计算机科学与人工智能的数学基础(I)

汪建基

2024年3月-6月

第一部分 逻辑学初步

第一部分 逻辑学初步

第1章 命题逻辑

第2章 谓词逻辑

1.1 命题

- 什么是命题(Proposition)？

定义1.1 能判断真假的陈述句叫做命题。

两层含义：

a) 命题是陈述句。其他的语句，如疑问句、祈使句、感叹句均不是命题；

b) 这个陈述句对事物的判断是否符合客观事实是可以给出结论的：不是真（符合客观事实）就是假（不符合客观事实），不能不真也不假，也不能既真又假，所以又称二值逻辑。

命题1. 2+3=5.

命题2. 1+1=3.

命题3. 对所有的非负整数n而言n^2+n+41为质数。

$\forall\, n\in\mathbb{N}$, n^2+n+41为质数。

1.1 命题

- 命题的真值

命题所表示的判断结果称为命题的真值。

a) 真值只取两个值：真（判断与事实相符）或假（判断与事实不符）。通常用1（或字母T）表示真，用0（或字母F）表示假。

b) 真命题：真值为真的命题。

c) 假命题：真值为假的命题。

命题都有唯一真值，但有些命题的真值有待进一步揭示：

猜想1. $a^4+b^4+c^4=d^4$ 没有正整数解。

$$\forall a,b,c,d\in\mathbb{Z}^+,\ a^4+b^4+c^4\neq d^4.$$

猜想2. $\forall a,b,c\in\mathbb{Z}^+,\ 313(a^3+b^3)\neq c^3.$

1.1 命题

- 例1.1.1 判断下列语句是否为命题，并指出其真值。

  a) 北京是中国的首都。

  b) 5可以被2整除。

  c) 明天天气晴。

  d) 请勿吸烟。

  e) 乌鸦是黑色的吗？

  f) 这个小男孩多勇敢啊！

  g) 地球外的星球上存在生物。

  h) 我正在说谎。

  i) 存在无穷多对质数间隙都小于7000万。

一个语句本身是否能分辨真假与我们是否知道它的真假是两回事。

1.1 命题

- 判断一个句子是否为命题

  a) 是否为陈述句

  b) 真值是否唯一

  $x+y>5$

  $1+101=110$

  真值是否唯一与我们是否知道它的真值是两回事

- 简单命题

  也称原子命题，指不能再分解为更简单的陈述句的命题。

- 复合命题

  由若干简单命题用联结词联结成的命题。

  例：2是质数。——简单命题

  2是偶数和质数。——复合命题

1.1 命题

- 否定联结词“$\neg$”

  否定联结词是一元联结词。相当于日常用语中的“非”，“不”，“无”，“没有”等。

  设p为一命题，p的否定是一个新的复合命题, 称为p的否定式，记作“$\neg p$”，读作“非p”。

  $\neg p$为真当且仅当p为假。

p	$\neg p$
0	1
1	0

例：p: 3是偶数。

$\neg p$: 3不是偶数。

思考：如果p: 这些都是男同学，则$\neg p$表示什么?

- 合取联结词“∧”

　　合取词是二元联结词。相当于自然语言中的“与”、“并且”、“而且”、“也”等。

　　设p, q为两个命题，复合命题“p与q”记作$p \wedge q$。$p \wedge q$为真当且仅当p和q同时为真。

p	q	$p \wedge q$
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

1.1 命题

- 例1.1.2 将下列命题符号化。

  (1) 李平既聪明又用功.

  (2) 李平虽然聪明, 但不用功.

  (3) 李平不但聪明,而且用功.

  (4) 李平不是不聪明,而是不用功.

  解: 设 p: 李平聪明. q: 李平用功.

  则 (1) $p\wedge q$ (2) $p\wedge\neg q$

  (3) $p\wedge q$ (4) $\neg(\neg p)\wedge\neg q$

  注意：不要见到“与”或“和”就使用联结词∧！

  例如: (1)李文与李武是兄弟。

  (2)玉芳和陈兰是好朋友。

- 析取联结词“∨”

析取词是二元联结词。相当于自然语言中的“或”、“要么…要么…”等。

设p, q为两个命题，复合命题“p或q”，记作$p \vee q$。$p \vee q$为真当且仅当p与q中至少有一个为真。

p	q	$p \vee q$
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	1

1.1 命题

自然语言中，“或”有“相容或”和“排斥或”之分。这里只是“相容或”。

相容或($p \vee q$): 允许p和q同时成立。

排斥或：不能同时成立，仅允许其中之一成立。

- 例1.1.3

a) 小王爱打球或爱跑步。（相容或）

设p：小王爱打球。q：小王爱跑步。

则上述命题可符号化为：$p \vee q$

b) 派小王或小李中的一人去开会。（排斥或）

设p：派小王去开会。q：派小李去开会。

则上述命题可符号化为：$(p \wedge \neg q) \vee (\neg p \wedge q)$或$(p \vee q) \wedge \neg(p \wedge q)$

1.1 命题

- 蕴涵联结词“→”

  蕴涵词是二元联结词。相当于自然语言中的“若...则...”、“如果...就...”、“只有...才...”。

  设p, q为两个命题,复合命题“若p则q”记作$p \to q$。并称p为前件，q为后件。

  $p \to q$为假当且仅当p为真且q为假。

p	q	$p \to q$
0	0	1
0	1	1
1	0	0
1	1	1

1.1 命题

- 例1.1.4 将下列命题符号化。

  a) 天不下雨，则草木枯黄。

  p： 天下雨。 q： 草木枯黄。

  则原命题可表示为： $\neg p \rightarrow q$

  b) 如果小明学日语，小华学英语，则小芳学德语。

  p： 小明学日语. q： 小华学英语. r： 小芳学德语.

  则原命题可表示为：$(p \wedge q) \rightarrow r$

  c) 只要不下雨，我就骑自行车上班。

  p： 天下雨。 q： 我骑自行车上班。

  则原命题可表示为： $\neg p \rightarrow q$

  d) 只有不下雨，我才骑自行车上班。

  p： 天下雨。 q： 我骑自行车上班。

  则原命题可表示为： $q \rightarrow \neg p$

- **例1.1.5** 设 p: 天冷，q: 小王穿羽绒服，将下列命题符号化

(1) 只要天冷，小王就穿羽绒服. $p \to q$

(2) 因为天冷，所以小王穿羽绒服. $p \to q$

(3) 若小王不穿羽绒服，则天不冷. $p \to q$

(4) 只有天冷，小王才穿羽绒服. $q \to p$

(5) 除非天冷，小王才穿羽绒服. $q \to p$

(6) 除非小王穿羽绒服，否则天不冷. $p \to q$

(7) 如果天不冷，则小王不穿羽绒服. $q \to p$

(8) 小王穿羽绒服仅当天冷的时候. $q \to p$

注意：$p \to q$与$\neg q \to \neg p$等值（真值相同）

1.1 命题

- **等价联结词“$\leftrightarrow$ ”**

  等价联结词是二元联结词。相当于自然语言中的“等价”、“当且仅当”、“充要条件”等。

  设p, q为两个命题，复合命题“p当且仅当q”记作$p \leftrightarrow q$ 。

  $p \leftrightarrow q$为真当且仅当p, q真值相同。

p	q	$p \leftrightarrow q$
0	0	1
0	1	0
1	0	0
1	1	1

1.1 命题

命题$p\leftrightarrow q$所表达的逻辑关系是, p与q互为充分必要条件,相当于$(p\rightarrow q)\wedge(q\rightarrow p)$.

双条件联结词连接的两个命题之间可以没有因果关系。

- 例1.1.5 分析下列各命题的真值。

p: 2+2=4. q：3是奇数

(1) 2+2=4 当且仅当3是奇数. ($p\leftrightarrow q$)

(2) 2+2=4 当且仅当3不是奇数. ($p\leftrightarrow \neg q$)

(3) 2+2≠4 当且仅当3是奇数. ($\neg p\leftrightarrow q$)

(4) 2+2≠4 当且仅当3不是奇数. ($\neg p\leftrightarrow \neg q$)

- 优先级顺序

联结词符称之为逻辑运算符，运算的优先级顺序为：

$\neg$, $\wedge$, $\vee$, $\rightarrow$, $\leftrightarrow$

例： p: 2+3=5.

q: $x+y>5$.

- 命题常项

简单命题的真值是确定的，因而又称为命题常项。

- 命题变项

类似q，本身不是命题，但当给定x与y的值后就存在真值，这种真值可以变化的简单陈述句称为命题变项。

命题变项不是命题。

- 命题公式

若在复合命题中，p, q, r 等不仅可以代表命题常项，还可以代表命题变项，这样组成的复合命题形式称为命题公式。

- 命题公式

定义1.2 命题公式按下列规则生成：

(1) 单个命题常项或命题变项$p,q,r,\ldots,p_i,q_i,r_i,\ldots$是命题公式；

(2) 如果A是命题公式，则$\neg A$也是命题公式；

(3) 如果A和B是命题公式，则$A\wedge B$, $A\vee B$, $A\rightarrow B$, $A\leftrightarrow B$均是命题公式；

(4) 只有有限次地利用(1)~(3)形成的符号串才是命题公式。

在命题逻辑中命题公式又称为合式公式，简称为公式。

在公式中也可以出现1和0.

例：$\neg(p\wedge q)$，$p\rightarrow(p\vee q)$等都是命题公式，而$pq\rightarrow r$，$\wedge p\rightarrow q$等不是命题公式。

1.2 命题公式

注意：

(1) 命题公式由命题常项、命题变项、联结词和括弧组成。

(2) 如果命题公式中只包含命题常项（即简单命题）而没有命题变项，则该公式便是一个复合命题。因此，对复合命题的研究可以转化为对命题公式的研究。

(3) 命题公式一般不是命题，仅当公式中的命题变元用确定的命题代入时，才得到一个命题。其真值依赖于代换变元的那些命题的真值。

(4) 日常生活中的推理问题是用自然语言描述的，因此要进行推理演算必须先把自然语言符号化（或形式化）成逻辑语言，即命题公式。然后再根据逻辑演算规律进行推理演算。

1.2 命题公式

- 命题公式的层数

定义1.2

(1) 若A是单个命题常项或命题变项，则称A是0层公式；

(2) 称A是n+1(n≥0)层公式是指A符合下列情况之一：

① $A=\neg B$，B是n层公式。

② $A=B\wedge C$，其中B、C分别为 i 层和 j 层公式，且$n=\max(i,j)$.

③ $A=B\vee C$，其中B、C分别为 i 层和 j 层公式，且$n=\max(i,j)$.

④ $A=B\rightarrow C$，其中B、C分别为 i层和 j 层公式，且$n=\max(i,j)$.

⑤ $A=B\leftrightarrow C$，其中B、C分别为 i层和 j 层公式，且$n=\max(i,j)$.

例： $\neg(p\wedge q)$，$p\rightarrow(p\vee q)$，$\neg(\neg p\wedge q)\rightarrow(r\vee s)$分别为**2**层、**2**层、**4**层命题公式。

1.2 命题公式

- 公式的解释或赋值

定义1.3 设A为一命题公式，$p_1, p_2, \ldots, p_n$是出现在A中的全部的命题变项。给$p_1, p_2, \ldots, p_n$指定一组真值，称为对A的一个赋值或解释。若指定的一组值使A的值为真，则称这组值为A的成真赋值；若使A的值为假，则称这组值为A的成假赋值。

例：对公式$(p \rightarrow q) \wedge r$，赋值011(即令$p$=0, q=1, r=1) 为$(p \rightarrow q) \wedge r$的成真赋值。

含有n个命题变项的公式共有2^n组不同的赋值。

赋值方式：按字典顺序赋值；

按编号赋值。

1.2 命题公式

- 真值表

　　将命题公式A在所有赋值之下取值的情况列成表，称为公式A的真值表。

- 真值表的构造步骤

　　(1) 找出命题公式中所含的所有命题变项$p_1, p_2, \ldots, p_n$；

　　(2) 按从低到高的顺序写出各层次；

　　(3) 从$00\ldots0$(n位)开始，按照二进制数从小到大列出所有可能的赋值，直到$11\ldots1$(n位)为止。

　　(4) 对应每个赋值，计算命题公式各层次的值，直到最后计算出命题公式的值。

1.2 命题公式

- 例1.2.1 利用真值表求命题公式$\neg(p\rightarrow(q\vee r))$的成真赋值和成假赋值。

p	q	r	$q\vee r$	$p\rightarrow(q\vee r)$	$\neg(p\rightarrow(q\vee r))$
0	0	0	0	1	0
0	0	1	1	1	0
0	1	0	1	1	0
0	1	1	1	1	0
1	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	0
1	1	0	1	1	0
1	1	1	1	1	0

1.2 命题公式

- 例1.2.2 求$(p\wedge(p\rightarrow q))\rightarrow q$的真值表。

p	q	$p\rightarrow q$	$p\wedge(p\rightarrow q)$	$(p\wedge(p\rightarrow q))\rightarrow q$
0	0	1	0	1
0	1	1	0	1
1	0	0	0	1
1	1	1	1	1

- 例1.2.3 求命题公式$\neg(p\rightarrow q)\wedge q$的真值表。

p	q	$p\rightarrow q$	$\neg(p\rightarrow q)$	$\neg(p\rightarrow q)\wedge q$
0	0	1	0	0
0	1	1	0	0
1	0	0	1	0
1	1	1	0	0

- 命题公式的分类

重言式/永真式：若命题公式A在所有赋值下都是真的，则称A为重言式或永真式。

矛盾式/永假式：A在所有赋值下都是假的，则称A为称为矛盾式或永假式。

可满足式：若A至少存在一组成真赋值。

两点说明：

(1) A是可满足式的等价定义是：A不是恒假的。

(2) 重言式一定是可满足式，反之不真。

例：$\neg(p\rightarrow(q\vee r))$为可满足式

$(p\wedge(p\rightarrow q))\rightarrow q$为重言式、可满足式

$\neg(p\rightarrow q)\wedge q$为矛盾式

1.2 命题公式

- 利用真值表判断公式的类型

(1) 若真值表最后一列全为1，则公式为重言式；

(2) 若真值表最后一列全为0，则公式为矛盾式；

(3) 若真值表最后一列中至少有一个1，则公式为可满足式。

例：判断下列公式的类型

(1) $(p\wedge q)\rightarrow q$

(2) $(q\rightarrow p)\wedge(\neg p\wedge q)$

(3) $(p\vee\neg q)\rightarrow(\neg p\wedge q\wedge r)$

若公式较复杂，可先列出各子公式的真值(若有括号，则应从里层向外层展开)，最后列出所求公式的真值。

1.2 命题公式

- 例1.2.1 利用真值表求命题公式$\neg(p\to(q\vee r))$的成真赋值和成假赋值。

p	q	r	$q\vee r$	$p\to(q\vee r)$	$\neg(p\to(q\vee r))$
0	0	0	0	1	0
0	0	1	1	1	0
0	1	0	1	1	0
0	1	1	1	1	0
1	0	0	0	0	1
1	0	1	1	1	0
1	1	0	1	1	0
1	1	1	1	1	0

- 例1.2.2 求$(p\wedge(p\rightarrow q))\rightarrow q$的真值表。

p	q	$p\rightarrow q$	$p\wedge(p\rightarrow q)$	$(p\wedge(p\rightarrow q))\rightarrow q$
0	0	1	0	1
0	1	1	0	1
1	0	0	0	1
1	1	1	1	1

- 例1.2.3 求命题公式$\neg(p\rightarrow q)\wedge q$的真值表。

p	q	$p\rightarrow q$	$\neg(p\rightarrow q)$	$\neg(p\rightarrow q)\wedge q$
0	0	1	0	0
0	1	1	0	0
1	0	0	1	0
1	1	1	0	0

1.2 命题公式

- 命题公式的分类

重言式/永真式：若命题公式A在所有赋值下都是真的，则称A为重言式或永真式。

矛盾式/永假式：A在所有赋值下都是假的，则称A为称为矛盾式或永假式。

可满足式：若A至少存在一组成真赋值。

两点说明：

(1) A是可满足式的等价定义是：A不是恒假的。

(2) 重言式一定是可满足式，反之不真。

例：$\neg(p\rightarrow(q\vee r))$为可满足式

$(p\wedge(p\rightarrow q))\rightarrow q$为重言式、可满足式

$\neg(p\rightarrow q)\wedge q$为矛盾式

1.2 命题公式

- 利用真值表判断公式的类型

(1) 若真值表最后一列全为1，则公式为重言式；

(2) 若真值表最后一列全为0，则公式为矛盾式；

(3) 若真值表最后一列中至少有一个1，则公式为可满足式。

例：判断下列公式的类型

(1) $(p\wedge q)\rightarrow q$

(2) $(q\rightarrow p)\wedge(\neg p\wedge q)$

(3) $(p\vee\neg q)\rightarrow(\neg p\wedge q\wedge r)$

若公式较复杂，可先列出各子公式的真值(若有括号，则应从里层向外层展开)，最后列出所求公式的真值。

- 公式等值

问题：是否存在两个命题公式A和B，在任意解释下它们的真值都相同？

解答：存在！

问题：若命题公式A和B，在任意解释下真值都相同，用我们已学知识如何描述？

解答：$A \leftrightarrow B$是重言式！

定义1.3.1 设A、B是两个命题公式，若等价式$A \leftrightarrow B$是重言式，则称公式A与B是等价的，记作$A \Leftrightarrow B$.

1.3 等值验算

(1) $A \Leftrightarrow B$当且仅当$A \leftrightarrow B$为重言式。

(2) $\Leftrightarrow$与$\leftrightarrow$是两个完全不同的符号。

- $\Leftrightarrow$不是联结词，而是命题公式间的关系符号，$A \Leftrightarrow B$不表示一个公式，它表示公式A与公式B有等价关系
- $\leftrightarrow$是联结词，$A \leftrightarrow B$是一个命题公式。

- 公式之间的等价关系的特点：
  - 自反的：$A \Leftrightarrow A$
  - 对称的：若$A \Leftrightarrow B$，则$B \Leftrightarrow A$
  - 传递的：若$A \Leftrightarrow B$，$B \Leftrightarrow C$，则$A \Leftrightarrow C$
- 公式A与B等价的判定方法

用真值表法判断$A \leftrightarrow B$是否为重言式。

例1.3.1 判断$\neg p\vee\neg q$与$\neg(p\wedge q)$是否等价。

p	q	$\neg p$	$\neg q$	$p\wedge q$	$\neg q\vee\neg p$	$\neg(p\wedge q)$	$(\neg q\vee\neg p)\leftrightarrow(p\wedge q)$
0	0	1	1	0	1	1	1
0	1	1	0	0	1	1	1
1	0	0	1	0	1	1	1
1	1	0	0	1	0	0	1

这一列可不要

因此，$\neg p\vee\neg q$与$\neg(p\wedge q)$等价。

- 德·摩根律

$$\neg(A\vee B)\Leftrightarrow\neg A\wedge\neg B$$

$$\neg(A\wedge B)\Leftrightarrow\neg A\vee\neg B$$

- 例1.3.2 判断$(p\wedge\neg q)\vee(\neg p\wedge q)$与$(p\vee q)\wedge\neg(p\wedge q)$是否等价。

p	q	$p\wedge\neg q$	$\neg p\wedge q$	$(p\wedge\neg q)\vee(\neg p\wedge q)$
0	0	0	0	0
0	1	0	1	1
1	0	1	0	1
1	1	0	0	0

p	q	$p\vee q$	$\neg(p\wedge q)$	$(p\vee q)\wedge\neg(p\wedge q)$
0	0	0	1	0
0	1	1	1	1
1	0	1	1	1
1	1	1	0	0

因此，$(p\wedge\neg q)\vee(\neg p\wedge q)$与$(p\vee q)\wedge\neg(p\wedge q)$等价。

1.3 等值验算

- 常用等价公式

(1) 双重否定律：$\neg(\neg A)\Leftrightarrow A$

(2-3) 等幂律：$A\vee A\Leftrightarrow A$，$A\wedge A\Leftrightarrow A$

(4-5) 交换律：

$$A\vee B\Leftrightarrow B\vee A,\quad A\wedge B\Leftrightarrow B\wedge A$$

(6-7) 结合律：

$$(A\vee B)\vee C\Leftrightarrow A\vee(B\vee C),$$

$$(A\wedge B)\wedge C\Leftrightarrow A\wedge(B\wedge C)$$

(8-9) 分配律：

$A\vee(B\wedge C)\Leftrightarrow(A\vee B)\wedge(A\vee C)$，　($\vee$对$\wedge$的分配律)

$A\wedge(B\vee C)\Leftrightarrow(A\wedge B)\vee(A\wedge C)$　($\wedge$对$\vee$的分配律)

1.3 等值验算

(10-11) 德·摩根律：

$$\neg(A \lor B) \Leftrightarrow \neg A \land \neg B, \quad \neg(A \land B) \Leftrightarrow \neg A \lor \neg B$$

(12-13) 吸收律：

$$A \lor (A \land B) \Leftrightarrow A, \quad A \land (A \lor B) \Leftrightarrow A$$

(14-15) 零律：

$$A \lor 1 \Leftrightarrow 1, \quad A \land 0 \Leftrightarrow 0$$

(16-17) 同一律：

$$A \lor 0 \Leftrightarrow A, \quad A \land 1 \Leftrightarrow A$$

(18) 排中律： $A \lor \neg A \Leftrightarrow 1$

(19) 矛盾律： $A \land \neg A \Leftrightarrow 0$

1.3 等值验算

(20) 蕴含等值式： $A \rightarrow B \Leftrightarrow \neg A \vee B$

(21) 等价（双条件）等值式：

$$A \leftrightarrow B \Leftrightarrow (A \rightarrow B) \wedge (B \rightarrow A),$$

$$A \leftrightarrow B \Leftrightarrow (A \wedge B) \vee (\neg A \wedge \neg B)$$

(22) 假言易位： $A \rightarrow B \Leftrightarrow \neg B \rightarrow \neg A$

(23) 等价否定等值式： $A \leftrightarrow B \Leftrightarrow \neg A \leftrightarrow \neg B$

(24) 归谬论： $(A \rightarrow B) \wedge (A \rightarrow \neg B) \Leftrightarrow \neg A$

根据已知的等价公式，推演出另外一些等价公式的过程称为等值演算。

- 置换定理

定理1.1（置换定理）设$\Phi(A)$是含命题公式A的命题公式，$\Phi(B)$是用命题公式B置换了$\Phi(A)$中的A之后的得到的命题公式，如果$A \Leftrightarrow B$，则$\Phi(A) \Leftrightarrow \Phi(B)$.

证明：由与于A与B等价，对任意的赋值，A与B的值都相等，把它们分别带入$\Phi(\cdot)$，其结果当然也一样，从而$\Phi(A) \Leftrightarrow \Phi(B)$. ■

- **例1.3.3** 用等值演算法证明 $(p \to r) \wedge (q \to r) \Leftrightarrow (p \vee q) \to r$.

证明：$(p \to r) \wedge (q \to r)$

$\Leftrightarrow (\neg p \vee r) \wedge (\neg q \vee r)$ （蕴含等值式）

$\Leftrightarrow ((\neg p \vee r) \wedge \neg q) \vee ((\neg p \vee r) \wedge r)$ （分配率）

$\Leftrightarrow ((\neg p \wedge \neg q) \vee (r \wedge \neg q)) \vee ((\neg p \wedge r) \vee (r \wedge r))$ （分配率）

$\Leftrightarrow (\neg p \wedge \neg q) \vee (r \wedge \neg q) \vee (\neg p \wedge r) \vee r$ （等幂率）

$\Leftrightarrow (\neg p\wedge\neg q)\vee(r\wedge\neg q)\vee(\neg p\wedge r)\vee r$

$\Leftrightarrow (\neg p\wedge\neg q)\vee(r\wedge\neg q)\vee r$ （吸收率）

$\Leftrightarrow (\neg p\wedge\neg q)\vee r$ （吸收率）

$\Leftrightarrow \neg(p\vee q)\vee r$ （德·摩根律）

$\Leftrightarrow (p\vee q)\rightarrow r$ （蕴含等值式）

- 例1.3.4 用等值演算法判断下列公式的类型。

(1) $((p\rightarrow q)\wedge p)\rightarrow q$

解：$((p\rightarrow q)\wedge p)\rightarrow q \Leftrightarrow ((\neg p\vee q)\wedge p)\rightarrow q$

$\Leftrightarrow ((\neg p\wedge p)\vee(q\wedge p))\rightarrow q \Leftrightarrow (0\vee(q\wedge p))\rightarrow q$

$\Leftrightarrow (q\wedge p)\rightarrow q \Leftrightarrow \neg(q\wedge p)\vee q \Leftrightarrow (\neg q\vee\neg p)\vee q$

$\Leftrightarrow \neg p\vee\neg q\vee q \Leftrightarrow \neg p\vee 1 \Leftrightarrow 1$

因此该公式是重言式。

- 例1.3.5 用等值演算法证明下列公式。

(2) $A\leftrightarrow B\Leftrightarrow(A\wedge B)\vee(\neg A\wedge\neg B)$——等价等值式

解：
$A\leftrightarrow B\Leftrightarrow(A\rightarrow B)\wedge(B\rightarrow A)$ (等价等值式)
$\Leftrightarrow(\neg A\vee B)\wedge(\neg B\vee A)$ (蕴涵等值式)
$\Leftrightarrow(\neg A\wedge\neg B)\vee(\neg A\wedge A)\vee(B\wedge\neg B)\vee(B\wedge A)$ (分配律)
$\Leftrightarrow(\neg A\wedge\neg B)\vee 0\vee 0\vee(B\wedge A)$ (矛盾律)
$\Leftrightarrow(A\wedge B)\vee(\neg A\wedge\neg B)$ (同一律、交换律)

(3) $(A\rightarrow B)\wedge(A\rightarrow\neg B)\Leftrightarrow\neg A$——归谬论

解：
$(A\rightarrow B)\wedge(A\rightarrow\neg B)\Leftrightarrow(\neg A\vee B)\wedge(\neg A\vee\neg B)$ (蕴涵等值式)
$\Leftrightarrow(\neg A\wedge\neg A)\vee(\neg A\wedge\neg B)\vee(B\wedge\neg A)\vee(B\wedge\neg B)$ (分配律)
$\Leftrightarrow\neg A\vee(\neg A\wedge\neg B)\vee(B\wedge\neg A)\vee 0$ (等幂律、矛盾律)
$\Leftrightarrow\neg A\vee(\neg A\wedge\neg B)\vee(B\wedge\neg A)\Leftrightarrow\neg A$ (同一律、吸收律)

1.3 等值验算

□ 例1.3.6 用等值演算法判断下列公式的类型。

(2) $\neg(p\rightarrow(p\vee q))\wedge r$

解： $\neg(p\rightarrow(p\vee q))\wedge r \Leftrightarrow \neg(\neg p\vee(p\vee q))\wedge r$

$\Leftrightarrow \neg((\neg p\vee p)\vee q)\wedge r \Leftrightarrow \neg(1\vee q)\wedge r \Leftrightarrow \neg 1\wedge r$

$\Leftrightarrow 0\wedge r \Leftrightarrow 0$

因此该公式是矛盾式。

(3) $p\wedge(((p\vee q)\wedge\neg p)\rightarrow q)$

解： $p\wedge(((p\vee q)\wedge\neg p)\rightarrow q) \Leftrightarrow p\wedge(((p\wedge\neg p)\vee(q\wedge\neg p))\rightarrow q)$

$\Leftrightarrow p\wedge((0\vee(q\vee\neg p))\rightarrow q) \Leftrightarrow p\wedge((q\vee\neg p)\rightarrow q)$

$\Leftrightarrow p\wedge(\neg(q\vee\neg p)\vee q) \Leftrightarrow p\wedge((\neg q\wedge p)\vee q))$

$\Leftrightarrow p\wedge((\neg q\vee q)\wedge(p\vee q)) \Leftrightarrow p\wedge(1\wedge(p\vee q))$

$\Leftrightarrow p\wedge(p\vee q) \Leftrightarrow p$

因此该公式既不是重言式，也不是矛盾式，而是可满足式。

- 例1.3.7 设有A, B, C, D四人参加百米竞赛，观众甲，乙，丙分别对比赛的名次进行了预测：

  甲：C第一，B第二；

  乙：C第二，D第三；

  丙：A第二，D第四；

  比赛结束后发现甲，乙，丙每人预测的情况都是各对一半，试问实际名次如何（假设无并列名次出现）？

  解：设p_i, q_i, r_i, s_i分别表示A, B, C, D是第 i (i=1,2,3,4)名，由于甲，乙，丙每人都各对一半，故有下面三个等值式：

  ① $(r_1 \wedge \neg q_2) \vee (\neg r_1 \wedge q_2) \Leftrightarrow 1$

  ② $(r_2 \wedge \neg s_3) \vee (\neg r_2 \wedge s_3) \Leftrightarrow 1$

  ③ $(p_2 \wedge \neg s_4) \vee (\neg p_2 \wedge s_4) \Leftrightarrow 1$

1.3 等值验算

因为重言式的合取仍为重言式，所以①∧②⇔1。

即

$$1\Leftrightarrow((r_1\wedge\neg q_2)\vee(\neg r_1\wedge q_2))\wedge((r_2\wedge\neg s_3)\vee(\neg r_2\wedge s_3))$$
$$\Leftrightarrow(r_1\wedge\neg q_2\wedge r_2\wedge\neg s_3)\vee(r_1\wedge\neg q_2\wedge\neg r_2\wedge s_3)$$
$$\vee(\neg r_1\wedge q_2\wedge r_2\wedge\neg s_3)\vee(\neg r_1\wedge q_2\wedge\neg r_2\wedge s_3)$$

由于C不能既第一又第二，B和C不能并列第二，所以

$r_1\wedge\neg q_2\wedge r_2\wedge\neg s_3\Leftrightarrow 0$

$\neg r_1\wedge q_2\wedge r_2\wedge\neg s_3\Leftrightarrow 0$

于是得

④ $(r_1\wedge\neg q_2\wedge\neg r_2\wedge s_3)\vee(\neg r_1\wedge q_2\wedge\neg r_2\wedge s_3)\Leftrightarrow 1$

再将③与④合取得③∧④⇔1，即

$$1 \Leftrightarrow ((p_2 \wedge \neg s_4) \vee (\neg p_2 \wedge s_4)) \wedge ((r_1 \wedge \neg q_2 \wedge \neg r_2 \wedge s_3) \vee (\neg r_1 \wedge q_2 \wedge \neg r_2 \wedge s_3))$$
$$\Leftrightarrow (p_2 \wedge \neg s_4 \wedge r_1 \wedge \neg q_2 \wedge \neg r_2 \wedge s_3) \vee (p_2 \wedge \neg s_4 \wedge \neg r_1 \wedge q_2 \wedge \neg r_2 \wedge s_3)$$
$$\vee (\neg p_2 \wedge s_4 \wedge r_1 \wedge \neg q_2 \wedge \neg r_2 \wedge s_3) \vee (\neg p_2 \wedge s_4 \wedge \neg r_1 \wedge q_2 \wedge \neg r_2 \wedge s_3)$$

由于A和B不能同时第二，D不能第三又第四，所以

$$p_2 \wedge \neg s_4 \wedge \neg r_1 \wedge q_2 \wedge \neg r_2 \wedge s_3 \Leftrightarrow 0$$

$$\neg p_2 \wedge s_4 \wedge r_1 \wedge \neg q_2 \wedge \neg r_2 \wedge s_3 \Leftrightarrow 0$$

$$\neg p_2 \wedge s_4 \wedge \neg r_1 \wedge q_2 \wedge \neg r_2 \wedge s_3 \Leftrightarrow 0$$

于是可得

⑤ $p_2 \wedge \neg s_4 \wedge r_1 \wedge \neg q_2 \wedge \neg r_2 \wedge s_3 \Leftrightarrow 1$

因此C第一，A第二，D第三，B第四。

1.4 范式

- 作业

  P32　1.5 (5)—(8)

  P33　1.7 (8), (9) —真值表法

  　　　1.8

  　　　1.9

1.5 将下列命题符号化.

(5) 如果天下大雨，他就乘公共汽车上班.

(6) 只有天下大雨，他才乘公共汽车上班.

(7) 除非天下大雨，否则他不乘公共汽车上班.

(8) 不经一事，不长一智.

1.7 判断下列命题公式的类型，真值表法.

(8) $(p \leftrightarrow q) \rightarrow \neg(p \vee q)$.

(9) $((p \rightarrow q) \wedge (q \rightarrow r)) \rightarrow (p \rightarrow r)$.

1.8 用等值演算法证明下列等值式.

(1) $(p \wedge q) \vee (p \wedge \neg q) \Leftrightarrow p$.

(2) $((p \rightarrow q) \wedge (p \rightarrow r)) \Leftrightarrow (p \rightarrow (q \wedge r))$.

(3) $\neg(p \leftrightarrow q) \Leftrightarrow ((p \vee q) \wedge \neg(p \wedge q))$.

1.9 用等值演算法判断下列公式的类型.

(1) $\neg((p \wedge q) \rightarrow p)$.

(2) $((p \rightarrow q) \wedge (q \rightarrow p)) \leftrightarrow (p \leftrightarrow q)$.

(3) $(\neg p \rightarrow q) \rightarrow (q \rightarrow \neg p)$.

1.4 范式

- 简单析取/合取式

定义1.4 仅由有限个命题变项及其否定构成的析取式为简单析取式。仅由有限个命题变项及其否定构成的合取式为简单合取式。

例：简单析取式：p, $\neg q$, $p\vee q$, $p\vee\neg q$, $\neg p\vee q\vee\neg r$

简单合取式：p, $\neg q$, $p\wedge q$, $p\wedge\neg q$, $\neg p\wedge\neg q\wedge r$

注意：

(1) 一个简单析取式是重言式当且仅当它同时含有某个命题变项及其否定式，如$p\vee\neg p\vee q$.

(2) 一个简单合取式是矛盾式当且仅当它同时含有某个命题变项及其否定式，如$p\wedge\neg p\wedge r$.

1.4 范式

- 析取范式/合取范式

定义1.5 仅由有限个简单合取式构成的析取式称为析取范式。

即：析取范式具有形式$A_1 \vee A_2 \vee \ldots \vee A_n$，其中$A_i\,(i=1, 2, \ldots, n)$为简单合取式。

例：$\neg p \vee q \vee \neg r$, $\neg p \wedge \neg q \wedge r$, $(\neg p \wedge \neg q) \vee (\neg p \wedge q \wedge r) \vee (p \wedge \neg q \wedge \neg r)$

定义1.6 仅由有限个简单析取式构成的合取式称为合取范式。

即：合取范式具有形式$A_1 \wedge A_2 \wedge \ldots \wedge A_n$，其中$A_i\,(i=1, 2, \ldots, n)$为简单析取式。

例：$\neg p \vee q \vee \neg r$, $\neg p \wedge \neg q \wedge r$, $(\neg p \vee \neg q) \wedge (\neg p \vee q \vee r) \wedge (p \vee \neg q \vee \neg r)$

1.4 范式

析取范式是矛盾式当且仅当每个简单合取式A_i都是矛盾式。

合取范式是重言式当且仅当每个简单析取式A_i都是重言式。

- 命题公式的等值范式求解步骤
  - 消去$\rightarrow$和$\leftrightarrow$
  - 否定联结词$\neg$的消去或内移
  - 求析取范式：$A\wedge(B\vee C)\Leftrightarrow(A\wedge B)\vee(A\wedge C)$ （$\wedge$对$\vee$的分配律）

    求合取范式：$A\vee(B\wedge C)\Leftrightarrow(A\vee B)\wedge(A\vee C)$ （$\vee$对$\wedge$的分配律）

例1.4.1：求公式$((p\vee q)\rightarrow r)\rightarrow p$的合取范式和析取范式。

解： $((p\vee q)\rightarrow r)\rightarrow p \Leftrightarrow \neg(\neg(p\vee q)\vee r)\vee p \Leftrightarrow ((p\vee q)\wedge\neg r)\vee p$

析取范式：$((p\vee q)\rightarrow r)\rightarrow p \Leftrightarrow (p\wedge\neg r)\vee(q\wedge\neg r)\vee p \Leftrightarrow (q\wedge\neg r)\vee p$

合取范式：$((p\vee q)\rightarrow r)\rightarrow p \Leftrightarrow (p\vee q\vee p)\wedge(\neg r\vee p) \Leftrightarrow (p\vee q)\wedge(\neg r\vee p)$

- 范式存在定理

定理1.2 任一命题公式都存在与之等价的析取范式和合取范式。

注意：存在但不唯一

- 极小项

定义1.7 设有n个命题变项，若在简单合取式中每个命题变项与其否定有且仅有一个出现一次，则这样的简单合取式为极小项。在极小项中，命题变项与其否定通常按下角标或字典顺序排列。

n个命题变项共可产生2^n个不同的极小项，其中每个极小项都有且仅有一个成真赋值。

在极小项中，将命题变项看成1，命题变项的否定看成0，则每个极小项唯一地对应一个二进制数，若该二进制数对应的十进制数为i，则该极小项记作m_i.

例：由三个命题变项p, q, r 共可产生8 个极小项，分别为：

$\neg p\wedge\neg q\wedge\neg r$　对应000，记为m_0

$\neg p\wedge\neg q\wedge r$　对应001，记为m_1

$\neg p\wedge q\wedge\neg r$　对应010，记为m_2

$\neg p\wedge q\wedge r$　对应011，记为m_3

$p\wedge\neg q\wedge\neg r$　对应100，记为m_4

$p\wedge\neg q\wedge r$　对应101，记为m_5

$p\wedge q\wedge\neg r$　对应110，记为m_6

$p\wedge q\wedge r$　对应111，记为m_7

1.4 范式

- 主析取范式

定义1.8 设命题公式A中含n个命题变项，如果A的析取范式中的简单合取式都是极小项，则称该析取范式为A的主析取范式。

定理1.3 任何命题公式都有唯一的主析取范式。

- 主析取范式的构造

(1) 先求A的析取范式A'。

(2) 若析取范式A'的某简单合取式B中不含命题变项p_i, 也不含$\neg p_i$，则添加$(p_i \vee \neg p_i)$, 然后应用分配律展开。即

$$B \Leftrightarrow B \wedge 1 \Leftrightarrow B \wedge (p_i \vee \neg p_i) \Leftrightarrow (B \wedge p_i) \vee (B \wedge \neg p_i)$$

(3) 将重复出现的命题变项和重复出现的极小项都消去；如$p \wedge p$用p代，$m_i \vee m_i$用m_i代。

(4) 将极小项按由小到大的顺序排列。

例1.4.2 求公式$((p\vee q)\rightarrow r)\rightarrow p$的主析取范式。

解：由例1.4.1得

$$
\begin{aligned}
((p\vee q)\rightarrow r)\rightarrow p &\Leftrightarrow (q\wedge\neg r)\vee p \\
&\Leftrightarrow ((p\vee\neg p)\wedge q\wedge\neg r)\vee(p\wedge(q\vee\neg q)\wedge(r\vee\neg r)) \\
&\Leftrightarrow (\neg p\wedge q\wedge\neg r)\vee(p\wedge q\wedge\neg r)\vee(p\wedge\neg q\wedge\neg r)\vee(p\wedge\neg q\wedge r)\vee(p\wedge q\wedge\neg r) \\
&\quad\vee(p\wedge q\wedge r) \\
&\Leftrightarrow m_2\vee m_6\vee m_4\vee m_5\vee m_6\vee m_7 \\
&\Leftrightarrow m_2\vee m_4\vee m_5\vee m_6\vee m_7
\end{aligned}
$$

- 主析取范式与真值表

极小项m_i的成真赋值为i对应的二进制；

依据命题公式主析取范式的极小项，可得到命题公式的成真赋值。由命题公式的主析取范式中没有出现的极小项可确定命题公式的成假赋值。

只要知道了命题公式A的主析取范式，即可写出A的真值表。

若知道了A的真值表，找出成真赋值，以对应的十进制数作为角码的极小项即为A的主析取范式中所含的全部极小项。

例1.4.3 用真值表法求公式$(\neg p \to r) \wedge (p \leftrightarrow q)$的主析取范式。

p	q	r	$\neg p \to r$	$p \leftrightarrow q$	$(\neg p \to r) \wedge (p \leftrightarrow q)$
0	0	0	0	1	0
0	0	1	1	1	1
0	1	0	0	0	0
0	1	1	1	0	0
1	0	0	1	0	0
1	0	1	1	0	0
1	1	0	1	1	1
1	1	1	1	1	1

从而该公式的主析取范式为$m_1 \vee m_6 \vee m_7$.

- 主析取范式的用途

(1) 求公式的成真赋值和成假赋值

例：$(p\to\neg q)\to r \Leftrightarrow m_1\vee m_3\vee m_5\vee m_6\vee m_7$，

其成真赋值为001, 011, 101, 110, 111，

其余的赋值000, 010, 100为成假赋值。

(2) 判断两个公式是否等值

任何命题公式的主析取范式都是唯一的，因而$A\Leftrightarrow B$当且仅当A与B有相同的主析取范式。

(3) 判断公式的类型

设A含n个命题变项，则

A为重言式$\Leftrightarrow A$的主析取范式含2^n个极小项

A为矛盾式$\Leftrightarrow A$的主析取范式为0

A为非重言式的可满足式$\Leftrightarrow A$的主析取范式中至少含一个且不含全部极小项

例1.4.4 某单位要在甲，乙，丙三人中选派1～2名出差，选派时需满足如下条件：

(1) 若甲去，则丙同去；

(2) 若乙去，则丙不能去；

(3) 若丙不去，则甲或乙可以去。

问有几种选派方案？

解：设p：派甲去出差；q：派乙去出差；r：派丙去出差。

由已知条件可得公式

$$(p\to r)\wedge(q\to\neg r)\wedge(\neg r\to(p\vee q))$$

经过演算可得

$$(p\to r)\wedge(q\to\neg r)\wedge(\neg r\to(p\vee q))$$

$$\Leftrightarrow(\neg p\wedge\neg q\wedge r)\vee(\neg p\wedge q\wedge\neg r)\vee(p\wedge\neg q\wedge r)$$

3个极小项可知有3种选派方案。

1.4 范式

- 极大项

定义1.9 设有n个命题变项，若在简单析取式中每个命题变项与其否定有且仅有一个出现一次，称这样的简单析取式为极大项。在极大项中，命题变项与其否定通常按下角标或字典顺序排列。

n个命题变项共可产生2^n个不同的极大项，其中每个极大项都有且仅有一个成假赋值。

在极大项中，将命题变项看成0，命题变项的否定看成1，则每个极大项唯一地对应一个二进制数，若该二进制数对应的十进制数为i，则该极大项记作M_i.

例：由三个命题变项p, q, r 共可产生8 个极大项，分别为：

$p\vee q\vee r$	对应000，记为M_0
$p\vee q\vee \neg r$	对应001，记为M_1
$p\vee \neg q\vee r$	对应010，记为M_2
$p\vee \neg q\vee \neg r$	对应011，记为M_3
$\neg p\vee q\vee r$	对应100，记为M_4
$\neg p\vee q\vee \neg r$	对应101，记为M_5
$\neg p\vee \neg q\vee r$	对应110，记为M_6
$\neg p\vee \neg q\vee \neg r$	对应111，记为M_7

- 主合取范式

定义1.10 如果公式A的合取范式中的简单析取式全是极大项，则称该合取范式为主合取范式。

定理1.4 任何命题公式都有唯一的主合取范式。

- 主合取范式的构造

(1) 先求A的合取范式A'。

(2) 若合取范式A'的某简单析取式B中不含命题变项p_i, 也不含$\neg p_i$，则添加$(p_i \wedge \neg p_i)$, 然后应用分配律展开。即

$$B \Leftrightarrow B \vee 0 \Leftrightarrow B \vee (p_i \wedge \neg p_i) \Leftrightarrow (B \vee p_i) \wedge (B \vee \neg p_i)$$

(3) 将重复出现的命题变项、重复出现的极大项都消去;如$p \vee p$用p代，$M_i \wedge M_i$用M_i代。

(4) 将极大项按由小到大的顺序排列。

例1.4.5 求公式$((p \vee q) \rightarrow r) \rightarrow p$的主合取范式。

解：由例1.4.1得

$$((p\vee q)\rightarrow r)\rightarrow p \Leftrightarrow (p\vee q)\wedge(\neg r\vee p)$$
$$\Leftrightarrow (p\vee q\vee(r\wedge\neg r))\wedge(p\vee(q\wedge\neg q)\vee\neg r)$$
$$\Leftrightarrow (p\vee q\vee r)\wedge(p\vee q\vee\neg r)\wedge(p\vee q\vee\neg r)\wedge(p\vee\neg q\vee\neg r)$$
$$\Leftrightarrow M_0\wedge M_1\wedge M_1\wedge M_3$$
$$\Leftrightarrow M_0\wedge M_1\wedge M_3$$

- 极小项与极大项

$$\neg m_i=M_i,\quad \neg M_i=m_i$$

- 利用主析取范式求主合取范式

(1) 求出A的主析取范式。

(2) 写出以A的主析取范式中没出现的极小项的角码为角码的极大项。

(3) 由这些极大项构成的合取式极为A的主合取范式。

- 作业

P33 1.12

1.13(1)

1.12 求下列命题公式的主析取范式、主合取范式、成真赋值、成假赋值.

(1) $(p\vee(q\wedge r))\rightarrow(p\wedge q\wedge r)$.

(2) $(\neg p\rightarrow q)\rightarrow(\neg q\vee p)$.

(3) $\neg(p\rightarrow q)\wedge q\wedge r$.

1.13 通过求主析取范式判断下列各组命题公式是否等值.

(1) $p\rightarrow(q\rightarrow r)$: $q\rightarrow(p\rightarrow r)$.

1.5 联结词全功能集

- 真值函数

n个命题变项的真值表给出了$\{0,1\}^n$到$\{0,1\}$的一个对应关系。

定义1.11 称定义域为$\{00\ldots0, 00\ldots1, \ldots, 11\ldots1\}$，值域为$\{0,1\}$的函数是$n$ 元真值函数(其中$n\geq1$)。

常用$\boldsymbol{F}:\{0,1\}^n\to\{0,1\}$表示$\boldsymbol{F}$是$n$元真值函数。

共有2^{2^n}个n元真值函数。

例：$\boldsymbol{F}:\{0,1\}^2\to\{0,1\}$，且$\boldsymbol{F}(00) = \boldsymbol{F}(01) = \boldsymbol{F}(11) = 1$, $\boldsymbol{F}(10)=0$，则$\boldsymbol{F}$为一个确定的2元真值函数。

对于任何一个含n个命题变项的命题公式A，都存在唯一的一个n元真值函数$\boldsymbol{F}$为A的真值表。

等值的公式对应的真值函数相同。

例：含两个命题变项p、q的真值函数：

p	q	$F_0^{(2)}$	$F_1^{(2)}$	$F_2^{(2)}$	$F_3^{(2)}$	$F_4^{(2)}$	$F_5^{(2)}$	$F_6^{(2)}$	$F_7^{(2)}$
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	1	0	0	0	0	1	1	1	1
1	0	0	0	1	1	0	0	1	1
1	1	0	1	0	1	0	1	0	1

p	q	$F_8^{(2)}$	$F_9^{(2)}$	$F_{10}^{(2)}$	$F_{11}^{(2)}$	$F_{12}^{(2)}$	$F_{13}^{(2)}$	$F_{14}^{(2)}$	$F_{15}^{(2)}$
0	0	1	1	1	1	1	1	1	1
0	1	0	0	0	0	1	1	1	1
1	0	0	0	1	1	0	0	1	1
1	1	0	1	0	1	0	1	0	1

1.5 联结词全功能集

- 冗余的联结词/独立的联结词

定义1.12 在一个联结词的集合中，如果一个联结词可由集合中的其他联结词定义，则称此联结词为冗余的联结词，否则称为独立的联结词。

例：在联结词集{¬, ∧, ∨, →, ↔}中，由于

$$p \to q \Leftrightarrow \neg p \vee q,$$

所以，→为冗余的联结词；类似地，↔也是冗余的联结词。又在{¬, ∧, ∨}中，由于

$$p \wedge q \Leftrightarrow \neg(\neg p \vee \neg q),$$

所以，∧是冗余的联结词。

1.5 联结词全功能集

- 联结词全功能集

定义1.13 设S是一个联结词集合，如果任何真值函数都可以由仅含S中的联结词构成的公式表示，则称S是联结词全功能集。

说明：

若S是全功能集，则任何命题公式都可用S中的联结词表示。

若S_1, S_2是两个联结词集合，且$S_1 \subseteq S_2$, 若S_1是全功能集，则S_2也是全功能集.

若一个联结词的全功能集中不含冗余的联结词，则称它是极小全功能集。

定理1.2 $\{\neg, \wedge, \vee\}$、$\{\neg, \wedge\}$、$\{\neg, \vee\}$、$\{\neg, \rightarrow\}$都是联结词全功能集。其中$\{\neg, \wedge\}$、$\{\neg, \vee\}$、$\{\neg, \rightarrow\}$是极小全功能集。

1.6 推理理论

- 相关概念

前提：已知的命题公式；

结论：从前提出发应用推理规则推出的命题公式；

推理：从前提推出结论的思维过程。

定义1.13 若$(A_1\wedge A_2\wedge \ldots \wedge A_n)\rightarrow B$为重言式，则称$A_1, A_2, \ldots, A_n$推出结论$B$的推理正确，$B$是$A_1, A_2, \ldots, A_n$的逻辑结论或有效结论。称$(A_1\wedge A_2\wedge \ldots \wedge A_n)\rightarrow B$为由前提$A_1, A_2, \ldots, A_n$推出结论$B$的推理的形式结构。

用“$A\Rightarrow B$”表示$A\rightarrow B$是重言式，因而若有前提$A_1, A_2, \ldots, A_n$推出结论B的推理正确，也记作$(A_1\wedge A_2\wedge \ldots \wedge A_n)\Rightarrow B$ 或

前提：$A_1, A_2, \ldots, A_n$

结论：B

注意：“$\Rightarrow$”不是联结词，“$A\Rightarrow B$”也不是公式。

注意：推理正确不能保证结论正确，因为前提可能为假。只有在推理正确且前提也正确时，才能保证结论正确。

例1.6.1 判断下面各推理是否正确。

(1) 若今天是1号, 则明天是5号. 今天是1号. 所以明天是5号.

解：设p：今天是1号，q：明天是5号.

前提：$p \to q, p$.

结论：q.

推理的形式结构为

$$((p \to q) \wedge p) \to q.$$

判断上式是否为重言式，用真值表法：

p	q	$p\rightarrow q$	$(p\rightarrow q)\wedge p$	$((p\rightarrow q)\wedge p)\rightarrow q$
0	0	1	0	1
0	1	1	0	1
1	0	0	0	1
1	1	1	1	1

真值表的最后一列全为1，因而推理正确。

(2) 若今天是1号, 则明天是5号. 明天是5号. 所以今天是1号.

解：设p：今天是1号，q：明天是5号.

前提：$p\rightarrow q$, q.

结论：p.

推理的形式结构为

$$((p\rightarrow q)\wedge q)\rightarrow p.$$

1.6 推理理论

用主合取范式法

$$
\begin{aligned}
&((p\to q)\wedge q)\to p\\
&\Leftrightarrow \neg((\neg p\vee q)\wedge q)\vee p\\
&\Leftrightarrow p\vee\neg q\\
&\Leftrightarrow M_1
\end{aligned}
$$

故01是成假赋值，所以推理不正确。

- 判断推理是否正确的方法

$$\left.\begin{array}{l}\text{真值表法}\\ \text{等值演算法}\\ \text{主析取范式法}\end{array}\right\}\text{判断推理是否正确}$$

构造证明法　　证明推理正确

说明：用前3个方法时采用形式结构“$A_1\wedge A_2\wedge\ldots\wedge A_k\to B$”.

用构造证明时, 采用“前提: $A_1, A_2, \ldots, A_k$, 结论: B”.

1.6 推理理论

- 推理定律

重要的推理定律

$A \Rightarrow (A \vee B)$	附加律
$(A \wedge B) \Rightarrow A$	化简律
$(A \rightarrow B) \wedge A \Rightarrow B$	假言推理
$(A \rightarrow B) \wedge \neg B \Rightarrow \neg A$	拒取式
$(A \vee B) \wedge \neg B \Rightarrow A$	析取三段论
$(A \rightarrow B) \wedge (B \rightarrow C) \Rightarrow (A \rightarrow C)$	假言三段论
$(A \leftrightarrow B) \wedge (B \leftrightarrow C) \Rightarrow (A \leftrightarrow C)$	等价三段论
$(A \rightarrow B) \wedge (C \rightarrow D) \wedge (A \vee C) \Rightarrow (B \vee D)$	构造性二难
$(A \rightarrow B) \wedge (C \rightarrow D) \wedge (\neg B \vee \neg D) \Rightarrow (\neg A \vee \neg C)$	破坏性二难

1.6 推理理论

- 证明

　证明是一个描述推理过程的命题公式序列，其中每个命题公式或者是已知的前提，或者是由前面的命题公式应用推理规则得到的结论。

- 推理规则

　(1) 前提引入规则
　在推理过程中，可以随时引入已知的前提。
　(2) 结论引入规则
　在推理过程中，前面已推出的有效结论（本演绎的中间结论）都可作为后续推理的前提引用。
　(3) 置换规则
　在推理过程中，命题公式中的子公式都可以用与之等价的命题公式置换，得到证明的公式序列的另一公式。

1.6 推理理论

(1) 前提引入规则

(2) 结论引入规则

(3) 置换规则

(4) 假言推理规则

$$\frac{A \to B \quad A}{\therefore B}$$

(5) 附加规则

$$\frac{A}{\therefore A \vee B}$$

(6) 化简规则

$$\frac{A \wedge B}{\therefore A}$$

(7) 拒取式规则

$$\frac{A \to B \quad \neg B}{\therefore \neg A}$$

(8) 假言三段论规则

$$\frac{A \to B \quad B \to C}{\therefore A \to C}$$

1.6 推理理论

(9) 析取三段论规则

$$\begin{array}{l} A \lor B \\ \neg B \\ \hline \therefore A \end{array}$$

(10)构造性二难推理规则

$$\begin{array}{l} A \to B \\ C \to D \\ A \lor C \\ \hline \therefore B \lor D \end{array}$$

(11) 破坏性二难推理规则

$$\begin{array}{l} A \to B \\ C \to D \\ \neg B \lor \neg D \\ \hline \therefore \neg A \lor \neg C \end{array}$$

(12) 合取引入规则

$$\begin{array}{l} A \\ B \\ \hline \therefore A \land B \end{array}$$

例1.6.2 构造下面推理的证明：

若明天是星期三或星期五，我就有课．若有课，今天必备课．我今天下午没备课．所以，明天不是星期三和星期五．

解：设p：明天是星期三，q：明天是星期五，

r：我有课，s：我备课

推理的形式结构为

前提：$(p\vee q)\rightarrow r$，$r\rightarrow s$，$\neg s$

结论：$\neg p\wedge\neg q$

证明

①	$r\rightarrow s$	前提引入
②	$\neg s$	前提引入
③	$\neg r$	①②拒取式
④	$(p\vee q)\rightarrow r$	前提引入
⑤	$\neg(p\vee q)$	③④拒取式
⑥	$\neg p\wedge\neg q$	⑤置换

- 附加前提证明法

欲证明

前提：$A_1, A_2, \ldots, A_k$

结论：$C \to B$

等价地证明

前提：$A_1, A_2, \ldots, A_k, C$

结论：B

理由：

$$(A_1 \wedge A_2 \wedge \ldots \wedge A_k) \to (C \to B)$$

$$\Leftrightarrow \neg(A_1 \wedge A_2 \wedge \ldots \wedge A_k) \vee (\neg C \vee B)$$

$$\Leftrightarrow \neg(A_1 \wedge A_2 \wedge \ldots \wedge A_k \wedge C) \vee B$$

$$\Leftrightarrow (A_1 \wedge A_2 \wedge \ldots \wedge A_k \wedge C) \to B$$

例1.6.1 用附加前提证明法构造证明：

2是素数或合数．若2是素数，则$\sqrt{2}$是无理数．若$\sqrt{2}$是无理数，则4不是素数. 所以，如果4是素数，则2是合数.

解：设p: 2是素数，q: 2是合数，r: $\sqrt{2}$是无理数，s: 4是素数

推理的形式结构为

前提：$p\vee q$, $p\to r$, $r\to\neg s$

结论：$s\to q$

证明

证明	① $p\to r$	前提引入
	② $r\to\neg s$	前提引入
	③ $p\to\neg s$	②③假言三段论
	④ s	附加前提引入
	⑤ $\neg p$	①④拒取式
	⑥ $p\vee q$	前提引入
	⑦ q	⑤⑥析取三段论

1.6 推理理论

- **反证法**

欲证明

前提：$A_1, A_2, \ldots, A_k$

结论：B

将$\neg B$加入前提，若推出矛盾，则得证推理正确.

理由:

$$A_1 \wedge A_2 \wedge \ldots \wedge A_k \rightarrow B$$
$$\Leftrightarrow \neg(A_1 \wedge A_2 \wedge \ldots \wedge A_k) \vee B$$
$$\Leftrightarrow \neg(A_1 \wedge A_2 \wedge \ldots \wedge A_k \wedge \neg B)$$

括号内部为矛盾式当且仅当 $(A_1 \wedge A_2 \wedge \ldots \wedge A_k \rightarrow B)$为重言式

例1.6.1 用反证法证明：

前提：$\neg(p\wedge q)\vee r$，$r\rightarrow s$，$\neg s$，p

结论：$\neg q$

证明（用反证法）

① $r\rightarrow s$	前提引入
② $\neg s$	前提引入
③ $\neg r$	②③拒取式
④ $\neg(p\wedge q)\vee r$	前提引入
⑤ $\neg(p\wedge q)$	④⑤析取三段论
⑥ $\neg p\vee\neg q$	⑥置换
⑦ q	结论否定引入
⑧ $\neg p$	①⑦析取三段论
⑨ p	前提引入
⑩ $\neg p\wedge p$	⑧⑨合取

- 作业

P35　1.19(3,4,5)

　　 1.20

1.19　构造下面推理的证明.

(3) 前提：$p \rightarrow q$.

结论：$p \rightarrow (p \wedge q)$.

(4) 前提：$q \rightarrow p, q \leftrightarrow s, s \leftrightarrow t, t \wedge r$.

结论：$p \wedge q \wedge s \wedge r$.

(5) 前提：$(p \wedge q) \rightarrow r, \neg r \vee s, \neg s, p$.

结论：$\neg q$.

1.20　判断下述推理是否正确，并证明你的结论. 如果他是理科学生，他必学好数学. 如果他不是文科学生，他必是理科学生. 他没学好数学. 所以他是文科学生.

逻辑学初步

第一部分 逻辑学初步

第1章 命题逻辑

第2章 谓词逻辑

2.谓词逻辑

- 命题逻辑的局限性

例：对如下推理：

所有人都是要死的。

苏格拉底是人。

苏格拉底是要死的。

在命题逻辑中，如果用 p, q, r 表示以上三个命题，则上述推理可以表示成 $(p \wedge q) \rightarrow r$, 通过命题演算的推理理论不能证明其为重言式。

在命题逻辑中，命题是命题演算的基本单位。如果不研究命题的内部结构、成分及命题之间的内在联系，那么就无法处理一些简单而又常见的推理过程。

2.1 谓词逻辑基本概念

- 个体词

  个体词指可以独立存在的客体，它可以是一个具体的事物，也可以是一个抽象的概念。

  例：计算机、李明、自然数、思想、定理

- 谓词

  用来刻画个体词的性质或个体词之间关系的词是谓词。

  例：$\sqrt{2}$是无理数。

  李华是程序员。

  小李比小王高2cm。

  个体词：$\sqrt{2}$、李华、小李、小王

  谓词：……是无理数、…….是程序员、….比….高2cm

2.1 谓词逻辑基本概念

- 个体常项与个体变项

　表示具体的或特定的个体的词称为个体常项，一般用小写的英文字母 $a, b, c, \cdots$表示。表示抽象的或泛指的个体的词称为个体变项，常用小写的英文字母 $x, y, z, \cdots$ 表示。个体变项的取值范围称为个体域（或论域）。

　个体域可以是有限的集合，例如$\{1, 2, 3, 4\}$、$\{a, b, c\}$等，也可以是无限的集合，例如自然数集合、实数集等。特别是，当无特殊声明时，个体域由宇宙间的一切事物组成，称为全总个体域。

- 谓词常项与谓词变项

　表示具体性质或关系的谓词为谓词常项，用大写的英文字母 $F, G, H, \cdots$表示。表示抽象的或泛指的谓词称为谓词变项，也用大写的英文字母 $F, G, H, \cdots$ 表示。

- 例2.1.1 将下列命题用谓词符号化。

(1) 王明是个劳动模范

(2) 小李是小赵的老师

解：

(1) 设$M(x)$： 表示 x 是个劳动模范

a： 王明

则命题符号化为： $M(a)$

(2) 设$T(x,y)$： 表示 x 是 y 的老师

s： 小李　　t： 小赵

则命题符号化为： $T(s,t)$

2.1 谓词逻辑基本概念

- ***n*元谓词**

　谓词中包含的个体词数称为元数，含有n（$n \geq 1$）个个体词的谓词称为n元谓词。

　一元谓词是表示个体词性质的。

　当$n \geq 2$时，n元谓词表示个体词之间的关系。

　一般来说，用$P(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ 表示n元谓词，它是以个体变项的个体域为定义域，以$\{0,1\}$为值域的n元函数，在这里个体变项的顺序不能随意改动。一般而言，$P(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ 不是命题。

- **0元谓词**

　不带个体变项的谓词称为0元谓词。

　例：在例2.1.1中的$F(a)$、$H(s,t)$ 都是0元谓词。0元谓词常项都是命题，简单命题都可以用0元谓词常项表示。

　命题逻辑中的联结词都可以应用于谓词逻辑中。

- 例2.1.2 将下列命题用0元谓词符号化。

(1) 2是素数且是偶数。

(2) 如果2大于3，则2大于4。

(3) 如果张明比李民高，李民比赵亮高，则张明比赵亮高。

解：

(1) 设$F(x)$：x 是素数； $G(x)$：x 是偶数； a：2

则命题符号化为： $F(a)\wedge G(a)$

(2) 设$L(x,y)$：x大于y； a：2； b：3； c：4

则命题符合化为： $L(a, b) \rightarrow L(a, c)$

(3) 设$H(x, y)$：x比y高； a：张明； b：李民； c：赵亮

则命题符号化为： $H(a, b)\wedge H(b, c) \rightarrow H(a, c)$

- **量词**

表示个体常量或变量之间数量关系的词叫量词，量词有全称量词和存在量词两种。

全称量词

对应日常语言中的“一切”，“所有的”，“任意的”等词，用符号 $\forall$ 表示。$\forall x$表示对个体域里的所有个体。$\forall x F(x)$表示个体域里的所有个体都有性质 F。

存在量词

对应日常语言中的“存在着”，“有一个”，“至少有一个”等词，用符号$\exists$ 表示。$\exists x$表示对个体域里的个体。$\exists x F(x)$表示存在着个体域中的个体具有性质 F。

- 例2.1.3 考虑下述两个命题的符号化

  (1) 所有人都是要死的

  (2) 有的人活百岁以上

解：在考虑符号化时必须先明确个体域，此处个体域 D 为人类集合。于是

(1) 符号化为： $\forall xF(x)$，其中$F(x)$： x 是要死的。

(2) 符号化为： $\exists xP(x)$，其中$P(x)$： x 活百岁以上。

但将个体域 D 设定为全总体个体域时不必声明D，此时 $\forall xF(x)$ 表示宇宙间的一切事物都是要死的，没能表达出原命题的意义，因此必须引入一个新的谓词，将人分离出来。

于是引入一个新的谓词 $M(x)$：x是人，于是有

(1) $\forall x(M(x) \rightarrow F(x))$

(2) $\exists x(M(x) \wedge P(x))$

- **特性谓词**

若一个谓词 $P(x)$ 是用来限制个体变元的取值范围，那么称谓词 $P(x)$ 为特性谓词 。

当取全总个体域时，用特性谓词对个体变化的真正取值范围加以限制。

注意：

对全称量词，特性谓词常作蕴含的前件，如$\forall x(M(x) \rightarrow F(x))$

对存在量词，特性谓词常作合取项，如$\exists x(M(x) \wedge F(x))$

- **在使用量词时的注意事项**

(1) 在不同的个体域中，命题符号化的形式可能不一样。

(2) 如果事先没有给出个体域，都应以全总体域为个体域。

(3) 在引入特性谓词后，使用全称量词和存在量词符号化的形式是不同的。

(4) 当个体域为有限集时，如 $D=\{a_1, a_2, \ldots, a_n\}$, 对于任意的谓词 $A(x)$,都有

$$<1> \forall x A(x) \Leftrightarrow A(a_1) \wedge A(a_2) \wedge \cdots \wedge A(a_n);$$

$$<2> \exists x A(x) \Leftrightarrow A(a_1) \vee A(a_2) \vee \cdots \vee A(a_n);$$

(5) 多个量词同时出现时，不能随意颠倒它们的顺序。

- 例2.1.4 在谓词逻辑中将下列命题符号化

  (1) 凡是有理数均可表达成分数。

  (2) 有的有理数是整数。

  要求：(a) 个体域为有理数集合

  (b) 个体域为实数集合

  (c) 个体域为全总个体域

  解：(a) 个体域为有理数集合

  (1) $\forall xF(x)$，其中$F(x)$：x 可表示成分数。

  (2) $\exists xG(x)$，其中$G(x)$：x 是整数。

  (b) 引入特性谓词：$R(x)$：x 是有理数。

  (1) $\forall x(R(x) \to F(x))$, 其中$F(x)$：x 可表示成分数。

  (2) $\exists x(R(x) \wedge G(x))$, 其中$G(x)$：$x$ 是整数。

  (c) 同(b)。

- 例2.1.4 考虑下述两个命题的符号化

(1) 任何金属都可以溶解在某种液体中

解：$M(x)$：x是金属； $L(x)$：x是液体；

$D(x, y)$：x可以溶解在y中

$\forall x(M(x)\rightarrow\exists y(L(y)\wedge D(x, y))$

(2) 不管白猫黑猫，抓住老鼠就是好猫。

解：$C(x)$：x是猫； $W(x)$：x是白色的；

$B(x)$：x是黑色的；$G(x)$：x是好的；

$M(x)$：x是老鼠；$K(x, y)$：x抓住y

$\forall x\ (C(x)\wedge(W(x)\vee B(x))\wedge\exists y(M(y)\wedge K(x, y))\rightarrow G(x))$

- 作业

P52-53　2.2 (1)(3)

　　　　　2.3 (1)(2)(4)

2.2 在谓词逻辑中将下列命题符号化，并指出各命题的真值。个体域分别为

(a) 自然数集合 N(N 中含 0).

