线性代数笔记整理V2.2

陈鸿峥

2019.04*

目录

1	矩阵与线性方程组			
	1.1 基本概念	2		
	1.2 矩阵的逆	3		
	1.3 分块矩阵	6		
	1.4 行列式	7		
2	向量空间	10		
	2.1 基本定义	10		
	2.2 四个基本子空间	11		
	2.3 线性变换	12		
	2.4 基、维度与秩	14		
	2.5 坐标系统	17		
3	内积空间	19		
	3.1 基本定义	19		
	3.2 正交	19		
	3.3 正交矩阵	21		
4	特征值与特征向量	22		
	4.1 基本定义	22		
	4.2 对角化	23		
5	对称矩阵与二次型	26		
	5.1 谱分解	26		
	5.2 奇异值分解	27		
	5.3 二次型	28		
	5.4 带约束的最值问题	29		

^{*}Build 20190415

6	仿射	空间	29
	6.1	仿射组合与凸组合	
	6.2	超平面	
	6.3	多胞形	
	6.4	曲线和表面	32
7	拓展		33
	7.1	线性模型与最小二乘	
		马尔可夫链	
	7.3	复数特征值	34
	7.4	离散动力系统	
	7.5	估计特征值	
	7.6	傅里叶级数	
	7.7	统计学应用	35

1 矩阵与线性方程组

1.1 基本概念

在此仅罗列一些基本的知识点的名字,具体内容本文不作赘述.

- 1. 解线性方程组(高斯消元法)
- 2. 方程组无解、唯一解、多解的判断,与主元列、主元位置的关系 解的**存在性:** 看每一列是否都有主元位置 解的**唯一性:** 看有无自由变元(*A***x** = **0**是否有**非平凡解**同样看自由变元)
- 3. **齐次方程**Ax = 0解的参数表示

非齐次方程 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 解的形式为 $\mathbf{x} = \mathbf{p} + t\mathbf{v}, t \in \mathbb{R}$,即非齐通解=齐通解+非齐特解,但要注意首先 得有解

这两种方程的具体比较见2.2节

- 4. 线性相关与线性无关
 - 要判定一组向量是线性相关还是线性无关,即判断Ax = 0是否有非平凡解
- 5. 基本矩阵运算(加减乘除、求逆、转置)
- 定义 1 (基本行变换/初等矩阵变换). 替换、交换、数乘
- 定义 2 (初等(elementary)矩阵). 对单位矩阵做一次基本行变换所得的矩阵.

下面是线性无关线性相关一些常见的结论.

定理 1. $S = \{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n\}, |S| > 1$

(a) S线性相关, 当且仅当至少有一向量可以表示为其他向量的线性组合(注意不是每一个)

- (b) 若S线性相关, $\mathbf{v}_1 \neq 0$, 那么 $\exists \mathbf{v}_i, j > 1$ 可以被表示为 $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{i-1}$ 的线性组合
- (c) 若S的子集S'线性相关,则S线性相关;若S线性无关,则S'线性无关(注意关系不能颠倒)
- (d) 初等行变换不改变列之间的线性相关关系

分析. 记 $A = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n]$, $B \sim A \rightarrow A$ 的阶梯形

(a) 必要性: 即 $\exists c_1, ..., c_n$ 不全为0, 使得 $c_1 \mathbf{v}_1 + ... + c_n \mathbf{v}_n = \mathbf{0}$.

不妨设 $c_1 \neq 0$, 则 $\mathbf{v}_1 = (-\frac{c_2}{c_1})\mathbf{v}_2 + \dots + (-\frac{c_n}{c_1})\mathbf{v}_n$, 证毕.

充分性: 不妨设 $\mathbf{v}_1 = c_2\mathbf{v}_2 + \dots + c_n\mathbf{v}_n$, 移项得 $(-1)\mathbf{v}_1 + c_2\mathbf{v}_2 + \dots + c_n\mathbf{v}_n = \mathbf{0}$.

- (b) 用((a))的结论,设 $\mathbf{v}_p = c_1\mathbf{v}_1 + \cdots + c_{p-1}\mathbf{v}_{p-1} + c_{p+1}\mathbf{v}_{p+1} + \cdots + c_n\mathbf{v}_n, p > 1$,找出最大的j使得 $c_j \neq 0$ (\mathbf{v}_p 的系数 $c_p = -1$ 也计入),进而 $c_1\mathbf{v}_1 + \cdots + c_j\mathbf{v}_j = \mathbf{0}$,接下来证明方法与((a))相同, \mathbf{v}_j 即为所求。
 - (c) 因两者互为逆否命题,故只用证前者,而前者通过不断扩充S'并令扩充部分的权重全为0即可.
 - (d) $A\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 与 $B\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 有相同的解,故线性相关关系不会改变.

1.2 矩阵的逆

如无特殊说明,在本节中我们讨论的矩阵均为方阵.

定义 3 (逆). A为 $n \times n$ 的矩阵, 若 $\exists C s.t. CA = I_n, AC = I_n$, 则称A可逆.

注意:在定义中要求左乘右乘都满足才说其可逆.

定理 2. A是 $m \times n$ 矩阵,若存在 $n \times m$ 矩阵C和D使得 $CA = I_n$, $AD = I_m$,则m = n且C = D

分析. 这个定理告诉我们只有方阵才会存在逆, 下面来证明.

 1° 证明若 $CA = I_n$,则 $m \geq n$

因为 $CAx = I_nx = x = 0$,故Ax = 0只有平凡解,没有自由变元,因此 $m \ge n$.

 2° 证明若 $AD = I_m$,则m < n

因为 $AD\mathbf{b} = I_m\mathbf{b} = \mathbf{b}$, 也即 $\forall \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 都有解 $\mathbf{x} = D\mathbf{b}$, 因此 $m \le n$.

 3° 由上分析知, m=n.

考虑乘积CAD,有 $CAD = (CA)D = I_nD = D = C(AD) = CI_m = C$,故C = D.

定理 3 (二阶矩阵的逆).

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \implies A^{-1} = \frac{1}{\det A} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}, \det A \neq 0$$

命题 1. 若A = BC, B可逆, 则 $\begin{bmatrix} B & A \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} I & C \end{bmatrix}$

分析.

$$EB = I \implies E = B^{-1}$$

$$EA = C \implies B^{-1}A = C \iff A = BC$$

算法 1 (求逆).

$$\begin{bmatrix} A & I \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} I & A^{-1} \end{bmatrix}$$

分析. 在命题1中令 $A \leftarrow I, B \leftarrow A, C \leftarrow A^{-1}$ 即可.

若令 $A^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n \end{bmatrix}$,那么也可以将上述求逆过程看成是解下面的这个方程组

$$A\mathbf{x}_1 = \mathbf{e}_1, \quad A\mathbf{x}_2 = \mathbf{e}_2, \quad \dots, \quad A\mathbf{x}_n = \mathbf{e}_n$$

其说明的是矩阵A乘上 A^{-1} 的第i列,将得到 I_n 的第i列,也即 \mathbf{e}_i .

虽然只是变换了视角,但对于一些问题来说这种视角的变换是重要的.

定理 4 (可逆阵定理). 对于 $n \times n$ 矩阵A, 下列说法均等价

- (a) A可逆
- (b) $A \sim I_n$
- (c) A有n个主元位置
- (d) $A\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 只有平凡解
- (e) A的列线性无关
- (f) x \mapsto Ax是单射
- (q) $A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \forall b \in \mathbb{R}^n$ 至少有一解
- (h) A的列张成 \mathbb{R}^n
- (i) $\mathbf{x} \mapsto A\mathbf{x}$ 是满射
- (j) $\exists n \times n \ C \ s.t. \ CA = I$
- (k) $\exists n \times n \ D \ s.t. \ AD = I$
- (l) A^T可逆

- (m) A的列构成 \mathbb{R}^n 的一组基
- (n) $\operatorname{Col} A = \mathbb{R}^n$
- (o) $\dim \operatorname{Col} A = n$
- (p) rank A = n (满秩)
- (q) Nul $A = \{0\}$
- $(r) \dim \operatorname{Nul} A = 0$
- (s) 0不是A的特征值
- (t) $\det A \neq 0$
- (u) $(\text{Col } A)^{\perp} = \text{Nul } A^{\text{T}} = \{ \mathbf{0} \}$
- $(v) (\operatorname{Nul} A)^{\perp} = \operatorname{Row} A = \mathbb{R}^n$
- (w) Row $A = \mathbb{R}^n$
- (x) A有n个非零奇异值

算法 2 (LU分解). A为 $m \times n$ 的矩阵,则A一定可以被分解为A = LU,其中L为下三角矩阵,U为上三角矩阵.以下为步骤

- 1. 初等行变换(只进行替换)将A变成行阶梯形U,并记录每次 E_1,\ldots,E_n
- 2. 则 $L=(E_p\cdots E_1)^{-1}$,相当于将每次初等行变换逆过来,并将矩阵直接重合即可

注意到LU分解与方阵求逆的方法基本相同,但它适用于所有矩阵,算是矩阵分解里最简单的一种了.用LU分解解方程,加法乘法计算量会降低不少(因为只需回代).

命题 2 (消去律). 若A可逆, AB = AC, 则B = C.

命题 3. 若AB可逆,则A,B都可逆.若A或B不可逆,则AB不可逆.

分析. $C = AB \implies I = BC^{-1}A \implies A^{-1} = BC^{-1}$,B同理. 而后面一句为前面一句的逆否命题,故证毕.

定理 5. 上(下)三角矩阵的逆仍为上(下)三角

分析. 不妨设A为下三角矩阵,则 $a_{ij}=0,i\in\{1,\ldots,n-1\},j\in\{i+1,\ldots,n\}$. 若 $j\neq n-1$,注意到 $a_{(n-1)n}=0$ 一定被包含在 A_{ji} 中,且一定在 A_{ji} 的对角线上(最右下角); 若j=n-1, $a_{(n-1)(n-3)}=0$ 一定被包含在 A_{ji} 中,且也在 A_{ji} 对角线上(右下角倒数第二个元素). 又注意到在 $a_{ij}=0,i\in\{1,\ldots,n-1\},j\in\{i+1,\ldots,n\}$ 的前提下, A_{ji} 一定为下三角矩阵,由上分析知对角线上一定存在0元素,故代数余子式 C_{ii} 为0. 进而伴随矩阵为下三角,原矩阵的逆为下三角.

1.3 分块矩阵

需要知道矩阵乘法另外的表示方法

$$AB = A[\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n] = [A\mathbf{b}_1, \dots, A\mathbf{b}_n]$$

类似地, 分块矩阵有

$$AB = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{b}_n \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^n \mathbf{a}_i \mathbf{b}_i$$

注意区别正常的矩阵乘法(行乘列得到某一位置上的元素),分块矩阵乘法是列乘行得到矩阵.

分块矩阵的转置除了每一个矩阵转置外,大的矩阵内部也需要转,如

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \implies A^{T} = \begin{bmatrix} A_{11}^{T} & A_{21}^{T} \\ A_{12}^{T} & A_{22}^{T} \end{bmatrix}$$

分块矩阵求逆并不是每一块分别求逆简单合并即可,而是需要将逆设出来,乘开后通过对比系数来求.如下面定理6所示.

定理 6.

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ O & A_{22} \end{bmatrix} \implies A^{-1} = \begin{bmatrix} A_{11}^{-1} & -A_{11}^{-1} A_{12} A_{22}^{-1} \\ O & A_{22}^{-1} \end{bmatrix}$$

特别地,当 A_{12} 为0矩阵,该分块矩阵的逆可以变成各个矩阵分别求逆.实际上对于**对角矩阵**,其k次方都是主对角线上的元素直接取k次幂,求逆看成是-1次幂当然也成立,见推论1.

分析. 设
$$B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}$$
,且

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ O & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_p & O \\ O & I_q \end{bmatrix}$$

乘开后对比系数有

$$A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} = I_p$$

$$A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} = O$$

$$A_{22}B_{21} = O$$

$$A_{22}B_{22} = I_q$$

由下往上回代即得结果.

推论 1.
$$A = \begin{bmatrix} B & O \\ O & C \end{bmatrix}$$
, B, C 均为方阵,则 A 可逆,当且仅当 B, C 都可逆.若 A 可逆,则 $A^{-1} = \begin{bmatrix} B^{-1} & O \\ O & C^{-1} \end{bmatrix}$

如求以下这个矩阵的逆就可以划分为对角矩阵后,直接对各块求逆合并.

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

当然,分块也是需要技巧的,常常需要先观察矩阵的性质,再做出合理划分,见例1.

例 1.

$$A = egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 1 & 0 & & 0 \\ 1 & 1 & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix},$$
 证明 $B = egin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 1 & 0 & & 0 \\ 0 & -1 & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & \cdots & -1 & 1 \end{bmatrix}$ 为 A 的逆

分析. 递归定义分块矩阵: $A_{k+1} = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{v} & A_k \end{bmatrix}$, $B_{k+1} = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0}^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{w} & B_k \end{bmatrix}$, 并用数学归纳法可证.

