三對角線矩陣之幾何觀

呂宗澤・鄭穗生

一. 簡介

三對角線矩陣是一種特別的方陣, 型如

$$T(g)=\begin{bmatrix} g_1 & h_1 & 0 & & \cdots & & 0 \\ f_1 & g_2 & h_2 & 0 & \cdot & & \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & & & \vdots \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & 0 \\ & & & & f_{n-2} & g_{n-1} & h_{n-1} \\ 0 & & \cdots & & 0 & f_{n-1} & g_n \end{bmatrix}, \tag{1}$$

非零分量只分佈在主對角線及其上下次對角線上, 其他分量均為0。因為這種稀疏的特性, 三對角線矩陣比一般矩陣有更好的性質, 有更多的理論被發現, 研究起來當然也比較容易。事實上它在矩陣理論或矩陣計算上都扮演了一個重要的角色。

十多年前, 我們一個在清華大學的研究小組, 經過多年的努力, 自行開發一套幾何的觀點來研究三對角線矩陣的可逆性, 陸續得到一些有趣而且具應用價值的結果 [1−5]。本文的目的是希望由淺顯的方式來介紹這套幾何, 指出一些我們最新的研究方向。要瞭解本文, 大概需要修過一學期的線性代數, 但其中一些概念高中學過的矩陣已足夠了。

底下我們討論的三對角線矩陣, 其分量均為實數。首先觀察一個特別的三對角線矩陣

$$M=\begin{bmatrix} a & 1 & & \\ 1 & b & 0 & \\ & 1 & c & 1 \\ & & 1 & d \end{bmatrix},$$

其次對角線上有一零分量。M 是否有反矩陣, 只要檢查 M 的行列式是否非零, 但

$$\det(M)=\left|\begin{array}{cc:cc} a & 1 & & \\ 1 & b & 0 & \\ \hdashline & 1 & c & 1 \\ & & 1 & d \end{array}\right| = \begin{vmatrix} a & 1 \\ 1 & b \end{vmatrix}\cdot\begin{vmatrix} c & 1 \\ 1 & d \end{vmatrix},$$

因此 M 可逆 (即有反矩陣) 的充要條件是其子矩陣

$$\begin{bmatrix} a & 1 \\ 1 & b \end{bmatrix} \quad 與 \quad \begin{bmatrix} c & 1 \\ 1 & d \end{bmatrix} \tag{2}$$

的行列式皆不等於零, 亦即此二矩陣都可逆, 所以三對角線矩陣若有

註: 組員 鄭穗生、趙昭子、呂宗澤、李宏展、吳淑惠、謝良瑜、盧瑞棻、羅家耀、林素心。

次對角線上分量爲零, 其是否可逆能由其數個子矩陣的可逆性得知。

要求 M 的固有值, 即解特徵方程式

$$\begin{aligned}
&\det(M-\lambda I)\\
=&\begin{vmatrix} a-\lambda & 1 & & \\ 1 & b-\lambda & 0 & \\ & 1 & c-\lambda & 1 \\ & & 1 & d-\lambda \end{vmatrix}\\
=&\begin{vmatrix} a-\lambda & 1 \\ 1 & b-\lambda \end{vmatrix}\cdot\begin{vmatrix} c-\lambda & 1 \\ 1 & d-\lambda \end{vmatrix}
\end{aligned}$$

的根, 因此 M 的固有值即其二子矩陣 (2) 的固有值聯集。所以, 次對角線上有分量爲零時, 探討其可逆性及固有值的問題, 可化成一些維數較小的子矩陣的對應問題。換句話說, 我們只要研究次對角線分量均非零的三對角線矩陣, 一般的情形都可簡化成這種型式來討論。

在解線性方程組時, 我們都知道其中一個方程式的每個係數都乘上同一非零常數時, 其解不會改變, 或者某個變數在所有方程式的係數, 都乘上同一非零常數時, 其解除了在此變數上有增減外, 其他的均不變。這種“伸縮”的技巧也可應用在三對角線矩陣上, 例如 $f_1f_2h_1h_2\neq 0$ 時

$$T=\begin{bmatrix} g_1 & h_1 & 0 \\ f_1 & g_2 & h_2 \\ 0 & f_2 & g_3 \end{bmatrix}.$$

的行列式可改寫如下:

$$\begin{aligned}
\det(T) &= \begin{vmatrix} g_1 & h_1 & 0 \\ f_1 & g_2 & h_2 \\ 0 & f_2 & g_3 \end{vmatrix} = f_1\begin{vmatrix} g_1 & h_1 & 0 \\ 1 & \frac{g_2}{f_1} & \frac{h_2}{f_1} \\ 0 & f_2 & g_3 \end{vmatrix}\\
&= f_1h_1\begin{vmatrix} g_1 & 1 & 0 \\ 1 & \frac{g_2}{f_1h_1} & \frac{h_2}{f_1} \\ 0 & \frac{f_2}{h_1} & g_3 \end{vmatrix}\\
&= f_1h_1\cdot\frac{f_2}{h_1}\begin{vmatrix} g_1 & 1 & 0 \\ 1 & \frac{g_2}{f_1h_1} & \frac{h_2}{f_1} \\ 0 & 1 & \frac{h_1}{f_2}g_3 \end{vmatrix}\\
&= f_2h_2\cdot\begin{vmatrix} g_1 & 1 & 0 \\ 1 & \frac{g_2}{f_1h_1} & 1 \\ 0 & 1 & \frac{h_1f_1}{f_2h_2}g_3 \end{vmatrix},
\end{aligned}$$

因此 T 的可逆性可轉化成矩陣

$$\begin{bmatrix} g_1 & 1 & 0 \\ 1 & \frac{g_2}{f_1h_1} & 1 \\ 0 & 1 & \frac{f_1h_1}{f_2h_2}g_3 \end{bmatrix}$$

的可逆性, 新矩陣的次對角線分量均爲1, 當然比 T 容易研究。同理只要瞭解 $n\times n$ 矩陣

$$A(g)=\begin{bmatrix} g_1 & 1 & & & \\ 1 & g_2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & g_{n-1} & 1 \\ & & & 1 & g_n \end{bmatrix}$$

的可逆性, 就可解決 $T(g)$ 是否可逆的問題 [3, §5]。底下我們就針對 $A(g)$ 這矩陣來研究。

二. 奇異曲面

我們這套幾何乃將矩陣 $A(g)$ 看成其主對角線向量 $g=(g_1,g_2\dots g_n)$ 的函數, 討論在不同 $g\in R^n$ 時 $A(g)$ 的可逆性。為方便討論, 我們有以下的定義: 若 $A(g)$ 可逆, 我們說向量 g 是正則的, 否則稱 g 為奇異的; 在 R^n 中, 若一個集合內的每個向量都是正則 (奇異) 的, 則稱此集合為正則 (奇異) 集。

