

作者	生姜 DrGinger
脚本	生姜 DrGinger
视频	崔崔 CuiCui
开源学习资源	https://github.com/Visualize-ML
平台	https://www.youtube.com/@DrGinger_Jiang https://space.bilibili.com/3546865719052873 https://space.bilibili.com/513194466

05

Inverse of a Matrix

逆矩阵

方阵行列式不为 0，几何操作的逆变换

5.1 逆矩阵

**本节你将掌握的核心技能：**

- ▶ 可逆矩阵：方阵且行列式非零。
- ▶ 矩阵是线性变换，逆矩阵是该变换的“逆操作”，试图还原原始几何结构，行列式反映面积变化。
- ▶ 方阵不可逆：几何变换不导致维度坍缩或信息丢失。
- ▶ 缩放矩阵的逆通过反比例缩放恢复原始位置。
- ▶ 旋转的逆操作是相反角度的旋转，且旋转矩阵属于正交矩阵。
- ▶ 剪切变换的逆通过抵消倾斜分量恢复图形。
- ▶ 镜像的逆是自身。
- ▶ 正交矩阵包括旋转、镜像、置换、单位矩阵等。

如何手算逆矩阵，在作者看来，是逆矩阵最无聊的部分。逆矩阵的计算公式本身很难解释矩阵逆的本质，以及它在数学和现实世界中的作用。

要更直观地理解矩阵的逆，我们还是需要祭出几何视角这个利器！

本书前文提过，矩阵乘法本质上是一个线性变换，它可以完成旋转、缩放、剪切、投影等等操作。

矩阵的逆，则试图让这些变换逆向执行，并恢复原始的几何结构。

例如，旋转矩阵的逆是沿相反方向的旋转，缩放矩阵的逆是相反比例的缩放。而如果某种变换导致信息丢失，则变换是不可逆的。

换句话说，矩阵是否可逆，取决于它是否保留了空间的完整信息。此外，矩阵的逆、行列式、秩、线性相关等数学概念密切相关。

本节我们将从几何角度出发，探讨矩阵逆的意义，并分析不同类型的线性变换是如何影响矩阵的可逆性的。

什么是逆矩阵

首先，矩阵 A 存在逆的前提是 A 必须是方阵，即行数、列数相等。

⚠ 注意，并不是所有的方阵都存在逆矩阵。

对于一个 $n \times n$ 方阵 A ，如果存在一个矩阵 A^{-1} 使得：

$$A @ A^{-1} = A^{-1} @ A = I \quad (1)$$

其中 I 是 $n \times n$ 单位矩阵；我们称方阵 A 为**可逆矩阵** (invertible matrix)，或**非奇异矩阵** (non-singular matrix)。

几何视角

本书前文提到，对于 $n \times n$ 方阵 A ， $Ax = y$ 可以看作是某种几何变换，比如缩放、旋转、剪切、镜像，以及它们的顺序组合等等。

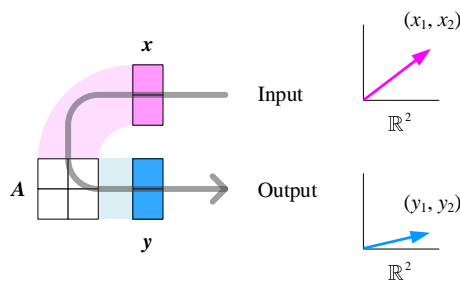
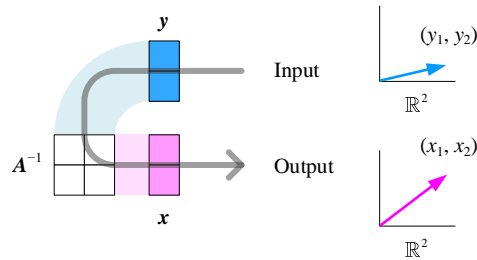


图 1. 列向量 x 在 2×2 方阵 A 映射下结果为列向量 y

如图 2 所示， $A^{-1}y = x$ 则可以看作这些几何变换的逆变换。当然，这个过程存在的前提是矩阵 A 可逆；否则，矩阵 A 的几何变换便无法逆向操作。

