

目录

线性方程组 2

1. 概念 2

2. 矩阵 2

 2.1 矩阵引入 2

 2.2 线性方程组的求解 3

 2.3 主元 3

3. 向量方程 4

 3.1 向量 4

 3.2 线性组合 5

4. 矩阵方程 $Ax = b$ 6

 4.1 齐次线性方程与线性相/无关 6

矩阵代数与行列式 7

1. 概念与矩阵运算 7

2. 矩阵的逆 8

 2.1 求 A^{-1} 的算法 8

 2.2 逆矩阵的应用-方程求解 8

 2.3 可逆矩阵的性质、判断是否可逆 9

3. 矩阵因式分解- LU 分解 10

 3.1 LU 分解算法 11

 3.2 算法性能分析 12

 3.3 LUP 分解 and 置换矩阵 12

 3.4 应用-求逆矩阵 13

4. 行列式 14

 4.1 行列式的计算 14

 4.2 行列式的性质 15

 4.3 逆矩阵公式 15

 4.4 用行列式表示面积或体积 16

线性方程组

1.概念

包含未知数 x_1, x_2, \dots, x_n 的一个**线性方程**是形如

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n = b$$

的方程，其中 b 与系数 a_1, a_2, \dots, a_n 是实数或复数，通常是已知数。

而**线性方程组**是由一个或多个包含相同变量 x_1, x_2, \dots, x_n 的线性方程组成的。例如

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 1.5x_3 = 8 \\ x_1 - 4x_3 = -7 \end{cases}$$

线性方程组的一组解是一组数 (s_1, \dots, s_n) ，用这组数分别代替 x_1, x_2, \dots, x_n 时所有方程的两边相等。例如 $(5, 6.5, 3)$ 代入方程组变成等式 $8 = 8$ 和 $7 = -7$ 。

方程组所有可能的解的集合称为线性方程组的**解集**。若是两个线性方程组有相同的解集，则它们等价。

求包含两个未知数的两个方程组成的方程组的解，等价于求两条直线的交点，例如

$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 = -1 \\ -x_1 + 3x_2 = 2 \end{cases}$$

这两个方程的图形都是直线，两条直线可能交于一点、不相交(平行)、重合，分别对应于一个解、无解、无穷多解的情况。

2.矩阵

2.1 矩阵引入

一个线性方程组包含的主要信息可以用**矩阵**表示，给出方程组

$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 + x_3 = 0 \\ 2x_2 - 8x_3 = 8 \\ -4x_1 + 5x_2 + 9x_3 = -9 \end{cases}$$

把每一个变量的系数写在对齐的一列中，矩阵

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 0 & 2 & -8 \\ -4 & 5 & 9 \end{bmatrix}$$

称之为该方程组的**系数矩阵**，而

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & -8 & 8 \\ -4 & 5 & 9 & -9 \end{bmatrix}$$

称之为增广矩阵。

2.2 线性方程组的求解

基本的思路是把方程组用一个更容易解的等价方程组代替。

粗略地说，我们用第一个方程组中第一个方程中含 x_1 的项消去其他方程中的含 x_1 的项，然后用第二个方程中含 x_2 的项消去其他方程中含 x_2 的项，以此类推，最后得到一个很简单的等价方程组(阶梯状的方程组)。

例如

$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 + x_3 = 0 \\ 2x_2 - 8x_3 = 8 \\ -4x_1 + 5x_2 + 9x_3 = -9 \end{cases} \quad \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & -8 & 8 \\ -4 & 5 & 9 & -9 \end{bmatrix}$$

可以将第一个方程*4 加上第 3 个方程，从而得到新的方程 3.如下所示

$$\begin{array}{l} 4 \cdot [\text{方程 1}]: 4x_1 - 8x_2 + 4x_3 = 0 \\ + [\text{方程 3}]: -4x_1 + 5x_2 + 9x_3 = -9 \\ \hline [\text{新方程 3}]: -3x_2 + 13x_3 = -9 \end{array}$$

就可以得到一个新的方程组和矩阵。以此类推最终得到阶梯状的方程组为

$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 + x_3 = 0 \\ x_2 - 4x_3 = 4 \\ x_3 = 3 \end{cases} \quad \begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

就这样，我们可以很容易地知道原方程组的解为(29,16,3)。

下面我们引入行初等变换：

1. (倍加变换) 把某一行换成它本身与另一行的倍数的和。
2. (对数变换) 把两行对换。
3. (倍乘变换) 把某一行的所有元素乘以同一个非零数。

若其中一个矩阵经过若干行初等变换变换为另一个矩阵，我们称这两个矩阵为行等价的。

2.3 主元

对于一个阶梯型矩阵，我们定义**主元元素**与**主元列**。下面是几个概念：

先导元素：(非零行中)该行最左边的非零元素。

主元位置：阶梯型矩阵中先导元素的位置

主元列：含有先导元素的列

我们举个例子，如下所示

$$\begin{bmatrix} 1 & 4 & 5 & -9 & -7 \\ 0 & 2 & 4 & -6 & -6 \\ 0 & 0 & 0 & -5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

可以知道，主元列是第 1、2、4 列，主元为 1、2、-5.

