数域 $\mathbb{F}$ 上的线性空间, 集合 $\beta = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 为线性空间 V 的一组基底. 那么线性空间 V 的**维数 (Dimension)** 为集合 β 中元素的个数, 记作 $\dim(V) = |\beta|$.

可以证明, 有限维线性空间中任意两组基底所含向量个数相同, 因此维数的定义不依赖于基底的选取. 另外, 在本书中我们默认所有的线性空间维数均是有限维的. 特别地, 我们定义零向量的维数为零: $\dim(\{\mathbf{0}\}) = 0$. 通过定义 1.10, 我们也能够发现 $\dim(\mathbb{R}^n) = n, \dim(\mathbb{P}_n(x)) = n + 1$.

定理

定理 1.9. 设 $\beta = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 为线性空间 V 的一个子集, 若 β 线性无关, 且 $\dim(V) = |\beta|$, 则 β 为 V 的一组基.



例题

例题 1.11. 在 $\mathbb{R}^3$ 中, 给出 $\boldsymbol{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \boldsymbol{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \boldsymbol{v}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, 判断 $\beta = \{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3\}$ 是否构成 $\mathbb{R}^3$ 的一组基.

解答 1.11. 判断是否为基底, 我们一定要把是否线性无关放在第一位, 那么根据定义, 我们只需要看线性齐次方程组 $c_1\boldsymbol{v}_1 + c_2\boldsymbol{v}_2 + c_3\boldsymbol{v}_3 = \mathbf{0}$ 的唯一解是否为 $c_1 = c_2 = c_3 = 0$. 我们通过研究矩阵 $(\boldsymbol{v}_1 \ \boldsymbol{v}_2 \ \boldsymbol{v}_3 \mid \mathbf{0})$, 经 Gauss 消元后得到的其行最简形矩阵为

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right).$$

显然该线性齐次方程组存在唯一平凡解 $c_1 = c_2 = c_3 = 0$, 因此 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \boldsymbol{v}_3$ 线性无关. 又因为 $|\beta| = 3 = \dim(\mathbb{R}^3)$, 我们可以直接得出 β 为 $\mathbb{R}^3$ 的一组基.

对于线性空间 V 一个线性无关的子集 β , 在有 $\dim(V) = |\beta|$ 的情况下, 为了确认是否为一组基底, 我们可以通过判断线性无关从而直接确定, 由此省去了验证线性组合. 当我们知道 β 为线性空间 V 的一组基底之后, 根据性质我们也知道 V 中任意一个向量都是 β 的一个线性组合. 我们此时便想知道这个线性组合究竟有着什么样的性质? 在此情况下一个向量有且仅有一种线性组合吗? 有没有无穷多组满足条件的线性组合? 如果我们选择 V 的另外一组基底 γ , 这个线性组合又有着什么样的性质? 让我们通过几条定理, 来一一回答上述这些问题.

定义

定义 1.11. 设 $\beta = \{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_n\}$ 为线性空间 V 的一组基底, 那么对于任意的 $\boldsymbol{u} \in V$, 有且仅有唯一的一组解 $c_1, c_2, \dots, c_n$, 使得

$$\boldsymbol{u} = c_1\boldsymbol{v}_1 + c_2\boldsymbol{v}_2 + \dots + c_n\boldsymbol{v}_n.$$

我们称实数对 $(c_1, c_2, \dots, c_n)$ 为向量 $\boldsymbol{u}$ 在基底 β 下的坐标 (Coordinates), 通常写作

$$[\boldsymbol{u}]_{\beta} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}_{\beta}.$$

在给定的基底中, 向量在该基底里面有且仅有一种分解方式; 并且向量的坐标和基底的选取密切相关. 在不同的基底中, 向量的坐标也会发生变化. 所以我们从现在开始要格外注意基底的强调. 在本书中如果没有特殊说



明或者要求的话, 所有向量的坐标均默认为在标准基底下的分解, 我们定义 $\mathbb{R}^n$ 的标准基底为:

$$E = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}; \cdots; \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \right\}.$$

通常我们也使用 $E = \{e_1, e_2, \cdots, e_n\}$ 来代指标准基底, 其中 e_i 的第 i 个元素为 1, 其余元素均为 0. 我们之前见到的形如 $v = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$ 的向量其实就是在标准基底 $\mathbb{R}^3$ 下的唯一分解的坐标:

$$[v]_E = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}_E = 2e_1 + 3e_2 + 1e_3.$$

在标准基底中, 向量右下角的角标可以略去, 但如果是向量在其他基底下的分解形式, 则必须要加上角标. 我们接下来研究一下向量在不同的基底之间是如何转化的.

定理

定理 1.10. 设 $\beta = \{v_1, v_2, \cdots, v_n\}$ 为线性空间 V 的一组基底, 设向量 u 在基底 β 下的分解坐标为

$$[v]_\beta = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}_\beta, \text{ 那么向量 } u \text{ 在标准基底 } E \text{ 下的分解坐标即为 } c_1v_1 + c_2v_2 + \cdots + c_nv_n.$$

我们来看另一组 $\mathbb{R}^3$ 的基底 $\gamma = \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_E, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_E, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}_E \right)$, 此时如果我们定义 $[v]_\gamma = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}_\gamma$, 那么我们知

道向量的坐标其实就是基底向量构成的线性组合. 我们于是可以得出:

$$[v]_\gamma = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}_\gamma = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_E + 3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_E + 1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}_E = \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}_E \quad (\text{标准基底})$$

此时, 我们应该格外注意基底与向量坐标之间的顺序关系, 在基底中, 从左至右第 i 个向量应该对应线性组合中的第 i 项. 在本书中, 我们默认所有的基底的顺序都是固定的, 因此我们便可以用 $v_1, v_2, \cdots, v_n$ 来表示基底, 其中 v_i 即为基底里面从左至右的第 i 个向量, 顺序不会发生变化. 我们称这样的基底为**有序基底 (Ordered Basis)**. 在本书中, 所有的基底均为有序基底.



例题

例题 1.12. 已知 $\mathbb{P}_2(x)$ 的标准基底为 $E = \{1, x, x^2\}$, 设线性空间 $W \subseteq \mathbb{P}_2(x)$ 为满足 $f(1) = 0, f'(1) = 0$ 的全体二次多项式构成的集合, 求出 W 的一组基.

解答 1.12. 我们首先设 $f(x) = ax^2 + bx + c$, 根据 W 所给的限制条件, 我们可以列出这样的方程组:

$$\begin{cases} a + b + c = 0 \\ 2a + b = 0 \end{cases} \quad . \text{ 求解这个方程组并不困难, 我们最终可以解得 } \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = s \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} : s \in \mathbb{R}. \text{ 由此, 我们可以}$$

取 $(1, -2, 1)_E$ 作为 W 的一组基. 即为形如 $f(x) = k(1 - 2x + x^2) : k \in \mathbb{R}$ 的全体多项式.

例题

例题 1.13. 在 $\mathbb{R}^3$ 中, 向量 v 在标准基底 E 下分解的坐标为 $v = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}$. 设

$$\gamma = \left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

为 $\mathbb{R}^3$ 的另一组基底, 求 $[v]_\gamma$.

解答 1.13. 这道题其实就是定理 1.10 的逆运算. 我们可以假设 $[v]_\gamma = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}_\gamma$, 那么我们就有这样一个线性方程组:

$$c_1 \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + c_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

随后, 我们只需要把工作交给我们的老朋友——Gauss 消元了. 我们可以写出这样的矩阵:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} -1 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 3 \end{array} \right) \xrightarrow{\text{经过 Gauss 消元}} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{array} \right).$$

由此我们得出, $c_1 = c_2 = c_3 = 1$, 则根据定义我们知道 $[v]_\gamma = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}_\gamma$.

我们现在已经了解向量在标准基底和其它基底之间的转化, 那么对于两个非标准基底, 它们之间的转化该如何求解呢?



例题

例题 1.14. 设 $\beta = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}, \gamma = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} \right\}$ 为 $\mathbb{R}^3$ 的两组基底. 若 $[v]_\beta = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}$, 求 $[v]_\gamma$.

解答 1.14. 此时, 我们需要标准基底 E 作为一个“过渡态”, 先求出 v 在标准基底下的表示形式 $[v]_E$, 然后在去求 $[v]_\gamma$. 根据定义我们知道

$$[v]_E = 1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + (-1) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

随后我们再设 $[v]_\gamma = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$, 因此可以列出如下的线性方程组:

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + c_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix}.$$

$$\text{不难解得} \begin{cases} c_1 = \frac{4}{5} \\ c_2 = -\frac{11}{5} \\ c_3 = -\frac{8}{5} \end{cases}. \text{由此我们得到 } [v]_\gamma = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} \\ -\frac{11}{5} \\ -\frac{8}{5} \end{pmatrix}_\gamma.$$

我们不难发现, 向量在不同基底下的坐标会有所不同. 不过有一个特例: 零向量. 根据我们的定义, 在任何基底为零向量的坐标均为 0. 我们定义向量的坐标就好比物理学定义参考系一样, 通过选取特定的基底, 从而使得向量在这个基底下的坐标更加简洁和方便运算. 要格外注意的是在进行不同基底之间的运算时, 我们一定要把向量转化到一个共同的基底下去进行计算, 就好比物理学里面我们要保证一个系统内所有物体的参考系是一致的.

在后续的章节中, 我们将把基底与基底之间的相互转化看作线性变换, 届时我们将从矩阵以及函数的角度重新审视基底与基底之间的变换, 这种变换也被我们称作是矩阵的对角化, 就是读者可能已经有所听闻的 $S = P^{-1}AP$ 形式. 现阶段, 读者只需要掌握对于给定的向量, 求出其在不同基底下面的坐标即可.



1.3 练习

1. 在线性空间 $\mathbb{P}_3(x)$ 中, 记集合 $V = \{f(x) \in \mathbb{P}_3(x) : 2f(1) = f'(1), f(1) + f(2) = 0\}$, (其中集合 V 也为一个线性空间, 我们称其为 $\mathbb{P}_3(x)$ 的一个子空间. 我们会在下一节详细地讨论子空间) 试求出 V 的一组基底.

2. 在线性空间 $\mathbb{R}^4$ 中, 设在标准基底分解的向量 $v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. 据此构造出 $\mathbb{R}^4$ 的一组基 β , 使得 $v_1, v_2 \in \beta$.

3. 设 $\{x_1, x_2, x_3\}$ 和 $\{y_1, y_2, y_3\}$ 为线性空间 $\mathbb{R}^3$ 的两组基底, 那么 $\{x_1 + y_1, x_2 + y_2, x_3 + y_3\}$ 能否也为 $\mathbb{R}^3$ 的一组基底?

4. 在线性空间 $\mathbb{P}_n(x)$ 中, 我们设 $\beta = \{x^n; x^n + x^{n-1}; x^n + x^{n-1} + x^{n-2}; \dots; x^n + x^{n-1} + \dots + x + 1\}$ 为 $\mathbb{P}_n(x)$ 的一组基底 (读者可以尝试自行证明 β 为一组基底). 我们设多项式 $f(x) = x^n + 2x^{n-1} + 3x^{n-2} + \dots + nx + (n+1)$, 据此求出 $[f(x)]_\beta$ (我们令 $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$ 为 $\mathbb{P}_n(x)$ 的标准基底).

5. 在线性空间 $\mathbb{P}_n(x)$ 中, 设 $f(x) \in \mathbb{P}_n(x)$, 集合 $\beta = \{f^{(0)}(x), x f^{(1)}(x), \dots, x^n f^{(n)}(x)\}$, 其中 $f^{(k)}(x)$ 代表多项式 $f(x)$ 的 k 阶导数. 当 $f(x)$ 满足什么条件时, β 构成 $\mathbb{P}_n(x)$ 的一组基底?



1.4 线性空间之间的关系

在上一节中, 我们主要探讨了线性空间与向量的关系. 而在本节的内容里面我们将会探讨线性空间之间的关系. 我们开门见山, 引出本节的第一个重要定义:

定义

定义 1.12. 设 V 为定义在数域 $\mathbb{F}$ 上的线性空间, $W \subseteq V$, 且 $W \neq \emptyset$. 如果对于任意的 $w_1, w_2 \in W, \lambda \in \mathbb{F}$, 满足

- ① $w_1 + w_2 \in W$;
- ② $\lambda w_1 \in W$.

我们称 W 为线性空间 V 的**子空间 (Subspace)**, 记作 $W \subseteq V$.

我们称子空间**对于向量加法运算封闭 (Closed Under Vector Addition)**; 以及**对于系数乘法运算封闭 (Closed Under Scalar Multiplication)**. 在实际应用中, 我们往往会采取如下的一步判别法: 即判断

$$\lambda w_1 + \mu w_2 \in W$$

即可.

定理

定理 1.11. 设 V 为定义在数域 $\mathbb{F}$ 上的线性空间, W 为线性空间 V 的子空间, 则 $\mathbf{0}_V \in W$.

证明. 我们只需取 $\lambda = 0$ 原式便得证. ■

例题

例题 1.15. 在线性空间 $\mathbb{P}_2(x)$ 中, $W = \{f(x) \in \mathbb{P}_2(x) : f(1) = 1\}$ 是否为 $\mathbb{P}_2(x)$ 的一个子空间?

解答 1.15. 设 $\beta = \{1, x, x^2\}$ 为 $\mathbb{P}_2(x)$ 的标准基底, 那么零向量 $\mathbf{0}$ 代表的多项式即为 $g(x) = 0 \cdot 1 + 0 \cdot x + 0 \cdot x^2 = 0$. 然而我们发现 $g(1) = 0 \neq 1$, 则因此 $\mathbf{0}_{\mathbb{P}_2(x)} \notin W$, 所以 W 不构成子空间.

随后, 我们回到矩阵本身, 设 A 为 $m \times n$ 矩阵, 我们知道可以用行向量和列向量对矩阵 A 进行表示, 因此我们不妨设由列向量表示的矩阵 A 为 $A_c = (v_1 \ \cdots \ v_n)$, 由行向量表示的矩阵 A 为 $A_r = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}$. 我们把 $m \times n$ 矩阵 A 中由全部列向量构成的线性组合记作 $\text{Span}(A_c)$, 由全部行向量构成的线性组合记作 $\text{Span}(A_r)$, 所以我们得到 $\text{Span}(A_c) \subseteq \mathbb{R}^m$, $\text{Span}(A_r) \subseteq \mathbb{R}^n$. 这样一来, 我们就建立了子空间和矩阵之间的联系.

定义

定义 1.13. 在 $m \times n$ 矩阵 A 中, 我们记 A 的**列空间 (Column Space)**为 $\text{Span}(A_c) := \text{Col}(A)$; A 的**行空间 (Row Space)**为 $\text{Span}(A_r) := \text{Row}(A)$.



随后我们定义两个重要的向量空间: $m \times n$ 矩阵 A 的**核空间 (Kernel Space)**和**像空间 (Image Space)**. 二者的定义可以类比函数中的零点和值域: 核空间为所有使得 $Ax = 0$ 的向量 x 所构成的集合, 根据矩阵和向量乘法的定义, 我们不难发现 $x \in \mathbb{R}^n$. 另一方面, A 的像空间便可以理解为 Ax 的所有可能取值, 我们也不难发现 $y := Ax \in \mathbb{R}^m$.

定义

定义 1.14. 设 A 为 $m \times n$ 矩阵.

① A 的核空间为 $\text{Ker}(A) := \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = 0\}$;

② A 的像空间为 $\text{Im}(A) := \{y \in \mathbb{R}^m : \exists x \in \mathbb{R}^n, y = Ax\}$.

定理

定理 1.12. $\text{Ker}(A)$ 为 $\mathbb{R}^n$ 的子空间; $\text{Im}(A)$ 为 $\mathbb{R}^m$ 的子空间.

证明. 设 $x_1, x_2 \in \text{Ker}(A)$, 常数 $c \in \mathbb{R}$. 那么 $Ax_1 = 0, Ax_2 = 0$. 因此根据矩阵与向量的运算法则, $A(cx_1 + x_2) = cAx_1 + Ax_2 = 0$. 则 $\text{Ker}(A) \subseteq \mathbb{R}^n$. 另一方面, 由于 $y_1, y_2 \in \text{Im}(A)$, 因此存在 $z_1, z_2 \in \mathbb{R}^n$ 使得 $y_1 = Az_1, y_2 = Az_2$, 那么对于常数 $c \in \mathbb{R}, cy_1 + y_2 = A(cz_1 + z_2)$. 则 $\text{Im}(A) \subseteq \mathbb{R}^m$. ■

例题

例题 1.16. 设矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & -1 \\ 2 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$, 据此分别求出 $\text{Ker}(A), \text{Im}(A)$ 的一组基底.

解答 1.16. 我们先求出 $\text{Im}(A)$ 的一组基底:

首先根据定义, 我们知道 $\text{Im}(A) = \text{Col}(A) = \text{Span} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}$, 我们因此得出 $\text{Im}(A)$

为 4 个向量的线性组合. 由于我们知道 $\text{Im}(A) \subseteq \mathbb{R}^3$, 因此构成 $\text{Im}(A)$ 的基底中向量个数的最大值为 3, 所以 A 的列向量彼此线性相关. 我们因此需要删去 4 个列向量中多余的向量. 我们此时可以从第一个向量开始依次选择, 首先 $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}$ 自身线性无关, 随后我们考虑集合 $\beta = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \right\}$, 不难验证该集合同样线性无关, 因此

我们再选取集合 $\gamma = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$, 通过求解线性方程组的知识我们也不难求出该集合彼此线性无关. 此时线性无关向量的个数已经达到了其基底中向量的最大个数, 所以我们据此构造出的集合 γ 便是 $\text{Im}(A)$ 的一组基底.

我们随后求解 $\text{Ker}(A)$ 的一组基底: 此时, 不难发现我们只需要求解线性方程组 $Ax = 0$, 因此利用我们已



经掌握的很熟练的线性方程组的相关知识, 不难写出形如下式的矩阵

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 2 & -1 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & 1 & 0 & 0 \end{array} \right).$$

对该矩阵进行高斯消元, 不难得到其行最简形式为

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 0 & \frac{3}{11} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{5}{11} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{7}{11} & 0 \end{array} \right).$$

根据求解线性方程组的知识, 我们此时有 3 个前导变量, 1 个滞后变量, 我们选取第四列对应的未知数作为参数 s , 得到其解集为 $s \begin{pmatrix} -\frac{3}{11} \\ -\frac{5}{11} \\ \frac{7}{11} \\ 1 \end{pmatrix} : s \in \mathbb{R}$, 那么 $\text{Ker}(A)$ 的一组基底即为 $\begin{pmatrix} -\frac{3}{11} \\ -\frac{5}{11} \\ \frac{7}{11} \\ 1 \end{pmatrix}$.

通过这道题, 我们有什么发现? 我们知道对于一个 $m \times n$ 的矩阵 A 而言, $\dim(\text{Im}(A))$ 即为矩阵中彼此线性无关的列向量的最大数量, 这就意味着根据定义, $\dim(\text{Im}(A)) = \text{rank}(A)$. 在第一节里面, 我定义矩阵的秩等于其行最简形矩阵中“前导变量”的数量, 因此像空间的维数也就等于前导变量的数量. 我们都知道, 在行最简形矩阵中, 一共只有前导变量和滞后变量两种, 其数目之和等于矩阵的列数 n , 而从我们对刚才题目的求解看出, 矩阵 A 的零空间又恰好是这些滞后变量的线性组合, 这些向量彼此线性无关. 也就是说滞后变量的数量也恰好是零空间的维数. 至此, 我们得出了一个线性代数中重要的定理之一——**秩零定理 (Rank - Nullity Theorem)**.

定理

定理 1.13 (秩零定理). 对任意的 $m \times n$ 矩阵 A 而言, $\dim(\text{Ker}(A)) + \dim(\text{Im}(A)) = n$

证明. 参见上文. ■

例题

例题 1.17. 设 $m \times n$ 矩阵 A 满足 $\text{Ker}(A) = \text{Im}(A)$, 那么 n 的取值能否为 114514? 能否为 191981?

解答 1.17. 我们此时注意到 n 的数目很大, 并且 m 不确定, 因此不太可能去列线性方程组从而求解. 因此我们直接使用秩零定理: 由题意得 $\dim(\text{Ker}(A)) = \dim(\text{Im}(A))$, 那么 $\dim(\text{Ker}(A)) + \dim(\text{Im}(A)) = 2 \dim(\text{Ker}(A)) = 2 \dim(\text{Im}(A)) = n$, 由于线性空间的维数只能为整数, 所以 n 必为偶数, 因此 n 可以取 114514, 不能取 191981. 至于怎么去实打实地找到满足 $\text{Ker}(A) = \text{Im}(A)$ 的矩阵 A , 学有余力的读者可以自行尝试.



定义

定义 1.15. 对于 $m \times n$ 矩阵 A 而言, 我们定义 A 的**转置矩阵 (Transpose Matrix)** 为一个 $n \times m$ 矩阵, 通常记作 A^T , 使得 $(A)_{ij} = (A^T)_{ji}$

有了转置矩阵的概念之后, 我们就再一次地建立起了列向量和行向量之间的联系. 根据矩阵转置的定义, 如果我们设 $A = (v_1 \cdots v_n)$, 那么 $A^T = \begin{pmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_n^T \end{pmatrix}$, 根据行秩和列秩相等这一定理, 我们也知道矩阵的秩等于其转置矩阵的秩.

在本节的后半部分, 我们将会研究不同线性空间之间的关系, 准确来说我们会研究在给定的线性空间中, 其子空间之间的联系. 我们都知道对于集合而言, 我们可以定义集合之间的交集与并集, 那么对于线性空间而言, 我们同样可以定义线性空间的交集与并集.

定义

定义 1.16. 设 U, V 均为某线性空间 (通常为 $\mathbb{R}^n$) 的子空间, 我们定义线性空间 U, V 的交集为 $U \cap V$; 并集为 $U \cup V$. 设 $w \in U \cap V$, 则 $w \in U$ 且 $w \in V$; 若 $w \in U \cup V$, 则 $w \in U$ 或 $w \in V$.

此时, 我们自然而然会想 $U \cap V; U \cup V$ 是否也为线性空间呢? 在往下阅读我所给出的定理之前, 读者不妨自行思考片刻, 如果可能, 尝试自己写出 $\mathbb{R}^2$ 或 $\mathbb{R}^3$ 的两个子空间, 然后通过计算来判断.

定理

定理 1.14. 设 U, V 均为某线性空间的子空间, 则:

- (i) $U \cap V$ 为线性空间;
- (ii) $U \cup V$ 为线性空间的充要条件为 $U \subseteq V$ 或 $V \subseteq U$.

证明. 我们先证明 $U \cap V$ 为线性空间: 设 $x, y \in U \cap V, c \in \mathbb{F}$, 则 $x + y \in U$ 且 $x + y \in V$, 即 $x + y \in U \cap V$; $cx \in U$ 且 $cx \in V$, 即 $cx \in U \cap V$, 因此 $U \cap V$ 为线性空间. 随后我们再证 $U \cup V$ 为线性空间的充要条件为 $U \subseteq V$ 或 $V \subseteq U$, 此时由于涉及到充要条件的证明, 我们需要从前后两个方向进行证明. 即:

($\Rightarrow$) 假设 $U \cup V$ 为线性空间, 则需证明 $U \subseteq V$ 或 $V \subseteq U$. 此时我们可以使用反证法, 即假设 $U \not\subseteq V$ 且 $V \not\subseteq U$, 此时即存在 $u \in U, u \notin V$ 且 $v \in V, v \notin U$. 由于 $U \cup V$ 为线性空间, 且 $u \in U \cup V; v \in U \cup V$, 则 $u + v \in U \cup V$. 那么 $(u + v) - u \in U$, 即 $v \in U$, 矛盾. 同理可证明 $u = (u + v) - v \in V$, 矛盾.

($\Leftarrow$) 假设 $U \subseteq V$ 或 $V \subseteq U$, 则需证明 $U \cup V$ 为线性空间. 由于 U, V 本身即为线性空间, 当 $U \subseteq V$ 时 $U \cup V = V$; 当 $V \subseteq U$ 时, $U \subseteq V = U$, 所以此时 $U \cup V$ 即为线性空间. 因此, $U \cup V$ 为线性空间的充要条件为 $U \subseteq V$ 或 $V \subseteq U$ 得证. ■

那么对于线性空间而言, 有没有类似于实数之间的加法, 乘法运算呢? 答案是有的, 只不过线性空间之间的加法和乘法运算法则与实数有所不同, 我们先从定义较为简单的乘法运算说起. 线性空间 U, V 的乘法运算也被称作是线性空间的**笛卡尔积 (Cartesian Product)**, 通常记作 $U \times V$, 其定义如下:



定义

定义 1.17. 设 U, V 为线性空间, 我们定义线性空间 U, V 的笛卡尔积 $U \times V$ 为:

$$U \times V = \{(u, v) : u \in U, v \in V\}.$$

不难发现, 笛卡尔积的结果其实是一个“坐标”, 其中坐标里的元素分别对应两个线性空间里面的元素, 这也是为什么在平面直角坐标系 xOy 中任意一点 (x, y) 有横坐标 x 和纵坐标 y . 我们称平面直角坐标系为 $\mathbb{R}^2$, 本质上就是笛卡尔积 $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$ 的结果. 同理我们还知道 $\mathbb{R}^3 = \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}$, 也就是为什么空间直角坐标系中的点分别对应了 x, y, z 三个坐标. 那么我们也不难发现, 对于两个线性空间而言, 其笛卡尔积同样为线性空间.

定理

定理 1.15. 设 U, V 均为线性空间, 则 $U \times V$ 同样为线性空间.

我们同时也可以定义线性空间之间的加法运算:

定义

定义 1.18. 设 U, V 为线性空间, 我们定义线性空间 U, V 的和 $U + V$ 为

$$U + V = \{u + v : u \in U, v \in V\}.$$

也就是说, $U + V$ 中的任何一个向量均为 U 中的一个向量 u 与 V 中的一个向量 v 的加和. 在平面直角坐标系内, 如果我们把 U 当作 x 轴, 即 $U = \text{Span} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}$, 如果我们把 V 当作 y 轴, 即 $V = \text{Span} \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$, 那么 $U + V$ 即为 $\mathbb{R}^2$. 或者我们也可以令 $U = \mathbb{R}^2, V = \{0\}$, 也能够产生同样的效果. 我们由此发现, 对于一个向量空间而言, 其可以表示为数个子空间的加和. 我们其中会重点研究一种特殊的加和: **直和 (Direct Sum)**. 其定义如下

定义

定义 1.19. 设 U, V 为线性空间 W 的子空间, 若 $W = U + V$ 且 $U \cap V = \{0\}$, 我们称 W 为 U, V 的直和, 记作 $W = U \oplus V$.

我们不难发现, 如果 $W = U \oplus V$, 那么 U, V 的交集有且只有零向量, 这一就意味着这两个线性空间彼此之间没有太多的关联, 我们也可以称 U 和 V 线性无关. 此时我们不妨再回到基底的概念, 此时我们又引出了一条重要的定理:

定理

定理 1.16. 设线性空间 U, V, W 满足 $W = U \oplus V$, 设 β_1 为 U 的一组基底, β_2 为 V 的一组基底, 则 $\beta_1 \cup \beta_2$ 为 W 的一组基底.

证明. 由直和的性质, 我们已经知道 $W = \text{Span}(\beta_1 \cup \beta_2)$, 因此我们只需证明 $\beta_1 \cup \beta_2$ 线性无关. 不妨设 $\beta_1 = \{v_1, \dots, v_m\}; \beta_2 = \{v_{m+1}, \dots, v_n\}$, 我们考虑线性组合 $(c_1 v_1 + \dots + c_m v_m) + (c_{m+1} v_{m+1} + \dots + c_n v_n) = 0$, 其



中令 $\boldsymbol{x} = (c_1 \boldsymbol{v}_1 + \cdots + c_m \boldsymbol{v}_m)$, $\boldsymbol{y} = (c_{m+1} \boldsymbol{v}_{m+1} + \cdots + c_n \boldsymbol{v}_n)$, 根据直和的性质, 我们再一次知道 $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} = \mathbf{0}$ 当且仅当 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} = \mathbf{0}$, 即 $c_1 = c_2 = \cdots = c_n = 0$. 因此 $\beta_1 \cup \beta_2$ 为 W 的一组基底. ■

至此, 第一章的全部内容到此结束. 我们在第一章中主要学习了线性方程组与矩阵和向量之间的关系和运算, 那么在下一章——《作用于线性空间之间的变换》中, 我们会重点研究线性变换, 从宏观的角度重新审视第一章所学的内容.

1.4 练习

1. 设矩阵 $P = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$, 分别求出 $\mathbf{Ker}(P)$, $\mathbf{Im}(P)$ 的一组基底.

2. 在线性空间 $\mathbb{P}_3(x)$ 中, 已知 $W = \{f(x) \in \mathbb{P}_3(x) : f'(1) + f(1) = 0\}$, 证明 W 为 $\mathbb{P}_3(x)$ 的子空间, 并分别求出 $\mathbf{Ker}(W)$, $\mathbf{Im}(W)$ 的一组基底.



作用于线性空间之间的变换

经过了第一章的学习，我们对于线性代数的一些基本概念已经有所了解。在第一章中，我们主要研究的是对于给定向量和向量组之间的关系。那么在本章节里面我们将会从宏观的角度去进一步研究矩阵和向量之间的关系。我们可以把矩阵和向量的乘法 $Ax = b$ 当作是一个函数，其中矩阵便代表了这个函数的法则， x 便代表了函数里的输入值。通过给定的法则我们便可以知道其结果 b 的取值。我们便很想知道这些法则之间究竟有着怎么样的奥秘？这些法则和函数之间的相同点与不同点分别是什么？在线性代数中，我们称这样的运算法则为线性变换，它是线性代数得以发展壮大的媒介，任何矩阵的背后都有其独特的线性变换。通过完成对本章的学习，我们将建立起矩阵和线性变换的关系，届时我们对线性代数的理解便会更上一层楼。

2.1 线性变换和矩阵的关系

对于函数 $y = f(x)$ 而言，我们可以写成映射的形式 $f: X \rightarrow Y$ ，其中集合 X 代表函数 f 的定义域，集合 Y 代表函数 f 的值域。即 $x \in X, y = f(x) \in Y$ 。那么我们同样可以从函数的角度去考虑我们的老朋友 $Ax = b$ ，我们知道如果 A 为 $m \times n$ 矩阵，那么 $x \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}^m$ 。因此矩阵 A 同样也可以看作类同于 f 的运算法则，我们一般用 T 表示这样的运算法则。那么形如 $Ax = b$ 的方程即可以表示为 $T: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ 。其中 $\mathbb{R}^n$ 即为运算 T 的定义域，我们一般也用集合 $U \subseteq \mathbb{R}^n$ 来表示定义域；用 $V \subseteq \mathbb{R}^m$ 来表示值域。我们知道，对于函数 $y = f(x)$ 而言，对给定的 x 而言，有且仅有一个 y 使得 $f(x) = y$ ，否则便不满足函数的定义。那么对于我们所定义的运算 T 而言，其当然也有一定的限制条件。我们把这种满足条件的运算 T 称作是**线性变换 (Linear Transformation)**，其具体定义如下：

定义

定义 2.1. 在数域 $\mathbb{F}$ 和线性空间 U, V 上，若对任意的 $v, u \in U, \lambda \in \mathbb{F}$ ，变换 $T: U \rightarrow V$ 满足

$$\textcircled{1} T(x+y) = T(x) + T(y) \quad \textcircled{2} \lambda T(x) = T(\lambda x),$$

我们则称 $T: U \rightarrow V$ 为定义在线性空间 U, V 之间的线性变换，

在目前阶段，除非有特殊说明，否则我们一律默认作用于线性变换的数域为全体实数 $\mathbb{R}$ 。看到这样的定义，读者能否尝试从函数的角度去理解？读者可以尝试构造出一个函数 $g(x)$ ，使得其为线性变换。

定理

定理 2.1. 设 $T: U \rightarrow V$ 为定义在线性空间 U, V 之间的线性变换，则：

$$\textcircled{1} T(0) = 0 \quad \textcircled{2} T(-v) = -T(v).$$



证明. ①: 根据零向量的定义, $\mathbf{0} = \mathbf{0} + \mathbf{0}$, 则 $T(\mathbf{0}) = T(\mathbf{0} + \mathbf{0}) = T(\mathbf{0}) + T(\mathbf{0})$, 即 $T(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$.

②: 我们取常数 $\lambda = -1$, 则 $T(-v) = T((-1)v) = -T(v)$. ■

虽然我们发现 $T(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$, 但我们要注意“此零非彼零”: 两个零向量分别指代线性空间 U 和 V 的零向量. 因此严格来讲我们有 $T(\mathbf{0}_U) = \mathbf{0}_V$. 但是对于任何线性空间而言, 零向量的定义是不变的, 即 $\mathbf{0} + u = u$.

例题

例题 2.1. 设作用于 $\mathbb{R}^2$ 上的运算 H 满足 $H(x, y) = (|x|, |y|)$, 那么 H 是否为线性变换?

解答 2.1. 我们可以先验证零向量: 即验证 $H(0, 0) = (0, 0)$, 这一点显然满足题意. 随后我们设 $u_1 = (x_1, y_1); u_2 = (x_2, y_2)$, 那么 $H(u_1 + u_2) = H((x_1 + x_2, y_1 + y_2)) = (|x_1 + x_2|, |y_1 + y_2|)$. 而 $H(u_1) + H(u_2) = (|x_1|, |y_1|) + (|x_2|, |y_2|) = (|x_1| + |x_2|, |y_1| + |y_2|)$, 我们知道 $|x + y| \leq |x| + |y|$, 因此 $H(u_1 + u_2) \neq H(u_1) + H(u_2)$. 因此 H 不为线性变换.

例题

例题 2.2. 设运算 $D: \mathbb{P}_n(x) \rightarrow \mathbb{P}_{n-1}(x)$, 设 $f(x) \in \mathbb{P}_n(x)$, 满足 $D(f(x)) = f'(x)$, 那么 D 是否为线性变换?

解答 2.2. 由于常值函数的导数为零, 因此 $f(x) = 0$ 时 $f'(x) = 0$. 根据求导法则, 我们很容易知道 $(f(x) + g(x))' = f'(x) + g'(x); (cf(x))' = cf'(x)$, 因此 D 为线性变换.

接下来, 在我们知道线性变换的抽象定义之后, 我们怎么把抽象问题具体化呢? 于是我们来一起研究一下线性变换和矩阵之间的关系. 我们不妨设 $T: U \rightarrow V$ 为一个线性变换, 然后我们再设 $\beta = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ 为线性空间 U 的一组基底. 那么我们知道对任意的 $x \in U$, 存在唯一的线性组合 $x = c_1 u_1 + c_2 u_2 + \dots + c_n u_n$, 并且我们知道向量 x 在基底 β 下的坐标为 $[x]_\beta = \begin{pmatrix} c_1 & c_2 & \dots & c_n \end{pmatrix}_\beta$. 因此对 x 施加变换 T , 我们有 $T(x) = T(c_1 u_1 + \dots + c_n u_n)$. 再结合线性变换的性质, 我们得到

$$T(x) = c_1 T(u_1) + \dots + c_n T(u_n).$$

此时, 我们设矩阵 A 的列向量分别为 $T(u_1), \dots, T(u_n)$, 那么我们便得到

$$T(x) = Ax = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ T(u_1) & T(u_2) & \dots & T(u_n) \\ | & | & & | \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = c_1 T(u_1) + \dots + c_n T(u_n).$$

如果此时我们假设 V 的一组基底为 $\gamma = \{v_1, \dots, v_m\}$, 然后我们将 $T(u_i)$ 写成在 γ 下的坐标 $[T(u_i)]_\gamma$, 那么原来的线性变换便可以写作

$$[T(x)]_\gamma = c_1 [T(u_1)]_\gamma + \dots + c_n [T(u_n)]_\gamma = [T]_\gamma^\gamma [x]_\beta.$$

经由上面的推理, 我们发现在线性变换 $T: U \rightarrow V$ 中, 在选定 U 的基底 β , V 的基底 γ 的情况下, Tx 便是将 x 在 β 基底下的坐标变换成 Tx 在 γ 基底下的坐标. 我们称此时的矩阵为该线性变换的矩阵形式. 我们不难发现, 不同的基底对应的矩阵形式不一定相同. 因此对于特定的问题而言, 我们也要选取特定的基底 γ , 使得运算更为简便. 这一点我们会在后面几节当中深入学习.



定理

定理 2.2. 设 $T: U \rightarrow V$ 为定义在线性空间 U, V 之间的线性变换, $\beta = \{u_1, \dots, u_n\}$ 为 U 的一组基底, γ 为 V 的一组基底, 那么对于 $x = c_1 u_1 + \dots + c_n u_n \in U$, 有

$$[T(x)]_\gamma = c_1 [T(u_1)]_\gamma + \dots + c_n [T(u_n)]_\gamma = [T]_\beta^\gamma [x]_\beta.$$

我们这样做的目的还是为了使得计算更加简便, 当 x 整体不好计算时, 我们可以把 x 写成若干基底向量的线性组合, 然后对形式简单的基底向量施加线性变换, 最后再进行加和. 我们来通过一个具体的例子来看这种简化思想是怎么体现的:

例题

例题 2.3. 在平面直角坐标系 $\mathbb{R}^2$ 中, 线性变换 R 满足以下性质: 对于任意的 $x \in \mathbb{R}^2$, $R(x)$ 的结果为将向量 x 绕坐标原点顺时针旋转角度 $\theta (0 \leq \theta \leq \pi/2)$. 那么对于任意的向量 $x = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ 而言, 计算其结果 $[R(x)]_E$

解答 2.3. 对于本题中提到的线性变换 $R: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$, 此时我们可以统一选取标准基底 $E = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$,

然后我们对基底向量施加变换 R : 在平面直角坐标系中, 通过几何关系便不难发现将 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 顺时针旋转角度 θ 之后得到 $\begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ -\sin(\theta) \end{pmatrix}$. 同理不难求出 $R\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin(\theta) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix}$, 则变换 R 在标准基底 E 下对应的矩阵形式即为 $[R]_E = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$, 将其乘以向量 x , 我们得到

$$[R](x) = a \begin{pmatrix} \cos(\theta) \\ -\sin(\theta) \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} \sin(\theta) \\ \cos(\theta) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \cos(\theta) + b \sin(\theta) \\ -a \sin(\theta) + b \cos(\theta) \end{pmatrix},$$

该结果即为在标准基底 E 下的坐标.

我们便不难发现, 基底的选取一定要巧妙. 如果我们选取

$$\beta = \left\{ \begin{pmatrix} 2023 \\ 2024 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2024 \\ -2023 \end{pmatrix} \right\}$$

作为基底的话, 不是不能算, 但要是像这样去求这些向量绕原点旋转角度 θ 的话, 与标准基底相比肯定就会复杂许多. 但是当我们选取简便的基底时, 我们需要格外小心. 再来看一个 $\mathbb{R}^2$ 的例子:

例题

例题 2.4. 在平面直角坐标系 $\mathbb{R}^2$ 中, 线性变换 P 满足以下性质: 对于任意的 $x \in \mathbb{R}^2$, $P(x)$ 的结果为将向量 x 投影至直线 $y = 2x$ 上. 那么对于任意的向量 $x = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ 而言, 计算其结果 $P(x)$



解答 2.4. 我们是不是可以直接选取这样的一组基底 $\beta = \{v_1, v_2\}$, 使得 v_1 恰在直线上, 这样一来 $P(v_1) = v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_\beta$, 投影即为其自身; 对于 v_2 而言, 我们是否也可以找一个与直线垂直的向量? 这样 $P(v_2) = 0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}_\beta$. 我们不妨设

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

那么这样一来, 根据定义我们就有该线性变换的矩阵形式 $\begin{pmatrix} P(v_1) & P(v_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. 我们如果取 xOy 内任意一点 $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, 那么将其投影到直线 $y = 2x$ 之后的结果应该是 $a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix}$. 这样计算有什么问题?

在此时的矩阵 $A = \begin{pmatrix} P(v_1) & P(v_2) \end{pmatrix}$ 为线性变换在基底 β 下的形式. 而我们随后乘以的向量 x 是在标准基底下的形式. 因此两者的基底不同, 我们便不能放在一起运算. 我会在稍微靠后的章节中讲解基变换, 到时候我们便知道这两种方法之间的联系.

定理

定理 2.3. 设 $T, S: U \rightarrow V$ 为定义在线性空间 U, V 之间的线性变换, $\beta = \{u_1, \dots, u_n\}$ 为 U 的一组基底, 若对任意的 $v_i \in \beta$, 有 $T(v_i) = S(v_i)$, 则 $T = S$.

证明. 任取 $x \in U$, 则有 $x = c_1 v_1 + \dots + c_n v_n$, 则 $T(x) = c_1 T(v_1) + \dots + c_n T(v_n) = c_1 S(v_1) + \dots + c_n S(v_n) = S(x)$. ■

例题

例题 2.5. 在空间直角坐标系 $\mathbb{R}^3$ 中, 线性变换 $P: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ 满足以下性质:

$$P \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad P \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad P \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

据此求 $P \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$.

解答 2.5. 由线性变换的性质, 我们知道存在这样的线性组合:

$$\begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + c_3 \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$



不难解出原方程的解为 $c_1 = \frac{1}{2}, c_2 = \frac{3}{4}, c_3 = \frac{7}{4}$ 这样一来

$$P \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} P \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} + \frac{3}{4} P \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{7}{4} P \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

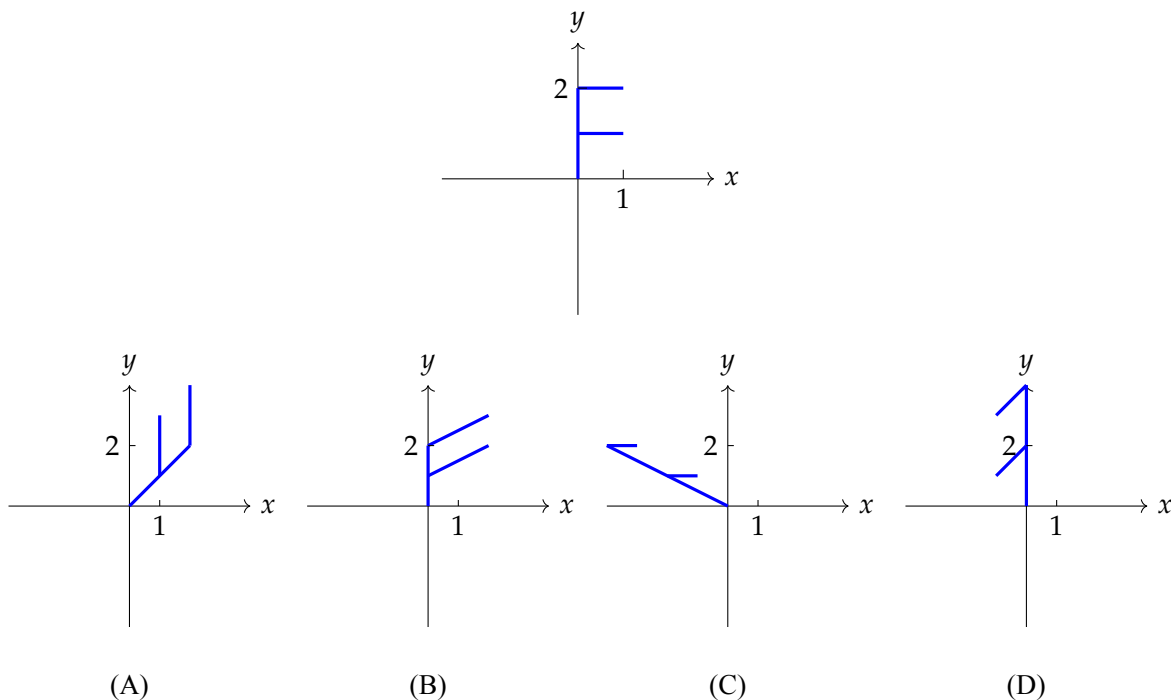


2.1 练习

1. 设 $T_1, T_2, T_3, T_4: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ 为 4 个线性变换, 其在标准基底下的变化矩阵分别为

$$T_1 = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; T_2 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}; T_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}; T_4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix};$$

那么对于如下图所示的图形而言, 经过上述的四种变换之后分别对应下列选项中的哪一个图像?



2. 我们设 $T: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ 为线性变换, 我们任取 $v_1, v_2, \dots, v_n \in \mathbb{R}^n$, 那么 $v_1, v_2, \dots, v_n$ 彼此线性无关是 $T(v_1), T(v_2), \dots, T(v_n)$ 彼此线性无关的 ()

- (A) 充要条件 (B) 充分但不必要条件 (C) 必要但不充分条件 (D) 既不充分也不必要条件

3. 设线性变换 $T: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, 且 $\beta = \{e_1, e_2, e_3\}$ 为 $\mathbb{R}^3$ 的一组基底, 已知 $T(e_1 + e_2) = e_3$; $T(e_1 + e_3) = e_2$; $T(e_2 + e_3) = e_1$, 据此求出 $T(e_1) + T(e_2) + T(e_3)$.

4. 设线性变换 $Q: \mathbb{P}_2(x) \rightarrow \mathbb{R}$, 已知 $Q(x+2) = 1$; $Q(1) = 5$; $Q(x^2 + x) = 0$, 据此求 $Q(2 - x + 3x^2)$.

5. 在平面直角坐标系 xOy 中, 我们将抛物线 $y = x^2$ 以 $(0,0)$ 为旋转中心绕原点顺时针旋转角度 θ , $(0 < \theta < \pi/2)$, 使得旋转过后抛物线与 x 轴相交于 $(5,0)$, 通过建立合适的线性变换模型, 求出此时抛物线旋转的角度 θ .



2.2 线性变换的函数性质

在上一章中, 我们引出了线性变换的概念以及线性变换的基本性质, 那么在本节中我们将通过函数的角度去重新审视线性变换. 我说过线性变换就好比是作用于线性空间的函数, 那么线性变换是否也具有一些函数特性呢? 我们不妨先考虑平面直角坐标系 xOy 内的函数 $y = f(x)$: 我们如果要研究 $f(x)$, 有哪些值得关注的点? 我们自然会想到函数的定义域和值域; 更进一步会研究函数的零点, 单调性和极值等. 这些概念我们可以尝试与线性变换 $T: U \rightarrow V$ 进行一一对应.

首先我们来看定义域和值域, 在函数 $y = f(x)$ 中, 定义域和值域均为 $\mathbb{R}$ 的子集, 我们可以写作 $f: A \subseteq \mathbb{R} \rightarrow B \subseteq \mathbb{R}$. 对于线性变换而言, 我们知道其本质还是 $Ax = b$, 其中 A 为变换 T 的矩阵形式 (再次强调, 矩阵 A 与基底的选取有关, 不同的基底对应不同的变化矩阵), $x \in U, b \in V$. 我们把所有满足条件的 b 构成的集合称作线性变换的像 (Image), 记作 $\text{Im}(T)$.

定义

定义 2.2. 设 $T: U \rightarrow V$ 为定义在线性空间 U, V 之间的线性变换, 我们定义 T 的像为

$$\text{Im}(T) := \{y: y = T(x), x \in U, y \in V\}.$$

因此我们便可以把 $\text{Im}(T)$ 当作是线性变换的“值域”. 随后我们联想矩阵里面的另一个定义——核空间, 我们知道矩阵 A 的核空间是所有满足 $Ax = 0$ 的解 x , 这一点是不是也很像函数的零点? 因此我们同样可以定义线性变换的核 (Kernel):

定义

定义 2.3. 设 $T: U \rightarrow V$ 为定义在线性空间 U, V 之间的线性变换, 我们定义 T 的核为

$$\text{Ker}(T) := \{x: T(x) = 0, x \in U\}$$

我们已经知道 $\text{Im}(T) \subseteq V; \text{Ker}(T) \subseteq U$, 因此我们可以给出秩零定理的线性变换形式:

定理

定理 2.4. 对任意的线性变换 $T: U \rightarrow V$, 有

$$\dim(\text{Im}(T)) + \dim(\text{Ker}(T)) = \dim(U).$$

例题

例题 2.6. 在标准基底 E 下, 设线性变换 $T: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ 满足 $T \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + y - z \\ x - y + z \\ -x + y + z \end{pmatrix}$, 据此分别求出 $\text{Ker}(T), \text{Im}(T)$.



解答 2.6. 我们根据线性变换的定义, 设 E 为标准基底, 那么我们有:

$$T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+0-0 \\ 1-0+0 \\ -1+0+0 \end{pmatrix}; T \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0+1-0 \\ 0-1+0 \\ -0+1+0 \end{pmatrix}; T \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0+0-1 \\ 0-0+1 \\ -0+0+1 \end{pmatrix}.$$

因此我们可以得到线性变换 T 在标准基底 E 下所对应的变化矩阵 A :

$$A = \begin{pmatrix} | & | & | \\ T(e_1) & T(e_2) & T(e_3) \\ | & | & | \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

因此我们只需要研究 $\text{Im}(A)$, $\text{Ker}(A)$ 即可. 我们首先可以研究线性齐次方程组 $Ax = 0$ 从而求解 $\text{Ker}(A)$.

不难得出此时 A 的增广矩阵为 $\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 1 & 0 \end{array} \right)$, 通过高斯消元我们最后得到 $\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right)$, 因此我们得到 $\text{rank}(A) = 3$, 根据秩零定理, 我们可以直接得到 $\text{Im}(A) = \mathbb{R}^3$; $\text{Ker}(A) = \{0\}$. 因此在原线性变换 T 中, 我们得到 $\text{Im}(T) = \mathbb{R}^3$; $\text{Ker}(T) = \{0\}$.

那么对于任意的线性变换 T 而言, 我们是否必须通过 Gauss 消元的方法, 从而才能求出线性变换的核空间与像空间呢? 我们先引出几条定义:

定义

定义 2.4. 设 $T: U \rightarrow V$ 为定义在线性空间 U, V 之间的线性变换.

(i) 若对于任意的 $x, y \in U$, $T(x) = T(y)$ 的充要条件是 $x = y$, 我们称 T 为单射 (Injective).

(ii) 若对于任意的 $y \in V$, 都存在 $x \in U$, 使得 $y = T(x)$, 我们称 T 为满射 (Surjective).

(iii) 若 T 既为单射, 也为满射, 我们称 T 为双射 (Bijjective).

例题

例题 2.7. 在例 2.6 中, 线性变换 T 为定义 2.4 中的哪种类型?

解答 2.7. 我们先判断 T 是否为单射: 根据我们最终的结论, $\text{rank}(A) = 3$, T 为满秩. 因此矩阵 A 中的列向量

(为简化符号, 我们记作 v_1, v_2, v_3) 彼此线性无关, 我们此时设 x, y 的坐标分别为 $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$, 那么我们不妨设

$T(x) = T(y)$, 于是便可以得到这样的线性方程组:

$$x_1 v_1 + x_2 v_2 + x_3 v_3 = y_1 v_1 + y_2 v_2 + y_3 v_3$$



整理得

$$(x_1 - y_1)v_1 + (x_2 - y_2)v_2 + (x_3 - y_3)v_3 = 0$$

根据线性无关的定义, 我们知道 $x_1 - y_1 = 0; x_2 - y_2 = 0; x_3 - y_3 = 0$, 即 $x_1 = y_1; x_2 = y_2; x_3 = y_3$, 则 $x = y$. 同理我们还可以设 $x = y$, 然后根据线性变换的定义可以得出 $T(x) = T(y)$, 因此 T 为单射.

随后我们判断 T 是否为满射, 我们已经知道 $\text{Span}\{v_1, v_2, v_3\} = \mathbb{R}^3$, 那么对于任意的 $y \in \mathbb{R}^3$, 我们均可以找到与之对应的 x , 使得 $y = Ax$, 因此 T 同样为满射. 由此我们得出 T 为双射.

那么我们是否有更快速的方法来判断一个线性变换所对应的种类呢? 我们来看下面的定理:

定理

定理 2.5. 对任意的线性变换 $T: U \rightarrow V$:

- ① T 为单射的充要条件是 $\ker(T) = \{0\}$;
- ② T 为满射的充要条件是 $\text{rank}(T) = \dim(V)$

证明. ($\Rightarrow$) 我们假设 T 为单射, 那么 $x = y$ 可推出 $T(x) = T(y)$, 那么 $T(x - y) = 0$, 即 $x - y = 0 \in \ker(T)$. 反过来, 若 $\ker(T) = \{0\}$, 那么假设 $x = y$, 不难发现 $T(x - y) = 0, T(x) = T(y)$.

($\Leftarrow$) 我们假设 T 为满射, 根据定义我们有 $\text{Im}(T) = V$, 即 $\dim(\text{Im}(T)) = \text{rank}(T) = \dim(V)$; ($\Leftarrow$) 我们假设 $\text{rank}(T) = \dim(V)$, 则 $\dim(\text{Im}(T)) = \text{rank}(T) = \dim(V)$, 则 $\text{Im}(T) = V$, 因此 T 为满射. ■

定理

定理 2.6. 对任意的线性变换 $T: U \rightarrow V$, 设 A 是变换 T 的矩阵形式, 则下列说法是等价的:

- ① T 为单射;
- ② $\ker(T) = \{0\}$;
- ③ 矩阵 A 满秩;
- ④ 矩阵 A 的列向量彼此线性无关.

另外, 我们能否从集合元素关系的角度去审视线性变换中的单射与满射? 对于一个函数 $f: X \rightarrow Y$ 而言, 我们有如下的定义:



定义

定义 2.5. 设 $f: X \rightarrow Y$ 为定义在 $\mathbb{R}$ 上的函数, $X, Y \subseteq \mathbb{R}$.

- ① 如果对于任意的 $x_1, x_2 \in X$ 而言, $f(x_1) = f(x_2)$ 的充要条件是 $x_1 = x_2$, 我们称 f 为**单射 (Injective)**;
- ② 如果对于任意的 $y \in Y$ 而言, 都存在 $x \in X$, 使得 $y = f(x)$ 我们称 f 为**满射 (Surjective)**;
- ③ 如果 T 既为单射, 也为满射, 我们称 f 为**双射 (Bijective)**.

因此我们不难发现对于函数而言, 单射与满射同样存在. 如果定义 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, 那么我们熟知的函数 $y = x$, 函数 $y = x^3$; 对数函数 $y = \ln(x)$ 便都是双射函数 ($(0, \infty)$ 上的双射) (读者可以自行验证). 如果 $f: X \rightarrow Y$ 为单射函数, 那么我们知道集合 X 与 Y 中的元素应该存在一一对应的关系, 也就是说 Y 中的元素应该足够多, 使得每一个 $x \in X$ 都可以有不同的 $y \in Y$ 与之对应. 也就是说最起码要保证 $|X| \leq |Y|$, 否则根据抽屉原理我们会知道会有最少两个 X 中的不同元素与 Y 中的一个元素对应, 从而不满足单射的性质; 如果 $f: X \rightarrow Y$ 为满射, 那么 Y 中的所有元素均要有与之相对应的元素. 根据函数的定义, 对于给定的 $x \in X$ 而言, 有且仅有一个 $y \in Y$ 使得 $f(x) = y$, 也就是说 X 中的元素要足够多, 使得每一个 $y \in Y$ 都有不同的 $x \in X$ 与之对应, 这样就意味着最起码要保证 $|Y| \leq |X|$.

根据上述推理, 我们知道了若 $f: X \rightarrow Y$ 为单射, 那么不可能会有 $|X| \geq |Y|$; 若 $f: X \rightarrow Y$ 为满射, 那么不可能会有 $|Y| \geq |X|$. 若 $f: X \rightarrow Y$ 为双射, 那么 $|Y| = |X|$. 那么该结论对于线性变换而言是否成立? 答案是肯定的, 但我们要进行一定程度的修改. 在线性空间里面, 有什么性质可以与集合的元素个数类比? 答案便是线性空间的维数. 维数也可以看作基底向量的个数, 所以我们由此便可以得出一条重要定理:

定理

定理 2.7. 设 $T: U \rightarrow V$ 为定义在线性空间 U, V 之间的线性变换.

- ① 若 $\dim(U) > \dim(V)$, 则 T 不可能为单射;
- ② 若 $\dim(U) < \dim(V)$, 则 T 不可能为满射;
- ③ 若 $\dim(U) = \dim(V)$, 则 T 为单射的充要条件是 T 为满射.

因此, 定理 2.7 也是很多时候快速判断某个线性变换种类的一条重要依据. 其中, 当 U, V 维数相同时, 我们只需要证明出该变换为单射便可以自然推出该变换为满射, 反之亦然. 我们把这种双射变换称作是**同构 (Isomorphism)**, 一般读作 U 同构于 V , 写作 $U \simeq V$. 同构的定义如下:

定义

定义 2.6. 设 U, V 为线性空间. 如果存在线性变换 $T: U \rightarrow V$, 使得 T 为双射, 我们则称 U 同构于 V , 记作 $U \simeq V$.



同构在满足双射线性变换的同时也是代数结构里面的一个**等价关系 (Equivalence Relation)**, 即同构还满足以下三条性质:

- ① **自反性 (Reflexive)**: 即任何线性空间 V 同构于自身, 有 $V \simeq V$.
- ② **对称性 (Symmetric)**: 即 $U \simeq V$ 可以推出 $V \simeq U$.
- ③ **传递性 (Transitive)**: 即 $U \simeq V, V \simeq W$ 可以推出 $U \simeq W$.

对于第一条自反性而言, 我们很好证明: 选取最特殊的线性变换 $T: V \rightarrow V$, 满足 $T(x) = x$. 形如这样的变换我们也称作**单位变换 (Identity Transformation)**, 通常用 I_d 表示. 随后我们不难证明 T 是一个双射线性变换, 由此 $V \simeq V$. 对于第二条和第三条而言, 我们目前还没有解决的好办法, 但完成本章的学习之后我们便可以进行第二, 三条的证明. 其中第二条便是线性变换的逆变换, 与逆矩阵关联密切; 第三条便是线性变换的复合, 与矩阵的乘法关联密切.

同构好比几何学里面的相似三角形, 我们知道两个三角形如果相似, 那么它们的对边成相同比例, 对角相等. 对于同构而言, 如果 $U \simeq V$, 那么线性空间 U, V 之间也有对应的“相似”关系. 简单来说, 二者的代数内核是一致的, 只不过用了不同的表现方式. 我们前面看到的基底之间的变换就是一种同构: 它们都是同一个向量在不同基底下的表现形式; 我们因此可以将同构理解为同一个“向量”在不同线性空间下的表现形式. 线性变换便是在不同的基底, 线性空间之间转化的媒介.

2.2 练习

1. 考虑集合 $A = \{1, 2, 3, 4, 5\}; B = \{5, 6, 7, 8\}$, 那么在所有映射 $f: A \rightarrow B$ 中, 有多少个单射? 有多少个满射? 有多少个双射?

2. 设非零线性变换 $T: \mathbb{R}^{2024} \rightarrow \mathbb{R}^{2022}$, 若 T 不是满射, 则 $\text{rank}(T)$ 的可能取值为 ()

3. 设线性变换 $T: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, 满足 $T \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x + kz \\ ky + z \\ x - y \end{pmatrix}, k \in \mathbb{R}$. 若 T 为单射, k 的取值范围是什么? 若 T 为双射, k 的取值范围是什么? 若 T 为满射, k 的取值范围是什么?

4. 设线性空间 V 的维数为 n , 证明: $V \simeq \mathbb{R}^n$.

5. 设 $V_1, V_2, \dots, V_n (n \geq 2)$ 为定义在同一数域 $\mathbb{F}$ 上的线性空间, 我们定义线性变换 $T_i: V_i \rightarrow V_{i+1} (1 \leq i \leq n-1)$, 使得这些线性变换满足以下的性质:



$$\begin{cases} \mathbf{Ker}(T_1) = \{0\} \\ \mathbf{Ker}(T_{i+1}) = \mathbf{Im}(T_i), 1 \leq i \leq n-2 \\ \mathbf{Im}(T_{n-1}) = V_n \end{cases}$$

证明: $\sum_{i=1}^n (-1)^i \dim(V_i) = 0$.

2.3 矩阵的乘法与线性变换的复合

我在前面说过, 线性变换就好比作用于线性空间上的函数. 我们在本章第二节里面也详细学习了线性变换中所体现出的函数的性质. 在本节中我们将重点讨论线性变换的复合的本质——矩阵的乘法. 在谈论线性变换的复合之前, 我们有必要首先引入矩阵的乘法运算, 只有这样我们才能更好地学习线性变换的复合.

定义

定义 2.7. 设 A 为 $m \times n$ 矩阵, B 为 $k \times r$ 矩阵. 当且仅当 $n = k$ 时, 矩阵乘法 AB 有意义, 并且其结果 $C = AB$ 为 $m \times r$ 矩阵. 我们设 A 的行向量分别为 $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_m$; B 的列向量分别为 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_r$. 则在 C 中, 有

$$C_{ij} = (\mathbf{v}_i)^\top \cdot (\mathbf{u}_j) = (\mathbf{v}_i) \cdot (\mathbf{u}_j)^\top \quad (1 \leq i \leq m; 1 \leq j \leq r).$$

根据定义, 对于 $C = AB$ 而言, C_{ij} 即为 A 中第 i 行与 B 中第 j 列取“数量积”的结果. 我们注意到, 若使得 AB 有意义, 我们必须确保矩阵 A 的列数与矩阵 B 的行数相等. 我们来通过实际的例子来熟悉矩阵的乘法运算:

例题

例题 2.8. 设 $A = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$, $B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & -1 \end{pmatrix}$, $C = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}$. 那么在 AB, AC, BC 中, 哪些运算有意义? 在运算有意义的情况下其结果是多少?

解答 2.8. 在 AB 中, $A \in M_{32}$, $B \in M_{23}$, 因此运算结果有意义且 $AB \in M_{33}$. 通过计算我们得到

$$AB = \begin{pmatrix} (1,3) \cdot (1,1) & (1,3) \cdot (0,1) & (1,3) \cdot (2,-1) \\ (2,-1) \cdot (1,1) & (2,-1) \cdot (0,1) & (2,-1) \cdot (2,-1) \\ (1,1) \cdot (1,1) & (1,1) \cdot (0,1) & (1,1) \cdot (2,-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 3 & -1 \\ 1 & -1 & 5 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

在 AC 中, $A \in M_{32}$, $C \in M_{22}$, 因此运算结果有意义且 $AC \in M_{32}$. 通过计算我们得到

$$AC = \begin{pmatrix} (1,3) \cdot (1,2) & (1,3) \cdot (2,-1) \\ (2,-1) \cdot (1,2) & (2,-1) \cdot (2,-1) \\ (1,1) \cdot (1,2) & (1,1) \cdot (2,-1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & -1 \\ 0 & 5 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}.$$

在 BC 中, $B \in M_{23}$, $C \in M_{22}$, 其中 B 的列数同 C 的行数不相等, 因此运算 BC 没有意义.

矩阵的乘法还可以从矩阵与向量乘法的角度进行审视, 下面的定理便是另一种求解矩阵乘法的方式:



定理

定理 2.8. 设 A, B 为矩阵, 且 AB 有意义. 设 $B = (\mathbf{b}_1 \ \mathbf{b}_2 \ \cdots \ \mathbf{b}_n)$, 则

$$AB = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ A\mathbf{b}_1 & A\mathbf{b}_2 & \cdots & A\mathbf{b}_n \\ | & | & & | \end{pmatrix}.$$

不难证明该计算法则与定义 2.7 中所提到的法则是等价的.

例题

例题 2.9. 设矩阵 $A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} -1 & 3 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$, 据此找出满足条件的矩阵 B , 使得 $AB = C$.

解答 2.9. 首先根据定义, 我们知道 B 是 2×2 矩阵. 我们不妨设 $B = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$, 随后根据矩阵乘法的定义, 我们有

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2a - c & 2b - d \\ a & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 3 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\text{由此我们得出线性方程组} \begin{cases} 2a - c = -1 \\ 2b - d = 3 \\ a = 1 \\ b = 2 \end{cases}, \text{ 不难解得} \begin{cases} a = 1 \\ b = 2 \\ c = 3 \\ d = 1 \end{cases}. \text{ 由此我们得到矩阵 } B = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}.$$

矩阵的加法运算较乘法运算而言更加简单, 我们只需要把对应位置的元素相加即可. 这也说明当且仅当矩阵 A, B 均为 $m \times n$ 矩阵时, 其加法运算 $A + B$ 有意义, 记 $C = A + B$, 则 $(C)_{ij} = (A)_{ij} + (B)_{ij}$.

