线性代数 Linear Algebra

Dait

目 录

第一章	向量和矩阵 1
1.1	向量 1
1.2	矩阵
1.3	矩阵的逆 6
	1.3.1* Woodbury 矩阵恒等式
	1.3.2* 分块矩阵的逆
第二章	线性方程组 11
2.1	消元法
2.2	矩阵的行变换
2.3	LU 分解
第三章	线性空间 17
3.1	线性空间
3.2	线性独立、基和维度
3.3	矩阵 <i>A</i> 的四个子空间
3.4	矩阵的秩、线性代数基本定理
0.1	3.4.1* 矩阵的秩的不等式
第四章	正交性 24
4.1	正交性
4.2	投影
4.3	最小二乘法
4.4	正交归一基
7.7	4.4.1 Gram-Schmidt 法则
	4.4.2 <i>QR</i> 分解
第五章	行列式 30
5.1	行列式
5.2	行列式的性质
0.4	5.2.1* 行列式的运算
5.3	Cramer 法则、伴随矩阵

目 录 ii

第六章	特征值和特征向量	38
6.1	特征值和特征向量	38
6.2	特征多项式	39
	6.2.1* Cayley-Hamilton 定理	39
6.3	矩阵对角化	41
6.4 *	Jordan 标准型	43
6.5	对称矩阵	45
6.6	正定矩阵	47
第七章	奇异值分解	49
7.1	奇异值分解	50
7.2	矩阵的模	52
7.3	伪逆	53
7.4	主成分分析	54
第八章	线性映射	55
8.1	线性映射和矩阵	
8.2	线性映射的性质	
8.3	基的变换	
8.4		
8.5	直和、直积	62
8.6	张量	63
第九章	复线性空间	66
第八早 9.1	友线性空间 内积和内积空间	66
9.1	Hermite 矩阵	
9.2	五田村 1	
9.3	五	09
	群、环、域	70
10.1	二元运算	70
10.2	群与子群	70
10.3	群同态	73
10.4	群同构	75
10.5	等价关系	75

1.1 向量

定义 1.1.1: 数域

给定复数集的子集 $\mathbb{F} \subset \mathbb{C}$, 若满足:

- 非平凡: 0,1∈ F;
- 封闭性: $\forall a, b \in \mathbb{F}$, 有 $a \pm b \in \mathbb{F}$, $ab \in \mathbb{F}$, 且 $a/b \in \mathbb{F}$ (当 $b \neq 0$ 时).

则称 F 是一个数域 (number field).

例 1.1.1: 数域的例子

- 最小的数域: 有理数域 ℚ;
- 二次数域 (quadratic field): 如 $\mathbb{Q}(\sqrt{2}) = \{a + b\sqrt{2} \mid a, b \in \mathbb{Q}\};$
- 实数域 ℝ、复数域 ℂ.
- 注. 直到第九章复线性空间之前,均只考虑实数域 $\mathbb{F} = \mathbb{R}$.

定义 1.1.2: 向量

一个 n 维向量 (vector) v 由 n 个标量 (scalar) $v_1, \ldots, v_n \in \mathbb{F}$ 组成,记作:

$$v = \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix},$$

组成向量 v 的标量 v_1, \ldots, v_n 称为 v 的分量 (component).

所有 n 维向量构成的集合记作 \mathbb{F}^n .

注. 如无特别说明,向量均默认为列向量,即 n 行 1 列.

定义 1.1.3: 零向量、反向量

零向量 (zero vector) 是所有分量均为 0 的向量,记作 0;

一个向量 v 的反向量 (opposite vector) 对应每个分量取相反数,记作 -v.

定义 1.1.4: 向量的加法

向量的加法 (addition) 即对应分量相加. 向量的减法定义为与其反向量相加.

推论. 向量加法的性质: $\forall v, u, w \in \mathbb{F}^n$,

- 交換律: v + u = u + v;
- 结合律: $v + (u + w) = (v + u) + w \equiv v + u + w$;
- 零向量: 0+v=v+0=v;
- 反向量: v + (-v) = 0.

定义 1.1.5: 向量的数乘

向量与标量的数乘 (scalar product) 即每个分量乘标量.

推论. 向量数乘的性质: $\forall v, u \in \mathbb{F}^n, c, d \in \mathbb{F}$,

- 1v = v, (-1)v = -v, 0v = 0.
- 结合律: $c(dv) = (cd)v \equiv cdv$;
- 对标量的分配律: (c+d)v = cv + dv;
- 对向量的分配律: c(v+u) = cv + cu.

定义 1.1.6: 线性组合

一般地, n 个向量 v_1, v_2, \ldots, v_n 的线性组合 (linear combination) 形如

$$c_1v_1 + c_2v_2 + \dots + c_nv_n, \quad \forall c_i \in \mathbb{F}.$$

注. 线性组合是线性代数中最重要的概念之一.

定义 1.1.7: (实) 向量的内积

两个向量的内积 (inner product) 结果是一个实数 $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathbb{F}^n \times \mathbb{F}^n \to \mathbb{R}$. 对于实向量

$$\langle v, u \rangle := \sum_{i=1}^{n} v_i u_i \equiv v_1 u_1 + v_2 u_2 + \dots + v_n u_n.$$
 (1.1)

有时可以将内积写成点乘的形式: $\langle v, u \rangle = v \cdot u$.

推论. 实向量内积的性质: $\forall v, u \in \mathbb{F}^n, c \in \mathbb{F}$,

- 交換律: $\langle v, u \rangle = \langle u, v \rangle$;
- 与数乘的结合律: $\langle cv, u \rangle = \langle v, cu \rangle = c \langle v, u \rangle$;
- $\oint \mathbb{R} \mathbb{R}^2 : \langle v + u, w \rangle = \langle v, w \rangle + \langle u, w \rangle;$
- 正定性: $\langle v, v \rangle \ge 0$, 且 $\langle v, v \rangle = 0 \iff v = 0$.

定义 1.1.8: 向量的长度

向量的长度 (或范数, norm) 可通过内积定义:

$$||v|| := \sqrt{\langle v, v \rangle} = (v_1^2 + v_2^2 + \dots + v_n^2)^{1/2}.$$
 (1.2)

长度为 1 的向量是单位向量 (unit vector).

推论. 与向量 v 同向的单位向量是

$$\hat{v} := \frac{v}{\|v\|},\tag{1.3}$$

注. 仅第 i 个分量为 1,其余均为 0 的单位向量记为 e_i .

1.2 矩阵

定义 1.2.1: 矩阵

一个m行n列的矩阵(matrix)A形如

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & \cdots & A_{mn} \end{bmatrix}, \quad A_{ij} \in \mathbb{F}.$$

其中 A_{ij} 是矩阵第 i 行第 j 列的元素 (entry). 特别地,当行数 m= 列数 n 时,称矩阵是 n 阶方阵 (square matrix).

所有 m 行 n 列矩阵构成的集合记作 $\mathbb{F}^{m \times n}$.

矩阵加法和数乘的运算规律与向量相同,是平凡的(trivial).

定义 1.2.2: 矩阵和向量的乘法 (左乘)

 $m \times n$ 矩阵 A 左乘 n 维向量 x,结果 b = Ax 是一个 m 维向量,其各分量为:

$$b_i = \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j, \quad i = 1, \dots, m.$$
 (1.4)

注. Ax 可以看成 A 所有列的线性组合,或者说 A 的各行与 x 分别内积. 这样线性方程组就可以等价地写成 Ax = b 的形式,即:

$$\begin{cases} A_{11}x_1 + \dots + A_{1n}x_n = b_1, \\ & \dots \\ A_{m1}x_1 + \dots + A_{mn}x_n = b_m, \end{cases} \iff \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & \dots & A_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix},$$

这种思想有助于我们掌握线性代数的理念.

定义 1.2.3: 矩阵的乘法

 $m \times n$ 矩阵 A 左乘 $n \times p$ 矩阵 B, 结果 AB 是一个 $m \times p$ 的矩阵, 其分量为

$$(AB)_{ij} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik} B_{kj}. \tag{1.5}$$

特别地, 当 A 是方阵时, 将 n 个 A 相乘简记为 A^n .

注. 若 A 可以左乘 B, 要求 A 的列数 = B 的行数.

推论. 矩阵乘法的性质: $\forall A, B, C$ 可运算的,

- 左分配律: (A+B)C = AC + BC;
- 右分配律: A(B+C) = AB + AC.
- 结合律: $(AB)C = A(BC) \equiv ABC$;

证明. 仅给出矩阵乘法结合律的证明: $\forall A \in \mathbb{F}^{m \times n}, B \in \mathbb{F}^{n \times p}, C \in \mathbb{F}^{p \times q}$

$$[A(BC)]_{ij} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik}(BC)_{kj} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik} \sum_{\ell=1}^{p} B_{k\ell}C_{\ell j}$$
$$= \sum_{\ell=1}^{p} \sum_{k=1}^{n} A_{ik}B_{k\ell}C_{\ell j} = \sum_{\ell=1}^{p} (AB)_{i\ell}C_{\ell j} = [(AB)C]_{ij}.$$

对应元素均相等,即证.

注. 矩阵乘法一般不满足交换律,即一般地, $AB \neq BA$, 比如

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

若 AB = BA,则称 A, B 是可交换的 (commutable).

推论. 若 A, B 可交换,则 A, B 必须首先为同阶方阵.

定义 1.2.4: 对角矩阵

当方阵 A 的非对角项均为 0 时,称 A 是对角的 (diagonal),可记作

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & & \\ & \ddots & \\ & & A_{nn} \end{bmatrix} \equiv \operatorname{diag}(A_{11}, \dots, A_{nn}). \tag{1.6}$$

注. 对角矩阵有很多简单的性质, 比如对角矩阵的乘法很简单

$$\operatorname{diag}(a_1, \dots, a_n) \operatorname{diag}(b_1, \dots, b_n) = \operatorname{diag}(a_1 b_1, \dots, a_n b_n). \tag{1.7}$$

因此任意同阶对角矩阵可交换.

定义 1.2.5: 单位矩阵

n 阶单位矩阵 (identity matrix) 是 n 阶对角矩阵,对角项均为 1:

$$I_n = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{bmatrix}.$$

5

推论. $\forall A \in \mathbb{F}^{m \times n}$,均有

$$I_m A = AI_n = A.$$

定理 1.2.1

若方阵 A 与任意方阵可交换,则 A = cI, $c \in \mathbb{F}$ 称作纯量矩阵 (scalar matrix).

证明. 定义 $e_{ij} \in \mathbb{F}^{n \times n}$ 表示仅 i 行 j 列为 1, 其余项均为 0 的矩阵. 则

$$(Ae_{ij})_{k\ell} = \sum_{p=1}^{n} A_{kp}(e_{ij})_{p\ell} = A_{ki}\delta_{j\ell};$$

$$(e_{ij}A)_{k\ell} = \sum_{p=1}^{n} (e_{ij})_{kp}A_{p\ell} = \delta_{ki}A_{j\ell},$$

当 $k \neq i = j = \ell$ 时, $A_{ki} = 0$;当 $k = i \neq j = \ell$ 时, $A_{ii} = A_{jj}$.

定义 1.2.6: 分块矩阵

可以将矩阵分块,每一块(block)是一个小矩阵,比如

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} I & I \\ O & I \end{bmatrix}.$$

注. 分块矩阵乘法: 每个块当作矩阵的元素, 块之间使用矩阵乘法.

定义 1.2.7: 矩阵的转置

矩阵 $A \in \mathbb{F}^{m \times n}$ 的转置 (transpose) 记作 $A^{\top} \in \mathbb{F}^{n \times m}$, 其元素由 A 给出:

$$(A^{\top})_{ij} = A_{ji}.$$

推论. 矩阵转置的性质: $\forall A, B$ 可运算的,

- $(A^{\top})^{\top} = A;$
- $(A+B)^{\top} = A^{\top} + B^{\top}$, $(cA)^{\top} = cA^{\top}$;
- $(AB)^{\top} = B^{\top}A^{\top}$.

定义 1.2.8: 矩阵的迹

n 阶方阵的迹 (trace) 是对角元的和

$$\operatorname{tr}(A) := \sum_{i=1}^{n} A_{ii}.$$
 (1.8)

推论. 矩阵迹的性质: $\forall A, B \in \mathbb{F}^{n \times n}, c \in \mathbb{F}$

- 线性: $\operatorname{tr}(A+B) = \operatorname{tr}(A) + \operatorname{tr}(B)$, $\operatorname{tr}(cA) = c \operatorname{tr}(A)$;
- 转置: $\operatorname{tr}(A^{\top}) = \operatorname{tr}(A)$;

注. 一般地, $\operatorname{tr}(AB) \neq \operatorname{tr}(A)\operatorname{tr}(B)$.

定理 1.2.2: 交换矩阵乘法的迹

$$tr(AB) = tr(BA). (1.9)$$

证明. 直接展开计算:

$$\operatorname{tr}(AB) = \sum_{i=1}^{m} (AB)_{ii} = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} A_{ij} B_{ji}$$
$$= \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{m} B_{ji} A_{ij} = \sum_{j=1}^{n} (BA)_{jj} = \operatorname{tr}(BA).$$

注. 除此之外, 迹还有一些重要性质, 将在后面讲.

1.3 矩阵的逆

定义 1.3.1: 矩阵的逆

方阵 $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$ 的逆矩阵 (inverse) 记作 $A^{-1} \in \mathbb{F}^{n \times n}$, 满足

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I_n$$
.

若存在 A^{-1} ,则称矩阵 A 是可逆的; 否则称为不可逆的,也称奇异的 (singular).

推论. 矩阵逆的性质: $\forall A, B \in \mathbb{F}^{n \times n}$ 可逆,

- 逆矩阵的逆: $(A^{-1})^{-1} = A$;
- 数乘: $(cA)^{-1} = c^{-1}A^{-1}$;
- 矩阵乘法: $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$;
- 转置: $(A^{-1})^{\top} = (A^{\top})^{-1}$.

注. 一般地, A, B 均可逆 \implies (A+B) 可逆.

例 1.3.1: 二阶方阵的逆

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}. \tag{1.10}$$

例 1.3.2: 对角矩阵的逆

显然,对角矩阵可逆 ← 所有对角元均不为 0,且逆为

$$\operatorname{diag}(a_1, \dots, a_n)^{-1} = \operatorname{diag}(a_1^{-1}, \dots, a_n^{-1}). \tag{1.11}$$

这对于分块对角矩阵也成立,即式中 a_i 可以为可逆矩阵.

定理 1.3.1: 左逆和右逆

若 A, B, C 为方阵, 且 BA = AC = I, 则 B = C.

证明. 考察恒等式 B(AC) = (BA)C 即得 B = C.

注. 事实上,可以有更强的命题: 若 A, B 为方阵,则 $BA = I \iff AB = I$.

例 1.3.3: 幂零矩阵

若 A 是幂零矩阵 (nilpotent matrix), 即 $\exists n \in \mathbb{N}$ 使 $A^n = O$, 则 I + A 可逆, 且

$$(I+A)^{-1} = I - A + A^2 - \dots + (-A)^{n-1}.$$

因为

$$(I+A)(I-A+\cdots+(-A)^{n-1})=I+A^n=I.$$

1.3.1* Woodbury 矩阵恒等式

定理 1.3.2: Woodbury 矩阵恒等式

给定 $A\in\mathbb{F}^{n\times n},U\in\mathbb{F}^{n\times k},C\in\mathbb{F}^{k\times k},V\in\mathbb{F}^{k\times n}$ 且 $A,C,(C^{-1}+VA^{-1}U)$ 可逆,则 (A+UCV) 可逆,且

$$(A + UCV)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(C^{-1} + VA^{-1}U)^{-1}VA^{-1}.$$
 (1.12)

证明. 直接代入验证即可:

$$(A + UCV)(A^{-1} - A^{-1}U(C^{-1} + VA^{-1}U)^{-1}VA^{-1})$$

$$= I - UCVA^{-1} - UC(C^{-1} + VA^{-1}U)(C^{-1} + VA^{-1}U)^{-1}VA^{-1} = I.$$

定理 1.3.3: Sherman-Morrison 公式

给定可逆矩阵 $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$ 和向量 $u, v \in \mathbb{F}^n$,则 $(A + uv^\top)$ 可逆 $\iff 1 + v^\top A^{-1}u \neq 0$,此时

$$(A + uv^{\top})^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^{\top}A^{-1}}{1 + v^{\top}A^{-1}u}.$$
 (1.13)

特别地, 当 A = I 时,

$$(I + uv^{\top})^{-1} = I - \frac{uv^{\top}}{1 + v^{\top}u}.$$
 (1.14)

证明. 对 Woodbury 恒等式 (1.12) 取 $A = I_n$, $C = I_k$, 得到

$$(I_n + UV)^{-1} = I_n - U(I_k + VU)^{-1}V. (1.15)$$

特别地,当 k=1 时,U,V 都是向量,令 $U=u,\ V=v^{\top}$ 即得式 (1.14),将 u 替换为 $A^{-1}u$ 即得式 (1.13).

例 1.3.4: Sherman-Morrison 公式的应用

求逆矩阵:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 0 \end{bmatrix}$$

设 $v = [1 \cdots 1]^{\mathsf{T}}$,不难看出 $A = -I + vv^{\mathsf{T}}$,故

$$A^{-1} = -I - \frac{vv^{\top}}{1-n} = \frac{1}{n-1} \begin{bmatrix} 2-n & 1 & \cdots & 1\\ 1 & 2-n & \cdots & 1\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 1 & 1 & \cdots & 2-n \end{bmatrix}.$$

定理 1.3.4: 华罗庚恒等式

对 Woodbury 恒等式 (1.12) 取 n = k 且 $U = V = I_n$,有

$$(A+B)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}(A^{-1} + B^{-1})^{-1}A^{-1}$$
(1.16a)

$$= A^{-1} - (A + AB^{-1}A)^{-1}. (1.16b)$$

1.3.2* 分块矩阵的逆

给定分块矩阵

$$M = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix},$$

当 M 满足某些条件时,其逆可以被表达出来. 比如 M 为分块对角时,

$$\begin{bmatrix} A \\ D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} A^{-1} \\ D^{-1} \end{bmatrix}. \tag{1.17}$$

下面介绍比较一般的情况,首先引入 Schur 补.

定义 1.3.2: Schur 补

当 A 可逆时,记 $M/A := D - CA^{-1}B$ 是 A 在 M 中的 Schur 补 (Schur complement); 当 D 可逆时,记 $M/D := A - BD^{-1}C$ 是 D 在 M 中的 Schur 补.

定理 1.3.5: 分块矩阵的逆

当 A 可逆且 $M/A = D - CA^{-1}B$ 可逆时,M 可逆,且

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I & -A^{-1}B \\ I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^{-1} & & \\ & (D - CA^{-1}B)^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I \\ -CA^{-1} & I \end{bmatrix}$$
(1.18a)
$$= \begin{bmatrix} A^{-1} + A^{-1}B(M/A)^{-1}CA^{-1} & -A^{-1}B(M/A)^{-1} \\ -(M/A)^{-1}CA^{-1} & (M/A)^{-1} \end{bmatrix};$$
(1.18b)

当 D 可逆且 $M/D = A - BD^{-1}C$ 可逆时,M 可逆,且

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} I \\ -D^{-1}C & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (A - BD^{-1}C)^{-1} \\ D^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & -BD^{-1} \\ I \end{bmatrix}$$
(1.19a)
$$= \begin{bmatrix} (M/D)^{-1} & -(M/D)^{-1}BD^{-1} \\ -D^{-1}C(M/D)^{-1} & D^{-1} + D^{-1}C(M/D)^{-1}BD^{-1} \end{bmatrix}.$$
(1.19b)

当 A, D, M/A, M/D 均可逆时, M 的逆可以写成简单的分解:

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} (A - BD^{-1}C)^{-1} & & & \\ & (D - CA^{-1}B)^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & -BD^{-1} \\ -CA^{-1} & I \end{bmatrix}. \quad (1.20)$$

证明. 可以直接代入验证. 下面介绍得到这一形式的思路: 由于分块对角矩阵的逆是易求的. 当 A 可逆时,可以利用 Gauss-Jordan 消元法 (见第 2.1 节) 将 M 化为分块对角的,即 LDU分解 (见定理 2.3.2)

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I \\ CA^{-1} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ D - CA^{-1}B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & A^{-1}B \\ I \end{bmatrix},$$

上式的分块对角矩阵中出现了 A 的 Schur 补 M/A; 当 D 可逆时,同理有

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & BD^{-1} \\ & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C & \\ & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I \\ D^{-1}C & I \end{bmatrix},$$

对上两式求逆即得.

