

线性代数知识点总结

1 概念总结

1.1 方程组和矩阵

1.11 线性方程组

矩阵刚被发明时是用来解线性方程组的，线性方程组就是一组n元一次方程，形如

$$\begin{cases} a_1x + b_1y + c_1z = d_1 \\ a_2x + b_2y + c_2z = d_2 \\ a_3x + b_3y + c_3z = d_3 \end{cases}$$

$a_{1\dots 3}, b_{1\dots 3}, c_{1\dots 3}$ 为系数， x, y, z 为未知数，所以线性方程组也可以表示为 $Au = d$ ，其中 A 为

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix}$$

矩阵，也就是该方程组所有系数组成的矩阵， u 为未知数矩阵

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

， d 为方程值矩阵

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix}$$

1.12 矩阵的初等变换

初等变换有行变换和列变换，其中每种变换都有三种操作，为倍乘，交换和倍乘加。这六种操作就是化简线性方程组的操作，且这些操作不会改变该方程组的解集，一般来说，我们只使用行变换的操作就行。

对矩阵使用初等变换可以换成阶梯型矩阵和最简型矩阵。

化成阶梯型矩阵的方法就是：

1. 从左边列开始，将其中最小的元素所在的行移到第一行，然后使用初等变换将该列的其他元素化为0。
2. 再到第二列，也是找除去第一行的最小元素并移动到第二行，将该列除了该行和第一行的其他元素化为0。
3. 再到第三列，第四列等直到最后一列或者已经处理到了最后一行，并重复第二步的对应步骤，也就是从左到右，从上到下。
4. 最后化成了上三角矩阵。

化成最简型矩阵的方法就是：

1. 先化成阶梯型矩阵。
2. 然后从右到左，从下到上的先将主对角线的非0元素都化为1，然后将主对角线的非0元素上面的非0元素都化为0。
3. 最后化成了三角矩阵。

1.13 方程组的解

化成最简型矩阵后，所有主对角线的非0元素对应的列就为主元列，每个主元列对应的未知数就是基本变量，其他列对应的未知数为自由变量。方程组有唯一解等价于该方程组对应的系数矩阵没有自由变量，存在自由变量等价于方程组有多个解。

如果方程组的所有方程右边的值全为0，则为线性齐次方程组，如果线性齐次方程组的解全为0，则称为平凡解，否则称为非平凡解。可以看出，线性齐次方程组的解为平凡解等价于该齐次方程组没有自由变量，解为非平凡解等价于该齐次方程组存在自由变量。

1.14 矩阵的逆和行列式

对于 $n \times n$ 方阵A来说，如果该方阵没有自由变量，则其通过初等变换后的最简型矩阵就是 $n \times n$ 单位矩阵I，该初等变换的所有操作形成的矩阵B就是A的逆矩阵，也就是矩阵A的倒数，且A也是B的逆矩阵，也就是

$$A^{-1} = B, B^{-1} = A, AB = BA = I.$$

$$\text{对于可逆矩阵 } A, (A^T)^{-1} A^T = A^T (A^T)^{-1} = I$$

只有方阵才有行列式，行列式可以判断一个方阵是否可逆，一个方阵A可逆等价于该方阵的行列式值不为0，否则不可逆，可逆矩阵被称为非奇异矩阵，不可逆矩阵被称为奇异矩阵。

对于二阶 2×2 方阵 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ 来说，可以直接计算套公式 $\det A = ad - bc, A^{-1} = \frac{1}{ad-bc} \begin{pmatrix} d & -b \\ -c & a \end{pmatrix}$ 计算出该方阵的行列式 $\det A$ 和逆矩阵 A^{-1} 。

对于其他阶方阵来说，方阵的行列式可由公式 $\det A = (-1)^r u_{11} \cdots u_{nn}$ 得出，其中 r 为初等变换所用的行/列交换次数， $u_{11} \cdots u_{nn}$ 为其化为阶梯型的主对角线元素（此时初等变换不能使用行/列倍乘操作）；逆矩阵 A^{-1} 可由公式 $(A \quad I) = (I \quad A^{-1})$ 推导出，其中 A 为 $n \times n$ 可逆矩阵， I 为 $n \times n$ 单位矩阵。

在几何上，矩阵 $A = (u_1 \ u_2)$ 的行列式的值表示的是向量 u_1, u_2 这两个向量所围成的面积。

1.2 向量和向量空间

1.21 向量及向量空间的定义

在线代中，列向量就是形如

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ \vdots \\ n \end{pmatrix}$$

如含有2个元素的向量为 $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ ，其中 a, b 为任意实数，所有含有2个元素的向量的集记为 R^2 ，这就是一个向量空间， R 表示向量中的元素是实数，而指数2表示每个向量包含2个元素。

两个向量相等必须是这两个向量的长度，每个位置对应的元素的值都相等才相等，所以向量是有序元素的集合。

1.22 线性组合与线性关系

$m \times n$ 矩阵 $A = (v_1 \ v_2 \ v_3 \ \cdots \ v_n)$ （其中 $v_1 v_2 v_3 \cdots v_n$ 为矩阵A的列向量）对 $n \times 1$ 向量 x 的线性组合 b （也就是 $Ax = b = c_1 v_1 + c_2 v_2 + c_3 v_3 + \cdots + c_n v_n$ ，其中 $c_1, c_2, c_3, \dots, c_n$ 为系数）也为一个 $n \times 1$ 向量。

如果矩阵A的各个列的向量中，如果存在一个向量是其他向量的线性组合，则称矩阵A的各个列的向量是线性相关的，否则称矩阵A的各个列的向量是线性无关。

1.23 向量空间的子空间

向量空间 R^n 的某组向量以及这些向量的倍乘向量以及其中任意两个向量的加法向量和零向量的集合被称为 R^n 的子空间，子空间 H 中的任意一组线性无关且能生成H的向量 $\{v_1, v_2, v_3, \dots, v_p\}$ （其中 $0 <= p <= n$ ）都可以看作为该子空间中的一个基，其中子空间中的每个 $p \times 1$ 向量 x 都可以看作为该子

空间中的基的线性组合(也就是 $x = c_1v_1 + c_2v_2 + c_3v_3 + \dots + c_pv_p$, 其中 $c_1, c_2, c_3, \dots, c_p$ 为系数)。仅含零向量的子空间叫做零子空间。一个非零子空间的维度为该子空间基所含向量的数目, 零子空间的维度为0, 所以向量空间 R^n 包含向量空间 R^p (其中 $0 \leq p \leq n$)。

1.24 子空间的基

简单来说, 可以将一个 R^n 的子空间 H 看作为一个 p 维空间(其中 $0 \leq p \leq n$), 该 p 维空间中的 $p \times 1$ 向量可以有多种坐标系来进行参照, 每种坐标系就是子空间 H 的一个基, 基中的每个列向量就代表坐标系中的坐标轴, 用于表示方向。子空间 H 的 $p \times 1$ 向量 x 可以用该子空间上的基唯一线性组合表示 (也就是用同子空间的不同的基对向量进行表示时, 所有线性组合表示的对应系数是一样的), 也就是用该 p 维空间的坐标系的各个坐标轴的分量之和来唯一表示, 比如子空间 H 上的基是 $\{v_1, v_2, v_3, \dots, v_p\}$, 则向量 x 表示为 $x = c_1v_1 + c_2v_2 + c_3v_3 + \dots + c_pv_p$, 其中 $c_1, c_2, c_3, \dots, c_p$ 是系数。

一个 $m \times n$ 矩阵 A 可以用来表示 R^m 子空间 H 上的一个基, 其中矩阵 A 中的所有主元列 $\{v_1, v_2, v_3, \dots, v_p\}$ 构成了该基(其中 $0 \leq p \leq m$), 所以该子空间上的向量 x 可以用 $Ac = x =$

$c_1v_1 + c_2v_2 + c_3v_3 + \dots + c_pv_p$ 表示, 其中向量 $c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_p \end{pmatrix}$ 称为 x 相对于 A 的坐标向量。

1.25 维度与秩

A 的秩就是 A 的列空间的维度, 也就是其主元列的数量, A 为满秩也就是指 A 的主元列数量等于其列数。

由此结合线性方程组的相关知识, 我们可以得出有关 $Ax = b$ (A 为 $m \times n$ 系数矩阵, x 为 $n \times 1$ 解向量, b 为 $m \times 1$ 值向量)解的结论:

1. $Ax = b$ 有唯一解等价于矩阵 A 构成的 R^m 子空间 H 的维度为 m , 且向量 b 在 H 上。
2. $Ax = b$ 有无穷多的解等价于矩阵 A 构成的 R^m 子空间 H 的维度小于 m , 且向量 b 在 H 上。
3. $Ax = b$ 无解等价于向量 b 不在矩阵 A 构成的 R^m 子空间 H 上。

1.26 内积与内积空间

在线代中, 内积(也叫做点积)定义的是一种使向量空间中的任何向量对于内积操作都支持交换, 结合和分配率的运算操作, 定义了内积的向量空间叫做内积空间。

标准内积的定义：假设 R^n 中有两个 $n \times 1$ 向量 $u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}$, $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$, 则 $u \cdot v =$

$$(u_1 u_2 u_3 \cdots u_n) \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} = u_1 v_1 + u_2 v_2 + u_3 v_3 + \cdots + u_n v_n.$$

向量 $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$ 的长度 $\|v\|$ 定义： $\|v\| = \sqrt{v \cdot v} = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 + \cdots + v_n^2}$, 且 $\|v\|^2 = v \cdot v$.

v

1.27 长度与距离

R^n 中向量 u, v 之间的距离 $dist(u, v) = \|u - v\|$, 表示向量 $u - v$ 的长度。

如果向量 u, v 是 R^2 或 R^3 中的向量, 则它们之间的夹角 θ 可以通过公式 $u \cdot v = \|u\| \|v\| \cos \theta$ 来计算。

1.28 正交与正交基

标准基就是一组由多个 0 和一个 1 组成的向量的线性无关集合; 正交基就是一组两两之间都正交的向量的线性无关集合; 标准正交基(单位正交基)就是一组正交基, 且每个基向量的长度为 1。

正交基的好处就是用于表示某个向量时, 该线性组合表示中的系数可以直接用公式求出, 比如正交基 $\{u_1, u_2, u_3, \dots, u_n\}$ 用于表示 $n \times 1$ 向量 $x = c_1 u_1 + c_2 u_2 + c_3 u_3 + \cdots + c_n u_n$ 时, 系数 c_j 的值为 $c_j = \frac{x \cdot u_j}{u_j \cdot u_j}$, 其中符号 \cdot 为内积, $1 \leq j \leq n$ 。

假设 R^n 子空间 H 的维度为 n , 则该子空间的基可以表示为 $\{v_1, v_2, v_3, \dots, v_n\}$, 该子空间上的 $n \times 1$ 向量 x 可以表示为 $x = c_1 v_1 + c_2 v_2 + c_3 v_3 + \cdots + c_n v_n$, 其中 $c_1, c_2, c_3, \dots, c_n$ 为系数。

对于由基为 $\{s_1, s_2, s_3, \dots, s_p\}$ (其中 $0 \leq p \leq n$) 的子空间子空间 S , $n \times 1$ 向量 x 在 S 上的投影可以表示为 $\hat{x} = a_1 s_1 + a_2 s_2 + a_3 s_3 + \cdots + a_n s_n$, 其中 $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ 为系数; 如果基 $\{u_1, u_2, u_3, \dots, u_p\}$ 为 S 的正交基, 则 $n \times 1$ 向量 x 在 S 上的正交投影为 $\hat{x} = a_1 u_1 + a_2 u_2 + a_3 u_3 + \cdots + a_n u_n$, 其中 $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ 为系数, 且 $a_j = \frac{x \cdot u_j}{u_j \cdot u_j}$, 其中符号 \cdot 为内积, $1 \leq j \leq n$ 。

我们可以使用格拉姆——斯密特方法将任何非正交基转换为正交基, 该方法主要利用的原理是公式 $y = \hat{y} + z$, 其中 \hat{y} 是向量 y 的正交投影, z 是垂直于向量 \hat{y} 的向量。

对于一个方阵 U 来说，如果该方阵的所有列向量可以构成一个单位正交基，则该方阵 U 被称为正交矩阵，也就是具有 $U^T U = I$ 的性质，其中 I 为单位矩阵。所有的正交矩阵都是可逆的，且其所有行向量也可以构成一个单位正交基。

1.3 线性变换

1.31 线性变换介绍

矩阵还可以对向量进行变换， $m \times n$ 矩阵将 $n \times 1$ 向量映射成该矩阵组成的 R^m 子空间 H 上的某个 $m \times 1$ 向量，这种操作叫作线性变换。比如 $Ax = y$ 就是 $m \times n$ 矩阵 A 将 $n \times 1$ 向量 x 转换成 $m \times 1$ 向量 y 。

线性变换在几何上可以表示为某点的运动结果，比如对于点 $x = (2, 5)$ 来说，矩阵 $A = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ 对其的线性变换 $Ax = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 5 \end{pmatrix}$ 就是将点 x 移动到位置 $(6, 5)$ 。

1.32 线性变换性质

线性变换支持向量的加法和标乘运算规则。线性变换的矩阵 A 满足单射等价于 A 是没有自由变量的，满射等价于 A 对 R^m 的每个向量都有解。

1.4 特征值与特征向量

1.41 特征值与特征向量介绍

对于变换矩阵 A 为方阵的线性变换来说，有某些**非零向量**在经过线性变换后，其方向不会改变，只会改变其长度。这些向量也就是变换矩阵的特征向量，对应的长度伸缩比也就是变换矩阵的特征值，也就是 $Av = \lambda v$ (其中 v 为向量， λ 为向量 v 对应的长度伸缩比)。

一般来说，矩阵 A 的特征值可能有多个，每个特征值对应的特征向量也可能有多个，对于矩阵 A 的特征值的求解，一般是让矩阵 A 对应的特征空间 $(A - \lambda)x = 0$ 有非平凡解，也就是让该方程有自由变量，所以矩阵 $(A - \lambda)$ 的行列式必须为0，且该矩阵不可逆。所以我们通常是求 $\det A = 0$ 的解(这也就是求特征方程的解)从而求出矩阵 A 的各个特征值，并求出各个特征值对应的特征向量。

1.42 特征向量的性质

同一矩阵的不同特征值之间的特征向量是线性无关的，同一特征值的不同特征向量之间可能是线性无关的。

之前谈到的特征值都是实特征值，也就是实数特征值，它们在几何上表示的是对特征向量长度的伸缩

比；还有一种是复数特征值，简称复特征值，由实部和虚部组成，实部在几何上表示的是对特征向量长度的伸缩比，而虚部在几何上表示的是对特征向量角度的旋转。

1.43 矩阵相似性

有些矩阵的特征值是一样的，这也反映了这些矩阵对某些向量的线性变换有着一样的伸缩变化，这些矩阵之间相互相似，也就是如果矩阵A和B相似，则存在可逆矩阵P，使得 $B = P^{-1}AP, A = PBP^{-1}$