通过先前的知识可以知道，矩阵可以对应于一个线性方程组，例如：

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -5 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{cases} x_1 - 5x_3 = 1 \\ x_2 + x_3 = 4 \\ 0 = 0 \end{cases}$$

对应于主元列的变量 x_1 和 x_2 称为**基本变量**，其他变量(x_3)称为**自由变量**。

3.向量方程

3.1 向量

仅含一列的矩阵称为**列向量**，或简称**向量**。

若 n 是正整数， \mathbb{R}^n 表示所有 n 个实数数列(或有序 n 元组)的集合，通常写成 $n \times 1$ 列矩阵的形式，如

$$\vec{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}$$

所有元素都是零的向量称为零向量，用 $\vec{0}$ 表示。

下面举个例子：

$$\vec{u} = \begin{bmatrix} 3 \\ -1 \end{bmatrix}, \vec{w} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}$$

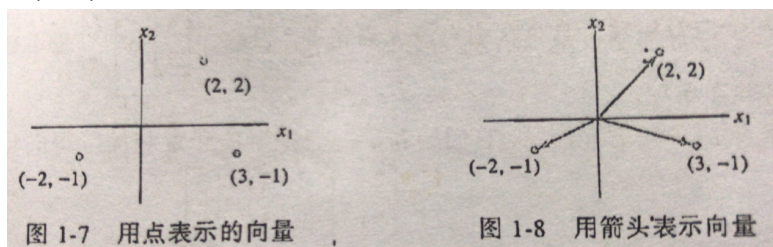
这里 w_1 和 w_2 是任意实数。所有的两个元素的向量的集记为 \mathbb{R}^2 ， \mathbb{R} 表示向量中的元素是实数，而指数 2 表示每个向量包含两个元素。

向量之间是可以做加减的，就是对应元素做加减得到新的向量；也支持和实数做标量乘法，就是实数与每个元素做乘法得到新的向量。

有时为了方便，我们会将列向量写成括号的形式，例如

$$\begin{bmatrix} 3 \\ -1 \end{bmatrix} \rightarrow (3, -1)$$

可以理解为是一个集合点对， \mathbb{R}^2 看作是平面上所有点的集合，而向量的几何表示是一条由原点(0,0)指向点(3,-1)的有向线段，如图。



其他维度的也同理。

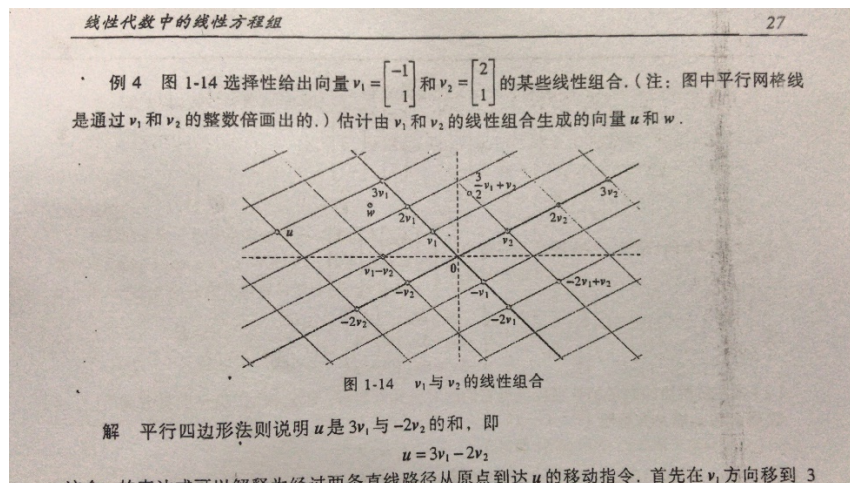
3.2 线性组合

给定 \mathbb{R}^n 中向量 $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_p$ 和标量 c_1, c_2, \dots, c_p , 向量

$$\vec{y} = c_1 \vec{v}_1 + \dots + c_p \vec{v}_p$$

称为向量 $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_p$ 以 c_1, c_2, \dots, c_p 为权的**线性组合**。