根据矩阵乘法运算的法则, 如果 A, B 均为 $n \times n$ 矩阵, 那么其乘积 AB, BA 也均为 $n \times n$ 矩阵. 此时也会有非常多的性质与推论. 我们重点研究的对象便是 $n \times n$ 矩阵之间的乘积. 在所有的 $n \times n$ 矩阵中, 有一种矩阵最为特殊: 即由所有 $\mathbb{R}^n$ 的标准基底中的向量 $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \cdots, \mathbf{e}_n$ 为列向量所构成的矩阵 $\mathbf{I} = (\mathbf{e}_1 \ \mathbf{e}_2 \ \cdots \ \mathbf{e}_n)$. 该矩阵我们也称作是**单位矩阵 (Identity Matrix)**, 其中 $\mathbf{e}_i$ 的模均为 1, 且在 $\mathbf{e}_i$ 中有且仅有第 i 个位置的元素为 1, 其余元素均为 0. 并且 $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$. 全体 $n \times n$ 矩阵构成的集合我们写作 M_n , 不难发现 M_n 同样构成线性空间.

定理

定理 2.9. 设 $\mathbf{I}_n$ 为单位矩阵, 则对于任意的 $A \in M_n, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, A\mathbf{I} = \mathbf{I}A = A; \mathbf{I}\mathbf{x} = \mathbf{x}$.

另外矩阵之间还满足一定的运算法则:



定理

定理 2.10. 设存在矩阵 A, B, C 使得任意两个矩阵之间的加法, 乘法均有意义, 设 $\lambda \in \mathbb{R}$, x 为向量, 则

$$\textcircled{1} A(BC) = (AB)C$$

$$\textcircled{2} A(B+C) = AB+AC$$

$$\textcircled{3} (B+C)A = BA+CA$$

$$\textcircled{4} \lambda(AB) = (\lambda A)B = A(\lambda B)$$

$$\textcircled{5} A(Bx) = (AB)x \text{ (在运算有意义时)}$$

$$\textcircled{6} (AB)^{\top} = B^{\top}A^{\top}, (A+B)^{\top} = A^{\top}+B^{\top}$$

$$\textcircled{7} (A^{\top})^{\top} = A$$

在定理 2.10 的第一条性质里面, 我们因此知道矩阵乘法满足乘法的结合律, 因此当涉及多个矩阵的乘法时, 我们往往也可以将括号省略不写, 比如我们可以直接写作 $ABCD$, 其代表 4 个矩阵的乘积, 同时根据乘法的分配律我们有 $ABCD = (AB)(CD) = A(BCD) = (ABC)D = A(BC)D$ 等多种形式. 因此多个矩阵相乘时可以改变括号的位置, 但不能改变矩阵的相对顺序. 这是因为根据矩阵乘法的定义, AB 与 BA 并不一定相等, 这一点读者可以自行验证. 交换位置之后矩阵的乘法很可能就没有意义, 或者结果发生改变.

例题

例题 2.10. 设 A 为 $m \times n$ 矩阵, B 为 $n \times n$ 矩阵, 满足 $AB = 0$ 且 A 不为零矩阵. 那么是否存在 $n \times n$ 矩阵 C , 使得 $BC = I$?

解答 2.10. 我们假设这样的矩阵 C 存在. 由于 $BC = I$, 根据矩阵乘法的定义, 我们可以在等式两边同时乘以矩阵 A , 使得原式仍有意义. 即 $A(BC) = A(I)$, 由此我们得到 $(AB)C = A$, 因为我们知道 $AB = 0$, 则 $(AB)C = A(BC) = AI = 0$, 即 $A = 0$, 这一点与题设 $A \neq 0$ 矛盾, 即不存在这样的矩阵 C , 使得 $BC = I$.

在矩阵乘法中, 有一类乘法是我们重点研究的对象: 即同为 $n \times n$ 矩阵之间的乘法. 这样一来根据定义, 如果 $A, B \in M_n$, 那么其乘积 AB, BA 必然存在且有意义 (但不一定相等), 且乘积所得到的新矩阵也为 $n \times n$ 矩阵, 这样一来我们就可以将全体的 $n \times n$ 矩阵当成是线性空间 M_n 中的“向量”来看待, 通过研究线性变换来研究矩阵的乘法. 我会在本节的后半部分引入线性变换.

定义

定义 2.8. 若矩阵 A 满足 $A = A^{\top}$, 我们称 A 为**对称矩阵 (Symmetric Matrix)**.

我们设 A 为 $m \times n$ 矩阵, 那么根据矩阵转置的定义, $A^{\top}$ 为 $n \times m$ 矩阵. 若 $A = A^{\top}$, 我们则首先要保证二者



的行数, 列数相同, 即 $m = n$. 因此只有 $n \times n$ 矩阵存在对称矩阵. 由全部 $n \times n$ 对称矩阵构成的集合我们也可以用 $\text{Sym}(M_n)$ 表示. $\text{Sym}(M_n)$ 也是一个线性空间, 读者可以自行尝试证明.

例题

例题 2.11. 设 $A, B \in \text{Sym}(M_n)$, 证明 $AB \in \text{Sym}(M_n)$ 当且仅当 $AB = BA$.

解答 2.11. 我们先证充分性: 假设 $AB \in \text{Sym}(M_n)$, 那么根据转置矩阵的性质我们有 $AB = (AB)^\top$. 另外我们也知道 $(AB)^\top = B^\top A^\top$, 即 $AB = B^\top A^\top$. 再由 $A, B \in \text{Sym}(M_n)$ 可知 $A = A^\top; B = B^\top$, 因此 $AB = B^\top A^\top = BA$, 充分性得证.

我们随后证必要性: 假设 $AB = BA$, 那么 $(AB)^\top = (BA)^\top$, 即 $B^\top A^\top = (BA)^\top$. 再由 $A, B \in \text{Sym}(M_n)$ 知, $B^\top A^\top = BA = (BA)^\top$, 即 $AB = (AB)^\top$, 故 $AB \in \text{Sym}(M_n)$, 必要性得证.

对于 $n \times n$ 矩阵乘法而言, 我们引入了**分块矩阵 (Block Matrix)**, 即将矩阵写成是若干个维数更小的 $m \times n$ 矩阵. 我们通过研究这些 $m \times n$ 矩阵, 也可以得出很多重要的性质和推论. 这些矩阵块可以是方阵, 也可以是矩形矩阵; 关键是相邻矩阵进行分块乘法时, 各块尺寸必须匹配. 我们先假设

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 4 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & -1 & 7 & 5 \end{pmatrix},$$

那么我们发现, 在矩阵 A 中有很多性质比较好的“局部”, 比如有一片区域为零, 同时左上角区域还存在一个单位矩阵 $I \in M_2$, 因此我们可以把这些性质比较好的矩阵分割出来, 写成如下的形式:

$$A = \left(\begin{array}{cc|ccc} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 2 & -1 & 4 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & -1 & 7 & 5 \end{array} \right) = \begin{pmatrix} I_2 & \mathbf{0} \\ P & Q \end{pmatrix}$$

这样一来, 我们很大程度地简化了矩阵 A 的结构. 假设此时我们有另外一个矩阵 B :

$$B = \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ 5 & 6 \\ 7 & 3 \\ -1 & 0 \\ 1 & 6 \end{pmatrix},$$

那么在计算矩阵乘法时, 我们其实就可以把分块矩阵当成一个整体, 然后按照常规的矩阵乘法进行计算. 比如我



们也可以将 B 写成这样的分块矩阵:

$$B = \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ 5 & 6 \\ \text{---} & \text{---} \\ 7 & 3 \\ -1 & 0 \\ 1 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}.$$

在进行矩阵的分块时,我们一定要选取合适的位置. 我们想通过分块,使得原矩阵变成数个结构简单的矩阵,同时我们还要考虑每一个分块在与另一个矩阵的对应分块相乘时有意义. 按照我们的划分,乘积 AB 即可以写作

$$AB = \begin{pmatrix} I_2 & \mathbf{0} \\ P & Q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_2 X + \mathbf{0} Y \\ PX + QY \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X \\ PX + QY \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & -2 \\ 5 & 6 \\ \text{---} & \text{---} \\ 30 & 8 \\ 8 & 27 \end{pmatrix}.$$

所以在计算矩阵的乘法时,我们可以将矩阵划分成若干个分区,把每一个分区当成一个整体进行矩阵乘法. 对于一种特殊类型的矩阵,存在下列定理:

定理

定理 2.11. 假设 $A = \begin{pmatrix} B & X \\ \mathbf{0} & C \end{pmatrix}$, $A_1 = \begin{pmatrix} B_1 & X_1 \\ \mathbf{0} & C_1 \end{pmatrix}$ 均为分块矩阵,其中 $B, B_1; C, C_1$ 均为同等大小的矩阵. 那么

$$AA_1 = \begin{pmatrix} B & X \\ \mathbf{0} & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_1 & X_1 \\ \mathbf{0} & C_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} BB_1 & BX_1 + XC_1 \\ \mathbf{0} & CC_1 \end{pmatrix}.$$

该定理的证明便是矩阵乘法定义的直接应用. 我们由此还可以得到一条推论:

推论

推论 2.1. 假设 $A = \begin{pmatrix} I_n & X \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$ 为分块矩阵. 则对于任意的正整数 k , 有 $A^k = A$.

证明. 首先我们有 $A^2 = \begin{pmatrix} I & X \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & X \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$, 根据定理 2.11,

$$A^2 = \begin{pmatrix} I & X \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & X \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I^2 & IX + X\mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & X \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} = A.$$

因此,运用数学归纳法不难发现 $A^k = A$. ■

说了这么多矩阵的乘法,让我们回到线性变换,用线性变换的角度去审视矩阵的乘法. 假设我们有线性变换 $T: V \rightarrow W$, $S: W \rightarrow U$. 我们是否可以构造出一个新的线性变换 $Q: V \rightarrow U$?



我们假设 $v \in V$, 那么通过变换 T , 我们知道 $T(v) \in W$, 我们不妨设 $T(v) = w$; 通过变换 S , 我们知道 $S(w) \in U$, 我们不妨设 $S(w) = u$. 我们再将 w 进行代换, 即 $S(T(v)) = w$. 我们此时得到 $S(T(v)) = ST(v)$, 于是我们看到矩阵的乘法实际上也就是两个线性变换的复合. 此时 $ST(v)$ 也可以记作 $S \circ T$.

定义

定义 2.9. 设线性变换 $T: V \rightarrow W; S: W \rightarrow U$, 我们称线性变换 T 与 S 的**复合 (Composite)** 为 $ST: V \rightarrow U$, $ST(v) = S(T(v))$.

注意到该法则的顺序可能与我们的正常认知有所不同. 在这里 ST 代表“先 T ”后“ S ”, 简单来说可以理解为“先内后外”. 就好比复合函数 $f(g(x))$, 我们需要先求出内层函数 $g(x)$ 的值, 然后在求解外层函数 $f(x)$ 的值. 引入线性变换之后, 我们重新回到之前我提出的两个问题: 第一, 不是所有的矩阵之间都可以做乘法. 我们还以上面定义过的 T, S 为例: 如果我们定义变换 TS , 即 $T(S(w)), w \in W$, 那么我们此时发现 $u = S(w) \in U$, 而 $u = S(w) \notin V$. 因此这个时候 $T(u)$ 即没有意义, 因为 u 不在其线性变换所定义的范围之内. 在我们给出的使得矩阵 AB 有意义的条件里面, 我强调了矩阵 A 的列数等于 B 的行数, 现在我们能否用线性变换的知识去解答这一点? 第二, 我强调 AB 与 BA 不一定相等. 为了加深对这一点的理解, 我们来一起看下面这个例子:

例题

例题 2.12. 在平面直角坐标系 $\mathbb{R}^2$ 中, 选取其基底为标准基底 E . 考虑两个线性变换: ① $T: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$, 该变换代表将向量 v 以原点为旋转中心顺时针旋转 $\pi/4$; ② $S: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$, 该变换代表将向量 v 正交投影至 x 坐标轴上. 分别求出 ST, TS , 并判断二者是否相等.

解答 2.12. 我们首先求出线性变换 T, S 在标准基底下所对应的矩阵. 对于 T 而言, 我们设其变换矩阵为 A , 有

$$A = \left[T \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \quad T \left(\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \right] = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}.$$

我们再求线性变换 S 在标准基底下所对应的矩阵. 对于 S 而言, 我们设其变换矩阵为 B , 有

$$B = \left[S \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \quad S \left(\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \right] = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

那么我们有

$$T(S(v)) = (TS)v = \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \right) v = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} v.$$

$$S(T(v)) = (ST)v = \left(\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right) v = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{pmatrix} v.$$

我们由此发现, $ST \neq TS$.

在上面的例题中, $(TS)v$ 既代表了先将向量正交投影至 x 轴上, 然后再顺时针旋转 $\frac{\pi}{4}$ 的变换; 而 $(ST)v$ 则代表了先将向量 x 顺时针旋转 $\frac{\pi}{4}$, 然后在正交投影至 x 轴的变换.



2.3 练习

1. 下列说法中, 哪些是正确的? 那些是错误的? 如果是错误的, 请找出一个反例或者说明原因.

- ① $A^2 = I$ 的充要条件是 $A = I$;
- ② $AJ = A$ 的充要条件是 $J = I$;
- ③ 设 A 为 $n \times n$ 矩阵, 则 $(A^\top)^3 = (A^3)^\top$
- ④ A 为对称矩阵的充要条件是 $A + I$ 为对称矩阵
- ⑤ 若 $A \neq 0$, 那么 $A^2 \neq 0$.

2. 在 AB, BA 有意义的情况下, 关于矩阵的乘法, 下列哪些说法是正确的?

- ① 若 A 中有一行元素全部为 0, 则 BA 也有一行元素全部为 0;
- ② 若 A 中有一列元素全部为 0, 则 BA 也有一列元素全部为 0;
- ③ 若 AB 中有一行元素全部为 0, 则 B 也有一行元素全部为 0;
- ④ 若 AB 中有一行元素全部为 0, 则 A 也有一行元素全部为 0.

3. 找出一个 3×3 矩阵 A , 使得 $A \neq 0, A^2 = 0$.

4. 是否存在满足条件的 2×2 矩阵 A, B , 使得 $AB - BA = I$?

5. 若线性变换 $T: V \rightarrow V$ 满足 $T^2 = T$, 我们则称其为**幂等变换 (Idempotent Transformation)**. 此时 T 对应的矩阵也被称作是幂等矩阵.

① 证明矩阵 $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ 为幂等矩阵;

② 在 $\mathbb{R}^3$ 中, T 代表向量到平面 $Ax + By + Cz = 0$ 的正交投影 ($A, B, C \neq 0$). 那么对于任意的 A, B, C , 证明 T 为幂等变换;

③ 若 P 为 $n \times n$ 幂等矩阵, 那么对于任意的 $n \times n$ 矩阵 $A, Q = P + AP - PAP$ 同样为幂等矩阵.

6. 若线性变换 $T: V \rightarrow V$ 满足 $T^k = 0, k \leq \dim(V)$, 我们则称其为**幂零变换 (Nilpotent Transformation)**. 设 T 为幂零变换, 且 $\dim(V) = n$. 证明: $T^n = 0$.

7. 设线性变换 $T: V \rightarrow U, S: U \rightarrow W$.

① 若 ST 为单射, 证明 T 为单射变换, 且 $\dim(V) \leq \dim(U)$;

② 若 ST 为满射, 证明 S 为满射变换, 且 $\dim(W) \leq \dim(U)$.



2.4 逆矩阵与线性变换的逆变换

让我们回到线性方程组 $Ax = y$ 中. 我们知道若 x 已知, 则可以利用用矩阵与向量的乘法 Ax 来计算结果 y . 那么我们设想这种情况: 若 y 已知, 我们该怎么去求解 x 呢? 我们可以试着构造出另一个矩阵 B , 使得 $By = x$. 那么在此情况下矩阵 A, B 之间满足什么关系? 我们可以在等式 $By = x$ 两边同时乘以矩阵 A , 得到 $A(By) = Ax = y$. 那么根据定义, 我们有 $AB = I$; 同理我们也可以在等式 $Ax = y$ 两边同时乘以矩阵 B , 那么有 $B(Ax) = By = x$. 根据定义我们有 $BA = I$, 此时我们发现 AB, BA 均有意义, $AB = BA = I$. 在此情况下, 我们可以把 B 写作 A^{-1} , 代表矩阵 A 的**逆矩阵 (Inverse Matrix)**; 同理可以把 A 写作 B^{-1} , 代表矩阵 B 的**逆矩阵 (Inverse Matrix)**. 我们由此引入逆矩阵的概念:

定义

定义 2.10. 若 $n \times n$ 矩阵 A, B 满足 $AB = BA = I_n$. 我们称矩阵 A, B 可逆. 我们记 $B = A^{-1}$ 为 A 的逆矩阵; 同理 $A = B^{-1}$ 为 B 的逆矩阵.

例题

例题 2.13. 设 $B = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$, 证明 A 的逆矩阵为 B .

解答 2.13. 我们需要验证两项乘积 $AB = BA = I$, 其中不难发现

$$AB = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; BA = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

因此根据逆矩阵的定义, 我们称 A 的逆矩阵为 B .

我们因此不难发现: 若 A 为 B 的逆矩阵, 则 B 为 A 的逆矩阵, 即逆矩阵满足对称性.

例题

例题 2.14. 证明 $C = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}$ 不存在逆矩阵.

解答 2.14. 我们采用假设法, 即假设 C 的逆矩阵为 $B = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$, 随后计算 CB 的结果为

$$CB = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a+3c & b+3d \end{pmatrix}.$$

不难发现, $(CB)_{11} = 0$, 因此无论 a, b, c, d 的取值如何, CB 不可能为单位矩阵 I , 因此矩阵 C 不存在逆矩阵.

所以我们会想: 什么情况下一个矩阵存在逆矩阵呢? 在本书中, 我们只考虑形如 $AB = BA = I$ 的矩阵, 那么因此**有且仅有 $n \times n$ 矩阵存在逆矩阵**. 那么在所有的 $n \times n$ 矩阵中, 究竟要满足什么样的性质才能够使得矩阵可逆呢? 我们此时不妨从线性变换的角度去研究这个问题. 我们知道, 每一个矩阵都对应着一个线性变换 T ,



在选定基底 $\beta = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 的情况下, 该线性变换对应的矩阵即为

$$[T]_{\beta} = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ [T(v_1)]_{\beta} & [T(v_2)]_{\beta} & \cdots & [T(v_n)]_{\beta} \\ | & | & & | \end{pmatrix}.$$

定理

定理 2.12. 设 $T: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ 为线性变换, 则 T 可逆的充要条件是 T 为双射. 此时我们记 T 的逆变换为 T^{-1} , 满足 $TT^{-1} = T^{-1}T = I_d$ (单位变换). 设 T 对应的矩阵形式为 A , 那么 T^{-1} 对应的矩阵形式为 A^{-1} .

我们同时也知道, 此时由于线性变换前后所对应的线性空间的维数不发生改变, 因此只要得出单射或满射, 便可以直接得出该变换为双射. 而我们知道, 满射即代表矩阵 $[T]_{\beta}$ 中的列向量可以构成 $\mathcal{V}$ 的一组基底, 再结合单射代表列向量彼此线性无关, 我们可以再度由行秩定理得到该矩阵的行向量也彼此线性无关, 等等. 也就是说, 有非常多种方法来确定一个线性变换 (矩阵) 是否可逆, 同时矩阵可逆也同时告诉了我们非常多的潜在结论. 我们把这些性质总结成为一条冗长的定理:

定理

定理 2.13. 设 $T: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ 为线性变换, 记 $[T]_{\beta}$ 为该变换的矩阵形式, 则下列结论等价:

- | | |
|-----------------------|--------------------------------|
| ① T 为单射 | ② T 为满射 |
| ③ T 为双射 | ④ 线性变换 T 可逆 |
| ⑤ 矩阵 $[T]_{\beta}$ 可逆 | ⑥ $([T]_{\beta})^{\top}$ 可逆 |
| ⑦ 矩阵 $[T]_{\beta}$ 满秩 | ⑧ 矩阵 $([T]_{\beta})^{\top}$ 满秩 |

定理 2.13 其实还可以扩充更多的结论, 限于篇幅原因我省略了一部分. 在这里强烈建议读者结合目前所学的知识, 尝试去扩充这些结论: 比如在线性方程组 $Ax = b$ 中, 矩阵可逆是否和解的结构有关系? 如果我们此时把目光重点放在可逆矩阵上, 我们还能引出很多有关可逆矩阵的性质:



定理

定理 2.14. 对于 $n \times n$ 可逆矩阵而言, 我们有如下的性质:

- ① 单位矩阵 I 可逆, 且 $I^{-1} = I$;
- ② $(A^{-1})^{-1} = A$;
- ③ $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$. 一般地, $(A_1A_2 \cdots A_k)^{-1} = A_k^{-1} \cdots A_2^{-1}A_1^{-1}$;
- ④ $(A^k)^{-1} = (A^{-1})^k$;
- ⑤ 设 λ 为非零常数, 则 $(\lambda A)^{-1} = \frac{1}{\lambda}A^{-1}$;
- ⑥ $(A^T)^{-1} = (A^{-1})^T$.

再次强烈建议读者尝试对定理 2.14 中的结论进行证明. 此处还是由于篇幅原因, 我将不做证明.

例题

例题 2.15. 设 A 为 $n \times n$ 可逆矩阵, 若 $A^3 - 3A + 2I = 0$, 据此求 A^{-1} .

解答 2.15. 在这种类型的题里面, 我们往往需要运用矩阵的性质进行“配凑”, 比如我们在本题中使用 $I = AIA^{-1}$ 这一公式, 那么原式即为 $A^3 - 3A + 2AIA^{-1} = 0$, 即 $A(A^2 - 3I + 2IA^{-1}) = 0$, 因为矩阵 A 可逆, 所以 $A \neq 0$, 则 $A^2 - 3I + 2A^{-1} = 0$, 由此我们求得 $A^{-1} = \frac{1}{2}(3I - A^2)$.

例题

例题 2.16. 设 A 为 $n \times n$ 矩阵 (不一定可逆), 若 $A^3 = 0$, 证明 $(I - A)^{-1} = I + A + A^2$.

解答 2.16. 此时由于矩阵 A 不一定可逆, 所以我们不能用含有 A^{-1} 的式子代换, 但我们由题意可知, $A^3 = 0$, 即 $I - A^3 = I$, 即 $I^3 - A^3 = I$, 我们随后便可以使用立方差公式, 得到 $(I - A)(A^2 + A + I) = (A^2 + A + I)(I - A) = I$, 然后根据逆矩阵的定义, 我们就有 $(I - A)^{-1} = A^2 + A + I$.

定义

定义 2.11. 若 $n \times n$ 矩阵 A 满足 $A^2 = I$, 即 $A^{-1} = A$, 我们称 A 为 **自逆矩阵 (Self Inverse Matrix)**.

根据这个定义, 我们也不难发现所有的单位矩阵 $I \in M_n$ 均为自逆矩阵.

例题

例题 2.17. 设 A 为 $m \times n$ 矩阵, 且 $X^T X = I_n$. 证明 $I_m - 2XX^T$ 为自逆矩阵, 同时也为对称矩阵.



解答 2.17. 欲证 $I_m - 2XX^\top$ 自逆, 根据定义我们只需证 $(I_m - 2XX^\top)^2 = I_m$, 即

$$I_m^2 - 2I_m(2XX^\top) + (2XX^\top)^2 = I_m.$$

随后根据矩阵乘法的性质, 我们得到 $I_m - 2(2XX^\top) + 4(XX^\top)(XX^\top) = I_m$, 即 $I_m - 4(XX^\top) + 4XX^\top XX^\top = I_m$. 根据定义, 即 $I_m - 4XX^\top + 4XI_n X^\top = I_m - 4XX^\top + 4XX^\top = I_m$. 那么不难发现, 等式左边等于等式右边, 即 $I_m - 2XX^\top$ 为自逆矩阵. 由于我们知道对于逆矩阵 $\mathcal{P}$ 而言, $(\mathcal{P}^{-1})^\top = (\mathcal{P}^\top)^{-1}$, 那么我们有

$$((I_m - 2XX^\top)^{-1})^\top = ((I_m - 2XX^\top)^\top)^{-1}.$$

根据矩阵的性质我们知道

$$(I_m - 2XX^\top)^\top = (I_m)^\top - (2XX^\top)^\top = I_m - 2(X^\top)^\top (X)^\top = I_m - 2XX^\top.$$

那么根据定义, $I_m - 2XX^\top$ 也为对称矩阵.

随后, 让我们回到线性方程组 $Ax = b$ 中, 我们假设矩阵 A 存在逆矩阵, 那么我们便可以在等式的两边同时乘以 A^{-1} , 我们进而得到

$$x = A^{-1}b$$

其中 x 便是该方程组的唯一解. 我们可以仿照 $Ax = b$ 的形式, 去判断或者求解一个矩阵的逆矩阵. 在线性方程组 $Ax = b$ 中, 我们可以把 x 看作是某个 A 的逆矩阵, 把 b 看作单位矩阵 I . 这样, 我们便可以用研究线性方程组的方法来研究逆矩阵了.

定理

定理 2.15. 若 A 为 $n \times n$ 可逆矩阵, 那么在矩阵 A 中, 我们一定可以通过一系列的高斯消元, 从而得到单位矩阵 I . 从 I 再到 A 的过程也是高斯消元的逆运算. 通过对增广矩阵 $(A \mid I)$ 进行高斯消元, 我们最终可以得到 $(I \mid A^{-1})$, 其中 A^{-1} 便是矩阵 A 的逆矩阵.

例题

例题 2.18. 求出矩阵 $A = \begin{pmatrix} 2 & 7 & 1 \\ 1 & 4 & -1 \\ 1 & 3 & 0 \end{pmatrix}$ 的逆矩阵.

解答 2.18. 我们只需求解 $(A \mid I)$ 即可, 在本题中我们有

$$(A \mid I) = \left(\begin{array}{ccc|ccc} 2 & 7 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right)$$



我们只需对 A 中的 3 列进行高斯消元即可.

$$\begin{aligned} & \left(\begin{array}{ccc|ccc} 2 & 7 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) \xrightarrow{2R_3 - R_1; 2R_2 - R_1} \left(\begin{array}{ccc|ccc} 2 & 7 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -3 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 2 \end{array} \right) \\ & \left(\begin{array}{ccc|ccc} 2 & 7 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -3 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & 2 \end{array} \right) \xrightarrow{2R_1 - 7R_2; R_3 + R_2; R_1/2; R_3/2} \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 11 & 4 & -7 & 0 \\ 0 & 1 & -3 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & -1 & 1 & 1 \end{array} \right) \\ & \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 11 & 4 & -7 & 0 \\ 0 & 1 & -3 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & -1 & 1 & 1 \end{array} \right) \xrightarrow{2R_1 + 11R_3; 2R_2 - 3R_3; R_1/2} \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & -1.5 & -1.5 & 5.5 \\ 0 & 1 & 0 & 0.5 & 0.5 & -1.5 \\ 0 & 0 & 1 & -0.5 & 0.5 & -0.5 \end{array} \right) \end{aligned}$$

因此, 从我们最终得出的 $(A \mid I)$ 中, 我们得到 $A^{-1} = \begin{pmatrix} -1.5 & -1.5 & 5.5 \\ 0.5 & 0.5 & -1.5 \\ -0.5 & 0.5 & -0.5 \end{pmatrix}.$

需要强调的一点是, 当我们使用 $(A \mid I)$ 进行消元时, A 矩阵应可逆, 否则我们无法得出形如 $(I \mid A^{-1})$ 的形式. 所以这种方法其实也是判断矩阵 A 是否可逆的方法. 这种方法的优点是我们不仅可以判断出矩阵 A 是否可逆, 当矩阵可逆时我们还可以直接求出 A 的逆矩阵. 当我们完成下一节对行列式的学习之后, 我们将给出逆矩阵的另外一种求法.

例题

例题 2.19. 设 $P = \begin{pmatrix} A & X \\ 0 & B \end{pmatrix}$ 和 $Q = \begin{pmatrix} A & 0 \\ Y & B \end{pmatrix}$ 为分块矩阵, 其中 $A \in M_m, B \in M_n$. 证明:

- ① 若 P 为可逆矩阵, 则 A, B 均为可逆矩阵, 且 $P^{-1} = \begin{pmatrix} A^{-1} & -(A^{-1}XB^{-1}) \\ 0 & B^{-1} \end{pmatrix};$
- ② 若 Q 为可逆矩阵, 则 A, B 均为可逆矩阵, 且 $Q^{-1} = \begin{pmatrix} A^{-1} & 0 \\ -(B^{-1}YA^{-1}) & B^{-1} \end{pmatrix}.$

不难发现, ①, ② 的结构十分相似, 我将仅证①, 第二问的证明留给读者思考.

解答 2.19. 我们先证此时 A, B 均为可逆矩阵: 首先我们不难发现 P 为 $(n+m) \times (n+m)$ 矩阵, 由于 P 可逆, 根据逆矩阵的性质我们知道 P 的行向量彼此线性无关; 列向量彼此线性无关. 由列向量彼此线性无关我们可知 A 中列向量一定线性无关, 又因为 A 为 $m \times m$ 矩阵, 则 A 可逆; 同理由行向量线性无关可以得出 B 中行向量线性无关, 则 B 可逆.



我们可以使用分块矩阵的乘法规则, 此时我们只需要验证 $PP^{-1} = P^{-1}P = I_{m+n}$

$$\begin{aligned} PP^{-1} &= \begin{pmatrix} A & X \\ \mathbf{0} & B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A^{-1} & -(A^{-1}XB^{-1}) \\ \mathbf{0} & B^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} AA^{-1} + \mathbf{0} & A(-A^{-1}XB^{-1}) + XB^{-1} \\ \mathbf{0} + \mathbf{0} & \mathbf{0} + BB^{-1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} I_m & -(AA^{-1})(XB^{-1}) + XB^{-1} \\ \mathbf{0} & I_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} I_m & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & I_n \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P^{-1}P &= \begin{pmatrix} A^{-1} & -(A^{-1}XB^{-1}) \\ \mathbf{0} & B^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & X \\ \mathbf{0} & B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^{-1}A + \mathbf{0} & A^{-1}X - (A^{-1}XB^{-1})B \\ \mathbf{0} + \mathbf{0} & \mathbf{0} + B^{-1}B \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} I_m & A^{-1}X - (A^{-1}X)(B^{-1}B) \\ \mathbf{0} + \mathbf{0} & I_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} I_m & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & I_n \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

因此, $PP^{-1} = P^{-1}P = I_{m+n}$, 原式得证.

2.4 练习

1. 求出下列矩阵的逆矩阵:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 1 & -1 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & 5 & -1 \end{pmatrix}; B = \begin{pmatrix} -1 & 4 & 5 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & -2 & -2 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}; C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

2. 若 $(A^{\top} - 2I_2)^{-1} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$, 求 A .

3. 设 A, B 均为 $n \times n$ 矩阵, 下列哪些说法是正确的?

① 若 $A \neq \mathbf{0}$, 则 A 可逆;

② 若 A, B 均可逆, 则 $A + B$ 可逆;



- ③ 若 A, B 均可逆, 则 $(A^{-1}B)^{\top}$ 可逆;
- ④ 若 $A^4 = 3I$, 则 A 可逆;
- ⑤ 若 A^2 可逆, 则 A 可逆;
- ⑥ 若 A 可逆且斜对称 (Skew Symmetric) (即 $A^{\top} = -A$), 则 A^{-1} 可逆且斜对称;
- ⑦ 若 $AB = B$ 且 $B \neq \mathbf{0}$, 则 A 可逆.

4. 设 $P = \begin{pmatrix} a & -b & -c & -d \\ b & a & -d & c \\ c & d & a & -b \\ d & -c & b & a \end{pmatrix}$, 求 $PP^{\top}$ 及 P^{-1} ($P \neq \mathbf{0}$).

5. 设 A 为 $n \times n$ 矩阵, 若 A 中每一行的全部元素加和均为 0, 证明: A 不可逆.

6. 设 P 为 $n \times n$ 矩阵, 满足 $P^2 = P$. 证明:

① $I - 2P$ 为自逆矩阵;

② $I - aP$ 可逆当且仅当 $a \neq 1$, 并验证 $(I - aP)^{-1} = I + \left(\frac{a}{1-a}\right)P$.

7. 若矩阵满足 $U^2 = I$, 证明: $I + U$ 不可逆, 除非 $U = I$.

8. 设 A, B 均为 $n \times n$ 矩阵, 证明:

① $A(I + BA) = (I + AB)A$, 且 $(I + BA)B = B(I + AB)$;

② 若 $I + AB$ 可逆, 则 $I + BA$ 也可逆, 且 $(I + BA)^{-1} = I - B(I + AB)^{-1}A$.

9. 设 A 为 $n \times n$ 矩阵, 若 $A^n = \mathbf{0}$, 求 $(I - A)^{-1}$.

10. 设 $n \times n$ 矩阵 J 中的每一个元素均为 1 (即 $(J)_{ij} = 1$ ($1 \leq i, j \leq n$)), 若 $(I - \lambda J)$ 为自逆矩阵和对称矩阵, 求 λ . (用含有 n 的式子表示).

11. 设 $n \times n$ 矩阵 A 中的元素 a_{ij} , $1 \leq i, j \leq n$ 满足

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|.$$

证明: 矩阵 A 可逆.



2.5 行列式变换

在本节中, 我们将研究一种特殊的线性变换: **行列式 (Determinant)**. 简单来说, 行列式是一个变换 $\det : M_n \rightarrow \mathbb{R}$. 需要注意的是行列式不是线性变换, 而是一个关于矩阵列向量的交替多线性函数. 也就是说, 当固定其他列时, 它对某一列是线性的; 但把整个矩阵作为一个向量来看时, 行列式通常不是线性的. 在这个变换 (即行列式) 中, 我们所研究的对象是 $n \times n$ 矩阵, 意味着我们将不讨论三行四列矩阵的行列式是什么. 同时根据我们所定义的变换, 行列式的取值 $T(M)$ 为全体实数 (在目前阶段我们只研究行列式为实数的情况, 行列式为复数的我暂时不做涉及).

行列式为一个 **多线性映射 (Multi-linear)**. 我们不妨正式给出多线性映射的定义:

定义

定义 2.12. 若定义在矩阵 $A = (v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n)$ 上的变换 $\mathcal{P}$ 满足

$$\mathcal{P}\left(\begin{pmatrix} v_1 & \cdots & \lambda v_i + \mu u & \cdots & v_n \end{pmatrix}\right) = \lambda \mathcal{P}\left(\begin{pmatrix} v_1 & \cdots & v_i & \cdots & v_n \end{pmatrix}\right) + \mu \mathcal{P}\left(\begin{pmatrix} v_1 & \cdots & u & \cdots & v_n \end{pmatrix}\right),$$

我们称 $\mathcal{P}$ 为一个多线性映射.

我们可以将其简单地理解为矩阵中的每一列都满足线性变换的性质, 且不同列之间彼此互不干扰, 即对于每一个固定的 i , 当其他列向量保持不变时, $\mathcal{P}$ 关于第 i 个列向量是线性的. 由此我们便可以得出多线性映射里面的一条定理:

定理

定理 2.16. 设 $\mathcal{P}$ 为定义在矩阵 A 上的多线性映射, 若 A 中的某一列元素全部为 0, 那么 $\mathcal{P}(A) = 0$.

证明. 为了简化运算, 且不失一般性, 我们不妨设矩阵 $A = (\mathbf{0} \ v_2 \ \cdots \ v_n)$, 即假设矩阵 A 的第一列全部为零. 那么根据多线性映射还有零向量的性质, 我们有

$$\begin{aligned} \mathcal{P}\left(\begin{pmatrix} \mathbf{0} & v_2 & \cdots & v_n \end{pmatrix}\right) &= \mathcal{P}\left(\begin{pmatrix} \mathbf{0} + \mathbf{0} & v_2 & \cdots & v_n \end{pmatrix}\right) \\ &= \mathcal{P}\left(\begin{pmatrix} \mathbf{0} & v_2 & \cdots & v_n \end{pmatrix}\right) + \mathcal{P}\left(\begin{pmatrix} \mathbf{0} & v_2 & \cdots & v_n \end{pmatrix}\right). \end{aligned}$$

那么不难发现, 我们有 $\mathcal{P}\left(\begin{pmatrix} \mathbf{0} & v_2 & \cdots & v_n \end{pmatrix}\right) = 2\mathcal{P}\left(\begin{pmatrix} \mathbf{0} & v_2 & \cdots & v_n \end{pmatrix}\right)$, 因此 $\mathcal{P}(A) = 0$. ■

定理

定理 2.17. 设 $\mathcal{P}$ 为定义在 $n \times n$ 矩阵 A 上的多线性映射. 则对于任意的常数 λ , 有 $\mathcal{P}(\lambda A) = \lambda^n \mathcal{P}(A)$.

证明. 我们不妨设 $A = (v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n)$, 那么根据定义, $\lambda A = (\lambda v_1 \ \lambda v_2 \ \cdots \ \lambda v_n)$, 根据多线性映射的



定义, 我们有

$$\begin{aligned}\mathcal{P}\left(\left(\lambda v_1 \quad \lambda v_2 \quad \cdots \quad \lambda v_n\right)\right) &= \lambda \mathcal{P}\left(\left(v_1 \quad \lambda v_2 \quad \cdots \quad \lambda v_n\right)\right) \\ &= \lambda \cdot \lambda \mathcal{P}\left(\left(v_1 \quad v_2 \quad \cdots \quad \lambda v_n\right)\right) \\ &\vdots \\ &= \lambda^n \mathcal{P}\left(\left(v_1 \quad v_2 \quad \cdots \quad v_n\right)\right).\end{aligned}$$

即 $\mathcal{P}(\lambda A) = \lambda^n \mathcal{P}(A)$. ■

在所有的多线性映射中, 我们再定义一种特殊的多线性映射: **交替多线性映射 (Alternating Multi-linear)**.

定义

定义 2.13. 若 $n \times n$ 矩阵 A 中含有任意两列完全相同的元素时, 多线性映射满足 $\mathcal{P}(A) = 0$, 我们则称 $\mathcal{P}$ 为交替多线性映射.

根据这个定义, 我们还能得出交替多线性映射的一条性质:

定理

定理 2.18. 设 $\mathcal{P}$ 为交替多线性映射, A 为 $n \times n$ 矩阵. 记矩阵 B 为交换 A 中的任意两列后得到的矩阵, 则 $\mathcal{P}(A) = -\mathcal{P}(B)$.

证明. 同样地, 为了简化运算以及不失一般性, 我们假设交换 A 的第一, 二列. 即 $A = (v_1 \quad v_2 \quad \cdots \quad v_n); B = (v_2 \quad v_1 \quad \cdots \quad v_n)$. 根据定义, $\delta = \mathcal{P}\left((v_1 + v_2 \quad v_1 + v_2 \quad v_3 \quad \cdots \quad v_n)\right) = 0$. 再结合多线性映射的性质, 我们有

$$\delta = \mathcal{P}[v_1, v_1, \cdots, v_n] + \mathcal{P}[v_1, v_2, \cdots, v_n] + \mathcal{P}[v_2, v_1, \cdots, v_n] + \mathcal{P}[v_2, v_2, \cdots, v_n] = 0.$$

因此不难发现 $\mathcal{P}(A) = -\mathcal{P}(B)$. ■

在所有的交替多线性映射中, 我们将会重点研究其中一种——**行列式 (Determinant)**, 我们先一起看一下行列式的定义:

定义

定义 2.14. 假设我们存在一种交替多线性映射 $\det: M_n \rightarrow \mathbb{R}$, 使得 $\det(I_n) = 1$, 我们则称该交替多线性映射 $\det$ 为行列式. 通常用 $\det(A)$ 来表示矩阵 A 的行列式.

可以证明, 对于 $n \times n$ 矩阵 A 而言, $\det(A)$ 存在且唯一. 我们现在已经知道了行列式的定义, 那么我们该如何去求解一个具体的矩阵的行列式呢? 我们在此之前先引入一些有关排列组合的知识: 假设我们现在有 n 个元素: $1, 2, 3, \cdots, n$ 构成的集合 T_n , 我们定义一种作用于这 n 个元素上面的双射 π , 使得对任意的 $m \in T_n$, $\pi(m) \in T_n$. 由于 π 为双射, 所以我们知道当 $m \neq n$ 时, $\pi(m) \neq \pi(n)$, 且对于任意的 $r \in T_n$, 都存在相应的 $t \in T_n$, 使得 $\pi(t) = r$. 满足这种条件的映射 π 被我们称作是关于 $1 - n$ 的一个**排列 (Permutation)**. 我们很多时候也用一个 $2 \times n$ 矩阵 π 来表示一个排列, 在矩阵的第 i 列里面, $\pi_{1i} = i; \pi_{2i} = \pi(i)$. 下面便是一个当 $n = 5$ 时的例子: (下



面的矩阵代表了 $1 \rightarrow 4, 2 \rightarrow 2, 3 \rightarrow 3, 4 \rightarrow 5, 5 \rightarrow 1$ 的一个排列)

$$\pi = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ \pi(1) & \pi(2) & \pi(3) & \pi(4) & \pi(5) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 2 & 3 & 5 & 1 \end{pmatrix}$$

那么对于给定的 n 而言, 我们把所有满足条件的不同排列 π 所构成的集合称作是关于 n 的一个**排列群 (Permutation Group)**, 通常用 S_n 表示.

定理

定理 2.19. 对于排列群 S_n 而言, $|S_n| = n!$.

该定理的证明显而易见. 我们此时需要引入一个至关重要的概念, 即排列的**符号 (Sign)**:

定义

定义 2.15. 设排列 $\pi \in S_n$, 令 k 代表在 π 中所有满足

$$\begin{cases} i < j \\ \pi(i) > \pi(j) \end{cases}$$

的有序数对 (i, j) 的数量. 则排列 π 的符号为 $\text{sgn}(\pi) = (-1)^k$.

我们一起来算一下上文提到的排列 $\pi = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 4 & 2 & 3 & 5 & 1 \end{pmatrix}$ 的符号. 我们知道 $\pi(1) = 4; \pi(2) = 2; \pi(3) = 3; \pi(4) = 5; \pi(5) = 1$. 那么我们先固定 $i = 1$, 我们发现: $1 < 2, \pi(1) > \pi(2); 1 < 3, \pi(1) > \pi(3); 1 < 5, \pi(1) > \pi(5)$. 因此对于元素 $i = 1$ 而言有三组满足条件的数对; 然后再看元素 $i = 2$, 我们发现: $2 < 5; \pi(2) > \pi(5)$, 只有一组满足条件的数对; 对于元素 $i = 3$: $3 < 5; \pi(3) > \pi(5)$, 有一对满足条件的数对; 对于元素 $i = 4$: $4 < 5, \pi(4) > \pi(5)$, 有一对满足条件的数对. 对于元素 $i = 5$ 而言, 不存在 j 使得 $5 < j$, 所以有 0 对满足条件的数对. 那么综合起来一共有 6 组满足条件的数对, 此时排列 π 的符号即为 $\text{sgn}(\pi) = (-1)^6 = 1$.

通过排列符号的定义, 我们不难发现排列的符号 $\text{sgn}(\pi)$ 的取值为 1 或 -1 . 在 $n \times n$ 矩阵中, 我们便可以把行列式看作是一种矩阵元素之间的排列.

定义

定义 2.16. 设 A 为 $n \times n$ 矩阵, 记 (a_{ij}) 为 A 中第 i 行, 第 j 列位置的元素. 那么矩阵 A 的行列式为:

$$\det(A) = \sum_{\pi \in S_n} \left(\text{sgn}(\pi) \prod_{i=1}^n (a_{\pi(i) i}) \right).$$



例题

例题 2.20. 计算二阶矩阵 $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ 的行列式.

解答 2.20. 首先根据定义, 我们要找出排列群 S_2 里面的全部元素. 此时有且仅有两种排列, 即

$$\pi_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}; \pi_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

那么, 在排列 π_1 中, 我们发现满足 $\begin{cases} i < j \\ \pi_1(i) > \pi_1(j) \end{cases}$ 的有序数对个数为 0, 因此 $\text{sgn}(\pi_1) = (-1)^0 = 1$; 同

理在 π_2 中我们有且仅有一对满足条件的排列 $(1 < 2; \pi_2(1) > \pi_2(2))$, 则 $\text{sgn}(\pi_2) = (-1)^1 = -1$. 随后由定理 2.20, 我们得到

$$\begin{aligned} \det(A) &= \sum_{\pi \in S_2} \left(\text{sgn}(\pi) \prod_{i=1}^2 (a_{\pi(i) i}) \right) \\ &= \text{sgn}(\pi_1)(a_{\pi_1(1)1})(a_{\pi_1(2)2}) + \text{sgn}(\pi_2)(a_{\pi_2(1)1})(a_{\pi_2(2)2}). \end{aligned}$$

再根据排列的性质, 我们知道 $\pi_1(1) = 1; \pi_1(2) = 2; \pi_2(1) = 2; \pi_2(2) = 1, \text{sgn}(\pi_1) = 1, \text{sgn}(\pi_2) = -1$. 我们将这些数值代入, 得到

$$\begin{aligned} \det(A) &= (+1)a_{11}a_{22} + (-1)a_{21}a_{12} \\ &= a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}. \end{aligned}$$

因此对于二阶矩阵的行列式而言, 我们可以简记为“左上乘右下, 减右上乘左下”. 那么二阶矩阵的行列式有什么几何意义呢? 我们设想在平面直角坐标系 xOy 内有向量 $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ 与 $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}$, 我们假设 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ 不重合, 然后我们考虑以 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ 为两条邻边所构成的平行四边形. 经过割补法等运算, 不难求出这个平行四边形的面积为 $|ad - bc|$, 也正是 $|\det(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2)|$. 因此二阶行列式的绝对值的几何意义也是在平面直角坐标系内由 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ 为邻边所围成的平行四边形的面积.

例题

例题 2.21. 计算三阶矩阵 $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$ 的行列式.

解答 2.21. 我们首先找出 S_3 中的全部元素, 它们分别是:

$$\pi_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}; \pi_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}; \pi_3 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix};$$



$$\pi_4 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}; \pi_5 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}; \pi_6 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

读者不妨尝试自行计算各个排列的符号. 我们最终得到

$$\det(A) = a_{11}a_{22}a_{33} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{21}a_{12}a_{33} + a_{21}a_{32}a_{13} + a_{31}a_{12}a_{23} - a_{31}a_{22}a_{13}.$$

类似地, 三阶行列式的绝对值的几何意义是空间直角坐标系中由三组列向量所围成的平行六面体的体积.

当 n 逐渐增大时, 我们所分析的排列数目也会增多, 计算也会变得愈发复杂, 那么有没有一种可以相对快速地计算行列式的方法呢? 当然有, 并且答案就在定义 2.16 中: 我们只需要对其中的公式做一些变形转化, 便可以得到一个相对简便的计算公式. 我们下面将进行详细地推理: 对于 $n \times n$ 矩阵 A 而言, 首先回顾我们所给出的定义:

$$\det(A) = \sum_{\pi \in S_n} \left(\operatorname{sgn}(\pi) \prod_{i=1}^n (a_{\pi(i)i}) \right).$$

对于一个确定的 j , 记 $S_{n,i}$ 为 S_n 中所有满足 $\pi(j) = i$ 的排列, 那么显而易见

$$S_n = S_{n,1} \cup S_{n,2} \cup \cdots \cup S_{n,n}, \quad S_{n,i} \cap S_{n,j} = \emptyset, (i \neq j).$$

由此我们得出

$$\det(A) = \sum_{\pi \in S_{n,1}} \left(\operatorname{sgn}(\pi) \prod_{i=1}^n (a_{\pi(i)i}) \right) + \cdots + \sum_{\pi \in S_{n,n}} \left(\operatorname{sgn}(\pi) \prod_{i=1}^n (a_{\pi(i)i}) \right).$$

根据定义, 在 $S_{n,i}$ 中 $\pi(j) = i$, 因此

$$\sum_{\pi \in S_{n,i}} \left(\operatorname{sgn}(\pi) \prod_{i=1}^n (a_{\pi(i)i}) \right) = \sum_{\pi \in S_{n,i}} \operatorname{sgn}(\pi) a_{\pi(1)1} \cdots a_{\pi(j)j} \cdots a_{\pi(n)n} = a_{ij} \cdot \sum_{\pi \in S_{n,i}} \operatorname{sgn}(\pi) \prod_{k \neq j} a_{\pi(k)k}.$$

所以当我们取遍所有的 $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ 时, 根据定义我们便有

$$\det(A) = \sum_{i=1}^n a_{ij} \left(\sum_{\pi \in S_{n,i}} \operatorname{sgn}(\pi) \prod_{k \neq j} a_{\pi(k)k} \right).$$

此时, 我们将重点研究 $\left(\sum_{\pi \in S_{n,i}} \operatorname{sgn}(\pi) \prod_{k \neq j} a_{\pi(k)k} \right)$ 一项. 为了方便研究, 我们定义两个特殊的排列 f, g :

$$\begin{pmatrix} (1 & 2 & \cdots & j-1) & (j & j+1 & \cdots & n-1 & n) \\ & & & & \downarrow f & & & & \\ (1 & 2 & \cdots & j-1) & (j+1 & j+2 & \cdots & n & j) \end{pmatrix};$$

$$\begin{pmatrix} (1 & 2 & \cdots & i-1) & (i & i+1 & \cdots & n-1 & n) \\ & & & & \downarrow g & & & & \\ (1 & 2 & \cdots & i-1) & (i+1 & i+2 & \cdots & n & i) \end{pmatrix}.$$



我们此时在矩阵 $A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$ 中考虑一个小一号的 $(n-1) \times (n-1)$ 矩阵:

$$Q = \begin{pmatrix} a_{g(1)f(1)} & a_{g(1)f(2)} & \cdots & a_{g(1)f(n-1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{g(n-1)f(1)} & a_{g(n-1)f(2)} & \cdots & a_{g(n-1)f(n-1)} \end{pmatrix}.$$

根据我们对 f, g 的定义可知, 矩阵 Q 与 i, j 的取值有关, 我们不妨来取一些特定的 i, j 从而更好地研究 Q 的性质.

我们首先设 $i = j = 1$, 那么根据 f, g 的定义, 我们有

$$Q = \begin{pmatrix} a_{g(1)f(1)} & a_{g(1)f(2)} & \cdots & a_{g(1)f(n-1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{g(n-1)f(1)} & a_{g(n-1)f(2)} & \cdots & a_{g(n-1)f(n-1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

我们再看一组取值: 设 $i = n, j = 1$, 那么同样地, 我们有

$$Q = \begin{pmatrix} a_{g(1)f(1)} & a_{g(1)f(2)} & \cdots & a_{g(1)f(n-1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{g(n-1)f(1)} & a_{g(n-1)f(2)} & \cdots & a_{g(n-1)f(n-1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{(n-1)2} & a_{(n-1)3} & \cdots & a_{(n-1)n} \end{pmatrix}.$$

读者此时不妨多取几组 i, j 的值来寻找规律. 事实上, 当我们取特定的 $1 \leq i, j \leq n$ 时, 我们会发现所得到的 $(n-1) \times (n-1)$ 矩阵 Q 即为原矩阵 A 中除去第 i 行与第 j 列之后的矩阵. 我们把这样的矩阵 Q 称为辅助因子矩阵.

定义

定义 2.17. 在 $n \times n$ 矩阵 A 中, 我们定义 A_{ij} 为矩阵 A 去除第 i 行与第 j 列之后所得到的 $(n-1) \times (n-1)$ 矩阵. 我们称 A_{ij} 为 A 在第 i 行, 第 j 列的**辅助因子矩阵 (Cofactor Matrix)**, 我们同时定义 A 在第 i 行, 第 j 列位置的**辅助因子 (Cofactor)**(也称“代数余子式”)为 $A^{ij} = (-1)^{(i+j)} \det(A_{ij})$.

让我们继续上文的推理: 我们此时如果设 $1 \leq i, j \leq n-1$, 设矩阵 $A = (a_{ij})$, 那么 $A_{ij} = (a_{g(i)f(j)})$. 定义



$b_{ij} = a_{g(i)f(j)}$, 结合我们在之前所得到的 $\left(\sum_{\pi \in S_{n,i}} \text{sgn}(\pi) \prod_{k \neq j} a_{\pi(k)k}\right)$, 则我们有

$$\begin{aligned} \left(\sum_{\pi \in S_{n,i}} \text{sgn}(\pi) \prod_{k \neq j} a_{\pi(k)k}\right) &= \left(\sum_{\pi \in S_{n,i}} \text{sgn}(\pi) \prod_{k \neq j} b_{g^{-1}(\pi(k))f^{-1}(k)}\right) \\ &= \left(\sum_{\pi \in S_{n,i}} \text{sgn}(\pi) \prod_{t=1}^{n-1} b_{g^{-1}(\pi(f(t)))t}\right). \end{aligned}$$

我们此时定义一个新的排列 $\pi' = g^{-1}\pi f$ ($\pi(j) = i$), 那么不难发现

$$\pi'(n) = g^{-1}\pi f(n) = g^{-1}\pi(j) = g^{-1}(i) = n,$$

由此 $\pi'(n) = n$ 恒成立, 所以我们实际上只对 $n-1$ 个剩余元素进行排列. 此外由排列的性质, 我们有

$$\text{sgn}(\pi') = \text{sgn}(g^{-1}\pi f) = \text{sgn}(g^{-1}) \text{sgn}(\pi) \text{sgn}(f),$$

即

$$\text{sgn}(\pi) = \text{sgn}(g) \text{sgn}(\pi') \text{sgn}(f^{-1}).$$

通过我们对于 f, g 的定义, 不难发现 $\text{sgn}(g) = j, \text{sgn}(f) = i$. 同时由于 $ff^{-1} = gg^{-1} = e$ (e 为单位元, 即 $e(i) = i$), 所以 $\text{sgn}(f) = \text{sgn}(f^{-1})$, 由此我们得到 $\text{sgn}(\pi) = (-1)^{i+j} \text{sgn}(\pi')$. 因此综合我们之前所得, 我们有

$$\left(\sum_{\pi \in S_{n,i}} \text{sgn}(\pi) \prod_{k \neq j} a_{\pi(k)k}\right) = (-1)^{i+j} \sum_{\pi' \in S_{n-1}} \text{sgn}(\pi') \prod_{t=1}^{n-1} b_{\pi'(t)t}.$$

通过上式我们不难发现 $\sum_{\pi' \in S_{n-1}} \text{sgn}(\pi') \prod_{t=1}^{n-1} b_{\pi'(t)t}$ 一项即代表 $(n-1) \times (n-1)$ 矩阵 $B = (b_{ij})$ 的行列式. 根据定义我们有

$$B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1(n-1)} \\ b_{21} & b_{22} & \cdots & b_{2(n-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{(n-1)1} & b_{(n-1)2} & \cdots & b_{(n-1)(n-1)} \end{pmatrix} \stackrel{b_{ij}=a_{g(i)f(j)}}{=} \begin{pmatrix} a_{g(1)f(1)} & a_{g(1)f(2)} & \cdots & a_{g(1)f(n-1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{g(n-1)f(1)} & a_{g(n-1)f(2)} & \cdots & a_{g(n-1)f(n-1)} \end{pmatrix}.$$

由此不难发现 B 即为我们之前定义的辅助因子矩阵 Q . 那么对于我们算选定的 j , 我们便有

$$\sum_{\pi' \in S_{n-1}} \text{sgn}(\pi') \prod_{t=1}^{n-1} b_{\pi'(t)t} = \det(A_{ij}), \quad \text{其中 } i \text{ 满足 } \pi(j) = i.$$

于是, 我们再结合之前的式子, 把最开始的 $\sum a_{ij}$ 以及关于 i 的加和添加到其中来, 我们便得到:

$$\det(A) = \sum_{i=1}^n a_{ij} \left(\sum_{\pi \in S_{n,i}} \text{sgn}(\pi) \prod_{k \neq j} a_{\pi(k)k}\right) = \sum_{i=1}^n (-1)^{i+j} a_{ij} \det(A_{ij}).$$

我们由此提出以下的定理: 它使得我们在计算矩阵的行列式的时候可以利用“降维打击”的方法, 把一个高阶行列式化简成低阶行列式.



定理

定理 2.20 (Laplace 定理). 设 A 为 $n \times n$ 矩阵, 则对任意的 $1 \leq i, j \leq n$, 有

$$\begin{cases} \det(A) = a_{i1}A^{i1} + a_{i2}A^{i2} + \cdots + a_{in}A^{in} = \sum_{j=1}^n (-1)^{(i+j)} a_{ij} \det(A_{ij}) & (\text{行列式的按行展开法则}) \\ \det(A) = a_{1j}A^{1j} + a_{2j}A^{2j} + \cdots + a_{nj}A^{nj} = \sum_{i=1}^n (-1)^{(i+j)} a_{ij} \det(A_{ij}) & (\text{行列式的按列展开法则}) \end{cases}$$

例题

例题 2.22. 计算 $\begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 1 & -1 & 2 \\ 1 & 2 & -1 \end{pmatrix}$ 的行列式.

解答 2.22. 我们不妨将该矩阵按第一行展开, 那么我们有

$$\begin{aligned} \det(A) &= 1 \det(A_{11}) - 3 \det(A_{12}) + 2 \det(A_{13}) \\ &= \det \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix} - 3 \det \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} + 2 \det \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

我们知道, 对于二阶行列式而言, 其结果便是“左上乘右下减去右上乘左下”, 所以我们很快便能得到

$$\det(A) = 1 \times (-3) - 3 \times (-3) + 2 \times (3) = 12.$$

定义

定义 2.18. 在一个 $n \times n$ 矩阵中, 若 $(-1)^{i+j} = 1$, 我们记该位置的符号为 $+$, 若 $(-1)^{i+j} = -1$, 我们记该位置的符号为 $-$, 那么该矩阵对应的符号矩阵为

$$\begin{pmatrix} + & - & + & - & \cdots \\ - & + & - & + & \cdots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}.$$

我们可以简记为: 位于 $i = j = 1$ 位置的符号永远为正, 然后任何相邻位置的符号不同. 随后我们会讨论一些求解矩阵行列式的技巧与推论. 首先根据定理 2.21 我们知道, 不管我们按照哪一行或者哪一列来展开矩阵, 所得的行列式的结果不变, 因此在展开矩阵的时候我们要挑选尽量形式简单的行或列, 比如有元素 0 的行或列, 这样一来我们就可以减少计算量. 同时行列式也是一个交替多线性映射, 那么矩阵的行列式也就满足所有交替多线性映射的性质.



推论

推论 2.2. 在 $n \times n$ 矩阵 A 中, 记 A 的行列式为 $\det(A)$, 则:

- ① 若 A 中含有任意一行或一列的元素全部为零, 或者 A 中含有完全相同的两行或两列, 则 $\det(A) = 0$;
- ② 交换 A 中的任意两行或者两列, 行列式的符号改变;
- ③ 对于任意的非零常数 λ , 满足 $\det(\lambda A) = \lambda^n \det(A)$;
- ④ 将一行或一列中的元素乘以同一非零常数, 然后加到另一行或另一列的对应元素上, $\det(A)$ 不变.

我们发现, 该定理中的第 1, 2, 3 条我们均以在交替多线性映射中证明, 我们在此仅证明第四条结论:

证明. 设 $A = (v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n)$ 为了简化运算同时不失一般性, 我们便假设将第二列的元素乘以非零常数 λ , 然后加到第一列上, 即 $A' = (v_1 + \lambda v_2 \ v_2 \ \cdots \ v_n)$, 根据交替多线性映射的性质我们有

$$\det(A') = \det((v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n)) + \lambda \det((v_2 \ v_2 \ \cdots \ v_n)),$$

即

$$\det(A') = \det((v_1 \ v_2 \ \cdots \ v_n)) + 0 = \det(A).$$

因此行列式的值不变. ■

定理

定理 2.21. 在 $n \times n$ 矩阵 A, B 中, 记 A, B 的行列式分别为 $\det(A), \det(B)$, 则:

- ① $\det(AB) = \det(A) \det(B)$;
- ② $\det(A) \neq 0$ 的充要条件是矩阵 A 中行向量, 列向量彼此线性无关;
- ③ 当 $\det(A) \neq 0$ 时, $\det(A^{-1}) = \frac{1}{\det(A)}$;
- ④ $\det(A) \neq 0$ 的充要条件是矩阵 A 可逆.

同样地, 定理 2.21 还可以进行扩充, 这里由于篇幅原因不再展开, 读者不妨停下来仔细思考一下, 尝试把行列式和向量之间的线性相关, 线性无关, 还有矩阵的秩, 是否可逆等性质联系在一起.



定义

定义 2.19. 在 $n \times n$ 矩阵 A 中, 定义一个新的矩阵 A' : 其中 $(A')_{ij} = A^{ji}$, 即新矩阵中位置 (i, j) 的元素为 A 在位置 (j, i) 的辅助因子. 那么矩阵 $(A')^\top$ 被我们称作是 A 的**伴随矩阵 (Adjugate Matrix)**, 通常用 $\text{adj}(A)$ 表示. 我们有 $(\text{adj}(A))_{ij} = A^{ji}$.

对于伴随矩阵而言, 我们再引出一条非常重要的定理:

定理

定理 2.22. 对于 $n \times n$ 矩阵 A 而言, 记 $\text{adj}(A)$ 为 A 的伴随矩阵, 则

$$A(\text{adj}(A)) = (\text{adj}(A))A = (\det(A))I$$

特别地, 如果 A 可逆, 我们有:

$$A^{-1} = \frac{1}{\det(A)} \text{adj}(A).$$

我们最后来看一下该定理在求解线性方程组中的应用: 假设我们需要求解线性方程组 $Ax = b$, 我们设

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}; \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}.$$

我们此时规定 A 可逆, 则 $x = A^{-1}b$, 再由定理 2.22, 我们得到

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \frac{1}{\det(A)} (\text{adj}(A))b = \frac{1}{\det(A)} \begin{pmatrix} A^{11} & A^{21} & \cdots & A^{n1} \\ A^{12} & A^{22} & \cdots & A^{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A^{1n} & A^{2n} & \cdots & A^{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}.$$

由此我们不难得到:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{\det(A)} [b_1 A^{11} + b_2 A^{21} + \cdots + b_n A^{n1}] \\ x_2 &= \frac{1}{\det(A)} [b_1 A^{12} + b_2 A^{22} + \cdots + b_n A^{n2}] \\ &\vdots \\ x_n &= \frac{1}{\det(A)} [b_1 A^{1n} + b_2 A^{2n} + \cdots + b_n A^{nn}]. \end{aligned}$$

我们不难发现, 根据之前所给出的定义, $b_1 A^{1i} + b_2 A^{2i} + \cdots + b_n A^{ni}$ 便可以看作是看作把矩阵 A 中的第 i 列替换成 b 之后所得到的新矩阵的行列式. 这样一来我们便发现了一种全新的求解线性方程组的方法, 这便是**Cramer 法则 (Cramer's Rule)**.



定理

定理 2.23 (Cramer 法则). 设 $n \times n$ 矩阵 A 可逆, 那么在线性方程组 $Ax = b$ 中, 其解 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 分别为

$$x_1 = \frac{\det(A_1)}{\det(A)}; x_2 = \frac{\det(A_2)}{\det(A)}; \dots; x_n = \frac{\det(A_n)}{\det(A)}.$$

其中 A_k 代表将矩阵 A 的第 k 列替换成 b 所得出的新矩阵.

2.5 练习

1. 计算下列矩阵的行列式.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 0 & a & 0 \\ b & c & d \\ 0 & e & 0 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} 1 & b & c \\ b & c & 1 \\ c & 1 & b \end{pmatrix}.$$

2. 我们在 $n \times n$ 矩阵中, 将对角线: $(A)_{11} - (A)_{22} - \dots - (A)_{nn}$ 称作是矩阵 A 的主对角线. 如果 A 中所有位于主对角线以下的元素均为 0, 我们称 A 为**上三角矩阵 (Upper Triangular Matrix)**; 类似地如果 A 中所有位于主对角线以上的元素均为 0, 我们定义矩阵 A 为**下三角矩阵 (Lower Triangular Matrix)**.

① 利用排列的知识, 证明: 当 A 为上三角矩阵或下三角矩阵时, 其行列式等于主对角线上的元素的乘积;

② 设 M 可以写成分块矩阵 $M = \begin{pmatrix} X & A \\ 0 & Y \end{pmatrix}$, 其中 X, Y 均为方阵. 证明: $\det(M) = \det(X) \det(Y)$, 同样的结论对与形如 $\begin{pmatrix} X & 0 \\ B & Y \end{pmatrix}$ 的矩阵同样适用;

③ 求 $\mathcal{P} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & -1 & 2 \end{pmatrix}$ 的行列式 $\det(\mathcal{P})$.