(b) 整数集合 Z.

(c) 实数集合 R.

(1) 对于任意的 x，均有 $(x+1)^2=x^2+2x+1$.

(3) 存在 x，使得 $5x=1$.

2.3 在一阶逻辑中将下列命题符号化.

(1) 每个大学生不是文科生就是理科生.

(2) 有些人喜欢所有的花.

(4) 在北京工作的人未必都是北京人.

2.2 谓词逻辑合式及解释

- **字母表**

定义2.1 字母表如下：

(1) 个体常项：$a, b, c, \ldots, a_i, b_i, c_i, \ldots, i \geq 1$

(2) 个体变项：$x, y, z, \ldots, x_i, y_i, z_i, \ldots, i \geq 1$

(3) 函数符号：$f, g, h, \ldots, f_i, g_i, h_i, \ldots, i \geq 1$

(4) 谓词符号：$F, G, H, \ldots, F_i, G_i, H_i, \ldots, i \geq 1$

(5) 量词符号：$\forall, \exists$

(6) 联结词符号：$\neg, \wedge, \vee, \rightarrow, \leftrightarrow$

(7) 括号与逗号：(,), ，

- **项**

定义2.2 项的递归定义如下：

(1) 个体常项和个体变项是项

(2) 若$\varphi(x_1, x_2, \ldots, x_n)$是任意的$n$元函数，$t_1, t_2, \ldots, t_n$是任意的$n$个项，则$\varphi(t_1, t_2, \ldots, t_n)$ 是项

(3) 只有有限次的使用(1) 、(2)生产的符号才是项

例：

a、b、x、y、$f(x,y) = x + y$、$g(x,y) = x - y$、 $h(x,y) = x \cdot y$ 等都是项，

$f(a, g(x,y)) = a + (x - y)$、 $g(h(x,y), f(a,b)) = x \cdot y - (a+b)$等也都是项。

2.2 谓词逻辑合式及解释

- **原子公式的定义**

  定义2.3 设$R(x_1, x_2, \ldots, x_n)$是任意的n元谓词($n \geq 1$)，$t_1, t_2, \ldots, t_n$是任意的n个项，则称$R(t_1, t_2, \ldots, t_n)$是**原子公式。**

  原子公式是由项组成的n元谓词

  例：$F(x,y)$, $F(f(x_1,x_2), g(x_3,x_4))$等均为原子公式

- **合式公式**

  定义2.4 合式公式的定义如下：

  (1) 原子公式是合式公式

  (2) 若A是合式公式，则 $(\neg A)$ 也是合式公式

  (3) 若A, B是合式公式，则$(A \wedge B)$, $(A \vee B)$, $(A \rightarrow B)$, $(A \leftrightarrow B)$也是合式公式

  (4) 若A是合式公式，则$\forall xA$, $\exists xA$也是合式公式

  (5) 只有有限次地应用(1)~(4)构成的符号串才是合式公式。

  在谓词逻辑中合式公式又称为**谓词公式**，简称为**公式**。

- 将自然语言转换成谓词公式的步骤

  (1) 确定个体域，如无特别说明，一般使用全总个体域；

  (2) 根据个体域，分析命题中的个体、个体性质以及各个个体间的关系，确定谓词；

  (3) 根据表示数量的词确定量词；

  (4) 利用联结词将整个命题符号化

□ 例2.2.1 教室里有同学在讲话

解：因为题中没有特别指名个体域，所有这里采用全总体域。

令$S(x)$: x是同学，$R(x)$: x在教室里，$T(x)$: x在讲话，则命题符号化为：

$$\exists x(S(x)\wedge R(x)\wedge T(x))$$

- **个体变项的自由出现与约束出现**

定义2.5 在公式$\forall xA$和$\exists xA$中，称x为指导变项，A为相应量词的辖域。在$\forall x$和$\exists x$的辖域中，x的所有出现都称为约束出现，A中不是约束出现的其他变项的出现均称为是自由出现。

例：在公式 $\forall x(F(x,y)\rightarrow G(x,z))$ 中, $A=(F(x,y)\rightarrow G(x,z))$为$\forall x$的辖域, x为指导变项, A中x的两次出现均为约束出现，y与z均为自由出现

例：公式$\exists x(S(x)\wedge R(x))\vee T(x,y)$和$\forall x(R(x,y,z)\rightarrow \forall zG(x,y,z))$

定义2.6 若公式A中无自由出现的个体变项，则称A是封闭的合式公式，简称闭式。

例：$\forall x(F(x)\rightarrow G(x))$，$\exists x\forall y(F(x)\vee G(x, y))$ 都是闭式，而$\exists xS(x)\wedge R(x)$和$\forall x(R(x,y,z)\rightarrow \forall zG(x,y,z))$不是闭式。

2.2 谓词逻辑合式及解释

在一个合式公式中,可能有既约束出现又自由出现的个体变项。例如，$\exists xF(x)\wedge G(x,y)$ 中x的两次出现实际上是2个不同的变项，只是用了同一个名字，这样就容易产生混淆。为了避免出现这种情况，需要给其中一个改名字，所有不同的变项都用不同的名字。

- **换名规则**

将一个指导变项及其在辖域中所有约束出现替换成公式中没有出现的个体变项符号。

例：对于 $\exists xF(x)\wedge G(x,y)$，利用换名规则。将指导变项$x$以及它的第一次出现替换成$z$，得到：

$$\exists zF(z)\wedge G(x,y)$$

2.2 谓词逻辑合式及解释

注意：

(1) 改名只对约束出现的变元进行，不对自由出现的变元进行

(2) 改名必须处处进行，即对某量词约束的变元改名时，必须对原式中该变元的一切受该量词约束的约束进行改名；

(3) 对受某量词约束的变元改名时新名决不能与该量词的辖域中的其它自由变元同名；

(4) 改名前与改名后的约束关系保存不变。

- 例2.2.1 对公式 $\forall x(P(x,y)\wedge\exists yQ(y)\wedge M(x,y))\wedge(\forall xR(x)\rightarrow Q(x))$中的约束进行改名，使每个变元在公式中只以一种形式出现。

解：在该公式中，将$P(x,y)$和$M(x,y)$中的约束变元 x 改名为 z ，$R(x)$中的x改名为s，$Q(y)$ 中的 y 改名为t，改名后为：

$$\forall z(P(z,y)\wedge\exists tQ(t)\wedge M(z,y))\wedge(\forall sR(s)\rightarrow Q(x))$$

2.2 谓词逻辑合式及解释

- **公式的解释与分类**

一般情况下，一个一阶谓词公式中含有：

个体常项；个体变项（自由出现或约束出现）；函数变项；谓词变项

定义2.7 一个**解释** I 由下面四部分组成

(1) 非空个体域D；

(2) 对每一个个体常项符号指定一个D中的元素；

(3) 对每一个函数变项符号指定一个D上的函数；

(4) 对每一个谓词变项符号指定一个D上的谓词。

2.2 谓词逻辑合式及解释

说明：

(1) 将公式的个体常项用 I 的特定常项代替，函数和谓词用 I 的特定函数和谓词代替；

(2) 被解释的公式不一定全部包含解释中的4部分；

(3) 闭式在任何解释下都是命题；

(4) 不是闭式的公式在某些解释下也可能是命题。

- 例 2.2.2 给定解释N如下：

(1) 个体域$D_{\mathbb{N}}$为自然数集合；

(2) $a = 0$；

(3) 函数 $f(x,y) = x + y$，$g(x,y) = x \cdot y$；

(4) 谓词 $F(x,y)$ 为 $x = y$

在解释N下，下面哪些公式为真？哪些公式为假？

2.2 谓词逻辑合式及解释

(1) $\forall xF(g(x,a),x)$；

(2) $\forall x\forall y(F(f(x,a),y) \rightarrow F(f(y,a),x))$

(3) $\forall x\forall y\exists zF(f(x,y),z)$；

(4) $\forall x\forall yF(f(x,y),g(x,y))$

(5) $F(f(x,y),f(y,z))$

(1) 个体域D_{N}为自然数集合；

(2) $a = 0$；

(3) 函数 $f(x,y) = x + y$， $g(x,y) = x \cdot y$；

(4) 谓词 $F(x,y)$ 为 $x = y$

解：在解释 N 下，公式化分别为：

(1) $\forall x(x \cdot 0 = x)$， 假命题

(2) $\forall x\forall y(x + 0 = y \rightarrow y + 0 = x)$， 真命题

(3) $\forall x\forall y\exists z(x + y = z)$， 真命题

(4) $\forall x\forall y(x + y = x \cdot y)$， 假命题

(5) $x + y = y + z$，真值不确定，因而不是命题

给定解释 I，对公式中每个自由出现的个体变项指定个体域中的一个元素称作在解释 I 下的赋值。

2.2 谓词逻辑合式及解释

- 谓词公式的分类

定义2.8　设A为一谓词公式

永真式(逻辑有效式):A在任何解释和该解释下的任何赋值下都为真

矛盾式(永假式):A在任何解释和该解释下的任何赋值下都为假

可满足式:若至少存在一个解释和该解释下的一个赋值使A为真

说明:

永真式为可满足式，但反之不真

谓词公式的可满足性(永真性, 永假性)是不可判定的(特例除外)

定义2.9　设A_0是含命题变项$p_1, p_2, \ldots, p_n$的命题公式，$A_1, A_2, \ldots, A_n$是n个谓词公式，用A_i处处代换A_0中的p_i $(1 \leq i \leq n)$，所得公式A称为A_0的代换实例。

例:　$F(x) \rightarrow G(x)$, $\forall x F(x) \rightarrow \exists y G(y)$是$p \rightarrow q$的代换实例

2.2 谓词逻辑合式及解释

定理 命题公式中的重言式的代换实例都是永真式，命题公式中的矛盾式的代换实例都是矛盾式。

- 例 2.2.3 判断下列公式中哪些是逻辑有效式？哪些是矛盾式？

(1) $\forall xF(x) \to \exists xF(x)$；

(2) $\forall xF(x) \to (\forall x\exists y\, G(x,y) \to \forall xF(x))$；

(3) $\neg(F(x,y) \to R(x,y)) \wedge R(x,y)$；

(4) $\forall xF(x,y) \vee \forall yF(x,y)$；

(5) $\forall x\exists yF(x,y) \to \exists x\forall yF(x,y)$.

解：(1) 设I为任意的解释，若$\forall xF(x)$为假，则$\forall xF(x)\to\exists xF(x)$为真。若$\forall xF(x)$为真，则$\exists xF(x)$也为真，所以$\forall xF(x)\to\exists xF(x)$也为真，是逻辑有效式。

(2) 重言式$p\to(q\to p)$的代换实例，是逻辑有效式。

(3) 矛盾式$\neg(p\rightarrow q)\wedge q$的代换实例，是矛盾式。

(4) $\forall xF(x,y) \vee \forall yF(x,y)$

$\forall xF(x,y)$ 中的y和 $\forall yF(x,y)$ 中的x是自由出现。

取解释I：个体域为自然数集$\mathbb{N}$，$F(x,y)$：$x \le y$。取赋值$\sigma_1: \sigma_1(x)=0, \sigma_1(y)=1$。在解释 I 和赋值σ_1下，公式为 $\forall x(x \le 1) \vee \forall y(0 \le y)$，其值为真。再取赋值$\sigma_2: \sigma_2(x)=1, \sigma_2(y)=0$在解释 I 和赋值σ_2下，公式为$\forall x(x \le 0) \vee \forall y(1 \le y)$，其值为假。故此公式是非逻辑有效式的可满足式。

(5) $\forall x\exists yF(x,y) \rightarrow \exists x\forall yF(x,y)$

闭式。

取解释I：个体域为自然数集$\mathbb{N}$, $F(x,y)$：$x = y$。其值为假。

取解释I：个体域为自然数集$\mathbb{N}$, $F(x,y)$：$x \le y$。其值为真。

故此公式是非逻辑有效式的可满足式。

2.2 谓词逻辑合式及解释

- 作业

P53-54　2.5、2.6(2)(3)、2.7

2.5 (1) 试给出解释 I_1，使得

$$\forall x(F(x)\to G(x))\text{与}\forall x(F(x)\wedge G(x))$$

在 I_1 下具有不同的真值.

(2) 试给出解释 I_2，使得

$$\exists x(F(x)\wedge G(x))\text{与}\exists x(F(x)\to G(x))$$

在 I_2 下具有不同的真值.

2.6 设解释 R 和赋值 σ 如下：D_R 是实数集，$a=0$，函数 $f(x,y)=x-y$，谓词 $F(x,y)$ 为 $x<y$，σ：$\sigma(x)=0$，$\sigma(y)=1$，$\sigma(z)=2$. 在解释 R 和赋值 σ 下，下列哪些公式为真？哪些为假？

(2) $\forall xF(f(x,y),x)\to\exists y\neg F(x,f(y,z))$.

(3) $\forall x(F(x,y)\to\forall y(F(y,z)\to\forall zF(x,z)))$.

2.7 给出解释 I，使下面两个公式在解释 I 下均为假，从而说明这两个公式都不是逻辑有效式.

(1) $\forall x(F(x)\vee G(x))\to(\forall xF(x)\vee\forall xG(x))$.

(2) $(\exists xF(x)\wedge\exists xG(x))\to\exists x(F(x)\wedge G(x))$.

- 谓词逻辑等值式

定义2.10 设A, B是谓词逻辑中的两公式，若$A \leftrightarrow B$为逻辑有效式，则称A与B是等值的，记作 $A \Leftrightarrow B$，并称$A \Leftrightarrow B$为等值式。

例：由于重言式都是逻辑有效式，因而第一章的等值式及其代换实例都是谓词逻辑中的等值式，如

$$\forall xA(x) \text{ 与 } \forall xA(x) \wedge \forall xA(x)$$

$$\forall xA(x) \rightarrow \exists xB(x) \text{ 与} \neg \forall xA(x) \vee \exists xB(x)$$

定理 2.1 量词否定等值式

设$A(x)$是含x自由出现的公式

(1) $\neg \forall xA(x) \Leftrightarrow \exists x \neg A(x)$

(2) $\neg \exists xA(x) \Leftrightarrow \forall x \neg A(x)$

2.3 谓词逻辑等值式与前束范式

- 量词辖域收缩与扩张等值式

定理 2.2　设$A(x)$是含x自由出现的公式，B中不含x的自由出现

(1)关于全称量词的：

① $\forall x(A(x) \vee B) \Leftrightarrow \forall x A(x) \vee B$

② $\forall x(A(x) \wedge B) \Leftrightarrow \forall x A(x) \wedge B$

③ $\forall x(A(x) \to B) \Leftrightarrow \exists x A(x) \to B$

④ $\forall x(B \to A(x)) \Leftrightarrow B \to \forall x A(x)$

(2)关于存在量词的:

① $\exists x(A(x) \vee B) \Leftrightarrow \exists x A(x) \vee B$

② $\exists x(A(x) \wedge B) \Leftrightarrow \exists x A(x) \wedge B$

③ $\exists x(A(x) \to B) \Leftrightarrow \forall x A(x) \to B$

④ $\exists x(B \to A(x)) \Leftrightarrow B \to \exists x A(x)$

- 量词分配等值式

定理 2.3 量词分配等值式

(1) $\forall x(A(x) \wedge B(x)) \Leftrightarrow \forall xA(x) \wedge \forall xB(x)$

(2) $\exists x(A(x) \vee B(x)) \Leftrightarrow \exists xA(x) \vee \exists xB(x)$

注意：$\forall$对$\vee$无分配律，$\exists$对$\wedge$无分配律, 即

(1) $\forall x(A(x) \vee B(x)) \not\Leftrightarrow \forall xA(x) \vee \forall xB(x)$

(2) $\exists x(A(x) \wedge B(x)) \not\Leftrightarrow \exists xA(x) \wedge \exists xB(x)$

定理 2.4 下面两等值式成立：

$\forall x\forall yA(x,y) \Leftrightarrow \forall y\forall xA(x,y)$

$\exists x\exists yA(x,y) \Leftrightarrow \exists y\exists xA(x,y)$

其中$A(x,y)$是任意的含x、y自由出现的谓词公式。

2.3 谓词逻辑等值式与前束范式

□ 例 2.3.1 证明下列等值式

(1) $\exists x(A(x) \to B(x)) \Leftrightarrow \forall x A(x) \to \exists x B(x)$

(2) $\forall x \forall y(P(x) \to Q(y)) \Leftrightarrow \exists x P(x) \to \forall y Q(y)$

证明：

(1) $\exists x(A(x) \to B(x)) \Leftrightarrow \exists x(\neg A(x) \vee B(x))$

$\Leftrightarrow \exists x \neg A(x) \vee \exists x B(x) \Leftrightarrow \neg \forall x A(x) \vee \exists x B(x)$

$\Leftrightarrow \forall x A(x) \to \exists x B(x)$

(2) $\forall x \forall y(P(x) \to Q(y)) \Leftrightarrow \forall x \forall y(\neg P(x) \vee Q(y))$

$\Leftrightarrow \forall x(\neg P(x) \vee \forall y Q(y)) \Leftrightarrow \forall x \neg P(x) \vee \forall y Q(y)$

$\Leftrightarrow \neg \exists x P(x) \vee \forall y Q(y)$

$\Leftrightarrow \exists x P(x) \to \forall y Q(y)$

问题

$\exists z\forall y[F(z)\vee G(x,y)] \overset{?}{\Leftrightarrow} \forall y\exists z[F(z)\vee G(x,y)]$

- 量词辖域收缩与扩张等值式

  定理 2.2 设$A(x)$是含x自由出现的公式，B中不含x的自由出现

  (1)关于全称量词的：

  ① $\forall x(A(x)\vee B)\Leftrightarrow \forall xA(x)\vee B$

  (2)关于存在量词的:

  ① $\exists x(A(x)\vee B)\Leftrightarrow \exists xA(x)\vee B$

- $\exists zF(z)\vee\forall yG(x,y)$
- $\exists x\forall yG(x,y)$ 与 $\forall y\exists xG(x,y)$　　$\mathbb{Z}$，**G**(x,y): $x+y=0$

2.3 谓词逻辑等值式与前束范式

- 前束范式

定义2.11 设A为一谓词公式，若A具有如下形式：

$$Q_1x_1Q_2x_2\ldots Q_kx_kB,$$

则称A为前束范式，其中每个Q_i $(1\leq i\leq k)$为$\forall$或$\exists$，B为不含量词的谓词公式。

例：$\forall x\exists y(F(x)\rightarrow(G(y)\land H(x,y)))$ ，$\forall x\neg(F(x)\land G(x))$是前束范式，而 $\forall x(F(x)\rightarrow\exists y(G(y)\land H(x,y)))$, $\neg\exists x(F(x)\land G(x))$不是前束范式。

在谓词逻辑中，任何合式公式公式 A 都存在与其等值的前束范式，称这样的前束范式为公式 A 的前束范式。

- 谓词公式化为前束范式的步骤

  (1) 消去联结词 $\to$，$\leftrightarrow$ 及多余的量词；

  (2) 否定深入。

  (3) 改名。即利用换名规则、代入规则更换一些变元的名称，以便消除混乱。

  (4) 量词前移。即利用量词辖域的收缩与扩张把量词移到前面，这样便可求出与公式等价的前束范式。

例 2.3.2 将公式 $\forall x\forall y(\exists z(P(x,z)\wedge P(y,z))\to\exists zQ(x,y,z))$ 化为前束范式。

解：$\forall x\forall y(\exists z(P(x,z)\wedge P(y,z))\to\exists zQ(x,y,z))$

$\Leftrightarrow\forall x\forall y(\neg\exists z(P(x,z)\wedge P(y,z))\vee\exists zQ(x,y,z))$ （消去$\to$）

$\Leftrightarrow\forall x\forall y(\forall z(\neg P(x,z)\vee\neg P(y,z))\vee\exists zQ(x,y,z))$ （$\neg$深入）

$\Leftrightarrow\forall x\forall y(\forall z(\neg P(x,z)\vee\neg P(y,z))\vee\exists uQ(x,y,u))$ （改名）

$\Leftrightarrow\forall x\forall y\forall z\exists u(\neg P(x,z)\vee\neg P(y,z)\vee Q(x,y,u))$ （量词前移）

- 例 2.3.3 求下列公式的前束范式：

(1) $\forall xF(x) \wedge \neg\exists xG(x)$

(2) $\forall xF(x) \vee \neg\exists xG(x)$

(3) $\forall xF(x) \to \exists xG(x)$

(4) $\exists xF(x) \to \forall xG(x)$

解：

(1) $\forall xF(x) \wedge \neg\exists xG(x)$

$\Leftrightarrow \forall xF(x) \wedge \forall x\neg G(x)$ (定理2.1(2))

$\Leftrightarrow \forall x(F(x) \wedge \neg G(x))$ (定理2.3(1))

(2) $\forall xF(x) \vee \neg\exists xG(x)$

$\Leftrightarrow \forall xF(x) \vee \forall x\neg G(x)$ (定理2.1(2))

$\Leftrightarrow \forall xF(x) \vee \forall y\neg G(y)$ (换名规则)

$\Leftrightarrow \forall x(F(x) \vee \forall y\neg G(y))$ (定理2.2(1)中的①)

$\Leftrightarrow \forall x\forall y(F(x) \vee \neg G(y))$ (定理2.2(1)中的①)

(3) $\forall xF(x) \to \exists xG(x)$

$\Leftrightarrow \neg\forall xF(x) \lor \exists xG(x)$

$\Leftrightarrow \exists x\neg F(x) \lor \exists xG(x)$ (定理2.1(1))

$\Leftrightarrow \exists x(\neg F(x) \lor G(x))$ (定理2.3(2))

$\Leftrightarrow \exists x(F(x) \to G(x))$

(4) $\exists xF(x) \to \forall xG(x)$

$\Leftrightarrow \neg\exists xF(x) \lor \forall xG(x) \Leftrightarrow \forall x\neg F(x) \lor \forall xG(x)$

$\Leftrightarrow \forall x\neg F(x) \lor \forall yG(y)$ (换名规则)

$\Leftrightarrow \forall x(\neg F(x) \lor \forall yG(y))$ (定理2.2(1)中的③)

$\Leftrightarrow \forall x\forall y(\neg F(x) \lor G(y))$ (定理2.2(1)中的④)

$\Leftrightarrow \forall x\forall y(F(x) \to G(y))$

2.3 谓词逻辑等值式与前束范式

注意：

(1) 一个公式的前束范式的各指导变项应是各不相同的；

(2) 原公式中自由出现的个体变项在前束范式中还应是自由出现的。

- 证明苏格拉底三段论

设$F(x)$: x是人. $G(x)$: x是要死的. a: 苏格拉底. 则有

$$\forall x(F(x)\to G(x))\wedge F(a)\to G(a)$$

2.3 谓词逻辑等值式与前束范式

- 作业

P54　　2.14

　　　　2.15

2.14 求下列各式的前束范式.

(1) $\neg \exists x F(x) \rightarrow \forall y G(x,y)$.

(2) $\neg(\forall x F(x,y) \vee \exists y G(x,y))$.

2.15 求下列各式的前束范式.

(1) $\forall x F(x) \vee \exists y G(x,y)$.

(2) $\exists x(F(x) \wedge \forall y G(x,y,z)) \rightarrow \exists z H(x,y,z)$.

第二部分 集合论初步

第3章 集合的基本概念与运算

第4章 组合分析初步

第5章 可数集、不可数集、Cantor集

第3章 集合的基本概念与运算

第二部分 集合论初步

第3章 集合的基本概念与运算

第4章 组合分析初步

第5章 可数集、不可数集、Cantor集

3.1 集合的基本概念

- 什么是集合（Set）？

只能直观而非正式地描述：集合就是一些事物构成的整体，且任一事物是否属于一个集合是完全确定的：要么属于，要么不属于，没有模糊空间。

例：a) 某班高数成绩高于线数成绩的同学的全体；
b) 某班取得较好高数成绩的同学的全体。

构成集合的事物称为集合的元素(Element)或成员(Member)或原子(Atom)。

通常用大写字母$A, B, C, \ldots$表示集合，用小写字母$a, b, c, \ldots$表示元素。

用$a \in A$ 表示a是集合A中的一个元素；而记号$a \notin A$ 表示a不是集合A中的一个元素。

3.1 集合的基本概念

- 集合的表示

1、列举法（花名册法 roster）

a) 将集合中的元素在花括号中全部列举出来：

A = {红，黄，蓝}

$B = \{0, 5, 2, 6, 1, 7, 8, 4, 3, 9\}$

b) 列举集合中足够多的元素以反映集合中所有元素的性质：

$C = \{0, 1, 4, 9, 16, 25, 36, ...\}$

$D = \{1, 4, 9, 16, ..., 9801, 10000\}$

2、谓词表示法（集合构造器 set builder）

通过描述集合成员所具有的性质来刻画集合中元素的方法

形如 $S = \{\, x \mid \mathrm{P}(x) \,\}$，集合$S$由满足性质P的元素组成

3.1 集合的基本概念

- 常见集合

符号	含义	元素
$\varnothing$	空集	不包含任何元素的集合
$\mathbb{N}$	自然数集	$\{0,1,2,3,\ldots\}$
$\mathbb{Z}$	整数集	$\{\ldots,-3,-2,-1,0,1,2,3,\ldots\}$
$\mathbb{Z}^+$	正整数集	$\{1,2,3,\ldots\}$
$\mathbb{Q}$	有理数集	$\{p/q \mid p, q \in \mathbb{Z}, \text{且} q \neq 0\}$
$\mathbb{R}$	实数集	所有实数构成的集合
$\mathbb{C}$	复数集	所有复数构成的集合

$A = \{\text{红，黄，蓝}\} = \{x \mid x\text{是基色}\}$

$B = \{0, 5, 2, 6, 1, 7, 8, 4, 3, 9\} = \{x \mid x < 10, x \in \mathbb{N}\}$

$C = \{0, 1, 4, 9, 16, 25, 36, \ldots\} = \{x^2 \mid x \in \mathbb{N}\}$

$D = \{1, 4, 9, 16, \ldots, 9801, 10000\} = \{x^2 \mid x \in \mathbb{Z}^+, x \leq 100\}$

3.1 集合的基本概念

- 集合中元素的三个特性

确定性：某一元素是否属于一个集合是完全确定的

互异性：同一集合中的元素是互相不同的

例：{红，黄，红，蓝} = {红，黄，蓝} = A

无序性：构成集合的各元素地位等同，无先后次序

例：$\{0, 5, 2, 6, 1, 7, 8, 4, 3, 9\} = \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9\} = B$

思考题：

$S = \left\{ [\frac{1^2}{2024}], [\frac{2^2}{2024}], \cdots, [\frac{2024^2}{2024}] \right\}$，$[x]$表示不超过 x 的最大整数

1) 用谓词法重新表示集合S；

2) 集合S中共有多少个元素？

3.1 集合的基本概念

- 集合之间的关系

包含(子集)　$A \subseteq B \Leftrightarrow \forall x\,(x \in A \rightarrow x \in B)$

不包含　$A \nsubseteq B \Leftrightarrow \exists x\,(x \in A \wedge x \notin B)$

相等　$A = B \Leftrightarrow A \subseteq B \wedge B \subseteq A$

不相等　$A \neq B$

真包含(真子集)　$A \subset B \Leftrightarrow A \subseteq B \wedge A \neq B$

不真包含　$A \not\subset B$

思考：　$\neq$ 和 $\not\subset$ 的定义

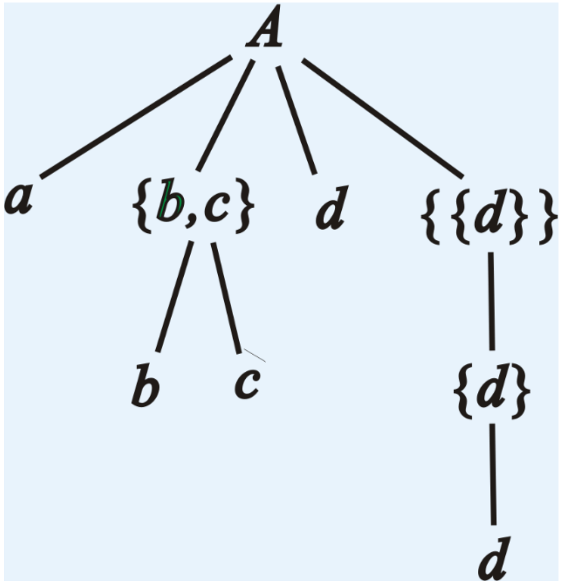
注意 $\in$ 和 $\subseteq$ 是不同层次的问题

□ 例1.1.1 $A=\{\, a, \{b,c\}, d, \{\{d\}\}\,\}$

$\{b,c\} \in A$　　$\{b,c\} \nsubseteq A$

$\{a,d\} \notin A$　　$\{a,d\} \subseteq A$

$\{\{d\}\} \in A$　　$\{\{d\}\} \nsubseteq A$



3.1 集合的基本概念

- 空集$\varnothing$——不含任何元素的集合

  例：$\{x \mid x^2+1=0 \wedge x\in\mathbb{R}\}$ 就是空集

  空集是任何集合的子集：$\varnothing \subseteq A$

  空集只有一个子集，即它自身。

  空集是唯一的。

  证：假设存在$\varnothing_1$和$\varnothing_2$，则$\varnothing_1 \subseteq \varnothing_2$ 且$\varnothing_1 \subseteq \varnothing_2$，因此$\varnothing_1=\varnothing_2$. $\blacksquare$

  注意区分$\varnothing$和$\{\varnothing\}$

- 集合的大小

  对于有限集S，如果S中恰有n个不同的元素，则称n是S的基数。S的基数记为$|S|$.

  如果$|S|=n$，则称S是n元集，它的含有m个$(m\le n)$元素的子集称作它的m元子集。

  如果集合不是有限集，则称它是无限的。

- 幂集（Power Set）

  集合S的幂集是集合S所有子集的集合，记作$P(S)$.

  $P(S) = \{x \mid x \subseteq A\}$.

□ 例1.1.2 计算以下幂集：

a) $P(\varnothing) = \{\varnothing\}$

b) $P(\{\varnothing\}) = \{\varnothing, \{\varnothing\}\}$

c) $P(\{\varnothing, \{\varnothing\}\}) = \{\varnothing, \{\varnothing\},\{\{\varnothing\}\}, \{\varnothing, \{\varnothing\}\}\}$

d) $P(\{1,\{2,3\}\}) = \{\varnothing,\{1\},\{\{2,3\}\}, \{1,\{2,3\}\}\}$

- 集合包含关系的性质

  a) 对任意集合A，$\varnothing \subseteq A$；

  b) 自反性：$A \subseteq A$

  c) 反对称性：若$A \subseteq B$且$B \subseteq A$，则$A = B$

  d) 传递性：若$A \subseteq B$且$B \subseteq C$，则$A \subseteq C$

  e) 若$|A| = n$，则A有2^n个子集

- **作业**

P74 3.9，3.14

3.9 $S_1=\varnothing, S_2=\{\varnothing\}, S_3=P(\{\varnothing\}), S_4=P(\varnothing)$，判断以下命题的真假.

(1) $S_2 \in S_4$.

(2) $S_1 \subseteq S_3$.

(3) $S_4 \subseteq S_2$.

(4) $S_4 \in S_3$.

(5) $S_2 = S_1$.

3.14 计算幂集 $P(A)$.

(1) $A=\{\varnothing\}$.

(2) $A=\{\{1\},1\}$.

(3) $A=P(\{1,2\})$.

(4) $A=\{\{1,1\},\{2,1\},\{1,2,1\}\}$.

(5) $A=\{x \mid x\in\mathbf{R} \wedge x^3-2x^2-x+2=0\}$.

- 集合的基本运算

  并集 $A \cup B = \{x \mid x \in A \vee x \in B\}$

  交集 $A \cap B = \{x \mid x \in A \wedge x \in B\}$

- 例1.2.1 设$A=\{a,b,c\}$，$B=\{c,d,f\}$，$C=\{b,e\}$

  $A \cup B = \{a,b,c,d,f\}$
  $A \cup C = \{a,b,c,e\}$
  $B \cup C = \{b,c,d,e,f\}$
  $A \cap B = \{c\}$
  $A \cap C = \{b\}$
  $B \cap C = \varnothing$　　不交

$$A_1 \cup A_2 \cup \ldots \cup A_n = \{x \mid x \in A_1 \vee x \in A_2 \vee \ldots \vee x \in A_n\} \triangleq \bigcup_{i=1}^{n} A_i$$

$$A_1 \cap A_2 \cap \ldots \cap A_n = \{x \mid x \in A_1 \wedge x \in A_2 \wedge \ldots \wedge x \in A_n\} \triangleq \bigcap_{i=1}^{n} A_i$$

例：$\{0,1\}\cup\{1,2\}\cup\{\{0,1\},\{1,2\}\}=\{0,1,2,\{0,1\},\{1,2\}\}$

$\{0,1\}\cap\{1,2\}\cap\{\{0,1\},\{1,2\}\}=\varnothing$

$$\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i = A_1 \cup A_2 \cup \ldots$$

$$\bigcap_{i=1}^{\infty} A_i = A_1 \cap A_2 \cap \ldots$$

- 全集

在一个具体问题中，如果所涉及的集合都是某个集合的子集，则称这个集合为全集，记作E（或U）．

全集具有相对性

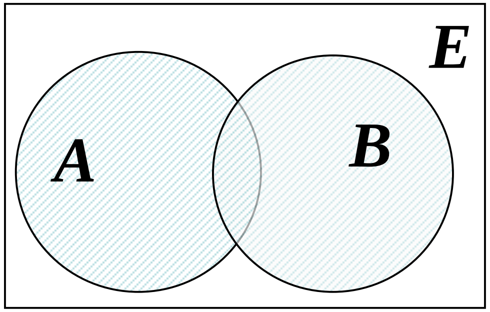
在给定问题中，全集包含任何集合，即$\forall A\,(A\subseteq E)$

- 文氏图——John Venn

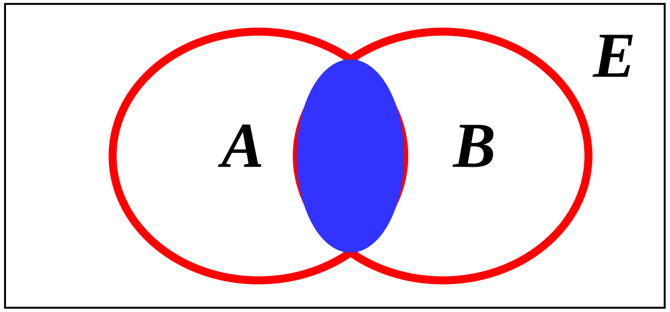
  全集E，包含所考虑的全部对象，用矩形框表示；

  圆形或其他几何图形用于表示集合；

  点用于表示集合中特定的元素。



$A \cup B$

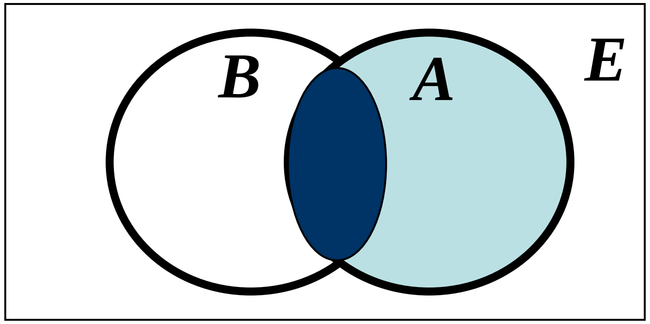


$A \cap B$

- 相对补集

设A、B是任意两个集合，所有属于A而不属于B的元素组成的集合，称为B中A的相对补集，记作$A-B$。即

$$A-B=\{x \mid x\in A \wedge x\notin B\}$$



□ 例1.2.5 如果$A=\{a,b,c,d\}$，$B=\{d,f,a\}$，$C=\{e,f,g\}$

$$B-A=\{f\}$$

$$A-B=\{b,c\}$$

$$C-A=\{e,f,g\}=C$$

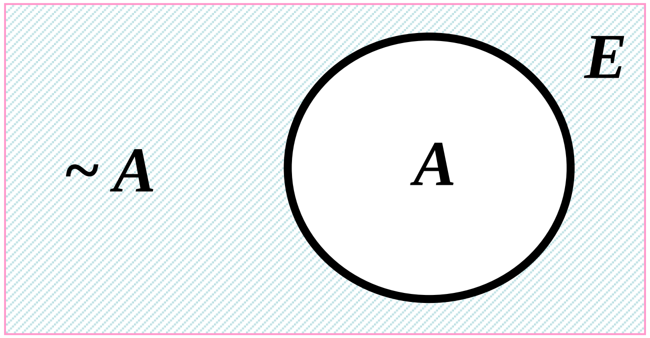
3.2 集合的基本运算

- 绝对补集

E为全集，A为E的子集，$E-A$称为A的绝对补集或补集，记作$\overline{A}$ 或$\sim A$. 即

$$\overline{A} = E-A = \{x \mid x \in E \wedge x \notin A\}$$

$$\overline{A} = \{x \mid x \notin A\}$$

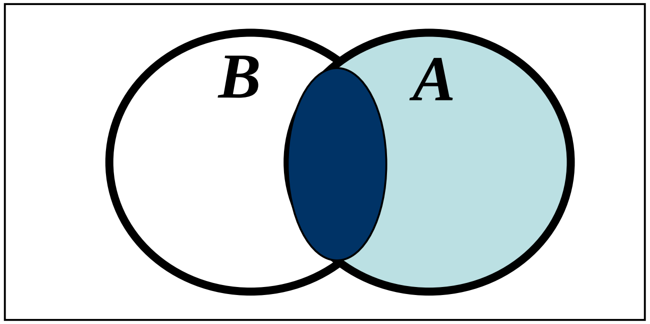


□ 例1.2.3 如果E={0,1,2,3}，A={0,1,2}，B={0,1,2,3}，C=∅，则

$\overline{A}$ ={3}　　$\overline{B}$ = ∅　　$\overline{C}$ = E.

- 重要性质：

$$A-B = A \cap \overline{B}$$

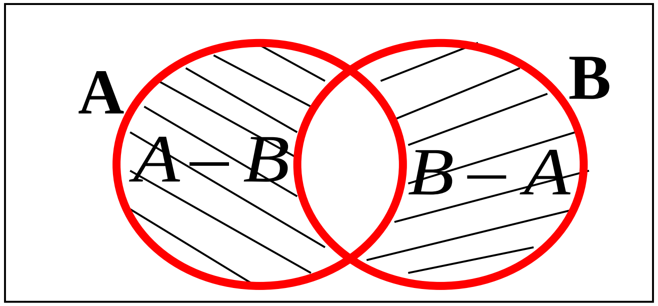


3.2 集合的基本运算

● 对称差

　　A、B为任意两个集合，所有属于A而不属于B和属于B而不属于A的元素组成的集合，称为A与B的对称差，记作$A \oplus B$。

$$A \oplus B = (A - B) \cup (B - A)$$



$A \oplus B$

□ 例1.2.4 如果$A=\{0,1,2\}$，$B=\{2,3\}$, 则有

$$A \oplus B = \{0,1\} \cup \{3\} = \{0,1,3\}$$

对称差等价定义：

$$A \oplus B = (A \cup B) - (A \cap B)$$

3.2 集合的基本运算

- 例1.2.6　T：选修《CS & AI数学基础I》的学生的集合
  - F：一年级大学生的集合　S：二年级大学生的集合
  - A：人工智能专业学生的集合　M：数学系学生的集合
  - L：爱好文学学生的集合　P：爱好体育运动学生的集合

所有人工智能专业一年级学生都选修《CS & AI数学基础I》

数学系二年级的学生都没有选修《CS & AI数学基础I》

人工智能专业学生或爱好文学或爱好体育运动

只有一、二年级的学生才爱好体育运动

除去数学系一年级学生和人工智能专业一年级学生外都不选修《CS & AI数学基础I》

$T \subseteq (M \cup A) \cap F$

$A \cap F \subseteq T$

$(M \cap S) \cap T = \varnothing$

$A \subseteq L \cup P$

$P \subseteq F \cup S$

$F - (M \cup A) \subseteq P$

135

3.2 集合的基本运算

- 集合运算法则

幂等律 $A \cup A = A$

$A \cap A = A$

交换律 $A \cup B = B \cup A$

$A \cap B = B \cap A$

结合律 $(A \cup B) \cup C = A \cup (B \cup C)$

$(A \cap B) \cap C = A \cap (B \cap C)$

分配律 $A \cup (B \cap C) = (A \cup B) \cap (A \cup C)$

$A \cap (B \cup C) = (A \cap B) \cup (A \cap C)$

恒等律 $A \cup \varnothing = A$

$A \cap E = A$

3.2 集合的基本运算

- 集合运算法则

支配律	$A\cup E = E$
	$A\cap\varnothing = \varnothing$
互补律	$A\cup \overline{A} = E$
	$A\cap \overline{A} = \varnothing$
吸收律	$A\cup(A\cap B) = A$
	$A\cap(A\cup B) = A$
双重否定律	$\overline{(\overline{A})} = A$

3.2 集合的基本运算

- 德·摩根(De Morgen)对偶原理

效果：将关于集合的某种性质转移到它的补集上去。

绝对补集情况：

$$\overline{B \cup C} = \overline{B} \cap \overline{C}$$

$$\overline{B \cap C} = \overline{B} \cup \overline{C}$$

证明： $\forall x$，有：

$$x \in \overline{B \cup C} \Leftrightarrow x \notin B \cup C \Leftrightarrow x \notin B,\ x \notin C$$

$$\Leftrightarrow x \in \overline{B},\ x \in \overline{C} \Leftrightarrow x \in \overline{B} \cap \overline{C}$$

因此，$\overline{B \cup C} = \overline{B} \cap \overline{C}$. $\blacksquare$

相对补集情况：

$$A-(B \cup C) = (A-B) \cap (A-C)$$

$$A-(B \cap C) = (A-B) \cup (A-C)$$

证明： $A-(B \cup C) = A \cap \overline{B \cup C} = A \cap (\overline{B} \cap \overline{C}) = A \cap A \cap (\overline{B} \cap \overline{C})$

$$= (A \cap \overline{B}) \cap (A \cap \overline{C}) = (A-B) \cap (A-C) \qquad \blacksquare$$

3.2 集合的基本运算

- 例1.2.6 分别对条件(1)到(5), 确定 X 集合与下述哪些集合相等

$\boldsymbol{S_1 = \{ 1, 2, \ldots, 8, 9 \}}$, $\boldsymbol{S_2 = \{ 2, 4, 6, 8 \}}$, $\boldsymbol{S_3 = \{ 1, 3, 5, 7, 9 \}}$,

$\boldsymbol{S_4 = \{ 3, 4, 5 \}}$, $\boldsymbol{S_5 = \{ 3, 5 \}}$

(1) 若 $X \cap S_3 = \varnothing$, 则 X $= \boldsymbol{S_2}$

(2) 若 $X \subseteq S_4$, $X \cap S_2 = \varnothing$, 则 X $= \boldsymbol{S_5}$

(3) 若 $X \subseteq S_1$, $X \not\subseteq S_3$, 则 $X = \boldsymbol{S_1, S_2, S_4}$

(4) 若 $X - S_3 = \varnothing$, 则 X $= \boldsymbol{S_3, S_5}$

(5) 若 $X \subseteq S_3$, $X \not\subseteq S_1$, 则 X与 $\boldsymbol{S_1, \ldots, S_5}$ 都不等

- 集合等式证明

  谓词逻辑证明法或集合构造器法

□ 例1.2.7 证明$\overline{B \cap C} = \overline{B} \cup \overline{C}$

证：$\overline{B \cap C} = \{x \mid x \notin B \cap C\}$

$= \{x \mid \neg(x \in (B \cap C))\} = \{x \mid \neg(x \in B \wedge x \in C)\}$

$= \{x \mid \neg(x \in B) \vee \neg(x \in C)\}$

$= \{x \mid x \notin B \vee x \notin C\} = \{x \mid x \in \overline{B} \vee x \in \overline{C}\}$

$= \{x \mid x \in \overline{B} \cup \overline{C}\} = \overline{B} \cup \overline{C}$

□ 例1.2.8 证明$(A \oplus B) \oplus C = A \oplus (B \oplus C)$

成员表法

3.2 集合的基本运算

- 对称差运算的性质

$A \oplus A = \varnothing \qquad A \oplus \varnothing = A$

$A \oplus E = \overline{A} \qquad A \oplus B = B \oplus A$

$A \oplus B = (A \cup B) \cap (\overline{A} \cup \overline{B})$

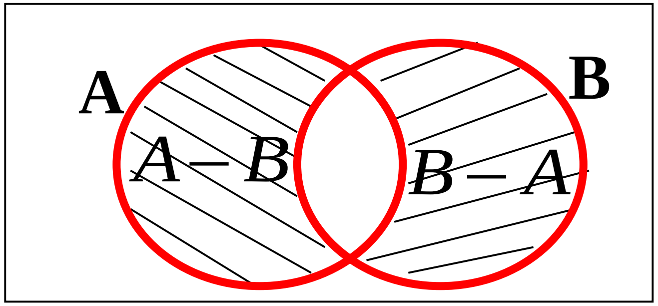
$A \oplus B = (A \cap \overline{B}) \cup (B \cap \overline{A})$

$A \cup B = (A \oplus B) \cup (A \cap B)$

$(A \oplus B) \oplus C = A \oplus (B \oplus C)$

$A \cap (B \oplus C) = (A \cap B) \oplus (A \cap C)$

iff $A \oplus B = A \oplus C$, then $B = C$



$A \oplus B$

$A \oplus B = (A - B) \cup (B - A)$

$A \oplus B = (A \cup B) - (A \cap B)$

- 例1.2.7 证明$(A \cap C = B \cap C) \land (A \cup C = B \cup C) \Rightarrow A = B$

证：由$A \cap C = B \cap C$和$A \cup C = B \cup C$ 得到

$$(A \cup C) - (A \cap C) = (B \cup C) - (B \cap C)$$

从而有 $A \oplus C = B \oplus C \Rightarrow A = B$

- 作业

P75　3.18

3.18 设 $|A|=3$，$|P(B)|=64$，$|P(A\cup B)|=256$. 求 $|B|$、$|A\cap B|$、$|A-B|$、$|A\oplus B|$.

- 包含排斥原理

定理 设 S 为有限集，$P_1, P_2, \ldots, P_m$ 是 m 种性质，A_i 是 S 中具有性质 P_i 的元素构成的子集，$i=1, 2, \ldots, m$. 则 S 中不具有性质 $P_1, P_2, \ldots, P_m$ 的元素数为

$$|\overline{A_1} \cap \overline{A_2} \cap \ldots \cap \overline{A_m}|$$

$$=|S|-\sum_{i=1}^{m}|A_i|+\sum_{1\le i<j\le m}|A_i \cap A_j|-\sum_{1\le i<j<k\le m}|A_i \cap A_j \cap A_k|+\ldots$$

$$+(-1)^m|A_1 \cap A_2 \cap \ldots \cap A_m|$$

证明要点：任何元素 x，如果不具有任何性质，则对等式右边计数贡献为1，否则为0.

证： 如果x不满足性质$P_1, P_2, \ldots, P_m$，对左右贡献各为1；

如果x满足$P_1, P_2, \ldots, P_m$中的n个性质，$1 \le n \le m$, 则x对右侧的贡献为：

$$1 - C_n^1 + C_n^2 - \ldots + (-1)^n C_n^n = \sum_{i=0}^{n} C_n^i (-1)^i = (1-1)^n = 0$$

推论 S 中至少具有一条性质的元素数为

$$|A_1 \cup A_2 \cup \ldots \cup A_m|$$

$$= \sum_{i=1}^{m} |A_i| - \sum_{1 \le i < j \le m} |A_i \cap A_j| + \sum_{1 \le i < j < k \le m} |A_i \cap A_j \cap A_k| + \ldots$$

$$+ (-1)^{m-1} |A_1 \cap A_2 \cap \ldots \cap A_m|$$

证： $|A_1 \cup A_2 \cup \ldots \cup A_m| = |S| - |\overline{A_1 \cup A_2 \cup \ldots \cup A_m}|$

$$= |S| - |\overline{A_1} \cap \overline{A_2} \cap \ldots \cap \overline{A_m}|$$

- 例3.3.1 求1到1000之间（包含1和1000在内）既不能被 5 和6 整除，也不能被 8 整除的数有多少个？

解：$S=\{x \mid x\in\mathbb{Z}, 1\le x\le 1000\}$,

如下定义 S 的 3 个子集 A, B, C：

$A=\{x \mid x\in S, 5\mid x\}$，$B=\{x \mid x\in S, 6\mid x\}$，$C=\{x \mid x\in S, 8\mid x\}$

对上述子集计数：

$|S|=1000$, $|A|=\lfloor 1000/5\rfloor=200$,

$|B|=\lfloor 1000/6\rfloor=166$, $|C|=\lfloor 1000/8\rfloor=125$,

$|A\cap B|=\lfloor 1000/30\rfloor=33$, $|A\cap C|=\lfloor 1000/40\rfloor=25$,

$|B\cap C|=\lfloor 1000/24\rfloor=41$, $|A\cap B\cap C|=\lfloor 1000/120\rfloor=8$,

代入公式

$N=1000-(200+166+125)+(33+25+41)-8=600$ 对比文氏图法

3.3 集合中元素的计数

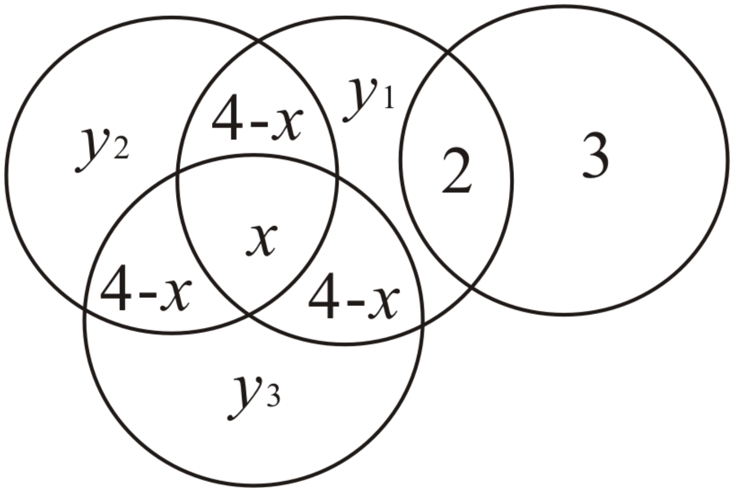
- 例3.3.2 有24名科技人员，每人至少会1门外语：

  英语：13；　日语：5；　德语：10；　法语：9

  英日：2;　　英德：4；　英法：4；　　法德：4

  会日语的不会法语、德语

  求：只会 1 种语言人数，会 3 种语言人数



x+2(4-x)+y_1+2=13

x+2(4-x)+y_2=10

x+2(4-x)+y_3=9

x+3(4-x)+y_1+y_2+y_3=19

x=1, y_1=4, y_2=3, y_3=2

- 例3.3.3 求欧拉函数的值

欧拉函数： $\varphi(n)$

表示$\{0,1,\ldots,n-1\}$中与n互素的数的个数.

$\varphi(12)=4$，与12互素的数有1, 5, 7, 11.

解： n 的素因子分解式

$$n = p_1^{\alpha_1} p_2^{\alpha_2} \ldots p_k^{\alpha_k}$$

$A_i=\{ x \mid 0\le x<n-1$且 p_i 整除 $x \}$

$$\varphi(n) = |\overline{A_1} \cap \overline{A_2} \cap \ldots \cap \overline{A_k}|$$

$$|A_i| = \frac{n}{p_i}, \quad i = 1, 2, \ldots, k$$

$$|A_i \cap A_j| = \frac{n}{p_i p_j}, \quad 1 \le i < j \le n$$

$\ldots$

$$|A_1 \cap A_2 \cap \ldots \cap A_k| = \frac{n}{p_1 p_2 \cdots p_k}$$

3.3 集合中元素的计数

$$\varphi(n)=|\overline{A_1}\cap\overline{A_2}\cap\ldots\cap\overline{A_k}|$$

$$=n-\left(\frac{n}{p_1}+\frac{n}{p_2}+\ldots+\frac{n}{p_k}\right)+\left(\frac{n}{p_1p_2}+\frac{n}{p_1p_3}+\ldots+\frac{n}{p_{k-1}p_k}\right)$$

$$-\ldots+(-1)^k\frac{n}{p_1p_2\cdots p_k}$$

$$=n\left(1-\frac{1}{p_1}\right)\left(1-\frac{1}{p_2}\right)\ldots\left(1-\frac{1}{p_k}\right)$$

与 60 互素的正整 数有 16 个：1，7，11，13，17，19，23，29，31，37，41，43，47，49，53，59.

$$\varphi(60)=60\left(1-\frac{1}{2}\right)\left(1-\frac{1}{3}\right)\left(1-\frac{1}{5}\right)=60\times\frac{1}{2}\times\frac{2}{3}\times\frac{4}{5}=16$$

3.2 集合的基本运算

- 作业

  P75 3.19

3.19 求在 1 到 1 000 000 之间(包括 1 和 1 000 000 在内)有多少个整数既不是完全平方数,也不是完全立方数?

第二部分 集合论与组合分析初步

第3章 集合的基本概念与运算

第4章 组合分析初步

第5章 可数集、不可数集、Cantor集

第二部分 集合论与组合分析初步

第3章 集合的基本概念与运算

第4章 组合分析初步

第5章 可数集、不可数集、Cantor集

- 加法法则

加法法则 如果事件A有p种产生的方式，事件B有q种产生的方式，则事件“A或B”有$p+q$种产生的方式。

例：某学生从2门数学课程和4门计算机课程中任意选择一门课程的方法是2+4=6种

注：事件A与事件B产生的方式不能重叠。

例：有5个学生选学英语或德语，其中有4人学英语，3人学德语。选出一名学英语或德语学生的方法数不是4+3=7，而是5，这是因为选英语和德语的学生可能是同一名学生。

推广：事件A_1有p_1种生产方式，事件A_2有p_2种生产方式,$\cdots$,事件A_n有p_n种生产方式，且其中任何两个事件产生的方式都不重叠，那么事件“A_1或A_2或$\cdots$ A_n”产生的方式为$p_1+p_2+\cdots+p_n$种。

- 乘法法则

乘法法则 如果事件A有p种产生的方式，事件B有q种产生的方式，则事件“A 与 B”有pq种产生的方式。

例：某学生从2门数学课程和4门计算机课程中选出1门数学课和1门计算机课的方法有2×4=8种。

注：事件A与事件B要相互独立。

例：从集合{1,2,3}中选取数字构成不同数字的两位数。这些两位数的十位和个位数字都可以从1、2、3中选取。但当十位数字选定以后，由于数字不能重复，个位数字的选法就不是3种而是2种了。这说明十位与个位数字的3种选法不相互独立。所以，不同的两位数的个数不是3×3=9，而是3×2=6。

与加法法则类似，乘法法则也可以推广到n个事件。

- 例4.1.1

由数字1、2、3、4、5构成3位数

(1) 如果3位数字的各位数字都不相同，有多少种方法？

(2) 如果这些3位数字必须是偶数，有多少种方法？

(3) 这些3位数中可以被5整除的有多少个？

(4) 这些3位数中比300大的有多少个？

解：

(1) $5\times4\times3=60$

(2) 个位为2，4，十位、百位各5种：$2\times5\times5=50$

(3) 个位为5，十位和百位同(2)：$1\times5\times5=25$

(4) 百位取3，4或5，十位和个位各5种：$3\times5\times5=75$

例4.1.2

设甲、乙、丙是3个城市，从甲城到乙城往返可以乘飞机、火车，也可以乘船。从乙城到丙城往返可以乘飞机和火车。从甲城不经过乙城到丙城往返可以乘飞机和火车。问

(1) 从甲城到丙城可以有多少种不同的方法？

(2) 从甲城到丙城，最后又回到甲城有多少种方法？整个过程有经过乙城的有多少种？

解：

(1) 从甲城经过乙城到丙城有3×2种方法。从甲城直接到丙城有2种方法。由加法法则，共有，

$$3\times 2+2=8$$

种方法。

(2) 走法有以下四种：

甲→乙→丙→乙→甲：$3\times2\times2\times3=36$

甲→乙→丙→甲：$3\times2\times2=12$

甲→丙→乙→甲：$2\times2\times3=12$

甲→丙→甲：$2\times2=4$

由加法法则，总方法数是

$$36+12+12+4=64$$

其中经过乙城的有$64-4=60$

4.2 基本排列组合的计数方法

- 排列

排列问题：从某个集合中有序地选取若干个元素的问题。

例：(1) 从{1,2, ⋯,9}中选取数字构成4位数。如果要求每个数字都不相同，问有多少种方法？

(2) 从{1,2, ⋯,9}中选取数字构成4位数，问有多少种方法？

- 组合

组合问题：从某个集合中无序地选取若干个元素的问题。

例：(1) 从5种不同的球中每次取3个不同的球，问有多少种方法？

(2)从5种不同的球中（每种球至少有3个），每次取3个球，问有多少种方法？

4.2 基本排列组合的计数方法

- 选取划分

由这两个例题可以看出，这类问题可以根据是否有序、是否允许重复，而划分成4种：

不允许重复的有序选取——集合的排列

允许重复的有序选取——多重集的排列

不允许重复的无序选取——集合的组合

允许重复的无序选取——多重集的组合

4.2 基本排列组合的计数方法

- 排列

定义4.1 从n个元素的集合S中有序选取的r个元素叫做S的一个r排列，不同的排列总数记作P_n^r（或$P(n,r)$）。如果$r=n$，则称这个排列为S的全排列，简称S的排列。

当$r>n$时，P_n^r =0。

定理4.1 对满足$r \le n$的正整数n和r有

$$P_n^r = n(n-1)\cdots(n-r+1)。$$

- 排列

证明：从n个元素中选取第1个元素的方法有n种。当第1个元素选好后，只能从剩下的$n-1$个元素中选取第2个元素，有$n-1$种方法，⋯，最后一个元素只能从剩下的$n-(r-1)$个元素中选取。由乘法法则，不同的选法数是$n(n-1)\cdots(n-r+1)$。如果$r=n$，则称这个排列为S的全排列，简称S的排列。

如果领$n!=n(n-1)\cdots 2\times 1$，且0！=1，则有

$$P_n^r=\frac{n!}{(n-r)!}$$

当$n\geq 0$时，定义P_n^0=1，这恰好与上式计算的结果相符。当$r=n$时，有$P_n^n=n!$。

- 例4.2.1

在5天内安排3门课程的考试，

(1) 若每天只允许考1门，有多少种方法？

(2) 若不限制每天考试的门数，有多少种方法？

解：

(1) 从5天中有序选取3天，不允许重复，其选法数为

$$N = P_5^3 = 5 \times 4 \times 3 = 60$$

(2) 每门考试都有5种独立的选法。由乘法法则总选法数为

$$N = 5 \times 5 \times 5 = 125$$

- 排列

定理4.2 一个n元素S的环形r排列数是

$$\frac{P_n^r}{r} = \frac{n!}{r(n-r)!}。$$

如果$r = n$，则S的环排列数是$(n-1)!$。

证明：把S的所有线形r排列分成组，使得同组的每个线形排列可以连接成同一个环排列。一维每组中恰含有r个线形排列，所以，S的环形r排列数$N = {P_n^r}/{r}$。当$r = n$时，S的环排列数为${P_n^r}/{n} = (n-1)!$。

□ 例4.2.2

(1) 10个男孩与5个女孩站成一排，如果没有两个女孩相邻，问有多少种方法？

(2) 10个男孩与5个女孩站成一个圆圈，如果没有两个女孩相邻，问有多少种方法？

解：每两个男孩之间看成一个空格

(1) 男孩组成格子的方法数P_{10}^{10}，每种组法有11个空格站女孩，有P_{11}^{5}种，根据乘法法则所求排列数是：$N = P_{10}^{10}P_{11}^{5} = \frac{10!\times 11!}{6!}$

(2) 男孩组成格子的方法数是$P_{10}^{10}/10$。女孩放入10个格子的方法数是P_{10}^{5}。由乘法法则总排列数是：

$$N = P_{10}^{10}/10 \times P_{10}^{5} = \frac{10! \times 9!}{5!}$$

- 组合

定义4.2 从n元集S中无序选取的r个元素叫做S的一个r组合，不同组合总数记作C_n^r($C(n,r)$或$\binom{n}{r}$)。当$n \geq 0$时，规定$C_n^0 = 1$。当$r > n$时，$C_n^r = 0$。

定理4.3 对一切$r \leq n$，有$P_n^r = r!\, C_n^r$，即$C_n^r = \frac{n!}{r!(n-r)!}$

证明：先从n元集中选出r个元素，有C_n^r种选法。对每一种选法，把选出的r个元素排列起来，有$r!$种排法。每一种排法就对应于n元集的一个r排列。由乘法法则，n个元素的r排列数是：

$$P_n^r = r!\, C_n^r,$$

即

$$C_n^r = \frac{P_n^r}{r!} = \frac{n!}{r!(n-r)!}$$

- 组合

推论 对一切$r \leq n$，有$C_n^r = C_n^{n-r}$。

证明：$C_n^r = \dfrac{n!}{r!(n-r)!} = \dfrac{n!}{\big(n-(n-r)\big)!(n-r)!} = C_n^{n-r}$

例4.2.3

在平面上给定25个点，其中任意3点都不共线。过2点可以作一条直线，以3个点为顶点可以作一个三角形。问这样的直线和三角形有多少个？

解：直线数 $N_1 = C_{25}^2 = \dfrac{25!}{2!\times 23!} = 300$

三角形数 $N_2 = C_{25}^3 = \dfrac{25!}{3!\times 22!} = 2300$

例4.2.4

从1,2,⋯,300之中任取3个数，使得它们的和能被3整除，问有多少种方法?