1.44 矩阵对角化

通过观察计算，我们可以发现三角矩阵和对角矩阵的特征值就是他们主对角线上的各个元素，如果一个矩阵相似于一个对角矩阵，则可以直接求出该矩阵的特征值了。不过不是所有的矩阵都有相似的对角矩阵，对于 $n \times n$ 矩阵A，只有存在n个线性无关的特征向量，才能够进行对角化，也就是说A要么有n个不同的特征值，要么相同特征值对应的线性无关特征向量数量等于该特征值的重数。

将 $n \times n$ 矩阵A转化为对应的对角矩阵的操作叫做对角化，也就是 $A = P^{-1}DP$ ，其中P是可逆矩阵，D是对角矩阵。根据矩阵求特征值的方法，我们可以推导出，可逆矩阵P的列是矩阵A的n个线性无关特征向量，D的对角线元素是其对应特征向量的特征值，P和D之间的值一一对应，这样就完成了矩阵A的对角化。

1.5 对角化与二次型

1.51 矩阵正交对角化

矩阵的对角化有许多用途，其中最主要的用途还是用于二次型方面，对于对称矩阵A来说，A的不同特征值之间的特征向量是正交的，所以我们将A进行对角化 $A = P^{-1}DP$ 时，可以使可逆矩阵P变为正交矩阵，这种对角化 $A = P^{-1}DP = P^TDP$ 也就叫做正交对角化。

1.52 二次型介绍

而对称矩阵是用来表示二次型的， R^n 上的二次型也是一个定义在 R^n 上的n元二次函数，它在向量x处的值可以用表达式 $Q(x) = x^T Ax$ 来计算，其中A是 $n \times n$ 对称矩阵。

二次型的各个项的系数可以由对应的对称矩阵看出，其中矩阵主对角线上是二次型的二次项系数，其他的是其他项的系数的一半，比如二次型为 $Q(x) = x^T \begin{pmatrix} 6 & 2 & 1 \\ 2 & -5 & -3 \\ 1 & -3 & 9 \end{pmatrix} x$ ，则该二次型可以用多项式表达为 $Q(x) = 6x_1^2 - 5x_2^2 + 9x_3^2 + 4x_1x_2 + 2x_1x_3 - 6x_2x_3$

1.53 标准型

对于二次型 $Q(x) = x^T Ax$ 来说，如果能够做一种变量代换，将式子中的所有非二次项的项的系数全化为0，则计算值将会方便的多，所以可以考虑变量代换 $x = Py$ 或 $y = P^{-1}x$ ，其中 P 是一个可逆矩阵， y 是变换后的向量，使得 $Q(x) = x^T Ax = y^T Dy$ ，从而将 $Q(x)$ 的所有非二次项的项的系数全化为了0。这也就是对 A 进行对角化，而 A 是对称矩阵，所以经过计算变换可以得知，要使变量代换成功，则可逆矩阵 P 必须为由对称矩阵 A 的特征向量组成的正交矩阵，此时 $Q(x) = x^T Ax = y^T (P^T AP)y = y^T Dy$ 。

所以使用变量代换 $x = Py$ 或 $y = P^{-1}x$ ，可以使得 $Q(x) = x^T Ax = y^T (P^T AP)y = y^T Dy$ ，其中 P 为由对称矩阵 A 的特征向量组成的正交矩阵，变换后的二次型叫做标准型。

1.54 二次型的性质

二次型 $Q(x)$ 的性质：

1. 正定型：对于所有的 $x \neq 0$ ，都有 $Q(x) > 0$ ，也就是 $Q(x)$ 对应的矩阵的特征值都是正值。
2. 负定型：对于所有的 $x \neq 0$ ，都有 $Q(x) < 0$ ，也就是 $Q(x)$ 对应的矩阵的特征值都是负值。
3. 不定型：对于所有的 $x \neq 0$ ， $Q(x)$ 有正有负，也就是 $Q(x)$ 对应的矩阵的特征值有正有负。

2 应用总结

2.1 列昂惕夫投入产出模型

在华西里·列昂惕夫 (Wassily Leontief) 获得诺贝尔奖的工作中, 线性代数起着重要的作用, 如第 1 章开始所提到的。本节所叙述的经济模型是现在世界各国广泛使用的模型的基础。

设某国的经济体系分为 n 个部门, 这些部门生产商品和服务。设 \mathbf{x} 为 \mathbb{R}^n 中产出向量, 它列出了每一部门一年中的产出。同时, 设经济体系的另一部分 (称为开放部门) 不生产商品或服务, 仅仅消费商品或服务, 设 \mathbf{d} 为最终需求向量 (或最终需求账单), 它列出经济体系中的各种非生产部门所需求的商品或服务。此向量代表消费者需求、政府消费、超额生产、出口或其他外部需求。

由于各部门生产商品以满足消费者需求, 生产者本身创造了中间需求, 需要这些产品作为生产部门的投入。部门之间的关系是很复杂的, 而生产和最后需求之间的联系也还不清楚。列昂惕夫思考是否存在某一生产水平 \mathbf{x} 恰好满足这一生产水平的总需求 (\mathbf{x} 称为供给), 从而

$$\{\text{总产出 } \mathbf{x}\} = \{\text{中间需求}\} + \{\text{最终需求 } \mathbf{d}\} \quad (1)$$

列昂惕夫的投入产出模型的基本假设是, 对每个部门, \mathbb{R} 中有一个单位消费向量, 它列出了该部门的单位产出所需的投入。所有的投入与产出都以百万美元作为单位, 而不用具体的单位 (如吨等) (假设商品和服务的价格为常数)。

作为一个简单的例子, 设经济体系由三个部门组成——制造业、农业和服务业。单位消费向量 $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3$ 如表 2-1 所示。

表 2-1 每单位产出消费的投入

购买自	制造业	农业	服务业
制造业	0.50	0.40	0.20
农业	0.20	0.30	0.10
服务业	0.10	0.10	0.30

↑
 \mathbf{c}_1 ↑
 \mathbf{c}_2 ↑
 \mathbf{c}_3

例 1 如果制造业决定生产 100 单位产品, 它将消费多少?

解 计算

$$100\mathbf{c}_1 = 100 \begin{bmatrix} 0.50 \\ 0.20 \\ 0.10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 50 \\ 20 \\ 10 \end{bmatrix}$$

为生产 100 单位产品, 制造业需要消费制造业其他部门的 50 单位产品, 20 单位农业产品, 10 单位服务业产品。 ■

若制造业决定生产 x_1 单位产出, 则在生产的过程中消费掉的中间需求是 $x_1\mathbf{c}_1$ 。类似地, 若 x_2 和 x_3 表示农业和服务业的计划产出, 则 $x_2\mathbf{c}_2$ 和 $x_3\mathbf{c}_3$ 为它们所对应的中间需求。三个部门的中间需求为

$$\{\text{中间需求}\} = x_1\mathbf{c}_1 + x_2\mathbf{c}_2 + x_3\mathbf{c}_3 = \mathbf{C}\mathbf{x} \quad (2)$$

其中 \mathbf{C} 是消耗矩阵 $[\mathbf{c}_1 \ \mathbf{c}_2 \ \mathbf{c}_3]$, 即

$$C = \begin{bmatrix} 0.50 & 0.40 & 0.20 \\ 0.20 & 0.30 & 0.10 \\ 0.10 & 0.10 & 0.30 \end{bmatrix} \quad (3)$$

方程 (1) 和 (2) 产生列昂惕夫模型.

列昂惕夫投入产出模型或生产方程

$$\begin{array}{rcl} \mathbf{x} & = & C\mathbf{x} + \mathbf{d} \\ \text{总产出} & & \text{中间需求} \quad \text{最终需求} \end{array} \quad (4)$$

可把 (4) 重写为

$$\begin{aligned} I\mathbf{x} - C\mathbf{x} &= \mathbf{d} \\ (I - C)\mathbf{x} &= \mathbf{d} \end{aligned} \quad (5)$$

例 2 考虑消耗矩阵为 (3) 的经济体系. 假设最终需求是制造业 50 单位, 农业 30 单位, 服务业 20 单位, 求生产水平 \mathbf{x} .

解 (5) 中系数矩阵为

$$I - C = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.5 & 0.4 & 0.2 \\ 0.2 & 0.3 & 0.1 \\ 0.1 & 0.1 & 0.3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5 & -0.4 & -0.2 \\ -0.2 & 0.7 & -0.1 \\ -0.1 & -0.1 & 0.7 \end{bmatrix}$$

为解方程 (5), 对增广矩阵作行变换:

$$\left[\begin{array}{cccc} 0.5 & -0.4 & -0.2 & 50 \\ -0.2 & 0.7 & -0.1 & 30 \\ -0.1 & -0.1 & 0.7 & 20 \end{array} \right] \sim \left[\begin{array}{cccc} 5 & -4 & -2 & 500 \\ -2 & 7 & -1 & 300 \\ -1 & -1 & 7 & 200 \end{array} \right] \sim \cdots \sim \left[\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 226 \\ 0 & 1 & 0 & 119 \\ 0 & 0 & 1 & 78 \end{array} \right]$$

最后一列四舍五入到整数, 制造业需生产约 226 单位, 农业 119 单位, 服务业 78 单位. ■

若矩阵 $I - C$ 可逆, 则可应用 2.2 节定理 5, 用 $I - C$ 代替 A , 由方程 $(I - C)\mathbf{x} = \mathbf{d}$ 得出 $\mathbf{x} = (I - C)^{-1}\mathbf{d}$. 下列定理说明, 在大部分的实际情况中, $I - C$ 是可逆的, 而且产出向量 \mathbf{x} 是经济上可行的, 亦即 \mathbf{x} 中的元素是非负的.

在此定理中, 列的和表示矩阵中某一列元素的和. 在通常情况下, 某一消耗矩阵的列的和是小于 1 的, 因为一个部门要生产一单位产出所需投入的总价值应该小于 1.

定理 11 设 C 为某一经济体系的消耗矩阵, \mathbf{d} 为最终需求. 若 C 和 \mathbf{d} 的元素非负, C 的每一列的和小于 1, 则 $(I - C)^{-1}$ 存在, 产出向量

$$\mathbf{x} = (I - C)^{-1}\mathbf{d}$$

有非负元素, 且是下列方程的唯一解:

$$\mathbf{x} = C\mathbf{x} + \mathbf{d}$$

下面的讨论说明定理成立的理由, 且给出一种计算 $(I - C)^{-1}$ 的新方法.

$(I - C)^{-1}$ 的公式

假设由 \mathbf{d} 表示的需求在年初提供给各种工业, 它们制定产业水平为 $\mathbf{x} = \mathbf{d}$ 的计划, 它将恰好

满足最终需求。由于这些工业准备产出为 \mathbf{d} , 它们将提出对原料及其他投入的要求。这就创造出对投入的中间需求 $C\mathbf{d}$ 。

为满足附加需求 $C\mathbf{d}$, 这些工业需要额外的投入为 $C(C\mathbf{d}) = C^2\mathbf{d}$, 当然, 它又创造出第二轮的中间需求, 当要满足这些需求时, 它们又创造出第三轮需求, 即 $C(C^2\mathbf{d}) = C^3\mathbf{d}$, 等等。

理论上, 这个过程可无限延续下去, 虽然实际上这样一系列事件不可能一直发生下去。我们可把这一假设的情形表示如表 2-2 所示。

表 2-2

	要满足的需求	为满足此需求需要的投入
最终需求	\mathbf{d}	$C\mathbf{d}$
中间需求		
第一轮	$C\mathbf{d}$	$C(C\mathbf{d}) = C^2\mathbf{d}$
第二轮	$C^2\mathbf{d}$	$C(C^2\mathbf{d}) = C^3\mathbf{d}$
第三轮	$C^3\mathbf{d}$	$C(C^3\mathbf{d}) = C^4\mathbf{d}$
	\vdots	\vdots

满足所有这些需求的产出水平 \mathbf{x} 是

$$\mathbf{x} = \mathbf{d} + C\mathbf{d} + C^2\mathbf{d} + C^3\mathbf{d} + \cdots = (I + C + C^2 + C^3 + \cdots) \mathbf{d} \quad (6)$$

为了使 (6) 有意义, 我们使用下列代数恒等式:

$$(I - C)(I + C + C^2 + \cdots + C^m) = I - C^{m+1} \quad (7)$$

可以证明, 若 C 的列的和都严格小于 1, 则 $I - C$ 是可逆的, 当 m 趋于无穷时 C^m 趋于 0, 而 $I - C^{m+1} \rightarrow I$ 。(这有点类似于当正数 t 小于 1 时, 随着 m 增大, $t^m \rightarrow 0$.) 应用 (7), 我们有

$$\text{当 } C \text{ 的列的和小于 1 时, } (I - C)^{-1} \approx I + C + C^2 + C^3 + \cdots + C^m \quad (8)$$

我们将 (8) 解释为当 m 充分大时, 右边可以任意接近于 $(I - C)^{-1}$ 。

在实际的投入产出模型中, 消耗矩阵的幂迅速趋于 0, 故 (8) 实际上给出一种计算 $(I - C)^{-1}$ 的方法。类似地, 对任意 \mathbf{d} , 向量 $C^m\mathbf{d}$ 迅速地趋于零向量, 而 (6) 给出实际解 $(I - C)\mathbf{x} = \mathbf{d}$ 的方法。若 C 和 \mathbf{d} 中的元素是非负的, 则 (6) 说明 \mathbf{x} 中的元素也是非负的。

$(I - C)^{-1}$ 中元素的经济重要性

$(I - C)^{-1}$ 中的元素是有意义的, 因为它们可用来预计当最终需求 \mathbf{d} 改变时, 产出向量 \mathbf{x} 如何改变。事实上, $(I - C)^{-1}$ 第 j 列的元素表示当第 j 个部门的最终需求增加 1 单位时, 各部门需要增加产出的数量。见习题 8。

数值计算的注解 在任何应用问题中(不仅是经济学), 方程 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 总可以写成 $(I - C)\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 的形式, 其中 $C = I - A$, 若方程组很大而且稀疏(大部分元素为 0), 可能 C 的各列元素的绝对值之和小于 1, 这时 $C^m \rightarrow 0$ 。若 C^m 趋于零足够迅速, 则 (6) 和 (8) 可以用来作为解方程 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 的实际方法, 也可用来求 A^{-1} 。

2.2 计算机图形学的应用

2.21 常用的二维变换矩阵

1. 对称变换

- 关于x轴对称: $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
- 关于y轴对称: $\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

- 关于直线 $y = x$ 对称: $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
- 关于直线 $y = -x$ 对称: $\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$
- 关于原点对称: $\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