图 2. 列向量 y 在 2×2 方阵 A^{-1} 映射下结果为列向量 x

逆矩阵的存在条件

以 2×2 矩阵为例

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \quad (2)$$

其逆矩阵为：

$$A^{-1} = \frac{1}{ad-bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix} \quad (3)$$

只要 $ad-bc \neq 0$ ，就能求逆。

大家已经发现， $ad-bc$ 叫就是 A 的行列式 $\det(A)$ ！

本书前文提过，行列式代表面积、体积；如果矩阵 A 的行列式为 0，这说明经过矩阵 A 线性变换后，几何图形发生“坍塌”！这使得某些信息丢失，因此矩阵是不可逆。

如果 $\det(A) \neq 0$ ，变换后，几何形体不会将为，信息没有丢失，因此变换是可逆的。

代码 1 自定义函数计算 2×2 矩阵的逆。下面聊聊其中关键语句。

a 定义了一个名为 `inverse_2x2_A` 的函数。函数的作用是计算一个 2×2 矩阵的逆矩阵，并且会检查矩阵是否可逆。如果矩阵的行列式为 0，则函数会打印提示信息并返回 `None`，表示矩阵不可逆。`def` 是关键字，表示要定义一个新函数，`inverse_2x2_A` 是函数的名称，`A` 是函数的输入参数，表示一个 2×2 矩阵。函数的输入 `A` 需要是一个 2×2 的嵌套列表或者 `numpy` 数组。


b 先从矩阵 A 的第一行提取两个元素 `a` 和 `b`；`A[0]` 代表矩阵 A 的第一行，而 `a, b = A[0]` 表示将这一行的两个值分别赋值给 `a` 和 `b`。再从 A 的第二行提取两个元素 `c` 和 `d`，它的作用和上面一行类似，但这里的 `A[1]` 代表矩阵 A 的第二行。

c 计算 A 的行列式，行列式是一个用于判断矩阵是否可逆的值。如果它等于 0，那么矩阵就不可逆。

d 这一行是一个 `if` 条件判断，意思是如果 `det` 的值等于 0，那么执行下面的代码块。`return None` 这一行是 `if` 语句块的一部分，如果 `det == 0`，函数会直接返回 `None`，表示函数到此结束，不再继续计算。

e 这一行创建了一个 2×2 的 `numpy` 数组，其中的元素是 `d, -b, -c, a`，然后将整个矩阵除以 `det`，得到 A 的逆矩阵，并将其存储在变量 `inv_A` 中。

f 创建矩阵，并调用自定义函数计算逆矩阵。

代码 1. 2×2 矩阵的逆 |  LA_Ch05_01_01.ipynb

```

## 初始化
import numpy as np

## 自定义函数

def inverse_2x2_A(A):
    """
    A = [[a, b],
          [c, d]]
    """
    # 提取矩阵元素
    a, b = A[0]
    c, d = A[1]

    # 计算行列式 det(A) = ad - bc
    det = a * d - b * c

    # 判断行列式是否为零
    if det == 0:
        print("矩阵不可逆，行列式为零")
        return None

    # 计算逆矩阵
    inv_A = np.array([[d, -b], [-c, a]]) / det
    return inv_A

## 定义矩阵
A = [[1, 2],
      [3, 4]]
A = np.array(A)

## 计算逆矩阵
inverse_2x2_A(A)

```



LA_05_01_02.ipynb 展示用 `numpy.linalg.inv()` 计算矩阵的逆，LA_05_01_03.ipynb 介绍用 SymPy 符号运算计算矩阵的逆，请大家自行学习。