解：把1,2,⋯,300分成A、B、C 3个组。

$$A = \{x \mid x \equiv 1(mod\ 3)\},$$

$$B = \{x \mid x \equiv 2(mod\ 3)\},$$

$$C = \{x \mid x \equiv 0(mod\ 3)\}.$$

设任取3个数为i、j、k，那么选取是无序的且满足 $i + j + k \equiv 0(mod\ 3)$。将选法分成两类：

i、j、k都取自同一组，方法数$N_1 = 3C_{100}^3$

i、j、k分别取自A、B、C，方法数$N_2 = (C_{100}^1)^3$。由加法法则，总取法数 $N = 3C_{100}^3 + (C_{100}^1)^3 = 1485100$

- 组合

定理4.4 设S为n元集，则S的子集总数是

$$2^n = C_n^0 + C_n^1 + \cdots + C_n^n$$

证明：对于$r = 0,1,\cdots,n$，S的每个r子集就是S的一个r组合，而C_n^r就是S的r子集数。由加法法则，S的子集数是

$$C_n^0 + C_n^1 + \cdots + C_n^n$$

另一方面，在构成S的某个子集时对每个元素有两种选择。

- 多重集

多重集是元素可以多次出现的集合。通常把某个元素a_i出现的次数$n_i(n_i = 0,1,\cdots,\infty)$叫做该元素的重复度。如果多重集$S$中含有$k$种不同的元素$a_1,a_2,\cdots,a_k$，那么可以把$S$记为

$$\{n_1 \cdot a_1, n_2 \cdot a_2, \cdots, n_k \cdot a_k\}。$$

- 多重集的排列

定义4.3 设多重集$S=\{n_1\cdot a_1,n_2\cdot a_2,\cdots,n_k\cdot a_k\}$，从$S$中有序选取的$r$个元素叫做$S$的一个$r$排列，当$r=n$时，$n=n_1+n_2+\cdots+n_k$，也叫做$S$的一个排列。

例：$S=\{2\cdot a,1\cdot b,3\cdot c\}$，那么$acab$、$abcc$都是$S$的4排列，而$abccca$和$aaccbc$都是$S$的排列。

定理4.5 设多重集$S=\{\infty\cdot a_1,\infty\cdot a_2,\cdots,\infty\cdot a_k\}$，则$S$的$r$排列数是$k^r$。

证明：在构造S的一个r排列时，第1位有k种选法，第2位也有k种选法，$\cdots$，第r位仍然有k种选法。这是因为S中的每种元素都可以无限重复，排列中每一位的选择都不依赖于以前各位的选择。由乘法法则，不同的选法数是k^r。

4.2 基本排列组合的计数方法

- 多重集的排列

推论：设多重集$S=\{n_1\cdot a_1,n_2\cdot a_2,\cdots,n_k\cdot a_k\}$，并且对一切$i=1,2,\cdots,k$ 有$n_i\geq r$，则S的r排列数是k^r。

例4.2.5

有10种画册，每种数量不限。现在要取3本送给3位朋友，问有多少种方法？

解：将10种画册分别记为$a_1,a_2,\cdots,a_{10}$。所求的方法数是多重集$\{\infty\cdot a_1,\infty\cdot a_2,\cdots,\infty\cdot a_{10}\}$的3排列数。得 $N=10^3=1000$。

定理4.6 设多重集$S=\{n_1\cdot a_1,n_2\cdot a_2,\cdots,n_k\cdot a_k\}$，且$n=n_1+n_2+\cdots+n_k$，则$S$的排列数等于$\frac{n!}{n_1!n_2!\cdots n_k!}$。简记为$\binom{n}{n_1n_2\cdots n_k}$

IAIR

- 多重集的排列

证明：S的一个排列就是n个元素的全排列，因为S中有n_1个a_1，在排列中要占据n_1个位置，这些位置的选法是$C_n^{n_1}$种。接下去，在剩下的$n-n_1$个位置中选择n_2个放a_2，选法数是$C_{n-n_1}^{n_2}$。类似地，有$C_{n-n_1-n_2}^{n_3}$种方法放a_3，⋯，有$C_{n-n_1-\cdots-n_{k-1}}^{n_k}$种方法放$a_k$。由乘法法则，$S$的排列数

$$N=C_n^{n_1}C_{n-n_1}^{n_2}\cdots C_{n-n_1-\cdots-n_{k-1}}^{n_k}$$

$$=\frac{n!}{n_1!(n-n_1)!}\frac{(n-n_1)!}{n_2!(n-n_1-n_2)!}\cdots\frac{(n-n_1-\cdots-n_{k-1})!}{n_k!\times 0!}$$

$$=\frac{n!}{n_1!n_2!\cdots n_k!}$$

例4.2.6

用2面红旗、3面黄旗依次悬挂在一根旗杆上，问可以组成多少种不同的标志？

解：所求的计数相当于多重集$\{2 \cdot 红旗, 3 \cdot 黄旗\}$的排列数$N$，

$$N = \frac{5!}{2! \times 3!} = 10$$

- 多重集的排列

关于多重集的排列问题小结如下：

设$S=\{n_1\cdot a_1,n_2\cdot a_2,\cdots,n_k\cdot a_k\}$，$n=n_1+n_2+\cdots+n_k$，则$S$的$r$排列数$N$满足：

(1)若$r>n$，则$N=0$

(2)若$r=n$，则$N=\frac{n!}{n_1!n_2!\cdots n_k!}$

(3)若$r<n$且对一切$i=1,2,\cdots,k$ 有$n_i\geq r$，则$N=k^r$

(4)若$r<n$且存在着某个$n_i<r$，则对N没有一般的求解公式，可以使用其他的组合数学方法解决。

- 多重集的组合

定义4.4 设多重集$S=\{n_1\cdot a_1,n_2\cdot a_2,\cdots,n_k\cdot a_k\}$，$S$的含有$r$个元素的子多重集叫做$S$的$r$组合。

例：$S=\{2\cdot a,1\cdot b,3\cdot c\}$，那么$\{a,a\}$、$\{c,c\}$、$\{a,b\}$、$\{a,c\}$、$\{b,c\}$都是$S$的2组合。

定理4.7 设多重集$S=\{\infty\cdot a_1,\infty\cdot a_2,\cdots,\infty\cdot a_k\}$，则$S$的$r$组合数是$C_{k+r-1}^{r}$。

证明：S的任何一个r组合$\{x_1\cdot a_1,x_2\cdot a_2,\cdots,x_k\cdot a_k\}$，其中$x_1,x_2,\cdots,x_k$是非负整数且满足方程$x_1+x_2+\cdots+x_k=r$。反之，对于每一组满足上述方程的非负整数解$x_1,x_2,\cdots,x_k$，$\{x_1\cdot a_1,x_2\cdot a_2,\cdots,x_k\cdot a_k\}$就是$S$的一个$r$组合。所以，多重集$S$的$r$组合数就等于上述方程的非负整数解的个数。

4.2 基本排列组合的计数方法

下面证明这种解的个数就等于多重集$T=\{(k-1)\cdot 0, r\cdot 1\}$的排列数。

给定T的一个排列，在这个排列中$(k-1)$个0把r个1分成k组。从左数第1组1的个数记作x_1，第2组1的个数记作x_2，…，第k组1的个数记作x_k，则所得到的$x_1,x_2,\cdots,x_k$都是非负整数，且其和等于r。反之，给定方程$x_1+x_2+\cdots+x_k=r$的一组非负整数解$x_1,x_2,\cdots,x_k$，可以如下构造排列：

$$\underbrace{1\cdots1}_{x_1\text{个}1}\quad 0\quad \underbrace{1\cdots1}_{x_2\text{个}1}\quad 0\quad\cdots\quad 0\quad \underbrace{1\cdots1}_{x_k\text{个}1}$$

第1个0　第2个0　第$k-1$个0

它就是多重集T的一个排列。根据定理4.6，T的排列数

$$N=\frac{(k-1+r)!}{(k-1)!\,r!}=C_{k+r-1}^{r}$$

定理4.6 设多重集$S=\{n_1\cdot a_1,n_2\cdot a_2,\cdots,n_k\cdot a_k\}$，且$n=n_1+n_2+\cdots+n_k$，则$S$的排列数等于$\frac{n!}{n_1!n_2!\cdots n_k!}$。简记为$\binom{n}{n_1n_2\cdots n_k}$

4.2 基本排列组合的计数方法

- 多重集的组合

推论1：设多重集$S=\{n_1\cdot a_1,n_2\cdot a_2,\cdots,n_k\cdot a_k\}$，且对一切$i=1,2,\cdots,k$ 有$n_i\geq r$，则S的r组合数是C_{k+r-1}^{r}。

推论2：设多重集$S=\{\infty\cdot a_1,\infty\cdot a_2,\cdots,\infty\cdot a_k\}$，$r\geq k$，则$S$中每个元素至少取一个的$r$组合数是$C_{r-1}^{k-1}$。

证明：任取一个所求的r组合. 从中拿走元素$a_1,a_2,\cdots,a_k$，就得到S的一个$(r-k)$组合。反之，任取一个S的$(r-k)$组合，加入元素$a_1,a_2,\cdots,a_k$，就得到所求的组合。所以，S中每个元素至少取一个的r组合数就是S的$(r-k)$组合数。由定理8.7有

$$N=C_{k+(r-k)-1}^{r-k}=C_{r-1}^{r-k}=C_{r-1}^{k-1}$$

例4.2.7

r个相同的球放到n个不同的盒子里，每个盒子球数不限，求放球方法数？

解：设盒子的球数依次记为 $x_1, x_2, \ldots, x_n$, 则满足下述方程：

$x_1 + x_2 + \ldots + x_n = r$， $x_1, x_2, \ldots, x_n$为非负整数

该方程的解的个数为：

$$N = \frac{(n-1+r)!}{(n-1)!r!} = C_{n+r-1}^{r}$$

例4.2.8

一个学生要在相继的5天内安排15个小时的学习时间，问有多少种方法？如果要求每天至少学习1小时，又有多少种方法？

解：将这相继的5天记为a_1、a_2、a_3、a_4、a_5，则第一种安排相当于多重集$S=\{\infty\cdot a_1,\infty\cdot a_2,\cdots,\infty\cdot a_k\}$的15组合问题。由定理4.7得

$$N_1=C_{15+5-1}^{15}=C_{19}^{15}=C_{19}^{4}$$

而第二种安排相当于S的每种元素至少取1个的15组合问题，由定理4.7的推论2得

$$N_2=C_{15-1}^{5-1}=C_{14}^{4}。$$

- 多重集的组合

关于多重集的组合问题小结如下：

设$S=\{n_1\cdot a_1, n_2\cdot a_2, \cdots, n_k\cdot a_k\}$，$n=n_1+n_2+\cdots+n_k$，则$S$的$r$组合数$N$满足：

(1)若$r>n$，则$N=0$

(2)若$r=n$，则$N=1$

(3)若$r<n$且对一切$i=1,2,\cdots,k$ 有$n_i\geq r$，则$N=C_{k+r-1}^{r}$

(4)若$r<n$且存在着某个$n_i<r$，则对N没有一般的求解公式，可以用包含排斥原理或其他的组合数学方法求解。

4.2 基本排列组合的计数方法

- 作业

1. 从连续n个整数中选择r个互不相邻的数（$n \geq 2r-1$），有多少种选取方法？

2. 在1到1000之间（包括1和1000在内）有多少个整数，其各位数字之和小于8？

4.3 递推方程的求解与应用

- 递归

一个直接调用自己或通过一系列的调用语句间接的调用自己的函数称作递归。

例：阶乘函数

$f(n) = 1 \qquad n = 0$

$f(n) = n \cdot f(n\text{-}1) \qquad n > 0$

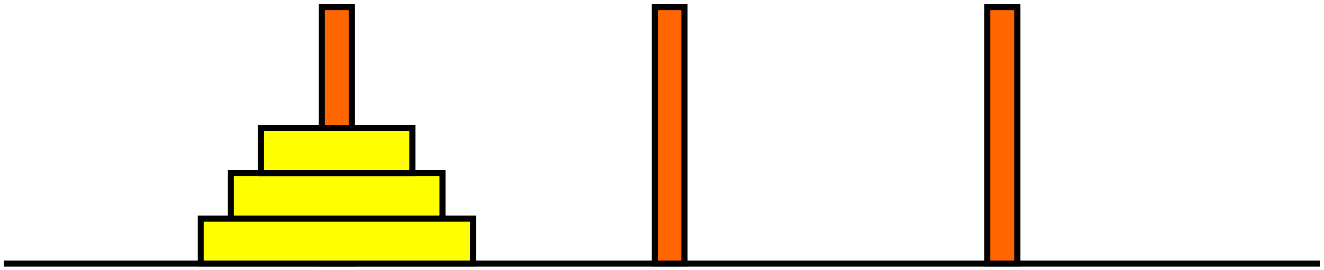
Fibonacci数列

$f_n=f_{n-1}+f_{n-2}$, 初值 $f_0=1$, $f_1=1$

□例4.3.1

Hanoi塔

在A柱放着n个大小不同的圆盘，其中小圆盘放在大圆盘上边。从A柱将这些圆盘移到C柱上去. 如果把一个圆盘从一个柱子移到另一个柱子称作 1 次移动，在移动和放置时允许使用B柱，但不允许大圆盘放到小圆盘的上面. 问把所有的圆盘的从A移到C总计需要多少次移动?



4.3 递推方程的求解与应用

- 递归算法

算法可以分成3个步骤：

(1) 用同样的算法把上面的$n-1$个盘子从A柱移到B柱

(2) 用1次移动把下面最大的盘子直接移到C柱

(3) 用同样的算法把B柱上的$n-1$个盘子移到C柱

设算法移动n个盘子的总次数为$T(n)$。步(1)和步(3)是递归调用，将$n-1$个盘子从一个柱子移动另一个柱子，移动次数为2倍的$T(n-1)$；步(2)利用1次移动将最下面的大盘子从A移到C柱；因此得到方程

$$T(n) = 2T(n-1) + 1$$

这个方程的初值是$T(1)=1$。

1秒钟移动1次，64个盘子大约需要5000亿年

4.3 递推方程的求解与应用

- 迭代过程

$$
\begin{aligned}
T(n) &= 2T(n-1)+1 \\
&= 2[2T(n-2)+1]+1 \quad (T(n-1)\text{被含}T(n-2)\text{的项替换}) \\
&= 2^2T(n-2)+2+1 \\
&= 2^2[2T(n-3)+1]+2+1 \quad (T(n-2)\text{被含}T(n-3)\text{的项替换}) \\
&= 2^3T(n-3)+2^2+2+1 \\
&= \ldots \\
&= 2^{n-1}T(1)+2^{n-2}+2^{n-3}+\ldots+2+1 \\
&= 2^{n-1}+2^{n-2}+2^{n-3}+\ldots+2+1 \quad (\text{代入初值}) \\
&= 2^n-1 \qquad\qquad (\text{等比级数求和})
\end{aligned}
$$

- 验证

- 递推方程

定义4.4 设序列$a_0, a_1, \cdots, a_n, \cdots$，简记为$\{a_n\}$，一个把$a_n$与某些个$a_i (i < n)$联系起来的等式称作关于序列$\{a_n\}$的递推方程。

- 例4.3.2

二分归并排序算法：

算法Mergesort(*A*,*s*,*t*)　//*排序数组*A*[*s*..*t*]

1. $m \leftarrow (t+s)/2$
2. $A \leftarrow$ Mergesort(A,s,m)　//*排序前半数组
3. $B \leftarrow$ Mergesort($A,m+1,t$) //*排序后半数组
4. Merge(A,B)　//*将排好序的A,B归并

例：

输入：[5,1,7,8,2,4,6,3]

划分：[5,1,7,8],[2, 4,6,3]

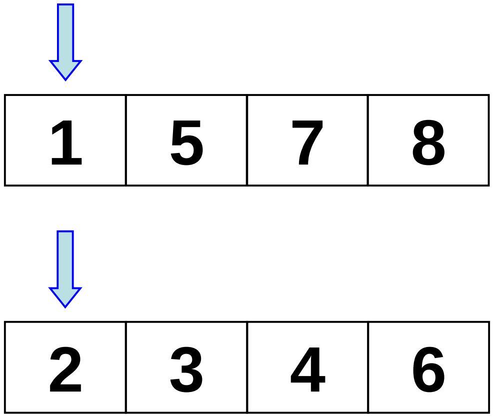
递归排序前半个数组：[5,1,7,8]⇒[1,5,7,8]

递归排序后半个数组：[2,4,6,3]⇒[2,3,4,6]

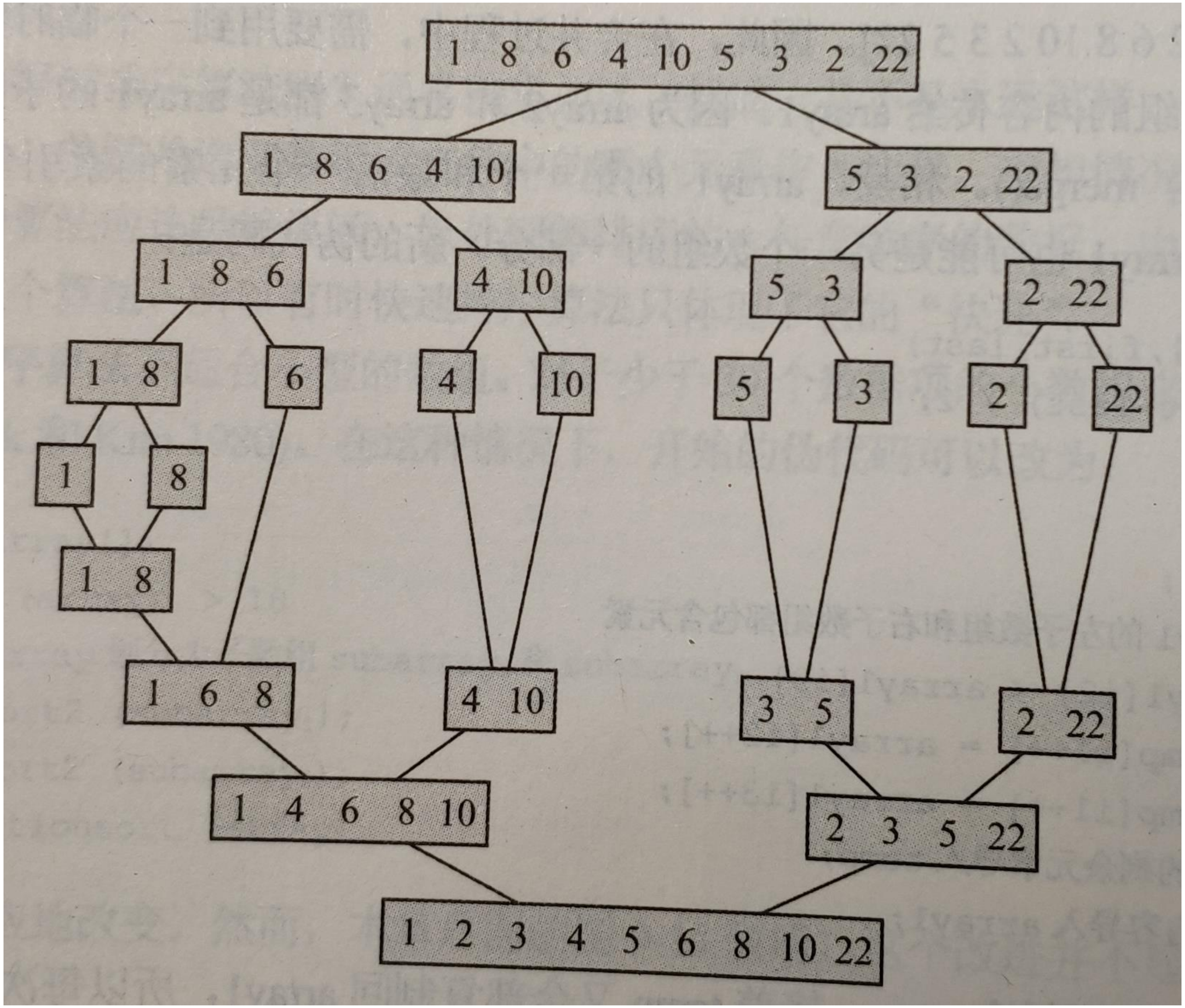
归并：[1,5,7,8]和[2,3,4,6]

输出：[1,2,3,4,5,6,7,8]

归并过程



4.3 递推方程的求解与应用



假设$n=2^k$，比较次数至多为$W(n)$：$W(n)=2W(n/2)+n-1$

归并两个$n/2$大小数组的比较次数至多为$n-1$

- 求解递推方程

$$\begin{aligned}
W(n) &= 2W(2^{k-1}) + 2^k - 1 \\
&= 2[2W(2^{k-2}) + 2^{k-1} - 1] + 2^k - 1 \\
&= 2^2 W(2^{k-2}) + 2^k - 2 + 2^k - 1 \\
&= 2^2[2W(2^{k-3}) + 2^{k-2} - 1] + 2^k - 2 + 2^k - 1 \\
&= 2^3 W(2^{k-3}) + 2^k - 2^2 + 2^k - 2 + 2^k - 1 \\
&= \ldots = 2^k W(1) + k2^k - (2^{k-1} + 2^{k-2} + \ldots + 2 + 1) \\
&= k2^k - 2^k + 1 \\
&= n\log n - n + 1
\end{aligned}$$

- 归纳法验证

n=1代入上述公式得

$$W(1)=1\log 1-1+1=0,$$

符合初始条件.

假设对于任何小于n的正整数t，$W(t)$都是正确的，将结果代入原递推方程的右边得

$$\begin{aligned}&2W(n/2)+n-1\\&=2(2^{k-1}\log 2^{k-1}-2^{k-1}+1)+2^k-1\\&=2^k(k-1)-2^k+2+2^k-1=k2^k-2^k+1\\&=n\log n-n+1=W(n)\end{aligned}$$

例4.3.3

快速排序算法：

算法 Quicksort(A,p,r) //*排序数组$A[p..r]$

输入：数组$A[p..r]$

输出：排好序的数组A

1. if $p < r$
2. then $q \leftarrow$Partition(A, p, r) //*以$A[p]$为准划分A
3. $A[p] \leftrightarrow A[q]$ //*$A[p]$与$A[q]$交换
4. Quicksort(A,p,q-1) //*对子数组递归排序
5. Quicksort(A,q+1,r)

4.3 递推方程的求解与应用

- 划分过程

Partition(A,p,r)
1. $x \leftarrow A[p]$
2. $i \leftarrow p$
3. $j \leftarrow r+1$
4. while true do
5. repeat $j \leftarrow j-1$
6. until $A[\,j\,]<x$ //*右边第1个比$A[p]$小的$A[j]$
7. repeat $i \leftarrow i+1$
8. until $A[\,i\,]>x$ //*左边第1个比$A[p]$大的$A[i]$
9. if $i<j$
10. then $A[\,i\,] \leftrightarrow A[\,j\,]$ //*交换$A[j]$与$A[i]$
11. else return j

27	99	0	8	13	64	86	16	7	10	88	25	90

4.3 递推方程的求解与应用

例：

27 99 0 8 13 64 86 16 7 10 88 25 90

27 25 0 8 13 64 86 16 7 10 88 99 90

27 25 0 8 13 10 86 16 7 64 88 99 90

27 25 0 8 13 10 7 16 86 64 88 99 90

16 25 0 8 13 10 7 | 27 | 86 64 88 99 90

- 平均时间复杂度

$T(n)$为对数组的各种输入平均做的比较次数. 将输入按照$A[p]$在排好序后的位置分别为1, 2, …, n进行分类. 假设每类输入出现的概率相等

$A[p]$处位置1，划分后子问题规模分别为0和n-1

…

$A[p]$处位置n，划分后子问题规模分别为n-1和0

n 种输入的平均复杂度为：

$$T(n) = \frac{1}{n}[(T(0)+T(n-1))+(T(1)+T(n-2))+\dots$$

$$+(T(n-1)+T(0))]+O(n) = \frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n-1} T(i)+O(n)$$

- 递推方程求解

$$\begin{cases} T(n)=\dfrac{2}{n}\sum_{i=1}^{n-1}T(i)+O(n), \quad n\ge 2 \\ T(1)=0 \end{cases}$$

从这个方程得出，$T(n)$依赖于$T(n\text{-}1),T(n\text{-}2),\cdots,T(1)$所有的项，这种递推方程称为全部历史递推方程。

差消法化简：

$$nT(n)=2\sum_{i=1}^{n-1}T(i)+cn^2 \quad c\text{为某个常数}$$

$$(n-1)T(n-1)=2\sum_{i=1}^{n-2}T(i)+c(n-1)^2$$

$$nT(n)-(n-1)T(n-1)=2T(n-1)+O(n)$$

$$nT(n)=(n+1)T(n-1)+O(n)$$

变形并迭代得到：

$$\frac{T(n)}{n+1}=\frac{T(n-1)}{n}+\frac{c'}{n+1} \qquad c'\text{为某个常数}$$

$$=\frac{T(n-2)}{n-1}+\frac{c'}{n}+\frac{c'}{n+1}$$

$$=\cdots$$

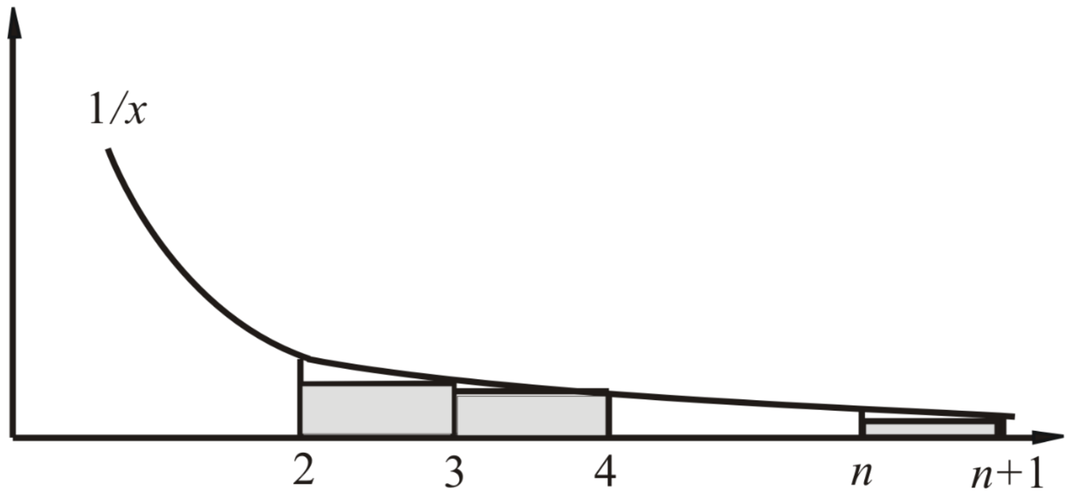
$$=c'[\frac{1}{n+1}+\frac{1}{n}+\ldots+\frac{1}{3}+\frac{T(1)}{2}]$$

$$=c'\left[\frac{1}{n+1}+\frac{1}{n}+\ldots+\frac{1}{3}\right]$$

变形并迭代得到：

$$\frac{1}{n+1}+\frac{1}{n}+\ldots+\frac{1}{3}\le\int_{2}^{n+1}\frac{1}{x}dx=\ln x\Big|_{2}^{n+1}$$

$$=\ln(n+1)-\ln 2=O(\log n)$$

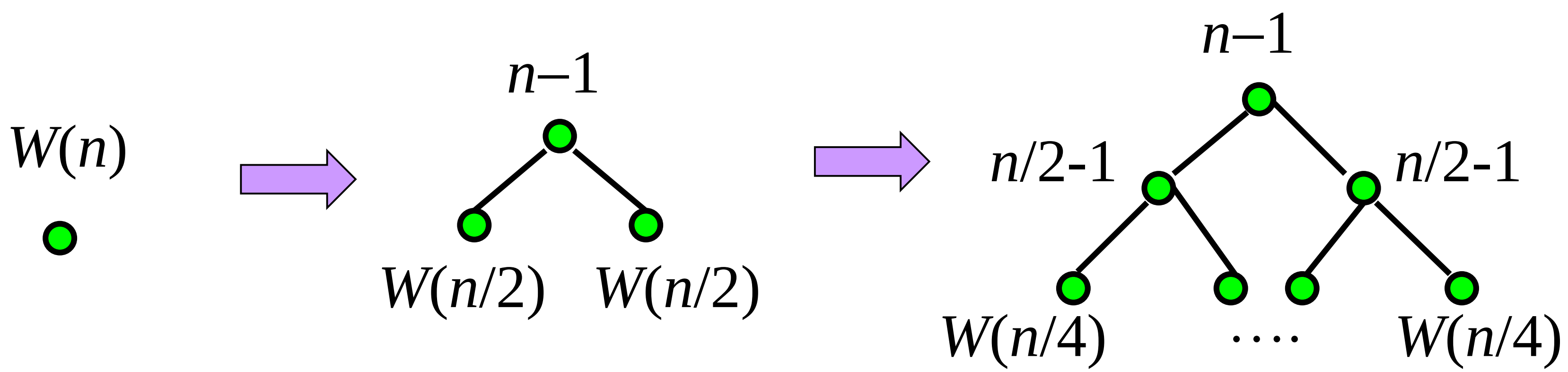


因此得到原递推方程的解：$T(n)=O(n\log n)$

4.3 递推方程的求解与应用

- 递归树

$$\begin{cases} W(n) = 2W(n/2) + n-1, \quad n = 2^k \\ W(1) = 0 \end{cases}$$



n-1 n-1

$n/2$-1 $n/2$-1 n-2

$n/4$-1 $n/4$-1 $n/4$-1 $n/4$-1 n-4

....

1 1 1 1 1 .... 1 1 1 1 1 $n-2^{k-1}$

总和为：

$$(n-1)+(n-2)+\ldots+(n-2^{k-1})$$

$$=nk-(1+2+\ldots+2^{k-1})$$

$$=nk-(2^k-1)=n\log n-n+1$$

- 分治算法的共同特点

设a、b为正整数，n为问题的输入规模，n/b为子问题的输入规模，a为子问题的个数，$d(n)$为将原问题分解成子问题以及将子问题的解综合得到原问题解的代价。

例：对n个正整数进行二分归并排序，那么$b=2$，$a=2$，$d(n)=n-1$。

一般情况下有

$$\begin{cases} T(n) = aT(n/b) + d(n) & n = b^k \\ T(1) = 1 \end{cases}$$

设$T(1)=1$，若$T(1)$为其他常数可类似处理。对这个方程进行迭代

$$T(n)=a^2T(n/b^2)+ad(n/b)+d(n)$$

$$=\ldots$$

$$=a^kT(n/b^k)+a^{k-1}d(n/b^{k-1})+a^{k-2}(n/b^{k-2})+\ldots+ad(n/b)+d(n)$$

$$=a^k+\sum_{i=0}^{k-1}a^id(n/b^i)$$

其中，$a^k=a^{\log_b n}=n^{\log_b a}$

当$d(n)=c$时，c代表某个常数，带入上式得

$$T(n)=\begin{cases} a^k+c\dfrac{a^k-1}{a-1}=O(a^k)=O(n^{\log_b a}) & a\neq 1 \\ a^k+kc=O(\log n) & a=1 \end{cases}$$

4.3 递推方程的求解与应用

当$d(n) = cn$时，c代表某个常数，带入上式得

$$T(n) = a^k + \sum_{i=0}^{k-1} a^i \frac{cn}{b^i} = a^k + cn\sum_{i=0}^{k-1}\left(\frac{a}{b}\right)^i$$

$$= \begin{cases} n^{\log_b a} + cn\dfrac{(a/b)^k - 1}{a/b-1} = O(n) & a < b \\ n + cnk = O(n\log n) & a = b \\ a^k + cn\dfrac{(a/b)^k - 1}{a/b-1} = a^k + c\dfrac{a^k - b^k}{a/b-1} = O(n^{\log_b a}) & a > b \end{cases}$$

- 结果应用

二分归并排序

$$\begin{cases} W(n) = 2W(n/2) + n-1,\ n = 2^k \\ W(1) = 0 \end{cases}$$

其中 a=2，b=2，$d(n)$=$O(n)$ $\Rightarrow W(n)=O(n\log n)$

二分查找算法

$$\begin{cases} W(n) = W(n/2) + 1,\ n = 2^k \\ W(1) = 0 \end{cases}$$

其中a=1，b=2，$d(n)$=$O(1)$ $\Rightarrow T(n)=O(\log n)$

4.3 递推方程的求解与应用

- 作业

  P194　8.26(2)(3)

8.26 求解下列递推方程.

(2) $T(n)=T(n-1)+n^2$, $T(1)=1$.

(3) $T(n)=4T(n/2)+O(n)$.

第二部分 集合论与组合分析初步

第3章 集合的基本概念与运算

第4章 组合分析初步

第5章 可数集、不可数集、Cantor集

5章 可数集、不可数集、Cantor集

第二部分 集合论与组合分析初步

第3章 集合的基本概念与运算

第4章 组合分析初步

第5章 可数集、不可数集、Cantor集

- 有限集与无限集

已经客满，但永远能够接受新客人，
这就是希尔伯特无限旅馆！

有限客人
无限个编好号的客人
无限辆编好号的巴士，每辆载有无限个编好号的客人

- 映射

定义5.1 设A与B是两个非空集合。如果按照一定的法则f，对于A中的每个元素x，都存在B中的一个确定的元素y与x相对应，那么称f是定义在A上取值于B中的一个映射，记作$f: A\to B$，y称为x在映射f下的象，记作$y = f(x)$。对于固定的y, A中适合关系式$y = f(x)$的x的全体称为y的原象，A称为映射f的定义域，$f(A)=\{f(x) \mid x\in A\}$称为映射$f$的值域。

定义5.2 若B是一个数集，此时映射f称为泛函，即定义在集A上的函数；若A与B都是数集，f就是通常的函数。

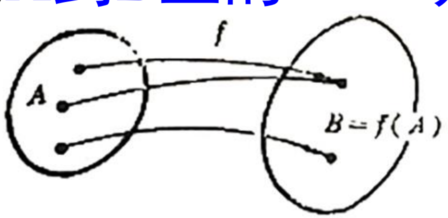
例：设X为任一集合，A是X的一个子集，定义

$$\chi_A(x)=\begin{cases}0, & x\notin A\\ 1, & x\in A\end{cases}$$

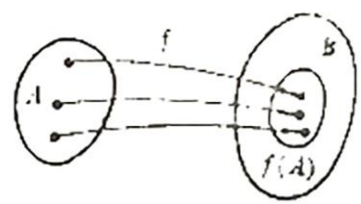
则映射$\chi_A: X\to\{0,1\}$是集合X上的一个函数，称为A的特征函数。

5.1 映射、对等与可数集

定义5.3 设有映射 $f: A \to B$。若$f(A)=B$，即对B中的每个元素y，都有A中的元素x，使 $f(x)=y$，则称 f 是一个满射，或A到B上的映射；若对于$f(A)$ 中的每个元y，都有A中的唯一的元x，使 $f(x)=y$，或者等价地，对于A中的任意不同元x_1与x_2，都有 $f(x_1) \neq f(x_2)$，则称 f 是一个单射；若f 既是满射，又是单射，即对于B中的每个元y，都有A中的唯一元x，使 $f(x)=y$，则称 f 是一个双射或A到B上的一一映射。



a. 满射



b. 单射

c. 双射

- 集合中元素的数量

有限集：集合的基数。

计数方法：

"数一数"，建立该集合与正整数集$\mathbb{Z}^+$的某个有限子集$\{1, 2, \ldots, n\}$之间的一一对应关系。

有时候不需要确切地知道两个集合A与B所含元素个数，只要比较它们所含的元素谁多谁少，该怎样办呢？

建立一一对应关系！

无限集中元素的数量？

- 集合的对等

定义5.4 设A与B是两个非空集合，若存在一个从A到B上的一一映射，则称集合A与B是对等的，或称A与B是一一对应的，记作A~B。

□ 例5.1.1 正整数集$\mathbb{Z}^+$与正偶数集是对等的。

只要做映射 f，使 $f(n) = 2n$, 则此映射 f 是一一映射。

□ 例5.1.2 设A=[0,1], B=[a,b], a<b, 则A~B。

事实上，线性函数 $f(x) = a+(b-a)x$ 就是一个从A到B上的一一映射。

这两个例子揭示了一个无限集可以与它的一个真子集对等。实际上可以证明任何一个无限集必能与它的一个真子集对等，反之亦真。这一性质反映了有限集与无限集的本质区别。

- 无限集所含元素的“个数”

定义5.5 设A与B是两个集合，如果$A\sim B$，那么就称A与B具有相同的**势**。集合A的势记为 $\overline{\overline{A}}$。

对等关系具有下述基本性质：

1）自反性 $A\sim A$

2）对称性 若$A\sim B$，则$B\sim A$

3）传递性 若$A\sim B$，$B\sim C$，则$A\sim C$

因此可以将势相同的集合归于同一类。

定义5.6 设A与B是两个集合，若A对等于B的一个子集，则称A的势小于或等于B的势（或B的势大于或等于A的势），记作$\overline{\overline{A}}\le\overline{\overline{B}}$（或$\overline{\overline{B}}\ge\overline{\overline{A}}$）。若$\overline{\overline{A}}\le\overline{\overline{B}}$且A与B不对等，则称$A$的势小于$B$的势（或$B$的势大于$A$的势），记作 $\overline{\overline{A}}<\overline{\overline{B}}$（或$\overline{\overline{B}}>\overline{\overline{A}}$）。

- 可数集

定义5.5 凡与正整数对等的集合称为可数集（或可列集）。

显然，一个集合是可数集的充要条件是它的所有元素可以用自然数编号，排成一个无穷序列：

$a_1, a_2, \ldots, a_n, \ldots$

可数集的势用$\aleph_0$表示，读作“阿列夫零”。

例：正偶数集是可数集。整数集$\mathbb{Z}$也是可数集。

定理5.1 任意的无限集都有一个可数子集。

定理5.2 可数集的子集或者是有限集，或者是可数集。

证：设A是可数集，则A可以表示为一个无穷序列

$$a_1, a_2, \ldots, a_n, \ldots$$

又设B为A的一个子集，若B不是有限集，那么B必是上面的序列的一个子列： $a_{n1}, a_{n2}, \ldots, a_{nk}, \ldots$

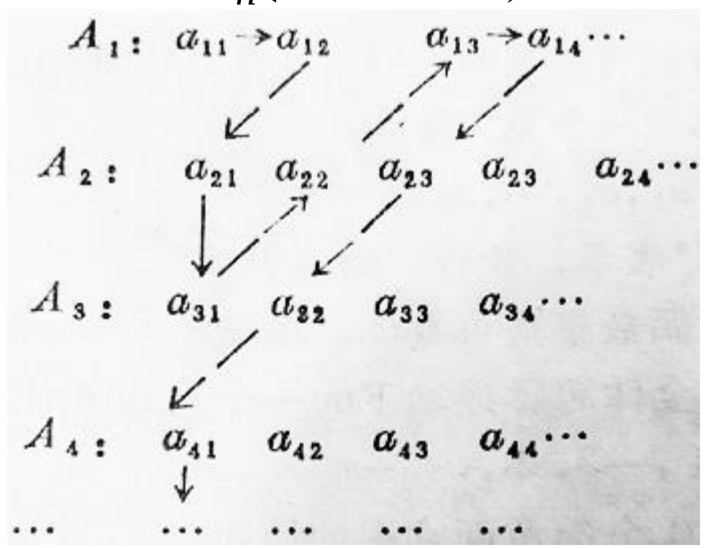
只要使B中的元a_{nk}与A中的元a_k相对应，可知B~A。

5.1 映射、对等与可数集

推论 可数集是无限集中具有最小势的一类集。

定理5.3 可数个可数集的并是可数集。

证：设有可数个可数集$A_n(n=1,2,\ldots)$. 将每个可数集的元素排列如下：



令 $S=\bigcup\limits_{n=1}^{+\infty}A_n$，将S中的所有元素按箭头指向顺序排列，则

$$S=\{a_{11},a_{12},a_{21},a_{31},a_{22},a_{13},a_{14},a_{23},\ldots\}$$

如果不同的A_n含有相同的元素，他们在并集S中是同一元素，则在该序列中应当删去这些重复元素，剩下的仍为可列集。

5.1 映射、对等与可数集

- 例5.1.3 在直角坐标系下，平面上坐标x与y均为整数的点(x,y)(称为格点)全体构成一个可数集。

事实上，对于固定的整数n，$A_n=\{(n,m)\,|\,m$是整数$\}$是一个可数集。而平面上的格点集是可数个A_n的并集$\bigcup_{-\infty}^{+\infty} A_n$，由定理5.3可知它是一个可数集。

- 例5.1.4 有理数集是一个可数集。

设x为有理数，则$x=p/q$是一既约分数，其中p, q均为整数且$q>0$. 将每个既约分数p/q与平面上的一个格点p,q相对应，易见有理数集与格点集的某个子集对等，由定理5.2，它至多是一个可数集，又有理数集是一个无限集，因而有理数集必是可数集。

- 例5.1.5 直线上一切互不相交的开区间或者构成有限集，或者构成可数集。

- 不可数集

可数集是无限集中最简单的一类集，然而，并非任何无限集都是可数集。

定理5.4 区间[0,1]中的点的全体构成一个不可数集。

定义5.6 区间[0,1]的点构成的集合的势称为连续统的势，记作$\aleph$（读作“阿列夫”）。

推论 实数集的势为$\aleph$.

事实上，由于开区间(0,1)与闭区间[0,1]是对等的，只要证明实数集$\mathbb{R}=(-\infty,+\infty)$与(0,1)对等就行了。为此，做映射

$$f(x)=\tan\frac{2x-1}{2}\pi$$

它显然是(0,1)到$(-\infty,+\infty)$上的一一映射。

5.2 不可数集、集合的势

定理5.5 (伯恩斯坦(Bernstein)定理) 设A与B是两个非空集。若 $A_0 \subset A$，$B_0 \subset B$，且$A \sim B_0$, $B \sim A_0$, 则$A \sim B$.

定理5.6 无理数集的势为$\aleph$.

康托猜想或连续统假设：在$\aleph_0$与$\aleph$之间不存在另一种势。

1900年巴黎召开的数学家大会上，希尔伯特在他的讲演中列举了23个还未解决的数学难题，连续统假设就是其中的第一个问题。

直到上世纪六十年代人们才证明，连续统假设与集合论中的策墨罗——弗兰克尔公理系统不但是相容的，而且是独立的。就是说在这个公理系统中，既不能否定连续统假设，也不能肯定连续统假设。

定理5.7 非空集合A的幂集的势比A本身的势大。

● 闭区间套定理

设$\{[a_n, b_n]\}$是$\mathbb{R}$中的闭区间列($n\geq 1$)，如果满足：

(1) $[a_1, b_1] \supset [a_2, b_2] \supset \ldots \supset [a_n, b_n] \supset \ldots$

(2) $\lim\limits_{n\to\infty}(b_n - a_n) = 0$

则存在唯一实数ξ属于所有闭区间$[a_n, b_n]$，$n\geq 1$。

证：由条件1)数列$\{a_n\}$单调增加有上界b_1，数列$\{b_n\}$单调减少有下界a_1，即：$a_1 \leq a_2 \leq \ldots \leq a_n \leq \ldots$， $b_1 \geq b_2 \geq \ldots \geq b_n \geq \ldots$, 因此数列$\{a_n\}$收敛，设$\lim\limits_{n\to\infty} a_n = \xi$，则由条件2)有$\lim\limits_{n\to\infty} b_n = \lim\limits_{n\to\infty}(b_n - a_n + a_n) = \lim\limits_{n\to\infty}(b_n - a_n) + \lim\limits_{n\to\infty} a_n = \xi$, 于是$\lim\limits_{n\to\infty} a_n = \lim\limits_{n\to\infty} b_n = \xi$.

对于任意给定的$k \in \mathbb{Z}^+$，$\forall\ n>k$有$a_k\leq a_n<b_n\leq b_k$，从而

$a_k\leq \lim\limits_{n\to\infty} a_n = \xi = \lim\limits_{n\to\infty} b_n \leq b_k$ 或$a_k\leq \xi \leq b_k$ 即ξ属于所有的闭区间。

- 不可数集

定理5.4 区间[0,1]中的点的全体构成一个不可数集。

证：用反证法。假定[0,1]中的点是可数的，那么它们必能排成一个无穷序列：$a_1, a_2, \ldots, a_n, \ldots$

将区间[0,1]三等分，则[0,1/3]与[2/3,1]中至少有一个不含a_1，记作I_1；将闭区间I_1三等分，则左右两个闭区间中至少有一个不含a_2，记作I_2；再将I_2三等分，又可以得到一个不含a_3的闭区间I_3。如此继续下去，便得到一个闭区间列$\{I_n\}$：

(1) I_n是递减的：$I_1 \supset I_2 \supset \ldots \supset I_n \supset \ldots$

(2) 当$n \to \infty$时，区间I_n的长度$=1/3^n \to 0$.

并且$a_n \notin I_n$，$n = 1,2,\ldots$。由区间套原理必存在$\xi \in \cap I_n$，但由于$a_n \notin I_n$，故$\xi \neq a_n\,(n = 1,2,\ldots)$。这说明在区间[0,1]中存在着点$\xi$，它不含在序列$\{a_n\}$中,与假设矛盾, 因此[0,1]中的点构成不可数集。

5.2 不可数集、集合的势

- **例5.2.1** 实数列全体E_∞的势为$\aleph$.

  证：设B为E_∞中适合$0<x_n<1$的元素$\{x_1, x_2, \ldots, x_n, \ldots\}$的全体。

$$f(x)=\{\tan\frac{2x_1-1}{2}\pi,\tan\frac{2x_2-1}{2}\pi,\cdots,\tan\frac{2x_n-1}{2}\pi,\cdots\}$$

易见f是从B到E_∞上的一一映射。

区间(0,1)对等与B的一个子集：$\{x, x, \ldots, x, \ldots\}$

集合B对等与(0,1) 的一个子集：

$x=\{x_1, x_2, \ldots, x_n, \ldots\}$，用十进制无限小数表示每个$x_n$有

$x_1=0.x_{11}x_{12\ldots}x_{1n\ldots}$

$\ldots$

由此可得一个新的十进制小数：$\varkappa=0.x_{11}x_{12}x_{21}x_{31}x_{22}x_{13}x_{14}x_{23}\ldots$

做映射$g(x)=\varkappa$

5.2 不可数集、集合的势

- 例5.2.2 n维欧式空间$\mathbb{R}^n$的势为$\aleph$.

$$\tilde{x} = \{x_1, x_2, \ldots, x_n, 0, 0, \ldots\}$$

$$x = \{x, 0, \ldots, 0\}$$

- 例5.2.3 闭区间[0,1]上连续函数全体$C[0,1]$的势为$\aleph$.

常值实函数$K \subset C[0,1]$

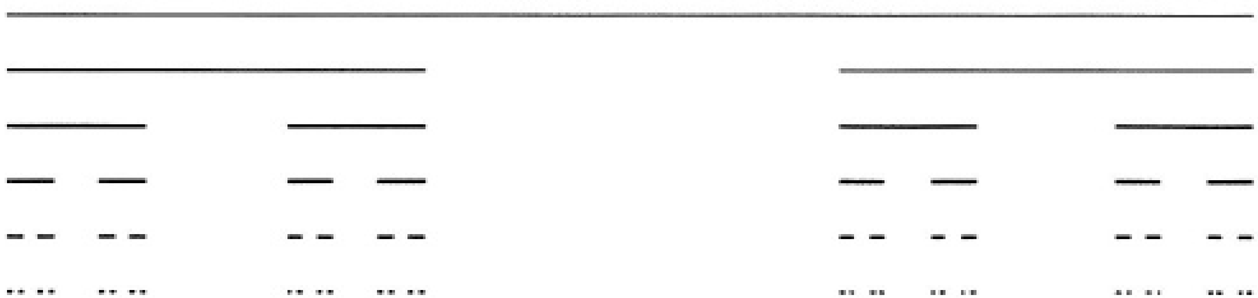
设$r_1, r_2, \ldots, r_n, \ldots$为[0,1]中有理数的全体。[0,1]上的任一连续函数 $f(x)$都由它在$r_1, r_2, \ldots, r_n, \ldots$上的值$f(r_1), f(r_2), \ldots, f(r_n), \ldots$完全确定。事实上，因为对于任何$x \in [0,1]$，存在着上述有理数列的子列$r_{nk} \to x (k \to \infty)$, 由 f 的连续性，$f(x) = \lim\limits_{k\to\infty} f(r_{nk})$.

作映射ψ，使$C[0,1]$中的每个 f 与E_∞中的

$$\{f(r_1), f(r_2), \ldots, f(r_n), \ldots\}$$

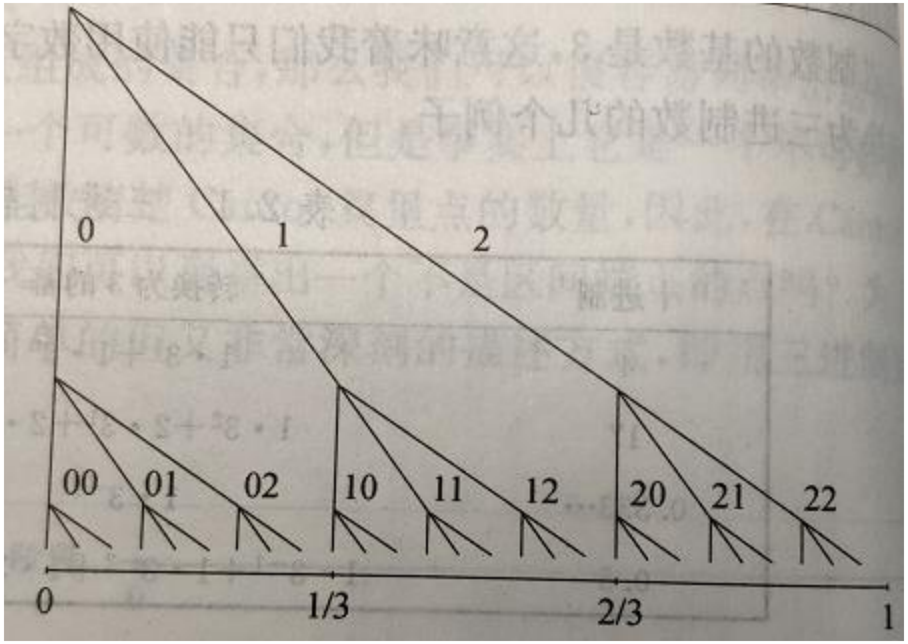
相对应，不难验证，ψ是$C[0,1]$到E_∞中的一个子集的一一映射。

5.3 Cantor集



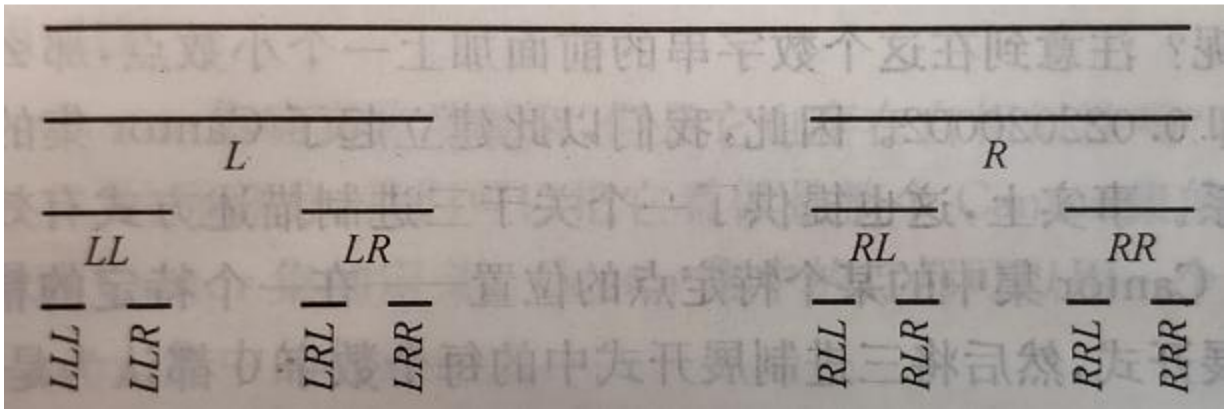
5.3 Cantor集

- 若干问题
  - 是否存在区间或线段？
  - 区间的端点在Cantor集中？
  - 可数集？
  - 含不含1？
  - 自相似性



5.3 Cantor集

- 地址与Cantor集



Cantor集的势

- 十进制展开的情况

三进制展开有限位

十进制展开有限位（14个）

5.3 Cantor集

- 囚徒集

$$f(x)=\begin{cases}3x, & x\le 0.5\\ -3x+3, & x>0.5\end{cases}$$

  - 逃逸点
  - 囚徒点

可数集、不可数集、Cantor集

作业：

1、试作下列各集合间的一一对应：

1) 区间$[0,1]$与$(0,1)$

2) 区间$(-\infty,+\infty)$与(a,b)

图论初步

第三部分 图论初步

第6章 图的基本概念

第7章 特殊的图

第8章 树

图论初步

第三部分 图论初步

第6章 图的基本概念

第7章 特殊的图

第8章 树

6.1 无向图及有向图

- 多重集

集合中的元素不重复出现，当允许元素重复出现时称作多重集。

例：$\{a, a, b, c, c, c\}$与 $\{a, b, c\}$作为集合是相同的，而作为多重集是不同的。

- 无序积

设A与B为两集合，称$\{\{a,b\} \mid a \in A \wedge b \in B\}$为$A$与$B$的无序积。记作$A\&B$。为方便起见，将无序对$\{a, b\}$记为$(a, b)$.

例：设$A=\{a_1, a_2\}$, $B=\{b_1, b_2\}$则

$$A\&B = \{(a_1, b_1), (a_1, b_2), (a_2, b_1), (a_2, b_2)\},$$

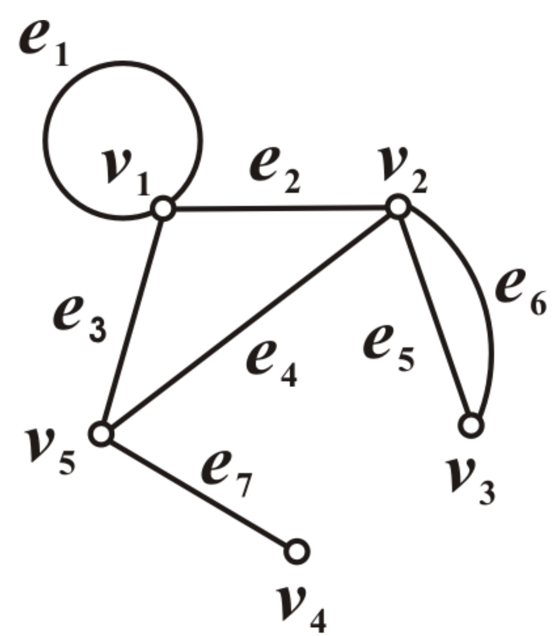
$$A\&A = \{(a_1, a_1), (a_1, a_2), (a_2, a_2)\}.$$

- 无向图

定义6.1 无向图G是一个二元组$<V,E>$, 其中

(1) G的顶点集V是非空有穷集合, 其元素称为顶点或节点

(2) G的边集E为$V\&V$的多重子集, 其元素称为无向边，简称边.



例：$G=<V,E>$, 其中

$V=\{v_1, v_2, \ldots, v_5\}$,

$E=\{(v_1,v_1), (v_1,v_2), (v_2,v_3),(v_2,v_3), (v_2,v_5), (v_1,v_5), (v_4,v_5)\}$

6.1 无向图及有向图

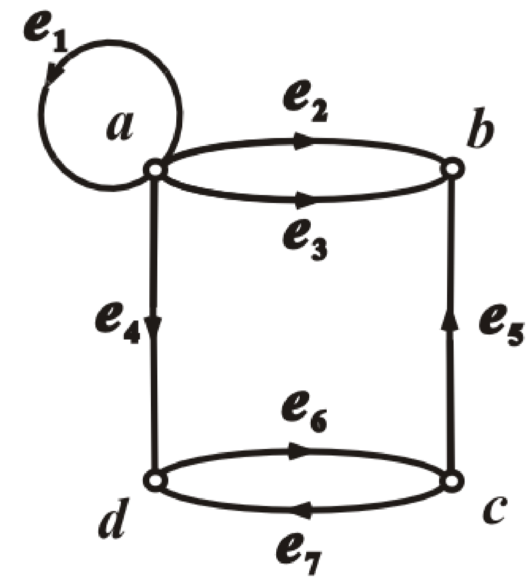
- 有向图

定义6.2 有向图D是一个二元组$<V,E>$, 其中

(1) 顶点集V是非空有穷集合,
其元素称为顶点或节点

(2) 边集E为卡氏积$V\times V$的多重子集，其
元素称为有向边，简称边.

D的基图:用无向边代替有向边



例：如$D=<V,E>$, 其中

$V=\{a, b, c, d\}$

$E=\{<a, a>,<a, b>,<a, b>,<a, d>,<c, b>,<d, c>,<c, d>\}$

图的数学定义与图形表示,在同构意义下一一对应

6.1 无向图及有向图

- **注意**

  通常用G表示无向图, D表示有向图, 也常用G泛指无向图和有向图.

  $V(G)$, $E(G)$, $V(D)$, $E(D)$: G和D的顶点集, 边集.

  n 阶图: n个顶点的图

  零图: $E=\varnothing$

  平凡图: 1 阶零图

  空图: $V=\varnothing$

- 顶点和边的关联与相邻

定义6.3 设$e=(u,v)$是无向图$G=<V,E>$的一条边, 称u,v为e的**端点**, e与$u\,(\,v)$**关联**. 若$u \neq v$, 则称e与$u\,(\,v)$的**关联次数为1**;若$u=v$, 则称e为**环**, 此时称e与u的**关联次数为2**; 若w不是e端点, 则称e与w的**关联次数为0**. 无边关联的顶点称作**孤立点**.

设无向图$G=<V,E>$, $u, v \in V$, $e, e' \in E$, 若$(u,v) \in E$, 则称u, v**相邻**; 若e, e'至少有一个公共端点, 则称e, e'**相邻**.

定义6.4 设$e=(u,v)$是有向图$D=<V,E>$的一条有向边, u为e的始点, v为e的终点, 称u,v为e的**端点**, e与$u\,(\,v)$**关联**.无边关联的顶点称作**孤立点**.若有一条有向边的始点与终点重合, 称该边为**环**.

- 顶点的度数

定义6.5 设$G=<V,E>$为无向图, $v \in V$,

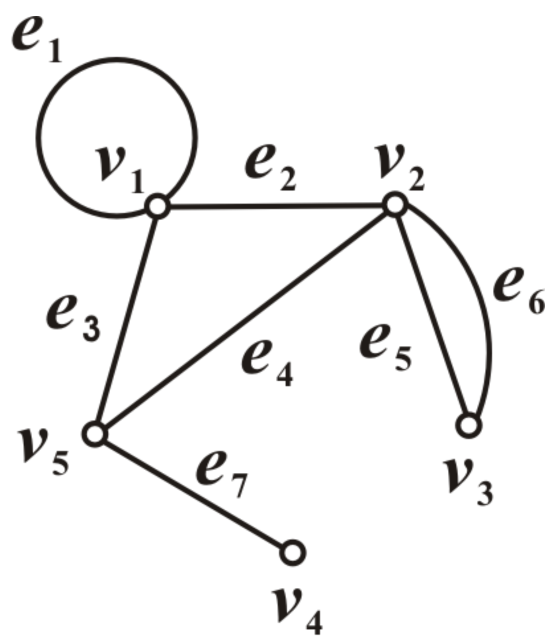
v的度数(度) d(v): v作为边的端点的次数之和

悬挂顶点: 度数为1的顶点

悬挂边: 与悬挂顶点关联的边

G的最大度$\Delta(G)=\max\{d(v) \mid v \in V\}$

G的最小度$\delta(G)=\min\{d(v) \mid v \in V\}$



例： $d(v_5)=3$, $d(v_2)=4$, $d(v_1)=4$,

$\Delta(G)=4$, $\delta(G)=1$,

v_4是悬挂顶点, e_7是悬挂边, e_1是环

6.1 无向图及有向图

- 顶点的度数

  v的出度$d^+(v)$：v作为边的始点次数之和

  v的入度$d^-(v)$：v作为边的终点次数之和

  v的度数(度) $d(v)$: v作为边的端点次数之和

$$d(v)= d^+(v)+ d^-(v)$$

D的最大出度$\Delta^+(D) = \max\{d^+(v)|v\in V\}$

最小出度$\delta^+(D) = \min\{d^+(v)|v\in V\}$

最大入度$\Delta^-(D) = \max\{d^-(v)|v\in V\}$

最小入度$\delta^-(D) = \min\{d^-(v)|v\in V\}$

最大度$\Delta(D) = \max\{d(v)|v\in V\}$

最小度$\delta(D) = \min\{d(v)|v\in V\}$

握手定理

定理6.1 设图$G=<V,E>$为无向图或有向图，$V=\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$，边数$|E| = m$，则

$$\sum_{i=1}^{n} d(v_i) = 2m.$$

证明：每一条边都有2个端点，所有顶点的度数之和等于它们作为端点的次数之和，因此恰好等于边数的两倍

推论：任何图(无向或有向)，度数为基数的顶点个数是偶数。

定理6.2 设有向图$D=<V,E>$，$V=\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$，$|E| = m$，则

$$\sum_{i=1}^{n} d^+(v_i) = \sum_{i=1}^{n} d^-(v_i) = m$$

其证明与定理6.1类似.

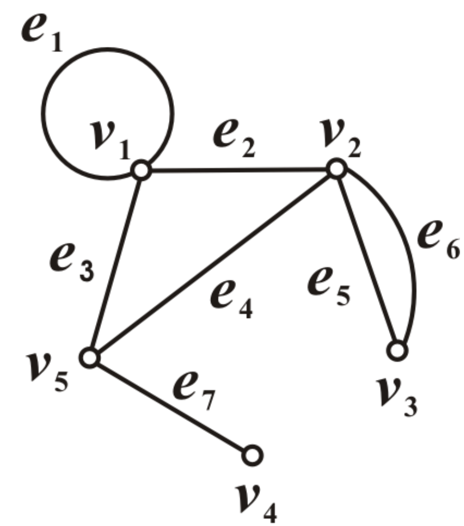
6.1 无向图及有向图

- 图的度数序列

设无向图G的顶点集$V=\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$

G的度数序列: $d(v_1), d(v_2), \ldots, d(v_n)$

例：右图度数序列:4,4,2,1,3



设有向图D的顶点集$V=\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$

D的度数序列: $d(v_1), d(v_2), \ldots, d(v_n)$

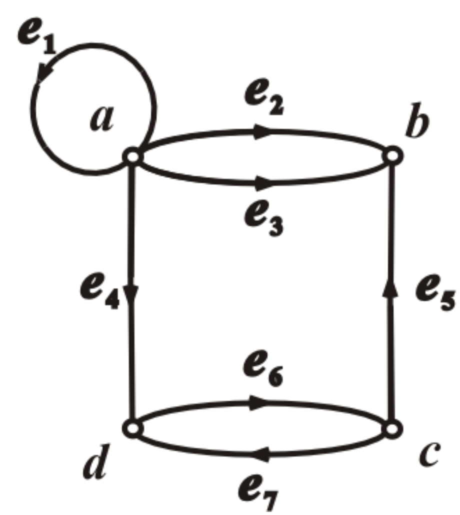
D的出度序列: $d^+(v_1), d^+(v_2), \ldots, d^+(v_n)$

D的入度序列: $d^-(v_1), d^-(v_2), \ldots, d^-(v_n)$

例：右图度数序列:5,3,3,3

出度序列:4,0,2,1

入度序列:1,3,1,2



- 握手定理的应用

□ 例6.1.1 (3,3,3,4), (2,3,4,6,8)能成为图的度数列吗?

解：不可能. 它们都有奇数个奇数.

□ 例6.1.2 已知图G有10条边, 4个3度顶点, 其余顶点的度数均小于等于2, 问G至少有多少个顶点?

解：设G有n个顶点. 由握手定理,

$$4\times3+2\times(n-4)\geq2\times10$$

解得 $n\geq8$

6.1 无向图及有向图

- 多重图与简单图

定义6.6

(1) 在无向图中,如果有2条或2条以上的边关联同一对顶点, 则称这些边为平行边, 平行边的条数称为重数.

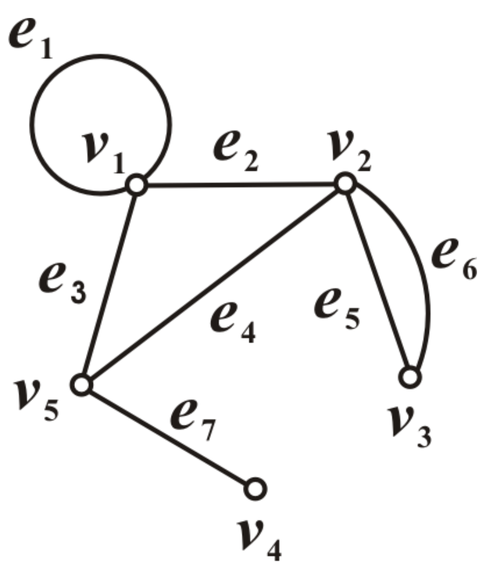
(2)在有向图中,如果有2条或2条以上的边具有相同的始点和终点, 则称这些边为有向平行边, 简称平行边, 平行边的条数称为重数.

(3) 含平行边的图称为多重图.

(4) 既无平行边也无环的图称为简单图.