2. 伸缩变换(其中k为伸缩系数)

- 水平伸缩: $\begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
- 垂直伸缩: $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix}$

3. 剪切变换(其中k为剪切系数)

- 水平剪切: $\begin{pmatrix} 1 & k \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
- 垂直剪切: $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ k & 1 \end{pmatrix}$

4. 投影变换

- 投影到x轴上: $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$
- 投影到y轴上: $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

2.3 差分方程的应用

2.31 差分方程的一般应用

差分方程类型的题就是给出一个差分方程 $x_{n+1} = Ax_n$ 和初值 x_0 , 求出该差分方程的通项公式, 其中 $x_j (0 <= j)$ 为向量, A为可对角化的矩阵。

我们可以通过差分方程看出 $x_n = A^n x_0$, 所以对于这类的题, 我们要利用特征值的相关性质, 将A用特征值来代替。

A可以对角化, 所以A有n个线性无关的特征向量 $\{v_1, v_2, v_3, \dots, v_n\}$, 这些特征向量也是在A所组成的子空间 H 上, 所以对于H上的初始向量 x_0 , 可以用这些特征向量组成的基来线性组合表示该向量, 也就是 $x_0 = c_1 v_1 + c_2 v_2 + c_3 v_3 + \dots + c_n v_n$, 其中 $c_1, c_2, c_3, \dots, c_n$ 为系数。

然后根据差分方程和 $Av = \lambda v$, 可得 $x_2 = A^2 x_0 = A(c_1 Av_1 + c_2 Av_2 + c_3 Av_3 + \dots + c_n Av_n) = c_1 \lambda_1 Av_1 + c_2 \lambda_2 Av_2 + c_3 \lambda_3 Av_3 + \dots + c_n \lambda_n Av_n = c_1 \lambda_1^2 v_1 + c_2 \lambda_2^2 v_2 + c_3 \lambda_3^2 v_3 + \dots + c_n \lambda_n^2 v_n$

由此可得 $x_k = c_1 \lambda_1^k v_1 + c_2 \lambda_2^k v_2 + c_3 \lambda_3^k v_3 + \dots + c_n \lambda_n^k v_n (k = 0, 1, 2, \dots)$

所以对于这类题的解题步骤为:

1. 找出初值，并列出差分方程 $x_{n+1} = Ax_n$ 。
2. 对矩阵A求出所有特征值以及对应的线性无关特征向量。
3. 利用式子 $x_0 = cv = c_1v_1 + c_2v_2 + c_3v_3 + \cdots + c_nv_n$ 求出系数向量c，其中c为系数向量，v为由特征向量组成的基。
4. 将求出的系数向量c的值代入公式 $x_k = c_1\lambda_1^k v_1 + c_2\lambda_2^k v_2 + c_3\lambda_3^k v_3 + \cdots + c_n\lambda_n^k v_n$ ($k = 0, 1, 2, \dots$)，至此已求出通项公式。

2.32 马尔科夫预测

本节中描述的马尔可夫链在许多学科如生物学、商业、化学、工程学及物理学等领域中被用来做数学模型。在每种情形中，该模型习惯上用来描述用同一种方法进行多次的实验或测量，实验中每次测试的结果属于几个指定的可能结果之一，每次测试结果仅依赖于最接近的前一次测试。

例如，若每年要统计一个城市及其郊区的人口，那么像

$$\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 0.60 \\ 0.40 \end{bmatrix} \quad (1)$$

这样的向量可以显示 60% 的人口住在城市中，40% 的人口住在郊区。 \mathbf{x}_0 中的小数加起来等于 1 是因为它们说明这个地区的总人口。在此对我们的目的而言，用百分数表示比用人口总数表示更方便。

一个具有非负元素且各元素的数值相加等于 1 的向量称为概率向量。随机矩阵是各列向量均为概率向量的方阵。马尔可夫链是一个概率向量序列 $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots$ 和一个随机矩阵 P ，满足

$$\mathbf{x}_1 = P\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2 = P\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3 = P\mathbf{x}_2, \dots$$

于是马尔可夫链可用一阶差分方程来刻画：

$$\mathbf{x}_{k+1} = P\mathbf{x}_k, k = 0, 1, 2, \dots$$

当向量在 \mathbb{R}^n 中的一个马尔可夫链描述一个系统或实验的序列时, x_k 中的元素分别列出系统在 n 个可能状态中的概率, 或实验结果是 n 个可能结果之一的概率. 因此, x_k 通常称为状态向量.

例 1 在 1.10 节中, 我们研究过一个人口在城市与郊区之间移动的模型, 见图 4-34. 在大城市地区的这两个部分之间, 每年的移民由移民矩阵 M 控制:

$$M = \begin{bmatrix} 0.95 & 0.03 \\ 0.05 & 0.97 \end{bmatrix}$$

即每年有 5% 的城市人口流动到郊区, 有 3% 的郊区人口流动到城市. M 的列是概率向量, 所以 M 是一个随机矩阵. 假设在 2014 年这个地区的城市人口为 600 000, 郊区人口为 400 000, 则这个地区原来的人口分布由上面 (1) 中的 x_0 给出. 2015 年人口的分布是什么? 2016 年呢?

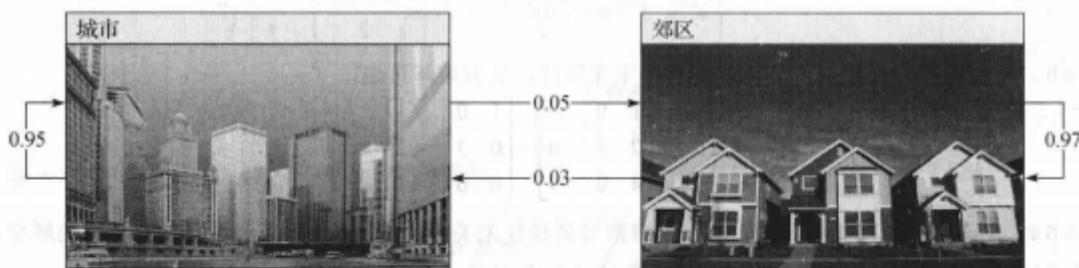


图 4-34 每年城市与郊区之间移民的百分比

解 在 1.10 节的例 3 中, 我们看到 1 年之后, 人口向量 $\begin{bmatrix} 600\,000 \\ 400\,000 \end{bmatrix}$ 变为

$$\begin{bmatrix} 0.95 & 0.03 \\ 0.05 & 0.97 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 600\,000 \\ 400\,000 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 582\,000 \\ 418\,000 \end{bmatrix}$$

如果用总人口 100 万除以方程两边, 再利用事实 $kMx = M(kx)$, 可得

$$\begin{bmatrix} 0.95 & 0.03 \\ 0.05 & 0.97 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.600 \\ 0.400 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.582 \\ 0.418 \end{bmatrix}$$

向量 $x_1 = \begin{bmatrix} 0.582 \\ 0.418 \end{bmatrix}$ 给出 2015 年的人口分布, 即该地区 58.2% 的人口住在城市, 41.8% 的人口住在郊区. 类似地, 2016 年的人口分布由 x_2 给出, 其中

$$x_2 = Mx_1 = \begin{bmatrix} 0.95 & 0.03 \\ 0.05 & 0.97 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.582 \\ 0.418 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.565 \\ 0.435 \end{bmatrix}$$

■

例 2 假设在某一固定选区美国国会选举的投票结果用 \mathbb{R}^3 中的向量 x 表示为

$$x = \begin{bmatrix} \text{民主党得票率}(D) \\ \text{共和党得票率}(R) \\ \text{自由党得票率}(L) \end{bmatrix}$$

假设我们用这种类型的向量每两年记录一次美国国会选举的结果，同时每次选举的结果仅依赖于前一次选举的结果，则刻画每两年选举的向量构成的序列是一个马尔可夫链。对此链，作为一个随机矩阵的例子，取

$$P = \begin{bmatrix} 0.70 & 0.10 & 0.30 \\ 0.20 & 0.80 & 0.30 \\ 0.10 & 0.10 & 0.40 \end{bmatrix}$$

从 D R L 到

标志为“ D ”的第一列中的数值刻画在一次选举中为民主党投票的人在下一次选举中将如何投票的百分比。这里我们已经假设 70% 的人在下一次选举中再一次投“ D ”的票，20% 的人将投“ R ”的票，10% 的人将投“ L ”的票。对 P 的其他两列有类似的解释，图 4-35 给出这个矩阵的一个图表。

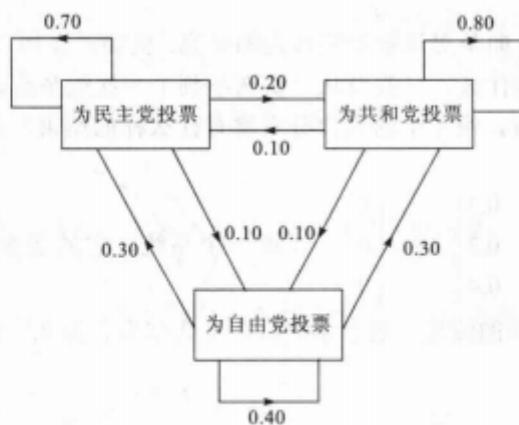


图 4-35 从一次选举到下一次选举投票的变化情况

如果这些“转换”百分比从一次选举到下一次选举多年保持为常数，则那些给出投票结果的向量的序列构成一个马尔可夫链。假设在一次选举中，结果为

$$\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 0.55 \\ 0.40 \\ 0.05 \end{bmatrix}$$

确定下一次可能的结果和再下一次可能的结果。

解 下一次选举的结果由状态向量 \mathbf{x}_1 描述，再下一次选举的结果由 \mathbf{x}_2 描述，其中

$$\mathbf{x}_1 = P\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 0.70 & 0.10 & 0.30 \\ 0.20 & 0.80 & 0.30 \\ 0.10 & 0.10 & 0.40 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.55 \\ 0.40 \\ 0.05 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.440 \\ 0.445 \\ 0.115 \end{bmatrix}$$

44% 将投 D 的票
44.5% 将投 R 的票
11.5% 将投 L 的票

$$\mathbf{x}_2 = P\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 0.70 & 0.10 & 0.30 \\ 0.20 & 0.80 & 0.30 \\ 0.10 & 0.10 & 0.40 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.440 \\ 0.445 \\ 0.115 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.3870 \\ 0.4785 \\ 0.1345 \end{bmatrix}$$

38.7%将投D的票
47.8%将投R的票
13.5%将投L的票

为了搞清楚为什么 \mathbf{x}_1 事实上给出了下一次选举的结果，假设 1000 个人在“第一次”选举中投票，550 人投 D 的票，400 人投 R 的票，50 人投 L 的票（见 \mathbf{x}_0 中的百分比）。在下一次选举中，550 人中的 70% 将再一次投 D 的票，400 人中的 10% 将从 R 转投 D，50 人中的 30% 将从 L 转投 D，于是 D 的总得票数为

$$0.70(550) + 0.10(400) + 0.30(50) = 385 + 40 + 15 = 440 \quad (2)$$

于是下一次 D 候选人将得 44% 的选票。（2）中的计算本质上与计算 \mathbf{x}_1 中第一个元素是相同的，对 \mathbf{x}_1 中其他元素以及 \mathbf{x}_2 中的元素等可以作类似的计算。 ■

预言遥远的未来

马尔可夫链最有趣的方面是对该链长期行为的研究。例如，在例 2 中经过多次选举以后，关于投票的情况我们能说些什么？（假设从一次选举到下一次选举给定的随机矩阵连续描述转换百分比。）另外，从长远看，例 1 中的人口分布将有什么样的结果？在回答这些问题之前，我们先讨论一个数值的例子。

例 3 令 $P = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.2 & 0.3 \\ 0.3 & 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0 & 0.4 \end{bmatrix}$, $\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ ，考虑一个系统，它的状态由马尔可夫链 $\mathbf{x}_{k+1} = P\mathbf{x}_k$

($k = 0, 1, \dots$) 描述。随着时间的流逝，这个系统将有什么结果？为此，计算状态向量 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{15}$ 来寻找结果。

解

$$\mathbf{x}_1 = P\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.2 & 0.3 \\ 0.3 & 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0 & 0.4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.3 \\ 0.2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_2 = P\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.2 & 0.3 \\ 0.3 & 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0 & 0.4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.3 \\ 0.2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.37 \\ 0.45 \\ 0.18 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_3 = P\mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.2 & 0.3 \\ 0.3 & 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0 & 0.4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.37 \\ 0.45 \\ 0.18 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.329 \\ 0.525 \\ 0.146 \end{bmatrix}$$

后续计算的结果如下所示，向量中的元素保留 4 位或 5 位有效数字。

$$\mathbf{x}_4 = \begin{bmatrix} 0.3133 \\ 0.5625 \\ 0.1242 \end{bmatrix}, \mathbf{x}_5 = \begin{bmatrix} 0.3064 \\ 0.5813 \\ 0.1123 \end{bmatrix}, \mathbf{x}_6 = \begin{bmatrix} 0.3032 \\ 0.5906 \\ 0.1062 \end{bmatrix}, \mathbf{x}_7 = \begin{bmatrix} 0.3016 \\ 0.5953 \\ 0.1031 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_8 = \begin{bmatrix} 0.3008 \\ 0.5977 \\ 0.1016 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_9 = \begin{bmatrix} 0.3004 \\ 0.5988 \\ 0.1008 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_{10} = \begin{bmatrix} 0.3002 \\ 0.5994 \\ 0.1004 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_{11} = \begin{bmatrix} 0.3001 \\ 0.5997 \\ 0.1002 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_{12} = \begin{bmatrix} 0.30005 \\ 0.59985 \\ 0.10010 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_{13} = \begin{bmatrix} 0.30002 \\ 0.59993 \\ 0.10005 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_{14} = \begin{bmatrix} 0.30001 \\ 0.59996 \\ 0.10002 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_{15} = \begin{bmatrix} 0.30001 \\ 0.59998 \\ 0.10001 \end{bmatrix}$$

这些向量似乎是逼近 $\mathbf{q} = \begin{bmatrix} 0.3 \\ 0.6 \\ 0.1 \end{bmatrix}$ 的。这些概率由 k 的一个值到下一个值几乎不改变。注意到下列

计算是精确的（没有舍入误差）：

$$P\mathbf{q} = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.2 & 0.3 \\ 0.3 & 0.8 & 0.3 \\ 0.2 & 0 & 0.4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0.3 \\ 0.6 \\ 0.1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.15 + 0.12 + 0.03 \\ 0.09 + 0.48 + 0.03 \\ 0.06 + 0 + 0.04 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.30 \\ 0.60 \\ 0.10 \end{bmatrix} = \mathbf{q}$$