下面，让我们看几个逆矩阵的具体例子。

缩放、逆缩放

缩放矩阵的逆矩阵是相反比例的缩放。

给定特定的缩放矩阵 S 为

$$S = \begin{bmatrix} 3/2 & 0 \\ 0 & 2/3 \end{bmatrix} \quad (4)$$

方阵 S 的作用是对二维空间中的向量分别沿 x_1 轴、 x_2 轴进行缩放。

具体来说，方阵 S 的会将 x_1 方向的坐标放大 1.5 倍，即 $3/2$ ；同时将 x_2 方向的坐标 缩小到原来的 $2/3$ 。

这意味着，所有的点在水平方向上被拉伸，而在垂直方向上被压缩，从而导致整个图形变形。

但是，计算方阵 S 的行列式，我们会发现 $\det(S) = 1$ ；这意味着这个缩放矩阵没有导致面积变化。

方阵 S 的逆

$$S^{-1} = \begin{bmatrix} 2/3 & 0 \\ 0 & 3/2 \end{bmatrix} \quad (5)$$

方阵 S 的逆矩阵，其作用正好相反。

逆矩阵 S^{-1} 的每个缩放因子是原矩阵缩放因子的倒数，因此它会将 x_1 方向的坐标缩小到 $2/3$ ，而将 x_2 方向的坐标放大 1.5 倍，从而完全抵消原矩阵的变换，使得任何经过矩阵变换的点都能被还原回原始位置。

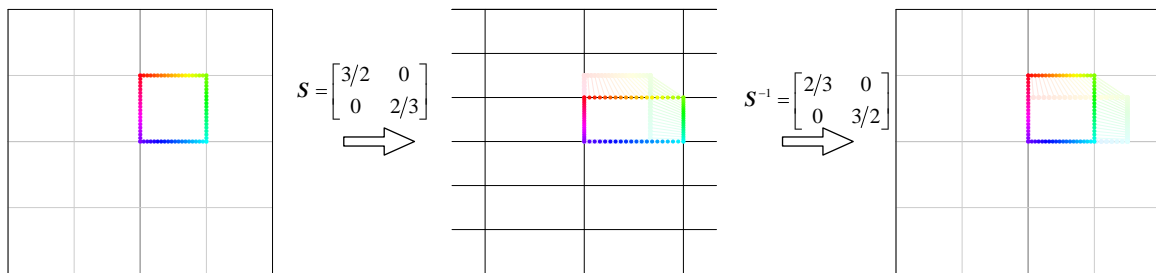


图 3. 平面上的缩放、缩放的逆操作， 2×2 矩阵

计算 S 和 S^{-1} 乘法

$$S @ S^{-1} = \begin{bmatrix} 3/2 & 0 \\ 0 & 2/3 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 2/3 & 0 \\ 0 & 3/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (6)$$

两者相乘为单位阵，单位阵意味着没有变化。

反过来，计算 S^{-1} 和 S 乘法

$$S^{-1} @ S = \begin{bmatrix} 2/3 & 0 \\ 0 & 3/2 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 3/2 & 0 \\ 0 & 2/3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (7)$$

方阵的逆矩阵也具有相同的结构，只不过主对角线上每个非零元素都是原矩阵对应元素的倒数。

因此，只要对角线上的元素不为零，任何对角方阵都是可逆的。

旋转、逆旋转

旋转矩阵的逆是沿相反方向的旋转。

给定旋转矩阵 R

$$R = \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix} \quad (8)$$

方阵 R 的作用是将二维空间中的所有向量绕原点逆时针旋转 120° 。也就是说，原点（零向量）位置不变，零向量 0 旋转后还是 0 。

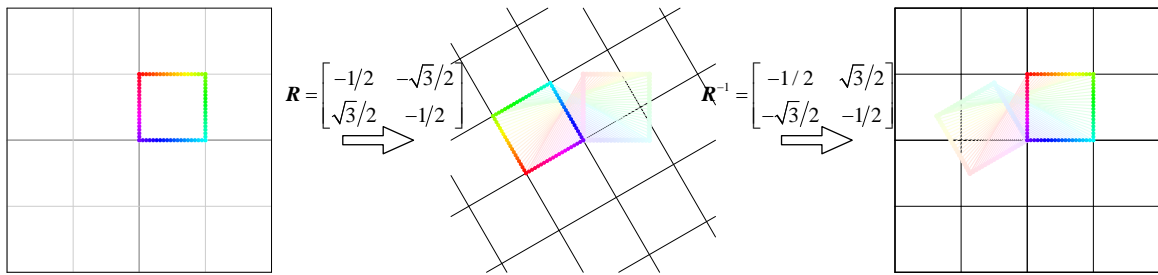


图 4. 平面上的旋转、旋转的逆操作， 2×2 矩阵

计算方阵 R 的行列式

$$\det(R) = (-1/2) \times (-1/2) - (-\sqrt{3}/2) \times (\sqrt{3}/2) = 1 \quad (9)$$