线性组合可以在几何上去理解, 线性组合后的向量与其他向量一样, 均是空间中的一个点。它的形成方式如下所示



也就是例如

$$\vec{u} = 3\vec{v}_1 - 2\vec{v}_2$$

可以当成是从原点开始沿着 \vec{v}_1 的方向走了三个单位, 再沿着 \vec{v}_2 方向走了-2个单位。

线性代数的一个主要思想是研究可以表示为某一固定向量集合 $\{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_p\}$ 的线性组合的所有向量。若 $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_p$ 是 \mathbb{R}^n 中的向量, 则 $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_p$ 的所有线性组合所称的集合用记号 $\text{Span}\{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_p\}$ 表示称为由 $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_p$ 所生成(或张成)的 \mathbb{R}^n 的子集, 也就是说, $\text{Span}\{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_p\}$ 是所有形如

$$c_1 \vec{v}_1 + \dots + c_p \vec{v}_p$$

的向量的集合, 其中 c_1, \dots, c_p 为标量。

要判断向量 \vec{b} 是否属于 $\text{Span}\{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_p\}$, 就是判断向量方程

$$x_1 \vec{v}_1 + \dots + x_p \vec{v}_p = \vec{b}$$

是否有解, 或等价地, 判断增广矩阵 $[\vec{v}_1 \dots \vec{v}_p \ \vec{b}]$ 的线性方程组是否有解。注意, 一定包含零向量。

下面是 $\text{Span}\{\vec{u}\}$ 与 $\text{Span}\{\vec{u}, \vec{v}\}$ 的几何解释。

设 \vec{u} 是 \mathbb{R}^3 中的向量, 那么 $\text{Span}\{\vec{u}\}$ 就是 \vec{u} 的所有数量倍数的集合, 也就是通过 \vec{u} 和 $\vec{0}$ 的直线上所有点的集合。

若 \vec{u} 和 \vec{v} 是 \mathbb{R}^3 的非零向量， \vec{v} 不是 \vec{u} 的倍数，则 $\text{Span}\{\vec{u}, \vec{v}\}$ 是 \mathbb{R}^3 中通过 \vec{u} 、 \vec{v} 和 $\vec{0}$ 的平面，可以结合我们之前的线性组合的几何理解上去理解。

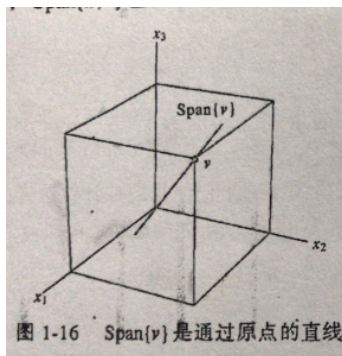


图 1-16 $\text{Span}\{v\}$ 是通过原点的直线

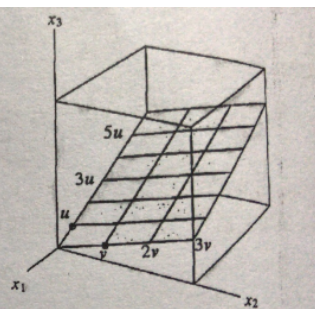


图 1-17 $\text{Span}\{u, v\}$ 是通过原点的平面

4. 矩阵方程 $A\vec{x} = \vec{b}$

线性代数的一个基本思想是把向量的线性组合看作矩阵与向量的积。

若 A 是 $m \times n$ 矩阵，它的各列为 a_1, \dots, a_n 。若 \vec{x} 是 \mathbb{R}^n 中向量，则 A 与 \vec{x} 的积，记为 $A\vec{x}$ ，就是 A 的各列以 \vec{x} 中对应元素为权的线性组合，即

$$A\vec{x} = [\vec{a}_1 \ \vec{a}_2 \ \dots \ \vec{a}_n] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = x_1 \vec{a}_1 + x_2 \vec{a}_2 + \dots + x_n \vec{a}_n$$

注意维度要求， A 的列数必须要等于 \vec{x} 中的元素个数。例如

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 0 & -5 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 7 \end{bmatrix} = 4 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + 3 \begin{bmatrix} 2 \\ -5 \end{bmatrix} + 7 \begin{bmatrix} -1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \end{bmatrix}$$

通过这个例子，相信能更好的理解矩阵相乘(即为什么要第一个矩阵的列数要等于第二个矩阵的行数)，还可以结合神经网络的前向传播来理解。

定理 设 A 是 $n \times m$ 矩阵，则下列命题是逻辑上等价的，也就是说，对某个 A ，它们都成立或者都不成立。

- 对 \mathbb{R}^m 中的每个 \vec{b} ，方程 $A\vec{x} = \vec{b}$ 有解
- \mathbb{R}^m 中的每个 \vec{b} 都是 A 的列的一个线性组合
- A 的各列生成 \mathbb{R}^m
- A 在每一列都有一个主元位置

其实要理解不难， a 和 d 是等价的，每一列均有一个主元，即阶梯型的矩阵每一列均不会出现 $0=b$ 的情况，就可以从最后一行开始逐步往上求解，所以 a 也是成立的。

对于 b ，因为 A 是一个可以到达最后一行的阶梯型的矩阵，所以自然是可以表示出任何 m 行向量。

4.1 齐次线性方程与线性相/无关

若它可以写成 $A\vec{x} = \vec{0}$ 的形式，则称该线性方程组为**齐次线性方程组**。这样的方程组至少

有一个解，即 $\vec{x} = \vec{0}$ ，这个解称为它的**平凡解**。我们往往更关注的是它的非平凡解。

我们将矩阵方程转换为向量方程，例如考虑方程

$$x_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix} + x_3 \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