推论. 对比 (1.18b) 和 (1.19b), 可得

$$A^{-1} + A^{-1}B(M/A)^{-1}CA^{-1} = (M/D)^{-1}$$
(1.21a)

$$-A^{-1}B(M/A)^{-1} = -(M/D)^{-1}BD^{-1}$$
(1.21b)

$$-(M/A)^{-1}CA^{-1} = -D^{-1}C(M/D)^{-1}$$
(1.21c)

$$(M/A)^{-1} = D^{-1} + D^{-1}C(M/D)^{-1}BD^{-1}$$
 (1.21d)

可得 Woodbury 矩阵恒等式 (定理 1.3.2).

推论. 当 C = O 时, M 可逆 $\iff A, D$ 均可逆, 且

$$\begin{bmatrix} A & B \\ & D \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} A^{-1} & -A^{-1}BD^{-1} \\ & D^{-1} \end{bmatrix};$$
 (1.22)

定理 1.3.6: 分块反对角矩阵的逆

当 M 是分块反对角的, 即 A,D=O 时, M 可逆 $\iff B,C$ 均可逆, 且

$$\begin{bmatrix} B \\ C \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} C^{-1} \\ B^{-1} \end{bmatrix}. \tag{1.23}$$

线性方程 (linear equation) 是未知数最高次数为 1 的方程. 考虑 $m \land n$ 元线性方程构成的线性方程组 (linear equation set)

$$\begin{cases} A_{11}x_1 + \dots + A_{1n}x_n = b_1, \\ \dots \\ A_{m1}x_1 + \dots + A_{mn}x_n = b_m, \end{cases}$$

可以把系数写成系数矩阵 A,未知数和常数写成向量 x,b,即 Ax = b.

2.1 消元法

如何解线性方程组,得到 x? 如果 A 是可逆的,将 Ax = b 左乘逆 A^{-1} ,当然可以得到 $x = A^{-1}b$. 但一般我们不知道逆 A^{-1} ,甚至 A 本身可能都不可逆,此时如何求解?

定理 2.1.1: Gauss 消元法

消元法 (elimination) 就是通过对方程之间倍加消元,得到一个等价的上三角方程组.

e.g.
$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 = 1 \\ 3x_1 + 2x_2 = 11 \end{cases} \iff \begin{cases} x_1 - 2x_2 = 1 \\ 8x_2 = 8 \end{cases} \iff \begin{cases} x_1 = 3 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

具体算法为:

- 1. 找到第 1 个 x_1 系数不为 0 的方程作为方程 (1);
- 2. 通过将方程 (1) 倍加, 从方程 (2) 到方程 (m) 中消去 x1;
- 3. 得到的方程 (2) 到方程 (m) 构成 (n-1) 元的线性方程组, 重复步骤 1.
- 4. 最后结果如果是一个上三角方程组,便可从最后一个方程开始解出全部未知数. 否则消元法失效,此时:
 - 若得到 0 ≠ 0,则方程组无解;
 - 若得到 0=0,则方程组有无穷多解.

上三角方程组中每个方程的第一个非 0 系数称为主元 (pivot element).

注. 当主元数目 < 未知数时,消元法失效.因此有唯一解要求:独立方程个数与未知数个数相同.

2.2 矩阵的行变换

由于消元法对方程的倍加操作同时作用在系数矩阵 A 和常数项 b 上,因此可以写成分块矩阵的形式: $[A\ b]$,称为增广矩阵 (augmented matrix),对其消元得到 $[I\ x]$:

$$\left[\begin{array}{cc|c} 1 & -2 & 1 \\ 3 & 2 & 11 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{cc|c} 1 & -2 & 1 \\ 8 & 8 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{cc|c} 1 & 3 \\ 1 & 1 \end{array}\right].$$

类似的,可以考虑对一般矩阵进行这种操作.

定义 2.2.1: 矩阵的初等行变换

矩阵有三种非退化的初等行变换 (elementary row operation):

- 倍加 (row addition): 一行乘系数加到另一行;
- 对换 (row switching): 交换两行;
- 倍乘 (row multiplication): 一行乘以一个非零系数.

定义 2.2.2: 行等价

如果一个矩阵可以经过行变换得到另一个矩阵,则它们行等价 (row equivalent).

注. 行等价是一种等价关系,满足自反性、对称性和传递性. 见定义 10.5.1.

行阶梯矩阵 Gauss 消元法所得到的阶梯型方程组,对应的矩阵可称为行阶梯型矩阵.

定义 2.2.3: 行阶梯矩阵

矩阵 M 若其满足以下性质:

- 如果 M 的第 i 行是 0 行,则下面的所有行的都是 0 行;
- 如果 M 的第 i 行不全是 0,则从左数第一个非 0 元素是主元.
- 记第 i 行的主元所在列为第 ℓ_i 列,若第 i,j 行都不是 0 行且 i < j,则 $\ell_i < \ell_j$. 则称矩阵 M 为行阶梯型 (row echelon form).

比如,形如(*表示任意非0数,不同位置的*不一定相等,而可以是任意数)

$$\begin{bmatrix} 0 & * & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & * & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

就是一个行阶梯矩阵,其中*是主元.

注. 消元法就是把增广矩阵变成行阶梯矩阵的过程.

显然, 行阶梯矩阵并不唯一, 还可以进一步化简.

定义 2.2.4: 约化行阶梯矩阵

约化行阶梯型 (reduced row echelon form) 矩阵还满足以下额外性质:

- 每个主元都是 1;
- 主元所在列只有主元非 0, 称为主列, 其他列称为自由列.

若 A 与约化行阶梯矩阵 U 行等价,记作 U = rref(A).

按上面的例子, 其约化行阶梯矩阵为

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdot & 0 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

第 2,4,5 列为主列,其余为自由列.

定理 2.2.1

一个矩阵的约化行阶梯矩阵是唯一的.

证明. 唯一性证明见 Lay 书的附录 A.

注. 借助约化行阶梯矩阵的概念,我们可归纳出解方程组 Ax = b 的方法:

- 将增广矩阵 [A b] 约化为 [rref(A) b'];
- 解的存在性: 若 rref(A) 有 0 行, 且 b' 对应行元素非 0, 则无解; 反之有解;
- 解的唯一性: 若 rref(A) 没有自由列,则解唯一.

初等矩阵 我们可以将矩阵的行变换等价地用矩阵乘法表示,即就结果而说:

对 $m \times n$ 矩阵 A 进行初等行变换 \iff 用一个特定的 $m \times m$ 矩阵左乘 A 称为初等矩阵 (elementary matrix).

定义 2.2.5: 初等矩阵

与初等行变换对应,初等矩阵有以下三种类型:

• 倍加: A 的第 i 行的 a 倍加到第 j 行 $(r_j' = ar_i + r_j)$

$$E_{i \to j}(a) := \begin{bmatrix} \ddots & & & & \\ & 1 & & a & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} = I + ae_{ij},$$

• 置换: 置换 A 的第 i 行和第 j 行 $(r_i \rightleftharpoons r_i)$

$$E_{i \leftrightarrow j} := \begin{bmatrix} \ddots & & & & & & \\ & 0 & & 1 & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & 1 & & 0 & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & \ddots & & \\ \end{bmatrix} = I + e_{ij} + e_{ji} - e_{ii} - e_{jj},$$

• 倍乘: A 的第 i 行乘一个非 0 常数 c $(r'_i = cr_i)$

其中 : . 所省略的对角项均为 1, 但阶数不一定相同.

推论. 初等矩阵的逆还是初等矩阵:

$$E_{i \to j}(a)^{-1} = E_{i \to j}(-a),$$
 (2.1a)

$$E_{i \leftrightarrow j}^{-1} = E_{i \leftrightarrow j}, \tag{2.1b}$$

$$E_i(c)^{-1} = E_i(c^{-1}) (2.1c)$$

注. 消元法: 用一系列初等矩阵 E_1, \ldots, E_k 左乘 A, 把 A 化简成行阶梯矩阵.

定义 2.2.6: 初等矩阵的广义定义

 $\forall u, v \in \mathbb{F}^m, \ \sigma \in \mathbb{F}, \ 定义 \ I + \sigma u v^\top \ 为 (广义的) \ 初等矩阵.$

注. 三种行变换对应的初等矩阵也可以写成 $I + \sigma uv^{\top}$ 的形式:

$$E_{i \to j}(a) = I + ae_i e_j^\top, \tag{2.2a}$$

$$E_{i \leftrightarrow j} = I - (e_i - e_j)(e_i - e_j)^\top, \tag{2.2b}$$

$$E_i(c) = I + (c - 1)e_i e_i^{\top}.$$
 (2.2c)

由式 (1.14), 初等矩阵都是可逆的, 并且逆也是初等矩阵:

$$(I + \sigma u v^{\top})^{-1} = I - \frac{\sigma}{1 + \sigma v u^{\top}} u v^{\top}, \tag{2.3}$$

定理 2.2.2: 可逆的等价命题

若 A 是 n 阶方阵,则下列叙述等价:

- 1. A 可逆;
- 2. $\forall b \in \mathbb{F}^n$,Ax = b 的解唯一;
- 3. 齐次线性方程组 Ax = 0 只有零解;
- 4. A 的行阶梯矩阵有 n 个主元;
- 5. $\operatorname{rref}(A) = I$;
- 6. A 可以写成有限个初等矩阵的乘积.

证明. 采用轮转证法:

- (1) \implies (2): 左乘 A^{-1} 可得 $x = A^{-1}b$;
- (2) \Longrightarrow (3): 取 b=0,又注意到 A0=0,由解的唯一性得证;
- $(3) \Longrightarrow (4)$: 方程组有唯一解 \iff 主元数 = 未知数个数 = n;
- $(4) \Longrightarrow (5)$: 显然;
- (5) \Longrightarrow (6): 在 A 化为 $\operatorname{rref}(A) = I$ 的初等变换中,与每步初等变换过程等价的初等矩阵为 E_1, \ldots, E_k ,即 $E_k \cdots E_1 A = I$,因此 $A = E_1^{-1} \cdots E_k^{-1}$,且 $E_1^{-1}, \ldots, E_k^{-1}$ 也是初等矩阵;
 - $(6) \Longrightarrow (1)$: 初等矩阵均可逆,故其乘积 A 也可逆.

 \dot{z} . 可以证明: n 阶可逆矩阵可以表示成不超过 n^2 个初等矩阵的乘积.

推论. 利用 Gauss-Jordan 消元法对增广矩阵 [A I] 做消元操作,就可以得到 A 的逆 A^{-1} :

$$[A \ I] \sim [I \ A^{-1}].$$

定义 2.2.7: 对角占优矩阵

给定方阵 $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$, 若每个对角元均在此行占优, 即 $\forall i = 1, \ldots, n$

$$|A_{ii}| > \sum_{j \neq i} |A_{ij}|, \qquad (2.4)$$

则称 A 是 (严格) 对角占优的 (strict diagonally dominant); 若上式不等号仅为 \geqslant ,则称 A 是弱对角占优的 (weak \sim).

定理 2.2.3: 对角占优矩阵可逆

若方阵 A 严格对角占优,则 A 可逆.

证明. 若 A 不可逆,则 $\exists x \neq 0$ 使得 Ax = 0. 令 $k = \arg\max_{i} |x_i|$,即 $|x_k| = \max_{i} |x_i|$. 考虑 Ax 的第 k 行:

$$\sum_{i=1}^{n} A_{ki} x_i = 0, \iff A_{kk} x_k = -\sum_{i \neq k} A_{ki} x_i,$$

由三角不等式

$$|A_{kk}| |x_k| = \left| \sum_{i \neq k} A_{ki} x_i \right| \le \sum_{i \neq k} |A_{ki}| |x_i| \le \sum_{i \neq k} |A_{ki}| |x_k|,$$

与 A 对角占优矛盾! 故 A 可逆.

2.3 LU 分解

定义 2.3.1: 上/下三角矩阵

上三角矩阵 (upper triangular matrix) U 是主对角线以下元素都是 0 的方阵

$$U_{ij} = 0, \quad \forall i > j,$$

同理可定义下三角矩阵 (lower ...) L 满足 $L_{ij} = 0$, $\forall i < j$.

不难注意到, 倍加矩阵和逆矩阵都同时是上/下三角矩阵. 这是 LU 分解的基础.

定理 2.3.1: LU 分解

对于方阵 A 来说,A 的 LU 分解 (lower-upper decomposition/factorization) 是将 A 分解成一个下三角矩阵 L 和一个上三角矩阵 U 的乘积:

$$A = LU, (2.5)$$

有时需要再乘上一个置换矩阵 PA = LU, 称为 LUP 分解 (LU factorization with partial pivoting).

证明. U 是和 A 等价的行阶梯矩阵,U 是上三角的. 如果 A 化成行阶梯矩阵 U 的过程中没有置换,则从 A 到 U 的过程中,我们只需消去主元下面的元素:

$$E_k \cdots E_2 E_1 A = U.$$

由于 E_i 及其逆 E_i^{-1} 都是下三角的,故

$$L = E_1^{-1} E_2^{-1} \cdots E_k^{-1},$$

也是下三角的,A = LU; 反之,则存在一个置换矩阵 P,使得 PA = LU.

注. LU 分解可以被视为 Gauss 消元法的矩阵形式. 在数值计算上, LU 分解经常被用来解线性方程组,且在求逆矩阵和计算行列式中都是一个关键的步骤.

定理 2.3.2: LDU 分解

LDU 分解 (lower-diagonal-upper decomposition) 是将矩阵写成

$$A = LDU$$
,

其中 D 是对角矩阵,L,U 是单位下/上三角的 (unitriangular),即其对角元均为 1.

3.1 线性空间

定义 3.1.1: 线性空间

定义域 \mathbb{F} 上的线性空间 (linear space) V 是具有加法 $+: V \times V \to V$ 和数乘 $\cdot: \mathbb{F} \times V \to V$ 运算且满足以下公理的集合.

1. 加法交换律 x+y=y+x;

2. 加法结合律 x + (y + z) = (x + y) + z;

3. 加法零元 x + 0 = x;

4. 加法逆元 x + (-x) = 0;

1x = x;

6. 数乘结合律 $(c_1c_2)x = c_1(c_2x);$

7. 数乘对向量的分配律 c(x+y) = cx + cy;

8. 数乘对标量的分配律 $(c_1 + c_2)x = c_1x + c_2x$.

例 3.1.1

 \mathbb{F}^n 和 $\mathbb{F}^{m \times n}$ 都是线性空间.

定义 3.1.2: 子空间

给定线性空间 V 的子集 $V_s \subset V$,若其对于加法和数乘封闭: $\forall v, w \in V_s, \forall c \in \mathbb{F}$

$$v + w \in V_{s}, \quad cv \in V_{s},$$

则 V_s 为 V 的子空间 (subspace). 子空间中元素的线性组合都在同一个子空间,

推论. 子空间必然包含零向量. 因为若 $v \in V_s$, 则 $v + (-v) = 0 \in V_s$.

注. 线性空间 V 的一个子集一般不是子空间,但我们可以通过其构造出子空间.

定义 3.1.3: 线性扩张

S 的线性扩张 (linear span) 是 S 中向量的所有线性组合的集合,记作 $\mathrm{span}(S)$.

推论. V 的子集的线性扩展是 V 的子空间.

3.2 线性独立、基和维度

定义 3.2.1: 线性独立

n 个向量 $\{v_i\}$ 是线性独立的 (linear independent), 当且仅当

$$\sum_{i=1}^{n} x_i v_i = 0,$$

只在 $x_i = 0$ 时成立,即只有零解. n 个向量 $\{v_i\}$ 不是线性独立,那么他们是线性相关的 (linear correlate).

等价描述:集合中每一个向量都不能写成其它向量的线性组合.

注. 向量是否线性独立同数域的选择有关.

定义 3.2.2: 线性空间的基

线性空间 V 的基 (base) 是一组线性无关的向量 $\{v_i\}$,并且他们张成整个线性空间 V.

例 3.2.1

 $\{e_1,\ldots,e_n\}$ 构成 \mathbb{R}^n 的一组基.

定义 3.2.3: 线性空间的维度

线性空间的维度 (dimension) 是一组基中向量的个数,记作 $\dim(V)$.

定理 3.2.1: 维度的确定性

线性空间的维度和基的选取无关.

证明. 若线性空间 V 存在两组基 $\{v_1,\ldots,v_m\},\{w_1,\ldots,w_n\}$ 元素个数不等,不妨设 n>m. 因为 $\{w_i\}$ 是基, $\{v_i\}$ 可以被表示为其线性组合

$$v_i = \sum_{j=1}^n w_j a_{ji}, \quad \forall i.$$

考虑线性组合

$$\sum_{i=1}^{m} x_i v_i = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} x_i w_j a_{ji} = 0.$$

因为 $\{w_i\}$ 线性无关,故

$$\sum_{i=1}^{m} a_{ji} x_i = 0, \quad \forall j,$$

但是其未知数的个数 m > 方程的个数 n,系数矩阵 A 一定有自由列,所以 x 有非零解. 这与 $\{v_i\}$ 线性无关矛盾! 故 m=n.

定理 3.2.2

若 $\forall v \in V_1$ 可以写成 V_2 中向量的线性组合,则 dim(V_1) ≤ dim(V_2).

证明. 这个定理是 trivial 的,证明留给读者.

定义 3.2.4: 变换矩阵

不同基之间的变换相应的矩阵称为变换矩阵 (transfomation matrix).

3.3 矩阵 A 的四个子空间

给定矩阵 $A \in \mathbb{F}^{m \times n}$,可由其得到四个子空间:列空间、行空间、零空间和左零空间.

定义 3.3.1: 列空间和行空间

矩阵 A 的列空间 (column space) 是 A 的所有列的线性组合的集合,记作 C(A):

$$C(A) \equiv \{Ax \mid x \in \mathbb{F}^n\}. \tag{3.1}$$

矩阵 A 的行空间 (row space) 是 A 的所有行的线性组合的集合,可用 $C(A^{T})$ 表示.

推论. C(A) 是 \mathbb{F}^m 的子空间, $C(A^{\top})$ 是 \mathbb{F}^n 的子空间.

注. 线性方程组 Ax = b 有解 $\iff b \in C(A)$.

定义 3.3.2: 零空间和左零空间

矩阵 A 的零空间 (null space) 是所有满足 Ax = 0 的 x 的集合,记作 N(A):

$$N(A) \equiv \{x \mid Ax = 0\}. \tag{3.2}$$

矩阵 A 的左零空间 (left null space) 是所有满足 $x^{\top}A=0$ 的 x 的集合,可用 $\mathbf{N}(A^{\top})$ 表示.

推论. N(A) 是 \mathbb{F}^n 的子空间, $N(A^{\top})$ 是 \mathbb{F}^m 的子空间.

例 3.3.1: 子空间的基

N(A) 的基:显然 N(A) = N(rref(A)),而 rref(A) 的每个自由列各给出一个 N(rref(A)) 的基. 若第 i 列为自由列,则其对应的基 x 的分量为:

$$x_i = \begin{cases} \delta_{ij}, & \text{第 } i \text{ 列为自由列} \\ -\operatorname{rref}(A)_{ij}, & \text{第 } i \text{ 列为主列} \end{cases}$$

C(A) 的基: rref(A) 的所有主列构成 C(A) 的一组基.

例 3.3.2: 用矩阵配平化学方程式

硫酸铜溶液可处理白磷中毒, 其原理为:

$$P_4 + CuSO_4 + H_2O \rightarrow Cu_3P + H_3PO_4 + H_2SO_4$$
.