先看 2×2 矩陣

$$E=\begin{bmatrix} x & 1\\ 1 & y\end{bmatrix}$$

的例子, 將有助我們理解 $A(g)$ 可逆的幾何意義。E 的行列式很容易算出, 即 $xy-1$, 因此 E 不可逆的充要條件是對角線 (x,y) 在雙曲線 $xy=1$ 上 (見圖1)。用我們上面的定義來說, $xy=1$ 為 R^2 平面上所有奇異點所成的集合, 可以稱它為奇異曲線; 雙曲線外的點都是正則的, 這些點所構成的集合稱為正則區域。注意到雙曲線有兩支, 每支都是無界的閉集。

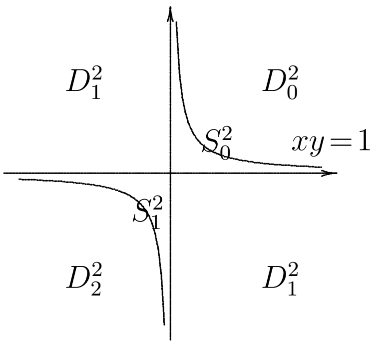

圖 1

不難將這個概念推廣到 n 維矩陣 $A(g)$:

$$S^n=\{g\in R^n|\det(A(g))=0\}$$

為 n 維空間的奇異集, 其他地方構成正則區域。有趣的是這個奇異集可分成 n 個互不相交的部份, 每部份都是無界的連通閉集, 而且具有“曲面”的性質 [4]。這 n 部份奇異曲面, 兩兩間到底有什麼不同呢? 要解釋此差異, 我們需要伴隨向量與振動次數的概念。

首先我們定義 $A(g)$ 第 k 個主子矩陣的行列式為

$$A_k=\begin{vmatrix} g_1 & 1 & & & \\ 1 & g_2 & \cdot & & \\ & \cdot & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \cdot & 1\\ & & & 1 & g_k \end{vmatrix},\ k=1,2,\dots,n,$$

則根據行列式展開, 可得遞推式

$$\begin{aligned} A_{k-1} &= g_{k+1}\begin{vmatrix} g_1 & 1 & & & \\ 1 & g_2 & \cdot & & \\ & \cdot & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \cdot & 1\\ & & & 1 & g_k \end{vmatrix}\\ &\quad -\begin{vmatrix} g_1 & 1 & & & 0\\ 1 & g_2 & \ddots & & \vdots\\ & & \ddots & 1 & \\ & & \ddots & g_{k-1} & 0\\ & & & 1 & 1 \end{vmatrix}\\ &= g_{k+1}A_k-A_{k-1}。 \end{aligned}\qquad (3)$$

設定 $A_{-1}=0$ 及 $A_0=1$, 我們就可利用三項遞迴式 (3) 遂次算出 $A_1,A_2,\dots,A_n$, 最終的 A_n 即為 $A(g)$ 的行列式。對每個 $g\in R^n$, 都可定義出數列 $\{A_k\}_{k=-1}^{n}$, 因此我們稱

$$C(g)=(A_{-1},A_0,\dots,A_n)$$

爲 g 的伴隨向量。

將伴隨向量的下標與對應分量 $\{(k,A_k)|\ k=-1,0,\ldots,n\}$ 在平面上畫出來, 就得到 $n+2$ 個點。連續兩點用直線段連起來, 就得到一個折線 (如圖2), 這個折線的零根就稱爲 $c(g)$ 的節點。注意到連續兩個 A_k 及 A_{k+1} 不能同時爲0, 否則根據 (3) $c(g)$ 只能爲零向量, 這與 $A_0=1$ 相矛盾。因此 $c(g)$ 節點數目必爲有限, 設 I 爲 $[-1,n]$ 的一個子區間, 我們就可定義 $c(g)$ 在 I 的振動次數 $V(c(g);I)$ 爲 $c(g)$ 在 I 的節點數目。

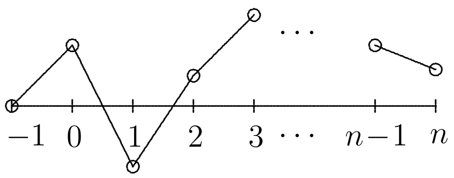

圖 2

當 g 是奇異時, $A_n=\det A(g)=0$, 故其伴隨向量 $c(g)$ 產生的折線, 頭尾兩端 ($k=-1$ 及 n) 都是節點。奇異曲面之所以分成 n 片, 乃因每片上點的伴隨向量振動次數相異之故, 因此我們可以定義第 $k+1$ 片奇異曲面爲

$$\begin{aligned} S_k^n = \quad & \{g\in R^n|\det A(g)=0 \text{ 且} \\ & V(c(g);(0,n))=k\}, \\ & k=0,1,\ldots,n-1。\end{aligned}$$

二維的情形如圖1, $S^2=S_0^2\cup S_1^2$, 其中 S_0^2 爲雙曲線在第一象限的分支, S_1^2 爲雙曲線在第三象限的分支。

對任何奇異的向量 g, 齊次方程組

$$A(g)x=0$$

的解空間都是一維的; 若 $g\in S_k^n$, 則非零解 $x=(x_1,x_2\ldots x_n)$ 產生的折線在 $[1,n]$ 間有 $n-1-k$ 個零根, 因此我們知道 x 的振動次數爲

$$V(x;[1,n])=n-1-k。$$

從圖1我們觀察到 S_0^2 與 S_1^2 是對原點對稱, 同時也對 $x+y=0$ 直線對稱; 就每支曲線而言, S_k^2 是對 $x=y$ 直線對稱的 $(k=1,2)$。這個對稱性不難推廣到 n 維, 事實上 S_k^n 與 S_{n-k-1}^n 是對原點對稱 [4, 定理2.1], 且對下列子空間對稱

$$\begin{aligned} U=\{(x_1\ldots x_n)| \quad & x_i+x_{n+1-i}=0, \\ i \quad & =1,2,\ldots,n\}。\end{aligned}$$

當 n 爲奇數時, 正中間的曲面 $S_{\frac{n-1}{2}}^n$ 本身就對原點及 U 對稱。另外每片曲面 S_k^n 都是對下列子空間對稱的 [4, 定理2.2]

$$\begin{aligned} V=\{(x_1\ldots x_n)| \quad & x_i=x_{n+1-i}, \\ i \quad & =1,2,\ldots,n\}。\end{aligned}$$

上面提到, S_k^n 有曲面的性質, 其中比較重要的是這些曲面可用參數式表達。以 S^2 爲例, 由於它是用方程式 $xy-1=0$ 定義, 則以參數方程 $x=t$, $y=\frac{1}{t}$ 也可表示 S^2。

對於一般的奇異曲面, 首先注意到, 如果 $A_1, A_2, \ldots, A_{n-1}$ 均不爲零, 則 (3) 式可改寫成

$$g_{k+1} = \frac{A_{k+1}}{A_k} + \frac{A_{k-1}}{A_k}, \quad k = 0, 1, \ldots, n-1。$$