注意:简单图是极其重要的概念

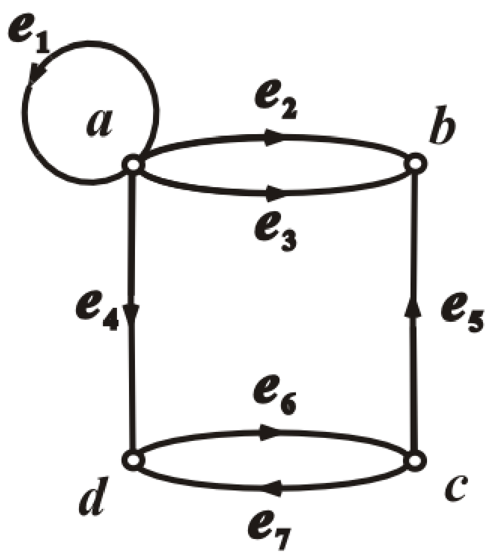
- 多重图与简单图应用



e_5和e_6是平行边

重数为2

不是简单图



e_2和e_3是平行边,重数为2

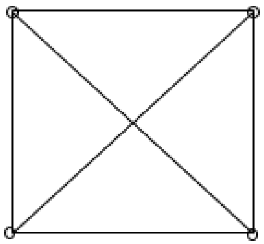
e_6和e_7不是平行边

不是简单图

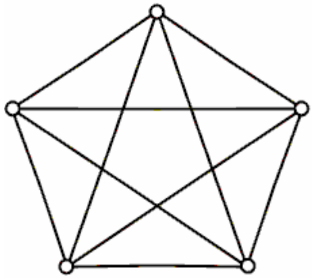
- 完全图

定义6.7 设$G=<V,E>$是n阶无向简单图，若G中任何顶点都与其余的n-1个顶点相邻，则称G为n阶无向完全图，记作K_n .

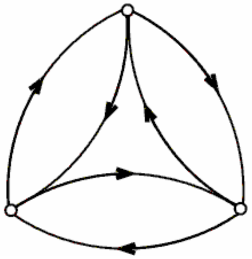
设$D=<V,E>$是n阶有向简单图, 若对于任意的顶点$u,v\in V(u\neq v)$, 既有有向边$<u,v>$，又有$<v,u>$，则称D为n阶有向完全图.



(a) K_4



(b) K_5



(c) 3阶有向完全图

6.1 无向图及有向图

- 子图、母图

定义6.8 设G=<V,E>, G'=<V',E'>是两个图

(1) 若$V'\subseteq V$且$E'\subseteq E$, 则称G'为G的子图, G为G'的母图，记作$G'\subseteq G$

(2) 若$G'\subseteq G$ 且$V'=V$，则称G'为G的生成子图

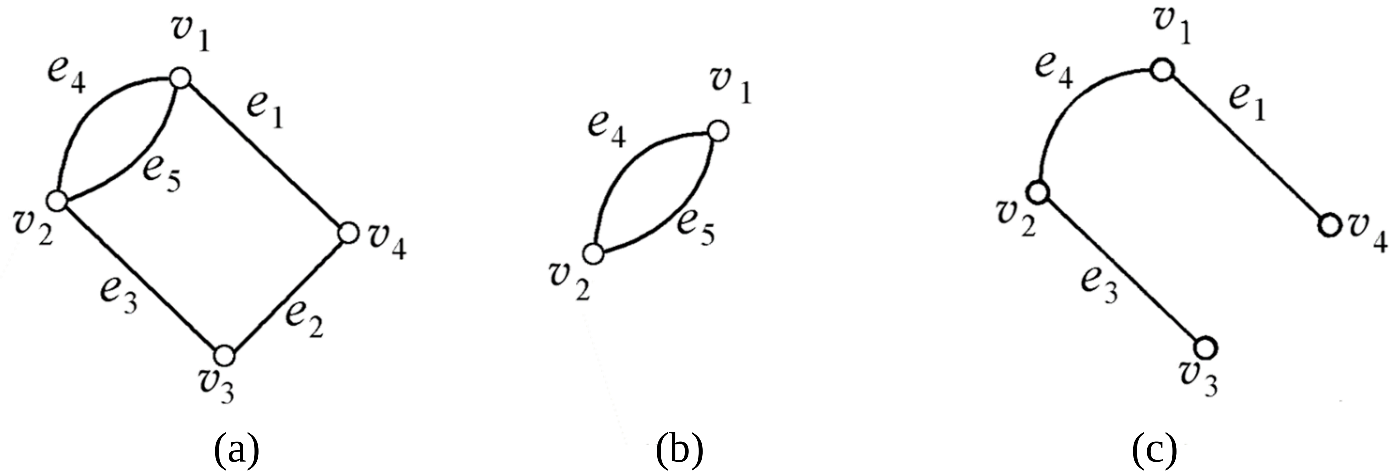
(3) 若$G'\subseteq G$ 且$G'\neq G$，称G'为G的真子图

(4) 设$V_1\subseteq V$ 且$V_1\neq\varnothing$, 以V_1为顶点集, 以两端点都在V_1中的所有边为边集的G的子图称作V_1的导出子图，记作 $G[V_1]$

(5) 设$E_1\subseteq E$且$E_1\neq\varnothing$, 以E_1为边集, 以E_1中边关联的所有顶点为顶点集的G的子图称作E_1的导出子图, 记作 $G[E_1]$

6.1 无向图及有向图

- 生成子图与导出子图应用

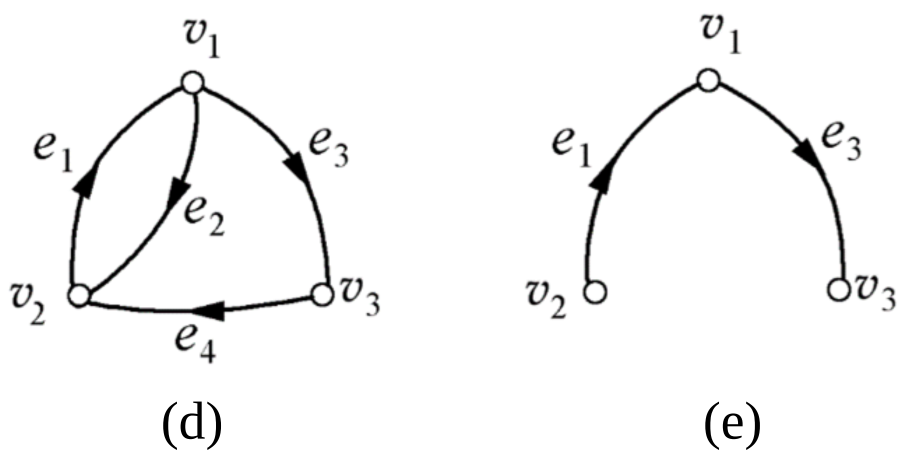


图(b)、图(c)均为图(a)的子图，图(c)是生成子图。

图(b)是顶点子集$\{v_1,v_2\}$的导出子图，也是边子集$\{e_4,e_5\}$的导出子图。

图(c)又是边子集$\{e_1, e_3,e_4\}$的导出子图。

- 生成子图与导出子图应用



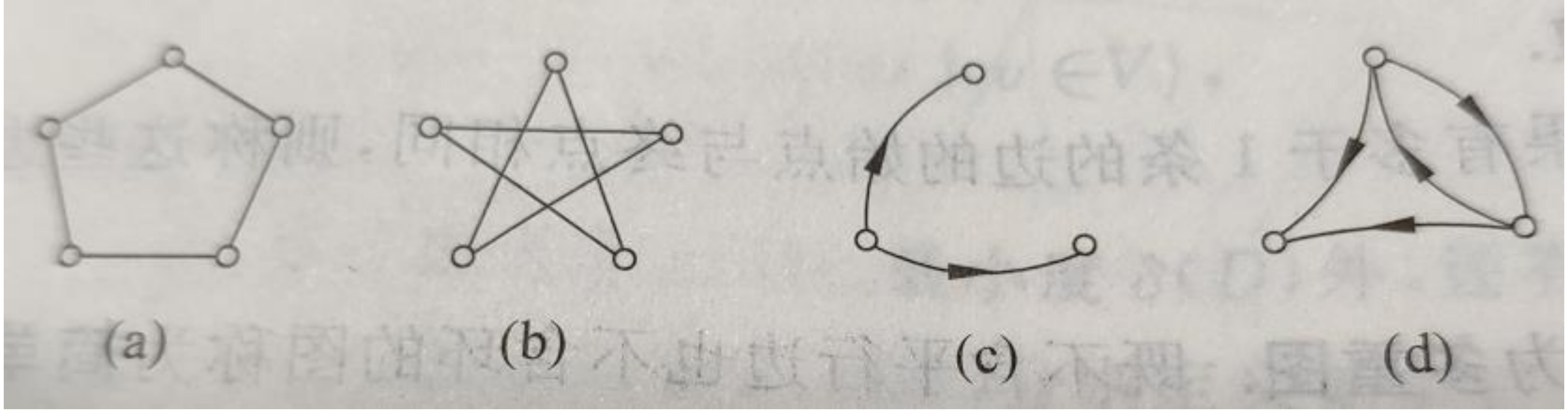
图(e)、图(f)是图(d)的子图，图(e)是生成子图，也是边子集$\{e_1,e_3\}$的导出子图。

图(f)是边子集$\{e_1,e_1\}$的导出子图，也是顶点子集$\{v_1,v_2\}$的导出子图。

- 补图

  定义6.9 设$G=<V,E>$为n阶无向简单图，G的补图$\bar{G}$定义如下：$\bar{G}=<V, \bar{E}>$，其中$\bar{E}=\{(u,v) \mid u,v \in V$ 且$(u,v) \notin E\}$.

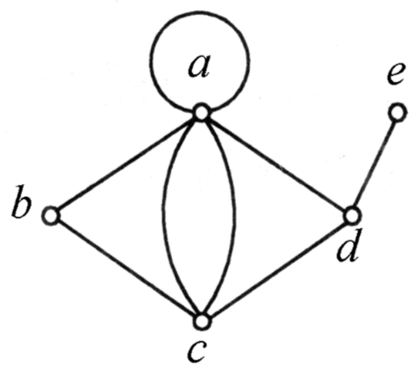
  有向简单图的补图可类似定义.

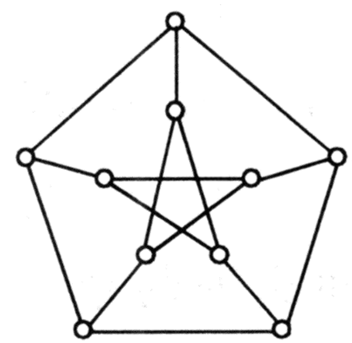


6.1 无向图及有向图

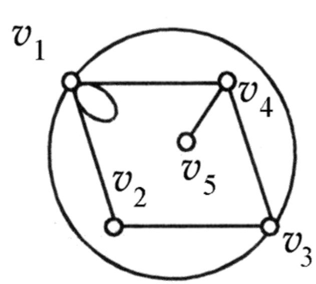
● 图的同构

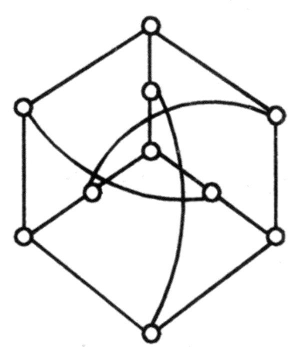
定义6.10 设两个无向图$G_1=<V_1,E_1>$, $G_2=<V_2,E_2>$, 如果存在双射函数 $f: V_1\to V_2$, 使得对于任意的$e=(u,v)\in E_1$, 当且仅当$e'=(f(u), f(v))\in E_2$，并且e 与 e'的重数相同，则称G_1与G_2是同构的，记作$G_1\cong G_2$.





彼得森图

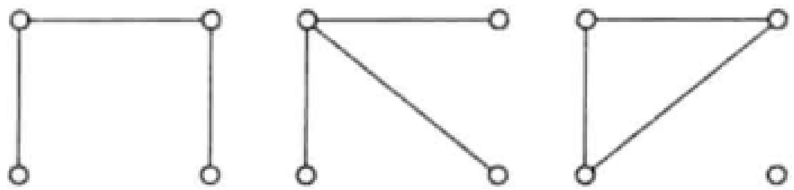




- 图的同构

例6.1.3

(1) 试画出4阶3条边的所有非同构的无向简单图.



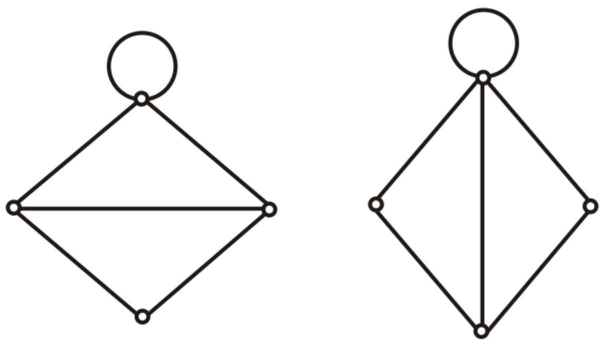
(a)　(b)　(c)

(2)画出3个顶点2条边的所有非同构的有向简单图.

(d)　(e)　(f)　(g)

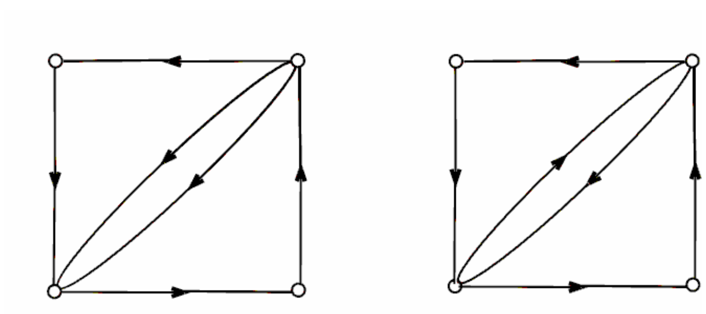
例6.1.4 判断下述每一对图是否同构:

(1)



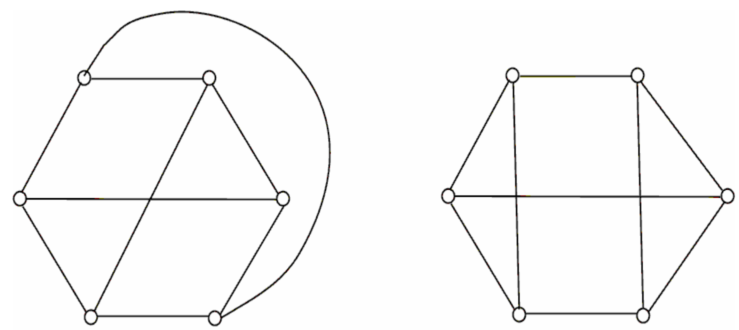
度数列不同　　不同构

(2)



入度(出度)列不同　不同构

(3)



度数列相同　左边没有三角形
右边有三角形　　不同构

说明:

图之间的同构关系具有自反性、对称性和传递性.

能找到多条同构的必要条件, 但它们都不是充分条件:

① 边数相同，顶点数相同

② 度数列相同(不计度数的顺序)

③ 对应顶点的关联集及邻域的元素个数相同，等等

若破坏必要条件，则两图不同构

至今没有找到判断两个图同构的多项式时间算法

- 作业

P137 5.3

5.5(2)

P138 5.10

5.3 设 D 是 4 阶有向简单图，度数列为 3,3,3,3. 它的入度列（或出度列）能为 1,1,1,1 吗？

5.5 下面各无向图中有几个顶点？

(2) 21 条边，3 个 4 度顶点，其余的都是 3 度顶点.

5.10 画出 K_4 的所有非同构的子图，其中有几个是生成子图？生成子图中有几个是连通图？

6.2 通路、回路、图的连通性

- 通路与回路

定义6.11 设G中顶点与边的交替序列$\Gamma=v_0e_1v_1e_2\ldots e_lv_l$，若$1\le i\le l$,$v_{i-1}$,$v_i$是$e_i$的端点(当$G$是有向图,要求$v_{i-1}$是$e_i$始点, v_i是e_i终点),则称Γ为顶点v_0到v_l的通路,v_0和v_l分别称为此通路的起点和终点,Γ中边的数目l为称为Γ的长度.又若$v_0=v_l$，则称Γ为回路.

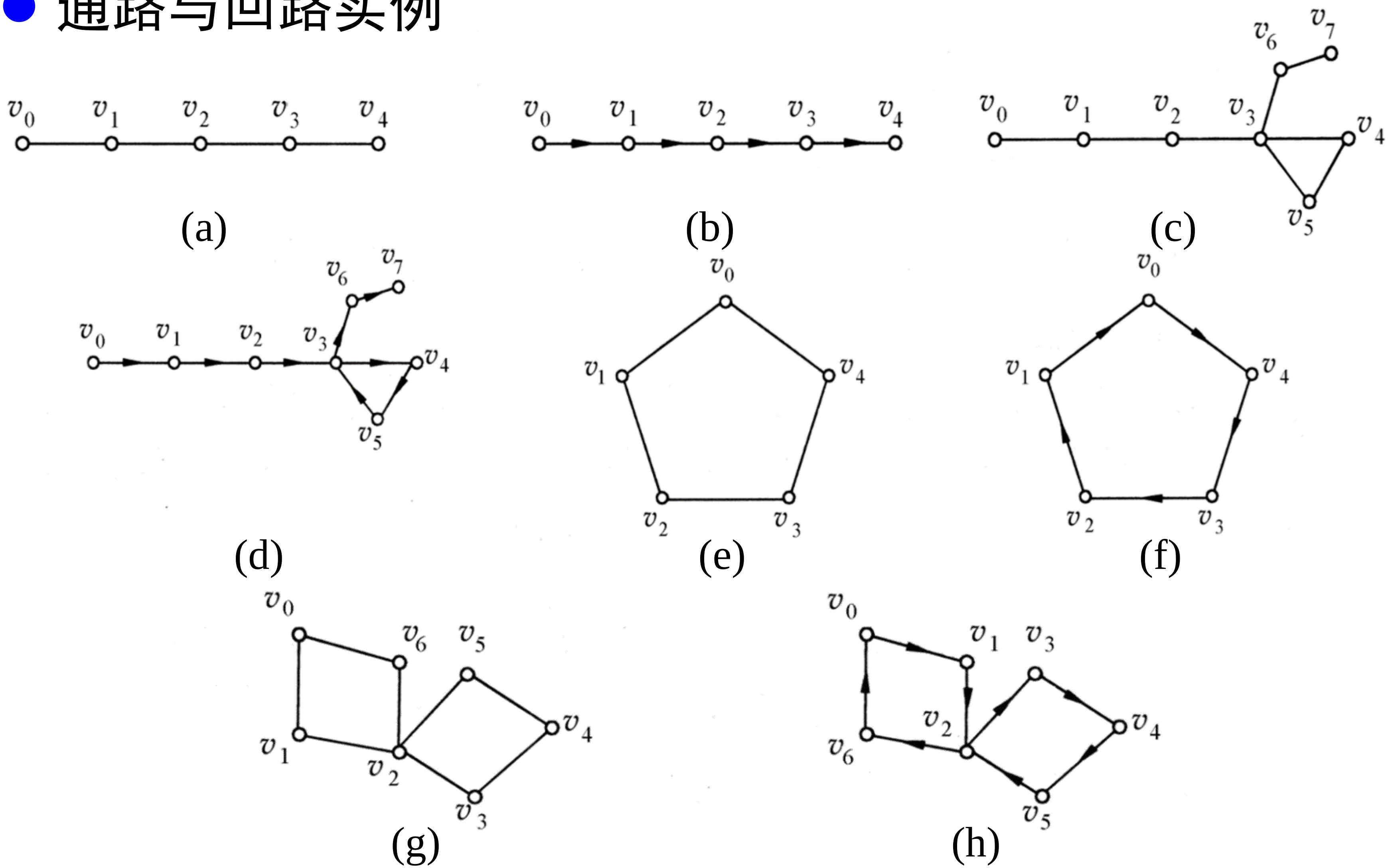
Γ中所有边互不相同，则称Γ为简单通路,当$v_0=v_l$时，称此简单通路为简单回路。

Γ中除v_0,v_l外所有顶点互不相同，所有的边也互不相同，则称此通路为初级通路或路径,当$v_0=v_l$时，称此通路为初级回路或圈.

有边重复出现的通路称为复杂通路，有边重复出现的回路称为复杂回路。

6.2 通路、回路、图的连通性

- 通路与回路实例



6.2 通路、回路、图的连通性

说明:

- 表示方法

  ① 用顶点和边的交替序列(定义), 如$\Gamma=v_0e_1v_1e_2\ldots e_lv_l$

  ② 用边的序列, 如$\Gamma=e_1e_2\ldots e_l$

  ③ 简单图中, 用顶点的序列, 如$\Gamma=v_0v_1\ldots v_l$

  ④ 非简单图中,可用混合表示法,如$\Gamma=v_0v_1e_2v_2e_5v_3v_4v_5$
- 无向图：环是长度为1的圈, 两条平行边构成长度为2的圈.
- 有向图：环和两条方向相反边构成的回路分别为长度为1和2的圈。
- 在无向简单图中, 所有圈的长度≥3; 在有向简单图中, 所有圈的长度≥2.

- 在两种意义下计算圈的个数

① 定义意义下

在无向图中，一个长度为$l(l\geq3)$的圈看作$2l$个不同的圈．如$v_0v_1v_2v_0$，$v_1v_2v_0v_1$，$v_2v_0v_1v_2$，$v_0v_2v_1v_0$，$v_1v_0v_2v_1$，$v_2v_1v_0v_2$看作6个不同的圈.

在有向图中, 一个长度为$l(l\geq3)$的圈看作l个不同的圈.

② 同构意义下

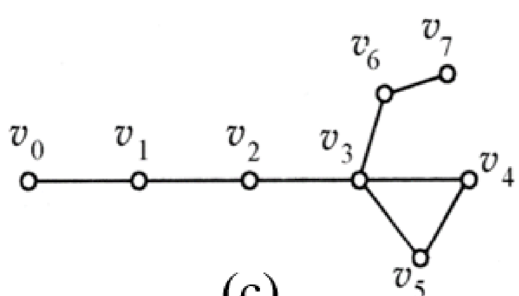
所有长度相同的圈都是同构的, 因而是1个圈.

6.2 通路、回路、图的连通性

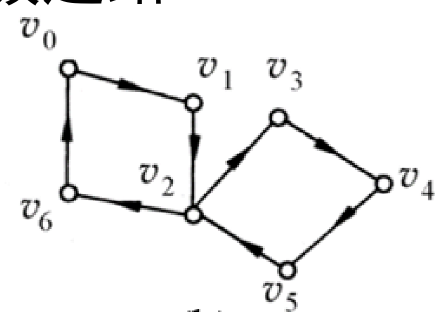
定理6.3 在一个n阶图G中，若从顶点u到v（$u \neq v$）存在通路，则从u到v存在长度小于等于$n-1$的通路.

证明：设$v_0e_1v_1e_2\ldots e_lv_l$是从$u=v_0$到$v=v_l$的一个通路,如果$l>n$-1，由于图中只有$n$个顶点，在$v_0$，$v_1$，…，$v_l$中一定有2个是相同的。设$v_i=v_j$，$i<j$，那么$v_ie_{i+1}v_{i+1}\ldots e_jv_j$是一条回路，删去这条回路，得到$v_0e_1v_1\ldots v_ie_{j+1}\ldots e_lv_l$仍是从$u=v_0$到$v=v_l$的一个通路，其长度减少$j$-$i$。如果它的长度仍大于$n$-1，则可以重复上述做法，直到得到长度不超过$n$-1的通路为止。

推论：在一个n阶图G中，若从顶点u到v（$u \neq v$）存在通路，则从u到v存在长度小于等于$n-1$的初级通路.



(c)



(h)

- 通路与回路

注：下述定理和推论可得定理6.3类似证明。

定理6.4：在一个n阶图G中，若存在v到自身的回路，则一定存在v到自身长度小于等于n的回路.

推论：在一个n阶图G中，若存在v到自身的简单回路，则存在v到自身长度小于等于n的初级回路.

6.2 通路、回路、图的连通性

- 连通性

定义6.12 在一个无向图G中，若从顶点u到v存在通路（当然从v到u也存在通路），则称u与v是连通的. 规定任何顶点与自身总是连通的.

在一个有向图D中，若从顶点u到v存在通路，则称u可达v. 规定任何顶点到自身总是可达的.

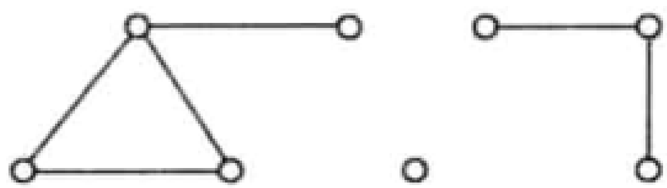
- 连通图与非连通图

定义6.13 若无向图G是平凡图或G中任意两顶点都是连通的，则称G是连通图；否则，称G是非连通图。

- 连通分支

在无向图中，顶点之间的连通关系是等价关系。设G为一个无向图，R是G中顶点之间的连通关系. 按照R可将V(G)划分成若干个等价类，设为$V_1,V_2,\ldots,V_k$. 由它们导出的导出子图$G[V_1]$, $G[V_2]$，…,$G[V_k]$称为G的**连通分支**，G的连通分支的个数记为$p(G)$.

例：下图有3个连通分支

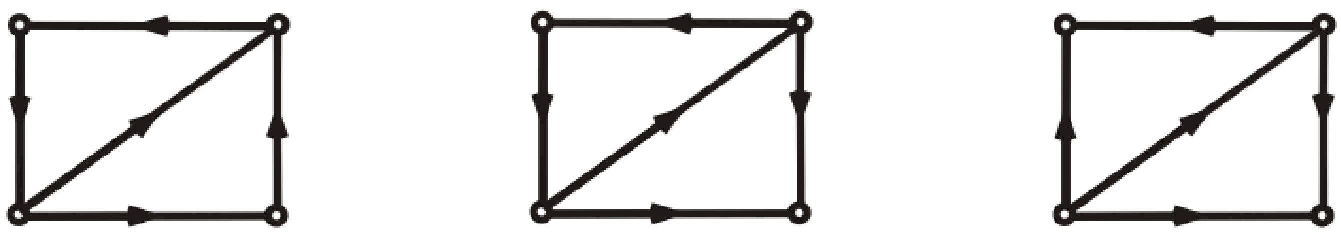


6.2 通路、回路、图的连通性

- 强连通图与弱连通图

定义6.14 设D是一个有向图，如果略去D中各有向边的方向后所得无向图是连通图，则称D是弱连通图，简称连通图. 若D中任意两顶点至少一个可达另一个，则称D是单向连通图. 若D中任何一对顶点都是相互可达的，则称D是强连通图。

例：



(a) **(b)** **(c)**

(a)为强连通图，(b)为单向连通图，(c)是(弱)连通图

- 点割集与边割集

设无向图$G=<V,E>$, $V'\subseteq V$,从G中删除V'中的所有顶点及其关联的边，称作删除V'，把删除V'后的图记作$G-V'$. 又设$E'\subseteq E$，从G中删除E'中的所有边，称作删除E'，把删除E'后的图记作$G-E'$.

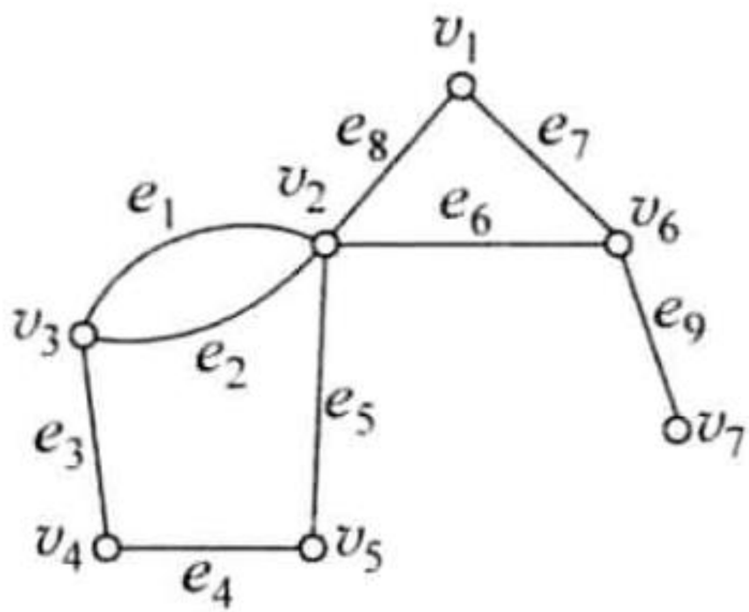
定义6.15 设无向图$G=<V,E>$,$V'\subset V$，若$p(G-V')>p(G)$,且对V'的任何真子集V'',$p(G-V'')=p(G)$，则称V'为G的点割集. 若点割集中只有一个顶点v，则称v为割点.

又 $E'\subseteq E$， 若 $p(G-E')>p(G)$ 且对 E' 的任何真子集 E''，$p(G-E'')=p(G)$，则称E'为G的边割集. 简称割集. 若为边割集中只有一条边e, 则称e为割边或桥.

6.2 通路、回路、图的连通性

- 点割集与边割集

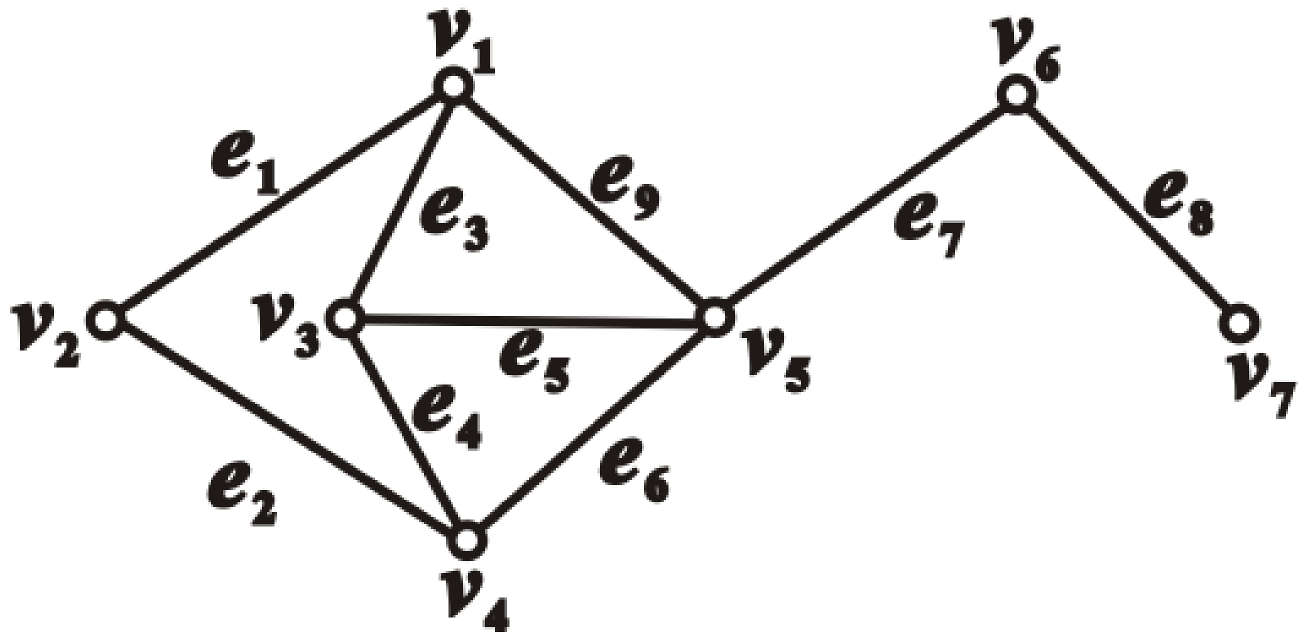
例：



在图中，$\{v_3,v_5\}$, $\{v_2\}$, $\{v_6\}$为点割集, v_2、v_6都是割点．$\{v_4,v_2\}$, 不是点割集，因为它的真子集$\{v_2\}$已经是点割集了. 类似的, $\{v_1,v_6\}$, 也不是点割集.

$\{e_3,e_4\}$, $\{e_4,e_5\}$, $\{e_1,e_2,e_5\}$, $\{e_6,e_7\}$, $\{e_6,e_8\}$, $\{e_9\}$ 等都是边割集，其中e_9是桥. $\{e_6,e_7,e_8\}$, $\{e_6,e_8,e_1,e_2,e_5\}$都不是边割集.

- 点割集与边割集



- 作业

P138　5.16

　　　　5.17

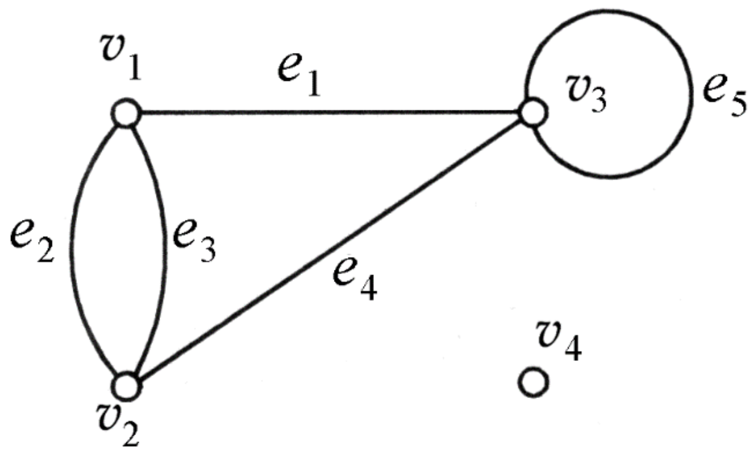
5.16 试寻找 3 个 4 阶有向简单图 D_1、D_2、D_3，使得 D_1 为强连通图；D_2 为单向连通图，但不是强连通图；而 D_3 是弱连通图，但不是单向连通图，更不是强连通图。

5.17 设 V' 和 E' 分别为无向连通图 G 的点割集和边割集. $G-E'$ 的连通分支个数一定为几？$G-V'$ 的连通分支数也是定数吗？

- 无向图的关联矩阵

定义 设无向图$G=<V,E>$, $V=\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$, $E=\{e_1, e_2, \ldots, e_m\}$, 令$m_{ij}$为$v_i$与$e_j$的关联次数，称$(m_{ij})_{n\times m}$为$G$的**关联矩阵**，记为$M(G)$.

例：



$$\text{关联矩阵}M(G)=\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

6.3 图的矩阵表示

- 无向图的关联矩阵

无向图的关联矩阵具有以下性质：

(1) 每一列恰好有两个1或一个2，这是因为每条边关联两个顶点（环关联的两个顶点重合）

(2) 第i行元素之和为v_i的度数，$\sum_{j=1}^{m} m_{ij}=d(v_i)$

(3) 所有元素之和等于$2m$，$\sum_{j=1}^{m}\sum_{i=1}^{n} m_{ij}=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m} m_{ij}=\sum_{i=1}^{n} d(v_i)=2m$

(4) v_i为孤立点当且仅当第i行全为0

(5) e_j与e_k平行边当且仅当第j列与第k列相同

6.3 图的矩阵表示

- 有向图的关联矩阵

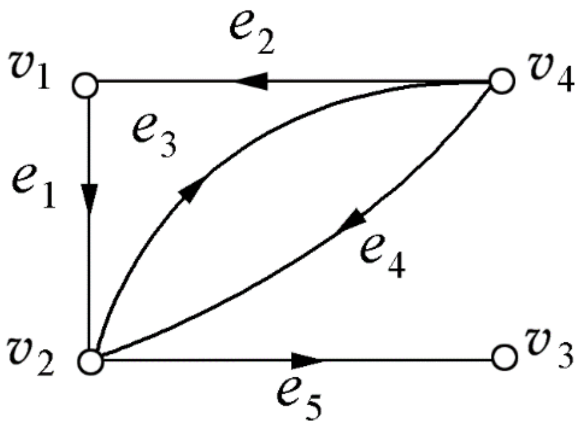
定义 设无环有向图$D=<V,E>$, $V=\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$, $E=\{e_1, e_2, \ldots, e_m\}$, 令

$$m_{ij}=\begin{cases}1, & v_i\text{为}e_j\text{的始点}\\ 0, & v_i\text{与}e_j\text{不关联}\\ -1, & v_i\text{为}e_j\text{的终点}\end{cases}$$

则称$(m_{ij})_{n\times m}$为D的关联矩阵，记为$M(D)$.

- 有向图的关联矩阵

例：



$$\text{关联矩阵}M(D)=\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

性质

(1) 每一列恰好有一个1和一个-1

(2) 第i行1 的个数等于$d^+(v_i)$, -1 的个数等于$d^-(v_i)$ 。$M(D)$中所有1的个数等于所有-1的个数, 且都等于m

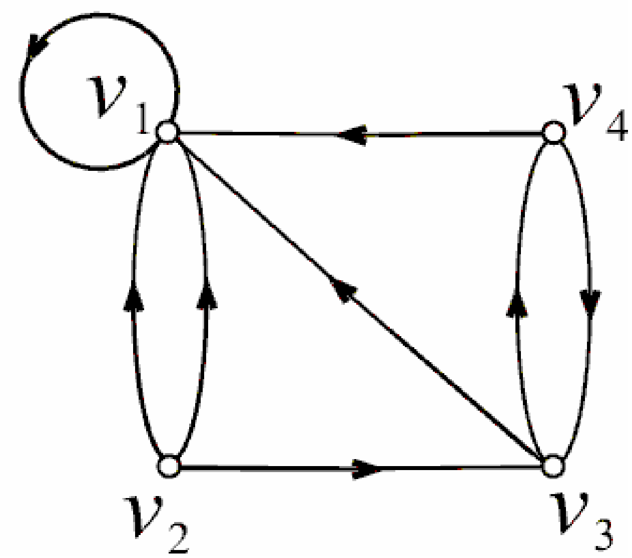
6.3 图的矩阵表示

- 有向图的邻接矩阵

在有向图中，若存在一条边e以顶点u为始点、以v为终点，则称u邻接到v。

定义 设有向图$D=<V,E>$, $V=\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$, $|E|=m$, 令$a_{ij}^{(1)}$为v_i邻接到v_j的边的条数，称$(a_{ij}^{(1)})_{n\times n}$为$D$的邻接矩阵, 记作$A(D)$.

例：



$$A(D)=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\2&0&1&0\\1&0&0&1\\1&0&1&0\end{bmatrix}$$

6.3 图的矩阵表示

- 有向图的邻接矩阵有下述性质：

(1) 第i行元素之和等于$d^+(v_i)$，$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^{(1)} = d^+(v_i)$

(2) 第j列元素之和等于$d^-(v_j)$，$\sum_{i=1}^{n} a_{ij}^{(1)} = d^-(v_j)$

(3) 所有元素之和等于边数(长度为1的通路数)，$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^{(1)} = m$

(4) 长度为1的回路数为 $\sum_{i=1}^{n} a_{ii}^{(1)}$

- 有向图的通路数与回路数

定理6.5 设A为n阶有向图D的邻接矩阵, 则 $A^l\,(l\geq 1)$中：

$a_{ij}^{(l)}$ 为D中v_i到v_j长度为 l 的通路数，

$a_{ii}^{(l)}$ 为D中v_i到自身长度为 l 的回路数，

$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^{(l)}$ 为D中长度为 l 的通路（含回路）总数，

$\sum_{i=1}^{n} a_{ii}^{(l)}$ 为D中长度为 l 的回路总数.

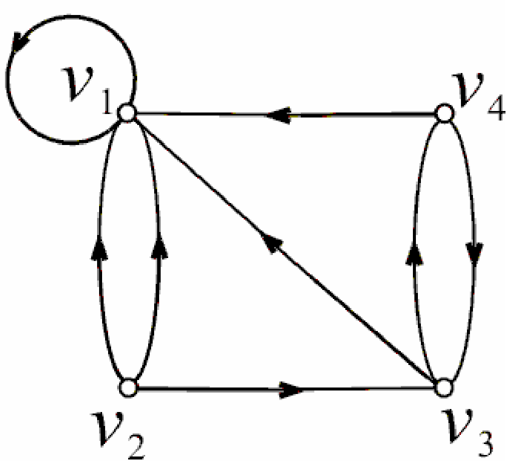
6.3 图的矩阵表示

推论：设$B_r=A+A^2+\ldots+A^r(r\geq 1)$, 则$B_r$中元素 $b_{ij}^{(r)}$ 为D中v_i到v_j长度小于等于r的通路数，$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}b_{ij}^{(r)}$ 为D中长度小于等于r 的通路（含回路）总数，其中 $\sum_{i=1}^{n}b_{ii}^{(r)}$ 为D中长度小于或等于r 的回路总数.

例：问在有向图D中

(1) 长度为1, 2, 3, 4的通路各有多少条？其中回路分别为多少条？

(2) 长度小于或等于4的通路为多少条？其中有多少条回路？



6.3 图的矩阵表示

解：

$$A=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\2&0&1&0\\1&0&0&1\\1&0&1&0\end{bmatrix}\qquad A^2=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\3&0&0&1\\2&0&1&0\\2&0&0&1\end{bmatrix}$$

$$A^3=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\4&0&1&0\\3&0&0&1\\3&0&1&0\end{bmatrix}\qquad A^4=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\5&0&0&1\\4&0&1&0\\4&0&0&1\end{bmatrix}$$

长度	通路	回路
1	8	1
2	11	3
3	14	1
4	17	3
合计	50	8

- 有向图的可达矩阵

定义 $D=\langle V,E\rangle$为有向图, $V=\{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$, 令

$$p_{ij}=\begin{cases}1, & 若v_i可达v_j, \\ 0, & 否则,\end{cases}$$

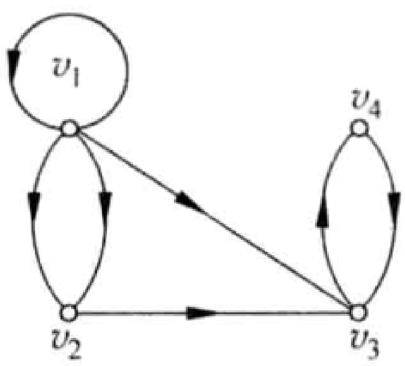
称$(p_{ij})_{n\times n}$为D的可达矩阵, 记作$P(D)$.

性质:

(1) $P(D)$主对角线上的元素恒为1.

(2) D强连通当且仅当$P(D)$的元素全为1.

例:



$$P(D)=\begin{bmatrix}1&1&1&1\\0&1&1&1\\0&0&1&1\\0&0&1&1\end{bmatrix}$$

6.3 图的矩阵表示

- 作业

  P138　5.18

5.18 有向图 D 如图 5-25 所示. 求 D 中在定义意义下长度为 4 的通路总数，并指出其中有多少条是回路？又有几条是 v_3 到 v_4 的通路？

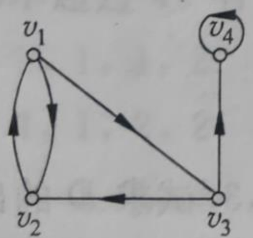


图　5-25

给有向图或无向图G的每条边附加一个实数，G连同附加在边上的实数称为带权图，记作G=<V,E,W>，其中$W=\{w(e)|e\in E\}$，$w(e)$是附加在边e上的实数，称作边e的权。设G_1是带权图G的子图，称$\sum_{e\in E(G_1)} w(e)$为G_1的权，记作$w(G_1)$。当无向边$e=(v_i,v_j)$或有向边$e=<v_i,v_j>$时，$w(e)$常记为w_{ij}。

- 最短路径问题

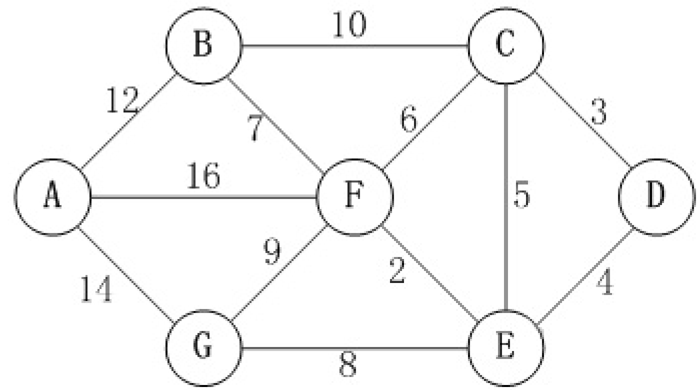
设带权图G=<V,E,W>，直观上把一条边的权看成这条边的长度，通路的长度等于它上面所有边的长度之和，即这条通路的权。设u,v为G中的两个顶点，从u到v的所有通路中权最小的通路称为u到v的最短路径，u到v的最短路径的权称作u到v的距离，记作$d(u,v)$。

最短路径问题：任给一个简单带权图G=<V,E,W>及$u,v\in V$，求u,v之间的最短路径及距离。

6.4 最短路径、关键路径和着色

- Dijkstra 算法示例

例：求右图中从D到A的最短路径



解：

步骤一(初始化)：

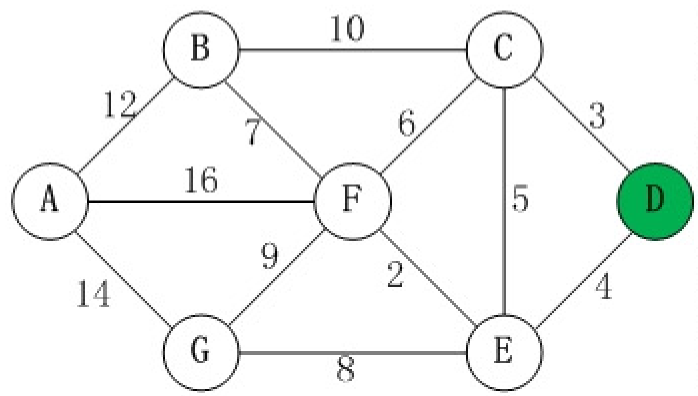
选取顶点D，

默认起点D的距离为0，

且上一个顶点为空，记为λ

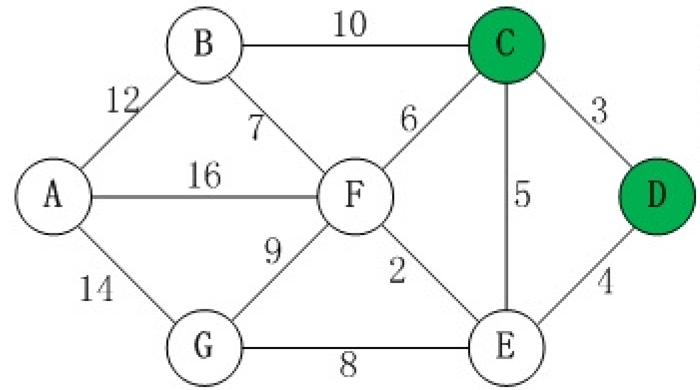
此时P={D(0, λ)}

剩余顶点集为



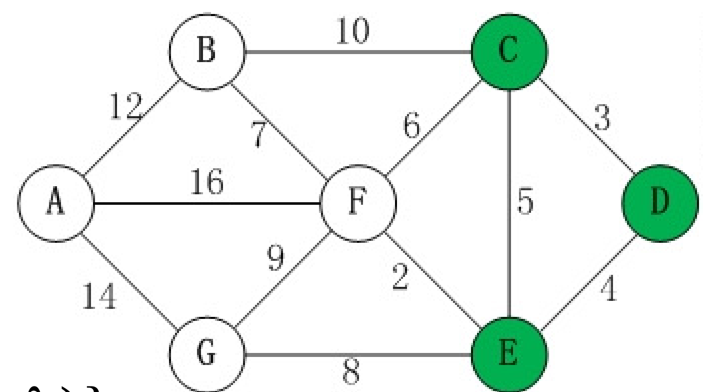
T={A(∞, λ), B(∞, λ), C(∞, λ), E(∞, λ), F(∞, λ), G(∞, λ)}

更新T：T={A(∞, λ), B(∞, λ), C(3, D), E(4, D), F(∞, λ), G(∞, λ)}



步骤二：
选取顶点C，
此时P={D(0, λ), C(3,D)}
剩余顶点集为
T={A(∞, λ), B(∞, λ), E(4, D), F(∞, λ), G(∞, λ)}

更新T：T={A(∞, λ), B(13, C), E(4, D), F(9, C), G(∞, λ)}



步骤三：
选取顶点E，
此时P={D(0, λ), C(3,D), E(4,D)}
剩余顶点集为
T={A(∞, λ), B(13, C), F(9, C), G(∞, λ)}

更新T： T={A(∞, λ), B(13, C), F(6, E), G(12, E)}

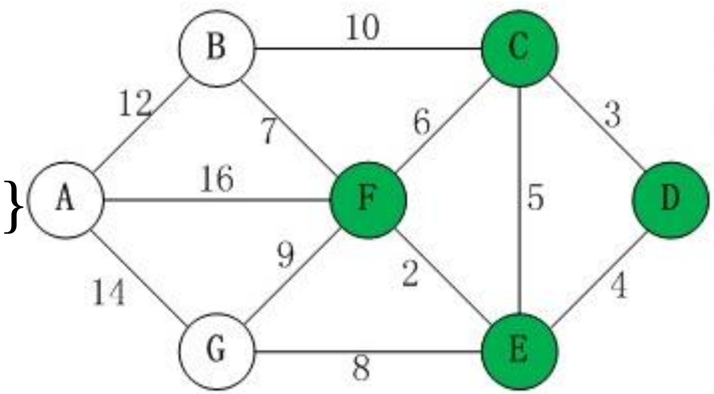
步骤四：

选取顶点F，

此时P={D(0, λ), C(3,D), E(4,D), F(6,E)}

剩余顶点集为

T={A(∞, λ), B(13, C), G(12, E)}



更新T： T={A(22, F), B(13, C或F), G(12, E)}

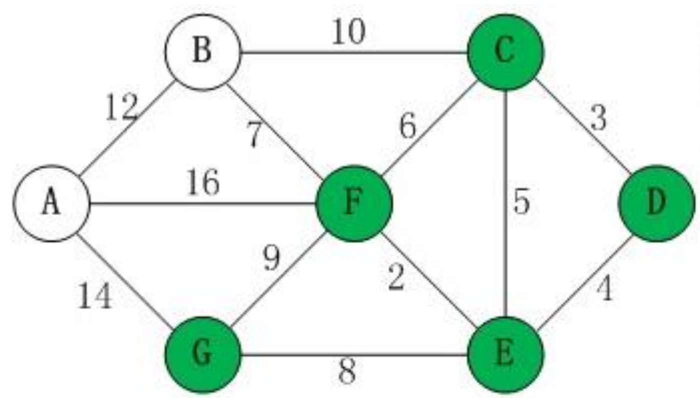
步骤五：

选取顶点G，

此时P={D(0, λ), C(3,D), E(4,D), F(6,E), G(12, E)}

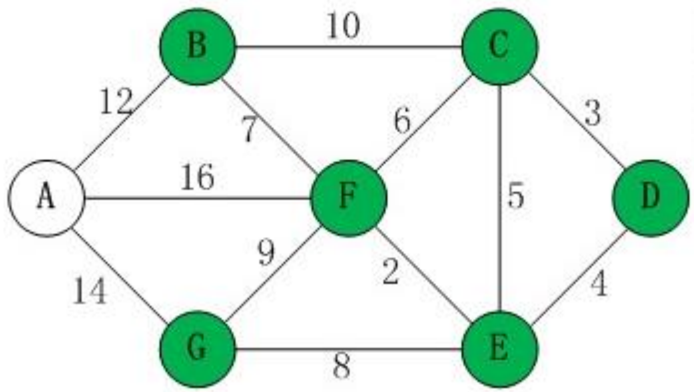
剩余顶点集为

T={A(22, F), B(13, C或F)}



更新T： T={A(22, F), B(13, C或F)}

步骤六：
选取顶点B，
此时P={D(0, λ), C(3,D), E(4,D), F(6,E), G(12, E), B(13, C或F)}
剩余顶点集为
T={A(22, F)}



更新T： T={A(22, F)}
最终P={D(0, λ), C(3,D), E(4,D), F(6,E), G(12, E), B(13, C或F), A(22, F)}

最短路径：
向前追溯：D、E、F、A

主要步骤：
初始化、T中距离和上一顶点的更新、P和T的更新

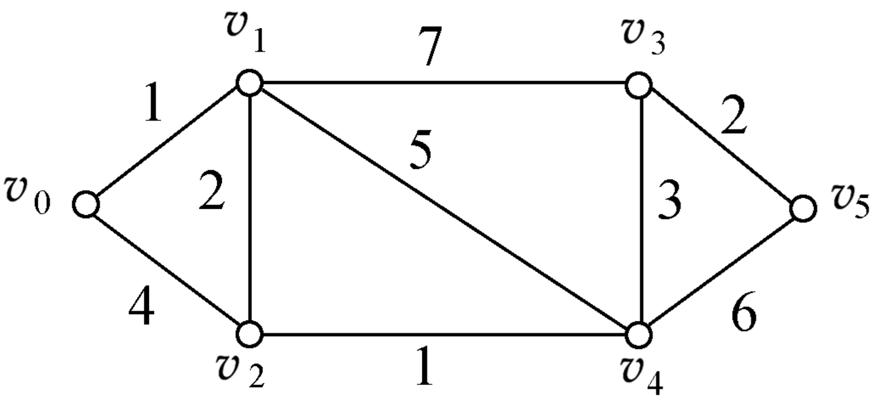
- Dijkstra 算法

1. 令 $l_1 \leftarrow 0, p_1 \leftarrow \lambda, l_j \leftarrow +\infty, p_j \leftarrow \lambda, \ j=2,3,\ldots,n,$
   $P=\{v_1\}, T=V-\{v_1\}, k \leftarrow 1, t \leftarrow 1.$ / λ表示空
2. 对所有的$v_j \in T$且$(v_k,v_j) \in E$
   令$l \leftarrow \min\{l_j, l_k+w_{kj}\}$,
   若$l=l_k+w_{kj}$, 则令$l_j \leftarrow l, p_j \leftarrow v_k$.
3. 求$l_i=\min\{l_j | v_j \in T_t\}$.
   令$P \leftarrow P \cup \{v_i\}, T \leftarrow T-\{v_i\}, k \leftarrow i$.
4. 令$t \leftarrow t+1$,
   若$t<n$, 则转2.

对于有向图，只需在算法中把无向边改成有向边。

例6.4.1

求图中顶点v_0与v_5的最短距离。



解：

t	v_0	v_1	v_2	v_3	v_4	v_5
1	$(0, \lambda)^*$	$(+\infty, \lambda)$	$(+\infty, \lambda)$	$(+\infty, \lambda)$	$(+\infty, \lambda)$	$(+\infty, \lambda)$
2		$(1,v_0)^*$	$(4,v_0)$	$(+\infty, \lambda)$	$(+\infty, \lambda)$	$(+\infty, \lambda)$
3			$(3,v_1)^*$	$(8,v_1)$	$(6,v_1)$	$(+\infty, \lambda)$
4				$(8,v_1)$	$(4,v_2)^*$	$(+\infty, \lambda)$
5				$(7,v_4)^*$		$(10,v_4)$
6						$(9,v_3)^*$

v_0到v_5的最短路径: $v_0v_1v_2v_4v_3v_5$， $d(v_0,v_5)=9$

6.4 最短路径、关键路径和着色

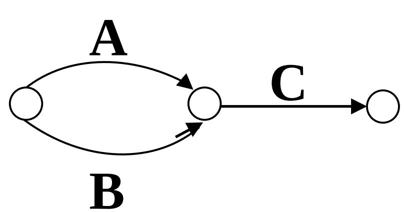
- 关键路径问题

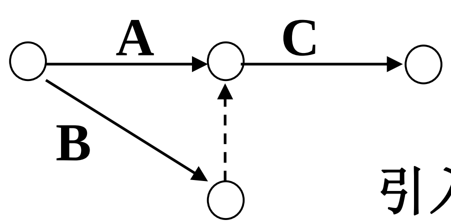
　项目网络图：表示项目的活动之间前后顺序的带权有向图。边表示活动，边的权是该活动的完成时间，边之间的邻接关系与活动之间的前后顺序一致。顶点表示事项（项目的开始和结束、活动的开始和结束）。

　项目网络图应满足下列条件：

　(1) 有一个始点和一个终点。始点的入度为0，表示项目开始；终点的出度为0，表示项目结束。

　(2) 任意两点之间只能有一条边。





引入虚活动

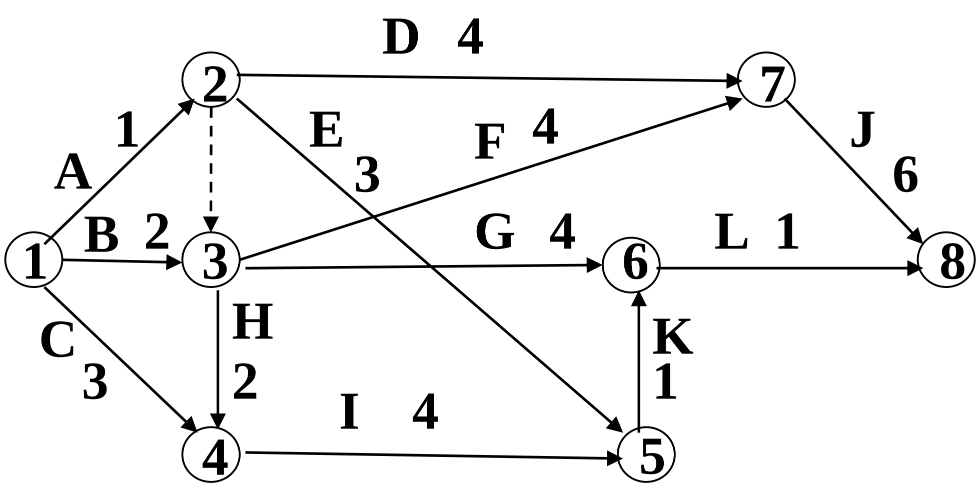
　(3) 没有回路。

　(4) 每一条边的始点的编号小于终点的编号。

- 例6.4.2 某项目由12个活动组成，活动之间的先后关系和完成时间如下表所示。

活动	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
紧前活动	–	–	–	A	A	A,B	A,B	A,B	C,H	D,F	E,I	G,K
时间(天)	1	2	3	4	3	4	4	2	4	6	1	1

解：



- 关键路径问题

关键路径: 项目网络图中从始点到终点的最长路径

关键活动: 关键路径上的活动

设$D=<V,E,W>$, $V=\{1,2,\ldots,n\}$, 1是始点, n是终点.

(1)事项i的最早开始时间$ES(v_i)$: i最早可能开始的时间,即从始点到i的最长路径的长度.

$ES(1)=0$

$ES(i)=\max\{ES(j)+w_{ji} \mid <j,i> \in E\}, \quad i=2,3,\ldots,n$

(2)事项i的最晚完成时间$LF(i)$: 在不影响项目工期的条件下,事项i最晚必须完成的时间.

$LF(n)=ES(n)$

$LF(i)=\min\{LF(j)-w_{ij} \mid <i,j> \in E\}, \quad i=n-1,n-2,\ldots,1$

(1) 事项i的最早开始时间$ES(v_i)$

(2) 事项i的最晚完成时间$LF(i)$

(3) 活动$<i,j>$的最早开始时间$ES(i,j)$: $<i,j>$最早可能开始时间.

(4) 活动$<i,j>$的最早完成时间$EF(i,j)$: $<i,j>$最早可能完成时间.

(5) 活动$<i,j>$的最晚开始时间$LS(i,j)$: 在不影响项目工期的条件下, $<i,j>$最晚必须开始的时间.

(6) 活动$<i,j>$的最晚完成时间$LF(i,j)$: 在不影响项目工期的条件下, $<i,j>$最晚必须完成的时间.

(7) 活动$<i,j>$的缓冲时间$SL(i,j)$:

$$SL(i,j)= LS(i,j)-ES(i,j)=LF(i,j)-EF(i,j)$$

显然, $ES(i,j)= ES(i)$, $EF(i,j)= ES(i)+w_{ij}$,

$LF(i,j)=LF(j)$, $LS(i,j)=LF(j)-w_{ij}$,

6.4 最短路径、关键路径和着色

例：对例6.4.3的项目计算如下:

事项的最早开始时间

$ES(1)=0$

$ES(2)=\max\{0+1\}=1$

$ES(3)=\max\{0+2,1+0\}=2$

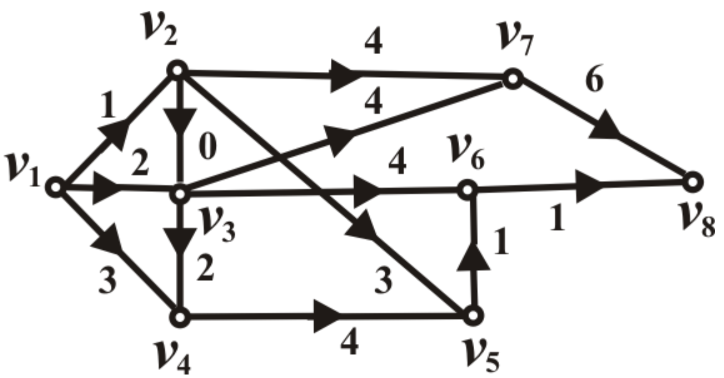
$ES(4)=\max\{0+3,2+2\}=4$

$ES(5)=\max\{1+3,4+4\}=8$

$ES(6)=\max\{2+4,8+1\}=9$

$ES(7)=\max\{1+4,2+4\}=6$

$ES(8)=\max\{9+1,6+6\}=12$



事项的最晚完成时间

$LF(8)=12$

$LF(7)=\min\{12-6\}=6$

$LF(6)=\min\{12-1\}=11$

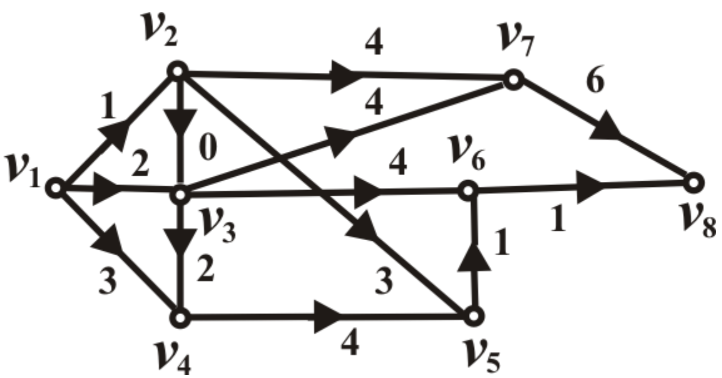
$LF(5)=\min\{11-1\}=10$

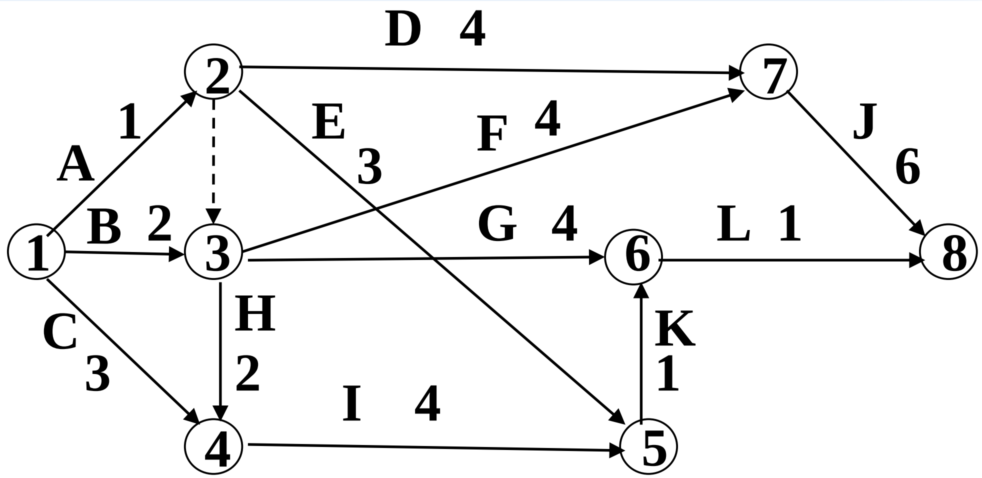
$LF(4)=\min\{10-4\}=6$

$LF(3)=\min\{6-2,11-4,6-4\}=2$

$LF(2)=\min\{2-0,10-3,6-4\}=2$

$LF(1)=\min\{2-1,2-2,6-3\}=0$





活动	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
ES	0	0	0	1	1	2	2	2	4	6	8	9
EF	1	2	3	5	4	6	6	4	8	12	9	10
LS	1	0	3	2	7	2	7	4	6	6	10	11
LF	2	2	6	6	10	6	11	6	10	12	11	12
SL	1	0	3	1	6	0	5	2	2	0	2	2

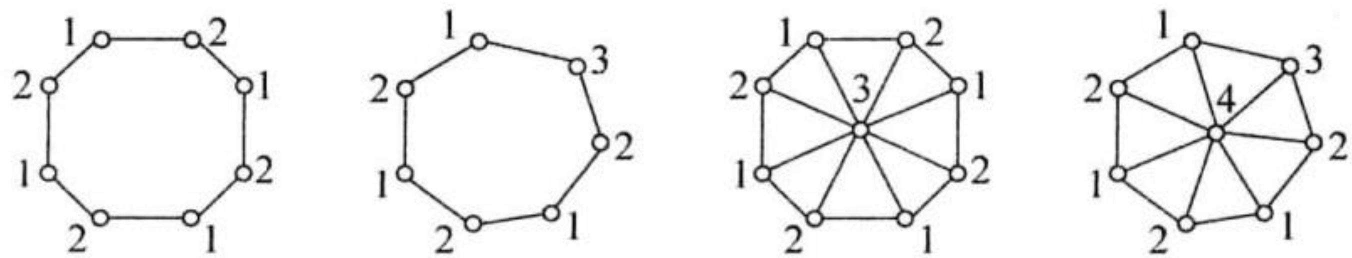
项目的总工期为12天，活动的相关时间列于上表。关键活动是B、F和J，关键路径是1-3-7-8.