3. 下列说法中哪些是正确的? 哪些是错误的? 如果错误, 试着举出一个反例或说明原因.

① $\det(A + B) = \det(A) + \det(B)$;

② $\det(A) = \det(\mathbf{RREF}(A))$;



③ $\det(A) = \det(A^\top)$;

④ 若 $A^\top = -A$, 则 $\det(A) = -1$;

⑤ $\det(A^\top A) > 0$;

⑥ $\det(I + A) = 1 + \det(A)$;

⑦ 若 A 中有一行元素全部为零, 则 $\text{adj}(A)$ 中也有一行元素全部为零;

⑧ 若 A 可逆, 则 $\text{adj}(A)$ 可逆;

4. 证明: 对任意的 3×3 矩阵 A 而言, $A^2 + I \neq 0$.

5. 证明: 对任意的 $n \times n$ 矩阵 A, B 而言, $\det(A + B^\top) = \det(A^\top + B)$.

6. 若 $\det \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = -2$, 求 $\det \begin{pmatrix} 2 & -2 & 0 \\ c+1 & -1 & 2a \\ d-2 & 2 & 2b \end{pmatrix}$.

7. 设 $Q = \begin{pmatrix} 1+x & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2+x & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 3+x & 4 \\ 1 & 2 & 3 & 4+x \end{pmatrix}$, 据此求 $\det(Q)$.

8. 若 $\det \begin{pmatrix} x & y & 0 & 0 \\ 0 & x & y & 0 \\ 0 & 0 & x & y \\ y & 0 & 0 & x \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} 1 & a & a^2 & a^3 \\ a & a^2 & a^3 & 1 \\ a^2 & a^3 & 1 & a \\ a^3 & 1 & a & a^2 \end{pmatrix} = 0$, 据此求 x, y, a .

9. 若 $A^{-1} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & -1 \end{pmatrix}$, 求 $\text{adj}(A)$.

10. 设 A 为 $n \times n$ 矩阵 ($n \geq 2$), 证明:

① 对于任意的非零常数 λ , 有 $\text{adj}(\lambda A) = \lambda^{n-1} \text{adj}(A)$;

② $\text{adj}(A^{-1}) = (\text{adj}(A))^{-1}$;

③ $\text{adj}(A^\top) = (\text{adj}(A))^\top$;

④ $\text{adj}(\text{adj}(A)) = (\det(A))^{n-2} A$.



2.6 矩阵的初等变换

回想我们在最开始引入的高斯消元法知识:

定理

定理 2.24. 在形如 $A|b$ 的矩阵中, 我们可以对增广矩阵进行如下的初等行变换, 使得最后的解不受影响:

- ① 交换任意两行;
- ② 将一行中的所有元素全部乘以同一非零常数 k ;
- ③ 将一行中的所有元素乘以同一常数 λ , 再加入到另外一行相对应的元素上. 即 $R_i \leftarrow R_i + \lambda R_j, \lambda \in \mathbb{R}$.

对于高斯消元法里面的每一步运算, 我们能否用线性变换的知识去理解? 为了简化运算, 我们不妨假设矩阵 $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$, 然后我们先考虑这样的一个线性变换 T_1 , 我们记该变换在标准基底下对应的矩阵形式为 E_1 , 满足:

$$E_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

此时我们把变换 T_1 作用在矩阵 A 上, 我们得到

$$T_1(A) = E_1 A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}.$$

此时我们发现, $T_1(A)$ 的意义便是将矩阵 A 的第一, 二行进行交换. 也就是说, 变换 T_1 也就对应了高斯消元里面的第一条法则, 即交换任意两行. 此时我们还可以给出交换矩阵 A 中第一, 第三行的矩阵 E_2 以及交换 A 中第二, 第三行的矩阵 E_3 , 我们设它们所对应的线性变换分别为 T_2, T_3 . 则

$$T_2(A) = E_2 A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{31} & a_{32} & a_{33} \\ a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{pmatrix};$$

$$T_3(A) = E_3 A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{pmatrix}.$$

我们不难发现, 此时矩阵 E_1, E_2, E_3 均与标准矩阵 I 十分相像, 它们都是由标准矩阵 I 经过交换任意两行中



的元素从而得到的新矩阵. 我们此时再来看另一个线性变换 $\mathcal{S}$, 设该变换在标准基底下的矩阵形式为 E_4 , 满足:

$$E_4 = \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

其中 λ 为非零常数. 我们此时把该变换作用在矩阵 A 上, 那么有

$$\mathcal{S}(A) = E_4 A = \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda a_{11} & \lambda a_{12} & \lambda a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}.$$

此时, 线性变换 $\mathcal{S}$ 便代表将矩阵 A 中第一行元素全部乘以一个非零常数 λ , 参照高斯消元法的定义, 该变换也就对应了第二条法则, 即把同一行的元素全部乘以同一个非零常数. 此时矩阵 E_4 也便是标准矩阵 I 经过把第一行乘以同一常数 λ 之后所得到的新矩阵. 当然, 我们也可以进行线性变换的复合. 考虑复合变换 $\mathcal{S} \circ T_1$, 根据线性变换复合的定义, 我们有

$$(\mathcal{S} \circ T_1)(A) = \mathcal{S}(T_1(A)) = E_4(E_1 A) = (E_4 E_1)A,$$

即

$$\begin{aligned} (\mathcal{S} \circ T_1)(A) &= \left(\begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \lambda & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \lambda a_{23} \\ a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

此时我们不难发现, 线性变换 $\mathcal{S} \circ T_1$ 即代表“先 T_1 后 $\mathcal{S}$ ”, 即为交换矩阵的第一, 第二行, 然后第一行整体乘以非零常数 λ . 通过这个变换, 我们是否也能够理解为什么在矩阵乘法中 AB 和 BA 不一定相等? 如果是变换 $T_1 \circ \mathcal{S}$, 即为“先 $\mathcal{S}$ 后 T_1 , 此时的结果还一样吗? (读者不妨尝试求出此时的矩阵). 在原变换 $\mathcal{S} \circ T_1$ 中, 该复合变换所对应的矩阵 $(E_4 E_1)$ 便也可以看作是标准矩阵 I 经过了两步变换 (先交换第一, 第二行, 然后第一行整体元素乘以非零常数 λ) 之后所得到的结果.



我们不妨再考虑一个线性变换 Q , 我们设 E_5 为该变换在标准基底下的矩阵形式, 且满足

$$E_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \lambda \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

那么, 当我们把线性变换 Q 作用在矩阵 A 上时, 我们有

$$Q(A) = E_5 A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \lambda \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} + \lambda a_{31} & a_{12} + \lambda a_{32} & a_{13} + \lambda a_{33} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}.$$

该变换 Q 即代表了将第三行中的元素乘以同一个非零常数 λ , 然后加到第一行上. 也就是对应了高斯消元法里面的第三条. 其中 E_5 也可以看作单位矩阵 I 中, 将第三行乘以同一常数 λ , 然后加到第一行上所得到的结果.

我们把上文中形如 E_1, E_2, E_3, E_4, E_5 的矩阵称作是**初等矩阵 (Elementary Matrix)**, 我们在此给出初等矩阵的定义 (为了简化数学符号我们仅给出 2×2 初等矩阵的定义):

定义

定义 2.20. 如果矩阵 E 可以通过对单位矩阵 I 进行一次高斯消元法里面提到的三种变化而得到, 我们则称 E 为初等矩阵. 初等矩阵包括以下三类:

- ① 形如 $E = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ 的矩阵 (对应交换第一, 二行);
- ② 形如 $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$ 的矩阵 (对应将第二行乘以非零常数 λ);
- ③ 形如 $E = \begin{pmatrix} 1 & \lambda \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ 的矩阵 (对应将第二行乘以非零常数 λ , 然后加到第一行上).

读者可以自行尝试推导剩余的几种变换矩阵, 比如用第二行减去第一行的 λ 倍等.

定理

定理 2.25. 所有的初等矩阵均可逆, 其逆矩阵也为初等矩阵.

由此一来, 我们便明白了高斯消元其实也是一个变换 $\mathcal{G}: A \rightarrow \mathbf{RREF}(A)$, 其中 $\mathcal{G}$ 便是若干个初等矩阵复合的结果. 我们不妨来看一个简单的例子: 设矩阵 $B = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$, 当我们进行高斯消元的时候, 我们先对第一列进行消元, 即把第一行的元素全部乘以 2, 然后用第二行减去第一行. 那么这个变换便可以看作是两个初等矩阵的复合. 我们设 $E_1 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, 该矩阵即代表将第一行全部元素乘以 2; 设 $E_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$, 该矩阵即代表用矩



阵的第二行减去第一行. 那么按照顺序, 第一列的消元即可以表示成为

$$E_2 E_1 B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 0 & -5 \end{pmatrix}.$$

这与我们使用高斯消元法所得到的矩阵一致. 我们随后来看第二列的消元, 为简化处理我们先将第一行同除以 2, 记 $E_3 = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ 为该运算所代表的矩阵, 那么

$$E_3(E_2 E_1 B) = \begin{pmatrix} 0.5 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 0 & -5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 0 & -5 \end{pmatrix}.$$

我们将第一行同乘以 5, 将第三行同乘以 3, 记 $E_4 = \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $E_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$, 随后我们把第二行加到第一行上去, 记 $E_6 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. 那么把这些初等矩阵进行复合, 则有

$$E_6 E_5 E_4 (E_3 E_2 E_1) B = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 0 & -5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & -15 \end{pmatrix}.$$

最后, 我们将第一行同除以 5, 将第三行同除以 -15, 记 $E_7 = \begin{pmatrix} 0.2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $E_8 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{15} \end{pmatrix}$, 最终我们即可得到单位矩阵 I , 也就是说

$$(E_8 E_7 E_6 E_5 E_4 E_3 E_2 E_1) B = I.$$

由于此时 $\mathbf{RREF}(A) = I$, 所以矩阵 A 可逆, 同时由于所有的初等矩阵均可逆, 因此我们有

$$A = (E_8 E_7 E_6 E_5 E_4 E_3 E_2 E_1)^{-1} I,$$

即

$$A = E_1^{-1} E_2^{-1} \cdots E_8^{-1}.$$

我们把上述发现总结成一条定理:

定理

定理 2.26. 若矩阵 A 可逆, 则 A 可以写成若干个基本初等矩阵的乘积; 当 A 不可逆时, 存在可逆矩阵 U , 使得 $\mathbf{RREF}(A) = UA$, 其中 U 也是若干个基本初等矩阵的乘积.

由这条定理我们可以给出如下推论:



推论

推论 2.3. 设 A 经由高斯消元之后得到 B , 则:

① 存在可逆矩阵 U , 使得 $B = UA$. 其中 $U = E_k E_{k-1} \cdots E_2 E_1$ 即为若干个初等矩阵的乘积, 这些初等矩阵对应了高斯消元里面的变换;

② 对增广矩阵 $(A \mid I)$ 进行高斯消元, 最终可以得到 $(B \mid U)$.

我们不妨用利用推论 2.2 来尝试将矩阵 A 分解成两个矩阵的乘积的形式. 我们为方便起见, 先假设

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 3 \end{pmatrix},$$

随后, 我们利用高斯消元把 A 转化成上三角矩阵: 我们首先用第二行的元素减去第一行元素的 2 倍, 然后用第三行元素加上第一行元素, 最后再用第三行的三倍两加上第二行的两倍. 这样的变换可以用基本初等矩阵表示为

$$E_3 E_2 E_1 A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & -3 & 3 \\ 0 & 0 & 12 \end{pmatrix}.$$

我们将式子最右边的上三角矩阵记作 U . 于是我们便有

$$E_3 E_2 E_1 A = U.$$

由于基本初等矩阵可逆, 我们便有

$$A = E_1^{-1} E_2^{-1} E_3^{-1} U.$$

基本初等矩阵的逆矩阵并不难求. 对于 E_1 , 其定义是第二行减去第一行的两倍, 那么它的逆变换便是第二行加上第一行的两倍; E_2 的逆变换便是第三行减去第一行; E_3 的逆变换便是第三行减去第二行的两倍再除以 3. 由此我们得到

$$E_1^{-1} E_2^{-1} E_3^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

我们此时把等式最右边的下三角矩阵记作 L , 那么由此我们便有

$$A = LU = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & -\frac{2}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & -3 & 3 \\ 0 & 0 & 12 \end{pmatrix}.$$

上式也被称作是矩阵的**LU 分解 (LU Factorization)**, 值得注意的是 LU 分解对于 $m \times n$ 矩阵同样适用, 只不过此时情况会稍加复杂, 我们在此略去. (读者可能会发现这里的 LU 矩阵可能与有些教材中的定义存在差异. 在



一些书中矩阵 L 的主对角线上的元素全部为 1. 这二者之间几乎没有差异, 我这样定义的出发点是想从初等矩阵的角度去考虑问题. 另外, 这里为了简化讨论, 我们假设消元过程中不需要交换行. 若需要交换行, 则通常要引入置换矩阵 P , 得到 $PA = LU$ 的形式).

我们不妨再考虑另一种分解: 设 A 为 $m \times n$ 矩阵, 且 $\text{rank}(A) = r$. 我们设 $\text{RREF}(A) = R$, 那么根据上述定理可知, 存在可逆矩阵 $U \in M_m$, 使得 $R = UA$, 并且我们知道存在以下形式的变换:

$$(A \mid I_m) \longrightarrow (R \mid U).$$

由于 $\text{rank}(A) = r$, 意味着在矩阵 R 中有 r 个前导变量, 那么通过适当地变换, R 中的元素可以写成如下图所示的分块矩阵:

$$R \in M_{mn} = \begin{pmatrix} I_r & Y \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}; \quad R^\top \in M_{nm} = \begin{pmatrix} I_r & \mathbf{0} \\ Y & \mathbf{0} \end{pmatrix}.$$

那么, 对 $R^\top$ 再次进行变换, 我们最终可以得到形如 $\begin{pmatrix} I_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$ 的矩阵, 那么此时即存在 $n \times n$ 可逆矩阵 U_1 , 使得

$$\begin{pmatrix} I_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} = U_1 R^\top.$$

我们设 $V = U_1^\top$, 此时我们有

$$UAV = RV = RU_1^\top = (U_1 R^\top)^\top = \left(\begin{pmatrix} I_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}_{n \times m} \right)^\top = \begin{pmatrix} I_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}_{m \times n}.$$

由此我们引出另一条定理:

定理

定理 2.27. 若 $m \times n$ 矩阵 A 的秩为 r , 则存在可逆矩阵 $U \in M_m, V \in M_n$, 使得

$$UAV = \begin{pmatrix} I_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}_{m \times n}.$$

我们称 UAV 为矩阵 A 的 **史密斯标准型 (Smith Normal Form)**.

至此, 第二章的内容到此结束. 我知道线性变换所涵盖的东西实在太多, 但无奈篇幅有限, 只好忍痛割爱. 第二章的内容同样也是第三章的垫脚石, 因此希望读者能够认真反复地研读该章节, 为自己的线性代数水平打下扎实的基础.



2.6 练习

1. 我们该如何理解初等矩阵的逆矩阵? 求出下列初等矩阵的逆矩阵.

$$E_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad E_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \quad E_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 5 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

2. 将下列矩阵表示成若干个基本初等矩阵的乘积:

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 3 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 6 \end{pmatrix}.$$

3. 若 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$, $C = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$, 求出初等矩阵 E_1, E_2 , 使得 $C = E_2 E_1 A$.

4. 在本书第一章第一节中, 我便提出过如下的定理: 对于任意的矩阵 A 而言, $\text{rank}(A) = \text{rank}(\text{RREF}(A))$. 在完成本节的学习之后, 尝试证明这一定理.

5. 假设在矩阵变换时我们有 $(A \mid I) \longrightarrow (P \mid Q)$, 证明: $P = QA$.

6. 求出下列矩阵的 LU 分解:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix}; \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$



线性变换之间的转化

在上一章中，我们学习了线性变换的基本性质，我们知道当线性变换选定基底之后便有了矩阵. 因此对于同一个线性变换而言，如果选定的基底不同，所表达出的矩阵也就不同. 这些矩阵不同基底下面的矩阵之间有着怎样的联系？完成本章的学习，读者便会对这一概念有着更加深刻的理解.

3.1 不同基底之间的转换

如果读者此时还有印象，想必会记得在第二章第一节里面我举了一个例子：求出把向量投影到直线 $y = 2x$ 上的变换矩阵. 那么理想情况下便是取两个分别与直线平行，垂直的向量作为基底，此时的线性变换矩阵便会十分简单. 但是我们最后却混淆了不同的基底，导致计算结果出错. 我们现在来重新审视一下这个问题：考虑线性变换 $\mathcal{T}: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ 以及线性空间 $\mathcal{V}$ 的两组基底

$$\beta = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}; \gamma = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$$

我们假设选取 β 基底作为我们的“参考系”，那么对于任意的一个向量 $v \in \mathcal{V}$ ，我们记该向量在基底 β 下的坐标为 $[v]_\beta$. 此时我们设 $[\mathcal{T}]_\beta$ 为线性变换在基底 β 下的表达形式，那么只有这样，我们知道 $[\mathcal{T}]_\beta[v]_\beta$ 才有意义. 如果此时我们假设 $[\mathcal{T}]_\gamma$ 为线性变换在基底 γ 下的表达形式，此时我们知道乘法 $[\mathcal{T}]_\gamma[v]_\beta$ 没有意义，我们需要将二者转化到同一个基底里面. 我们不妨假设 $[\mathcal{T}]_\gamma$ 的形式非常简便，所以我们会考虑把 $[v]_\beta$ 转化为 $[v]_\gamma$. 我们假设线性变换 $\mathcal{T}_\beta^\gamma: [v]_\beta \rightarrow [v]_\gamma$ 便是实现这一转化的媒介. 设该变换的矩阵形式为 P ，那么根据定义，我们有

$$P = \begin{pmatrix} | & | & & | \\ [(v_1)]_\gamma & [(v_2)]_\gamma & \cdots & [(v_n)]_\gamma \\ | & | & & | \end{pmatrix}$$

此时，我们便可以使用 $[\mathcal{T}]_\gamma[v]_\gamma$ 进行计算，记 $[\mathcal{T}]_\gamma[v]_\gamma = [w]_\gamma$. 我们最后需要做的即为将该向量重新变化至我们所选定的基底 β 中. 为此我们便可以使用 $\mathcal{T}_\beta^\gamma$ 的逆变换. 下面的图便是一个非常直观的例子：

$$\begin{array}{ccc} [v]_\beta & \xrightarrow{[\mathcal{T}]_\beta} & [\mathcal{T}v]_\beta \\ \downarrow P & & \uparrow P^{-1} \\ [v]_\gamma & \xrightarrow{[\mathcal{T}]_\gamma} & [\mathcal{T}v]_\gamma \end{array}$$

由此不难看出，对于任意的 $[v]_\beta$ ，有 $[\mathcal{T}]_\beta[v]_\beta = (P^{-1}[\mathcal{T}]_\gamma P)[v]_\beta$. 这样一来，我们就完成了不同基底之间的转换. 那么现在我们可以回到之前所提到的例子了：



例题

例题 3.1. 在平面直角坐标系 $\mathbb{R}^2$ 中, 线性变换 P 满足以下性质: 对于任意的 $x \in \mathbb{R}^2$, $P(x)$ 的结果为将向量 x 投影至直线 $y = 2x$ 上. 那么对于任意的向量 $x = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ 而言, 计算其结果 $P(x)$

解答 3.1. 首先令 $\beta = \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right)$, 不难发现 β 即为标准基底. 随后我们选取两个特殊的向量: 与直线 $y = 2x$ 垂直的向量以及与直线 $y = 2x$ 重合的向量. 那么我们可以选取一组新的基底: $\gamma = \left(\begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \right)$, 此时我们知道线性变换在基底 γ 下的矩阵形式便很容易求得:

$$[P]_{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

此时, 如果要求出 $[P]_{\beta}$, 我们便可以使用形如上一页图中的转换. 我们设线性变换 $Q: [v]_{\beta} \rightarrow [v]_{\gamma}$, 那么我们可以求出矩阵 Q , 矩阵 Q 即为

$$Q = \left(\begin{array}{c|c} \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right)_{\gamma} & \left(\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right)_{\gamma} \end{array} \right)$$

如果要求 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_{\gamma}$, 则需要我们满足条件的线性组合:

$$\lambda_1 \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

此时我们有 $\lambda_1 = -\frac{2}{5}; \lambda_2 = \frac{1}{5}$, 同样我们可以求 $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_{\gamma}$, 因此我们便可以求得 Q 为

$$Q = \begin{pmatrix} -\frac{2}{5} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{5} & \frac{2}{5} \end{pmatrix}.$$

那么此时, 参考我们上一页给出的图表, 我们有

$$P(x) = \left(\begin{pmatrix} -\frac{2}{5} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{5} & \frac{2}{5} \end{pmatrix} \right)^{-1} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{2}{5} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{5} & \frac{2}{5} \end{pmatrix} (x) = \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & \frac{2}{5} \\ \frac{2}{5} & \frac{4}{5} \end{pmatrix} x.$$

对于这种形如 $A = Q^{-1}PQ$ 的形式, 我们用矩阵的相似来定义该关系.



定义

定义 3.1. 对于 $n \times n$ 矩阵 A, B 而言, 如果存在 $n \times n$ 可逆矩阵 P , 使得 $A = P^{-1}BP$, 我们则称 $n \times n$ 矩阵 A, B 为**相似矩阵 (Similar Matrix)**, 一般记作 $A \simeq B$.

不难看出, 相似矩阵之间还是一个等价关系, 即相似矩阵满足自反性, 对称性和传递性. 有兴趣的读者可以自行证明.

定理

定理 3.1. 设 $A, B, C \in M_n$, 则

- ① $A \simeq A$
- ② $A \simeq B \implies B \simeq A$
- ③ $A \simeq B; B \simeq C \implies A \simeq C$

定理

定理 3.2. 设矩阵 $A \simeq B$, 则 $\det(A) = \det(B)$

证明. 根据定义, 若 $A \simeq B$, 那么存在可逆矩阵 Q , 使得 $A = Q^{-1}BQ$, 那么 $\det(A) = \det(Q^{-1}BQ) = \det(Q^{-1}) \det(B) \det(Q) = \frac{1}{\det(Q)} \det(B) \det(Q) = \det(B)$, 因此定理 3-2 得证. ■

3.2 线性变换 (矩阵) 的特征向量与特征值

在函数中, 我们接触到过“不动点”的概念, 比如像 $f(f(x)) = C$ (C 为常数) 这样的例子. 当我们知道某个函数具有类似的性质时, 在研究函数的复合时便会容易很多. 那么对于线性变换而言, 我们能够找到一个线性变换里面的“不变量”呢? 即类似 $T(T(x)) = y$ 这样的形式. 我们用**特征向量 (Eigenvectors)** 和 **特征值 (Eigenvalues)** 来定义线性变换里面的这一“不变”的关系.

定义

定义 3.2. 在线性变换 $T: \mathcal{V} \longrightarrow \mathcal{V}$ 中, 如果存在常数 $\lambda \in \mathbb{F}$ 以及**非零**向量 $x \in \mathcal{V}$, 使得

$$T(x) = \lambda x$$

成立, 我们则称 λ 为线性变换 T 的一个特征值, x 为与特征值 λ 所对应的特征向量.

推论

推论 3.1. 设线性变换 $T: \mathcal{V} \longrightarrow \mathcal{V}$ 的一个特征值为 λ , 与该特征值所对应的特征向量为 v . 那么对于任意的正整数 n , 有

$$T^n(v) = \lambda^n v$$



因此, 我们得到了同函数里面的“不动点”所类似的推论. 在此情况下当我们计算线性变换自身的复合时, 便可以利用特征向量和特征值的关系来进行简便运算. 这一点在后面章节的矩阵对角化里面会重点提及. 我们现在需要知道的是: 并不是所有的线性变换都会有特征向量和特征值; 同理可知一个线性变换也可能会有多个特征向量和特征值; 一个特征向量仅能和与之对应的特征值组合, 否则就不具备定义 3-2 中的性质.

那么我们便想知道对于给定的线性变换 $T: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$, 我们该如何计算该线性变换的特征向量和特征值呢? 我们一起来看下面的推理过程: 假设在线性变换 $T: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ 中, λ 为一个特征值, v 为该特征值所对应的特征向量. 那么根据定义, 我们有

$$T(v) = \lambda v.$$

我们将原等式进行移项, 得到

$$T(v) - \lambda(v) = 0.$$

根据单位变换的性质, 设 I 为单位矩阵, T 的矩阵形式为 A , 那么有 $Iv = v$, 因此

$$A(v) - \lambda(Iv) = 0,$$

即

$$(A - \lambda I)v = 0.$$

由此可知, 齐次方程 $(A - \lambda I)v = 0$ 存在非零解, 那么 $A - \lambda I$ 不可逆, 即 $\det(A - \lambda I) = 0$.

定义

定义 3.3. 在线性变换 $T: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ 中, 设 T 在某一选定基底下的矩阵形式为 A , 那么我们定义 T 在该基底下的 **特征多项式 (Characteristic Polynomial)** $C_T(x)$ 为

$$C_T(x) = \det(A - xI).$$

其中, T 的特征值即为 $C_T(x)$ 的零点.

由于我们知道, 当 λ 为特征值时, 与其对应的特征向量 v 满足 $v(T - \lambda I) = 0$, 也就是说,

$$v \in \text{Ker}(T - \lambda I).$$

推论

推论 3.2. 设 $T \in M_n(\mathbb{R})$, λ 为其一特征值, v 为关于 λ 的特征向量. 则

$$v \in \text{Ker}(T - \lambda I).$$

在这里, 当特征值 λ 给定时, 我们便得知全体关于 λ 的特征向量构成 $T - \lambda I$ 的核空间. 我们也可以将其称为特征空间, 记作 $\text{Eig}_T(\lambda)$. 任何非零 $u \in \text{Eig}_T(\lambda)$ 均为与特征值 λ 对应的特征向量. 特征空间也是 $\mathcal{V}$ 的一个子空间.



例题

例题 3.2. 设线性变换 $\mathcal{P}: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ 满足 $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$, 证明: $\mathcal{P}$ 的特征值为 0 或 1.

解答 3.2. 设 λ 为线性变换 $\mathcal{P}$ 的一个特征值; $\boldsymbol{v}$ 是与之对应的一个特征向量. 由特征值的定义可知, $\mathcal{P}\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}$, 再由题意可知, $\mathcal{P}^2\boldsymbol{v} = \lambda^2\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v} = \mathcal{P}\boldsymbol{v}$, 因此有 $\lambda^2 = \lambda$, 即解得 $\lambda = 0$ 或 1 .

此时我们再回到相似矩阵: 我们之所以称之为相似矩阵, 是因为二者之间存在着相似的结构. 我们目前仅仅知道相似矩阵的行列式相同, 但实际上相似矩阵也有着相同的特征值.

定理

定理 3.3. 若矩阵 $A \simeq B$, 则 A, B 具有相同的特征值.

证明. 根据相似矩阵的定义, 我们知道存在可逆矩阵 Q , 使得 $A = Q^{-1}BQ$. 那么我们有 $\det(A - \lambda I) = \det(Q^{-1}BQ - \lambda I)$. 我们对该式进行等价变换, 有

$$\det(A - \lambda I) = \det(Q^{-1}BQ - \lambda Q^{-1}IQ),$$

即为

$$\det(A - \lambda I) = \det(Q^{-1}Q(B - \lambda I)).$$

再由行列式的性质, 我们知道

$$\begin{aligned} \det(Q^{-1}(B - \lambda I)Q) &= \det(Q^{-1}) \det(B - \lambda I) \det(Q) \\ &= \frac{1}{\det(Q)} \det(B - \lambda I) \det(Q) \\ &= \det(B - \lambda I). \end{aligned}$$

我们得到 $\det(A - \lambda I) = \det(B - \lambda I)$, 二者的特征多项式相同, 因此也具有相同的特征值. ■

值得注意的是, 虽然相似矩阵的特征值相同, 但是由于矩阵结构毕竟不同, 所以相似矩阵的特征向量 (特征向量构成的空间) 不一定相同. 因此, 我们现在便知道如何计算给定矩阵 (线性变换) 的特征向量和特征值. 欲求特征值, 我们只需求方程 $\det(A - xI) = 0$ 的解. 回顾行列式的知识, 我们想什么情况下矩阵的行列式能够很容易计算出来? 我们会想到上三角矩阵和下三角矩阵 (若读者不熟悉此概念请查阅 2.5 练习 2), 此时矩阵的行列式即为主对角线上元素的乘积. 更进一步, 考虑一个主对角线以外的位置全部为零的矩阵, 即 $(A)_{ij} = 0$ 若 $i \neq j$. 形如这样的矩阵我们称作是**对角矩阵 (Diagonal Matrix)**, 我们设对角矩阵 A 主对角线上的元素从左上方到右下方依次为 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. 由于此时矩阵的结构简单, 为了简化处理我们也可以将该对角矩阵 A 记作 $\text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$. 同上 (下) 三角矩阵类似, 对角矩阵的行列式即为对角线上全体元素的乘积, 此时我们也不难发现, 对角矩阵的特征多项式 $\det(A - xI)$ 中, 有

$$(A - xI)_{ij} = \begin{cases} \lambda_i - x & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$



此时, 我们便有

$$\det(A - xI) = \prod_{i=1}^n (\lambda_i - x).$$

推论

推论 3.3. 对角矩阵, 上 (下) 三角矩阵的特征值即为主对角线上的全部元素.

为了更好地判断一个线性变换 (矩阵) 的特征值, 我们通常会运用因式分解, 将矩阵的特征多项式写成形如 $p(x) = (\lambda_1 - x)^{k_1}(\lambda_2 - x)^{k_2} \cdots (\lambda_j - x)^{k_j}$ 的形式. 此时, 我们要考虑复数根的情况了, 但是我会题目中强调数域, 没有特殊说明的时候我们还是仅考虑特征向量为实数的情况.

随后, 我们再给出两个至关重要的定义: 特征值的 **代数重数 (Algebraic Multiplicity)** 以及 **几何重数 (Geometric Multiplicity)**, 这两个定义在后面的章节里面对于对角化的判断不可或缺.

定义

定义 3.4. 在线性变换 $T: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ 中, 设 λ 为线性变换的一个特征值, 则

- ① λ 的 **代数重数 (Algebraic Multiplicity)** 为特征多项式中 $(\lambda - x)$ 一项的次幂.
- ② λ 的 **几何重数 (Geometric Multiplicity)** 为特征空间 $Eig_T(\lambda) := \text{Ker}(T - \lambda I)$ 的维数.

例题

例题 3.3. 设矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, 求出 A 的特征值, 以及这些特征值所对应的几何重数与代数重数.

解答 3.3. A 的特征多项式为 $\det \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x & 0 & 0 \\ 0 & x & 0 \\ 0 & 0 & x \end{pmatrix} \right)$, 即 $C_A(x) = \det \left(\begin{pmatrix} 1-x & 0 & 0 \\ 1 & 2-x & 0 \\ 1 & 0 & 1-x \end{pmatrix} \right)$, 根据行列式的展开法则, 我们按第一行展开, 即有

$$\begin{aligned} C_A(x) &= (1-x)[(2-x)(1-x)] \\ &= (1-x)^2(2-x). \end{aligned}$$

因此, 我们发现矩阵 A 的特征值为 $\lambda_1 = 1; \lambda_2 = 2$, 其中根据定义, λ_1 的代数重数为 2; λ_2 的代数重数为 1. 对于 λ_1 而言, 根据定义有 $Eig_A(\lambda_1) = \text{Ker}(A - I)$, 即

$$Eig_A(\lambda_1) = \text{Ker} \left(\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right).$$



通过对矩阵 $A - I$ 进行高斯消元, 我们得到

$$\mathbf{RREF}(A - I) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

因此, 我们知道 $\mathbf{Ker}(A - I) = \mathbf{Span} \left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right)$, 不难发现其维数为 1. 即特征值 $\lambda_1 = 1$ 的几何重数为 1.

对于特征值 λ_2 , 根据定义, 我们得到

$$Eig_A(\lambda_2) = \mathbf{Ker}(A - 2I) = \mathbf{Ker} \left(\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right).$$

对 $A - 2I$ 进行高斯消元, 得到

$$\mathbf{RREF}(A - 2I) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

因此, $\mathbf{Ker}(A - 2I) = \mathbf{Span} \left(\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right)$, 其维数为 1, 因此特征值 λ_2 对应的几何重数为 1.

在以后的计算中, 为方便文字说明, 对于一个特征值 λ 而言, 我们将使用 $m_\lambda(a)$ 代表其代数重数, 使用 $m_\lambda(g)$ 代表其几何重数.

例题

例题 3.4. 证明 $n \times n$ 矩阵 A 可逆 (存在逆矩阵) 的充要条件是 A 不存在为 0 的特征值.

解答 3.4. 我们可以证明其逆反命题: 即 A 不可逆的充要条件是存在为 0 的特征值:

($\implies$)

假设 A 不可逆, 根据定义我们有 $\det(A) = 0$, 在特征多项式 $\det(A - xI)$ 中正好对应 $x = 0$ 的解, 因此 A 的一个特征值为 0.

($\impliedby$)

假设 A 存在为 0 的特征值, 则其特征多项式为 $C_A(x) = \det(A - xI)$, 将 $x = 0$ 代入特征多项式, 得 $\det(A - 0I) = \det(A) = 0$, 根据行列式的定义, $\det(A) = 0$ 说明 A 不可逆, 因此得证.

此时, 我们想研究一种特殊的情况: 我们设线性变换 $T: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$, 令 $v \in \mathcal{V}$, 假设 $\dim(\mathcal{V}) = n$, 考虑由以下向量为线性组合所构成的子空间:

$$\beta = \{v, T(v), T^2(v), \dots, T^{n-1}(v)\}.$$



如果我们假设 β 彼此线性无关, 那么根据定义, 其即为 $\mathcal{V}$ 的一组基底. 由于 $T^n(v) \in \mathcal{V}$, 便存在常数 $c_0, c_1, \dots, c_{n-1}$, 使得

$$T^n(v) + c_0 v + c_1 T(v) + \dots + c_{n-1} T^{n-1}(v) = 0$$

此时, 我们设矩阵 B 为线性变换 T 在基底 β 下的矩阵表达形式, 那么我们有

$$B = \left(\begin{array}{c|c|c|c} | & | & | & | \\ [T(v)]_\beta & [T(T(v))]_\beta & \cdots & [T(T^{n-1}(v))]_\beta \\ | & | & | & | \end{array} \right).$$

根据 β 的定义, 我们便有

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & -c_0 \\ 1 & 0 & \cdots & -c_1 \\ 0 & 1 & \cdots & -c_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -c_{n-1} \end{pmatrix},$$

因此其特征多项式为

$$\begin{aligned} C_B(x) &= \det(B - xI) \\ &= \det \begin{pmatrix} -x & 0 & \cdots & -c_0 \\ 1 & -x & \cdots & -c_1 \\ 0 & 1 & \cdots & -c_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & -x - c_{n-1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

其中, 我们将该行列式按第 n 列展开, 那么有

$$\det(B - xI) = (-1)^{2n}(-x - c_{n-1}) \det(B_{nn}) + \sum_{j=1}^{n-1} (-1)^{n+j}(-c_{j-1}) \det(B_{jn})$$

其中, 我们观察到 B_{nn} 为下三角矩阵, 因此 $\det(B_{nn}) = (-x)^{n-1}$, 同时 B_{jn} 为形如 $\begin{pmatrix} M_j & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & N_j \end{pmatrix}$ 的分块矩阵, 且

$$\det(B_{jn}) = \det(M_j) \det(N_j) = (-x)^{j-1} (1)^{n-j}$$

由此可知

$$\det(B - xI) = (-1)^{2n}(-x - c_{n-1})x^{n-1} + \sum_{j=1}^{n-1} (-1)^{2n}(-c_{j-1})(-x)^{j-1}$$

即

$$\det(B - xI) = x^n + c_{n-1}x^{n-1} + \cdots + c_1x + c_0$$

此时, 令 $x = T$, 我们便有

$$\det(B - TI) = T^n + c_{n-1}T^{n-1} + \cdots + c_1T + c_0I = 0$$



由于我们事先已经知道, 同一线性变换的特征多项式与基底的选取无关, 因此我们便得到了著名的 **Cayley-Hamilton 定理**:

定理

定理 3.4. 设线性变换 $T: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$, B 为线性变换 T 在任意 $\mathcal{V}$ 的基底下的矩阵形式. 那么 $C_T(T) = \mathbf{0}$.

来举一个例子: 假设矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 2 \end{pmatrix},$$

那么不难求出 A 的特征多项式为

$$\det(A - xI) = \det \begin{pmatrix} 1-x & 0 \\ 1 & 2-x \end{pmatrix} = x^2 - 3x + 2.$$

将 x 替换为矩阵 A , 我们发现

$$\begin{aligned} C_A(A) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}^2 - 3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 3 & 6 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

需要注意的是, 在我们之前的推导中, 我们默认了 $\{v, T(v), T^2(v), \dots, T^{n-1}(v)\}$ 彼此线性无关, 但是在实际情况下往往这些向量不一定线性无关. 我们需要明白的是 Cayley-Hamilton 定理对任何前后维数不变的线性变换以及任何 $n \times n$ 矩阵均成立. 上面的推理仅仅是一种特殊情况下的证明. 完整的证明会需要更多的引理, 在此我们不多做叙述.



3.2 练习

1. 求出下列矩阵的特征向量与特征值:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 2 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -3 \\ 2 & 0 & 6 \\ 1 & -1 & 5 \end{pmatrix}$$

2. 我们称线性变换 $T: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ 在选定基底上对应的矩阵形式 A 为**幂零矩阵 (Nilpotent Matrix)**, 如果其满足 $A^k = \mathbf{0}$ 其中 $k \geq 1$.

① 证明主对角线全部元素为零的上(下)三角矩阵为幂零矩阵.

② 证明幂零矩阵有且仅有 0 这一个特征值.(无论数域为实数或复数该结论均成立)

③ 证明 $n \times n$ 幂零矩阵 A 的特征多项式为 $C_A(x) = x^n$.

3. 设 A 为 $n \times n$ 可逆矩阵, 且 λ 为一个特征值(在例题中我们已经证明此时 $\lambda \neq 0$), 证明 $\frac{1}{\lambda}$ 为 A^{-1} 的一个特征值. 此时设 $C_A(x), C_{A^{-1}}(x)$ 分别为 A, A^{-1} 的特征多项式, 试证明:

$$C_{A^{-1}}(x) = \frac{(-x)^n}{\det(A)} C_A\left(\frac{1}{x}\right).$$

4.* 在复数域中, 证明矩阵 $\begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$ 的特征值为 $e^{i\theta}$ 和 $e^{-i\theta}$.

5. 设 A 为 $n \times n$ 矩阵, 若 A 中的每一列(或每一行)元素之和均为同一常数 λ , 证明: λ 即为 A 的一个特征值.

6. 设分块矩阵 $A = \begin{pmatrix} B & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & C \end{pmatrix}$, 其中 A, B, C 均为方阵. 设 A, B, C 的特征多项式分别为 $C_A(x), C_B(x), C_C(x)$.

① 证明: $C_A(x) = C_B(x)C_C(x)$;

② 若 $\mathbf{x}$ 为 B 的一个特征向量; $\mathbf{y}$ 为 C 的一个特征向量, 证明: $\begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{y} \end{pmatrix}$ 均为 A 的特征向量.

7. 在 $n \times n$ 矩阵 A 中, 设 λ 为 A 的一个特征值, 证明:

① $k\lambda$ 为矩阵 kA 的一个特征值;

② $\lambda^3 - 2\lambda + 3$ 为矩阵 $A^3 - 2A + 3I$ 的一个特征值.



3.3 线性变换 (矩阵) 的对角化

在特征向量与特征值一节中, 我们了解了形如 $T(x) = \lambda x$ 的形式: 其中 λ 为线性变换的特征值, x 为与其对应的特征向量. 我们在本节中将尝试扩大 x 的可能取值范围——把范围扩大到线性变换所作用的整个线性空间 V . 此时, 我们能否尝试利用向量分解的形式, 把任意的 $v \in V$ 分解成 $v = v_1 + v_2 + \cdots + v_n$, 使得每一个 v_i 都是和特征值 λ_i 有关的向量? 这样一来我们便有

$$T(v) = \lambda_1 v_1 + \cdots + \lambda_n v_n.$$

定理

定理 3.5. 设 λ_1, λ_2 为线性变换 T 的两个不同的特征值, 则 $Eig_T(\lambda_1) \cap Eig_T(\lambda_2) = \{0\}$.

证明. 假设存在非零向量 u , 使得 $u \in Eig_T(\lambda_1) \cap Eig_T(\lambda_2)$, 那么有

$$(T - \lambda_1 I)u = (T - \lambda_2 I)u = 0,$$

即 $(\lambda_1 - \lambda_2)Iu = 0$. 根据定义, $\lambda_1 = \lambda_2$. ■

该定理告诉了我们不同的特征空间之间没有交集 (虽然其交集存在零向量, 但是根据我们的定义, 零向量不在我们所考虑的特征向量中). 这也就意味着特征空间彼此线性无关. 那么这些线性无关的特征空间构成的并集能否包含 V 呢? 我们由此引出矩阵对角化的概念:

定义

定义 3.5. 在线性变换 $T: V \rightarrow V$ 中, 设 $\dim(V) = n$. 如果存在互不相同的子空间 $W_1, W_2, \dots, W_m$ 以及常数 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m \in \mathbb{F}$ ($m \leq n$), 使得

$$(i) V = \bigoplus_{i=1}^m W_i;$$

(ii) 对于任意的 $w \in W_i$, 有 $T(w) = \lambda_i w$.

我们则称 T 可对角化 (Diagonalizable)

该定理告诉我们: 线性变换 (矩阵) 可对角化需要满足两个条件: 第一, 其作用的线性空间 V 是若干个子空间的直和 (不清楚此概念的读者请阅读第一章第四节的内容), 这些子空间其实就是 T 的特征空间; 第二: 对于每一个特征空间 W_i 而言, 对于 $w \in W_i$, 满足 $T(w) = \lambda_i w$, 这里面 λ_i 即为和特征空间 W_i 相对应的特征值.

此时我们便知道, 根据直和的定义, 对于任意的 $v \in V$, 都存在 $w_i \in W_i$, 使得

$$v = w_1 + w_2 + \cdots + w_m.$$

为方便后续的推导, 我们此时先假设 $m = n$. 因此, 再根据矩阵对角化的概念, 我们便有

$$T(v) = \lambda_1 w_1 + \lambda_2 w_2 + \cdots + \lambda_n w_n,$$

其中 λ_i 即为与特征空间 W_i 对应的特征值.



由于特征空间彼此线性无关, 因此 $\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \dots, \boldsymbol{w}_n$ 也彼此线性无关. 根据直和的定义, 此时 $\gamma = \{\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \dots, \boldsymbol{w}_n\}$ 也构成 $\boldsymbol{V}$ 的一组基底, 如果我们考虑线性变换 $\boldsymbol{T}$ 在基底 γ 下面的矩阵形式, 不难得到

$$[\boldsymbol{T}]_\gamma = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \mathbf{0} \\ & \lambda_2 & \\ & & \ddots \\ \mathbf{0} & & & \lambda_n \end{pmatrix} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n).$$

此时, 我们也自然而然地联想到了基底之间的变换, 如果设 $[\boldsymbol{T}]_E$ 为该线性变换在标准基底下的表达形式的话, 那么我们知道, 存在可逆矩阵 $\boldsymbol{Q}$, 使得

$$[\boldsymbol{T}]_\gamma = \boldsymbol{Q}^{-1}[\boldsymbol{T}]_E \boldsymbol{Q}.$$

我们再一次回顾形如下图的转化关系:

$$\begin{array}{ccc} [\boldsymbol{v}]_\gamma & \xrightarrow{[\boldsymbol{T}]_\gamma} & [\boldsymbol{T}\boldsymbol{v}]_\gamma \\ \downarrow \boldsymbol{Q} & & \uparrow \boldsymbol{Q}^{-1} \\ [\boldsymbol{v}]_E & \xrightarrow{[\boldsymbol{T}]_E} & [\boldsymbol{T}\boldsymbol{v}]_E \end{array}$$

其中可逆矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 即为从标准基底 γ 变化到基底 E 的变化矩阵. 此时不妨设在标准基底 $E = \{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \dots, \boldsymbol{e}_n\}$ 中, 有

$$\boldsymbol{v} = c_1 \boldsymbol{e}_1 + c_2 \boldsymbol{e}_2 + \dots + c_n \boldsymbol{e}_n$$

同时, $\boldsymbol{v}$ 还满足

$$\boldsymbol{v} = \lambda_1 \boldsymbol{w}_1 + \lambda_2 \boldsymbol{w}_2 + \dots + \lambda_n \boldsymbol{w}_n$$

根据定义, 我们有:

$$\left(\begin{array}{c|c|c} | & | & | \\ [T(\boldsymbol{e}_1)]_\gamma & \cdots & [T(\boldsymbol{e}_n)]_\gamma \\ | & | & | \end{array} \right) \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{pmatrix}_\gamma = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}_E$$

形如 $\left(\begin{array}{c|c|c} | & | & | \\ [T(\boldsymbol{e}_1)]_\gamma & \cdots & [T(\boldsymbol{e}_n)]_\gamma \\ | & | & | \end{array} \right)$ 的矩阵即为可逆矩阵 $\boldsymbol{Q}$. 不难发现, 我们得到

$$\lambda_1 [T(\boldsymbol{e}_1)]_\gamma + \dots + \lambda_n [T(\boldsymbol{e}_n)]_\gamma = \boldsymbol{v}.$$

根据定义, 我们便有 $[T(\boldsymbol{e}_i)]_\gamma = \boldsymbol{w}_i$, 其中 $\boldsymbol{w}_i$ 为特征向量. 由此我们得出, 可逆矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的第 i 列即为线性变换中与 λ_i 所对应的特征向量.

此时如果 $m < n$, 且我们发现某一个特征空间的维数为 k ($k > 1$) 时, 我们需要将该特征空间的特征值在对角线上重复 k 次, 然后选取构成其基底的 k 个向量作为不同的特征向量依次写在相应的列里面. 即对每个特征空间而言, 我们取其一组基底, 若所有这些特征空间的基底合并后恰好构成 $\boldsymbol{V}$ 的一组基底, 则 $\boldsymbol{T}$ 在这组基底



下的矩阵为对角矩阵. 这一过程便是矩阵 (线性变换) 的**对角化 (Diagonalization)**.

此时, 我们便得出了判断线性变换 (矩阵) 是否可对角化的第一个定理:

定理

定理 3.6. 设线性变换 $T: V \rightarrow V$, 那么 T 可对角化的充要条件是存在可逆矩阵 Q 与对角矩阵 P , 使得

$$Q^{-1}TQ = P$$

其中 Q 的列向量即为 T 的特征向量; P 主对角线上的元素即为相对应的特征值.

该定理也可以叙述为: 设线性变换 $T: V \rightarrow V$, 那么 T 可对角化的条件是存在可逆矩阵 Q 与对角矩阵 P , 使得

$$QPQ^{-1} = T$$

其中 Q 的列向量即为 T 的特征向量; P 主对角线上的元素即为相对应的特征值.

随后, 我们进一步来探究线性变换 (矩阵) 可对角化的条件. 设线性空间 V 的维数为 n . 假设此时线性变换 $T: V \rightarrow V$ 有 n 个不同的特征值, 那么我们便知道此时就有 n 个彼此线性无关的特征向量, 由这些特征向量作为列向量构成的矩阵可逆, 也就满足了矩阵对角化的条件. 由此我们可以再引出一条定理:

定理

定理 3.7. 设线性变换 $T: V \rightarrow V$, $\dim(V) = n$. 若 T 存在 n 个互不相同的特征值, 则 T 可对角化.

如果 T 的特征值个数小于 n , 此时并不意味着 T 不能对角化, 我们只需要找出 n 个彼此线性无关的特征向量即可. 此时我们注意到由于特征空间的个数小于 n , 因此一定存在维数大于 1 的特征空间, 自然在该空间里面也可以找到多个彼此线性无关的特征向量. 在这种情况下该特征空间对应的特征值在对角矩阵中会重复出现, 出现次数与其维数相同.

推论

推论 3.4. 设线性变换 $T: V \rightarrow V$, $\dim(V) = n$. 若 T 存在 n 个彼此线性无关的特征向量, 则 T 可对角化.

此时, 我们再从几何重数与代数重数的角度去理解这个问题. 我们知道, 特征值的几何重数代表其特征空间的维数, 也代表着该特征空间里面彼此线性无关的特征向量的个数. 因此我们还可以引出一条推论:

推论

推论 3.5. 设线性变换 $T: V \rightarrow V$, $\dim(V) = n$. 若 T 的所有特征值的几何重数之和为 n , 则 T 可对角化.

再进一步的深入讨论之前, 我们引出一条定理, 来说明几何重数与代数重数之间的关系.



定理

定理 3.8. 设线性变换 $T: V \rightarrow V$, 则对于 T 的任意一个特征值 λ 而言, 其代数重数大于等于其几何重数.

该定理的证明我们在此省略, 读者不必知道其证明方法. 值得注意的是, 任何一个特征值的代数重数均大于等于 1, 并且根据定义, 当特征多项式在数域 $\mathbb{F}$ 中可分解时, 所有特征值的代数重数之和为 n (线性空间的维数).

例题

例题 3.5. 设线性变换 $T: V \rightarrow V$, 已知 $\dim(V) = 5$, 且 T 的特征值为 $0, 1, 2$. 若 $\text{rank}(T) = 2$, 证明: T 可对角化.

解答 3.5. 由秩零定理可知, $\dim(\text{Ker}(T)) = 3$, 即 $\dim(\text{Ker}(T - 0I)) = 3$, 则特征值 0 对应的特征空间的维数为 3 , 特征值 $\lambda = 0$ 的几何重数即为 3 . 也就是说 $\lambda = 0$ 的代数重数大于等于 3 , 由于全体特征值的代数重数之和为 5 , 且 $1, 2$ 这两个特征值的代数重数不为零, 则 $\lambda = 0$ 的代数重数为 3 , 特征值 $1, 2$ 的代数重数均为 1 , 且已知任何特征值的代数重数均大于等于其几何重数, 所以特征值 $1, 2$ 的几何重数为 1 . 由于所有特征值的几何重数之和为 5 ($\dim(V)$), 因此 T 可对角化.

那么我们现在已经万事俱备, 只欠东风了: 我们引出最重要的对角化定理:

定理

定理 3.9. 设线性变换 $T: V \rightarrow V$, $\dim(V) = n$, 且其特征多项式可在数域 $\mathbb{F}$ 中完全分解. 则 T 可对角化的充要条件是对于任何一个 T 的特征值 λ , 其几何重数等于其代数重数.

这一定理的证明我们暂时忽略.

例题

例题 3.6. 设 a 为任意实数, 在下列矩阵中, 哪一个矩阵 **不可以** 对角化?

$$(A) \begin{pmatrix} 1 & a & -1 \\ 0 & 2 & a \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

$$(B) \begin{pmatrix} 1 & a & 0 \\ a & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

$$(C) \begin{pmatrix} 1 & 1 & a \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$(D) \begin{pmatrix} 1 & 1 & a \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

解答 3.6. 我们逐个分析:

(A) 选项: 根据上三角矩阵的性质, A 的特征值为 $1, 2, 3$, 因此可知 A 有 3 个互不相同的特征值, 因此 A 可对角化.

(B) 选项: 不难发现 B 为对称矩阵, 所有的对称矩阵均可对角化 (见本节章末习题).

(C) 选项: 根据上三角矩阵的性质, C 的特征值为 $1, 2$, 其中 $\lambda = 1$ 的代数重数为 1 , 经计算其几何重数为 1 ; $\lambda = 2$ 的代数重数为 2 , 经计算其几何重数为 2 . 因此每一个特征值的代数重数均等于几何重数, 则 C 可对角化.



(D) 选项: 根据上三角矩阵的性质, C 的特征值为 1, 2, 其中 $\lambda = 1$ 的代数重数为 1, 经计算其几何重数为 1; $\lambda = 2$ 的代数重数为 2, 经计算其几何重数为 1. 对于 $\lambda = 2$ 而言其几何重数不等于代数重数, 因此 D 不可对角化.

3.3 练习

1. 判断下列矩阵能否对角化:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 2 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 2 & -4 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 4 & -1 \end{pmatrix}.$$

2. 特征多项式相同的 $n \times n$ 矩阵一定都可以 (或都不可以) 对角化吗? 不妨使用 $A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & -3 \\ 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & -2 \end{pmatrix}$, $B =$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
 来验证这一猜想.

3. 设线性变换 $T: V \rightarrow V$ 满足 $T^2(v) = v, \forall v \in V$. 证明: T 可对角化.

4. 证明任何的对称矩阵 (即 $A = A^T$) 均可对角化.

5. 设 $n \geq 1$, 定义线性变换 $T: \mathbb{P}_n(x) \rightarrow \mathbb{P}_n(x)$, 满足:

$$T(f(x)) = f(x) + f^{(1)}(x) + f^{(2)}(x) + \cdots + f^{(n)}(x)$$

其中 $f^{(k)}(x)$ 代表多项式 $f(x)$ 的 k 阶导数. 判断 T 能否对角化.



3.4 线性递归系统

在自然界中有非常多的随时间而变化的变量. 例如某物种种群数量随时间而变化; 矿石放射性元素含量随时间而衰减等. 我们可以尝试用线性变换的知识去理解这些问题: 将所要研究的变量当做一个向量 v_0 , 然后通过已知条件求出一个变换矩阵 A . 这样一来 $v_1 = Av_0$ 就可以表示为该变量经过时间等因素的影响在下一时间节点的性质. 我们便可以利用该模型来预测其未来的变化趋势. 我们一起来看一个例子:

例题

例题 3.7. 假设存在某鸟类种群, 在该鸟类种群中我们将其分为幼年鸟和成年鸟两种. 经过一段时间的调查我们得出以下关系:

- ① 每一年新孵化的幼年鸟的数量是前一年存活下来的成年鸟的数量的两倍;
- ② 每一年中约有 $\frac{1}{2}$ 的成年鸟能够存活下来;
- ③ 每一年中约有 $\frac{1}{4}$ 的幼年鸟能够存活下来并且成长为成年鸟.

现在经调查得知该种群有 100 只成年鸟和 40 只幼年鸟, 那么试问在许多年后该鸟类种群数目会发生何等变化?

解答 3.7. 我们可以设幼年鸟在第 k 年的数量为 j_k , 设成年鸟在第 k 年的数量为 a_k , 那么我们可以根据上述关系, 得到:

$$\begin{cases} a_{k+1} = \frac{1}{2}a_k + \frac{1}{4}j_k \\ j_{k+1} = 2a_k \end{cases}.$$

此时我们设 $v_k = \begin{pmatrix} a_k \\ j_k \end{pmatrix}$, 设 $A = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$, 那么根据题设关系, 我们就有

$$v_{k+1} = Av_k.$$

因此, 结合初始条件 $v_0 = \begin{pmatrix} 100 \\ 40 \end{pmatrix}$, 我们还可以得到

$$v_k = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \\ 2 & 0 \end{pmatrix}^k \begin{pmatrix} 100 \\ 40 \end{pmatrix}.$$

接下来, 我们便一起研究一下矩阵 A . 其中经过计算我们得出 A 的特征多项式为

$$C_A(x) = (x-1)\left(x + \frac{1}{2}\right),$$

因此 A 有两个不同的特征值 $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = -\frac{1}{2}$. 那么根据定理 3.7 可知, A 可对角化. 且我们可以计算出 $\lambda_1 = 1$



对应的特征向量 $\mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$; $\lambda_2 = -\frac{1}{2}$ 对应的特征向量 $\mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 4 \end{pmatrix}$.

也就是说, 存在可逆矩阵 $\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$ 与对角矩阵 $\mathcal{D} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$, 使得 $A = \mathcal{P}\mathcal{D}\mathcal{P}^{-1}$, 即

$$\begin{aligned} A^k &= \mathcal{P}\mathcal{D}^k\mathcal{P}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1^k & 0 \\ 0 & (\frac{1}{2})^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & \frac{1}{6} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 4 + 2(-\frac{1}{2})^k & 1 - (-\frac{1}{2})^k \\ 8 - 8(-\frac{1}{2})^k & 2 + 4(-\frac{1}{2})^k \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

即

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_k &= \begin{pmatrix} a_k \\ j_k \end{pmatrix} = A^k \mathbf{v}_0 = \begin{pmatrix} 4 + 2(-\frac{1}{2})^k & 1 - (-\frac{1}{2})^k \\ 8 - 8(-\frac{1}{2})^k & 2 + 4(-\frac{1}{2})^k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 100 \\ 40 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 440 + 160(-\frac{1}{2})^k \\ 880 - 640(-\frac{1}{2})^k \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

所以我们得到

$$a_k = \frac{220}{3} + \frac{80}{3} \left(-\frac{1}{2}\right)^k \quad j_k = \frac{440}{3} - \frac{320}{3} \left(-\frac{1}{2}\right)^k.$$

由此可知, 当 k 很大时, $\left(-\frac{1}{2}\right)^k \rightarrow 0$, 因此在很多年之后, 种群的数量会趋于稳定, 即

$$\begin{cases} a_k \approx \frac{220}{3} \\ j_k \approx \frac{440}{3} \end{cases}.$$

由上面的例子, 我们引出一条概念:

定义

定义 3.6. 在 $n \times n$ 矩阵 A 中, 如果存在满足一定条件的向量 $\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_1, \dots$ 和非负整数 k , 使得

$$\mathbf{v}_{k+1} = A\mathbf{v}_k,$$

我们便称该系统为一个**线性递归系统 (Linear Dynamical System)**.



我们设在线性递归系统 $\mathbf{v}_{k+1} = A\mathbf{v}_k$ 中, 矩阵 A 可对角化, 设 A 的特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ ($\dim(A) = n$); 与之对应的特征向量为 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n$. 设矩阵 $\mathcal{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \cdots & \mathbf{u}_n \end{pmatrix}$, $\mathcal{D} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, 那么

$$A^k \mathbf{v}_0 = (\mathcal{P} \mathcal{D}^k \mathcal{P}^{-1}) \mathbf{v}_0 = \mathcal{P} \mathcal{D}^k (\mathcal{P}^{-1} \mathbf{v}_0).$$

我们令 $\mathbf{b} = \mathcal{P}^{-1} \mathbf{v}_0 = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{pmatrix}^\top$, 那么

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_k &= \mathcal{P} \mathcal{D}^k (\mathcal{P}^{-1} \mathbf{v}_0) \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \cdots & \mathbf{u}_n \end{pmatrix} \text{diag}(\lambda_1^k, \lambda_2^k, \dots, \lambda_n^k) \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{pmatrix}^\top \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \cdots & \mathbf{u}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \lambda_1^k & b_2 \lambda_2^k & \cdots & b_n \lambda_n^k \end{pmatrix}^\top. \end{aligned}$$

因此, 我们也得出了一个公式:

$$\mathbf{v}_k = b_1 \lambda_1^k \mathbf{u}_1 + b_2 \lambda_2^k \mathbf{u}_2 + \cdots + b_n \lambda_n^k \mathbf{u}_n.$$

定理

定理 3.10. 在线性递归系统 $\mathbf{v}_{k+1} = A\mathbf{v}_k$ ($k > 0$) 中, 假设 $\mathbf{v}_0, A$ 均给定, 且 A 可对角化. 设 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 为 A 的特征值; $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n$ 为相对应的特征向量, 令 $\mathcal{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \cdots & \mathbf{u}_n \end{pmatrix}$, 那么我们有

$$\mathbf{v}_k = b_1 \lambda_1^k \mathbf{u}_1 + b_2 \lambda_2^k \mathbf{u}_2 + \cdots + b_n \lambda_n^k \mathbf{u}_n$$

其中

$$\mathbf{b} = \mathcal{P}^{-1} \mathbf{v}_0 = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{pmatrix}^\top.$$

在一些情况下, 我们往往不必按照定理 3-10 所给出的公式进行求解:

定义

定义 3.7. 在 $n \times n$ 矩阵 A 中, 如果特征值 λ 的代数重数为 1, 且 λ 的绝对值是所有特征值的绝对值中的最大值, 我们称 λ 为矩阵 A 的主导特征值.

不失一般性地讲, 我们不妨设 λ_1 为 A 的主导特征值, 那么我们便有

$$\mathbf{v}_k = \lambda_1^k \left[b_1 \mathbf{u}_1 + b_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{u}_2 + \cdots + b_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{u}_n \right].$$

因此当 k 很大时, 我们便会发现 $\left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k \rightarrow 0$ ($j > 1$), 所以决定 $\mathbf{v}_k$ 的其实只与主导特征值有关, 即 $\mathbf{v}_k \approx \lambda_1^k b_1 \mathbf{u}_1$.



例题

例题 3.8. 在某线性递归系统中, 给定 $x_0 = 1, x_1 = -1$, 且

$$x_{k+2} = -x_{k+1} + 2x_k \quad (k > 0).$$

据此求 x_k 的通项.

解答 3.8. 我们由题意可设 $\mathbf{v}_k = \begin{pmatrix} x_k \\ x_{k+1} \end{pmatrix}$, 由 $\mathbf{v}_{k+1} = \begin{pmatrix} x_{k+1} \\ x_{k+2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{k+1} \\ 2x_k - x_{k+1} \end{pmatrix} = A\mathbf{v}_k$ 可以求出其变换矩阵为

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}.$$

经计算, A 的特征值为 $\lambda_1 = -2; \lambda_2 = 1$, 其对应的特征向量为 $\mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}; \mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, 则 $\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \mathcal{P}^{-1}\mathbf{v}_0 = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}$, 由此可得

$$\begin{pmatrix} x_k \\ x_{k+1} \end{pmatrix} = b_1 \lambda_1^k \mathbf{u}_1 + b_2 \lambda_2^k \mathbf{u}_2 = (-2)^k \begin{pmatrix} \frac{1}{3} \\ -\frac{2}{3} \end{pmatrix} + 1^k \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

即

$$x_k = \frac{1}{3} [2(-2)^k + 1].$$

形如 $\mathbf{v}_{k+1} = A\mathbf{v}_k$ 的线性递归系统还有一种特殊情况: 如果矩阵 $A\mathbf{v}_k$ 代表的是下一阶段 ($\mathbf{v}_{k+1}$) 所发生的事件的概率, 我们把这种结构也可以称作**马尔可夫链 (Markov Chain)**.

定义

定义 3.8. 在一个变化的系统中, 如果该系统下一时刻的变化仅取决于该系统当前的状态, 而不取决于该系统之前的状态, 我们就将该系统称作为一个马尔可夫链. 我们一般用 $\{X_t : t = 0, 1, \dots\}$ 来表示一个马尔可夫链: 其中 t 代表所处的单位时刻, X 为一个随机变量, 代表这个系统可能处于的状态.

在一个马尔可夫链中, 我们可以假设这个系统存在 n 种不同的状态. 在某时刻 t 该系统处于状态 $X_t = j$. 那么在下一时刻 $t+1$ 该系统便可以处于 n 种状态中的任意一种. 我们用 p_{kj} 来表示系统在某时刻 t 处于状态 j , 且在下一时刻 $t+1$ 处于状态 k 的概率 (注意顺序!). 不难发现

$$p_{1j} + p_{2j} + \dots + p_{nj} = 1, p_{kj} \geq 0.$$

如果我们取遍 $j = 1, 2, \dots, n$, 便会得到一个 $n \times n$ 矩阵: 矩阵中的元素便是 p_{kj} . 所得到的 $n \times n$ 矩阵 $P = (p_{kj})$ 便被称作是**过渡矩阵 (Transition Matrix)**.



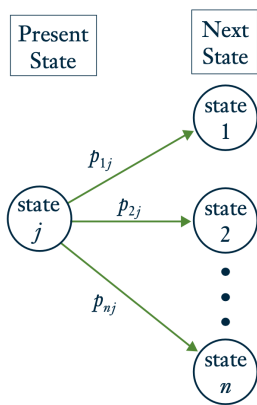


图 1: 马尔可夫链的简化图.