因 g 是奇異的, $A_n = 0$。設定參數

$$c_k = A_k / A_{k-1}, \quad k = 1, 2, \ldots, n-1$$

則得參數方程組

$$\begin{cases} g_1 = c_1, \\ g_k = c_k + \frac{1}{c_{k-1}}, \quad k = 2, \ldots, n-1, \\ g_n = \frac{1}{c_{n-1}}, \end{cases} \tag{4}$$

其中注意到我們用了 $n-1$ 個參數 c_k。

依振動數目的定義, 知 $g \in S_0^n$ 時, 其伴隨向量中的 $A_0, A_1, \ldots, A_{n-1}$ 均爲正。因此 g 有 (4) 之表法, 其所有參數 c_k 均爲正。若 $g \in S_{n-1}^n$, 則其伴隨向量中的 $A_0, \ldots, A_{n-1}$ 正負相間, 因此 g 也可用 (4) 表示, 但所有參數均取負值。至於其他曲面 S_k^n $(1 \le k \le n-2)$ 上的點, 對應的 $A_1, \ldots, A_{n-1}$ 中可能會有零出現, 其參數表示法當然會比較複雜, 有興趣的讀者可參考 [4, §3]。利用這些參數表示法, 我們可以證出很多有關奇異曲面的性質, 例如它們的延伸範圍、它們的拓樸性質、它們的對稱性質等等。

三. 正則區域

從圖1可觀察到, 兩支奇異曲線 S_0^2 與 S_1^2 將 R^2 平面分成三塊正則區域。在高維空間也有同樣的情形, $S_0^n, \ldots, S_{n-1}^n$ 這 n 片曲面將 R^n 空間分割成 $n+1$ 個不連通的正則區域, 不同區域間的差別乃在其伴隨向量的振動次數不一樣。我們可精確地來定義第 k 個正則區域

$$\begin{aligned} D_k^n = \quad & \{g \in R^n | \det A(g) \neq 0 \quad 且 \\ & V(c(g); (0, n)) = k\}, \\ & k = 0, 1, \ldots, n。\end{aligned}$$

圖1標出 D_k^2 的位置, D_0^2 乃在 S_0^2 右上方部份, D_1^2 爲 S_0^2 與 S_1^2 中間區域, D_2^2 在 S_1^2 左下方。

不難證出 [4], 每個正則區域 D_k^n 都是無界的連通開集。奇異曲面有對稱性, 正則區域當然也有, D_k^n 與 D_{n-k}^n 對原點對稱, 且對子空間 U 對稱; 另外每個區域 D_k^n 本身都對子空間 V 對稱; 當 n 爲偶數時, 正中間的區域 $D_{\frac{n}{2}}^n$ 會對原點及 U 對稱。

一個令人驚訝的事情是, 這些正則區域與奇異曲面是按著某種規律有條不紊的排列著, 他們之間可以定義次序關係。這個規則很容易可從圖1看出來, 從右上往左下依次是 $D_0^2, S_0^2, D_1^2, S_1^2$ 及 D_2^2。n 維的情形, 我們可以考慮與 $(1, 1, \ldots 1)$ 向量平行的直線, 這種直線當然有無限多個, 但不管是那一條, 它上面正則區域與奇異曲面的次序都是一樣的。當某質點沿著此種直線移動, 其座標分量由 $+\infty$ 遞減到 $-\infty$ 時, 它會依次經過 $D_0^n, S_0^n, D_1^n, S_1^n, \ldots, D_{n-1}^n, S_{n-1}^n$ 而到 D_n^n。

瞭解了各個正則區域與各片奇異曲面的空間次序關係, 就不難瞭解 S_0^n 爲 D_0^n 之邊

界, S^n_{n-1} 爲 D^n_n 的邊界, 而 D^n_k 的邊界爲 $S^n_{k-1}\cup S^n_k$, $k=1,2,\ldots n-1$ [4, 定理5.1], 也不難想像 $D^n_k\cup S^n_k\cup D^n_{k+1}$ 爲一開集。假設有一條路徑連接 D^n_1 內某點與 D^n_4 內某點, 則此路徑上必有 $S^n_1, D^n_2, S^n_2, D^n_3$ 與 S^n_3 的點, [4, 定理6.1]。同樣地很容易可看出, 若有某連通的正則集合, 則此集合必落在某個 D^n_k 內 [4, 定理6.2]。

四. 正則凸域

這一節我們對奇異曲面最外邊的正則集再作說明, 先看二維的情形會帶給我們一些靈感。回憶 S^2_0 上點的參數式爲 $(t,\frac{1}{t})$, 其中 $t>0$; 每個正 t 就對應出 S^2_0 上點 $P=(t,\frac{1}{t})$。P 點外面可定義爲 $\begin{cases}|x|\geq t\\ |y|\geq \frac{1}{t}\end{cases}$,

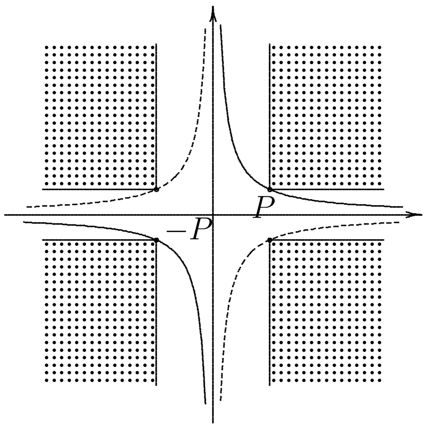

圖 3

這個集合爲圖3中格子點的部份, 每象限都有一塊無界的區域, 每塊形狀都類似。注意到這集合除了點 P 及 $-P$ 外, 其他點都是正則的。因爲 t 可變動, 實際上我們有無窮多個這種集合, 將所有這類集合聯集起來, 就形成圖4的點狀區域 G。G 除了在邊界 S^2_0 及 S^2_1 上, 其他點都是正則的, 而且 G 在每個象限內都是一個凸集。

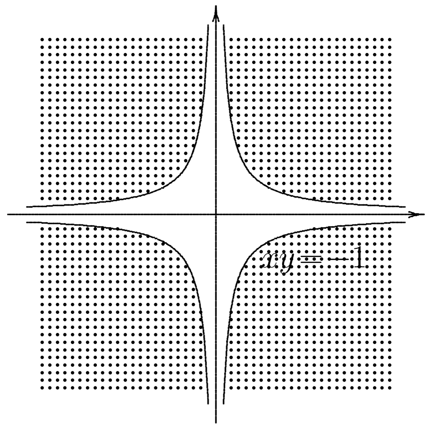

圖 4

高維時首先考慮 S^n_0 上的點 $P=(c_1, c_2+\frac{1}{c_1},\ldots,c_{n-1}+\frac{1}{c_{n-2}},\frac{1}{c_{n-1}})$, 其參數 $c_1,\ldots,c_{n-1}$ 均爲正。此點"外面"的集合可定義爲

$$\begin{cases}|g_1|\geq c_1\\ |g_k|\geq c_k+\frac{1}{c_{k-1}}, \quad k=2,\ldots,n-1\\ |g_n|\geq \frac{1}{c_{n-1}}\end{cases} \tag{5}$$