定理 7. 两个上(下)三角矩阵的乘积仍为上(下)三角

分析. 不妨设两个矩阵A, B都为下三角, 且 $A = [a_{ij}], B = [b_{ij}], C = AB = [c_{ij}],$ 其中

$$c_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \dots + a_{in}b_{nj}$$

当i < j时, $a_{ij} = b_{ij} = 0$,故(自行画图观察可得以下事实)

$$c_{ij} = \underbrace{a_{i1}}_{\neq 0} \underbrace{b_{1j}}_{=0} + \dots + \underbrace{a_{ii}}_{\neq 0} \underbrace{b_{ij}}_{=0} + \underbrace{a_{i(i+1)}}_{=0} \underbrace{b_{(i+1)j}}_{=0} + \dots + \underbrace{a_{ij}}_{=0} \underbrace{b_{jj}}_{\neq 0} + \dots + \underbrace{a_{in}}_{=0} \underbrace{b_{nj}}_{\neq 0} = 0$$

定理 8 (舒尔(Schur)补). 若 A_{11} 可逆,则

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I & O \\ X & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11} & O \\ O & S \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & Y \\ O & I \end{bmatrix}$$

其中 $S=A_{22}-A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$ 称为 A_{11} 的舒尔补, $X=A_{21}A_{11}^{-1}$, $Y=A_{11}^{-1}A_{12}$.

分析. 类似定理6的方法, 乘开后通过对比系数可得.

1.4 行列式

命题 4 (行列式的基本运算).

1.
$$\det A^{\mathrm{T}} = \det A$$

2. $\det AB = (\det A)(\det B) = \det BA$

$$3. \det A^{-1} = \frac{1}{\det A}$$

4. $\det A^k = (\det A)^k$ (如果把矩阵的逆看成-1次幂, 那就是3式)

5. $\det rA = r^n \det A$

命题 5 (行列式基本行变换). 三种基本行变换与矩阵相同, 但替换不改变它的值, 交换乘(-1), 数乘乘k.

定理 9 (拉普拉斯(Laplace)展开). A为 $n \times n$ 的矩阵,称 $C_{ij} = (-1)^{i+j} \det A_{ij}$ 为(i,j)的代数余子式,其中 A_{ij} 是A删除第i行和第j列后剩下的矩阵.

对第1行展开有

$$\det A = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} C_{ij}$$

对第j列展开有

$$\det A = \sum_{i=1}^{n} a_{ij} C_{ij}$$

特别地,若A是三角矩阵,则 $\det A$ =主对角线上元素的积(因对第一行或第一列展开,形式不变).

定理 10 (克莱姆(Cramer)法则). $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, 则 $\mathbf{x}_i = \frac{\det A_i(\mathbf{b})}{\det A}$, 其中

$$\det A_i(\mathbf{b}) = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{b}^{\checkmark} & \cdots & \mathbf{a}_n \end{bmatrix}$$

分析. 直接构造

$$AI_i(\mathbf{b}) = A \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1 & \cdots & \mathbf{b} & \cdots & \mathbf{e}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A\mathbf{a}_1 & \cdots & A\mathbf{b} & \cdots & A\mathbf{a}_n \end{bmatrix}$$

左右两边取det得

$$\det AI_i(\mathbf{b}) = (\det A)(\det I_i(\mathbf{b})) = (\det A)\mathbf{x}_i = \det A_i(\mathbf{b})$$

定理 11. 若A可逆,则 $A^{-1} = \frac{1}{\det A} \operatorname{adj} A$,其中共轭/伴随矩阵($\operatorname{adj} A$) $_{ij} = C_{ji}$ 注意: 共轭矩阵元素下标与代数余子式下标不同.

分析. 求逆算法换个角度思考,记 $B=A^{-1}$ 的第j列为 \mathbf{b}_{j} ,则 $A\mathbf{b}_{j}=\mathbf{e}_{j}$,又记第i个元素为 b_{ij} ,则由克莱姆法则, $b_{ij}=\frac{\det A_{i}(\mathbf{e}_{j})}{\det A}$,分子

$$\det A_i(\mathbf{e}_j) = (-1)^{j+i} \det A_{ji} = C_{ji}$$

(对第i列进行展开,除了第j行为1,其余行均为0),得证.

定理 12 (行列式的线性性). 记 $T: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $T(\mathbf{x}) = \det \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1 & \cdots & \mathbf{a}_{j-1} & \mathbf{x} & \mathbf{a}_{j+1} & \cdots & \mathbf{a}_n \end{bmatrix}$, 则T为线性变换.

注:这里的线性性只是针对行列式中的一列可变来说的,若整个行列式都可变,则不一定有 $\det(A+B)=\det A+\det B$.

定理 13 (线性变换与体积变化). 线性变换 $T: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 的标准矩阵为A, S是一块有限的区域,那么

$$T(S)$$
的面积或体积 = $|\det A| \cdot S$ 的面积或体积

由此定理立得椭圆面积为 πab .

定理 14 (解析几何)。 1. 相异两点 $A(x_1,y_1), B(x_2,y_2) \in \mathbb{R}^2$,则直线AB的方程为 $\det \begin{vmatrix} 1 & x & y \\ 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \end{vmatrix} = 0$

$$2$$
. 过点 $A(x_1,y_1)\in\mathbb{R}^2$,斜率为 k 的直线方程为 $\detegin{bmatrix}1&x&y\\1&x_1&y_1\\0&1&k\end{bmatrix}=0$

3.
$$A(x_1,y_1), B(x_2,y_2), C(x_3,y_3) \in \mathbb{R}^2$$
,三角形 ABC 的面积为 $\frac{1}{2} \left| \det \begin{bmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{bmatrix} \right|$

分析. 实际上还有很多类似的结论, 在此不作赘述. 均是做基本行变换后展开即得证.

定理 15 (范德蒙(Vandermonde)矩阵).

$$V = \begin{bmatrix} 1 & \alpha_1 & \alpha_1^2 & \dots & \alpha_1^{n-1} \\ 1 & \alpha_2 & \alpha_2^2 & \dots & \alpha_2^{n-1} \\ 1 & \alpha_3 & \alpha_3^2 & \dots & \alpha_3^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \alpha_m & \alpha_m^2 & \dots & \alpha_m^{n-1} \end{bmatrix}$$

令首行为变量,其他行为常量可得n-1次多项式,常被用于多项式插值. 当m=n时它的行列式

$$\det(V) = \prod_{1 \le i < j \le n} (\alpha_j - \alpha_i)$$

分析. 从第n-1列到第1列, 每一列乘上 $-\alpha_n$ 后加到后一列:

$$\det(V_n) = \begin{vmatrix} 1 & \alpha_1 - \alpha_n & \alpha_1^2 - \alpha_1 \alpha_n & \cdots & \alpha_1^{n-2} - \alpha_1^{n-3} \alpha_n & \alpha_1^{n-1} - \alpha_1^{n-2} \alpha_n \\ 1 & \alpha_2 - \alpha_n & \alpha_2^2 - \alpha_2 \alpha_n & \cdots & \alpha_2^{n-2} - \alpha_2^{n-3} \alpha_n & \alpha_2^{n-1} - \alpha_2^{n-2} \alpha_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 1 & \alpha_{n-1} - \alpha_n & \alpha_{n-1}^2 - \alpha_{n-1} \alpha_n & \cdots & \alpha_1^{n-2} - \alpha_{n-1}^{n-3} \alpha_n & \alpha_{n-1}^{n-1} - \alpha_{n-1}^{n-2} \alpha_n \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

$$= (-1)^{n+1} \begin{vmatrix} \alpha_1 - \alpha_n & \alpha_1(\alpha_1 - \alpha_n) & \cdots & \alpha_1^{n-3}(\alpha_1 - \alpha_n) & \alpha_1^{n-2}(\alpha_1 - \alpha_n) \\ \alpha_2 - \alpha_n & \alpha_2(\alpha_2 - \alpha_n) & \cdots & \alpha_2^{n-3}(\alpha_2 - \alpha_n) & \alpha_2^{n-2}(\alpha_2 - \alpha_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{n-1} - \alpha_n & \alpha_{n-1}(\alpha_{n-1} - \alpha_n) & \cdots & \alpha_1^{n-2}(\alpha_{n-1} - \alpha_n) & \alpha_{n-1}^{n-2}(\alpha_{n-1} - \alpha_n) \end{vmatrix}$$

$$\Rightarrow (-1)^{n+1} (\alpha_1 - \alpha_n)(\alpha_2 - \alpha_n) \cdots (\alpha_{n-1} - \alpha_n) \begin{vmatrix} 1 & \alpha_1 & \alpha_1^2 & \cdots & \alpha_1^{n-2} \\ 1 & \alpha_2 & \alpha_2^2 & \cdots & \alpha_2^{n-2} \\ 1 & \alpha_3 & \alpha_3^2 & \cdots & \alpha_3^{n-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \alpha_{n-1} & \alpha_{n-1}^2 & \cdots & \alpha_{n-1}^{n-2} \end{vmatrix}$$

$$\Rightarrow (\alpha_n - \alpha_1)(\alpha_n - \alpha_2) \cdots (\alpha_n - \alpha_{n-1}) \det(V_{n-1}) = \prod_{1 \le i < j \le n} (\alpha_j - \alpha_i)$$

除了懂得用拉普拉斯展开外,也要懂得通过基本行变换(或列变换)来计算行列式,如例2.

例 2.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 2 & 2 & \dots & 2 \\ 1 & 2 & 3 & \dots & 3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 2 & 3 & \dots & n \end{bmatrix} \implies \det A = 1$$

分析. 将每行乘(-1)后加到下一行, 最后只剩对角线上元素全为1.

2 向量空间

2.1 基本定义

定义 4 (向量空间/线性空间). 给定一个域 F^1 ,若对一个非空集合V满足以下十条公理,则称V为F上的向量空间:

1. 定义两种运算 + 和· $\langle V, +, \cdot \rangle$ 加法是 $V \times V$ 到V的一个映射,数乘是 $F \times V$ 到V的一个映射 注:在说明一个集合构成一个向量空间时,一定要指出域是什么,向量加法是怎么定义的,数乘是怎么定义的。否则一切都只是空中楼阁。

¹参见https://en.wikipedia.org/wiki/Field_(mathematics)

- 2. 封闭性(对两种运算封闭)
- 3. V的基本性质,设 $u,v,w \in V$, c,d为常数
 - (a) 零元 u+0=u
 - (b) 单位元 $1 \cdot u = u$
 - (c) 逆元 u + (-u) = 0
 - (d) 加法交换律 u+v=v+u (暂不定义两向量相乘)
 - (e) 结合律 (u+v)+w=u+(v+w), (cd)u=c(du)
 - (f) 左右分配律 c(u+v) = cu + cv, (c+d)u = cu + du

要注意,这里的向量空间实际上是很抽象的,F,V可以是一些很奇怪的东西. 如度为n的多项式所构成的集合 \mathbb{P}_n ,有

$$\mathbf{p}(t) = a_0 + a_1 t + a_2 t + \dots + a_n t^n$$

的形式(这里的t虽然可以取任意值,但在 $\{1,t,\ldots,t^n\}$ 这组标准基下区别不同多项式的是前面的系数,也即坐标向量. 故考虑其线性性时,不是考虑 $\mathbf{p}(u+v)$,而是考虑 $\mathbf{p}(t)+\mathbf{q}(t)$),这个集合满足以上所有公理,也被称为向量空间.

甚至于不用显式地表示出来的也可以算是向量空间,如定义在[a,b]上实值函数f的集合,同样是一个向量空间。

2.2 四个基本子空间

定义 5 (子空间). 称H是V的子空间, 当 $\mathbf{u},\mathbf{v}\in H$, 有:

- 1. $0 \in H$
- 2. $u + v \in H$
- 3. $c\mathbf{u} \in H$

注意: \mathbb{R}^2 并不是 \mathbb{R}^3 的子空间,向量元素数目都不同,但可以通过补0来达到目的.

定义 $\mathbf{6}$ (基本子空间). A为 $m \times n$ 的矩阵,则列空间 $\mathrm{Col}\,A$ 、行空间 $\mathrm{Row}\,A$ 、零空间 $\mathrm{Nul}\,A$ 、左零空间 $\mathrm{Nul}\,A^\mathrm{T}$ 称为A的基本子空间

我们先来探究A的零空间与列空间:

同时我们发现:

- 1. $\operatorname{Nul} A = \{0\}$ (A的列线性无关) 当且仅当 $\mathbf{x} \mapsto A\mathbf{x}$ 是一一映射/单射 也说明A的每一列都为主元列(n个),并且m > n,无自由变元.
- 2. $\operatorname{Col} A = \mathbb{R}^m$ 当且仅当 $\mathbf{x} \mapsto A\mathbf{x}$ 将 \mathbb{R}^n 映上/满射到 \mathbb{R}^m 也说明A的每一行都有主元位置 $(m \land n)$,并且 $m \le n$,**可能**存在自由变元.

需要注意:

$\operatorname{Nul} A$	$\operatorname{Col} A$
$\{\mathbf{x}: \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, A\mathbf{x} = 0\}$	$\{\mathbf{b}: \exists \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, A\mathbf{x} = \mathbf{b}\}$
隐性(implicit)定义	显性(explicit)定义
\mathbb{R}^n 的子空间	\mathbb{R}^m 的子空间
考虑有n个变量	考虑有加个方程
dim =方程自由变量个数	dim =主元列数
基得解出来才知道	基为 原矩阵 的主元列

- 1. 当A不是方阵时,Nul A与Col A是两个完全不同的空间;A是方阵,则有可能存在非零向量同时属于这两个空间
- 2. 基本行变换不会影响列之间的相关关系, 但会改变其列空间
- 3. 基本行变换**不会改变**其行空间,阶梯形的**非零行**形成其行空间的一组基,也是原矩阵行空间的一组 基

分析. B是由A经过行变换得来的矩阵,则B的行是A的行的线性组合,因此B的行的线性组合也一定是A的行的线性组合,进而 $Row\ B \subset Row\ A$; 而行操作又是可逆的,相反的操作可以说明 $Row\ A \subset Row\ B$,因此 $Row\ A = Row\ B$.