- **着色问题**

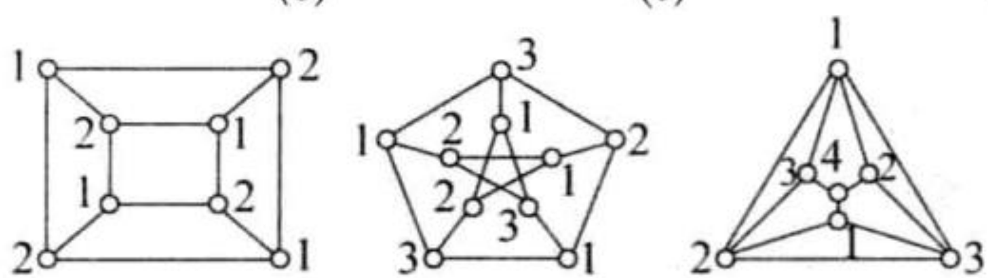
定义 6.16 设无向图G无环, 对G的每个顶点涂一种颜色，使相邻的顶点涂不同的颜色，称为图G的一种点着色,简称着色。若能用k种颜色给G的顶点着色，则称G是k-可着色的。

图的着色问题: 用尽可能少的颜色给图着色。

例：



(a) (b) (c) (d)



(a) (b) (c)

- 着色问题应用：有冲突的情况下进行资源分配

(1) 有n项工作, 每项工作需要一天的时间完成. 有些工作由于需要相同的人员或设备不能同时进行, 问至少需要几天才能完成所有的工作?

(2) 计算机有k个寄存器, 现正在编译一个程序, 要给每一个变量分配一个寄存器. 如果两个变量要在同一时刻使用, 则不能把它们分配给同一个寄存器.如何给变量分配寄存器?

(3) 无线交换设备的波长分配. 有n台设备和k个发射波长, 要给每一台设备分配一个波长. 如果两台设备靠得太近, 则不能给它们分配相同的波长, 以防止干扰. 如何分配波长?

例6.4.3 学生会下设6个委员会, 第一委员会={张, 李, 王}, 第二委员会={李, 赵, 刘}, 第三委员会={张, 刘, 王}, 第四委员会={赵, 刘, 孙}, 第五委员会={张, 王}, 第六委员会={李, 刘, 王}. 每个月每个委员会都要开一次会, 为了确保每个人都能参加他所在的委员会会议, 这6个会议至少要安排在几个不同时间段?

解:

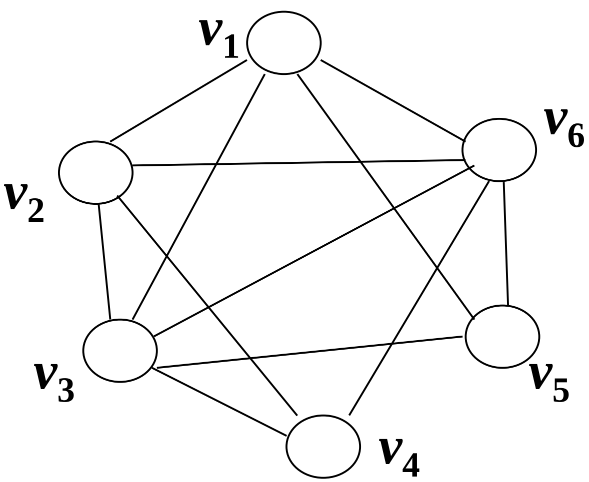
至少要4个时段

第1时段:一,四

第2时段:二,五

第3时段:三

第4时段:六



- **作业**

P138 5.19

P139 5.25

5.19 求图 5-26 中从 b 到其余各顶点的最短路径和距离.

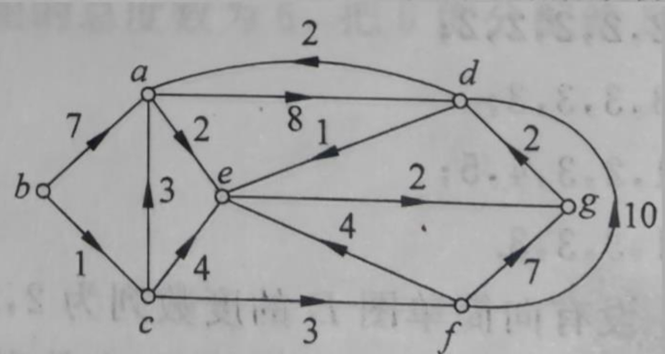


图 5-26

5.25 在图 5-28 所示的 6 个图中,强连通图为 $\boxed{A}$,单向连通图为 $\boxed{B}$.

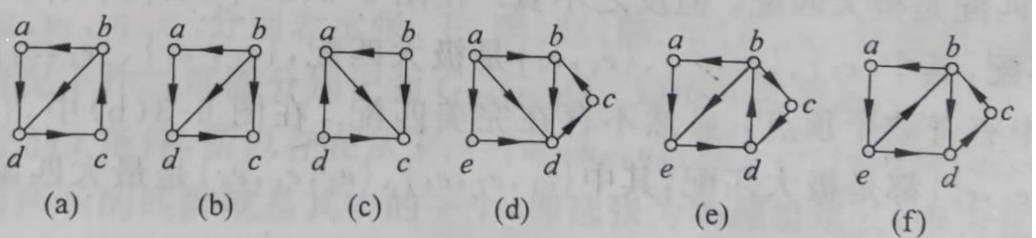


图 5-28

第三部分 图论初步

7.1 二部图

- 二部图

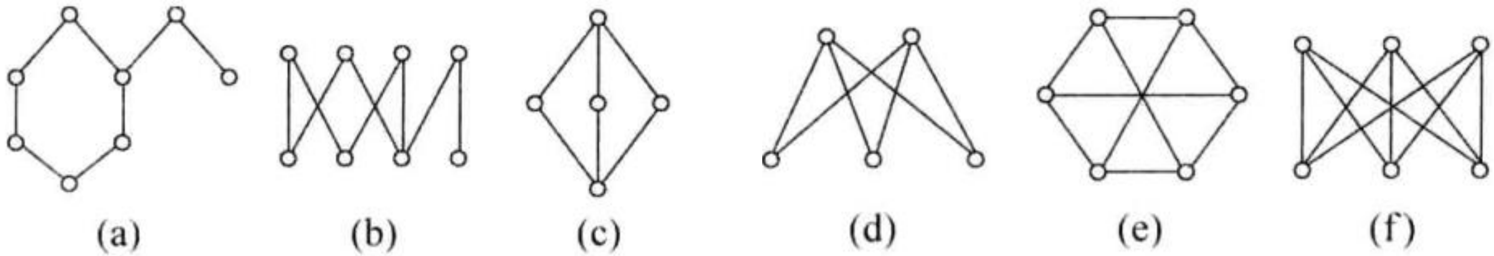
定义7.1 若能将无向图$G=<V,E>$的顶点集V划分成两个不相交的非空子集V_1 和 V_2，使得G中的每条边的两个端点一个属于V_1，另一个属于V_2，则称G为二部图（或偶图）。称V_1和V_2为互补顶点子集，此时可将G记为$G=<V_1,V_2,E>$。

若V_1中每个顶点都与V_2中每个顶点均有且仅有一条边相关联，则称二部图G为完全二部图（或完全偶图）。当$|V_1|=n$，$|V_2|=m$，完全二部图G记为$K_{n,m}$。

定理7.1 一个无向图$G=<V,E>$是二部图当且仅当G中没有长度为奇数的回路。

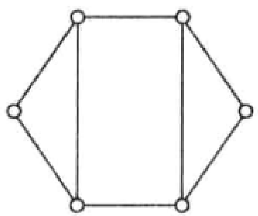
7.1 二部图

例：



(a)是二部图，可以把它画成图(b)的样子。(a)和(b)同构。通常都把二部图画成图(b)的样子，把互补顶点子集分列两行。图(c)和图(d)是$K_{2,3}$，图(e)和图(f)是$K_{3,3}$。

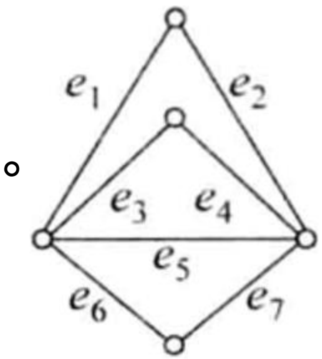
例：



上图不是二部图，因为它含有三角形，即长度为3的回路。

- 匹配

定义7.2 设无向图$G=<V,E>$，$M \subseteq E$，



若M中任意两条边均不相邻，则称M为G中的匹配。

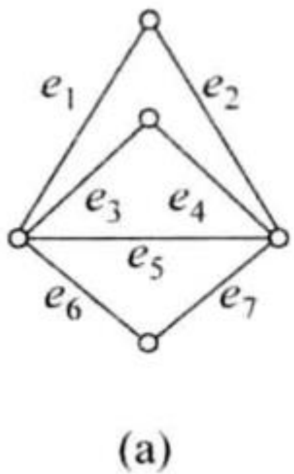
若在M中再加入任何1条边就都不是匹配了，则称M为极大匹配。

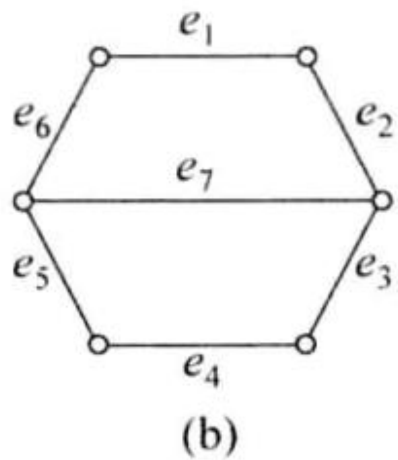
边数最多的匹配称为最大匹配，最大匹配中的边的条数称为G的匹配数，记为$\beta_1(G)$，简记为β_1。

设M为G中一个匹配，$v \in V(G)$，若存在M中的边与v关联，则称v为M的饱和点，否则称v为M的非饱和点。若G中每个顶点都是M饱和点，则称M为完美匹配。

- 匹配

例：





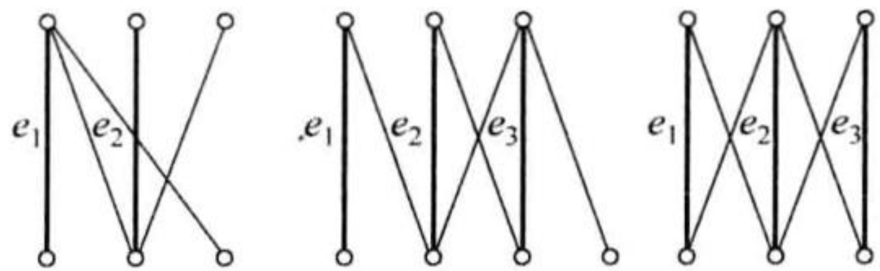
图(a)中$\{e_1\}$、$\{e_1, e_7\}$、$\{e_5\}$、$\{e_4, e_6\}$等都是图中的匹配，其中$\{e_1, e_7\}$、$\{e_5\}$、$\{e_4, e_6\}$是极大匹配，$\{e_1, e_7\}$、$\{e_4, e_6\}$是最大匹配，匹配数是$\beta_1 =2$，图中有奇数个顶点显然不存在完美匹配。

图(b)中, $\{e_2, e_5\}$、$\{e_3 , e_6\}$、$\{e_1, e_7 , e_4\}$、$\{e_2, e_4 , e_6\}$都是极大匹配，其中$\{e_1, e_7 , e_4\}$、$\{e_2, e_4 , e_6\}$是最大匹配。同时也是完美匹配，匹配数为3.

定义7.3 设$G=<V_1,V_2,E>$为二部图, $|V_1|\le|V_2|$, M是G中一个最大匹配, 若$|M|=|V_1|$，则称M为G中V_1到V_2的完备匹配。

当$|V_1|=|V_2|$时, 完备匹配是完美匹配。

例：



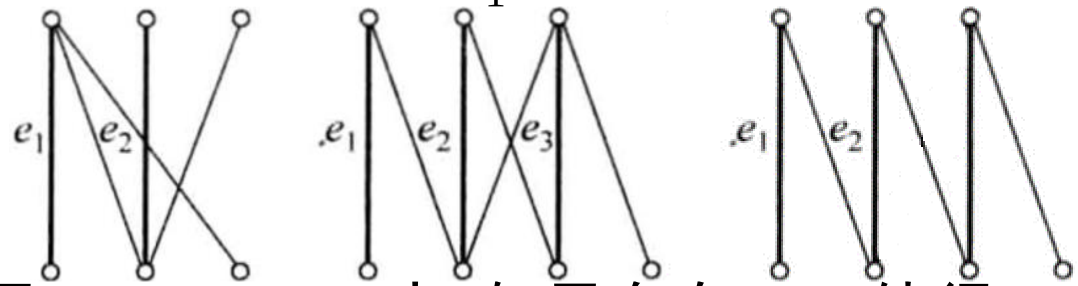
(a) G_1 (b) G_2 (c) G_3

上图中，$\{e_1, e_2\}$为G_1中的最大匹配，G_1中不存在完备匹配，更无完美匹配。G_2中，$\{e_1, e_2, e_3\}$为完备匹配，但G_2中无完美匹配。在G_3中，$\{e_1, e_2, e_3\}$为完备匹配，同时是完美匹配。

7.1 二部图

定理7.2 (Hall定理) 设二部图$G=<V_1,V_2,E>$中，$|V_1|\le|V_2|$. G中存在从V_1到V_2的完备匹配当且仅当V_1中任意k 个顶点至少邻接V_2中的k个顶点。

——相异性条件



定理7.3 二部图$G=<V_1,V_2,E>$中, 如果存在$t>0$, 使得

(1) V_1中每个顶点至少关联 t 条边,

(2) V_2中每个顶点至多关联t条边,

则G中存在V_1到V_2的完备匹配.　　　　——t 条件

证明：由(1)知，V_1中任意k个顶点至少关联kt条边，由(2)知这kt条边至少关联V_2中的k个顶点，即V_1中任意k个顶点至少邻接V_2中的k个顶点. 由Hall定理, G中存在V_1到V_2的完备匹配.

7.1 二部图

- 例7.1.1 某课题组要从a, b, c, d, e 5人中派3人分别到上海、广州、香港去开会. 已知a只想去上海，b只想去广州，c, d, e都表示想去广州或香港. 问该课题组在满足个人要求的条件下，共有几种派遣方案？

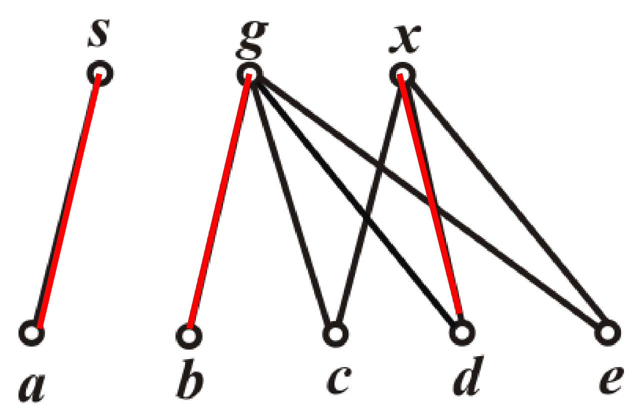
解：令$G=<V_1,V_2,E>$, 其中$V_1=\{s, g, x\}$, $V_2=\{a, b, c, d, e\}$,

$E=\{(u,v) \mid u\in V_1, v\in V_2, v\text{想去}u\}$,

其中s, g, x分别表示上海、广州和香港.

G 满足相异性条件，红边是一个完备匹配, 对应的派遣方案:

a–上海, b–广州, d–香港



7.1 二部图

- 作业

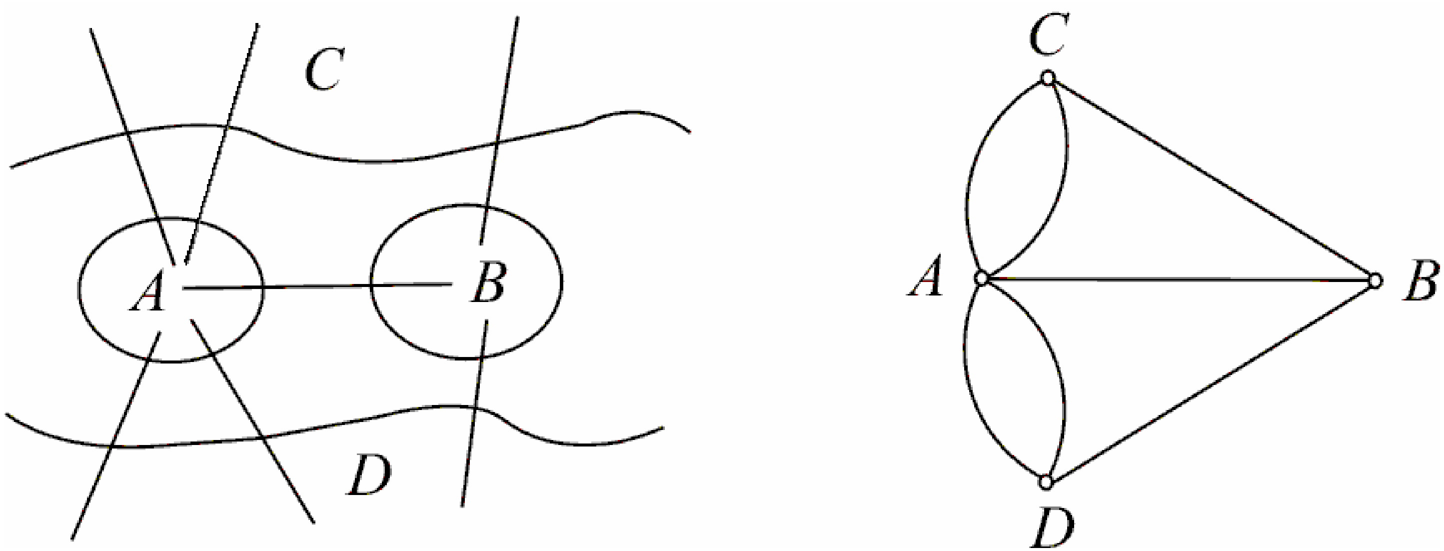
  P154　6.1

  　　　6.4

6.1 画出完全二部图 $K_{1,3}$、$K_{2,3}$ 和 $K_{2,2}$.

6.4 完全二部图 $K_{r,s}$ 的匹配数 β_1 为多少?

- 哥尼斯堡七桥问题



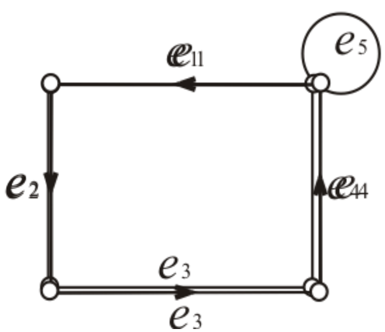
一个人怎样不重复地走完七座桥？

- 欧拉回路与欧拉图

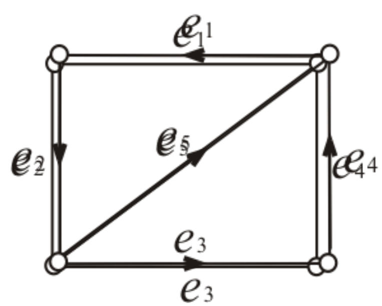
  定义7.4

  经过图（无向图或有向图）中每条边一次且仅一次并且行遍图中每个顶点的回路（通路），称为欧拉回路（欧拉通路）。

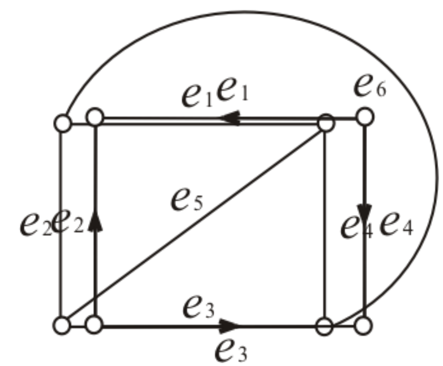
  存在欧拉回路的图称为欧拉图，存在欧拉通路，但无欧拉回路的图称为半欧拉图。



欧拉图



半欧拉图



不是

7.2 欧拉图

- 欧拉图的判别法

定理7.4

无向图G有欧拉回路，当且仅当G是连通图且无奇度顶点。无向图G有欧拉通路、但无欧拉回路，当且仅当G是连通图且恰有两个奇度顶点。这两个奇度顶点是欧拉通路的端点。

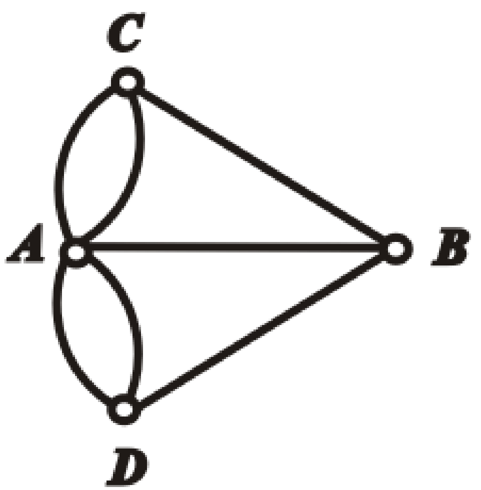
定理7.5

有向图D有欧拉回路，当且仅当D是连通的且每个顶点的入度都等于出度。有向图D有欧拉通路、但无欧拉回路，当且仅当D是连通的，且除了两个顶点外，其余顶点的入度均等于出度。这两个特殊的顶点中，一个顶点的入度比出度大1，另一个顶点的入度比出度小1。任何欧拉通路以前一个顶点为终点，以后一个顶点为始点。

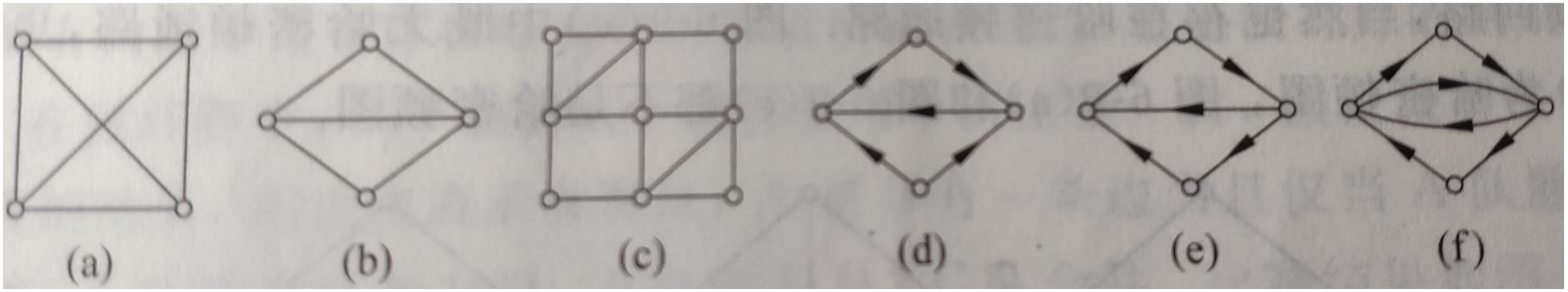
- 哥尼斯堡七桥问题

　从图可知，*A*, *B*, *C*, *D*四个顶点，全部都是奇度顶点，不存在欧拉通路，更不存在欧拉回路。

　哥尼斯堡七桥问题无解，任何人都不可能不重复地走完七座桥，最后回到出发地点。

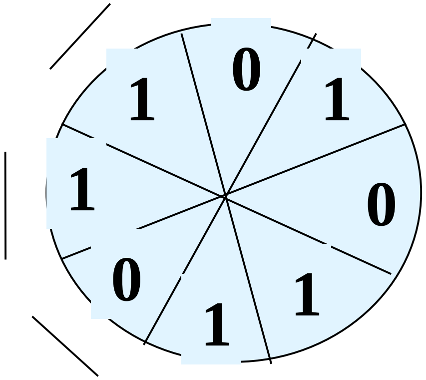


例：



例7.2.1

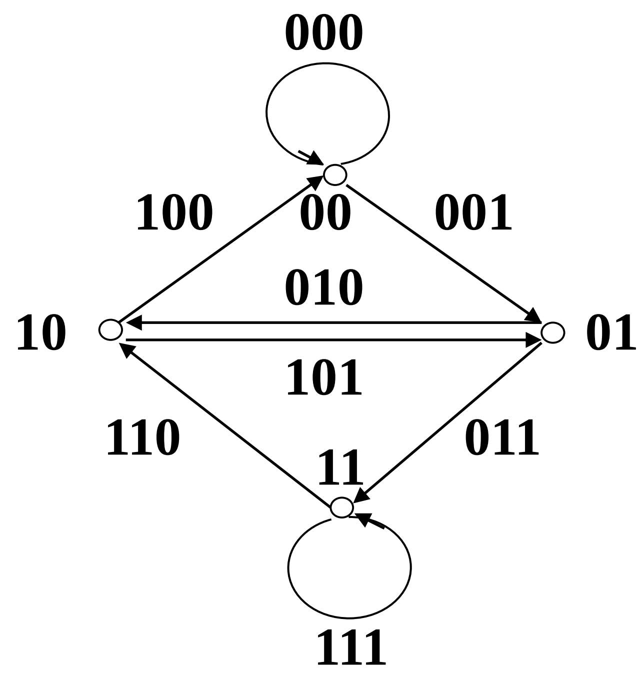
设旋转磁鼓分成8个扇区， 每个扇区标记一个0或1，有3个探测器能够读出连续的3个扇区的标记。如何赋给扇区标记，使得能够根据探测器的读数确定磁鼓的位置。为了能够根据读数确定磁鼓的位置，必须构造一个由8个0和1组成的圆环，使得圆环上连续3个数字的序列都不相同。



7.2 欧拉图

解：

构造一个4阶有向图， 8条边的标记是不同的，图中存在一条欧拉回路:000, 001, 011, 111, 110, 101, 010, 100。在这条回路上连续3条边的标记的第一位恰好与第一条边的标记相同。顺着这条回路取每一条边标记的第一位得到00011101，按照这个顺序标记磁鼓的扇区。



7.2 欧拉图

- 作业

P154　6.7

6.7 图 6-28 所示各图中哪些是欧拉图?

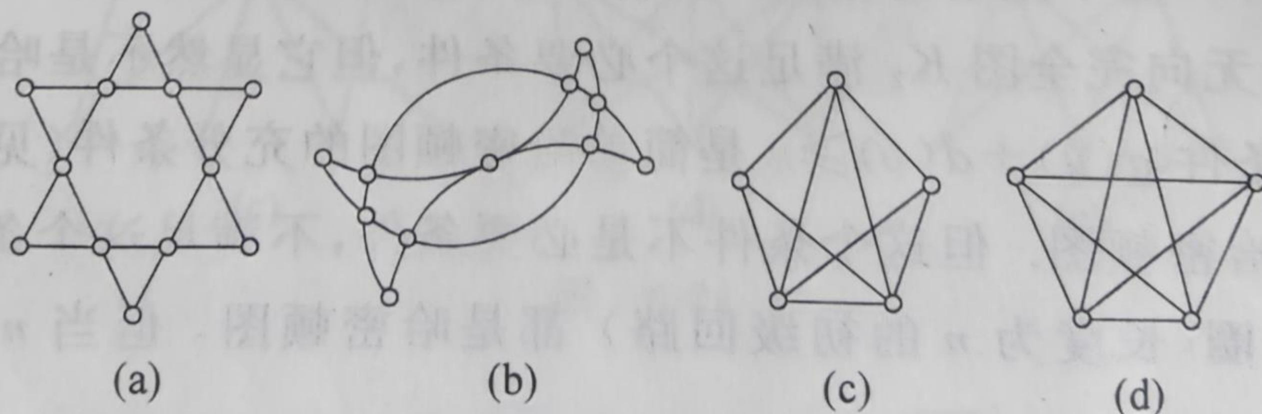
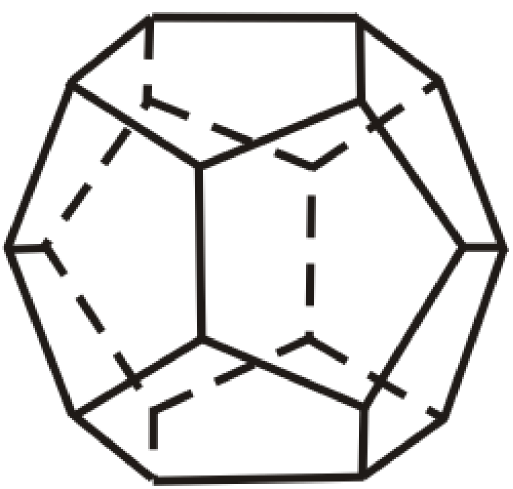


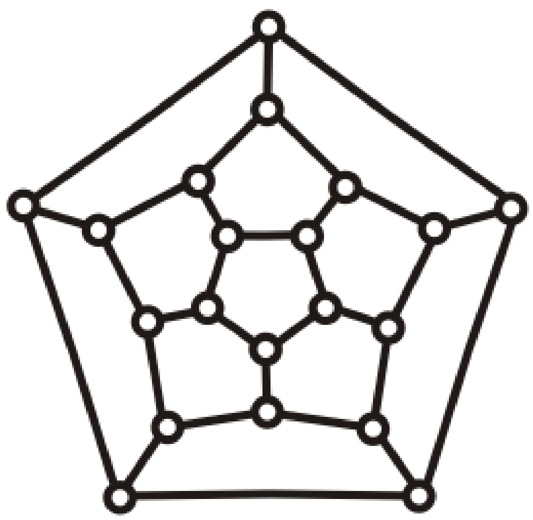
图　6-28

7.3 哈密顿图

- 哈密顿周游世界问题

　　每个顶点是一个城市，有20个城市，要求从一个城市出发，恰好经过每一个城市一次，回到出发点。

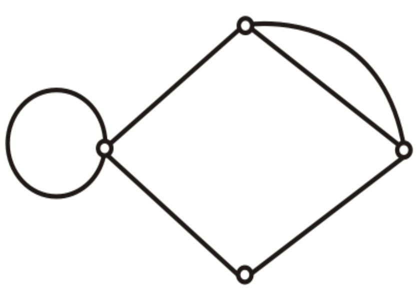




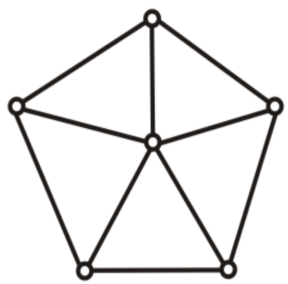
- 哈密顿图的定义

  定义7.5

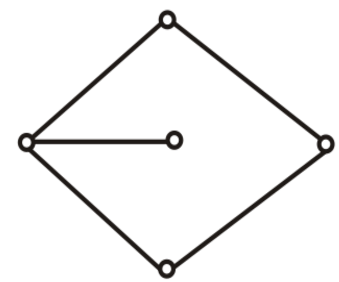
  经过图中每个顶点一次且仅一次的通路称为哈密顿通路，闭合的哈密顿通路称为哈密顿回路。存在哈密顿回路的图称为哈密顿图，具有哈密顿通路而无哈密顿回路的图称为半哈密顿图。



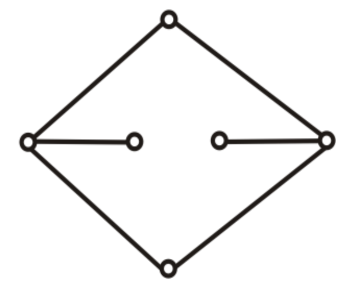
哈密顿图



哈密顿图



半哈密顿图



不是

7.3 哈密顿图

- 无向哈密顿图的一个必要条件

定理7.6 设无向图G=<V,E>是哈密顿图，V_1是V的任意非空子集，则

$$p(G-V_1) \le |V_1|$$

证明:

设C为G中一条哈密顿回路。设V_1中的顶点把C分成r段，则: $p(C-V_1) = r \le |V_1|$。又因为$C \subseteq G$，故 $p(G-V_1) \le p(C-V_1) \le |V_1|$。

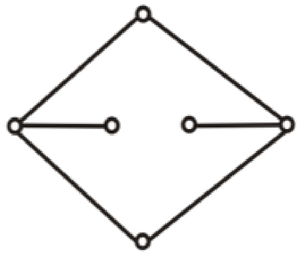
推论:

设无向图G=<V,E>中有哈密顿通路，V_1是V的任意非空子集，则: $p(G-V_1) \le |V_1| + 1$。

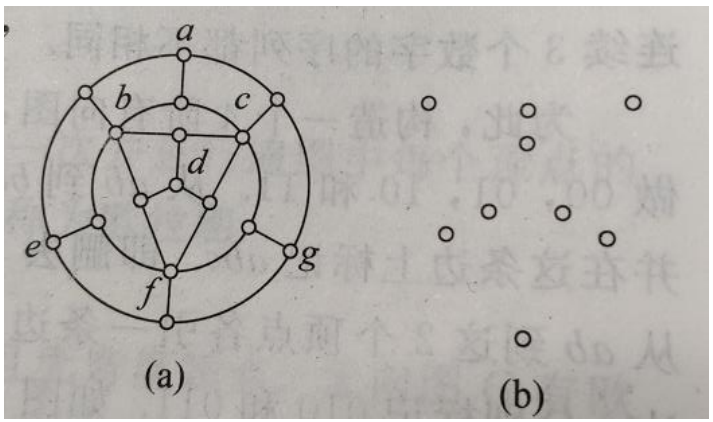
利用定理7.6及推论可以判断某些图不是哈密顿图和不存在哈密顿通路。

7.3 哈密顿图

例：



$p(G-V_1)=4$



$p(G-V_1)=9$

n阶无向连通简单图,G中若有割点, 则G不是哈密顿图.

证：设v为割点, 则$p(G-v)\geq 2>|\{v\}|=1$. G不是哈密顿图.

7.3 哈密顿图

- 无向哈密顿图的一个充分条件

定理7.7

设G是$n(n \geq 3)$阶无向简单图，如果G中任何一对不相邻的顶点的度数之和都大于等于$n-1$，则G中存在哈密顿通路。如果G中任何一对不相邻的顶点的度数之和都大于等于n，则G中存在哈密顿图。

- 有向图的哈密通路

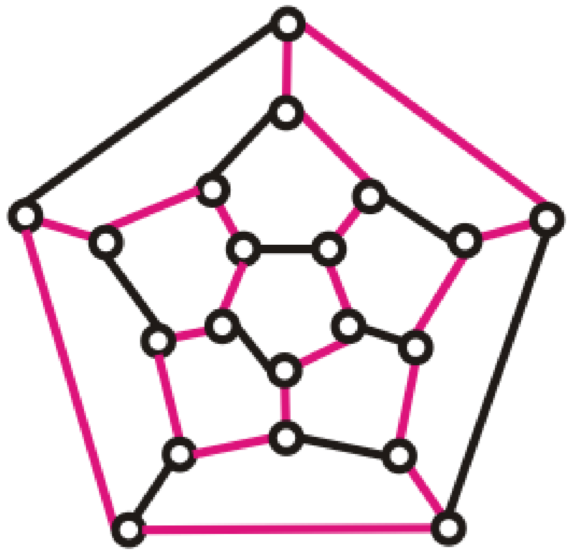
定理7.8

在$n(n \geq 2)$阶有向图$D=<V,E>$中，如果所有有向边均用无向边代替，所得无向图含有生成子图K_n，则有向图D中存在哈密顿通路。

7.3 哈密顿图

- 判断是否是哈密顿图的可行方法
- 观察出一条哈密顿回路

  右图(周游世界问题)中红边给出一条哈密顿回路，故它是哈密顿图。



- 满足定理7.7或定理7.8的充分条件

- 到目前为止，人们还没有找到比定义更好的便于判断一个图是否存在哈密顿回路或哈密顿通路的充要条件。

- 例7.3.1 某次国际会议8人参加，已知每人至少与其余7人中的4人有共同语言，问服务员能否将他们安排在同一张圆桌就座，使得每个人都能与两边的人交谈？

  解：

  作无向图$G=<V,E>$，其中$V=\{v|v$为与会者$\}$，

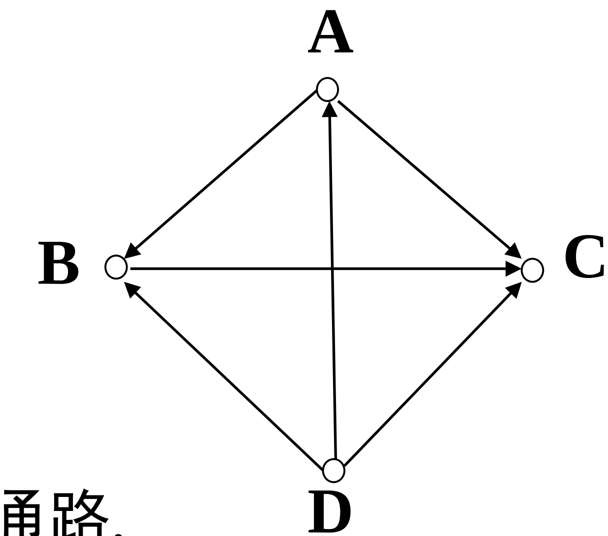
  $E=\{(u,v) \mid u,v\in V$， u与v有共同语言，且$u\neq v\}$。

  G为简单图。根据条件，$\forall v\in V$，$d(v)\geq 4$。于是，$\forall u,v\in V$，有$d(u)+d(v)\geq 8$。由定理可知G为哈密顿图。服务员在G中找一条哈密顿回路C，按C中相邻关系安排座位即可。

7.3 哈密顿图

- 竞赛图：任意两个顶点之间恰好有一条有向边

在循环赛中, n个参赛队中的任意两个队比赛一次，假设没有平局，用有向图描述比赛结果:顶点表示参赛队，A到B有一条边当且仅当A队胜B队。



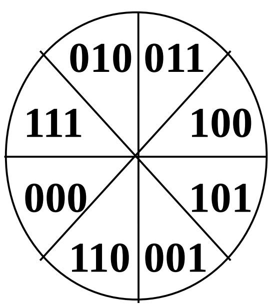
根据定理7.8，竞赛图中一定有哈密顿通路, 当然也可能有哈密顿回路。当没有哈密顿回路时, 通常只有一条哈密顿通路, 这条通路给出参赛队的唯一名次。

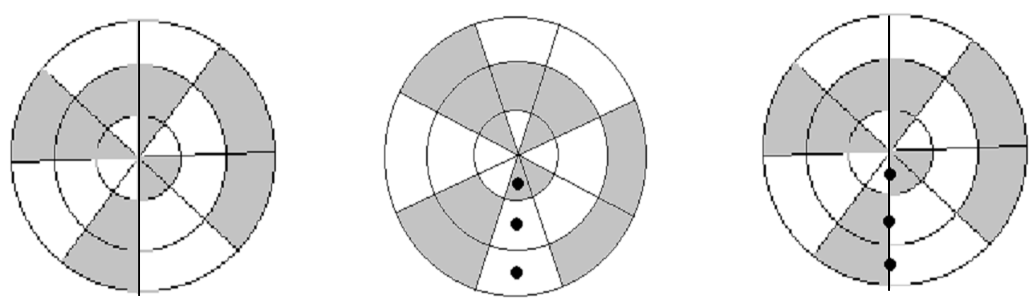
例：DABC是一条哈密顿通路, 它没有哈密顿回路, 比赛结果是D第一, A第二, B第三, C第四。

例7.3.2 格雷码

为了确定圆盘停止旋转后的位置，把圆盘划分成2^n个扇区，每个扇区分配一个n位0-1串。要用某种电子装置读取扇区的赋值。当圆盘停止旋转后，如果电子装置处于一个扇区的内部，它将能够正确的读出这个扇区的赋值，如果电子装置恰好处于两个扇区的边界上，就可能出问题。

如何赋值，才能将可能出现的误差减少到最小？





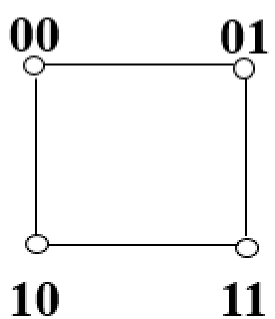
7.3 哈密顿图

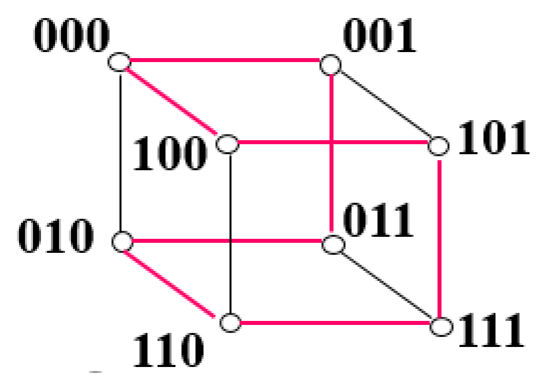
- 格雷码

把n位0-1串排成一个序列，相邻的两个以及最后一个和第一个之间只有一位不同，这样的序列称为格雷码。

例： 000, 001, 011, 010, 110, 111, 101, 100是一个格雷码。

构造n维立方体图: 2^n个顶点, 每个顶点表示一个n位串, 两个顶点之间有一条边当且仅当它们的n位串仅相差一位。当$n \geq 2$时, 图中一定存在哈密顿回路。





- 作业

P154 6.10

P156 6.27

6.10 画一个无向图，使它：

(1) 既是欧拉图，又是哈密顿图；

(2) 是欧拉图，而不是哈密顿图；

(3) 是哈密顿图，而不是欧拉图；

(4) 既不是欧拉图，也不是哈密顿图.

6.27 (1) 完全图 $K_n(n\geq 1)$都是欧拉图. 这个命题为$\boxed{A}$.

(2) 完全图 $K_n(n\geq 1)$都是哈密顿图. 这个命题为$\boxed{B}$.

(3) 完全二部图 $K_{n,m}(n\geq 1,m\geq 1)$都是欧拉图. 这个命题为$\boxed{C}$.

(4) 完全二部图 $K_{n,m}(n\geq 1,m\geq 1)$都是哈密顿图. 这个命题为$\boxed{D}$.

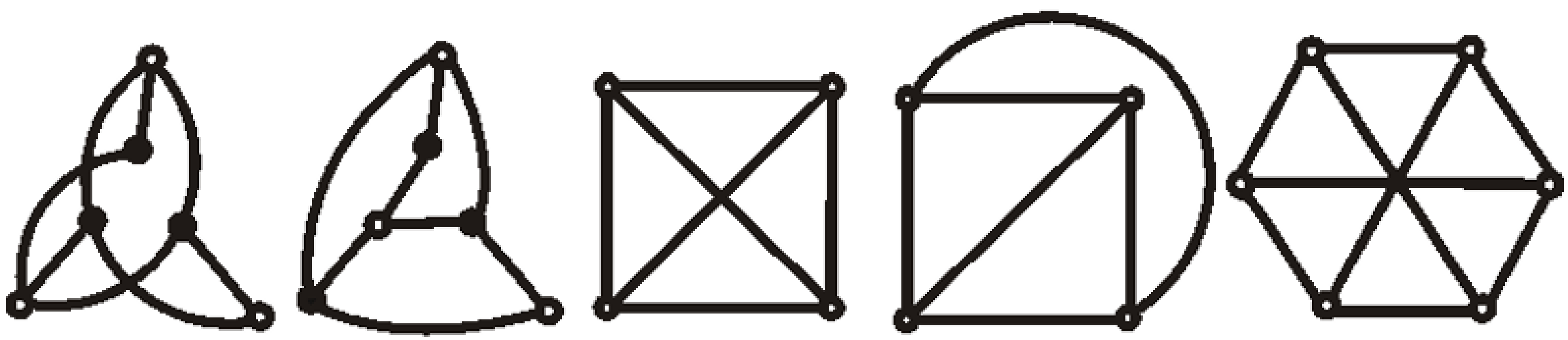
供选择的答案

A、B、C、D：① 真；② 假.

● 平面图和平面嵌入

定义7.6 如果图G能画在平面上使得除顶点处外没有边交叉出现，则称G是平面图。画出的这种不出现边交叉的图称为G的一个平面嵌入。没有平面嵌入的图称作非平面图。

例：下图中(1)~(4)是平面图，(2)是(1)的平面嵌入，(4)是(3)的平面嵌入。(5)是非平面图。



(1)　(2)　(3)　(4)　(5)

7.4 平面图

- 平面图和平面嵌入

　今后称一个图是平面图, 可以是指定义中的平面图，又可以是指平面嵌入，视当时的情况而定。当讨论的问题与图的画法有关时，是指平面嵌入。

- 平面图的面与次数

定义7.7 设G是一个平面嵌入:

G的面: 由G的边将平面划分成的每一个区域

无限面(外部面): 面积无限的面, 用R_0表示

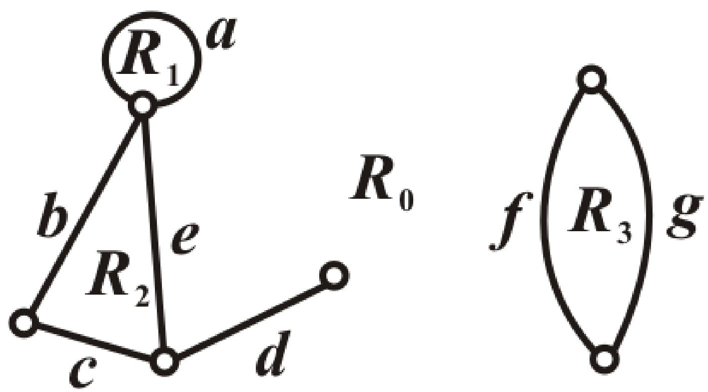
有限面(内部面): 面积有限的面, 用$R_1, R_2, \ldots, R_k$表示

面R_i的边界: 包围R_i的所有边构成的回路组

面R_i的次数: R_i边界的长度，用$\deg(R_i)$表示

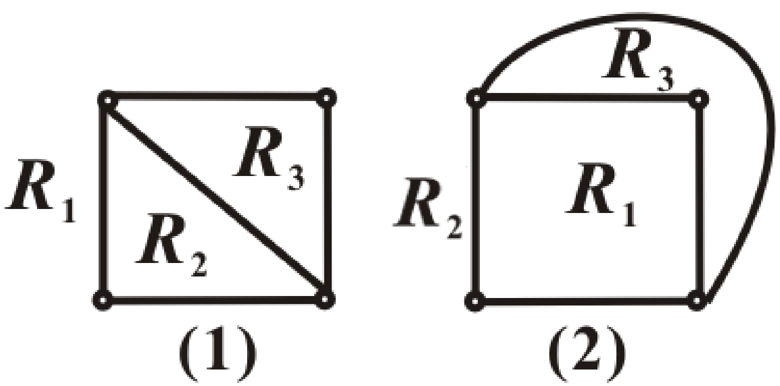
7.4 平面图

- **例7.4.1** 分别计算下图各面的次数。



解：

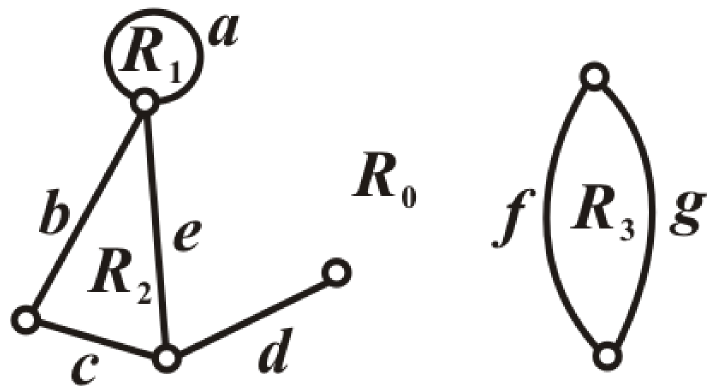
deg(R_1)=1,deg(R_2)=3,
deg(R_3)=2, deg(R_0)=8。



例：左边2个图是同一个平面图的平面嵌入。R_1在(1)中是外部面，在(2)中是内部面；R_2在(1)中是内部面在(2)中是外部面。

- 平面图的面与次数

定理7.9　平面图的所有面的次数之和等于边数的2倍。



证明：

每条边可能在两个面的公共边界上，也可能只在一个面的边界上。当在两个面的公共边界上时，在每个面的边界上这条边只出现一次，在计算总的次数时计算两次。而当只在一个面的边界上时，它出现2次，在计算总的次数时也计算两次。所以所有面的次数之和等于边数的两倍。

● 极大平面图与极小非平面图

定义7.8 设G为一个简单平面图，如果在G中任意不相邻的两个顶点之间再加一条边，所得图为非平面图，则称G为极大平面图。

若在非平面图G中任意删除一条边，所得图为平面图，则称G为极小非平面图。

极大平面图必连通，极小非平面图必为简单图。

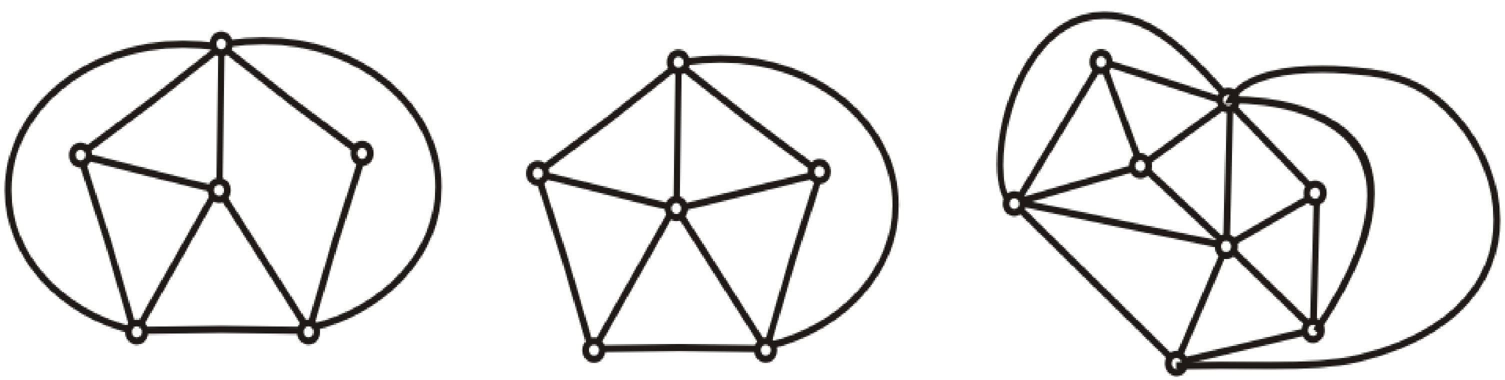
例： K_1, K_2, K_3, K_4都是极大平面图(它们已无不相邻顶点)。
K_5若删去一条边是极大平面图。
$K_5, K_{3,3}$是极小非平面图。

注意：$K_{3,3}$删去一条边不是极大平面图

- 极大平面图与极小非平面图

定理7.10　$n(n\geq3)$阶简单平面图是极大平面图当且仅当它连通且每个面的次数都为3。

例： 下图是否是极大平面图?



不是　　　不是　　　是

- 欧拉公式

定理7.11（欧拉公式） 设G为n阶m条边r个面的连通平面图，则有：

$$n - m + r = 2.$$

证明：对边数m做归纳证明。

(1) m=0, G为孤立点，此时n =1, r = 1, 结论自然成立。

(2) 设m=k–1(k≥0)时结论成立, 要证明m=k时结论成立:

若G中至少有一个1度顶点。设v是1度顶点，删除v，得$G'=G-\{v\}$，则G'是连通的，G'中有$n'=n-1$个顶点，$m'=m-1$条边，$r'=r$，由归纳假设，$n'-m'+r'=2$，

即 $$(n-1)-(m-1)+r=2$$

整理后得， $$n-m+r=2$$

7.4 平面图

证明（续）：

若G中所有顶点的度数大于等于2，则必有初级回路。设C是一初级回路，在C上任取一条边e，令$G' = G - \{e\}$，由于e在C上。所以G'仍连通。在G'中，$n' = n$，$m' = m - 1$，$r' = r - 1$，由归纳假设得到

$$n - (m - 1) + (r - 1) = 2$$

整理后得，$n - m + r = 2$

欧拉公式可推广到非连通的平面图。这时，n、m、r之间的关系还与连通分支数p有关。

- 推论（欧拉公式的推广）

  设G是有 p ($p \geq 2$) 个连通分支的平面图, 则:

$$n - m + r = p + 1$$

证明:

设平面图G有p个连通图分支$G_1, G_2, \ldots, G_p$, G_n有n_i个顶点，m_i条边， r_i个面，由欧拉公式，

$$n_i - m_i + r_i = 2 \quad i = 1,2,\ldots,p$$

显然，$n = \sum_{i=1}^{p} n_i$, $m = \sum_{i=1}^{p} m_i$。注意到每个G_i有一个外部面，而G也是一个外部面，故 $r = \sum_{i=1}^{p} r_i - p + 1$。

从而

$$n - m + r = 2p - p + 1 = p + 1$$

- 平面图的性质

定理7.12 设G为n阶m条边的连通平面图, 每个面的次数不小于l ($l \geq 3$), 则:

$$m \leq \frac{l}{l-2}(n-2)$$

设G为有 p ($p \geq 2$) 个连通分支的平面图, 且每个面的次数不小于 l ($l \geq 3$), 则

$$m \leq \frac{l}{l-2}(n-p-1)$$

证明: 由各面次数之和等于边数的2倍及欧拉公式得

$$2m \geq lr = l\,(2+m-n)$$

可解得所需结论。对 p ($p \geq 2$) 个连通分支的情况类似可证。

- 平面图的性质

推论 K_5 和 $K_{3,3}$不是平面图。

证明：

K_5有5个顶点，10条边，假若是平面图，则每个面的次数至少为3，由定理7.12可得：

$$10 \le 3(5-2) = 9$$

矛盾，因而K_5不是平面图。

$K_{3,3}$有6个顶点，9条边，假若是平面图，则每个面的次数至少为4，因而有：

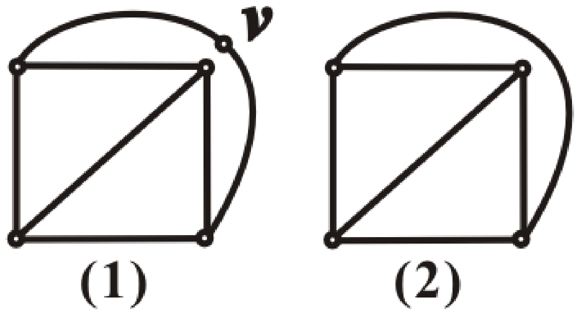
$$9 \le 2(6-2) = 8$$

矛盾，因而$K_{3,3}$不是平面图。

- 同胚与收缩

消去2度顶点v 如右图从(1)到(2)

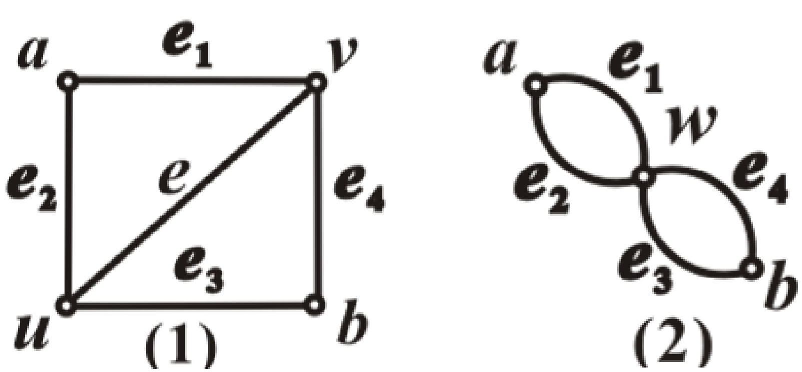
插入2度顶点v 如右图从(2)到(1)



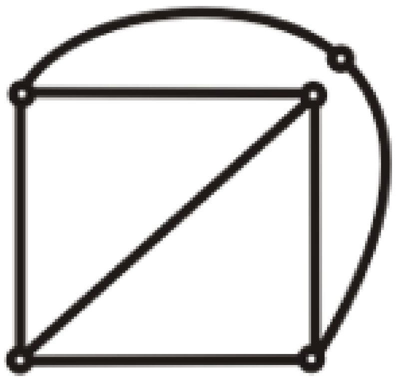
定义7.9

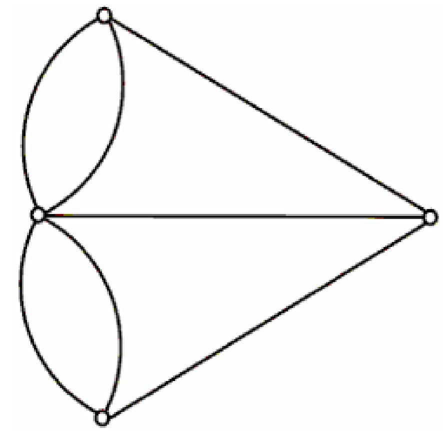
如果两个图G_1与G_2同构, 或经过反复插入或消去2度顶点后同构，则称G_1与G_2同胚。

删除边(u, v)，用新的顶点w(可以用u或v充当w)取代u、v，并使w和除(u, v)以外所有与u、v关联的边关联，称这个变换为收缩边。



7.4 平面图



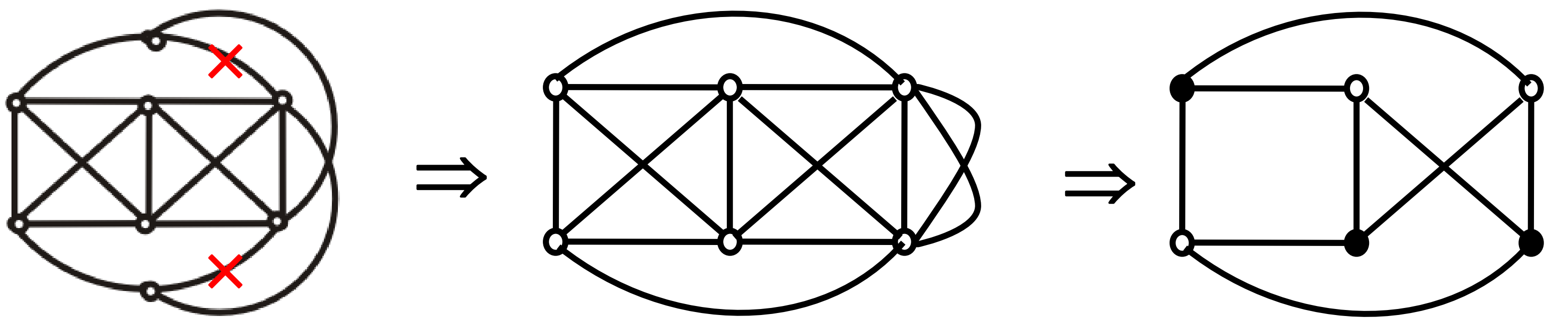


定义7.10 如果G_1可以通过若干次收缩边得到G_2，则称为G_1可收缩到G_2。

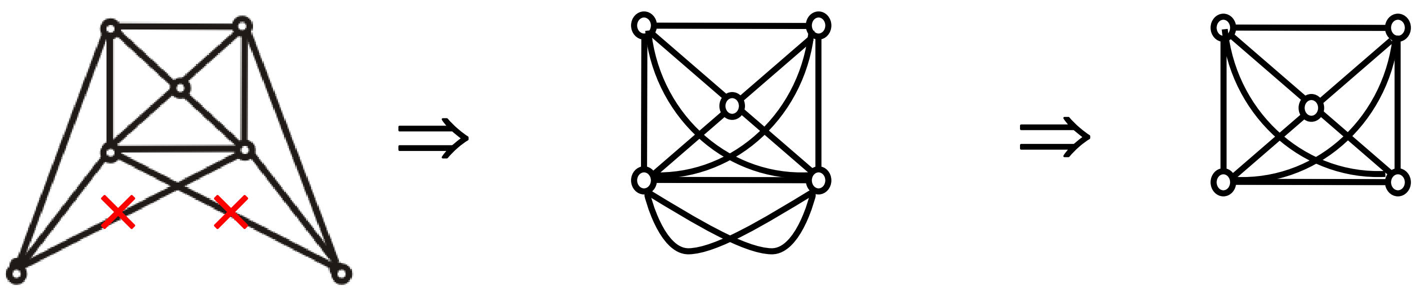
- 库拉图斯基定理

定理7.13 一个图是平面图当且仅当它没有可收缩到K_5同胚的子图，也没有可收缩到$K_{3,3}$同胚的子图。

□ 例7.4.2　证明下述2个图为非平面图



收缩2条边　　　　取子图　$K_{3,3}$



收缩2条边　　　　取子图　K_5

- 平面图的对偶图

定义7.11 设平面图G, 有n个顶点, m条边和r个面, G的**对偶图** $G^*=<V^*,E^*>$如下：

在G的每一个面R_i中任取一个点v_i^*作为G^*的顶点,

$$V^*= \{ v_i^* | i=1,2,\ldots,r \}$$

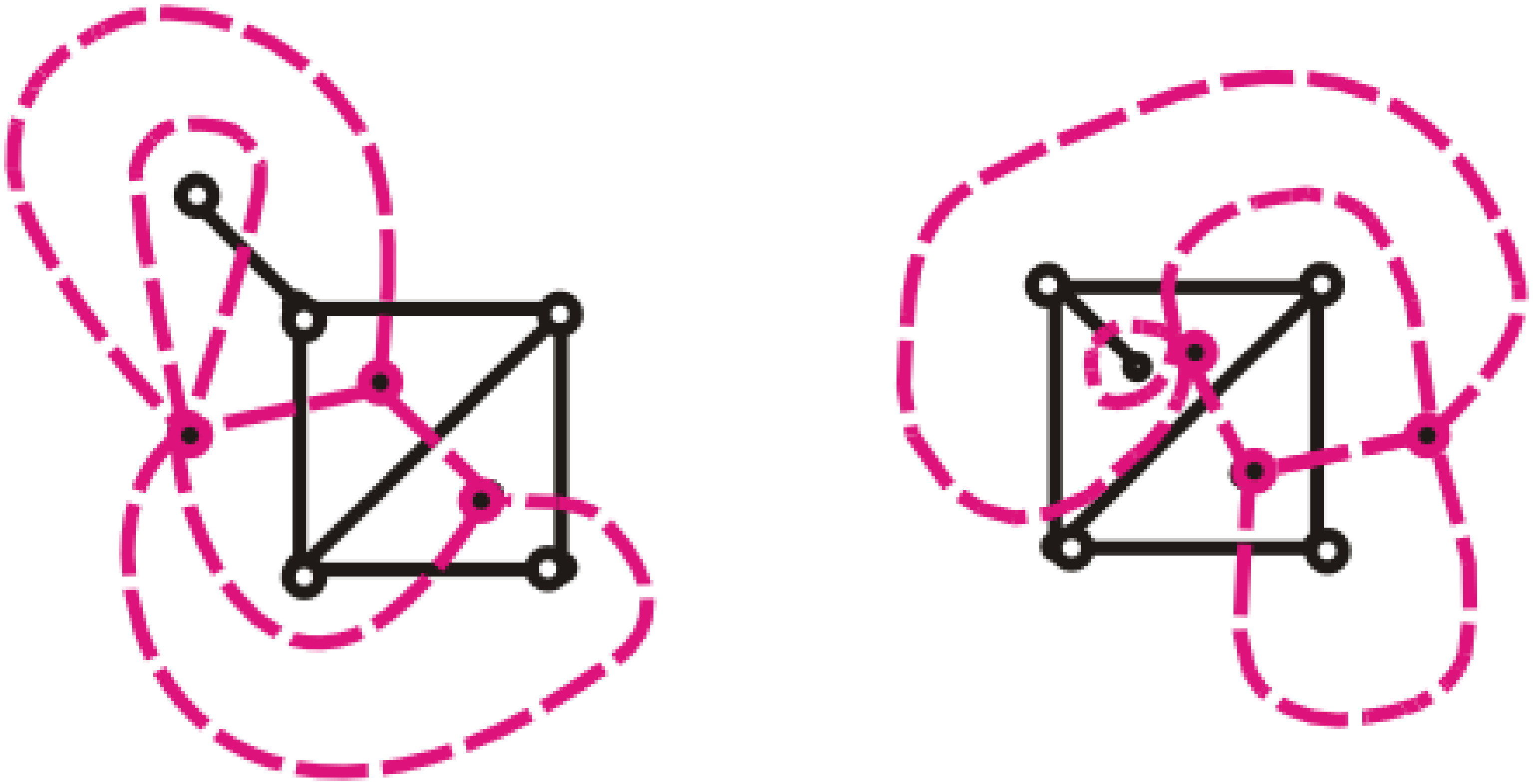
对G的每一条边e_k，若e_k在G的面R_i与R_j的公共边界上，则作边$e_k^*=(v_i^*,v_j^*)$, 且与e_k相交;

若e_k为G中的桥且在面R_i的边界上, 则作环$e_k^*=(v_i^*,v_i^*)$。

$$E^*=\{ e_k^* | k=1,2, \ldots,m \}$$

- 平面图的对偶图的实例

  黑色实线为原平面图, 红色虚线为其对偶图



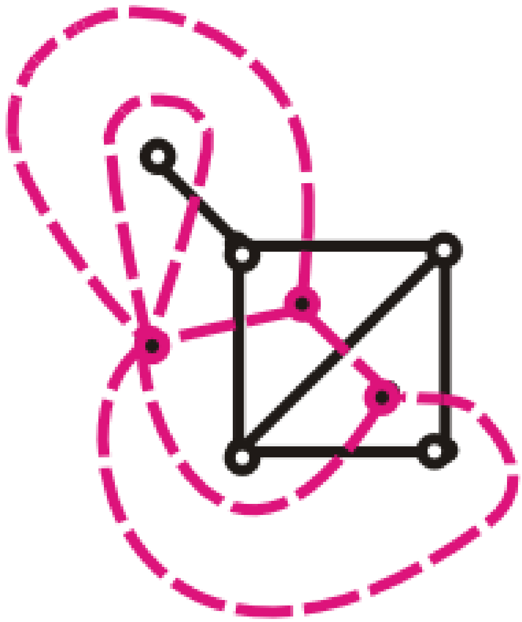
- 平面图的对偶图的性质

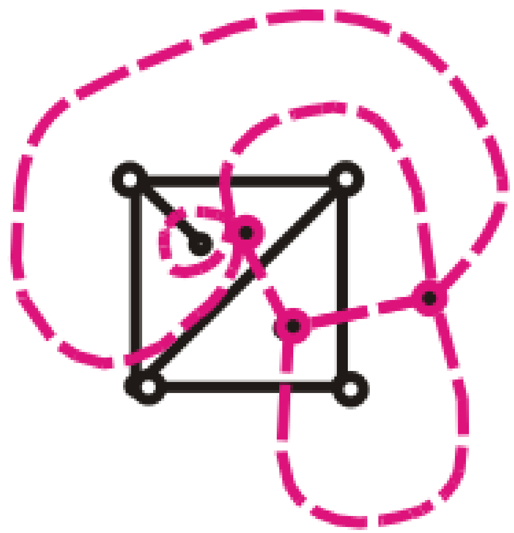
  (1) 对偶图是平面图，而且是平面嵌入。

  (2) 对偶图是连通图。

  (3) 若边e为G中的环，则G^*与e对应的边e^*为桥; 若e为桥，则G^*中与e对应的边e^*为环。

  (4) 同构的平面图的对偶图不一定同构。





7.4 平面图

● 地图着色

地图: 连通无桥平面图的平面嵌入，每一个面是一个国家。若两个国家有公共边界，则称它们是相邻的。

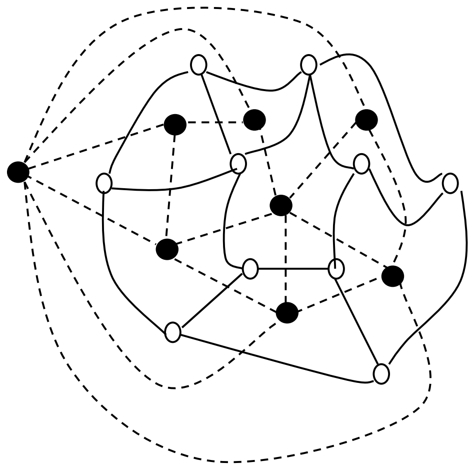
地图着色(面着色): 对地图的每个国家涂一种颜色，使相邻的国家涂不同的颜色。

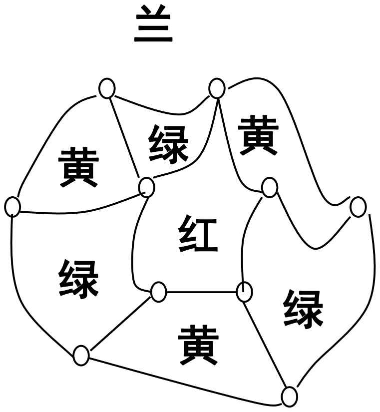
地图着色问题: 用尽可能少的颜色给地图着色。

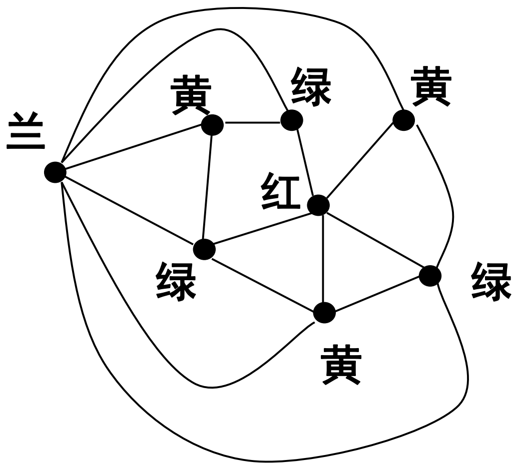
地图着色可以转化成平面图的点着色。当G中无桥时，G^*中无环。G的面与G^*的顶点对应，且G的两个面相邻当且仅当G^*对应的两个顶点相邻, 从而G的面着色等同于G^*的点着色。

7.4 平面图

- 地图着色与平面图的点着色







7.4 平面图

- 四色定理

四色猜想(100多年前): 任何地图都可以用4种颜色着色, 即任何平面图都是4-可着色的。

1890年希伍德证明五色定理: 任何平面图都是5-可着色的。

1976年美国数学家阿佩尔和黑肯证明, 如果四色猜想不成立, 则存在一个反例, 这个反例大约有2000种可能(后来有人简化到600多种), 他们用计算机分析了所有这些可能, 都没有导致反例

定理7.14（四色定理）

任何平面图都是4–可着色的。

- **作业**

  P155　6.19

  　　　 6.22

  P156　6.26

6.19 指出图 6-30 所示平面图各面的次数，并验证各面次数之和等于边数的两倍.