只要 (5) 中有一個不等式是嚴格大於, 則 g 爲正則的。它的證明其實很容易, 只要用歸納法證明三項遞推式 (3) 滿足

$$|A_k|\geq c_k|A_{k-1}|>0,\ k=1,\ldots,n-1, \tag{6}$$

就可得到 $|A_n|>0$, 有興趣的讀者可參考 [1, 引理1,2]。事實上只要 g 不爲 $\pm P$, 滿足 (5) 式的 g 都是正則的 [4, 定理7.4]。

讓正的參數 $c_1,\ldots,c_{n-1}$ 變動, (5) 式就定義出許多不同的集合, 將這些集合聯集起來, 就得到一個區域 G。這個 G 有絕對對稱性, 也就是說當向量 u 與 v 的分量絕對值均相同 ($|u_k|=|v_k|, k=1,\ldots,n$), 若 $u\in G$ 則 $v\in G$。二維的象限, 推廣到 n 維就稱爲卦限。不難看出, G 在 n 維空間的每個卦限都有一塊, 每一塊都是無界, 且兩兩並不相連; 根據絕對對稱性, 每塊形狀均“相同”。同二維的情形一樣, G 在 $(+,+,\ldots,+)$ 卦限的這一塊就是 $D_0^n\cup S_0^n$, G 在 $(-,-,\ldots,-)$ 卦限的這一塊就是 $D_n^n\cup S_{n-1}^n$ [4, 定理 7.3]; G 的邊界只在這兩個卦限是奇異的, 此二奇異邊界分別爲 S_0^n 及 S_{n-1}^n, 其餘邊界均爲正則 [4, 定理 7.4], 因此 G 中除了 $\pm P$ 這種點外都是正則的。所以區域 G 的內部是包含 D_0^n 與 D_n^n, 且在每個卦限都是連通的最大絕對對稱正則區域。

G 的另一特徵是它在每個卦限內都是凸集 [1, 定理 1], 二維時, 由圖 4 很容易可看出。用這個凸集的特性可做出一些不同的正則集 [1, 推論 1,2], 如

$$\sum_{k=1}^{n} k(n+1-k)\min\{|g_k|-2,0\} > -(n+1); \qquad (7)$$

$$\sum_{k=1}^{n}\min\{|g_k|-2,0\} > -\gamma_n, \qquad (8)$$

而

$$\gamma_n=\begin{cases}\frac{2m+1}{m(m+1)}, & n=2m\\ \frac{2}{m+1}, & n=2m+1\end{cases}$$

等等。$n=2$ 時, 上面二不等式的圖形如圖 5。

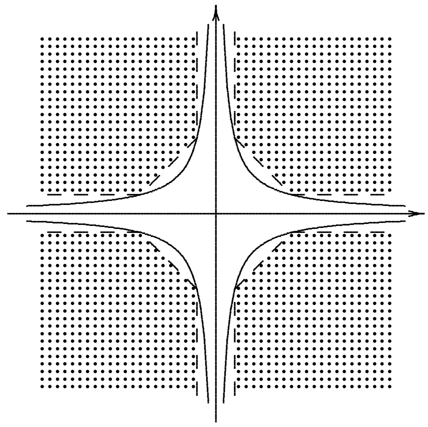

圖 5

五. 正則卦限

圖 1 告訴我們, 第二、四象限都是正則的, 自然我們會懷疑, n 維空間有那些卦限是正則的? 它的答案是, 只有兩個正則卦限, 即 $(+,-,+,-,\cdots)$ 與 $(-,+,-,+,\cdots)$。證明詳見 [2], 要說明此二卦限是正則的卻很簡單, 利用數學歸納法推導出三項遞迴式 (3) 滿足

$$g_kA_{k-1}A_k>0,\ k=1,2,\ldots,n。 \qquad (9)$$

至於奇異的卦限是不存在的, 因爲奇異曲面不是“實心”的 [4, 引理 2.4], 換句話說, 這些 $n-1$ 維曲面並不包含任何 n 維的球。

圖 1 也可看出兩個座標軸 (x 軸與 y 軸) 都是正則的, 那麼 n 維空間有那些正則的座標軸或座標面呢? 它的充要條件較繁, 我們不打算在此敍述, 讀者可自行閱讀 [2, 定理 2]。事實上, 當維數 n 爲偶數時, 所有的正則卦限及正則座標軸、面, 都含在正中間的正則

區域 $D^n_{\frac{n}{2}}$ 內, n 奇數時, 這些卦限、軸、面包含在 $D^n_{\frac{n-1}{2}}$ 與 $D^n_{\frac{n+1}{2}}$ 內 [4, 定理7.7]。

至於有那些奇異的座標軸或面呢? 這問題的答案卻很簡單, 首先注意到當維數 n 是偶數時, 不存在奇異的座標軸與面。其原因是當 g 爲原點時, $\det A(0)=(-1)^{n/2}\neq 0$, 故原點附近都是正則的, 而任何座標軸、面都包含原點附近, 所以不可能整個軸、面都奇異。奇數維時, 原點爲奇異的, 而有奇異的座標軸、面, 其充要條件爲 [2, 定理3]

$$g_1=g_3=\cdots=g_n=0;$$

事實上所有的奇異座標軸、面都在正中間片奇異曲面 $S^n_{\frac{n-1}{2}}$ 之內 [4, 定理7.6]。

利用第一節提到的伸縮變換, 我們可以得到 (1) 式一般三對角線矩陣 $T(g)$ 的正則卦限與正則座標軸、面 [2, 定理4]。例如矩陣

$$B=\begin{bmatrix} g_1 & h \\ f & g_2 \end{bmatrix}。$$

當 $fh>0$ 時, g 在第二、四象限是正則的; 當 $fh<0$, g 在一、三象限是正則的。換成符號矩陣的語言來說

$$\begin{bmatrix} + & + \\ + & - \end{bmatrix},\begin{bmatrix} - & + \\ + & + \end{bmatrix},\begin{bmatrix} + & - \\ - & - \end{bmatrix},\begin{bmatrix} - & - \\ - & + \end{bmatrix},$$
$$\begin{bmatrix} + & - \\ + & + \end{bmatrix},\begin{bmatrix} - & - \\ + & - \end{bmatrix},\begin{bmatrix} + & + \\ - & + \end{bmatrix},\begin{bmatrix} - & + \\ - & - \end{bmatrix},$$

