

第5章 矩阵的相合与相似

5.1 欧氏空间

5.2 正交化

5.3 二次型

5.4 实对称方阵相合标准形

5.5 特征向量与相似矩阵

5.6 正交相似

5.7 更多例子

5.8 若当标准型

5.1 欧氏空间

最小二乘法

例1 在几何向量组成的3维向量空间 V 中，用几何方法定义了内积：

$$(\alpha, \beta) = |\alpha| |\beta| \cos \theta$$

求是否存在向量 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 满足条件：

$$(\alpha_1, \alpha_1) = (\alpha_2, \alpha_2) = (\alpha_3, \alpha_3) = 1, (\alpha_1, \alpha_2) = 2,$$

$$(\alpha_1, \alpha_3) = -3 \text{ 且 } (\alpha_2, \alpha_3) = -2?$$

解： 设有 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 满足条件，它们在实数域 \mathbb{R} 上的任意线性组合 $\alpha = x\alpha_1 + y\alpha_2 + z\alpha_3$ 含于 V ，应满足条件 $(\alpha, \alpha) \geq 0$. 即

$$\begin{aligned}(\alpha, \alpha) &= (x\alpha_1 + y\alpha_2 + z\alpha_3, x\alpha_1 + y\alpha_2 + z\alpha_3) \\ &= x^2 + y^2 + z^2 + 4xy - 6xz - 4yz \geq 0\end{aligned}$$

配方得

$$\begin{aligned}(\alpha, \alpha) &= x^2 + y^2 + z^2 + 4xy - 6xz - 4yz \geq 0 \\ &= (x + 2y - 3z)^2 - 3\left(y - \frac{4}{3}z\right)^2 - \frac{8}{3}z^2\end{aligned}$$

选 $x = -2, y = 1, z = 0$, 则 $(\alpha, \alpha) = -3 < 0$

矛盾。 故不存在满足所说条件的 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$.

例2（最小二乘法） 已知某种材料在生产过程中的废品率 y 与某种化学成分的含量百分比 x 有关。以下是某工厂在生产过程中实测到的 x, y 的一些对应数据。

$X(\%)$	3.6	3.7	3.8	3.9	4.0	4.1	4.2
$Y(\%)$	1.00	0.9	0.9	0.81	0.60	0.56	0.35

试给出 x, y 之间函数关系的一个近似公式。

解: 可以将 x, y 的函数关系用一次函数 $y=kx+b$ 来近似的表示。现在需要确定 k, b 使直线与所有点的总的偏差尽可能小, 点 (x_i, y_i) 的偏差为 kx_i+b-y_i , 则所有偏差的平方和为:

$$d(k, b) = \sum_{i=1}^7 (kx_i + b - y_i)^2$$

用来度量“总的偏差”, 选择 k, b 使 $d(k, b)$ 达到最小值。将 $d(k, b)$ 展开得

$$d(k, b) = Ak^2 + 2Bkb + Cb^2 - 2Dk - 2Eb + F$$

其中 $A = \sum_{i=1}^7 x_i^2 = 106.75, B = \sum_{i=1}^7 x_i = 27.3, C = \sum_{i=1}^7 1 = 7$

$$D = \sum_{i=1}^7 x_i y_i = 19.675, E = \sum_{i=1}^7 y_i = 5.12, F = \sum_{i=1}^7 y_i^2 = 4.0722$$

将数值代入, $d(k, b)$ 配方得:

$$d(k, b) = 106.75(k + 0.255738b - 0.184309)^2 + \\ 0.0183607(b - 4.8125)^2 + 0.0206821$$

取 $b = 4.8125, k = -0.255738b + 0.184309 = -1.04643$

即可使 $d(k, b)$ 达到最小值0.0206821。

所以所求直线方程为 $y = -1.04643x + 4.8125$.