若B是阶梯形,它的非零行一定线性无关,因为没有一个非零行是它下面非零行的线性组合(定理1(c)的逆否命题),证毕.

定理 16.

$$(\operatorname{Row} A)^{\perp} = \operatorname{Nul} A, (\operatorname{Col} A)^{\perp} = \operatorname{Nul} A^{\mathrm{T}}$$

分析. 若 $\mathbf{x} \in \text{Nul}\,A$,由矩阵乘法,A每一行与 \mathbf{x} 都正交,而A的行张成 $\text{Row}\,A$,因此 $\text{Nul}\,A \subset (\text{Row}\,A)^{\perp}$. 若 $\mathbf{x} \in (\text{Row}\,A)^{\perp}$,则 \mathbf{x} 与A的每一行都正交,进而 $\mathbf{x} \in \text{Nul}\,A$,因此 $(\text{Row}\,A)^{\perp} \subset \text{Nul}\,A$. 故 $(\text{Row}\,A)^{\perp} = \text{Nul}\,A$. 最后令 $A \leftarrow A^{\text{T}}$ 代入即可得第二个结论.

关于四个基本子空间维度之间的关系, 见定理21.

2.3 线性变换

定义 7 (线性变换²). $若T: V \to W$ 满足

1.
$$T(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = T(\mathbf{u}) + T(\mathbf{v})$$

2.
$$T(c\mathbf{u}) = cT(\mathbf{u})$$

则称T为线性变换.

注意:这里并不需要零元的定义,即 $T(\mathbf{0}) = \mathbf{0}(*)$,因线性变换保持数乘不变性,这已经可以推出(*)式

线性变换研究的是两个向量空间,则更加抽象.如对一个实值连续函数求导,也可以算是一个线性变换.

 $^{^2}$ 有些地方说线性映射(linear mapping)是从一个向量空间V到另一个向量空间W的映射且保持加法运算和数量乘法运算,而线性变换(linear transformation)是线性空间V到其自身的线性映射. 但从国外的课本上看,这两者并没有区分得特别清楚.

定理 17 (标准(standard)矩阵). 对于线性变换 $T: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, 存在唯一矩阵A使得

$$T(\mathbf{x}) = A\mathbf{x}, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

其中A是一个 $m \times n$ 的矩阵,且

$$A = \begin{bmatrix} T(\mathbf{e}_1) & \cdots & T(\mathbf{e}_n) \end{bmatrix}$$

称 A 为 T 的标准矩阵.

分析. 1° 存在性:

$$T(\mathbf{x}) = T(x_1 \mathbf{e}_1 + \dots + x_n \mathbf{e}_n)$$

$$= x_1 T(\mathbf{e}_1) + \dots + x_n T(\mathbf{e}_n)$$

$$= \begin{bmatrix} T(\mathbf{e}_1) & \cdots & T(\mathbf{e}_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

$$= A\mathbf{x}$$

 2° 唯一性: 设存在另一矩阵B使得 $T(\mathbf{x})=B\mathbf{x}, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 故 $A\mathbf{x}=B\mathbf{x}, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 令 $\mathbf{x}=\mathbf{e}_i$ 即得A=B

这里需要注意几点:

- 1. 由矩阵乘向量的线性性知,所有的矩阵变换都是线性变换.
- 2. 线性变换着重于映射的性质,而矩阵变换则描述了该映射是怎么实施的.
- 3. 标准矩阵的唯一性是在确定了基的情况下才说的,如上面的定理是标准基,非标准基的情况请见定理40.

定义 8 (单射与满射). 线性变换 $T:V\to W$ 满足:

- 1. \forall **b** ∈ W至多可以在V中找到一个原像x,则称T单射(即T(**u**) = T(**v**) ⇒ **u** = **v**)
- 2. \forall b ∈ W至少可以在V中找到一个原像x,则称T满射
- 3. \forall **b** ∈ W在V中都有且只有一个原像 \mathbf{x} ,则称T双射/一一映射,称V和W同构,记为 $V \cong W$.

定义 9 (核空间与值域空间). $T(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 的解为T的核空间, $T(\mathbf{x}), \forall \mathbf{x}$ 的所有可能值构成T的值域空间,分别对应着矩阵中的零空间和列空间.

定理 18. 线性变换 $T: V \to W$, $S = \{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p\} \in V$, $S' = \{T(\mathbf{v}_1), \dots, T(\mathbf{v}_p)\} \in W$, $U \neq V$ 的子空间

- 1. 若S线性相关,则S'线性相关;若S'线性无关,则S线性无关
- 2. T是单射,若S'线性相关,则S线性相关;若S线性无关,则S'线性无关
- 3. 若S为U的一组基,则S'张成T(U)
- 4. $V \cong W$, 若 $S \not\in V$ 的线性无关组(生成集/基),则 $S' \not\in W$ 的线性无关组(生成集/基)
- 5. $V \cong W \iff \dim V = \dim W$
- 6. T(U)是W的子空间

- 7. $\dim T(U) \leq \dim U$, 当T为单射时取等
- 8. 核是定义域的子空间, 值域空间是对映域的子空间
- 分析. 1. 不妨设 $\mathbf{v}_p = c_1 \mathbf{v}_1 + \dots + c_{p-1} \mathbf{v}_{p-1}$,则 $T(\mathbf{v}_p) = T(c_1 \mathbf{v}_1 + \dots + c_{p-1} \mathbf{v}_{p-1}) = c_1 T(\mathbf{v}_1) + \dots + c_{p-1} T(\mathbf{v}_{p-1})$,说明S'也线性相关.后者为前者的逆否命题,易知成立.
 - 2. 不妨设 $T(\mathbf{v}_p) = c_1 T(\mathbf{v}_1) + \dots + c_{p-1} T(\mathbf{v}_{p-1})$, 则 $c_1 T(\mathbf{v}_1) + \dots + c_{p-1} T(\mathbf{v}_{p-1}) = T(c_1 \mathbf{v}_1 + \dots + c_{p-1} \mathbf{v}_{p-1}) = T(\mathbf{v}_p)$. 又因T是单射,故 $\mathbf{v}_p = c_1 \mathbf{v}_1 + \dots + c_{p-1} \mathbf{v}_{p-1}$,S线性相关.
 - 3. $\mathbf{y} \in T(U)$, $\exists T(\mathbf{x}) = \mathbf{y}$, 因 $\mathbf{x} \in U$, 所以 $\mathbf{x} = c_1 \mathbf{v}_1 + \cdots + c_p \mathbf{v}_p$, 因T为线性, 故 $\mathbf{y} = T(\mathbf{x}) = c_1 T(\mathbf{v}_1) + \cdots + c_p T(\mathbf{v}_p)$, 即可说明. (注意这里只能说明T(U)的基在S'内, 而不能说明S'就是基)
 - 4. 结合1,2,3即得证.
 - 5. 结合4, $S \to V$ 的基, $S' \to W$ 的基, 都含有p个向量, 故维度相同.
 - 6. (a) $0 \in U$, $T(0) = 0 \in T(U)$
 - (b) $\forall \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2 \in T(U), \exists \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2 \in U \text{ s.t. } \mathbf{v}_1 = T(\mathbf{u}_1), \mathbf{v}_2 = T(\mathbf{u}_2),$ $\therefore \mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_2 \in U \quad \therefore T(\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_2) = T(\mathbf{u}_1) + T(\mathbf{u}_2) = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 \in T(U)$
 - (c) $\forall \mathbf{v} \in T(U), \exists \mathbf{u} \in U \ s.t. \ \mathbf{v} = T(\mathbf{u}),$ $\because c\mathbf{u} \in U \quad \therefore T(c\mathbf{u}) = cT(\mathbf{u}) = c\mathbf{v} \in T(U)$
 - 7. 由定理20(d)知dim $T(U) \le \dim U$. 若 $S \to U$ 的一组基,则S'张成T(U),又本题的题2证明了S'线性无关,故 $S' \to T(U)$ 的一组基,故dim $T(U) = p = \dim U$
 - 8. 记T的核为 $\ker T$, 显然 $\mathbf{0} \in \ker T$. 若 $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \ker T$, 即 $T(\mathbf{u}) = \mathbf{0}, T(\mathbf{v}) = \mathbf{0}$, 则 $T(\mathbf{u} + \mathbf{v}) = T(\mathbf{u}) + T(\mathbf{v}) = \mathbf{0}$ $\Longrightarrow \mathbf{u} + \mathbf{v} \in \ker T, T(c\mathbf{u}) = cT(\mathbf{u}) = \mathbf{0}$ $\Longrightarrow c\mathbf{u} \in \ker T$, 故核是定义域的子空间. 上面6中令 $U \leftarrow V$, 即得值域空间是对映域的子空间.

2.4 基、维度与秩

定义 10 (基). H是向量空间V的子空间, $\mathcal{B} = \{\mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{b}_n\}$ 满足以下两个条件:

- 1. B为线性无关集
- 2. Span{ $\mathbf{b}_1, ..., \mathbf{b}_n$ } = H

则称B是H的基. 换言之,基是极大线性无关组,也是极小生成集.

由条件2知 $\mathbf{b}_1, ..., \mathbf{b}_p$ 都得在H中,这个显然的结论看似没用,但却是 \mathcal{B} 成为基的重要条件(在后文证明施密特正交化(算法4)时也需要说明这一点).

如
$$\mathbf{v}_1 = (1,0,1), \mathbf{v}_2 = (0,1,1), \mathbf{v}_3 = (0,1,0), \ \$$
令 $H = \{(s,t,t): s,t \in \mathbb{R}\}, \ \$ 有

$$\begin{bmatrix} s \\ t \\ t \end{bmatrix} = s \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} + (t - s) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} + s \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

这里 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3 \notin H$,其实H只是Span $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$ 的子集,故 $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$ 不能称为一组基.

定理 19 (生成集(Spanning set)). $S = \{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p\}$ 是V中的集合,令 $H = \operatorname{Span}\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p\}$,

- (a) 若 \mathbf{v}_k 是S中其余向量的线性组合,则将 \mathbf{v}_k 移除,S仍然张成H

分析. 不妨设 \mathbf{v}_{n} 可以被其他向量线性表示,则

$$\mathbf{v}_p = a_1 \mathbf{v}_1 + \dots + a_{p-1} \mathbf{v}_{p-1}$$

将上式代入下式,可知将 \mathbf{v}_n 移除后,H中的向量 \mathbf{x} 依然可以被其余p-1个向量线性表示,即S仍然张成H

$$\mathbf{x} = c_1 \mathbf{v}_1 + \dots + c_p \mathbf{v}_p = (c_1 + a_1 c_p) \mathbf{v}_1 + \dots + (c_{p-1} + a_{p-1} c_p) \mathbf{v}_{p-1}$$

不断重复(a)的步骤,删除线性相关的向量,那么剩下的向量一定都线性无关,且可张成H,故形成一组基

定义 11 (维度). 向量空间V的一组基中向量的个数定义为V的维度, 记为 $\dim V$

定义 12 (秩). 对于矩阵A, 它的秩记为

$$\operatorname{rank} A = \dim \operatorname{Col} A$$

一般地,对于一组向量集合,它的秩是极大线性无关组中向量的数目

定理 20. 以下是关于基和维度的一些结论. 设 $S = \{\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n\} \in V, |S| \ge 1$,且 $S \ni V$ 的基

- (a) 在V中任取p(p > n)个向量,一定线性相关
- (b) 在V中任取p(p < n)个向量,一定不能张成V
- (c) V的所有基都包含n个向量

分析. 由假设知dim V=n,先将S与这p个向量改写成坐标向量后(见2.5节),构造 $n \times p$ 矩阵A,A的每一列即为这p个向量. 由2.2节的讨论知,若n < p,则A一定存在自由变元,A的列一定线性相关;若n > p,则不能保证每一行都有主元位置,进而不能张成 \mathbb{R}^n ,对应地也就不能张成V. 因此,V的所有基都包含n个向量. 直接推论是:每一个 \mathbb{R}^n 的基都必须包含n个向量.

(d) H是V的一个子空间,则H内任一线性无关集都可以被拓展为H的一组基,且 $\dim H \leq \dim V$ (基的存在性)

分析. 若 $H = \{0\}$, 显然dim $H = 0 < \dim V$;

否则,令 $S' = \{\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_k\}$ 是H的一个线性无关集. 若S'张成H,则S'是H的一组基;否则, $\exists \mathbf{u}_{k+1} \in H - \operatorname{Span} S'$,则 $\{\mathbf{u}_1, \ldots, \mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k+1}\}$ 将线性无关. 继续这个过程,可以不断扩展S'直至其能张成H,也即成为H的一组基. 但由((a)),S'中向量的数量不能超过 $\dim V$. 综上, $\dim H \leq \dim V$.

(e) 任一p个元素的线性无关集或是可张成V的集合自动成为V的基

分析. 由((d)),有p个元素的线性无关集S'可以被拓展成V的基,但这组基一定得含p个元素,因为 $\dim V = p$,因此S'已经是V的基. 假设S''有p个元素且可张成V,因为 $V \neq \{\mathbf{0}\}$,生成集定理告诉我们S''的某一个子集 S^* 一定是V的基,又因 $\dim V = p$,所以 S^* 一定包含p个向量,也即 $S^* = S''$.