都是可逆的, 亦即任何矩陣對應分量有上述符號性, 則此矩陣必可逆。符號矩陣是當今矩陣理論最熱門的研究題材之一 [7]。

六. 正則內域

上節提到, 當維數 n 爲偶數時, 原點是正則的; 當 n 爲奇數時, 原點爲奇異的。底下我們討論包含原點的正則集, 因此本節 n 都限定爲偶數。在 R^2 平面, 我們有很多包含原點的正則菱形

$$\frac{1}{t}|x|+t|y|<2, \tag{10}$$

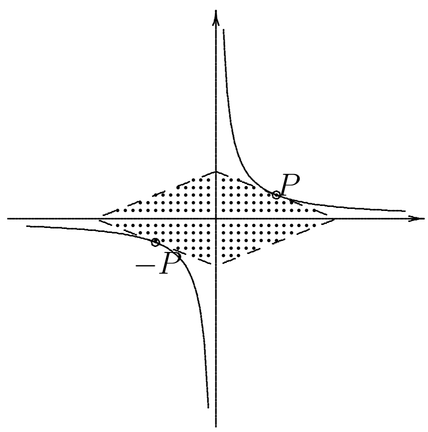

圖 6

如圖6, 其中 t 爲任意正數。這些菱形都與奇異曲線相切, 切點在 $\pm P=\pm(t,\frac{1}{t})$, 因此幾何上它們都是中心在原點的最大正則菱形; 代數上來說, 不等式 (10) 的上界2是最好的了, 無法再增大。圖7也可看出雙曲線內部

$$|x|\cdot|y|<1$$

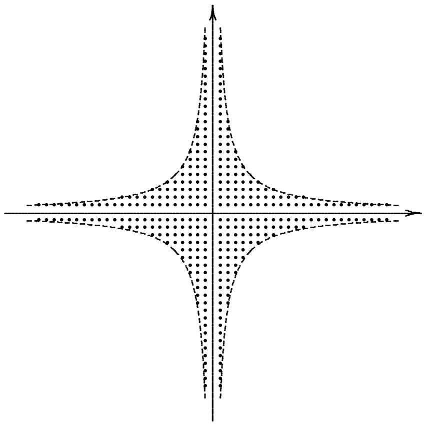

圖 7

也是正則的, 它是含原點的最大絕對對稱的星狀正則區域。

不難將這些概念推廣到 n 維 [3, 定理2.3]。首先我們可驗證下面含原點的正則內域

$$\sum_{i=1}^{n/2}\sum_{j=1}^{i}|g_{2i}g_{2j-1}|<1, \qquad (11)$$

然後再利用不等式

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{n/2}\sum_{j=1}^{i}|g_{2i}g_{2j-1}| &\le \sum_{i=1}^{n/2}|g_{2i}|\cdot\sum_{j=1}^{n/2}|g_{2j-1}|\\ &\le \frac{1}{4}\Big(t\sum_{i=1}^{n/2}|g_{2i}|+\frac{1}{t}\sum_{j=1}^{n/2}|g_{2j-1}|\Big)^2,\end{aligned}$$

其中 t 可設定爲任意正數, 則我們可得到更多的正則內域, 如

$$\sum_{i=1}^{n/2}|g_{2i}|\cdot\sum_{j=1}^{n/2}|g_{2j-1}|<1,$$

$$t\sum_{i=1}^{n/2}|g_{2i}|+\frac{1}{t}\sum_{j=1}^{n/2}|g_{2j-1}|<2,$$

$$\sum_{i=1}^{n/2}|g_{2i}|<\frac{1}{t}\ \text{且}\ \sum_{j=1}^{n/2}|g_{2j-1}|<t.$$

幾何上這些區域的邊界都碰到奇異曲面, 代數上這些不等式的上界常數不能再大, 因此這些區域都是“最好”的。附帶一提, 我們事實上還得到 (11) 式定義出來的正則內域, 其邊界上的點是正則或奇異的充要條件 [3, 定理2.6及2.7]。

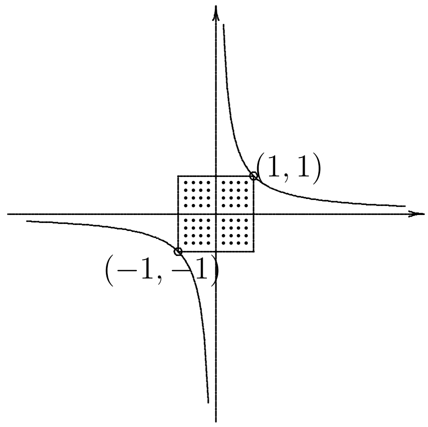

圖 8

圖8畫出二維時, 中心在原點, 邊線與座標軸平行的最大正則正方形: $\max\{|x|,|y|\}\le 1$, 其邊界除了 $\pm(1,1)$ 之外, 都是正則的。高維時, 此種最大正方體爲 [3, 定理4.1]

$$|g_i|\le\sigma;\quad i=1,2,\ldots,n \qquad (12)$$

而 $\sigma=2\cos\frac{n\pi}{2(n+1)}$; 除了 $g=\pm(\sigma,\sigma,\ldots,\sigma)$ 之外, 滿足 (12) 式的 g 都是正則的。

自然我們會想到中心在原點、邊線與座標軸平行的最大正則長方體。二維的做法是: 任選 S_0^2 上的一個點 $P=(t,\frac{1}{t})$ 當頂點, 當然此

處 $t > 0$, 然後依此定義出長方形 $\begin{cases}|x| \le t\\ |y| \le \frac{1}{t}\end{cases}$

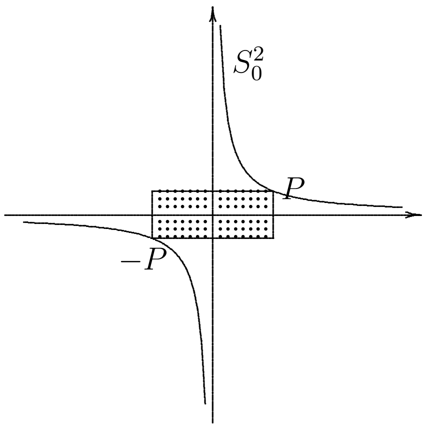

圖 9

如圖9。注意到除了 $\pm P$ 之外, 此長方形上的點都是正則的, 因此它是最大的正則長方形。因爲 t 可變動, 我們可將無窮多個這種長方形聯集起來,就形成了圖7的點狀區域 L (含邊界)。L 是一星狀區域,除了在邊界 S_0^2 及 S_1^2,其他的點都是正則的。

這些想法不難推廣到 n 維空間, 首先選取 $S^n_{\frac{n}{2}-1}$ 上的點

$$\begin{aligned}P &= (c_1, \frac{1}{c_1} - c_2, c_3 - \frac{1}{c_2}, \frac{1}{c_3} - c_4, \cdots,\\ &\quad c_{n-1} - \frac{1}{c_{n-2}}, \frac{1}{c_{n-1}})\end{aligned}$$

爲頂點,其參數 c_k 滿足 $\frac{1}{c_1} \ge c_2 \ge \frac{1}{c_3} \ge \cdots \ge c_{n-2} \ge \frac{1}{c_{n-1}} > 0$。由 P 就可定義出長方體

$$\begin{cases}|g_1| \le c_1\\ |g_k| \le (-1)^{k-1}(c_k - \frac{1}{c_{k-1}}), \quad k=2,\ldots,n-1\\ |g_n| \le \frac{1}{c_{n-1}}。\end{cases} \tag{13}$$