若系统处于状态 \mathbf{q} ，则从一次测量到下一次测量，系统没有变化。 ■

稳态向量

若 P 是一个随机矩阵，则相对于 P 的稳态向量（或平衡向量）是一个满足

$$P\mathbf{q} = \mathbf{q}$$

的概率向量 \mathbf{q} 。可以证明每一个随机矩阵有一个稳态向量。上面的例 3 中， \mathbf{q} 是 P 的一个稳态向量。

例 4 在例 1 中，概率向量 $\mathbf{q} = \begin{bmatrix} 0.375 \\ 0.625 \end{bmatrix}$ 是人口迁移矩阵 M 的一个稳态向量，这是因为

$$M\mathbf{q} = \begin{bmatrix} 0.95 & 0.03 \\ 0.05 & 0.97 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0.375 \\ 0.625 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.35625 + 0.01875 \\ 0.01875 + 0.60625 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.375 \\ 0.625 \end{bmatrix} = \mathbf{q}$$

在例 1 中，若大城市地区的总人口是 100 万，则由例 4， \mathbf{q} 将对应有 375 000 人在城市，有 625 000 人在郊区。在一年的年底，从城市迁出的人口是 $(0.05)(375000) = 18750$ ，从郊区迁进城市的人口是 $(0.03)(625000) = 18750$ 。结果是，城市里的人口保持不变。类似地，郊区里的人口也是稳定的。

下一个例子说明如何求稳态向量。

例 5 令 $P = \begin{bmatrix} 0.6 & 0.3 \\ 0.4 & 0.7 \end{bmatrix}$ ，求 P 的稳态向量。

解 首先，解方程 $P\mathbf{x} = \mathbf{x}$ 。

$$P\mathbf{x} - \mathbf{x} = \mathbf{0}$$

$$P\mathbf{x} - I\mathbf{x} = \mathbf{0} \quad \text{回顾 1.4 节有 } I\mathbf{x} = \mathbf{x}$$

$$(P - I)\mathbf{x} = \mathbf{0}$$

对上面的 P ,

$$P - I = \begin{bmatrix} 0.6 & 0.3 \\ 0.4 & 0.7 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.4 & 0.3 \\ 0.4 & -0.3 \end{bmatrix}$$

为求 $(P - I)x = \mathbf{0}$ 的所有解, 将增广矩阵作行化简:

$$\begin{bmatrix} -0.4 & 0.3 & 0 \\ 0.4 & -0.3 & 0 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} -0.4 & 0.3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & -3/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

于是 $x_1 = \frac{3}{4}x_2$, x_2 为自由变量, 通解为 $x_2 \begin{bmatrix} 3/4 \\ 1 \end{bmatrix}$.

其次, 对此解空间选一个简单的基. 一个显然的选择是 $\begin{bmatrix} 3/4 \\ 1 \end{bmatrix}$, 但一个更好的没有分数的选择是 $w = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \end{bmatrix}$ (对应于 $x_2 = 4$).

最后, 在 $Px = x$ 的全体解的集合中求一个概率向量. 这是简单的, 因为每个解均为上面 w 的一个倍数. 将 w 除以其元素之和得

$$q = \begin{bmatrix} 3/7 \\ 4/7 \end{bmatrix}$$

检验之, 计算

$$Pq = \begin{bmatrix} 6/10 & 3/10 \\ 4/10 & 7/10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3/7 \\ 4/7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 18/70 + 12/70 \\ 12/70 + 28/70 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 30/70 \\ 40/70 \end{bmatrix} = q$$

下一个定理将证明, 例 3 中产生的结果是许多随机矩阵的一个典型代表. 我们说一个随机矩阵是正则的, 如果矩阵的某次幂 P^k 仅包含严格正的元素. 对例 3 中的 P , 有

$$P^2 = \begin{bmatrix} 0.37 & 0.26 & 0.33 \\ 0.45 & 0.70 & 0.45 \\ 0.18 & 0.04 & 0.22 \end{bmatrix}$$

由于 P^2 中每个元素是严格正的, 故 P 是一个正则随机矩阵.

另外, 我们说一个向量序列 $\{x_k : k=1, 2, \dots\}$ 当 $k \rightarrow \infty$ 时收敛到一个向量 q , 如果当 k 充分大时, x_k 中的元素无限接近 q 中对应的元素.

定理 18 若 P 是一个 $n \times n$ 的正则随机矩阵, 则 P 具有唯一的稳态向量 q . 进一步, 若 x_0 是任一个初始状态, 且 $x_{k+1} = Px_k$, $k = 0, 1, 2, \dots$, 则当 $k \rightarrow \infty$ 时, 马尔可夫链 $\{x_k\}$ 收敛到 q .

这个定理的证明可在有关马尔可夫链的标准教科书中找到. 这个定理的奇妙之处在于初始状态对马尔可夫链的长期行为没有影响. 稍后 (在 5.2 节) 你将看到为什么这种情况对这里研究的多个随机矩阵是真实的.

例 6 在例 2 中, 假设选举结果构成一个马尔可夫链. 问从现在开始经过多年若干次的选举之后, 投票者可能为共和党候选人投票的百分比是多少?

解 若用手工计算, 错误方法是选某初始向量 x_0 , 再对充分大的 k 计算 x_1, \dots, x_k . 这样没办法知道要计算多少向量, 并且你不能把握 x_k 中元素的极限值.

正确方法是先计算稳态向量，再借助定理 18. 给定例 2 中的矩阵 P ，通过对角线上每个元素减去 1 得到 $P - I$ ，再将增广矩阵进行行化简：

$$[(P-I) \quad \mathbf{0}] = \begin{bmatrix} -0.3 & 0.1 & 0.3 & 0 \\ 0.2 & -0.2 & 0.3 & 0 \\ 0.1 & 0.1 & -0.6 & 0 \end{bmatrix}$$

回顾前面的工作，通过每一行乘以 10，可以使运算简化。^③

$$\begin{bmatrix} -3 & 1 & 3 & 0 \\ 2 & -2 & 3 & 0 \\ 1 & 1 & -6 & 0 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 0 & -9/4 & 0 \\ 0 & 1 & -15/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$(P-I)\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 的通解为 $x_1 = \frac{9}{4}x_3$, $x_2 = \frac{15}{4}x_3$, x_3 是自由变量。选 $x_3 = 4$ ，得到解空间的一组基，它的

每个元素是整数，由此容易求得隐态向量，它的元素之和为 1：

$$\mathbf{w} = \begin{bmatrix} 9 \\ 15 \\ 4 \end{bmatrix}, \mathbf{q} = \begin{bmatrix} 9/28 \\ 15/28 \\ 4/28 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0.32 \\ 0.54 \\ 0.14 \end{bmatrix}$$

\mathbf{q} 中的元素刻画由现在开始多年之后进行的一次选举中得票数的分布（假设这个随机矩阵连续描述从一次选举到下一次选举的变化情况）。这样，最终大约 54% 的选票被共和党候选人得到。

■

数值计算的注解 你可能已注意到若 $\mathbf{x}_{k+1} = P\mathbf{x}_k$, $k = 0, 1, 2, \dots$, 则

$$\mathbf{x}_2 = P\mathbf{x}_1 = P(P\mathbf{x}_0) = P^2\mathbf{x}_0$$

一般地，

$$\mathbf{x}_k = P^k\mathbf{x}_0, k = 0, 1, 2, \dots$$

为了计算一个向量，比如 \mathbf{x}_3 ，将 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2$ 先算出来再计算 \mathbf{x}_3 也需要很少的算术运算，而先计算 P^3 和 $P^3\mathbf{x}_0$ 则不然。然而，若 P 很小——比如是 30×30 的矩阵，则对这两种方法，机器计算 \mathbf{x}_3 的时间没有什么区别，计算 $P^3\mathbf{x}_0$ 的指令可以作为首选，因为它需要较少的键击次数。

2.4 微分方程的应用

本节讲述在 5.6 节研究的差分方程的连续型类推。在很多的应用问题中，有些量随时间连续变化，它们与下面的微分方程组有关：

$$x'_1 = a_{11}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n$$

$$x'_2 = a_{21}x_1 + \cdots + a_{2n}x_n$$

⋮

$$x'_n = a_{n1}x_1 + \cdots + a_{nn}x_n$$

这里 x_1, \dots, x_n 是关于 t 的可导函数，导数分别是 x'_1, \dots, x'_n ， a_{ij} 是常数。该方程组最主要的特征是线性性质。为了便于理解，我们把方程组写成矩阵微分方程

$$\mathbf{x}'(t) = A\mathbf{x}(t) \quad (1)$$

其中

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}'(t) = \begin{bmatrix} x'_1(t) \\ \vdots \\ x'_n(t) \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

方程 (1) 的解是向量值函数，该函数定义在某实数区间，比如 $t \geq 0$ ，且满足方程 (1)。

由于函数求导以及向量与矩阵相乘都是线性变换，故方程 (1) 是线性的。因此，若 \mathbf{u} 和 \mathbf{v} 是 $\mathbf{x}' = A\mathbf{x}$ 的解，则 $c\mathbf{u} + d\mathbf{v}$ 同样也是 $\mathbf{x}' = A\mathbf{x}$ 的解，因为

$$(c\mathbf{u} + d\mathbf{v})' = c\mathbf{u}' + d\mathbf{v}' = cA\mathbf{u} + dA\mathbf{v} = A(c\mathbf{u} + d\mathbf{v})$$

(工程师们将这个性质称为解的叠加) 同样，恒等于零的函数也是方程 (1) 的(平凡)解。用第 4 章的术语，方程 (1) 的所有解的集合是值属于 \mathbb{R}^n 的所有连续函数组成的集合的子空间。

有关微分方程的标准教材证明了方程(1)一定存在基础解系. 假如 A 是 $n \times n$ 矩阵, 那么在基础解系中存在 n 个线性无关的函数, 使得方程(1)的每一个解可以唯一表示为这 n 个函数的线性组合. 即基础解系是方程(1)的所有解的集合的基, 且解集是函数的 n 维向量空间. 若给定向量 \mathbf{x}_0 , 那么初值问题就是构造一个(唯一)函数 \mathbf{x} , 满足 $\mathbf{x}' = A\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$.

当 A 是对角矩阵时, 可以用初等微积分求出(1)的解. 例如考虑

$$\begin{bmatrix} x_1'(t) \\ x_2'(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & -5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix} \quad (2)$$

即有

$$\begin{aligned} x_1'(t) &= 3x_1(t) \\ x_2'(t) &= -5x_2(t) \end{aligned} \quad (3)$$

因为每个函数的导数仅依赖于函数自身, 而不是 $x_1(t)$ 和 $x_2(t)$ 的组合或“结合”, 所以称方程组(2)是解耦的. 由微积分, (3)的解是 $x_1(t) = c_1 e^{3t}$ 和 $x_2(t) = c_2 e^{-5t}$, c_1 和 c_2 为任意常数. (2)的每一个解都可以写成下列形式:

$$\begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 e^{3t} \\ c_2 e^{-5t} \end{bmatrix} = c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{3t} + c_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{-5t}$$

这个例子提示我们, 对于一般的方程 $\mathbf{x}' = A\mathbf{x}$, 它的解可能是形如

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{v} e^{\lambda t} \quad (4)$$

的函数的线性组合, 其中 λ 为数, \mathbf{v} 为非零向量.(若 $\mathbf{v} = \mathbf{0}$, 则函数 $\mathbf{x}(t)$ 恒为零, 且满足 $\mathbf{x}' = A\mathbf{x}$.) 注意到

$$\begin{aligned} \mathbf{x}'(t) &= \lambda \mathbf{v} e^{\lambda t} && \text{对 } \mathbf{x}(t) \text{ 求导, 其中 } \mathbf{v} \text{ 是常向量} \\ A\mathbf{x}(t) &= A\mathbf{v} e^{\lambda t} && \text{式(4)两边同乘 } A \end{aligned}$$

因为 $e^{\lambda t}$ 不可能为零, 故 $\mathbf{x}'(t)$ 等于 $A\mathbf{x}(t)$ 当且仅当 $\lambda \mathbf{v} = A\mathbf{v}$, 即当且仅当 λ 是 A 的特征值, 而 \mathbf{v} 是对应的特征向量. 因此, 每一对特征值-特征向量提供了 $\mathbf{x}' = A\mathbf{x}$ 的一个解(4), 这种解有时被称为微分方程的特征函数. 特征函数为求解微分方程提供了方法.

例 1 图 5-21 显示的电路可以用微分方程描述:

$$\begin{bmatrix} x_1'(t) \\ x_2'(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(1/R_1 + 1/R_2)/C_1 & 1/(R_2 C_1) \\ 1/(R_2 C_2) & -1/(R_2 C_2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix}$$

其中 $x_1(t)$ 和 $x_2(t)$ 是在时间 t 的两个电容器的电压. 设电阻 R_1 为 1 欧姆, R_2 为 2 欧姆, 电容器 C_1 为 1 法拉, C_2 为 0.5 法拉, 并假设电容器 C_1 的初始电压为 5 伏, C_2 为 4 伏. 求描述电压随时间变化的公式 $x_1(t)$ 和 $x_2(t)$.

解 由给出的数据, 令 $A = \begin{bmatrix} -1.5 & 0.5 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$, $\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix}$, $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 5 \\ 4 \end{bmatrix}$, 我们可以求得 A 的特征值是 $\lambda_1 = -0.5$ 和 $\lambda_2 = -2$, 对应的特征向量是

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

特征函数 $x_1(t) = v_1 e^{\lambda_1 t}$ 和 $x_2(t) = v_2 e^{\lambda_2 t}$ 都满足 $\mathbf{x}' = A\mathbf{x}$, x_1 和 x_2 的任意线性组合亦同样满足 $\mathbf{x}' = A\mathbf{x}$. 令

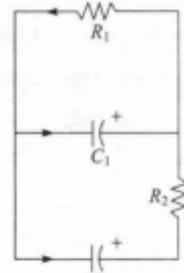


图 5-21

$$x(t) = c_1 v_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 v_2 e^{\lambda_2 t} = c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} e^{-0.5t} + c_2 \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} e^{-2t}$$

记 $x(0) = c_1 v_1 + c_2 v_2$, 显然 v_1 和 v_2 是线性无关的, 故 v_1 和 v_2 可生成 \mathbb{R}^2 , 令 $x(0) = x_0$, 可求出 c_1 和 c_2 . 事实上, 由方程

$$c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} + c_2 \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 4 \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{ccc} \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ v_1 & v_2 & x_0 \end{array}$$

容易解出 $c_1 = 3$ 和 $c_2 = -2$, 因此, 微分方程 $x' = Ax$ 的解是

$$x(t) = 3 \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} e^{-0.5t} - 2 \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix} e^{-2t}$$

或

$$\begin{bmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3e^{-0.5t} + 2e^{-2t} \\ 6e^{-0.5t} - 2e^{-2t} \end{bmatrix}$$

图 5-22 显示了 $x(t)$ 在 $t \geq 0$ 的图像或轨迹, 一起显示的还有其他初始点的轨迹. 两个特征函数 x_1 和 x_2 的轨迹包含在 A 的特征空间里.