6.22 求图 6-31 所示平面图 G 的对偶图 G^*，再求 G^* 的对偶图 G^{**}. G^{**} 与 G 同构吗？

6.26 图 6-34 是一个平面图，试给出它的一个平面嵌入. 它是极大平面图吗？

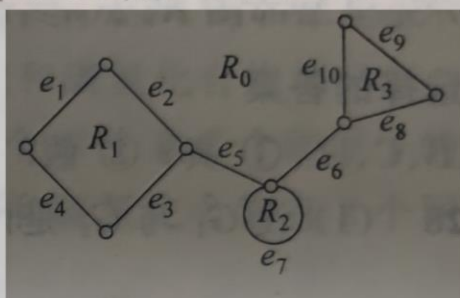


图 6-30

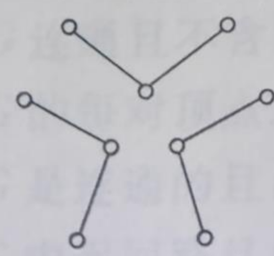


图 6-31

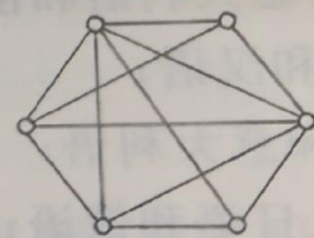


图 6-34

图论初步

第三部分 图论初步

第6章 图的基本概念

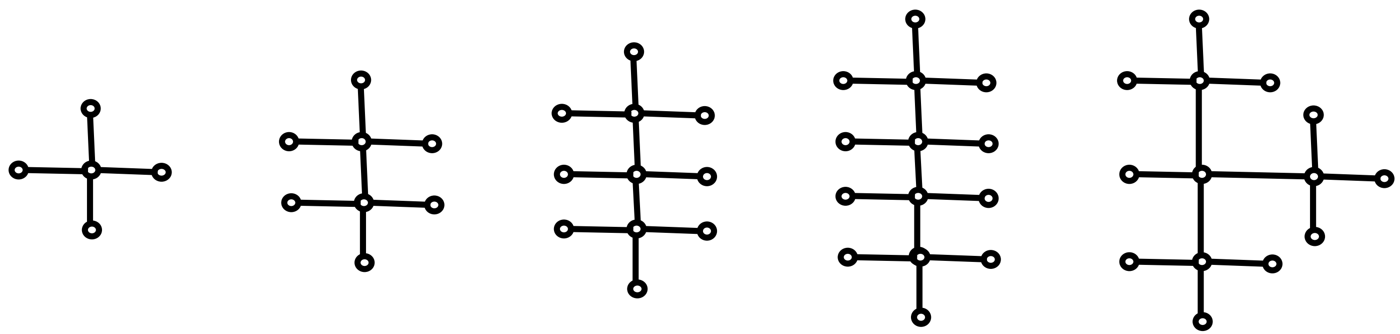
第7章 特殊的图

第8章 树

8.1 无向树及生成树

定义8.1 不含回路的连通无向图称为无向树，简称树。每个连通分支均是树的非连通无向图称为森林。平凡图称为平凡树。树中度数为1的顶点称为树叶，度数大于等于2的顶点称为分支点。

英国数学家凯莱(Arthur Cayley)于19世纪中叶研究饱和碳氢化合物C_nH_{2n+2}的同分异构体时提出树的概念。当n=1,2,3时，都只有一棵非同构的树；当n=4时，有2棵不同构的树。



甲烷　乙烷　丙烷　丁烷　异丁烷

- 无向树的性质

定理8.1 设$G=(V,E)$是n阶m条边的无向图，则下面各命题是等价的

(1) G连通且不含回路；

(2) G的每对顶点之间有唯一的一条路径；

(3) G是连通的且$m=n-1$；

(4) G中无回路且$m=n-1$；

(5) G中无回路，但在任两个不相邻的顶点之间增加一条边，就形成唯一的一条初级回路；

(6) G是连通的且每条边都是桥；

- 无向树的性质

定理8.2 n阶非平凡的树中至少有2片树叶。

证明：非平凡的树的每个顶点的度数都大于等于1，设有k片树叶，则有$n-k$个顶点度数大于等于2。由握手定理，

$$2m \geq k + 2(n-k)$$

由定理8.1，$m = n - 1$，代入上式得

$$2(n-1) \geq k + 2(n-k)$$

整理得， $$k \geq 2$$

□ 例8.1.1 已知无向树T中，有1个3度顶点，2个2度顶点，其余顶点全是树叶。试求树叶数，并画出满足要求的非同构的无向树。

解：

用树的性质$m=n-1$和握手定理。设有x片树叶，于是

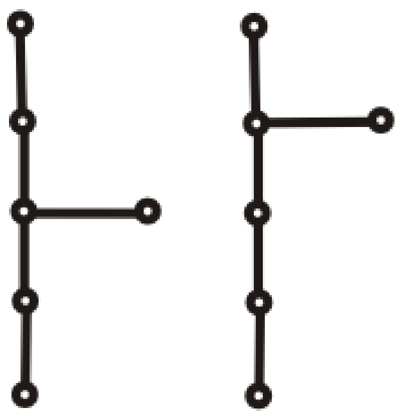
$$n=1+2+x=3+x$$

$$2m=2\times(2+x)=1\times3+2\times2+x$$

解得$x=3$，故T有3片树叶。

T的度数列为1, 1, 1, 2, 2, 3

有2棵非同构的无向树。



□ 例8.1.2 已知无向树T有5片树叶，2度与3度顶点各1个，其余顶点的度数均为4。求T的阶数n，并画出满足要求的所有非同构的无向树。

解：

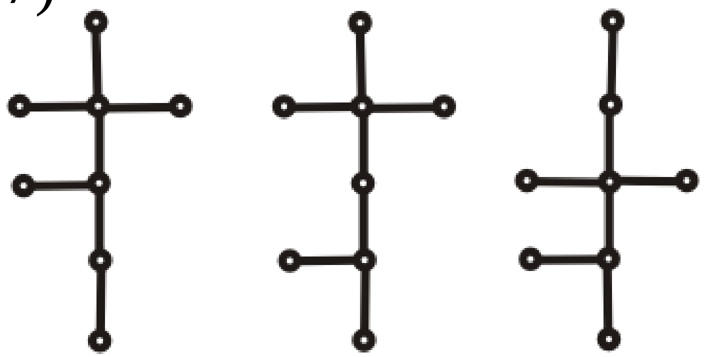
设T的阶数为n，则边数为$n-1$，4度顶点的个数为$n-7$。由握手定理得

$$2m=2(n-1)=5\times1+2\times1+3\times1+4(n-7)$$

解得$n=8$，4度顶点为1个。

T的度数列为1,1,1,1,1,2,3,4

有3棵非同构的无向树



8.1 无向树及生成树

- 生成树

定义8.2 设$G=(V,E)$是无向连通图，T是G的生成子图并且是树，则称T是G的生成树。

生成树T的树枝: G在T中的边

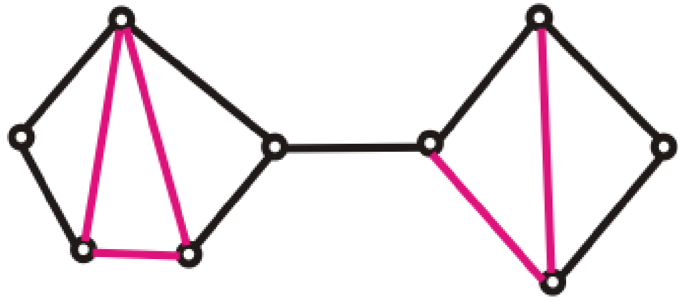
生成树T的弦: G不在T中的边

生成树T的余树: 所有弦的集合的导出子图

设n阶连通无向图有m条边，则它的生成树有$n-1$条边，余树有$m-n+1$条边。

黑边构成生成树

红边构成余树



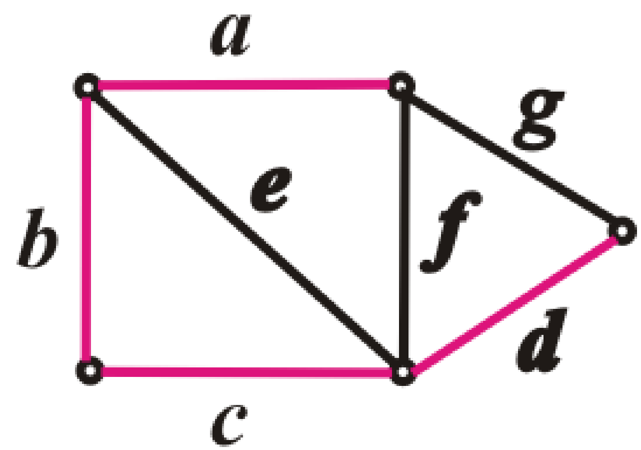
- 生成树的存在性

定理8.3 任何无向连通图都有生成树。

证明：设G是一个无向连通图，如果G中无回路，则G本身就是树，当然也是G的生成树。如果G中存在回路C，删除C上任意一条边，这不影响图的连通性。如果还有回路，就再删除此回路上的一条边，直到图中无回路为止，最后得到一个连通无回路的生成子图，它就是G的生成树。

推论：设n阶无向连通图G有m条边，则$m \geq n-1$。

定义8.3 设T 是连通图$G=(V,E)$的一棵生成树，对每一条弦e，存在唯一的由弦e和T的树枝构成的初级回路C_e，称C_e为对应于弦e的基本回路。称所有基本回路的集合为对应生成树T的基本回路系统。



连通图的生成树一般不是唯一的，对于不同生成树的基本回路及基本回路系统可能不同，但基本回路的个数都等于$m-n+1$。

- 求基本回路的方法

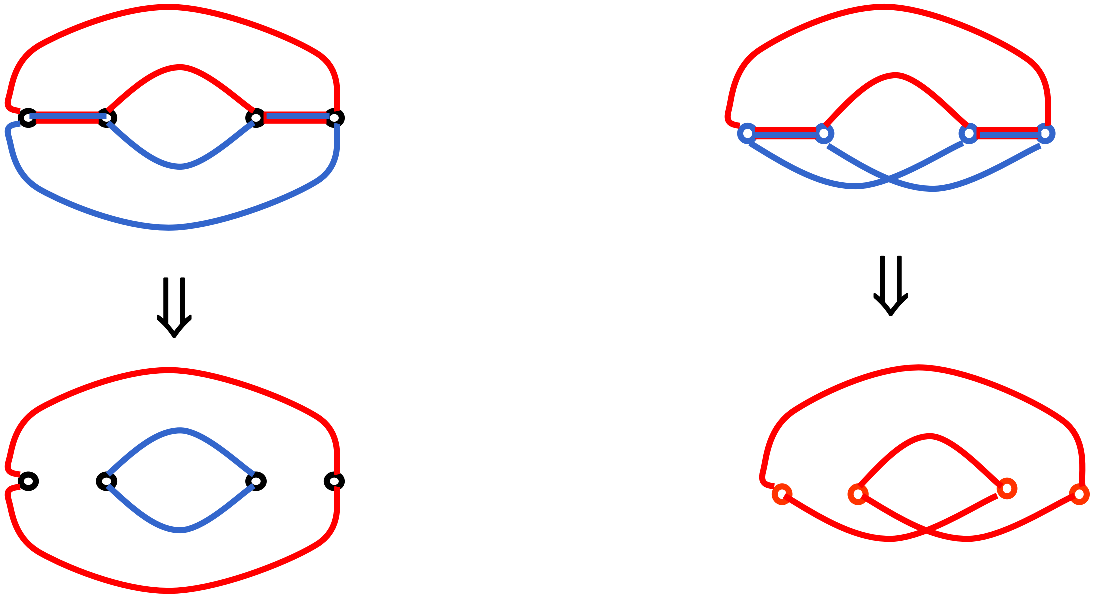
设弦$e=(u,v)$，先求T中u到v的路径Γ_{uv}，再加上弦e。

例：$C_e=e\ b\ c$, $C_f=f\ a\ b\ c$, $C_g=g\ a\ b\ c\ d$,

$C_{基}=\{C_e, C_f, C_g\}$。

- 回路合并

设C_1和C_2是两条回路，如果C_1和C_2有一条或几条共同的边，那么删去共同的边，每一条回路变成若干条通路，这些通路可以连接成一条或几条回路，称**合并回路**C_1和C_2，把合并的结果，记作$C_1 \oplus C_2$。



- 基本回路的性质

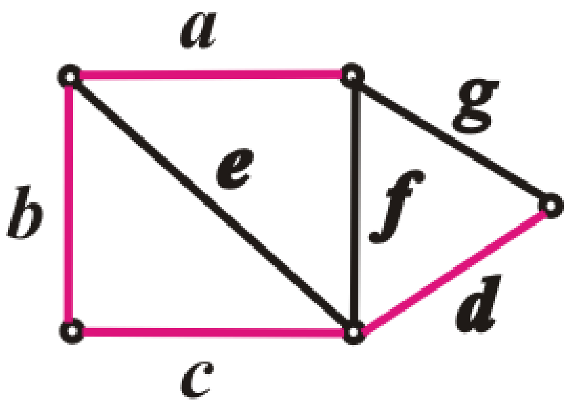
连通图中的任一条回路都可以表示成基本回路的合并，实际上，任一条回路必含有弦，它等于对应它所含弦的基本回路的合并。

例：$abcf=C_f$

$aef=C_e \oplus C_f$

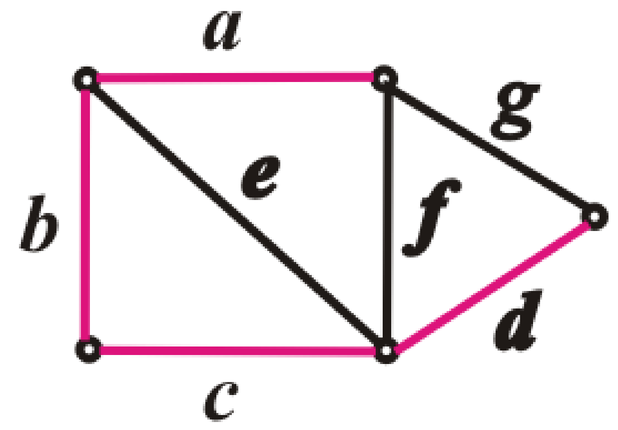
$aedg=C_e \oplus Cg$

$bcdgfe=C_e \oplus C_f \oplus Cg$



定义8.4 设T是连通图$G=(V,E)$的一棵生成树，对T的每一条树枝a，存在唯一的由树枝a、其余的边都是弦构成的G的边割集S_a，称S_a为对应树枝a的基本割集，称所有基本割集的集合为对应生成树T的基本割集系统。

G的对应不同生成树的基本割集也可能不一样，但基本割集的个数都是 $n-1$ 。



- 求基本割集的算法

设a为生成树T的树枝，$T-a$由两棵子树T_1与T_2组成, 则：

$S_a=\{e \mid e\in E(G)$且e的两个端点分别属于T_1与$T_2\}$

例：$S_a=\{a, f, g\}$, $S_b=\{b, e, f, g\}$, $S_c=\{c, e, f, g\}$, $S_d=\{d, g\}$,

$$S_{基}=\{S_a, S_b, S_c, S_d\}.$$

- 基本割集的性质

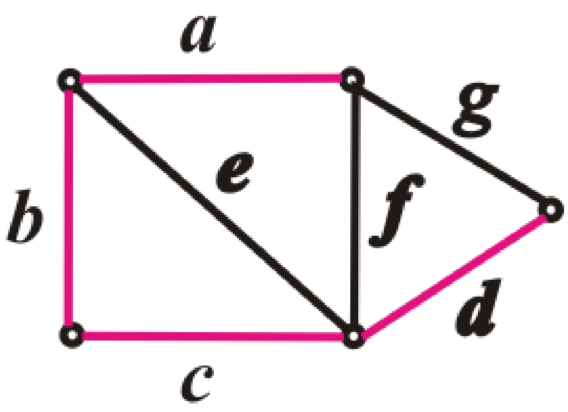
连通图中的任一割集都可表示成对应它所含树枝的基本割集的合并。

例： $\{g,d\}=S_d$

$\{a,b,e\}=S_a\oplus S_b$

$\{a,e,c\}=S_a\oplus S_c$

$\{b,e,f,d\}=S_b\oplus S_d$



- 无向图与最小生成树

对无向图或有向图的每一条边e附加一个实数$w(e)$，称作边e的权。图连同附加在边上的权称作带权图，记作$G=\langle V,E,W\rangle$。设T是G的生成树，T中所有边的权之和称作T的权，记作$W(T)$。

最小生成树: 带权图中权最小的生成树

避圈法 (Kruskal) ——求最小生成树的算法

设G是n阶无向连通带权图G

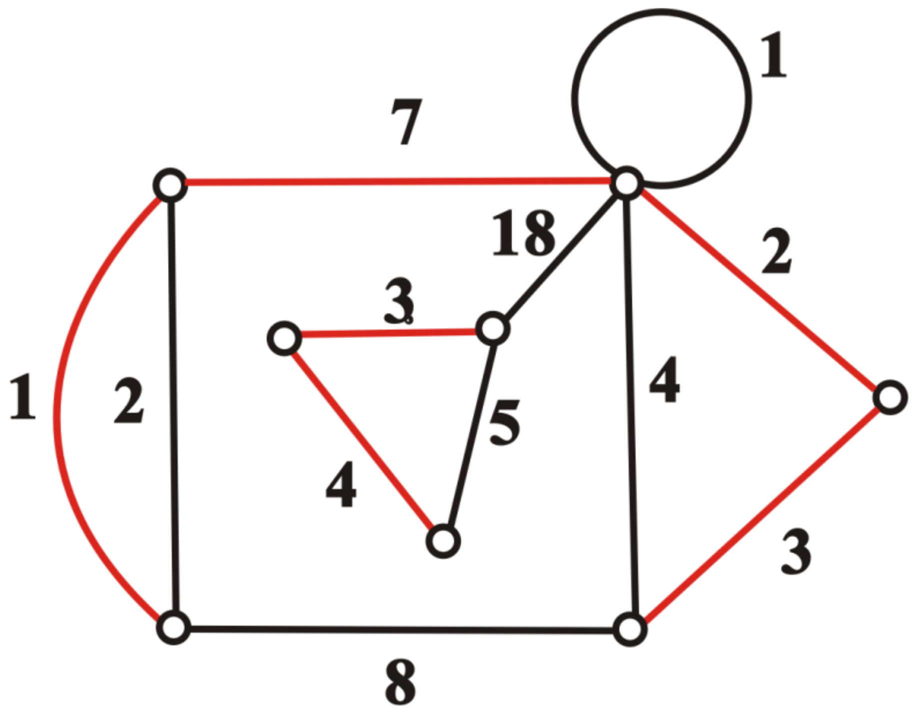
(1) 按权从小到大排列边(环除外), 设$W(e_1)\le W(e_2)\le\ldots\le W(e_m)$.

(2) 令$T\leftarrow\varnothing$, $i\leftarrow 1$, $k\leftarrow 0$.

(3) 若e_i与T中的边不构成回路，则令$T\leftarrow T\cup\{e_i\}$, $k\leftarrow k+1$.

(4) 若$k<n-1$, 则令$i\leftarrow i+1$, 转(3).

例：求图中的最小生成树



w(T)=38

8.1 无向树及生成树

- 作业

  P171　7.2

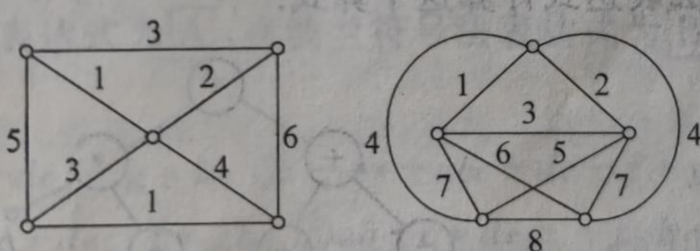
  　　　7.7

  　　　7.8

7.2 设无向树 T 有 7 片树叶，其余顶点的度数均为 3，求 T 中 3 度顶点数，能画出几棵具有此种度数的非同构的无向树？

7.7 在图 7-22 所示的无向图 G 中，实线边所示的子图为 G 的一棵生成树 T，求 G 对应于 T 的基本回路系统和基本割集系统.

7.8 求图 7-23 所示两个带权图的最小生成树，并计算它们的权.



(a)　(b)

图 7-23

- 有向树与根树

定义8.5 一个有向图D，如果略去有向边的方向所得无向图为一颗无向树，则称D为有向树。

根树：有一个顶点入度为0，其余的入度均为1的非平凡的有向树

树根: 根树中入度为0的顶点

树叶: 根树中入度为1，出度为0的顶点

内点: 根树中入度为1，出度大于0的顶点

分支点:根树中树根与内点的总称

顶点v的层数: 从树根到v的通路长度，记为$l(v)$

树高: 有向树中顶点的最大层数

8.2 根树及其应用

- 根树

根树的画法：树根放上方，省去所有有向边上的箭头。

例：右图所示

a是树根

b,e,f,h,i是树叶

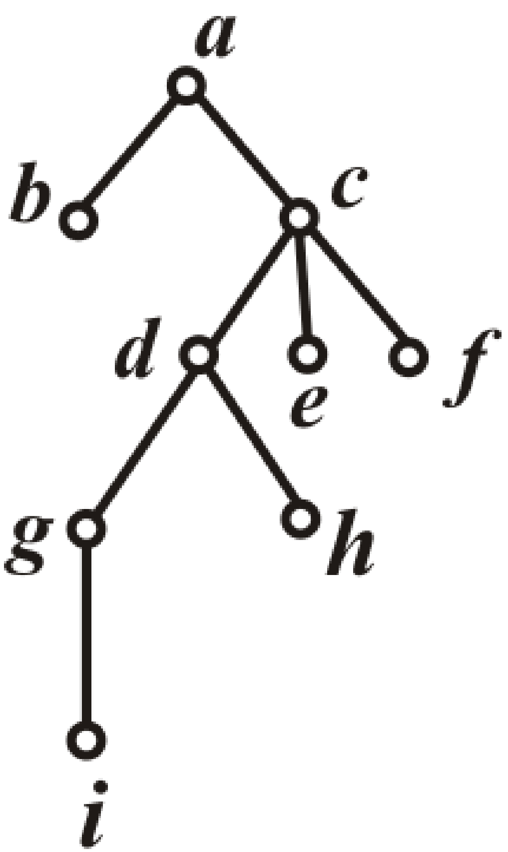
c,d,g是内点

a,c,d,g是分支点

a为0层;1层有b,c; 2层有d,e,f;

3层有g,h; 4层有i.

树高为4



8.2 根树及其应用

- 家族树

一颗根树可以看成一颗家族树：

(1) 若顶点a邻接到顶点b，则称b是a的儿子，a是b的父亲；

(2) 若b和c有同一个父亲，则称b和c是兄弟；

(3) 若$a\neq d$且a可达d，则称a是d的祖先，d是a的后代。

定义8.6　设T为一颗根树，a为T 中一个顶点且不是树根，称a及其后代导出的子图T'为T 的以a为根的子树，简称根子树。

定义8.7　如果对根树每一层上的顶点规定次序，称这样的根树为有序树。

8.2 根树及其应用

- 根树的分类

定义 8.8 设T为一棵根树

(1) 若T的每个分支点至多有r个儿子，则称T为r叉树。

(2) 若T的每个分支点都恰好有r个儿子，则称T为r叉正则树

(3) 若T为r叉正则树，且所有树叶的层次都等于树高，则称T为r叉完全正则树。

(4) 若r叉树T是有序的，则称T为r叉有序树。

(5) 若r叉正则树T是有序的，则称T为r叉正则有序树。

(6) 若r叉完全正则树T是有序的，则称T为r叉完全正则有序树。

- 最优2叉树

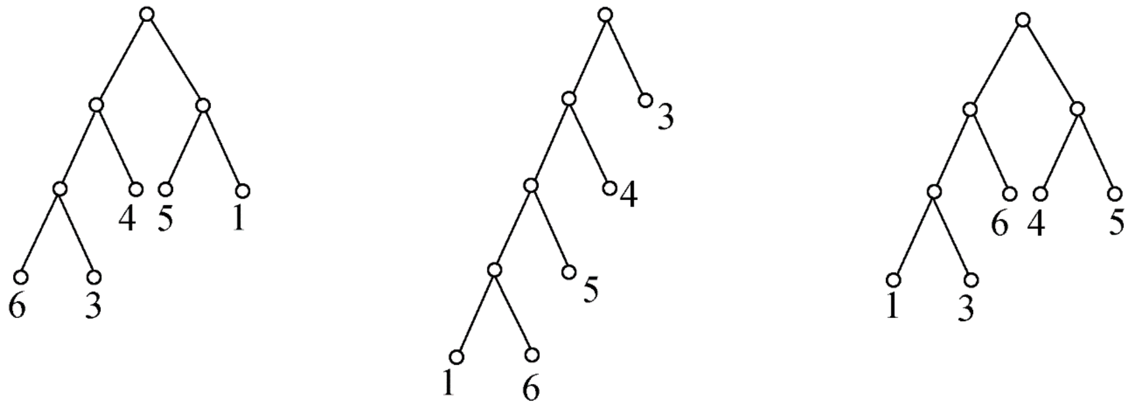
定义8.9 设2叉树T有t片树叶$v_1, v_2, \ldots, v_t$, 树叶的权分别为$w_1, w_2, \ldots, w_t$, 称

$$W(T) = \sum_{i=1}^{t} w_i l(v_i)$$

为T的权，其中$l(v_i)$是v_i的层数。在所有权为$w_1, w_2, \ldots, w_t$的t片树叶的2叉树中，权最小的2叉树称为最优2叉树。

8.2 根树及其应用

□ 例8.2.1 求下图中树的权



解： $W(T_1)=6\times3+3\times3+4\times2+5\times2+1\times2=47$

$W(T_2)=1\times4+6\times4+5\times3+4\times2+3\times1=54$

$W(T_2)=1\times3+3\times3+6\times2+4\times2+5\times2=42$

- 求最优2叉树的算法

Huffman算法:

给定实数$w_1, w_2, \ldots, w_t$,

(1) 作t片树叶，分别以$w_1, w_2, \ldots, w_t$为权。

(2) 在所有入度为0的顶点(不一定是树叶)中选出两个权最小的顶点，添加一个新分支点，它以这2个顶点为儿子，其权等于这2个儿子的权之和。

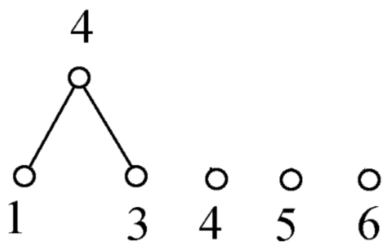
(3) 重复(2)，直到只有1个入度为0 的顶点为止。

$W(T)$等于所有分支点的权之和。

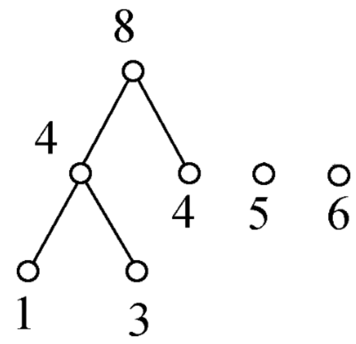
□ 例8.2.2 求权为1,3,4,5,6的最优树

解：

(a)

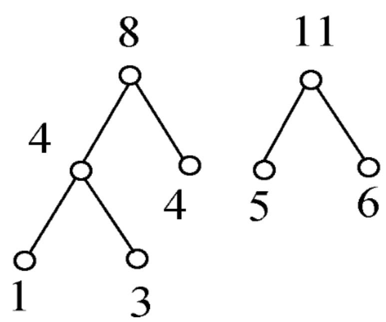


(b)

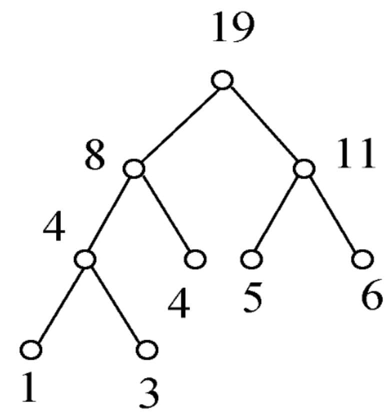


(c)

$W(T) = 42$



(d)



(e)

问题：假如用0、1、10分别作为0、1、2的编码
则1010的翻译会造成混乱

- 前缀码

定义8.10　设$\beta=\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_{n-1}\alpha_n$是长度为$n$的符号串，称其子串$\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_k$ $(1\le k\le n)$为β的前缀。

设$B=\{\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_m\}$是一个符号串集合，若对于任意的$i\ne j$, β_i与β_j互不为前缀，则称B为前缀码，只有2个符号(如0与1)的前缀码称为2元前缀码。

例：{0,10,110, 1111}, {1,01,001,000}是2元前缀码
{1,11,101, 0011} 不是前缀码

例：假如用0、10、11分别作为0、1、2的编码
则10001011001110可以翻译成？

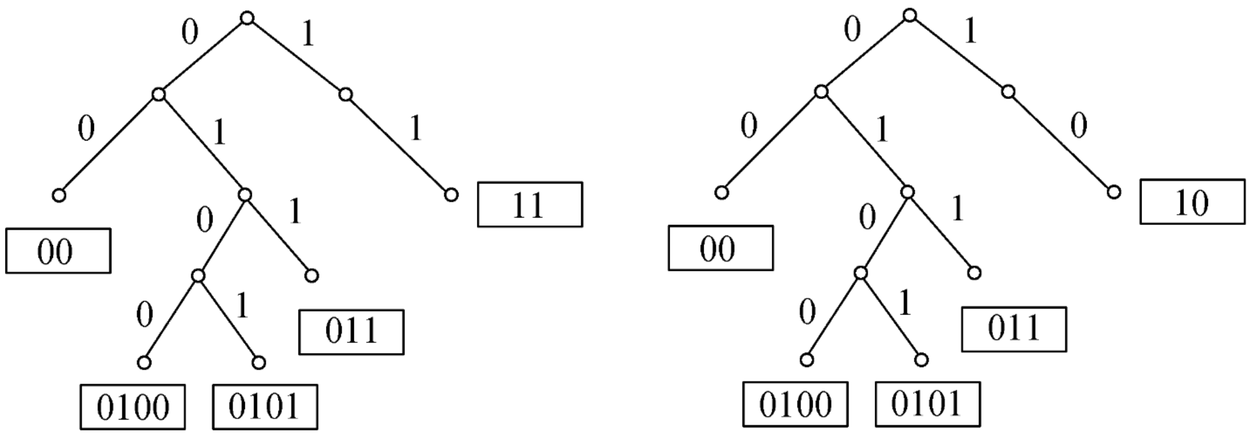
- 前缀码

一棵2叉树产生一个二元前缀码:

对每个分支点，若关联2条边，则给左边标0，右边标1；

若只关联1条边，则可以给它标0(看作左边)，也可以标1(看作右边)。将从树根到每一片树叶的通路上标的数字组成的字符串记在树叶处，所得的字符串构成一个前缀码。

例:



- 最佳前缀码

设要传输的电文中含有t个字符，字符a_i出现的频率为p_i，它的编码的长度为l_i，那么100个字符的电文的编码的期望长度是

$$100\sum_{i=1}^{t} l_i p_i$$

称编码期望长度最小的2元前缀码为最佳2元前缀码。

在用2叉树产生2元前缀码时，每个二进制串的长度等于它所在树叶的深度，因而权为$100p_1$，$100p_2, \ldots, 100p_t$的最优2叉树产生的2元前缀码是最佳2元前缀码。于是，给定字符出现的频率，可以用Huffman算法产生最佳2元前缀码。

- 例8.2.3　在通信中，设八进制数字出现的频率如下：

0：25%	1：20%	2：15%	3：10%
4：10%	5：10%	6：5%	7：5%

采用2元前缀码, 求传输数字最少的2元前缀码，并求传输 $10^n(n\geq 2)$个按上述比例出现的八进制数字需要多少个二进制数字？若用等长的 (长为3) 的码字传输需要多少个二进制数字?

解：用Huffman算法求以频率(乘以100)为权的最优2叉树。这里 w_1=5, w_2=5, w_3=10, w_4=10, w_5=10, w_6=15, w_7=20, w_8=25.

编码:

0---01

1---11

2---001

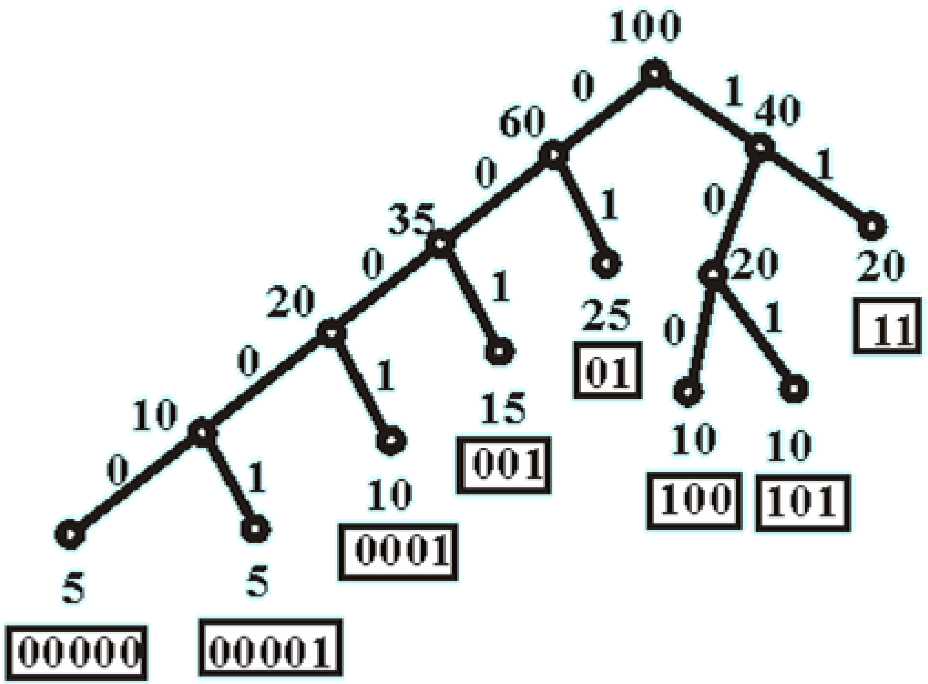
3---100

4---101

5---0001

6---00000

7---00001



传100个按比例出现的八进制数字所需二进制数字的个数为 $W(T)$=285。

传10^n(n≥2)个所用二进制数字的个数为2.85×10^n， 而用等长码(长为3)需要用 3×10^n个数字。

- 作业

P171　7.10

P172　7.12

P173　7.17

7.10 下面给出的符号串集合中，哪些是前缀码？

$B_1=\{0,10,110,1111\}$；

$B_2=\{1,01,001,000\}$；

$B_3=\{1,11,101,001,0011\}$；

$B_4=\{b,c,aa,ac,aba,abb,abc\}$；

7.12 利用图 7-25 中的 2 叉树产生一个 2 元前缀码，用它作为八进制数字的代码，对应关系标在图中的树叶处．

(1) 写出八进制数字的代码．

(2) 写出八进制数 6014 和 1725 的编码．

(3) 写出 11001010100 和 01111100100 代表的八进制数．

图　7-25

7.17 设 7 个字母在通信中出现的频率如下：

a：35%，　b：20%，

c：15%，　d：10%，

e：10%，　f：5%，

g：5%．

编一个最佳 2 元前缀码．在这个前缀码中，a、b、c、d、e、f、g 的码长分别是 $\boxed{A}$、$\boxed{B}$、$\boxed{C}$、$\boxed{D}$、$\boxed{E}$、$\boxed{F}$、$\boxed{G}$．

传输 10^4 个按上述比例出现的字母需要 $\boxed{H}$ 个二进制数字．

供选择的答案

A、B、C、D、E、F、G：① 1；② 2；③ 3；④ 4；⑤ 5；⑥ 6．

H：① 20000；② 25000；③ 25500．

第四部分 矩阵论初步

第9章 矩阵基础及应用

第10章 应用回归分析初步

第四部分 矩阵论初步

第9章 矩阵基础及应用

第10章 应用回归分析初步

- 特征值和特征向量

设 $\boldsymbol{A}$ 是 n 阶方阵，如果存在常数 λ 和 n 维非零列向量 $\boldsymbol{u}$ 满足关系式：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{u}$$

则称 λ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，$\boldsymbol{u}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的属于λ 的一个特征向量。

如果$\boldsymbol{u}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的属于 λ 的特征向量，那么对$k \neq 0$，$k\boldsymbol{u}$ 也是 $\boldsymbol{A}$ 的属于 λ 的特征向量，这是因为：

$$\boldsymbol{A}(k\boldsymbol{u}) = k\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = k\lambda\boldsymbol{u}= \lambda(k\boldsymbol{u})$$

所以可以得知，特征向量不唯一，可有无穷多个。

- **特征值和特征向量的求解**

根据 $\boldsymbol{Au}=\lambda\boldsymbol{u}$，设 λ 是一个未知量，矩阵$\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}$称为 $\boldsymbol{A}$ 的特征矩阵，其行列式

$$p(\lambda)=|\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}|=\begin{vmatrix}\lambda-\alpha_{11} & -\alpha_{12} & \cdots & -\alpha_{1n}\\ -\alpha_{21} & \lambda-\alpha_{22} & \cdots & -\alpha_{2n}\\ \cdots & \cdots & \cdots & -\alpha_{3n}\\ -\alpha_{n1} & -\alpha_{n2} & \cdots & \lambda-\alpha_{nn}\end{vmatrix}$$

$$=\lambda^n+a_{n\text{-}1}\lambda^{n-1}+\cdots+a_1\lambda+a_0$$

称 $p(\lambda)$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式，方程 $|\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}|=0$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的特征方程，$\boldsymbol{A}$ 的特征值就是特征方程的解，n 阶方阵 $\boldsymbol{A}$ 有 n 个特征值。

9.1 特征分析基础

由于特征值 λ 和特征向量 $\boldsymbol{u}$ 经常成对出现，因此常将$(\lambda, \boldsymbol{u})$称为矩阵$\boldsymbol{A}$的特征对。

定理9.1 任何一个多项式

$$p(\lambda) = \lambda^n + a_{n-1}\lambda^{n-1} + \cdots + a_1\lambda + a_0$$

都可以写成$n \times n$矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} -a_{n-1} & a_{n-2} & \cdots & (-1)^{n-1}a_1 & (-1)^n a_0 \\ -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

的特征多项式，即有$p(\lambda) = \det(\lambda \boldsymbol{I} - \boldsymbol{A})$.

9.1 特征分析基础

矩阵$\boldsymbol{A}$的迹等于其所有特征值之和，而行列式$\det(\boldsymbol{A})$等于矩阵$\boldsymbol{A}$所有特征值的乘积，即有

$$tr(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$
$$\det(\boldsymbol{A}) = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i$$

- 特征值和特征向量的求解

在计算出$\boldsymbol{A}$的全部特征值之后，把所求得特征值逐个代入方程组

$$(\lambda \boldsymbol{I} - \boldsymbol{A})\, \boldsymbol{x} = 0$$

并求出其一组基础解系，基础解系就是属于这个特征值的全部线性无关的特征向量。

9.1 特征分析基础

考虑矩阵$\boldsymbol{A}$的n次多项式

$$f(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{A}^n + c_1\boldsymbol{A}^{n-1} + \cdots + c_{n-1}\boldsymbol{A} + c_n\boldsymbol{I}$$

若矩阵$\boldsymbol{A}$有特征对$(\lambda, \boldsymbol{u})$，即$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{u}$，则

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{A})\boldsymbol{u} &= (\boldsymbol{A}^n + c_1\boldsymbol{A}^{n-1} + \cdots + c_{n-1}\boldsymbol{A} + c_n\boldsymbol{I})\boldsymbol{u} \\ &= (\lambda^n + c_1\lambda^{n-1} + \cdots + c_{n-1}\lambda + c_n)\boldsymbol{u} \end{aligned}$$

令矩阵多项式$f(\boldsymbol{A})$的特征值为$f(\lambda)$，即$f(\boldsymbol{A})\boldsymbol{u} = f(\lambda)\boldsymbol{u}$. 将这一关系式带入上式，易知

$$f(\lambda) = \lambda^n + c_1\lambda^{n-1} + \cdots + c_{n-1}\lambda + c_n$$

是矩阵多项式$f(\boldsymbol{A})$的特征值。

9.1 特征分析基础

标量x的幂级数定义为

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2!}x^2 + \frac{1}{3!}x^3 + \cdots$$

类似地，矩阵**A**的幂级数定义为

$$e^{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{A} + \frac{1}{2!}\boldsymbol{A}^2 + \frac{1}{3!}\boldsymbol{A}^3 + \cdots = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!}\boldsymbol{A}^n$$

假定级数收敛。若矩阵**A**的特征值为λ，则由矩阵多项式的特征值表示式，立即知矩阵的指数函数$e^{\boldsymbol{A}}$的特征值为

$$f(\lambda) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!}\lambda^n = e^{\lambda}$$

9.2 主成分分析

- 内积与范数

对于实向量**x**和向量**y**

1) 向量**x**和向量**y**的内积

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = \mathbf{x}^T \mathbf{y} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

2) 向量**x**的范数

a) L_0范数(也称0范数) $\|\mathbf{x}\|_0$定义为**x**中非零元的个数

b) L_1范数(也称和范数或1范数) $\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$

c) L_2范数(也称欧氏范数或2范数) $\|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2 \right)^{1/2}$

d) L_∞范数(也称无穷范数) $\|\mathbf{x}\|_\infty = \max\{|x_1|, |x_2|, \cdots, |x_n|\}$

e) L_p范数(也称Hölder范数) $\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{1/p}, p \geq 1$

- 协方差和协方差矩阵

对于样本**X**和样本**Y**

1) 样本均值 $\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$

2) 样本方差 $S^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2$

3) 样本**X**和**Y**的协方差 $Cov(X,Y) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$

4) 样本$\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_p$, 若$s_{ij} = Cov(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \mu_i)(x_j - \mu_j)$, 则

$$\mathbf{S} = (s_{ij})_{p\times p} = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1p} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{p1} & s_{p2} & \cdots & s_{pp} \end{bmatrix}$$

称为样本$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_p$的协方差矩阵。

根据上述定义，有

$$\mathbf{S}=\frac{1}{n}\left(\mathbf{x}_1-\mu_1\mathbf{1}\,,\mathbf{x}_2-\mu_2\mathbf{1}\,,\cdots,\mathbf{x}_p-\mu_p\mathbf{1}\,\right)^T \times\left(\mathbf{x}_1-\mu_1\mathbf{1}\,,\mathbf{x}_2-\mu_2\mathbf{1}\,,\cdots,\mathbf{x}_p-\mu_p\mathbf{1}\right)$$

在本课中记 $\mathbf{X}_0=\left(\mathbf{x}_1-\mu_1\mathbf{1}\,,\mathbf{x}_2-\mu_2\mathbf{1}\,,\cdots,\mathbf{x}_p-\mu_p\mathbf{1}\,\right)$，从而有

$$\mathbf{S}=\frac{1}{n}\mathbf{X}_0{}^T\mathbf{X}_0$$

- 相关系数和相关矩阵

对于向量x和向量y

1) 向量x的标准化 $\mathbf{x}'=\frac{\mathbf{x}-\bar{x}\mathbf{1}}{\langle\mathbf{x}-\bar{x}\mathbf{1},\mathbf{x}-\bar{x}\mathbf{1}\rangle^{1/2}}=\frac{\mathbf{x}-\bar{x}\mathbf{1}}{\|\mathbf{x}-\bar{x}\mathbf{1}\|}$

2) 向量x和向量y的相关系数 $r(\mathbf{x},\mathbf{y})=<\mathbf{x}',\mathbf{y}'>$

3) 两个向量x和y之间的夹角θ $\cos\theta=\frac{\langle\mathbf{x},\mathbf{y}\rangle}{\sqrt{\langle\mathbf{x},\mathbf{x}\rangle\langle\mathbf{y},\mathbf{y}\rangle}}$

9.2 主成分分析

$$r(\mathbf{x},\mathbf{y}) = <\mathbf{x}',\mathbf{y}'> = <\frac{\mathbf{x}-\bar{x}\mathbf{1}}{\|\mathbf{x}-\bar{x}\mathbf{1}\|},\frac{\mathbf{y}-\bar{y}\mathbf{1}}{\|\mathbf{y}-\bar{y}\mathbf{1}\|}>$$

$$= \frac{\langle \mathbf{x}-\bar{x}\mathbf{1},\mathbf{y}-\bar{y}\mathbf{1}\rangle}{\|\mathbf{x}-\bar{x}\mathbf{1}\|\|\mathbf{y}-\bar{y}\mathbf{1}\|} = \cos\gamma$$

γ为向量$\mathbf{x}-\bar{x}\mathbf{1}$与$\mathbf{y}-\bar{y}\mathbf{1}$之间的夹角。

向量之间的相关性与加减$\beta\mathbf{1}$无关。

4) 设有向量$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n$，若$r(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j) = r_{ij}$，则

$$\mathbf{R} = (r_{ij})_{n\times n} = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ r_{21} & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{n1} & r_{n2} & \cdots & r_{nn} \end{bmatrix}$$

称为向量$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n$的相关矩阵。

考虑：

问题1. 如果向量$\mathbf{x}$和$\mathbf{y}$之间的夹角为90°，则$\mathbf{x}$和$\mathbf{y}$的相关系数是多少？

问题2. 求下列向量$\mathbf{x}$和$\mathbf{y}$之间的夹角和相关系数：

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

问题3. 求下列向量零均值化后的夹角，即求向量$\mathbf{x} - \bar{x}\mathbf{1}$和向量$\mathbf{y} - \bar{y}\mathbf{1}$之间的夹角：

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

得出了什么结论？

已知10位同学的身高、胸围、体重的数据如表所示：

身高x_1（cm）	胸围x_2（cm）	体重x_3（kg）
149.5	69.5	38.5
162.5	77.0	55.5
162.7	78.5	50.8
162.2	87.5	65.5
156.5	74.5	49.0
156.1	74.5	45.5
172.0	76.5	51.0
173.2	81.5	59.5
159.5	74.5	43.5
157.7	79.0	53.5

能否使用更少的数据来反映同学们的特征？

9.2 主成分分析

- 数据降维

对含有多个变量的数据进行观测

多变量大数据集会为研究的应用提供丰富的信息

增加了问题分析的复杂性。

每个变量都提供了一定的信息，但其重要性不同

存在信息冗余

因此需要找到一种合理的方法，在减少需要分析的变量同时，尽量减少原指标包含信息的损失，从而达到对所收集数据进行全面分析的目的。

9.2 主成分分析

- 主成分分析概念

主成分分析就是把原有的多个指标转化成少数几个代表性较好的综合指标，这少数几个指标能够反应原来指标大部分的信息，并且各个指标之间保持独立，避免出现重叠信息。这些综合指标就称为主成分。

主成分分析主要起着降维和简化数据结构的作用，是把各变量之间互相关联的复杂关系进行简化分析的方法。

主成分分析主要是可以处理高维数据，通方减少数据维数实现数据压缩，同时不损失过多的信息；可以有效处理“维数灾难”的问题。

主成分分析在图像处理、经济学、统计学等各个领域得到了广泛的应用。

9.2 主成分分析

- 最大方差理论

在信号处理中认为信号具有较大的方差，噪声有较小的方差，信噪比就是信号与噪声的方差比，信噪比越大越好。

数据降维的要求：将p维样本点转换为k维后$(1 \le k < p)$，每一维上的样本方差都应尽可能大。

- 主成分分析

Input: 假定有p个统计相关的属性组合$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_p$, 由于它们之间的相关性，在这$p$个属性中存在信息冗余。

Output: 希望通过正交变换, 获得k个零均值的新特征集合$(k<p)$ $\tilde{\mathbf{x}}_1, \tilde{\mathbf{x}}_2, \cdots, \tilde{\mathbf{x}}_k$, 使这些新特征相互正交。这一过程属于特征提取。

正交：无冗余信息；坐标计算方便。

这里设

$$
\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{x}}_i &= \alpha_{i1}\mathbf{x}_1 + \alpha_{i2}\mathbf{x}_2 + \cdots + \alpha_{ip}\mathbf{x}_p + \beta_i\mathbf{1} \\
&= \alpha_{i1}(\mathbf{x}_1 - \mu_1\mathbf{1}) + \alpha_{i2}(\mathbf{x}_2 - \mu_2\mathbf{1}) + \cdots + \alpha_{ip}\left(\mathbf{x}_p - \mu_p\mathbf{1}\right) \\
&\quad + \left(\alpha_{i1}\mu_1 + \alpha_{i2}\mu_2 \ + \cdots + \alpha_{ip}\mu_p + \beta_i\right)\mathbf{1} \\
&= \mathbf{X}_0\boldsymbol{\alpha}_i + \tilde{\mu}_i\mathbf{1}
\end{aligned}
$$

由于需要构造零均值的特征向量$\tilde{\mathbf{x}}_i$，从而需要

$$
\tilde{\mu}_i = \alpha_{i1}\mu_1 + \alpha_{i2}\mu_2 \ + \cdots + \alpha_{ip}\mu_p + \beta_i = 0
$$

因此，

$$
\begin{aligned}
\tilde{\mathbf{x}}_i &= \alpha_{i1}(\mathbf{x}_1 - \mu_1\mathbf{1}) + \alpha_{i2}(\mathbf{x}_2 - \mu_2\mathbf{1}) + \cdots + \alpha_{ip}\left(\mathbf{x}_p - \mu_p\mathbf{1}\right) \\
&= \mathbf{X}_0\boldsymbol{\alpha}_i
\end{aligned}
$$

此时，

$$
S^2(\tilde{\mathbf{x}}_i) = \frac{1}{n}\langle\tilde{\mathbf{x}}_i, \tilde{\mathbf{x}}_i\rangle = \frac{1}{n}\tilde{\mathbf{x}}_i{}^T\tilde{\mathbf{x}}_i = \frac{1}{n}\boldsymbol{\alpha}_i{}^T\mathbf{X}_0{}^T\mathbf{X}_0\boldsymbol{\alpha}_i = \boldsymbol{\alpha}_i{}^T\mathbf{S}\boldsymbol{\alpha}_i
$$

$$\tilde{\mathbf{x}}_i = \alpha_{i1}(\mathbf{x}_1 - \mu_1\mathbf{1}) + \alpha_{i2}(\mathbf{x}_2 - \mu_2\mathbf{1}) + \cdots + \alpha_{ip}(\mathbf{x}_p - \mu_p\mathbf{1})$$

由$\tilde{\mathbf{x}}_i$的上述定义可以看出，$\boldsymbol{\alpha}_i$的尺度变化不改变$\tilde{\mathbf{x}}_i$之间的正交性，这里我们令$\boldsymbol{\alpha}_i$的长度为1。于是问题转换为：

目标：$\max \sum S^2(\tilde{\mathbf{x}}_i)$

$$\tilde{\mathbf{x}}_i \perp \tilde{\mathbf{x}}_j,\ ||\boldsymbol{\alpha}_i|| = 1,\ \ i \neq j,\ \ \ i,j = 1,2,\ldots,k$$

S是实对称矩阵，于是存在单位正交阵Q，使得

$$S^2(\tilde{\mathbf{x}}_i) = \boldsymbol{\alpha}_i{}^T\mathbf{Q}\Lambda\mathbf{Q}^T\boldsymbol{\alpha}_i$$

其中

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_p \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{Q} = [\boldsymbol{\omega}_1,\ \boldsymbol{\omega}_2,\ldots,\boldsymbol{\omega}_p],$$

而$\boldsymbol{\omega}_i$是S的属于特征值λ_i的一个单位特征向量，$\boldsymbol{\omega}_i \perp \boldsymbol{\omega}_j$，$i \neq j$.