只要 $g \neq \pm P$, 則滿足 (13) 式的 g 均爲正則的 [3, 定理3.7]。因此, 這個長方體爲一個中心在原點的最大正則長方體。

如法泡製,讓這些參數 $c_1, \ldots, c_{n-1}$ 變動, 就得到很多不同的長方體, 將這些長方體聯集起來成爲集合 L。L 不用說是星狀、絕對對稱、中心在原點, 且其內部是正則的; 因原點落在正中間的正則區域 $D^n_{\frac{n}{2}}$, L 內部當然包含於 $D^n_{\frac{n}{2}}$ 之內。L 的邊界及奇異邊界都已經知道了 [3, 定理3.5及3.6], 事實上它的奇異邊界是 $S^n_{\frac{n}{2}-1}$ 及 $S^n_{\frac{n}{2}}$ 的一部份 [4, 定理7.5], 因此 $L - (S^n_{\frac{n}{2}-1} \cup S^n_{\frac{n}{2}})$ 是正則的。總結來說, L 的內部是含原點的最大絕對對稱正則連通區域。

另一個有趣的問題是圓心在原點的最大正則球是什麼? 二維的最大正則圓當然是 $x^2+y^2 < 1$,如圖10。

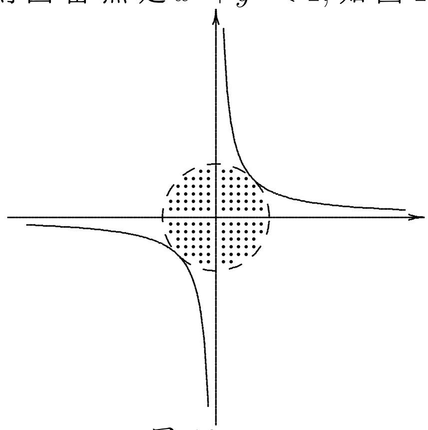

圖 10

至於 n 維 (n 爲偶數) 的情形, 仍尚未被解決。

七. 特徵幾何

固有值 (或稱特徵值) 與矩陣的可逆性有密切的關係, 那麼上面所發展的幾何觀點, 是否也可以處理一些固有值問題呢? 選取向量 $e=(1,1,\cdots,1)$, 設 λ 爲 $A(\mathbf{g})$ 的一個實固有值, 則

$$A(g)-\lambda I=A(g-\lambda e)$$

不可逆, 亦即 $g-\lambda e$ 爲奇異的, 換句話說, $g-\lambda e$ 在某片奇異曲面 S_k^n 上。當 t 變動時, $g-te$ 爲通過點 g 且與向量 e 平行的直線, 每當此線與一片奇異曲面相交, 此時的 t 就是一個實固有值。因此固有值幾何上對應直線與 n 片奇異曲面相交的現象。

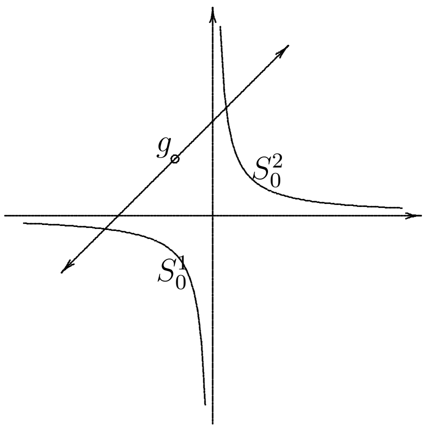

圖 11

二維上來看是很清楚的, 當對角線向量爲 $g=(g_1,g_2)$ 時, 求 $A(g)$ 的固有值, 即求直線 $\mathbf{g-te=(g_1-t,g_2-t)}$ 與奇異曲線 S_0^2 與 S_1^2 的交點, 如圖11。因此最大固有值對應直線與 S_1^2 的交點, 最小固有值發生在直線與 S_0^2 的交點。若交點是在以 g 爲起點, $(-1,-1)$ 方向的射線上, 則對應固有值爲正; 若在 $(1,1)$ 方向的射線, 則對應固有值爲負; 若 g 本身就在奇異曲線上, 則對應固有值爲0。所以

當$g\in D_0^2, A(g)$兩固有值均爲正;
當$g\in D_1^2, A(g)$有一正及一負的固有值;
當$g\in D_2^2, A(g)$兩固有值均爲負;
當$g\in S_0^2, A(g)$有零及一正的固有值;
當$g\in S_1^2, A(g)$有零及一負的固有值。

因$A(g)$爲對稱矩陣, 其固有值均爲實數, 所以在 n 維空間, 直線 $g-te$ 與每片奇異曲面均相交。 在第3節中提到, $D_0^n, S_0^n, D_1^n, S_1^n,\cdots, S_{n-1}^n, D_n^n$ 是沿著 $(-1,-1,\cdots,-1)$ 方向規則的排列著, 因此不難推論出 D_0^n 上的點 g, 其矩陣 $A(g)$ 的固有值均爲正; D_n^n 上的 g, $A(g)$ 的固有值均爲負。事實上

當 $g\in D_k^n$, $A(g)$ 有 k 個負的及 $n-k$ 個正的固有值;

當 $g\in S_k^n$, $A(g)$ 有一個零、k 個負、及 $n-1-k$ 個正的固有值。

用矩陣的語言來說, $A(g)$ 是正定的充要條件是 $g\in D_0^n$, $A(g)$ 是負定的充要條件是 $g\in D_n^n$; $D_0^n\cup S_0^n$ 對應出半正定的矩陣 $A(g)$, $D_n^n\cup S_{n-1}^n$ 對應出半負定的 $A(g)$, 其餘部分對應非定矩陣。我們知道一個矩陣的行列式爲其固有值的乘積, 因此奇異曲面上的點 g, $\det(A(g))=0$; $\det(A(g))>0$ 的充要條件是 $g\in D_k^n$, 而 k 爲偶數; $\det(A(g))<0$ 充要條件是 $g\in D_k^n$, 而 k 爲奇數。

依據奇異曲面排列的特性, 不管對角線向量 g 在何處, 最小固有值一定發生在直線

$g-te$ 與第一片曲面 S_0^n 之交點, 最大固有值發生在直線與 S_{n-1}^n 曲面交點處, 第 k 個固有值 λ_k 由直線與 S_{k-1}^n 相交產生。假設 λ_k 所對應的固有向量爲 v_k, 則

$$\begin{aligned} A(g-\lambda_k e)v_k &= [A(g)-\lambda_k I]v_k \\ &= A(g)v_k-\lambda_k v_k=0, \end{aligned}$$