由反应前后 H,O,P,S,Cu 元素守恒可得系数矩阵的每行为:

$$\begin{bmatrix} & 2 & 3 & 2 \\ 4 & 1 & 4 & 4 \\ 4 & & 1 & 1 \\ 1 & & & & 1 \\ 1 & & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nu_{P_4} \\ \nu_{CuSO_4} \\ \nu_{H_2O} \\ \nu_{Cu_3P} \\ \nu_{H_3PO_4} \\ \nu_{H_2SO_4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \implies \begin{bmatrix} \nu_{P_4} \\ \nu_{CuSO_4} \\ \nu_{H_2O} \\ \nu_{Cu_3P} \\ \nu_{H_3PO_4} \\ \nu_{H_2SO_4} \end{bmatrix} = k \begin{bmatrix} 11 \\ 60 \\ 96 \\ -20 \\ -24 \\ -60 \end{bmatrix}.$$

这相当于求系数矩阵的零空间的基,得到配平的化学方程式为:

$$11 P_4 + 60 CuSO_4 + 96 H_2O = 20 Cu_3P + 24 H_3PO_4 + 60 H_2SO_4.$$

但是这种方法也不是万能的,比如高锰酸钾与双氧水的反应:

$$MnO_4^- + H_2O_2 + H^+ \rightarrow Mn^{2+} + H_2O + O_2 \uparrow.$$

由反应前后 H,O,Mn 元素守恒及电荷守恒可得:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 & 2 \\ 1 & & 1 \\ -1 & & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \nu_{\mathrm{MnO_{4}^{-}}} \\ \nu_{\mathrm{H_{2}O_{2}}} \\ \nu_{\mathrm{H^{+}}} \\ \nu_{\mathrm{Mn^{2+}}} \\ \nu_{\mathrm{H_{2}O}} \\ \nu_{\mathrm{O_{2}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \implies \begin{bmatrix} \nu_{\mathrm{MnO_{4}^{-}}} \\ \nu_{\mathrm{H_{2}O_{2}}} \\ \nu_{\mathrm{H^{+}}} \\ \nu_{\mathrm{Mn^{2+}}} \\ \nu_{\mathrm{H_{2}O}} \\ \nu_{\mathrm{O_{2}}} \end{bmatrix} = k_{1} \begin{bmatrix} 2 \\ 5 \\ 6 \\ -2 \\ -8 \\ -5 \end{bmatrix} + k_{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \\ -2 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

零空间有两个基,不能确定最简系数,这是因为该方程可以线性叠加双氧水分解反应 $(2\,H_2O_2=2\,H_2O+O_2\uparrow)$. 后来通过同位素标记法确定了 O_2 中的氧原子仅来自 H_2O_2 而不是 MnO_4 :

$${\rm Mn^{16}O_4^- + H_2^{18}O_2 + H^+ \rightarrow Mn^{2+} + H_2^{16}O + {}^{18}O_2 \uparrow}.$$

才能以 $^{16}{\rm O}, ^{18}{\rm O}$ 守恒确定 $\nu_{{\rm MnO}_4^-}: \nu_{{\rm H}_2{\rm O}_2}=2:5$.

$$2\,{\rm MnO_4^-} + 5\,{\rm H_2O_2} + 6\,{\rm H^+} = 2\,{\rm Mn^{2+}} + 8\,{\rm H_2O} + 5\,{\rm O_2}\uparrow.$$

3.4 矩阵的秩、线性代数基本定理

定义 3.4.1: 矩阵的秩

矩阵 A 的秩 (rank) 定义为列空间的维数:

$$rank(A) := dim(C(A)).$$

若矩阵的秩等于行数,则称其行满秩 (full row rank);若秩等于列数,则称其列满秩 (full column rank).

定理 3.4.1: 线性方程组 Ax = 0 的完整解

线性方程组 Ax = b 的通解可以分解为特解 x_p 和零解 x_n 的和:

$$x = x_{\rm p} + x_{\rm n}$$

特解满足 $Ax_p = b$,其各个分量可以由约化的增广矩阵 $[\operatorname{rref}(A)\ b']$ 得到:

$$(x_{p})_{i} = \begin{cases} 0, & \text{第 } i \text{ 列为自由列} \\ b'_{j}, & \text{第 } i \text{ 列为主列, 其主元 1 在第 } j \text{ 行} \end{cases}$$

而零解满足 $Ax_n = 0$,可以写成零空间的基的线性组合.

推论.

- 若 A 列满秩,则 $\operatorname{rref}(A)$ 没有自由列, $\operatorname{N}(A) = \{0\}$. 当 $b \in \operatorname{C}(A)$ 时有唯一解, 否则无解;
- 若 A 行满秩,则 $\operatorname{rref}(A)$ 没有零行, $\operatorname{C}(A) = \mathbb{F}^m$, $\forall b$ 都有解,有唯一解或无穷多解.

四个子空间的维度 已经知道,初等行变换就是用初等矩阵 E 左乘 A,相应的,列变换就是 E 右乘 A.

定理 3.4.2: 初等变换和子空间

• N(A) = N(EA), 因为

$$Ax = 0 \iff EAx = 0.$$

• $\dim(C(A)) = \dim(C(EA))$,因为

$$\{v_i\}$$
 是 $C(A)$ 一组基 \iff $\{Ev_i\}$ 是 $C(EA)$ 一组基.

• C(A) = C(AE), 因为

$$AE$$
 的每一列 $\in C(A)$ 且 $A = (AE)E^{-1}$ 的每一列 $\in C(AE)$

• $\dim(N(A)) = \dim(N(AE))$, 因为可由 $Ax = 0 \iff AE(E^{-1}x) = 0$ 推出

$$\{v_i\}$$
 是 N(A) 一组基 \iff $\{E^{-1}v_i\}$ 是 N(AE) 一组基

推论. 矩阵 A 在初等变换下, $\dim(C(A))$ 和 $\dim(N(A))$ 均不变,而行变换下 N(A) 不变,列变换下 C(A) 不变. 因此,可以将 A 先由行变换为 $\mathrm{rref}(A)$,再列变换为

$$\tilde{I} = \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{F}^{m \times n}.$$

显然, \tilde{I} 的行秩 $\dim(\mathbf{C}(\tilde{I}^{\top})) =$ 列秩 $\dim(\mathbf{C}(\tilde{I})) = r$, 且

$$\dim(\mathbf{C}(\tilde{I}^{\top})) + \dim(\mathbf{N}(\tilde{I})) = n;$$

$$\dim(\mathbf{C}(\tilde{I})) + \dim(\mathbf{N}(\tilde{I}^{\top})) = m.$$

定理 3.4.3: 线性代数基本定理·一

- 1. 行秩 = 列秩: $\operatorname{rank}(A) = \dim(\operatorname{C}(A)) = \dim(\operatorname{C}(A^{\top}));$
- 2. $\dim(C(A^{\top})) + \dim(N(A)) = n$;
- 3. $\dim(\mathbf{C}(A)) + \dim(\mathbf{N}(A^{\top})) = m$.

推论. 方阵 A 可逆 \iff A 满秩.

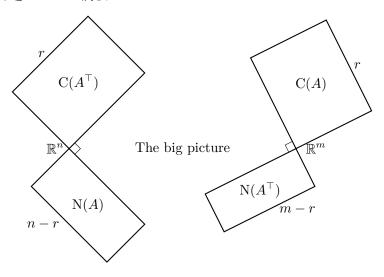


图 3.1: A 的四个子空间

3.4.1* 矩阵的秩的不等式

定理 3.4.4

对于矩阵 A, B 有

$$rank(A+B) \leqslant rank(A) + rank(B). \tag{3.3}$$

证明. 设 C(A), C(B) 的一组基分别为 $\{a_1, \ldots, a_{rank(A)}\}$ 和 $\{b_1, \ldots, b_{rank(B)}\}$,则 A+B 中的列必然可以由 $\{a_1, \ldots, a_{rank(A)}, b_1, \ldots, b_{rank(B)}\}$ 的线性组合表示出,故不等式成立.

定理 3.4.5: Sylvester 不等式

对 n 阶方阵 A, B 有

$$rank(AB) \geqslant rank(A) + rank(B) - n. \tag{3.4}$$

证明. 注意到

$$\operatorname{rank}(AB) + n = \operatorname{rank}\left(\begin{bmatrix} I_n & \\ & AB \end{bmatrix}\right) = \operatorname{rank}\left(\begin{bmatrix} I_n & -B \\ A & \end{bmatrix}\right) \geqslant \operatorname{rank}(A) + \operatorname{rank}(B). \qquad \Box$$

定理 3.4.6: Frobenius 秩不等式

对于矩阵 A, B, C,有

$$rank(ABC) \geqslant rank(AB) + rank(BC) - rank(B). \tag{3.5}$$

证明. 注意到

$$\begin{aligned} \operatorname{rank}(ABC) + \operatorname{rank}(B) &= \operatorname{rank}\left(\begin{bmatrix} B & \\ & ABC \end{bmatrix}\right) \\ &= \operatorname{rank}\left(\begin{bmatrix} BC & B \\ & AB \end{bmatrix}\right) \geqslant \operatorname{rank}(AB) + \operatorname{rank}(BC). \end{aligned} \quad \Box$$

将列向量看做矩阵,则实向量 v 和 w 的内积可以看做 $\langle v,w\rangle=v^{\top}w$.

定义 4.0.1: 向量的正交

若 $\langle v, w \rangle = 0$,则称 v 和 w 正交 (orthogonal),记作 $v \perp w$.

注. 依定义, 0 和所有向量正交.

定理 4.0.1: 正交的模

若向量 $v \perp w$,则

$$||v||^2 + ||w||^2 = ||v + w||^2.$$
 (4.1)

4.1 正交性

定义 4.1.1: 向量和子空间的正交

给定线性空间 L 及其子空间 W,给定 $v \in L$,若 $\forall w \in W$ 均有 $v \perp w$,则称 v 和 W 正交,记作 $v \perp W$.

定义 4.1.2: 子空间的正交

给定线性空间 L 的两个子空间 V,W,若 $\forall v \in V, w \in W$ 均有 $v \perp w$,则称 V 和 W 正 交,记作 $V \perp W$.

推论. 若 L 的子空间 V,W 正交,则

$$\dim(L) \geqslant \dim(V) + \dim(W). \tag{4.2}$$

定义 4.1.3: 正交补

线性空间 L 的子空间 V 的正交补 (orthogonal complement) 由 L 中所有同 V 正交的 向量组成,记作 V^{\perp} .

推论. $V \cap V^{\perp} = \{0\}$.

定理 4.1.1: 线性代数基本定理・二

在
$$\mathbb{F}^n$$
 中, $N(A) = C(A^\top)^{\perp}$.
在 \mathbb{F}^m 中, $N(A^\top) = C(A)^{\perp}$.

定理 4.1.2: 分解

给定矩阵 $A \in \mathbb{F}^{m \times n}$, 则 $\forall x \in \mathbb{F}^n$ 均可以分解成

$$x = x_{\rm r} + x_{\rm n},$$

其中 $x_r \in C(A^T)$, $x_n \in N(A)$, 且这种分解是唯一的.

证明.由

$$Ax = A(x_r + x_n) = Ax_r \in C(A^\top)$$

知, 只需证明: $\forall b \in C(A^{\top})$, 存在唯一的 $x_r \in C(A^{\top})$ 使得 $Ax_r = b$.

若存在 $x_{\rm r},x_{\rm r}'\in {\rm C}(A^\top)$ 满足 $Ax_{\rm r}=Ax_{\rm r}'$,则 $x_{\rm r}-x_{\rm r}'$ 同时在 ${\rm C}(A^\top)$ 和 N(A) 中,故 $x_{\rm r}-x_{\rm r}'=0$.

定理 4.1.3: 矩阵的可逆部分

对于矩阵 A,把 N(A) 和 $N(A^{T})$ 对应的行和列去掉之后总是一个 r 阶可逆矩阵.

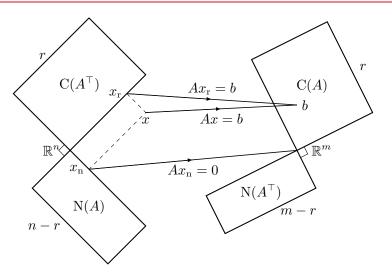


图 4.1: big picture 升级版

4.2 投影

例 4.2.1: 向量在向量上的投影

考虑向量 b 在向量 a 上的投影 (projection) p,依内积的性质:

$$p = (\hat{a} \cdot b)\hat{a} = \frac{a^\top b}{a^\top a} a = \frac{aa^\top}{a^\top a} b.$$

那么对于一个矩阵,投影的概念应该如何定义?

考虑 \mathbb{R}^m 中 n 个线性无关的向量 a_1,\ldots,a_n 张成的子空间 $\mathrm{span}(a_1,\ldots,a_n)=\mathrm{C}(A)$,其中 $A=[a_1\cdots a_n]$. 向量 $b\in\mathbb{R}^m$ 在 $\mathrm{C}(A)$ 上的投影为 $p\in\mathrm{C}(A)$

$$p = Ax = x_1 a_1 + \dots + x_n a_n.$$

投影的性质要求: p 的终点在 C(A) 中,且距离 b 的终点最近,即 $(b-p) \perp C(A)$,等价于

$$A^{\top}(b - Ax) = 0,$$

相当于求解线性方程组

$$A^{\top}Ax = A^{\top}b.$$

若 $A^{T}A$ 可逆,则 $x = (A^{T}A)^{-1}A^{T}b$,故 b 在 C(A) 上的投影为 $p = Ax = A(A^{T}A)^{-1}A^{T}b$.

定义 4.2.1: 投影矩阵

一个矩阵 A 的投影矩阵 (projection matrix) 为

$$P = A(A^{\top}A)^{-1}A^{\top}. (4.3)$$

推论. $P^2 = P$, 这也是符合投影性质的.

注. 只有当 A 可逆时,才能拆开 $(A^{\top}A)^{-1} = A^{-1}(A^{\top})^{-1}$,此时 $P = AA^{-1}(A^{\top})^{-1}A^{\top} = I$.

定理 4.2.1: $A^{T}A$ 的可逆性

 $A^{\mathsf{T}}A$ 可逆 \iff A 的列之间线性无关.

证明. 只需证明 $N(A^{T}A) = N(A)$ 即可.

一方面: $\forall x \in N(A)$, 对 Ax = 0 左乘 A^{\top} 得 $A^{\top}Ax = 0$, 故 $x \in N(A^{\top}A)$; 另一方面: $\forall x \in N(A^{\top}A)$, 对 $A^{\top}Ax = 0$ 左乘 x^{\top} 得

$$x^{\top}A^{\top}Ax = \|Ax\|^2 = 0, \implies Ax = 0, \implies x \in N(A).$$

综上,
$$N(A^{T}A) = N(A)$$
.

推论.

$$\operatorname{rank}(A) = \operatorname{rank}(A^\top) = \operatorname{rank}(A^\top A) = \operatorname{rank}(AA^\top).$$

4.3 最小二乘法

问题背景 考虑线性方程组 Ax = b. 当 A 的行数 m >列数 n 甚至 $m \gg n$ 时,一般地 A 不可逆,x 无解,即 $\forall x \in \mathbb{R}^n$ 均有 ||b - Ax|| > 0. 但可以找到一个解 x' 使得 ||b - Ax|| 最小:

$$x' = \arg\min_{x} \|b - Ax\|,$$

由投影的性质, Ax' 是 b 在 C(A) 上的投影, 即

$$x' = (A^{\top}A)^{-1}A^{\top}b. (4.4)$$

27

其一个典型应用就是最小二乘法.

例 4.3.1: 直线拟合 (最小二乘法)

m 组数据 (x_i, y_i) , 确定线性关系 y = a + bx 中的系数 a, b, 即

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}, \iff Ax = b.$$

A 列满秩 $\operatorname{rank}(A) = 2$,故 $A^{\top}A$ 可逆,

$$A^{\top}A = \begin{bmatrix} m & \langle x_i \rangle \\ \langle x_i \rangle & \langle x_i^2 \rangle \end{bmatrix}, \quad (A^{\top}A)^{-1} = \frac{1}{m \langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2} \begin{bmatrix} \langle x_i^2 \rangle & -\langle x_i \rangle \\ -\langle x_i \rangle & m \end{bmatrix}.$$

为了简化符号,此处且仅在此处 $\langle \cdot \rangle$ 特指对 $i=1,\ldots,m$ 求和,得到

$$\begin{cases}
a = \frac{\langle x_i^2 \rangle \langle y_i \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_i y_i \rangle}{m \langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2} \\
b = \frac{-\langle x_i \rangle \langle y_i \rangle - m \langle x_i y_i \rangle}{m \langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2}
\end{cases} (4.5)$$

例 4.3.2: 多项式拟合

m 组数据 (x_i, y_i) , 使用 n 次多项式拟合:

$$y = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n,$$

求 n+1 个系数 a_0,\ldots,a_n , 即

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & \cdots & x_m^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}, \iff Ax = b.$$

从而 $x' = (A^{\mathsf{T}}A)^{-1}A^{\mathsf{T}}b$.

注. 两组数据相关不一定代表有因果.

4.4 正交归一基

基是一组线性无关的向量并且张成整个线性空间,我们对基之间的夹角和长度并没有要求.为了方便,我们可以要求基具备一些额外的性质.

定义 4.4.1: 正交归一基

n 维线性空间中的一组基 $\{q_1,\ldots,q_n\}$ 若满足,

$$\langle q_i, q_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \forall i, j.$$

则称这组基是正交归一的 (orthonomal).

定义 4.4.2: 正交矩阵

将一组正交归一基 $\{q_1,\ldots,q_n\}$ 按列排成矩阵

$$Q = [q_1 \ \cdots \ q_n],$$

则 Q 是方阵且 $Q^{\top} = Q^{-1}$,称 Q 为正交矩阵 (orthogonal matrix).

定理 4.4.1: 正交归一基的完备性

由 $Q^{\mathsf{T}}Q = QQ^{\mathsf{T}} = I$,可得正交归一基的完备性 (completeness)

$$\sum_{i=1}^{n} q_i q_i^{\top} = I. {4.6}$$

4.4.1 Gram-Schmidt 法则

给定一组基 $\{a_1,\ldots,a_n\}$,如何构造一组正交归一基?

方法 4.4.1: Gram-Schmidt 法则

- 1. 选取 $b_1 := a_1$;
- 2. 从 a_i 减去沿着 b_1,\ldots,b_{i-1} 方向的分量,作为 b_i

$$b_i := a_i - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\langle b_j, a_i \rangle}{\langle b_j, b_j \rangle} b_j.$$

得到一组正交基 $\{b_1,\ldots,b_n\}$,再归一化 $q_i=\hat{b}_i$,便得到一组正交归一基 $\{q_1,\ldots,q_n\}$.

4.4.2 *QR* 分解

定理 4.4.2: QR 分解

若 $m \times n$ 矩阵 $A = (a_1, \ldots, a_n)$ 的列之间线性无关,可用 Gram-Schmidt 法则构造一组正交归一基 $\{q_1, \ldots, q_n\}$, q_i 同 a_1, \ldots, a_{i-1} 正交,定义

$$R := Q^{\top} A = \begin{bmatrix} q_1^{\top} a_1 & q_1^{\top} a_2 & \cdots & q_1^{\top} a_n \\ & q_2^{\top} a_2 & \cdots & q_2^{\top} a_n \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & q_n^{\top} a_n \end{bmatrix}$$

R 是个上三角矩阵,故 A 可以写成正交矩阵和上三角矩阵的乘积:

$$A = QR. (4.7)$$

注. 在最小二乘法等应用中, $A^{T}A = R^{T}R$

$$x = (A^{\top}A)^{-1}A^{\top}b = R^{-1}Q^{\top}b.$$

效率更高.

5.1 行列式

行列式的递归定义 首先引入代数余子式.

定义 5.1.1: 代数余子式

给定 n 阶方阵 A, 去掉 A_{ij} 所在的第 i 行和第 j 列得到的 (n-1) 阶方阵记作 $A_{\neq ij}$, 其行列式 $\det(A_{\neq ij})$ 定义为 A_{ij} 的余子式 (minor); 而

$$cof(A)_{ij} := (-)^{i+j} \det(A_{\neq ij}).$$
 (5.1)

定义为 A_{ij} 的代数余子式 (cofactor). 其表达式的正负号与位置的关系:

$$\begin{bmatrix}
+ & - & + & \cdots \\
- & + & - & \cdots \\
+ & - & + & \cdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{bmatrix}$$
(5.2)

定义 5.1.2: 行列式·一

n 阶方阵 A 的行列式 (determinant) 记作 det(A), 其值递归地定义为:

- 1. n = 1 时, $det(A) = A_{11}$;
- 2. n > 1 时,任取第 i 行展开或第 j 列展开 (Laplace 展开)

$$\det(A) = \sum_{i=1}^{n} A_{ij} \operatorname{cof}(A)_{ij} = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} \operatorname{cof}(A)_{ij}.$$
 (5.3)

由于 cof(A) 是 n-1 阶的行列式,故递归会随降阶停止.