此方程当然有平凡解，即 $x_1 = x_2 = x_3 = 0$ ，不过我们更关心的是平凡解是否是唯一解。

我们定义， \mathbb{R}^n 中的一组向量 $\{v_1, \dots, v_p\}$ 称为**线性无关**的，若向量方程

$$x_1 \vec{v}_1 + \dots + x_p \vec{v}_p = \vec{0}$$

仅有平凡解，向量组(集) $\{v_1, \dots, v_p\}$ 称为**线性相关**的，若存在不全为零的权 c_1, \dots, c_p ，使

$$c_1 \vec{v}_1 + \dots + c_p \vec{v}_p = \vec{0}$$

矩阵代数与行列式

1. 概念与矩阵运算

若 A 是 $m \times n$ 矩阵，即有 m 行 n 列的矩阵， A 的第 i 行第 j 列的元素用 a_{ij} 表示，称为 A 的 (i, j) 元素，如下图所示

设 A, B, C 是相同维数的矩阵， r 与 s 为数，则有

- a. $A + B = B + A$
- b. $(A + B) + C = A + (B + C)$
- c. $(A + 0) = A$
- d. $r(A + B) = rA + rB$
- e. $(r + s)A = rA + sA$
- f. $r(sA) = (rs)A$
- g. $AB \neq BA$

若乘积 AB 有定义， AB 的第 i 行第 j 列的元素是 A 的第 i 行与 B 的第 j 列对应元素乘积之和。若 $(AB)_{ij}$ 表示 AB 的 (i, j) 元素， A 为 $m \times n$ 矩阵，则

$$(AB)_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \dots + a_{in}b_{nj}$$

矩阵乘法的理解可以参照前面有关矩阵方程的介绍。

矩阵的乘幂表示为 A^k ，其中 A 是 $n \times n$ 矩阵， A^k 表示 k 个 A 的乘积。 A^0 为单位矩阵。

$$A^k = A \cdots A$$

矩阵的转置表示为 A^T ，其中 A 是一个 $m \times n$ 矩阵，则 A 的转置是一个 $n \times m$ 矩阵，它的列是由 A 对应行构成的。

设 A 与 B 表示矩阵，其维数使下列和与积有定义，则

- a. $(A^T)^T = A$

- b. $(A+B)^T = A^T + B^T$
- c. 对任意实数 r , $(rA)^T = rA^T$
- d. $(AB)^T = B^T A^T$

2.矩阵的逆

一个 $n \times n$ 矩阵 A 是可逆的, 若存在一个 $n \times n$ 矩阵 C 使

$$AC = I \text{ 且 } CA = I$$

这时称 C 是 A 的**逆阵**, A 可逆, 且它的逆矩阵唯一。我们将 C 记为 A^{-1} , 于是

$$AA^{-1} = I \text{ 且 } A^{-1}A = I$$

不可逆矩阵也称为**奇异矩阵**, 可逆矩阵也称为**非奇异矩阵**。

我们从这个定义可以知道, 可逆矩阵一定是方阵。后面还会引入左逆和右逆。下面是有关可逆矩阵的一些性质。

2.1 伴随矩阵求 A^{-1}

将 A 和 I 排在一起构成增广矩阵 $[A \ I]$, 则对此矩阵进行行变换时, A 和 I 受到同一变换。要么有一系列行变换把 A 变成 I , 同时 I 变成 A^{-1} ; 要么 A 是不可逆的。例如

如求 $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 4 \\ 2 & -1 & 0 \end{bmatrix}$ 的逆矩阵 A^{-1} 。

$$B = [A|I] = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 4 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 4 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{2} & 1 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

故 A 可逆并且, 由右一半可得逆矩阵 $A^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 4 & -2 & 1 \\ -\frac{3}{2} & 1 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$

伴随矩阵求 A^{-1} 时间复杂度为 $O(n^4)$, 开销大, 更高效的算法可以参考 [3.4 应用](#), 应用矩阵的因式分解来求。

2.2 逆矩阵的应用-方程求解

可逆矩阵的一个重要性质就是用于求解方程组。

若 A 可逆, 则对每一个 \mathbb{R}^n 中的 \vec{b} , 方程 $A\vec{x} = \vec{b}$ 有唯一解 $\vec{x} = A^{-1}\vec{b}$ 。

我们举一个例子来说明可逆矩阵的作用。比如我们要解如下方程

$$\begin{cases} 3x_1 + 4x_2 = 3 \\ 5x_1 + 6x_2 = 7 \end{cases}$$

解 该方程组就是 $A\vec{x} = \vec{b}$, 可以看成

$$\begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 7 \end{bmatrix}$$

所以有

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 3 \\ 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 & 2 \\ 5/2 & -3/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ -3 \end{bmatrix}$$