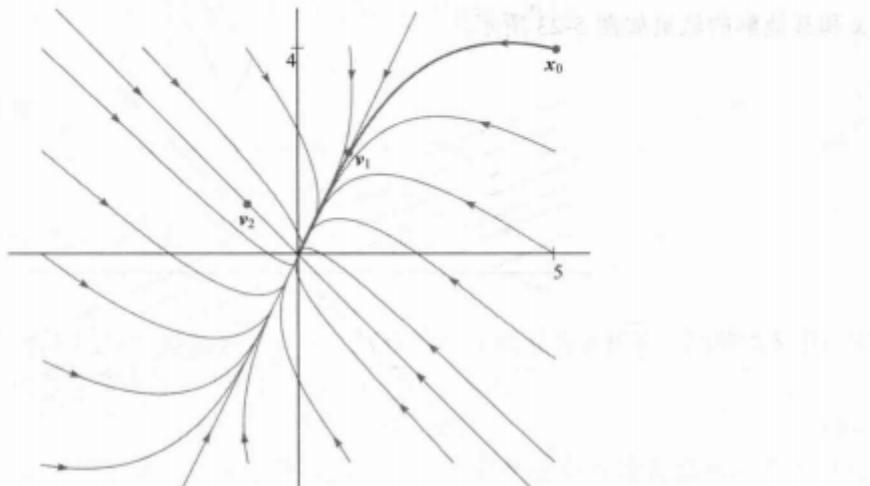


图 5-22 原点是吸引子

当 $t \rightarrow \infty$ 时, 函数 x_1 和 x_2 都衰减为零, 但 x_2 的值要衰减得更快一些, 因为它的指数要小一些. 对应的特征向量 v_2 的分量表明, 若两个初始电压大小相等但符号相反, 两个电容器的电压将会很快衰退为零.

在图 5-22 中, 因为所有轨迹都趋近于原点, 所以把原点称为动力系统的吸引子或汇. 最大的吸引方向是在较小的特征值 $\lambda = -2$ 对应的特征函数 x_2 的轨迹上 (沿着过原点和 v_2 的直线). 起点不在此直线的轨迹渐渐逼近过原点和 v_1 的直线, 因为它们在 v_2 方向的分量衰减得很快.

如果例 1 的特征值是正数, 则相应的轨迹形状相同, 但轨迹背离原点. 此时, 称原点为动

力系统的排斥子或源, 最大的排斥方向是在包含较大特征值对应的特征函数的轨迹的直线上.

2.5 最小二乘问题

最小二乘问题也就是求方程近似解的问题，当方程组 $Ax = y$ 无解时，证明了向量 y 不在 A 组成的子空间 H 上，我们就可以将向量 y 投影到子空间中，此时用向量 y 的投影 \hat{y} 替代向量 y 来求方程组 $Ax = \hat{y}$ ，从而得出的解就是方程组 $Ax = y$ 的近似解。

可以证明该近似解是离 $Ax = y$ 的解最近的解，其中解的误差为 $\epsilon = \text{dist}(y - \hat{y})$ 。

我们还可以直接使用公式 $A^T Ax = A^T y$ 来求出近似解，因为该公式求出的解集与 $Ax = \hat{y}$ 的相同。

2.51 回归分析

最小二乘问题最广泛的应用是回归分析，回归分析也就是给出一组数据点，根据这些数据点来判断和计算与其近似拟合的直线或曲线，这些直线或曲线就叫做回归直线或回归曲线。

科学和工程中的一项任务就是分析或理解几个变化量之间的联系。本节描述各种情形下数据被用作构造或验证一个公式，该公式可预测一个变量作为其他变量的函数。在每种情形下，问题会等同于求解一个最小二乘问题。

为了更容易应用所讨论的实际问题，如读者以后就业中遇到的相关问题，我们选取科学和工程数据中常见的统计分析记号。将 $Ax = b$ 写成 $X\beta = y$ ，且称 X 为设计矩阵， β 为参数向量， y 为观测向量。

最小二乘直线

变量 x 和 y 之间最简单的关系是线性方程 $y = \beta_0 + \beta_1 x$ 。^② 实验数据常常给出点 $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ ，它们的图形近似接近于直线。我们希望确定参数 β_0 和 β_1 ，使得直线尽可能“接近”这些点。

假设 β_0 和 β_1 固定，考虑图 6-26 中的直线 $y = \beta_0 + \beta_1 x$ 。对应每一个数据点 (x_j, y_j) ，有一个在直线上的点 $(x_j, \beta_0 + \beta_1 x_j)$ 具有同样的 x 坐标。我们称 y_j 为 y 的观测值，而 $\beta_0 + \beta_1 x_j$ 为 y 的预测值（由直线确定）。观测 y 值和预测 y 值之间的差称为余差。

② 这个记号在最小二乘直线中代替 $y = mx + b$ ， m 是斜率， b 是截距。

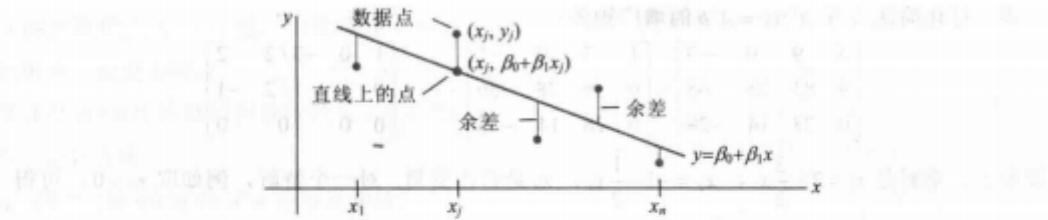


图 6-26 实验数据的直线拟合

有几种方法来度量直线如何“接近”数据，最常见的选择是余差平方之和（主要原因是数学计算简单）。最小二乘直线 $y = \beta_0 + \beta_1 x$ 是余差平方之和最小的，这条直线也称为 y 对 x 的回归直线，这是因为假设数据中的任何误差只出现在 y 坐标。直线的系数 β_0, β_1 被称为（线性）回归系数。^①

如果数据点在直线上，则参数 β_0 和 β_1 满足方程

$$\begin{array}{ll} \text{预测的} & \text{观测的} \\ \mathbf{y} \text{ 值} & \mathbf{y} \text{ 值} \\ \beta_0 + \beta_1 x_1 & = y_1 \\ \beta_0 + \beta_1 x_2 & = y_2 \\ \vdots & \\ \beta_0 + \beta_1 x_n & = y_n \end{array}$$

我们可将这个方程组写成

$$X\beta = \mathbf{y}, \text{ 其中 } X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \quad (1)$$

当然，如果数据点不在直线上，就没有参数 β_0, β_1 使得 $X\beta$ 中的预测 y 值与 \mathbf{y} 中的观测 y 值相等，且 $X\beta = \mathbf{y}$ 没有解。这就是 $Ax = b$ 的最小二乘解问题，只是记法不同！

向量 $X\beta$ 与 \mathbf{y} 之间距离的平方精确表达为余差的平方之和，于是，使平方和最小的 β 同样使得 $X\beta$ 与 \mathbf{y} 之间的距离最小。计算 $X\beta = \mathbf{y}$ 的最小二乘问题等价于找出 β ，它确定图 6-26 中的最小二乘直线。

例 1 求最小二乘直线的方程 $y = \beta_0 + \beta_1 x$ ，最佳拟合数据点为 $(2,1), (5,2), (7,3), (8,3)$ 。

解 利用数据的 x 坐标构造 (1) 中的矩阵 X 和 y 坐标构造向量 \mathbf{y} ：

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 5 \\ 1 & 7 \\ 1 & 8 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix}$$

对 $X\beta = \mathbf{y}$ 的最小二乘解，得到法方程（用新记号）：

① 如果测量的余差是 x ，而不是 y ，那么在描点和计算回归直线之前只需交换数据 (x_j, y_j) 的坐标。如果两个坐标都有误差，那么你必须选择直线，使得数据点到直线的正交（垂直）距离的平方和最小，见 7.5 节的练习题。

$$X^T X \beta = X^T y$$

也就是说, 计算

$$X^T X = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 5 & 7 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 5 \\ 1 & 7 \\ 1 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 22 \\ 22 & 142 \end{bmatrix}$$

$$X^T y = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 5 & 7 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 57 \end{bmatrix}$$

法方程是

$$\begin{bmatrix} 4 & 22 \\ 22 & 142 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 57 \end{bmatrix}$$

因此

$$\begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 22 \\ 22 & 142 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 9 \\ 57 \end{bmatrix} = \frac{1}{84} \begin{bmatrix} 142 & -22 \\ -22 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 9 \\ 57 \end{bmatrix} = \frac{1}{84} \begin{bmatrix} 24 \\ 30 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2/7 \\ 5/14 \end{bmatrix}$$

这样, 最小二乘直线的方程为 $y = \frac{2}{7} + \frac{5}{14}x$, 见图 6-27.

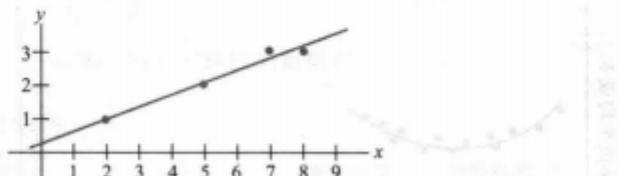


图 6-27 最小二乘直线 $y = \frac{2}{7} + \frac{5}{14}x$

在计算最小二乘直线之前, 常见的练习是计算原来 x 值的平均 \bar{x} , 并形成一个新变量 $x' = x - \bar{x}$. 新的 x 数据被称为平均偏差形式. 在这种情形下, 设计矩阵的两列是正交的. 像 6.5 节的例 4, 法方程的解是简化的, 见习题 17 和习题 18.

一般线性模型

在一些应用中, 必须将数据点拟合为非直线形式. 在下面的例子中, 矩阵方程仍然是 $X\beta = y$, 但特定形式的 X 会从一个问题变到下一个. 统计学家常引入余差向量 ε , 定义为 $\varepsilon = y - X\beta$, 并且记作

$$y = X\beta + \varepsilon$$

任何具有这种形式的方程称为线性模型. 一旦 X 和 y 被确定, 使 ε 长度达到最小化相当于找出 $X\beta = y$ 的最小二乘解. 在每种情形下, 最小二乘解 $\hat{\beta}$ 是下面法方程的解:

$$X^T X \beta = X^T y$$

其他曲线的最小二乘拟合

当“分散画出”的数据点 $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ 不接近任何直线时，一个合适的假定是 x 和 y 具有其他函数关系。

下面三个例子说明如何将数据拟合为如下一般形式的曲线：

$$y = \beta_0 f_0(x) + \beta_1 f_1(x) + \dots + \beta_k f_k(x) \quad (2)$$

其中 f_0, \dots, f_k 是已知函数， β_0, \dots, β_k 是待定参数。下面将看到，方程 (2) 描述一个线性模型，因为它是未知参数的线性模型。

对特殊的 x 值，(2) 式给出 y 的预测或“拟合”值。观测值与预测值之间的差为余差，参数 β_0, \dots, β_k 的确定需满足余差平方之和最小。

2.6 内积空间的应用

加权最小二乘法

设向量 y 的 n 次观测值为 y_1, \dots, y_n ，且假设我们希望用属于 \mathbb{R}^n 的特定子空间的一个向量 \hat{y} 逼近 y （在 6.5 节， \hat{y} 被写成 Ax ，所以 \hat{y} 属于 A 的列空间）。记 \hat{y} 的元素为 $\hat{y}_1, \dots, \hat{y}_n$ ，那么误差的平方和或 $SS(E)$ 用 \hat{y} 逼近 y 后为

$$SS(E) = (y_1 - \hat{y}_1)^2 + \dots + (y_n - \hat{y}_n)^2 \quad (1)$$

利用 \mathbb{R}^n 的标准长度的写法，上式可简记为 $\|y - \hat{y}\|^2$ 。

现在，假设测量时 y 的各个元素的可靠性不同（这是北美地质资料的一个特点，因为测量的数据是 140 年前的，作为另一个例子， y 的元素的计算来自各种样本的测量和不同样本的大小），那么可靠性就变成 (1) 式中平方误差的适当权值，较可靠的测量应赋予更重要的作用。^① 如果权值记为 w_1^2, \dots, w_n^2 ，那么加权的误差平方和是

$$\text{加权 } SS(E) = w_1^2(y_1 - \hat{y}_1)^2 + \dots + w_n^2(y_n - \hat{y}_n)^2 \quad (2)$$

这是 $(y - \hat{y})$ 长度的平方，其中的长度类似 6.7 节例 1 中定义的内积，即

$$\langle x, y \rangle = w_1^2 x_1 y_1 + \dots + w_n^2 x_n y_n$$

有时，可以非常方便地将这种加权最小二乘问题变换为等价的普通最小二乘问题。设 W 是对角线上是正数 w_1, \dots, w_n 的对角矩阵，可得

$$W\hat{y} = \begin{bmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & w_n & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_1 y_1 \\ w_2 y_2 \\ \vdots \\ w_n y_n \end{bmatrix}$$

$W\hat{y}$ 有类似的表达式，可以看到 (2) 式的第 j 项可写成

$$w_j^2(y_j - \hat{y}_j)^2 = (w_j y_j - w_j \hat{y}_j)^2$$

从而 (2) 式中加权的 $SS(E)$ 就是 \mathbb{R}^n 中 $W\hat{y}$ 的普通长度的平方，它可以写成 $\|W\hat{y}\|^2$ 。

现在假设向量 \hat{y} 的逼近是由矩阵 A 的列构成的，我们寻找一个 \hat{x} ，使得 $A\hat{x} = \hat{y}$ 尽可能接近 y 。然而，逼近的度量是加权的误差：

$$\|W\hat{y} - W\hat{y}\|^2 = \|W\hat{y} - WA\hat{x}\|^2$$

这样 \hat{x} 是方程

$$WA\hat{x} = W\hat{y}$$

^① 有统计学知识的读者注意：若 y_i 的测量误差是独立随机变量，且均值为零，方差分别为 $\sigma_1^2, \dots, \sigma_n^2$ ，则 (2) 中适当的权值是 $w_i^2 = 1/\sigma_i^2$ 。较大的方差误差对应较小的权值。

的（普通）最小二乘解，此最小二乘解的法方程是

$$(WA)^T W A \mathbf{x} = (WA)^T W \mathbf{y}$$

例 1 求最小二乘直线 $y = \beta_0 + \beta_1 x$ ，最佳拟合数据为 $(-2, 3), (-1, 5), (0, 5), (1, 4), (2, 3)$ 。假设后面两组数据中， y 值测量的误差比其余数据的误差大，这些数据的权值只有其余数据权值的一半。