推论. 三角矩阵的行列式等于对角元的乘积.

例 5.1.1: 二阶行列式和三阶行列式

二阶行列式:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}. \tag{5.4}$$

三阶行列式:

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

$$= a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32}$$

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

$$(5.5)$$

5.2 行列式的性质

行列式作为线性映射的定义 可以由行列式的性质,给出行列式的另一定义.

定义 5.2.1: 行列式・二

行列式还可定义为 $n \land n$ 维向量到数域 \mathbb{F} 的映射:

$$\det: \underbrace{\mathbb{F}^n \times \cdots \times \mathbb{F}^n}_{n} \to \mathbb{F}$$

且满足:

• 多线性:

$$\det(\ldots, ka_i + k'a_i', \ldots) = k \det(\ldots, a_i, \ldots) + k' \det(\ldots, a_i', \ldots); \tag{5.6}$$

• 反对称:

$$\det(\dots, a_i, \dots, a_j, \dots) = -\det(\dots, a_j, \dots, a_i, \dots); \tag{5.7}$$

• 单位化: det(I) = 1.

可以证明,这个满足此定义的映射存在且唯一,并且与定义 5.1.2 是等价的.

引理. 初等矩阵的行列式……略

证明. 思路在于通过将矩阵 A 表示为一系列初等矩阵 E_1, \ldots, E_n 和 $\operatorname{rref}(A)$ 的乘积得到,过程略.

推论.

- 若 A 中有任意两行或两列相同,则 det(A) = 0;
- 若 A 的行/列之间线性相关,或者说秩小于阶,则 det(A) = 0.

定理 5.2.1: 可逆性与行列式的关系

A 可逆 \iff $\det(A) \neq 0$.

注. 因此任意给定一个方阵,其不可逆的可能是很小的. 因为不可逆 $(\det(A) = 0)$ 是一个额外的约束.

定理 5.2.2: 行列式与矩阵乘法

给定 $A, B \in \mathbb{F}^{n \times n}$, 其乘积的行列式等于行列式的乘积:

$$\det(AB) = \det(A)\det(B). \tag{5.8}$$

证明. 若 A 不可逆,则 AB 不可逆,等式成立:

$$\det(AB) = \det(A)\det(B) = 0;$$

若 A 可逆,则可表示为一系列初等矩阵的乘积 $A = E_k \cdots E_1$,从而

$$\det(AB) = \det(E_k \cdots E_1 B) = \det(E_k) \det(E_{k-1} \cdots E_1 B)$$
$$= \det(E_k) \cdots \det(E_1) \det(B) = \det(E_k \cdots E_1) \det(B) = \det(A) \det(B). \quad \Box$$

推论. 逆的行列式为原行列式的倒数:

$$\det(A^{-1}) = \det(A)^{-1}. (5.9)$$

注. 一般地, $\det(A+B) \neq \det(A) + \det(B)$. 但是当 A,B 满足一些特定条件时, $\det(A+B)$ 可以化简,见定理 5.2.7.

行列式的完全展开定义 首先引入排列的逆序数.

定义 5.2.2: 排列

给定集合 $S = \{1, \ldots, n\}$ 和 n 个数 $i_1, \ldots, i_n \in S$,若映射 σ :

$$\sigma: S \to S, \ \sigma(k) \mapsto i_k,$$

是一个一一映射,则称 σ 是 S 的一个排列 (permutation).

定义 5.2.3: 逆序

给定排列 σ , 若 i < j 且 $\sigma(i) > \sigma(j)$, 则称 (i,j) 是 σ 的一个逆序 (inversion).

注. 有的地方将逆序定义为 $(\sigma(i), \sigma(j))$, 二者是等价的.

定义 5.2.4: 逆序数与奇偶性

 σ 中所有逆序组成的集合为逆序集, 逆序集中元素的个数称为逆序数 $inv(\sigma)$. 排序的奇偶性 (parity) 便定义为逆序数的奇偶性:

$$sgn(\sigma) = (-)^{inv(\sigma)}. (5.10)$$

定义 5.2.5: 全反对称张量

给定 n 个数 $i_1, \ldots, i_n \in S = \{1, \ldots, n\}$,定义全反对称张量 (Levi-Civita symbol)

$$\epsilon_{i_1 \cdots i_n} = \begin{cases} \operatorname{sgn}(\sigma), & i_1, \dots, i_n \not \in S \text{ 的一个排列 } \sigma \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$
 (5.11)

定义 5.2.6: 行列式·三

利用全反对称张量, 行列式也可以定义为

$$\det(A) = \sum_{i_1, \dots, i_n \in S} \epsilon_{i_1 \dots i_n} a_{1i_1} \dots a_{ni_n}. \tag{5.12}$$

证明. 可以验证展开式满足定义 5.2.1 的三条性质.

定理 5.2.3: 行列式与矩阵转置

行列式在矩阵转置下不变

$$\det(A^{\top}) = \det(A),$$

证明. 由行列式的定义 5.2.6 立得.

5.2.1* 行列式的运算

下面研究分块矩阵的行列式,显然分块对角矩阵 $\det(\operatorname{diag}(A,D)) = \det(A)\det(D)$,下面研究更一般的情况.

定理 5.2.4: 分块矩阵的行列式。

若 $A \in m$ 阶方阵, $D \in n$ 阶方阵, $B \in m \times n$ 矩阵, 则

$$\det \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ & D \end{bmatrix} \end{pmatrix} = \det(A)\det(D). \tag{5.13}$$

证明. 对 A,D 进行 LU 分解, $A = L_A U_A, D = L_D U_D$,则

$$\begin{bmatrix} A & B \\ & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_A & \\ & L_D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_A & L_A^{-1}B \\ & U_D \end{bmatrix}$$

前者为下三角矩阵,后者为上三角矩阵,故

$$\det \begin{pmatrix} \begin{bmatrix} A & B \\ & D \end{bmatrix} \end{pmatrix} = \det(L_A) \det(L_D) \det(U_A) \det(U_D) = \det(A) \det(D). \quad \Box$$

第五章 行列式 34

定理 5.2.5: 分块矩阵的行列式·二

若 $A \in m$ 阶方阵, $D \in n$ 阶方阵,且 A, D 至少一个可逆,则

证明. 对定理 1.3.5 的证明中的矩阵取行列式即证:

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I \\ CA^{-1} & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ D - CA^{-1}B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & A^{-1}B \\ I \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} I & BD^{-1} \\ I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A - BD^{-1}C \\ D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I \\ D^{-1}C & I \end{bmatrix}.$$

定理 5.2.6: Weinstein-Aronszain 恒等式

给定 $A \in \mathbb{F}^{m \times n}, B \in \mathbb{F}^{n \times m}$,则

$$\det(I_m + AB) = \det(I_n + BA). \tag{5.15}$$

证明. 考察分块矩阵

$$M = \begin{bmatrix} I_m & A \\ -B & I_n \end{bmatrix},$$

显然 I_m, I_n 都是可逆的,由定理 5.2.5,即得.

例 5.2.1: Weinstein-Aronszajn 恒等式的应用

定理 5.2.6 适用于求解 $m \gg n \sim 1$ 的情形,例如

$$\begin{vmatrix} 1 + a_1 + b_1 & a_1 + b_2 & \cdots & a_1 + b_n \\ a_2 + b_1 & 1 + a_2 + b_2 & \cdots & a_2 + b_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n + b_1 & a_n + b_2 & \cdots & 1 + a_n + b_n \end{vmatrix}$$

定义

$$A = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}^\top, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{bmatrix}$$

则原式 = $\det(I_n + AB)$,而

$$\det(I_n + AB) = \det(I_2 + BA) = \left(1 + \sum_{i=1}^n a_i\right) \left(1 + \sum_{i=1}^n b_i\right) - n \sum_{i=1}^n a_i b_i.$$

第五章 行列式 35

定理 5.2.7: 矩阵行列式引理

若 A 可逆且 u,v 均为 n 维列向量,则

$$\det(A + uv^{\top}) = (1 + v^{\top}A^{-1}u)\det(A). \tag{5.16}$$

证明. 先证明命题对于 A = I 成立, 事实上

$$\begin{bmatrix} I \\ v^\top & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I + uv^\top & u \\ & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I \\ -v^\top & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & u \\ & 1 + v^\top u \end{bmatrix}.$$

故

$$\det(I + uv^{\top}) = 1 + v^{\top}u \tag{5.17}$$

进而

$$\det(A + uv^{\top}) = \det(A)\det(I + A^{-1}uv^{\top}) = (1 + v^{\top}A^{-1}u)\det(A).$$

注. 行列式的运算技巧不宜写得过多, 因为这远非线性代数的精髓.

5.3 Cramer 法则、伴随矩阵

定理 5.3.1: Cramer 法则

考虑线性方程组 Ax=b,记 A 的第 j 列为 $a_j=Ae_j$,将 A 的第 j 列 a_j 替换为 b 得到矩阵 B_j ,即

$$B_i := [a_1 \cdots a_{i-1} \ b \ a_{i+1} \cdots a_n]$$

Cramer 法则给出: x 的各分量为

$$x_j = \frac{\det(B_j)}{\det(A)}. (5.18)$$

证明. 注意到 $a_j = Ae_j$, 将 I 的第 j 列 e_j 替换为 x 得到矩阵 C_j , 即

$$C_j := [e_1 \ \cdots \ e_{j-1} \ x \ e_{j+1} \ \cdots \ e_n],$$

则 $B_j = AC_j$,等号左右取行列式,由 $\det(C_j) = x_j$ 即证.

推论. 利用 $AA^{-1} = I$, 把 A 左乘 A^{-1} 的每一列看做一个线性方程组,解得

$$(A^{-1})_{ij} = \frac{\operatorname{cof}(A)_{ji}}{\det(A)}.$$

定义 5.3.1: 伴随矩阵

方阵 A 的伴随矩阵 (adjugate matrix) 定义为其代数余子式矩阵的转置:

$$\operatorname{adj}(A) := \operatorname{cof}(A)^{\top}. \tag{5.19}$$

第五章 行列式 36

推论. 伴随矩阵的性质:

- adj(I) = I; adj(O) = O, 除了 adj([0]) = [1];
- $\operatorname{adj}(cA) = c^{n-1}\operatorname{adj}(A)$;
- $\operatorname{adj}(A^{\top}) = \operatorname{adj}(A)^{\top};$
- $\operatorname{adj}(AB) = \operatorname{adj}(B) \operatorname{adj}(A)$, $\operatorname{th} \operatorname{adj}(A^k) = \operatorname{adj}(A)^k$.

定理 5.3.2: 伴随矩阵与逆的关系

根据 Cramer 法则,

$$A^{-1} = \frac{\operatorname{adj}(A)}{\det(A)}. (5.20)$$

注. 即使 A 不可逆, adj(A) 依然存在.

定理 5.3.3: 伴随矩阵与原矩阵的乘积

伴随矩阵与原矩阵可交换, 其乘积为

$$A \operatorname{adj}(A) = \operatorname{adj}(A)A = \det(A)I. \tag{5.21}$$

证明. 根据 Laplace 展开,

$$[A \operatorname{adj}(A)]_{ij} = \sum_{k} A_{ik} \operatorname{adj}(A)_{kj} = \sum_{k} (-)^{j+k} A_{ik} \det(A_{\neq jk}) = \delta_{ij} \det(A);$$
$$[\operatorname{adj}(A)A]_{ij} = \sum_{k} \operatorname{adj}(A)_{ik} A_{kj} = \sum_{k} (-)^{i+k} \det(A_{\neq ki}) A_{kj} = \delta_{ij} \det(A).$$

对应元素相等,即证.

推论.

• 伴随矩阵的行列式 (并不要求 A 可逆)

$$\det(\operatorname{adj}(A)) = \det(A)^{n-1}; \tag{5.22}$$

• 伴随矩阵的伴随矩阵:

$$\operatorname{adj}(\operatorname{adj}(A)) = \det(A)^{n-2}A. \tag{5.23}$$

由伴随矩阵 adj(A) 反求矩阵 A:

$$A = \det(\operatorname{adj}(A))^{-(n-2)/(n-1)} \operatorname{adj}(\operatorname{adj}(A)).$$

• A 可逆 \iff adj(A) 可逆

$$adj(A)^{-1} = adj(A^{-1}) = \frac{A}{\det(A)};$$
 (5.24)

定理 5.3.4: 伴随矩阵的秩

矩阵 A 的伴随矩阵 adj(A) 的秩为

$$\operatorname{rank}(\operatorname{adj}(A)) = \begin{cases} n, & \operatorname{rank}(A) = n \\ 1, & \operatorname{rank}(A) = n - 1 \\ 0, & \operatorname{rank}(A) \leqslant n - 2 \end{cases}$$
 (5.25)

证明.

- rank(A) = n 时, A 可逆, adj(A) 也可逆;
- $\operatorname{rank}(A) = n 1$ 时, $A \operatorname{adj}(A) = O$, 故 $\operatorname{C}(\operatorname{adj}(A)) \subset \operatorname{N}(A)$, 即

$$rank(adj(A)) \leq n - rank(A) = 1,$$

又 A 存在非 0 的余子式,故 rank(adj(A)) ≥ 1 ,即 rank(adj(A)) = 1;

• $rank(A) \leq n-2$ 时,A 的余子式均为 0,故 adj(A) = O.

定理 5.3.5: Jacobi 公式

给定矩阵函数 $A: \mathbb{F} \to \mathbb{F}^{n \times n}, t \mapsto A(t), 则$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\det(A) = \mathrm{tr}\left(\mathrm{adj}(A)\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\right) \tag{5.26}$$

推论.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\det(A) = \det(A)\operatorname{tr}\left(A^{-1}\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}\right) \tag{5.27}$$

注. 计算机运用 Cramer 法则解 n 元线性方程组的时间复杂度是 $\mathcal{O}(n \cdot n!)$,且在数值上不稳定^I,这是不可接受的. 与其在计算方面的作用相比,其理论价值更为重大,即: 研究了方程组的系数与方程组解的存在性与唯一性关系.

因此在解题中建议用增广矩阵和 Gauss-Jordan 消元法求解线性方程组 Ax = b:

$$[A \ b] \rightarrow [I \ A^{-1}b];$$

同时,不推荐用伴随矩阵 adj(A) 求逆,因为其与 Cramer 法则等价. 仍建议用增广矩阵和 Gauss-Jordan 消元法求逆:

$$[A \ I] \ \rightarrow \ [I \ A^{-1}].$$

^ICramer, Gabriel (1750). "Introduction à l'Analyse des lignes Courbes algébriques" (in French). Geneva: Europeana. pp. 656-659. Retrieved 2012-05-18.

第六章 特征值和特征向量

6.1 特征值和特征向量

定义 6.1.1: 特征值和特征向量

给定方阵 A,若存在 $x \neq 0$ 和 $\lambda \in \mathbb{F}$ 满足:

$$Ax = \lambda x$$

则称 x 是 A 的特征向量 (eigenvector), λ 是对应的特征值 (eigenvalue). 矩阵 A 所有特征值构成的集合称为 A 的谱 (spectrum).

推论. 特征值的性质:

- 1. A 的特征向量 x 也是 A^n 的特征向量,特征值是 λ^n ;
- 2. 若 A 可逆,则 x 也是 A^{-1} 的特征向量,特征值是 λ^{-1} ;
- 3. 三角矩阵的特征值就是对角元;
- 4. A 可逆 $\iff A$ 所有特征值非 0.

定理 6.1.1: 不同特征值对应特征向量线性无关

给定 A 的一组特征向量 x_1, \ldots, x_r ,对应特征值为 $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$. 若 $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$ 两两不等,则 x_1, \ldots, x_r 线性无关.

证明. 运用数学归纳法证明. r=1 时, $x_1 \neq 0$ 自然线性无关;

假设 r=m-1 时, x_1,\ldots,x_{m-1} 线性无关; 当 r=m 时, 考虑

$$x_m = c_1 x_1 + \dots + c_{m-1} x_{m-1}, \tag{*}$$

两边同时左乘 A 得

$$\lambda_m x_m = c_1 \lambda_1 x_1 + \dots + c_{m-1} \lambda_{m-1} x_{m-1}, \tag{**}$$

 $\lambda_m(*) - (**)$ 得,

$$0 = c_1(\lambda_m - \lambda_1)x_1 + \dots + c_{m-1}(\lambda_m - \lambda_{m-1})x_{m-1},$$

由 x_1, \ldots, x_{m-1} 线性无关可得所有的 $c_i = 0$,故 x_1, \ldots, x_m 线性无关. 综上,定理对所有可能的 r 均成立.

6.2 特征多项式

定义 6.2.1: 特征子空间

A 的所有特征值为 λ 的特征向量张成 \mathbb{R}^n 的一个线性子空间: $N(A - \lambda I)$.

定义 6.2.2: 特征方程和特征多项式

求特征值 λ 需要解特征方程 (eigenfunction):

$$\det(\lambda I - A) = \lambda^n + a_1 \lambda^{n-1} + \dots + a_n = 0,$$

而 $p_A(\lambda) := \det(\lambda I - A)$ 称为特征多项式 (eigen-polynomial).

推论. 特别地, $p_A(0) = a_n = \det(-A)$, 由 Vieta 定理: 在考虑重根的情况下,

$$\det(A) = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i. \tag{6.1}$$

另一方面,通过对行列式进行 Laplace 展开,可得 $a_1 = -\operatorname{tr}(A)$,由 Vieta 定理:

$$\operatorname{tr}(A) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i, \tag{6.2}$$

6.2.1* Cayley-Hamilton 定理

定理 6.2.1: Cayley-Hamilton 定理

给定特征多项式 p_A 的系数 $1, a_1, \ldots, a_n$, 可定义矩阵多项式

$$p_A^*(X) = X^n + a_1 X^{n-1} + \dots + a_{n-1} X + a_n I, \tag{6.3}$$

则 $p_A^*(A) = O$.

完全错误的证明. 将特征多项式 $p_A(\lambda)=\det(\lambda I-A)$ 中的 λ 替换为 A,自然得到 $p_A(A)=\det(AI-A)=0$.

证明. 考察伴随矩阵 $adj(\lambda I - A)$, 可以写成如下形式:

$$\operatorname{adj}(\lambda I - A) = B_1 \lambda^{n-1} + \dots + B_{n-1} \lambda + B_n,$$

其中 B_1, \ldots, B_n 完全由 A 决定. 由伴随矩阵的性质:

$$(\lambda I - A) \operatorname{adj}(\lambda I - A) = \det(\lambda I - A)I = p_A(\lambda)I,$$

两边展开可得

$$B_1 \lambda^n + (B_2 - AB_1) \lambda^{n-1} + \dots + (B_n - AB_{n-1}) \lambda - AB_n = I \lambda^n + a_1 I \lambda^{n-1} + \dots + a_{n-1} \lambda + a_n I,$$

作为系数的矩阵均由 A 确定, 与 λ 无关. 由于上式 $\forall \lambda$ 均成立, 故对应系数相同:

$$B_1 = I$$
, $B_{i+1} - AB_i = a_i I$, $-AB_n = a_n I$.

因而 $p_A^*(A)$ 可以化为裂项和 (telescoping sum)

$$p_A^*(A) = A^n B_1 + A^{n-1}(B_2 - AB_1) + \dots + A(B_n - AB_{n-1}) - AB_n = O.$$

定理 6.2.2: Faddeev-LeVerrier 算法

特征多项式 $p_A(\lambda)$ 的第 k 个系数 a_k 可以递归地求出:

$$a_k = -\frac{1}{k} \left[\operatorname{tr}(A^k) + a_1 \operatorname{tr}(A^{k-1}) + \dots + a_{k-1} \operatorname{tr}(A) \right].$$
 (6.4)

证明. 沿用定理 6.2.1 证明中的定义,由 Jacobi 公式 (5.26),有

$$p'_A(\lambda) = \operatorname{tr}(\operatorname{adj}(\lambda I - A)I) = \operatorname{tr}(B_1\lambda^{n-1} + \dots + B_n)$$

展开

$$n\lambda^{n-1} + (n-1)a_1\lambda^{n-2} + \dots + a_{n-1} = \operatorname{tr}(B_1)\lambda^{n-1} + \operatorname{tr}(B_2)\lambda^{n-2} + \dots + \operatorname{tr}(B_n).$$

由于上式 $\forall \lambda$ 均成立, 故对应系数相同:

$$(n-k)a_k = \operatorname{tr}(B_{k+1}),$$

又 B_k 满足递推关系 $B_{k+1} = AB_k + a_k I$, 两边取迹可得

$$(n-k)a_k = \operatorname{tr}(AB_k) + na_k, \implies a_k = -\frac{1}{k}\operatorname{tr}(AB_k),$$

再展开 B_k 即证:

$$B_k = AB_{k-1} + a_{k-1}I = \dots = A^{k-1} + a_1A^{k-2} + \dots + a_{k-1}I.$$

推论. 取 $\lambda = 0$ 可得伴随矩阵:

$$\operatorname{adj}(-A) = B_n = A^{n-1} + a_1 A^{n-2} + \dots + a_{n-1} I. \tag{6.5}$$

易证这满足 $adj(-A)(-A) = (-A) adj(-A) = det(-A)I = c_0I$.