因此 v_k 爲 $A(g-\lambda_k e)$ 對應的齊次方程之非零解。在第二節中提到這個齊次方程的解空間是一維的, 非零解 v_k 的振動性與 $g-\lambda_k e$ 所在的曲面 S_{k-1}^n 有關, 依此可得固有向量 v_k 之振動次數

$$V(v_k;[1,n])=n-1-(k-1)=n-k。$$

所以每片奇異曲面與直線的交點都產生一個固有值, 當固有值由大到小排列時, 其對應固有向量振動次數依序爲 $0,1,\ldots,n-1$。

在這套幾何下來看 Cauchy 的交錯定理是很有趣的, 這個定理我們將在下面介紹。我們也是先研究低維度的情形, 矩陣 $E=\begin{bmatrix} x & 1 \\ 1 & y \end{bmatrix}$ 的奇異曲面 S_0^2 與 S_1^2 如圖12。$[x]$ 爲 E 的一個一階主子矩陣, 它不可逆的充要條件是 $x=0$, 因此矩陣 $[x]$ 在實數線上只有一個奇異點, 即 $S_0^1=\{0\}$, $D_0^1=\{x|x>0\}$ 及 $D_1^1=\{x|x<0\}$ 爲兩個正則區域, 如圖12。注意到 S_0^2 在 x 軸上的投影剛好是 D_0^1, S_1^2 在 x 軸的投影爲 D_1^1。R^2 上任何與 $(1,1)$ 平行的直線交 S_0^2 於 Q 點, 則 Q 在 x 軸的投影必落在 D_0^1; 同理若此線與 S_1^2 的交點在 R, 則 R 在 x 軸的投影定落在 D_1^1, 因此在 x 軸, Q 及 R 的投影必定被 S_0^1 (即原點 O) 分開 (參見圖12)。

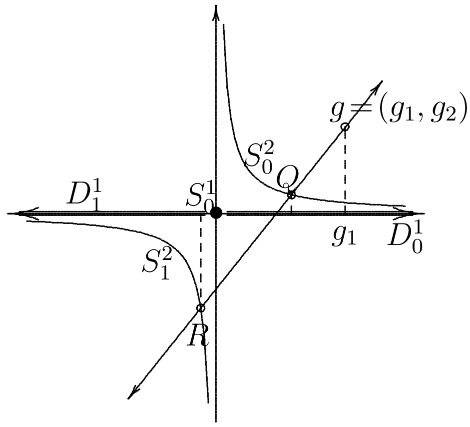

圖 12

我們可以把這種現象用固有值來解讀, 設矩陣

$$\begin{bmatrix} g_1 & 1 \\ 1 & g_2 \end{bmatrix}$$

的兩個固有值依次排列爲 $\lambda_1<\lambda_2$; 其主子矩陣 $[g_1]$ 的固有值爲 $g_1-\lambda=0$, 即 $\lambda=g_1$。R^2 平面上直線 $g-te$ 分別與 S_0^2 及 S_1^2 相交於 Q 及 R (如圖12), Q 點對應直線參數 $t=\lambda_1$, R 點對應 $t=\lambda_2$。今將此直線投影在 x 軸, 得到 x 軸上直線 $g_1-t\cdot 1$, 此線與 S_0^1 之交點即對應 1×1 矩陣 $[g_1]$ 的固有值, 事實上此交點爲原點而對應 $t=g_1$。在 x 軸上, Q 與 R 的投影被 O 分開, 因此這三點所對應的直線參數就有交錯性質

$$\lambda_1<g_1<\lambda_2。$$

n 維時, 設 $A(g)$ 的固有值依序排列爲

$$\lambda_1<\lambda_2<\cdots<\lambda_n,$$

其 $(n-1)\times(n-1)$ 主子矩陣

$$\begin{bmatrix} g_1 & 1 & & & \\ 1 & \cdot & \cdot & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & g_{n-1} \end{bmatrix}$$

的固有值爲

$$\mu_1<\mu_2<\cdots<\mu_{n-1}。$$

同理考慮 n 維空間上的點 $(x_1\cdots x_{n-1},x_n)$ 投影到 $n-1$ 維空間上的 $(x_1\cdots x_{n-1})$, 那麼 n 維奇異曲面 S_k^n 的投影就是少一維的正則區域 D_k^{n-1}, $k=0,1,\ldots,n-1$ [4, 引理 2.5]。因此, n 維空間上, 直線 $g-te$ 與 n 片 S_k^n 有 n 個交點, 這些點的投影必然分散於直線的投影 (也是直線) 與 S_k^{n-1} 的 $n-1$ 個交點之間。對應於固有值就有下面的關係

$$\lambda_1<\mu_1<\lambda_2<\mu_2<\cdots<\lambda_{n-1}<\mu_{n-1}<\lambda_n,$$

此即爲三對角線矩陣的 Cauchy 交錯定理。

一般的三對角線矩陣 $T(g)$, 其固有值無法由 $A(g)$ 的固有值求出。例如 $\begin{bmatrix} g_1 & -1 \\ 1 & g_2 \end{bmatrix}$,

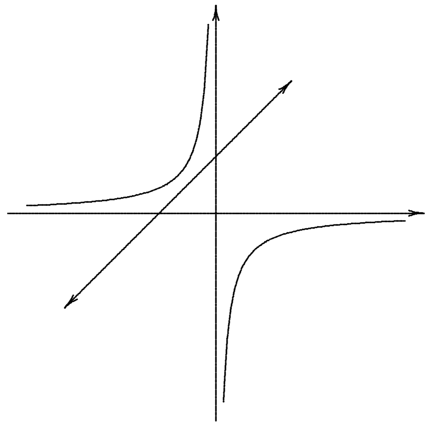

圖 13

其奇異曲線也是雙曲線如圖 13, 但有些與 (1,1) 平行的直線與此雙曲線無交點, 此時就產生複數的固有值, 因此此矩陣固有值與二維的 $A(g)$ 有很大的差異。雖然如此, 我們還是可證明, 當 $f_1,\ldots,f_{n-1},h_1,\ldots h_{n-1}$ 均爲正時, $T(g)$ 與 $A(g)$ 的奇異曲面與正則區域均極爲類似, 因此前面提到的固有值有趣的性質也都成立。這項工作以及更深入的研究, 正在中山大學進行中。

八. 數值應用

上述這套幾何觀在差分方程、固有值的上下界、或者廣義固有值問題都有很多應用, 見 [1§3, 4§8], 底下我們舉出兩個在數值計算上的應用。

我們在解線性方程組時, 最常用的方法當然是高斯消去法。高斯消去法遇到支點爲零時, 就要做列交換, 那麼何種矩陣做高斯消去法不必列交換呢? 其充要條件是這個 $n\times n$

矩陣 (w_{ij}) 的所有主子矩陣

$$\begin{bmatrix} w_{11} & \cdots & w_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ w_{k1} & \cdots & w_{kk} \end{bmatrix}, \ k=1,2,\ldots,n-1$$