根据定义, 矩阵 P 的第 j 列即为 $(p_{1j} \ p_{2j} \ \cdots \ p_{nj})^\top$, 且 $p_{1j} + p_{2j} + \cdots + p_{nj} = 1$. 由于 p_{kj} 表示在当前状态为 j 时, 经过一次变化到状态 k 的概率, 故 P 也被称作**随机矩阵 (Stochastic Matrix)**. 我们设 $s_i^{(m)}$ 代表系统经过 m 次变化之后最终处于状态 i 的概率, 定义

$$\mathbf{s}_m = (s_1^{(m)} \ s_2^{(m)} \ \cdots \ s_n^{(m)})^\top, \quad (m = 0, 1, 2, \cdots)$$

为**状态向量 (State Vector)**, $\mathbf{s}_0$ 称作**初始状态 (Initial State)**. 在一个马尔可夫链中, $P, \mathbf{s}_0$ 均为已知量.

定理

定理 3.11. 设 P 为一个有 n 个状态的马尔可夫链的随机矩阵 (过渡矩阵), 若 $\mathbf{s}_m$ 代表该马尔可夫链在第 m 阶段时的状态向量, 则

$$\mathbf{s}_{m+1} = P\mathbf{s}_m = P^{m+1}\mathbf{s}_0.$$

证明. 读者不妨尝试自证. ■

例题

例题 3.9. 在一处草原中, 某狼群会对 R_1, R_2, R_3 三个不同位置的羊群进行攻击, 已知该狼群的攻击有以下规律:

- ① 若该狼群在某一天攻击了一处羊群, 那么下一天该狼群仍攻击该羊群的概率和不攻击该羊群的概率相等;
- ② 若该狼群在某一天攻击了 R_1 处的羊群, 那么下一天该狼群不会攻击 R_2 处的羊群;
- ③ 若该狼群在某一天攻击了 R_2 或 R_3 位置的羊群, 那么在“不攻击原羊群”的情况下, 下一天攻击另外两个位置羊群的概率相等.

现在已知该狼群在周一攻击了 R_1 处的羊群, 那么在周四该狼群仍攻击 R_1 处的羊群的概率是多少?



解答 3.9. 根据题意, 我们可以得出以下的关系表 (该表格即为过渡矩阵):

	R_1	R_2	R_3
R_1	0.5	0.25	0.25
R_2	0	0.5	0.25
R_3	0.5	0.25	0.5

$$P = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.25 & 0.25 \\ 0 & 0.5 & 0.25 \\ 0.5 & 0.25 & 0.5 \end{pmatrix}$$

我们根据第一条规律便可以得知, $p_{11} = p_{22} = p_{33} = 0.5$. P 的第一列表示当前状态为 R_1 时, 下一状态的概率, 因此由第二条规律可知 $p_{21} = 0$, 再由其列中元素之和为 1 可知 $p_{31} = 0.5$. 随后再利用规律 3, 便可以求出 P 中的全部元素. 我们设周一时对应的状态为 s_0 , 根据定义, $s_0 = (1 \ 0 \ 0)^T$, 那么我们就可以知道 s_3 即可表示周四时的状态向量. 我们有

$$s_3 = P^3(s_0) = \begin{pmatrix} 0.5 & 0.25 & 0.25 \\ 0 & 0.5 & 0.25 \\ 0.5 & 0.25 & 0.5 \end{pmatrix}^3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{11}{32} \\ \frac{6}{32} \\ \frac{15}{32} \end{pmatrix}$$

由此得知在周四该狼群仍然攻击 R_1 处的羊群的概率为 $\frac{11}{32}$.

在本章的第一个例题中, 我们发现当经过很长一段时间之后, 鸟类种群中成年鸟和幼年鸟的数目趋于稳定. 对于一些马尔可夫链而言, 我们也存在一个使得状态向量 s 收敛于某一位置的向量 x . 此时马尔可夫链趋于稳定, 我们有

$$x = Px.$$

我们称满足条件的 x 为**稳定态向量 (Steady-State Vector)**. 那么什么样的马尔可夫链满足这样的收敛性质呢?

定理

定理 3.12. 设 P 为一个有 n 个状态的马尔可夫链的随机矩阵 (过渡矩阵), 且假设存在正整数 m , 使得 P^m 中的所有元素均严格大于零 (我们也称 P 为正则矩阵). 则存在唯一的向量 s , 使得

$$s = Ps.$$

其中, $s = (s_1 \ s_2 \ \cdots \ s_n)^T$ 满足 $\sum_{i=1}^n s_i = 1, s_i > 0$. 同时由任意状态向量构成的数列 $x_0, x_1, x_2, \cdots$ 收敛于 s .

该定理的证明已远远超纲. 感兴趣的读者不妨自行阅读相关材料.



3.4 练习

1. 在线性递归系统 $v_{k+1} = Av_k$ 中, 我们给出

$$A_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix} \quad A_2 = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 0 \\ 0 & \frac{4}{3} \end{pmatrix} \quad A_3 = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}$$

如果我们将 $v_0, v_1, v_2, \dots$ 看作数列, 依次标在坐标系中, 用箭头来表示其变化趋势. 那么下面的三个选项中哪一幅图可以准确地对应上面的矩阵? 对这部分知识感兴趣的读者欢迎阅读第六章第 4 节!

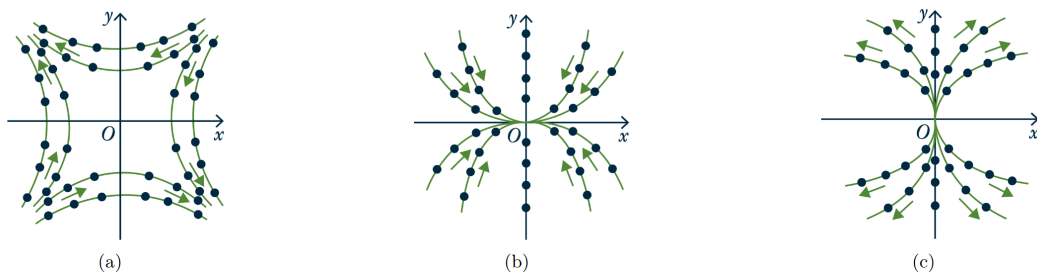


图 2: 练习 1 用图

2. 甲要爬一段有 k 级台阶的楼梯, 已知甲每一步可以爬一级或两级台阶, 要求最后甲可以刚好达到最顶端. 记 s_k 为甲刚好爬上台阶所用的不同种类数, 当 $k=1$ 时, 我们有 $s_1=1$, $k=2$ 时有 $s_2=2$. 据此求出 s_k 的通项公式. (HINT: 我们有 $s_{k+2} = s_{k+1} + s_k$, 据此建立线性递归模型进行求解.)

3. 假设有足够多的红色, 蓝色, 白色木板, 将这些木板从下往上堆成一叠. 设 x_k 表示当木板为 k 个时, 所有的使白色木板彼此不相邻的堆叠方式. 据此求出 x_k 的通项公式. (HINT: 我们有 $x_{k+2} = 2x_{k+1} + 2x_k$, 据此建立线性递归模型进行求解. 并且可以参考第二题!)

4. 在一个核反应堆中含有 α 粒子和 β 粒子. 每经过一秒就会有一个 α 粒子分解为三个 β 粒子; 同时也会有一有一个 β 粒子分解为一个 α 粒子和两个 β 粒子. 在某一时刻该封闭系统内有一个 α 粒子, 那么在经过 $t=20$ 秒之后该系统里面有多少个 α 粒子和 β 粒子?

5. 在某机器学习模型中, 我们给出如下图 (见下页) 所示的网格迷宫. 某 AI 需要从一个位置出发, 然后通过图中标出的路径进行节点之间的移动从而到达下一相邻位置. 已知 AI 在每一处特定节点位置时所选择的路径概率相等.

① 假设在某一时刻 AI 位于节点 1, 据此求出经过三次移动之后, 该 AI 又回到节点 1 处的概率;

② 假设在某一时刻 AI 位于节点 2, 那么在经过次数足够多的移动之后该 AI 最有可能处于哪一处节点?



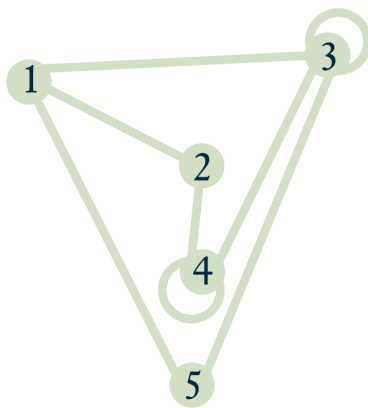


图 3: 练习 5 用图

6. 设 $0 < p < 1; 0 < q < 1$ 及随机矩阵 $P = \begin{pmatrix} 1-p & q \\ p & 1-q \end{pmatrix}$.

① 证明: $\frac{1}{p+q} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$ 为 P 的稳定态向量;

② 证明: P^m 收敛于 $\frac{1}{p+q} \begin{pmatrix} q & q \\ p & p \end{pmatrix}$.

HINT: 先尝试用数学归纳法证明 $P^m = \frac{1}{p+q} \begin{pmatrix} q & q \\ p & p \end{pmatrix} + \frac{(1-p-q)^m}{p+q} \begin{pmatrix} p & -q \\ -p & q \end{pmatrix}$



作用于内积空间的变换

在前面三章的学习中, 我们主要学习了作用于线性空间的线性变换. 在本章中我们将引入一种全新的空间: **内积空间 (Inner Product Space)**. 内积空间与向量空间存在着诸多的相同之处和不同之处, 我们也可以理解为内积空间是一定程度上对向量空间进行扩充而得到的. 在内积空间中, 我们所谈论的数域要进行扩充: 引入复数域 $\mathbb{C}$, 在此基础上我们会重新定义内积空间, 以及内积空间的性质, 最后我们也会从线性变换的角度去审视内积空间.

4.1 内积空间的基本定义与性质

正如本章序言所讲, 在本章中我们所考虑的数域 $\mathbb{F}$ 为复数域 $\mathbb{C}$. 内积空间可以理解为是在线性空间 V 的基础上增加了一种二元运算 $f: (v_1, v_2) \mapsto \mathbb{F}$. 如果设 V 为一个内积空间, 同时 $v_1, v_2 \in V$, 那么这种二元运算 f 也被我们计作 $\langle v_1, v_2 \rangle$, 称作**内积 (Inner product)**, 且该二元运算满足特定的性质.

定义

定义 4.1. 定义 V 为作用于数域 $\mathbb{F} = \mathbb{C}$ 上的线性空间. 若 V 中存在二元运算 $\langle \cdot, \cdot \rangle: V \times V \rightarrow \mathbb{C}$, 且对于任意的 $u, v, w \in V$ 以及 $\lambda \in \mathbb{C}$, 满足以下四条性质, 我们便称具备这种运算的线性空间 V 为一个**内积空间 (Inner Product Space)**.

- ① $\langle u + v, w \rangle = \langle u, w \rangle + \langle v, w \rangle$;
- ② $\langle \lambda u, v \rangle = \lambda \langle u, v \rangle$;
- ③ $\langle u, v \rangle = \overline{\langle v, u \rangle}$;
- ④ $\langle u, u \rangle \geq 0$, 且 $\langle u, u \rangle = 0$ 当且仅当 $u = 0$.

由内积的定义, 我们可以很容易地得到以下性质:

推论

推论 4.1. 设 V 为定义于复数域 $\mathbb{C}$ 上的内积空间. 则对于任意的 $u, v, w \in V, \lambda \in \mathbb{C}$:

- ① $\langle u, v + w \rangle = \langle u, v \rangle + \langle u, w \rangle$;
- ② $\langle u, \lambda v \rangle = \overline{\lambda} \langle u, v \rangle$;
- ③ $\langle 0, v \rangle = \langle v, 0 \rangle = 0$.

证明. ①:

$$\langle u, v + w \rangle = \overline{\langle v + w, u \rangle} = \overline{\langle v, u \rangle} + \overline{\langle w, u \rangle} = \langle u, v \rangle + \langle u, w \rangle.$$

②:

$$\langle u, \lambda v \rangle = \overline{\langle \lambda v, u \rangle} = \overline{\lambda \langle v, u \rangle} = \overline{\lambda} \overline{\langle v, u \rangle} = \overline{\lambda} \langle u, v \rangle.$$



③:

$$\langle \mathbf{0}, \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{v} - \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle - \langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle = 0.$$

定义

定义 4.2. 设 V 为作用于数域 $\mathbb{F}$ 上的线性空间. 若 $\forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in V, \alpha \in \mathbb{F}$, 一元函数 $\|\cdot\|: V \rightarrow [0, \infty)$ 满足

① $\|\mathbf{v}\| \geq 0$, 且 $\|\mathbf{v}\| = 0$ 当且仅当 $\mathbf{v} = \mathbf{0}$;

② $\|\alpha \mathbf{v}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{v}\|$;

③ $\|\mathbf{u} + \mathbf{v}\| \leq \|\mathbf{u}\| + \|\mathbf{v}\|$.

我们则称 $\|\cdot\|$ 为 V 上的**模 (Norm)**.

在此情况下, $(V, \|\cdot\|)$ 也被称作**赋范向量空间 (Normed Vector Space)**. 在内积空间中, 我们可以用向量与向量自身的内积来定义模:

定理

定理 4.1. 任意内积空间 V 均为赋范向量空间. 设 $\mathbf{v} \in V$, 则 $\mathbf{v}$ 的模为

$$\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle}.$$

若 $\|\mathbf{v}\| = 1$, 我们将其称作**单位向量 (Unit Vector)**.

证明. 我们只需证明 $\|\mathbf{v}\| = \sqrt{\langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle}$ 满足模的三条定义. 第一条定义显然成立, 对于第二条而言:

$$\|\alpha \mathbf{v}\| := \sqrt{\langle \alpha \mathbf{v}, \alpha \mathbf{v} \rangle} = \sqrt{\alpha \cdot \bar{\alpha} \langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle} := |\alpha| \cdot \|\mathbf{v}\|.$$

第三条定义在我们在后面提出的定理中便有证明.

我们随后一起定义一些常见的内积空间:

• (A) 当我们考虑线性空间 $\mathbb{C}^n$ 时, 设 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^n$, $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}; \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$. 定义

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \sum_{i=1}^n x_i \bar{y}_i = \mathbf{x}^\top \cdot \bar{\mathbf{y}},$$

这种运算也被我们称作是向量的**数量积 (Dot Product)**, 记作 $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$. 除非特别强调, 所有作用于 $\mathbb{C}^n$ (或 $\mathbb{R}^n$) 向量上的内积均为数量积. 此时我们定义向量 $\mathbf{x}$ 的模为

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle} = \sqrt{\mathbf{x}^\top \cdot \bar{\mathbf{x}}}.$$

• (B) 当我们考虑作用于函数上的内积空间时, 设 $f(x), g(x) \in V$ 且 $f(x), g(x)$ 为定义在 $[a, b]$ 上的可积复



变函数, 那么我们可以定义

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_a^b f(x) \overline{g(x)} dx.$$

此时, 我们通常取函数的 L^2 模:

$$\|f\|^2 = \left(\int_a^b f(x) \cdot \overline{f(x)} dx \right)^{1/2}.$$

- (C) 对于 $m \times n$ 矩阵 $A, B \in M_{m \times n}(\mathbb{C})$ 而言, 其内积可定义为

$$\langle A, B \rangle = \text{tr}(A^\top \overline{B}).$$

既然我们分别定义了内积和模, 我们此时便很想知道他们之间有什么样的关系? 我们提出一条非常重要且完美的不等式: 柯西不等式.

定理

定理 4.2 (Cauchy-Schwarz 不等式). 设 V 为一个内积空间且 $u, v \in V$, 那么

$$|\langle u, v \rangle| \leq \|u\| \cdot \|v\|.$$

不等式取得 “=” 当且仅当向量 $u = kv$ (即 u, v 共线.)

证明. 我们做一个简化证明: 假设数域为 $\mathbb{R}$, 令 $g(t) = \|u + tv\|^2$, 则

$$g(t) = \|v\|^2 t^2 + 2\langle u, v \rangle t + \|u\|^2.$$

不难发现 $g(t)$ 为开口向上的二次函数, 所以当 $g(t)$ 取最小时, 有

$$t_{\min} = -\frac{b}{2a} = -\frac{2\langle u, v \rangle}{2\|v\|^2}.$$

根据定义, $g(t) \geq 0$ 恒成立, 那么

$$\|v\|^2 \cdot \frac{|\langle u, v \rangle|^2}{\|v\|^4} - \frac{2|\langle u, v \rangle|^2}{\|v\|^2} + \|u\|^2 \geq 0.$$

通过化简我们便得到

$$\|u\|^2 \cdot \|v\|^2 \geq |\langle u, v \rangle|^2.$$

若 u, v 共线, 原式显然成立. ■

柯西不等式的应用十分广泛, 经常可以用作不等式证明的工具. 我们来看一个例子:



例题

例题 4.1. 设 $a_1, a_2, \dots, a_n \in \mathbb{R}$, 证明:

$$\left(\sum_{i=1}^n a_i \right)^2 \leq n \left(\sum_{i=1}^n a_i^2 \right).$$

解答 4.1. 我们不妨设 $x = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}; y = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$, 那么我们有

$$(\langle x, y \rangle)^2 = (a_1 + a_2 + \dots + a_n)^2; \quad \|x\|^2 = a_1^2 + \dots + a_n^2; \quad \|y\|^2 = n.$$

由柯西不等式, 我们便可以得到

$$(a_1 + a_2 + \dots + a_n)^2 \leq n(a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2)$$

由此原不等式得证.

我们可以进一步利用柯西不等式来证明另外一条重要的不等式: **三角不等式 (Triangle Inequality)**.

定理

定理 4.3 (三角不等式). 设 V 为一个内积空间且 $u, v \in V$, 则

$$\|u + v\| \leq \|u\| + \|v\|.$$

不等式取得 “=” 当且仅当向量 $u = kv, k > 0$ (即 u, v 共线且同向.)

证明. 我们只需证明

$$\|u + v\|^2 \leq (\|u\| + \|v\|)^2,$$

即

$$\langle u + v, u + v \rangle \leq \langle u, u \rangle + \langle v, v \rangle + 2\|u\|\|v\|,$$

即

$$\langle u, u \rangle + \langle v, v \rangle + \langle u, v \rangle + \overline{\langle u, v \rangle} \leq \langle u, u \rangle + \langle v, v \rangle + 2\|u\|\|v\|.$$

根据共轭复数的性质, $\|u\| = \|\bar{u}\|$, 因此再由柯西不等式即可得证. ■



4.1 练习

1. 证明本节中 (A),(B),(C) 三个例子均满足内积的定义.

2. [平行四边形法则] 设 V 为一个内积空间, 且 $v, u \in V$. 证明

$$2\|v\|^2 + 2\|u\|^2 = \|v + u\|^2 + \|v - u\|^2.$$

3. 在 $\langle v, u \rangle$ 中, 我们定义 $\mathbf{Re}(\langle v, u \rangle)$ 为其实部, $\mathbf{Im}(\langle v, u \rangle)$ 为其虚部. 证明:

$$\mathbf{Re}(\langle v, u \rangle) = \frac{1}{2} (\|v\|^2 + \|u\|^2 - \|v - u\|^2);$$

以及

$$\mathbf{Im}(\langle v, u \rangle) = \frac{1}{2} (\|v\|^2 + \|u\|^2 - \|v - iu\|^2).$$

4. 设实数 $a_1, \dots, a_n > 0$. 证明:

$$\frac{1}{a_1} + \dots + \frac{1}{a_n} \geq \frac{n^2}{a_1 + \dots + a_n}.$$

5. [度量空间] 设 S 为任意集合, 若 S 中存在二元运算 $d(\cdot, \cdot) : S \times S \rightarrow \mathbb{R}$, 使得:

① $d(x, y) \geq 0$, 不等式取得 “=” 当且仅当 $x = y$;

② $d(x, y) = d(y, x)$;

③ $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$.

那么二元函数 $d(\cdot, \cdot)$ 便称作是 S 上的一个**度量 (Metric)**, (S, d) 也被称作**度量空间 (Metric Space)**. 设 V 为定义在 $\mathbb{R}$ 上的内积空间, 那么 $d(u, v) = \|u - v\|$ 为 V 上的一个度量.



4.2 内积空间的正交性

在本节中, 我们将讨论内积空间中的一个非常重要的性质: **正交性 (Orthogonality)**. 我们首先给出正交的定义:

定义

定义 4.3. 在内积空间 V 中, 设 $x, y \in V$. 若 $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle = 0$, 我们定义向量 x, y **正交**, 记作 $x \perp y$.

正交和我们所熟知的垂直非常相似. 实际上, 向量 x, y 相互垂直代表它们之间的数量积为 0, 然后我们回顾定义, 在此情况下内积的定义便是数量积. 其实正交这一概念不单单用于向量之间, 函数之间同样可以引入正交的概念. 回顾上一节中的定义, 设 $f(x), g(x)$ 为定义在 $[0, \pi]$ 上的可积实数函数, 定义 $\langle f, g \rangle$ 如下:

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_0^\pi f(x) \cdot g(x) dx.$$

如果我们令 $f(x) = \sin(x), g(x) = \cos(x)$, 那么显而易见

$$\int_0^\pi \sin(x) \cos(x) dx = \int_0^\pi \frac{1}{2} \sin(2x) dx = 0.$$

因此我们称 $\sin(x)$ 和 $\cos(x)$ 在区间 $[0, \pi]$ 上正交. 需要注意的是我们一定要强调区间, 如果改成 $[0, \frac{\pi}{2}]$ 的话二者便不再正交了.

接下来我们定义向量的 **正交投影 (Orthogonal Projection)**:

定义

定义 4.4. 在内积空间 V 中, 设 $x, y \in V$, 我们定义向量 x 在向量 y 方向上的正交投影 $\text{proj}_y(x)$ 为

$$\text{proj}_y(x) = \frac{\langle x, y \rangle}{\|y\|^2} \cdot y.$$

不难发现, 若 x, y 正交, $\text{proj}_y(x) = \text{proj}_x(y) = 0$. 我们可以回顾物理学中讲到过的正交分解: 即把一个向量 x 分解成与 y 平行和垂直的两个向量. 其中正交投影 $\text{proj}_y(x)$ 即表示 x 沿平行于 y 方向上的分解, 也故叫做正交投影. 由此我们同样不难发现,

$$x - \text{proj}_y(x) \perp y.$$

根据定义我们很容易发现 $x \perp y$ 代表 x, y 线性无关. 那么我们是不是自然地联想到由正交向量所构成的基底呢?

定义

定义 4.5. 设内积空间 V 的一组基底为 $\beta = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$. 若对任意的 $(i \neq j), \langle u_i, u_j \rangle = 0$, 我们则称 β 为一组 **正交基 (Orthogonal Basis)**. 特别地, 如果对任意的 $i, \|u_i\| = 1$, 我们称 β 为一组 **单位正交基 (Orthonormal Basis)**.



任意有限维内积空间都存在正交基与单位正交基. 比如在 $\mathbb{R}^2$ 中, 我们熟知的 $\mathbf{e}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 以及 $\mathbf{e}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 便是一组单位正交基. 相较于其他的基底, (单位) 正交基有什么优点?

不妨设内积空间 V 的一组单位正交基为 $\beta = \{\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n\}$, 那么对于任意的 $\mathbf{v} \in V$, 我们设

$$\mathbf{v} = c_1 \mathbf{u}_1 + c_2 \mathbf{u}_2 + \dots + c_n \mathbf{u}_n.$$

那么此时我们根据定义便有

$$\begin{aligned} \mathbf{proj}_{\mathbf{u}_i}(\mathbf{v}) &= \langle \mathbf{v}, \mathbf{u}_i \rangle \mathbf{u}_i \\ &= \langle c_1 \mathbf{u}_1 + c_2 \mathbf{u}_2 + \dots + c_n \mathbf{u}_n, \mathbf{u}_i \rangle \\ &= c_1 \langle \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_i \rangle + c_2 \langle \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_i \rangle + \dots + c_n \langle \mathbf{u}_n, \mathbf{u}_i \rangle \\ &= c_i \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_i \rangle \\ &= c_i. \end{aligned}$$

同理我们可以得到 $\mathbf{proj}_{\mathbf{u}_1}(\mathbf{v}) = c_1$, 等等. 于是将这些式子加和, 我们得到一个重要的公式:

定理

定理 4.4. 设 $\beta = \{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n\}$ 为一组单位正交基, $\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n c_i \mathbf{u}_i$, 则

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n \langle \mathbf{v}, \mathbf{u}_i \rangle \mathbf{u}_i = \sum_{i=1}^n \mathbf{proj}_{\mathbf{u}_i}(\mathbf{v}).$$

其中, $\langle \mathbf{v}, \mathbf{u}_i \rangle$ 被称作是 $\mathbf{v}$ 的 **傅立叶系数 (Fourier Coefficients)**.

在单位正交基 β 中我们还可以快速地算出线性变换 $T: V \rightarrow V$ 所对应的矩阵 $[T]_\beta$. 根据定义我们知道 $[T]_\beta$ 的第 j 列即为 $[T(\mathbf{u}_j)]_\beta$, 如果我们设

$$[T(\mathbf{u}_j)]_\beta = \begin{pmatrix} c_1 & \dots & c_n \end{pmatrix}^\top,$$

那么根据定义我们便有

$$T(\mathbf{u}_j) = c_1 \mathbf{u}_1 + \dots + c_n \mathbf{u}_n.$$

此时对所有的 i , 我们考虑 $\langle T(\mathbf{u}_j), \mathbf{u}_i \rangle$, 那么我们有

$$\langle T(\mathbf{u}_j), \mathbf{u}_i \rangle = \langle c_1 \mathbf{u}_1 + \dots + c_n \mathbf{u}_n, \mathbf{u}_i \rangle = c_i.$$

因此

$$[T(\mathbf{u}_j)]_\beta = \begin{pmatrix} \langle T(\mathbf{u}_j), \mathbf{u}_1 \rangle & \langle T(\mathbf{u}_j), \mathbf{u}_2 \rangle & \dots & \langle T(\mathbf{u}_j), \mathbf{u}_n \rangle \end{pmatrix}^\top.$$

由此我们得出以下推论:



定理

定理 4.5. 对于线性变换 $T: V \rightarrow V$ 而言, 设 β 为一组单位正交基, 那么

$$[T]_{\beta} = (\langle T(u_j), u_i \rangle)_{ij} = \begin{pmatrix} \langle T(u_1), u_1 \rangle & \cdots & \langle T(u_n), u_1 \rangle \\ \langle T(u_1), u_2 \rangle & \cdots & \langle T(u_n), u_2 \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle T(u_1), u_n \rangle & \cdots & \langle T(u_n), u_n \rangle \end{pmatrix}.$$

单位正交基还有另外一条性质: 我们不妨先设矩阵 P 的列向量即为单位正交基中的元素:

$$P \in M_n(\mathbb{C}) = (u_1 \ u_2 \ \cdots \ u_n),$$

随后我们令 $P^* := \bar{P}^T$ (即 P 的共轭转置), 由此我们发现

$$P^*P = \begin{pmatrix} \overline{u_1} \\ \vdots \\ \overline{u_n} \end{pmatrix} \cdot (u_1 \ \cdots \ u_n) = \begin{pmatrix} \|u_1\|^2 & \langle \overline{u_2}, u_1 \rangle & \cdots & \langle \overline{u_n}, u_1 \rangle \\ \langle \overline{u_1}, u_2 \rangle & \|u_2\|^2 & \cdots & \langle \overline{u_n}, u_2 \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \overline{u_1}, u_n \rangle & \cdots & \langle \overline{u_{n-1}}, u_n \rangle & \|u_n\|^2 \end{pmatrix} = I.$$

同理, 我们还可以得到 $PP^* = I$. 由于 P 可逆, 所以我们也通常把这种关系写作 $P^* = P^{-1}$. 同时当数域为 $\mathbb{R}$ 时, 我们有 $P^T = P^{-1}$. 我们给出满足这种条件的矩阵的定义:

定义

定义 4.6. 设矩阵 $P = (u_1 \ u_2 \ \cdots \ u_n)$. 那么:

- ① 若数域为 $\mathbb{R}$, 且 $P^T = P^{-1}$, 我们称矩阵 P 为 **正交矩阵 (Orthogonal Matrix)**;
- ② 若数域为 $\mathbb{C}$, 且 $P^* = P^{-1}$ 我们称矩阵 P 为 **酉矩阵 (Unitary Matrix)**.

根据我们以上的推理, 我们不难发现由正交单位基为列向量所构成的矩阵即为正交矩阵 (或酉矩阵).

我们此时已经知道单位正交基有着非常多美好的性质, 那么我们该如何构建一个单位正交基呢? 如果任意给出一组基底 γ , 我们该通过怎么样的运算将 γ 转变成为单位正交基呢? 我们所运用的原理即为 $x - \text{proj}_y(x) \perp y$ 这一公式. 我们不难发现, $\sum_{i=1}^{k-1} \frac{\langle v_k, u_i \rangle}{\|u_i\|^2} \cdot u_i$ 即为 v_k 在 $\text{Span}(u_1, u_2, \cdots, u_{k-1})$ 上的正交投影, 由此我们便有

$$v_k - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{\langle v_k, u_i \rangle}{\|u_i\|^2} \cdot u_i \perp \text{Span}(u_1, u_2, \cdots, u_{k-1}).$$

这种算法也被我们称作是 **施密特算法 (Gram-Schmidt Algorithm)**:



定理

定理 4.6 (Gram-Schmidt 算法). 给定内积空间 V 的任意一组基底 $\beta = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$, 然后进行以下步骤:

① 令 $w_1 = v_1$;

② 对于 v_k ($2 \leq k \leq n$), 令

$$w_k = v_k - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{\langle v_k, w_i \rangle}{\|w_i\|^2} w_i;$$

③ 对于 $i = 1, \dots, n$, 令 $u_i = \frac{w_i}{\|w_i\|}$.

则 $\gamma = \{u_1, u_2, \dots, u_n\}$ 为 V 的一组单位正交基.

值得注意的是, 在 Gram-Schmidt 算法中, 我们得到的 $\{w_1, \dots, w_n\}$ 为一个 **正交基** (Orthogonal Basis), 即 $w_i \perp w_j, \forall i \neq j$. 通过对其进行单位化, 我们便可以得到一组单位正交基.

例题

例题 4.2. 设 $v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, v_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, 根据 Gram-Schmidt 算法构建出一组单位正交基.

解答 4.2. 首先我们令 $w_1 = v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. 在 $\mathbb{R}^n$ 中, 内积即为数量积. 随后我们按照定义得出

$$w_2 = v_2 - \frac{\langle v_2, w_1 \rangle}{\|w_1\|^2} \cdot w_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

此时我们不妨验证一下 $w_1 \perp w_2$: $\langle w_1, w_2 \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$. 为了方便后续运算, 我们可以将 w_2 的所有坐标均扩大一倍, 即 $w_2 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 \end{pmatrix}^\top$, 这样在后续计算模的时候便会简便很多. 在此情况下我们同样可以给出 w_3 的表达式:

$$w_3 = v_3 - \frac{\langle v_3, w_1 \rangle}{\|w_1\|^2} \cdot w_1 - \frac{\langle v_3, w_2 \rangle}{\|w_2\|^2} \cdot w_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix}.$$



由此我们得到的一组正交基为

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \\ \frac{2}{3} \end{pmatrix} \right\}.$$

通过单位化, 我们得到的单位正交基为

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ -1/\sqrt{6} \\ 2/\sqrt{6} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{pmatrix} \right\}.$$

例题

例题 4.3. 设 $P_2([0, 1])$ 代表定义在 $[0, 1]$ 上的实数二次多项式. 设 $f(x), g(x) \in P_2([0, 1])$, 定义内积运算为

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_0^1 f(x)g(x)dx.$$

据此求出 $P_2([0, 1])$ 的一组正交基.

解答 4.3. 我们首先取一组 $P_2([0, 1])$ 的基底: $\alpha = \{f_0(x) = 1, f_1(x) = 1 + x, f_2(x) = 1 + x + x^2\}$. 随后根据 Gram-Schmidt 算法, 令 $g_0(x) = 1$, 那么

$$g_1(x) = f_1(x) - \frac{\langle f_1(x), g_0(x) \rangle}{\|g_0(x)\|_{L^2}^2} \cdot g_0(x).$$

回顾我们对于实数多项式内积的定义, 我们有

$$\langle f_1(x), g_0(x) \rangle = \int_0^1 f_1(x) \cdot g_0(x)dx = \int_0^1 (1+x)dx = \frac{3}{2},$$

$$\|g_0(x)\|_{L^2}^2 = \int_0^1 g_0^2(x)dx = \int_0^1 1dx = 1.$$

则

$$g_1(x) = 1 + x - \frac{3}{2} \cdot 1 = x - \frac{1}{2}.$$

对于 $g_2(x)$, 同理

$$\begin{aligned} g_2(x) &= f_2(x) - \frac{\langle f_2(x), g_0(x) \rangle}{\|g_0(x)\|_{L^2}^2} \cdot g_0(x) - \frac{\langle f_2(x), g_1(x) \rangle}{\|g_1(x)\|_{L^2}^2} \cdot g_1(x) \\ &= 1 + x + x^2 - \frac{\int_0^1 (1+x+x^2)dx}{\int_0^1 1dx} \cdot 1 - \frac{\int_0^1 (x-\frac{1}{2})(1+x+x^2)dx}{\int_0^1 (x-\frac{1}{2})^2 dx} \cdot (x-\frac{1}{2}) \\ &= x^2 - x + \frac{1}{6}. \end{aligned}$$

由此我们得出 $P_2([0, 1])$ 的一组正交基为

$$\left\{ g_0(x) = 1, g_1(x) = x - \frac{1}{2}, g_2(x) = x^2 - x + \frac{1}{6} \right\}.$$



(读者可以自行尝试将其转化为单位正交基, 只不过运算量会比较大).

定义

定义 4.7. 设 $\mathcal{U} \subseteq V$, 我们定义 $\mathcal{U}$ 的**正交补**(Orthogonal Complement) $\mathcal{U}^\perp$ 为

$$\mathcal{U}^\perp := \{v \in V : \forall u \in \mathcal{U}, \langle u, v \rangle = 0\}.$$

在我们研究更多性质之前, 我们先提出一个简单的推论:

推论

推论 4.2. 设 $A \in M_n(\mathbb{R})$, $x, y \in \mathbb{R}^n$. 则 $\langle x, Ay \rangle = \langle A^\top x, y \rangle$.

证明. 显而易见, $\langle x, Ay \rangle = x^\top(Ay) = (x^\top A)y = (A^\top x)^\top y = \langle A^\top x, y \rangle$. ■

我们可以利用此推论去证明下面的定理:

定理

定理 4.7. 设 $A \in M_n(\mathbb{R})$, 则:

$$\textcircled{1} \text{Ker}(A^\top) = \text{Im}(A)^\perp; \quad \textcircled{2} \text{Im}(A^\top) = \text{Ker}(A)^\perp.$$

证明. 对于①而言, 我们设 $y \in \text{Im}(A)^\perp$, 那么对任意的 $x \in \mathbb{R}^n$, $\langle y, Ax \rangle = 0$. 由推论 4.2, 我们便知道 $\langle A^\top y, x \rangle = 0$. 由于 x 为任意 $\mathbb{R}^n$ 中的向量, 那么我们有 $A^\top y = 0$, 即 $y \in \text{Ker}(A^\top)$ (注意到我们的每一步运算均为“当且仅当”), 因此等式①得证; ②所用到的方法与①完全相同. ■

例题

例题 4.4. 设 $x = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 2 \end{pmatrix}^\top \subseteq \mathbb{R}^4$. 求出 $x^\perp$ 的一组正交基.

解答 4.4. 我们设 $y = \begin{pmatrix} a & b & c & d \end{pmatrix}^\top \in x^\perp$. 由定义可知 $\langle x, y \rangle = 0$, 即 $a + b - c + 2d = 0$. 在这个方程中有三个自由变量, 因此原式的解集可以写作

$$y = s \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + r \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$$\text{由此我们得出 } x^\perp \text{ 的一组基底为 } v_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, v_3 = \begin{pmatrix} -2 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$



随后我们便可以通过 *Gram-Schmidt* 算法将 $\{v_1, v_2, v_3\}$ 转化为一组单位正交基:

$$\begin{aligned} w_1 &= \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^\top; \\ w_2 &= v_2 - \frac{\langle v_2, w_1 \rangle}{\|w_1\|^2} \cdot w_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 & 0 \end{pmatrix}^\top; \\ w_3 &= v_3 - \frac{\langle v_3, w_1 \rangle}{\|w_1\|^2} \cdot w_1 - \frac{\langle v_3, w_2 \rangle}{\|w_2\|^2} \cdot w_2 = \begin{pmatrix} -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & 1 \end{pmatrix}^\top. \end{aligned}$$

最后再将 w_1, w_2, w_3 单位化, 我们即得到 $x^\perp$ 的一组单位正交基为

$$\left\{ \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{2}{\sqrt{21}} \\ -\frac{2}{\sqrt{21}} \\ \frac{2}{\sqrt{21}} \\ \frac{3}{\sqrt{21}} \end{pmatrix} \right\}.$$

4.2 练习

1. 利用 *Gram-Schmidt* 算法, 将下列基底转化为单位正交基:

$$(a): \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \right\}; \quad (b): \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}.$$

2. 设 $P_2([-1, 1])$ 代表定义在 $[-1, 1]$ 上的实数二次多项式. 在此情况下定义内积为

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_{-1}^1 f(x) \cdot g(x) dx,$$

利用 *Gram-Schmidt* 算法, 求出 $P_2([-1, 1])$ 的一组正交基 $\gamma = \{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \varphi_2(x)\}$.

3. 在 $\mathbb{R}^3$ 中, 计算向量 $v = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}$ 在平面 $x + y + z = 0$ 上的正交投影.

4. 设 $P_2([0, 2])$ 代表定义在 $[0, 2]$ 上的实数二次多项式. 定义内积为

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_0^2 f(x)g(x)dx.$$

记 $\alpha = \{1, x - x^2, x + x^2\}$ 为 $P_2([0, 2])$ 的一组基底; $W = \text{Span}(1, x)$. 线性变换 $T: P_2([0, 2]) \rightarrow P_2([0, 2])$

满足 $T(f(x)) = \text{proj}_W(f(x))$. 据此求变换矩阵 $[T]_\alpha^\alpha$.



5. 记 $v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$. 若 $u = \begin{pmatrix} 3 \\ -1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}$, 求出满足条件的 u_1, u_2 . 使得 $u = u_1 + u_2, u_1 \in \text{Span}(v_1, v_2), u_2 \in \text{Span}(v_1, v_2)^\perp$.

6. [投影变换] 设 V 为线性空间, 若线性变换 $T: V \rightarrow V$ 满足 $T^2 = T$, 我们则称 T 为投影变换, 其对应的矩阵为投影矩阵.

(i) 设 $v \in V, U \subseteq V, T(v) = \text{proj}_U(v)$. 证明: $\text{Im}(T) = U, \text{Ker}(T) = U^\perp$;

(ii) 若矩阵 $X^\top X$ 可逆, 证明 $X(X^\top X)^{-1}X^\top$ 以及 $X^\top(XX^\top)^{-1}X$ 均为投影矩阵;

(iii) 若 T 为投影变换, 证明 $I - T$ 也为投影变换, 且 $\text{Im}(T) = \text{Im}(I - T)^\perp$.

7. [Fourier 级数] 给出在区间 $(-l, l)$ 上有定义的实数函数 $\varphi(x)$, 我们定义 $\varphi(x)$ 在 $(-l, l)$ 上的 Fourier 级数为

$$\varphi(x) = \frac{1}{2}A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(A_n \cos \frac{n\pi x}{l} + B_n \sin \frac{n\pi x}{l} \right),$$

其中

$$A_n = \frac{1}{l} \int_{-l}^l \varphi(x) \cos \left(\frac{n\pi x}{l} \right) dx; \quad B_n = \frac{1}{l} \int_{-l}^l \varphi(x) \sin \left(\frac{n\pi x}{l} \right) dx.$$

(i) 假设 $f(x), g(x)$ 的内积为

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_0^\pi f(x)g(x)dx,$$

且 m, n 为正整数, $m \neq n$. 证明: $\sin\left(\frac{\pi mx}{l}\right), \sin\left(\frac{\pi nx}{l}\right)$ 在 $(0, l)$ 上正交; $\cos\left(\frac{\pi mx}{l}\right), \cos\left(\frac{\pi nx}{l}\right)$ 在 $(0, l)$ 上正交.

(ii) 证明 $1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \frac{1}{9} - \cdots = \frac{\pi}{4}$. 提示: 设 $\varphi(x) = x$, 然后求其在 $(-\pi, \pi)$ 上的 Fourier 级数;

(iii) 证明 $1 + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} + \frac{1}{7^2} + \cdots = \frac{\pi^2}{8}$. 提示: 设 $\varphi(x) = \begin{cases} \pi + x & -\pi \leq x \leq 0 \\ \pi - x & 0 \leq x \leq \pi \end{cases}$.



4.3 矩阵的正交对角化

回顾我们在第三章中提到的矩阵的对角化: 对于矩阵 A 而言, 其可以对角化的条件是存在对角矩阵 P 与可逆矩阵 Q , 使得

$$A = PQP^{-1}$$

成立. 其中位于 P 主对角线上的元素即为 A 的特征值; Q 的列向量即为 A 的特征向量. 如果我们回顾上一节中提到的正交矩阵和酉矩阵的定义, 我们发现当 Q 为正交矩阵时, $Q^T = Q^{-1}$. 因此我们能否尝试构造出 $A = QPQ^T$ 的形式呢?

定义

定义 4.8. 设 $A \in M_n(\mathbb{F})$.

① 若 $\mathbb{F} = \mathbb{R}$, 且存在由 $\mathbb{R}^n$ 的一组单位正交基为列向量构成的矩阵 Q 以及对角矩阵 P , 使得 $A = QPQ^T$, 我们称 A 可**正交对角化** (*Orthogonally Diagonalizable*);

② 若 $\mathbb{F} = \mathbb{C}$, 且存在由 $\mathbb{C}^n$ 的一组单位正交基为列向量构成的矩阵 Q 以及对角矩阵 P , 使得 $A = QPQ^*$ ($Q^* = (\overline{Q})^T$), 我们称 A 可**酉对角化** (*Unitarily Diagonalizable*).

通过定义, 我们可以分析出使得矩阵 A 正交对角化的条件:

- 首先, A 必须可以对角化. 否则我们就无法构造出矩阵 P 和 Q .
- 其次, 由于 Q 为正交 (酉) 矩阵, 这也就代表了 Q 中的列向量彼此正交. 由于我们知道, 不同的特征向量所对应的特征空间满足直和的关系, 因此 A 的特征空间彼此正交, 即 $Eig_A(\lambda_i) \perp Eig_A(\lambda_j), i \neq j$;
- 最后, 在一个特征空间中, 我们同样要满足其基底向量彼此正交, 因此我们需要通过 Gram-Schmidt 算法去找出特征空间的单位正交基.

例题

例题 4.5. 设线性变换 $T: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ 满足

$$T \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}; \quad T \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

那么令 $E := \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$, 判断 $[T]_E^E$ 能否正交对角化.

解答 4.5. 不难发现, $A := [T]_E^E = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$. 那么很显然 A 有两个不同的特征值: $\lambda_1 = 3; \lambda_2 = 2$. 由此我们知道 A 可对角化. 对于 $\lambda_1 = 3$ 而言, 其特征向量 v_1 满足

$$v_1 \in \text{Ker}(A - \lambda_1 I) = \text{Ker} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \text{Span} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$



对于 $\lambda_2 = 2$ 而言, 其特征向量 v_2 满足

$$v_2 \in \text{Ker}(A - \lambda_2 I) = \text{Ker} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \text{Span} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

我们发现, v_1, v_2 所处的特征空间不正交. 因此我们无法构造出正交矩阵 Q , 因此 $[T]_E^E$ 不可正交对角化.

定理

定理 4.8. 设 $A \in M_n(\mathbb{F})$.

- ① 若 $\mathbb{F} = \mathbb{R}$, 且 A 可正交对角化, 那么 $A = A^\top$ (A 为对称矩阵);
- ② 若 $\mathbb{F} = \mathbb{C}$, 且 A 可酉对角化, 那么 A 为**正规矩阵 (Normal Matrix)**, 即 $AA^* = A^*A$.

证明. 对于①而言, 我们知道此时存在对角矩阵 P 和正交矩阵 Q , 使得 $A = QPQ^\top$. 那么

$$A^\top = (QPQ^\top)^\top = (Q^\top)^\top P^\top Q^\top = QPQ^\top.$$

对于②而言, 类似地

$$AA^* = QPQ^*(QPQ^*)^* = QPQ^*QP^*Q^* = QPP^*Q^* = QP^*PQ^* = QP^*Q^*QPQ^* = A^*A.$$

■

该定理说明, 实矩阵若可正交对角化, 则必须是对称矩阵; 反过来, 我们随后便会知道: 当 $A \in M_n(\mathbb{R})$ 时任何对称矩阵均可正交对角化. 对于 $A \in M_n(\mathbb{C})$ 而言, 我们把正规矩阵主要分成以下几类:

- 若 $A \in M_n(\mathbb{C})$ 满足 $A = A^*$, 则 A 为**自伴矩阵 (Self-adjoint Matrices)**. 其中

$$\langle x, Ay \rangle = (x)^\top (\overline{Ay}) = (x^\top \overline{A}) \overline{y} = (\overline{A^\top x})^\top y = \langle A^* x, y \rangle = \langle Ax, y \rangle.$$

若定义在内积空间 V 上的线性变换 $T: V \rightarrow V$ 满足 $\langle Tu, v \rangle = \langle u, Tv \rangle$, T 也被称作**自伴算子 (Self-adjoint Operator)**.

定理

定理 4.9. 设 $A \in M_n(\mathbb{C})$ 为自伴矩阵, 则 A 的所有特征值为实数.

证明. 设 λ 为 A 的一个特征值, v 为与之对应的特征向量. 那么根据推论 4.2, 当 $A \in M_n(\mathbb{C})$ 时我们可以得出相似的结果:

$$\langle x, Ay \rangle = (x)^\top (\overline{Ay}) = (x^\top \overline{A}) \overline{y} = (\overline{A^\top x})^\top y = \langle A^* x, y \rangle = \langle Ax, y \rangle.$$

设 λ 为 A 的一个特征值, v 为与之对应的特征向量, 那么我们有 $\langle Av, v \rangle = \langle v, Av \rangle$, 因此由 $Av = \lambda v$, 我们得到 $\langle \lambda v, v \rangle = \langle v, \lambda v \rangle$. 根据内积的性质, $\langle \lambda v, v \rangle = \lambda \cdot \|v\|^2$; $\langle v, \lambda v \rangle = \overline{\lambda} \cdot \|v\|^2$. 即我们有 $\lambda \|v\|^2 = \overline{\lambda} \|v\|^2$. 由于 v 为非零向量, 则 $\lambda \in \mathbb{R}$.



同理, 所有的自伴算子的特征值也均为实数.

- 若 $A \in M_n(\mathbb{C})$ 满足 $A = -A^*$, 则 A 为**斜自伴矩阵 (Skew-adjoint Matrices)**. 其中

$$\langle x, Ay \rangle = (x)^\top (\overline{Ay}) = (x^\top \overline{A}) \overline{y} = (\overline{A}^\top x)^\top y = \langle A^* x, y \rangle = -\langle Ax, y \rangle.$$

若定义在内积空间 V 上的线性变换 $T: V \rightarrow V$ 满足 $\langle Tu, v \rangle = -\langle u, Tv \rangle$, T 也被称作**斜自伴算子 (Skew-adjoint Operator)**.

定理

定理 4.10. 设 $A \in M_n(\mathbb{C})$ 为斜自伴矩阵, 则 A 的所有非零特征值为纯虚数.

证明. 设 λ 为 A 的一个特征值, v 为与之对应的特征向量. 则 $\langle Av, v \rangle = \langle \lambda v, v \rangle = \lambda \|v\|^2$. 同时 $\langle Av, v \rangle = -\langle v, Av \rangle = -\langle v, \lambda v \rangle = -\bar{\lambda} \|v\|^2$. 则 $\lambda = -\bar{\lambda}$, 即 $\text{Re}(\lambda) = 0$. ■

同理, 所有的斜自伴算子的非零特征值也均为纯虚数.

- 若 $A \in M_n(\mathbb{C})$ 满足 $A^* = A^{-1}$, 则 A 为**酉矩阵 (Unitary Matrices)**. 其中

$$\langle Ax, Ay \rangle = (Ax)^\top (\overline{Ay}) = A(x^\top \overline{A}) \overline{y} = A(A^* x)^\top \overline{y} = A \langle A^* x, y \rangle = AA^* \langle x, y \rangle = \langle x, y \rangle.$$

若定义在内积空间 V 上的线性变换 $T: V \rightarrow V$ 满足 $\langle Tu, Tv \rangle = \langle u, v \rangle$, T 也被称作**酉算子 (Unitary Operator)**.

定理

定理 4.11. 设 $A \in M_n(\mathbb{C})$ 为酉矩阵, 则对 A 中任意的特征值 λ 而言, $\lambda \bar{\lambda} = 1$.

证明. 根据酉算子的定义, $\langle Av, Av \rangle = \langle v, v \rangle$. 此外 $\langle Av, Av \rangle = \langle \lambda v, \lambda v \rangle = \lambda \cdot \bar{\lambda} \langle v, v \rangle$. 因此原式得证. ■

同理, 所有的酉算子的特征值也均满足上述性质.

我们接下来将重点研究正规矩阵的性质:

定理

定理 4.12. 设 $A \in M_n(\mathbb{C})$ 为正规矩阵, u 为 A 中与 λ 对应的特征值, 则 u 同为 A^* 中与 $\bar{\lambda}$ 对应的特征值.

证明. 可知 $\langle Av, v \rangle = \langle \lambda v, v \rangle = \lambda \langle v, v \rangle = \langle v, \bar{\lambda} v \rangle$. 同时结合 $\langle Av, v \rangle = \langle v, A^* v \rangle$ 即可得证. ■

定理

定理 4.13. 设 $A \in M_n(\mathbb{C})$ 为正规矩阵, u, v 分别为特征值 λ, μ 所对应的特征向量 ($\lambda \neq \mu$). 则 $\langle u, v \rangle = 0$.



证明. 设 $Au = \lambda u, Av = \mu v$. 那么 $\langle Au, v \rangle = \langle \lambda u, v \rangle = \lambda \langle u, v \rangle$. 同时

$$\langle Au, v \rangle = \langle u, A^*v \rangle = \langle u, \bar{\mu}v \rangle = \bar{\mu} \langle u, v \rangle.$$

由于 $\lambda \neq \mu$, 则 $\langle u, v \rangle = 0$. ■

也就是说, 对于所有的正规矩阵或正规算子而言, 其特征空间两两彼此正交. 那么是不是就代表了这些矩阵可以正交对角化了呢? 我们现在提出本章最重要的定理:

定理

定理 4.14 (谱定理 (Spectral Theorem)). 设 V 为定义在数域 $\mathbb{F}$ ($\mathbb{R}$ 或 $\mathbb{C}$) 上的内积空间, 记线性变换 $T: V \rightarrow V$, 其矩阵形式为 A . 假设 T 的特征多项式可在 $\mathbb{F}$ 中分解, 那么 T 可正交对角化 (A 可正交对角化) 的充要条件是 T 为正规算子 (A 为正规矩阵).

该定理的证明我们在本书中忽略. 感兴趣的同学请在今后选修泛函分析或者高等代数课程. 我们从两个方面去理解谱定理:

- 第一, 如果 $\mathbb{F} = \mathbb{R}$, 那么 $A^* = A^T$, 即 $AA^T = A^T A$, 即 $A = A^T$, 因此 A 为对称矩阵. 也就是说 A 可以正交对角化的充要条件是 A 为对称矩阵. 此时, 存在矩阵 Q , 使得 Q 的列向量为 A 的特征向量, 且它们构成 V 的一组标准正交基. 记 P 为包含 A 的特征值的对角矩阵, 那么

$$A = QPQ^T.$$

- 第二, 如果 $\mathbb{F} = \mathbb{C}$, 此时 A 为正规矩阵, 也就包括了我们先前提出的几种情况: 自伴矩阵, 斜自伴矩阵, 酉矩阵. 因此, A 可以正交对角化的充要条件是 A 为正规矩阵. 此时, 存在矩阵 Q , 使得 Q 的列向量为 A 的特征向量, 且它们构成 V 的一组标准正交基. 记 P 为包含 A 的特征值的对角矩阵, 那么

$$A = QPQ^*.$$

例题

例题 4.6. 设 $A = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$. 找出 $P, Q \in M_3(\mathbb{C})$, 使得 $A = QPQ^*$.

解答 4.6. 不难发现, A 为正规矩阵, 因此 A 可正交对角化. A 的特征多项式为

$$C_A(x) = \det \begin{pmatrix} -x & i & 0 \\ -i & -x & 0 \\ 0 & 0 & -x \end{pmatrix} = -x(x^2 - 1) = -x(x+1)(x-1).$$



因此 A 有三个特征值 $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = -1, \lambda_3 = 1$. 三个特征值对应的特征空间分别为

$$\mathbf{Eig}_A(\lambda_1) = \mathbf{Ker} \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{Span} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$$\mathbf{Eig}_A(\lambda_2) = \mathbf{Ker} \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{Span} \begin{pmatrix} i \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

$$\mathbf{Eig}_A(\lambda_3) = \mathbf{Ker} \begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{Span} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

由于 A 的特征空间两两正交, 因此我们得到的三个向量即构成了 $\mathbb{C}^3$ 的一组正交基. 通过单位化, 我们得到的单位正交基为

$$v_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}; v_2 = \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}, v_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

因此我们得到

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

在本节的最后, 我们浅谈一下对角化概念的扩充: **三角化 (Triangularization)**.

定义

定义 4.9. 设 V 为维数为 n 的线性空间, 设线性变换 $T: V \rightarrow V$. 若存在 V 的一组基底 β , 使得 $[T]_\beta$ 为上三角矩阵, 且位于主对角线上的元素为 T 的特征值, 则我们称 T 为可三角化的线性算子.

矩阵的三角化和线性变换的三角化具有相似的定义: 若 A 相似于以 A 特征值为主对角线元素的上三角矩阵, 我们则称矩阵 A 可三角化, 反之同样成立: 此时存在可逆矩阵 Q 和上三角矩阵 P , 使得 $A = QPQ^{-1}$. 其中

$$P = \begin{pmatrix} \lambda_1 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & \lambda_2 & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{pmatrix},$$

$\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 为 A 的特征值. 如果 Q 为正交矩阵或酉矩阵, 原结论同样成立, 我们称 A 可正交三角化.



定义

定义 4.10. 设 $A, P \in M_n(\mathbb{F})$.

① 若 $\mathbb{F} = \mathbb{R}$, 且存在正交矩阵 Q , 使得 $A = QPQ^\top$, 我们称 A 正交相似于 P ;

② 若 $\mathbb{F} = \mathbb{C}$, 且存在酉矩阵 Q , 使得 $A = QPQ^*$, 我们称 A 酉相似于 P .

下面的定理告诉了我们矩阵 A 在什么情况下可以正交三角化:

定理

定理 4.15 (Schur 定理). 设 V 为维数为 n , 定义在数域 $\mathbb{F}$ ($\mathbb{R}$ 或 $\mathbb{C}$) 上的内积空间. 则以下两个推论等价:

① 线性变换 $T: V \rightarrow V$ 的特征多项式可在 $\mathbb{F}$ 中分解, 即

$$C_T(x) = (x - \lambda_1)^{a_1} \cdots (x - \lambda_k)^{a_k}, \quad a_1 + \cdots + a_k = n; \lambda_i \in \mathbb{F};$$

② 存在一组 V 的单位正交基 β , 使得 $[T]_\beta$ 为上三角矩阵, 且 $[T]_\beta$ 的主对角线上的元素为 T 的特征值.

证明. ② $\rightarrow$ ①: 假设存在满足条件的单位正交基 β . 那么设 T 在任意基底下的矩阵形式为 A , 则存在由 β 中的元素为列向量的矩阵 Q , 使得 $A = Q[T]_\beta Q^*$, 即 $A, [T]_\beta$ 相似, 又因为相似矩阵的特征值相同, 故①得证.

① $\rightarrow$ ②. 我们将采用数学归纳法. 假设①成立. 设 $\dim(V) = n$. 首先若 $n = 1$, 那么结果显然成立. 我们假设结论②对所有 $\dim(V) < n$ 的正整数成立, 则我们需验证结论②对 $\dim(V) = n$ 时成立. 设 λ_1 为 T 的一个特征值, v_1 为与之对应的特征向量, 且不失一般性地讲令 $\|v_1\| = 1$. 利用 Gram-Schmidt 算法, 以 v_1 为基础构造出 V 的一组单位正交基 $\beta = \{v_1, \cdots, v_n\}$. 令 $P = \begin{pmatrix} v_1 & \cdots & v_n \end{pmatrix}$, 则

$$A = P[T]_\beta P^{-1}.$$

其中, 我们可以将 $[T]_\beta$ 写作

$$[T]_\beta = \begin{pmatrix} [T(v_1)]_\beta & \cdots & [T(v_n)]_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [\lambda_1 v_1]_\beta & \cdots & [T(v_n)]_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & u^\top \\ \mathbf{0}_{n-1} & A_1 \end{pmatrix},$$

$\mathbf{0}_{n-1}$ 代表维数为 $n-1$ 的零向量; u 为一未知向量, A_1 为未知 $(n-1) \times (n-1)$ 矩阵. 由于 $A, [T]_\beta$ 相似, 因此二者有相同的特征多项式, 因此 $[T]_\beta$ 的特征多项式可在 $\mathbb{F}$ 中分解. 那么根据数学归纳法原理, 矩阵 A_1 可正交三角化. 即存在正交矩阵 (或酉矩阵) $Q \in M_{n-1}(\mathbb{F})$, 由 A_1 的特征值为主对角线元素的上三角矩阵 A_2 , 使得

$$A_1 = QA_2Q^{-1}.$$

我们现在假设

$$R = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}_{n-1}^\top \\ \mathbf{0}_{n-1} & Q \end{pmatrix},$$



那么不难发现矩阵 R 可逆. 除此之外, 注意到

$$R^{-1}[T]_{\beta}R = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}_{n-1}^{\top} \\ \mathbf{0}_{n-1} & Q^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_0 & \mathbf{u}^{\top} \\ \mathbf{0}_{n-1} & A_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}_{n-1}^{\top} \\ \mathbf{0}_{n-1} & Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_0 & \mathbf{u}^{\top} \\ \mathbf{0}_{n-1} & A_2 \end{pmatrix}.$$

因此 $R^{-1}[T]_{\beta}R$ 为上三角矩阵. 同时由 $R^{-1}[T]_{\beta}R = R^{-1}P^{-1}APR = (PR)^{-1}A(PR)$ 可知, $(PR)^{-1}A(PR)$ 为上三角矩阵. 由于 P, Q 均为正交矩阵 (或酉矩阵), 则 PQ 同为正交矩阵 (或酉矩阵). 因此根据定义 T 可正交三角化. ■

推论

推论 4.3. 对任意的 $A \in M_n(\mathbb{C})$ 而言, A 单一相似 (Unitarily Similar) 于一个上三角矩阵 P . 即存在一组 $\mathbb{C}^n$ 的单位正交基 $\{v_1, \dots, v_n\}$, 设矩阵 $Q = (v_1 \ \dots \ v_n)$, 有

$$A = PQP^*.$$

其中 P 位于主对角线上的元素即为 A 的特征值.

4.3 练习

1. 对于下面定义在内积空间 V 上的线性变换 $T: V \rightarrow V$, 判断 T 是否为: 正规算子; 自伴算子; 酉算子 (当数域为 $\mathbb{R}$ 时, 我们把 A^* 当成 $A^{\top}$ 处理即可).

(i) $V = \mathbb{R}^2, T \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2a - 2b \\ -2a + 5b \end{pmatrix};$

(ii) $V = \mathbb{R}^3, T \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -a + b \\ 5b \\ 4a - 2b + 5c \end{pmatrix};$

(iii) $V = \mathbb{C}^2, T \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2a + ib \\ a + 2b \end{pmatrix};$

(iv) $V = P_2(\mathbb{R}), T(f(x)) = f'(x)$. 其中 $\langle f(x), g(x) \rangle = \int_0^1 f(x) \cdot g(x) dx;$

(v) $V = M_2(\mathbb{R}), T(A) = A^{\top}.$

2. 设 $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$, 求出矩阵 $Q, P \in M_3(\mathbb{R})$, 使得 $A = PQP^{\top}.$



3. 设 $A = \begin{pmatrix} 0 & -2 & 2 \\ 2 & 0 & -1 \\ -2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$, 求出矩阵 $Q, P \in M_3(\mathbb{C})$, 使得 $A = PQP^*$.

4. 设定义在维数有限的内积空间 V 上的线性变换 $T: V \rightarrow V$ 为正规算子 (即 $T^*T = TT^*$, 或 $[T]_\beta$ 为正规矩阵). 证明:

(i) 对任意的 $v \in V, \|Tv\| = \|T^*v\|$;

(ii) 对任意的 $\lambda \in \mathbb{F}, T - \lambda I$ 为正则算子.

5. 设 V 为定义在 $\mathbb{C}$ 上的内积空间, $T: V \rightarrow V$ 为线性变换. 定义 $T_1, T_2: V \rightarrow V$, 使得

$$T_1 = \frac{1}{2}(T + T^*); \quad T_2 = \frac{1}{2i}(T - T^*).$$

证明: T_1, T_2 为自伴算子.

6. [简化版谱定理] 设 V 为定义在 $\mathbb{F}$ 上的内积空间, $T: V \rightarrow V$ 为线性变换. 记 T 的矩阵形式为 A . 证明: T 为自伴算子的充要条件是矩阵 A 正交相似 (或单一相似) 于对角矩阵. 即存在正交矩阵 (或酉矩阵) Q 与对角矩阵 P , 使得 $A = QPQ^{-1}$ 成立. 提示: 用 *Schur* 定理. 同时该定理还告诉我们如下性质:

- 若 $\mathbb{F} = \mathbb{R}$, 那么 A 正交相似于对角矩阵的充要条件是 $A = A^T$;
- 若 $\mathbb{F} = \mathbb{C}$, 那么 A 单一相似于对角矩阵的充要条件是 $A = A^*$.



4.4 正定矩阵及矩阵的奇异值分解

在前一节的学习中, 我们知道对称矩阵为自伴矩阵的一种, 因此对称矩阵的所有特征值均为实数. 我们本节打算对这一性质进行深入研究: 即我们将研究当对称矩阵的所有特征值均为正数时, 矩阵有什么性质呢? 我们将这类矩阵称作**正定矩阵 (Positive Definite Matrix)**. 在本节中, 我们只考虑实数矩阵.

定义

定义 4.11. 若 $A \in M_n(\mathbb{R})$ 为对称矩阵且所有的特征值均为正数, 那么我们称 A 为正定矩阵.

正定矩阵有着非常多的性质:

定理

定理 4.16. 若 A 为正定矩阵, 那么 A 可逆且 $\det(A) > 0$.

证明. 设 A 的特征值为 $\lambda_1, \dots, \lambda_n > 0$ (可能存在重复), 由于 A 可对角化, 因此存在对角矩阵 $P = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, 使得 A 相似于 P . 由于相似矩阵的行列式相同, 那么 $\det(A) = \det(P) = \lambda_1 \cdots \lambda_n > 0$, 因此 A 也可逆. ■

定理

定理 4.17. $A \in M_n(\mathbb{R})$ 为正定矩阵的充要条件是对任意的非零 $x \in \mathbb{R}^n$, $x^\top A x > 0$.

证明. ($\implies$): 设 $A \in M_n(\mathbb{R})$ 为正定矩阵, $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 为 A 的特征值 (可能存在重复), 则 $\lambda_i > 0$. 设 u_i 为 λ_i 对应的特征向量, 那么记 $Q = (u_1 \cdots u_n)$, $P = \text{diag}(\lambda_1 \cdots \lambda_n)$, 那么我们知道 $A = QPQ^\top$. 则对任意的非零 $x = (x_1 \cdots x_n)^\top$, $x^\top A x = x^\top (QPQ^\top)x$. 令 $Q^\top x = y = (y_1 \cdots y_n)^\top$, 则

$$(x^\top Q)P(Q^\top x) = \lambda_1 y_1^2 + \cdots + \lambda_n y_n^2 > 0.$$

($\impliedby$). 设 λ 为 A 的特征值, u 为与其对应的非零特征向量, 则

$$u^\top A u = u^\top \lambda u = \lambda \|u\|^2 > 0,$$

则 $\lambda > 0$. ■

推论

推论 4.4. 设 $A \in M_n(\mathbb{R})$ 可逆, 则 $A^\top A$ 为正定矩阵.