(f) H是V的n维子空间,则H=V

分析. 若dim $V = \dim H = 0$, 则 $V = H = \{0\}$;

E(E) 老 E(E) 一 E(E) 一 E(E) ,则 E(E) ,E(E) ,则 E(E) ,则 E(E) ,则 E(E) ,则 E(E) ,则 E(E) ,E(E) ,E(

(q) P是无限维空间, $C(\mathbb{R})$ 为所有实值连续函数构成的空间, 也是无限维的

分析. 反证法, 假设 $\dim \mathbb{P} = k < \infty$, \mathbb{P}_n 是 \mathbb{P} 的子空间, $\dim \mathbb{P}_{k-1} = k$, 因此 $\dim \mathbb{P}_{k-1} = \dim \mathbb{P}$, 进 $\mathbb{D}_{k-1} = \mathbb{P}$, 这显然不对, 如 $\mathbf{p}(t) = t^k$ 在 \mathbb{P} 内, 但不在 \mathbb{P}_{k-1} 内, 矛盾. 因 \mathbb{P} 是 $C(\mathbb{R})$ 的子空间, 若 $C(\mathbb{R})$ 为有限维, 则由((d)), \mathbb{P} 也是有限维的, 矛盾.

定理 21 (秩定理).

$$\operatorname{rank} A + \dim \operatorname{Nul} A = n$$

$$\dim \operatorname{Row} A + \dim \operatorname{Nul} A^{\mathrm{T}} = m$$

分析. 由前面2.2节的讨论知道, 列空间的维度为主元列数, 加上零空间的维度为自由变量个数就等于总的列数.

例 3. 若一个非齐次线性方程组有6个方程8个未知数,已知其有一个有2个自由变元的解,则无论方程右侧的常数是什么,该方程组总有解.

分析. $\dim \operatorname{Nul} A = 2$, $\operatorname{rank} = 8 - 2 = 6$, $\operatorname{Col} A \in \mathbb{R}^6 \implies \operatorname{Col} A = \mathbb{R}^6$

例 4. $A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \forall \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ 都有解 $\iff A^T\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 只有平凡解

分析. $\operatorname{rank} A = \dim \operatorname{Col} A = \dim \operatorname{Row} A = m \implies \dim \operatorname{Nul} A^{\mathrm{T}} = 0$

定理 22 (秩的进阶定理). $A \not\in m \times n$ 矩阵, $B \not\in m \times p$ 矩阵, 记 $\operatorname{rank} A = r = r_1$, $\operatorname{rank} B = r_2$, 有以下结论

(a) $\operatorname{rank} AB \leq \operatorname{rank} A$, $\operatorname{rank} AB \leq \operatorname{rank} B$

分析. 设 $\mathbf{y} \in \operatorname{Col} AB$, 则 $\exists \mathbf{x} s.t. \mathbf{y} = AB\mathbf{x}$, 而 $AB\mathbf{x} = A(B\mathbf{x}) = \mathbf{y}$, 因此 $\mathbf{y} \in \operatorname{Col} A$, 故 $\operatorname{Col} AB$ 为 $\operatorname{Col} A$ 的子空间,由定理20((d))知 $\operatorname{rank} AB \leq \operatorname{rank} A$.

又由秩定理, $\operatorname{rank} AB = \operatorname{rank} (AB)^{\mathrm{T}} = \operatorname{rank} B^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} \leq \operatorname{rank} B^{\mathrm{T}} = \operatorname{rank} B.$

(b) P是 $m \times m$ 可逆矩阵, Q是 $n \times n$ 可逆矩阵, 则rank PA = rank AQ = rank A

(c) 若AB = O, 则 $\operatorname{rank} A + \operatorname{rank} B \leq n$

分析. 由AB = O知, B的每一列都在NulA中, 故ColB是NulA的子空间, 故 $rankB \le dim NulA$. 又由秩定理 $n = rankA + dim NulA \ge rankA + rankB$.

(d) $\operatorname{rank}(A+B) \le \operatorname{rank} A + \operatorname{rank} B$

分析. 引理: 一定存在秩分解A=CR, 其中C是 $m \times r$ 矩阵, R是 $r \times n$ 矩阵. 将A, B秩分解得 $A=C_1R_1$, $B=C_2R_2$, 构造 $m \times (r_1+r_2)$ 矩阵 $C=\begin{bmatrix} C_1 & C_2 \end{bmatrix}$, 则

$$A + B = C_1 R_1 + C_2 R_2 = \begin{bmatrix} C_1 & C_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \end{bmatrix} = CR$$

因C有 r_1+r_2 列,故 $\operatorname{rank} C \leq r_1+r_2$,同理R有 r_1+r_2 行,故 $\operatorname{rank} R \leq r_1+r_2$,进而 $\operatorname{rank} (A+B) \leq r_1+r_2 = \operatorname{rank} A + \operatorname{rank} B$.

(e) A的秩为r当且仅当A包含一个 $r \times r$ 的子矩阵,且没有更大的方阵是可逆的

分析. 1° 证明A一定有 $m \times r$ 且秩为r的子矩阵 A_1

 $\Diamond A_1$ 包含A的r个主元列,因这些列线性无关,故 A_1 即为所求.

 2° 证明 A_1 一定有 $r \times r$ 且可逆的子矩阵 A_2

 $\operatorname{rank} A_1 = \dim \operatorname{Row} A_1 = r$, 令 A_2 包含 A_1 的r个线性无关的行,则 A_2 即为所求,且为方阵故可逆.

$$(f)$$
 若 $C = \begin{bmatrix} A & O \\ O & B \end{bmatrix}$, 则rank $C = \operatorname{rank} A + \operatorname{rank} B$

分析. 将A, B都写成阶梯形,因分块矩阵其余位置都为0,故C此时也为阶梯形,C的秩就等于A, B主元列之和.

2.5 坐标系统

定理 23 (向量唯一表示定理). $\mathcal{B} = \{b_1, \cdots, b_p\}$ 是向量空间V的基,则 $\forall \mathbf{x} \in V$,存在唯一 c_1, \ldots, c_n 使得 $\mathbf{x} = c_1 \mathbf{b}_1 + \cdots + c_p \mathbf{b}_p$

分析.

$$0 = \mathbf{x} - \mathbf{x} = (c_1 - d_1)\mathbf{b}_1 + \dots + (c_p - d_p)\mathbf{b}_p$$

由基线性无关, 知上述方程只有平凡解.

定义 13 (坐标向量). $\mathcal{B} = \{b_1, \dots, b_p\}$ 是H的基, $\forall \mathbf{x} \in H, \ \mathbf{x} = c_1\mathbf{b}_1 + \dots + c_p\mathbf{b}_p$,则 \mathbf{x} 关于 \mathcal{B} 的坐标向量定义为

$$[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}} := \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_p \end{bmatrix}$$

坐标系统最大的用处是可以将向量空间V中奇奇怪怪的东西转换成 \mathbb{R}^n 中我们熟悉的向量,求解坐标的过程实质上又是解线性方程组,进而有如下定理.

定理 24 (坐标变换矩阵). 对于V的一组基 $\mathcal{B} = \{\mathbf{b}_1, \cdots, \mathbf{b}_n\}$, 存在唯 $-n \times n$ 矩阵 $P_{\mathcal{B}}$ 使得

$$\mathbf{x} = P_{\mathcal{B}}[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}}, \, \forall \mathbf{x} \in V$$

其中 $P_{\mathcal{B}} = \left[\mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{b}_n\right]$ 称为坐标变换矩阵. 移项即可解出坐标,

$$[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}} = P_{\mathcal{B}}^{-1}\mathbf{x}$$

定理 25 (换基). $\mathcal{B} = \{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n\}, \mathcal{C} = \{\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_n\}$ 都是向量空间V的基,那么存在唯一的 $n \times n$ 矩阵 $\underset{\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{B}}{P}$,使得

$$[\mathbf{x}]_{\mathcal{C}} = \underset{\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{B}}{P}[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}}$$

其中 $_{\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{B}}^{P} = \begin{bmatrix} [\mathbf{b}_{1}]_{\mathcal{C}} & [\mathbf{b}_{2}]_{\mathcal{C}} & \cdots & [\mathbf{b}_{n}]_{\mathcal{C}} \end{bmatrix}$, 称为过渡矩阵.

算法 $\mathbf{3}$ (在 \mathbb{R}^n 中换基). 要求 $\underset{\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{B}}{P}$, 首先要将 \mathcal{B} 与 \mathcal{C} 之间的关系找到,即用 \mathcal{C} 中的向量表示 \mathcal{B} 中的向量. 设坐标变换矩阵 $P_{\mathcal{C}} = \begin{bmatrix} \mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_n \end{bmatrix}$, 进而 $\mathbf{b}_i = P_{\mathcal{C}}[\mathbf{b}_i]_{\mathcal{C}}$, 故

$$P_{\mathcal{B}} = P_{\mathcal{C}} P_{\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{B}}$$

(注意矩阵下标) 由命题1, 可得以下过程

$$\begin{bmatrix} P_{\mathcal{C}} & P_{\mathcal{B}} \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} I & P \\ C \leftarrow \mathcal{B} \end{bmatrix}$$

或者 $P_{\mathcal{B}}[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}} = \mathbf{x} = P_{\mathcal{C}}[\mathbf{x}]_{\mathcal{C}} \implies [\mathbf{x}]_{\mathcal{C}} = P_{\mathcal{C}}^{-1}P_{\mathcal{B}}[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}} \implies P_{\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{B}} = P_{\mathcal{C}}^{-1}P_{\mathcal{B}}.$

定理 26. 关于坐标变换 $T: \mathbf{x} \mapsto [\mathbf{x}]_{\mathcal{B}}$, 其中 $\mathcal{B} = \{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n\}$, 有如下结论.

- 1. T是一个双射的线性变换, \mathbf{x} 所处的空间V与 $[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}}$ 所处的空间 \mathbb{R}^n 同构
- $S=\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_p\}$ 线性无关当且仅当 $S'=\{[\mathbf{u}_1]_{\mathcal{B}},\ldots,[\mathbf{u}_p]_{\mathcal{B}}\}$ 线性无关;S线性相关当且仅当S'线性相关

分析.
$$1. \ \Xi[\mathbf{u}]_{\mathcal{B}} = [\mathbf{w}]_{\mathcal{B}} = \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$$
, 由坐标向量定义 $\mathbf{u} = \mathbf{w} = c_1 \mathbf{b}_1 + \dots + c_n \mathbf{b}_n$, 而 \mathbf{u}, \mathbf{w} 均为 V 中任意元素,故 T 为单射. 令 $\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$, $\mathbf{u} = y_1 \mathbf{b}_1 + \dots + y_n \mathbf{b}_n$, 则由定义 $[\mathbf{u}]_{\mathcal{B}} = \mathbf{y}$, 因 \mathbf{y} 为 \mathbb{R}^n 任意向量,故 T 为满射.

2. 由定理18易知.

3 内积空间

3.1 基本定义

定义 14 (内积空间). 线性空间V上的内积是一个函数 $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \to \mathbb{R}, \forall u, v, w \in V, c$ 为常数,满足

- 1. $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{v}, \mathbf{u} \rangle$
- 2. $\langle \mathbf{u} + \mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle = \langle \mathbf{u}, \mathbf{w} \rangle + \langle \mathbf{v}, \mathbf{w} \rangle$
- 3. $\langle c\mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = c \langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$
- $4. \langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle \geq 0$,且 $\langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle = 0$ 当且仅当u = 0

定义了内积的向量空间称为内积空间.

定义 15 (长度/模/范数). V是一个内积空间,则对于某一向量 $v \in V$ 的长度为 $||v|| := \sqrt{\langle v, v \rangle}$.

注:如无特殊说明,下文在谈论到内积时都是指最简单不加权的内积,即 $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{u}^{\mathrm{T}} \mathbf{v}$.

3.2 正交

定义 16 (正交). 若 $\langle u, v \rangle = 0$, 则称u, v正交.

注: 与高中的定义不同, 这里我们可以说0与任意向量正交.

下面这些定理看似简单,因为有二维三维空间的几何直观作为基础,但拓展到高维空间这些定理还 是否会成立呢?我们不得而知,因此还应从公理出发一一证明.

定理 27 (毕达哥拉斯(Pythagoras)定理). u, v正交当且仅当 $\|\mathbf{u}\|^2 + \|\mathbf{v}\|^2 = \|\mathbf{u} + \mathbf{v}\|^2$

定义 17. 设W是向量空间V的子空间,V中与所有与W正交的向量构成的集合称为W的正交补,记为 W^{\perp} .

以下有两条性质

- 1. $\mathbf{x} \in W^{\perp} \iff \mathbf{x}$ 与张成V的一组向量中的每一个都正交
- 2. W[⊥]是V的子空间

定理 28 (正交必定线性无关). $S = \{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_p\}$ 是V的一个由非零向量构成的正交集,那么S线性无关,因此构成Span S的基.

注:一定要注意前提条件!!!

分析.

$$\mathbf{0} = c_1 \mathbf{u}_1 + c_2 \mathbf{u}_2 + \dots + c_p \mathbf{u}_p$$

$$0 = \langle \mathbf{0}, \mathbf{u}_1 \rangle = \langle c_1 \mathbf{u}_1 + c_2 \mathbf{u}_2 + \dots + c_p \mathbf{u}_p, \mathbf{u}_1 \rangle$$

$$= \langle c_1 \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1 \rangle + \langle c_2 \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_1 \rangle + \dots + \langle c_p \mathbf{u}_p, \mathbf{u}_1 \rangle$$

$$= c_1 \langle \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1 \rangle + c_2 \langle \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_1 \rangle + \dots + c_p \langle \mathbf{u}_p, \mathbf{u}_1 \rangle$$

$$= c_1 \langle \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1 \rangle$$

因为 $\mathbf{u}_1 \neq \mathbf{0}$, 所以 $c_1 = 0$. 类似地, 可以推出 $c_i = 0, i = 2, \dots, p$, 因此S线性无关.