内积的推广

实数域 R 上的三维几何空间 R^3 中，向量 α, β 的内积可以通过**模长和夹角余弦**来定义

$$(\alpha, \beta) = |\alpha| |\beta| \cos \theta,$$

设向量 α, β 的坐标为 $\alpha = (x_1, y_1, z_1), \beta = (x_2, y_2, z_2)$, 则有内积的**坐标表达式和余弦公式**:

$$(\alpha, \beta) = x_1 x_2 + y_1 y_2 + z_1 z_2,$$

$$\cos \theta = \frac{(\alpha, \beta)}{|\alpha| |\beta|} = \frac{x_1 x_2 + y_1 y_2 + z_1 z_2}{\sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2} \sqrt{x_2^2 + y_2^2 + z_2^2}}$$

实数域 R 上的 n 维空间 R^n , 设向量 α, β 为
 $\alpha=(x_1, \dots, x_n), \beta=(y_1, \dots, y_n)$, 很自然地推广3维内
积的坐标表达式和余弦公式:

$$(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^n x_i y_i = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_n y_n$$

$$|\alpha| = \sqrt{(\alpha, \alpha)} = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_n^2}$$

$$\cos \theta = \frac{(\alpha, \beta)}{\sqrt{(\alpha, \alpha)} \sqrt{(\beta, \beta)}} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n y_i^2}}$$

定义5.1.1 (内积) 设 V 是实数域 \mathbb{R} 上线性空间. 如果给定了 V 上的 **2元实函数**, 将 V 中任意两个向量 α, β 对应到一个 **实数** (α, β) , 并且满足如下条件:

(1) (**双线性**)

$$(\alpha_1 + \alpha_2, \beta) = (\alpha_1, \beta) + (\alpha_2, \beta), (\lambda \alpha_1, \beta) = \lambda (\alpha_1, \beta);$$

$$(\beta, \alpha_1 + \alpha_2) = (\beta, \alpha_1) + (\beta, \alpha_2), (\beta, \lambda \alpha_1) = \lambda (\beta, \alpha_1)$$

对任意 $\alpha_1, \alpha_2, \beta \in V$ 和 $\lambda \in \mathbb{R}$ 成立。

(2) (**对称性**) $(\alpha, \beta) = (\beta, \alpha)$ 对任意 $\alpha, \beta \in V$ 成立

(3) (**正定性**) $(\alpha, \alpha) > 0$ 对任意 $0 \neq \alpha \in V$ 成立

就称 (α, β) 为**内积**, V 为**欧几里德空间**, 简称**欧氏空间**。

记号 $E(R)$ 表示欧氏空间, $E_n(R)$ 表示 n 维欧氏空间。

例 如下的空间 V 是欧氏空间:

1. V 是实数域 R 上 n 维数组空间 R^n 。对 $X=(x_1, \dots, x_n)$, $Y=(y_1, \dots, y_n)$, 定义 $(X, Y) = x_1 y_1 + \dots + x_n y_n$, 则 (X, Y) 是内积, R^n 成为欧氏空间。此内积称为 R^n 上的**标准内积**。

2. V 是闭区间 $[a, b]$ 上所有的连续实函数组成的实向量空间 $C[a, b]$ 。对任意 $f(x), g(x) \in V$, 定义

$$(f(x), g(x)) = \int_a^b f(x)g(x)dx$$

则 $(f(x), g(x))$ 是内积, $C[a, b]$ **在此内积下是欧氏空间**。

由内积的定义立即得出如下性质:

● $(0, \alpha) = (0, 0) = 0$ 。特别 $(0, 0) = 0$ 。因此, 内积的**正定性**也可以叙述为: $(\alpha, \alpha) \geq 0$ 对任意 $\alpha \in V$ 成立, 其中等号成立**仅当** $\alpha = 0$ 。

● 由正定性定义任意向量 α 的长度 $|\alpha| = \sqrt{(\alpha, \alpha)}$, 则 $|\alpha| \geq 0$, 且仅当 $\alpha = 0$ 时 $|\alpha| = 0$ 。

● 对任意 $\alpha \neq 0$, $\alpha_0 = (1/|\alpha|)\alpha$ 是与 α 方向相同、长度为1的向量, 称为**单位向量**。由 α 得到单位向量 $(1/|\alpha|)\alpha$ 的过程称为将向量 α **归一化**。

● 设 V 是欧氏空间。如果 $\alpha, \beta \in V$ 满足 $(\alpha, \beta) = 0$, 就称 α, β **正交**, 记为 $\alpha \perp \beta$ 。

例3 对任意 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, 求证:

1. $A^T A X = A^T b$ 的解 X_0 使 $|AX - b|^2$ 取最小值 $|AX_0 - b|^2$ 。
2. 齐次线性方程组 $AX = 0$ 与 $A^T A X = 0$ 同解。
 $\text{rank}(A^T A) = \text{rank} A$ 。
3. 方程组 $A^T A X = A^T b$ 总有解, 且当 $\text{rank} A = n$ 时有唯一解 $X = (A^T A)^{-1} A^T b$ 。