2.3 可逆矩阵的性质、判断是否可逆

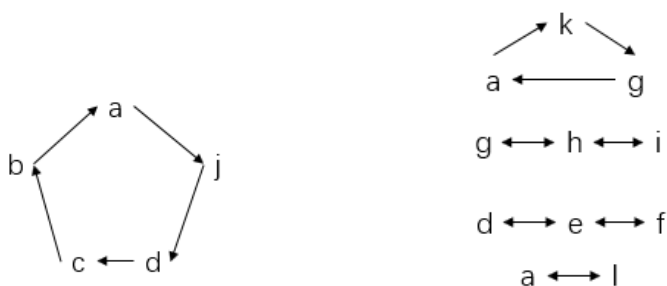
下面是有关可逆矩阵的两个基本定理：

- $(A^{-1})^{-1} = A$
- 若 A, B 可逆, 则有 $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$

接着是可逆矩阵定理。设 A 为 $n \times n$ 矩阵，则下列命题是等价的，即对某一特定的 A ，它们同时为真或同时为假。

- A 是可逆矩阵
- A 等价于 $n \times n$ 单位矩阵
- A 有 n 个主元位置
- 方程 $A\vec{x} = \vec{0}$ 仅有平凡解
- A 的各列线性无关
- 线性变换 $\vec{x} \mapsto A\vec{x}$ 是一对一的
- 对 \mathbb{R}^n 中任意 \vec{b} , 方程 $A\vec{x} = \vec{b}$ 至少有一个解
- A 的各列生成 \mathbb{R}^n
- 线性变换 $\vec{x} \mapsto A\vec{x}$ 把 \mathbb{R}^n 映上 \mathbb{R}^n 上
- 存在 $n \times n$ 矩阵 C 使 $CA = I$
- 存在 $n \times n$ 矩阵 D 使 $DA = I$
- A^T 是可逆矩阵

它们的推导关系如下所示



$c \rightarrow b$ 是因为在矩阵有 n 个主元就说明它的简化阶梯形是 I 。

关于 d, 可有 j 推出, 即 $CA\vec{x} = \vec{0}$ 推得 $\vec{x} = \vec{0}$.

关于 e ，其实就是 d ，可参照 4.1 节。

利用这些定理，我们可以用于判断一个矩阵是否可逆。例如我们有一个矩阵A，如下所示。

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 3 & 1 & -2 \\ -5 & -1 & 9 \end{bmatrix}$$

解

$$A \sim \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & 4 \\ 0 & -1 & -1 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

所以A有 3 个主元位置，根据可逆矩阵定理 c，A是可逆的。

3.矩阵因式分解-LU分解

矩阵的因式分解是把A表示为两个或更多矩阵的乘积，矩阵乘法是数据的综合（把两个或更多线性变换的作用结合成一个矩阵），矩阵的因式分解是数据的分解，把数据组成两个或者更多，这种结构可能更有用，或者更便于计算。

LU分解，是在工业与商业问题中常见的，解一系列具有相同系数矩阵中的线性方程

$$A\vec{x} = \vec{b}_1, A\vec{x} = \vec{b}_2, A\vec{x} = \vec{b}_3, \dots, A\vec{x} = \vec{b}_p$$

我们解决这个问题是可以通过计算 A^{-1} 来求解方程，但是若A不可逆呢？

首先，我们假设A是 $m \times n$ 矩阵可以行化简为阶梯形而不必行对换，则A可以写成形式 $A = LU$ ，L是 $m \times n$ 下三角矩阵，主对角线元素全是 1，U是A的一个等价的 $m \times n$ 阶梯形矩阵，例如下图所示，这样一个分解称为LU分解，矩阵L是可逆的，称为单位下三角矩阵。

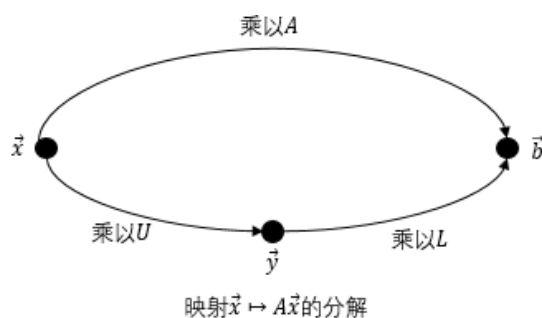
$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ * & 1 & 0 & 0 \\ * & * & 1 & 0 \\ * & * & * & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$L \qquad \qquad U$

求解 $A\vec{x} = \vec{b}$ 可写成 $L(U\vec{x}) = \vec{b}$ ，因此可以由解下列方程来求解 \vec{x} ：

$$\begin{cases} L\vec{y} = \vec{b} & (1) \\ U\vec{x} = \vec{y} & (2) \end{cases}$$