定理 29 (正交分解). $\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_p\}$ 是V的子空间W的一组正交基,对于 $\mathbf{y}\in V$,都可以唯一表示成 $\mathbf{y}=\hat{\mathbf{y}}+\mathbf{z}$,其中 $\hat{\mathbf{y}}\in W,\mathbf{z}\in W^\perp$,且

$$\hat{\mathbf{y}} = c_1 \mathbf{u}_1 + \dots + c_p \mathbf{u}_p$$

各项为

$$\hat{\mathbf{y}}_i = \operatorname{proj}_{u_i} \hat{\mathbf{y}} = c_i \mathbf{u}_i = \frac{\langle \hat{\mathbf{y}}, \mathbf{u}_i \rangle}{\langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_i \rangle} \mathbf{u}_i = \frac{\langle \hat{\mathbf{y}}, \mathbf{u}_i \rangle}{\|\mathbf{u}_i\|} \frac{\mathbf{u}_i}{\|\mathbf{u}_i\|}, i = 1, \dots, p \qquad (*)$$

注: 与选的基没有关系, 只和W有关.

分析. 类似定理28的证明有 $\langle \hat{\mathbf{y}}, \mathbf{u}_i \rangle = \langle c_1 \mathbf{u}_1 + c_2 \mathbf{u}_2 + \dots + c_p \mathbf{u}_p, \mathbf{u}_i \rangle = c_i \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{u}_i \rangle$, 移项即得(*)式.

$$\langle \mathbf{z}, \mathbf{u}_1 \rangle = \langle \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}, \mathbf{u}_1 \rangle = \langle \mathbf{y}, \mathbf{u}_1 \rangle - \langle \frac{\langle \hat{\mathbf{y}}, \mathbf{u}_1 \rangle}{\langle \mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1 \rangle}, \mathbf{u}_1 \rangle \mathbf{u}_1 - 0 - \dots - 0$$
$$= \langle \mathbf{y}, \mathbf{u}_1 \rangle - \langle \mathbf{y}, \mathbf{u}_1 \rangle = 0$$

类似地可证明 \mathbf{z} 与W的每一个基 \mathbf{u}_i 都正交,进而 $\mathbf{z} \in W^{\perp}$.

为证明唯一性,不妨设存在另一表示方法 $\mathbf{y} = \hat{\mathbf{y}}' + \mathbf{z}'$,其中 $\hat{\mathbf{y}}' \in W$, $\mathbf{z}' \in W^{\perp}$ 那么 $\hat{\mathbf{y}} + \mathbf{z} = \hat{\mathbf{y}}' + \mathbf{z}'$, 即 $\hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}' = \mathbf{z}' - \mathbf{z}$. 因为 $\mathbf{z}, \mathbf{z}' \in W^{\perp}$,所以 $\mathbf{z}' - \mathbf{z} \in W^{\perp}$,故 $\hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}' \in W^{\perp}$,而 $\hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}' \in W$,推出 $\langle \hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}', \hat{\mathbf{y}} - \hat{\mathbf{y}}' \rangle = 0$,即 $\hat{\mathbf{y}} = \hat{\mathbf{y}}'$,同时 $\mathbf{z}' = \mathbf{z}$.

从(*)的最后一个等式可以看出,实际上正交分解与我们高中所学的向量知识是一致的,即 \mathbf{y} 在 \mathbf{u}_i 上的投影的长度再乘上该方向上的单位向量.

定理 30 (最佳估计). W 为 V的子空间, $y \in V$, 则

$$\|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\| \le \|\mathbf{y} - \mathbf{v}\|, \forall v \in W$$

分析.

$$\mathbf{y} - \mathbf{v} = (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}) + (\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{v})$$

因为 $\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{v} \in W, \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} \in W^{\perp}$, 所以由毕达哥拉斯定理

$$\|\mathbf{y} - \mathbf{v}\|^2 = \|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|^2 + \|\hat{\mathbf{y}} - \mathbf{v}\|^2$$

即得结论.

定理 31 (柯西(Cauchy)不等式).

$$\|\mathbf{u}\|\|\mathbf{v}\| \ge |\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle|$$

分析.

$$\|\operatorname{proj}_{\mathbf{u}} \mathbf{v}\| = \frac{\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle}{\|\mathbf{u}\|} \le \|\mathbf{v}\|$$

定理 32 (三角不等式).

$$\|\mathbf{u}\| + \|\mathbf{v}\| \ge \|\mathbf{u} + \mathbf{v}\|$$

分析. 平方后用柯西不等式.

命题 6. A是 $m \times n$ 矩阵,A**x** = **0**当且仅当A^TA**x** = **0**,进而Nul A = Nul A^TA. A^TA可逆当且仅当A的列线性无关. $\operatorname{rank} A$ ^TA = n – $\operatorname{dim} \operatorname{Nul} A$ ^TA = Nul A = $\operatorname{rank} A$ 分析. \mathbf{x} ^TA^TA**x** = **0**

3.3 正交矩阵

定理 33. U是 $m \times n$ 矩阵,则U每一列都单位正交当且仅当 $U^{\mathrm{T}}U = I$ 分析.

$$U^{\mathrm{T}}U = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{1}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \mathbf{u}_{n}^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} [\mathbf{u}_{1} \quad \cdots \quad \mathbf{u}_{n}] = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}_{1} & \cdots & \mathbf{u}_{1}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}_{n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{u}_{n}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}_{1} & \cdots & \mathbf{u}_{n}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}_{n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} = I$$

定理 34. $U \not\in m \times n$ 矩阵且每一列都单位正交, $x, y \in \mathbb{R}^n$

- 1. $||U\mathbf{x}|| = ||\mathbf{x}||$
- 2. $(U\mathbf{x}) \cdot (U\mathbf{y}) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$
- 3. $(U\mathbf{x}) \cdot (U\mathbf{y}) = 0 \iff \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = 0$

分析. $(U\mathbf{x}) \cdot (U\mathbf{y}) = (U\mathbf{x})^{\mathrm{T}}(U\mathbf{y}) = \mathbf{x}^{\mathrm{T}}U^{\mathrm{T}}U\mathbf{y} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$, 1,3同理可证.

定义 18 (正交矩阵). 若U为方阵且每一列都单位正交,则称U为正交矩阵.

注:从定义上看似乎应该叫单位正交矩阵(orthonormal matrix)比较合适,但实际上在线性代数中正交矩阵(orthogonal matrix)已经包含了单位正交的意思.

由以上定理和定义可知下面几条显然的结论.

命题 7. 1. U为方阵则一定可逆,因 $U^{T}U = I = U^{-1}U = I$

- 2. U, V均为正交矩阵,则UV也为正交矩阵
- 3. U中的列交换一下得到V,则V也为正交矩阵

命题 8. $\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_p\}$ 是V的子空间W的一组单位正交基,则 $\mathrm{proj}_W\,\mathbf{y}=UU^\mathrm{T}\mathbf{y},\,\forall\mathbf{y}\in V$

算法 4 (施密特(Schmidt)正交化). 设 $\{v_1, \ldots, v_n\}$ 是W的一组基, 定义

$$\mathbf{u}_{1} = \mathbf{v}_{1}$$

$$\mathbf{u}_{2} = \mathbf{v}_{2} - \operatorname{proj}_{\mathbf{u}_{1}} \mathbf{v}_{2}$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{u}_{p} = \mathbf{v}_{p} - \sum_{i=1}^{p-1} \operatorname{proj}_{\mathbf{u}_{j}} \mathbf{v}_{p}$$

则 $\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_p\}$ 是W的一组正交基,且

$$\operatorname{Span}\{\mathbf{v}_1,\ldots,\mathbf{v}_k\} = \operatorname{Span}\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_k\}, \forall \ 1 \leq k \leq p$$

注:此过程说明了结合向量空间基的存在性可说明正交基的存在性.

分析. 设 $V_k = \operatorname{Span}\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}, W_k = \operatorname{Span}\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k\}, 1 \leq k \leq p, \ \mathbb{M}\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{v}_{k+1} - \operatorname{proj}_{W_k}\mathbf{v}_{k+1}, \ \mathbb{H}\mathbf{v}_{k+1} \in W_{k+1}^{\perp}, \ \mathbb{H}\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{v}_{k+1} - \operatorname{proj}_{W_k}\mathbf{v}_{k+1}, \ \mathbb{H}\mathbf{v}_{k+1} \in W_{k+1}^{\perp}, \ \mathbb{H}\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{v}_{k+1} - \operatorname{proj}_{W_k}\mathbf{v}_{k+1}, \ \mathbb{H}\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{v}_{k+1} + \operatorname{proj}_{W_k}\mathbf{v}_{k+1} + \operatorname{proj}_{W_k}$

定理 35 (QR分解). $若m \times n$ 矩阵A的**列线性无关**,则A可被分解为A = QR,其中Q是 $m \times n$ 矩阵且它的列形成Col A的**单位正交**基,R是 $n \times n$ 可逆上三角矩阵且对角线上元素全为正数.

注:在下面的证明可以看出A=QR,单位正交不是必须的,但可能因为具有某种性质,所以才要强调单位正交.

分析. 施密特正交化将A的列转为正交基 $\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_n\}$,则 $Q=\left[\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_n\right]$. 由算法A的分析知 $\mathbf{x}_k\in V_k=W_k$,故存在 r_{k1},\ldots,r_{kk} ,使得

$$\mathbf{x}_k = r_{k1}\mathbf{u}_1 + \dots + r_{kk}\mathbf{u}_k + 0 \cdot \mathbf{u}_{k+1} + \dots + 0 \cdot \mathbf{u}_n$$

假设 $r_{kk} \geq 0$ (否则给 r_{kk} 和 \mathbf{u}_k 同乘-1),令

$$\mathbf{r}_k = egin{bmatrix} r_{k1} \ dots \ r_{kk} \ 0 \ dots \ 0 \end{bmatrix}$$

为R的列,显然R为上三角,即可满足 $\mathbf{x}_k = Q\mathbf{r}_k$.

算法 $\mathbf{5}$ (QR分解). 1. 先将A的列向量单位正交化,得到Q

2. 通过 $R = IR = Q^{T}QR = Q^{T}A$ 计算得R

4 特征值与特征向量

4.1 基本定义

定义 19. $A \rightarrow n \times n$ 的矩阵, 若 $\exists \lambda, \mathbf{x} \neq \mathbf{0} s.t. A\mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}$, 则

- 1. λ 称为A的特征值, x称为关于 λ 的特征向量
- 2. $Nul(A \lambda I)$ 称为A关于 λ 的特征空间
- $3. \det (A \lambda I)$ 称为A的特征多项式
- 4. λ的代数重数是它在特征多项式中作为根的重数, 几何重数是它对应的特征空间的维度需要注意:

- 1. 特征向量不能为0, 但特征值可以为0
- 2. A不可逆,则0是一个特征值(充要条件); $A \lambda I$ 不可逆,A才有特征值

定理 36. $\lambda_1, \dots, \lambda_r \in A \times n$ 矩阵 $A \times n$ 矩阵 $A \times n$ 矩阵 $A \times n$ 矩位,则其对应的特征向量 $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_r\}$ 线性无关.

分析. 反证, 假设 $\{\mathbf{v}_1,\cdots,\mathbf{v}_r\}$ 线性相关. 令p是最小的下标使得 \mathbf{v}_{p+1} 是之前向量的线性组合, 即

$$c_1 \mathbf{v}_1 + \dots + c_p \mathbf{v}_p = \mathbf{v}_{p+1} \tag{1}$$

左右同乘A, 得

$$c_1 A \mathbf{v}_1 + \dots + c_p A \mathbf{v}_p = A \mathbf{v}_{p+1}$$

进而

$$c_1 \lambda_1 \mathbf{v}_1 + \dots + c_p \lambda_p \mathbf{v}_p = \lambda_{p+1} \mathbf{v}_{p+1} \tag{2}$$

将(1)式同乘 λ_{p+1} ,并与(2)式相减得

$$c_1(\lambda_1 - \lambda_{p+1})\mathbf{v}_1 + \dots + c_p(\lambda_p - \lambda_{p+1})\mathbf{v}_p = \mathbf{0}$$

由于 $\{\mathbf{v}_1,\cdots,\mathbf{v}_p\}$ 线性无关,则它们的权重 $c_i(\lambda_i-\lambda_{p+1})=0,\,i=1,\ldots,p$.而A的特征值均不同,故 $\lambda_i-\lambda_{p+1}\neq 0$,因而 $c_i=0,\,i=1,\ldots,p$.

但由(1)又推出 $\mathbf{v}_{p+1} = \mathbf{0}$,与特征向量的定义矛盾,故假设不成立.

命题 9. 特征值与矩阵运算

- 1. λ 为可逆矩阵A的特征值,则 λ^{-1} 为 A^{-1} 的特征值
- $2. \lambda 是 A$ 的特征值, 当且仅当 $\lambda 是 A^T$ 的特征值

分析. 前者给 $A\mathbf{x}=\lambda\mathbf{x}$ 左乘 A^{-1} 后显然. 后者 $\det(A-\lambda I)=\det(A-\lambda I)^T=\det(A^T-\lambda I)$ 特征多项式相同定义 20 (相似性). 矩阵A,B满足 $A=P^{-1}BP$,则称A,B相似.

注:相似性不同于行等价,行变换会改变矩阵的特征值,但相似性不会变

4.2 对角化

定理 37. $n \times n$ 矩阵A可对角化当且仅当A有n个线性无关的特征向量.

分析.