令$\boldsymbol{\alpha}_i{}^T\mathbf{Q}=\mathbf{c}_i{}^T=(c_{i1},c_{i2},\cdots,c_{ip})$，则有

$$S^2(\tilde{\mathbf{x}}_i)=\lambda_1 c_{i1}^2+\lambda_2 c_{i2}^2+\cdots+\lambda_p c_{ip}^2$$

且有$||\boldsymbol{c}_i||=1.$

假设$\lambda_1\geq\lambda_2\geq\cdots\geq\lambda_p$，当$k=1$时，问题转换为

$$\max S^2(\tilde{\mathbf{x}}_1)=\lambda_1 c_{11}^2+\lambda_2 c_{12}^2+\cdots+\lambda_p c_{1p}^2$$

$$c_{11}^2+c_{12}^2+\cdots+c_{1p}^2=1$$

因此，

$$\max S^2(\tilde{\mathbf{x}}_1)=\lambda_1$$

$$\mathbf{c}_1=\left(c_{11},c_{12},\cdots,c_{1p}\right)^T=(1,0,\cdots,0)^T$$

此时有

$$\boldsymbol{\alpha}_1=\mathbf{Q}\mathbf{c}_1=[\boldsymbol{\omega}_1,\ \boldsymbol{\omega}_2,\ldots,\boldsymbol{\omega}_p](1,0,\cdots,0)^T=\boldsymbol{\omega}_1$$

更一般地，问题转换为：

$$\max \sum_{i=1}^{k} S^2(\tilde{\mathbf{x}}_i) = \lambda_1 \sum_{j=1}^{k} c_{j1}^2 + \lambda_2 \sum_{j=1}^{k} c_{j2}^2 + \cdots + \lambda_p \sum_{j=1}^{k} c_{jp}^2$$

其中：$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_p \geq 0$

$$\sum_{i=1}^{p} c_{ji}^2 = 1, \quad j = 1,2,\cdots,k$$

$$\sum_{i=1}^{p} \lambda_i c_{li} c_{mi} = 0, \quad l \neq m, \quad l,m = 1,2,\cdots,k$$

于是有

$$\max \sum_{i=1}^{k} \mathbf{S}^2(\tilde{\mathbf{x}}_i) = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_k$$

9.2 主成分分析

由于

$$\langle \tilde{\mathbf{x}}_i, \tilde{\mathbf{x}}_j \rangle = (\tilde{\mathbf{x}}_i)^T \tilde{\mathbf{x}}_j = \boldsymbol{\alpha}_i{}^T\ \mathbf{X}_0{}^T \mathbf{X}_0 \boldsymbol{\alpha}_j = n\boldsymbol{\alpha}_i{}^T \mathbf{S} \boldsymbol{\alpha}_j$$

当$i \neq j$时，有 $\boldsymbol{\alpha}_i{}^T \mathbf{S} \boldsymbol{\alpha}_j = 0$

显然$\boldsymbol{\alpha}_i = \boldsymbol{\omega}_i$，$i = 1,2,\dots,k$ 是上式的一组解。此时，

$$c_{ij} = \begin{cases} 1, i = j \\ 0, i \neq j \end{cases}$$

从而

$$\sum_{i=1}^{k} \mathbf{S}^2(\tilde{\mathbf{x}}_i) = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_k = \max \sum_{i=1}^{k} \mathbf{S}^2(\tilde{\mathbf{x}}_i)$$

累积贡献率为

$$\frac{\sum_{i=1}^{k} \lambda_i}{\sum_{i=1}^{p} \lambda_i}$$

9.2 主成分分析

在一般情况下，设有 n 个样品，每个样品观测 p 个指标，那么将原始数据排成如下矩阵：

$$\begin{bmatrix} x_{11} & x_{21} & \cdots & x_{p1} \\ x_{12} & x_{22} & \cdots & x_{p2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{1n} & x_{2n} & \cdots & x_{pn} \end{bmatrix}$$

则主成分求解步骤如下：

1.求样本均值$\overline{\boldsymbol{x}} = (\overline{\boldsymbol{x}_1}, \overline{\boldsymbol{x}_2}, \ldots, \overline{\boldsymbol{x}_p})$ 和样本的协方差矩阵$\boldsymbol{S}$；

2.求解特征方程$|\lambda \boldsymbol{I} - \boldsymbol{S}| = 0$，解得 p 个特征根$\lambda_1, \lambda_2, \ldots \lambda_p$ 。

3.求每个特征值对应的单位正交特征向量$\boldsymbol{\alpha}_i$ $(k = 1,2,\ldots,k)$

解得 $\boldsymbol{\alpha}_i = (\alpha_{1i}, \alpha_{2i}, \ldots, \alpha_i)^T$

4.写成主成分的表达式

$$\boldsymbol{f}_i = \alpha_{1i}(\boldsymbol{x}_1 - \overline{\boldsymbol{x}_1}\mathbf{1}) + \alpha_{2i}(\boldsymbol{x}_2 - \overline{\boldsymbol{x}_2}\mathbf{1}) + \ldots + \alpha_{pi}(\boldsymbol{x}_p - \overline{\boldsymbol{x}_p}\mathbf{1})$$

9.2 主成分分析

- R型分析

为消除量纲影响，在计算之前先将原始数据标准化。标准化变量的**S**=**R**，所以用标准化变量进行主成分分析相当于从原变量的相关矩阵R出发进行主成分分析。统计学上称这种分析法为**R**型分析，由协方差矩阵出发的主成分分析为**S**型分析。

S型分形和**R**型分析的结果是不同的。在一般情况下，若各变量的量纲不同，通常采用**R**型分析。

□ 例1 下表是10位同学的身高，胸围，体重的数据。

身高x_1（cm）	胸围x_2（cm）	体重x_3（kg）
149.5	69.5	38.5
162.5	77.0	55.5
162.7	78.5	50.8
162.2	87.5	65.5
156.5	74.5	49.0
156.1	74.5	45.5
172.0	76.5	51.0
173.2	81.5	59.5
159.5	74.5	43.5
157.7	79.0	53.5

对此进行主成分分析。

解：

1.求样本均值和样本协方差矩阵$\boldsymbol{S}$

$$\begin{pmatrix} \overline{x_1} \\ \overline{x_2} \\ \overline{x_3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 161.19 \\ 77.3 \\ 51.23 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{S} = \begin{pmatrix} 46.57 & 17.09 & 30.98 \\ 17.09 & 21.11 & 32.58 \\ 30.98 & 32.58 & 55.53 \end{pmatrix}$$

9.2 主成分分析

2.求解协方差矩阵的特征方程 $|\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{S}|=0$

$$\begin{vmatrix} 46.57-\lambda & 17.09 & 30.98 \\ 17.09 & 21.11-\lambda & 32.58 \\ 30.98 & 32.58 & 55.53-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

3.解得三个特征值和对应的单位特征向量：

$\lambda_1 = 99.00$ （a_{11}, a_{12}, a_{13}）=（0.56，0.42，0.71）

$\lambda_2 = 22.79$ （a_{21}, a_{22}, a_{23}）=（0.83，-0.33，-0.45）

$\lambda_3 = 1.411$ （a_{31}, a_{32}, a_{33}）=（0.05，0.84，-0.54）

4.因此可得三个主成分的表达式：

$$\mathbf{f}_1 = 0.56(\mathbf{x}_1 - 161.19) + 0.42(\mathbf{x}_2 - 77.3) + 0.71(\mathbf{x}_3 - 51.23)$$

$$\mathbf{f}_2 = 0.83(\mathbf{x}_1 - 161.19) - 0.33(\mathbf{x}_2 - 77.3) - 0.45(\mathbf{x}_3 - 51.23)$$

$$\mathbf{f}_3 = 0.05(\mathbf{x}_1 - 161.19) + 0.84(\mathbf{x}_2 - 77.3) - 0.54(\mathbf{x}_3 - 51.23)$$

三个主成分方差贡献率分别为：

$$\frac{99.00}{123.21} = 80.4\%, \quad \frac{22.79}{123.21} = 18.5\%, \quad \frac{1.411}{123.21} = 1.1\%$$

前两个主成分累积方差贡献率为：$\dfrac{99.00+22.79}{123.21} = 98.9\%$

9.2 主成分分析

作业：

9.1、下表是10位同学的身高、胸围、体重的数据，试用**R**型分析进行主成分分析。

身高x_1（cm）	胸围x_2（cm）	体重x_3（kg）
149.5	69.5	38.5
162.5	77.0	55.5
162.7	78.5	50.8
162.2	87.5	65.5
156.5	74.5	49.0
156.1	74.5	45.5
172.0	76.5	51.0
173.2	81.5	59.5
159.5	74.5	43.5
157.7	79.0	53.5

9.3 奇异值分解

● 矩阵的特征值和特征向量

设 $\boldsymbol{A}$ 是 n 阶方阵，如果存在常数λ和 n 维非零列向量$\boldsymbol{u}$ 满足关系式：

$$\boldsymbol{Au}=\lambda\boldsymbol{u}$$

则称 λ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，$\boldsymbol{u}$为 $\boldsymbol{A}$ 的属于λ 的一个特征向量。

对于一个实对称矩阵$\boldsymbol{A}$，已知其n个特征值$\lambda_1 \geq \lambda_2 \ldots \geq \lambda_n$,以及这$n$个特征值所对应的特征向量$\{\boldsymbol{\omega}_1, \boldsymbol{\omega}_2, \ldots, \boldsymbol{\omega}_n\}$。

如果这n个特征向量线性无关，那么矩阵A就可以用下式的特征分解表示：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{W} \sum \boldsymbol{W}^{-1}$$

其中$\boldsymbol{W}$是由n个特征向量组成的$n \times n$维矩阵，而$\sum$为这n个特征值为主对角线的$n \times n$维矩阵

一般情况下，在求解出特征值对应的特征向量之后，需要把n个特征向量进行标准化，即满足 $\omega_i^T\omega_i = 1$，那么对于特征向量组成的矩阵$\boldsymbol{W}$，可以满足$\boldsymbol{W}^T\boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}$，即 $\boldsymbol{W}^T = \boldsymbol{W}^{-1}$

那么矩阵$\boldsymbol{A}$的特征分解表达式就可以写成：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{W}\sum\boldsymbol{W}^T$$

- 奇异值分解

奇异值分解（SVD）是线性代数中一种重要的矩阵分解，和特征分解不同，SVD并不要求要分解的矩阵为方阵，SVD是特征分解在任意矩阵上的推广。在信号处理、统计学等领域有重要应用。

9.3 奇异值分解

- SVD的定义

　假设矩阵$\boldsymbol{A}$是一个$m \times n$的矩阵，那么定义矩阵$\boldsymbol{A}$的SVD为：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U} \sum \boldsymbol{V}^T$$

其中$\boldsymbol{U}$是一个$m \times m$的矩阵，$\sum$是一个$m \times n$的矩阵，并且除了主对角线上的元素以外全为0，主对角线上的每个元素都称为奇异值，$\boldsymbol{V}$是一个$n \times n$的矩阵。$\boldsymbol{U}$和$\boldsymbol{V}$都是酉矩阵，即满足：

$$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}, \boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V} = \boldsymbol{I}$$

- SVD的计算

　由SVD定义可知，矩阵$\boldsymbol{A}$不是方阵，所以无法直接使用特征值分解来计算$\boldsymbol{U}$和$\boldsymbol{V}$矩阵。为了使用特征分解，首先要将矩阵$\boldsymbol{A}$进行一个转换。

9.3 奇异值分解

根据SVD的定义，我们可得：

$$A = U\sum V^T \Rightarrow A^T = V\sum^T U^T \Rightarrow A^T A = V\sum^T U^T U\sum V^T = V\sum^2 V^T$$

因为A^TA是方阵，所以可以进行特征分解，方阵A^TA的特征向量组成的矩阵就是SVD分解中的 V 矩阵。一般将V 中的每个特征向量叫做A 的右奇异值向量。

同理，

$$A = U\sum V^T \Rightarrow A^T = V\sum^T U^T \Rightarrow AA^T = U\sum V^T V\sum^T U^T = U\sum^2 U^T$$

可知方阵AA^T的特征向量组成的矩阵就是SVD分解中的U矩阵，一般将U 中的每个特征向量叫做A 的左奇异值向量。

进一步的，可知方阵A^TA或AA^T的特征值矩阵等于SVD中奇异值矩阵的平方。这样就可以求解出SVD分解中每个奇异值。

上述解法正确吗？

$$\mathbf{A}=[\mathbf{u}_1 \ \cdots \ \mathbf{u}_k \mid \mathbf{u}_{k+1} \ \cdots \ \mathbf{u}_m]\left[\begin{array}{ccc|c} \lambda_1 & & & \\ & \ddots & & 0 \\ & & \lambda_k & \\ \hline & 0 & & 0 \end{array}\right]\begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_k^T \\ \mathbf{v}_{k+1}^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n^T \end{bmatrix} = [\mathbf{U}_1 \quad \mathbf{U}_2]\begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{V}_1^T \\ \mathbf{V}_2^T \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}=[\mathbf{u}_1 \ \cdots \ \mathbf{u}_k]\begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_k \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_k^T \end{bmatrix}=[\lambda_1\mathbf{u}_1 \ \cdots \ \lambda_k\mathbf{u}_k]\begin{bmatrix} \mathbf{v}_1^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_k^T \end{bmatrix}=\sum \lambda_i\mathbf{u}_i\mathbf{v}_i^T \quad =\mathbf{U}_1\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}_1^T$$

$$\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_1^T \\ \boldsymbol{U}_2^T \end{bmatrix}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1, \ \boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2)=\begin{pmatrix} \boldsymbol{U}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 & \boldsymbol{U}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 \\ \boldsymbol{U}_2^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 & \boldsymbol{U}_2^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 \end{pmatrix}=\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Lambda} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix},$$ Λ: 非零特征值对角阵

如果$m \times n$阶矩阵**A**的秩为k，则：

（1）**V**的后n-k列组成矩阵**A**的零空间的标准正交基；

（2）**U**的后m-k列组成矩阵$\mathbf{A}^T$的零空间的标准正交基。

9.3 奇异值分解

奇异值分解求解法1：利用$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\sum^2 \boldsymbol{V}^T$求解

（1）求矩阵$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$的酉相似对角矩阵及酉矩阵$\boldsymbol{V}$：

$$\mathbf{V}^T(\mathbf{A}^T\mathbf{A})\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \Lambda^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

（2）记 $\mathbf{V} = (\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2)$，　$\mathbf{V}_1 \in \mathbb{R}^{n\times k}, \mathbf{V}_2 \in \mathbb{R}^{n\times(n-k)}$

（3）令　$\mathbf{U}_1 = \mathbf{A}\mathbf{V}_1\mathbf{\Lambda}^{-1} \in \mathbb{R}^{m\times k}$

（4）扩充 $\mathbf{U}_1$为酉矩阵 $\mathbf{U} = (\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2)$

（5）构造奇异值分解

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}\mathbf{V}^T$$

- **例1** 已知矩阵A为：

$$A=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\\0&0&0\end{pmatrix}$$

计算A的SVD分解。

解：

$$A^TA=\begin{pmatrix}1&0&1\\0&1&1\\1&1&2\end{pmatrix}$$ 其特征值为 $\lambda_1=3,\lambda_2=1,\lambda_3=0,$

对应的特征向量为：

$$x_1=(1,1,2)^T,\quad x_2=(1,-1,0)^T,\quad x_3=(1,1,-1)^T,$$

于是

$$rankA = 2,\quad \Lambda = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$ 令 $V = (V_1, V_2)$,

其中 $V_1 = \left(\frac{1}{\sqrt{6}} x_1, \frac{1}{\sqrt{2}} x_2 \right), V_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}(x_3)$

进而计算 $U_1 = AV_1\Delta^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$，构造 $U_2 = (0,0,1)^T$，有

$U = (U_1, U_2) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$，从而有 $A = U \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} V^T$

奇异值分解求解法2：利用$AA^T = U\sum^2 U^T$求解

（1）求矩阵AA^T的酉相似对角矩阵及酉矩阵U：

$$\mathbf{U}^T(\mathbf{AA}^T)\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{\Lambda}^2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

（2）记 $\mathbf{U} = (\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2), \mathbf{U}_1 \in \mathbb{C}^{m\times k}, \mathbf{U}_2 \in \mathbb{C}^{m\times(m-k)}$

（3）令 $\mathbf{V}_1 = \mathbf{A}^T\mathbf{U}_1\mathbf{\Lambda}^{-1} \in \mathbb{C}^{n\times k}$

（4）扩充 $\mathbf{V}_1$ 为酉矩阵 $\mathbf{V} = (\mathbf{V}_1, \mathbf{V}_2)$

（5）构造奇异值分解

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\begin{bmatrix} \mathbf{\Lambda} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}\mathbf{V}^T$$

例2 已知矩阵A为：

$$A=\begin{pmatrix}1 & 2\\0 & 0\\0 & 0\end{pmatrix}$$

计算A的SVD分解。

解：

$$AA^T=\begin{pmatrix}5 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\\0 & 0 & 0\end{pmatrix},$$ 其特征值为 $\lambda_1=5,\lambda_2=\lambda_3=0$

对应的特征向量为：

$$x_1=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},x_2=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},x_3=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix};$$

于是

$$rankA=1,\quad \text{令}\quad \mathbf{U}=(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\mathbf{x}_3),\ \mathbf{U}_1=\mathbf{x}_1,\mathbf{U}_2=(\mathbf{x}_2,\mathbf{x}_3)$$

进而计算 $\mathbf{V}_1=\mathbf{A}^T\mathbf{U}_1\mathbf{\Lambda}^{-1}=\begin{pmatrix}1&0&0\\2&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}}\\\frac{2}{\sqrt{5}}\end{pmatrix}$,

构造 $\mathbf{V}_2=\begin{pmatrix}\frac{-2}{\sqrt{5}}\\\frac{1}{\sqrt{5}}\end{pmatrix}$,

从而有 $\mathbf{V}=(\mathbf{V}_1,\mathbf{V}_2)=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}}&\frac{-2}{\sqrt{5}}\\\frac{2}{\sqrt{5}}&\frac{1}{\sqrt{5}}\end{pmatrix}$,

因此,

$$\mathbf{A}=\mathbf{U\Lambda V}^T=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{5}&0\\0&0\\0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}}&\frac{-2}{\sqrt{5}}\\\frac{2}{\sqrt{5}}&\frac{1}{\sqrt{5}}\end{pmatrix}^T$$

9.3 奇异值分解

- SVD的性质

在奇异值分解中，奇异值矩阵中的奇异值是按照从大到小排列的，并且前10%甚至1%的奇异值的和就占了全部的奇异值之和的较大比例。

因此，可以用最大的k个的奇异值和对应的左右奇异向量来近似描述矩阵。

由于这个重要的性质，SVD可以用于PCA降维，对数据进行压缩和降维。

- 应用：图像压缩

假定一幅图像有$n \times n$个像素，用矩阵$\boldsymbol{A}$表示。

$\boldsymbol{A}= \boldsymbol{U}\sum \boldsymbol{V}^T$，奇异值按从大到小的顺序排列

选择k个大奇异值及对应的左和右奇异向量

图像重构：$\hat{\boldsymbol{A}} = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^T$

作业：

9.2、求矩阵$\boldsymbol{A}$的奇异值分解：

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

定义9.1 以变量 x 的函数 $a_{ij}(x)$ 为元素构成的矩阵

$$\boldsymbol{A}(x)=\begin{bmatrix} a_{11}(x) & a_{12}(x) & \cdots & a_{1n}(x) \\ a_{21}(x) & a_{22}(x) & \cdots & a_{2n}(x) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1}(x) & a_{m2}(x) & \cdots & a_{mn}(x) \end{bmatrix}$$

称为函数矩阵。函数矩阵的运算性质（加法、数乘、乘法、转置等）与常数矩阵的运算性质相同。

定义9.2 设 $\boldsymbol{A}(x)$ 为 n 阶函数矩阵，如果存在 n 阶函数矩阵 $\boldsymbol{B}(x)$，对于任意的 $x\in[a,b]$ 都有

$$\boldsymbol{A}(x)\boldsymbol{B}(x)=\boldsymbol{B}(x)\boldsymbol{A}(x)=\boldsymbol{E}_n$$

则称 $\boldsymbol{A}(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上可逆，$\boldsymbol{B}(x)$ 是 $\boldsymbol{A}(x)$ 的逆矩阵，记为 $\boldsymbol{A}^{-1}(x)$.

9.4 函数矩阵的求导

例9.3 求函数矩阵$\boldsymbol{A}(x)=\begin{bmatrix} x & 2 \\ 2 & x \end{bmatrix}, x\in[0,1]$ 的逆矩阵。

解：与常数矩阵类似，我们求得函数矩阵 $\boldsymbol{A}(x)$ 的伴随矩阵为

$$\boldsymbol{A}^*(x)=\begin{bmatrix} x & -2 \\ -2 & x \end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{A}(x)$ 的行列式为$|\boldsymbol{A}(x)|=x^2-4$,在区间 $[0,1]$ 上处处不为零，所以其逆矩阵为

$$\boldsymbol{A}^{-1}(x)=\frac{1}{x^2-4}\begin{bmatrix} x & -2 \\ -2 & x \end{bmatrix}$$

定义9.3 若函数矩阵$\boldsymbol{A}(x)=\left[a_{ij}(x)\right]_{m\times n}$的所有元素$a_{ij}(x)$在区间$[a,b]$上对 x 处处可导，则称函数矩阵 $\boldsymbol{A}(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上对 x 可导，$\boldsymbol{A}(x)$ 对 x 的导数记为

$$\boldsymbol{A}'(x)=\frac{d\boldsymbol{A}(x)}{dx}=\begin{bmatrix} a'_{11}(x) & a'_{12}(x) & \cdots & a'_{1n}(x) \\ a'_{21}(x) & a'_{22}(x) & \cdots & a'_{2n}(x) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a'_{m1}(x) & a'_{m2}(x) & \cdots & a'_{mn}(x) \end{bmatrix}.$$

例9.4 求函数矩阵$\boldsymbol{A}(x)=\begin{bmatrix} x^2 & x+x^3 & 0 \\ x+1 & 1 & 1 \\ 0 & \dfrac{1}{x} & e^x \end{bmatrix}, x\neq 0$对 x 的导数。

9.4 函数矩阵的求导

函数矩阵导数运算的常用性质：

(1) 若 $\boldsymbol{A}(x)$ 是常数矩阵，则

$$\frac{d\boldsymbol{A}(x)}{dx} = \boldsymbol{0}$$

(2) 线性法则：若 $\boldsymbol{A}(x), \boldsymbol{B}(x)$ 均可导， λ, μ为实数，则

$$\frac{d}{dx}[\lambda \boldsymbol{A}(x) + \mu \boldsymbol{B}(x)] = \lambda \frac{d\boldsymbol{A}(x)}{dx} + \mu \frac{d\boldsymbol{A}(x)}{dx}$$

(3) 乘法法则：若 $\boldsymbol{A}(x), \boldsymbol{B}(x)$ 均可导，且两者可相乘，则

$$\frac{d}{dx}[\boldsymbol{A}(x)\boldsymbol{B}(x)] = \frac{d\boldsymbol{A}(x)}{dx}\boldsymbol{B}(x) + \boldsymbol{A}(x)\frac{d\boldsymbol{B}(x)}{dx}$$

(4) 若 $\boldsymbol{A}(x), \boldsymbol{A}^{-1}(x)$ 都可导，则

$$\frac{d\boldsymbol{A}^{-1}(x)}{dx} = -\boldsymbol{A}^{-1}(x)\frac{d\boldsymbol{A}(x)}{dx}\boldsymbol{A}^{-1}(x)$$

证明(4)：将$\boldsymbol{A}(x)\boldsymbol{A}^{-1}(x)=\boldsymbol{I}$的两端对$x$求导，得

$$\frac{d\boldsymbol{A}(x)}{dx}\boldsymbol{A}^{-1}(x)+\boldsymbol{A}(x)\frac{d\boldsymbol{A}^{-1}(x)}{dx}=\boldsymbol{0}$$

移项并左乘$\boldsymbol{A}^{-1}(x)$即得性质(4)。

例9.5 函数矩阵$\boldsymbol{A}(x)=\begin{bmatrix} x & 2x-1 \\ 1 & x \end{bmatrix}, x\neq 1$，求$\boldsymbol{A}^{-1}(x)$的导数。

解：易得$\boldsymbol{A}(x)$的逆矩阵为$\boldsymbol{A}^{-1}(x)=\dfrac{1}{(x-1)^2}\begin{bmatrix} x & -2x+1 \\ -1 & x \end{bmatrix}$.

方法一：直接对$\boldsymbol{A}^{-1}(x)$求导，得

$$\frac{d\boldsymbol{A}^{-1}(x)}{dx}=\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{(x-1)^2}\right)\begin{bmatrix} x & -2x+1 \\ -1 & x \end{bmatrix}+\frac{1}{(x-1)^2}\frac{d}{dx}\begin{bmatrix} x & -2x+1 \\ -1 & x \end{bmatrix}$$

$$=-\frac{2}{(x-1)^3}\begin{bmatrix} x & -2x+1 \\ -1 & x \end{bmatrix}+\frac{1}{(x-1)^2}\begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$=-\frac{1}{(x-1)^3}\begin{bmatrix} x+1 & -2x \\ -2 & x+1 \end{bmatrix}.$$

方法二：利用性质(4)求导，可得

$$\frac{d\boldsymbol{A}^{-1}(x)}{dx}=-\boldsymbol{A}^{-1}(x)\frac{d\boldsymbol{A}(x)}{dx}\boldsymbol{A}^{-1}(x)$$

$$=-\frac{1}{(x-1)^2}\begin{bmatrix} x & -2x+1 \\ -1 & x \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\frac{1}{(x-1)^2}\begin{bmatrix} x & -2x+1 \\ -1 & x \end{bmatrix}$$

$$=-\frac{1}{(x-1)^3}\begin{bmatrix} x+1 & -2x \\ -2 & x+1 \end{bmatrix}.$$

9.5 Jacobian矩阵

- 梯度反向传播算法

$$f(x_0, x_1, x_2, w_0, w_1) = \frac{e^{w_0 x_0 - w_1 x_1 + 1}}{x_2^2 - 2}$$

$$x_0 = 1$$

$$x_1 = 1$$

$$x_2 = 1.5$$

$$w_0 = 2$$

$$w_1 = 3$$

9.5 Jacobian矩阵

- 符号规定

$\boldsymbol{x} = [x_1, \cdots, x_n]^T \in \mathbb{R}^n$为实向量变元；

$\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_m] \in \mathbb{R}^{n\times m}$为实矩阵变元；

$f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$为实值标量函数，其变元为$n\times 1$实值向量$\boldsymbol{x}$，记作$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$;

$f(\boldsymbol{X}) \in \mathbb{R}$为实值标量函数，其变元为$n\times m$实值矩阵$\mathbf{X}$，记作$f: \mathbb{R}^{n\times m} \to \mathbb{R}$;

$\boldsymbol{f}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^p$为$p$维实列向量函数，其变元为$n\times 1$实值向量$\boldsymbol{x}$，记作$\boldsymbol{f}: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^p$;

$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{X}) \in \mathbb{R}^p$为$p$维实列向量函数，其变元为$n\times m$实值矩阵$\mathbf{X}$，记作$\boldsymbol{f}: \mathbb{R}^{n\times m} \to \mathbb{R}^p$;

$\boldsymbol{F}(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}^{p\times q}$为$p\times q$维实列向量函数，其变元为$n\times 1$实值向量$\boldsymbol{x}$，记作$\boldsymbol{F}: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{p\times q}$;

$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X}) \in \mathbb{R}^{p\times q}$为$p\times q$维实列向量函数，其变元为$n\times m$实值矩阵$\mathbf{X}$，记作$\boldsymbol{F}: \mathbb{R}^{n\times m} \to \mathbb{R}^{p\times q}$.

- Jacobian矩阵

  $1\times n$行向量偏导算子记为

$$D_{\boldsymbol{x}} \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}^T} = \left[\frac{\partial}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right]$$

于是，实值标量函数$f(\boldsymbol{x})$在$\boldsymbol{x}$的偏导向量由$1\times n$行向量给出：

$$D_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^T} = \left[\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}\right]$$

当实值标量函数$f(\boldsymbol{X})$的变元为实值矩阵$\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^{n\times m}$时，

$$D_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{n1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1m}} & \cdots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{nm}} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n}$$

$D_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X})$称为实值标量函数$f(\boldsymbol{X})$关于矩阵变元$\boldsymbol{X}$的Jacobian矩阵。

9.5 Jacobian矩阵

- 梯度矩阵

采用列向量形式定义的偏导算子称为列向量偏导算子，习惯称为梯度算子。

$n\times 1$列向量偏导算子即梯度算子记为$\nabla_{\boldsymbol{x}}$，定义为

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} \overset{\text{def}}{=} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} = \left[\frac{\partial}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right]^T$$

因此，实值标量函数$f(\boldsymbol{x})$的梯度向量$\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})$为$n\times 1$列向量给出：

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) \overset{\text{def}}{=} \left[\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}\right]^T = \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}$$

当实值标量函数$f(\boldsymbol{X})$的变元为实值矩阵$\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^{n\times m}$时, 定义梯度矩阵

$$\nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) \overset{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1m}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{n1}} & \cdots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{nm}} \end{bmatrix} = \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}$$

9.5 Jacobian矩阵

比较上式与Jacobian矩阵，有

$$\nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) = D_{\boldsymbol{X}}^{T} f(\boldsymbol{X})$$

即实值标量函数$f(\boldsymbol{X})$的梯度矩阵等于Jacobian矩阵的转置。

在流形计算、几何物理、微分几何以及矩阵微分中，Jacobian矩阵是“最自然的”选择；而在最优化和许多工程问题中，采用列向量定义的偏导（梯度向量和梯度矩阵）却是更自然的选择。

9.5 Jacobian矩阵

- 实值函数的偏导和梯度计算

(1) 若$f(\boldsymbol{X}) = c$为常数，其中$\boldsymbol{X}$为n×m矩阵，则梯度$\frac{\partial c}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{O}_{n\times m}$.

(2) 线性法则 若$f(\boldsymbol{X})$和$g(\boldsymbol{X})$分别是矩阵$\boldsymbol{X}$的实值函数，c_1和c_2为实常数，则

$$\frac{\partial[c_1 f(\boldsymbol{X}) + c_2 g(\boldsymbol{X})]}{\partial \boldsymbol{X}} = c_1 \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} + c_2 \frac{\partial g(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}$$

(3) 乘积法则 若$f(\boldsymbol{X})$、$g(\boldsymbol{X})$和$h(\boldsymbol{X})$都是矩阵$\boldsymbol{X}$的实值函数，则

$$\frac{\partial[f(\boldsymbol{X})g(\boldsymbol{X})]}{\partial \boldsymbol{X}} = g(\boldsymbol{X})\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} + f(\boldsymbol{X})\frac{\partial g(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}$$

$$\frac{\partial[f(\boldsymbol{X})g(\boldsymbol{X})h(\boldsymbol{X})]}{\partial \boldsymbol{X}}$$

$$= g(\boldsymbol{X})h(\boldsymbol{X})\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} + f(\boldsymbol{X})h(\boldsymbol{X})\frac{\partial g(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} + f(\boldsymbol{X})g(\boldsymbol{X})\frac{\partial h(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}$$

(4)

9.5 Jacobian矩阵

(4) 商法则 若$g(\boldsymbol{X}) \neq 0$，则

$$\frac{\partial[f(\boldsymbol{X})/g(\boldsymbol{X})]}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{1}{g^2(\boldsymbol{X})}\left[g(\boldsymbol{X})\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} - f(\boldsymbol{X})\frac{\partial g(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}\right]$$

(5) 链式法则 令$\boldsymbol{X}$为$n\times m$矩阵，且$y=f(\boldsymbol{X})$和$g(y)$分别是以矩阵$\boldsymbol{X}$和标量y为变元的实值函数，则

$$\frac{\partial g(f(\boldsymbol{X}))}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\mathrm{d}g(y)}{\mathrm{d}y}\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}$$

独立性基本假设 假定实值函数的向量变元$\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^n$或者矩阵变元$\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^{n\times m}$本身无任何特殊结构, 即向量的元素之间是各自独立的.

该基本假设可以用数学公式表示成:

$$\frac{\partial x_i}{\partial x_j} = \delta_{ij} = \begin{cases}1, i=j\\ 0, others\end{cases} \qquad \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ij}} = \delta_{ki}\delta_{lj} = \begin{cases}1, k=i \wedge l=j\\ 0, others\end{cases}$$

例9.6 求实值函数 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$的Jacobian矩阵。

解：由于$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{kj}x_k x_j$，利用独立性假设可求出偏导向量$\frac{\partial \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}^T}$的第$i$个分量为

$$\left[\frac{\partial \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}^T}\right]_i=\frac{\partial}{\partial x_i}\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{kj}x_k x_j$$

$$=\sum_{k=1}^{n}a_{ki}x_k+\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j$$

立即得行偏导向量

$$Df(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}+\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}^T=\boldsymbol{x}^T(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^T)$$

而梯度向量$\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})=\left(Df(\boldsymbol{x})\right)^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{A}^T+\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}$

例9.7 求实值函数 $f(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{a}^T\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{b}$的Jacobian矩阵，其中 $\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^{n\times m}$，$\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}^n$.

解：由于 $\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{b} = \sum_{k=1}^n\sum_{l=1}^n a_k(\sum_{p=1}^m x_{kp}x_{lp})b_l$

利用独立性假设，易知

$$\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}^T}\right]_{ij} = \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{ji}} = \sum_{k=1}^n\sum_{l=1}^n\sum_{p=1}^m \frac{\partial a_k x_{kp} x_{lp} b_l}{\partial x_{ji}}$$

$$= \sum_{k=1}^n\sum_{l=1}^n\sum_{p=1}^m \left[a_k x_{lp} b_l \frac{\partial x_{kp}}{\partial x_{ji}} + a_k x_{kp} b_l \frac{\partial x_{lp}}{\partial x_{ji}}\right]$$

$$= \sum_{l=1}^n a_j x_{li} b_l + \sum_{k=1}^n a_k x_{ki} b_j = [\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{b}]_i a_j + [\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{a}]_i b_j$$

由此得Jacobian矩阵为 $D_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{X}^T(\boldsymbol{b}\boldsymbol{a}^T + \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^T)$，梯度矩阵为 $\nabla_{\boldsymbol{X}} f(\boldsymbol{X}) = (\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^T + \boldsymbol{b}\boldsymbol{a}^T)\boldsymbol{X}$.

例9.8 求实值函数 $f(\boldsymbol{X}) = tr(\boldsymbol{XB})$的Jacobian矩阵, 其中$\boldsymbol{X}$和$\boldsymbol{B}$分别为$n\times m$和$m\times n$实矩阵。

解：首先，矩阵乘积的元素为

$$[\boldsymbol{XB}]_{kl} = \sum_{p=1}^{m} x_{kp} b_{pl}$$

故矩阵乘积的迹

$$tr(\boldsymbol{XB}) = \sum_{l=1}^{n}\sum_{p=1}^{m} x_{lp} b_{pl}$$

于是，利用独立性假设有

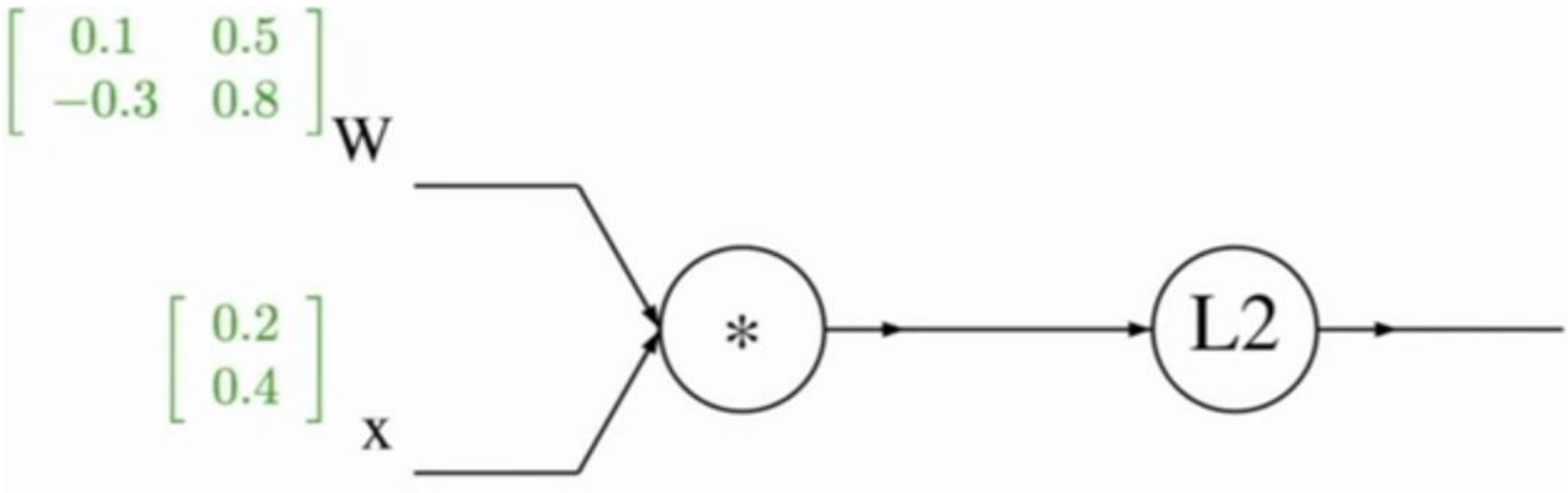
$$\left[\frac{\partial tr(\boldsymbol{XB})}{\partial \boldsymbol{X}^T}\right]_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}}\left(\sum_{l=1}^{n}\sum_{p=1}^{m} x_{lp} b_{pl}\right) = \sum_{l=1}^{n}\sum_{p=1}^{m} \frac{\partial x_{lp}}{\partial x_{ji}} b_{pl} = b_{ij}$$

即有$\frac{\partial tr(\boldsymbol{XB})}{\partial \boldsymbol{X}^T} = \boldsymbol{B}$. 又由于$tr(\boldsymbol{XB}) = tr(\boldsymbol{BX})$，故

$$D_{\boldsymbol{X}} tr(\boldsymbol{XB}) = D_{\boldsymbol{X}} tr(\boldsymbol{BX}) = \boldsymbol{B}$$
$$\nabla_{\boldsymbol{X}} tr(\boldsymbol{XB}) = \nabla_{\boldsymbol{X}} tr(\boldsymbol{BX}) = \boldsymbol{B}^T$$

9.5 Jacobian矩阵

例9.9 神经网络反向传播中的梯度分析，其中 $f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{W}) = \|\boldsymbol{W}\boldsymbol{x}\|^2$



9.5 Jacobian矩阵

练习：

9.3、$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$, 求证：

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{a}$$

9.4、 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{n \times n}$,

求实值函数 $f(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{a}^T \boldsymbol{X} \boldsymbol{b}$ 的Jacobian矩阵和梯度矩阵。

- 矩阵的广义逆

从广义的角度讲，任何一个矩阵G都可以称为矩阵A的逆矩阵，若它与矩阵A的乘积等于单位矩阵I，即$GA=I$. 根据矩阵A本身的特点，满足这一定义的矩阵G存在以下三种可能的答案：

(1) 在某些情况下，G存在，并且唯一；

(2) 在另一些情况下，G存在，但不唯一；

(3) 在有些情况下，G不存在。

例：

$$\boldsymbol{A}_1=\begin{bmatrix}2 & -2 & -1\\ 1 & 1 & -2\\ 1 & 0 & -1\end{bmatrix},\boldsymbol{A}_2=\begin{bmatrix}4 & 8\\ 5 & -7\\ -2 & 3\end{bmatrix},\boldsymbol{A}_3=\begin{bmatrix}1 & 3 & 1\\ 2 & 5 & 1\end{bmatrix}$$

9.6 广义逆矩阵与最小二乘

$\boldsymbol{A}_1$有唯一逆矩阵，$\boldsymbol{A}_2$存在多个2×3矩阵$\boldsymbol{L}$使得$\boldsymbol{L}\boldsymbol{A}_2$=$\boldsymbol{I}_{2\times 2}$，如

$$\boldsymbol{A}_2=\begin{bmatrix}4 & 8\\ 5 & -7\\ -2 & 3\end{bmatrix},\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix}\dfrac{7}{68} & \dfrac{2}{17} & 0\\ 0 & 2 & 5\end{bmatrix},\boldsymbol{L}=\begin{bmatrix}0 & 3 & 7\\ 0 & 2 & 5\end{bmatrix},\cdots$$

对矩阵$\boldsymbol{A}_3$，没有任何3×2矩阵使得$\boldsymbol{G}_3\boldsymbol{A}_3$=$\boldsymbol{I}_{3\times 3}$，但存在多个3×2矩阵$\boldsymbol{R}$，使得$\boldsymbol{A}_3\boldsymbol{R}$= $\boldsymbol{I}_{2\times 2}$，例如

$$\boldsymbol{A}_3=\begin{bmatrix}1 & 3 & 1\\ 2 & 5 & 1\end{bmatrix},\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}1 & 1\\ -1 & 0\\ 3 & -1\end{bmatrix},\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 0 & 0\\ 2 & -1\end{bmatrix},\cdots$$

定义9.1 满足$\boldsymbol{LA}$=$\boldsymbol{I}$，但不满足$\boldsymbol{AL}$=$\boldsymbol{I}$的矩阵$\boldsymbol{L}$称为矩阵$\boldsymbol{A}$的左逆矩阵。类似地，满足$\boldsymbol{AR}$=$\boldsymbol{I}$，但不满足$\boldsymbol{RA}$=$\boldsymbol{I}$的矩阵$\boldsymbol{R}$称为矩阵$\boldsymbol{A}$的右逆矩阵。

(1) 仅当$n \geq m$时，矩阵$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$可能有左逆矩阵；

(2) 仅当$n \leq m$时，矩阵$\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$可能有右逆矩阵。

一个矩阵的左逆矩阵或右逆矩阵往往非唯一，下面考虑它们的唯一解：

考查$n>m$且$\boldsymbol{A}$具有满列秩$(\mathrm{rank}\ \boldsymbol{A} = m)$的情况。此时，$m \times m$矩阵$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$是可逆的，容易验证$\boldsymbol{L} = (\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^T$满足$\boldsymbol{LA}=\boldsymbol{I}$，这种左逆矩阵是唯一确定的，常称为左伪逆矩阵。

考查$n<m$且$\boldsymbol{A}$具有满行秩$(\mathrm{rank}\ \boldsymbol{A} = n)$的情况。此时，$n \times n$矩阵$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T$是可逆的，容易验证$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{A}^T(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^T)^{-1}$满足$\boldsymbol{AR}=\boldsymbol{I}$，这种右逆矩阵是唯一确定的，常称为右伪逆矩阵。

9.6 广义逆矩阵与最小二乘

- 广义逆矩阵

考虑一个$n\times m$维的秩亏缺矩阵$\boldsymbol{A}$，$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})<\min\{m,n\}$. $n\times m$维的秩亏缺矩阵的逆矩阵称为广义逆矩阵，它是一个$m\times n$矩阵。令A^{-}表示$\boldsymbol{A}$的广义逆矩阵。

无论$\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}_{m\times m}$还是$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-}=\boldsymbol{I}_{n\times n}$都不可能成立。有必要使用三个矩阵的乘积定义一个秩亏缺矩阵$\boldsymbol{A}$的逆矩阵。

考虑线性矩阵方程$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$的求解。两边左乘$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-}$，则有$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{y}$. 若$\boldsymbol{A}^{-}$是$\boldsymbol{A}$的广义逆矩阵，则$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}\Rightarrow\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{y}$，代入$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{y}$可得$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，我们希望该式对任意非零向量$\boldsymbol{x}$均应成立，则必须要求下列约束条件满足：$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}$

满足$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}$的矩阵$\boldsymbol{A}^{-}$称为$\boldsymbol{A}$的广义逆矩阵。

- Moore-Penrose逆矩阵

满足$AA^{-}A = A$的矩阵A^{-}不是唯一的，存在明显的缺陷。只能保证A^{-}是A的广义逆矩阵，并不能保证A是A^{-}的广义逆矩阵。

考虑原矩阵方程$Ax=y$的解方程$x=A^{-}y$的求解。两边左乘$A^{-}A$，则有 $A^{-}Ax=A^{-}AA^{-}y$. 由于矩阵A是A^{-}的广义逆矩阵，则$x=A^{-}y \Rightarrow Ax=y$，代入$Ax=y$可得$A^{-}y=A^{-}AA^{-}y$，因此

$$A^{-}AA^{-}=A^{-}$$

也需要满足。

我们还希望当A是列满秩或者行满秩时，广义逆矩阵A^{-}能够包括左伪逆矩阵和右伪逆矩阵在内的特例。左伪逆矩阵$L=(A^TA)^{-1}A^T$满足$LA=I$但不存在$AL=I$，但$AL=A(A^TA)^{-1}A^T=(AL)^T$，同样，右伪逆矩阵满足$RA=(RA)^T$。

- Moore-Penrose逆矩阵

定义9.2 令A是任意$n \times m$矩阵，称$\boldsymbol{A}^+$是$\boldsymbol{A}$的广义逆矩阵，若$\boldsymbol{A}^+$满足以下四个条件（常称Moore-Penrose 条件）

(1) $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}$

(2) $\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^+ = \boldsymbol{A}^+$

(3) $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^+=(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^+)^T$

(4) $\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A})^T$

与逆矩阵、左伪逆矩阵、右伪逆矩阵一样，Moore-Penrose逆矩阵也是唯一的。

逆矩阵和之前介绍的各种广义逆矩阵都是Moore-Penrose逆矩阵的特例。

9.6 广义逆矩阵与最小二乘

Moore-Penrose 条件 (1) 是$\boldsymbol{A}$的广义逆矩阵$\boldsymbol{A}^+$必须满足的条件；而条件 (2) 是$\boldsymbol{A}^+$的广义逆矩阵$\boldsymbol{A}$必须满足的条件。

- Moore-Penrose逆矩阵$\boldsymbol{A}^+$具有的性质

(1) Moore-Penrose逆矩阵$\boldsymbol{A}^+$是唯一的；

(2) Moore-Penrose逆矩阵的广义逆矩阵等于原矩阵：$(\boldsymbol{A}^+)^+=\boldsymbol{A}$

(3) 若$\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(d_{11},\cdots,d_{nn})$为$n\times n$对角矩阵, 则$\boldsymbol{D}^+=\mathrm{diag}(d_{11}^+,\cdots,d_{nn}^+)$, 其中$d_{ii}^+ = d_{ii}^{-1}$(若$d_{ii}\neq 0$)或者$d_{ii}^+ = 0$(若$d_{ii}=0$) 。

- 利用SVD分解计算Moore-Penrose逆矩阵$\boldsymbol{A}^+$

若$n\times m$矩阵$\boldsymbol{A}$的奇异值分解为$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T$, 其中$\boldsymbol{U}$是$n\times n$的正交阵, $\boldsymbol{V}$是$m\times m$的正交阵，$\boldsymbol{\Sigma}$是$n\times m$的对角阵，则$\boldsymbol{A}^+= \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^+\boldsymbol{U}^T$。

- 验证$\boldsymbol{A}^+ = \boldsymbol{V\Sigma}^+\boldsymbol{U}^T$满足Moore-Penrose条件

(1) $\boldsymbol{AA}^+\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}$

$$\boldsymbol{U\Sigma V}^T\boldsymbol{V\Sigma}^+\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{U\Sigma V}^T = \boldsymbol{U\Sigma\Sigma}^+\boldsymbol{\Sigma V}^T = \boldsymbol{U\Sigma V}^T$$

(2) $\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{AA}^+ = \boldsymbol{A}^+$

$$\boldsymbol{V\Sigma}^+\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{U\Sigma V}^T\boldsymbol{V\Sigma}^+\boldsymbol{U}^T = \boldsymbol{V\Sigma}^+\boldsymbol{\Sigma\Sigma}^+\boldsymbol{U}^T = \boldsymbol{V\Sigma}^+\boldsymbol{U}^T$$

(3) $\boldsymbol{AA}^+ = (\boldsymbol{AA}^+)^T$

即证：$\boldsymbol{\Sigma\Sigma}^+ = (\boldsymbol{\Sigma\Sigma}^+)^T$

(4) $\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A})^T$

即证：$\boldsymbol{\Sigma}^+\boldsymbol{\Sigma} = (\boldsymbol{\Sigma}^+\boldsymbol{\Sigma})^T$

作业：

9.5、求矩阵$\boldsymbol{A}$的Moore-Penrose逆矩阵（可在习题9.2的基础上完成）：

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

9.6 广义逆矩阵与最小二乘

在众多科学与工程学科，许多问题都可用数学建模成矩阵方程$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$. 根据数据向量$\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}^n$和数据矩阵$\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times m}$的不同，矩阵方程有以下三种主要类型：

(1) 超定矩阵方程 $n>m$，并且数据矩阵$\boldsymbol{A}$和数据向量b均已知，其中之一或者二者可能存在误差或干扰。

(2) 盲矩阵方程 仅数据向量b已知，数据向量$\boldsymbol{A}$未知。

(3) 欠定系数矩阵方程 $n<m$，数据矩阵$\boldsymbol{A}$和数据向量b均已知，但未知向量x为稀疏向量。

考虑超定矩阵方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其中$\boldsymbol{b}$为$n\times1$数据向量，$\boldsymbol{A}$为$n\times m$数据矩阵，并且$n>m$.

加性观测误差或噪声：$\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}_0+\boldsymbol{e}$

校正向量 $\Delta\boldsymbol{b}$，使$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}$

$$\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}_0+\boldsymbol{e}+\Delta\boldsymbol{b}\rightarrow\boldsymbol{b}_0$$

目标：$\Delta\boldsymbol{b}\rightarrow0$

$$\min_{\boldsymbol{x}}\|\boldsymbol{b}\|^2=\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_2^2=(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b})^T(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b})$$

$$\phi=\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}-\boldsymbol{b}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{b}^T\boldsymbol{b}$$

$$\frac{d\phi}{d\boldsymbol{x}}=0=2\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$$

9.6 广义逆矩阵与最小二乘

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$$

情形一：超定方程(n>m)满列秩，即rank($\boldsymbol{A}$)=m

由于$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$非奇异，所以方程有唯一解

$$\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}} = (\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$$

情形二：超定方程(n>m) 秩亏缺，即rank($\boldsymbol{A}$)<m

$$\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}} = (\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})^{\ddagger}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$$

其中$\boldsymbol{B}^{\ddagger}$代表$\boldsymbol{B}$的广义逆矩阵。

9.7 稀疏矩阵与稀疏编码

一个含有大多数零元素的向量/矩阵称为稀疏向量/稀疏矩阵。

信号向量$\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$最多可分解为$n$个正交基$g_k\in\mathbb{R}^n$, $k=1,\cdots,n$, 这些正交基的集合称为完备正交基。此时，信号分解

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{G}\boldsymbol{c}=\sum_{i=1}^{n} c_i\boldsymbol{g}_i$$

中的系数向量$\boldsymbol{c}$一定是非稀疏的。

若将信号向量$\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$分解为$m$个$n$维向量$\boldsymbol{d}_i\in\mathbb{R}^n$, $i=1,\cdots,m$ (其中$m>n$)的线性组合

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{D}\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n} x_i\boldsymbol{d}_i \qquad (m>n)$$

则m个向量$\boldsymbol{d}_i$不可能是正交基的集合。

为了与正交基区别，称$\boldsymbol{d}_i$ 为原子、码字、基函数或基向量。由于原子的个数m大于向量空间$\mathbb{R}^n$的维数n，称这些原子的集合是过完备的。

过完备的原子组成的矩阵$\boldsymbol{D}=[\boldsymbol{d}_1, \cdots, \boldsymbol{d}_m]\in\mathbb{R}^{n\times m}$称为字典或码本. 对字典$\boldsymbol{D}\in\mathbb{R}^{n\times m}$通常作如下假设：

(1) $\boldsymbol{D}$的行数n小于列数m.

(2) $\boldsymbol{D}$具有满行秩，即$\mathrm{rank}(\boldsymbol{D}) = n$.

(3) $\boldsymbol{D}$的列具有单位Euclidean范数$\|\boldsymbol{d}_j\| = 1, j = 1,2, \cdots , m$.

信号过完备分解存在无穷多组解向量$\boldsymbol{x}$.

1) 经典方法（求最小l_2范数解）

$$\min\|\mathbf{x}\|_2 \quad \text{subject to} \quad \boldsymbol{D}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$$

2) 现代方法（求最小l_0范数解）

$$\min\|\mathbf{x}\|_0 \quad \text{subject to} \quad \boldsymbol{D}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$$

称为目标信号$\boldsymbol{y}$相对于字典$\boldsymbol{D}$的稀疏表示。

两种方法的优缺点：解的唯一性、稀疏性、计算难度。

在存在观测数据误差或背景噪声的情况下，最小l_0范数解为

$$\min\|\mathbf{x}\|_0 \quad \text{subject to} \quad \|\boldsymbol{D}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\| \le \varepsilon$$

式中ε为一很小的误差或扰动。称为目标信号$\boldsymbol{y}$相对于字典$\boldsymbol{D}$的稀疏逼近。

当系数向量 $\boldsymbol{x}$ 是稀疏向量时，信号分解 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{D}\boldsymbol{x}$ 称为(信号的)稀疏分解。其中，字典矩阵$\boldsymbol{D}$的列常称为解释变量或预测变量；向量$\boldsymbol{y}$称为响应变量或目标信号；而$\boldsymbol{x}$则可视为目标信号$\boldsymbol{y}$相对于字典$\boldsymbol{D}$的一种表示。

稀疏编码问题：给定一个n维实值输入向量$\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$，确定$m$个$n$维基向量$\boldsymbol{d}_1, \cdots, \boldsymbol{d}_m\in\mathbb{R}^n$以及一个稀疏的 n 维权向量或者系数向量$\boldsymbol{s}\in\mathbb{R}^m$，使得部分基向量的加权线性组合可以充分逼近输入向量，即$\boldsymbol{y}\approx\boldsymbol{D}\boldsymbol{s}$，其中$\boldsymbol{D}=[\boldsymbol{d}_1, \cdots, \boldsymbol{d}_m]\in\mathbb{R}^{n\times m}$.

9.7 稀疏矩阵与稀疏编码

如果给定的是n维实值输入向量的一组集合$\{\boldsymbol{y}_1,\boldsymbol{y}_2,\cdots,\boldsymbol{y}_k\}$，则稀疏编码的目的就是确定基矩阵$\boldsymbol{D}$和系数矩阵$\boldsymbol{S}$，使得$\boldsymbol{Y}\approx\boldsymbol{DS}$. 其中系数矩阵的每一个列向量都是稀疏向量。

稀疏编码的主要特点是系数向量只有少数元素不等于零，大多数元素为零。

稀疏编码可能是临界完备的或过完备的。临界完备是指基向量的个数m等于输入向量的维数n.

[讨论]影响稀疏编码精度的因素有哪些？

$\boldsymbol{D}=[\boldsymbol{d}_1, \cdots, \boldsymbol{d}_m]\in\mathbb{R}^{n\times m}$, $\boldsymbol{y}\in\mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{x}\in\mathbb{R}^m$

求解方程

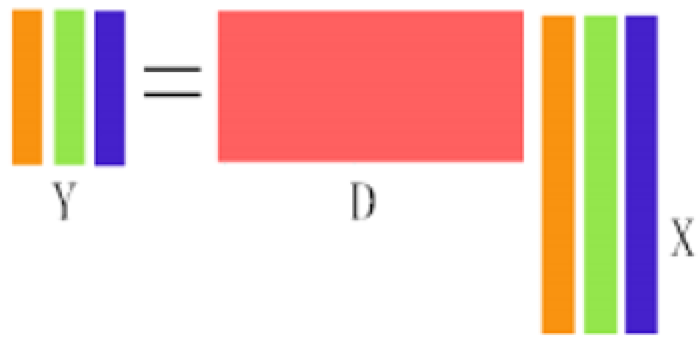
$$\min_{\boldsymbol{x}} \|\boldsymbol{x}\|_0 \quad \text{subject to} \quad \|\boldsymbol{D}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\| \le \varepsilon$$

- 稀疏编码中的常见问题

(1) 基向量的训练

(2) 稀疏编码的求解

- 稀疏矩阵方程的求解



如图所示，在稀疏编码中，**Y**是需要进行编码的样本集，**D**是超完备字典，**X**是系数矩阵。稀疏矩阵方程的求解就是为了求解出系数矩阵**X**。

直接求解该优化问题，必须筛选出系数向量x中所有可能的非零元素。此方法是NP困难的，因为搜索空间过于庞大。

9.7 稀疏矩阵与稀疏编码

- 贪婪求解算法

(1) 匹配追踪算法(MP算法)：迭代地构造一个稀疏解

从字典矩阵$\boldsymbol{D}$（也称为过完备原子库中），选择一个与信号 y 最匹配的原子(也就是某列)，构建一个稀疏逼近，并求出信号残差，然后继续选择与信号残差最匹配的原子，反复迭代，信号y可以由这些原子来线性和，再加上最后的残差值来表示。

与信号y 最匹配的原子就是与信号y的相关系数的绝对值最大的原子。

一般地，预先将信号y零均值化，将字典中的原子（即$\boldsymbol{D}$中的列向量）也零均值化，再将原子归一化后再进行求解。此时，与信号y 最匹配的原子就是与y的内积的绝对值最大的原子。

优点：计算速度快、收敛性差

(2) 正交匹配追踪算法(OMP算法)

在分解的每一步对残差与所选择的全部原子进行正交化处理，这使得在精度要求相同的情况下，OMP算法的收敛速度更快。

优点：计算速度快、收敛性好

一个原子不会被选择两次，因此结果会在有限的几步收敛。

- 字典训练算法K-SVD

K-SVD算法是2006年由以色列理工学院的Michal Aharon、Michael Elad等人提出来，是一种非常经典的字典训练算法，并且达到了很好的训练效果。

- 基本思想

在稀疏编码中，除了稀疏表示外，另外一个重要工作就是过完备字典的训练。过完备字典质量的好坏对稀疏编码的结果有很大的影响。

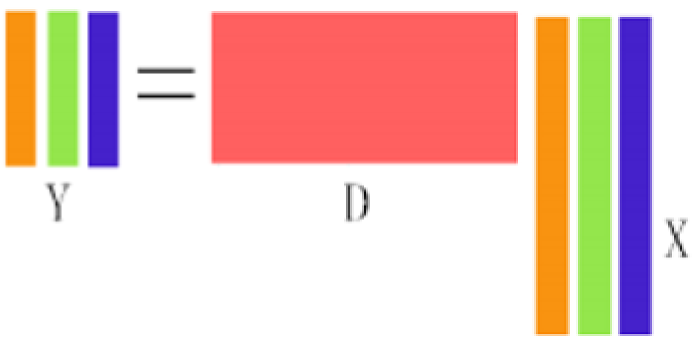
K-SVD算法主要分为两个步骤，稀疏表示与字典更新：

稀疏表示：对于目标信号集$\boldsymbol{Y}\in\mathbb{R}^{n\times N}$，初始化字典$\boldsymbol{D}\in\mathbb{R}^{n\times m}$，采用各类稀疏编码的求解算法来求解出系数矩阵$\boldsymbol{X}\in\mathbb{R}^{m\times N}$；

- 字典设计目标

$$\min_{\boldsymbol{D},\boldsymbol{X}}\{\|\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{D}\boldsymbol{X}\|^2\} \quad \text{subject to} \quad \forall i, \|\boldsymbol{x}_i\|_0 \le T_0$$

- 字典更新



K-SVD更新字典的方法为逐列更新字典，并且更新系数矩阵中相应行的非零项的值。当更新第k列原子的时候，其它的原子固定不变。

假设当前更新的是字典$\boldsymbol{D}$中第k列原子，将其表示为$\boldsymbol{d}_k$，其对应系数矩阵相应的第k行，令其为$\boldsymbol{X}_T^k$。那么样本矩阵与字典表示之间的误差可以表示为：

$$||\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{D}\boldsymbol{X}||^2=||\boldsymbol{Y}-\sum_{j=1}^{m}\boldsymbol{d}_j\boldsymbol{X}_T^j||^2$$

$$=||(\boldsymbol{Y}-\sum_{j\neq k}^{m}\boldsymbol{d}_j\boldsymbol{X}_T^j)-\boldsymbol{d}_k\boldsymbol{X}_T^k||^2$$

$$=||\boldsymbol{E}_k-\boldsymbol{d}_k\boldsymbol{X}_T^k||^2$$

依据误差最小原则，对误差项进行SVD分解, 选择使误差最小的分解项作为更新的字典原子和系数矩阵$\boldsymbol{X}$中对应的原子系数，经过不断的迭代从而得到最优化的解。

第四部分 矩阵论初步

第9章 矩阵基础及应用

第10章 应用回归分析初步

第四部分 矩阵论初步

第9章 矩阵基础及应用

第10章 应用回归分析初步

- 拟合与回归

如果向量$x_1, x_2, \cdots, x_p$与向量y之间存在相关关系，能找到一个关于$x_1, x_2, \cdots, x_p$的函数 f 和一个满足要求的范数较小的ε，使得

$$y = f(x_1, x_2, \cdots, x_p) + \varepsilon$$

则称 $f(x_1, x_2, \cdots, x_p)$是$x_1, x_2, \cdots, x_p$对 y 的拟合。

y称为响应变量（因变量），x_i称为解释变量（自变量）

因为满足要求的函数 f 有无数种可能，从而有各种拟合方法: 如果 f 是线性的，就叫线性拟合或者线性回归(主要在统计中)，否则叫作非线性拟合或者非线性回归。

当拟合的结果是一条曲线时，称为曲线拟合，曲线拟合中 f 的表达式也可以是分段函数，这种情况下叫作样条拟合。

10.1 拟合与回归

- 回归分析的主要研究内容

从19世纪初（1809年）高斯提出最小二乘算起，回归分析的历史已有200多年。

回归分析研究的主要对象是客观事物变量间的统计关系，它是建立在对客观事物进行大量试验和观察的基础上，用来寻找隐藏在那些看上去是不确定现象中的统计规律性的统计方法。

- 回归问题的分类

根据 f 的类型分类：线性回归、非线性回归

根据自变量的个数分类：一元回归、多元回归

- 随机误差

$$y = f(x_1, x_2, \cdots, x_p) + \varepsilon$$

其中 ε 为随机误差。正是因为随机误差项 ε 的引入，才将变量之间的关系描述为一个随机方程。

- 简单回归

一元线性回归，又称为简单回归，是两个变量之间最简单的回归模型。如果向量$\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_n]^T$与$\boldsymbol{y}=[y_1,y_2,\cdots,y_n]^T$之间存在线性关系，简单回归寻找两个回归系数$\beta_0$与$\beta_1$，使得

$$y_i \quad \beta_0+\beta_1 x_i, \qquad i=1,2,\cdots,n$$

或者

$$\boldsymbol{y}\approx\beta_0\boldsymbol{1}+\beta_1\boldsymbol{x}$$

此时，称 $\hat{\boldsymbol{y}}=\beta_0\boldsymbol{1}+\beta_1\boldsymbol{x}$ 为 $\boldsymbol{y}$ 的估计量。

- 简单回归方程的一般解法

一般地，将β_0与β_1的求解问题转换为最小化二范数问题，即

$$\min\|\boldsymbol{\varepsilon}\|_2^2,\ s.t.\ \ \boldsymbol{y}=\beta_0\boldsymbol{1}+\beta_1\boldsymbol{x}+\boldsymbol{\varepsilon}$$

$\|\boldsymbol{\varepsilon}\|^2 = \sum_{i=1}^{n}[y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)]^2$，利用最小二乘法，有

$$\frac{\partial\|\boldsymbol{\varepsilon}\|^2}{\partial\beta_0} = 0 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n}\frac{\partial[y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)]^2}{\partial\beta_0} = 0$$

$$\Leftrightarrow 0 = \sum_{i=1}^{n} y_i - n\beta_0 - \beta_1\sum_{i=1}^{n} x_i$$

$$\frac{\partial\|\boldsymbol{\varepsilon}\|^2}{\partial\beta_1} = 0 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n}\frac{\partial[y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)]^2}{\partial\beta_1} = 0$$

$$\Leftrightarrow 0 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \beta_0\sum_{i=1}^{n} x_i - \beta_1\sum_{i=1}^{n} x_i^2$$

令 $\bar{x}=\frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n}$，$\bar{y}=\frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}$ 分别为**x**和**y**的元素均值，则

$$\hat{\beta}_0=\bar{y}-\hat{\beta}_1\bar{x}$$

$$\hat{\beta}_1=\frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i-n\bar{x}\bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2-n(\bar{x})^2}$$

其中$\hat{\beta}_0,\hat{\beta}_1$分别是参数$\beta_0$与$\beta_1$的最小二乘估计。

在实际中对向量**x**与向量**y**，只需先分别求出它们的样本均值$\bar{x}$和$\bar{y}$以及$\sum_{i=1}^{n} x_i^2$和$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i$，就可以根据上式求出参数β_0与β_1的估计值。

- 多元回归问题

多元回归是使用多个变量的线性组合来对响应变量进行逼近的回归模型。即对向量$\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_m$与响应向量$\boldsymbol{y}$，寻找回归系数$\beta_0, \beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_m$使得

$$\boldsymbol{y} \approx \beta_0 \boldsymbol{1} + \beta_1 \boldsymbol{x}_1 + \beta_2 \boldsymbol{x}_2 + \cdots + \beta_m \boldsymbol{x}_m$$

此时，称$\hat{\boldsymbol{y}} = \beta_0 \boldsymbol{1} + \beta_1 \boldsymbol{x}_1 + \beta_2 \boldsymbol{x}_2 + \cdots + \beta_m \boldsymbol{x}_m$为$\boldsymbol{y}$的估计量。

- 多元回归方程的一般解法（帽子矩阵法）

类似地，将拟合系数$\beta_0, \beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_m$的求解问题转换为最小化二范数问题，即

$$\min \|\boldsymbol{\varepsilon}\|_2^2,\ \ s.t.\ \ \boldsymbol{y} = \beta_0 \boldsymbol{1} + \beta_1 \boldsymbol{x}_1 + \beta_2 \boldsymbol{x}_2 + \cdots + \beta_m \boldsymbol{x}_m + \boldsymbol{\varepsilon}$$

令$\boldsymbol{X} = [\mathbf{1} \quad \boldsymbol{x}_1 \quad \boldsymbol{x}_2 \quad \cdots \quad \boldsymbol{x}_m]$, $\boldsymbol{\beta} = [\beta_0 \quad \beta_1 \quad \cdots \quad \beta_m]^T$则有

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}$$

从而有

$$\|\boldsymbol{\varepsilon}\|_2^2 = \langle \boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\beta}, \boldsymbol{y} - \boldsymbol{X\beta} \rangle = \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{X\beta} + \boldsymbol{\beta}^T\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X\beta}$$

利用最小二乘法，有

$$\frac{\partial \|\boldsymbol{\varepsilon}\|_2^2}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -2\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y} + 2\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = 0$$

因此，

$$\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$$

当$(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}$存在时，即得拟合参数的最小二乘估计为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$$

最后有

$$\widehat{\boldsymbol{\beta}}=(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$$

$$\widehat{\boldsymbol{y}}=\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{y}$$

其中称$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T$称为帽子矩阵，它是对称幂等阵，即

$$\boldsymbol{H}^T=\boldsymbol{H}, \qquad \boldsymbol{H}^n=\boldsymbol{H}, \qquad (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H})^n=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H}$$

- 稀疏拟合

从向量$\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_m$中选择$k$个向量来对y进行线性拟合($k\leq m$为一较小的值)称为基于向量$\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_m$对y的稀疏拟合。

稀疏拟合一般会限定拟合精度（即限定$\|\boldsymbol{\varepsilon}\|$的大小）或限定拟合向量的项数$k$。

- 目标： $\|\boldsymbol{\varepsilon}\| < \delta$

  按照帽子矩阵公式，有

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T)\boldsymbol{y}$$

从而要求

$$\|(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^T\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^T)\boldsymbol{y}\| < \delta$$

- 目标：k

  此时共有C_m^k种可能的情况

  一般地，稀疏拟合可能有多个响应变量$\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_l$

  帽子公式的优缺点：

  直观、易于理解，但计算复杂度高

10.4 基于条件不相关性的稀疏回归方法

- 多元相关性及其度量方法

$$\rho_{\mathbf{ab}}^2 = 1 - \det\begin{bmatrix}\rho_{\mathbf{aa}} & \rho_{\mathbf{ab}} \\ \rho_{\mathbf{ba}} & \rho_{\mathbf{bb}}\end{bmatrix}$$

  - 无符号相关系数（UCC）

如果非零方差向量 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \cdots, \mathbf{v}_m$ 的相关矩阵为**R**，则它们的无符号相关系数 r 定义为：

$$r^2 = 1 - \det(\mathbf{R})$$

  - 无符号多元不相关系数（UIC）

如果非零方差向量 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \cdots, \mathbf{v}_m$ 的相关矩阵为**R**，则它们的无符号不相关系数 ω 定义为：

$$\omega^2 = \det(\mathbf{R})$$

非零方差向量**a**, **b**, **c**的三元相关系数$r_{\mathbf{abc}}$（默认为无符号）为：

$$r_{\mathbf{abc}}^2 = \rho_{\mathbf{ab}}^2 + \rho_{\mathbf{bc}}^2 + \rho_{\mathbf{ca}}^2 - 2\rho_{\mathbf{ab}}\rho_{\mathbf{bc}}\rho_{\mathbf{ca}}$$

10.4 基于条件不相关性的稀疏回归方法

- 多元相关系数r/多元不相关系数ω的属性

属性1 r和ω都是所涉及变量的对称函数。

属性2 r和ω的值域都是[0,1].