证明. 设 $x \in \mathbb{R}^n \neq 0$. 由于 A 可逆, 则 $Ax \neq 0$, 那么

$$x^\top (A^\top A)x = (Ax)^\top Ax = \|Ax\|^2 > 0.$$

■



采用固定的消元规则: 即只用主元行消去其下方元素, 并记录每一步产生的主元. 这样得到的主元和上三角矩阵才可用于构造 Cholesky 分解.

例题

例题 4.7. 求出 $A = \begin{pmatrix} 10 & 5 & 2 \\ 5 & 3 & 2 \\ 2 & 2 & 3 \end{pmatrix}$ 的 Cholesky 分解.

解答 4.7. 对 A 进行高斯消元, 不难得到如下的上三角矩阵 U_1 :

$$U_1 = \begin{pmatrix} 10 & 5 & 2 \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 \\ 0 & 0 & \frac{3}{5} \end{pmatrix},$$

因此我们有

$$U = \begin{pmatrix} \sqrt{10} & \frac{5}{\sqrt{10}} & \frac{2}{\sqrt{10}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}, \quad A = U^T U.$$

除了正定矩阵之外, 还有一类特征值为非负数的矩阵. 我们将这类矩阵称作**半正定矩阵 (Positive Semi-definite Matrix)**

定义

定义 4.12. 若 $A \in M_n(\mathbb{R})$ 为对称矩阵且所有的特征值均为非负数, 那么我们称 A 为半正定矩阵.

半正定矩阵和正定矩阵在性质上非常相似, 唯一的不同便是半正定矩阵中可能出现 0 作为特征值. 因此对定理 4.17 稍作修改, 我们也可以得到半正定矩阵的相应性质:

推论

推论 4.5. $A \in M_n(\mathbb{R})$ 为半正定矩阵的充要条件是对任意的非零 $x \in \mathbb{R}^n$, $x^T A x \geq 0$.

证明. 证明略. ■

对于任意的 $A \in M_{mn}(\mathbb{R})$, 不难发现 $A^T A$ 为对称矩阵. 设 λ 为 A 的特征值, u 为与之对应的特征向量, 那么

$$u^T A^T A u = u^T \lambda^2 u \geq 0,$$

则 $A^T A$ 均为半正定矩阵. 由于半正定矩阵的特征值为非负数, 我们可以由此给出任意矩阵 A 的**奇异值 (Singular Value)**的定义:

定义

定义 4.13. 设 $A \in M_{mn}(\mathbb{R})$ 为任意矩阵, 记 λ_i 为 $A^T A$ 的特征值, 我们定义 A 的奇异值为 $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$.



我们前面讲到的 LU 分解, 对角化, Cholesky 分解等都用于 $n \times n$ 矩阵. 像是一般的矩阵 $A \in M_{mn}(\mathbb{R})$, 我们能否也将其分解成类似的形式呢? 在本节的后半部分我将着重讲解这一独特的分解: 矩阵的**奇异值分解 (Singular Value Decomposition)**. 对于 $A \in M_{m \times n}(\mathbb{R})$, 而言, 我们的目标是找出 $m \times m$ 的正交矩阵 U , $n \times n$ 的正交矩阵 V , 以及 $m \times n$ 的“对角矩阵” S , 使得

$$A = USV^T, \quad S = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_n \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix} \text{ 或 } \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_n & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n \geq 0.$$

其中位于 S 的“对角线”上的元素即为矩阵 $A^T A$ 的奇异值, 且按照从大到小依次排列. 我们知道, 此时 $A^T A$ 为 $n \times n$ 对称矩阵, 因此可以正交对角化. 由此存在由 $\mathbb{R}^n$ 的一组单位正交基 $\{v_1, \cdots, v_n\}$ 为列向量的矩阵 V 以及以 $A^T A$ 的特征值为对角线元素的对角矩阵 D , 使得

$$A^T A = VDV^T.$$

推论

推论 4.6. 设 $\sigma_i u_i = A v_i$, $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_k \geq \sigma_{k+1} = \cdots = \sigma_n = 0$ 则 $u_1, \cdots, u_k \in \mathbb{R}^m$ 正交且为单位向量.

证明. 根据定义, $\forall i, j \leq k$,

$$u_i^T u_j = \left(\frac{1}{\sigma_i} A v_i \right)^T \cdot \frac{1}{\sigma_j} A v_j = \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} v_i^T A^T A v_j = \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} v_i^T (VDV^T) v_j = \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} v_i^T \lambda_j v_j.$$

结合 $\lambda_j = \sigma_j^2$, 我们有

$$u_i^T u_j = \frac{\sigma_j}{\sigma_i} v_i^T v_j = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}.$$

■

此时, 我们便有有了一组单位正交向量. 但值得注意的是此时 $k \leq m$, 所以当 $k < m$ 的时候我们需要使用 Gram-Schmidt 算法将 $u_1, \cdots, u_k$ 补全为一组 $\mathbb{R}^m$ 的单位正交基: $\{u_1, \cdots, u_k, u_{k+1}, \cdots, u_m\}$. 随后记矩阵 U 的列向量为 $u_1, \cdots, u_m$, 我们便得到了三个矩阵: U, S, V . 此时我们想知道的便是 $A = USV^T$ 是否成立. 我们首先注意到 $V^T = V^{-1}$, 因此我们只需要验证 $AV = US$. 而注意到

$$AV = (A v_1 \quad \cdots \quad A v_n) = (\sigma_1 u_1 \quad \cdots \quad \sigma_k u_k \quad 0 \quad \cdots \quad 0) = US,$$

因此矩阵 A 的奇异值分解即为

$$A = USV^T.$$



标准形

在关于矩阵对角化的学习中, 我们知道若 A 可对角化, 那么便存在可逆矩阵 Q 与对角矩阵 P , 使得 $A = QPQ^{-1}$. 从线性变换的角度来讲, 我们可以找出一组基底 β , 使得线性变换 T 在该基底下的矩阵形式为 $[T]_{\beta} = P$. 我们本章的目标便是找出满足条件的基底, 使得线性变换在该基底下的矩阵形式十分简便. 不难发现前面我们提到的对角化便是满足条件的一种变换. 但是当矩阵无法对角化的时候我们能否也构造出相似的结构呢?

5.1 广义特征向量

回顾矩阵对角化的知识: 矩阵对角化的充要条件为对于任何的特征值 λ_i , 其代数重数等于其几何重数. 由于 $A \in M_n(\mathbb{R})$ 的特征多项式 $C_A(x)$ 为 n 次多项式, 那么根据代数基本定理, $C_A(x)$ 存在 n 个复数根 (可能重复). 所以我们也说 A 的所有特征值的代数重数之和恒为 n . 又因为任何特征值的几何重数小于代数重数, 那么矩阵 A 不可对角化即对应了存在几何重数小于代数重数的特征值. 我们把这样的特征值称作**缺陷特征值 (Defective Eigenvalues)**.

定义

定义 5.1. 设 $A \in M_n(\mathbb{R})$, $\lambda \in \mathbb{R}$ 为一代数重数为 m 的特征值. 若 $\dim(\text{Ker}(A - \lambda I)) < m$ (即其几何重数小于其代数重数), 我们则称 λ 为一缺陷特征值. 在此情况下, 我们定义特征值 λ 的缺陷为 $d_{\lambda} := m - \dim(\text{Ker}(A - \lambda I))$.

例题

例题 5.1. 设 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$. 判断 A 是否有缺陷特征值.

解答 5.1. 不难发现, A 的特征多项式为 $C_A(x) = x^3(x+1)$. 因此 A 有两个特征值. $\lambda_1 = 0$ 的代数重数为 3; $\lambda_2 = -1$ 的代数重数为 1. 对于 $\lambda_1 = 0$ 而言,

$$\text{Ker}(A - 0I) = \text{Ker} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \text{Span} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}.$$

因此 $\dim(\text{Ker}(A - \lambda_1 I)) = 1 < 3$, 则 $\lambda_1 = 0$ 为缺陷特征值, 其缺陷为 2. 而对于 $\lambda_2 = -1$ 而言, 其代数重数为 1, 因此其几何重数只能为 1. 因此 $\lambda_2 = -1$ 不是缺陷特征值.



当我们提出缺陷特征值的定义后, 我们给出**广义特征向量 (Generalized Eigenvectors)**的定义.

定义

定义 5.2. 设 $A \in M_n(\mathbb{R})$, $\lambda \in \mathbb{R}$ 为一代数重数为 m 的特征值. 若非零向量 $u \in \mathbb{R}^n$ 和常数 $k \geq 1$ 满足 $(A - \lambda I)^k u = 0$, 且 $(A - \lambda I)^{k-1} u \neq 0$, 我们则称 u 为 A 关于 λ 的 k 阶广义特征向量, $\text{Ker}((A - \lambda I)^k)$ 为广义特征空间.

显然, 特征向量本身也为广义特征向量. 如果 $(A - \lambda I)u = 0$, 那么对任意的 $k \geq 1$, $(A - \lambda I)^k u = 0$, 即

$$\text{Ker}(A - \lambda I) \subseteq \text{Ker}((A - \lambda I)^k).$$

定义

定义 5.3. 设 $A \in M_n(\mathbb{R})$, 特征值 λ 的代数重数为 m . 若向量组 $\{v_1, \dots, v_m\}$ 满足 $(A - \lambda I)v_1 = 0$, 且 $(A - \lambda I)v_j = v_{j-1}$, $j = 2, \dots, m$. 我们则称 $\{v_1, \dots, v_m\}$ 为一条关于特征值 λ 的广义特征向量链.

由此可见, 广义特征向量不仅可以补足普通特征向量的不足, 而且可以按照链式关系排列起来. 这些链式结构将在下一节自然地导出 Jordan 块与 Jordan 标准形.

定理

定理 5.1. 设 $A \in M_n(\mathbb{R})$, $\lambda \in \mathbb{R}$ 为一代数重数为 $m \geq 1$ 的特征值. 则

$$\dim(\text{Ker}(A - \lambda I)^m) = m.$$

因此定理 5.1 告诉我们任何一个代数重数为 m 的特征值均可以找到 m 个彼此线性无关的广义特征向量. 又因为所有特征值的代数重数之和为 n , 这也就告诉我们我们可以找出一组由 A 的广义特征向量所构成的 $\mathbb{R}^n$ 的一组基底. 那么我们该如何去构建这 n 个广义特征向量呢? 对于代数重数为 m 的特征值 λ , 我们设

$$K_j = \text{Ker}(A - \lambda I)^j, \quad j = 1, \dots, m.$$

参照广义特征向量链, 我们不妨设 $v_1 \in K_1 = \text{Ker}(A - \lambda I)$, $v_j \in K_j$, 那么 $(A - \lambda I)^j v_j = 0$. 令 $v_{j-1} = (A - \lambda I)v_j$; $(A - \lambda I)^{j-1} v_{j-1} = (A - \lambda I)^j v_j = 0$, 即 $v_{j-1} \in \text{Ker}(A - \lambda I)^{j-1}$. 同时

$$(A - \lambda I)^j v_{j-1} = (A - \lambda I)(A - \lambda I)^{j-1} v_{j-1} = 0,$$

那么 $v_{j-1} \in K_j$. 由此我们知道 $K_{j-1} \subseteq K_j$. 那么我们便有

$$\{0\} \subseteq K_1 \subseteq K_2 \subseteq \dots \subseteq K_m.$$

推论

推论 5.1. 设 $A \in M_n(\mathbb{R})$, λ 为一代数重数为 $m \geq 1$ 的特征值. 若存在 $j \in \{0, 1, \dots, m-1\}$, 使得 $K_j = K_{j+1}$, 则 $K_j = K_{j+1} = \dots = K_m$.



证明. 假设 $K_j = K_{j+1}$. 由于我们已经知道 $K_{j+1} \subseteq K_{j+2}$, 因此我们只需要证明 $K_{j+2} \subseteq K_{j+1}$. 设 $u \in K_{j+2}$, 则 $(A - \lambda I)^{j+2}u = 0$, 即

$$(A - \lambda I) \cdot (A - \lambda I)^{j+1}u = 0, w = (A - \lambda I)u \in \mathbf{Ker}(A - \lambda I)^{j+1} := \mathbf{Ker}(A - \lambda I)^j.$$

因此

$$(A - \lambda I)^{j+1}u = (A - \lambda I)^j v = 0.$$

■

因此通过关系式 $K_1 \subseteq K_2 \subseteq \cdots$, 我们首先可以求出 $v_1 \in K_1$, 随后求出 $v_2 \in K_2 \setminus K_1$, $v_3 \in K_3 \setminus K_2$, 然后依次类推. 通过这样我们便可以最终得到 m 个彼此线性无关的广义特征向量.

假设 $v_i \in K_i \setminus K_{i-1}$, 那么不难发现 $(A - \lambda I)^i v_i = 0, (A - \lambda I)^{i-1} v_{i-1} \neq 0$. 不妨设 $v_{i-1} := (A - \lambda I)v_i$. 则 $(A - \lambda I)^i v_{i-1} = 0$. 即 $v_{i-1} \in K_i$, 且 $(A - \lambda I)^{i-1} v_{i-1} \neq 0$. 由于 $v_i \notin K_i$, 那么 $v_{i-1} \notin K_{i-1}$. 因此 $v_{i-1} \in K_i \setminus K_{i-1}$. 所以当我们已知 v_{i-1} 而要求解 v_i 时, 我们只需要求出所有满足 $v_{i-1} = (A - \lambda I)v_i$ 的解.

例题

例题 5.2. 在例题 5.1 中, 求出 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ 中缺陷特征值的广义特征向量.

解答 5.2. 我们已经知道 $\lambda_1 = 0$ 为缺陷特征值, 且缺陷为 2. 我们同时还知道

$$\mathbf{Ker}(A - 0I) = \mathbf{Ker} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{Span} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

那么我们将由此构建出两个广义特征向量. 设 $u_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, 根据公式第一个广义特征向量 $u_2 = (a \ b \ c \ d)^T$

满足

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$



第三个广义特征向量 $\mathbf{u}_3 = (a \ b \ c \ d)^\top$ 满足

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

那么由此一来, 我们是不是就可以构建出一组由广义特征向量构成的基底呢? 我们此时结合特征值 $\lambda_2 = -1$ 的特征向量:

$$\mathbf{Ker}(A + I) = \mathbf{Ker} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \mathbf{Span} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}.$$

所以我们便可以得到由 A 的广义特征向量构成的基底 β :

$$\beta = \left\{ \mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \mathbf{v}_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -2 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{v}_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}.$$

我们此时考虑线性变换 $T: \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^4$ 在此基底 β 下的矩阵形式 $[T]_\beta$. 根据定义我们有

$$[T]_\beta = \begin{pmatrix} [T\mathbf{v}_1]_\beta & [T\mathbf{v}_2]_\beta & [T\mathbf{v}_3]_\beta & [T\mathbf{v}_4]_\beta \end{pmatrix},$$

其中 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ 为特征值 $\lambda_1 = 0$ 对应的广义特征向量. 根据我们前面的推论,

$$(T - 0I)\mathbf{v}_1 = \mathbf{0}, \quad (T - 0I)\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_1, \quad (T - 0I)\mathbf{v}_3 = \mathbf{v}_2.$$

最后再结合特征值 $\lambda_2 = -1$, $T\mathbf{v}_4 = \lambda_2\mathbf{v}_4 = -\mathbf{v}_4$. 因此我们得到

$$[T]_\beta = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

通过下一节的学习, 同学们将对 $[T]_\beta$ 产生更加深刻的理解.

定义

定义 5.4. 设线性变换 $T: V \rightarrow V$. 若存在 $m \geq 1$ 使得对任意的 $\mathbf{v} \in V$, $T^m\mathbf{v} = \mathbf{0}$, 那么我们称 T 为**幂零变换 (Nilpotent)**. 与其对应的矩阵被称为幂零矩阵. 满足条件的最小正整数 m 被称作是 T (或 A) 的**幂零指数**.

幂零变换的一个基本性质是, 它自然地产生线性无关的向量链。



推论

推论 5.2. 设线性变换 $T: V \rightarrow V, \dim(V) = n$, 且存在 $v \in V$ 与正整数 m 使得 $T^m v = 0, T^{m-1} v \neq 0$ (即 T 为指数为 m 的幂零变换), 则向量组 $\{v, Tv, T^2v, \dots, T^{m-1}v\}$ 线性无关.

证明. 设存在 $c_1, \dots, c_n \in \mathbb{R}$, 使得

$$c_1 v + c_2 Tv + \dots + c_m T^{m-1} v = 0.$$

对等式两边同时作用线性变换 T^{m-1} , 结合 $T^m v = 0, \forall n \geq m$ 和线性变换的性质, 我们得到

$$c_1 T^{m-1} v = 0,$$

即 $c_1 = 0$. 重复这个过程, 对等式两边同时作用 $T^{m-2}, T^{m-3}, \dots$, 不难得到 $c_1 = \dots = c_m = 0$. ■

现在我们将这一结论应用到广义特征向量. 设 λ 为矩阵 A 的代数重数为 m 的特征值, 并令 $N = A - \lambda I$. 若 u 是关于 λ 的 m 阶广义特征向量, 即 $(A - \lambda I)^m u = 0, (A - \lambda I)^{m-1} u \neq 0$, 则由前面的命题可知, $\{u, Nu, N^2u, \dots, N^{m-1}u\}$ 线性无关. 若将上面的向量的顺序反过来, 记

$$v_1 = N^{m-1}u, v_2 = N^{m-2}u, \dots, v_m = u,$$

我们则有 $Nv_1 = 0$, 并且 $Nv_j = v_{j-1}, j = 2, \dots, m$. 由此一来, 我们便可以得到一条广义特征向量链. 即

$$(A - \lambda I)v_j = v_{j-1}, j = 2, \dots, m.$$

因此, 广义特征向量并不是孤立出现的, 而是可以排列成链:

$$v_m \mapsto v_{m-1} \mapsto \dots \mapsto v_2 \mapsto v_1 \mapsto 0,$$

而这种链式结构正是下一节 Jordan 块的来源.

5.1 练习

1. 设 $A = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$. 判断 A 是否存在缺陷特征值. 如果存在, 求出 $\mathbb{R}^3$ 的一组由 A 的缺陷特征值构成的基底 β , 并求 $[T]_\beta$.

2. 设 $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$. 判断 A 是否存在缺陷特征值. 如果存在, 求出 $\mathbb{R}^4$ 的一组由 A 的缺陷特征值



构成的基底 β , 并求 $[T]_\beta$.

3. 设矩阵 $A \in M_n(\mathbb{R})$, 为幂零矩阵, 证明 A 的特征多项式为 $C_A(x) = (-1)^n x^n$, 即幂零变换的特征值恒为 0.

5.2 Jordan 标准形

回顾我们上一章里面提到的 Schur 定理, 我们可以把一个矩阵分解成 $A = QPQ^*$ 的形式. 其中 P 为主对角线是 A 的特征值的上三角矩阵, Q 为正交矩阵 (或酉矩阵). Schur 分解的优点是其保留了基底的正交性, 但得到的上三角矩阵一般不是最简单的形式. 在本节中, 我们放弃基底的正交性, 只要求基变换矩阵可逆. 这样一来我们希望通过选取一组特定的基底, 使得上三角矩阵的形式更为简单. 通过这种变换得到的上三角矩阵即被称为 **Jordan 标准形 (Jordan Canonical Form)**.

定理

定理 5.2. 设线性变换 $T: V \rightarrow V, \dim(V) = n$ 有 k 个不同的特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_k \in \mathbb{R}$, 记 λ_i 的代数重数为 m_i . 那么存在 V 的一组基底 β , 使得 $[T]_\beta = \text{diag}(U_1 \cdots U_k)$, 其中 $U_i \in M_{m_i}(\mathbb{R})$ 为上三角矩阵, 主对角线上的元素为 λ_i . 也就是说, 若矩阵 $A \in M_n(\mathbb{R})$ 有 k 个不同的实数特征值, 那么存在可逆矩阵 Q 与上三角矩阵 P , 使得 $A = QPQ^{-1}$.

该定理的证明与 Schur 定理的证明十分类似:

证明. 我们将采用数学归纳法. 当 $A \in M_1(\mathbb{R})$ 时原式显然成立. 假设定理对所有的 $A \in M_{n-1}(\mathbb{R})$ 成立, 我们只需要证明该定理对 $A \in M_n(\mathbb{R})$ 成立即可. 设 λ_1 为 A 的一个特征值, v_1 为其特征向量. 那么我们构造出一组 $\mathbb{R}^n$ 的基底 $\beta_0 := \{v_1, w_1, \dots, w_{n-1}\}$. 记 $[T]_{\beta_0}$ 为线性变换在基底 β_0 下的矩阵形式, 不难发现

$$[T]_{\beta_0} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & X \\ \mathbf{0} & A_1 \end{pmatrix}, \quad A_1 \in M_{n-1}(\mathbb{R}).$$

由于 $A, [T]_{\beta_0}$ 相似, 因此二者的特征多项式相同. 那么

$$C_A(x) = (x - \lambda_1) \cdot C_{A_1}(x), \quad C_{A_1}(x) = (x - \lambda_1)^{m_1-1} (x - \lambda_2)^{m_2} \cdots (x - \lambda_k)^{m_k}.$$

根据数学归纳法的假设, 存在可逆矩阵 Q 与上三角矩阵 P , 使得

$$QPQ^{-1} = A_1,$$

其中记 $P = \text{diag}(Z_1 \ U_2 \ \cdots \ U_k)$, $Z_1 \in M_{m_1-1}(\mathbb{R}), U_i \in M_{m_i}(\mathbb{R})$ 为上三角矩阵, 主对角线上的元素均为 λ_1, λ_i . 记 $S = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & Q \end{pmatrix}$, 那么

$$A' := S^{-1}[T]_{\beta_0}S = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & Q^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & X \\ \mathbf{0} & A_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}^\top \\ \mathbf{0} & Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & XQ \\ \mathbf{0} & Q^{-1}A_1Q \end{pmatrix},$$

即 $A', [T]_{\beta_0}, A$ 三者两两相似.



我们在本节学习的 Jordan 标准形便是矩阵三角化的一种体现. 定理 5.2 只说明我们可以得到上三角矩阵, 但它并没有说明主对角线以上的元素应该具有什么结构. Jordan 标准形的目标就是进一步将这些上三角块整理成若干个标准的 Jordan 块. 我们再次给出 Jordan 块的定义:

定义

定义 5.5. 若 $n \geq 1$, 定义 Jordan 块 $J_n(\lambda)$ 为主对角线为 λ , 主对角线上一个位置为 1, 其余位置全部为 0 的矩阵. 即

$$J_1(\lambda) = (\lambda), \quad J_2(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad J_3(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad J_4(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix}, \quad \dots$$

值得注意的是 Jordan 块的形式并不是任意规定的. 它来自上一节中我们所定义的广义特征向量链. 我们还假设 $A \in M_n(\mathbb{R})$, λ 为代数重数为 m 的特征值. 若向量组 $v_1, v_2, \dots, v_m$ 满足 $(A - \lambda I)v_1 = 0$, 以及 $(A - \lambda I)v_j = v_{j-1}$, $j = 2, \dots, m$, 则有

$$Av_1 = \lambda v_1, \quad Av_j = \lambda v_j + v_{j-1}, \quad j = 2, \dots, m.$$

因此在基底 $\beta = \{v_1, v_2, \dots, v_m\}$ 下 A 的矩阵形式正是一个 Jordan 块:

$$J_m(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda \end{pmatrix}.$$

接下来, 我们不禁要问: 定理 5.2 中的上三角矩阵 P 能否写成 Jordan 块的形式呢? 我们首先注意到

$$J_m(\lambda) = \lambda I_m + J_m(0).$$

而 $J_m(0)$ 便是一个特征值为零的 Jordan 块. 我们知道幂零变换的所有特征值为零 (见 5.1 练习 3), 因此研究幂零变换对理解 Jordan 块将至关重要.

定理

定理 5.3. 设线性变换 $T: V \rightarrow V$, $\dim(V) = n$, 且 T 为幂零变换. 那么存在 V 的一组基底 β ,

$$[T]_\beta = \text{diag} \left(J_{r_1}(0) \quad J_{r_2}(0) \quad \cdots \quad J_{r_s}(0) \right), \quad r_1 + \cdots + r_s = n.$$

换言之, 任何幂零变换都可以在某基底下表示成若干个零特征值 Jordan 块的直和.

我将不作过于技术化的证明. 下面我给出一个大致思路:



证明. 设 T 的幂零指数为 m , 即 $T^m = 0, T^{m-1} \neq 0$, 因此根据上一节的推论, 我们可以得到一系列递增的子空间:

$$\{0\} \subseteq \mathbf{Ker} T \subseteq \mathbf{Ker} T^2 \subseteq \cdots \subseteq \mathbf{Ker} T^m = V.$$

我们的目标是在 V 中选出若干条广义特征向量链 $v_r \mapsto v_{r-1} \mapsto \cdots \mapsto v_1 \mapsto 0$, 使得在每一条链中 $Tv_1 = 0, Tv_j = v_{j-1}, j = 2, \dots, r$. 这样一来每一条这样的链都对应一个 Jordan 块 $J_r(0)$. 首先, 我们从 $\mathbf{Ker} T^m$ 开始. 选取若干个向量使得它们构成 $\mathbf{Ker} T^m \setminus \mathbf{Ker} T^{m-1}$ 的一组基底. 对于每个这样的向量 v , 由于 $T^m v = 0, T^{m-1} v \neq 0$, 由上一节的结论可知 $\{v, Tv, \dots, T^{m-1}v\}$ 线性无关. 因此这些向量一起构成了一条长度为 m 的广义特征向量链.

随后我们在 $\mathbf{Ker} T^{m-1} \setminus \mathbf{Ker} T^{m-2}$ 中选取新的向量, 并对每个新向量重复同样的过程. 这样一来我们得到长度为 $m-1$ 的广义特征向量链. 我们随后重复这个步骤, 依次在 $\mathbf{Ker} T^j \setminus \mathbf{Ker} T^{j-1}, j = m, m-1, \dots, 1$ 中选取尚未被前面链覆盖的向量, 并生成相应的链. 这样以来, 我们得到的所有链中的向量线性无关, 并且它们的个数恰好为 n , 因此这些向量构成 V 的一组基底.

在每一条链 $v_1, \dots, v_r$ 中, 由于我们有 $Tv_1 = 0, Tv_j = v_{j-1}$, 所以在这条链对应的基底下 T 的矩阵形式即为 $J_r(0)$.

$$J_r(0) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

我们如果把把所有链合并起来便可以得到

$$[T]_\beta = \text{diag} \left(J_{r_1}(0) \quad J_{r_2}(0) \quad \cdots \quad J_{r_s}(0) \right).$$

■

我们可以将递增的核空间链

$$\{0\} \subseteq \mathbf{Ker} T \subseteq \mathbf{Ker} T^2 \subseteq \cdots \subseteq \mathbf{Ker} T^m = V$$

理解为一层一层像洋葱一样的结构. 在构造 Jordan 链时, 我们并不是在每个 $\mathbf{Ker} T^j$ 中重新选取一组完整基底, 而是只在新增的部分中选取代表元. 换言之, 我们只选择 $\mathbf{Ker} T^j$ 中相对于 $\mathbf{Ker} T^{j-1}$ 新出现的“方向”(线性无关的向量). 每当我们在某一层选出一个向量 v 时, 它会通过 $v, Tv, T^2v, \dots$ 向较低层生成一整条链. 因此, 在较低层继续选取向量时, 我们需要避开已经由较长链生成出的方向. 通过这种方式可以确保最终得到的所有链中的向量彼此线性无关, 并且总数恰好等于 $\dim(V) = n$.

因此由定理 5.3 可知, 幂零变换可以分解为若干个关于特征值 0 的 Jordan 块. 接下来我们将说明一般的线性变换也可以在其广义特征空间上转化为幂零变换. 设 λ 是 T 的特征值, 其代数重数为 m , 其对应的广义特征空间我们记作 $\mathcal{G}_\lambda$, 满足 $\mathcal{G}_\lambda = \mathbf{Ker}(A - \lambda I)^m$, 根据上一节的推论, $\dim(\mathcal{G}_\lambda) = m$, 且在 $\mathcal{G}_\lambda$ 上, 线性变换

$$N_\lambda := (T - \lambda I) \Big|_{\mathcal{G}_\lambda}$$



为幂零变换 (N_λ 表示将线性变换 $T - \lambda I$) 限制在 $\mathcal{G}_\lambda$ 上). 这是因为对于任意的 $v \in \mathcal{G}_\lambda, (A - \lambda I)^m v = 0$, 因此 $N_\lambda^m v = (T - \lambda I)^m v = 0$. 因此定理 5.3 同样适用于 $N_\lambda = (T - \lambda I)$. 这样一来我们便会得到形如 $\text{diag}(J_{r_1}(\lambda) \cdots J_{r_s}(\lambda))$.

定理

定理 5.4 (Jordan 标准形 (实数域情形)). 设线性变换 $T: V \rightarrow V, \dim(V) = n$ 的特征多项式在 $\mathbb{R}$ 中可完全分解. 若 T 存在 k 个不同的特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_k \in \mathbb{R}$, 那么存在 V 的一组基底 β , 使得

$$[T]_\beta = \text{diag}(U_1 \cdots U_k),$$

其中 $U_i = \text{diag}(J_{r_{i1}}(\lambda_i) \cdots J_{r_{is_i}}(\lambda_i))$.

回顾本章的例题 5.1, 5.2, 矩阵 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$. 我们求出其广义特征向量构成的基底为

$$\beta = \left\{ v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, v_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -2 \\ 0 \end{pmatrix}, v_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\},$$

且

$$[T]_\beta = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_3(0) & 0 \\ 0 & J_1(-1) \end{pmatrix}.$$

那么我们就知道

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & -2 \\ 1 & 0 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & -2 \\ 1 & 0 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}^{-1}.$$



5.2 练习

1. 设向量 $v_1, v_2, v_3 \in \mathbb{R}^3$ 满足

$$(A - \lambda I)v_1 = 0, \quad (A - \lambda I)v_2 = v_1, \quad (A - \lambda I)v_3 = v_2.$$

证明: 在基底 $\beta := \{v_1, v_2, v_3\}$ 下满足

$$[T]_{\beta} = J_3(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda & 1 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix}.$$

2. 设矩阵 $J_2(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$.

(i) 证明: $J_2(\lambda)$ 不可对角化;

(ii) 证明: $J_2^n(\lambda) = \begin{pmatrix} \lambda^n & n\lambda^{n-1} \\ 0 & \lambda^n \end{pmatrix}$.

(iii) 设 $f(\lambda) = \lambda^n$, 我们发现

$$J_2^n(\lambda) = \begin{pmatrix} f(\lambda) & f'(\lambda) \\ 0 & f(\lambda) \end{pmatrix}.$$

证明

$$(J_n(\lambda))^k = \begin{bmatrix} f(\lambda) & f'(\lambda) & \frac{f''(\lambda)}{2} & \cdots & \frac{f^{(k-1)}(\lambda)}{(k-1)!} \\ 0 & f(\lambda) & f'(\lambda) & \cdots & \frac{f^{(k-2)}(\lambda)}{(k-2)!} \\ 0 & 0 & f(\lambda) & \cdots & \frac{f^{(k-3)}(\lambda)}{(k-3)!} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & f_n(\lambda) \end{bmatrix}.$$



线性代数与微分方程

从本章开始我们将着重讨论线性代数在不同领域的应用. 在本章里我们将学会如何运用线性代数的知识去解决微分方程组的解集和稳定性问题.

6.1 常微分方程的基本理论

微分方程可以看作是由一个未知的函数 f 与其导数所构成的方程. 微分方程可以主要分成两大类: **常微分方程 (Ordinary Differential Equations (ODEs))** 和 **偏微分方程 (Partial Differential Equations (PDEs))**. 在常微分方程中未知函数为一元函数 $y(t)$; 而在偏微分方程中未知函数 y 为一个多元函数 $y(t, x_1, \dots, x_n)$. 我们将重点讨论常微分方程(组). 下面是几个微分方程的例子:

- $u_t(t, x) = ku_{xx}(t, x)$, 该方程为偏微分方程;
- $y'(t) = y(t)$, 该方程为一阶常微分方程 (最高次导数次数为 1);
- $y''(t) + 3y'(t) + 4y(t) = 0$, 该方程为二阶常微分方程.

对于上面出现的 $y''(t) + 3y'(t) + 4y(t) = 0$, 如果我们假设 $y_1(t) = y(t), y_2(t) = y'(t)$, 那么原式便可以写作

$$\begin{pmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_2(t) \\ -4y_1(t) - 3y_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -4 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{pmatrix}.$$

我们发现了什么? 是不是我们可以把一个常微分方程也写作是一个线性方程组呢? 这样一来我们便有

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t),$$

然后我们便可以尝试运用线性代数的知识进行求解了. 有了方程以后, 我们所关心的自然便是方程的解. 对于常微分方程而言, 我们希望原方程可以得到一个唯一解. 但值得注意的是并不是所有的方程都可以得到唯一解, 比如在 $y'(t) = y^{1/3}(t); y(0) = 0$ 这个方程里面, $y_1(t) = 0$ 以及 $y_2(t) = \frac{2}{3}t^{3/2}$ 均为满足条件的原方程的解. 我们该如何去避免这种情况? 为此我们先引出一条定义.

定义

定义 6.1. 设函数 $f: D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $\|\cdot\|$ 是定义在 $\mathbb{R}$ 上的任何模. 若对任意的 $x, y \in D$, 存在 $L > 0$ 使得

$$\|f(x) - f(y)\| \leq L\|x - y\|,$$

我们则称 f 在 D 上 *Lipschitz* 连续, 满足条件的最小值 L 为 *Lipschitz* 常数.

我们来做一些练习:



例题

例题 6.1. 判断下列函数是否在 D 上 Lipschitz 连续:

① $f(t) = 3t + 5, D = \mathbb{R}$;

② $f(t) = \frac{1}{t}, D = (0, \infty)$.

解答 6.1. $\forall x, y \in D$, 取模为绝对值, 那么

对于①而言, $|f(x) - f(y)| = |3x + 5 - 3y - 5| = |3x - 3y| = 3|x - y|$. 不难发现 f 为 Lipschitz 连续, 且 Lipschitz 常数为 3;

对于②而言, 我们发现当 $x, y \rightarrow 0$ 时函数的斜率及函数值趋近于正无穷. 在此情况下 L 不存在. 但是如果取任意的 $\delta > 0$, 函数 $f(t) = \frac{1}{t}$ 在 (δ, ∞) 上便为 Lipschitz 连续. 这是因为根据 Lagrange 中值定理, 对任意的 $x, y \in (\delta, \infty), x < y$, 存在 $z \in (x, y)$ 使得

$$f(y) - f(x) = f'(z) \cdot (y - x) = -\frac{1}{(z)^2} \cdot (y - x) \leq \sup \left| -\frac{1}{(z)^2} \right| \cdot (y - x) := \frac{1}{\delta^2} \cdot (y - x),$$

其中 $L = \frac{1}{\delta^2}$ 即为 Lipschitz 常数.

我们由此对 Lipschitz 连续的概念进行扩充:

定义

定义 6.2. 设函数 $f: D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $\|\cdot\|$ 是定义在 $\mathbb{R}$ 上的任何模. 若对任意的 $x, y \in D$, D 的紧致子集 $K \subseteq D$, 存在 $L(K) > 0$ 使得

$$\|f(x) - f(y)\| \leq L\|x - y\|,$$

我们则称 f 在 D 上局部 Lipschitz 连续, 记作 $f \in \text{LLC}(D)$.

由于我是在讲线性代数而不是数学分析, 我们将不多做紧致集的解释. 不过很好的一点是根据 Heine-Borel 定理, $D \subseteq \mathbb{R}^n$ 为紧致集的充要条件是 D 闭合且有界. 我们可以视作 D 即为闭区间 (形如 $[a, \infty); (-\infty, a]$ 也为闭区间).

在常微分方程里面, 我们设 $y(t)$ 为关于 t 的一个一元函数, $y'(t)$ 为 $y(t)$ 关于 t 的导数, 那么我们可以将该微分方程写成如下的形式:

$$y'(t) = f(y(t), t).$$

对于高阶的常微分方程而言, 我们可以通过本节最开始所作的变换, 将高阶常微分方程写成是若干个形如上式的一阶常微分方程组:

$$y'(t) = f(y(t), t) = \left(y_1'(t) = f_1(y_1(t), t), \dots, y_n'(t) = f_n(y_n(t), t) \right).$$

对于多元函数 $f(x, t)$ 而言, 我们同样可以给出局部 Lipschitz 连续的定义:



定义

定义 6.3. 设函数 $f: D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $\|\cdot\|$ 是定义在 $\mathbb{R}^n$ 上的任何模. 若对任意的 $x, y \in D$, D 的紧致子集 $K \subseteq D$, 存在 $L(K) > 0$ 使得

$$\|f(x) - f(y)\| \leq L\|x - y\|,$$

我们则称 f 在 D 上局部 *Lipschitz* 连续, 记作 $f \in LLC(D)$.

最后, 我们再强调一下微分方程的初始条件. 回顾不定积分的知识, 我们知道在不定积分的最后会有一个常数项 $+C$: 这是因为常函数的导数是零. 与不定积分类似, 微分方程通常会有一族解. 为了从这一族解中确定唯一的一条解曲线, 我们需要给定初始条件, 例如 $y(t_0) = y_0$. 随后我们就可以提出本章的理论基础了: 微分方程的**存在唯一性定理 (Existence and Uniqueness Theorem)**.

定理

定理 6.1. 设 $D \subseteq \mathbb{R}^n, I = (a, b) \subseteq \mathbb{R}$ 为开子集, 函数 $f: D \times (a, b) \rightarrow \mathbb{R}^n$ 在 $D \times (a, b)$ 上局部 *Lipschitz* 连续. 那么存在 $J \subseteq I \subseteq \mathbb{R}, t_0 \in J$, 使得方程

$$\begin{cases} y'(t) &= f(y(t), t) \\ y(t_0) &= y_0 \end{cases}$$

在 J 上有唯一解.

接下来, 我们将逐步证明这一定理.

推论

推论 6.1. 函数 $y(t)$ 为方程 $\begin{cases} y'(t) &= f(y(t), t) \\ y(t_0) &= y_0 \end{cases}$ 的解当且仅当

$$y(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(y(s), s) ds.$$

证明. ($\Rightarrow$): 假设 $y(t)$ 为原方程的解, 那么

$$\int_{t_0}^t y'(t) dt = \int_{t_0}^t f(y(s), s) ds,$$

即 $y(t) - y(t_0) = y(t) - y_0$.

($\Leftarrow$) 假设 $y(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(y(s), s) ds$ 成立, 那么

$$y(t_0) = y_0 + \int_{t_0}^{t_0} f(y(s), s) ds = y_0$$



由此可知 $y(t_0) = y_0$. 与此同时

$$y'(t) = \frac{d}{dt}y_0 + \frac{d}{dt} \int_{t_0}^t f(y(s), s) ds = 0 + f(y(t), t).$$

■

有了这一条推论, 我们只需要证明

$$y(t_0) = y_0 + \int_{t_0}^t f(y(s), s) ds$$

存在唯一解. 我们将其分成两个证明: 即存在性的证明和唯一性的证明. 由于我们知道 $D \times (a, b)$ 为开子集, 因此存在 $\alpha > 0, \delta > 0$, 使得

$$D_{\alpha, \delta} := \{(y, t) \in \mathbb{R}^{n+1}, \|y - y_0\| \leq \alpha, |t - t_0| < \delta\} \subseteq D \times (a, b).$$

推论

推论 6.2 (Picard 算子). 令

$$\varepsilon := \min \left(\delta, \frac{\alpha}{M_{\alpha, \delta}} \right), \quad \text{其中 } M_{\alpha, \delta} = \sup_{(y, t) \in D_{\alpha, \delta}} \|f(y, t)\|.$$

那么 $\varepsilon \leq \delta, D_{\alpha, \varepsilon} \subseteq D_{\alpha, \delta}$. 令 $J = (t_0 - \varepsilon, t_0 + \varepsilon)$, 那么对于所有满足 $y(t_0) = y_0$ 和 $(y(t), t) \in D_{\alpha, \varepsilon}, \forall t \in J$ 的函数 $y(t)$, 变换

$$T(y)(t) \equiv y_0 + \int_{t_0}^t f(y(s), s) ds$$

被称作 $y(t)$ 的 *Picard* 算子, 且

$$(1) \quad T(y_0)(t_0) = y_0;$$

$$(2) \quad (T(y)(t), t) \in D_{\alpha, \varepsilon}, \forall t \in J.$$

证明. 对于第一条性质 $T(y)(t_0) = y_0$, 由定义显然

$$T(y)(t_0) = y_0 + \int_{t_0}^{t_0} f(y(s), s) dx = y_0.$$

随后我们只需要证明

$$\|T(y)(t) - y_0\| \leq \alpha, |t - t_0| \leq \delta.$$



不难发现后面一条显然成立. 最后注意到

$$\begin{aligned}
 \|T(y)(t) - y_0\| &= \left\| y_0 + \int_{t_0}^t f(y(s), s) ds - y_0 \right\| \\
 &= \left\| \int_{t_0}^t f(y(s), s) ds \right\| \\
 &\leq \left| \int_{t_0}^t \|f(y(s), s)\| ds \right| \\
 &\leq M_{\alpha, \delta} \cdot \left| \int_{t_0}^t ds \right| \\
 &\leq M_{\alpha, \delta} \cdot \varepsilon \\
 &\leq \alpha.
 \end{aligned}$$

■

同学们可以在下图中直观地感受到我们所定义的这些抽象概念:

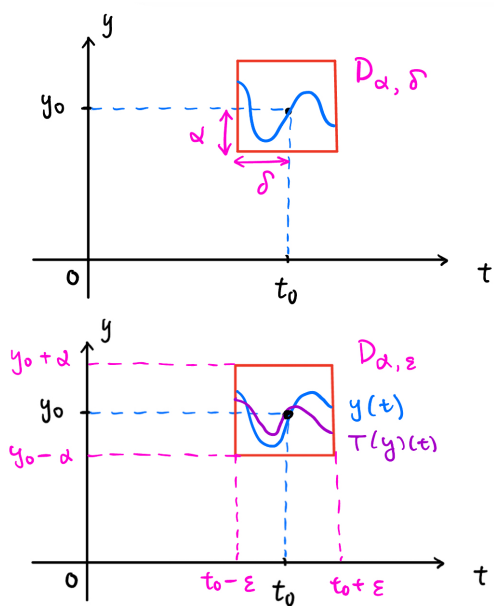


图 4: Picard 算子

存在性定理的证明将依赖于 Picard 算子. 我们定义函数列 $\{y_k(t)\}_{k=1}^{\infty}$, 使得

$$y_k(t) := T(y_{k-1})(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(y_{k-1}(s), s) ds, \quad \forall k \geq 1.$$



推论

推论 6.3. 当 $t \in J := (t_0 - \varepsilon, t_0 + \varepsilon)$ 时, 函数列 $\{y_k(t)\}_{k=1}^\infty$ 为柯西列 (Cauchy Sequence). 即对任意的 $\eta > 0$, 存在正整数 N , 使得对任意的 $m, n \geq N$, 有 $\|y_m(t) - y_n(t)\| < \eta$. 特别地,

$$y(t) := \lim_{k \rightarrow \infty} y_k(t)$$

存在且为方程 $\begin{cases} y'(t) = f(y(t), t) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$ 的解.

证明. 注意到

$$\begin{aligned} \|y_1(t) - y_0(t)\| &= \left\| y_0 + \int_{t_0}^t f(y_0(s), s) ds - y_0 \right\| \\ &= \left\| \int_{t_0}^t f(y_0(s), s) ds \right\| \end{aligned}$$

不失一般性地讲, 假设 $t \in [0, t_0 + \varepsilon)$, 那么

$$\begin{aligned} &\leq \int_{t_0}^t \|f(y_0(s), s)\| ds \\ &\leq M_{\alpha, \delta}(t - t_0). \end{aligned}$$

我们提出一条性质:

$$\|y_m(t) - y_{m-1}(t)\| \leq M_{\alpha, \delta} \cdot L^{m-1} \frac{(t - t_0)^m}{m!}.$$

我们将采用数学归纳法证明该性质. 假设其对所有的 $N \leq m$ 成立, 那么我们只需要证明其对 $N = m + 1$ 成立即可. 我们有

$$\begin{aligned} \|y_{m+1}(t) - y_m(t)\| &= \left\| y_0 + \int_{t_0}^t f(y_m(s), s) ds - y_0 - \int_{t_0}^t f(y_{m-1}(s), s) ds \right\| \\ &\leq \int_{t_0}^t \|f(y_m(s), s) - f(y_{m-1}(s), s)\| ds \\ &\quad (\text{由于函数 } f \text{ 为局部 Lipschitz 连续}) \leq \int_{t_0}^t L \|y_m(s) - y_{m-1}(s)\| ds \\ &\quad (\text{数学归纳法假设}) \leq \int_{t_0}^t L \cdot M_{\alpha, \delta} \cdot L^{m-1} \frac{(s - t_0)^m}{m!} ds \\ &= \frac{L^m \cdot M_{\alpha, \delta}}{(m+1)!} (t - t_0)^{m+1}, \end{aligned}$$

由此该性质得证. 那么 $\forall l > 1$, 我们有

$$\begin{aligned} \|y_l(t) - y_{l-1}(t)\| &\leq M_{\alpha, \delta} \cdot L^{m-1} \frac{(t - t_0)^l}{l!} \\ &\leq \frac{M_{\alpha, \delta}}{L} \frac{(L\varepsilon)^l}{l!}. \end{aligned}$$



令 $p, m \geq 1$, 记

$$\|y_{m+p}(t) - y_{m+1}(t)\| = \|y_{m+p}(t) - y_{m+p-1}(t) + y_{m+p-1}(t) + \cdots + y_{m+2}(t) - y_{m+1}(t)\|,$$

那么

$$\begin{aligned} \text{等式左边} &\leq \sum_{k=1}^{p-1} \|y_{m+k+1}(t) - y_{m+k}(t)\| \\ &\leq \sum_{k=1}^{p-1} \frac{M_{\alpha,\delta}}{L} \cdot \frac{(L\varepsilon)^{m+k+1}}{(m+k+1)!} \\ &= \frac{M_{\alpha,\delta}}{L} \sum_{j=m+2}^{p+m} \frac{(L\varepsilon)^j}{j!} \xrightarrow{m,p \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

因此 $\{y_k(t)\}$ 为柯西列. 由于 $\mathbb{R}^n$ 为完备空间, 即所有 $\mathbb{R}^n$ 中的柯西列收敛, 那么 $\lim_{k \rightarrow \infty} y_k(t)$ 存在. 于是我们令 $y(t) = \lim_{k \rightarrow \infty} y_k(t)$, 我们只需要证明 $y(t)$ 为 $\begin{cases} y'(t) = f(y(t), t) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$ 的解即可. 不妨令 $p \rightarrow \infty$, 我们知道

$$\sup_{t \in J} \|y_{m+p}(t) - y_{m+1}(t)\| \xrightarrow{p \rightarrow \infty} \|y(t) - y_{m+1}(t)\| \leq \frac{M_{\alpha,\delta}}{L} \sum_{j=m+2}^{\infty} \frac{(L\varepsilon)^j}{j!} \xrightarrow{m \rightarrow \infty} 0.$$

由此我们知道 $y_k(t)$ 一致收敛于 $y(t)$, 由于 $y_k(t)$ 连续, 那么 $y(t)$ 连续. 则

$$\lim_{k \rightarrow \infty} y_k(t) = \lim_{k \rightarrow \infty} y_0 + \int_{t_0}^t f(y_{k-1}(s), s) ds,$$

再结合一致收敛的性质, 我们有

$$y(t) = y_0 + \int_{t_0}^t f(y(s), s) ds.$$

因此存在性定理得证. ■

我们最后给出唯一性定理的证明:

证明. 假设 $y(t), z(t)$ 均为 $y(t)$ 为 $\begin{cases} y'(t) = f(y(t), t) \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$ 的解. 不失一般性地讲, 假设 $t \in (t_0, t_0 + \varepsilon)$. 那么我们知道

$$\begin{aligned} \|y(t) - z(t)\| &\leq \int_{t_0}^t \|f(y(s), s) - f(z(s), s)\| ds \\ &\leq L \int_{t_0}^t \|y(s) - z(s)\| ds. \end{aligned}$$

令

$$g(t) \equiv \int_{t_0}^t \|y(s) - z(s)\| ds,$$

不难发现 $g(t) \geq 0, g'(t) \leq Lg(t)$. 我们将等式两边同时乘以一个系数 $e^{-L(t-t_0)}$, 则

$$\text{等式左边} = \frac{d}{dt} \left(e^{-L(t-t_0)} g(t) \right) = e^{-L(t-t_0)} (g'(t) - Lg(t)) \leq 0.$$



由于 $t \mapsto e^{-L(t-t_0)}$ 在区间 $(t_0, t_0 + \varepsilon)$ 上单调递减, 因此

$$0 \leq e^{-L(t-t_0)} g'(t) \leq g(t_0) = 0.$$

结合 $g \geq 0$, 我们便有 $g \equiv 0$, 即 $g'(t) = \|y(t) - z(t)\| = 0$. 因此 $y(t) \equiv z(t)$. 由此唯一性定理得证. ■

例题

例题 6.2. 设

$$\begin{cases} y'(t) = y + 1 \\ y(0) = 1 \end{cases}.$$

解答 6.2. 不难发现, 函数 $f(y(t), t) = y + 1$ 在 $\mathbb{R} \times (-\infty, \infty)$ 上为局部 *Lipschitz* 连续, 因此存在唯一性定理适用于此. 随后令

$$\varepsilon = \min \left\{ \delta, \frac{\alpha}{M_{\alpha, \delta}} \right\}, D_{\alpha, \delta} = \{(y(t), t) : \|y - 1\| \leq \alpha, \|t - 0\| \leq \delta\} = [1 - \alpha, 1 + \alpha] \times [-\delta, \delta].$$

结合 f 的定义域, 我们知道 $\alpha, \delta \in \mathbb{R}$, 由此可知

$$M = \sup_{(y, t) \in D_{\alpha, \delta}} \|f(y, t)\| = 2 + \alpha,$$

那么

$$\varepsilon = \min \left\{ \delta, \frac{\alpha}{2 + \alpha} \right\}.$$

若我们取 $\delta = 1, \alpha = 7$, 则我们得到

$$J = \left(-\frac{7}{9}, \frac{7}{9} \right).$$

因此根据存在唯一性定理, 存在定义在 J 上的函数 $y(t)$ 使得 $y'(t) = y + 1, y(0) = 1$.

不难发现, 在上面的例子中 J 与 α, δ 的取值有关. 我们由此定义 $J_{\max} = \sup_{\alpha, \delta} J_{\alpha, \delta}$.

例题

例题 6.3. 设

$$y'(t) = y^2 + \frac{1}{t}, \quad y(1) = 1, t > 0$$

根据存在唯一性定理, 求 $J_{\max}$.

解答 6.3. 不难发现 $f(y, t) = y^2 + \frac{1}{t}$ 在 $\mathbb{R} \times (0, \infty)$ 上为局部 *Lipschitz* 连续, 因此存在唯一性定理适用. 令

$$D_{\alpha, \delta} = \{(y, t) \mid |y - 1| \leq \alpha, |t - 1| \leq \delta\} = [1 - \alpha, 1 + \alpha] \times [1 - \delta, 1 + \delta],$$



其中 $1 - \delta > 0$. 则 $\delta \in [0, 1)$. 那么我们有

$$\mathcal{M} = \sup_{(y,t) \in \mathcal{D}_{\alpha,\delta}} |f(y,t)| = \sup_{(y,t) \in \mathcal{D}_{\alpha,\delta}} \left| y^2 + \frac{1}{t} \right| = (1 + \alpha)^2 + \frac{1}{1 - \delta}.$$

定义

$$\varepsilon = \min \left\{ \delta, \frac{\alpha}{\mathcal{M}} \right\} = \min \left\{ \delta, \frac{\alpha}{(1 + \alpha)^2 + \frac{1}{1 - \delta}} \right\},$$

令

$$f(\alpha) = \frac{\alpha}{(1 + \alpha)^2 + \frac{1}{1 - \delta}} \quad \delta \text{ 为常数, 且 } g(\delta) = \delta.$$

不难发现

$$f'(\alpha) = \frac{-2\alpha^2 + 1 + \frac{1}{1 - \delta}}{\left((1 + \alpha)^2 + \frac{1}{1 - \delta} \right)^2},$$

因此 $f(\alpha)$ 在区间 $\left(0, \sqrt{1 + \frac{1}{1 - \delta}} \right)$ 上单调递增, 则

$$\begin{aligned} f(\alpha)_{\max} &= f\left(\sqrt{1 + \frac{1}{1 - \delta}}\right) = \frac{\sqrt{1 + \frac{1}{1 - \delta}}}{\left(1 + \sqrt{1 + \frac{1}{1 - \delta}}\right)^2 + \frac{1}{1 - \delta}} \\ &= \frac{\sqrt{1 + \frac{1}{1 - \delta}}}{1 + 1 + \frac{1}{1 - \delta} + 2\sqrt{1 + \frac{1}{1 - \delta}} + \frac{1}{1 - \delta}} \\ &= \frac{\sqrt{1 + \frac{1}{1 - \delta}}}{2\sqrt{1 + \frac{1}{1 - \delta}} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{1}{1 - \delta}}\right)}. \end{aligned}$$

那么我们便有

$$f(\alpha)_{\max} = \frac{1}{2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{1}{1 - \delta}}\right)}.$$

则 $\min\{f(\alpha)_{\max}, \delta\}$ 取得最小值当且仅当 $f(\alpha)_{\max} = \delta$. 因此我们只需求解

$$\frac{1}{2 \left(1 + \sqrt{1 + \frac{1}{1 - \delta}}\right)} = \delta,$$

由此不难解出

$$\varepsilon = \delta = f(\alpha)_{\max} = \frac{1}{5}.$$

那么根据存在唯一性定理, $y'(t) = y^2 + \frac{1}{t}$, $y(0) = 1$ 在区间 $\mathcal{J} = \left(\frac{4}{5}, \frac{6}{5}\right)$ 上存在唯一解.

6.2 常数系数下的齐次线性系统

在本节里面, 我们将对常数系数下的齐次线性系统进行求解. 假设 $y(t)$ 是关于变量 t 的函数, 满足

$$a_0 y(t) + a_1 y'(t) + \cdots + a_n y^{(n)}(t) = 0, \quad (6.1)$$



且 $a_0, \dots, a_n$ 均为与 t 无关的非零常数, $y^{(n)}(t)$ 为 y 关于 t 的 n 阶导数. 形如上式的方程便是我们本节所讨论的重点. 按照上一节提出的方法, 我们可以将等式(6.1)写成是一个线性方程组的形式: 我们不妨设 $y_1(t) = y(t), y_2(t) = y'(t), \dots, y_n(t) = y^{(n-1)}(t)$, 那么这样一来我们便有 $y'_1(t) = y_2(t), y'_2(t) = y_3(t), \dots$, 以及

$$\begin{aligned} y'_n(t) &= y^{(n)}(t) = -\frac{a_0}{a_n}y(t) - \frac{a_1}{a_n}y'(t) - \dots - \frac{a_{n-1}}{a_n}y^{(n-1)}(t) \\ &= -\frac{a_0}{a_n}y_1(t) - \frac{a_1}{a_n}y_2(t) - \dots - \frac{a_{n-1}}{a_n}y_n(t). \end{aligned}$$

因此我们便有

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} y'_1(t) \\ y'_2(t) \\ \vdots \\ y'_n(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} y_2(t) \\ y_3(t) \\ \vdots \\ -\frac{a_0}{a_n}y_1(t) - \frac{a_1}{a_n}y_2(t) - \dots - \frac{a_{n-1}}{a_n}y_n(t) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{a_0}{a_n} & -\frac{a_1}{a_n} & \dots & \dots & -\frac{a_{n-1}}{a_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \\ \vdots \\ y_n(t) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

因此我们便有形如

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$$

的常微分方程组. 形如这样的方程组也被称作**自治系统 (Autonomous System)**. 即矩阵 $\mathbf{A}$ 中的元素与 t 无关. 我们在今后的篇幅中只研究自治系统.

例题

例题 6.4. 将微分方程 $y'''(t) - 2y''(t) + 4y'(t) - 5y(t) = 0$ 写成 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的形式.

解答 6.4. 设 $y_1(t) = y(t), y_2(t) = y'(t), y_3(t) = y''(t)$. 则

$$y'_1(t) = y_2(t), y'_2(t) = y_3(t), y'_3(t) = 2y''(t) - 4y'(t) + 5y(t) = 2y_3(t) - 4y_2(t) + 5y_1(t).$$

由此我们可知

$$\begin{pmatrix} y'_1(t) \\ y'_2(t) \\ y'_3(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 5 & -4 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \\ y_3(t) \end{pmatrix}.$$

随后我们来学习如何求解这样的常微分方程组. 在求解之前, 我们需要先给出有关微分方程组解的存在唯一性定理:



定理

定理 6.2. 设 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}(t)\mathbf{y}(t) + \mathbf{b}(t)$, $\mathbf{A}(t) \in M_n(\mathbb{R})$, $\mathbf{b}(t) \in \mathbb{R}^n$. 若 $\mathbf{A}(t), \mathbf{b}(t)$ 中的每一个元素均为定义在 I 上关于 t 的连续函数, 那么对任意的 $t_0 \in I$, 初值问题 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}(t)\mathbf{y}(t) + \mathbf{b}(t), \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$ 在 I 上存在唯一解 $\mathbf{y}(t)$.

该定理的证明和上一节中的定理 5.1 的证明十分相似.

在求解这样的方程时, 我们不妨先尝试将问题简化: 假设矩阵为 1×1 , 那么这样一来, 我们可以得到形如

$$y'(t) = \lambda y(t) \quad (6.2)$$

的方程, 其中 λ 为常数. 我们将 $y'(t)$ 改写作 $\frac{dy}{dt}$, 于是我们有

$$\frac{dy}{dt} = \lambda y.$$

形式上分离变量可得

$$\frac{1}{y} dy = \lambda dt \implies \int \frac{1}{y} dy = \int \lambda dt.$$

由此不难看出(6.2)的解为 $y(t) = Ce^{\lambda t}$, 其中 C 为常数. 那么对于形如 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的方程组, 我们是不是也可以类比这种方法呢? 我们可以尝试将该方程的解写成若干个形如 $e^{\lambda t}$ 的线性组合. 设 $\mathbf{A} \in M_n(\mathbb{R})$, 在方程组 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 里面, 我们假设 $\mathbf{y}_1(t) = e^{\lambda t}\mathbf{v}$ 为满足条件的一个解. 因此我们有 $\mathbf{y}'_1(t) = \lambda e^{\lambda t}\mathbf{v}$, 那么

$$\mathbf{y}'_1(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}_1(t) \implies \lambda e^{\lambda t}\mathbf{v} = \mathbf{A}e^{\lambda t}\mathbf{v}.$$

如果我们将 $e^{\lambda t}\mathbf{v}$ 看作一个整体 $\mathbf{u}$, 我们便会得到 $\mathbf{A}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$. 也就是说, 在 $\mathbf{y}_1(t) = e^{\lambda t}\mathbf{v}$ 中, 若 $\mathbf{y}'_1(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}_1(t)$, 则 λ 为 $\mathbf{A}$ 的一个特征值, $\mathbf{v}$ 为与之相关的特征向量. 如果此时 $\mathbf{A}$ 有多个特征值, 这些特征值与特征向量所构成的解 $\mathbf{y}_i(t) = e^{\lambda_i t}\mathbf{v}_i$ 的线性组合是否也为满足条件的解呢?

定理

定理 6.3 (叠加性质 (Principle of Superposition)). 在 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 中, 若 $\mathbf{y}_1(t), \mathbf{y}_2(t)$ 均为原方程的解, 那么 $\forall c_1, c_2 \in \mathbb{R}, c_1\mathbf{y}_1(t) + c_2\mathbf{y}_2(t)$ 也为原方程的解.

证明. 显然. ■

因此, 我们知道微分方程组的解即可看作是若干个线性无关的“基础解”的线性组合.

定义

定义 6.4. 我们若将 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的解 $\mathbf{y}_1(t), \dots, \mathbf{y}_n(t)$ 当作列向量写到一个矩阵 $\mathbf{Y}(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1(t) & \cdots & \mathbf{y}_n(t) \end{pmatrix}$, 我们则称 $\mathbf{Y}(t)$ 为一个**矩阵解 (Matrix Solution)**.

根据线性代数的知识, $\mathbf{y}_1(t), \dots, \mathbf{y}_n(t)$ 彼此线性无关的充要条件为对任意的 $t, \det(\mathbf{Y}(t)) \neq 0$. 此时我们称 $\mathbf{y}_1(t), \dots, \mathbf{y}_n(t)$ 为 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的一个**基础解系 (Fundamental Solution)**. 如果 $\mathbf{A} \in M_n(\mathbb{R})$ 有 n 个不同的实



数特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, 那么我们便可以找到 n 个与特征值所对应的彼此线性无关的特征向量 $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$. 由此, 方程组 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的解便可以看作是由 $\mathbf{y}_i(t) = e^{\lambda_i t} \mathbf{v}_i$ 所构成的线性组合:

$$\mathbf{y}(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} \mathbf{v}_1 + \dots + c_n e^{\lambda_n t} \mathbf{v}_n.$$

定理

定理 6.4. 设常数系数下的线性齐次常微分方程组 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$, $\mathbf{A} \in M_n(\mathbb{R})$. 若 $\mathbf{A}$ 有 n 个不同的实数特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, 其对应的特征向量分别为 $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$. 则 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的解集为

$$\mathbf{y}(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} \mathbf{v}_1 + \dots + c_n e^{\lambda_n t} \mathbf{v}_n, \quad c_1, \dots, c_n \in \mathbb{R}.$$

对于存在 n 个不同的实数特征值的矩阵而言, 线性齐次常微分方程组 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 便很好求得. 我们不禁要问: 如果 $\mathbf{A}$ 含有复数特征值呢? 如果 $\mathbf{A}$ 无法对角化呢? 我们将在本节讨论特征值为复数的情况.

推论

推论 6.4. 设 $\mathbf{A} \in M_n(\mathbb{R})$, 且 $\lambda = a + bi$ 为 $\mathbf{A}$ 的一个特征值, 那么 $\bar{\lambda} = a - bi$ 也为 $\mathbf{A}$ 的一个特征值. 特别地, 如果 $\mathbf{u} + i\mathbf{v}$ 为 $\lambda = a + bi$ 所对应的特征向量, 那么 $\mathbf{u} - i\mathbf{v}$ 为 $\bar{\lambda} = a - bi$ 所对应的特征向量.

设 $\mathbf{A} \in M_n(\mathbb{R})$ 存在复数特征值. 我们取 $\lambda = a + bi$, ($a, b \in \mathbb{R}$) 和特征向量 $\mathbf{u} + i\mathbf{v}$, ($\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$), 那么根据定义,

$$\mathbf{y}(t) = e^{(a+bi)t} (\mathbf{u} + i\mathbf{v}) \quad (6.3)$$

即为满足条件的一个解. 但由于 $\mathbf{A} \in M_n(\mathbb{R})$, 所以我们不能就这样把这这个复数解直接放上去. 我们可以利用 Euler 公式对式子(6.3)进行变形. 根据 Euler 公式, $e^{ix} = \cos(x) + i \sin(x)$. 那么

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t) &= e^{\lambda t} \cdot (\mathbf{u} + i\mathbf{v}) \\ &= e^{at} \cdot \left(e^{bit} \mathbf{u} + e^{bit} (i\mathbf{v}) \right) \\ &= e^{at} \cdot \left((\cos(bt) + i \sin(bt)) \mathbf{u} + i \cdot (\cos(bt) + i \sin(bt)) \mathbf{v} \right) \\ &= e^{at} \cdot \left(\cos(bt) \mathbf{u} - \sin(bt) \mathbf{v} \right) + i \cdot e^{at} \left(\sin(bt) \mathbf{u} + \cos(bt) \mathbf{v} \right). \end{aligned}$$

推论

推论 6.5. 设 $\mathbf{y}_1(t) = e^{at} \cdot (\cos(bt) \mathbf{u} - \sin(bt) \mathbf{v})$, $\mathbf{y}_2(t) = e^{at} (\sin(bt) \mathbf{u} + \cos(bt) \mathbf{v})$. 则 $\mathbf{y}_1(t), \mathbf{y}_2(t)$ 均为原方程组 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的解.