 1° 必要性: A可对角化,即 $A = PDP^{-1}$,D为对角矩阵,也即AP = PD.设 $P = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n \end{bmatrix}$, $D = \begin{bmatrix} \lambda_1 \mathbf{e}_1, \dots, \lambda_n \mathbf{e}_n \end{bmatrix}$ (注意这里 \mathbf{v}_i 只是P的列,还不是特征向量;同样 λ_i 也还不是A的特征值).则

$$AP = [A\mathbf{v}_1, \dots, A\mathbf{v}_n] = PD = [\lambda_1\mathbf{v}_1, \dots, \lambda_n\mathbf{v}_n]$$

进而 $A\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$, $\lambda_i \to A$ 的特征值, $\mathbf{v}_i \neq 0$, $\mathbf{v}_i \to \lambda_i$ 对应的特征向量. 由于P可逆, 故P的列, 也即A的特征向量线性无关.

 2° 充分性: 令 $P = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n]$, 其中 \mathbf{v}_i 为 λ_i 对应的特征向量, $D = [\lambda_1 \mathbf{e}_1, \dots, \lambda_n \mathbf{e}_n]$,其中 λ_i 为A的特征向量.那么

$$AP = [A\mathbf{v}_1, \dots, A\mathbf{v}_n] = [\lambda_1\mathbf{v}_1, \dots, \lambda_n\mathbf{v}_n] = PD$$

因为 \mathbf{v}_i 线性无关,故P可逆,进而 $A = PDP^{-1}$.

注: 从以上构造可以知道λ相同并不影响对角矩阵的构造, 但是v相同则无法保证线性无关.

定理 38. $若n \times n$ 矩阵A有n个不同的特征值,则A可对角化.

分析. 从定理36可知, $\{\mathbf{v}_1,\cdots,\mathbf{v}_r\}$ 线性无关,进而由定理37,A可对角化.

算法 6 (对角化).

- 1. 找到A的特征值
- 2. 找到A的线性无关特征向量
- 3. 构造P, 其中 $P = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n \end{bmatrix}$
- 4. 构造D,其中 $D = \left[\lambda_1 \mathbf{e}_1, \dots, \lambda_n \mathbf{e}_n\right]$

注:对角化不是唯一的,会随着特征值摆放位置、特征向量的不同而改变.可逆与可对角化没有必然联系.

定理 39. $A \not\in n$ 矩阵, $\lambda_1, \dots, \lambda_p \not\in A$ 不同的特征值, 则

- 1. $\forall 1 < k < p$, λ_k 的几何重数 $< \lambda_k$ 的代数重数
- 2. A可对角化,当且仅当不同特征值的几何重数之和为n,而这当且仅当对于每一个 λ_k ,其代数重数都等于几何重数
- 3. 若A可对角化, \mathcal{B}_k 是 λ_k 对应的特征空间的基,那么 $\mathcal{B}_1, \ldots, \mathcal{B}_n$ 形成 \mathbb{R}^n 的一组特征向量基

定理 40 (线性变换矩阵). $\mathcal{B} = \{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n\}$ 为向量空间V的基, $\mathcal{C} = \{\mathbf{b}_{c_1}, \dots, \mathbf{b}_{c_m}\}$ 为向量空间W的基,线性变换 $T: V \to W$,存在唯一 $m \times n$ 矩阵M使得

$$[T(\mathbf{x})]_{\mathcal{C}} = M[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}}, \, \forall \mathbf{x} \in V$$

其中

$$M = \begin{bmatrix} [T(\mathbf{b}_1)]_{\mathcal{C}} & [T(\mathbf{b}_2)]_{\mathcal{C}} & \cdots & [T(\mathbf{b}_n)]_{\mathcal{C}} \end{bmatrix}$$

称为T关于基 \mathcal{B} 和 \mathcal{C} 的矩阵 (the matrix for T relative to the bases \mathcal{B} and \mathcal{C}). 特别地,当线性空间和基取特殊值时,可以得到我们之前求得的一些矩阵.

1. T的标准矩阵 $(standard\ matrix\ for\ T)$ $A = \left[T(\mathbf{e}_1), \dots, T(\mathbf{e}_n)\right], \ \ \exists \ V = W = \mathbb{R}^n, \mathcal{B} = \mathcal{C} = \mathcal{E} \ (\mathbb{R}^n + \mathbf{e})$ 的标准基)

2. T的B矩阵 (the matrix for T relative to \mathcal{B} , or the \mathcal{B} -matrix for T) $[T]_{\mathcal{B}} = [[T(\mathbf{b}_1)]_{\mathcal{B}}, \dots, [T(\mathbf{b}_n)]_{\mathcal{B}}], \quad \exists V = W, \mathcal{B} = \mathcal{C}$

- 3. 坐标变换矩阵 (change-of-coordinates matrix), 右乘坐标可以将坐标变换成具体的 \mathbf{x} $P_{\mathcal{B}} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n \end{bmatrix}$, 当 $V = W = \mathbb{R}^n, \mathcal{C} = \mathcal{E}$, $T(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$
- 4. 过渡矩阵/B到C的坐标变换矩阵 (change-of-coordinates matrix from \mathcal{B} to \mathcal{C}) $P_{\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{B}} = \left[[\mathbf{b}_1]_{\mathcal{C}}, \dots, [\mathbf{b}_n]_{\mathcal{C}} \right], \quad \exists V = W, \quad T(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$

分析. 1° 存在性:

$$[T(\mathbf{x})]_{\mathcal{C}} = [T(x_1\mathbf{b}_1 + \dots + x_n\mathbf{b}_n)]_{\mathcal{C}}$$

$$= x_1[T(\mathbf{b}_1)]_{\mathcal{C}} + \dots + x_n[T(\mathbf{b}_n)]_{\mathcal{C}}$$

$$= [[T(\mathbf{b}_1)]_{\mathcal{C}}, \dots, [T(\mathbf{b}_n)]_{\mathcal{C}}] \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

$$= [[T(\mathbf{b}_1)]_{\mathcal{C}}, \dots, [T(\mathbf{b}_n)]_{\mathcal{C}}][\mathbf{x}]_{\mathcal{B}}$$

$$= M[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}}$$

 2° 唯一性: 设存在另一矩阵M'使得 $[T(\mathbf{x})]_{\mathcal{C}} = M'[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}}$,故 $M[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}} = M'[\mathbf{x}]_{\mathcal{B}}$,令 $\mathbf{x} = \mathbf{b}_i$ 即得M = M'

分析.

$$[T]_{\mathcal{B}} = \left[[T(\mathbf{b}_1)]_{\mathcal{B}}, \dots, [T(\mathbf{b}_n)]_{\mathcal{B}} \right]$$

$$= \left[[A\mathbf{b}_1]_{\mathcal{B}}, \dots, [A\mathbf{b}_n]_{\mathcal{B}} \right]$$

$$= \left[P^{-1}A\mathbf{b}_1, \dots, P^{-1}A\mathbf{b}_n \right] \quad \text{坐标变换}$$

$$= P^{-1}A\left[\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n\right]$$

$$= P^{-1}AP = D$$

求解方法 $\begin{bmatrix} P & AP \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} I & P^{-1}AP \end{bmatrix}$. 由上面分析知D不需是对角矩阵,只要A与D相似即可.

如下图所示³,一个线性变换T对于标准基(或其他基)的矩阵为A,为了更清楚地通过矩阵看出这个线性变换的效果,就将A对角化: $A = PDP^{-1}$.这其实相当于先把标准基换成由特征向量组成的基(P^{-1} 的意义),于是每一个基向量在经过T变换后都只是乘了个常数(D的意义),最后再把由特征向量组成的基换回标准基(P的意义)。因此对角化其实是用一组比标准基更好的基来描述线性变换,也就是由特征向量组成的基. 至于更好的基,由特征向量组成的规范正交基(谱定理)描述的则更好.

定义 21 (迹(trace)). A为 $n \times n$ 的方阵, A主对角线上元素之和称为A的迹, 定义为

$$\operatorname{tr} A = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$$

定理 41. 若A, B均为 $n \times n$ 的方阵,则tr(AB) = tr(BA)

³图根据课本重绘,话摘自线性变换的矩阵为什么要强调在这组基下? - 匡世珉的回答 - 知乎 https://www.zhihu.com/question/22218306/answer/88697757

$$\begin{array}{c|c} \mathbf{x} & \xrightarrow{\mathfrak{R}A} & A\mathbf{x} \\ & & & \uparrow \\ & & & \downarrow \\ [\mathbf{x}]_{\mathcal{B}} & \xrightarrow{\mathfrak{R}D} & [A\mathbf{x}]_{\mathcal{B}} \end{array}$$

分析.

$$\operatorname{tr}(AB) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{ji} = \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} a_{ji} b_{ij} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} b_{ij} a_{ji} = \operatorname{tr}(BA)$$

定理 42 (相似性一些定理). 已知A与B相似,

- 1. 若A可逆,则A-1与B-1相似
- 2. 则 A^k 与 B^k 相似
- 3. A与C相似,则B与C相似
- 4. A可对角化,则B也可对角化
- 5. $A = PBP^{-1}$, x是A关于 λ 的特征向量,则 P^{-1} x是B关于 λ 的特征向量
- 6. $\operatorname{rank} A = \operatorname{rank} B$

5 对称矩阵与二次型

5.1 谱分解

定义 22 (对称矩阵). $A^{T} = A$ (显然得是方阵)

定理 43. A为对称矩阵, 任两个不同特征空间的特征向量一定正交

分析. 设 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ 为不同特征值 λ_1, λ_2 对应的特征向量

$$\lambda_1 \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 = (\lambda_1 \mathbf{v}_1)^{\mathrm{T}} \mathbf{v}_2 = (A \mathbf{v}_1)^{\mathrm{T}} \mathbf{v}_2$$
$$= \mathbf{v}_1^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} \mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_1^{\mathrm{T}} (A \mathbf{v}_2)$$
$$= \lambda_2 \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2$$

进而 $(\lambda_1 - \lambda_2)\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 = 0$,而 λ_1, λ_2 不同,故 $\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_2 = 0$

定义 23 (正交对角化). 若存在对角矩阵D和正交矩阵P使得 $A=PDP^{\mathrm{T}}=PDP^{-1}$,则称A可正交对角化算法 7 (正交对角化).

- 1. 先将矩阵一般对角化, 暂不用求 P^{-1}
- 2. 然后将P的列施密特单位正交化, 使P变为正交矩阵
- $3. P^{T} = P^{-1}$ 直接求得P的逆

定理 44 (谱定理). $A \rightarrow n \times n$ 的对称矩阵,则

- 1. A有n个实特征值(包含重数)
- $2. \dim W_{\lambda_i} = \lambda_i$ 的代数重数
- 3. 特征空间相互正交, 对应不同特征值的特征向量都正交
- 4. A可以被正交对角化(充要条件)

注:正交矩阵不一定可以被正交对角化,正交对角化一定会产生正交矩阵,要理清关系.

定理 45 (谱分解). A为对称矩阵,记正交矩阵P的列为 \mathbf{u}_i ,则 $A = \lambda_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{u}_1^\mathrm{T} + \lambda_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{u}_2^\mathrm{T} + \cdots + \lambda_n \mathbf{u}_n \mathbf{u}_n^\mathrm{T}$

定义 24 (投影矩阵). A是对称矩阵且 $A^2 = A$, 则称其为投影矩阵

命题 11. 若 $A = \mathbf{u}\mathbf{u}^{\mathrm{T}}$, 其中 $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$ 为单位向量,则

- 1. A是投影矩阵
- 2. $A\mathbf{x} = \operatorname{proj}_{\mathbf{u}} \mathbf{x}$
- 3. u是A的特征向量

5.2 奇异值分解

定理 46. $A^{T}A$ 的特征值均为非负数

分析. $\forall \mathbf{u}_i, \|A\mathbf{u}_i\|^2 = (A\mathbf{u}_i)^T A\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_i^T (A^T A)\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_i^T \lambda_i \mathbf{u}_i = \lambda_i \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i = \lambda_i \|\mathbf{u}_i\| \ge 0 \implies \lambda_i \ge 0$,故 $\partial \mathbf{u}_i = \sqrt{\lambda_i} = \|A\mathbf{u}_i\| \mathbf{u}_i \|\mathbf{u}_i\| + \|A\mathbf{u}_i\| + \|A\mathbf{u}_i\|$

定义 25 (奇异值). A的奇异值是 $A^{T}A$ 的特征值的算术平方根,记为 $\sigma_{i} := \sqrt{\lambda_{i}}, \forall 1 \leq i \leq n$,且呈递减序列。

定理 47. A为 $m \times n$ 矩阵, $A^{\mathrm{T}}A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_{i} \mathbf{u}_{i} \mathbf{u}_{i}^{\mathrm{T}}$,假设有r个非零特征值,不妨设 $\lambda_{1} \geq \lambda_{2} \geq \cdots \geq \lambda_{r} > \lambda_{r+1} = \cdots = \lambda_{n} = 0$,则 $\{A\mathbf{u}_{1}, \ldots, A\mathbf{u}_{r}\}$ 是 $\mathrm{Col}\,A$ 正交基,且 $\mathrm{rank}\,A = r$.