例 6.2.1: 特征多项式的前几项

$$a_2 = \frac{1}{2} (\operatorname{tr}(A)^2 - \operatorname{tr}(A^2)),$$
 (6.6a)

$$a_3 = \frac{1}{6} (\operatorname{tr}(A)^3 - 3\operatorname{tr}(A)\operatorname{tr}(A^2) + 2\operatorname{tr}(A^3)),$$
 (6.6b)

更一般地, a_k 的显性表达式由一个 k 阶行列式给出:

$$a_{k} = \frac{(-)^{k}}{k!} \begin{vmatrix} \operatorname{tr}(A) & k-1 \\ \operatorname{tr}(A^{2}) & \operatorname{tr}(A) & k-2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 1 \\ \operatorname{tr}(A^{k}) & \operatorname{tr}(A^{k-1}) & \operatorname{tr}(A^{k-2}) & \cdots & \operatorname{tr}(A) \end{vmatrix}.$$
(6.7)

6.3 矩阵对角化

由于对角矩阵有很多简单的性质,考虑相似变换 $\Lambda = X^{-1}AX$,其中 Λ 为对角矩阵.

定理 6.3.1: 相似变换与特征多项式

A 的相似变换 $B^{-1}AB$ 和 A 有相同的特征多项式.

证明. 对下式两边取行列式即证.

$$\lambda I - B^{-1}AB = \lambda B^{-1}IB - B^{-1}AB = B^{-1}(\lambda I - A)B.$$

定理 6.3.2: 可对角化判定

n 阶矩阵 A 可对角化 \iff A 有 n 个线性无关的特征向量 x_1, \ldots, x_n .

此时 $A = X\Lambda X^{-1}$,X 由特征向量给出,对角矩阵 Λ 由对应特征值 $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ (可能相同) 给出:

$$X = (x_1, \dots, x_n), \quad \Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n).$$
 (6.8)

证明. 假设 A 有 n 个线性无关的特征向量 x_1, \ldots, x_n ,

$$AX = (Ax_1, \dots, Ax_n) = (\lambda_1 x_1, \dots, \lambda_n x_n) = X\Lambda,$$

故 A 可对角化; 反过来说, 若 A 可对角化为 $X\Lambda X^{-1}$, 则 $AX = X\Lambda$, 即

$$(Ax_1, \ldots, Ax_n) = (\lambda_1 x_1, \ldots, \lambda_n x_n),$$

故 x_1, \ldots, x_n 是 A 的特征向量,又 X 可逆,故 x_1, \ldots, x_n 线性无关.

推论. 有 n 个互不相同特征值的 n 阶矩阵 A 可对角化.

特征值的重数 当特征值重复时,引入两个概念

定义 6.3.1: 几何重数和代数重数

几何重数 (geometric multiplicity, GM): 特征值 λ 对应的最大线性无关的特征向量的个数,即 $\dim(N(\lambda I - A))$.

代数重数 (algebraic multiplicity, AM): 特征值 λ 作为特征方程 $\det(\lambda I - A) = 0$ 的根的重复次数.

特征方程可以写成

$$\prod_{i=1}^{r} (\lambda - \lambda_i)^{m_i} = 0,$$

其中 λ_i 是互不相同的根, m_i 是 λ_i 的代数重数.

定理 6.3.3

 $GM \leq AM$.

证明. 考虑 n 阶矩阵 A,假设特征值 λ_1 的 $GM = \dim(\lambda_1 I - A) = m$,

取 $\{x_1,\ldots,x_m\}$ 为 $C(\lambda_1 I - A)$ 的一组正交归一基.

取 $\{b_1,\ldots,b_{n-m}\}$ 为 $N(\lambda_1 I - A)^{\perp}$ 的一组正交归一基.

设 $n \times n$ 矩阵

$$P = (x_1, \dots, x_m, b_1, \dots, b_{n-m}) = (X, B),$$

P 是可逆的且 $P^{-1} = P^{\mathsf{T}}$,且 $X^{\mathsf{T}}B = 0$,则

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} \lambda_1 I_m & X^\top AB \\ 0 & B^\top AB \end{bmatrix},$$

分块三角矩阵

$$\det(\lambda I - P^{-1}AP) = (\lambda - \lambda_1)^m \det(\lambda I - B^{\top}AB),$$

A 和 $P^{-1}AP$ 有相同的特征方程,故 λ_1 必然是 A 的特征方程的根,且其 $AM \geqslant GM$. \square **推论.** n 阶矩阵 A 的全部特征值为 $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_r\}$,A 可对角化当且仅当

$$\sum_{i=1}^{r} \dim(\lambda_i I - A) = n,$$

即所有特征值的 AM = GM.

定理 6.3.4: 同时对角化

若 A, B 可对角化,则他们可以同时对角化当且仅当 AB = BA.

证明. 若 A, B 可以同时对角化, 故

$$A = X\Lambda_A X^{-1}, \quad B = X\Lambda_B X^{-1},$$

故

$$AB - BA = X(\Lambda_A \Lambda_B - \Lambda_B \Lambda_A)X^{-1} = 0;$$

若 AB = BA, 下证 A, B 可同时对角化.

设 A 的特征值为 $\{\lambda_1,\ldots,\lambda_s\}$, λ_i 对应特征子空间为 V_i ,几何重数 $m_i=\dim(V_i)$,记 $n_i:=m_1+\cdots+m_{i-1}$,取 $\{v_{n_i+1},\ldots,v_{n_i+m_i}\}$ 表示 V_i 的一组基,记 $X=(v_1,\ldots,v_n)$,则 X 可对角化 A

$$X^{-1}AX = \begin{bmatrix} \lambda_1 I_{m_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_s I_{m_s} \end{bmatrix},$$

 $\forall x \in V_i$,

$$(AB - BA)x = (A - \lambda_i I)Bx = 0,$$

故 $Bx \in V_i$, 从而 $X^{-1}BX$ 和 $X^{-1}AX$ 一样是分块对角的:

$$X^{-1}BX = \begin{bmatrix} B_1 & & \\ & \ddots & \\ & & B_s \end{bmatrix},$$

其中 B_i 是 $m_i \times m_i$ 的. 给定 B 的特征值 ξ_j ,其必是 B_1, \ldots, B_s 其中至少一个的特征值,不妨考虑 ξ_j 是 B_i 的特征值^I,若 ξ_j 的 $AM > B_i$ 的 GM,则 ξ_j 的 AM > B 的 GM,B 便不能被对角化,与前提矛盾! 故 B_i 均可被特定的 Y_i 对角化,即 $Y_i^{-1}B_iY_i = \Lambda_i$,构造

$$Y = \begin{bmatrix} Y_1 & & \\ & \ddots & \\ & & Y_s \end{bmatrix}$$

则 $Y^{-1}X^{-1}BXY$ 是对角化的,同时 $Y^{-1}X^{-1}AXY$ 也是对角化的,取 Z=XY,便可同时对角化 A,B.

6.4* Jordan 标准型

不是所有方阵都可以对角化,如果 n 阶矩阵 A 有 r < n 个线性独立的特征向量,怎么把 A 变成最接近对角矩阵的形式?

定理 6.4.1: Jordan 标准型

n 阶矩阵 A 有 r 个特征值,则存在 B,使得

$$B^{-1}AB = \begin{bmatrix} J_1 & & & \\ & \ddots & \\ & & J_r \end{bmatrix}, \quad J_i = \begin{bmatrix} \lambda_i & 1 & & \\ & \lambda_i & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ & & & \lambda_i \end{bmatrix}$$

其中 J_i 称为 Jordan 块, λ_i 是 A 的第 i 个特征值.

 $^{^{\}mathrm{I}}$ 无需考虑 $\mathrm{N}(B_i)$

其证明是线性代数的核心.其中一些概念需要等到第八章线性映射才会提及.先给出几个概念证明引理.

定义 6.4.1: 广义特征向量

线性映射 $T:V\to V$ 的广义特征向量 (general eigenvector) $v\in V$ 且 $v\neq 0$,使得 $(T-\lambda I)^k v=0$ 对某个正整数 k 成立. 这里 $I:V\to V$ 是恒等映射.

使得 $(T - \lambda I)^d v = 0$ 成立的最小正整数 d 称为 v 的幂指数 (exponent).

定理 6.4.2

给定正整数 k,广义特征方程 $(T - \lambda I)^k v = 0$ 有解当且仅当 λ 是 T 的特征值.

证明. 若 λ 是 T 的特征值,则 $(T - \lambda I)v = 0$, 左乘 $(T - \lambda I)^{k-1}$ 即可.

若 $(T-\lambda I)^k v=0$ 有解,则 $w=(T-\lambda I)^{k-1}v$ 满足 $(T-\lambda I)w=0$, λ 是 T 的特征值. \square

定理 6.4.3

令 $u_i := (T - \lambda I)^i v$,则 $B = \{u_0, \dots, u_{d-1}\}$ 是一组线性无关的向量.

证明.设

$$\sum_{i=0}^{d-1} a_i u_i = \sum_{i=0}^{d-1} a_i (T - \lambda I)^i v = 0,$$

左乘 $(T - \lambda I)^{d-1}$,左边只剩 $a_0(T - \lambda I)^{d-1}v$,故 $a_0 = 0$;

递推地左乘 $(T-\lambda I)^{d-2}, (T-\lambda I)^{d-3}, \dots$ 可得到所有系数为 0,从而 u_0, \dots, u_{d-1} 线性无 关.

定理 6.4.4

$$Tu_{j} = \begin{cases} \lambda u_{j} + u_{j+1}, & 1 \leq j < d-1\\ \lambda u_{j}, & j = d-1\\ 0, & j > d-1 \end{cases}$$

证明. $1 \le j < d-1$ 时, $(T - \lambda I)u_j = u_{j+1}$,即 $Tu_j = \lambda u_j + u_{j+1}$. j = d-1 时, $(T - \lambda I)u_j = 0$,即 $Tu_j = \lambda u_j$; j > d-1 时, $u_j = 0$.

定理 6.4.5

 $X = \operatorname{span}(B)$ 是 T 的不变子空间,即 $T(X) \subset X$

证明. 由上式, $\forall u = a_0 u_0 + \cdots + a_{d-1} u_{d-1} \in X$

$$Tu = \sum_{i=0}^{d-2} a_i (\lambda u_i + u_{i+1}) + a_{d-1} \lambda u_{d-1} \in X.$$

因为 X 是 T 的不变子空间,我们可以把 T 看成是 $X \to X$ 的线性映射. 取 B 作为 X 的一组基,则 T 在 B 下的表示矩阵为

$$T = \begin{bmatrix} \lambda & & & \\ 1 & \lambda & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & \lambda \end{bmatrix}$$

这与 Jordan 块在定理 6.4.1 中的定义仅仅是转置的差别.

接下来我们将证明 V 中存在一组基,T 在这组基上的表示矩阵是分块对角的,而且每一块都是 Jordan 块的形式.

定理 6.4.6

若 v_1, \ldots, v_r 是 T 的广义特征向量,且相应的幂指数是 d_i ,设

$$u_{ij} := (T - \lambda_i I)^j v_i, \quad V_i := \text{span}(u_{i0}, \dots, u_{id-1}).$$

之前证明了 V_i 是 T 的不变子空间,且 T 在 V_i 上的表示矩阵是 Jordan 块. 故 T 在 $V_1 \oplus \cdots \oplus V_r$ 上的表示矩阵是分块对角的,且每一块都是 Jordan 块的形式.

所以我们只要证明存在这样一组广义特征向量 v_1, \ldots, v_r 使得 $V = V_1 \oplus \cdots \oplus V_r$ 就可以证明 Jordan 标准型的定理.

假设 λ 是 T 的某个特征值. 如果 $T - \lambda I$ 可以写成 Jordan 块的形式,则 T 也可以写成 Jordan 块的形式. 所以以下我们用 $T - \lambda I$ 代替 T,或者说,考虑有一个特征值是 0 的线性 映射 T.

定理 6.4.7

设 $K_i = \ker(T^i), U_i = \operatorname{Im}(T^i),$ 则

$$K_1 \subset K_2 \subset \cdots, \quad U_1 \supset U_2 \supset \cdots$$

证明. 待补

6.5 对称矩阵

定义 6.5.1: 对称矩阵

若 $S^{\top} = S$,则称 S 是对称矩阵 (symmetric matrix);

若 $A^{\top} = -A$,则称 A 是反对称矩阵 (skew-symmetric/anti-symmetric).

定理 6.5.1: 对称矩阵的性质 · 一

若 S 是一个 n 阶实对称矩阵,则 S 至少有一个实特征值 λ

证明. 由代数基本定理,对任何矩阵,S 的特征方程至少会得到一个复特征值 λ ,其对应的特征向量为 z (一般也是复的),则 $\bar{z}^{T}z>0$.

$$Sz = \lambda z, \quad S\bar{z} = \bar{S}\bar{z} = \bar{S}\bar{z} = \bar{\lambda}\bar{z},$$

由 S 的对称的性质,注意到

$$\bar{z}^{\top} S z = \lambda \bar{z}^{\top} z = \lambda (\bar{z}^{\top} z)^{\top} = \lambda z^{\top} \bar{z} = (S z)^{\top} \bar{z} = z^{\top} S \bar{z} = \bar{\lambda} z^{\top} \bar{z}.$$

故
$$\lambda = \bar{\lambda}$$
.

推论. 由代数基本定理的递归性,可推知 S 的所有特征值都是实数.

定理 6.5.2: 对称矩阵的性质 · 二

 $v \in S$ 的特征向量, 若 $w \perp v$, 则 $Sw \perp v$.

证明.

$$(Sw)^{\top}v = w^{\top}S^{\top}v = w^{\top}Sv = \lambda w^{\top}v = 0.$$

定理 6.5.3: 对称矩阵的性质 · 三

若 $W \in \mathbb{R}^n$ 的一个线性子空间,且在 S 的作用下稳定,即:

$$\forall w \in W, Sw \in W,$$

则 W^{\perp} 也在 S 的作用下稳定:

$$\forall u \in W^{\perp}, \ Su \in W^{\perp}.$$

证明. $\forall w \in W, u \in W^{\perp}$

$$(Su)^{\top} w = u^{\top} S^{\top} w = u^{\top} (Sw) = 0.$$

定理 6.5.4: 谱定理

对称矩阵 S 总可以被一个正交矩阵 Q 对角化.

证明. 由定理 6.5.1 和推论可知 S 至少有一个实特征值 λ_1 和实特征向量 q_1 且 $q_1^\top q_1 = 1$,S 在 q_1 张成的一维线性空间上是稳定的.

由定理 6.5.3 可知 S 作用在 $C(q_1)^{\perp}$ 上也是稳定的,假设 $C(q_1)^{\perp}$ 上有一组正交归一基为 $\{a_1,\ldots,a_{n-1}\}$,构造矩阵 $X_1=[q_1,a_1,\ldots,a_{n-1}]$,且 X_1 是正交的 $X_1^{\top}X_1=I$,

$$X_1^{\top} S X_1 = X_1^{\top} [\lambda q_1, S a_1, \dots, S a_{n-1}] = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \\ & S_1 \end{bmatrix}.$$

 S_1 是一个 (n-1) 阶方阵,且 $(S_1)_{ij} = a_i^{\mathsf{T}} S a_i$ 的,显然它也是对称的.

重复上述步骤,直到用 S 的特征向量构造出 \mathbb{R}^n 的一组正交归一基:

对 S_1 可构造 (n-1) 阶的正交矩阵 X_2 , 使得

$$X_2^\top S_1 X_2 = \begin{bmatrix} \lambda_2 & \\ & S_2 \end{bmatrix},$$

其中 S_2 是一个 (n-2) 阶对称方阵. 从而

$$\begin{bmatrix} 1 & \\ & X_2^\top \end{bmatrix} X_1^\top S X_1 \begin{bmatrix} 1 & \\ & X_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & \\ & \lambda_2 & \\ & & S_2 \end{bmatrix}.$$

 $Q_2 := X_1 \operatorname{diag}(1, X_2)$ 也是正交的 · · · · · 最终有

$$Q_n^{\top} S Q_n = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{bmatrix}.$$

 Q_n 也是正交的.

注. 对角化对称矩阵 S 的正交矩阵 Q 可被构造:

- 若 S 的特征值互不相同,对应的归一特征向量 q_i 两两正交,可选 $Q = [q_1, \ldots, q_n]$;

6.6 正定矩阵

定义 6.6.1: 二次型

二次型 (quadratic form) 是形如 $x^{T}Sx$ 的二次多项式,其中 S 是实对称矩阵.

定义 6.6.2: 正定矩阵

给定对称矩阵 S, 如果 $\forall x \neq 0$, 二次型 $x^{T}Sx > 0$, 则称 S 是正定的 (positive definite).

定理 6.6.1: 正定矩阵的判定

对于对称矩阵 S,下述命题是等价的:

- $1. \ \forall x \neq 0$,二次型 $x^{\top}Sx > 0$;
- 2. S 的所有 n 个特征值都是正的;
- 3. S 可以只通过换行和倍加后得到 n 个正的主元;
- 4. S 的所有左上行列式 (前 i 行 i 列子矩阵的行列式) 均 > 0;
- 5. 存在 A 列之间线性无关, 使得 $S = A^{T}A$.

证明. $1 \implies 2$: S 对称,则 $\Lambda = Q^{T}SQ$

$$\lambda_i = e_i^{\top} \Lambda e_i = e_i^{\top} Q^{\top} S Q e_i = (Q e_i)^{\top} S (Q e_i) > 0.$$

 $2 \implies 1$: S 的所有 n 个特征值都是正的, 故

$$x^{\top} S x = x^{\top} Q \Lambda Q^{\top} x = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i (Q^{\top} x)_i^2 > 0.$$

 $5 \implies 1$: A 列之间线性无关,故 $\forall x \neq 0, Ax \neq 0$

$$x^{\top} S x = x^{\top} A^{\top} A x = (Ax)^{\top} (Ax) > 0.$$

 $1 \Longrightarrow 5$: S 正定,故

$$S = Q\Lambda Q^\top = Q \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{\lambda_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{\lambda_n} \end{bmatrix} Q^\top =: A^\top A.$$

 $3 \implies 4$: 行倍加不改变所有左上行列式,S 做行倍加得到上三角矩阵 U,其 $i \times i$ 的左上行列式就是前 i 个主元的乘积,所以 > 0.

 $4 \implies 3$: U 的左上行列式都 > 0,所以前 i 个主元乘积都 > 0,所以主元全正.

 $3 \implies 5$: S = LDU, 由 S 对称且 LDU 分解唯一可知 $L = U^{\mathsf{T}}$, 又主元全正, 故

$$S = U^{\top}DU = U^{\top} \begin{bmatrix} \sqrt{a_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{a_n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{a_1} & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{a_n} \end{bmatrix} U =: A^{\top}A.$$

 $5 \implies 3$: A 列之间线性无关,故 A = QR

$$A^{\top}A = R^{\top}Q^{\top}QR = R^{\top}R = LDU.$$

定义 6.6.3: 半正定矩阵

如果 $\forall x \neq 0$,二次型 $x^{\top}Sx \geq 0$,则称 S 是半正定的 (positive semi-definite).

定理 6.6.2: 半正定但非正定矩阵的判定

- 1. S 的最小特征值是 0;
- 2. 存在 A 列之间线性相关,使得 $S = A^{T}A$.