证明. 由于 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{y}_1(t) + i\mathbf{y}_2(t)$ and $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$, 那么

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{y}'_1(t) + i\mathbf{y}'_2(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}_1(t) + i\mathbf{A}\mathbf{y}_2(t).$$

由于 $b \neq 0$, 则 $\mathbf{y}_1(t), \mathbf{y}_2(t)$ 线性无关. 因此 $\mathbf{y}'_1(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}_1(t); \mathbf{y}'_2(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}_2(t)$. ■



例题

例题 6.5. 设 $\alpha, \beta, \gamma \in \mathbb{R}$, 矩阵 $A = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta & 0 \\ \beta & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}$. 求出 $\mathbf{y}'(t) = A\mathbf{y}(t)$ 的解集.

解答 6.5. A 的特征多项式为

$$p(\lambda) = \det(A - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} \alpha - \lambda & -\beta & 0 \\ \beta & \alpha - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \gamma - \lambda \end{pmatrix} = (\gamma - \lambda)[(\alpha - \lambda)^2 + \beta^2],$$

因此 A 的特征值为

$$\lambda_1 = \alpha + i\beta, \quad \lambda_2 = \alpha - i\beta, \quad \lambda_3 = \gamma,$$

与特征值所对应的特征向量为

$$\mathbf{u}_1 \in \ker(A - \lambda_1 I) = \ker \begin{pmatrix} -i\beta & -\beta & 0 \\ \beta & -i\beta & 0 \\ 0 & 0 & \gamma - \alpha - i\beta \end{pmatrix} \in \text{Span} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} \implies \text{令 } \mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

根据推论 6.4, 我们很容易得到 $\mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}$.

最后,

$$\mathbf{u}_3 \in \ker(A - \lambda_3 I) = \text{Span} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \implies \text{令 } \mathbf{u}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

对于特征值 $\alpha \pm \beta i$ 而言, 其对应的解满足

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(t) &= e^{\alpha t} (\cos(\beta t) + i \sin(\beta t)) \cdot \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \right) \\ &= e^{\alpha t} \left[\cos(\beta t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \sin(\beta t) \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] + i e^{\alpha t} \left[\sin(\beta t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \cos(\beta t) \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]. \end{aligned}$$

则

$$\mathbf{y}_1(t) = e^{\alpha t} \begin{pmatrix} \cos(\beta t) \\ \sin(\beta t) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y}_2(t) = e^{\alpha t} \begin{pmatrix} \sin(\beta t) \\ -\cos(\beta t) \\ 0 \end{pmatrix}.$$



对于 $\lambda_3 = \gamma$ 而言, 显然 $y_3 = e^{\gamma t} u_3$. 则原方程的解集为

$$y(t) = c_1 e^{\alpha t} \begin{pmatrix} \cos(\beta t) \\ \sin(\beta t) \\ 0 \end{pmatrix} + c_2 e^{\alpha t} \begin{pmatrix} \sin(\beta t) \\ -\cos(\beta t) \\ 0 \end{pmatrix} + c_3 e^{\gamma t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad c_1, c_2, c_3 \in \mathbb{R}.$$

6.2 练习

1. [带阻尼的 LRC 电路] 考虑串联 LRC 电路: 其中 L 为电感, R 为电阻, C 为电容. $I(t)$ 为电路中的电流. 已知微分方程

$$LI''(t) + RI'(t) + \frac{1}{C}I(t) = 0.$$

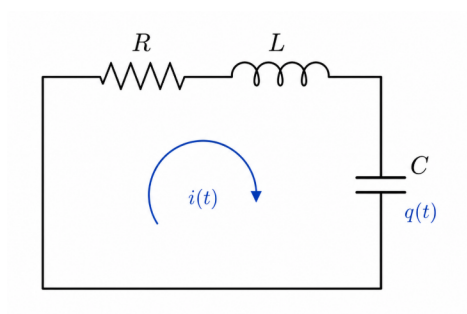


图 5: 练习 1 用图

(i) [过阻尼] 设 $L = 1, R = 3, C = 0.5$. 求出 $I(t)$ 随时间的变化关系. 并大致画出其图像;

(ii) [欠阻尼] 设 $L = 1, R = 1, C = 1$. 求出 $I(t)$ 随时间的变化关系. 并大致画出其图像.

2. [溶液溶质问题] 如图, 有 A, B, C 三个密封良好且装满水的水缸, 且 $A, B; B, C; A, C$ 水缸之间通过单向阀连接. A, C 水缸容积均为 $60L$, B 水缸容积为 $30L$. 已知 A, B, C 缸中均匀且充分地溶解了 $0kg, 1kg, 4kg$ 的盐, 且三个单向阀均处于闭合状态. 在某一时刻 ($t = 0$), 三个阀门突然同时开启. 随后每单位时间内有 $10L$ 的盐水分别由 A 流向 B , 由 B 流向 C , 以及由 C 流向 A . 设 A, B, C 缸中盐水的浓度在 t 时刻分别为 $y_1(t), y_2(t), y_3(t)$ (单位: kg/L). 建立合适的微分方程组, 求出 $y_1(t), y_2(t), y_3(t)$ 随时间的变化关系.



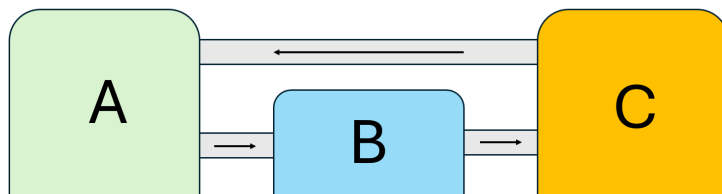


图 6: 练习 2 用图

3. [弹簧振子系统] 如图, 物块 m_1, m_2 被三根劲度系数分别为 k_1, k_2, k_3 的弹簧连接. 设在 t 时刻对 m_1, m_2 施加的力分别为 $F_1(t), F_2(t)$, 物块 m_1, m_2 相较初始位置的位移分别为 x_1, x_2 . 取右边为正方向, 不计一切摩擦, 根据牛顿运动定律和胡克定律我们有

$$m_1 x_1''(t) = k_2(x_2 - x_1) - k_1 x_1 + F_1(t);$$

$$m_2 x_2''(t) = -k_3 x_2 - k_2(x_2 - x_1) + F_2(t).$$

设 $m_1 = m_2 = 1, k_1 = k_3 = 1, k_2 = 2, F_1 = F_2 = 0$. 求出 $x_1(t), x_2(t)$ 的通解, 并大致描述不同的初始条件 $x_1(0), x_2(0), x_1'(0), x_2'(0)$ 对系统可能产生的影响.

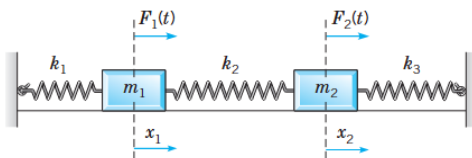


图 7: 练习 3 用图

6.3 矩阵的指数与微分方程组的解

回顾函数 e^x 的 Taylor 展开式:

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!},$$

我们能否将原式中的 x 替换成一个 $n \times n$ 矩阵 A 呢? 经过这样的替换, 矩阵的指数又有什么意义呢?



定义

定义 6.5. 设 $A \in M_n(\mathbb{R})$. 我们定义 A 的指数, 记作 e^A 为

$$e^A := I + A + \frac{1}{2}A^2 + \frac{1}{6}A^3 + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!}.$$

对于 $t \in \mathbb{R}$, 定义

$$e^{At} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k t^k.$$

我们接下来给出 e^{At} 的性质. 首先当 $t = 0$ 时我们有 $e^{A \cdot 0} = e^0 = I$; 其次对于任意的 $s, t \in \mathbb{R}$, 有 $e^{A(s+t)} = e^{As} \cdot e^{At}$; 同时矩阵 e^{At} 可逆, 其逆矩阵为 $(e^{At})^{-1} = e^{-At}$; 最后我们关注的便是其关于 t 的导数. 我们有 $\frac{d}{dt} e^{At} = A e^{At}$. 在最后一性质里面, 我们也不难发现形如 $\mathbf{y}'(t) = A\mathbf{y}(t)$ 的结构. 我们设矩阵 $Y(t) = e^{At}$, 那么我们有

$$Y'(t) = AY(t),$$

即 $Y(t)$ 为满足条件的一个矩阵解. 设 $Y(t)$ 的列向量为 $\mathbf{y}_1(t), \cdots, \mathbf{y}_n(t)$, 那么根据矩阵乘法的性质, 我们有

$$Y'(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{y}'_1(t) & \cdots & \mathbf{y}'_n(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A\mathbf{y}_1(t) & \cdots & A\mathbf{y}_n(t) \end{pmatrix}.$$

因此 $\mathbf{y}_1(t), \cdots, \mathbf{y}_n(t)$ 便是满足条件的一组解. 根据叠加性质, 它们的线性组合也同样为满足条件的解. 也就是说

$$\mathbf{y}(t) = c_1 \mathbf{y}_1(t) + \cdots + c_n \mathbf{y}_n(t)$$

也为满足条件的解. 因此我们有

$$\mathbf{y}(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1(t) & \cdots & \mathbf{y}_n(t) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = Y(t)\mathbf{c} = e^{At}\mathbf{c}.$$

我们因此把上面的发现总结成一条定理:

定理

定理 6.5. 设 $A \in M_n(\mathbb{R})$, $\mathbf{y}_0 \in \mathbb{R}^n$. 微分方程组 $\mathbf{y}'(t) = A\mathbf{y}(t)$ 的通解即为

$$\mathbf{y}(t) = e^{At}\mathbf{c}, \quad \mathbf{c} \in \mathbb{R}^n.$$

对于给定的初始条件 $\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$, 方程 $\mathbf{y}'(t) = A\mathbf{y}(t)$ 存在唯一解 $\mathbf{y}(t) = e^{At}\mathbf{y}_0$.

那么我们该如何去求矩阵的指数呢? 我们不妨设 λ 为一个特征值, $\mathbf{u}$ 为与之对应的特征向量. 那么

$$e^{At}\mathbf{u} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k t^k \mathbf{u} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} (A^k \mathbf{u}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \lambda^k \mathbf{u} := e^{\lambda t} \mathbf{u}.$$

随后, 我们便可以用上一节讲到的知识进行求解了. 不过我们会问一个问题: 在上一节里面, 我们需要令矩



阵 A 可对角化. 当 A 无法对角化时上一节的方法便不再适用了. 不过好消息是, 通过矩阵的指数, 我们可以轻松地解决 A 不可对角化的情况. 在此情况下, 我们需要用到矩阵的广义特征向量 (不熟悉的读者请参考第 5 章第 1 节).

我们假设特征值 λ 的代数重数为 m , u 为与其对应的广义特征向量. 此时我们知道存在 $j \leq m$, 使得对所有的 $k > j$, $(A - \lambda I)^k u = 0$. 因此我们有

$$e^{At}u = e^{\lambda It} \cdot e^{(A-\lambda I)t}u = e^{\lambda t} \cdot I \cdot \left(\sum_{k=0}^j \frac{t^k}{k!} (A - \lambda I)^k \right) u.$$

定理

定理 6.6. 设 $A \in M_n(\mathbb{R})$. 设 $u_1, \dots, u_n$ 为线性无关的 A 的广义特征向量, λ_i 为 u_i 对应的特征值, 那么微分方程组 $y'(t) = Ay(t)$ 的解为

$$y(t) = \sum_{i=1}^n c_i e^{At} u_i = \sum_{i=1}^n c_i e^{\lambda_i t} \cdot \left(\sum_{k=0}^{j_i} \frac{t^k}{k!} (A - \lambda_i I)^k \right) u_i,$$

其中 j_i 为满足条件的最大正整数使得 $(A - \lambda_i I)^{j_i} u_i \neq 0$.

例题

例题 6.6. 设 $A = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ -1 & -2 \end{pmatrix}$, 求出 $y'(t) = Ay(t)$ 的解.

解答 6.6. 矩阵 A 的特征多项式为 $C_A(x) = (2 - \lambda)(-2 - \lambda) + 4 = \lambda^2$. 因此 $\lambda = 0$ 为唯一的特征值, 其代数重数为 2. 特征向量 u_1 满足

$$u_1 \in \text{Ker}(A - 0I) = \text{Ker} \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ -1 & -2 \end{pmatrix} = \text{Span} \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

我们根据 u_1 , 在构造出一个广义特征向量 $u_2 = \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix}^\top \in K_2 \setminus K_1$. 我们知道

$$Au_2 = u_1 \implies \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ -1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

因此我们得到由广义特征向量构成的基底为 $u_1 = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}, u_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. 那么根据定理 6.6,

$$y_1(t) = e^{At}u_1 = e^{\lambda t}u_1 = u_1;$$



由于 u_2 为广义特征向量, 且 $(A - \lambda I)^2 u_2 = 0, (A - \lambda I)u_2 \neq 0$, 因此我们有

$$y_2(t) = e^{At} u_2 = e^{\lambda t} e^{(A - \lambda I)t} u_2 = \sum_{k=0}^1 \frac{t^k}{k!} A^k u_2 = u_2 + t A u_2 = u_2 + t u_1.$$

由此可知, 该微分方程的解为

$$y(t) = c_1 y_1(t) + c_2 y_2(t) = c_1 \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 1 + 2t \\ -t \end{pmatrix}, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{R}.$$

例题

例题 6.7. 设 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$, 求出 $y'(t) = Ay(t)$ 的解.

解答 6.7. 该矩阵在第五章中曾反复出现. 我们直接给出 A 的广义特征向量:

$$u_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, u_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, u_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ -2 \\ 0 \end{pmatrix}, u_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

其中 u_1, u_2, u_3 为代数重数为 3 的特征向量 $\lambda_1 = 0$ 的广义特征向量. $u_1 \in K_1, u_2 \in K_2 \setminus K_1, u_3 \in K_3 \setminus K_2$. 最后 u_4 为 $\lambda_2 = -1$ 对应的特征向量. 因此

$$y_1(t) = e^{At} v_1 = e^{\lambda_1 t} u_1 = u_1;$$

$$y_2(t) = e^{At} u_2 = e^{\lambda_1 t} \sum_{k=0}^1 \frac{t^k}{k!} A^k u_2 = u_2 + t A u_2 = u_2 + t u_1;$$

$$y_3(t) = e^{At} u_3 = e^{\lambda_1 t} \sum_{k=0}^2 \frac{t^k}{k!} A^k u_3 = u_3 + t A u_3 + \frac{t^2}{2} A^2 u_3 = u_3 + t u_2 + \frac{1}{2} t^2 u_1.$$

对于 u_4 而言,

$$y_4(t) = e^{At} u_4 = e^{\lambda_2 t} u_4 = e^{-t} u_4.$$

由此可知, 该微分方程的解为

$$\begin{aligned} y(t) &= c_1 y_1(t) + c_2 y_2(t) + c_3 y_3(t) + c_4 y_4(t) \\ &= c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} 1+t \\ -t \\ t \\ 1+t \end{pmatrix} + c_3 \begin{pmatrix} -1+t+\frac{t^2}{2} \\ 1-\frac{t^2}{2} \\ -2+\frac{t^2}{2} \\ t+\frac{t^2}{2} \end{pmatrix} + c_4 e^{-t} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$



其中 $c_i \in \mathbb{R}$.

在本节的最后, 我们简要讨论一下非齐次线性系统的求解. 假设我们有如下的系统:

$$\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t) + \mathbf{r}(t), \quad \mathbf{r}(t) \text{ 为连续函数.}$$

在这种情况下, 我们往往可以将该微分方程的解分成两部分: 第一部分是关于齐次线性系统 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的通解, 第二部分是和 $\mathbf{r}(t)$ 有关的特解. 我们设 $\mathbf{y}_1(t), \mathbf{y}_2(t)$ 为 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t) + \mathbf{r}(t)$ 的两个不同的解, 那么不难发现

$$(\mathbf{y}_2(t) - \mathbf{y}_1(t))' = \mathbf{A}(\mathbf{y}_2(t) - \mathbf{y}_1(t)).$$

因此存在一个矩阵解 $\mathbf{Y}(t)$, 使得 $\mathbf{y}_2(t) - \mathbf{y}_1(t) = \mathbf{Y}(t)\mathbf{c}$ 为 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的解. 我们对这个式子进行变形, 有

$$\mathbf{y}_2(t) = \mathbf{y}_1(t) + \mathbf{Y}(t)\mathbf{c}, \quad \mathbf{c} \in \mathbb{R}^n.$$

我们称 $\mathbf{Y}(t)\mathbf{c}$ 为齐次方程组 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的通解, $\mathbf{y}_1(t)$ 为与 $\mathbf{r}(t)$ 有关的特殊解. 因此非齐次线性系统的通解即为

$$\mathbf{y}(t) = c_1\mathbf{y}_1(t) + \cdots + c_n\mathbf{y}_n(t) + \mathbf{y}_p(t),$$

其中 $\mathbf{y}_p(t)$ 为一个特殊解, $\mathbf{Y}(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1(t) & \cdots & \mathbf{y}_n(t) \end{pmatrix}$. 我们令 $\mathbf{y}_p(t) = \mathbf{Y}(t)\mathbf{c}_p(t)$, 其中 $\mathbf{c}_p(t)$ 为未知量. 假设 $\mathbf{y}_p(t)$ 为原方程的解, 那么

$$\mathbf{y}_p'(t) = \mathbf{Y}'(t)\mathbf{c}_p(t) + \mathbf{Y}(t)\mathbf{c}_p'(t) = \mathbf{A}\mathbf{Y}(t)\mathbf{c}_p(t) + \mathbf{Y}(t)\mathbf{c}_p'(t).$$

与此同时

$$\mathbf{y}_p'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}_p(t) + \mathbf{r}(t) = \mathbf{A}\mathbf{Y}(t)\mathbf{c}_p(t) + \mathbf{r}(t),$$

则 $\mathbf{Y}(t)\mathbf{c}_p'(t) = \mathbf{r}(t)$. 即

$$\mathbf{c}_p(t) = \int \mathbf{Y}^{-1}(t)\mathbf{r}(t)dt,$$

那么

$$\mathbf{y}_p(t) = \mathbf{Y}(t) \int \mathbf{Y}^{-1}(t)\mathbf{r}(t)dt.$$

定理

定理 6.7 (非齐次系统的常数变易法). 在非齐次微分方程组 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t) + \mathbf{r}(t)$ 中, 设 $\mathbf{Y}(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1(t) & \cdots & \mathbf{y}_n(t) \end{pmatrix}$ 为齐次方程组 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的矩阵解, 那么该方程组的一个特殊解 $\mathbf{y}_p(t)$ 为

$$\mathbf{y}_p(t) = \mathbf{Y}(t) \int \mathbf{Y}^{-1}(t)\mathbf{r}(t)dt.$$

该方程组的通解为

$$\mathbf{y}(t) = c_1\mathbf{y}_1(t) + \cdots + c_n\mathbf{y}_n(t) + \mathbf{y}_p(t).$$



例题

例题 6.8. 求出

$$\mathbf{y}'(t) = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{y}(t) + \begin{pmatrix} e^{-t} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

的解.

解答 6.8. 令

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}(t) = \begin{pmatrix} e^{-t} \\ 1 \end{pmatrix},$$

不难发现 $\mathbf{A}$ 的特征值为 $\lambda_1 = 3, \lambda_2 = -1$. 其对应的特征向量分别为

$$\mathbf{u}_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u}_2 = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

因此在齐次系统 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 中, 我们有

$$\mathbf{Y}(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{3t} & -\frac{1}{2}e^{-t} \\ e^{3t} & e^{-t} \end{pmatrix}.$$

根据定理 6.7, 我们有

$$\mathbf{y}_p(t) = \mathbf{Y}(t) \int \mathbf{Y}(t)^{-1} \mathbf{r}(t) dt.$$

其中

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}(t)^{-1} &= \begin{pmatrix} e^{-3t} & \frac{1}{2}e^{-3t} \\ -e^t & \frac{1}{2}e^t \end{pmatrix}, \\ \mathbf{Y}(t)^{-1} \mathbf{r}(t) &= \begin{pmatrix} e^{-3t} & \frac{1}{2}e^{-3t} \\ -e^t & \frac{1}{2}e^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-t} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-4t} + \frac{1}{2}e^{-3t} \\ -1 + \frac{1}{2}e^t \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

那么

$$\int \mathbf{Y}(t)^{-1} \mathbf{r}(t) dt = \int \begin{pmatrix} e^{-4t} + \frac{1}{2}e^{-3t} \\ -1 + \frac{1}{2}e^t \end{pmatrix} dt = \begin{pmatrix} -\frac{1}{4}e^{-4t} - \frac{1}{6}e^{-3t} \\ -t + \frac{1}{2}e^t \end{pmatrix}.$$

则

$$\mathbf{y}_p(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{3t} & -\frac{1}{2}e^{-t} \\ e^{3t} & e^{-t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{4}e^{-4t} - \frac{1}{6}e^{-3t} \\ -t + \frac{1}{2}e^t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(-\frac{1}{8} + \frac{t}{2}\right)e^{-t} - \frac{1}{3} \\ \left(-\frac{1}{4} - t\right)e^{-t} + \frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

因此其通解为

$$\mathbf{y}(t) = c_1 \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{3t} \\ e^{3t} \end{pmatrix} + c_2 \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}e^{-t} \\ e^{-t} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \left(-\frac{1}{8} + \frac{t}{2}\right)e^{-t} - \frac{1}{3} \\ \left(-\frac{1}{4} - t\right)e^{-t} + \frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

结合初始条件 $\mathbf{y}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, 我们有

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\frac{11}{24} \\ \frac{1}{12} \end{pmatrix},$$



那么

$$c = Y(0)^{-1} \left[\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -\frac{11}{24} \\ \frac{1}{12} \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} \frac{17}{12} \\ -\frac{3}{2} \end{pmatrix}.$$

因此该非齐次线性微分方程组的解为

$$y(t) = \frac{17}{12} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}e^{3t} \\ e^{3t} \end{pmatrix} - \frac{3}{2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}e^{-t} \\ e^{-t} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \left(-\frac{1}{8} + \frac{t}{2}\right)e^{-t} - \frac{1}{3} \\ \left(-\frac{1}{4} - t\right)e^{-t} + \frac{1}{3} \end{pmatrix}.$$

6.3 练习

1. 求出下列矩阵的指数.

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 8 & 6 \end{pmatrix}.$$

2. 设 D 为对角矩阵 $D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$, 证明:

$$e^D = \text{diag}(e^{\lambda_1}, \dots, e^{\lambda_n}).$$

3. 设 A 为幂零矩阵 (即存在 m 使得 $A^m = \mathbf{0}$). 令 $N = A + cI, c \in \mathbb{R}$.

(i) 求 e^{Nt} . 提示: 你可以很大程度地化简!

(ii) 用 (i) 中你得到的公式, 求出

$$y'(t) = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} y(t), \quad y(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

的解.

4. 求出齐次线性微分方程组

$$\begin{cases} y_1'(t) = 3y_1(t) + y_3(t) \\ y_2'(t) = 3y_2(t) + y_3(t) \\ y_3'(t) = 3y_3(t) \end{cases}$$



的通解.

5. 运用常数变易法, 求出

$$\mathbf{y}'(t) = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} \mathbf{y}(t) + \begin{pmatrix} 2e^{-t} \\ 3t \end{pmatrix}$$

的通解.

6. 若 $\mathbf{A} \in M_n(\mathbb{R})$ 有 n 个不同的特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \mathbb{R}$, 我们知道 $\mathbf{A}$ 可对角化. 此时存在矩阵 $\mathbf{D} = \text{diag}(e^{\lambda_1}, \dots, e^{\lambda_n})$ 与可逆矩阵 $\mathbf{Q}$, 使得

$$e^{\mathbf{A}} = \mathbf{Q}\mathbf{D}\mathbf{Q}^{-1}.$$

利用这一结论, 设 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 4 \end{pmatrix}$, 求 $e^{\mathbf{A}}$.



6.4 线性系统的稳定性与相图

在前面几节里面, 我们学习了如何去求解一个线性微分方程组. 但值得注意的是能够求解的微分方程仅为少数. 很多非线性微分方程组有着非常复杂的结构, 也因此没有通解. 比如 Lorenz 方程:

$$\begin{pmatrix} x'(t) \\ y'(t) \\ z'(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma(y - x) \\ x(\rho - z) - y \\ xy - \beta z \end{pmatrix}, \quad \sigma, \rho, \beta \in \mathbb{R}.$$

在这个系统中, 微小的参数变化便可能会对方程的解产生很大的影响. 比如在下图中, 我们取 $\sigma = 10, \beta = \frac{8}{3}$, 以及相同的初始条件 $x(0) = y(0) = z(0) = 1$. 我们随后选取不同的参数 ρ , 得到下图中 $x(t), z(t)$ 的变化关系:

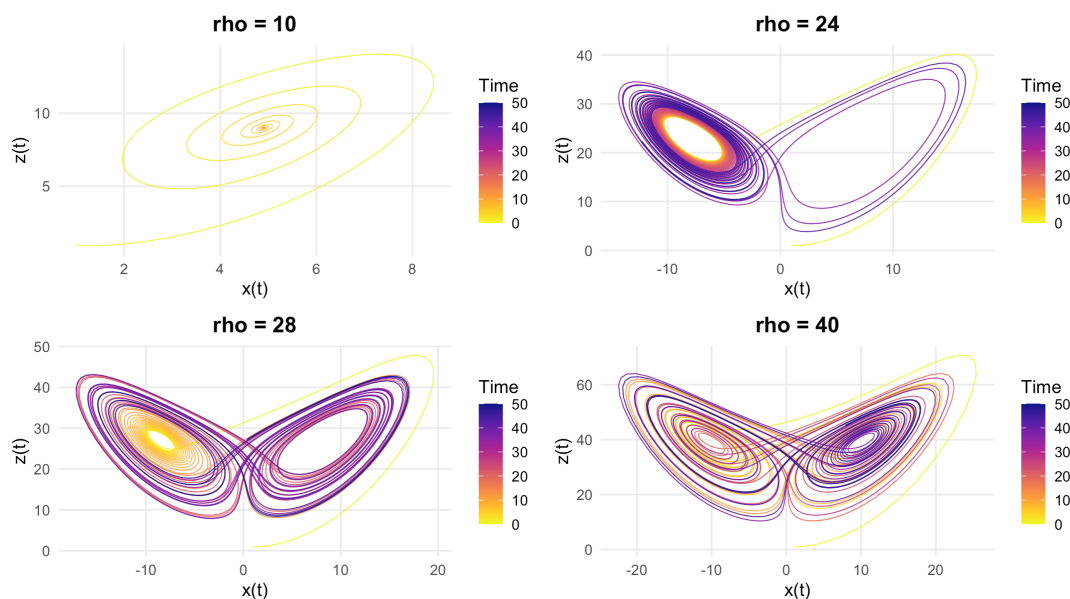


图 8: Lorenz 方程中不同的参数 ρ 对系统的影响

在这种情况下, 我们去尝试求解便不再现实了. 对于 Lorenz 方程这样的非线性系统, 我们通常无法像常系数线性系统那样利用特征值, 特征向量和矩阵指数写出通解. 然而, 我们仍然可以从几何角度研究解的行为: 例如, 解是否会趋近某个点? 是否会远离某个点? 不同初始条件下的轨迹是否会呈现相似的形状, 等等. 如果我们回到上图, 我们发现当 $\rho = 10$ 时, 随着时间增大, 解也在逐渐趋近于某一个点; 当 ρ 取值变大后我们便发现解就变得更加无序. 研究这些问题并不要求我们知道解的精确公式, 而是关注解在空间中的整体运动趋势, 这便引出了稳定性与相图的研究.

为了更好地理解稳定性的概念, 我们先从一维的微分方程 $x'(t) = f(x)$ 出发.

定义

定义 6.6. 在微分方程 $x'(t) = f(x)$ 中, 若 x^* 满足 $f(x^*) = 0$, 我们则称 x^* 为 **平衡点 (Equilibrium point)**.

当 $f(x) > 0$ 时, 我们有 $x'(t) > 0$, 即 $x(t)$ 单调递增, 解向右运动. 我们不妨考虑 $x'(t) = 1$, 在这里面我们知道 $f(x) = 1 > 0$, 因此我们在不求解方程的情况下便知道解向右运动. 如果对原方程进行求解我们有 $x(t) = t + C$, 那么不难发现 $x(t)$ 随着 t 的增大而增大, 因此在 $x(t)$ 坐标轴上随着 t 的增大 $x(t)$ 向右运动. 同理



若 $f(x) < 0$, $x(t)$ 单调递减, 解向左运动. 如果我们再考虑 $x'(t) = -1$, 那么此时我们知道解向左运动. 求解得 $x(t) = -t + C$. 因此随着时间 t 的增大 $x(t)$ 在减小, 那么在 $x(t)$ 坐标轴上随着 t 的增大 $x(t)$ 向左运动.

我们如果考虑一个稍微复杂一点的情形: $x'(t) = x^2 - 1$. 那么我们知道 $x = \pm 1$ 为该方程的平衡点. 当 $x \in (-\infty, -1)$ 时, $x'(t) > 0$, 因此在这个区间上解向右运动; 当 $x \in (-1, 1)$ 时, $x'(t) < 0$, 因此解向左运动; 当 $x \in (1, \infty)$ 时, $x'(t) > 0$, 因此解向右运动. 如果我们在坐标轴上用箭头画出不同位置下 x 的运动方向, 我们得到如下的图:

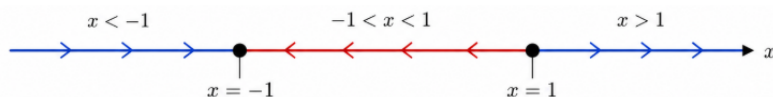


图 9: 微分方程 $x'(t) = x^2 - 1$ 的向图

我们发现, 在 $x = -1$ 附近, 解会逐渐趋近于该点. 我们称这样的点为稳定平衡点; 而在 $x = 1$ 附近, 解会逐渐远离该点. 我们称这样的点为不稳定平衡点. 我们如果同 $f(x) = x^2 - 1$ 的图像进行对比:

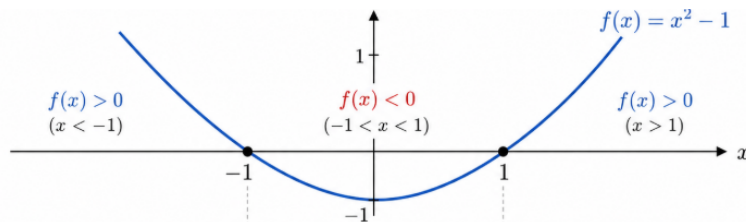


图 10: 函数 $f(x) = x^2 - 1$ 的图像

不难发现, 稳定平衡点对应了其导函数 $f'(x)$ 的极大值点; 不稳定平衡点对应了其导函数 $f'(x)$ 的极小值点. 对于稳定性我们进而给出更加严谨的定义:

定义

定义 6.7. 设 x^* 为系统 $x'(t) = f(x)$ 的一个平衡点.

(i) 若对任意的 $\varepsilon > 0$, 存在 $\delta > 0$, 使得当 $|x(0) - x^*| < \delta$ 时 $|x(t) - x^*| < \varepsilon, t \geq 0$, 我们则称 x^* 为 **Lyapunov 稳定**;

(ii) 若存在 $\delta > 0$, 使得当 $|x(0) - x^*| < \delta$ 时, $\lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = x^*$, 我们称 x^* 为 **准渐近稳定 (Quasi Asymptotic Stable)**;

(iii) 若 x^* 同时满足 Lyapunov 稳定和准渐近稳定, 我们称 x^* 为 **渐近稳定 (Asymptotic Stable)**. 若 x^* 不为 Lyapunov 稳定, 我们称 x^* 为 **不稳定 (Unstable)**.

Lyapunov 稳定描述的是“初始值靠近则轨迹始终靠近”; 而准渐近稳定描述的是“初始值靠近则轨迹最终收敛”. 若二者同时成立, 则称平衡点渐近稳定. 在上面的例子 $x'(t) = x^2 - 1$ 中, 点 $x = -1$ 即为渐近稳定.

随后, 我们开始讨论线性系统的稳定性与相图. 为方便读者理解和简化概念, 我们在本节将重点学习 2×2 矩阵 A . 我们首先假设 $A \in M_2(\mathbb{R})$ 可逆, 这样一来系统 $y'(t) = Ay(t)$ 的平衡点便是 $Ay(t) = 0$ 的解, 即



$\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 为唯一的平衡点. 在此条件下, 矩阵 $\mathbf{A}$ 涵盖了以下几种情况:

- (i) 矩阵 $\mathbf{A}$ 可对角化, 且特征值 λ_1, λ_2 均为实数;
- (ii) 矩阵 $\mathbf{A}$ 有一对互为共轭复数的特征值;
- (iii) 矩阵 $\mathbf{A}$ 不可对角化.

针对不同的情况, 平衡点 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 有着不同的相图类型, 我们将平衡点附近轨迹的形状称为 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 的节点. 我们下面将逐个分析各个情况下节点的形状:

- **情况一: 矩阵 $\mathbf{A}$ 可对角化, 且特征值为实数:** 记 λ_1, λ_2 为特征值, $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ 为与之对应的特征向量. 那么根据我们之前的推论, 微分方程 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的通解为

$$\mathbf{y}(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} \mathbf{u}_1 + c_2 e^{\lambda_2 t} \mathbf{u}_2, \quad c_1, c_2 \in \mathbb{R}.$$

在此情况下, 我们可以通过特征值的符号来判断 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 这个平衡点的稳定性.

- 若 $\lambda_1, \lambda_2 < 0, \lambda_1 \neq \lambda_2$: 那么 $e^{\lambda t} \rightarrow 0$. 因此

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{y}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} c_1 e^{\lambda_1 t} \mathbf{u}_1 + c_2 e^{\lambda_2 t} \mathbf{u}_2 = \mathbf{0},$$

故 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 为准渐进稳定. 同时结合 $e^{\lambda t}$ 的单调性, 我们得出 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 为 Lyapunov 稳定. **因此当 $\mathbf{A}$ 的所有特征值均为负数时, $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 为渐近稳定节点.** 此时平衡点附近的轨迹有向原点移动的趋势.

- 若 $\lambda_1, \lambda_2 > 0, \lambda_1 \neq \lambda_2$: 那么不难发现

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{y}(t)$$

发散. **因此当 $\mathbf{A}$ 的所有特征值均为正数时, $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 不稳定节点,** 此时平衡点附近的轨迹方向有远离原点的趋势.

- 若 $\mathbf{A}$ 有两个相同的特征值 $\lambda_1 = \lambda_2$: 此时 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 被称作是一个**真节点 (Proper Node)**. 此时其稳定性取决于特征值的符号. 若特征值为正数, 则 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 不稳定; 若特征值为负数, 则 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 渐近稳定. 其对应的节点分别为渐近稳定节点和不稳定节点.

- 若两个特征值异号 ($\lambda_1 \lambda_2 < 0$): 此时 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 被称作是**鞍点 (Saddle Point)**. 此时沿着负特征值对应的特征向量方向的解会趋向原点; 沿着正特征值对应的特征向量方向的解会远离原点. 此时的平衡点不稳定.

回顾我们先前提到的方程 $\mathbf{x}'(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t))$, 其状态空间是一条数轴. 由于 $\mathbf{x}'(t) > 0$ 表示解向右运动; 而 $\mathbf{x}'(t) < 0$ 表示解向左运动. 我们便可以在数轴上画出向图, 从而判断平衡点附近解的运动趋势. 那么同理, 对于二维系统

$$\begin{pmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(y_1(t), y_2(t)) \\ g(y_1(t), y_2(t)) \end{pmatrix},$$

系统的状态由点 $(y_1(t), y_2(t))^T \in \mathbb{R}^2$ 表示. 因此, 我们把 $\mathbb{R}^2$ 称为该系统的相平面. 对于相平面中的每一点 $(y_1(t), y_2(t))^T$, 我们都可以得到一个速度向量 $(y_1'(t), y_2'(t))^T$. 这个向量表示解经过点 $(y_1(t), y_2(t))$ 时



的瞬时运动方向. 由这些向量组成的图像称为方向场, 而由不同初始条件得到的解轨迹所组成的图像称为相图. 因此我们可以类比在一维平面里 $x'(t) = x^2 - 1$ 的相图, 去绘制 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 的相图.

下面的几个相图便分别对应了我们上面讨论过的 4 种情况: 在下面的四幅图中, 蓝色实线表示特征向量的方向, 红色曲线表示点的运动轨迹, 粉色箭头即为速度方向向量.

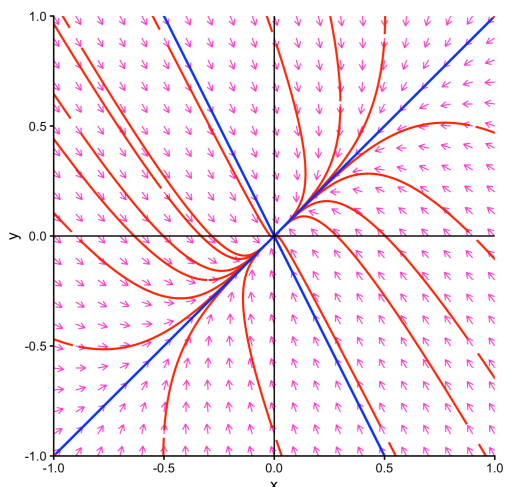


图 11: $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -2 & 1 \\ 2 & -3 \end{pmatrix}$, 此时 $\mathbf{A}$ 有两个不同的负数特征值, $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 渐近稳定.

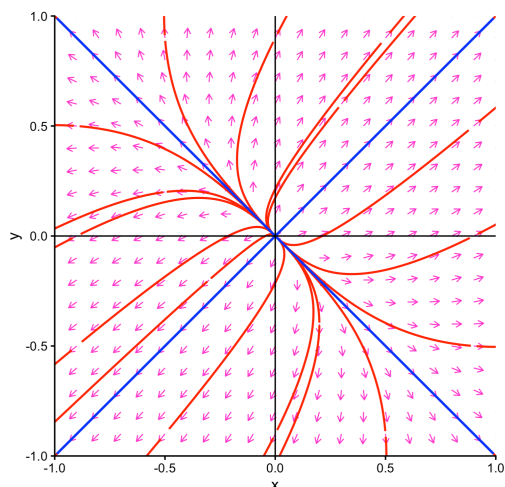


图 12: $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$, 此时 $\mathbf{A}$ 有两个不同的正数特征值, $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 不稳定.

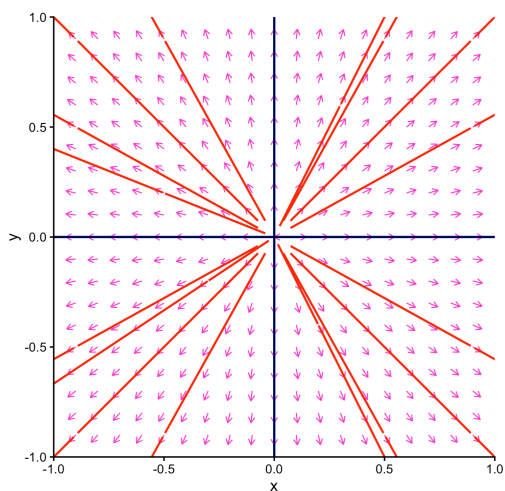


图 13: $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, 此时 $\mathbf{A}$ 有两个相同的正数特征值. 此时系统的稳定性取决于特征向量的符号. 因此 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 不稳定.

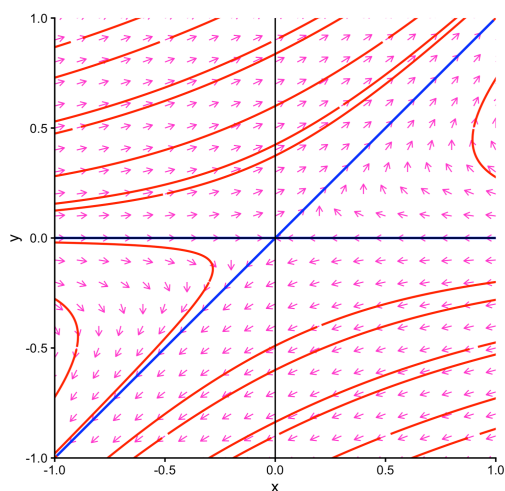


图 14: $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $\mathbf{A}$ 有特征值 $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = -1$, 沿 $\mathbf{u}_1$ 方向系统不稳定, 沿 $\mathbf{u}_2$ 方向系统稳定.

- **情况二: 矩阵 $\mathbf{A}$ 含有一对共轭特征值:** 此时我们假设 $\lambda_1 = a + bi, \lambda_2 = a - bi, b \neq 0$ 为 $\mathbf{A}$ 的特征值, $\mathbf{u} + i\mathbf{v}, \mathbf{u} - i\mathbf{v}$ 分别为 λ_1, λ_2 对应的特征向量. 那么方程 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}$ 的解为

$$\mathbf{y}'(t) = c_1 e^{at} \cdot (\cos(bt)\mathbf{u} - \sin(bt)\mathbf{v}) + c_2 e^{at} \cdot (\sin(bt)\mathbf{u} + \cos(bt)\mathbf{v}).$$



如果我们令 $p = c_1 u + c_2 v, q = c_2 u - c_1 v$, 那么我们就有

$$y'(t) = e^{at} (p \cos(bt) + q \sin(bt)).$$

不难发现, $p \cos(bt) + q \sin(bt) = \begin{pmatrix} p_1 \cos(bt) + q_1 \sin(bt) \\ p_2 \cos(bt) + q_2 \sin(bt) \end{pmatrix}$ 表示了一个经过旋转变换之后的椭圆:

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \cos \theta \\ b \sin \theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \cos \varphi \cos \theta - b \sin \varphi \sin \theta \\ a \sin \varphi \cos \theta + b \cos \varphi \sin \theta \end{pmatrix},$$

然后通过选取合适的角度及参数, 我们便可以将其表示为 $p \cos(bt) + q \sin(bt)$ 的形式. 至于 e^{at} , 我们可以看成是一个控制椭圆放大或缩小的参数. 当 $a > 0$ 时, e^{at} 的模随着时间增大而增大, 也就是说其离原点越来越远, 那么 $y(t) = 0$ 便是一个不稳定点; 若 $a < 0$, 那么 e^{at} 的模随着时间的增大而逐渐趋于 0, 也就是说其离原点越来越近, $y(t) = 0$ 便是一个渐近稳定点. 最后当 $a = 0$ 的时候我们发现其解集便是一个个相似的椭圆. 因此我们将目前的发现总结成以下三点:

定理

定理 6.8. 设 $y'(t) = Ay(t)$, 记 $\lambda = a + bi, b \neq 0$ 为复数特征值.

- 若 $a = 0$, 我们称 $y(t) = 0$ 为一稳定中心点 (Lyapunov 稳定);
- 若 $a < 0$, 则 $y(t) = 0$ 渐近稳定螺旋点;
- 若 $a > 0$, 则 $y(t) = 0$ 不稳定螺旋点.

下面我们分别设 $A_1 = \begin{pmatrix} 6 & 15 \\ -3 & -6 \end{pmatrix}, A_2 = \begin{pmatrix} -1 & 6 \\ -\frac{3}{2} & -1 \end{pmatrix}, A_3 = \begin{pmatrix} 7 & -10 \\ 5 & -3 \end{pmatrix}$. 它们分别对应了矩阵 A 的复数特征值的实部分别为 0, 负数, 正数的情况. 下面展示了它们的相图.

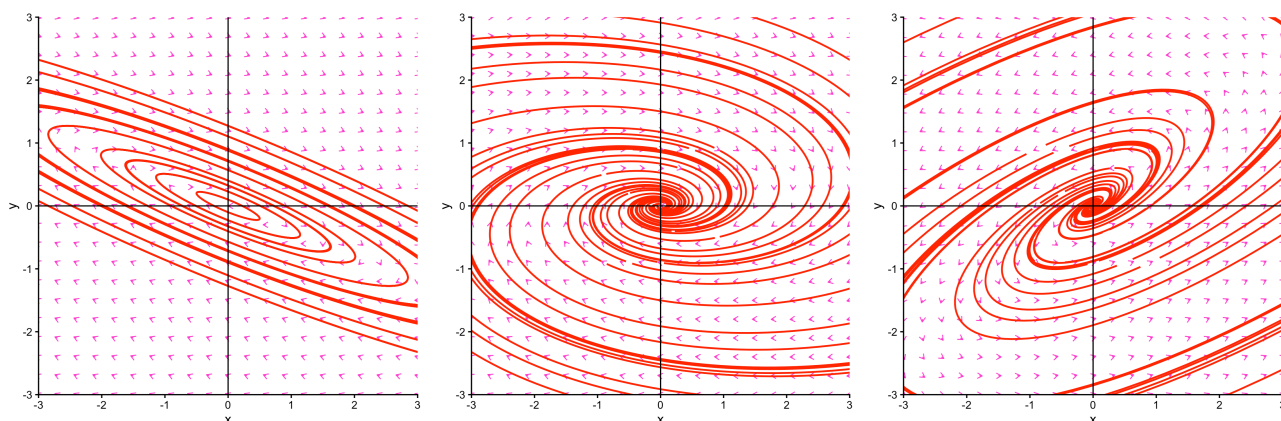


图 15: 上面的三幅图分别对应了矩阵 A_1, A_2, A_3 在微分方程 $y'(t) = A_i y(t)$ 里的相图.

- **情况三: 矩阵 A 不可对角化:** 在前面的几种情形中, 我们都可以找到足够多的特征向量, 从而利用特征向量方向来描述相图. 然而, 当矩阵 A 有重复特征值但缺少足够多的特征向量时, 矩阵无法对角化. 此时我们需要使用广义特征向量, 而相图中也只会出现唯一的特征向量方向. 这类平衡点附近的相图类型被称为**退**



化节点 (Improper Node). 在 2×2 矩阵 A 中, A 不可对角化的条件是存在代数重数为 2, 但几何重数为 1 的特征值 λ . 我们记其广义特征向量为 $\mathbf{u} \in K_1, \mathbf{v} \in K_2 \setminus K_1$. 利用广义特征向量的知识, 我们知道此时微分方程组 $\mathbf{y}'(t) = A\mathbf{y}(t)$ 的解满足

$$\mathbf{y}(t) = c_1 e^{\lambda t} \mathbf{u} + c_2 e^{\lambda t} (\mathbf{v} + t\mathbf{u}), \quad c_1, c_2 \in \mathbb{R}.$$

当 $\lambda < 0$ 且 $t \rightarrow \infty$ 时, 虽然 $\mathbf{y}(t)$ 趋近于 $\mathbf{0}$, 但是包含 $te^{\lambda t}\mathbf{u}$ 一项会影响轨线接近原点的方向. 大多数轨线在靠近原点时会变得越来越接近唯一的特征向量方向, 即 $\mathbf{u}$ 的方向. 所以在相图上我们会看到很多轨线弯曲着靠近原点, 并且最终都几乎沿着同一个方向进入原点:

定理

定理 6.9. 设 $\mathbf{y}'(t) = A\mathbf{y}(t)$ 中 λ 为一缺陷特征值.

- 若 $\lambda < 0$, 我们称 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 为渐进稳定的退化节点;
- 若 $\lambda > 0$, 我们称 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 为不稳定的退化节点.

下面的两幅图展示了此时系统 $\mathbf{y}'(t) = A\mathbf{y}(t)$ 在原点附近的相图:

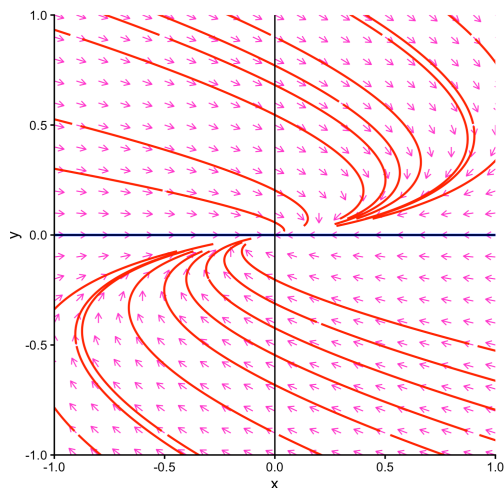


图 16: $A = \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, 此时 A 不可对角化且特征值为负数, $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 为渐进稳定的退化节点.

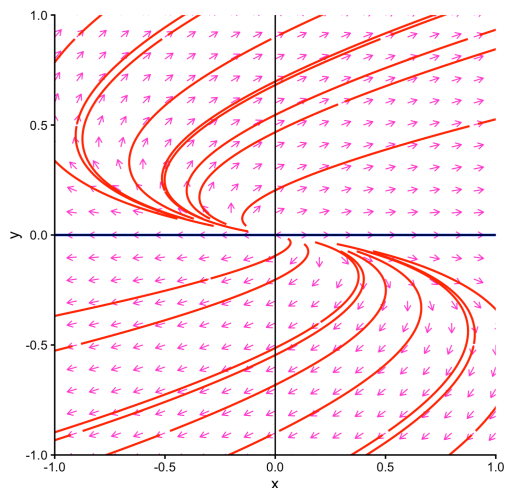


图 17: $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, 此时 A 不可对角化且特征值为正数, $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 为不稳定的退化节点.

此时读者不妨回忆第三章第 4 节的课后习题第一题: 现在如果再回去看这一道题, 是不是就小菜一碟了呢?

我们把本节里讨论过的平衡点 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 的稳定性以及其对应的相图类型总结成了以下的表格, 方便读者快速记忆:



特征值情况	相图类型	稳定性
$\lambda_1, \lambda_2 < 0$	稳定节点	渐近稳定
$\lambda_1, \lambda_2 > 0$	不稳定节点	不稳定
$\lambda_1 < 0 < \lambda_2$	鞍点	不稳定
$a \pm bi, a < 0$	稳定螺旋点	渐近稳定
$a \pm bi, a > 0$	不稳定螺旋点	不稳定
$\pm bi$	中心点	Lyapunov 稳定但非渐近稳定
$\lambda < 0, A$ 不可对角化	稳定退化节点	渐近稳定
$\lambda > 0, A$ 不可对角化	不稳定退化节点	不稳定

表 1: 二维线性系统 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$ 中原点的相图类型与稳定性分类

例题

例题 6.9 (LRC 振荡电路). 此时我们重温本章第 3 节的课后习题第一题: 即在串联 LRC 电路中, 有电阻 R , 电容 C , 与电感 $L (L, R, C > 0)$. 电路中的电流 $I(t)$ 随时间 t 的变化关系满足微分方程

$$LI''(t) + RI'(t) + \frac{1}{C}I(t) = 0.$$

我们接下来探讨一下这个微分方程的平衡点以及其附近的稳定性.

解答 6.9. 我们设 $y_1(t) = I(t), y_2(t) = I'(t)$. 那么原本的微分方程可以很容易地写作

$$\begin{pmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{1}{CL} & -\frac{R}{L} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \end{pmatrix}.$$

此时矩阵 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{1}{CL} & -\frac{R}{L} \end{pmatrix}$ 可逆, 因此 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 为唯一的平衡点. 我们现在便要分析其附近的相图. 首先, A 的特征多项式为

$$C_A(x) = \det \begin{pmatrix} -x & 1 \\ -\frac{1}{CL} & -\frac{R}{L} - x \end{pmatrix} = x^2 + \frac{R}{L}x + \frac{1}{CL}.$$

其 Δ 判别式为 $\Delta = b^2 - 4ac = \frac{R^2}{L^2} - \frac{4}{CL}$. 根据 Δ 的符号, 我们将知道 A 的特征值为实数还是复数.

• 若 $\Delta > 0$, 此时 A 的特征值为实数. 其两解为

$$\lambda_1 = \frac{-\frac{R}{L} + \sqrt{\frac{R^2}{L^2} - \frac{4}{CL}}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{-\frac{R}{L} - \sqrt{\frac{R^2}{L^2} - \frac{4}{CL}}}{2}.$$

不难发现, $\lambda_2 < 0$. 同时

$$\sqrt{\frac{R^2}{L^2} - \frac{4}{CL}} < \frac{R}{L},$$



因此 $\lambda_1 < 0$. 此时 A 的两个特征值为不同的负数, 因此 $y(t) = 0$ 为渐近稳定的节点.

• 若 $\Delta = 0$, 此时 A 的特征值为

$$\lambda_1 = \lambda_2 = -\frac{R}{2L}.$$

由于其特征值为负数, 因此 $y(t) = 0$ 为渐近稳定的节点 (其实此时矩阵 A 不可对角化. 因此严格来说此时 $y(t) = 0$ 为一稳定退化节点).

• 若 $\Delta < 0$, 那么此时 A 的特征值为一对共轭复数:

$$\lambda_1 = -\frac{R}{2L} + \frac{\sqrt{-\frac{R^2}{L^2} + \frac{4}{CL}}}{2}i, \quad \lambda_2 = -\frac{R}{2L} - \frac{\sqrt{-\frac{R^2}{L^2} + \frac{4}{CL}}}{2}i.$$

此时复数特征值的实部为负数, 因此 $y(t) = 0$ 为渐进稳定的螺旋点.

上面的三种情况分别对应了三种物理情景:

- (i) 若 $\Delta > 0$, 系统处于过阻尼 (Overdamped) 状态, 即电流逐步衰减为零;
- (ii) 若 $\Delta = 0$, 系统处于临界阻尼 (Critically damped) 状态, 电流同样逐步衰减为零;
- (iii) 若 $\Delta < 0$, 系统处于欠阻尼 (Underdamped) 状态, 此时电流产生震荡, 并衰减为零.

下面的三幅图便分别对应了三种不同的情况:

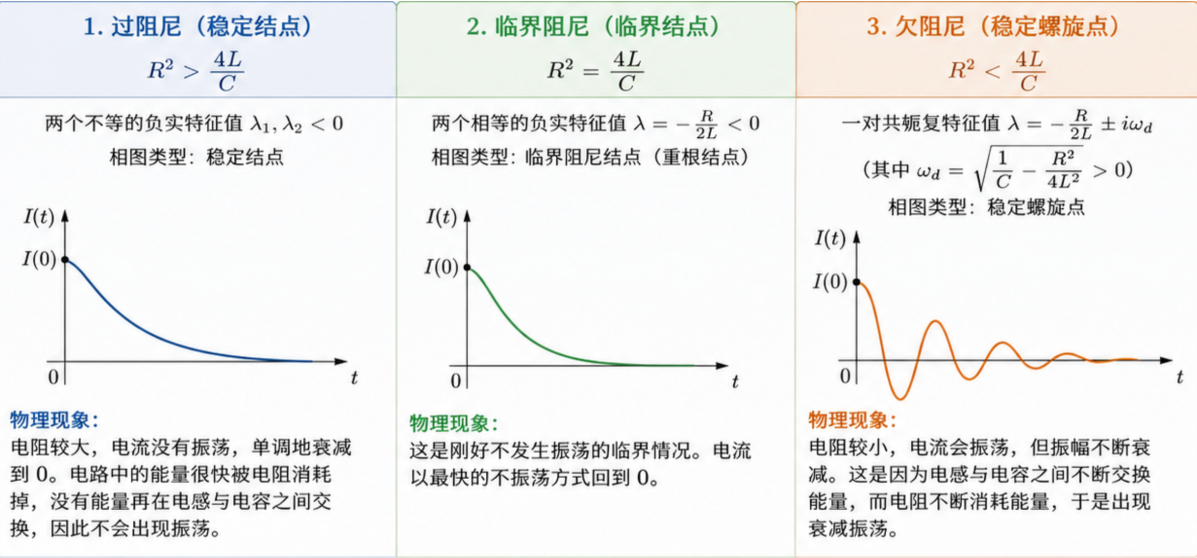


图 18: LRC 振荡电路中的三种情况.



6.4 练习

1. [分岔论初步] 回顾我们最开始提到的微分方程 $x'(t) = x^2 - 1$, 我们绘制出了如下的相图:

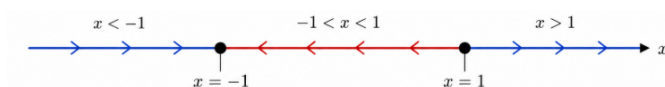


图 19: 微分方程 $x'(t) = x^2 - 1$ 的相图

现在, 我们引入一个变量 μ , 然后研究微分方程 $x'(t) = f(x, \mu) = x^2 - \mu, \mu \geq 0$, 那么不难发现 $x = \pm\sqrt{\mu}$ 即为两个平衡点. 此时我们想知道: μ 的取值会如何影响平衡点的位置及性质呢? 因此在 (μ, x) 平面中平衡点便是曲线 $x = \sqrt{\mu}$ 与曲线 $x = -\sqrt{\mu}$. 根据我们前面的讨论, $x = \sqrt{\mu}$ 为不稳定平衡点, 因此我们将曲线 $x = \sqrt{\mu}$ 绘制成虚线; $x = -\sqrt{\mu}$ 为渐近稳定的平衡点, 我们将曲线绘制成实线. 如此一来, 我们便得到了一个**分岔图 (Bifurcation Diagram)**:

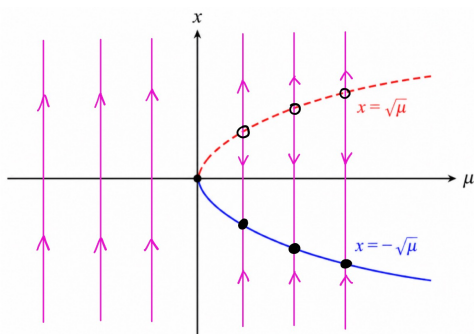


图 20: $x'(t) = x^2 - \mu$

我们称其为**鞍结分岔 (Saddle Node Bifurcation)**. 其中粉色的竖直箭头即可表示当 μ 为确定值时系统解的运动方向, $(x, \mu) = (0, 0)$ 的位置便是一个分岔点.

(i) [跨临界分岔 (Transcritical Bifurcation)] 类比我们上面的推理, 现在我们设 $x'(t) = f(x, \mu) = x^2 - \mu x, \mu \in \mathbb{R}$. 先求出这个微分方程的平衡点, 讨论其稳定性, 然后尝试画出这个系统的分岔图.

(ii) [Pitchfork 分岔 (Pitchfork Bifurcation)] 类比我们上面的推理, 现在我们设 $x'(t) = f(x, \mu) = x^3 - \mu x, \mu \in \mathbb{R}$. 先求出这个微分方程的平衡点, 讨论其稳定性, 然后尝试画出这个系统的分岔图.

在一维系统 $x'(t) = f(x, \mu)$ 中, 平衡点 x^* 的稳定性由 $f_x(x^*, \mu)$ 的符号决定. 当这个导数在某个参数值处变为 0 时, 系统可能发生分岔. 在高维系统 $x'(t) = F(x, \mu)$ 中, 一维导数 $f_x(x^*, \mu)$ 便由其 *Jacobi* 矩阵 $D_x F(x^*, \mu)$ 所取代. 此时平衡点的稳定性由该矩阵的特征值决定: 当特征值穿过虚轴时, 系统的相图结构可能发生改变. 比如当实特征值穿过 0 时可能出现鞍结分岔 (saddle-node bifurcation); 当一对共轭复特征值穿过虚轴时可能出现 Hopf 分岔 (Hopf bifurcation).



2. 考虑二维线性系统 $\mathbf{y}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{y}(t)$, $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$. 令

$$p = \text{tr}(\mathbf{A}) = a + d, \quad q = \det(\mathbf{A}) = ad - bc, \quad \Delta = p^2 - 4q,$$

(i) 将下列条件与平衡点 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 的稳定性配对:

条件	稳定性
(1) $q > 0, p < 0$	(A) 不稳定
(2) $p = 0, q > 0$	(B) 渐近稳定
(3) $q < 0$ 或 $p > 0$	(C) Lyapunov 稳定但非渐近稳定

(ii) 将下列条件与平衡点 $\mathbf{y}(t) = \mathbf{0}$ 处相应的相图类型配对:

条件	相图类型
(1) $q < 0$	(A) 中心点
(2) $q > 0, \Delta > 0$	(B) 螺旋点
(3) $q > 0, \Delta < 0, p \neq 0$	(C) 鞍点
(4) $q > 0, p = 0$	(D) 结点

3. [带电粒子在匀强磁场中的运动] 设一带电粒子在 xy 平面内运动, 已知存在垂直于直面向外的匀强磁场, 且粒子的重力和空气阻力忽略不计.

(i) 若粒子在 x, y 方向上的速度分量 $v_x(t), v_y(t)$ 满足

$$\begin{cases} v'_x(t) = \omega v_y(t) \\ v'_y(t) = -\omega v_x(t) \end{cases}, \quad \omega \text{ 为常数.}$$

求出 $v_x(t), v_y(t)$ 的通解, 并判断平衡点的稳定性, 绘制出平衡点附近的相图;

(ii) 若粒子在 x, y 方向上的速度分量 $v_x(t), v_y(t)$ 满足

$$\begin{cases} v'_x(t) = -\alpha v_x(t) + \omega v_y(t) \\ v'_y(t) = -\omega v_x(t) - \alpha v_y(t) \end{cases}, \quad \alpha, \omega \text{ 为常数.}$$

求出 $v_x(t), v_y(t)$ 的通解, 并判断平衡点的稳定性, 绘制出平衡点附近的相图.



6.5 非线性系统与线性化

在本节里面, 我们将学习非线性系统的稳定性以及相图. 我们前面提到的 Lorenz 方程便是一个很好的非线性系统的例子:

$$\begin{pmatrix} x'(t) \\ y'(t) \\ z'(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma(y - x) \\ x(\rho - z) - y \\ xy - \beta z(t) \end{pmatrix}, \quad \sigma, \rho, \beta \in \mathbb{R}.$$

由于 xz, xy 项的出现, 使得这个系统成为了非线性系统. 这样一来最直接的结果便是矩阵 A 的结构就变复杂了:

$$\begin{pmatrix} x'(t) \\ y'(t) \\ z'(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & \sigma & 0 \\ \rho & -1 & -x(t) \\ y(t) & 0 & -\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \\ z(t) \end{pmatrix}.$$

因此我们为了简化数学符号, 我们随后会将 t 略去. 类似地, 为了方便理解, 我们不妨先考虑一元函数的情况. 假设我们有微分方程 $x'(t) = f(x)$, 且 x^* 为平衡点. 因此 $f(x^*) = 0$. 我们令 $u(t) = x(t) - x^*$, 那么 $u'(t) = x'(t)$, 且在系统 $u'(t) = f(u)$ 中 $u = 0$ 便是一个平衡点. 因此我们考虑 $f(x)$ 在 x^* 附近的 Taylor 展开式:

$$f(x) = f(u + x^*) = f(x^*) + uf'(x^*) + \frac{1}{2}u^2f''(x^*) + \frac{1}{6}u^3f'''(x^*) + \dots$$

结合 $u'(t) = x'(t) = f(x)$, $f(x^*) = 0$, 我们有

$$u'(t) = uf'(x^*) + O(u^2).$$

当 x 很接近 x^* 时, 我们可以类比函数在某一点处的切线. 此时我们可以忽略二次项的影响, 因而我们便有 $u'(x) = uf'(x^*)$. 这样的过程也被称作是**线性化 (Linearization)**. 这样的过程对于一个多元函数同样适用. 如果我们设 $\mathbf{x}'(t) = f(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $f = (f_1, \dots, f_n)^\top$, 那么其线性化结果为

$$\mathbf{u}'(t) = \mathcal{J}\mathbf{u}(t),$$

其中 $\mathcal{J}$ 即为函数 f 在 x^* 处的 Jacobi 矩阵:

$$\mathcal{J} = \mathcal{J}_f(\mathbf{x}^*) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*}.$$

这样一来, 对于一个非线性系统而言, 在每一个平衡点附近我们便有了形如 $\mathbf{y}'(t) = A\mathbf{y}(t)$ 的常数微分方程组. 因此, 我们此时便想知道 $\mathcal{J}$ 在每一个平衡点的特征向量与特征值. 通过我们以前的学习, 我们自然会猜测: 若特征值的实部大于零, 则平衡点不稳定; 若特征值的实部小于零, 则平衡点渐近稳定.

定理

定理 6.10. 在非线系统 $\mathbf{x}'(t) = f(\mathbf{x}(t))$ 中, 设 $\mathbf{x}^*$ 为一平衡点, $\mathcal{J}$ 为系统在该点的线性化矩阵. 若 $\mathcal{J}$ 存在实部大于零的特征值, 则 $\mathbf{x}^*$ 不稳定; 若 $\mathcal{J}$ 的所有特征向量的实部均小于零, 则 $\mathbf{x}^*$ 渐近稳定.