先解(1)再解(2)即可得到 \vec{x} ，每个方程都很容易解，因为L和U都是三角矩阵。



下面我们举一个例子来应用LU分解。

已知

$$A = \begin{bmatrix} 3 & -7 & -2 & 2 \\ -3 & 5 & 1 & 0 \\ 6 & -4 & 0 & -5 \\ -9 & 5 & -5 & 12 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & -5 & 1 & 0 \\ -3 & 8 & 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & -7 & -2 & 2 \\ 0 & -2 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = LU$$

应用 A 的 LU 分解来解 $A\vec{x} = \vec{b}$, 其中 $\vec{b} = \begin{bmatrix} -9 \\ 5 \\ 7 \\ 11 \end{bmatrix}$.

解

$$[L \vec{b}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & -9 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 5 \\ 2 & -5 & 1 & 0 & 7 \\ -3 & 8 & 3 & 1 & 11 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & -9 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -4 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} = [I \vec{y}]$$

$$[U \vec{y}] = \begin{bmatrix} 3 & -7 & -2 & 2 & -9 \\ 0 & -2 & -1 & 2 & -4 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 3 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -6 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} = [I \vec{x}]$$

$$\text{所以 } \vec{x} = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ -6 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

3.1 LU 分解算法

算法并不复杂, 总的来说就是

1. 矩阵 A 经过一系列行变换变成阶梯形矩阵, 即为 U
2. 变换过程在每个主元列, 把主元以下的元素除以主元即为 L 在该列主元以下的元素。

以一个例子来讲解。求下列矩阵的 LU 分解

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 5 & -2 \\ -4 & -5 & 3 & -8 & 1 \\ 2 & -5 & -4 & 1 & 8 \\ -6 & 0 & 7 & -3 & 1 \end{bmatrix}$$

解

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 5 & -2 \\ -4 & -5 & 3 & -8 & 1 \\ 2 & -5 & -4 & 1 & 8 \\ -6 & 0 & 7 & -3 & 1 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 5 & -2 \\ 0 & 3 & 1 & 2 & -3 \\ 0 & -9 & -3 & -4 & 10 \\ 0 & 12 & 4 & 12 & -5 \end{bmatrix} = A_1$$

$$\sim A_2 = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 5 & -2 \\ 0 & 3 & 1 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 7 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 5 & -2 \\ 0 & 3 & 1 & 2 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5 \end{bmatrix} = U$$

接着是在变换过程中求出 L 矩阵。上式中标出的元素确定了 A 化为 U 的行变换, 在每个主元列, 把标出的元素除以主元后将结果放入 L 。(提问, 如果处理主元为 0 的情况?)

$$\begin{array}{c} \begin{bmatrix} 2 \\ -4 \\ 2 \\ 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ -9 \\ 12 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \end{bmatrix} [5] \\ \div 2 \quad \div 3 \quad \div 2 \div 5 \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -3 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 2 & 1 \end{bmatrix} = L \end{array}$$

容易证明，所求出的 L 和 U 满足 $LU = A$ 。

3.2 算法性能分析

下列运算次数的计算适用于 $n \times n$ 稠密矩阵 A (大部分元素非零), n 相当大, 例如 $n \geq 30$ 。

1. 计算 A 的 LU 分解大约需要 $2n^3/3$ 浮算, 而求 A^{-1} 大约需要 $2n^3$ 浮算。
2. 解 $L\vec{y} = \vec{b}$ 和 $U\vec{x} = \vec{y}$ 大约需要 $2n^3$ 浮算, 因为任意 $n \times n$ 三角方程组可以用大约 n^3 浮算接触。
3. 把 \vec{b} 乘以 A^{-1} 也需要 $2n^3$ 浮算, 但结果可能不如 L 和 U 得出的精确(由于计算 A^{-1} 及 $A^{-1}\vec{b}$ 的舍入误差)
4. 若 A 是稀疏矩阵 (大部分元素为 0), 则 L 和 U 可能也是稀疏的, 然而 A^{-1} 很可能是稠密的, 显然用 LU 分解来解 $A\vec{x} = \vec{b}$ 很可能比用 A^{-1} 快很多。

3.3 LUP分解 and 置换矩阵

考虑下面一个矩阵的 LU 分解。

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

根据之前所述算法, 先将矩阵 A 化为阶梯形矩阵, 并在变换的过程中求出 L 。但是很明显, 在这种情况下, 会出现除数为 0 的情况, 这当然是灾难性的。

除了除数为 0 外, 还有除数很小的情况, 这会产生数值不稳定, 因此我们希望尽可能选一个较大的主元。所以有的时候我们必须在矩阵的非对角线元素中选主元。

我们先引入一个置换矩阵的概念, 考虑下面两个矩阵的相乘。

$$\text{已知 } P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 3 \\ 0 & -5 & -4 \end{bmatrix}, \text{ 计算 } P \cdot A$$