推论. 半正定但非正定矩阵的行列式为 0.

定理 6.6.3: Cholesky 分解

正定矩阵 A 可以分解为

$$A = LL^{\top}, \tag{6.9}$$

其中 L 是对角元为正的下三角矩阵,这称为 Cholesky 分解.

特征值和特征向量只适用于方阵,对于一般的 $m \times n$ 矩阵 A,有没有类似的操作? 考虑 $A^{\mathsf{T}}A$ 和 AA^{T} ,他们都是半正定的,因为 $\forall x$

$$x^{\top} A^{\top} A x = \left\| A x \right\|^2 \geqslant 0,$$

 AA^{T} 同理,因此 $A^{\mathsf{T}}A$ 和 AA^{T} 都可以对角化.

定义 7.0.1: 奇异值

 $A^{\top}A$ 是半正定的,因此所有特征值 $\lambda_i \geq 0$,矩阵 A 的奇异值 (singular value) 便定义为 $A^{\top}A$ 特征值的平方根: $\sigma_i := \sqrt{\lambda_i}$.

为了后续方便,我们将所有奇异值从大到小排列:

$$\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_n \geqslant 0.$$

由定理 4.2.1, $\operatorname{rank}(A^{\top}A) = \operatorname{rank}(A)$

定理 7.0.1: 非零奇异值的数量

A 的非零奇异值的数量 r = rank(A).

证明. 设 $\{v_1,\ldots,v_n\}$ 为 \mathbb{R}^n 中可以把 $A^{\top}A$ 对角化的一组正交归一基, $\{\lambda_1,\ldots,\lambda_n\}$ 为对应的特征值,则 $\{Av_1,\ldots,Av_n\}$ 是一个正交向量集合,即 $\forall i\neq j$,

$$(Av_i)^{\top} Av_j = v_i^{\top} A^{\top} Av_j = v_i^{\top} (\lambda_j v_j) = 0.$$

假设 $\lambda_1 \ge \cdots \ge \lambda_r > 0$ 是所有的正特征值,则 $Av_{r+1}, \ldots, Av_n = 0$.

 $\forall x \in \mathbb{R}^n$, x 可以写成 $x = c_1 v_1 + \dots + c_n v_n$, 从而 $\forall y \in \mathrm{C}(A)$, y 可以被写为 $\{Av_1, \dots, Av_r\}$ 的线性组合:

$$y = Ax = c_1 A v_1 + \dots + c_r A v_r + 0 + \dots + 0,$$

故 $\{Av_1,\ldots,Av_r\}$ 是 C(A) 的一组正交基, $r=\operatorname{rank}(A)$.

7.1 奇异值分解

定理 7.1.1: 奇异值分解

 $m \times n$ 矩阵 A 秩为 r, 则存在一个 $m \times n$ 的矩阵 Σ

$$\Sigma = \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad D = \operatorname{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r).$$

 $m \times m$ 的正交矩阵 U 和 $n \times n$ 的正交矩阵 V, 且

$$A = U\Sigma V^{\top}$$
.

证明. 直接构造出 U, Σ, V .

由 $A^{\top}A$ 是对称矩阵,故存在一组 \mathbb{R}^n 中的正交归一基 $\{v_1,\ldots,v_n\}$ 可将 $A^{\top}A$ 对角化, $\{\lambda_1,\ldots,\lambda_n\}$ 为对应的特征值,且 $\lambda_1,\ldots,\lambda_r>0,\ \lambda_{r+1},\ldots,\lambda_n=0.$

因为 $\{v_1, \ldots, v_n\}$ 之间是正交的,则 $\forall i \neq j$,

$$(Av_i)^\top (Av_j) = v_i^\top A^\top A v_j = \lambda_j v_i^\top v_j = 0.$$

所以 $\{Av_1,\ldots,Av_r\}$ 之间也是正交的, $Av_{r+1},\ldots,Av_n=0$. 令

$$u_i = \frac{Av_i}{\|Av_i\|} = \frac{Av_i}{\sqrt{\lambda_i}} = \frac{Av_i}{\sigma_i}, \quad i = 1, \dots, r.$$

则 $\{u_1,\ldots,u_r\}$ 是 C(A) 的一组正交归一基.

再设 $\{u_{r+1},\ldots,u_m\}$ 是 $\mathrm{N}(A^{\top})$ 中的一组正交归一基,由 $\mathrm{N}(A^{\top})=\mathrm{C}(A)^{\perp}$, $\{u_1,\ldots,u_m\}$ 是 \mathbb{R}^m 的一组正交归一基.

设矩阵 $U = (u_1, ..., u_m)$, $V = (v_1, ..., v_n)$, U 和 V 都是正交矩阵, 且

$$AV = (Av_1, \dots, Av_n) = (\sigma_1 u_1, \dots, \sigma_r u_r, 0, \dots, 0) = U\Sigma.$$

定理 7.1.2

 $A^{T}A$ 和 AA^{T} 的非零特征值相同.

证明. 假设 x_i 是 $A^{T}A$ 的特征值为 $\lambda_i \neq 0$ 的特征向量,

$$(\lambda_i I - A^{\top} A) x_i = 0.$$

左乘 A,

$$A(\lambda_i I - A^{\top} A) x_i = (\lambda_i I - A A^{\top}) (A x_i) = 0,$$

又 $x_i^{\top} A^{\top} A x_i = \lambda_i x_i^{\top} x_i > 0$,所以 $A x_i \neq 0$,所以 $A x_i$ 是 $A A^{\top}$ 的特征值为 λ_i 的特征向量.

同理,如果 x_i 是 AA^{\top} 的特征值为 $\lambda_i \neq 0$ 的特征向量,则 $A^{\top}x_i$ 是 $A^{\top}A$ 的特征值为 λ_i 的特征向量.

从而 $A^{\mathsf{T}}A$ 和 AA^{T} 非零特征值对应的特征向量一一对应.

推论. 四个子空间的正交归一基:

- $\{v_1, ..., v_r\}$ 是 $C(A^{\top})$ 的正交归一基, $V_r = (v_1, ..., v_r)$;
- $\{v_{r+1}, \ldots, v_n\}$ 是 N(A) 的正交归一基, $V_{n-r} = (v_{r+1}, \ldots, v_n)$;
- $\{u_1, \ldots, u_r\}$ 是 C(A) 的正交归一基, $U_r = (u_1, \ldots, u_r)$;
- $\{v_{r+1},...,v_n\}$ 是 $N(A^{\top})$ 的正交归一基, $U_{n-r}=(u_{r+1},...,v_m)$.

定义 7.1.1: 秩一矩阵

若矩阵 A 的秩 rank(A) = 1,则称为秩一矩阵.

注. 秩一矩阵 $A \in \mathbb{F}^{m \times n}$ 总可以表示成 $A = vu^{\top}$, 其中 $u \in \mathbb{F}^m, v \in \mathbb{F}^n$.

例 7.1.1: 数据压缩

通过奇异值分解,A 可以表示成 r 个秩一矩阵的和:

$$A = \begin{bmatrix} U_r & U_{m-r} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_r^\top \\ V_{n-r}^\top \end{bmatrix} = U_r D V_r^\top = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^\top.$$

若 $r < \min(m, n)$,则可以用 U_r, D, V_r 这三个矩阵的 r(m+1+n) 个分量完全确定 A 原来的 mn 个分量. 由此实现了数据的压缩 (无损).

甚至可以把很小的奇异值当成0,只取前k项,进一步压缩图片(有损)。误差

$$\Delta A = \sum_{\ell=k+1}^{r} \sigma_{\ell} u_{\ell} v_{\ell}^{\top}.$$

误差分量的绝对值

$$|\Delta A_{ij}| = \left| \sum_{\ell=k+1}^r \sigma_\ell(u_\ell)_i(v_\ell)_j \right| \leqslant \sum_{\ell=k+1}^r \sigma_\ell.$$

因此误差由忽略的奇异值控制,忽略的越少误差越小.

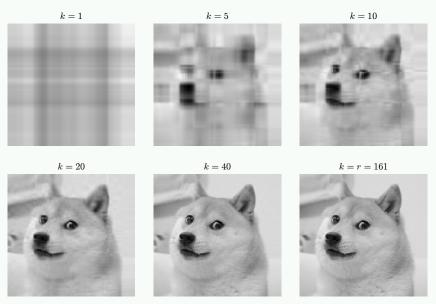


图 7.1: 基于奇异值分解的 doge meme 灰度图的压缩

7.2 矩阵的模

我们用内积定义了向量的模 (即长度)

$$||x|| := \sqrt{\langle x, x \rangle}.$$

下面我们用向量的范数诱导矩阵的范数.

定理 7.2.1

$$||Ax|| \leqslant \sigma_1 ||x||. \tag{7.1}$$

证明.

$$\begin{split} \left\|Ax\right\|^2 &= x^\top A^\top A x = x^\top V \Sigma^\top \Sigma V^\top x \\ &= \sum_{k=1}^n x^\top v_k \sigma_k^2 v_k^\top x \leqslant \sigma_1^2 \sum_{k=1}^n x^\top v_k v_k^\top x \\ &= \sigma_1^2 x^\top V V^\top x = \sigma_1^2 x^\top x, \end{split}$$

等号可在 $x = cv_1$ 时成立.

定义 7.2.1: 矩阵的模

矩阵的模 (norm) 定义为

$$||A|| := \max_{x \neq 0} \frac{||Ax||}{||x||} = \sigma_1. \tag{7.2}$$

推论. 由矩阵模的定义可直接导出 $\forall x \neq 0$,

 $||Ax|| \leqslant ||A|| \, ||x|| \, .$

定理 7.2.2: 三角不等式

$$||A + B|| \le ||A|| + ||B||. \tag{7.3}$$

证明. $\forall x \neq 0$,

$$||(A+B)x|| = ||Ax+Bx|| \le ||Ax|| + ||Bx|| \le ||A|| \, ||x|| + ||B|| \, ||x||.$$

故

$$||A + B|| \le \frac{||(A + B)x||}{||x||} \le ||A|| + ||B||.$$

给定矩阵 A,限定矩阵 B 的秩 $\operatorname{rank}(B) = k < \operatorname{rank}(A)$,如何使得 B 最接近 A? 即

$$B^{\star} = \arg\min_{D} \|A - B\|.$$

定理 7.2.3: Eckart-Young-Mirsky 定理

同矩阵 A 最接近的秩为 k 的矩阵为

$$A_k = \sum_{i=1}^k \sigma_i u_i v_i^{\top}. \tag{7.4}$$

证明. 只需证 $\forall B$ 秩为 k, 都有

$$||A - B|| \geqslant ||A - A_k|| = \sigma_{k+1}.$$

设 $w = c_1 v_1 + \cdots + c_{k+1} v_{k+1}$,因为 $\operatorname{rank}(B) = k$,故 Bv_1, \ldots, Bv_{k+1} 必然线性相关,继而存在非零的 c_1, \ldots, c_{k+1} 使得 Bw = 0,在此基础上再归一化 w,从而

$$||A - B||^{2} \ge ||(A - B)w||^{2} = ||Aw||^{2}$$

$$= \sigma_{1}^{2}c_{1}^{2} + \dots + \sigma_{k+1}^{2}c_{k+1}^{2} \ge \sigma_{k+1}^{2}(c_{1}^{2} + \dots + c_{k+1}^{2}) = \sigma_{k+1}^{2}.$$

7.3 伪逆

定义 7.3.1: 伪逆

 $m \times n$ 矩阵 $A = U \Sigma V^{\mathsf{T}}$, 定义伪逆 (pseudoinverse) 是一个 $n \times m$ 的矩阵

$$A^+ := V \Sigma^+ U^\top. \tag{7.5}$$

其中 Σ^+ 是一个 $n \times m$ 的矩阵

$$\Sigma^+ := \begin{bmatrix} D^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad D^{-1} = \operatorname{diag}(\sigma_1^{-1}, \dots, \sigma_r^{-1}).$$

推论.

$$AA^{+}A = A, (7.6a)$$

$$A^{+}AA^{+} = A^{+}. (7.6b)$$

注. 伪逆与原矩阵的乘积并不是单位矩阵:

$$A^{+}A = V \begin{bmatrix} I_{r} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^{\top},$$

是投影到 $C(A^{\top})$ 的矩阵;

$$AA^+ = U \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^\top,$$

是投影到 C(A) 的矩阵.

定理 7.3.1: 伪逆与最小二乘法

最小二乘法

$$A^{\top}Ax = A^{\top}b$$
,

的解为 $x^{+} = A^{+}b$.

证明.

$$A^{\top}Ax^{+} = V\Sigma^{\top}U^{\top}U\Sigma V^{\top}V\Sigma^{+}U^{\top}b = V\Sigma^{\top}U^{\top}b = A^{\top}b.$$

7.4 主成分分析

一组数据 $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_n)$ 来源于 n 个样本,其样本均值 (mean) 和样本方差 (variance) 分别为

$$\bar{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mu_i, \quad \sigma^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (\mu_i - \bar{\mu})^2.$$

将数据存在一个 $m \times n$ 的矩阵 A 中,每一行对应一种数据,每一列代表一个样本. 将每个元素减去其所在行的平均值

$$A_{ij} := (A_0)_{ij} - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} (A_0)_{ik}.$$

由此得到矩阵 A,每一行都是以 0 为中心的分布.

定义 7.4.1: 协方差矩阵

定义协方差矩阵 (covariance matrix)

$$S := \frac{AA^{\top}}{n-1}.\tag{7.7}$$

对角线上 S_{ii} 是样本方差; S_{ij} 是样本协方差.

方法 7.4.1: 主成分分析

主成分分析 (principal component analysis, PCA): 找到原有数据的一系列线性组合作为新的数据,新数据之间的协方差为 0.

利用 $A = U\Sigma V^{\mathsf{T}}$, 定义新的数据矩阵 $B := U^{\mathsf{T}} A = \Sigma V$, B 的协方差矩阵

$$\frac{BB^\top}{n-1} = \frac{\Sigma \Sigma^\top}{n-1}$$

是对角的,故 B 之间协方差为 0.

总方差在这种变换下是不变的:

$$\operatorname{tr} \left(\frac{BB^\top}{n-1} \right) = \frac{\operatorname{tr} (U^\top AA^\top U)}{n-1} = \frac{\operatorname{tr} (UU^\top AA^\top)}{n-1} = \operatorname{tr} \left(\frac{AA^\top}{n-1} \right).$$

所有数据点分布在 $\{u_1,\ldots,u_r\}$ 张成的 C(A) 上, u_1 是所有数据变化最大的方向 (方差最大)、 u_2 次之……因此 $\{u_1,\ldots,u_r\}$ 称作主成分 (principal component).

定义 8.0.1: 映射

给定两个集合 S, S', 如果 $\forall x \in S$, 均有一个对应的 $f(x) \in S'$, 这种对应关系 f 便称 为映射 (mapping),记作

$$f: S \to S', \ x \mapsto f(x).$$
 (8.1)

其中 S 称为定义域 (domain), S' 称为陪域 (codomain). f(x) 称为 x 的像 (image), 所有像的集合 $f(S) = \{f(x) | x \in S\}$ 称为值域 (image of S), 有 $f(S) \subset S'$.

给定 $y \in S'$, 所有满足 f(x) = y 的 x 的集合称为 y 的原像 (preimage), 记作

$$f^{-1}(y) := \{ x \in S \mid f(x) = y \}. \tag{8.2}$$

注. 符号 $f(\cdot)$ 便代表映射 $x \mapsto f(x)$.

定义 8.0.2: 映射的复合

映射 $f: U \to V, g: V \to W$ 的复合 (composition) 构成一个新的映射:

$$g \circ f : U \to W, x \mapsto q(f(x)).$$

推论. 映射的复合满足结合律

$$(h \circ g) \circ f = h \circ (g \circ f) \equiv h \circ g \circ f.$$

定义 8.0.3: 单射、满射和双射

- •
- 满射 (surjection): $\forall s \in S'$, 均 $\exists x \in S$ 使得 f(x) = s.
- 双射 (bijection): 既是单射又是满射.

定义 8.0.4: 恒等映射

定义 S 上的恒等映射 (identity) 为

$$id_S: S \to S, \ x \mapsto x.$$
 (8.3)

推论. $\forall f: S \to S'$, 有 $f \circ id_S = id_{S'} \circ f = f$.

定义 8.0.5: 逆映射

给定映射 $f: S \to S'$, 若存在 $g: S' \to S$ 使得

$$g \circ f = \mathrm{id}_S, \quad f \circ g = \mathrm{id}_{S'},$$

则称映射 $f: S \to S'$ 可逆, $g = f^{-1}$ 为 f 的逆映射 (inverse).

定理 8.0.1: 有关映射的等价描述

- 1. 映射 f 为单射 \iff 存在映射 g 使得 $g \circ f = id$;
- 2. 映射 f 为满射 \iff 存在映射 g 使得 $f \circ g = id$;
- 3. 映射 f 为双射 \iff f 可逆.

证明. 显然 $(1),(2) \Longrightarrow (3)$, 故只需证明 (1),(2). 证明留作习题.

8.1 线性映射和矩阵

定义 8.1.1: 线性映射

给定两个线性空间 V, W, 若映射 $T: V \to W$ 满足:

- 1. $\forall u, v \in V, \ T(u+v) = T(u) + T(v);$
- 2. $\forall c \in \mathbb{F}, \ T(cu) = cT(u).$

则称映射 T 是线性映射 (或线性变换,linear mapping). 所有 $V \to W$ 的线性映射的 集合记作 $\hom(V, W)$.

推论. T(0) = 0.

例 8.1.1

求导运算

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}:\mathcal{C}^{\infty}\to\mathcal{C}^{\infty},\ f\mapsto f'$$

是线性映射, 而 $e^{\lambda x}$ 是其特征函数.

定理 8.1.1: 线性映射与基

给定两个线性空间 V,W, $\{v_1,\ldots,v_n\}$ 是 V 中的一组基, $\{w_1,\ldots,w_n\}$ 是 W 中任意 n 个元素,则存在唯一的线性映射 $T:V\to W$ 使得

$$T(v_1) = w_1, \ldots, T(v_n) = w_n.$$

证明. (存在性) $\forall v \in V$ 均可唯一写成基的线性组合 $v = c_1 v_1 + \cdots + c_n v_n$, 定义映射 $T: V \to W$

$$T(v) = c_1 w_1 + \dots + c_n w_n,$$

下面证明 T 是线性映射,再任取 $u = d_1v_1 + \cdots + d_nv_n \in V$

$$T(v+u) = T((c_1+d_1)v_1 + \dots + (c_n+d_n)v_n)$$

$$= (c_1+d_1)w_1 + \dots + (c_n+d_n)w_n = T(v) + T(u);$$

$$T(cv) = T(cc_1v_1 + \dots + cc_nv_n) = cc_1w_1 + \dots + cc_nw_n = cT(v).$$

(唯一性) 假设存在另一个线性映射 $F: V \to W$ 满足

$$F(v_1) = w_1, \ldots, F(v_n) = w_n,$$

则

$$F(v) = c_1 F(v_1) + \dots + c_n F(v_n) = c_1 w_1 + \dots + c_n w_n = T(v).$$

综上,存在唯一的线性映射.

注. 只要知道线性映射在基上的值,就唯一决定了这个线性映射.

例 8.1.2: 矩阵定义线性映射

 $m \times n$ 的矩阵 A 可定义一个线性映射:

$$L_A: \mathbb{F}^n \to \mathbb{F}^m, \ x \mapsto Ax.$$
 (8.4)

定理 8.1.2: 线性映射和矩阵

设 $L: \mathbb{F}^n \to \mathbb{F}^m$ 是线性映射,则存在唯一的矩阵 A 使得 $L=L_A$.

证明. 设 $\{e_1,\ldots,e_n\}$ 是 \mathbb{F}^n 的标准基, $\{f_1,\ldots,f_m\}$ 是 \mathbb{F}^n 的标准基, $\forall x\in\mathbb{F}^n$,有 $x=x_1e_1+\cdots+x_ne_n$,则

$$L(x) = x_1 L(e_1) + \dots + x_n L(e_n).$$

 $L(e_i) \in \mathbb{F}^m$,故可写成基的线性组合

$$L(e_i) = a_{1i}f_1 + \dots + a_{mi}f_m.$$

故

$$L(x) = x_1(a_{11}f_1 + \dots + a_{m1}f_m) + \dots + x_n(a_{n1}f_1 + \dots + a_{nm}f_m)$$

$$= (a_{11}x_1 + \dots + a_{1n}x_n)f_1 + \dots + (a_{m1}x_1 + \dots + a_{mn}x_n)f_m$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11}x_1 + \dots + a_{1n}x_n \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + \dots + a_{mn}x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} =: Ax.$$

便唯一确定了一个矩阵 A.