行列式的为 1，意味着该变换不会改变面积。

方阵 R 的逆矩阵 R^{-1} 具有相同的结构，但角度相反

$$R^{-1} = \begin{bmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix} \quad (10)$$

由于方阵 R 代表的是逆时针旋转 120° ，那么其逆矩阵 R^{-1} 就应该是顺时针旋转 120° 。

计算 R 和 R^{-1} 乘法

$$R @ R^{-1} = \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (11)$$

如果一个点被方阵 R 逆时针旋转 120° ，再乘以 R^{-1} 顺时针旋转 120° ，它会回到原来的位置。

请大家计算 R^{-1} 和 R 矩阵乘法。

此外，对于旋转矩阵，如下这个关系值得大家注意

$$R^T = R^{-1} \quad (12)$$

也就是说，

$$R^T R = I, \quad R R^T = I \quad (13)$$

满足以上关系的方阵叫做正交矩阵 (orthogonal matrix)。



本书后续会展开讲解正交矩阵。

剪切、逆剪切

剪切矩阵的作用是沿某个方向倾斜坐标系，使得一个向量的某个分量被另一分量拉伸或压缩，而不会改变该向量的长度。剪切矩阵的逆通过逆剪切恢复原始形状。

给定剪切矩阵：

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (14)$$

方阵 \mathbf{K} 的作用是沿 x_1 方向对二维空间中的所有向量施加剪切变换。

具体来说：向量在 x_2 方向上分量保持不变。

向量在 x_1 方向上的分量会增加 x_2 坐标的 0.5 倍。点 (1, 1) 变换后变为 (1.5, 1)。点 (2, 3) 变换后变为 (3.5, 3)。注意，原点 (0,0) 位置不变，因为它剪切后仍然是自身。

计算方阵 \mathbf{K} 的行列式

$$\det(\mathbf{K}) = (1 \times 1) - (0.5 \times 0) = 1 \quad (15)$$

行列式的值为 1，这意味着该变换不会改变面积。它只是改变形状，但不会拉伸或压缩空间的整体大小。

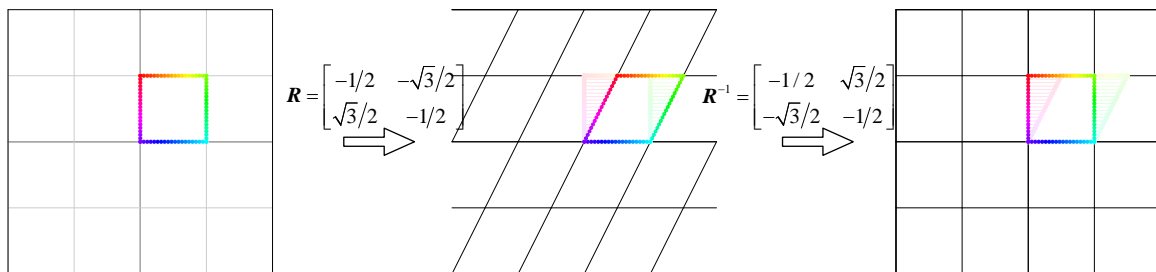


图 5. 平面上的剪切、剪切的逆操作， 2×2 矩阵

剪切变换是可逆的，方阵 \mathbf{K} 的逆矩阵 \mathbf{K}^{-1} 也具有相似的结构。

由于剪切操作只是在 x_1 方向上增加了 x_2 坐标的 0.5 倍，那么逆变换应该是减去 x_2 坐标的 0.5 倍，从而抵消剪切效应。因此，剪切矩阵的逆矩阵为：

$$\mathbf{K}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -0.5 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (16)$$

这个逆矩阵的作用是： x_1 坐标减少 x_2 坐标的 0.5 倍，抵消之前的剪切变换； x_2 坐标保持不变。

计算 \mathbf{K} 和 \mathbf{K}^{-1} 乘法

$$\mathbf{K} @ \mathbf{K}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0.5 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} 1 & -0.5 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (17)$$