分析. $||A\mathbf{u}_i|| = \sqrt{\lambda_i} \neq 0, i = 1, \dots, r$

正交性: $\forall i \neq j, (A\mathbf{u}_i) \cdot (A\mathbf{u}_j) = \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} A \mathbf{u}_j = \lambda_j \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{u}_j = 0$

任取 $\mathbf{v} \in \operatorname{Col} A$, 即 $\exists \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n s.t. A\mathbf{x} = \mathbf{v}$, 其中 $\mathbf{x} = c_1 \mathbf{u}_1 + \cdots + c_n \mathbf{u}_n$, 则 $\mathbf{v} = c_1 A \mathbf{u}_1 + \cdots + c_n A \mathbf{u}_n = c_1 A \mathbf{u}_1 + \cdots + c_r A \mathbf{u}_r + 0 + \cdots + 0$, 即说明 \mathbf{v} 可由 $\{A \mathbf{u}_1, \dots, A \mathbf{u}_r\}$ 线性表示, 故证毕.

定理 48 (奇异值分解(SVD)). A是 $m \times n$ 的矩阵, $\operatorname{rank} A = r$,则存在 $m \times n$ 矩阵 $\Sigma = \begin{bmatrix} D & O \\ O & O \end{bmatrix}$,其中D的 对角线是前r个A的奇异值,且 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$,那么存在 $m \times m$ 正交矩阵U和 $n \times n$ 正交矩阵V使得 $A = U \Sigma V^{\mathrm{T}}$.

分析. 设 $A^{\mathrm{T}}A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i^{\mathrm{T}}$, 其有r个非零特征值, $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > 0$.

 $\{A\mathbf{u}_1,\ldots,A\mathbf{u}_r\}$ 是 $\mathrm{Col}\,A$ 正交基,将其标准化,得 $\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_r\}$,其中 $\mathbf{u}_i=\frac{A\mathbf{v}_i}{\|A\mathbf{v}_i\|}=\frac{1}{\sigma_i}A\mathbf{v}_i$,即 $A\mathbf{v}_i=\sigma_i\mathbf{u}_i$. 将 $\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_r\}$ 拓展为 \mathbb{R}^m 的正交基 $\{\mathbf{u}_1,\ldots,\mathbf{u}_m\}$,令

$$U = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & \cdots & \mathbf{u}_m \end{bmatrix}, V = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_1 & \cdots & \mathbf{v}_n \end{bmatrix}$$

那么U,V均为正交矩阵,而且

$$AV = \begin{bmatrix} A\mathbf{v}_1 & \cdots & A\mathbf{v}_r & \mathbf{0} \cdots \mathbf{0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1\mathbf{u}_1 & \cdots & \sigma_r\mathbf{u}_r & \mathbf{0} \cdots \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

进而

$$U\Sigma = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1 & \cdots & \mathbf{u}_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D & O \\ O & O \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} A\mathbf{v}_1 & \cdots & A\mathbf{v}_r & \mathbf{0} \cdots \mathbf{0} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \mathbf{u}_1 & \cdots & \sigma_r \mathbf{u}_r & \mathbf{0} \cdots \mathbf{0} \end{bmatrix}$$
$$= AV$$

因为V为正交矩阵,故 $U\Sigma V^{\mathrm{T}} = AVV^{\mathrm{T}} = A$.

算法 8 (奇异值分解). 分为以下几个步骤

- 1. 对 $A^{T}A$ 正交对角化
- 2. 建立起 Σ 和V
- 3. 建立起U

5.3 二次型

定义 26 (二次型). $Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} A \mathbf{x}$, 其中A是对称矩阵

将二次型合并为矩阵的写法,平方项放对角线,交叉项取一半对称写.以三元二次型为例,观察下面各个元素的去向.

$$Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} A \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$
$$= a_{11} x_1^2 + a_{22} x_2^2 + a_{33} x_3^2 + (a_{12} + a_{21}) x_1 x_2 + (a_{13} + a_{31}) x_1 x_3 + (a_{23} + a_{32}) x_2 x_3$$

定理 49 (主轴定理). $\mathbf{x} = P\mathbf{y}$, 存在P将二次型 $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}A\mathbf{x}$ 转为 $\mathbf{y}^{\mathrm{T}}D\mathbf{y}$, 其中P的列(A的单位特征向量)称为 $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}A\mathbf{x}$ 的主轴.

算法 9 (标准型变换). 将矩阵A正交对角化后,得到 $A = PDP^{-1}$,做变换 $\mathbf{x} = P\mathbf{y}$,可得 $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}A\mathbf{x} = \mathbf{y}^{\mathrm{T}}D\mathbf{y}$,由于D为对角矩阵,由上面的分析即可知变换后的二次型不存在交叉项,这种形式称为标准型. 又 $\mathbf{x} = P\mathbf{y}$,令 $\mathbf{y} = \mathbf{e}_i$ (变换后的主轴在坐标轴上),可得 $\mathbf{x} = \mathbf{u}_i$,即原来的主轴为P的列,也即A的特征向量.

定义 27. 对于二次型 $Q(\mathbf{x})$

- 1. 若 $Q(\mathbf{x}) > 0 \ \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, 正定 $\iff \forall \lambda > 0$; $Q(\mathbf{x}) > 0 \ \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, 半正定
- 2. 若 $Q(\mathbf{x}) < 0 \ \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, 负定 $\iff \forall \lambda < 0$; $Q(\mathbf{x}) \leq 0 \ \forall \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, 半负定
- $3. Q(\mathbf{x})$ 正负值都有,不定

分析. 对二次型进行标准型变换使其没有交叉项, $Q(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^{\mathrm{T}} A \mathbf{x} = \mathbf{y}^{\mathrm{T}} D \mathbf{y} = \lambda_1 y_1^2 + \dots + \lambda_n y_n^2$, 进而得证.

命题 12. 1. $B \to m \times n$ 矩阵, $B^T B \to \mu$ 正定;若 $B \to \mu$ 方阵且可逆,则 $B^T B$ 正定.

分析. $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}(B^{\mathrm{T}}B)\mathbf{x} = ||B\mathbf{x}|| \geq 0$, 可逆则 $B\mathbf{x} = \mathbf{0}$ 只有平凡解.

2. A为方阵且正定,那么存在一个正定方阵B使得 $A = B^TB$

命题 13. A, B均为方阵, 且特征值均为正数, 则A + B的特征值也全为正数.

分析.
$$\mathbf{x}^{\mathrm{T}}A\mathbf{x} > 0, \mathbf{x}^{\mathrm{T}}B\mathbf{x} > 0 \implies \mathbf{x}^{\mathrm{T}}(A+B)\mathbf{x} > 0$$

5.4 带约束的最值问题

定理 50. 二次型
$$Q$$
, $\min_{\|\mathbf{x}\|=1} Q(\mathbf{x}) = \lambda_{\min}$, $\max_{\|\mathbf{x}\|=1} Q(\mathbf{x}) = \lambda_{\max}$

分析. 化为标准型后直接放缩即可.

定理 51.
$$A$$
为 $m \times n$ 矩阵, $\min_{\|\mathbf{x}\|=1} \|A\mathbf{x}\| = \lambda_{\min}$, $\max_{\|\mathbf{x}\|=1} \|A\mathbf{x}\| = \lambda_{\max}$

分析. $||A\mathbf{x}||^2 = (A\mathbf{x})^T A\mathbf{x} = \mathbf{x}^T (A^T A)\mathbf{x}$ 进而转化为二次型. 实际上 $||A\mathbf{x}|| \le \lambda ||x||$.

6 仿射空间

由于这一章涉及的概念太多,且比较难找到对应的中文术语,故在专业术语后都会标上对应的英文名称.

6.1 仿射组合与凸组合

定义 28 (仿射组合与凸组合). \mathbb{R}^n 中的向量 $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p$ 的线性组合 $c_1\mathbf{v}_1 + \dots + c_p\mathbf{v}_p$,若满足权重 $c_1 + \dots + c_p = 1$,则该线性组合称为仿射组合,集合S所有点仿射组合的集合称为仿射包(affine hull)或仿射生成(affine span)集,记为aff S. 在仿射组合的基础上满足权重 $c_i \geq 0, i = 1, \dots, p$,则该线性组合称为凸组合,集合S所有点凸组合的集合称为凸包(convex hull),记为conv S.

由定义得知, $S = \{\mathbf{v}_1\}$ 时,aff S和conv S均为一个点 \mathbf{v}_1 ; $S = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$ 时,aff S是通过 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ 的直线(定比分点),conv S则是线段 $\overline{\mathbf{v}_1\mathbf{v}_2}$; $S = \{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$ 时,aff S是通过 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ 的平面,conv S则是三角形 $\Delta \mathbf{v}_1\mathbf{v}_2\mathbf{v}_3$; 以此类推.

定义 29 (仿射(affine)与凸性(convex)). 对于集合S, 若 \forall **u**, **v** \in S, (1-t)**u** + t**v** \in S, \forall t \in \mathbb{R} , 则称S是仿射集. 若 \forall **u**, **v** \in S, $\overline{\mathbf{uv}}$ \in S, 则称S是凸集.

定理 52. 以下是关于仿射集和凸集的一些定理.

- 1. S是仿射集当且仅当S = aff S; S是凸集当且仅当S = conv S
- 2. 仿射集的子集是仿射集, 凸集的子集是凸集

定义 30. \mathbb{R}^n 的一个集合S经向量 \mathbf{p} 的平移(translate)变为 $S+\mathbf{p}=\{\mathbf{s}+\mathbf{p}|\mathbf{s}\in S\}$. \mathbb{R}^n 的一个面(flat) 4 是 \mathbb{R}^n 子空间的一个平移. 若一个面是另一个的平移,则两个面平行. 一个面的维度是它对应的平行子空间的维度. S的维度是包含S最小的面的维度. \mathbb{R}^n 中的线是一维的面, \mathbb{R}^n 中的超平面(hyperplane)是n-1维的面. 注:由于子空间必须包含零点,故经过平移的子空间就不是子空间了,就称为面. 真(proper)面即不包含自己的面.

定义 31 (齐次(homogeneous)坐标). 对于 $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$, 其标准齐次坐标为 $\tilde{\mathbf{v}} = \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1}$

引入齐次坐标的好处有以下几点.

- 1. 合并矩阵加法乘法运算
- 2. 引入无穷远点等同于其他点

定义 32 (仿射无关). 若存在 c_1, \ldots, c_p 不全为0, 使得 $c_1 + \cdots + c_p = 0, c_1 \mathbf{v}_1 + \cdots + c_p \mathbf{v}_p = \mathbf{0}$, 则称 $\{\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_p\} \in \mathbb{R}^n$ 仿射相关,否则称为仿射无关.

定理 53. $S = \{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p\} \in \mathbb{R}^n, p \geq 2$, 以下命题都等价

- 1. S仿射相关
- 2. S其中一个点是其他点的仿射组合
- 3. $\{\mathbf{v}_2 \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p \mathbf{v}_1\} \in \mathbb{R}^n$ 线性相关
- $4. \{\tilde{\mathbf{v}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{v}}_n\} \in \mathbb{R}^{n+1}$ 线性相关

定理 54 (向量唯一表示定理(仿射组合)). $S = \{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}$ 是 \mathbb{R}^n 的仿射无关集,那么 $\forall \mathbf{p} \in \text{aff } S$ 有唯一向量表示

$$\mathbf{p} = c_1 \mathbf{v}_1 + \dots + c_k \mathbf{v}_k$$
 $\exists c_1 + \dots + c_k = 1$

其中 c_1, \ldots, c_n 称为**p**的质心(barycentric)坐标或仿射坐标.

分析. 相当于解 $\tilde{\mathbf{p}} = c_1\tilde{\mathbf{v}}_1 + \cdots + c_k\tilde{\mathbf{v}}_k$, 通过高斯消元初等行变换可得. 广泛应用于图像渐变、透视关系.

定理 55. 1. 一个非空子集S是仿射集当且仅当它是一个面

- 2. S仿射无关, $\mathbf{p} \in \operatorname{aff} S$, 那么 $\mathbf{p} \in \operatorname{conv} S$ 当且仅当 \mathbf{p} 的质心坐标全部非负
- $3. \operatorname{conv} S$ 是所有包含S的凸集的交

定理 56 (Caratheodory). S是 \mathbb{R}^n 的一个非空子集,那么 $\operatorname{conv} S$ 的每一个点都可以被表示成S中小于等于n+1个点的凸组合

6.2 超平面

定义 33 (线性泛函(linear functional)). 线性变换 $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ 是一个线性泛函. $\forall d \in \mathbb{R}, [f:d] := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : f(\mathbf{x}) = d\}$. 零泛函是使得 $f(\mathbf{x}) = 0, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ 的变换,其他均称为非零.

⁴https://en.wikipedia.org/wiki/Flat_(geometry)

定理 57. \mathbb{R}^n 的子集H是一个超平面当且仅当H = [f:d], 其中f是非零泛函, $d \in \mathbb{R}$. 因此, 若H是一个超平面,则存在一个非零向量 \mathbf{n} 和 $d \in \mathbb{R}$ 使得 $H = \{\mathbf{x} : \mathbf{n} \cdot \mathbf{x} = d\}$

定义 34 (拓扑概念). $\forall \mathbf{p} \in \mathbb{R}^n, \delta > 0$,中心为 \mathbf{p} ,半径为 δ 的开球(open ball)记为 $B(\mathbf{p}, \delta) := {\mathbf{x} : \|\mathbf{x} - \mathbf{p}\| < \delta}$. 给定集合 $S \in \mathbb{R}^n$,若 $\exists \delta > 0$ s.t. $B(\mathbf{p}, \delta) \subset S$,则称 $\mathbf{p} \not\in S$ 的内点(interior point). 若每一个中心在 \mathbf{p} 的开球都与S和S的补相交,则 $\mathbf{p} \not\in S$ 的边界点(boundary point). 若S不包含任一边界点,则称S是开的(open);若S包含所有边界点,则称S是闭的(closed);否则既不开也不闭. 若 $\exists \delta > 0$ s.t. $S \subset B(\mathbf{0}, \delta)$,则称S是有界的(bounded). S同时是闭的,又是有界的,则称S是紧的(compact). (欧氏空间上有界闭集等于紧集)

定理 58. 开集的凸包是开的, 紧集的凸包是紧的, 但闭集的凸包不一定是闭的

定义 35. 称超平面H = [f:d]将集合A, B分隔(seperate),若满足以下其一

- 1. $f(A) \leq d \coprod f(B) \geq d$
- 2. $f(A) > d \coprod f(B) < d$

定理 59. A, B均为非空凸集,A是紧集,B是闭集,那么存在一个超平面H严格分割A, B,当且仅当 $A \cap B = \emptyset$

定理 60. A, B均为非空紧集,那么那么存在一个超平面H严格分割A, B,当且仅当 $(conv\ A)\cap (conv\ B)=\emptyset$

6.3 多胞形

定义 36 (多胞形(polytopes)). \mathbb{R}^n 中的多胞形是有限集合的凸包. \mathbb{R}^2 中,多胞体就是简单的多边形; \mathbb{R}^3 ,则是多面体.