注. 线性映射给出了矩阵和向量乘法的自然定义.

8.2 线性映射的性质

利用线性映射和矩阵的对应,线性映射的加法和数乘等价于矩阵的加法和数乘,零映射 对应零矩阵,这些都是平凡的.

给出加法、数乘、零映射的定义后,所有 $V \to W$ 的线性映射的集合 $\{T\}$ 便构成一个线性空间,可验证满足 8 条公理.

定义 8.2.1: 线性映射的核

线性映射 $F: V \to W$ 的核 (kernel) 是所有满足 F(v) = 0 的向量 v 的集合

$$\ker(F) \equiv \{ v \in V \mid F(v) = 0 \}.$$

推论. $\ker(F)$ 是 V 的线性子空间. $\ker(L_A) = \mathrm{N}(A)$.

定理 8.2.1: 核和单射

$$\ker(F) = \{0\} \iff F$$
 是单射.

证明. (矩阵版本) 对应矩阵零空间为 $\{0\}$, Av = b 若有解则解必唯一.

(抽象版本) 若 $u, v \in V$ 满足 F(u) = F(v),则 F(u - v) = F(u) - F(v) = 0,从而 u - v = 0.

定理 8.2.2: 核的性质

若线性映射 $F: V \to W$ 的核 $\ker(F) = \{0\}$,则对于线性无关的一组 $v_1, \ldots, v_n \in V$,有 $F(v_1), \ldots, F(v_n)$ 线性无关.

证明. (矩阵版本) 对应矩阵零空间为 {0},则列满秩,列之间线性无关.

(抽象版本) 假设
$$x_1F(v_1) + \cdots + x_nF(v_n) = 0$$
,则

$$F(x_1v_1 + \dots + x_nv_n) = 0, \implies x_1v_1 + \dots + x_nv_n = 0.$$

 v_1, \ldots, v_n 线性无关, 故只有零解.

定义 8.2.2: 线性映射的像

线性映射 $F: V \to W$ 的像 (image) 是所有 F(v) 的集合

$$\operatorname{im}(F) \equiv \{F(v) \in W \mid \forall v \in V\}.$$

推论. im(F) 是 W 的线性子空间. $im(L_A) = C(A)$.

定理 8.2.3: 核和像的关系

V 是线性空间, $L:V\to W$ 是线性映射

$$\dim(V) = \dim(\ker(L)) + \dim(\operatorname{im}(L)). \tag{8.5}$$

证明. (矩阵版本)

$$\dim(V) = \dim(\mathcal{N}(A)) + \dim(\mathcal{C}(A^{\top})) = \dim(\mathcal{N}(A)) + \dim(\mathcal{C}(A)).$$

(抽象版本) 略 □

定理 8.2.4: 核、像和双射

线性映射 $L: V \to W$,且 $\dim(V) = \dim(W)$,则

$$\ker(F) = \{0\} \iff \operatorname{im}(F) = W \iff L$$
 是双射.

证明. 略

8.3 基的变换

定义 8.3.1: 坐标向量

设 $B = \{v_1, \ldots, v_n\}$ 是线性空间 V 上的一组基,V 中的向量 $v \in V$ 可唯一写成 $v = x_1v_1 + \cdots + x_nv_n$,其在基 B 下的坐标向量 (coordinate vector) 为

$$x_B(v) = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}.$$

显然 $x_B: V \to \mathbb{F}^n$ 是线性映射,且是一个双射.

我们可以选取 V 上的另一组基 $B' = \{u_1, \ldots, u_n\}$, 基变换矩阵:

$$(u_1, \dots, u_n) = (v_1, \dots, v_n)M, \tag{*}$$

v 也可以写成 $v = y_1u_1 + \cdots + y_nu_n$, 由于向量在基的变换下保持不变, 故

$$v = (v_1, \dots, v_n)(x_1, \dots, x_n)^{\top} = (u_1, \dots, u_n)(y_1, \dots, y_n)^{\top}.$$

可以推出

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = M^{-1} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}. \tag{**}$$

定理 8.3.1: 换基矩阵

 $L: V \to W$ 是一个线性映射, $B = \{v_1, \ldots, v_n\}$ 是 V 上的一组基, $B' = \{w_1, \ldots, w_m\}$ 是 W 上的一组基. 则存在唯一的 $m \times n$ 矩阵 $M_{B'}^B(L)$,使得 $\forall v \in V$,

$$x_{B'}(L(v)) = M_{B'}^B(L)x_B(v).$$

证明. $\forall v \in V$, 有

$$v = x_1 v_1 + \dots + x_n v_n$$
, $L(v) = x_1 L(v_1) + \dots + x_n L(v_n)$.

 $L(v_i) \in W$, 所以

$$L(v_i) = m_{1i}w_1 + \dots + m_{mi}w_m.$$

写成矩阵的形式即 $(L(v_1),\ldots,L(v_n))=(w_1,\ldots,w_m)M$,从而

$$L(v) = (L(v_1), \dots, L(v_n))(x_1, \dots, x_n)^{\top} = (w_1, \dots, w_m)M(x_1, \dots, x_n)^{\top}.$$

故 L(v) 在 B' 上的坐标为 $M(x_1,\ldots,x_n)^{\top}$.

 $M_{B'}^B(L)$ 是所有线性变换 $L:V\to W$ 到 $\dim(W)\times\dim(V)$ 矩阵的线性映射,并且是一个双射.

特别地, 当 $L \equiv id: V \rightarrow V$ 时,

$$x_{B'}(v) = M_{B'}^B(\mathrm{id})x_B(v).$$

定理 8.3.2: 线性变换的复合与矩阵乘法

线性映射 $L_1: U \to V, L_2: V \to W, B, B', B''$ 分别是 U, V, W 上的一组基,则

$$M_{B''}^B(L_2 \circ L_1) = M_{B''}^{B'}(L_2)M_{B'}^B(L_1).$$

线性映射的复合等价于对应矩阵的乘法,由此可自然得到矩阵乘法的规则.

定理 8.3.3: $M_{B'}^{B}(id)$ 可逆

$$M_{B'}^B(\mathrm{id}) = M_B^{B'}(\mathrm{id})^{-1}.$$

定理 8.3.4

线性映射 $L: V \to W$, $B, B' \neq V$ 上的两组基, $C, C' \neq W$ 上的两组基, 则

$$M_{C'}^{B'}(L) = M_{C'}^{C}(\mathrm{id}) M_{C}^{B}(L) M_{B}^{B'}(\mathrm{id}) = M_{C}^{C'}(\mathrm{id})^{-1} M_{C}^{B}(L) M_{B}^{B'}(\mathrm{id})$$

证明. 利用 $L = id_W \circ L \circ id_V$.

推论. $L: V \to V$, $B, B' \in V$ 上的两组基,则

$$M_{B'}^{B'}(L) = M_{B}^{B'}(\mathrm{id})^{-1} M_{B}^{B}(L) M_{B}^{B'}(\mathrm{id}).$$

因此相似变换就是换基,矩阵对角化就是找到描述线性变换的最好的基.

8.4 对偶空间

如何从已知的线性空间构造新的线性空间?

定义 8.4.1: 对偶空间

线性空间 V 的对偶空间 (dual space) V^* 是所有线性映射 $L:V\to \mathbb{F}$ 构成的线性空间.

定理 8.4.1: 对偶空间的基

通过 V 的一组基 $\{v_1, \ldots, v_n\}$ 可构造 V^* 的基 $\{v^{*1}, \ldots, v^{*n}\}$, 满足

$$v^{*i}(v_j) = \delta^i{}_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$
 (8.6)

证明. (完备性) $\forall L \in V^*$, 由定理 8.1.1, L 可由其在基上的取值 $\{L(v_1), \ldots, L(v_n)\}$ 唯一决定,又 $L(v_1)v^{*1} + \cdots + L(v_n)v^{*n}$ 和 L 在基 v_1, \ldots, v_n 上取到了相同的值,故二者相等:

$$L = L(v_1)v^{*1} + \dots + L(v_n)v^{*n}.$$

即 L 可被写成 $\{v^{*1}, ..., v^{*n}\}$ 的线性组合.

(线性无关) 若基的线性组合是零映射 $x_1v^{*1}+\cdots+x_nv^{*n}=O$,则 $O(v_i)=x_i=0$,即只有零解.

例 8.4.1: Fourier 变换

Fourier 变换

$$\hat{f}(k) = \int f(x) e^{ik \cdot x} d^3x,$$

就是将 \mathbb{R}^3 的函数变成 $(\mathbb{R}^3)^*$ 的函数.

例 8.4.2: 对偶的对偶

依定义,对偶空间 V^* 的对偶空间 V^{**} 是所有线性映射 $F:V^*\to\mathbb{R}$ 构成的线性空间. $\forall v\in V$,可定义映射 $u^{**}\in V^{**}$,使得 $\forall L\in V^*$

$$u^{**}(L) = L(u). (8.7)$$

因此 V^{**} 和 V 是自然同构的 (natural isomorphism): $V^{**}\cong V$. 这是范畴论 (category theory) 的概念,粗糙地说就是这种同构关系不依赖于基的选取,而 V 和 V^* 的同构是依赖于基的. 因此我们可以将 V^{**} 和 V 视为同一个线性空间,从而 V^{**},V^{***},\dots 也就再没有研究价值了.

定理 8.4.2: 对偶空间的基变换

给定线性空间 V 及其中的两组基 $\{v_1,\ldots,v_n\}$ 和 $\{u_1,\ldots,u_n\}$,我们可以给出对偶空间 V^* 的基 $\{v^{*1},\ldots,v^{*n}\}$ 和 $\{u^{*1},\ldots,u^{*n}\}$,满足

$$v^{*i}(v_j) = \delta^i{}_j, \quad u^{*i}(u_j) = \delta^i{}_j,$$

若
$$(v_1,\ldots,v_n)=(u_1,\ldots,u_n)A$$
,则 $(v^{*1},\ldots,v^{*n})^{\top}=A^{-1}(u^{*1},\ldots,u^{*n})^{\top}$

证明. 若 $(v^{*1},\ldots,v^{*n})^{\top}=B(u^{*1},\ldots,u^{*n})^{\top}$, 即

$$v_i = \sum_{j=1}^n u_j A^j{}_i, \quad v^{*i} = \sum_{j=1}^n B^i{}_j u^{*j}.$$

则

$$v^{*i}(v_j) = \sum_{k=1}^n B^i{}_k u^{*k} \left(\sum_{\ell=1}^n u_\ell A^\ell{}_j \right) = \sum_{k,\ell} B^i{}_k A^\ell{}_j u^{*k} (u_\ell)$$
$$= \sum_{k,\ell} B^i{}_k A^\ell{}_j \, \delta^k{}_\ell = \sum_{k=1}^n B^i{}_k A^k{}_j = \delta^i{}_j.$$

故 $B = A^{-1}$.

8.5 直和、直积

定义 8.5.1: 线性空间的和

线性空间 U 的两个子空间 V,W 的和 (sum) V+W 定义为所有 $v+w,v\in V,w\in W$ 的集合:

$$V + W \equiv \{v + w \mid v \in V, w \in W\}. \tag{8.8}$$

显然, V+W 也是 U 的子空间.

定义 8.5.2: 线性空间的直和

线性空间 $U \in V$ 和 W 的直和 (direct sum) $U = V \oplus W$,若 $\forall u \in U$,存在唯一的 $v \in V, w \in W$ 使得 u = v + w.

定理 8.5.1: 和与直和

若 U = V + W 且 $V \cap W = \{0\}$,则 $U = V \oplus W$.

证明. 假设 $u \in U$ 可以写成 u = v + w = v' + w', 则 v - v' = w - w',

又 $v-v'\in V,\ w-w'\in W$ 且 $V\cap W=\{0\}$,所以 v-v'=w-w'=0. 故分解是唯一的.

定理 8.5.2: 直和的存在

U 是一个有限维线性空间, V 是 U 的子空间, 则存在 U 的子空间 W 使得 $U = V \oplus W$.

证明. 取 V 的一组基 $\{v_1, \ldots, v_r\}$,可将其扩张成 U 的一组基 $\{v_1, \ldots, v_r, w_1, \ldots, w_m\}$,取 $W = \operatorname{span}(w_1, \ldots, w_m)$ 即可.

推论.

$$\dim(V \oplus W) = \dim(V) + \dim(W). \tag{8.9}$$

定义 8.5.3: 线性空间的直积

两个线性空间 V,W 的直积 (direct product) $V\times W$ 是所有形如 $(v,w),v\in V,w\in W$ 的元素的集合:

$$V \times W \equiv \{(v, w) \mid v \in V, w \in W\}. \tag{8.10}$$

定理 8.5.3: 直基的维度

 $V \times W$ 是一个线性空间. 且

$$\dim(V \times W) = \dim(V) + \dim(W). \tag{8.11}$$

8.6 张量

定义 8.6.1: 多重线性映射

映射 $L: V_1 \times \cdots \times V_r \to W$ 是一个多重线性映射 (multiple linear mapping),若其对于 每一个变量都是线性的:

$$L(\ldots, au + bw, \ldots) = aL(\ldots, u, \ldots) + bL(\ldots, w, \ldots).$$

定义 8.6.2: 张量空间 $V^* \otimes V^*$

- 加法: $(L_1 + L_2)(u, v) = L_1(u, v) + L_2(u, v)$;
- 数乘: (cL)(u,v) = cL(u,v);
- 零元: $O(u,v) \equiv 0$.

因此这个集合构成一个线性空间,称作张量空间 (tensor space) $V^* \otimes V^*$. 其中的每一个元素 L 是二阶协变张量 (covariant tensor),记作 (0,2) 张量.

若 V 的一组基为 $\{v_1,\ldots,v_n\}$,则 $\forall L \in V^* \otimes V^*$

$$L(u, v) = L\left(\sum_{i=1}^{n} a_i v_i, \sum_{j=1}^{n} b_j v_j\right) = \sum_{i,j} a_i b_j L(v_i, v_j).$$

 n^2 个函数值 $L(v_i, v_i)$ 便可唯一确定函数 L.

例 8.6.1: *V** ⊗ *V** 的基

给定对偶空间 V^* 的一组基 $\{v^{*1},\dots,v^{*n}\}$ 满足 $v^{*i}(v_j)=\delta^i{}_j$. 继而定义张量 $v^{*i}\otimes v^{*j}\in V^*\otimes V^*$ 满足

$$v^{*i} \otimes v^{*j}(u, v) = v^{*i}(u)v^{*j}(v).$$

从而

$$v^{*i} \otimes v^{*j}(v_k, v_\ell) = v^{*i}(v_k)v^{*j}(v_\ell) = \delta^i{}_k \delta^j{}_\ell.$$

 n^2 个张量 $v^{*i} \otimes v^{*j}$ 构成 $V^* \otimes V^*$ 的一组基.

张量 $\forall w \in V^* \otimes V^*$,

$$w = \sum_{i,j} w_{ij} v^{*i} \otimes v^{*j}, \quad w_{ij} = w(v_i, v_j).$$

给出 V, V^* 的另一组基 $\{u_1, \ldots, u_n\}, \{u^{*1}, \ldots, u^{*n}\}$, 有变换

$$(u_1, \dots, u_n) = (v_1, \dots, v_n)A,$$

 $(u^{*1}, \dots, u^{*n})^{\top} = (v^{*1}, \dots, v^{*n})^{\top}A^{-1}.$

张量 w 在基 $\{u^{*i} \otimes u^{*j}\}$ 下的分量

$$w'_{ij} = w(u_i, u_j) = w\left(\sum_{k=1}^{n} v_k A^k_{i}, \sum_{\ell=1}^{n} v_\ell A^\ell_{j}\right) = \sum_{k,\ell} w_{k\ell} A^k_{i} A^\ell_{j}.$$

因此这也是协变 (covariant) 的含义: 分量在坐标变换下同基的变换规律一致.

定义 8.6.3: 张量积

U,V 是两个线性空间,定义 $u \in U, v \in V$ 的张量积 (tensor product) 是一个新的元素 $u \otimes v$,且满足以下性质:

- 结合律: $(u \otimes v) \otimes w = u \otimes (v \otimes w) \equiv u \otimes v \otimes w$;
- 右分配律: $u \otimes (v_1 + v_2) = u \otimes v_1 + u \otimes v_2$;
- 数乘: $(au) \otimes v = u \otimes (av) = a(u \otimes v)$.

注. 张量积并不满足交换律, 即 $u \otimes v \neq v \otimes u$ 是两个不同的张量.

定义 8.6.4: 线性空间的张量积

给定两个线性空间 U,V 和各自的一组基 $\{u_1,\ldots,u_m\},\{v_1,\ldots,v_n\}$,定义 U,V 的张量 积是基的张量积张成的线性空间:

$$U \otimes V = \operatorname{span} \{ u_i \otimes v_j \mid 1 \leqslant i \leqslant m, 1 \leqslant j \leqslant n \}$$
 (8.12)

推论,由定义

$$\dim(U \otimes V) = \dim(U)\dim(V).$$

例 8.6.2

 $\forall u \in U, v \in V, \ u = x_1 u_1 + \dots + x_m u_m, \ v = y_1 v_1 + \dots + y_n v_n, \ \square$

$$u \otimes v = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} x_i y_j u_i \otimes v_j \in U \otimes V.$$

但并不是所有 $U \otimes V$ 的元素都能写成 $u \otimes v$ 的形式.

例 8.6.3: 张量空间 $V \otimes V$

 $V \otimes V$ 是所有 $V^* \times V^* \to \mathbb{R}$ 的双线性函数构成的线性空间, $\forall v \in V \otimes V$ 都可以写为

$$v = \sum_{i,j} v^{ij} v_i \otimes v_j.$$

称作二阶逆变张量 (contravariant tensor), 记作 (2,0) 张量.

换基时,

$$v^{k\ell} = \sum_{i,j} A^k{}_i A^\ell{}_j v'^{ij}, \quad v'^{ij} = \sum_{k,\ell} (A^{-1})^i{}_k (A^{-1})^j{}_\ell v^{k\ell}.$$

逆变 (contravariant) 的含义: 换基时分量每个指标对应的变换矩阵是基的变换矩阵的逆矩阵.

例 8.6.4: 混合张量 $V \otimes V^*$

(1,1) 张量 $v \in V \otimes V^*$ 可以写成

$$v = \sum_{i,j} v^i{}_j v_i \otimes v^{*j}.$$

例 8.6.5: $V \otimes \cdots \otimes V \otimes V^* \otimes \cdots \otimes V^* = V^{\otimes k} \otimes V^{* \otimes \ell}$

考虑

$$V^{\otimes k} \otimes V^{* \otimes \ell} := \underbrace{V \otimes \cdots \otimes V}_{k} \otimes \underbrace{V^{*} \otimes \cdots \otimes V^{*}}_{\ell},$$

的基:

$$\{v_{i_1} \otimes \cdots \otimes v_{i_k} \otimes v^{*j_1} \otimes \cdots \otimes v^{*j_\ell} \mid 1 \leqslant i_1, \dots, i_k, j_1, \dots, j_\ell \leqslant n\}$$

 $V^{\otimes k} \otimes V^{*\otimes \ell}$ 的元素

$$v = \sum_{\substack{i_1, \dots, i_k \\ j_1, \dots, j_\ell}} (v^{i_1 \cdots i_k}{}_{j_1 \cdots j_\ell}) v_{i_1} \otimes \cdots \otimes v_{i_k} \otimes v^{*j_1} \otimes \cdots \otimes v^{*j_\ell}.$$

是 (k,ℓ) 阶张量. 基变换

$$v'^{i_1\cdots i_k}{}_{j_1\cdots j_\ell} = \sum_{\substack{p_1,\dots,p_k\\q_1,\dots,q_\ell\\j_1,\dots,q_\ell}} (A^{-1})^{i_1}{}_{p_1}\cdots (A^{-1})^{i_k}{}_{p_k} (v^{p_1\cdots p_k}{}_{q_1\cdots q_\ell})A^{q_1}{}_{j_1}\cdots A^{q_\ell}{}_{j_\ell}.$$

这一章我们将数域由实数域 \mathbb{R} 扩展至复数域 \mathbb{C} ,复数的定义和运算高中已经讲过,也可参见复变函数的笔记. 在此略.