证明: (1) 设 $A^T A X_0 = A^T b$ 。对任意 $X \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, $AX - b = (AX_0 - b) + A(X - X_0)$, 且

$$\begin{aligned} (A(X - X_0))^T (AX_0 - b) &= (X - X_0)^T A^T (AX_0 - b) \\ &= (X - X_0)^T (A^T A X_0 - A^T b) = 0 \end{aligned}$$


即 $AX_0 - b \perp A(X - X_0)$, 由勾股定理得 $|AX - b|^2 \geq |AX_0 - b|^2$ 。

(2) $AX=0$ 与 $A^T A X=0$ 的解空间为 $V_A \subseteq V_{A^T A}$ 。

反之, $X \in V_{A^T A} \iff A^T A X = 0 \implies X^T A^T A X = 0 \implies (AX)^T A X = 0 \implies AX = 0$ 即 $X \in V_A$ 。从而 $V_{A^T A} \subseteq V_A$ 。

$$\left. \begin{array}{l} \dim V_{A^T A} = n - \text{rank } A^T A \\ \dim V_A = n - \text{rank } A \end{array} \right\} \implies \text{rank } A^T A = \text{rank } A.$$

(3) 由 $\text{rank}AB \leq \text{rank}A$ 知
 $\text{rank}(A^T A, A^T b) \leq \text{rank}(A^T) = \text{rank}(A) = \text{rank}(A^T A)$ 。反之, $A^T A$ 为 $(A^T A, A^T b)$ 的子矩阵于是 $\text{rank}(A^T A) \leq \text{rank}(A^T A, A^T b)$, 因此方程组 $A^T A X = A^T b$ 的系数矩阵与增广矩阵的秩相等, **一定有解**。当 $\text{rank}A = n$ 时, $\text{rank}(A^T A) = \text{rank}A = n$ 。因此 $A^T A$ 为可逆矩阵, 方程组有**唯一解** $X = (A^T A)^{-1} A^T b$ 。

 **算法5.1.1**(最小二乘法)设 n 元实系数线性方程组 $AX=b$ 的系数矩阵的秩 $\text{rank}A = n$ 。若方程组无解, 则 $(A^T A)X = A^T b$ 的唯一解 X_0 是使 $|AX-b|^2$ 最小的近似值。

定理5.1.2(Cauchy-Schwartz不等式)对欧氏空间 V 中任意 $\alpha, \beta \in V, (\alpha, \beta)^2 \leq (\alpha, \alpha)(\beta, \beta)$ 成立, 其中的等号仅当 α, β 线性相关时成立。

证明: 显然, 当 $\alpha=0$ 时, $(\alpha, \beta)^2=0=(\alpha, \alpha)(\beta, \beta)$, C-S不等式中的等式成立。

以下设 $\alpha \neq 0, (\alpha, \alpha) > 0$ 由内积的**正定性**知: 对任意实数 x , 有 $(x\alpha + \beta, x\alpha + \beta) \geq 0$ 即 $(\alpha, \alpha)x^2 + 2(\alpha, \beta)x + (\beta, \beta) \geq 0$ 。

这说明以 x 为自变量的二次函数 $f(x) = (\alpha, \alpha)x^2 + 2(\alpha, \beta)x + (\beta, \beta)$ 的**图像在 x 轴的上方**。

判别式 $\Delta = 4(\alpha, \beta)^2 - 4(\alpha, \alpha)(\beta, \beta) \leq 0$, 即

$(\alpha, \beta)^2 \leq (\alpha, \alpha)(\beta, \beta)$, 其中的等号成立当且仅当方程 $(\alpha, \alpha)x^2 + 2(\alpha, \beta)x + (\beta, \beta) = 0$ 有根, 即存在 x 使 $(x\alpha + \beta, x\alpha + \beta) = 0$, 即 $x\alpha + \beta = 0$, 也即 α, β 线性相关。

✎ 应用到例题中的2个例子中, 分别得到:

$$(1) (x_1 y_1 + \dots + x_n y_n)^2 \leq (x_1^2 + \dots + x_n^2)(y_1^2 + \dots + y_n^2)$$

对任意实数 x_i, y_i ($1 \leq i \leq n$) 成立。

$$(2) \quad \left(\int_a^b f(x)g(x)dx \right)^2 \leq \int_a^b f(x)^2 dx \int_a^b g(x)^2 dx$$