均可逆, 因此只要檢查這些子矩陣的行列式是否爲0就可 [5]。

對矩陣 $A(g)$ 而言, 其 $k\times k$ 主子矩陣的行列式即爲 A_k, 因此當對角線 g 滿足 (5) 式時, 根據 (6) 式這些 $A_1, A_2, \ldots A_{n-1}$ 均不爲0, 故對 $A(g)$ 做高斯消去法就不需列交換。利用伸縮法可將它推廣到一般的矩陣 $T(g)$, 設 $c_1, \ldots c_{n-1}$ 均爲正數, 若 g 滿足

$$\begin{cases} |g_1| \geq c_1 \\ |g_k| \geq \frac{|f_{k-1}h_{k-1}|}{c_{k-1}} + c_k, \quad k=2,3,\ldots,n-1 \\ |g_n| \geq \frac{|f_{n-1}h_{n-1}|}{c_{n-1}}, \end{cases} \tag{14}$$

則 $T(g)$ 做高斯消去法不用列交換。

若 $h_1, \ldots, h_{n-1}$ 均不爲0, 選取

$$c_k = |h_k|, \quad k=1,2,\ldots,n-1$$

則 (14) 式的條件變成

$$\begin{cases} |g_1| \geq |h_1| \\ |g_k| \geq |f_{k-1}| + |h_k|, \quad k=2,3,\ldots,n-1 \\ |g_n| \geq |f_{n-1}|。 \end{cases}$$

此時的 $T(g)$ 是一種很特別的矩陣, 在每一列中, 對角線上元素的絕定值大於或等於同列其他元素的絕對值和。事實上一個一般的 $n\times n$ 矩陣, 若每一列上對角線元素的絕對值嚴格大於同列其他元素的絕對值和, 則此矩陣做高斯消去法一定不需列交換 [5]。因此在三對角線矩陣, 我們可得到比此更一般的定理。

回憶正則凸域 G 是所有 (5) 式所定義出來的集合之聯集, 因此若 $g\in G$, 則 $A(g)$ 的高斯消去法不需列交換。觀察到圖5的點狀部份是包含在二維凸域 G 內, 事實上 (7) 式或 (8) 式所決定的區域包含於 G 內, 故只要 g 滿足 (7) 或 (8), 則 $A(g)$ 的高斯消去法不需列交換。同理對矩陣 $T(g)$, 我們也可得出類似 (7)、(8) 的區域, 區內所對應的矩陣 $T(g)$, 高斯消去法不用列交換。

對 $A(g)$ 而言, 正則卦限上的點, 其分量的符號正負相間。因其主子矩陣的行列式滿足 (9) 式, 故 A_k 均不爲0, 所以正則卦限所對應的矩陣 $A(g)$, 高斯消去法均不需列交換。推廣到一般的矩陣, 我們有下列條件 [2, 定理4]

$$f_k g_k h_k g_{k+1} < 0, \quad k=1,2,\ldots,n-1,$$

則 $T(g)$ 做高斯消去法不必列交換。

另外這套幾何也提供了一個求對稱矩陣第 k 個固有值的方法。我們知道, 任何一個對稱矩陣, 都可經由正交相似變換轉化成對稱的三對角線矩陣 [5], 因此新舊矩陣的所有固有值都是一樣的, 只要能求出三對角線矩陣第 k 個固有值, 此即原矩陣的第 k 固有值。

假設 $T(g)$ 爲對稱的三對角線矩陣, 其中 $f_k = h_k > 0$, $k = 1,2,\ldots,n-1$。此時奇異曲面與正則區域沿著 $(-1,-1,\ldots,-1)$ 方向, 按著次序 $D_0^n, S_0^n, D_1^n, \ldots, S_{n-1}^n, D_n^n$ 排列著。回憶這些曲面與區域的定義, 若 $g\in D_i^n \cup S_i^n$, 則其伴隨矩陣 $c(g)$ 在 $(0,n)$ 間的振動次數 $V(c(g);(0,n)) = i$。欲求第 k 固有值 λ_k, 即求直線 $g-te$ 與第 k 片奇異曲面 S_{k-1}^n

的交點, 此點對應 $V(c(g-\lambda_k e);(0,n)) = k-1$。任意給定一個起始猜測 t_0,

若 $V(c(g-t_0e);(0,n)) > k-1$, 則 $t_0 > \lambda_k$;
若 $V(c(g-t_0e);(0,n)) < k-1$, 則 $t_0 < \lambda_k$;
若 $V(c(g-t_0e);(0,n)) = k-1$, 但 $A_n \neq 0$, 則 $t_0 < \lambda_k$。

依此就可得出一個更好的 λ_k 估計值 t_1, 用同樣準則判別 t_1 與 λ_k 的關係, 而找到更接近的 t_2 等。

這樣, 我們即可設計出計算第 k 個固有值的各種算法。這個原理其實就是用 Sturm 數列來估計大於某實數的固有值個數, 從幾何結構上來看, 是很淸楚的。至於對稱的三對角線矩陣, 若次對角線上有分量爲零, 只要稍微修改算法, 也可求出其第 k 個固有值。

九. 結語

將矩陣作爲一種資料的表示結構, 先天上是一種代數形式, 提供了我們機械化的計算或證明工具。但是透過幾何的看法, 我們觀察到這些形式背後所隱藏的一些事實, 從而使我們對三對角線矩陣的本質有更深的認識, 而且可作出一些重要的應用。

本文中所談到的都是原創性的結果, 但用到的數學工具卻不多, 說明了要洞悉一些看似深奧的學問, 並不一定需要高深的數學工具, 或是抽象的數學語言。重要的是善用我們的想像力與創造精神, 加上不折不撓的毅力, 必定能在數學這個領域, 開創出屬於自己的一片園地。

參考資料

1. S. S. Cheng and T. T. Lu, Convex regular domains of tridiagonal matrices, Linear Algebra and its Applications, 79 (1986), pp.103-125.
2. S. S. Cheng, H. J. Li, T. T. Lu and S. H. Wu, Regular and singular orthants of tridiagonal matrices, Linear Algebra and its Applications, 94(1987), pp.181-191.
3. S. S. Cheng, T. T. Lu and S. H. Wu, Regular starlike domains of tridiagonal matrices, Linear Algebra and its Applications, 129(1990), pp.29-54.
4. S. S. Cheng and J. Y. Lo, Singular surfaces and regular domains of tridiagonal matrices, Proceeding of National Research Council of R.O.C. (Part A), 17(1993), pp.42-55.
5. S. S. Cheng, A discrete analogue of the inequality of Lyapunov, Hokkaido Mathematical Journal, 12 (1983), pp. 105-112.
6. R. L. Burden and J. D. Faires, Numerical Analysis, 5-th ed., Prindle, Weber & Schmidt, Boston, 1993.
7. V. Klee, R. Ladner and R. Manber, Signsolvability revisited, Linear Algebra and its Applications, 59(1969), pp.136-157.

—本文作者呂宗澤任教於中山大學應學系,
鄭穗生任教於淸華大學應數系—