复数构成的向量 z 的共轭即将其中所有元素取共轭,记作 \bar{z} . 共轭转置记作 $z^{\dagger} := \bar{z}^{\top}$. 所有实线性空间的知识都可以推广到复线性空间,只需要把原来是实数的地方换成复数.

9.1 内积和内积空间

定义 9.1.1: \mathbb{C}^n 标准内积

复向量 u,v 的内积

$$u^{\dagger}v = \sum_{i=1}^{n} \bar{u}_{i}v_{i} = \bar{u}_{1}v_{1} + \dots + \bar{u}_{n}v_{n}.$$

- 一般复线性空间 V 的内积 $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \to \mathbb{C}$:
 - 交换共轭: $\langle u, v \rangle = \overline{\langle v, u \rangle}$;
 - 对第二个变量线性: $\langle u, cv \rangle = c \langle u, v \rangle$, $\langle u, v + w \rangle = \langle u, v \rangle + \langle v, w \rangle$;
 - 正定: $\langle u, u \rangle \ge 0$ 当且仅当 u = 0 时取等号.
- 注. 对第一个变量不是简单的线性, 而是多一个复共轭:

$$\langle cu, v \rangle = \bar{c} \langle u, v \rangle, \quad \langle u + v, w \rangle = \langle u, v \rangle + \langle u, w \rangle.$$

定理 9.1.1

只需要知道基之间的内积就可以算出任意向量之间的内积.

证明.
$$v_1, \ldots, v_n$$
 是 V 上的一组基, $\forall u, w \in V$, $u = u^1 v_1 + \cdots + u^n v_n$, $w = w^1 v_1 + \cdots + w^n v_n$
$$\langle u, w \rangle = \langle u^1 v_1 + \cdots + u^n v_n, w^1 v_1 + \cdots + w^n v_n \rangle = \sum_{i,j} \bar{u}^i w^j \langle v_i, v_j \rangle.$$

例 9.1.1: 内积与对偶空间

V 的对偶空间 V^* 是所有 $V \to \mathbb{C}$ 的线性函数的集合. 通过内积可以建立 V,V^* 的一一映射

$$\forall v \in V, g_v \in V^*, \ g_v(w) := \langle v, w \rangle.$$

例 9.1.2: Legendre 多项式

所有不高于 n 的实系数多项式

$$f(x) = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n,$$

构成线性空间 $\mathscr{P}^n(\mathbb{R})$, 显然 $\{1,x,x^2,\ldots,x^n\}$ 构成 $\mathscr{P}^n(\mathbb{R})$ 的一组基. 定义内积

$$\langle f, g \rangle := \int_{-1}^{1} f(x)g(x) \, \mathrm{d}x,$$

用 Gram-Schmidt 法则将 $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$ 变成一组正交基

$$\begin{split} P_{0} &= 1, \\ P_{1} &= x - \frac{\langle P_{0}, x \rangle}{\langle P_{0}, P_{0} \rangle} P_{0} = x, \\ P_{2} &= x^{2} - \frac{\langle P_{1}, x^{2} \rangle}{\langle P_{1}, P_{1} \rangle} P_{1} - \frac{\langle P_{0}, x^{2} \rangle}{\langle P_{0}, P_{0} \rangle} P_{0} = x^{2} - \frac{2}{3}, \\ P_{3} &= x^{3} - \frac{\langle P_{2}, x^{3} \rangle}{\langle P_{2}, P_{2} \rangle} P_{2} - \frac{\langle P_{1}, x^{3} \rangle}{\langle P_{1}, P_{1} \rangle} P_{1} - \frac{\langle P_{0}, x^{3} \rangle}{\langle P_{0}, P_{0} \rangle} P_{0} = x^{3} - \frac{3}{5}x, \end{split}$$

这与实际 Legendre 多项式的定义只是系数的差别.

例 9.1.3: Hermite 多项式

在 $\mathscr{P}^n(\mathbb{R})$ 内定义内积

$$\langle f, g \rangle := \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)g(x) e^{-x^2/2} dx,$$

用 Gram-Schmidt 法则将 $\{1, x, x^2, \dots, x^n\}$ 变成一组正交基

$$H_{0} = 1,$$

$$H_{1} = x - \frac{\langle H_{0}, x \rangle}{\langle H_{0}, H_{0} \rangle} H_{0} = x,$$

$$H_{2} = x^{2} - \frac{\langle H_{1}, x^{2} \rangle}{\langle H_{1}, H_{1} \rangle} H_{1} - \frac{\langle H_{0}, x^{2} \rangle}{\langle H_{0}, H_{0} \rangle} H_{0} = x^{2} - 1,$$

$$H_{3} = x^{3} - \frac{\langle H_{2}, x^{3} \rangle}{\langle H_{2}, H_{2} \rangle} H_{2} - \frac{\langle H_{1}, x^{3} \rangle}{\langle H_{1}, H_{1} \rangle} H_{1} - \frac{\langle H_{0}, x^{3} \rangle}{\langle H_{0}, H_{0} \rangle} H_{0} = x^{3} - 3x,$$
...

这与实际 Hermite 多项式的定义也只是系数的差别.

68

9.2 Hermite 矩阵

定义 9.2.1: Hermite 矩阵

方阵 H 是厄米 (Hermite) 矩阵若 $H^{\dagger} = H$.

Hermite 矩阵是对称矩阵 (见定义 6.5.1) 在复空间的推广.

例 9.2.1: Pauli 矩阵

给出三个 Pauli 矩阵

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 都是 Hermite 的,且

$$\sigma_i \sigma_j = i\sigma_k, \quad (ijk) = (123).$$

定理 9.2.1: Hermite 矩阵的二次型

 $\forall z \in \mathbb{C}, \ z^{\dagger}Hz \ \text{\&esym}.$

证明. $(z^{\dagger}Hz)^{\dagger} = z^{\dagger}H^{\dagger}z = z^{\dagger}Hz$.

定理 9.2.2: Hermite 矩阵的特征值

Hermite 矩阵 H 的特征值都是实数.

证明. $Hz = \lambda z$,左乘 z^{\dagger} 得 $z^{\dagger}Hz = \lambda z^{\dagger}z$,由 $z^{\dagger}Hz$, $z^{\dagger}z$ 均是实数知, λ 也是实数.

定理 9.2.3: Hermite 矩阵的特征向量

Hermite 矩阵 H 不同特征值对应的特征向量正交.

证明. $Hz_1 = \lambda_1 z_1$, $Hz_2 = \lambda_2 z_2$, $\lambda_1 \neq \lambda_2$

$$\lambda_1 z_2^{\dagger} z_1 = z_2^{\dagger} H z_1 = (z_1^{\dagger} H z_2)^{\dagger} = (\lambda_2 z_1^{\dagger} z_2)^{\dagger} = \lambda_2 z_2^{\dagger} z_1.$$

故 $z_2^{\dagger} z_1 = 0$.

定理 9.2.4: 谱定理

Hermite 矩阵的特征向量构构成 \mathbb{C}^n 中的一组幺正基.

$$H = Q\Lambda Q^{\dagger}$$
.

证明. 略.

9.3 幺正矩阵

定义 9.3.1: 幺正矩阵

矩阵 U 是幺正的 (unitary) 若 $U^{\dagger}U = I$.

幺正矩阵是正交矩阵 (见定义 4.4.2) 在复空间的推广.

定理 9.3.1: 幺正变换

幺正变换保持复向量的模不变.

证明.

$$||Uz||^2 = z^{\dagger}U^{\dagger}Uz = z^{\dagger}z = ||z||^2$$
.

定理 9.3.2: 幺正矩阵的行列式

 $|\det(U)| = 1.$

证明.

$$1 = \det(U^{\dagger}U) = \det(U^{\dagger})\det(U) = \overline{\det(U)}\det(U) = |\det(U)|^{2}.$$

10.1 二元运算

定义 10.1.1: 二元运算

集合 S 上的一个二元运算 (binary operation) 形如映射 $\circ: S \times S \to S$. 其中 $S \times S \equiv S^2$ 是笛卡尔积 (Cartesian product),

$$A \times B := \{(a, b) | a \in A, b \in B\}.$$

二元运算在 S 上是封闭的 (property of closure).

定义 10.1.2: 恒等元

 $e \in S$ 是恒等元 (identity element), 若 $\forall a \in S$, $e \circ a = a \circ e = a$.

定义 10.1.3: 可逆

 $a \in S$ 是可逆的 (inversible),若 $\exists a^{-1} \in S, \ a \circ a^{-1} = a^{-1} \circ a = e.$

特别地, 简记

$$a^m \equiv a \circ \cdots \circ a, \quad a^{-m} \equiv a^{-1} \circ \cdots \circ a^{-1}.$$

10.2 群与子群

定义 10.2.1: 群

群 (group) 是有二元运算 $\circ: G \times G \to G$ 和集合 G 并满足下列性质的组合 (G, \circ) :

- 结合律: $(a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c) \equiv a \circ b \circ c$;
- 单位元: $\exists e \in G$ 使得 $e \circ a = a \circ e = a$;

若还满足交换律,则称为交换群或 Abel 群.

群的阶 (order) ord(G) 表示其元素的个数. 群可分为有限群和无限群.

定理 10.2.1: 单位元和逆元的唯一性

在群中只能有一个单位元,而群中的每个元素都正好有一个逆元素.

证明. 若一个群存在两个单位元 e,e',则

$$e = e \circ e' = e'$$
;

若一个元素 a 存在两个逆 b,c,则

$$b = b \circ e = b \circ (a \circ c) = (b \circ a) \circ c = e \circ c = c.$$

例 10.2.1: 群的例子

- 整数加群 (Z,+): 单位元 0;
- 非零实数乘法群 (ℝ\{0},×): 单位元 1;
- 一般线性 (general linear) 群 GL(n): 所有 n 阶可逆矩阵集合,单位元 I_n .

定理 10.2.2: 消去律

 $\forall a, b, c \in G$, \uparrow

$$a \circ b = a \circ c \implies b = c;$$
 (10.1a)

$$b \circ a = c \circ a \implies b = c;$$
 (10.1b)

$$b \circ a = a \ \text{id} \ a \circ b = a \implies b = e.$$
 (10.1c)

证明. 左乘/右乘 a^{-1} .

注. 逆 a^{-1} 的存在很关键,如果 G 上的运算只是结合的,则 (G,\circ) 是一个半群 (semigroup),有单位元的半群又叫幺半群 (monoid).

定义 10.2.2: 置换群和对称群

给定有限集合 T,所有可逆映射 $f: T \to T$ 构成一个群 $\operatorname{sym}(T)$,运算是映射的复合,称做置换群 (permutation group)

当 $T = \{1, 2, ..., n\}$ 时,对应的置换群称为对称群 (symmetric group) S_n .

例 10.2.2: Se

 $S_2 = \{1, p\}$,其中

$$1 = \mathrm{id}: \{1,2\} \to \{1,2\},$$

$$p: \{1,2\} \to \{1,2\}, \quad p(1) = 2, \ p(2) = 1.$$

 S_2 是交换群. 可列出 Cayley 表

$$\begin{array}{c|cccc} & 1 & p \\ \hline 1 & 1 & p \\ p & p & 1 \end{array}$$

例 10.2.3: S₃

 S_3 : 定义生成元 x,y 满足:

$$x(1) = 2, \quad x(2) = 3, \quad x(3) = 1;$$

$$y(1) = 2$$
, $y(2) = 1$, $y(3) = 3$.

可以证明生成元之间的关系: $x^3 = 1$, $y^2 = 1$, $x^2y = yx$, 故 S_3 中所有元素都能写成生成元的积:

$$S_3 = \{1, x, x^2, y, xy, x^2y\},\$$

易知 S_3 不交换. 根据生成元, S_3 还可写为 $S_3 = \{x, y \mid x^3 = 1, y^2 = 1, x^2y = yx\}$. 生成元及其关系称作一个群的表现 (presentation),一个群的表现不唯一.

定义 10.2.3: 子群

 $H \subset G$ 是 G 的子群 (subgroup), 若 H 满足

- 封闭性: $\forall a, b \in H$, $a \circ b \in H$;
- 单位元: e ∈ H;
- $\dot{\Xi}$: $\forall a \in H, \exists a^{-1} \in H$.

 $\{e\}$ 和 G 都是平凡的子群,其他子群称为真子群 (proper subgroup).

例 10.2.4: 子群的例子

- 圆群: $(\{z \in \mathbb{C} \mid |z| = 1\}, \times) \subset (\mathbb{C} \setminus \{0\}, \times)$;
- 特殊线性群 $SL(n) \subset GL(n)$: 所有行列式为 1 的 n 阶方阵;

定义 10.2.4: 循环群

循环群 (cyclic group) 是

$$Z_n \equiv \{1, x, \dots, x^{n-1} \mid x^n = 1\},$$
 (10.2)

其生成元为 x.

例 10.2.5

 S_3 有两个子群是循环群: $\{x^k \mid x^3 = 1\} = Z_3$ 和 $\{y^k \mid y^2 = 1\} = Z_2$.

10.3 群同态

定义 10.3.1: 群同态

 $(G,\circ),(G',\circ')$ 是群,映射 $\phi:G\to G'$ 是群同态 (group homomorphism) 若 $\forall a,b\in G$

$$\phi(a \circ b) = \phi(a) \circ' \phi(b). \tag{10.3}$$

也称映射 ϕ 和群上的乘法相容 (compatible).

定理 10.3.1: 群同态下的单位元和逆元

若 $\phi: G \to G'$ 是群同态,G, G' 的单位元分别为 1, 1', $a \in G$,则

$$\phi(1) = 1', \quad \phi(a^{-1}) = \phi(a)^{-1}.$$
 (10.4)

证明. (1) 由 $\phi(1) = \phi(1 \circ 1) = \phi(1) \circ' \phi(1)$, 再运用消去律可得 $1' = \phi(1)$;

(2)
$$\[\text{id} \] \phi(a^{-1}) \circ' \phi(a) = \phi(a^{-1} \circ a) = \phi(1) = 1' \] \] \] \] \[\[\] \phi(a^{-1}) = \phi(a)^{-1}. \] \] \] \[\] \]$$

例 10.3.1: 线

空间和 + 构成一个群, 线性映射都是群同态.

定义 10.3.2: 群同态的像

群同态 $\phi: G \to G'$ 的像 (image) im ϕ 定义为

$$\operatorname{im} \phi \equiv \left\{ x \in G' \, | \, \exists a \in G, \ \phi(a) = x \right\}. \tag{10.5}$$

定义 10.3.3: 群同态的核

群同态 $\phi: G \to G'$ 的核 (kernel) ker ϕ 定义为

$$\ker \phi \equiv \{ a \in G \, | \, \phi(a) = 1' \} \,.$$
 (10.6)

定理 10.3.2

若 $\phi: G \to G'$ 是群同态,则 $\operatorname{im} \phi$ 是 G' 的子群, $\ker \phi$ 是 G 的子群.

证明. 考虑线性空间在 + 下构成的群,此时线性映射作为群同态的像与核同之前线性映射的像与核相同.

定义 10.3.4: 左陪集

H 是 G 的子群, $a \in G$, 则

$$a \circ H \equiv \{ a \circ h \mid h \in H \} \tag{10.7}$$

是 H 在 G 下的一个左陪集 (left coset). 同理可定义右陪集.

定理 10.3.3

群同态 $\phi: G \to G'$, $a, b \in G$, 则以下命题等价:

- 1. $\phi(a) = \phi(b)$;
- 2. $a^{-1} \circ b \in \ker \phi$;
- 3. $b \in a \circ \ker \phi$;
- 4. $b \circ \ker \phi = a \circ \ker \phi$.

证明. $(1) \Rightarrow (2)$:

$$\phi(a) = \phi(b) \implies 1' = \phi(a)^{-1} \circ' \phi(b) = \phi(a^{-1} \circ b) \implies a^{-1} \circ b \in \ker \phi;$$

 $(2) \Rightarrow (3)$:

$$a^{-1} \circ b = h \in \ker \phi \implies b = a \circ h \in a \circ \ker \phi.$$

- $(3) \Rightarrow (4)$: 由 $b \in a \circ \ker \phi$, $\exists h \in \ker \phi$ 使得 $b = a \circ h$; $\forall b' \in b \circ \ker \phi$, $\exists h' \in \ker \phi$ 使得 $b' = b \circ h' = (a \circ h) \circ h' = a \circ (h \circ h') \in a \circ \ker \phi$, 故 $b \circ \ker \phi \subset a \circ \ker \phi$; 同理由 $a = b \circ h^{-1}$ 可以证明 $a \circ \ker \phi \subset b \circ \ker \phi$, 故 $a \circ \ker \phi = b \circ \ker \phi$.
 - $(4) \Rightarrow (1)$: $\forall h \in \ker \phi$, $\exists h' \in \ker \phi$ 使得 $a \circ h = b \circ h'$

$$\implies \phi(a \circ h) = \phi(b \circ h') \implies \phi(a) \circ' \phi(h) = \phi(b) \circ' \phi(h')$$

$$\implies \phi(a) \circ' 1' = \phi(b) \circ' 1' \implies \phi(a) = \phi(b).$$

故以上 4 个命题等价.

注.

- 群同态的核不仅告诉我们 G 中的哪些元素映射到 1, 也告诉我们哪些元素的像相同;
- 上面的命题在线性方程组中的应用就是 Ax = b 的通解 = 特解 + $\{Ax = 0\}$ 的通解.

推论. 群同态 $\phi: G \to G'$ 是单射 $\iff \ker \phi = \{1\}$.

定义 10.3.5: 正规子群

 $N \subset G$ 是 G 的正规子群 (normal subgroup) 若 $\forall a \in N, \forall g \in G$, 共轭 $g \circ a \circ g^{-1} \in N$.

定理 10.3.4

 $\phi: G \to G'$ 是群同态, $\ker \phi$ 是 G 的正规子群.

定义 10.3.6: 中心

群 G 的中心 (center) 是

$$Z_G \equiv \{ z \in G \mid z \circ x = x \circ z, \forall x \in G \}, \qquad (10.8)$$

中心 Z_G 总是 G 的正规子群.

例 10.3.2

• 行列式是 GL 的群同态:

$$\det: \mathrm{GL}(n) \to (\mathbb{R} \setminus \{0\}, \times)$$

核 $\ker \det = \operatorname{SL}(n)$ 是 $\operatorname{GL}(n)$ 的正规子群.

- $Z_{SL(2)} = \{I, -I\};$
- $Z_{S_n} = \{1\}, n \geqslant 3.$

10.4 群同构

定义 10.4.1: 群同构

若群同态 $\phi: G \to G'$ 是双射,则称 ϕ 为群同构 (isomorphism),称 G, G' 是同构的 (isomorphic),记作 $G \simeq G'$.

群到自己的同构 $\phi: G \to G$ 也叫自同构. (automorphism)

恒等映射 $id: G \to G$ 是自同构.

例 10.4.1: 群同构的例子

• 指数函数

$$\exp: (\mathbb{R}, +) \to (\mathbb{R}_{>0}, \times), \ x \mapsto e^x.$$

• P 是投影矩阵: $P^2 = P$

$$S_2 \rightarrow \{I, I-2P\}.$$

10.5 等价关系

定义 10.5.1: 等价关系

集合 S 上的等价关系 \sim 是 S 中两个元素 a,b 之间的关系,记作 $a \sim b$,满足:

- 自反性 (reflexivity): $\forall a, \ a \sim a$.
- 对称性 (symmetry): $a \sim b \iff b \sim a$;
- 传递性 (transitivity): $a \sim b, b \sim c \implies a \sim c$;

具有等价关系的集合称为集合体 (setiod).

注.

- 等价关系可以看成 = 的抽象;
- 等价关系可以理解为映射 $f: S \times S \rightarrow \{0,1\}$ 满足

$$a \sim b \iff f(a, b) = 1.$$

未竟

定义 10.5.2: 等价类

在等价关系 \sim 下,所有与 a 等价的元素构成的集合称作 a 的等价类 (equivalence class),记作

$$[a] \equiv \{x \mid x \sim a\} \,.$$
 (10.9)