定义 37. S是 \mathbb{R}^n 紧致的凸集,F是S的非空子集,若 $F \neq S$, $\exists H = [f:d] s.t. F = S \cap H$ 以及 $f(S) \leq d$ 或 $f(S) \geq d$,则称F为S的面(face). H称为S的支撑超平面(supporting hyperplane). 若dim F = k,则F称为S的k-面. 若P是k维的多胞体,称P为k-多胞体. P的0-面称为顶点(vertex/vertices),1-面称为边(edge),k-1-面是S的facet.

定义 38 (端点). S是凸集,若 $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in S, \mathbf{p} \in \overline{\mathbf{x}}, \mathbf{y} \in S, \mathbf{p} \in S, \mathbf{p}$

定义 39 (最小表示). 若多胞形 $P = \text{conv}\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}$ 且 $\mathbf{v}_i \notin \text{conv}\{\mathbf{v}_j : j \neq i\}, \forall i = 1, \dots, k$,则称 $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}$ 是P的 最小表示(minimal representation).

定理 61. $M = \{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}$ 是多胞形P的最小表示,则以下说法等价

- 1. $p \in M$
- 2. p是P的顶点
- 3. p是P的端点

定理 62. S是非空紧致凸集,则S是它轮廓(S的端点)的凸包

定理 $63.\ f$ 是一个定义在非空紧致凸集S上的线性泛函,则存在S的端点 $\hat{\mathbf{v}},\hat{\mathbf{w}}$ 使得

$$f(\hat{\mathbf{v}}) = \max_{\mathbf{v} \in S} f(\mathbf{v}) \quad f(\hat{\mathbf{w}}) = \min_{\mathbf{v} \in S} f(\mathbf{v})$$

注:线性规划极值点取得依据

定义 40 (单纯形(simplex))。单纯形是有限仿射无关向量构成的集合的凸包. \mathbb{R}^2 中,多胞体就是简单的多边形; \mathbb{R}^3 ,则是多面体.

0-单纯形
$$S^0$$
:一个点 $\{\mathbf{v}_1\}$

k-单纯形 S^k : $conv(S^{k-1} \cup \{\mathbf{v}_{k+1}\})$,其中 $\mathbf{v}_{k+1} \notin S^{k-1}$

定义 41 (超立方体(hypercube)). $I_i = \overline{\mathbf{0e}_i}$,向量和(vector sum) ${}^5C^k = I_1 + I_2 + \cdots + I_k$ 称为fk-维超立方体

定理 64 (欧拉(Euler)公式). 记 $f_k(P)$ 为n-维多胞形P的k-维面的数目,则

$$\sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k f_k(P) = 1 + (-1)^{n-1}$$

特别地, 当n=3时, 有v-e+f=2, 其中v,e,f分别为顶点、边、面的数量.

6.4 曲线和表面

定义 42 (贝塞尔(Bézier)曲线). 三阶贝塞尔曲线

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} \mathbf{p}_0 & \mathbf{p}_1 & \mathbf{p}_2 & \mathbf{p}_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -3 & 3 & -1 \\ 0 & 3 & -6 & 3 \\ 0 & 0 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ t \\ t^2 \\ t^3 \end{bmatrix} = GM_B \mathbf{u}(t)$$

其中G为四个控制点构成的几何(geometry)矩阵, M_B 为贝塞尔基底矩阵. 换种形式表示

$$\mathbf{x}(s) = \mathbf{u}(s)^{\mathrm{T}} M_B^{\mathrm{T}} G^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} (1-s)^3 & 3s(1-s)^2 & 3s^2(1-s) & s^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}_0 \\ \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{p}_3 \end{bmatrix}$$

 $^{{}^{5}}A + B = \{ \mathbf{c} : \mathbf{c} = \mathbf{a} + \mathbf{b}, \forall \mathbf{a} \in A, \mathbf{b} \in B \}$

定义 43 (贝塞尔表面).

$$GM_{B}\mathbf{u}(t) \begin{bmatrix} \mathbf{p}_{11} & \mathbf{p}_{12} & \mathbf{p}_{13} & \mathbf{p}_{14} \\ \mathbf{p}_{21} & \mathbf{p}_{22} & \mathbf{p}_{23} & \mathbf{p}_{24} \\ \mathbf{p}_{31} & \mathbf{p}_{32} & \mathbf{p}_{33} & \mathbf{p}_{34} \\ \mathbf{p}_{41} & \mathbf{p}_{42} & \mathbf{p}_{43} & \mathbf{p}_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (1-t)^{3} \\ 3t(1-t)^{2} \\ 3t^{2}(1-t) \\ t^{3} \end{bmatrix}$$

进而,

$$\mathbf{x}(s,t) = \mathbf{u}(s)^{\mathrm{T}} M_B^{\mathrm{T}} G M_B \mathbf{u}(t), 0 \le s, t \le 1$$

7 拓展

7.1 线性模型与最小二乘

定理 65 (最小二乘). $A \to m \times n$ 的矩阵, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$, $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ 的最小二乘解是 $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n$ 使得

$$\|\mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}\| \le \|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|$$

则 $\hat{\mathbf{b}} = \operatorname{proj}_{\operatorname{Col} A} \mathbf{b}$, 解与 $A^{\operatorname{T}} A \mathbf{x} = A^{\operatorname{T}} \mathbf{b}$ 相同. 若A可被QR分解(定理35),则 $\hat{\mathbf{x}} = R^{-1} Q^{\operatorname{T}} \mathbf{b}$.

分析.
$$\mathbf{a}_i \cdot (\mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{a}_i^{\mathrm{T}}(\mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}) = 0 \implies A^{\mathrm{T}}(\mathbf{b} - A\hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{0} \implies A^{\mathrm{T}}A\mathbf{x} = A^{\mathrm{T}}\mathbf{b}$$

算法 10 (最小二乘估计). 直接计算 $A^{T}Ax = A^{T}b$ 即可.

定义 44 (一般线性模型). $y = X\beta + \epsilon$, X为设计矩阵, β 为参数向量, y为观测向量, ϵ 为残差向量, 满足这种形式的方程称为线性模型. 使 ϵ 得长度最小化, 即找出 $x\beta = y$ 的最小二乘解.

以下是一些例子.

1. 直线拟合

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

2. 抛物线拟合

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

3. 多重回归

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & u_1 & v_1 \\ 1 & u_2 & v_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & u_n & v_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

7.2 马尔可夫链

定义 45 (马尔可夫(Markov)链). 具有非负分量的数值且相加等于1的向量 $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \ldots$ 称为概率向量,各列向量均为概率向量的方阵P称为随机矩阵,则马尔可夫链为 $\mathbf{x}_{k+1} = P\mathbf{x}_k, k = 0, 1, 2, \ldots$,其中 \mathbf{x}_k 称为状态向量.

定理 $\mathbf{66}$ (马尔可夫链收敛定理 6). 马尔可夫链 $\{\mathbf{x}_{k+1}\}$ 一定会收敛至平衡向量 \mathbf{q} , 其中 \mathbf{q} 满足 $P\mathbf{q}=\mathbf{q}$.

7.3 复数特征值

定理 67. 当A为实矩阵时, 它的复特征值成对出现.

分析. $A\bar{\mathbf{x}} = \bar{A}\bar{\mathbf{x}} = \overline{A}\bar{\mathbf{x}} = \overline{\lambda}\bar{\mathbf{x}} = \bar{\lambda}\bar{\mathbf{x}}$

定理 68. A为2×2实矩阵,有复特征值 $\lambda = a - bi(b \neq 0)$ 及对应 \mathbb{C}^2 中的复特征向量 \mathbf{v} ,则

$$A = PCP^{-1}$$
,其中 $P = \begin{bmatrix} \Re \mathbf{v} & \Im \mathbf{v} \end{bmatrix}$, $C = \begin{bmatrix} a & -b \\ b & a \end{bmatrix}$

分析. 证明利用了结论: A是实矩阵, 则 $A(\Re \mathbf{x}) = \Re A\mathbf{x}$, $A(\Im \mathbf{x}) = \Im A\mathbf{x}$. $\Re \mathbf{x}$ 与 $\Im \mathbf{x}$ 线性无关

7.4 离散动力系统

若A可对角化,有n个线性无关的特征向量 $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$ 和对应的特征值 $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$,且由大到小排列. 由于{ $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$ }为 \mathbb{R}^n 的基. 故任一初始向量可唯一表示为 $\mathbf{x}_0 = c_1 \mathbf{v}_1 + \cdots + c_n \mathbf{v}_n$,则

$$\mathbf{x}_k = A^k \mathbf{x}_0 = c_1(\lambda_1)^k \mathbf{v}_1 + \dots + c_n(\lambda_n)^k \mathbf{v}_n$$

线性动力系统中,只有原点才可能是吸引子($|\lambda| < 1$)或者排斥子($|\lambda| > 1$),但非线性系统中可能存在多个吸引子或排斥子,其可用雅可比矩阵的特征值定义. 若特征值正负都有,则原点为鞍点.

7.5 估计特征值

幂算法、逆幂法、QR算法 若A可对角化,特征向量 $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n$ 是 \mathbb{R}^n 的基,且

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge |\lambda_3| \ge \cdots \ge |\lambda_n|$$

⁶具体情况比较复杂

(注意第一个符号为严格大) 其中 λ_1 称为主特征值

$$\mathbf{x}_k = A^k \mathbf{x}_0 = c_1(\lambda_1)^k \mathbf{v}_1 + \dots + c_n(\lambda_n)^k \mathbf{v}_n$$

假设 $c_1 \neq 0$,左右同除 λ_1^k ,可知 $(\lambda_1)^{-k} A^k \mathbf{x} \to c_1 \mathbf{v}_1(k \to \infty)$

7.6 傅里叶级数

 $\forall n \geq 1, \{1, \cos t, \cos 2t, \cdots, \cos nt, \sin t, \sin 2t, \cdots, \sin nt\}$,定义内积 $\langle f, g \rangle = \int_0^{2\pi} f(t)g(t) \, \mathrm{d}t$,知这个集合为正交集

定理 69 (傅里叶(Fourier)级数).

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \cos kt + b_k \sin kt)$$

当k > 1时,

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

常数项,

$$\frac{\langle f, 1 \rangle}{\langle 1, 1 \rangle} = \frac{a_0}{2}$$

7.7 统计学应用

定义 46 (平均值). $p \times N$ 的观测矩阵 $A = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N \end{bmatrix}$ (即有N个样本,每个样本有p个维度的信息),则其样本均值为 $\mathbf{M} = \frac{1}{N}(\mathbf{X}_1 + \dots + \mathbf{X}_N)$. 平均偏差形式为 $B = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{X}}_1, \dots, \hat{\mathbf{X}}_N \end{bmatrix}$,其中 $\hat{\mathbf{X}}_k = \mathbf{X}_k - \mathbf{M}$.

定义 47 (方差). 协方差矩阵为 $S=\frac{1}{N-1}BB^{\mathrm{T}}$ (BB^{T} 正定,故S正定),其中元素 s_{ii} 称为 x_{i} (某一行)的方差, $s_{ij}, i\neq j$ 称为 x_{i} 与 x_{j} 的协方差,而总方差TVar $B=\mathrm{tr}\,S$

定义 48 (主成分分析). 假设 $A = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_N \end{bmatrix}$ 为平均偏差形式,找到 $p \times p$ 正交矩阵 $P = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_p \end{bmatrix}$ 使得 $\mathbf{X} = P\mathbf{Y}$,其中 y_1, \dots, y_p 都线性无关且方差递减. $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_p$ 为数据的主成分,第一主成分是S最大的特征值对应的特征向量.

注: 主成分分析等同于正交回归

分析. $\mathbf{X}_k = P\mathbf{Y}_k \implies \mathbf{Y}_k = P^{-1}\mathbf{X}_k = P^{\mathrm{T}}\mathbf{X}_k, k = 1, \dots, N \implies S = PDP^{\mathrm{T}}, P^{\mathrm{T}}SP = D$ 可以验证对于任意正交矩阵P, $\mathbf{Y}, \dots \mathbf{Y}_N$ 的协方差矩阵都是 $P^{\mathrm{T}}SP$

变量的正交变换 $\mathbf{X}=P\mathbf{Y}$ 不改变数据的总方差,且 $\mathrm{TVar}\,\mathbf{X}=\mathrm{TVar}\,\mathbf{Y}=\mathrm{tr}\,D=\lambda_1+\cdots+\lambda_p$,商 $\lambda_j/\mathrm{tr}\,S$ 表明 y_j 的占比,用于降维