属性3 $r=1$则这组变量与向量**1**线性相关。

属性4 $r=0$则任两个变量之间的相关性为0。

以下仅针对三元相关系数进行说明：

1) $r_{\mathbf{abc}}^2=\rho_{\mathbf{ab}}^2+\rho_{\mathbf{bc}}^2+\rho_{\mathbf{ca}}^2-2\rho_{\mathbf{ab}}\rho_{\mathbf{bc}}\rho_{\mathbf{ca}}$ 是**a**, **b**, **c**的对称函数；

2) $0\leq r_{\mathbf{abc}}^2\leq 1$

证：

左：

$$\begin{aligned} r_{\mathbf{abc}}^2 &= \rho_{\mathbf{ab}}^2+\rho_{\mathbf{bc}}^2+\rho_{\mathbf{ca}}^2-2\rho_{\mathbf{ab}}\rho_{\mathbf{bc}}\rho_{\mathbf{ca}} \\ &= (|\rho_{\mathbf{ab}}|-|\rho_{\mathbf{bc}}|)^2+\rho_{\mathbf{ca}}^2+2|\rho_{\mathbf{ab}}\rho_{\mathbf{bc}}|-2\rho_{\mathbf{ab}}\rho_{\mathbf{bc}}\rho_{\mathbf{ca}} \end{aligned}$$

右：令$\mathbf{a}',\mathbf{b}',\mathbf{c}'$分别为a, b, c的标准化向量，且

$$< \mathbf{a}',\mathbf{b}' > - < \mathbf{a}',\mathbf{c}' >< \mathbf{b}',\mathbf{c}' >$$
$$= < \mathbf{a}' - < \mathbf{a}',\mathbf{c}' > \mathbf{c}',\mathbf{b}' - < \mathbf{b}',\mathbf{c}' > \mathbf{c}' >$$

利用柯西-施瓦茨不等式，有

$$< \mathbf{a}' - < \mathbf{a}',\mathbf{c}' > \mathbf{c}',\mathbf{b}' - < \mathbf{b}',\mathbf{c}' > \mathbf{c}' >^2$$
$$\le \|\mathbf{a}' - < \mathbf{a}',\mathbf{c}' > \mathbf{c}'\|^2 \|\mathbf{b}' - < \mathbf{b}',\mathbf{c}' > \mathbf{c}'\|^2$$
$$= [\|\mathbf{a}'\|^2 - < \mathbf{a}',\mathbf{c}' >^2][\|\mathbf{b}'\|^2 - < \mathbf{b}',\mathbf{c}' >^2]$$

3) $r_{\mathbf{abc}}^2$=1当且仅当$\mathbf{a}'$, $\mathbf{b}'$, $\mathbf{c}'$在同一个平面上；

证：性质2中柯西-施瓦茨不等式的等号成立当且仅当两部分线性相关，即存在不全为0的λ_1和λ_2，有

$$\lambda_1(\mathbf{a}' - < \mathbf{a}',\mathbf{c}' > \mathbf{c}') + \lambda_2(\mathbf{b}' - < \mathbf{b}',\mathbf{c}' > \mathbf{c}') = 0$$

从而有

$$\lambda_1\mathbf{a}' + \lambda_2\mathbf{b}' + (-\lambda_1 < \mathbf{a}',\mathbf{c}' > -\lambda_2 < \mathbf{b}',\mathbf{c}' >)\mathbf{c}' = 0$$

4) $r_{\mathbf{abc}}^2$=0当且仅当$\rho_{\mathbf{ab}} = \rho_{\mathbf{bc}} = \rho_{\mathbf{ca}} = 0$；

证：充分性是显然的。

必要性：
$$r_{\mathbf{abc}}^2 = \rho_{\mathbf{ab}}^2 + \rho_{\mathbf{bc}}^2 + \rho_{\mathbf{ca}}^2 - 2\rho_{\mathbf{ab}}\rho_{\mathbf{bc}}\rho_{\mathbf{ca}}$$
$$= (|\rho_{\mathbf{ab}}| - |\rho_{\mathbf{bc}}|)^2 + \rho_{\mathbf{ca}}^2 + 2|\rho_{\mathbf{ab}}\rho_{\mathbf{bc}}| - 2\rho_{\mathbf{ab}}\rho_{\mathbf{bc}}\rho_{\mathbf{ca}}$$

- 条件不相关性

目标：$\min MSE(\mathbf{y},\hat{\mathbf{y}}) = \frac{1}{d}\|\mathbf{y} - (\beta_0\mathbf{1} + \beta_1\mathbf{x}_1 + \beta_2\mathbf{x}_2 + \cdots + \beta_k\mathbf{x}_k)\|_2^2$

设 $\mathbf{y}$ 和 $\hat{\mathbf{y}}$ 的标准差为 s_{y} 和 $s_{\hat{\mathrm{y}}}$.$\mathbf{x}_i$, $\mathbf{y}$, $\hat{\mathbf{y}}$的均值分别为μ_i ,μ_{y}和 $\mu_{\hat{\mathrm{y}}}$,

$\mathbf{x}_i$和$\mathbf{y}$, $\mathbf{x}_i$和$\mathbf{x}_j$, $\mathbf{y}$ 和 $\hat{\mathbf{y}}$ 的协方差分别为 $s_{i\mathrm{y}}$ ，s_{ij} ，$s_{\mathrm{y}\hat{\mathrm{y}}}$.

令 $\mathfrak{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_k]$, $\boldsymbol{b} = [\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_k]^T$

则
$$MSE(\mathbf{y},\hat{\mathbf{y}}) = \frac{1}{d} < \mathbf{y} - \beta_0\mathbf{1} - \mathfrak{X}\boldsymbol{b}, \mathbf{y} - \beta_0\mathbf{1} - \mathfrak{X}\boldsymbol{b} >$$

$$\frac{\partial MSE(\mathbf{y},\hat{\mathbf{y}})}{\partial \beta_0} = 0,\ \text{可得}\ \beta_0 = \mu_{\mathrm{y}} - (\hat{\beta}_1\mu_1 + \hat{\beta}_2\mu_2 + \cdots + \hat{\beta}_k\mu_k)$$

于是， $MSE(\mathbf{y},\hat{\mathbf{y}})=\dfrac{1}{d}<\mathbf{y}_0-\mathbf{X}_0\boldsymbol{b},\mathbf{y}_0-\mathbf{X}_0\boldsymbol{b}>=s_{\mathbf{y}}^2-2s_{\mathbf{y}\hat{\mathbf{y}}}+s_{\hat{\mathbf{y}}}^2$

$\dfrac{\partial MSE(\mathbf{y},\hat{\mathbf{y}})}{\partial\boldsymbol{b}}=0\Rightarrow\mathbf{X}_0^T\mathbf{y}_0=\mathbf{X}_0^T\mathbf{X}_0\hat{\boldsymbol{b}}$, 即 $s_{i\mathbf{y}}=\sum_j\hat{\beta}_j s_{ij}, i=1,2,\cdots,k.$

因 $s_{\hat{\mathbf{y}}}^2=\sum_i\hat{\beta}_i\sum_j\hat{\beta}_j s_{ij},\quad s_{\mathbf{y}\hat{\mathbf{y}}}=\sum_i\hat{\beta}_i s_{i\mathbf{y}}$

又因 $\sum_i\hat{\beta}_i\sum_j\hat{\beta}_j s_{ij}=\sum_i\hat{\beta}_i s_{i\mathbf{y}}$ 可得此时

$$s_{\hat{\mathbf{y}}}^2=s_{\mathbf{y}\hat{\mathbf{y}}}$$

令 $\boldsymbol{S}=\begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{1k} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{k1} & s_{k2} & \cdots & s_{kk} \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{S}_{\bullet\mathbf{y}}=\begin{bmatrix} s_{1\mathbf{y}} \\ s_{2\mathbf{y}} \\ \vdots \\ s_{k\mathbf{y}} \end{bmatrix},$

于是有 $\hat{\boldsymbol{b}}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{S}_{\bullet\mathbf{y}}$，进一步可得 $s_{\mathbf{y}\hat{\mathbf{y}}}=\boldsymbol{S}_{\bullet\mathbf{y}}^T\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{S}_{\bullet\mathbf{y}}$.

10.4 基于条件不相关性的稀疏回归方法

同时 $\det\begin{bmatrix} \boldsymbol{S} & \boldsymbol{S}_{\bullet \mathbf{y}} \\ \boldsymbol{S}_{\bullet \mathbf{y}}^T & s_{\mathbf{y}}^2 \end{bmatrix} = \det(\boldsymbol{S})(s_{\mathbf{y}}^2 - \boldsymbol{S}_{i\mathbf{y}}^T \boldsymbol{S}^{-1} \boldsymbol{S}_{\bullet \mathbf{y}}) = \det(\boldsymbol{S})(s_{\mathbf{y}}^2 - s_{\mathbf{y}\hat{\mathbf{y}}})$

化简得

$$MSE(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}}) = s_{\mathbf{y}}^2 - s_{\mathbf{y}\hat{\mathbf{y}}} = \frac{\det\begin{bmatrix} \boldsymbol{S} & \boldsymbol{S}_{\bullet \mathbf{y}} \\ \boldsymbol{S}_{\bullet \mathbf{y}}^T & s_{\mathbf{y}}^2 \end{bmatrix}}{\det(\boldsymbol{S})} = s_{\mathbf{y}}^2 \cdot \frac{\omega^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_k, \mathbf{y})}{\omega^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_k)}$$

$$\min MSE(\hat{\mathbf{y}}, \mathbf{y}) \Leftrightarrow \min \frac{\omega^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_k, \mathbf{y})}{\omega^2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_k)}$$

定义条件不相关性

$$\omega(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_k) = \frac{\omega(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_k, \mathbf{y})}{\omega(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_k)}$$

称$\omega(\mathbf{y}|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_k)$为给定$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_k$条件下$\mathbf{y}$的条件不相关系数。

1) 描述了在有 k 个预测变量的条件下其最优线性组合表征 $\mathbf{y}$ 的精度；
2) 形似条件概率公式;
3) 上式包含的3项取值均在[0,1]之间（分母不为0）。

10.4 基于条件不相关性的稀疏回归方法

此时，$\begin{bmatrix} s_1\hat{\beta}_1 \\ s_2\hat{\beta}_2 \\ \vdots \\ s_k\hat{\beta}_k \end{bmatrix} = s_{\mathbf{y}}\mathbf{R}_{\mathbf{x}}^{-1}\begin{bmatrix} \rho_{1\mathbf{y}} \\ \rho_{2\mathbf{y}} \\ \vdots \\ \rho_{k\mathbf{y}} \end{bmatrix}$，

其中s_i是$\mathbf{x}_i$的标准差，

$\mathbf{R}_{\mathbf{x}}$是$\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\ldots,\mathbf{x}_k$的相关矩阵

$\rho_{i\mathbf{y}}$是$\mathbf{x}_i$与$\mathbf{y}$的相关系数

- 条件不相关系数的计算

算法 1 单目标变量情况下条件不相关性 $\omega^2(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}})$ 的计算

Input: 变量 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_k, \mathbf{y}$ 的相关矩阵 $R_{\mathbf{xy}}$

Output: 条件不相关性 $\omega^2(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}})$

for $i \leftarrow 1$ **to** k **do**
    recipdiag $= 1/\mathbf{R}_{\mathbf{xy}}[i][i]$;
    for $j \leftarrow i+1$ **to** $k+1$ **do**
        temp $= \mathbf{R}_{\mathbf{xy}}[i][j] *$ recipdiag;
        for $p \leftarrow j$ **to** $k+1$ **do**
            $\mathbf{R}_{\mathbf{xy}}[j][p] = \mathbf{R}_{\mathbf{xy}}[j][p] - \mathbf{R}_{\mathbf{xy}}[i][p] *$ temp;
        end
    end
end
return $\mathbf{R}_{\mathbf{xy}}[k+1][k+1]$

第11章 代数系统与李代数

代数系统

定义1 设 $\mathbb{F}$ 是复数域$\mathbb{C}$的一个子集，如果下面两个条件成立，就称 $\mathbb{F}$ 是一个数域：

1) $\mathbb{F}$ 中至少含有一个不等于零的常数；

2) 对 $\mathbb{F}$ 中任意两个数$a, b\in\mathbb{F}, a+b, a\cdot b, a-b$ 都在 $\mathbb{F}$ 中，且当$b\neq 0$时， a/b也在 $\mathbb{F}$ 中。

常见数域：$\mathbb{Q}$、$\mathbb{R}$、$\mathbb{C}$等。数域有无穷多个。

例1 令 $\mathbb{H}=\{a+b\sqrt{2} \mid a, b\in\mathbb{Q}\}$, 则 $\mathbb{H}$ 是一个数域。

定理1 任何数域都包含有理数域$\mathbb{Q}$。

代数系统

定义2 非空集合S上的一个运算，是指$S\times S$到S的一个映射，它使S中任意两个元都有S中的一个唯一确定的元与他们对应。

非空集合上的运算具有三个特性：

1）运算的封闭性；

2）运算的顺序性；

3）运算结果的唯一性。

定义3 如果一个非空集合S上定义了一个（或几个）运算，它（或它们）满足一定的基本性质，则称这种具有一定运算的集合为代数系统（也称代数结构或抽象代数）。

代数系统举例：

整数全体$\mathbb{Z}$，定义了加法运算和乘法运算并满足一定的性质。

有理数全体、实数全体以及复数全体分别构成有理数域、实数域及复数域均是代数系统。

数域 $\mathbb{F}$ 上的一元多项式的全体 $\mathbb{F}[x]$，定义了多项式的加法运算、乘法运算并满足一定性质，构成代数系统。

数域 $\mathbb{F}$ 上的 $m\times n$ 阶矩阵的全体 $\mathbb{F}^{m\times n}$，定义了矩阵的加法运算并满足一定性质，构成代数系统。

数域 $\mathbb{F}$ 上的 n 阶方矩的全体 $\mathbb{F}^{n\times n}$，不仅对于矩阵加法运算构成代数系统，而且还定义了矩阵乘法运算，也构成代数系统。

群

定义4 若在一个非空集合G上定义了一个运算，记为“·”，称为乘法，并满足下列条件：

1) 结合律成立，对任意$a, b, c \in G$，有

$$a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c$$

2) 有单位元素（幺元） $e \in G$，满足：对任意 $a \in G$，有

$$a \cdot e = e \cdot a = a$$

3) G 中任意元素 a 均有逆元素 $a^{-1} \in G$，满足

$$a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e$$

则称G对于运算“·”构成一个群，或简称G为一个群。

只满足1)为半群，只满足1)和2)为带幺半群。

若上述定义的运算为加法，则将运算符号“$\cdot$”改为“$+$”，幺元改为零元，逆元改为负元。

若群G对于对于上述运算还有交换律成立，即对于任意$a, b\in G$，有 $a \cdot b = b \cdot a$，则称G为交换群（或称Abel群）。

群是一种代数系统，它是由一个非空集合与一个运算构成的. 若集合不同，构成的群当然不同。对同一个集合，运算不同则构成的群也不同。

例2 单位元群，即只有一个元素的群。如数集$\{1\}$对于数的乘法，构成一个单位元群。

例3 加法群：$\mathbb{Z}$、$\mathbb{C}$、$\mathbb{R}$、$\mathbb{Q}$、 $\mathbb{R}^n$、$\mathbb{R}[x]_n$、$\mathbb{R}^{m\times n}$

乘法群：$GL_n(\mathbb{R})$

不构成群： $\mathbb{Z}^+$关于数的加法或乘法均不构成群

群

按群G具有元素的个数（元数）多少分为无限群与有限群。

有限群实例：含有 n 个元素的有限集上的所有可逆映射（称为 n 元置换），对于映射的乘法构成一个群，称为 n 元置换群，或称为 n 次对称群，记为 S_n。S_n 的每一个元素可以表示成一个 n 元置换：

$$\sigma = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ j_1 & j_2 & j_3 & \cdots & j_n \end{bmatrix}$$

其中，$j_1, j_2, j_3, \ldots, j_n$为$1, 2, 3, \ldots, n$的某个排列。

讨论：n 次对称群是否为Abel群？其元数为多少？

无限群实例：非空集合 U 到其自身的所有可逆映射（或称为变换），对于映射的乘法构成群，称为集合 U 的全变换群，记为 S_u。当 U 为无限集时，S_u为无限群。S_u的非空子集，若对于映射的乘法也构成群，则称为变换群。

群的性质

群有以下简单性质：

(1) 任意一个群的单位元是唯一的。群的任意元的逆元也是唯一的。

(2) 若 $(G,\cdot)$ 是一个群，则对任意$a, b \in G$，方程

$$a\cdot x = b \text{ 与 } y\cdot a = b$$

均有唯一解。

(3) 消去律成立，即

$$a\cdot x = a\cdot y \Rightarrow x = y$$

$$x\cdot a = y\cdot a \Rightarrow x = y$$

群中可以定义幂：$a^1 = a,\ a^{n+1} = a^n \cdot a,$
$a^0 = e,\ a^{-n} = (a^{-1})^n, n > 0$

子群

如果群 G 的非空子集 H 对于 G 上定义的运算也构成一个群，则称 H 为 G 的子群。

例4 在群$\mathbb{Z}$中，非空子集

$$n\mathbb{Z} = \{\, na \mid a\in\mathbb{Z}, n\text{为一个整数}\}$$

对于$\mathbb{Z}$上定义的数的加法，显然构成$\mathbb{Z}$的子群。

例5 $\mathbb{R}[x]_n$是$\mathbb{R}[x]$的一个子群。

设G 是任意一个群，e 是 G 的单位元，则单位元群$\{e\}$是 G 的子群，且 G 本身也构成 G 的子群。这两个特殊的子群，称为G 的平凡子群。除此之外，G 的其他子群 H 可称为非平凡子群。

子群

定理2 群 G 的非空子集 H 是 G 的子群的充要条件是：

(1) 对任意 $a, b \in H$，有$a \cdot b \in H$；

(2) 对任意 $a \in H$，有 $a^{-1} \in H$.

定理3 群 G 的非空子集 H 是 G 的子群的充要条件是：对任意 $a, b \in H$，有$a \cdot b^{-1} \in H$.

证 充分性：由于 H 非空，所以至少应含有一个元素 a，于是

$$e = a \cdot a^{-1} \in H$$

又由$a, e \in H$，可得

$$a^{-1} = e \cdot a^{-1} \in H$$

对任意 $a, b \in H$，由上知$b^{-1} \in H$，于是

$$a \cdot b = a \cdot (b^{-1})^{-1} \in H$$

由定理2可知，H 是 G 的子群。

定义5 设H是群G的子群，对任意给定的$a \in G$，记

$$aH = \{ a \cdot h \mid 任意\ \ h \in H \}$$

与 $$Ha = \{ h \cdot a \mid 任意\ \ h \in H \}$$

分别称为H的左陪集与右陪集。

定义6 若群G中子群H的任意左陪集同时又是H的右陪集，也就是说，H能够与G的任意元素a交换，即对任意$a \in G$有

$$aH = Ha$$

则称H为G的正规子群。

交换群的任意子群均是正规子群。

正规子群H可以定义左陪集的乘法运算：

$$aH \cdot bH = aHb \cdot H = abH \cdot H = abH \qquad 对任意\ a, b \in G$$

G中所有H的左陪集构成的集合对于上述乘法运算构成群。

定义7 设 G 与 G' 是两个群，如果有一个 G 到 G' 上的一一对应σ，对于 G 与 G' 的运算，有

$$\sigma(x \cdot y) = \sigma(x) \circ \sigma(y)$$

对任意 $x, y \in G$ 均成立。那么，就称G 同构于 G'，记为$G \cong G'$，称满足上述条件的映射为同构映射（简称同构）。

同构把 G 的单位元变为 G' 的单位元，把 G 的逆元变为 G' 的逆元。

例6 试证明 群$(\mathbb{R},+) \cong$ 群$(\mathbb{R}^+, \cdot)$.

证 任取实数x，令

$$\sigma(x) = e^x$$

显然，σ是一个$(\mathbb{R},+)$到$(\mathbb{R}^+, \cdot)$.的一一对应，且

$$\sigma(x + y) = e^{x+y} = e^x e^y = \sigma(x)\sigma(y)$$

对任意的实数 x, y 均成立。

作业

11.1 证明幺元是群中唯一的等幂元。

11.2 若非空集合G及定义在G上的运算$*$构成群，对G中的任意元素a, b, 求$a*b$的逆元.

环

定义8 设非空集合R上定义了两个运算，一个称为加法 (用记号+表示), 一个称为乘法 (用记号 · 表示), 它们满足以下条件：

1) 对于加法运算，R构成加法群；

2) 对于乘法运算有结合律 (构成半群), 即对任意$a, b, c \in R$, 有

$$a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c$$

3) 对于加法与乘法运算有分配律，即对于任意$a, b, c \in R$, 有

$$a \cdot (b + c) = a \cdot b + a \cdot c$$

$$(b + c) \cdot a = b \cdot a + c \cdot a$$

则称 R 为环。

环

若环 R 又满足乘法交换律，即对任意$a, b \in R$, 有 $a \cdot b = b \cdot a$, 则称 R 为交换环。

判断下列情况哪些构成环：

1、全体整数集$\mathbb{Z}$对于数的加法与乘法

2、一元实系数多项式$\mathbb{R}[x]$的全体对于多项式的加法与乘法

3、 $\mathbb{R}[x]_n$对于多项式的加法与乘法

分别为整数环、多项式环，$\mathbb{R}[x]_n$不构成环。

例7 设 R 为一个环，由 R 的元组成的 n 阶方阵的全体集，对于矩阵的加法与乘法构成环，称为 R 上的 n 阶全矩阵环，记为 $M_n(R)$。如$M_n(\mathbb{Z})$是元素为整数的 n 阶方阵的全体构成的环。

例8 设 G 为一个加法群，在 G 上定义乘法为：对任意$a, b \in G$, $a \cdot b = o$, 其中 o 是 G 的零元。满足结合律与分配律。所以 G 构成一个环，称为零环。

如集合$\{0\}$对于数的加法与乘法构成零环。

定义9 若环 R 的子集 S 对于定义在环 R 上的两个运算也构成环，则称 S 为 R 的子环，称 R 为 S 的扩张环。

定理5 环R 的非空子集 S 是 R 的子环的充要条件是：

(1) S 对加法运算构成群；

(2) S 对乘法运算具有封闭性。

一个环可以看成自身的子环，异于自身的子环称为真子环。

全体偶数集$\overline{\mathbb{Z}}$构成整数环$\mathbb{Z}$的子环。

环

因环 R 是一个加法群，所以有零元 o 与负元 $-a$ 和加法群的一切性质。这里只讨论与乘法有关的性质：

(1) $o \cdot a = a \cdot o = o$ 对任意$a \in R$均成立。

(2) $(-a) \cdot b = a \cdot (-b) = -a \cdot b$， $(-a) \cdot (-b) = a \cdot b$ 对任意$a, b \in R$ 均成立。

注意 环 R 中乘法交换律一般不成立。对于乘法运算，逆元不一定存在，因此，乘法消去律一般不成立，即当 $a \neq o$ 时，由 $a\cdot x = a\cdot y$ 或 $x\cdot a = y\cdot a$ 不一定能推出 $x = y$; 由 $a \cdot b = o$ 不一定能推出 $a = o$ 或 $b = o$.

域

定义10 设 F 是一个至少含有两个元素的环，如果 F 对于乘法还满足以下条件：

1) 有单位元 e，即对任意 $a \in F$，有

$$a \cdot e = e \cdot a = a$$

2) 除零元外其余元素均有逆元，即对任意$a\ (\neq o) \in F$，均有 $a^{-1} \in F$ 存在，使下式成立：

$$a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e$$

3) 交换律成立，即对于任意$a, b \in F$，有

$$a \cdot b = b \cdot a$$

则称 F 为域。

即所有非零元对于乘法也构成群的交换环就构成域。

域

定义1所定义的数域均构成域。

例9 由两个元素组成的域 F ={单，双}，定义 F 上的加法为:

$$单+单=双+双=双$$

$$单+双=双+单=单$$

定义 F 上的乘法为：

$$单\cdot单=单$$

$$单\cdot双=双\cdot双=双\cdot单=双$$

易验证 F 对以上定义的加法与乘法构成域。

定义11 如果环 R 的子环 R_1 构成域，则称 R_1 为 R 的子域。若 R 也为域，也称R为其子域 R_1 的扩域。

域

实数域 $\mathbb{R}$ 是复数域 $\mathbb{C}$ 的子域；有理数域 $\mathbb{Q}$ 是实数域 $\mathbb{R}$ 的子域，当然也是复数域 $\mathbb{C}$ 的子域。

n 阶全矩阵环$M_n(F)$中，全体数量阵构成它的一个子域。

在环$M_n(F)$中，全体可逆的对角阵不构成子域。

在环$M_n(F)(n>1)$中，全体对角阵虽然构成一个有单位元 $\boldsymbol{I}_n$ 的交换子环，但它不构成子域。

例10 形如
$$\begin{bmatrix} \alpha & & & \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 0 \end{bmatrix},\quad \alpha \in F$$
的 n 阶矩阵的全体构成$M_n(F)$ 的子域，其单位元与$M_n(F)$ 的单位元 $\boldsymbol{I}_n$ 不同。

域

定义12 两个环 R 与 R' 同构，是指如果存在一个从 R 到 R' 的一一对应σ，对任意 $a, b \in R$，满足条件：

1) $\sigma(a+b)=\sigma(a)\oplus\sigma(b)$

2) $\sigma(a\cdot b)=\sigma(a)\circ\sigma(b)$

记为 $R \cong R'$，且称σ为 R 到 R' 的同构映射（简称同构）。

域也是环，所谓域之间的同构就是他们作为环的同构。

定义数域 F 上全体二阶数量阵构成的域 P 到数域 F 的一个映射σ：对任意$\alpha \in F$，令 $\sigma(\alpha \boldsymbol{I}_2)=\alpha$，

显然，σ是 P 到 F 的一个同构，于是，$P \cong F$.

与群一样，同构的环（或域）具有相同的代数性质。因此，从抽象观点来看，同构的环（或域）可以不加区别。

三维空间刚体运动

我们知道，对于真实场景中的两个实向量 $\boldsymbol{a}=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}, \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}b_1\\b_2\\b_3\end{pmatrix}\in\mathbb{R}^3,$

或表示成 $\boldsymbol{a}=a_1\boldsymbol{i}+a_2\boldsymbol{j}+a_3\boldsymbol{k}, \boldsymbol{b}=b_1\boldsymbol{i}+b_2\boldsymbol{j}+b_3\boldsymbol{k}$ ，

如果**a**和**b**之间的夹角为$\theta_{\boldsymbol{ab}}$，则它们的内积为

$$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}=\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{b}=|\boldsymbol{a}||\boldsymbol{b}|\cos\theta_{\boldsymbol{ab}},$$

它们的外积为

$$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}=\det\begin{pmatrix}\boldsymbol{i}&\boldsymbol{j}&\boldsymbol{k}\\a_1&a_2&a_3\\b_1&b_2&b_3\end{pmatrix}=(a_2b_3-a_3b_2)\boldsymbol{i}+(a_3b_1-a_1b_3)\boldsymbol{j}+(a_1b_2-a_2b_1)\boldsymbol{k}$$

$$=\begin{pmatrix}a_2b_3-a_3b_2\\a_3b_1-a_1b_3\\a_1b_2-a_2b_1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&-a_3&a_2\\a_3&0&-a_1\\-a_2&a_1&0\end{pmatrix}\boldsymbol{b}\triangleq\boldsymbol{a}^\wedge\boldsymbol{b}$$

三维空间刚体运动

其中 $\boldsymbol{a}^\wedge$ 表示向量 $\boldsymbol{a}$ 与矩阵的一种映射关系（一一映射）：

$$\boldsymbol{a}^\wedge = \begin{pmatrix} 0 & -a_3 & a_2 \\ a_3 & 0 & -a_1 \\ -a_2 & a_1 & 0 \end{pmatrix}$$

显然$\boldsymbol{a}^\wedge$是一个反对称矩阵，可以认为 $^\wedge$ 为反对称符号。

对于$\mathbb{R}^3$中两组不同的单位正交基 $\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3\}$ 和 $\{\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_3'\}$，如果有

$$\boldsymbol{a} = (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3)\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = (\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_3')\begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ a_3' \end{pmatrix},$$

则有

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3)^T (\boldsymbol{e}_1', \boldsymbol{e}_2', \boldsymbol{e}_3')\begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ a_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_1^T\boldsymbol{e}_1' & \boldsymbol{e}_1^T\boldsymbol{e}_2' & \boldsymbol{e}_1^T\boldsymbol{e}_3' \\ \boldsymbol{e}_2^T\boldsymbol{e}_1' & \boldsymbol{e}_2^T\boldsymbol{e}_2' & \boldsymbol{e}_2^T\boldsymbol{e}_3' \\ \boldsymbol{e}_3^T\boldsymbol{e}_1' & \boldsymbol{e}_3^T\boldsymbol{e}_2' & \boldsymbol{e}_3^T\boldsymbol{e}_3' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ a_3' \end{pmatrix} \triangleq \boldsymbol{R}\boldsymbol{a}',$$

$\boldsymbol{R}$ 描述了两组基向量之间的旋转变换关系，称为旋转矩阵。

三维空间刚体运动

旋转矩阵表示不同坐标系之间，相应坐标轴的旋转关系。旋转矩阵 $\boldsymbol{R}$ 中的每个元素都是来源于不同基向量组中的基向量的内积，实际上是两个基向量夹角的余弦值，因而 $\boldsymbol{R}$ 也称为方向余弦矩阵。

从线性代数而言, $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{a}'$ 表示坐标 $\boldsymbol{a}'$ 通过 $\boldsymbol{R}$ 变换为坐标$\boldsymbol{a}$.

两个标准正交基的乘积还是标准正交基，因此旋转矩阵 $\boldsymbol{R}$ 是正交矩阵，并且旋转矩阵的行列式必为1，$\boldsymbol{R}^T$ 表示一个旋转 $\boldsymbol{R}$ 的反旋转。反之，行列式为1的正交矩阵也是一个旋转矩阵。

n维旋转矩阵的集合定义如下：

$$\mathrm{SO}(n) = \{\boldsymbol{R} \in \mathbb{R}^{n\times n} | \boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^T = \boldsymbol{I}, \det(\boldsymbol{R}) = 1\}$$

$\mathrm{SO}(n)$关于矩阵乘法或矩阵加法是否构成群？

三维空间刚体运动

SO(n)表示特殊正交群(Special Orthogonal Group).

SO(3)是三维空间的旋转。通过旋转矩阵，可以直接讨论坐标系间的变换而不用再从基开始讨论。

$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{a}'$ 表示坐标 $\boldsymbol{a}'$ 通过 $\boldsymbol{R}$ 变换为坐标$\boldsymbol{a}$，其逆变换 $\boldsymbol{R}^T$ 描述了一个相反的变换，即 $\boldsymbol{a}' = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{R}^T\boldsymbol{a}$.

欧式变换包含旋转和平移。对于向量 $\boldsymbol{a}$，经过一次旋转 $\boldsymbol{R}$ 和一次平移 $\boldsymbol{t}$ 后，得到$\boldsymbol{a}'$，即

$$\boldsymbol{a}' = \boldsymbol{R}\boldsymbol{a} + \boldsymbol{t}$$

其中 $\boldsymbol{t}$ 为平移向量。

多次旋转和平移不是线性关系。

三维空间刚体运动

向量 $\boldsymbol{a}$ 经过一次旋转 $\boldsymbol{R}_1$ 和一次平移 $\boldsymbol{t}_1$后，得到 $\boldsymbol{b}$, 再经过一次旋转 $\boldsymbol{R}_2$ 和一次平移 $\boldsymbol{t}_2$ 后由 $\boldsymbol{b}$ 得到 $\boldsymbol{c}$，即

$$\boldsymbol{b}=\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{a}+\boldsymbol{t}_1, \boldsymbol{c}=\boldsymbol{R}_2\boldsymbol{b}+\boldsymbol{t}_2 ,$$

于是，由 $\boldsymbol{a}$ 得到 $\boldsymbol{c}$ 的变换过程为

$$\boldsymbol{c}=\boldsymbol{R}_2(\boldsymbol{R}_1\boldsymbol{a}+\boldsymbol{t}_1)+\boldsymbol{t}_2 .$$

可以使用齐次坐标简化欧式变换的表现形式：

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}'\\1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{R} & \boldsymbol{t}\\ \boldsymbol{0}^T & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}\\1\end{bmatrix}\triangleq\boldsymbol{T}\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}\\1\end{bmatrix}$$

该公式中，对一个三维向量的末尾加1，将其变为四维向量，称为齐次坐标。此时可将旋转 $\boldsymbol{R}$ 和平移 $\boldsymbol{t}$ 写在一个矩阵中，使整个关系变成线性关系。称这样的矩阵 $\boldsymbol{T}$ 为变换矩阵。

若分别用 $\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c}$ 表示**a**,**b**,**c**的齐次坐标，则有

$$\tilde{\boldsymbol{b}} = T_1\tilde{\boldsymbol{a}},\ \tilde{\boldsymbol{c}} = T_2\tilde{\boldsymbol{b}},\quad \text{于是}\ \tilde{\boldsymbol{c}} = T_2T_1\tilde{\boldsymbol{a}}.$$

以后在不引起混淆的情况下，直接使用 **a**,**b**,**c** 表示齐次坐标，即 $\boldsymbol{c}=\boldsymbol{T}_2\boldsymbol{T}_1\boldsymbol{a}$.

变换矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的反变换为

$$\boldsymbol{T}^{-1} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{R}^T & -\boldsymbol{R}^T\boldsymbol{t} \\ \boldsymbol{0}^T & 1 \end{pmatrix}.$$

将变换矩阵的集合定义为:

$$\mathrm{SE}(3) = \left\{ \boldsymbol{T} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{R} & \boldsymbol{t} \\ \boldsymbol{0}^T & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{4\times4} \mid \boldsymbol{R} \in \mathrm{SO}(3), \boldsymbol{t} \in \mathbb{R}^3 \right\}$$

SE(3)关于矩阵乘法或矩阵加法是否构成群?

三维空间刚体运动

SE(3)表示特殊欧式群(Special Euclidean Group).

在不引起混淆的情况下，对齐次坐标与普通坐标的符号不加区分。例如 $\boldsymbol{Ta}$ 一般表示齐次坐标，而 $\boldsymbol{Ra}$ 使用了非齐次坐标。

下面介绍旋转矩阵与变换矩阵的自由度：

1) 三维空间中的旋转具有3个自由度，而旋转矩阵有9个元素;

2) 欧式变换具有6个自由度，而变换矩阵有16个元素；

其他约束：旋转矩阵为单位正交阵，且行列式为1，变换矩阵行列式也为1.

使用旋转矩阵和变换矩阵不仅计算冗余，还受到行列式约束，实际问题中这些约束会使求解变得更加困难。

是否存在方法更紧凑描述旋转和平移？如3维旋转6维平移？

三维空间刚体运动

三维空间中的旋转也可以表示为向量绕着某一个单位向量旋转一个具体角度。因此，可以用一个旋转轴和一个旋转角进行刻画，其旋转方向为旋转轴的方向。因此，只使用一个向量即可进行描述，其方向与旋转轴一致，长度等于旋转角，这种向量称为旋转向量（或轴角angle-axis），正好为三维：

$$\boldsymbol{\phi} = \theta \boldsymbol{n}$$

其中θ表示旋转角度，$\boldsymbol{n}$表示单位旋转向量。

罗德里格斯公式：旋转向量到旋转矩阵

$$\boldsymbol{R} = \cos\theta \boldsymbol{I} + (1 - \cos\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T + \sin\theta \boldsymbol{n}^{\wedge}.$$

同样，对于变换矩阵，可用一个旋转向量和一个平移向量进行描述，正好为六维。

三维空间刚体运动

旋转矩阵到旋转向量的转换：

$$
\begin{aligned}
tr(\boldsymbol{R}) &= 3\cos\theta + (1-\cos\theta)tr(\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T) \\
&= 3\cos\theta + (1-\cos\theta)\|\boldsymbol{n}\|_2^2 \\
&= 3\cos\theta + (1-\cos\theta) \\
&= 1 + 2\cos\theta
\end{aligned}
$$

从而$\theta = \arccos\frac{tr(\boldsymbol{R})-1}{2}$，同时，由$\boldsymbol{R}\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}$可得

$$(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{I})\boldsymbol{n} = 0，\ \|\boldsymbol{n}\|_2 = 1$$

即通过旋转矩阵的迹求旋转角度，通过旋转矩阵的特征值求单位旋转向量。

轴角的表示也有奇异性，比如转30度与转390度的轴角表示是一样的。

缺点：旋转矩阵与轴角对于三维空间的旋转而言，都不够直观

有一种简单直观的旋转表示法，直接把旋转表示为围绕三个坐标轴的三个旋转，即欧拉角：

$$(\theta_x, \theta_y, \theta_z)$$

把一个旋转分成3次绕不同轴的旋转，可以有多种定义方式。

三维空间中绕z轴旋转θ角度的矩阵(只要保证旋转后z坐标不变)：

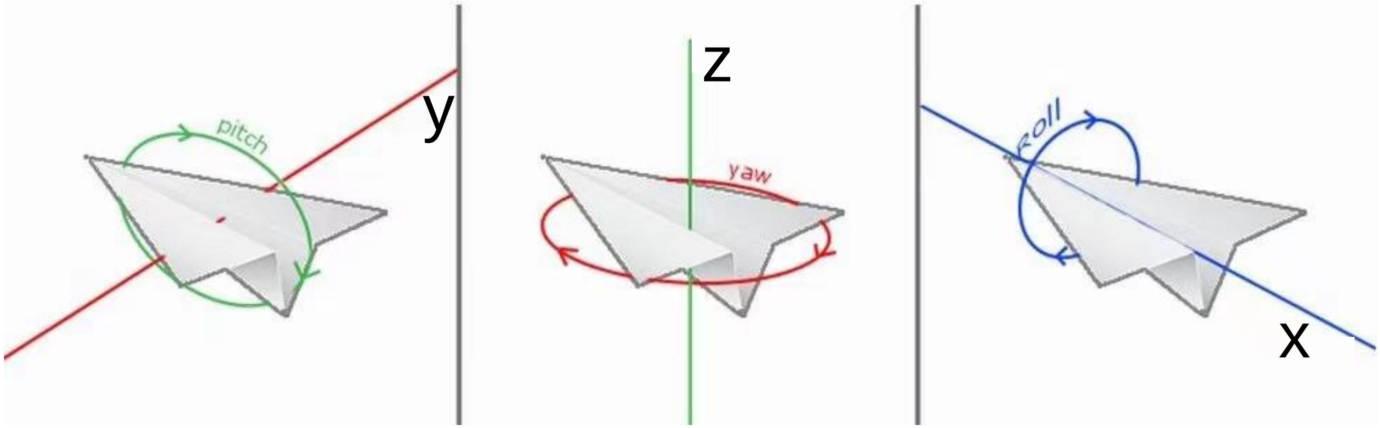
$$\mathbf{R}_z(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

类似地，三维空间中绕x轴、y轴的旋转矩阵分别为

$$\mathbf{R}_x(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \quad \mathbf{R}_y(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{bmatrix}$$

三维空间刚体运动

无人机系统中常用的欧拉角是yaw-pitch-roll，可记为偏航-俯仰-滚转角（z-旋转后的y-旋转后的x），如下图所示



欧拉角对于旋转而言非常直观，但是有著名的万向锁问题（例如在仰俯角为±90°时，第一次旋转和第三次旋转将使用同一个轴），导致丢失一个自由度，容易出现奇异问题。因此：

旋转矩阵用9个量描述3个自由度的旋转——冗余性

三维向量描述方式——全部都有奇异性

三维空间刚体运动

复数 $a+bi$ 表示复平面上的向量 (a,b)，复数乘法表示复平面上的旋转。例如 $(a+bi)\, i$ 将向量 (a,b) 逆时针旋转90度，若要将复平面上的向量旋转θ角，只需给它乘以$e^{i\theta}=\cos\theta+i\sin\theta$, 它是单位长的复数。即在二维情况下，旋转可以用单位复数描述。

类似于复数，四元数由一个实部 s 与三个虚部 $\boldsymbol{v}$ 构成，其旋转由单位四元数表示(可以使用向量形式来简化四元数的表示)：

$$\boldsymbol{q}=w+xi+yj+zk$$

$$s=w\in\mathbb{R},\boldsymbol{v}=(x,y,z)^T\in\mathbb{R}^3$$

$$\boldsymbol{q}=(s,x,y,z)^T=\begin{pmatrix} s \\ \boldsymbol{v} \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} ij=k, ji=-k \\ jk=i, kj=-i \\ ki=j, ik=-j \\ i^2=-1, j^2=-1, k^2=-1 \end{cases}$$

四元数是紧凑的也没有奇异性。

三维空间刚体运动

对 $\boldsymbol{q}=\left(s,\boldsymbol{v}^T\right)^T$，若 $s=0$ 则称 $\boldsymbol{q}$ 为虚四元数，或纯虚四元数；若 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{0}$ 则称 $\boldsymbol{q}$ 为实四元数。令 $\boldsymbol{q}_a=\left(s_a,\boldsymbol{v}_a^T\right)^T$，$\boldsymbol{q}_b=\left(s_b,\boldsymbol{v}_b^T\right)^T$.

四元数的基本运算：

加减法 $\boldsymbol{q}_a \pm \boldsymbol{q}_b = \begin{pmatrix} s_a \pm s_b \\ \boldsymbol{v}_a \pm \boldsymbol{v}_b \end{pmatrix}$

乘法 $\boldsymbol{q}_a\boldsymbol{q}_b = \begin{pmatrix} s_a s_b - \boldsymbol{v}_a^T\boldsymbol{v}_b \\ s_a\boldsymbol{v}_b + s_b\boldsymbol{v}_a + \boldsymbol{v}_a \times \boldsymbol{v}_b \end{pmatrix}$

模长 $\|\boldsymbol{q}\| = \left\|\begin{matrix} s \\ \boldsymbol{v} \end{matrix}\right\|_2$，$\|\boldsymbol{q}_a\boldsymbol{q}_b\| = \|\boldsymbol{q}_a\|\|\boldsymbol{q}_b\|$

数乘 $k\boldsymbol{q}=\left(ks,k\boldsymbol{v}^T\right)^T$

共轭 $\boldsymbol{q}^* = \begin{pmatrix} s \\ -\boldsymbol{v} \end{pmatrix}$，$\boldsymbol{q}\boldsymbol{q}^* = \boldsymbol{q}^*\boldsymbol{q} = \left(s^2+\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{v},\boldsymbol{0}\right)^T = \|\boldsymbol{q}\|^2 + 0i + 0j + 0k = \|\boldsymbol{q}\|^2$

逆 $\boldsymbol{q}^{-1} = \dfrac{\boldsymbol{q}^*}{\|\boldsymbol{q}\|^2}$，$\boldsymbol{q}\boldsymbol{q}^{-1} = \boldsymbol{q}^{-1}\boldsymbol{q} = 1.$

若 $\|\boldsymbol{q}_a\| = \|\boldsymbol{q}_b\| = 1$，则 $\left(\boldsymbol{q}_a\boldsymbol{q}_b\right)^{-1} = \boldsymbol{q}_b^{-1}\boldsymbol{q}_a^{-1}$

三维空间刚体运动

单位四元数表示旋转：单位四元数实际上具有三个自由度，对应于三维空间中的旋转。

将三维空间中的点 $\mathrm{P}(x,y,z)$ 用虚四元数 $\boldsymbol{p}=(0,x,y,z)^T$ 表示，以及一个由四元数 $\boldsymbol{q}$ 指定的旋转，则旋转后的点 $\boldsymbol{p}'$ 可表示为：

$$\boldsymbol{p}'=\boldsymbol{q}\boldsymbol{p}\boldsymbol{q}^{-1}$$

上述乘法均为四元数乘法，结果 $\boldsymbol{p}'$ 也是虚四元数，其虚部就是旋转后点的坐标。

任意单元四元数描述了一个旋转，该旋转也可用旋转矩阵或旋转向量表示。

定理6 三维空间中，从四元数到旋转矩阵的变换关系为

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^T+s^2\boldsymbol{I}+2s\boldsymbol{v}^\wedge+(\boldsymbol{v}^\wedge)^2.$$

定理7 三维空间中，绕单位向量$\boldsymbol{n}$逆时针旋转θ，对应于单位四元数$\boldsymbol{q}=\left(\cos\frac{\theta}{2},\boldsymbol{n}^T\sin\frac{\theta}{2}\right)^T$.

三维空间刚体运动

证明：四元数乘法也可写成一种矩阵乘法。若 $\boldsymbol{q}=\left(s,\boldsymbol{v}^T\right)^T$，令

$$\boldsymbol{q}^{\square}=\begin{bmatrix} s & -\boldsymbol{v}^T \\ \boldsymbol{v} & s\boldsymbol{I}+\boldsymbol{v}^{\wedge} \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{q}^{\oplus}=\begin{bmatrix} s & -\boldsymbol{v}^T \\ \boldsymbol{v} & s\boldsymbol{I}-\boldsymbol{v}^{\wedge} \end{bmatrix}.$$

这两个符号可以将四元数映射成一个4×4的矩阵。于是

$$\boldsymbol{q}_1^{\square}\boldsymbol{q}_2=\begin{bmatrix} s_1 & -\boldsymbol{v}_1^T \\ \boldsymbol{v}_1 & s_1\boldsymbol{I}+\boldsymbol{v}_1^{\wedge} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} s_2 \\ \boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} -\boldsymbol{v}_1^T\boldsymbol{v}_2+s_1s_2 \\ s_1\boldsymbol{v}_2+s_2\boldsymbol{v}_1+\boldsymbol{v}_1^{\wedge}\boldsymbol{v}_2 \end{bmatrix}=\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{q}_2.$$

同理可证：

$$\boldsymbol{q}_1\boldsymbol{q}_2=\boldsymbol{q}_1^{\square}\boldsymbol{q}_2=\boldsymbol{q}_2^{\oplus}\boldsymbol{q}_1.$$

因

$$\boldsymbol{p}'=(\boldsymbol{q}\boldsymbol{p})\boldsymbol{q}^{-1}=\boldsymbol{q}^{\square}\left(\boldsymbol{p}\boldsymbol{q}^{-1}\right)=\boldsymbol{q}^{\square}\left(\boldsymbol{p}^{\square}\boldsymbol{q}^{-1}\right)=\boldsymbol{q}^{\square}\boldsymbol{q}^{-1^{\oplus}}\boldsymbol{p}$$

带入两个符号对应的矩阵，有

$$\boldsymbol{q}^{+}\boldsymbol{q}^{-1^{\oplus}}=\begin{bmatrix} s & -\boldsymbol{v}^{T} \\ \boldsymbol{v} & s\boldsymbol{I}+\boldsymbol{v}^{\wedge} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} s & \boldsymbol{v}^{T} \\ -\boldsymbol{v} & s\boldsymbol{I}+\boldsymbol{v}^{\wedge} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & \boldsymbol{0}^{T} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{T}+s^{2}\boldsymbol{I}+2s\boldsymbol{v}^{\wedge}+(\boldsymbol{v}^{\wedge})^{2} \end{bmatrix}.$$ *

因 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{p}'$ 都是虚四元数，所以上面矩阵右下角实际上给出了从四元数到旋转矩阵的变换关系：

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{T}+s^{2}\boldsymbol{I}+2s\boldsymbol{v}^{\wedge}+(\boldsymbol{v}^{\wedge})^{2}.$$

对上式两侧求迹，得

$$\begin{aligned}\operatorname{tr}(\boldsymbol{R}) &= \operatorname{tr}(\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{T}+s^{2}\boldsymbol{I}+2s\boldsymbol{v}^{\wedge}+(\boldsymbol{v}^{\wedge})^{2}) \\ &= x^{2}+y^{2}+z^{2}+3s^{2}+2s\cdot 0-2(x^{2}+y^{2}+z^{2}) \\ &= (1-s^{2})+3s^{2}-2(1-s^{2}) \\ &= 4s^{2}-1.\end{aligned}$$

因

$$\theta = \arccos\frac{tr(\boldsymbol{R})-1}{2} = \arccos(2s^2-1),$$

即

$$\cos\theta = 2s^2 - 1 = 2\cos^2\frac{\theta}{2} - 1,$$

所以

$$\theta = 2\arccos s.$$

在*式中用 $\boldsymbol{q}$ 的虚部代替 $\boldsymbol{p}$，易知 $\boldsymbol{q}$ 的虚部组成的向量在旋转时是不动的，即构成旋转轴。只要将它归一化即得。

因此，四元数的旋转向量的转换公式为：

$$\begin{cases} \theta = 2\arccos s \\ \boldsymbol{n}^T = \boldsymbol{v}^T / \sin\dfrac{\theta}{2} \end{cases}.$$

三维刚体在三维空间中的平移和旋转可以通过旋转矩阵 $\boldsymbol{R}$ 和平移向量 $\boldsymbol{t}$ 来表示，对刚体进行定位或者状态估计就是求解 $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{t}$ 。定位或状态估计时，经常需要对刚体位姿($\boldsymbol{R}$和$\boldsymbol{t}$)为自变量的函数$f(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{t})$进行优化，不可避免地需要对 $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{t}$ 进行求导。

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

$\boldsymbol{t}$ 是向量，可以进行向量的数乘和加法运算；

$\boldsymbol{R}$ 是旋转矩阵，关于矩阵乘法构成特殊正交群SO(3)，但它对矩阵加法是不封闭的。为了解决旋转矩阵求导的问题，需要借助李群和李代数这个工具。

任意旋转矩阵 $\boldsymbol{R}$ 均满足$\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^T=\boldsymbol{I}$.

对于一个刚体（例如一个相机），它可以在空间中连续地进行旋转，即旋转具有连续的性质，于是，它可以是时间 t 的函数，即 $\boldsymbol{R}(t)$. 同时它也满足$\boldsymbol{R}(t)\boldsymbol{R}(t)^T=\boldsymbol{I}$. 若$\boldsymbol{R}(t)$可导，则有

$$\dot{\boldsymbol{R}}(t)\boldsymbol{R}(t)^T+\boldsymbol{R}(t)\dot{\boldsymbol{R}}(t)^T=0,$$

整理即得

$$\dot{\boldsymbol{R}}(t)\boldsymbol{R}(t)^T=-\left(\dot{\boldsymbol{R}}(t)\boldsymbol{R}(t)^T\right)^T.$$

因此，矩阵 $\dot{\boldsymbol{R}}(t)\boldsymbol{R}(t)^T$ 为反对称矩阵。

根据向量与反对称矩阵的一一对应关系，

如果 $\boldsymbol{a}^\wedge=\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}0 & -a_3 & a_2\\ a_3 & 0 & -a_1\\ -a_2 & a_1 & 0\end{pmatrix}$， 记 $\boldsymbol{A}^\vee=\boldsymbol{a}$.

由于$\dot{\boldsymbol{R}}(t)\boldsymbol{R}(t)^T$为反对称矩阵，它必然与一个向量 $\boldsymbol{\phi}\in\mathbb{R}^3$ 对应：

$$\dot{\boldsymbol{R}}(t)\boldsymbol{R}(t)^T=\boldsymbol{\phi}(t)^{\wedge}.$$

对上式两边同时右乘 $\boldsymbol{R}(t)$，有

$$\dot{\boldsymbol{R}}(t)=\boldsymbol{\phi}(t)^{\wedge}\boldsymbol{R}(t),\quad *$$

即每次对 $\boldsymbol{R}(t)$ 求导，相当于左乘一个矩阵 $\boldsymbol{\phi}(t)^{\wedge}$.

对 $\boldsymbol{R}(t)$ 在 $t_0=0$ （此时 $\boldsymbol{R}(0)=\boldsymbol{I}$）附近进行泰勒展开，有

$$\boldsymbol{R}(t)\approx\boldsymbol{R}(t_0)+\dot{\boldsymbol{R}}(t_0)(t-t_0)=\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\phi}(t_0)^{\wedge}t.\quad **$$

根据*式，$\boldsymbol{\phi}$ 反映了 $\boldsymbol{R}$ 导数的性质。由**式，称 $\boldsymbol{\phi}$ 在SO(3)原点附近的正切空间上。

若在 t_0 附近 $\boldsymbol{\phi}(t)$ 保持为常向量，即 $\boldsymbol{\phi}(t_0)=\boldsymbol{\phi}_0$，则根据*式有

$$\dot{\boldsymbol{R}}(t)=\boldsymbol{\phi}_0^{\wedge}\boldsymbol{R}(t),$$

解之得 $\boldsymbol{R}(t)=e^{\boldsymbol{\phi}_0^{\wedge}t}$.

李群与李代数

流形：由局部具有欧几里得性质的点构成的拓扑空间。

例：一维流形是线或圆，但不是“8”字形；二维流形是面，例如平面、球面或环面。

李群：具有可微流形性质的群，可微流形性质也可理解为连续性质，另外李群上的操作是光滑的。

例：整数群$\mathbb{Z}$是离散的群，没有连续性质，所以不是李群。

而$\mathrm{SO}(n)$与$\mathrm{SE}(n)$满足李群性质，是矩阵李群，其元素都为矩阵，元素的逆即矩阵的逆。但是矩阵李群仅对乘法封闭，对加法不封闭，不适合做微分及求导运算。

每个李群都有与之对应的李代数。李代数描述了李群的局部性质，准确地说，是单位元附近的正切空间。

李代数包含一个集合$\mathbb{V}$，一个数域 $\mathbb{F}$ 和一个二元运算[,]。如果它们满足以下四条性质，则称$(\mathbb{V}, \mathbb{F}, [,])$为一个李代数。

- 封闭性 $\forall \boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y} \in \mathbb{V}, \quad [\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}] \in \mathbb{V}$
- 双线性 $\forall \boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z} \in \mathbb{V}, a, b \in \mathbb{F}$, 有

$$[a\boldsymbol{X} + b\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}] = a[\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Z}] + b[\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}],$$

$$[\boldsymbol{Z}, a\boldsymbol{X} + b\boldsymbol{Y}] = a[\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{X}] + b[\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{Y}].$$

- 自反性 $\forall \boldsymbol{X} \in \mathbb{V}, \quad [\boldsymbol{X}, \boldsymbol{X}] = \boldsymbol{0}$
- 雅克比性 $\forall \boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z} \in \mathbb{V}$,

$$[\boldsymbol{X}, [\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}]] + [\boldsymbol{Z}, [\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}]] + [\boldsymbol{Y}, [\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{X}]] = \boldsymbol{0}$$

其中的二元运算[,]称为李括号，表达了两个元素间的差异。

例：三维空间上的叉积×是一种李括号，即 $\mathfrak{g} = (\mathbb{R}^3, \mathbb{R}, \times)$ 构成了一个李代数。

事实上之前提到的 $\boldsymbol{\phi}$ 也是一种李代数。SO(3)对应的李代数是定义在 $\mathbb{R}^3$ 上的向量。每个 $\boldsymbol{\phi}$ 对应一个反对称矩阵 $\boldsymbol{\Phi}$：

$$\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\phi}^{\wedge} \in \mathbb{R}^{3\times 3}.$$

定义李括号运算：$[\boldsymbol{\phi}_1, \boldsymbol{\phi}_2] = (\boldsymbol{\Phi}_1\boldsymbol{\Phi}_2 - \boldsymbol{\Phi}_2\boldsymbol{\Phi}_1)^{\vee}$,

可以验证满足李代数的4条性质。

在不引起歧义的情况下，李代数 $\mathfrak{so}(3)$ 的元素可以认为是三维向量，也可以认为是三维反对称矩阵：

$$\mathfrak{so}(3) = \{\phi \in \mathbb{R}^3, \boldsymbol{\Phi} = \phi^{\wedge} \in \mathbb{R}^{3\times 3}\}.$$

即$\mathfrak{so}(3)$是一个由三维向量组成的集合，每个向量对应一个反对称矩阵，可以用于表达旋转矩阵的导数。它与SO(3)的关系由如下的指数映射给定：

$$\boldsymbol{R} = e^{\phi^{\wedge}} = \exp(\boldsymbol{\phi}^{\wedge}).$$

$\mathfrak{so}(3)$ 上的指数映射

指数映射反映了从李代数到李群的对应关系：

$$\boldsymbol{R} = \exp(\boldsymbol{\phi}^{\wedge})$$

由于 $\boldsymbol{\phi}$ 是向量，可分别定义其模长和方向为 θ 和 $\boldsymbol{a}$, 其中 $\boldsymbol{a}$ 是长度为1的方向向量，从而 $\boldsymbol{\phi} = \theta\boldsymbol{a}$.

关于$\boldsymbol{a}$，有以下性质：

$$\boldsymbol{a}^{\wedge}\boldsymbol{a}^{\wedge} = \begin{bmatrix} -a_2^2 - a_3^2 & a_1a_2 & a_1a_3 \\ a_1a_2 & -a_1^2 - a_3^2 & a_2a_3 \\ a_1a_3 & a_2a_3 & -a_1^2 - a_2^2 \end{bmatrix} = \boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^T - \boldsymbol{I}$$

$$\boldsymbol{a}^{\wedge}\boldsymbol{a}^{\wedge}\boldsymbol{a}^{\wedge} = \boldsymbol{a}^{\wedge}(\boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^T - \boldsymbol{I}) = -\boldsymbol{a}^{\wedge}$$

利用这两个性质，可得：

李群与李代数

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{R} = e^{\boldsymbol{\phi}^\wedge} &= e^{\theta \boldsymbol{a}^\wedge} = \sum_{n=0}^{\infty} \tfrac{1}{n!} (\theta \boldsymbol{a}^\wedge)^n \\
&= \boldsymbol{I} + \theta \boldsymbol{a}^\wedge + \frac{1}{2!}\theta^2 \boldsymbol{a}^\wedge \boldsymbol{a}^\wedge + \frac{1}{3!}\theta^3 \boldsymbol{a}^\wedge \boldsymbol{a}^\wedge \boldsymbol{a}^\wedge + \frac{1}{4!}\theta^4 (\boldsymbol{a}^\wedge)^4 + \ldots \\
&= \boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^T - \boldsymbol{a}^\wedge \boldsymbol{a}^\wedge + \theta \boldsymbol{a}^\wedge + \frac{1}{2!}\theta \boldsymbol{a}^\wedge \boldsymbol{a}^\wedge - \frac{1}{3!}\theta^3 \boldsymbol{a}^\wedge + \frac{1}{4!}\theta^4 (\boldsymbol{a}^\wedge)^4 + \ldots \\
&= \boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^T + \left(\theta - \frac{1}{3!}\theta^3 + \frac{1}{5!}\theta^5 - \ldots\right)\boldsymbol{a}^\wedge - \left(1 - \frac{1}{2!}\theta^2 + \frac{1}{4!}\theta^4 - \ldots\right)\boldsymbol{a}^\wedge \boldsymbol{a}^\wedge \\
&= \boldsymbol{a}^\wedge \boldsymbol{a}^\wedge + \boldsymbol{I} + \sin\theta \boldsymbol{a}^\wedge - \cos\theta \boldsymbol{a}^\wedge \boldsymbol{a}^\wedge \\
&= (1 - \cos\theta)\boldsymbol{a}^\wedge \boldsymbol{a}^\wedge + \boldsymbol{I} + \sin\theta \boldsymbol{a}^\wedge \\
&= \cos\theta \boldsymbol{I} + (1 - \cos\theta)\boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^T + \sin\theta \boldsymbol{a}^\wedge
\end{aligned}
$$

即：$\boldsymbol{R}=e^{\theta \boldsymbol{a}^\wedge}=\cos\theta \boldsymbol{I}+(1-\cos\theta)\boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^T+\sin\theta \boldsymbol{a}^\wedge.$

[回顾] 罗德里格斯公式：旋转向量 $\boldsymbol{n}$ 到旋转矩阵 $\boldsymbol{R}$

$$\boldsymbol{R}=\cos\theta \boldsymbol{I}+(1-\cos\theta)\boldsymbol{n}\boldsymbol{n}^T+\sin\theta \boldsymbol{n}^\wedge.$$

因此，$\boldsymbol{\phi}=\theta\boldsymbol{a}$ 是旋转向量（或轴角），$\mathfrak{so}(3)$ 是由旋转向量组成的空间，而指数映射就是罗德里格斯公式映射。我们可以将 $\mathfrak{so}(3)$ 中的任意一个旋转向量对应到 SO(3) 中的一个旋转矩阵。

指数映射建立了从向量到矩阵的映射，同理，反过来，从矩阵到向量的映射可以通过如下的对数映射建立：

$$\boldsymbol{\phi}=\ln(\boldsymbol{R})^\vee=\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n+1}(\boldsymbol{R}-\boldsymbol{I})^{n+1}\right)^\vee.$$

同样地，一般没必要用泰勒展开计算对数映射，而是使用上一节介绍的公式 $\theta=\arccos\frac{tr(\boldsymbol{R})-1}{2}$ 进行计算。

李群与李代数

需要指出，指数映射不是一个双射，但是一个满射。这意味着每一个旋转矩阵都可以找到一个旋转向量与之对应，但是可能存在多个向量对应到同一个矩阵。这个很好理解，因为旋转角度具有周期性，多转360°效果一样。

一般将旋转角固定在±π之间，则李群与李代数的元素是一一对应的。

旋转矩阵的导数可以由旋转向量指定，指导着如何在旋转矩阵中进行微积分运算

SE(3) 也有对应的李代数 $\mathfrak{se}(3)$. $\mathfrak{se}(3)$位于 $\mathbb{R}^6$ 空间中，

$$\mathfrak{se}(3) = \left\{ \xi = \begin{bmatrix} \rho \\ \phi \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^6, \rho \in \mathbb{R}^3, \phi \in \mathfrak{so}(3), \xi^\wedge = \begin{bmatrix} \phi^\wedge & \rho \\ \mathbf{0}^T & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{4\times 4} \right\}.$$

$\mathfrak{se}(3)$ 由三维的平移分量 $\boldsymbol{\rho}$ 和三维的旋转分量 $\boldsymbol{\phi}$ 组成，其中的旋转分量与 $\mathfrak{so}(3)$ 相同。同时对符号^的意义进行了拓展，不再表示反对称：

$$\xi^\wedge = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\phi}^\wedge & \boldsymbol{\rho} \\ \mathbf{0}^T & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{4\times 4}.$$

^ 不再是反对称矩阵，表示“从向量到矩阵”；同样地，$^\vee$表示“从矩阵到向量”。

注意：平移分量 $\boldsymbol{\rho}$ 不是SE(3) 上的平移分量 $\boldsymbol{t}$！

同样定义李括号为：$[\xi_1, \xi_2] = (\xi_1^\wedge \xi_2^\wedge - \xi_2^\wedge \xi_1^\wedge)^\vee$.

$\mathfrak{se}(3)$ 上的指数映射

$$\exp(\boldsymbol{\xi}^\wedge) = \begin{pmatrix} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(\boldsymbol{\phi}^\wedge)^n & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(n+1)!}(\boldsymbol{\phi}^\wedge)^n \boldsymbol{\rho} \\ \mathbf{0}^T & 1 \end{pmatrix} \triangleq \begin{pmatrix} \boldsymbol{R} & \boldsymbol{J}\boldsymbol{\rho} \\ \mathbf{0}^T & 1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{T}$$

其中 $\boldsymbol{J} = \frac{\sin\theta}{\theta}\boldsymbol{I} + \left(1 - \frac{\sin\theta}{\theta}\right)\boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^T + \frac{1-\cos\theta}{\theta}\boldsymbol{a}^\wedge.$

右上角表示李代数的平移部分到矩阵的平移部分，相差一个以 $\boldsymbol{J}$ 为系数矩阵的线性变换。

同样可以推得对数映射，但有更方便的方式：从左上角的 $\boldsymbol{R}$ 计算旋转向量，而右上角的 $\boldsymbol{t}$ 满足：$\boldsymbol{t} = \boldsymbol{J}\boldsymbol{\rho}$. 由于 $\boldsymbol{J}$ 可以由 $\boldsymbol{\phi}$ 得到，所以 $\boldsymbol{\rho}$ 也可以通过求解此线性方程组得到。

李群与李代数

三维旋转

李群

$SO(3)$

$R \in \mathbb{R}^{3\times3}$

$RR^T = I$

$\det(R) = 1$

$\exp(\theta a^\wedge) = \cos\theta I + (1-\cos\theta) aa^T + \sin\theta a^\wedge$ 指数映射

对数映射 $\theta = \arccos\frac{tr(R)-1}{2}$ $Ra = a$

李代数

$\mathfrak{so}(3)$

$\phi \in \mathbb{R}^3$

$$\phi^\wedge = \begin{bmatrix} 0 & -\phi_3 & \phi_2 \\ \phi_3 & 0 & -\phi_1 \\ -\phi_2 & \phi_1 & 0 \end{bmatrix}$$

三维变换

李群

$SE(3)$

$T \in \mathbb{R}^{4\times4}$

$$T = \begin{bmatrix} R & t \\ 0^T & 1 \end{bmatrix}$$

$$\exp(\xi^\wedge) = \begin{bmatrix} \exp(\phi^\wedge) & J\rho \\ 0^T & 1 \end{bmatrix}$$

$$J = \frac{\sin\theta}{\theta} I + \left(1 - \frac{\sin\theta}{\theta}\right) aa^T + \frac{1-\cos\theta}{\theta} a^\wedge$$

指数映射

对数映射 $\theta = \arccos\frac{tr(R)-1}{2}$ $Ra = a$ $t = J\rho$

李代数

$\mathfrak{se}(3)$

$$\xi = \begin{bmatrix} \rho \\ \phi \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^6$$

$$\xi^\wedge = \begin{bmatrix} \phi^\wedge & \rho \\ 0^T & 0 \end{bmatrix}$$