在平衡点 $\mathbf{x}^*$ 处, 我们定义系统关于 $\mathbf{x}^*$ 的**稳定流形 (Stable Manifold)**为所有实部小于零的特征值对应的特



征向量的线性组合, 记作 E^s ; **不稳定流形 (Unstable Manifold)** 为所有实部大于零的特征值对应的特征向量的线性组合, 记作 E^u ; 以及 **中心流形 (Centre Manifold)** 为所有实部等于零的特征值对应的特征向量的线性组合, 记作 E^c . 对于非线性系统, 真正的稳定流形、不稳定流形和中心流形一般是弯曲的流形, 它们在平衡点处分别与 E^s, E^u, E^c 相切.

为了引出接下来的定理, 我们先定义一种特殊的平衡点:

定义

定义 6.8. 若在平衡点 $\mathbf{x}^*$ 处的线性化矩阵 $\mathcal{J}$ 没有纯虚数特征值, 我们则称 $\mathbf{x}^*$ 为 **双曲平衡点 (Hyperbolic Equilibrium Point)**.

双曲平衡点的重要性在于: 它排除了平衡点处的中心流形. 也就是说, 线性化矩阵 $\mathcal{J}$ 的每一个特征方向都对应明确的指数增长或指数衰减 (对应实部为正的的特征值和实部为负的特征值). 因此, 平衡点附近的动力学主要由线性化系统决定, 而高阶非线性项只会改变轨线的具体形状, 不会改变其基本拓扑结构. 一个自然的问题便是: 非线性系统在双曲平衡点附近是否可以用其线性化系统来描述?

定理

定理 6.11 (Hartman-Grobman 定理). 设多元函数 $f(\mathbf{x}(t))$ 连续且可导, 非线性系统 $\mathbf{x}'(t) = f(\mathbf{x}(t))$ 在 $\mathbf{x}^*$ 处为双曲平衡点. 那么该系统在 $\mathbf{x}^*$ 附近与对应的线性化系统 $\mathbf{x}'(t) = \mathcal{J}\mathbf{x}(t)$ 在 $\mathbf{x}^*$ 附近局部拓扑共轭. 即二者有着相同的局部相图类型.

它告诉我们, 在双曲平衡点附近, 非线性系统的相图与线性化系统的相图在拓扑意义下相同. 因此我们对于这样的平衡点而言只需要研究其线性化系统即可.

例题

例题 6.10. 设非线性系统满足

$$\begin{pmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \end{pmatrix} = f(\mathbf{y}(t)) = \begin{pmatrix} y_1(1 - y_1 - y_2) \\ y_2(3 - 2y_1 - 4y_2) \end{pmatrix}.$$

求出该系统在平衡点附近的稳定性及相图类型.

解答 6.10. 我们首先找出该系统的所有平衡点, 因此我们将求解

$$\begin{cases} y_1 - y_1^2 - y_1 y_2 &= 0 \\ 3y_2 - 2y_1 y_2 - 4y_2^2 &= 0 \end{cases}.$$

在此我们分类讨论: 若 $y_1 = 0, y_2 = 0$, 那么显然 $(0, 0)$ 为一个稳定点; 其次我们设 $y_1 = 0, y_2 \neq 0$, 因此我们有 $3y_2 - 4y_2^2 = 0, y_2 = \frac{3}{4}$. 因此 $(0, \frac{3}{4})$ 也为一个平衡点; 我们随后设 $y_1 \neq 0, y_2 = 0$. 那么 $y_1(1 - y_1) = 0, y_1 = 1$. 则 $(1, 0)$ 也为一个平衡点. 最后我们设 $y_1 \neq 0, y_2 \neq 0$. 因此 $1 - y_1 - y_2 = 0, 3 - 2y_1 - 4y_2 = 0$. 即 $y_1 = y_2 = \frac{1}{2}$. 因此这个系统中一共有四个平衡点: $(0, 0); (0, \frac{3}{4}); (1, 0); (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.



随后我们先求出该系统的 *Jacobi* 矩阵. 令 $f_1(y_1, y_2) = y_1(1 - y_1 - y_2)$, $f_2(y_1, y_2) = y_2(3 - 2y_1 - 4y_2)$. 那么

$$\mathcal{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial y_1} & \frac{\partial f_1}{\partial y_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial y_1} & \frac{\partial f_2}{\partial y_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - 2y_1 - y_2 & -y_1 \\ -2y_2 & 3 - 2y_1 - 8y_2 \end{pmatrix}.$$

我们分别将 4 个平衡点带入 *Jacobi* 矩阵:

$$\mathcal{J}(0,0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

此时的矩阵有两个特征值 $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 3$. 因此根据 *Hartman-Grobman* 定理, 该系统在 $(0,0)$ 附近不稳定;

$$\mathcal{J}(0, \frac{3}{4}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & 0 \\ -\frac{3}{2} & -3 \end{pmatrix}.$$

此时的矩阵有两个特征值 $\lambda_1 = \frac{1}{4}, \lambda_2 = -3$. 因此根据 *Hartman-Grobman* 定理, 该系统在 $(0, \frac{3}{4})$ 处为不稳定的鞍点;

$$\mathcal{J}(1,0) = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

此时的矩阵有两个特征值 $\lambda_1 = -1, \lambda_2 = 1$. 因此根据 *Hartman-Grobman* 定理, 该系统在 $(1,0)$ 处为不稳定的鞍点;

$$\mathcal{J}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -1 & -2 \end{pmatrix}.$$

此时的矩阵有两个负数特征值 $\lambda = \frac{1}{4}(-5 \pm \sqrt{17})$, 因此根据 *Hartman-Grobman* 定理, 该系统在 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 处为渐近稳定的节点.

如果我们把整个系统在 $\mathbb{R}^2$ 内的大致相图画出来, 便会得到下图:

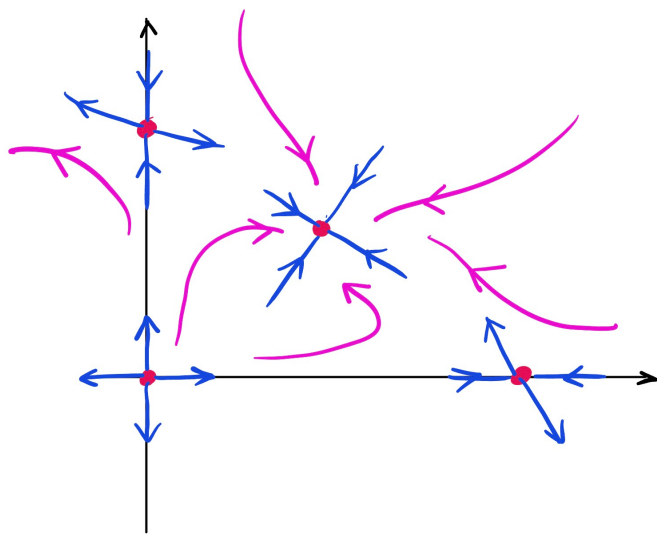


图 21: 该系统的大致相图: 红色的点为平衡点, 蓝色箭头为特征向量及其方向, 粉色箭头为大致相图轨迹.



6.5 练习

1. 求出下面四个非线性系统中的平衡点; 当平衡点为双曲平衡点时判断平衡点的稳定性, 并画出大致相图.

$$\begin{aligned} \text{(a). } \begin{pmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} y_2 \\ 8y_1 - 2y_2^3 \end{pmatrix} & \text{(b). } \begin{pmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 2y_2(2 - y_1) \\ y_2^2 - 2y_1 + 2 \end{pmatrix} \\ \text{(c). } \begin{pmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} y_2 \\ -\sin(y_1) - y_2 \end{pmatrix} & \text{(d). } \begin{pmatrix} y_1'(t) \\ y_2'(t) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} y_1(3y_2^2 + y_1^2 - 1) \\ y_2(1 - 3y_1^2 - y_2^2) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

2. [Lotka-Volterra 方程组] 设 $y_1(t), y_2(t)$ 满足微分方程组

$$\begin{cases} y_1'(t) = ay_1 - \frac{a}{K}y_1^2 - by_1y_2 \\ y_2'(t) = -cy_2 + dy_1y_2 \end{cases},$$

其中 a, b, c, d, K 均为大于零的常数.

(i) 求出该系统的所有平衡点, 并分析所有双曲平衡点的稳定性.

(ii) 如果将该方程视为生态系统中种群 y_1, y_2 随时间的变化关系, 不同的 a, b, c, d, K 的取值以及种群 y_1, y_2 的初始数量会对系统产生什么样的影响?

3. [三体问题中的 Lagrange 点] 我们考虑一个简化版的三体问题: 假设存在两个天体 M_1, M_2 , 其质量分别为 $M_1 = 1 - \mu, M_2 = \mu, M_1 > M_2 > 0$. 在此基础上添加一质量不计的小型天体 M_3 . 我们建立旋转坐标系 xyz , 使得 M_1, M_2 的位置固定在点 $(-\mu, 0, 0), (1 - \mu, 0, 0)$ 处. 我们设 M_3 的轨迹方程为 $(x(t), y(t), z(t)) = (x, y, z)$, 其速度向量为 (x', y', z') , 其加速度向量为 (x'', y'', z'') . 定义

$$d = \sqrt{(x + \mu)^2 + y^2 + z^2}, \quad r = \sqrt{(x - 1 + \mu)^2 + y^2 + z^2}.$$

那么根据物理学规律, 我们有如下的微分方程组:

$$\begin{cases} x'' = 2y' + \Omega_x \\ y'' = -2x' + \Omega_y, \\ z'' = \Omega_z \end{cases} \quad (6.4)$$

其中 $\Omega = \frac{1-\mu}{d} + \frac{\mu}{r} + \frac{x^2+y^2}{2}$ 为势能函数, $\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z$ 为势能函数关于 x, y, z 的偏导数. 若 M_3 在某一点 (x_0, y_0, z_0) 处的速度与加速度均为零 (即 $x' = y' = z' = x'' = y'' = z''|_{x=x_0} = 0$), 我们则称 (x_0, y_0, z_0) 为系统的一个 Lagrange 点.

(i) 证明系统(6.4)中的所有 Lagrange 点的坐标均位于 xy 平面内;



(ii) 求出两个满足 y 坐标不为零的 Lagrange 点. 将这两个点记作 L_4, L_5 . 这两个点与 M_1, M_2 的位置之间有着什么样的几何关系?

(iii) 当 $y = z = 0$ 时, 系统同样存在另外 3 个 Lagrange 点: L_1, L_2, L_3 . 写出该情况下 x 满足的关系式 (此时 x 没有通解, 我们只能借助 *Newton Raphson* 或 *Gradient Descent* 算法来求出数值解);

(iv) 设 $(x_0, y_0, 0)$ 为 $L_i, i = 1, \dots, 5$ 的坐标. 为研究其稳定性, 我们在该点施加一微小扰动: $(x_0 + \xi, y_0 + \eta, 0)$. 此时系统满足微分方程 $\mathbf{y}' = \mathbf{A}\mathbf{y}$:

$$\begin{pmatrix} \xi' \\ \eta' \\ \xi'' \\ \eta'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \Omega_{xx} & \Omega_{xy} & 0 & 2 \\ \Omega_{yx} & \Omega_{yy} & -2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \\ \xi' \\ \eta' \end{pmatrix}.$$

• 设 $i = 1, 2, 3$:

– (a) 通过判断 $\mathbf{A}$ 的特征值实部的符号, 解释为什么 L_1, L_2, L_3 为不稳定的节点.

• 设 $i = 4, 5$:

– (a) 通过求出 $\mathbf{A}$ 的特征值, 解释为什么 L_4, L_5 为稳定的节点.

– (b) 当 $\mathbf{A}$ 的特征值为纯虚数时, 证明 M_1, M_2 的质量关系大约满足 $M_2 \leq 0.04M_1$.

太阳-木星系统提供了 L_4, L_5 稳定性的一个重要实际例子. 由于木星质量远小于太阳质量, 该系统满足 L_4, L_5 的稳定条件. 因此在木星轨道前方和后方约 60° 的区域便有大量小行星在此相对静止, 随木星一起绕太阳运动. 这些小行星被称为 *Trojan* 小行星 (特洛伊群).

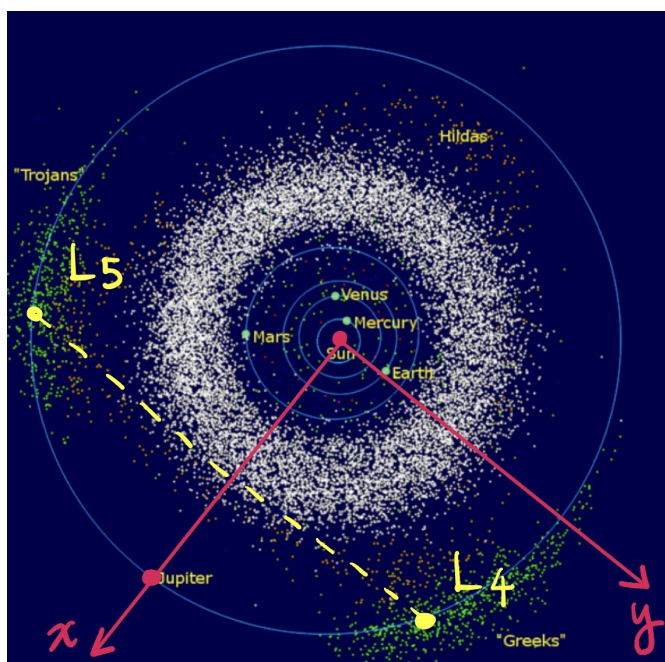


图 22: 太阳-木星系统的 L_4, L_5 (黄色点). Trojan 小行星在图中已用绿色标出.



6.6 特征函数与偏微分方程

特征函数与算子

我们在第三章中学习了矩阵的特征值与特征向量. 那么在本节中我们将尝试拓宽这一概念: 即此时我把 $Ax = \lambda x$ 中的 x 当成是一个函数 X , A 当成是一个线性算子 $\mathcal{L}$, 那么我们有

$$\mathcal{L}X = \lambda X.$$

其中我们称 X 为算子 $\mathcal{L}$ 的**特征函数 (Eigenfunctions)**, λ 为对应的特征值. 我们随后会发现, 特征函数与特征值对于一定条件下偏微分方程的求解具有很大的帮助. 我们不妨考虑如下的算子 $\mathcal{L}$, 使得对于一元函数 $X(x)$ 而言,

$$\mathcal{L}X(x) = -\frac{d^2}{dx^2}X(x).$$

算子 $\mathcal{L}$ 即为求函数 $X(x)$ 的二次导数相反数. 我们也可将上式简记为 $\mathcal{L}X(x) = -\Delta_x X$, 其中 Δ_x 为函数 $X(x)$ 的**Laplacian 算子**. 此时 $-\Delta_x$ 为线性算子, 因为对任意的函数 $X_1(x), X_2(x)$ 和常数 c 而言,

$$-\frac{d^2}{dx^2}(X_1(x) + cX_2(x)) = -\frac{d^2}{dx^2}X_1(x) - c \cdot \frac{d^2}{dx^2}X_2(x).$$

这样一来, 我们研究的对象便是

$$-\frac{d^2}{dx^2}X(x) = \lambda X(x).$$

一个很直观的例子便是 $X(x) = \sin(x)$. 我们知道 $\sin'(x) = \cos(x), \cos'(x) = -\sin(x)$, 因此 $-\frac{d^2}{dx^2} \sin(x) = \sin(x)$, 而此时我们便有

$$-\frac{d^2}{dx^2} \sin(x) = \sin(x) = \lambda \sin(x),$$

因此我们称函数 $\sin(x)$ 为 $-\Delta_x$ 算子的特征函数, 此时 $\lambda = 1$ 为与之对应的特征值. 我们设 $l > 0, n$ 为整数, 那么

$$-\frac{d^2}{dx^2} \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) = \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) = \lambda \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right),$$

我们也由此可知 $\sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right)$ 为算子 $-\Delta_x$ 的特征函数, 与其对应的特征值为 $\lambda = \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2$. 我们发现此时非零特征函数对应的特征值均为正数. 除此之外还有没有满足类似性质的函数呢?

定理

定理 6.12. 设 $X(x)$ 为定义在 $[a, b]$ 上的非零函数, 假设 $X(x) \in C^2([a, b])$, 且满足 $-\frac{d^2}{dx^2}X(x) = \lambda X(x)$. 若 $X(a) = X(b) = 0$, 则 $\lambda > 0$.

证明. 我们对 $-\frac{d^2}{dx^2}X(x) = \lambda X(x)$ 两边同时乘以 $X(x)$ 再取积分, 我们便有

$$\int_a^b -X(x) \frac{d^2}{dx^2}X(x) dx = \int_a^b \lambda X^2(x) dx.$$



对等式左边进行分部积分, 我们得到

$$\int_a^b -X(x) \cdot X''(x) dx = -X(x)X'(x) \Big|_{x=a}^{x=b} + \int_a^b X'(x) \cdot X'(x) dx.$$

根据定义, $X(a) = X(b) = 0$, 因此结合等式右边我们有

$$\int_a^b [X'(x)]^2 dx = \lambda \int_a^b X^2(x) dx,$$

故 $\lambda > 0$. ■

形如定理 6.12 中的边界条件 $X(a) = X(b) = 0$ 被我们称作 **Dirichlet 边界条件 (Dirichlet Boundary Condition)**. 除了 Dirichlet 边界条件外还有很多其它的边界条件, 比如 **Neumann 边界条件 (Neumann Boundary Condition)**. 此时 $X'(a) = X'(b) = 0$. 同时, 不要忘记 $-\frac{d^2}{dx^2}$ 同时也是线性算子, 因此我们可以尝试从线性代数的角度去学习它的性质. 回顾我们在内积空间中提到的内积: 设 $f(x), g(x)$ 为实数函数, 我们定义 $f(x), g(x)$ 在 $[a, b]$ 上的内积为

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \int_a^b f(x) \cdot g(x) dx, \quad (6.5)$$

若 $\langle f(x), g(x) \rangle = 0$, 我们称 $f(x), g(x)$ 在 $[a, b]$ 上正交. 类比对称矩阵, 我们可以给出 **自伴算子 (Self-adjoint Operator)** 的定义:

定义

定义 6.9. 取(6.5)为内积, 若对任意满足边界条件 $\mathcal{B}$ 的函数 X_1, X_2 , 都有 $\langle \mathcal{L}X_1, X_2 \rangle = \langle X_1, \mathcal{L}X_2 \rangle$, 我们则称算子 $\mathcal{L}$ 在 $\mathcal{B}$ 边界条件下是自伴的.

如果我们取 $\mathcal{L} = -\frac{d^2}{dx^2}$, $\mathcal{B}$ 为 Dirichlet 边界条件, 设 $X_1(a) = X_1(b) = 0, X_2(a) = X_2(b) = 0$. 那么

$$\begin{aligned} \langle -\frac{d^2}{dx^2} X_1(x), X_2(x) \rangle &= \int_a^b -X_1''(x) \cdot X_2(x) dx \\ &= -X_1'(x) \cdot X_2(x) \Big|_{x=a}^{x=b} + \int_a^b X_1'(x) \cdot X_2'(x) dx \\ &= \int_a^b X_1'(x) \cdot X_2'(x) dx. \end{aligned}$$

与此同时,

$$\begin{aligned} \langle X_1(x), -\frac{d^2}{dx^2} X_2(x) \rangle &= \int_a^b X_1(x) \cdot (-X_2''(x)) dx \\ &= -X_1(x) \cdot X_2'(x) \Big|_{x=a}^{x=b} + \int_a^b X_1'(x) \cdot X_2'(x) dx \\ &= \int_a^b X_1'(x) \cdot X_2'(x) dx. \end{aligned}$$

因此 $\langle -\frac{d^2}{dx^2} X_1(x), X_2(x) \rangle = \langle X_1(x), -\frac{d^2}{dx^2} X_2(x) \rangle$, 也就是说 $-\frac{d^2}{dx^2}$ 在 Dirichlet 边界条件下为自伴算子.



定理

定理 6.13. 设定义在 $[a, b]$ 上的函数满足 $-\frac{d^2}{dx^2}X(x) = \lambda X(x)$. 若 $X(x)$ 满足 *Dirichlet* 边界条件, 那么不同特征值对应的特征函数彼此正交.

证明. 我们设 $X_m(x), X_n(x)$ 均满足 *Dirichlet* 边界条件, 即 $X_m(a) = X_m(b) = X_n(a) = X_n(b) = 0$, 同时设 $-\frac{d^2}{dx^2}X_m(x) = \lambda_m X_m(x), -\frac{d^2}{dx^2}X_n(x) = \lambda_n X_n(x)$, 则

$$\lambda_m \langle X_m(x), X_n(x) \rangle = \langle -\frac{d^2}{dx^2}X_m(x), X_n(x) \rangle = \langle X_m(x), -\frac{d^2}{dx^2}X_n(x) \rangle = \overline{\lambda_n} \langle X_m(x), X_n(x) \rangle.$$

由于我们已经知道 $\lambda \in \mathbb{R}^+$, 因此 $(\lambda_m - \lambda_n) \cdot \langle X_m(x), X_n(x) \rangle = 0$. 若 $m \neq n$, 则 $\langle X_m(x), X_n(x) \rangle = 0$, 即不同特征值对应的特征函数正交. ■

定理 6.13 则立刻引出了一条推论:

推论

推论 6.6. 设 $l > 0, m, n$ 为整数. 若 $m \neq n$, 则

$$\int_0^l \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx = 0, \quad \int_0^l \cos\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx = 0.$$

证明. $\sin(\frac{m\pi x}{l})$ 即为满足 *Dirichlet* 边界条件的 $-\frac{d^2}{dx^2}X(x) = \lambda X(x)$ 的特征函数. $\cos(\frac{m\pi x}{l})$ 则为 *Neumann* 边界条件下的特征函数 (参考本节后练习第一题). ■

我们知道在学习矩阵的特征值与特征向量时, 我们可以将向量写成是由特征向量构成的线性组合. 那么在函数空间中我们能否也用特征函数构成的基底去表示其它函数呢? 我们由此引入 *Fourier* 级数的概念:

定义

定义 6.10. 设连续函数 $\varphi(x)$ 在区间 $[0, l]$ 上有定义, 我们定义 $\varphi(x)$ 在 $[0, l]$ 上的 **Fourier 正弦级数 (Fourier Sine Series)** 为

$$\varphi(x) := \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right), \quad (6.6)$$

其中 A_n 为常数.

对于确定的 m , 我们如果对等式(6.6)两边同时乘以 $\sin \frac{n\pi x}{l}$ 再取积分, 我们能够得到

$$\begin{aligned} \int_0^l \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \varphi(x) dx &= \int_0^l \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^l A_n \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx. \end{aligned}$$

求和与积分的顺序交换涉及到较多的实分析内容, 在此我们不做过多解释. 结合前面的到的推论, 我们知



道当 $m \neq n$ 时等式右边的积分为零. 因此

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int_0^l A_n \sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx = \frac{A_n}{2} \int_0^l 1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{l}\right) dx = A_n \cdot \frac{l}{2}.$$

因此我们可得到 A_n 的求解公式:

$$A_n = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(x) \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx.$$

一般地, 在 $-\frac{d^2}{dx^2}X(x) = \lambda X(x)$ 中, 设 $\lambda_1, \dots$ 为特征值, $X_1, \dots$ 为特征函数. 那么对于 $\varphi(x)$ 而言, 我们可以类比将向量分解成特征向量的线性组合的方式, 将 $\varphi(x)$ 写作特征函数的线性组合:

$$\varphi(x) = A_1 X_1(x) + A_2 X_2(x) + \dots$$

那么当 $X_i(x)$ 满足 Dirichlet 边界条件时, 特征函数之间彼此正交, 因此我们便有

$$A_n := \frac{\langle \varphi(x), X_n(x) \rangle}{\|X_n(x)\|^2} = \frac{\int_a^b \varphi(x) X_n(x) dx}{\int_a^b X_n^2(x) dx}.$$

利用特征函数求解偏微分方程

接下来, 我们将一起探究特征函数对于求解偏微分方程有着怎么样的作用. 我们此时不妨考虑满足 Dirichlet 边界条件的 **波动方程 (Wave Equation)**:

$$u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0, (0 \leq x \leq l), \quad u(0, t) = u(l, t) = 0, \quad u(x, 0) = \varphi(x), \quad u_t(x, 0) = \psi(x).$$

这里 $u(x, t)$ 可以理解为一根长度为 l 的弦在位置 x 处时间 t 时偏离平衡位置的位移. 边界条件表示弦的两端被牢牢地固定住. 为了能够求解 $u(x, t)$, 我们采取 **分离变量法 (Separation of Variables)**. 我们不妨假设其解满足 $u(x, t) = X(x)T(t)$, 那么此时在波动方程中我们便有

$$X(x)T''(t) - c^2 X''(x)T(t) = 0.$$

通过变形, 我们有

$$-\frac{T''(t)}{c^2 T(t)} = -\frac{X''(x)}{X(x)} = \lambda. \quad (6.7)$$

由于我们知道 $X(x)$ 与 t 无关, $T(t)$ 与 x 无关. 因此上式能够成立的前提便是 λ 为常数. 我们还根据前面的推论知道, $\lambda > 0$. 那么由此我们便得到了两组常微分方程:

$$-X''(x) + \lambda X(x) = 0, \quad T''(t) + c^2 \lambda T(t) = 0.$$

此时对于 X 而言, 我们发现 $X(0) = 0, X(l) = 0$, 因此 $-X''(x) = \lambda X(x)$ 满足 Dirichlet 边界条件. 根据我们前面的推理, 我们可以设其特征值与特征函数为

$$\lambda_n = \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2, \quad X_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right), n = 1, 2, \dots$$

对于 T 而言, 不难发现 $T''(t) + c^2 \lambda T(t) = 0$ 为一个二阶常微分方程. 我们将 λ 替换成 λ_n , 然后可以用本章



第3节的知识求解,得到

$$T_n(t) = A_n \cos\left(\frac{n\pi ct}{l}\right) + B_n \sin\left(\frac{n\pi ct}{l}\right).$$

因此对于每一个 n , 我们得到

$$u_n(x, t) = \left[A_n \cos\left(\frac{n\pi ct}{l}\right) + B_n \sin\left(\frac{n\pi ct}{l}\right) \right] \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right).$$

我们根据叠加定理可知, 这些解的线性组合仍然是满足条件的解, 故我们有

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[A_n \cos\left(\frac{n\pi ct}{l}\right) + B_n \sin\left(\frac{n\pi ct}{l}\right) \right] \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right),$$

其中 A_n, B_n 的系数取决于初始条件中的 $\varphi(x), \psi(x)$. 由 $u(x, 0) = \varphi(x)$ 可知, 我们令 $t = 0$, 得到

$$\varphi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right).$$

因此 A_n 正是边界条件 $\varphi(x)$ 中的 Fourier 正弦系数, 即

$$A_n = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx.$$

另一方面,

$$u_t(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[-A_n \cdot \frac{n\pi c}{l} \sin\left(\frac{n\pi ct}{l}\right) + B_n \cdot \frac{n\pi c}{l} \cdot \cos\left(\frac{n\pi ct}{l}\right) \right] \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right),$$

结合 $u_t(x, 0) = \psi(x)$, 我们有

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \cdot \frac{n\pi c}{l} \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right),$$

则

$$B_n = \frac{2}{n\pi c} \int_0^l \psi(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx.$$

定理

定理 6.14. 在 Dirichlet 边界条件下波动方程 $u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0, 0 \leq x \leq l, u(x, 0) = \varphi(x), u_t(x, 0) = \psi(x)$ 的解为

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[A_n \cos\left(\frac{n\pi ct}{l}\right) + B_n \sin\left(\frac{n\pi ct}{l}\right) \right] \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right).$$

其中

$$A_n = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx, \quad B_n = \frac{2}{n\pi c} \int_0^l \psi(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx.$$

除此以外, 我们还可以利用特征函数求出**热传导方程 (Heat Equation)**的解. 考虑满足 Dirichlet 边界条件的热传导方程:

$$u_t - k u_{xx} = 0, 0 \leq x \leq l, u(0, t) = u(l, t) = 0, u(x, 0) = \varphi(x),$$

其中 $k > 0$ 为热扩散系数. 物理上, 可以将 $u(x, t)$ 想象成一根长度为 l 的细杆在位置 x 处, 时间 t 时的温度.



Dirichlet 边界条件代表细杆的两端温度始终为 0. 我们同样可以采用分离变量法 $u(x, t) = X(x)T(t)$. 因此我们有

$$X(x)T'(t) - kX''(x)T(t) = 0 \implies -\frac{T'(t)}{kT(t)} = -\frac{X''(x)}{X(x)} = \lambda > 0.$$

因此对于 X 而言我们仍然有

$$\lambda_n = \left(\frac{n\pi}{l}\right)^2, \quad X_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right), n = 1, 2, \dots$$

此时的 $T(t)$ 满足

$$T'_n(t) + k\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 T_n(t) = 0,$$

其通解为

$$T_n(t) = C_n e^{-k(n\pi/l)^2 t}.$$

由此一来热传导方程的解即为

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-k(n\pi/l)^2 t} \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right).$$

此时如果我们将带入初始条件 $u(x, 0) = \varphi(x)$, 不难发现

$$\varphi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right), \quad C_n = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx.$$

定理

定理 6.15. 在 Dirichlet 边界条件下热传导方程 $u_t - ku_{xx} = 0, 0 \leq x \leq l, u(x, 0) = \varphi(x)$ 的解为

$$u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} u_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-k(n\pi/l)^2 t} \cdot \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right).$$

其中

$$C_n = \frac{2}{l} \int_0^l \varphi(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx.$$

6.6 练习

1. [Neumann 边界条件] 设 $X(x)$ 为定义在 $[a, b]$ 上的函数, 满足 $-\frac{d^2}{dx^2} X(x) = \lambda X(x)$. 假设 $X(x)$ 满足 Neumann 边界条件, 即 $X'(a) = X'(b) = 0$.

(i) 证明此时非零特征函数的特征值 λ 为正数;



(ii) 证明 $-\frac{d^2}{dx^2}$ 在 Neumann 边界条件下为自伴算子;

(iii) 求出此时的特征函数与特征值.

(iv) 在 Neumann 边界条件下, 波动方程和热传导方程的解有什么变化? 此时的边界条件在波动方程与热传导方程中有什么物理意义?

2. 分别求出函数 $f(x) = 1, f(x) = x$ 在区间 $[0, \pi]$ 上的 Fourier 正弦级数.

3. 在波动方程 $u_{tt} = c^2 u_{xx}, 0 \leq x \leq l$ 中, 边界条件满足 $u(0, t) = u_x(l, t) = 0, u(x, 0) = x, u_t(x, 0) = 0$. 求出此时 $u(x, t)$ 的解, 并将其表示成特征函数与特征值的复合形式.

4. 假设有一根长为 l 的金属棒. 在某时刻金属棒的温度为 $T = 1$, 随后其两端的温度被迅速地降为 $T = 0$. 此时对于金属棒上位置 x 处的温度 t 随时间的变化满足热传导方程 $u_t - ku_{xx} = 0$. 求出此时 $u(x, t)$ 的解, 并将其表示成特征函数与特征值的复合形式.



线性回归分析初步

数据在我们的生活中随处可见. 给定一组数据, 我们该如何研究数据中不同变量之间的关系? 在本章中, 我们将一起窥探线性回归分析: 通过建立变量之间的线性模型来对数据进行拟合.

7.1 * 统计推断基础

在我看来, 想要更好地了解线性回归的话就必然要有扎实的统计推断基础. 尽管这本书是一本关于线性代数的书籍, 但我的初衷却是想让读者学到尽可能多的应用知识. 在当今环境下, 学好统计推断迫在眉睫. 因此在这一节里面我将用最简捷明了的篇幅带领大家学习统计推断中的重要概念和结论.

概率测度

概率论为测度论的重要应用之一. 在此我将简要地叙述概率测度中的常见概念:

- **样本空间 (Sample Space):** 我们通常使用集合 Ω 来表示样本空间. 样本空间代表了对于我们的研究对象而言所有可能发生的事件. 比如当我们研究抛一枚硬币时, 我们便可以将样本空间记作 $\Omega = \{H, T\}$. 其中 H 表示硬币正面朝上; T 表示硬币背面朝上. 还比如当我们研究某物种种群的数量时, 我们便可以取样本空间为全体自然数, $\Omega = \{0, 1, 2, \dots\}$.
- **样本空间的 σ -代数 (Sigma Algebra):** 我们通常使用 $\mathcal{F}$ 表示. $\mathcal{F}$ 为由 Ω 中的元素所组成的新集合. 我们称 $\mathcal{F}$ 是样本空间的 Ω 的 σ -代数, 如果其满足以下三条性质:

- $\Omega \in \mathcal{F}$;
- 对任意的 $A \in \mathcal{F}$, 其关于 Ω 的补集 $\Omega \setminus A \in \mathcal{F}$;
- 若 $A_1, A_2, \dots \in \mathcal{F}$, 那么其并集 $\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i \in \mathcal{F}$.

在现阶段, 我们可以将 $\mathcal{F}$ 简单理解为将样本空间 Ω 中的元素进行任意交集, 并集与补集运算所得到的新集合. 那么对于抛一枚硬币而言, 此时 Ω 的 σ -代数即为 $\mathcal{F} = \{\{H\}, \{T\}, \{H, T\}, \emptyset\}$. 另外, 我们再定义 **Borel σ -代数 (Borel Sigma-Algebra)**, 简记为 $B(\mathbb{R})$, 且我们称其中的元素为 **Borel 集 (Borel Set)**. 在本书涉及的常见集合中, 例如区间、有限并、可数并、可数交等, 都可以视为 Borel 集. 我们不会涉及非 Borel 集的例子.

- **概率测度 (Probability Measure):** 我们通常使用 $\mathbb{P}$ 来表示概率测度. 概率测度 $\mathbb{P}$ 是定义在样本空间 Ω 的 σ -代数 $\mathcal{F}$ 上的函数. 对于 $A \in \mathcal{F}$, 我们记 $\mathbb{P}(A)$ 为事件 A 发生的概率. 概率测度满足以下性质:

 - 对任意的 $A \in \mathcal{F}$, $0 \leq \mathbb{P}(A) \leq 1$, 且 $\mathbb{P}(\Omega) = 1$;
 - 若 $A_1, A_2, \dots \in \mathcal{F}$ 且 $A_i \cap A_j = \emptyset, i \neq j$, 那么

$$\mathbb{P}\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{P}(A_i).$$



我们习惯性地把 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ 称为**概率空间 (Probability Space)**. 对于 $A, B \in \mathcal{F}$, 我们称事件 A, B 的交事件为 $A \cap B$, 即事件 A, B 同时发生; 我们称 A, B 的并事件为 $A \cup B$, 即事件 A, B 至少有一个发生. 若 $\mathbb{P}(A \cap B) = \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B)$, 我们则称事件 A, B **相互独立 (Independent)**, 也就是说事件 A 的发生不会影响到事件 B 的发生, 反之同样成立.

条件概率 (Conditional Probability) 也是我们重点研究的对象之一. 对于事件 $A, B \in \mathcal{F}$, 条件概率 $\mathbb{P}(A|B)$ 表示已知事件 B 发生的情况下事件 A 发生的概率. 其计算公式为

$$\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(A \cap B)}{\mathbb{P}(B)}.$$

同理, 我们有 $\mathbb{P}(B|A) = \frac{\mathbb{P}(B \cap A)}{\mathbb{P}(A)}$. 因此综合二式我们可以得到

$$\mathbb{P}(A|B) = \frac{\mathbb{P}(B|A)\mathbb{P}(A)}{\mathbb{P}(B)}.$$

此时, 若 A, B 相互独立, 我们便有 $\mathbb{P}(A|B) = \mathbb{P}(A)$, 更加清晰地诠释了事件 B 的发生不影响事件 A 的发生. 我们如果考虑样本空间 Ω 的一个划分: $\Omega = B_1 \cup B_2 \cup \cdots \cup B_n$, 且 $B_i \cap B_j = \emptyset$, 那么对于任意的事件 B , 我们可以求出 B 在 B_i 发生下的条件概率 $\mathbb{P}(B|B_i)$. 如果我们此时知道 $\mathbb{P}(B_i)$ 的概率, 我们便可以将其进行结合从而得到**全概率公式 (Law of Total Probability)**:

$$\mathbb{P}(B) = \mathbb{P}(B|B_1)\mathbb{P}(B_1) + \cdots + \mathbb{P}(B|B_n)\mathbb{P}(B_n).$$

那么, 由此我们便可以得出**Bayes 定理 (Bayes Theorem)**:

$$\mathbb{P}(B_i|B) = \frac{\mathbb{P}(B|B_i)\mathbb{P}(B_i)}{\mathbb{P}(B|B_1)\mathbb{P}(B_1) + \cdots + \mathbb{P}(B|B_n)\mathbb{P}(B_n)}.$$

随机变量

随机变量 (Random Variables) 为将样本空间中的元素映射到实数的一个函数. 我们通常用 X 来表示随机变量, 只不过此时随机变量的取值不再介于 0 到 1 之间, 而是可以根据我们的研究兴趣而自由选择. 比如在抛硬币中, 我们规定正面朝上时得 1 分, 反面朝上时得 0 分. 此时我们便有 $X(H) = 1, X(T) = 0$. 当然, 我们还有其它更多的方法去定义这个随机变量, 比如正面得 5 分等. 设 B 为任意一 Borel 集. 若函数 $X: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ 满足 $X^{-1}(B) := \{A \in \Omega : X(A) \in B\} \in \mathcal{F}$, 我们则称 X 为一随机变量.

该定义告诉我们 X 作为随机变量的充要条件为任意 Borel 集 B , 其原像为 $\mathcal{F}$ 中的元素. 在实践中, 我们往往将 B 取区间 $(-\infty, x]$. 即对所有的 $x \in \mathbb{R}$,

$$X^{-1}((-\infty, x]) = \{w \in \Omega : X(w) \leq x\} \in \mathcal{F}.$$

我们不妨回到最开始抛硬币的例子中: 设正面朝上得 1 分, 反面朝上得 0 分, 我们有 $X(H) = 1, X(T) = 0$. 那么对于 x 而言, 我们分三种情况讨论:

- 若 $x < 0$. 此时我们知道没有相应的事件 $A \in \Omega$ 使得 $X(A) < 0$, 那么此时的原像便为空集 $X^{-1}((-\infty, x]) = \emptyset$, 而我们前面知道 $\emptyset \in \mathcal{F}$;
- 若 $0 \leq x < 1$, 此时有 T 满足条件, 因为 $X(T) = 0$. 因此 $X^{-1}((-\infty, x]) = \{T\} \in \mathcal{F}$;



- 若 $x \geq 1$, 此时 H, T 均满足条件. 因此 $X^{-1}((-\infty, x]) = \{H, T\} = \Omega \in \mathcal{F}$.

由此我们得知 X 即为随机变量. 随机变量满足线性关系, 即当 X, Y 均为随机变量, a, b 均为常数时, $aX + bY$ 也为随机变量. 随机变量主要分为两类: **离散型随机变量 (Discrete Random Variables)** 与 **连续型随机变量 (Continuous Random Variables)**. 对于离散型随机变量而言, 其函数取值通常为整数: 即 $X = 0, 1, 2, 3, \dots$. 对于连续型随机变量而言, 其取值通常为一个连续的区间 $[a, b]$. 随机变量 X 的 **分布函数 (Distribution Function)**, 通常记作 $F(x)$, 被定义为是使得随机变量的取值小于 x 的概率, 即

$$F(x) := \mathbb{P}(\{w \in \Omega : X(w) \leq x\}),$$

我们也通常将其简记为 $\mathbb{P}(X \leq x)$. 根据定义, 分布函数的取值为 0 到 1 之间, 且单调递增. 在离散型随机变量中, 假设随机变量取得数值 i 的概率为 p_i , $\mathbb{P}(X = i) = p_i$. 那么

$$F(x) = \sum_{i \leq x} p_i,$$

此时 p_i 被称作是离散型随机变量 X 的 **概率质量函数 (Probability Mass Function)**. 而对于连续型随机变量而言, 加和的形式即被替换成了积分:

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(t) dt,$$

此时 $f(x)$ 也被称作是连续性随机变量 X 的 **概率密度函数 (Probability Density Function)**.

设 X 为随机变量, 我们假设随机变量 Y 为关于 X 的一元函数, 即 $Y = g(X)$. 我们假设函数 g 是单调且光滑的, 这样一来, 我们便知道 Y 的分布函数满足

$$F_Y(y) = \mathbb{P}(Y \leq y) = \mathbb{P}(g(X) \leq y) = \mathbb{P}(X \leq g^{-1}(y)),$$

其中 $g^{-1}(y)$ 为函数 g 的反函数. 那么由此一来我们便有

$$F_Y(y) = \int_{-\infty}^{g^{-1}(y)} f_X(x) dx.$$

再根据微积分基本定理, Y 的概率密度函数即可写作

$$f_Y(y) = \frac{d}{dy} F_Y(y) = \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{g^{-1}(y)} f_X(x) dx = f_X(g^{-1}(y)) \cdot \left| \frac{d}{dy} g^{-1}(y) \right|.$$

随机变量的期望与方差

对于一个随机变量而言, 我们定义其 **期望 (Expectation)**, 通常记作 $\mathbb{E}[X]$, 为

$$\mathbb{E}[X] = \sum_i i p_i, \text{ 若 } X \text{ 为离散型随机变量; } \mathbb{E}[X] = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx, \text{ 若 } X \text{ 为连续型随机变量,}$$

而对于关于 X 的连续函数 $g(X)$ 而言, 随机变量 $g(X)$ 的期望满足

$$\mathbb{E}[g(X)] = \sum_i g(i) p_i, \text{ 若 } X \text{ 为离散型随机变量; } \mathbb{E}[g(X)] = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) f(x) dx, \text{ 若 } X \text{ 为连续型随机变量.}$$

随机变量的期望同样满足线性关系. 设 X, Y 为随机变量, a, b 为常数, 则 $\mathbb{E}[aX + bY] = a\mathbb{E}[X] + b\mathbb{E}[Y]$. 我



们同时定义随机变量 X 的**方差 (Variance)**, 通常记作 $\text{Var}(X)$, 为

$$\text{Var}(X) = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])^2] := \mathbb{E}[X^2] - (\mathbb{E}[X])^2.$$

对于随机变量 X 和常数 c 而言, $\text{Var}(cX) = c^2 \text{Var}(X)$, $\text{Var}(c) = 0$. 对于随机变量而言, 有两个重要的不等式. 它们分别为**Markov 不等式 (Markov Inequality)**与**Chebyshev 不等式 (Chebyshev Inequality)**:

- Markov 不等式: 对于非负随机变量 X 而言, 设 $x \neq 0$, 则 $\mathbb{P}(X \geq x) \leq \frac{\mathbb{E}[X]}{x}$.
- Chebyshev 不等式: 对随机变量 X 和任意的 $x > 0$, 有 $\mathbb{P}(|X - \mathbb{E}[X]| \geq x) \leq \frac{\text{Var}(X)}{x^2}$.

我们最后给出随机变量的**矩母函数 (Moment Generating Function)**的定义: 对于随机变量 X 而言, 其矩母函数 $M_X(t)$, $t > 0$ 为

$$M_X(t) = \mathbb{E}[e^{tX}] = \begin{cases} \sum_i e^{ti} \cdot \mathbb{P}(X = i) & \text{若 } X \text{ 为离散型随机变量} \\ \int e^{tx} f_X(x) dx & \text{若 } X \text{ 为连续型随机变量} \end{cases}.$$

矩母函数和随机变量之间有着一一对应的关系. 这一点同概率密度 (质量) 函数一样. 不同的随机变量便对应着不同的矩母函数与概率密度 (质量) 函数.

随机变量的联合分布

对于多个随机变量而言, 我们同样可以定义它们的**联合分布函数 (Joint Distribution Function)**. 我们设 $X_1, X_2, \dots, X_n$ 为随机变量, 且 $X_1 \sim f_1(x), \dots, X_n \sim f_n(x)$, 那么联合分布函数 $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 的定义为

$$F(x_1, x_2, \dots, x_n) = \mathbb{P}(X_1 \leq x_1 \cap X_2 \leq x_2 \cap \dots \cap X_n \leq x_n).$$

若 $X_1, \dots, X_n$ 均为连续性随机变量, 那么存在唯一的函数 $f(x_1, \dots, x_n)$, 使得

$$F(x_1, \dots, x_n) = \int_{-\infty}^{x_1} \dots \int_{-\infty}^{x_n} f(x_1, \dots, x_n) dx_n \dots dx_1.$$

我们称 $f(x_1, \dots, x_n)$ 为 $X_1, \dots, X_n$ 的**联合密度函数 (Joint Density Function)**. 对于离散型随机变量而言我们只需要将积分替换成求和即可.

设 $X \sim f(x), Y \sim g(y)$ 为两个连续性随机变量, 令 $f(x, y)$ 为其联合密度函数. 我们此时可以定义 X, Y 的**边际密度函数 (Marginal Density Function)**:

$$f(y) := \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) dx, \quad f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y) dy.$$

若

$$F(x, y) = \mathbb{P}(X \leq x) \cdot \mathbb{P}(Y \leq y) = \int_{-\infty}^x f(x) dx \cdot \int_{-\infty}^y g(y) dy,$$

我们则称随机变量 X, Y 相互独立. 对于随机变量 X, Y 而言, 我们定义它们之间的**协方差 (Covariance)**为

$$\text{Cov}(X, Y) = \mathbb{E}[(X - \mathbb{E}[X])(Y - \mathbb{E}[Y])] = \mathbb{E}[XY] - \mathbb{E}[X]\mathbb{E}[Y],$$



其中

$$\mathbb{E}[XY] = \iint xyf(x, y)dxdy.$$

若 X, Y 相互独立, 则 $\mathbf{Cov}(X, Y) = 0$.

大数定律与中心极限定理

在本节里面我们将考虑一个随机变量列 $X_1, X_2, \dots$, 并研究其性质. 若 $X_1, X_2, \dots$ 独立, 且服从相同的概率密度函数 (概率质量函数) $f(x)$, 我们称 $\{X_n\}_{n=1}^{\infty}$ **独立同分布 (Independent and Identically Distributed)**. 通常记作 $X_1, X_2, \dots \stackrel{i.i.d.}{\sim} f(x)$. 独立同分布且期望存在的随机变量列满足**弱大数定律 (Weak Law of Large Numbers)**: 记 $\mathbb{E}[X_1] = \mathbb{E}[X_2] = \dots = \mu$,

$$\frac{1}{n}(X_1 + \dots + X_n) \xrightarrow{\mathbb{P}} \mu,$$

我们通常将 $\frac{1}{n}(X_1 + \dots + X_n)$ 记作**样本均值 (Sample Mean)**(或样本矩). 此时我们称样本均值**依概率收敛 (Convergence in Probability)**于 μ , 记作 $\bar{X}_n \xrightarrow{\mathbb{P}} \mu$. 随机变量列 $\{X_n\}$ 依概率收敛于 X 的严格定义为: 对任意的 $\varepsilon > 0$, 都有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(|X_n - X| > \varepsilon) = 0.$$

除了弱大数定律外, 还存在**强大数定律 (Strong Law of Large Numbers)**. 在强大数定律下样本均值**几乎处处收敛 (Almost Surely Convergence)**于 μ , 记作 $\bar{X}_n \xrightarrow{a.s.} \mu$. 随机变量列 $\{X_n\}$ 几乎处处收敛于 X 的严格定义为:

$$\mathbb{P}\left(\lim_{n \rightarrow \infty} X_n = X\right) = 1.$$

目前阶段读者不需要知道二者之间的差别. 如感兴趣, 欢迎阅读测度论相关的书籍. 我们再定义一种收敛类型: **弱收敛 (Weak Convergence)**, 通常记作 $\xrightarrow{d}$. 该收敛可以理解为是在分布函数层面上的收敛. 即若随机变量列 $\{X_n\}$ 弱收敛于 X , 那么设 F_n 为 X_n 的分布函数, F 为 X 的分布函数, 则

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F_n(x) = F(x).$$

中心极限定理 (Central Limit Theorem) 告诉我们, 对于期望 (μ) 和方差 (σ^2) 均存在的独立同分布随机变量列 $\{X_n\}$,

$$Z_n = \frac{\bar{X}_n - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \xrightarrow{d} N(0, 1),$$

即随机变量列 Z_n 弱收敛于正态分布 $N(0, 1)$ 的概率密度函数. 此时正态分布 $N(0, 1)$ 对应的概率密度函数即为

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}.$$

当我们知道了随机变量列 $\{X_n\}$ 的收敛性后, 我们还可以研究其变换 $\{g(X_n)\}$ 的收敛性. 假设 $g(x)$ 为连续函数, 且 X_n 弱收敛于 $X: X_n \rightarrow X$, 那么根据**连续映射定理 (Continuous Mapping Theorem)**, 我们有

$$g(X_n) \xrightarrow{d} g(X).$$



最大似然估计

我们在统计推断中, 往往会假设我们获得的样本符合独立同分布的特征. 我们记 $X_1, \dots, X_n \stackrel{i.i.d}{\sim} f(x; \theta)$. 其中 f 为随机变量的概率密度 (质量) 函数, 而 θ 为参数. 比如对于指数分布而言, 其概率密度函数为

$$f(x; \theta) = \frac{1}{\theta} e^{-x/\theta};$$

而对于正态分布而言, 其概率密度函数为

$$f(x; \mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-(x-\mu)^2/2\sigma^2}.$$

通常我们会假设我们已经知道了这组独立同分布随机变量所属的分布类型. 那么我们只需要估计出里面的参数 θ 便可以更好地了解其分布情况. 我们将这类问题称作是 **参数估计 (Parameter Estimation)**. 此时我们拥有的数据仅为 $X_1, \dots, X_n$ 这些观测到的样本, 我们定义参数 θ 的一个 **估计量 (Estimator)** 即为关于 $X_1, \dots, X_n$ 的一个函数. 比如样本均值 $\frac{1}{n}(X_1 + \dots + X_n)$ 即为一个估计量. 此外, 形式简单的 $X_1 + X_2$ 也为一个估计量. 我们用 **无偏性 (Unbiasedness)** 来衡量估计量的好坏. 若某估计量 $T(X_1, \dots, X_n)$ 满足 $\mathbb{E}[T(X_1, \dots, X_n)] = \theta$, 我们则称 $T(X_1, \dots, X_n)$ 为关于 θ 的 **无偏估计量 (Unbiased Estimator)**; 同时若估计量 $T(X_1, \dots, X_n)$ 依测度收敛于 θ , 我们则称 $T(X_1, \dots, X_n)$ 为关于 θ 的 **一致估计量 (Consistent Estimator)**. 比如在我们的例子中, 样本均值的期望满足

$$\mathbb{E} \left[\frac{1}{n}(X_1 + \dots + X_n) \right] = \frac{1}{n} (\mathbb{E}[X_1] + \mathbb{E}[X_2] + \dots + \mathbb{E}[X_n]) = \frac{1}{n} \cdot n\mu = \mu,$$

因此样本均值 $\bar{X}_n$ 为关于 μ 的无偏估计量.

最大似然估计 (Maximum Likelihood Estimator) 是目前使用最广泛的参数估计法之一. 对于给定的独立同分布样本 $X_1, \dots, X_n \stackrel{i.i.d}{\sim} f(x; \theta)$, 假设我们得出的样本观测值为 $x_1, \dots, x_n$. 那么该样本的似然函数为

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^n f(x_i; \theta).$$

我们可以将其看作是关于 θ 的一个函数. 那么在此情况下参数 θ 的最大似然估计量 $\hat{\theta}_{MLE}$ 即为使得似然函数 $L(\theta)$ 取得极大值时的 θ 取值:

$$\hat{\theta}_{MLE} = \arg \max_{\theta} L(\theta).$$

通常我们取似然函数的对数, 从而得到对数似然函数:

$$\ell(\theta) = \sum_{i=1}^n \log f(x_i; \theta),$$

然后结合对数函数的单调性, 最大似然估计量 $\hat{\theta}_{MLE}$ 同时也为使得对数似然函数取得最大值时 θ 的取值. 比如在服从两点分布的样本中, 假设参数为 θ , ($0 < \theta < 1$), 其概率质量函数为 $\theta^x(1-\theta)^{1-x}$, $x = 0, 1$. 那么我们有

$$\ell(\theta) = \sum_{i=1}^n \log \theta^{x_i} (1-\theta)^{1-x_i} = \sum_{i=1}^n x_i \log \theta + (1-x_i) \log(1-\theta),$$



对其求导得

$$\frac{\partial \ell}{\partial \theta} = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\theta} - \frac{1-x_i}{1-\theta},$$

求解 $\frac{\partial \ell}{\partial \theta} = 0$, 我们有

$$\sum_{i=1}^n \frac{x_i - \theta}{\theta(1-\theta)} = 0,$$

由于分母恒不为零, 因此 $\sum_{i=1}^n x_i - n\theta = 0$, 即 $\hat{\theta}_{MLE} = \bar{X}_n$. 因此我们称在两点分布中样本均值 $\bar{X}_n$ 即为参数 θ 得最大似然估计. 最大似然估计量满足不变性, 即若 $\hat{\theta}$ 为参数 θ 的最大似然估计量, 那么对于函数 $f(x)$ 而言, $f(\hat{\theta})$ 也同为 $f(\theta)$ 的最大似然估计量.

Fisher 信息

假设我们有独立同分布的样本 $X_1, X_2, \dots, X_n \stackrel{i.i.d}{\sim} f(x; \theta)$, 其中 θ 为参数. 在统计推断中, 我们经常需要引入 **正则条件 (Regularity Conditions)**:

- (i) 随机变量的概率密度 (质量) 函数的定义域与参数 θ 无关;
- (ii) 我们默认概率密度 (质量) 函数为关于参数 θ 的光滑函数.

在正则条件下, 我们能够给出有关参数 θ 的估计量 $T(\mathbf{X})$ 的一些性质: 我们定义样本 X_i 的 **Fisher 信息 (Fisher Information)** 为

$$\mathcal{I}_i(\theta) = \mathbb{E} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \theta} \log f(x_i; \theta) \right)^2 \right],$$

总样本的 Fisher 信息为

$$\mathcal{I}_n(\theta) = \mathbb{E} \left[\left(\frac{\partial}{\partial \theta} \log \prod_{i=1}^n f(x_i; \theta) \right)^2 \right].$$

根据 Bartlett 公式, Fisher 信息还可以写作

$$\mathcal{I}_n(\theta) = -\mathbb{E} \left[\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \log \prod_{i=1}^n f(x_i; \theta) \right].$$

Fisher 信息可用于对某一参数估计量的方差进行检验. 我们设 $T(\mathbf{X})$ 为关于以参数 θ 为变量的函数 $\tau(\theta)$ 的无偏估计量, 那么 $\text{Var}(T(\mathbf{X}))$ 存在一确定下界. 该下界也被称为 **Cramér-Rao 下界 (Cramér-Rao Lower Bound)**:

$$\text{Var}(T(\mathbf{X})) \geq \frac{[\tau'(\theta)]^2}{\mathcal{I}_n(\theta)}.$$

在参数估计中, $\mathcal{I}_i(\theta)$ 往往为未知量, 我们也可用其估计量 $\hat{\mathcal{I}}_i(\theta)$:

$$\hat{\mathcal{I}}_1(\theta) = -\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \log f(x_j; \hat{\theta}_{MLE}).$$



置信区间

不同于最大似然估计, **置信区间 (Confidence Interval)** 利用中心极限定理来构造一个区间 $(L(X), U(X))$, 使得在重复抽样的前提下, 参数 θ 包含在区间 $(L(X), U(X))$ 中的概率为 α . 在这里尤其注意的是真实参数 θ 为一定值, 因此不存在“区间 $(L(X), U(X))$ 包含参数 θ 的概率为 α ”这一说法, 因为当区间确定后只有两种可能性: 区间包含 θ 与区间不包含 θ . 对置信区间合理的解释是: 在重复实验的前提下, 计算每一次实验由结果得到的区间 $(L(X), U(X))$, 那么这些区间中大约有 $\alpha\%$ 比例的区间包含参数 θ .

在中心极限定理中, 我们已经知道

$$\sqrt{n} \cdot \frac{(\bar{X}_n - \mu)}{\sigma} \rightarrow N(0, 1),$$

那么根据定义, 对于期望 μ 而言, 此时一个 $1 - \alpha$ 置信水平的置信区间满足

$$\mathbb{P}(L(X) \leq \mu \leq U(X)) = 1 - \alpha.$$

在正态分布中, 我们定义 $z_{\alpha/2}$ 为 $N(0, 1)$ 中的 **上侧 $\alpha/2$ 分位点 ($\alpha/2$ Quantile)**, 即 $\mathbb{P}(X \geq z_{\alpha/2}) = \alpha/2$. 此时我们对中心极限定理进行改写, 关于 μ 的 $\alpha\%$ 置信区间即可写作

$$\left(\bar{X}_n - z_{\alpha/2} \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \quad \bar{X}_n + z_{\alpha/2} \cdot \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right).$$

在实践中, 我们往往无法得知 σ , 因此我们也经常将其替换成 σ 的无偏估计量 S_n :

$$S_n := \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X}_n)^2},$$

此时的置信区间为

$$\left(\bar{X}_n - t(n-1, \alpha/2) \cdot \frac{S_n}{\sqrt{n}}, \quad \bar{X}_n + t(n-1, \alpha/2) \cdot \frac{S_n}{\sqrt{n}} \right),$$

此时 $t(n-1, \alpha/2)$ 为带有 $n-1$ 个自由度的 t 分布的上侧 $\alpha/2$ 分位点. 感兴趣的读者欢迎阅读更多相关材料.

假设检验

在统计推断中, 我们经常希望根据样本数据判断某个关于总体的假设是否合理. 这样的过程称为 **假设检验 (Hypothesis Testing)**. 通常我们会提出两个互相对立的假设:

$$H_0 : \text{原假设 (Null Hypothesis)}, \quad H_1 : \text{备择假设 (Alternative Hypothesis)}.$$

其中, H_0 通常代表我们在没有充分证据时默认接受的假设, 而 H_1 代表我们希望通过数据支持的另一种可能性. 假设检验的目标不是直接估计未知参数, 而是根据样本判断是否有足够证据拒绝 H_0 .

设样本空间为 $\mathcal{H}$, 一个检验可以看作是将样本空间划分为两个部分:

$$\mathcal{R} = \mathcal{R} \cup \mathcal{R}^c,$$

其中 $\mathcal{R}$ 称为 **拒绝域 (Rejection Region)**. 当观测值 $x \in \mathcal{R}$ 时, 我们拒绝原假设 H_0 ; 而当 $x \in \mathcal{R}^c$ 时, 我们不拒绝



H_0 . 等价地, 我们可以定义检验函数

$$\varphi(x) = \begin{cases} 1, & x \in \mathcal{R} \\ 0, & x \in \mathcal{R}^c \end{cases},$$

其中 $\varphi(x) = 1$ 表示拒绝 H_0 , 而 $\varphi(x) = 0$ 表示不拒绝 H_0 . 在假设检验中可能出现两类错误: 若 H_0 实际为真, 但我们错误地拒绝了 H_0 , 我们则称为**第一类错误 (Type I Error)**; 若 H_0 实际为假, 但我们没有拒绝 H_0 , 则称为**第二类错误 (Type II Error)**. 第一类错误的概率通常记为

$$\alpha = \mathbb{P}_{H_0}(\text{拒绝 } H_0),$$

即为当 H_0 为真时拒绝 H_0 的概率, 我们也将之称为检验的**显著性水平 (Significance Level)**. 第二类错误的概率通常记为

$$\beta = P_{H_1}(\text{不拒绝 } H_0),$$

即当 H_1 为真时不拒绝 H_0 的概率. 相应地, $1 - \beta$ 也被称为检验的**功效 (Power)**, 它表示当备择假设 H_1 为真时, 检验能够正确拒绝 H_0 的概率.

一种常用的构造检验的方法是**似然比检验 (Likelihood Ratio Test)**: 设样本 $X_1, \dots, X_n$ 整体的似然函数为 $L_n(\theta)$, 原假设和备择假设对应的参数空间分别为 Θ_0 和 Θ . 定义似然比统计量

$$\lambda_n(X) = \frac{\sup_{\theta \in \Theta_0} L_n(\theta)}{\sup_{\theta \in \Theta} L_n(\theta)}.$$

由于 $\Theta_0 \subseteq \Theta$, 因此有 $0 \leq \lambda_n(X) \leq 1$. 当 $\lambda_n(X)$ 很小时, 说明在原假设 H_0 限制下, 能够达到的最大似然值远小于总体参数空间中的最大似然值, 因此数据对 H_0 不利. 于是似然比检验的拒绝域通常写作

$$\mathcal{R} = \{x \in \mathcal{X} : \lambda_n(x) < c\},$$

其中常数 c 由给定的显著性水平 α 决定. 在适当的正则条件下, 当样本量 $n \rightarrow \infty$ 时, 似然比统计量还具有如下近似分布:

$$-2 \log \lambda_n(X) \xrightarrow{d} \chi_d^2,$$

其中 $d = \dim(\Theta) - \dim(\Theta_0)$. 因此, 在显著性水平为 α 的检验中, 常用的拒绝域可以写为

$$\mathcal{R} = \{x \in \mathcal{X} : -2 \log \lambda_n(x) \geq \chi_{d,\alpha}^2\},$$

其中 $\chi_{d,\alpha}^2$ 表示自由度为 d 的 χ^2 分布的上 α 分位点.



7.1 练习

1. 设 $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ 为概率空间.

(i) 证明概率测度满足单调性. 即当 $A \subseteq B$ ($A, B \in \mathcal{F}$) 时, $\mathbb{P}(A) \leq \mathbb{P}(B)$;

(ii) 设 $A_1, A_2, \dots, A_n \in \mathcal{F}$, 证明:

$$\mathbb{P}\left(\bigcup_{i=1}^n A_i\right) \leq \sum_{i=1}^n \mathbb{P}(A_i).$$

2. 已知人群中某种疾病的患病率约为 $1/10000$. 现有一种检测方法可以判断一个人是否患有该疾病, 对于该检测方法, 我们已知: (i) 在一个人未患病的条件下, 检测结果呈阳性的概率仅为 0.02 ; (ii) 在一个人患病的条件下, 检测结果呈阴性的概率仅为 0.01 . 现在随机选取一个人进行该疾病检测, 且检测结果为阳性. 那么此人真正患有该疾病的概率是多少?

3. 已知 X 服从标准正态分布, 即其概率密度函数满足

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}.$$

证明随机变量 $Y = X^2$ 服从自由度为 1 的 χ^2 分布, 即其概率密度函数为

$$g(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{y}}.$$

4. (Chernoff 界) 设 X 为一随机变量. 证明对于任意的 $a \in \mathbb{R}, s > 0$, 有 $\mathbb{P}(X \geq a) \leq M_X(s)e^{-as}$.

5. 甲乙二人准备于 9 点至 10 点之间在某地见面. 已知二人会在之间的任意时刻等可能到达, 且二人到达的时间相互独立. 那么先到的一方等另外一方超过 10 分钟的概率是多少?

6. 设 $X_1, \dots, X_n \stackrel{i.i.d}{\sim} f(x; \theta)$ 为独立同分布的样本.

(i) 样本服从泊松分布 (Poisson Distribution): $f(x; \theta) = \frac{e^{-\theta} \theta^x}{x!}, x = 0, 1, 2, \dots$, 求参数 θ 的最大似然估计量;

(ii) 样本服从指数分布 (Exponential Distribution): $f(x; \theta) = \theta e^{-\theta x}, x > 0$, 求参数 θ 的最大似然估计量;

(iii) 样本服从几何分布 (Geometric Distribution): $f(x; \theta) = \theta^x (1 - \theta)^{x-1}, x = 1, 2, \dots$, 求参数 θ 的最大似然估计量.

(iv) 在 (i) - (iii) 中, 求出此时所有关于参数 θ 的无偏估计量的 Cr mer-Rao 下界, 并判断此时最大似然估计量的方差是否取到该下界.

7. (Bayes 估计法) 假设 $X_1, \dots, X_n \stackrel{i.i.d}{\sim} f(x; \theta)$, 我们将参考条件概率公式, 给出一个参数 θ 的先验分布 (Prior Distribution) $\pi(\theta)$. 先验分布往往是我们对于参数本身的一种分布假设. 那么参数 θ 的后验分布 (Posterior Distribution) $p(\theta|x)$ 便满足

$$p(\theta|x) = \frac{f(x; \theta) \pi(\theta)}{\int f(x; \theta) \pi(\theta) d\theta}.$$



其中 $f(x; \theta)$ 为样本的似然函数.