根据我们之前的所学知识很容易解出来。求得

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

可以发现，矩阵 A 似乎没什么变化，只是行的位置改变了而已。我们把这样的矩阵称之为置换矩阵。

置换矩阵 一种系数只由 0 和 1 组成的方阵。矩阵的每一行/列的第 i 个元素为 1，表示原矩阵的该行/列为第 i 行/列。具体置换的行 or 列取决于左乘还是右乘。

- 当矩阵 A 左乘一个置换矩阵，交换的是矩阵的行。即 $P \cdot A$
- 当矩阵 A 右乘一个置换矩阵，交换的是矩阵的列。即 $A \cdot P$

让我们回到 LUP 分解。借助这个置换矩阵，我们可以将矩阵 A 的行进行置换，每步重新选取较大的主元进行行替换。

原来的 $A = LU$ 我们改写为 $PA = LU$ ，其中 P 是一个置换矩阵。该式子意为先对 A 进行行置换，再对行置换后的 A 进行 LU 分解。

当我们要求解 $A\vec{x} = \vec{b}$ ，可做如下变换：

$$A\vec{x} = \vec{b}_1 \rightarrow PA\vec{x} = P\vec{b}_1 \rightarrow LU\vec{x} = P\vec{b}_1$$

于是问题可以化为

$$\begin{cases} L\vec{y} = P\vec{b} & (1) \\ U\vec{x} = \vec{y} & (2) \end{cases}$$

求解得到的 \vec{x} 就是 $A\vec{x} = \vec{b}$ 的解，证明如下：

$$A\vec{x} = P^{-1}LU\vec{x} = P^{-1}L\vec{y} = P^{-1}P\vec{b} = \vec{b}$$

其实 LU 分解是 LUP 分解的一种，当 $P = I$ 时， LUP 分解就成为 LU 分解。可以理解成是 A 矩阵不进行置换的情况下 LUP 分解就成为了 LU 分解。

3.4 应用

利用好矩阵的因式分解，不只是在求解方程组，在求逆矩阵、最小二乘逼近方面也能大大提高效率。

在求逆矩阵时，我们可以有两种思路：

- $A^{-1} = (LU)^{-1}P = U^{-1}L^{-1}P$
- 通过 LUP 分解解方程 $AX = I$ ， X 即为 A^{-1}

通过 LUP 分解来求逆矩阵的过程中，分解的过程需要 $O(n^3)$ ，求解三角矩阵的过程需要 $O(n^2)$ ，避免了主元素为 0 的情况。可提高求解一系列具有相同系数矩阵中的线性方程的效率，[3.矩阵因式分解-LU分解](#)。

LUP 分解在 Python 中可以使用 scipy 库的 `lu` 方法直接进行求解，使用示例如下：

```
1. import numpy as np
2. from scipy.linalg import lu
3.
4. if __name__ == "__main__":
5.     a = np.asarray([[2, 4, -1],
```

6. $[0, 0, 3],$
7. $[0, -5, -4]])$
8. $p, l, u = \text{lu}(a)$

4.行列式

首行列式是只对方阵才有定义的，即只有方阵才能计算行列式，可逆矩阵也类似。

当行列式不为 0 时，矩阵才可逆；当系数矩阵行列式不为 0 时，系数矩阵才线性无关，方程组才有解。

接下来我们会先介绍行列式是如何计算的。

4.1 行列式的计算

我们先给出 2×2 矩阵和 3×3 矩阵的行列式。

$$\det A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

$$\det A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} \\ - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{13}a_{22}a_{31}$$

余子式 在 n 阶行列式中，把元素 a_{ij} 所在的第 i 行第 j 列划去后，余下的 $n-1$ 阶行列式叫做 (i, j) 元素的 a_{ij} 的余子式，记作 M_{ij} ，同时 $A_{ij} = (-1)^{i+j}M_{ij}$ 称为 a_{ij} 的代数余子式。

要注意的是，余子式与代数余子式都是行列式，行列式的阶越低越容易计算，它存在的意义就是为了更好的计算行列式。

下面给出行列式的计算公式。

$$\det A = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = a_{11}M_{11} - a_{12}M_{12} + \cdots + (-1)^{1+n}a_{1n}M_{1n} \\ = a_{11}A_{11} + a_{12}A_{12} + \cdots + a_{1n}A_{1n}$$

这是按照第一行来计算行列式，更一般地，我们可以按照第 i 行或者第 j 列来计算。通过观察我们也可以知道，三角形矩阵的行列式等于对角线上元素的乘积。

$$\det A = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = a_{i1}A_{i1} + a_{i2}A_{i2} + \cdots + a_{in}A_{in} \\ = a_{1j}A_{1j} + a_{2j}A_{2j} + \cdots + a_{nj}A_{nj}$$