对区间 $[a,b]$ 上任意连续函数 $f(x), g(x)$ 成立。

☞ 根据C-S不等式, 可以定义两个非零向量 α, β 的夹角

$$\theta = \arccos \frac{(\alpha, \beta)}{|\alpha| |\beta|}$$

例4 (三角形不等式)对欧氏空间 V 中任意向量 α, β , 有 $|\alpha+\beta| \leq |\alpha| + |\beta|$ 。

证明: 由 $(\alpha, \beta)^2 \leq (\alpha, \alpha)(\beta, \beta)$ 有 $|(\alpha, \beta)| \leq |\alpha||\beta|$ 。因此

$$|\alpha + \beta|^2 \leq |\alpha|^2 + 2|\alpha||\beta| + |\beta|^2 = (|\alpha| + |\beta|)^2$$

$$\Rightarrow |\alpha + \beta| \leq |\alpha| + |\beta|.$$

5.2 正交化

标准正交基

例1 实数域 R 上方程 $x_1+x_2+x_3+x_4=0$ 的解空间 W 是欧氏空间 R^4 的子空间, $a_1=(1,-1,0,0)^T$, $a_2=(0,1,-1,0)^T$, $a_3=(0,0,1,-1)^T$, 组成 W 的一组基 S 。将 W 中每个向量用它在 S 下的坐标表示, 根据 $a, b \in W$ 在 S 下的坐标 $X=(x_1, x_2, x_3)^T$, $Y=(y_1, y_2, y_3)^T$ 并计算内积 (a, b) 。

解: $a = x_1 a_1 + x_2 a_2 + x_3 a_3 = (a_1, a_2, a_3)(x_1, x_2, x_3)^T = AX$,
 $b = y_1 a_1 + y_2 a_2 + y_3 a_3 = (a_1, a_2, a_3)(y_1, y_2, y_3)^T = AY$, 其中
 $A = (a_1, a_2, a_3)$, 于是

$$(a, b) = a^T b = (AX)^T (AY) = X^T A^T AY = X^T GY,$$

$$G = A^T A = \begin{pmatrix} a_1^T \\ a_2^T \\ a_3^T \end{pmatrix} (a_1, a_2, a_3) = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$(a, b) = X^T GY = (x_1, x_2, x_3) \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix}$$

$$= 2x_1y_1 + 2x_2y_2 + 2x_3y_3 - x_1y_2 - x_2y_1 - x_2y_3 - x_3y_2.$$

由内积的**双线性性**可以推出: 对欧氏空间 V 中任意向量 α_i, β_j 和任意实数 x_i, y_j , ($1 \leq i \leq k, 1 \leq j \leq m$), 有


$$\left(\sum_{i=1}^k x_i \alpha_i, \sum_{j=1}^m y_j \beta_j \right) = \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^m x_i y_j (\alpha_i, \beta_j)$$

特别地, 取 V 的任意一组基 $M = \{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$, 设 α, β 在这组基 M 下的坐标分别是 $X = (x_1, \dots, x_n)^T$, $Y = (y_1, \dots, y_n)^T$, 则

$$(\alpha, \beta) = \left(\sum_{i=1}^n x_i \alpha_i, \sum_{j=1}^n y_j \alpha_j \right) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i y_j (\alpha_i, \alpha_j) = X^T S Y$$

$$S = (s_{ij})_{n \times n}, s_{ij} = (\alpha_i, \alpha_j), \forall 1 \leq i, j \leq n.$$

S 是由基 M 中的向量两两的内积组成的矩阵, 称为内积 (α, β) 在基 M 下的**度量矩阵**(metric matrix), 也称为**Gram方阵**。

 上述定义可推广到一般的向量组 $T = \{\alpha_1, \dots, \alpha_m\}$, 即 $G = (t_{ij})_{m \times m}$, $t_{ij} = (\alpha_i, \alpha_j)$, $1 \leq i, j \leq m$ 称为 T 的**度量矩阵**(metric matrix), 也称为**Gram方阵**。

 选取3个两两正交的单位向量 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 作为基向量, 则空间中的向量在这样的基向量下用坐标表示, 则由于

$$(\alpha_i, \alpha_j) = \begin{cases} 1, & \text{when } i = j \\ 0, & \text{when } i \neq j \end{cases}$$

内积在这组基下的度量矩阵 $S=I_{(3)}$ 为单位阵。
坐标分别为 $X=(x_1, x_2, x_3)^T$, $Y=(y_1, y_2, y_3)^T$ 的向量 α, β 的内积 $(\alpha, \beta)=X^T/Y=X^TY=x_1y_1+x_2y_2+x_3y_3$.