(i) 已知样本服从 Bernoulli 分布 (Bernoulli Distribution), 即 $X_1, \dots, X_n \stackrel{i.i.d}{\sim} \theta^x(1-\theta)^{1-x}, x = 0, 1$. 已知 θ 的先验分布服从 Beta 分布 (Beta Distribution), 即

$$\pi(\theta) = \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}, \alpha, \beta > 0,$$

其中 α, β 为确定常数. 求出此时 θ 的后验分布 $p(\theta|x)$.

(ii) 在 (i) 的条件下, 求出 $\mathbb{E}_\theta[p(\theta|x)]$.

8. (最大似然估计量的渐近正态性) 假设 $X_1, \dots, X_n \stackrel{i.i.d}{\sim} f(x; \theta)$, 设 $\hat{\theta}$ 为 θ 的最大似然估计量. 在适当的正则条件下, 当样本量 $n \rightarrow \infty$ 时, $\hat{\theta}$ 的分布会渐近于正态分布, 即

$$\frac{\sqrt{n} \cdot (\hat{\theta} - \theta)}{\sqrt{\hat{\mathcal{I}}_1(\theta)}} \sim N(0, 1).$$

现已知样本服从 Poisson 分布: $X_1, \dots, X_n \stackrel{i.i.d}{\sim} \frac{e^{-\theta}\theta^x}{x!}, x = 0, 1, 2, \dots$. 利用最大似然估计量的渐近正态性, 求出一个关于参数 θ 的 $1 - \alpha$ 置信水平的置信区间.



7.2 线性回归与最小二乘

数据在我们的生活中随处可见. 我们想要通过建立模型来捕捉变量之间的关系, 并且用我们的模型进行预测. 我们假设获得的一组数据为

$$D_n := \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\},$$

而我们的目标便是尝试建立 x_i 与 y_i 之间的联系. 我们将 $\mathbf{x}_i = (x_{i1} \ x_{i2} \ \dots \ x_{im})^\top \in \mathbb{R}^m$ 称作是**协变量向量 (Covariates)** (也可叫做**特征 (Features)**), 其中 x_{ij} 代表数据 $\mathbf{x}_i$ 的第 j 个协变量. 我们还定义 $y_i \in \mathbb{R}$ 为**响应变量 (Response Variable)**, 即我们感兴趣的研究对象. 协变量和响应变量的选择取决于我们的研究对象和研究目的. 在线性回归下, 我们希望建立响应变量 y_i 与协变量 $\mathbf{x}_i$ 之间的线性关系. 即我们希望求出常数 $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m \in \mathbb{R}$, 使得

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_m x_{im} + \varepsilon_i, \quad (7.1)$$

其中 β_0 被称作该模型的**截距 (Intercept)**, ε_i 被我们称作是模型的**噪声 (Noise)**, 即无法用线性模型解释的波动因素, 它可以视为误差, 噪声, 遗漏因素或随机扰动. 我们假设这些噪声为相互独立的随机变量, 且它们的均值为 0, 方差为 σ_i^2 . 对于这些相互独立的噪声而言, 它们可以简要分为两种情况: **同方差性 (Homoskedasticity)** 与 **异方差性 (Heteroskedasticity)**. 对于同方差性而言, 我们假设所有的噪声均为独立同分布的样本, 即它们的方差为一常数 σ^2 . 而异方差性假设这些噪声的方差互不相同. 在接下来的讨论中, 我们默认模型的噪声满足同方差性.

如果我们考虑对所有的 $(\mathbf{x}_i, y_i)$ 使用等式(7.1), 我们便可以得到一个线性方程组:

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}.$$

我们也将上式简写为 $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$ 或 $y_i = \mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta} + \varepsilon_i$, 其中 $\mathbf{y}$ 为**响应向量 (Response Vector)**, $\mathbf{X} \in M_{n \times (m+1)}(\mathbb{R})$ 为**设计矩阵 (Design Matrix)**, $\boldsymbol{\beta}$ 为**参数向量 (Coefficient Vector)**, $\boldsymbol{\varepsilon}$ 为**噪声向量 (Noise Vector)**. 我们的目标即为求解 $\boldsymbol{\beta}$, 从而便能得到 y_i 与 $\mathbf{x}_i$ 之间的关系. 在本节的学习中, 我们规定设计矩阵 $\mathbf{X}$ 满足**固定设计 (Fixed Design)**, 即 $\mathbf{X}$ 中的元素均为已知量, 模型中的随机性仅来源于噪声; 我们同时规定设计矩阵 $\mathbf{X}$ 满列秩, 即 $\mathbf{X}$ 的列向量彼此线性无关. 那么此时由于 $\mathbf{x}_i$ 的维数为 $m+1$, 它们之间彼此线性无关也就说明了 $m+1 \leq n$. 即样本点要是足够多. 这对我们随后构建最小二乘有着至关重要的意义.

最小二乘估计量及其性质

我们发现, 如果 $m+1 < n$, 那么便代表了在 $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$ 中方程的数量多于未知数的数量. 回顾第一章, 第一节的知识, 此时的方程很可能是无解的. 那么我们能不能尝试求出一个“近似解”呢? 即求出满足 $\mathbf{y}$ 与 $\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ 非常接近的参数向量. 在向量中, “非常接近”便对应了向量差值的模非常小. 因此我们希望 $\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|$ 非常小, 即噪声非常小. 由此我们也就引出了**最小二乘 (Least Squares)**: 即求出优化问题 $\arg \min_{\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{m+1}} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|^2$ 的解 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$.



定理

定理 7.1. 在 $y = X\beta + \varepsilon$ 中, 若设计矩阵满列秩, 那么最小二乘的解 $\hat{\beta}$ 存在且唯一, 且

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y.$$

我们做一个大致证明: 严格的证明依赖于严格凸函数的性质.

证明. 根据定义, 我们有

$$\begin{aligned} \|y - X\beta\|^2 &= (y - X\beta)^T (y - X\beta) \\ &= y^T y - y^T X\beta - (X\beta)^T y + (X\beta)^T (X\beta) \\ &= y^T y - 2y^T X\beta + \beta^T X^T X\beta. \end{aligned}$$

设 $F(\beta) = y^T y - 2y^T X\beta + \beta^T X^T X\beta$. 其梯度为

$$\nabla F(\beta) = -2X^T y + 2X^T X\beta.$$

利用严格凸函数的性质, $\nabla F(\beta) = \mathbf{0}$ 的点对应唯一的极小值, 因此我们有 $X^T y = X^T X\beta$. 该方程也被称为**正规方程 (Normal Equation)**. 由于 X 满列秩, 因此 $X^T X$ 可逆. 则

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y.$$

■

此时的 $\hat{\beta}$ 被我们称作**普通最小二乘估计量 (Ordinary Least Squares Estimator)**, 或简称为 OLS 估计量. 我们有时候将其记作 $\hat{\beta}_{OLS}$, 或 $\hat{\beta}$. 求解完 $\hat{\beta}$, 我们便可以用得到的参数来对我们的模型进行检验和预测.

定理

定理 7.2 (最小二乘估计量的无偏性与方差). 最小二乘估计量 $\hat{\beta}$ 为关于 β 的条件无偏估计量, 即 $\mathbb{E}[\hat{\beta}|X] = \beta$. 特别地, 当我们假设噪声符合同方差性时 (即 $\mathbb{E}[\varepsilon_i] = 0, \text{Var}(\varepsilon_i) = \sigma^2$),

$$\text{Var}(\hat{\beta}|X) = (X^T X)^{-1} \sigma^2.$$

该定理的证明涉及到一些没有在本章第一节提及的概率论知识, 感兴趣的读者欢迎阅读.

证明. 我们首先证明最小二乘的无偏性. 不难发现

$$\mathbb{E}[\hat{\beta}|X] = \mathbb{E}[(X^T X)^{-1} X^T y|X] = (X^T X)^{-1} X^T \mathbb{E}[y|X],$$

再由 $y = X\beta + \varepsilon$ 可知

$$\mathbb{E}[y|X] = \mathbb{E}[X\beta + \varepsilon|X] = X\mathbb{E}[\beta|X] + \mathbf{0} = X\beta,$$



这是因为 ε 的期望为零, 同时 β 为一常数向量, 因此其期望等于自身. 那么结合上面两式我们不难得到

$$\mathbb{E}[\hat{\beta}|X] = \beta.$$

对于其方差而言, 通过计算我们得到

$$\begin{aligned}\text{Var}(\hat{\beta}_n|X) &= \text{Var}\left((X^\top X)^{-1}X^\top y|X\right) \\ &= \left((X^\top X)^{-1}X^\top\right) \cdot \text{Var}(y|X) \cdot \left((X^\top X)^{-1}X^\top\right)^\top \\ &= (X^\top X)^{-1}X^\top \cdot \sigma^2 \cdot X(X^\top X)^{-1} \\ &= (X^\top X)^{-1}\sigma^2.\end{aligned}$$

■

实际上, 我们可以根据条件无偏性得到无偏性. 这是因为 $\mathbb{E}[\hat{\beta}] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[\hat{\beta}|X]]$, 因此我们也称 $\hat{\beta}$ 为一无偏估计量. 对于方差而言, 根据公式

$$\text{Var}(\hat{\beta}) = \mathbb{E}[\text{Var}(\hat{\beta}|X)] + \text{Var}(\mathbb{E}[\hat{\beta}|X]) = \sigma^2 \mathbb{E}\left[(X^\top X)^{-1}\right] = \sigma^2 \cdot (X^\top X)^{-1},$$

我们可以得到相似的结果. 在所有的无偏估计量中, 我们的目标是寻找方差最小的一个估计量. 这一估计量其实就是最小二乘估计量. 该定理被称作 **Gauss-Markov 定理 (Gauss-Markov Theorem)**:

定理

定理 7.3 (Gauss-Markov 定理). 在模型 $y = X\beta + \varepsilon$ 中, 若设计矩阵 X 满列秩, 且噪声满足同方差性, 那么最小二乘估计量 $\hat{\beta}$ 为所有关于 β 的线性无偏估计量中方差最小的. 我们也称最小二乘估计量为 **BLUE 估计量 (Best Linear Unbiased Estimator)**.

该定理的证明略.

在模型 $y = X\beta + \varepsilon$ 中, 数据的**残差 (Residual)** 为 $\varepsilon_i = y_i - x_i^\top \beta$. 对于最小二乘估计量 $\hat{\beta}$, 我们称 $\hat{y}_i = x_i^\top \hat{\beta}$ 为数据点 (x_i, y_i) 的**拟合值 (Fitted Value)**. 观测值 y_i 和拟合值 $\hat{y}_i$ 的差 $\hat{\varepsilon}_i = y_i - x_i^\top \hat{\beta}$ 被称作该数据点的**残差估计量 (Estimated Residual)**. 那么如果我们有一个新的数据点 x_0 , 我们便可以用公式 $\hat{y}_0 = x_0^\top \hat{\beta}$ 求出此时响应变量的拟合值. 随后我们便可以构建置信区间来检验拟合的精确性. 由于本书中缺乏对概率论与数理统计的深入讨论, 因此有关置信区间的构建我们在此不作涉及.

定理

定理 7.4. 利用最小二乘得到的残差估计量 $\hat{\varepsilon}_i = y_i - x_i^\top \hat{\beta}$ 的期望为零. 即 $\mathbb{E}[\hat{\varepsilon}_i] = 0$.



证明. 不难发现,

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}[\hat{\varepsilon}_i] &= \mathbb{E}[y_i - \mathbf{x}_i^\top \hat{\boldsymbol{\beta}}] \\
 &= \mathbb{E}[\mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta} + \varepsilon_i - \mathbf{x}_i^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}] \\
 &= \mathbb{E}[\mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta} + \varepsilon_i - \mathbf{x}_i^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top (\mathbf{X} \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon})] \\
 &= 0.
 \end{aligned}$$

当我们初步了解完最小二乘的性质之后, 我们给出两个矩阵的定义: 它们分别为**帽子矩阵 (Hat Matrix)**和**残差生成矩阵 (Annihilator Matrix)**.

定义

定义 7.1. 设 $\mathbf{X}$ 为设计矩阵, 那么帽子矩阵 $\mathbf{H}$ 与残差生成矩阵 $\mathbf{M}$ 分别为

$$\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top, \quad \mathbf{M} = \mathbf{I} - \mathbf{H}.$$

对于帽子矩阵而言, 我们不难发现

$$\mathbf{H}\mathbf{y} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \hat{\mathbf{y}},$$

而对于残差生成矩阵, 同样地我们有

$$\mathbf{M}\mathbf{y} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}.$$

本节的课后练习题中会有更多关于帽子矩阵和残差生成矩阵的性质等待读者去探索. 在普通最小二乘中, 我们通过最小化 $\sum_{i=1}^n (y_i - \mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta})^2$ 来选择参数 $\boldsymbol{\beta}$. 这相当于认为每一个观测点的误差 ε_i 都具有相同的重要性. 然而在实际问题中, 不同数据点的可靠程度可能并不相同. 例如: 有些观测值测量误差较小, 因此相对更值得信任; 有些观测值噪声较大, 因此不应使模型产生过强影响. 为了反映这种差异, 我们可以引入一个**权函数 (Weight Function)**, 使得在观测点 $\mathbf{x}_i$ 处的权重为 $w_i > 0$. 权重越大, 则表示该观测点在拟合中越重要; 权重越小, 则表示该观测点对最终模型的影响较弱. 因此我们此时的最小二乘优化的便是 $\sum_{i=1}^n w_i (y_i - \mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta})^2$ 的最小值.

定理

定理 7.5. 在加权线性回归中, 记 $\mathbf{W} = \text{diag}(w_1 \ \cdots \ w_n)$ 为每一个观测点对应的权重的对角矩阵, $\mathbf{X}$ 为设计矩阵. 若 $\mathbf{X}$ 列满秩, 那么此时最小二乘的解 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 存在且唯一. 且

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{W} \mathbf{y}.$$

不难发现, 一般情况下的线性回归即对应了权函数 $w_i \equiv 1$. 最小二乘有什么几何意义呢? 由于我们知道 $n > m + 1$, 也就是说 $\mathbf{y}$ 的维数大于 $\mathbf{X}$ 的列空间的位数. 此时可以将最小二乘其视作响应变量 $\mathbf{y}$ 在设计矩阵 $\mathbf{X}$ 的列空间上的正交投影. 此时 $\mathbf{y}$ 满足正交分解 $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$, $\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \in \text{Im}(\mathbf{X})^\perp$. 回顾我们在内积空间



中提出的定理: $\text{Im}(X)^\perp = \text{Ker}(X^\top)$. 因此 $y - X\beta \in \text{Ker}(X^\top)$, 即

$$X^\top(y - X\beta) = 0.$$

将其展开我们便得到了系统的正规方程: $X^\top y = X^\top X\beta$. 当设计矩阵满列秩时我们便得到了前面推出的 $\hat{\beta} = (X^\top X)^{-1}X^\top y$. 下面的图便很好地展示了这一几何关系:

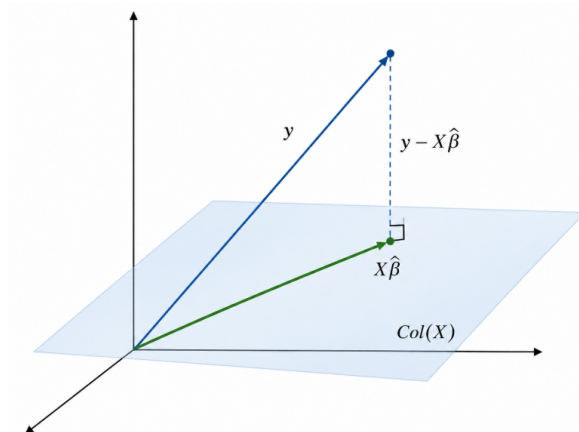


图 23: 最小二乘的几何关系: 满足 $\|y - X\beta\|$ 最小的解即为 y 在设计矩阵 X 的列空间上的正交投影.

多项式回归

值得我们注意的是, 线性回归仅代表我们的模型关于参数向量 β 是线性的, 而关于协变量 x 则不需要满足线性关系. 比如我们完全可以设 $x = (x \quad x^2 \quad \cdots \quad x^m)^\top$, 这样一来我们得到的模型便为

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \cdots + \beta_m x^m,$$

其中 y 是关于 x 的多项式. 我们也把这类问题称作是**多项式回归 (Polynomial Regression)**. 给出数据点 $D_n = \{(x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)\}$, 假设我们将使用关于 x 的 m 次多项式去估计 y , 那么此时我们有

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^m \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^m \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}.$$

此时的最小二乘为

$$\sum_{i=1}^n |y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2 + \cdots + \beta_m x_i^m)|.$$

类似地, 如果我们假设的模型为

$$y = \beta_0 f_0(x) + \beta_1 f_1(x) + \cdots + \beta_m f_m(x),$$



那么我们有

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0(x_1) & f_1(x_1) & f_2(x_1) & \cdots & f_m(x_1) \\ f_0(x_2) & f_1(x_2) & f_2(x_2) & \cdots & f_m(x_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_0(x_n) & f_1(x_n) & f_2(x_n) & \cdots & f_m(x_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{pmatrix}.$$

此时我们考虑多项式回归中的一个特殊情况: 假设 $m = 1$, 此时的最小二乘可以写作

$$\begin{aligned} (\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) &= \arg \min_{\beta_0, \beta_1} \sum_{i=1}^n \{y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)\}^2 \\ &= \arg \min_{\beta_0, \beta_1} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \{y_i^2 + \beta_0^2 + 2\beta_0\beta_1 x_i + \beta_1^2 x_i^2 - 2y_i\beta_0 - 2\beta_1 y_i x_i\}. \end{aligned}$$

我们令

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i := \bar{x}_n \quad \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i := \bar{y}_n,$$

由此我们进一步将原式化简为

$$(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) := \arg \min_{\beta_0, \beta_1} \left\{ \beta_0^2 + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 \beta_1^2 + 2\bar{x}_n \beta_0 \beta_1 - 2\bar{y}_n \beta_0 - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i \beta_1 \right\}.$$

我们定义关于 β_0, β_1 的二元函数

$$f(\beta_0, \beta_1) = \beta_0^2 + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 \beta_1^2 + 2\bar{x}_n \beta_0 \beta_1 - 2\bar{y}_n \beta_0 - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i \beta_1,$$

因此 f 的梯度为

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial \beta_0}, \frac{\partial f}{\partial \beta_1} \right) = \left(2\beta_0 + 2\bar{x}_n \beta_1 - 2\bar{y}_n, \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 \beta_1 + 2\bar{x}_n \beta_0 - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i \right).$$

令 $\nabla f = 0$, 则我们有

$$\begin{cases} 2\beta_0 + 2\bar{x}_n \beta_1 - 2\bar{y}_n = 0 \\ \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 \beta_1 + 2\bar{x}_n \beta_0 - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i = 0 \end{cases}.$$

其中不难发现

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y}_n - \bar{x}_n \hat{\beta}_1. \quad (7.2)$$

然后利用(7.2)中 $\hat{\beta}_0$ 的取值带入另外一式求出 β_1 :

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 \hat{\beta}_1 + \bar{x}_n (\bar{y}_n - \bar{x}_n \hat{\beta}_1) - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i y_i = 0,$$

即

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i - n \bar{x}_n \bar{y}_n}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}.$$

我们将这一发现总结成下面的推论:



推论

推论 7.1. 设数据 $\mathcal{D} := \{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$ ($(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$) 和线性回归模型 $y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$. 则 β_1, β_2 的最小二乘估计为

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y}_n - \bar{x}_n \hat{\beta}_1, \quad \hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i - n \bar{x}_n \bar{y}_n}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}.$$

此时读者会想: 如果我们有 n 组数据 $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$, 且这些 x_i 互不相同, 那么根据 Lagrange 多项式, 我们可以找到一个 $(n-1)$ 次多项式 $p(x)$, 使得 $p(x_i) = y_i$. 也就是说, 理论上完全存在这样的函数, 使得这个函数能够与数据完美吻合, 那么我们还干嘛费尽心思地去用最小二乘求解呢? 我们不妨来看下图:

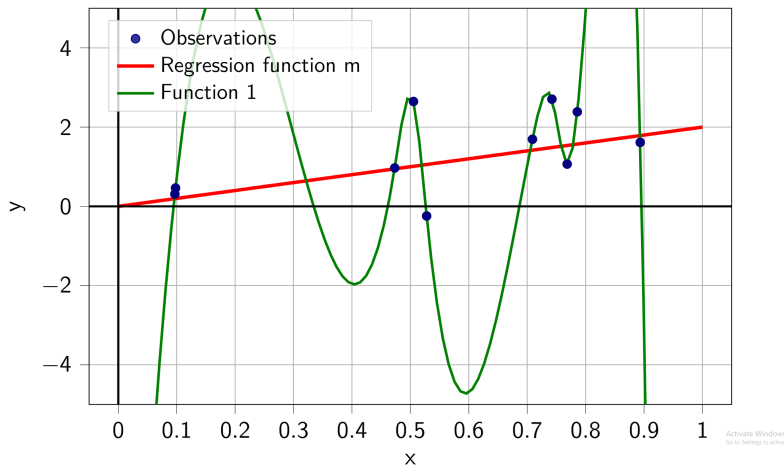


图 24: 利用 Lagrange 多项式和最小二乘分别对数据进行回归的比较. 在本图中观测到的数据点已用蓝色标出, 绿色曲线为 Lagrange 多项式的拟合结果; 红色直线为使用 $y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon$ 得到的最小二乘拟合结果.

在回归分析中, 我们关注的不仅仅是模型在以观测到的数据集上的表现, 我们还要求模型要有精准的预测能力. 在 Lagrange 多项式拟合的结果中, 虽然拟合函数精确地穿过了每一个数据点, 做到了零误差, 但我们看到得到的函数在数据点之间会来回大幅度地波动, 并且在 x 坐标相距很近的情况下对应的响应变量 y 却有天壤之别. 因此 Lagrange 多项式的拟合结果显然没有捕捉到数据之间的大致变动趋势. 相反, 红色的线性函数虽然没有精确地穿过每一个数据点, 但它在一定程度上反映出了 x, y 之间的变化趋势. 这个例子说明: 复杂的模型并不一定意味着预测效果越好. 若模型过度追逐训练数据中的偶然波动或噪声, 就可能在已有数据上表现很好, 却在新的数据上表现较差. 这种现象称为**过拟合 (Overfitting)**.

为避免过拟合的发生, 我们通常把数据集分成**训练集 (Training Set)**和**检验集 (Testing Set)**. 即我们利用训练集中的数据构造设计矩阵, 进行回归分析. 然后再用得到的参数估计去拟合检验集中的数据, 然后比较误差. 不过, 当数据较少时, 单纯划分一次训练集和检验集会产生一定程度的数据浪费, 因此我们也可以使用**交叉验证 (Cross Validation)**的方法. 交叉验证的基本逻辑是通过重复实验, 多次改变训练集和检验集, 使得每一个数据都能被最大程度地利用. 常见的交叉验证方法有**K 折交叉验证 (K-fold Cross Validation)**, 即将数据分成 K 份, 其中 $K-1$ 份作为训练集, 剩下的一份作为检验集, 然后重复实验 K 次, 取模型的平均检验误差. 这样一来每一份数据都能够作为检验集, 通过平均, 这样得到的误差通常比单次划分更加稳定.

此时, 如果我们的数据如果不再是离散的数据点 (x_i, y_i) , 而是一个整个连续的区间 (a, b) , 那么在这个区间上我们能否也类比最小二乘的知识呢? 此时我们会联想到积分的知识. 即当我们在区间 (a, b) 上用多项式 $p(x) =$



$\beta_0 + \beta_1 x + \cdots + \beta_m x^m$ 去近似 $y = f(x)$ 时, 我们所要优化的便是积分

$$f(\beta_0, \cdots, \beta_m) = \int_a^b |f(x) - p(x)|^2 dx = \int_a^b \left(f(x) - \sum_{i=0}^m \beta_i x^i \right)^2 dx.$$

我们此时求出 f 关于 β_i 的偏导数, 得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \beta_i} &= \frac{\partial}{\partial \beta_i} \int_a^b \left(f(x) - \sum_{i=0}^m \beta_i x^i \right)^2 dx \\ &= \int_a^b \frac{d}{d\beta_i} \left[f^2(x) - 2f(x) \sum_{i=0}^m \beta_i x^i + \left(\sum_{i=0}^m \beta_i x^i \right)^2 \right] dx \\ &= \int_a^b -2f(x)x^i + 2x^i \sum_{j=0}^m \beta_j x_j dx. \end{aligned}$$

在极小值处, 我们令 $\frac{\partial f}{\partial \beta_i} = 0$, 我们因此得到此时的正规方程:

$$\int_a^b x^i f(x) dx = \sum_{j=0}^m \beta_j \int_a^b x^{i+j} dx, \quad i = 0, 1, \cdots, m.$$

由此我们便得到了如下的矩阵形式:

$$\begin{pmatrix} \int_a^b f(x) dx \\ \int_a^b x f(x) dx \\ \vdots \\ \int_a^b x^m f(x) dx \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \int_a^b 1 dx & \int_a^b x dx & \int_a^b x^2 dx & \cdots & \int_a^b x^m dx \\ \int_a^b x dx & \int_a^b x^2 dx & \int_a^b x^3 dx & \cdots & \int_a^b x^{m+1} dx \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \int_a^b x^m dx & \int_a^b x^{m+1} dx & \int_a^b x^{m+2} dx & \cdots & \int_a^b x^{2m} dx \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_m \end{pmatrix},$$

其中等式右边的 $(m+1) \times (m+1)$ 矩阵被称作 **Gram 矩阵**. Gram 矩阵的列向量彼此线性无关 (这一点读者不妨自行验证), 因此上面的系统便存在唯一解. 此时对于确定的 $f(x), m, a, b$, 我们便可以求出每一个积分的值. 随后我们便可以运用求解线性方程组的方法去求解 $\beta_0, \cdots, \beta_m$ 了.

7.2 练习

1. 设 $\mathbf{X} \in M_{n(m+1)}(\mathbb{R})$ 为设计矩阵, 帽子矩阵为 $\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top$; 残差生成矩阵为 $\mathbf{M} = \mathbf{I} - \mathbf{H}$.

(i) 证明: $\mathbf{H}, \mathbf{M}$ 均为对称矩阵;

(ii) 证明: $\mathbf{H}, \mathbf{M}$ 均为投影矩阵, 即 $\mathbf{H}^2 = \mathbf{H}, \mathbf{M}^2 = \mathbf{M}$;

(iii) 证明: $\text{tr}(\mathbf{H}) = m+1, \text{tr}(\mathbf{M}) = n - m - 1$.

(iv) 对于样本 $\mathbf{x}_i$ 而言, 我们定义其 **杠杆值 (Leverage)** 为 $h_{ii} = \mathbf{x}_i^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_i$. 证明: $0 \leq h_{ii} \leq 1$.

(v) 我们假设样本中的噪声满足同方差性, 证明 $\text{Var}(\hat{\varepsilon}_i) = \sigma^2(1 - h_{ii})$.



2. 设 $\mathbf{X} \in M_{n(m+1)}(\mathbb{R})$ 为设计矩阵, 我们假设 $\mathbf{X}$ 从左往右的第一列为截距列, 即第一列所有元素为 1. 样本 $\mathbf{x}_i$ 的第一个协变量也为截距项 1.

(i) 对于任意的样本 $\mathbf{x}_i$, 证明 $\sum_{j=1}^n \mathbf{x}_i^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_j = 1$.

(ii) 证明

$$\sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i = 0.$$

3. 设 $\mathbf{X} \in M_{n(m+1)}$ 为设计矩阵, $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}$, $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$. $\mathbf{H}$ 为帽子矩阵, $\mathbf{M}$ 为残差生成矩阵. 证明 $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^\top \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \boldsymbol{\varepsilon}^\top \mathbf{M} \boldsymbol{\varepsilon}$.

4. 当我们假设线性模型 $y_i = \mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta} + \varepsilon_i$ 时, 若噪声满足同方差性且服从正态分布 $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$, 我们可以将样本的似然函数写作

$$L(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \cdot \exp\left(-\sum_{i=1}^n \frac{(y_i - \mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\beta})^2}{2\sigma^2}\right).$$

求出在此情况下 $\boldsymbol{\beta}$ 和 σ^2 的最大似然估计.

5. 在以下的回归分析问题中, 我们假设有且仅有一个分类项作为协变量. 分类项中我们假设含有 K 个不同的种类. 定义 $\mathbb{1}_{\mathbf{x}_i=g}$ 为样本 $\mathbf{x}_i$ 是否属于种类 g 的示性函数 (Indicator Function), 即

$$\mathbb{1}_{\mathbf{x}_i=g} = \begin{cases} 1 & \text{若样本 } \mathbf{x}_i \text{ 属于种类 } g \\ 0 & \text{若样本 } \mathbf{x}_i \text{ 不属于种类 } g \end{cases}.$$

我们定义 $\mathbf{z}_i = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{\mathbf{x}_i=1} \\ \mathbb{1}_{\mathbf{x}_i=2} \\ \vdots \\ \mathbb{1}_{\mathbf{x}_i=K} \end{pmatrix}$, 设计矩阵 $\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1^\top \\ \mathbf{z}_2^\top \\ \vdots \\ \mathbf{z}_n^\top \end{pmatrix}$. 设 n_g 为属于种类 g 的样本数, 证明此时在模型 $\mathbf{y} = \mathbf{Z}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$ 中 $\boldsymbol{\beta}$ 的最小二乘估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{n_1} \sum_{y \in n_1} y \\ \frac{1}{n_2} \sum_{y \in n_2} y \\ \vdots \\ \frac{1}{n_K} \sum_{y \in n_K} y \end{pmatrix}.$$

6. 在加权线性回归中, 给出设计矩阵 $\mathbf{X}$ 和权函数矩阵 $\mathbf{W}$ 我们得到的关于 $\boldsymbol{\beta}$ 的加权最小二乘估计量为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{GLS} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{W} \mathbf{y}.$$

假设噪声相互独立, 现给出两个不同条件: 噪声满足同方差性 (M1); 噪声满足异方差性 (M2).

(i) 证明: 在 (M1), (M2) 条件下均有 $\mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\beta}}_{GLS} | \mathbf{X}] = \boldsymbol{\beta}$;

(ii) 在 (M1) 条件下证明

$$\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_{GLS} | \mathbf{X}) = \sigma^2 (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1};$$



(iii) 在 (M2) 条件下, 假设 $\text{Var}(\varepsilon_i|\mathbf{X}) = \sigma_i^2$, 证明

$$\text{Var}(\hat{\beta}_{GLS}|\mathbf{X}) = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \text{diag} \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_2^2 & \cdots & \sigma_n^2 \end{pmatrix}.$$

(iv) 在 (M2) 条件下, 我们假设 $\text{Var}(\varepsilon|\mathbf{X}) = \sigma^2 \mathbf{\Sigma}$, 其中 $\mathbf{\Sigma}$ 为对角矩阵. 设模型

$$\tilde{\mathbf{y}} = \tilde{\mathbf{X}}\boldsymbol{\beta} + \tilde{\varepsilon},$$

其中 $\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{y}$, $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{\Sigma}^{-1/2}\mathbf{X}$, $\tilde{\varepsilon} = \mathbf{\Sigma}^{-1/2}\varepsilon$. 此时的最小二乘估计为 $\tilde{\boldsymbol{\beta}} = (\tilde{\mathbf{X}}^\top \tilde{\mathbf{X}})^{-1} \tilde{\mathbf{X}}^\top \tilde{\mathbf{y}}$. 求出 $\mathbb{E}[\tilde{\boldsymbol{\beta}}|\tilde{\mathbf{X}}]$ 与 $\text{Var}(\tilde{\boldsymbol{\beta}}|\tilde{\mathbf{X}})$.

7. 在线性模型 $y = \mathbf{x}^\top \boldsymbol{\beta} + \varepsilon$ 中我们假设噪声满足同方差性, 设计矩阵为固定设计且满列秩. 现有观测数据

$$D = \{(\mathbf{x}_1, y_1), (\mathbf{x}_2, y_2), \cdots, (\mathbf{x}_n, y_n)\},$$

我们将采用 **留一交叉验证 (Leave One Out Cross Validation)** 对最小二乘估计量进行分析. 在留一交叉验证中, 我们将原数据复制 n 份, 在每一份中采用 $n-1$ 个数据作为训练集, 随后剩余的一个数据作为检验集. 这样一来每一个数据都可以作为检验集. 我们定义集合 $E_i \subseteq D$ 为除去原数据中除去第 i 个样本之后得到的新数据集, 即 $E_i = D \setminus \{(\mathbf{x}_i, y_i)\}$. 那么在数据集 E_i 上关于 $\boldsymbol{\beta}$ 的最小二乘估计量为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^{(i)} = \arg \min_{\boldsymbol{\beta}} \frac{1}{n-1} \sum_{j \neq i} (y_j - \mathbf{x}_j^\top \boldsymbol{\beta})^2.$$

(i) 利用 Sherman-Morrison 公式:

$$(\mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}^\top)^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{v}^\top\mathbf{A}^{-1}}{1 + \mathbf{v}^\top\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}},$$

证明此时的最小二乘估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}^{(i)}$ 满足

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}^{(i)} = \hat{\boldsymbol{\beta}} - \frac{(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x}_i \hat{\varepsilon}_i}{1 - h_{ii}}.$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y} = \left(\sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i \mathbf{x}_i^\top \right)^{-1} \cdot \left(\sum_{i=1}^n \mathbf{x}_i y_i \right)$ 为普通最小二乘估计量, $\hat{\varepsilon}_i = y_i - \mathbf{x}_i^\top \hat{\boldsymbol{\beta}}$.

(ii) 证明: $\hat{\varepsilon}_i^{(i)} = y_i - \mathbf{x}_i^\top \hat{\boldsymbol{\beta}}^{(i)} = \frac{\hat{\varepsilon}_i}{1 - h_{ii}}$.

8. 在推论 7.1 中, 证明 $\hat{\beta}_1$ 的估计还可以写作

$$\hat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)(y_i - \bar{y}_n)}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_n)^2}.$$

9.

(i) 设函数 $f(x) = \frac{1}{x}$, $1 \leq x \leq 3$. 利用 Gram 矩阵, 求出在该区间上满足最小二乘条件的二次多项式 $p(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2$;

(ii) 设 $A = (-1, 0)$, $B = (0, 1)$, $C = (1, 4)$. 以 $y = \beta_0 x + \beta_1 2^x$ 为模型, 利用最小二乘求出此时的参数 β_0, β_1 .



7.3 正则化与高维线性回归

回顾我们上一章提到的最小二乘, 其中一个重要的假设即为设计矩阵 $\mathbf{X}$ 满列秩. 即样本数量 n 和特征数量 m 应满足 $n \geq m + 1$ 的关系. 但是在很多数据中, 往往有着数以万计的特征却缺乏足够多的样本. 在此情况下 $n < m + 1$, 那么此时就有一些问题出现了. 比如此时方程的数量远远小于未知数的数量, 我们知道此时的方程便有无穷多组解. 此时的回归问题被称作**高维线性回归 (High-dimensional Regression)**. 此时为了能够求解, 我们需要通过**正则化 (Regularization)** 来对我们的最小二乘进行适当的改造.

Ridge 回归

我们首先提出的是**Ridge 回归 (Ridge Regression)**. Ridge 回归在最小二乘的基础上加入了一个**惩罚项 (Penalty Term)**, 使得改造过的矩阵重新变得可逆. 我们设 $\lambda > 0$ 为一常数, 那么 Ridge 回归中参数向量 $\hat{\beta}_{R,\lambda}$ 的解为

$$\hat{\beta}_{R,\lambda} := \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}^{m+1}} (||\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta||^2 + \lambda ||\beta||^2). \quad (7.3)$$

推论

推论 7.2. 对任意的 $\mathbf{X} \in M_{mn}(\mathbb{R})$ 和参数 $\lambda > 0$, 矩阵 $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I}$ 可逆.

证明. 回顾第四章第 4 节的知识, 对任意的 $\mathbf{X}$ 而言, $\mathbf{X}^\top \mathbf{X}$ 为半正定矩阵, 即 $\forall \mathbf{u} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{u}^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X}) \mathbf{u} \geq 0$. 此时

$$\mathbf{u}^\top (\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I}) \mathbf{u} = \mathbf{u}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{X} \mathbf{u} + \lambda \mathbf{u}^\top \mathbf{u} > 0,$$

因此 $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I}$ 为正定矩阵, 而正定矩阵必然可逆. ■

在 Ridge 回归下, 尽管设计矩阵 $\mathbf{X}$ 不为列满秩, 但 $\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I}$ 便为可逆矩阵, 我们也就可以在此情况下求出 Ridge 回归下的参数向量 $\hat{\beta}_{R,\lambda}$.

定理

定理 7.6. 若 $\lambda > 0$, 那么在(7.3)中, Ridge 回归的参数向量有唯一解:

$$\hat{\beta}_{R,\lambda} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}.$$

证明. 由定义可知,

$$\begin{aligned} ||\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta||^2 + \lambda ||\beta||^2 &= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^\top (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) + \lambda \beta^\top \beta \\ &= \mathbf{y}^\top \mathbf{y} - \mathbf{y}^\top \mathbf{X}\beta - (\mathbf{X}\beta)^\top \mathbf{y} + (\mathbf{X}\beta)^\top (\mathbf{X}\beta) + \lambda \beta^\top \beta \\ &= \mathbf{y}^\top \mathbf{y} - 2\mathbf{y}^\top \mathbf{X}\beta + \beta^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\beta + \lambda \beta^\top \beta. \end{aligned}$$

设 $F(\beta) = \mathbf{y}^\top \mathbf{y} - 2\mathbf{y}^\top \mathbf{X}\beta + \beta^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\beta + \lambda \beta^\top \beta$. 其梯度为

$$\nabla F(\beta) = -2\mathbf{X}^\top \mathbf{y} + 2\mathbf{X}^\top \mathbf{X}\beta + 2\lambda \beta$$

利用严格凸函数的性质, $\nabla F(\beta) = \mathbf{0}$ 的点对应唯一的极小值, 因此我们有 $\mathbf{X}^\top \mathbf{y} = \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\beta + \lambda \beta$. 由于



$\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I}$ 可逆, 则

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{R,\lambda} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}.$$

■

我们知道, 最小二乘的几何意义可以看作是响应向量 $\mathbf{y}$ 在设计矩阵 $\mathbf{X}$ 的列空间上的正交投影. 那么 Ridge 回归有没有什么几何意义呢? 根据 Lagrange 乘数法, (7.3) 中的公式与下面的完全等价:

$$\min_{\boldsymbol{\beta}} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|^2, \quad \|\boldsymbol{\beta}\|^2 \leq \lambda^2.$$

即 Ridge 回归便可看作是在普通最小二乘的前提下加上了关于参数向量 $\boldsymbol{\beta}$ 的约束条件. 为了方便理解, 我们先考虑只有两个参数的情况: 即 $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1 \ \beta_2)^\top$. 此时

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|^2 = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^\top (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{y}^\top \mathbf{y} - 2\mathbf{y}^\top \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$$

可以看作是关于 $\boldsymbol{\beta}$ 的二次函数 $F(\boldsymbol{\beta})$. 对于确定的常数 t , 函数的等值线 $F(\boldsymbol{\beta}) = t$ 代表了所有使得残差平方和相同的参数 $\boldsymbol{\beta}$ 构成的集合, 这些点关于轨迹便是在 (β_1, β_2) 平面内的一簇簇椭圆. 越靠近椭圆的中心, 残差平方和越小. 同时, 对于确定的常数 s , $\|\boldsymbol{\beta}\|^2 = s$ 即可看作是在 (β_1, β_2) 平面内的圆. 因此如果我们回到带约束条件的优化问题里:

$$\min_{\boldsymbol{\beta}} \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|^2, \quad \|\boldsymbol{\beta}\|^2 \leq \lambda^2,$$

它便代表了在 (β_1, β_2) 不超出以 λ 为半径的圆的前提下使得数据中残差平方和最小. 那么对于确定的 λ , 我们很自然地想让 $\|\boldsymbol{\beta}\|^2 = \lambda^2$ 与 $F(\boldsymbol{\beta})$ 的等值线相切. 切点即为满足条件的最优解. 下面的几幅图很好地阐释了 Ridge 回归的几何意义:

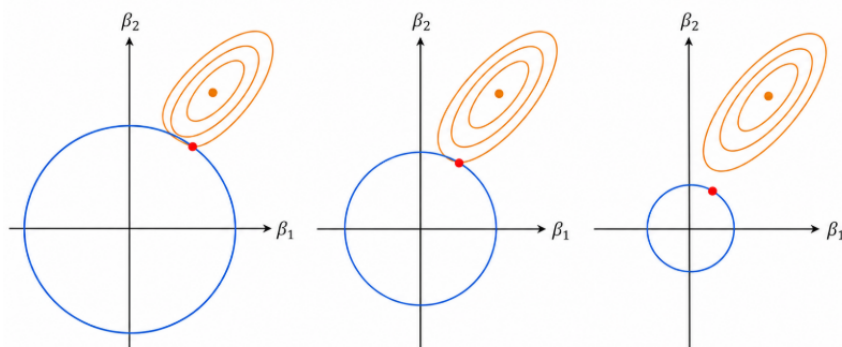


图 25: Ridge 回归的几何意义: 蓝色圆代表方程 $\beta_1^2 + \beta_2^2 = \lambda^2$, 橙色的一簇簇椭圆既代表了函数 $F(\boldsymbol{\beta}) = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}\|^2$ 的等值线. 其中红色的点即为圆与等值线的切点. 红色切点越靠近椭圆的中心, 代表在此情况下数据的残差平方和越小.

在实际应用中, 正则化参数 λ 通常不是由一个简单公式直接给出, 而是通过验证集或交叉验证选择. 在 Ridge 回归中, 我们一般先有一组候选值 $\lambda_1, \dots, \lambda_m$, 常见的参数有 0.1, 0.05, 0.001 等. 我们用这些参数分别拟合 Ridge 模型, 并比较它们在未参与训练的数据上的预测误差. 使预测误差最小的 λ 则被视为较合适的正则化参数.



我们还可以从其他角度去解释 λ 的不同取值会产生什么样的影响. 回顾第四章第 4 节的知识, 我们知道任何矩阵都存在奇异值分解. 因此对于设计矩阵 $\mathbf{X} \in M_{n(m+1)}(\mathbb{R})$, 存在单位正交矩阵 $\mathbf{U}, \mathbf{V}$ 与对角矩阵 $\mathbf{\Sigma}$, 使得 $\mathbf{X} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top$, 其中 $\mathbf{U} \in M_n(\mathbb{R})$, $\mathbf{V} \in M_{(m+1)}(\mathbb{R})$, $\mathbf{\Sigma} \in M_{n(m+1)}(\mathbb{R})$, 那么

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{X} = (\mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top)^\top \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{U}^\top \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top.$$

因此 Ridge 回归的解 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{R,\lambda} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{y}$ 便可以写成

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{R,\lambda} &= (\mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top + \lambda \mathbf{I})^{-1} \cdot (\mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top)^\top \mathbf{y} \\ &= [\mathbf{V}(\mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{\Sigma} + \lambda \mathbf{I})\mathbf{V}^\top]^{-1} \cdot \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{U}^\top \mathbf{y} \\ &= \mathbf{V}(\mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{\Sigma} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{U}^\top \mathbf{y}.\end{aligned}$$

此时响应向量 $\mathbf{y}$ 的拟合值即为 $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}_{R,\lambda}$, 即

$$\hat{\mathbf{y}}_{R,\lambda} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top \mathbf{V}(\mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{\Sigma} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{U}^\top \mathbf{y} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}(\mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{\Sigma} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{U}^\top \mathbf{y}.$$

此时我们设 $\mathbf{X}$ 有 k 个非零奇异值 ($k \leq m+1$): $\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_k > 0$. 由于矩阵 $\mathbf{\Sigma}, \mathbf{\Sigma}^\top$ 为对角矩阵, 那么 $(\mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{\Sigma} + \lambda \mathbf{I})^{-1}$ 也为对角矩阵, 且对角线上的元素为 $\frac{1}{\sigma_i^2 + \lambda}$. 由此可知矩阵 $\mathbf{\Sigma}(\mathbf{\Sigma}^\top \mathbf{\Sigma} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{\Sigma}^\top$ 也为对角矩阵, 其对应角线上的元素即为三个对角矩阵对应元素的乘积, 即 $\frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda}, i = 1, \cdots, k$. 那么此时我们可以将 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 写成

$$\hat{\mathbf{y}}_{R,\lambda} = \sum_{i=1}^k \frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda} \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}, \quad (7.4)$$

其中 $\mathbf{u}_i$ 即为矩阵 $\mathbf{U}$ 中的列向量, $\frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda} \in (0, 1)$. 为了更好地解释(7.4), 我们有必要写出拟合向量在 OLS 估计量下有着怎样的分解形式. 其实我们不难发现,

$$\hat{\mathbf{y}}_{OLS} = \sum_{i=1}^k \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^\top \mathbf{y}.$$

因此, Ridge 回归可以看作是将 OLS 中的拟合值进行“缩放”而得到的结果. 在 λ 确定时, 缩放的大小则取决于矩阵 $\mathbf{X}$ 的奇异值. 奇异值越大, $\frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda}$ 一项越接近 1; 奇异值越小, $\frac{\sigma_i^2}{\sigma_i^2 + \lambda}$ 一项越接近 0. 在设计矩阵 $\mathbf{X}$ 中, 尤其是当 $(m+1) \gg n$ 时, $\mathbf{X}$ 的列向量之间会展现出很强的**多重共线性 (Multicollinearity)**, 即可以理解为它们之间彼此线性相关. 在此情况下强烈的多重共线性会使得 $\mathbf{X}$ 出现很小的奇异值, 从而导致 OLS 在这些奇异值方向上的系数极不稳定. Ridge 回归的作用可以通俗地理解为: 其更好地保留了 $\mathbf{X}$ 中真正对响应变量能起到作用的协变量. 对于一些关联性极小的协变量则削弱它们的权重. 这种从众多协变量中选出部分重要的协变量也被我们称为**变量选择 (Variable Selection)**.

由于 Ridge 回归具有相对简单的闭合解, 因此我们不妨再研究一下其性质:



定理

定理 7.7. 在模型 $y = X\beta + \varepsilon$ 中, 设噪声满足同方差性 $\text{Var}(\varepsilon_i) = \sigma^2$, 设 X 为设计矩阵, $\lambda \geq 0$, $\hat{\beta}_{\text{Ridge}}$ 为参数 β 的 Ridge 回归估计量, 那么

$$\mathbb{E}[\hat{\beta}_{R,\lambda}|X] = (X^\top X + \lambda I)^{-1} X^\top X \beta, \quad \text{Var}(\hat{\beta}_{R,\lambda}|X) = \sigma^2 (X^\top X + \lambda I)^{-1} X^\top X (X^\top X + \lambda I)^{-1}.$$

该定理读者自证不难. 它告诉我们此时 Ridge 回归估计量不再为关于参数 β 的无偏估计, 但是有一个好处便是其方差小于最小二乘估计量的方差.

定理

定理 7.8. 对任意的 $\lambda > 0$, Ridge 回归估计量的方差小于最小二乘估计量的方差. 即

$$\text{Var}(\hat{\beta}_{R,\lambda}|X) \leq \text{Var}(\hat{\beta}_{OLS}|X).$$

该定理的证明略.

LASSO 回归

提起变量选择, 我们就不得不再介绍一种正则化手段: **LASSO 回归 (LASSO Regression)**. LASSO 的全称为**最小绝对收缩与选择算子 (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator)**, 其原理与 Ridge 回归非常相似, 都是在 $\|y - X\beta\|^2$ 一项后面加入了一个惩罚项. 根据定义, 通过 LASSO 回归得到的参数估计 $\hat{\beta}_{\text{LASSO}}$ 满足

$$\hat{\beta}_{\text{LASSO}} := \arg \min_{\beta} (\|y - X\beta\|^2 + \lambda \|\beta\|_1), \quad \lambda > 0, \quad (7.5)$$

其中我们定义 $\|\beta\|_1$ 为参数向量 $\beta = (\beta_0 \ \beta_1 \ \cdots \ \beta_m)$ 的 L^1 模:

$$\|\beta\|_1 := \sum_{i=0}^m |\beta_i|.$$

对于(7.5)中一般情形的 LASSO 回归, 我们无法像 Ridge 回归那样求出一个简单的解. 这是因为在 LASSO 的惩罚项中有绝对值函数 $|\beta_j|$, 而该函数在 $\beta_j = 0$ 处不可导. 因此我们无法通过简单的求导而得到一个公式. 不过, 在一维情形中, 我们可以进行简易分析: 此时(7.5)可以写作

$$\arg \min_{\beta \in \mathbb{R}} \{(z - \beta)^2 + \lambda |\beta|\} = \arg \min_{\beta \in \mathbb{R}} \{\beta^2 - 2z\beta + \lambda |\beta|\}. \quad (7.6)$$

方程(7.6)的解为

$$\hat{\beta}_{\text{LASSO}} = \begin{cases} z - \frac{\lambda}{2}, & z > \frac{\lambda}{2} \\ 0, & |z| \leq \frac{\lambda}{2} \\ z + \frac{\lambda}{2}, & z < -\frac{\lambda}{2} \end{cases}.$$

因此, 当未正则化估计的 z 的绝对值不超过 $\frac{\lambda}{2}$ 时, LASSO 会将对应系数直接压缩为 0. 这样一来便可以减少协变量的数量, 这也正是 LASSO 可以进行变量选择的原因. 从几何角度来看, 在二维平面 (β_1, β_2) 中函数



$|\beta_1| + |\beta_2|$ 的等值线即为一个“菱形”. 因此当我们尝试去寻找此时 $|\beta_1| + |\beta_2|$ 与 $\|y - X\beta\|$ 的等值线相切的点时, 菱形的棱角变更容易成为切点. 此时也便对应了 β_1 或 β_2 的坐标为零, 也因此达到了变量选择的效果.

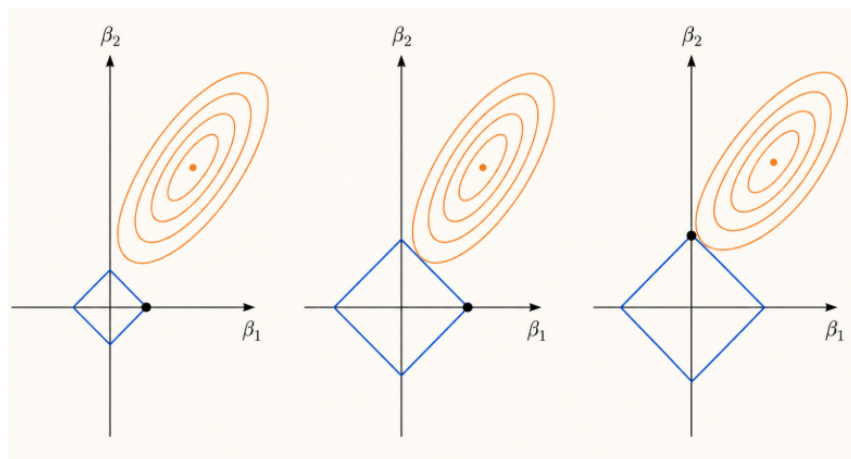


图 26: LASSO 的几何演示

7.3 R Lab

我们将使用 R 软件来演示如何运用最小二乘, Ridge 与 Lasso 回归来进行数据分析. 假设我们想要研究一处海滩附近每日的鲨鱼数量. 那么鲨鱼数量便将作为我们的响应变量. 同时假设我们目前考虑的协变量有: 当日的气温, 当日在海滩游泳的人数, 当日海滩附近渔船的数量, 当日 AMD 股票的均价, 以及当日 MLB 棒球比赛的场数. 那么不难发现在这些协变量里面最后两个基本上与响应变量没有什么关系, 因此在建立回归模型时我们也便自然希望看到这两个协变量对应的参数几乎为零. 在此, 我们在 R 软件中进行以下的模拟:

```

1  set.seed(123)
2  # 随机生成300个样本
3  num <- 300
4  #生成协变量
5  dat <- data.frame(ships = rnorm(n=num, mean=50, sd=10),
6  swimmers = round(rnorm(n=num, mean=500, sd=100)),
7  temp = rnorm(n=num, mean=90, sd=2),
8  stock_price = runif(n=num, min = 100, max=150),
9  mlb_games = runif(n=num, min=0, max=10)
10 )
11
12 #响应变量与协变量之间的关系
13 sharks <- round(rnorm(n=num, mean = 30, sd=10)+ #噪声项
14 -2*dat$ships+0.1*dat$swimmers+1*dat$temp+ 0*dat$stock_price+0*dat$mlb_games)
15
16 dat$sharks <- sharks
17

```



18

`plot(dat)`

根据我们假设的模型, 当日 AMD 股票的均价以及 MLB 棒球比赛的数量对鲨鱼数量没有任何影响; 每多一艘船便会使得鲨鱼数量下降 2; 每多 10 位游泳者便会使得鲨鱼数量上升 1; 气温每提高 1 度也会使得鲨鱼数量上升 1. 最后一行的 `plot` 指令可以绘制出在观测数据中不同两个协变量之间的散点图:

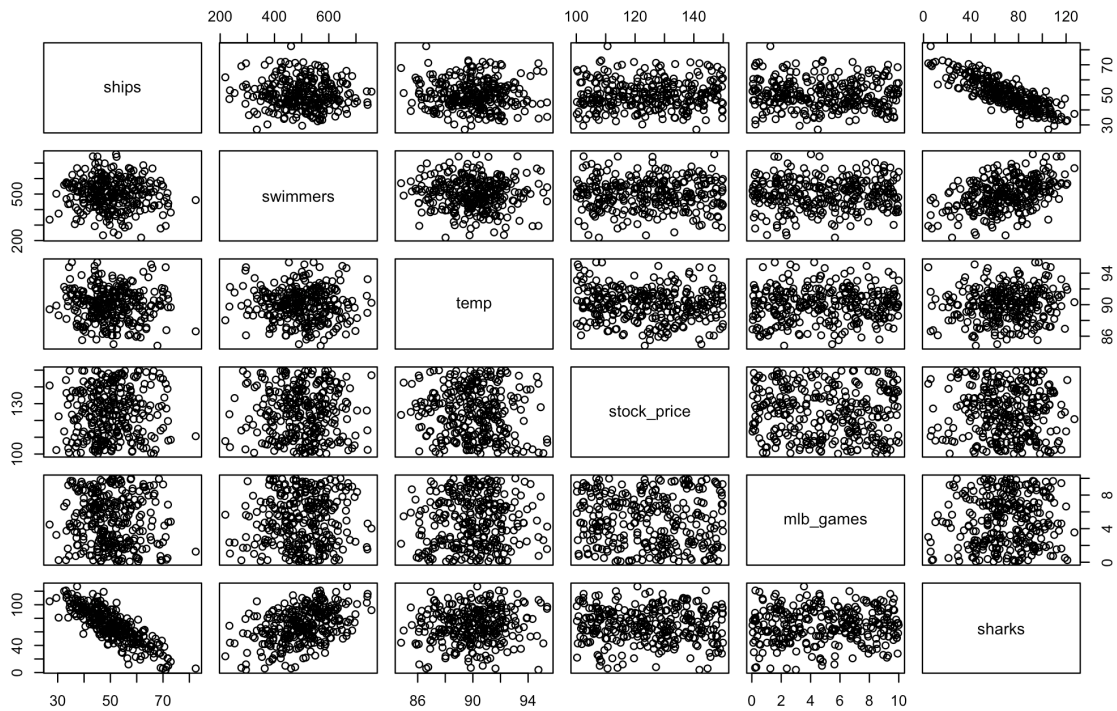


图 27: 不同协变量之间的散点图

我们首先来检验利用最小二乘所得到的线性模型 $y = X\beta + \varepsilon$ 的表现. 我们在 R 中运行如下的代码:

```
1 res <- lm(sharks~., data=dat)
2
3 summary(res)
```

最后一行的 `summary` 指令即可对该模型所得到的参数加以概括:

```
Call:
lm(formula = sharks ~ ., data = dat)

Residuals:
Min      1Q  Median      3Q      Max
-26.346  -6.563   0.620   6.643  33.705

Coefficients:
Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 24.637398  26.203791   0.940   0.348
ships       -2.127438   0.060019 -35.446 < 2e-16 ***
swimmers     0.098607   0.005729  17.212 < 2e-16 ***
```



```

temp      1.114489    0.274962    4.053 6.47e-05 ***
stock_price 0.023424    0.039430    0.594    0.553
mlb_games  -0.130108    0.191781   -0.678    0.498
---
Signif. codes:
0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 9.757 on 294 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8497,    Adjusted R-squared:  0.8472
F-statistic: 332.5 on 5 and 294 DF,  p-value: < 2.2e-16

```

在 **Estimate** 一栏中, 我们不难发现对于船只, 游泳人数, 当日气温, AMD 股票均价, MLB 棒球比赛数量这些协变量参数的估计量分别为 -2.127 , 0.099 , 1.114 , 0.023 , -0.130 . 这些估计量与真实值已经十分接近. 接下来我们将运行以下的代码进行 Ridge 回归.

```

1  install.packages("glmnet")
2  library(glmnet)
3
4  varmtx <- model.matrix(sharks~.-1, data=dat)
5  response <- dat$sharks
6
7  # alpha=0 means ridge regression.
8  ridge <- glmnet(scale(varmtx), response, alpha=0)
9
10 # Cross validation to find the optimal lambda penalization
11 cv.ridge <- cv.glmnet(varmtx, response, alpha=0)
12
13 # Create a function for labeling the plot below
14 lbs_fun <- function(fit, offset_x=1, ...) {
15   L <- length(fit$lambda)
16   x <- log(fit$lambda[L])+ offset_x
17   y <- fit$beta[, L]
18   labs <- names(y)
19   text(x, y, labels=labs, ...)
20 }
21
22 plot(ridge, xvar = "lambda", label=T)
23 lbs_fun(ridge)
24 abline(v=cv.ridge$lambda.min, col = "red", lty=3)
25 abline(v=cv.ridge$lambda.1se, col="blue", lty=3)

```

该代码会生成如下的参数与正则化参数 $-\log \lambda$ 的关系图像. 从图中我们可以看到当正则化参数趋于零时, 对应的参数估计便趋近于其最小二乘估计; 而随着正则化参数的增大, 对应的参数估计在惩罚项的影响下逐渐收缩, 最后收缩至零.



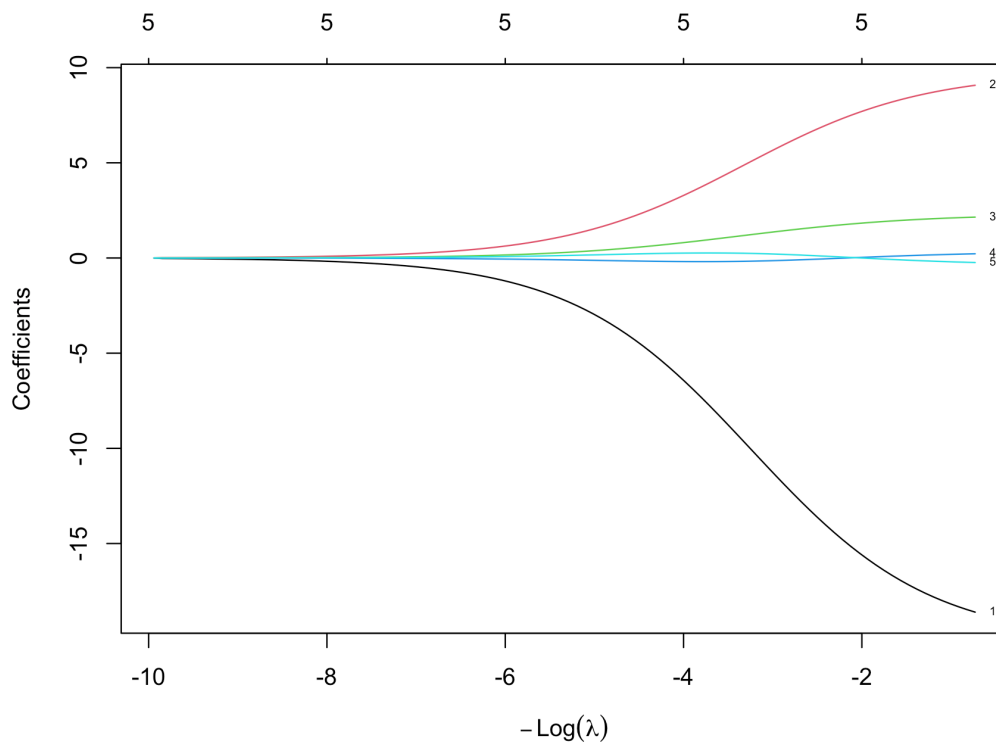


图 28

如果我们运用 LASSO 回归, 我们可以运行以下的代码:

```

1 lasso <- glmnet(scale(varmtx), response, alpha=1)
2
3 cv.lasso <- cv.glmnet(varmtx, response, alpha=1)
4
5 plot(lasso, xvar = "lambda", label=T)
6 lbs_fun(lasso, offset_x = -2)
7 abline(v=cv.lasso$lambda.min, col = "red", lty=2)
8 abline(v=cv.lasso$lambda.1se, col="blue", lty=2)

```

通过观察下图, 我们也不难发现在 LASSO 回归中, 对于任意的 λ 取值, 总会有一些协变量的估计为零, 因此和 Ridge 回归相比 LASSO 回归更能起到变量选择的作用. 通过观察下图我们也能分辨出哪些协变量是重要的, 而哪些协变量是可有可无的.



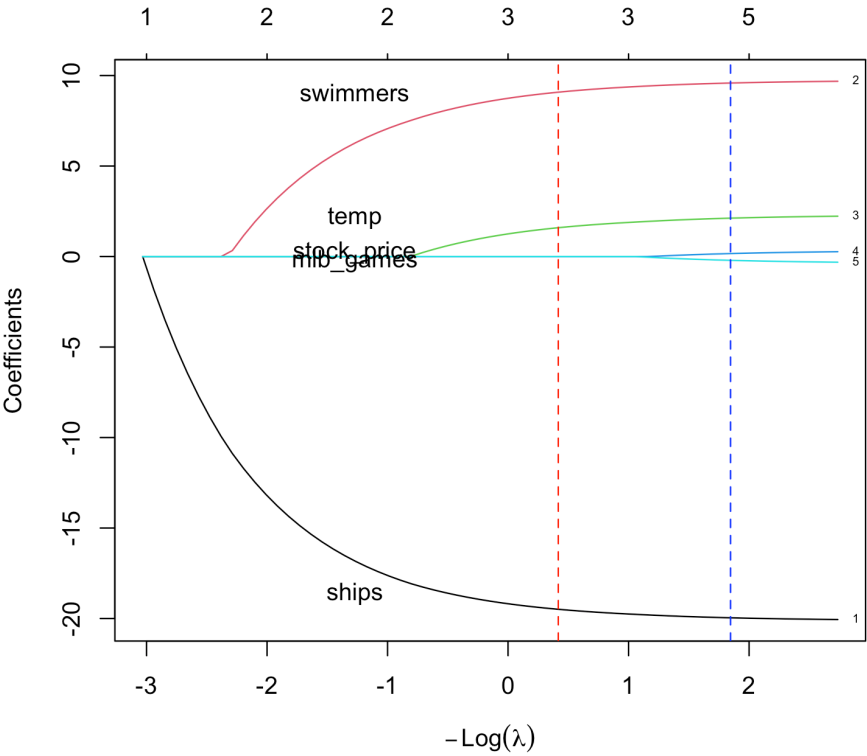


图 29

值得注意的是, Ridge 与 LASSO 回归同样也适用于设计矩阵满列秩时的情况.



后记

2024 年的暑假, 我开始了这本书的编写. 我在 2024 年的 6, 7 两个月期间完成了本书第一, 二, 三章以及第四章第一节的编写. 随后由于学业紧张我一直没有时间重新回到编写工作中. 这本书的 LaTeX 文档也就默默无闻地在我的文件夹里面闲置了将近两年. 2026 年 5 月, 随着我顺利获得应用数学学士学位, 我一下子变得清闲起来, 我也因此想在这个暑假做一些有意义的事情.

在某日的浏览中, 我无意间发现了这个被我遗忘许久的源文件. 点开之后我大吃一惊, 于是一个念头便在我的脑海中浮现了: 我要完成这本书的编写. 于是在接下来的一段时间, 我每天都会进行大约一节内容的编写, 顺带对之前章节进行适当地润色修改. 前前后后将近两个月过去了, 我也顺利完成了第四, 五, 六, 七章的初步编写.

尽管我和我的一些同学对本书进行了详细地审核, 但无奈编者水平有限, 错误难免. 因此也请广大读者谅解.

Johansson