解 如 6.6 节所示，写出矩阵 A 对应的 X 和向量 \mathbf{x} 对应的 β ，我们得到

$$X = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 1 & -1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \\ 5 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix}$$

对权矩阵，选取 W 的对角线元素为 2, 2, 2, 1 和 1。对 X 的行和 y 分别左乘 W ，得到

$$WX = \begin{bmatrix} 2 & -4 \\ 2 & -2 \\ 2 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad Wy = \begin{bmatrix} 6 \\ 10 \\ 10 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix}$$

对于法方程，计算

$$(WX)^T WX = \begin{bmatrix} 14 & -9 \\ -9 & 25 \end{bmatrix} \text{ 和 } (WX)^T Wy = \begin{bmatrix} 59 \\ -34 \end{bmatrix}$$

并且求解

$$\begin{bmatrix} 14 & -9 \\ -9 & 25 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 59 \\ -34 \end{bmatrix}$$

法方程的解（精确到 2 位有效数字）是 $\beta_0 = 4.3$ 和 $\beta_1 = 0.20$ ，期望的直线是 $y = 4.3 + 0.20x$ 。

相反，这些数据的普通最小二乘直线是 $y = 4.0 - 0.10x$ 。两条直线都显示在图 6-38 中。

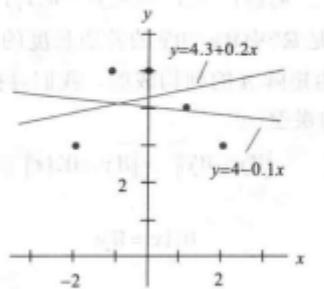


图 6-38 加权和普通的最小二乘直线

数据趋势分析

设特定函数 f 仅知道在点 t_0, \dots, t_n 处的值（也许是近似值），如果数据 $f(t_0), \dots, f(t_n)$ 中有一个“线性趋势”，那么我们期望用形如 $\beta_0 + \beta_1 t$ 的函数得到 f 的近似值。如果数据有一个“二次趋势”，那么我们会尝试用形如 $\beta_0 + \beta_1 t + \beta_2 t^2$ 的函数。这就是不同的观点下在 6.6 节已讨论过的函数。

在某些统计问题中，将线性趋势从二次趋势（也许是三次或高阶趋势）中分离出来非常重要。例如，工程师正在分析新车的性能，而 $f(t)$ 表示 t 时刻汽车和一些参照点之间的距离。如果汽车以常速连续行驶，那么 $f(t)$ 的图像应该是直线且斜率表示速度。如果突然踩下油门，那么 $f(t)$ 的图像将改变为包含二次项和三次项（由于加速的原因）。又例如，当分析一辆汽车超过另一辆汽车的能力时，工程师就会希望将二次或三次项从一次项中分离出来。

如果一个函数由形如 $y = \beta_0 + \beta_1 t + \beta_2 t^2$ 的函数来逼近，那么系数 β_2 也许不能给出期望的二次趋势的数据，原因是在统计学意义上，它和其他 β_i 相关。为进行所谓的数据的趋势分析，类似 6.7 节的例 2，我们引入空间 \mathbb{P}_n 上的内积。对属于 \mathbb{P}_n 的 p, q ，定义：

$$\langle p, q \rangle = p(t_0)q(t_0) + \dots + p(t_n)q(t_n)$$

实际上，统计学家很少需要考虑阶数高于三次或四次的趋势。所以，假设 p_0, p_1, p_2, p_3 表示 \mathbb{P}_3 的子空间 \mathbb{P}_3 的正交基，它可以将多项式 $1, t, t^2$ 和 t^3 应用格拉姆-施密特方法得到。由第 2 章的补充习题 11，存在一个属于 \mathbb{P}_n 的多项式 g ，它在 t_0, \dots, t_n 的值与未知函数 f 的值一致。令 \hat{g} 是 g 在 \mathbb{P}_3 上的正交投影（关于给定的内积），比如

$$\hat{g} = c_0 p_0 + c_1 p_1 + c_2 p_2 + c_3 p_3$$

那么 \hat{g} 称为数据的立方趋势函数， c_0, \dots, c_3 称为数据的趋势系数。其中系数 c_1 表示线性趋势， c_2 表示二次趋势， c_3 表示立方趋势。结果是如果数据具有某些性质，则这些系数相互独立。

由于 p_0, \dots, p_3 是正交的（注意 $c_i = \langle g, p_i \rangle / \langle p_i, p_i \rangle$ ），故趋势系数可逐次计算且相互独立。如果我们仅需要二次趋势，则可以忽略 p_3 和 c_3 。例如，如果我们需要确定四次趋势，则仅需要计算 $\langle g, p_4 \rangle / \langle p_4, p_4 \rangle$ ，找到一个与 \mathbb{P}_3 正交且属于 \mathbb{P}_4 的多项式 p_4 （通过格拉姆-施密特方法）。

例 2 最简单且最重要的趋势分析是点 t_0, \dots, t_n 被调整后，它们均匀分布且总和为零。用二次趋势函数拟合数据 $(-2, 3), (-1, 5), (0, 5), (1, 4), (2, 3)$ 。

解 对 6.7 节中例 5 中的正交多项式的 t 坐标重新度量，可得

多项式:	p_0	p_1	p_2	数据: g
向量值:	$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -2 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ -2 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 3 \\ 5 \\ 5 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix}$

计算仅包含这些向量，没有涉及特别的正交多项式公式。在 \mathbb{P}_2 中，用多项式对数据的最佳逼近是下面给出的正交投影：

$$\begin{aligned}\hat{p} &= \frac{\langle g, p_0 \rangle}{\langle p_0, p_0 \rangle} p_0 + \frac{\langle g, p_1 \rangle}{\langle p_1, p_1 \rangle} p_1 + \frac{\langle g, p_2 \rangle}{\langle p_2, p_2 \rangle} p_2 \\ &= \frac{20}{5} p_0 - \frac{1}{10} p_1 - \frac{7}{14} p_2\end{aligned}$$

且

$$\hat{p}(t) = 4 - 0.1t - 0.5(t^2 - 2) \quad (3)$$

由于 p_2 的系数不是足够小, 因此一个合理的结果是趋势至少是二次. 这个结论可从图 6-39 得到验证.

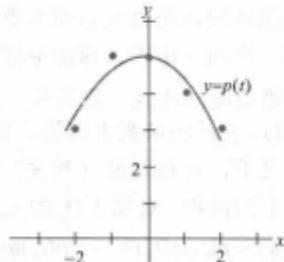


图 6-39 用二次趋势函数逼近

傅里叶级数 (需要微积分知识)

连续函数常用正弦和余弦函数的线性组合来逼近. 例如, 一个连续函数可以表示一个声波、某类电信号或力学振动系统的运动等.

为简单起见, 我们考虑 $0 \leq t \leq 2\pi$ 上的函数, 结果是任何 $C[0, 2\pi]$ 上的函数可以由下列形式的函数任意逼近:

$$\frac{a_0}{2} + a_1 \cos t + \cdots + a_n \cos nt + b_1 \sin t + \cdots + b_n \sin nt \quad (4)$$

如果自然数 n 足够大, (4) 中的函数称为三角多项式. 如果 a_n 和 b_n 不同时为零, 则多项式称为是 n 阶的. 三角多项式和 $C[0, 2\pi]$ 上的其他函数之间的联系依赖于下列事实: 对任何 $n \geq 1$, 集合

$$\{1, \cos t, \cos 2t, \dots, \cos nt, \sin t, \sin 2t, \dots, \sin nt\} \quad (5)$$

关于如下定义的内积是正交的:

$$\langle f, g \rangle = \int_0^{2\pi} f(t)g(t)dt \quad (6)$$

这个正交性可从下面的例题和习题 5 及习题 6 得到验证.

例 3 空间 $C[0, 2\pi]$ 具有形如(6)的内积, 并且 m 和 n 是不相等的正整数. 证明 $\cos mt$ 和 $\cos nt$ 正交.

解 利用三角恒等式. 如果 $m \neq n$, 则

$$\begin{aligned}\langle \cos mt, \cos nt \rangle &= \int_0^{2\pi} \cos mt \cos nt dt \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} [\cos(mt+nt) + \cos(mt-nt)] dt\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} \left[\frac{\sin(mt+nt)}{m+n} + \frac{\sin(mt-nt)}{m-n} \right]_0^{2\pi} \\ = 0$$

■

设 W 是 $C[0,2\pi]$ 中的子空间且由 (5) 中的函数所生成. 对 $C[0,2\pi]$ 中的函数 f , W 中用函数对 f 的最佳逼近称为 f 在 $[0,2\pi]$ 上的 n 阶傅里叶逼近. 由于 (5) 中的函数是正交的, 因此给出的最佳逼近是 W 上的正交投影. 在这种情形下, (4) 式中的系数 a_k 和 b_k 称为 f 的傅里叶系数. 标准的正交投影公式表明

$$a_k = \frac{\langle f, \cos kt \rangle}{\langle \cos kt, \cos kt \rangle}, \quad b_k = \frac{\langle f, \sin kt \rangle}{\langle \sin kt, \sin kt \rangle}, \quad k \geq 1$$

习题 7 要求证明 $\langle \cos kt, \cos kt \rangle = \pi$ 和 $\langle \sin kt, \sin kt \rangle = \pi$. 因此

$$a_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(t) \cos kt dt, \quad b_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(t) \sin kt dt \quad (7)$$

正交投影中的 (常数) 函数 1 的系数是

$$\frac{\langle f, 1 \rangle}{\langle 1, 1 \rangle} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(t) \cdot 1 dt = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(t) \cos(0 \cdot t) dt \right] = \frac{a_0}{2}$$

其中 a_0 是 (7) 式中 $k=0$ 的情形, 这就解释了 (4) 中的常数项为什么写成 $a_0/2$.

例 4 求函数 $f(t)=t$ 在区间 $[0,2\pi]$ 上的 n 阶傅里叶逼近.

解 计算

$$\frac{a_0}{2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} t dt = \frac{1}{2\pi} \left[\frac{1}{2} t^2 \right]_0^{2\pi} = \pi$$

当 $k > 0$ 时, 利用分部积分,

$$a_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} t \cos kt dt = \frac{1}{\pi} \left[\frac{1}{k^2} \cos kt + \frac{t}{k} \sin kt \right]_0^{2\pi} = 0$$

$$b_k = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} t \sin kt dt = \frac{1}{\pi} \left[\frac{1}{k^2} \sin kt - \frac{t}{k} \cos kt \right]_0^{2\pi} = -\frac{2}{k}$$

这样, $f(t)=t$ 的 n 阶傅里叶逼近是

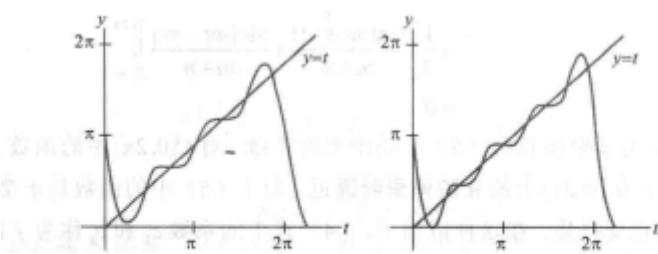
$$\pi - 2 \sin t - \sin 2t - \frac{2}{3} \sin 3t - \cdots - \frac{2}{n} \sin nt$$

图 6-40 显示了 f 的 3 阶和 4 阶傅里叶逼近.

函数 f 与傅里叶逼近之差的范数称为逼近的均方误差. (术语“均”是相对于积分定义中的范数而言的.) 可以证明, 当傅里叶级数的阶数增加时, 均方误差趋于零. 由于这个原因, 它常常写成

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{m=1}^{\infty} (a_m \cos mt + b_m \sin mt)$$

$f(t)$ 的这个表达式称为 f 在 $[0,2\pi]$ 上的傅里叶级数. 例如, 项 $a_m \cos mt$ 是 f 在由 $\cos mt$ 生成的一维子空间上的投影.



a) 3 阶逼近

b) 4 阶逼近

图 6-40 函数 $f(t)=t$ 的傅里叶逼近

2.7 条件优化

工程师、经济学家、科学家和数学家常常要寻找在一些特定集合内的 x 值，使得二次型 $Q(x)$ 取最大值或最小值。具有代表性的是，这类问题可化为 x 是在一组单位向量中的变量的优化问题。下面我们将看到，这类条件优化问题有一个有趣且精彩的解。例 6 及后面的 7.5 节将讨论如何从实际中引出这类问题。

\mathbb{R}^n 中的一个单位向量 x 可用以下几种等价形式来描述：

$$\|x\|=1, \|x\|^2=1, x^T x=1$$

和

$$x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2 = 1 \quad (1)$$

在应用中经常使用 $x^T x=1$ 的展开式 (1)。

当一个二次型没有交叉乘积项时，可以很容易得到在 $x^T x=1$ 的条件下 $Q(x)$ 的最大值和最小值。

例 1 求 $Q(x)=9x_1^2+4x_2^2+3x_3^2$ 在限制条件 $x^T x=1$ 下的最大值和最小值。

解 由于 x_1^2 和 x_3^2 是非负的，因此

$$4x_2^2 \leq 9x_2^2, \quad 3x_3^2 \leq 9x_3^2$$

所以当 $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$ 时，

$$\begin{aligned} Q(x) &= 9x_1^2 + 4x_2^2 + 3x_3^2 \\ &\leq 9x_1^2 + 9x_2^2 + 9x_3^2 \\ &= 9(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \\ &= 9 \end{aligned}$$

因此当 x 为单位向量时， $Q(x)$ 的最大值不超过 9。更进一步，当 $x=(1, 0, 0)$ 时， $Q(x)=9$ 。从而 9 是 $Q(x)$ 在 $x^T x=1$ 条件下的最大值。

为求出 $Q(\mathbf{x})$ 的最小值, 注意到

$$9x_1^2 \geq 3x_1^2, 4x_2^2 \geq 3x_2^2$$

因此当 $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$ 时,

$$Q(\mathbf{x}) \geq 3x_1^2 + 3x_2^2 + 3x_3^2 = 3(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) = 3$$

当 $x_1 = 0, x_2 = 0, x_3 = 1$ 时, $Q(\mathbf{x}) = 3$, 从而 3 是 $Q(\mathbf{x})$ 在 $\mathbf{x}^\top \mathbf{x} = 1$ 条件下的最小值. ■

从例 1 可以看到, 二次型的矩阵具有特征值 9, 4 和 3, 且最大和最小特征值分别等于在限制条件下的 $Q(\mathbf{x})$ 的最大值和最小值. 我们将会看到, 此结论对任何二次型都是成立的.