值得注意的是， \mathbf{K} 和 \mathbf{K}^{-1} 都是上三角矩阵。上三角矩阵的逆矩阵仍然是一个上三角矩阵。

镜像、逆镜像

镜像矩阵的作用是关于某条轴进行对称反射。

给定镜像矩阵：

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (18)$$

方阵 \mathbf{M} 作用是将二维空间中的所有向量沿 x_2 轴 (纵轴) 进行镜像反射。

具体来说： x_1 坐标变号，方阵 \mathbf{M} 会将所有点的 x_1 方向坐标取相反数，即水平翻转。

x_2 坐标保持不变，方阵 \mathbf{M} 不会改变 x_2 方向的坐标。

比如，点 $(1, 1)$ 经过变换后变为 $(-1, 1)$ ；点 $(-1, 0)$ 经过变换后变为 $(1, 0)$ 。

原点 $(0,0)$ 位置不变，因为它对称后仍然是自身。也就是说，零向量 $\mathbf{0}$ 经过镜像后还是零向量 $\mathbf{0}$ 。

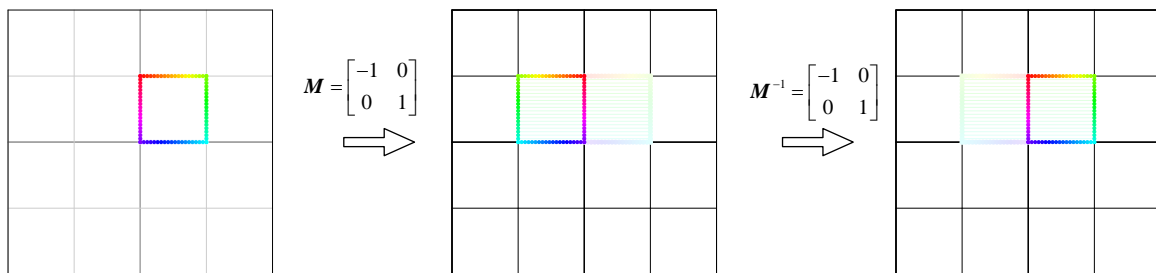


图 6. 平面上的镜像、镜像的逆操作， 2×2 矩阵

计算方阵 \mathbf{M} 的行列式：

$$\det(\mathbf{M}) = (-1) \cdot (1) - (0) \cdot (0) = -1 \quad (19)$$

行列式的绝对值是 1，这意味着该变换不会改变面积；但由于行列式为负，意味着它改变了方向，即翻转了空间的定向。

比如，逆时针来看，变换前 \mathbf{e}_1 领先 \mathbf{e}_2 ；经过 \mathbf{M} 变换， \mathbf{e}_2 领先 \mathbf{e}_1 。

镜像变换是可逆的，方阵 \mathbf{M} 的逆矩阵 \mathbf{M}^{-1} 也是一个镜像矩阵

$$\mathbf{M}^{-1} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (20)$$

由于镜像操作是对称的，即再进行一次相同的镜像操作，就会恢复原始位置。

计算 \mathbf{M} 和 \mathbf{M}^{-1} 乘法

$$\mathbf{M} @ \mathbf{M}^{-1} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} @ \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (21)$$

也就是说，镜像矩阵的逆矩阵就是它自己！

即

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}^{-1} \quad (22)$$

这符合直觉——如果一个点被镜像变换翻转了一次，再进行一次相同的镜像变换，它就会回到原来的位置。

此外，镜像矩阵是正交矩阵，因为，

$$\mathbf{M}^T \mathbf{M} = \mathbf{I}, \quad \mathbf{M} \mathbf{M}^T = \mathbf{I} \quad (23)$$

即它的转置矩阵等于它的逆矩阵。



请大家用 DeepSeek/ChatGPT 等工具完成本节如下习题。

Q1. 请判断如下矩阵是否可逆。

▶ $\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$

Q2. 请计算如下缩放矩阵的逆，并描述矩阵的几何操作。

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$

Q3. 请计算如下剪切矩阵的逆，并描述矩阵的几何操作。

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$

Q4. 请计算如下(绕原点)旋转矩阵的逆, 并描述矩阵的几何操作。

▶ $\begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 & -1/2 \\ 1/2 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

Q5. 请计算如下镜像矩阵的逆, 并描述矩阵的几何操作。

▶ $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

▶ $\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$