在 n 维实向量空间 V 中定义内积之后, 选取 V 的这样的基 $M=\{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$, 使度量矩阵 $S=((\alpha_i, \alpha_j))_{n \times n}$ 是 n 阶单位阵, 也就是要求基向量之间的内积满足条件

$$(\alpha_i, \alpha_j) = \begin{cases} 1, & \text{when } i = j \\ 0, & \text{when } i \neq j \end{cases}$$

从而向量 α, β 的坐标 $X=(x_1, \dots, x_n)^T$, $Y=(y_1, \dots, y_n)^T$
计算内积的公式有最简单的形式 $(\alpha, \beta)=X^T Y= X^T Y$
 $=x_1 y_1 + \dots + x_n y_n$ 。因此, 以上对基向量内积的要求
就是: 基 $\{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$ 由两两正交的单位向量组成。

定义5.2.1 V 中由两两正交的非零向量组成的向量组 $\{\alpha_1, \dots, \alpha_k\}$, 称为正交向量组。如果 V 的基 M 是正交向量组, 就称 M 为正交基。由两两正交的单位向量组成的基称为标准正交基。

引理5.2.2 (1) 实矩阵 A 的列向量组是正交向量组 $\leftrightarrow A^T A$ 是可逆对角矩阵;

(2) 实矩阵 A 的列向量组是标准正交向量组 $\leftrightarrow A^T A = I$;

(3) n 阶实方阵 A 列向量组是 $\mathbb{R}^{n \times 1}$ 标准正交基 $\leftrightarrow A^T A = I \leftrightarrow A^T = A^{-1} \leftrightarrow A A^T = I \leftrightarrow A$ 行向量组是 $\mathbb{R}^{1 \times n}$ 标准正交基.

引理 欧氏空间 V 中的正交向量组 $\{\alpha_1, \dots, \alpha_k\}$ 线性无关。

证明： 略

Gram-Schmidt 正交化方法

定理 n 维欧氏空间 V 必然存在标准正交基。

证明(算法5.2.1)任取 V 的一组基 $M=\{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$. 取 $\beta_1 = \alpha_1$, 并依次对 $2 \leq k \leq m$ 取

$$\beta_k = \alpha_k - \sum_{i=1}^{k-1} \frac{(\alpha_k, \beta_i)}{(\beta_i, \beta_i)} \beta_i$$

得到正交向量组, 在将之归一化即得标准正交基。

命题: 设 $M_1 = \{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$ 是欧氏空间的一组基, 则存在 V 的标准正交基 $M = \{\gamma_1, \dots, \gamma_n\}$ 使

$$(\gamma_1, \dots, \gamma_n) = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) T$$

对某个上三角矩阵

$$T = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdots & b_{1n} \\ & b_{22} & \cdots & b_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & b_{nn} \end{pmatrix}$$

成立。对每个 $1 \leq k \leq n$, $\{\gamma_1, \dots, \gamma_k\}$ 是 $\{\alpha_1, \dots, \alpha_k\}$ 生成的子空间的一组标准正交基。

推论 5.2.1 欧氏空间 V 中任何一组两两正交的单位向量 $S=\{\alpha_1, \dots, \alpha_k\}$ 都能扩充为 V 的一组标准正交基。

证明: 将 S 扩充为 V 的一组基 $M_1=\{\alpha_1, \dots, \alpha_k, \dots, \alpha_n\}$, 再利用 Gram-Schmidt 正交化方法, 用 $\beta_{k+1}, \dots, \beta_n$ 替换 $\alpha_{k+1}, \dots, \alpha_n$ 得到标准正交基 $M=\{\alpha_1, \dots, \alpha_k, \beta_{k+1}, \dots, \beta_n\}$ 。

练习 试求 R^4 中线性无关的向量组 $\alpha_1=(1,0,1,0)^T$, $\alpha_2=(0,-1,1,-1)^T$, $\alpha_3=(1,1,1,1)^T$ 所生成的子空间的一组正交基, 并扩充成为 R^4 的一组标准正交基。

$$\gamma_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (1,0,1,0), \gamma_2 = \frac{1}{\sqrt{10}} (-1,-2,1,-2), \gamma_3 = \frac{1}{\sqrt{10}} (-2,1,2,1)$$

$$\gamma_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} (0,1,0,-1).$$