例 2 令 $A = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 7 \end{bmatrix}$, 当 \mathbf{x} 属于 \mathbb{R}^2 时, $Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top A \mathbf{x}$, 图 7-8 是 Q 的图形表示. 图 7-9 表示圆柱体内部的一部分, 圆柱与曲面的截面是点集 (x_1, x_2, z) , 表示在 $x_1^2 + x_2^2 = 1$ 情况下的 $z = Q(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$. 这些点的“高度值”是 $Q(\mathbf{x})$ 的约束值, 从几何意义上讲, 条件优化问题确定的是截面曲线上最高点和最低点的位置.

曲线上的两个最高点在 $x_1 x_2$ 平面上之上 7 个单位, 出现在点 $x_1 = 0$ 和 $x_2 = \pm 1$ 处, 这些点对应于 A 的特征值 7 和特征向量 $\mathbf{x} = (0, 1)$ 及 $-\mathbf{x} = (0, -1)$. 类似地, 曲线上的两个最低点在 $x_1 x_2$ 平面上之上 3 个单位, 它们对应于特征值 3 和特征向量 $(1, 0)$ 及 $(-1, 0)$.

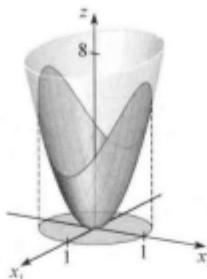


图 7-8 $z = 3x_1^2 + 7x_2^2$

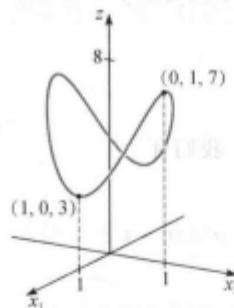


图 7-9 $z = 3x_1^2 + 7x_2^2$ 和圆柱 $x_1^2 + x_2^2 = 1$ 的交线 ■

图 7-9 中交线上的每一点对应的 z 坐标在 3 和 7 之间, 且对任何 3 和 7 之间的数 t , 存在一个单位向量 \mathbf{x} 使得 $Q(\mathbf{x}) = t$. 换言之, 所有 $\mathbf{x}^\top A \mathbf{x}$ 的可能值在 $\|\mathbf{x}\| = 1$ 条件下的集合是闭区间 $3 \leq t \leq 7$.

可以证明, 对任何对称矩阵 A , 在 $\|\mathbf{x}\| = 1$ 条件下, $\mathbf{x}^\top A \mathbf{x}$ 所有可能值的集合是实轴上的闭区间 (见习题 13). 分别用 m 和 M 表示区间的左端点和右端点, 即取

$$m = \min\{\mathbf{x}^\top A \mathbf{x} : \|\mathbf{x}\| = 1\}, M = \max\{\mathbf{x}^\top A \mathbf{x} : \|\mathbf{x}\| = 1\} \quad (2)$$

习题 12 要求证明, 如果 λ 是 A 的一个特征值, 那么 $m \leq \lambda \leq M$. 正像例 2 一样, 下面的定理说明 m 和 M 自身也是 A 的特征值.^②

② (2) 式中的 min 和 max 以及定理 6 中的最小和最大是指实数的自然顺序而不是指量级的最小和最大.

定理 6 设 A 是对称矩阵, 且 m 和 M 的定义如(2)式所示, 那么 M 是 A 的最大特征值 λ_1 , m 是 A 的最小特征值, 如果 x 是对应于 M 的单位特征向量 u_1 , 那么 $x^T Ax$ 的值等于 M . 如果 x 是对应于 m 的单位特征向量, 那么 $x^T Ax$ 的值等于 m .

证 A 的正交对角化是 PDP^{-1} , 我们知道

$$\text{当 } x = Py \text{ 时, } x^T Ax = y^T Dy \quad (3)$$

同样

$$\text{对所有 } y, \|x\| = \|Py\| = \|y\|$$

这是因为 $P^T P = I$, 且 $\|Py\|^2 = (Py)^T Py = y^T P^T Py = y^T y = \|y\|^2$. 特别地, $\|y\|=1$ 充分必要条件是 $\|x\|=1$. 这样, 如果 x 和 y 是任意单位向量, 那么 $x^T Ax$ 和 $y^T Dy$ 可以认为是具有同样值的集合.

为简化记号, 假设 A 是以 $a \geq b \geq c$ 为特征值的 3×3 矩阵, 重排 P 的列 (特征向量), 使得 $P = [u_1 \ u_2 \ u_3]$ 和

$$D = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{bmatrix}$$

对给定 \mathbb{R}^3 中的单位向量 y , 其坐标为 y_1, y_2, y_3 , 注意到

$$\begin{aligned} ay_1^2 &= ay_1^2 \\ by_2^2 &\leq ay_1^2 \\ cy_3^2 &\leq ay_1^2 \end{aligned}$$

将不等式相加, 我们有

$$\begin{aligned} y^T Dy &= ay_1^2 + by_2^2 + cy_3^2 \\ &\leq ay_1^2 + ay_2^2 + ay_3^2 \\ &= a(y_1^2 + y_2^2 + y_3^2) \\ &= a\|y\|^2 = a \end{aligned}$$

这样由 M 的定义可知, $M \leq a$. 然而, 当 $y = e_1 = (1, 0, 0)$ 时, $y^T Dy = a$, 所以, 事实上 $M = a$.

由(3)可知, 对应于 $y = e_1$ 的向量 x 是矩阵 A 的特征向量 u_1 , 其原因是

$$x = Pe_1 = [u_1 \ u_2 \ u_3] \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = u_1$$

这样 $M = a = e_1^T De_1 = u_1^T Au_1$, 从而证明了关于 M 的论断. 同理可证明 m 是最小特征值即 c 值, 且 $x^T Ax$ 的这个值当 $x = Pe_3 = u_3$ 时可以取到. ■

例 3 令 $A = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \\ 1 & 1 & 4 \end{bmatrix}$, 求二次型 $x^T Ax$ 在限制条件 $x^T x = 1$ 下的最大值, 并求一个可以取到

该最大值的单位向量.

解 由定理 6, 只需求出 A 的最大特征值, 其特征多项式是

$$0 = -\lambda^3 + 10\lambda^2 - 27\lambda + 18 = -(\lambda - 6)(\lambda - 3)(\lambda - 1)$$

最大特征值为 6.

限制条件下 $\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x}$ 的最大值可以在特征值 $\lambda = 6$ 对应的单位特征向量 \mathbf{x} 处获得. 解 $(\mathbf{A} - 6I)\mathbf{x} = \mathbf{0}$,

$$\text{可得特征向量 } \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \text{ 和 } \mathbf{u}_1 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \\ 1/\sqrt{3} \end{bmatrix}.$$

■

在定理 7 和稍后的应用实例中, 要计算 $\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x}$ 的值, 其中附加的限制条件是单位向量 \mathbf{x} .

定理 7 设 A, λ_1 和 \mathbf{u}_1 如定理 6 所示. 在如下条件限制下:

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{x} = 1, \quad \mathbf{x}^\top \mathbf{u}_1 = 0$$

$\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x}$ 的最大值是第二大特征值 λ_2 , 且这个最大值可以在 \mathbf{x} 是对应于 λ_2 的特征向量 \mathbf{u}_2 处达到.

定理 7 的证明和上面讨论的类似, 即定理化为二次型的矩阵是对角矩阵的情形, 下面的例子给出对角矩阵情形下证明的思路.

例 4 求 $9x_1^2 + 4x_2^2 + 3x_3^2$ 的最大值, 其限制条件是 $\mathbf{x}^\top \mathbf{x} = 1$ 和 $\mathbf{x}^\top \mathbf{u}_1 = 0$, 其中 $\mathbf{u}_1 = (1, 0, 0)$. 注意到 \mathbf{u}_1 是二次型的矩阵的最大特征值 $\lambda = 9$ 对应的单位特征向量.

解 如果 \mathbf{x} 的坐标为 x_1, x_2, x_3 , 那么限制 $\mathbf{x}^\top \mathbf{u}_1 = 0$ 简单意味着 $x_1 = 0$. 对这样的一个单位向量, $x_2^2 + x_3^2 = 1$ 且

$$\begin{aligned} 9x_1^2 + 4x_2^2 + 3x_3^2 &= 4x_2^2 + 3x_3^2 \\ &\leq 4x_2^2 + 4x_3^2 \\ &= 4(x_2^2 + x_3^2) \\ &= 4 \end{aligned}$$

在这样的限制条件下, 二次型的最大值不超过 4, 且这个最大值可在 $\mathbf{x} = (0, 1, 0)$ 处达到, 而这就是二次型的矩阵的第二大特征值对应的特征向量. ■

例 5 令 A 表示例 3 中的矩阵, 且 \mathbf{u}_1 是对应于矩阵 A 的最大特征值的特征向量, 求 $\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x}$ 的最大值, 其限制条件是

$$\mathbf{x}^\top \mathbf{x} = 1, \quad \mathbf{x}^\top \mathbf{u}_1 = 0 \quad (4)$$

解 由例 3 可知, A 的第二大特征值是 $\lambda = 3$. 解方程 $(A - 3I)\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 求出 $\lambda = 3$ 对应的特征向量, 且单位化得到

$$\mathbf{u}_2 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{6} \\ 1/\sqrt{6} \\ -2/\sqrt{6} \end{bmatrix}$$

由于特征向量对应于不同的特征值, 故向量 \mathbf{u}_2 和 \mathbf{u}_1 自然互相垂直. 这样, 在条件 (4) 的限制下, $\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x}$ 的最大值是 3, 且在 $\mathbf{x} = \mathbf{u}_2$ 处可以达到. ■

下面的定理是定理 7 的推广, 它和定理 6 一起给出矩阵 A 所有特征值的有用特性. 具体证明从略.

定理 8 设 A 是一个 $n \times n$ 对称矩阵, 其正交对角化为 $A = PDP^{-1}$, 将对角矩阵 D 上的元素重新排列, 使得 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$, 且 P 的列是其对应的单位特征向量 u_1, \dots, u_n . 那么对 $k = 2, \dots, n$, 在以下限制条件下:

$$\mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1, \mathbf{x}^T \mathbf{u}_1 = 0, \dots, \mathbf{x}^T \mathbf{u}_{k-1} = 0$$

$\mathbf{x}^T A \mathbf{x}$ 的最大值是特征值 λ_k , 且这个最大值在 $\mathbf{x} = \mathbf{u}_k$ 处可以达到.

定理 8 在 7.4 节中和 7.5 节中非常有用, 下面的应用仅仅需要定理 6.

例 6 在下一年度, 一个县政府计划修 x 百英里的公路和桥梁, 并且修整 y 百英亩的公园和娱乐场所. 政府部门必须确定在两个项目上如何分配它的资源(资金、设备和劳动等). 如果更划算的话, 可以同时开始两个项目, 而不是仅开始一个项目, 那么 x 和 y 必须满足下面的限制条件:

$$4x^2 + 9y^2 \leq 36$$

见图 7-10. 每个阴影可行集中的点 (x, y) 表示一个可能的该年度的公共工作计划. 在限制曲线 $4x^2 + 9y^2 = 36$ 上的点使资源利用达到最大可能.

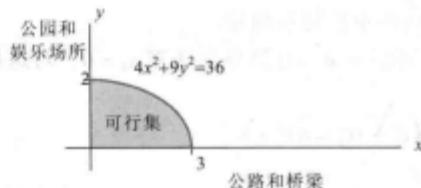


图 7-10 公共工作计划

为选择它的公共工作计划, 县政府需要考虑居民的意见. 为度量居民分配各类工作计划 (x, y) 的值或效用, 经济学家有时利用下面的函数:

$$q(x, y) = xy$$

其中使 $q(x, y)$ 为常数的 (x, y) 点的集合称为无差别曲线. 从图 7-11 中可以看到三条这样的曲线, 沿着无差别曲线的点对应的选择表示居民作为一个群体有相同的价值观^②. 求公共工作计划, 使得效用函数 q 最大.

解 限制条件的方程 $4x^2 + 9y^2 = 36$ 并没有描述一个单位向量集, 但变量代换可以修正这个问题. 重写限制条件为如下形式:

$$\left(\frac{x}{3}\right)^2 + \left(\frac{y}{2}\right)^2 = 1$$

定义



② 关于无差别曲线的讨论, 可参考 Michael D. Intriligator, Ronald G. Bodkin, and Cheng Hsiao, *Econometric Models, Techniques, and Application* (Upper Saddle River, NJ: Prentice-Hall, 1996).

$$x_1 = \frac{x}{3}, x_2 = \frac{y}{2}, \text{ 即 } x = 3x_1, y = 2x_2$$

从而限制条件变成

$$x_1^2 + x_2^2 = 1$$

效用函数变成 $q(3x_1, 2x_2) = (3x_1)(2x_2) = 6x_1x_2$. 取 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$, 那么原问题变为, 在限制条件 $\mathbf{x}^\top \mathbf{x} = 1$

下 $Q(\mathbf{x}) = 6x_1x_2$ 的最大值. 注意到 $Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top A\mathbf{x}$, 其中

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 3 \\ 3 & 0 \end{bmatrix}$$

A 的特征值是 ± 3 , 对应于 $\lambda = 3$ 的特征向量是 $\begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$, 对应于 $\lambda = -3$ 的特征向量是 $\begin{bmatrix} -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$,

这样 $Q(\mathbf{x}) = q(x_1, x_2)$ 的最大值是 3, 在 $x_1 = 1/\sqrt{2}$ 和 $x_2 = 1/\sqrt{2}$ 处可以达到.

根据原来的变量, 最优的公共工作计划是修建 $x = 3x_1 = 3/\sqrt{2} \approx 2.1$ 百英里的公路和桥梁以及 $y = 2x_2 = \sqrt{2} \approx 1.4$ 百英亩的公园和娱乐场所. 最优公共工作计划是限制曲线和无差别曲线 $q(x, y) = 3$ 恰好相交的点, 具有更大效用的点 (x, y) 位于和限制曲线不相交的无差别曲线上, 见图 7-11.

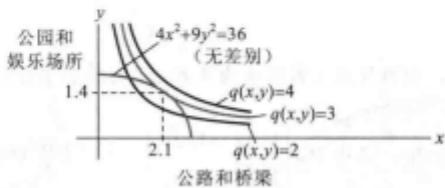


图 7-11 最优公共工作计划是 $(2.1, 1.4)$

2.8 主成分分析

本章介绍性实例中的卫星图像问题给出一个多维或多变量数据的例子，组织数据后使得数据集合中的每组数据可看成是 \mathbb{R}^n 的点（向量）。本节的主要目标是介绍主成分分析的方法，用于分析这类多维数据。计算将说明正交对角化和奇异值分解的应用方法。

主成分分析可用于任何数据，包括测量清单上采集的对象或个体。例如，研究生产塑料材料的化学过程时，为了监控生产过程，在材料生产过程中取得 300 个样本，且每一个样本经过 8 个一组的测试，如熔化点、密度、黏性、抗拉强度等。实验室的每一个样本报告是一个属于 \mathbb{R}^8 的向量，这类向量集合形成一个 8×300 的矩阵，称为观测矩阵。

粗略地讲，我们可以说控制过程的数据是八维的，下面两个例子中描述的数据可以用图形给出。

例 1 一个二维数据的例子是 N 个大学生关于体重和身高的一组数据。令 X_j 表示 \mathbb{R}^2 中的观测向量，它列出第 j 个学生的体重和身高。如果用 w 表示体重， h 表示身高，那么观测矩阵的形式为

$$\begin{bmatrix} w_1 & w_2 & \cdots & w_N \\ h_1 & h_2 & \cdots & h_N \end{bmatrix}$$

↑ ↑ ↑
 $X_1 \quad X_2 \quad \cdots \quad X_N$



观测向量的集合可以形象地表示为一个二维散列图，见

图 7-18.