让我们举个例子来加深理解。

计算 $\det A$ ，这里

$$A = \begin{bmatrix} 3 & -7 & 8 & 9 & -6 \\ 0 & 2 & -5 & 7 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \end{bmatrix}$$

解 按 A 的第一列来进行计算, 有

$$\det A = 3 \cdot \begin{vmatrix} 2 & -5 & 7 & 3 \\ 0 & 1 & 5 & 0 \\ 0 & 2 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 \end{vmatrix} - 0 + 0 - 0 + 0$$

再对第一列进行展开, 有

$$\det A = 2 \cdot \begin{vmatrix} 1 & 5 & 0 \\ 2 & 4 & -1 \\ 0 & -2 & 0 \end{vmatrix} = -12$$

具体按照哪一行来展开要看情况。

4.2 行列式的性质

我们给出几个行列式的性质。

A 是一个方阵。

- 若 A 的某一行的倍数加到另一行得矩阵 B , 则 $\det B = \det A$
- 若 A 的两行互换得矩阵 B , 则 $\det B = -\det A$
- 若 A 的某行乘以 k 倍得到矩阵 B , 则 $\det B = k \cdot \det A$
- $\det A = \det A^T$, 这证明了行列式的列变换和行变换具有相同效果
- 若 A 与 B 均为 $n \times n$ 矩阵, 则 $\det AB = \det A \cdot \det B$

这几个性质可以帮我们有效地计算行列式。我们举一个例子来说明。

计算 $\det A$, 其中 $A = \begin{bmatrix} 1 & -4 & 2 \\ -2 & 8 & -9 \\ -1 & 7 & 0 \end{bmatrix}$

解 思路是先将 A 化简成阶梯形, 再利用三角形矩阵的行列式等于对角线上元素的乘积来计算。

$$\begin{aligned} \det A &= \begin{vmatrix} 1 & -4 & 2 \\ -2 & 8 & -9 \\ -1 & 7 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & -4 & 2 \\ 0 & 0 & -5 \\ -1 & 7 & 0 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & -4 & 2 \\ 0 & 0 & -5 \\ 0 & 3 & 2 \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} 1 & -4 & 2 \\ 0 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & -5 \end{vmatrix} \\ &= -(1)(3)(-5) = 15 \end{aligned}$$

4.3 逆矩阵公式

下面给出一个利用行列式来计算矩阵的逆的公式。

定理 设 A 是一个可逆的 $n \times n$ 矩阵, 则 $A^{-1} = \frac{1}{\det A} \text{adj} A$.

用一个例子来说明。求矩阵 $A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 4 & -2 \end{bmatrix}$ 的逆。

解 九个代数余子式为

$$A_{11} = + \begin{vmatrix} -1 & 1 \\ 4 & -2 \end{vmatrix} = -2 \quad A_{12} = 3 \quad A_{13} = 5$$

$$A_{21} = 14 \quad A_{22} = -7 \quad A_{23} = -7$$

$$A_{31} = 4 \quad A_{32} = 1 \quad A_{33} = -3$$

$adjA$ 为代数余子式的矩阵的转置(例如 A_{21} 到 (1,2) 的位置), 从而有

$$adjA = \begin{bmatrix} -2 & 14 & 4 \\ 3 & -7 & 1 \\ 5 & -7 & -3 \end{bmatrix}$$

我们可以直接计算 $\det A$, 但下列计算对上面的结果提供了一个检验并计算出 $\det A$ 的方法。

$$(adjA) \cdot A = \begin{bmatrix} -2 & 14 & 4 \\ 3 & -7 & 1 \\ 5 & -7 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 4 & -2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 14 & 0 & 0 \\ 0 & 14 & 0 \\ 0 & 0 & 14 \end{bmatrix} = 14I$$

我们根据定理可知, $A^{-1}A = \frac{1}{\det A} adjA \cdot A = \frac{1}{\det A} 14I$, 可知 $\det A = 14$.

$$\text{所以, } A^{-1} = \frac{1}{14} \begin{bmatrix} -2 & 14 & 4 \\ 3 & -7 & 1 \\ 5 & -7 & -3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/7 & 1 & 2/7 \\ 3/14 & -1/2 & 1/14 \\ 5/14 & -1/2 & -3/14 \end{bmatrix}$$

4.4 用行列式表示面积或体积

若 A 是一个 2×2 矩阵, 则由 A 的列确定的平行四边形的面积为 $|\det A|$; 若 A 是一个 3×3 矩阵, 则由 A 的列确定的平行六面体的体积也为 $|\det A|$. 可引申到 $n \times n$ 矩阵的情形。这也就是行列式的几何意义。

例如若 A 为 2 阶对角矩阵, 定理显然成立。

$$\left| \det \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & d \end{bmatrix} \right| = |ad| = \text{矩阵面积}$$

所以可以得出, 判断一个线性方程组是否有唯一解, 即判断系数矩阵的列向量所构成的体积是否为 0, 即判断列向量是否两两位于不同平面上。