■ 图 7-18 观测向量 X_1, \dots, X_N 的散列图

例 2 本章的介绍性实例中，关于美国内华达州铁路峡谷的前三幅图可以作为某区域的具有三个光谱分量的一个图像，原因是它们在三个独立的波长同时给出该区域的度量，每幅图给出同一自然区域的不同信息。例如，每幅图中位于左上角的第一像素对应地面的同一位置（大约 30 米 \times 30 米）。每一个像素对应着 \mathbb{R}^3 中的一个观测向量，它列出了该像素在三个光谱段中的信号强度。

典型的图像是 2000 \times 2000 像素，使得图像有 400 万像素。图像的数据形成一个 3 行和 400 万列的矩阵（列可以调整为方便的次序）。在这种情形下，数据的“多维”特征是指 3 个光谱维数，而不是自然属于任一图形的二维空间维数。数据也许如图 7-19 所示，形象地表示为 \mathbb{R}^3 中的 400 万个点。

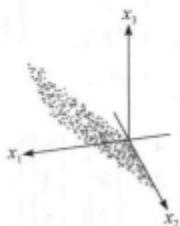


图 7-19 一幅卫星图像中光谱数据的散列图 ■

均值和协方差

为准备主成分分析, 令 $[X_1 \cdots X_N]$ 是如上描述的一个 $p \times N$ 观测矩阵. 观测向量 X_1, \dots, X_N 的样本均值 \bar{M} 由下式给出:

$$\bar{M} = \frac{1}{N}(X_1 + \cdots + X_N)$$

对图 7-18 中的数据, 样本均值是散列图的“中心”. 对 $k=1, \dots, N$, 令

$$\hat{X}_k = X_k - \bar{M}$$

$p \times N$ 矩阵的列

$$B = [\hat{X}_1 \hat{X}_2 \cdots \hat{X}_N]$$

具有零样本均值, 这样的 B 称为平均偏差形式. 当图 7-18 中的数据减去样本均值后, 得到的散列图具有图 7-20 的形式.

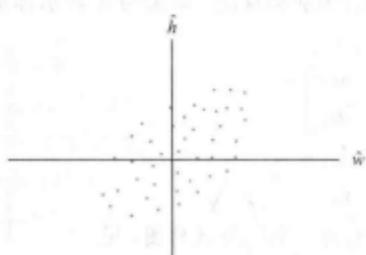


图 7-20 平均偏差形式的体重-身高数据

(样本) 协方差矩阵是一个 $p \times p$ 矩阵 S , 其定义为

$$S = \frac{1}{N-1} BB^T$$

由于任何具有 BB^T 形式的矩阵是半正定的, 所以 S 也是半正定的. (见 7.2 节的习题 25, 互换 B 和 B^T .)

例 3 从一个总体中随机取出 4 个样本个体作三次测量, 每一个样本的观测向量为:

$$X_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}, X_2 = \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ 13 \end{bmatrix}, X_3 = \begin{bmatrix} 7 \\ 8 \\ 1 \end{bmatrix}, X_4 = \begin{bmatrix} 8 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix}$$

计算样本均值和协方差矩阵.

解 样本均值是

$$\bar{M} = \frac{1}{4} \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 4 \\ 2 \\ 13 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 7 \\ 8 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 8 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix} \right) = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 20 \\ 16 \\ 20 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix}$$

从 X_1, \dots, X_4 中减去样本均值, 我们得到

$$\hat{X}_1 = \begin{bmatrix} -4 \\ -2 \\ -4 \end{bmatrix}, \hat{X}_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \\ 8 \end{bmatrix}, \hat{X}_3 = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ -4 \end{bmatrix}, \hat{X}_4 = \begin{bmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

并且

$$B = \begin{bmatrix} -4 & -1 & 2 & 3 \\ -2 & -2 & 4 & 0 \\ -4 & 8 & -4 & 0 \end{bmatrix}$$

样本协方差矩阵为

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{3} \begin{bmatrix} -4 & -1 & 2 & 3 \\ -2 & -2 & 4 & 0 \\ -4 & 8 & -4 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -4 & -2 & -4 \\ -1 & -2 & 8 \\ 2 & 4 & -4 \\ 3 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 30 & 18 & 0 \\ 18 & 24 & -24 \\ 0 & -24 & 96 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 & 6 & 0 \\ 6 & 8 & -8 \\ 0 & -8 & 32 \end{bmatrix} \quad \blacksquare \end{aligned}$$

为了讨论 $S = [s_{ij}]$ 中的元素, 令 \mathbf{X} 表示在观测向量集合中变化的向量, 用 x_1, \dots, x_p 表示 \mathbf{X} 的坐标, 那么例如 x_1 是一个在 X_1, \dots, X_N 集合中变化的第一个坐标的数值. 对 $j = 1, \dots, p$, S 中的对角元素 s_{jj} 称为 x_j 的方差.

x_j 的方差用来度量 x_j 值的分散性 (见习题 13). 在例 3 中, x_1 的方差是 10, x_3 的方差是 32, 32 大于 10 的事实说明, 对应向量中第三个元素的集合包含比第一个元素的集合更大的取值范围.

数据的总方差是指 S 中对角线上方差的总和. 一般地, 一个方阵 S 中对角线元素之和称为矩阵的迹, 记作 $\text{tr}(S)$. 这样

$$\{\text{总方差}\} = \text{tr}(S)$$

S 中的元素 s_{ij} ($i \neq j$) 称为 x_i 和 x_j 的协方差. 观察例 3 中 x_1 和 x_3 之间的协方差是零, 这是因为 S 中的(1,3)元素是零. 统计学家称 x_1 和 x_3 是无关的. 如果大部分或所有变量 x_1, \dots, x_p 是无关的, 即当 X_1, \dots, X_N 的协方差矩阵是对角阵或几乎是对角阵时, 则 X_1, \dots, X_N 中多变量数据的分析可以简化.

主成分分析

为简单起见, 假设矩阵 $[X_1 \dots X_N]$ 已经是平均偏差形式. 主成分分析的目标是找到一个 $p \times p$ 正交矩阵 $P = [\mathbf{u}_1 \dots \mathbf{u}_p]$, 确定一个变量代换 $\mathbf{X} = PY$, 或

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_p \end{bmatrix} = [\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \dots \ \mathbf{u}_p] \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_p \end{bmatrix}$$

并具有新的变量 y_1, \dots, y_p 两两无关的性质, 且整理后的方差具有递减顺序.

变量的正交变换 $\mathbf{X} = P\mathbf{Y}$ 说明, 每一个观测向量 \mathbf{X}_k 得到一个“新名称” \mathbf{Y}_k , 使得 $\mathbf{X}_k = P\mathbf{Y}_k$. 注意到 \mathbf{Y}_k 是 \mathbf{X}_k 关于 P 的列的坐标向量, 且对 $k=1, \dots, N$ 有 $\mathbf{Y}_k = P^{-1}\mathbf{X}_k = P^T\mathbf{X}_k$.

不难验证, 对任何正交矩阵 P , $\mathbf{Y}_1, \dots, \mathbf{Y}_N$ 的协方差是 P^TSP (习题 11). 于是, 期望的正交矩阵 P 是一矩阵使得 P^TSP 为对角矩阵. 设 D 是对角矩阵且 S 的特征值 $\lambda_1, \dots, \lambda_p$ 位于对角线上, 重新整理使得 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p \geq 0$, 并令 P 是正交矩阵, 它的列是对应的单位特征向量 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_p$, 那么 $S = PDP^T$ 且 $P^TSP = D$.

协方差矩阵 S 的单位特征向量 $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_p$ 称为(观测矩阵中的)数据的主成分. 第一主成分是 S 中最大特征值对应的特征向量. 第二主成分是 S 中第二大特征值对应的特征向量, 以此类推.

第一主成分 \mathbf{u}_1 可用下列方式确定新变量 y_1 . 设 c_1, \dots, c_p 是 \mathbf{u}_1 中的元素, 由于 \mathbf{u}_1^T 是 P^T 的行, 故方程 $\mathbf{Y} = P^T\mathbf{X}$ 表明

$$y_1 = \mathbf{u}_1^T \mathbf{X} = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_p x_p$$

于是 y_1 是原变量 x_1, \dots, x_p 的线性组合, 并用特征向量 \mathbf{u}_1 中的元素作为权值. 用同样的方式, \mathbf{u}_2 确定变量 y_2 , 以此类推.

例 4 铁路峡谷(例 2)的多光谱图像的初始数据包含 \mathbb{R}^3 中 400 万个向量, 其协方差矩阵是^①

$$S = \begin{bmatrix} 2382.78 & 2611.84 & 2136.20 \\ 2611.84 & 3106.47 & 2553.90 \\ 2136.20 & 2553.90 & 2650.71 \end{bmatrix}$$

求数据的主成分, 并列出由第一主成分确定的新变量.

解 S 的特征值和相关的主成分(单位特征向量)是

$$\lambda_1 = 7614.23 \quad \lambda_2 = 427.63 \quad \lambda_3 = 98.10$$

$$\mathbf{u}_1 = \begin{bmatrix} 0.5417 \\ 0.6295 \\ 0.5570 \end{bmatrix} \quad \mathbf{u}_2 = \begin{bmatrix} -0.4894 \\ -0.3026 \\ 0.8179 \end{bmatrix} \quad \mathbf{u}_3 = \begin{bmatrix} 0.6834 \\ -0.7157 \\ 0.1441 \end{bmatrix}$$

为简单起见用小数点后两位小数, 第一主成分的变量是

$$y_1 = 0.54x_1 + 0.63x_2 + 0.56x_3$$

在本章介绍性实例中, 这个方程用于生成图 7-1d. 变量 x_1, x_2, x_3 是三个光谱段中的信号强度. 将 x_i 的值转化为介于黑色和白色之间的灰度, 生成图 7-1a. 类似地, x_2 和 x_3 的值分别生成图 7-1b 和图 7-1c. 对图 7-1d 中的每一个像素, 用 y_1 计算得到灰度值, 即加权的 x_1, x_2, x_3 的线性组合. 在这个意义上, 图 7-1d“显示”数据的第一主成分. ■

在例 4 中, 变换后数据的协方差矩阵用变量 y_1, y_2, y_3 表示为

$$D = \begin{bmatrix} 7614.23 & 0 & 0 \\ 0 & 427.63 & 0 \\ 0 & 0 & 98.10 \end{bmatrix}$$

^① 例 4 和习题 5、习题 6 中的数据由马里兰州罗克维尔市地球卫星公司提供.

尽管 D 比原来的协方差矩阵 S 明显简单，但构造新变量的优点仍然不明显。然而，变量 y_1, y_2, y_3 的方差出现在对角矩阵 D 的对角线上，并且明显看出 D 中第一个方差比其余两个大得多。如我们将要看到的，这个事实允许将数据当作一维而不是三维的。

多变量数据的降维

对大多数数据的变化或动态范围，当新变量 y_1, \dots, y_p 中的一些变量的变化较小时，主成分分析有潜在的应用价值。

可以证明变量的正交变换 $\mathbf{X} = P\mathbf{Y}$ 不改变数据的总方差。（粗略地讲，这个结论是真的，其原因是左乘 P 不改变向量的长度或它们之间的夹角，见习题 12.）这说明，如果 $S = PDP^T$ ，那么 $\{x_1, \dots, x_p\}$ 的总方差 $= \{y_1, \dots, y_p\}$ 的总方差 $= \text{tr}(D) = \lambda_1 + \dots + \lambda_p$ 。
 y_j 的方差是 λ_j ，商 $\lambda_j / \text{tr}(S)$ 度量总体方差成分中被 y_j “说明”或“记录”的比例。

例 5 计算铁路峡谷例题中各种方差占总方差的百分比，显示主成分图形中的多光谱数据，这在本章介绍性实例的图 7-1d-f 中已经画出。

解 数据的总方差是

$$\text{tr}(D) = 7614.23 + 427.63 + 98.10 = 8139.96$$

(可验证这个数等于 $\text{tr}(S)$.) 主成分占总方差的百分比分别是

$$\begin{array}{lll} \text{第一成分} & \text{第二成分} & \text{第三成分} \\ \frac{7614.23}{8139.96} = 93.5\% & \frac{427.63}{8139.96} = 5.3\% & \frac{98.10}{8139.96} = 1.2\% \end{array}$$

其意义是，地球资源卫星关于铁路峡谷地区收集的 93.5% 的信息显示在图 7-1d 上，5.3% 显示在图 7-1e 上，而仅有剩余的 1.2% 显示在图 7-1f 中。■

例 5 的计算表明，数据在第三个坐标上实际上没有变化， y_3 的值几乎接近于零。从几何意义上讲，数据点几乎位于平面 $y_3 = 0$ 上，且它们的位置可由已知的 y_1, y_2 相当精确地确定。实际上， y_2 的方差也相对很小，这说明点集几乎位于一条直线上，数据几乎是一维的。见图 7-19，其数据像一个冰棒棍。

主成分变量的特征

如果 y_1, \dots, y_p 是来自一个 $P \times N$ 观测矩阵的主成分分析，那么 y_1 的方差在下列意义下可能尽量大：如果 \mathbf{u} 是任意一个单位向量且 $y = \mathbf{u}^T \mathbf{X}$ ，那么当 \mathbf{X} 在原来数据 $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N$ 范围变化时， y 的方差值为 $\mathbf{u}^T S \mathbf{u}$ 。由 7.3 节的定理 8，对于所有单位向量 \mathbf{u} ， $\mathbf{u}^T S \mathbf{u}$ 的最大值就是 S 的最大特征值 λ_1 ，且这个方差可以在 \mathbf{u} 等于对应的特征向量 \mathbf{u}_1 处达到。同样的方式，定理 8 表明 y_2 的方差最大值可能出现在与 y_1 无关的所有变量 $y = \mathbf{u}^T \mathbf{X}$ 中。同样， y_3 的方差最大值可能出现在与 y_1 和 y_2 都无关的所有变量中，以此类推。