

數學建模講義

補充課 9：建模所需的線性代數基礎

Kenneth Sok Kin Cheng

修訂日期：2026 年 8 月 20 日

學習目標

完成這節兩小時的補充課後，學生應能：

- 利用向量表示數據、決策與狀態；
- 計算並解釋內積、範數、線性組合及張成空間；
- 把矩陣理解為表格、線性變換或方程組；
- 運用高斯消元法求解小型方程組；
- 解釋秩、自由變量及齊次方程組的解結構；
- 把線性代數連繫至最小二乘法、馬爾可夫鏈、博弈論及量綱分析；
- 解釋特徵向量與平穩分佈在動態建模中的重要性。

1 線性代數為何屬於建模的一部分

微積分描述一個量如何改變；線性代數則描述多個量如何組合。這在數學建模中無可避免：送貨路線包含多段行車時間，回歸模型包含多個殘差，馬爾可夫鏈包含多個轉移概率，而量綱分析問題亦包含多個物理指數。

引入活動：向量在哪裏？

為下列每個建模情境找出一個自然的向量。

1. 機械人的路線途經五幢建築物，並記錄五段行程時間。
2. 學校飯堂記錄六個十分鐘時段內的到達人數。
3. 一間公司連續多週追蹤三個品牌的市場佔有率。
4. 回歸模型比較十個數據點的預測值與觀察值。

目的並非令符號變得更繁重，而是使多變量資訊易於閱讀與計算。

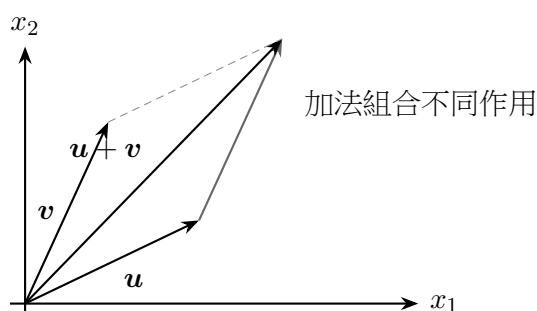


圖 1: 向量加法可為位移、資源使用量，或各組成部分的累積變化等合成作用建模。

2 作為數據組合的向量

向量、內積與範數

$\mathbb{R}^n$ 中的向量是一列有序數值：

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}.$$

對 $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$,

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_1 v_1 + \cdots + u_n v_n, \quad \|\mathbf{v}\| = \sqrt{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}.$$

內積衡量方向的一致程度。若 $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = 0$ ，兩個向量便互相正交。

例題 1：資源使用向量

一部送貨機械人會使用電量、時間及職員注意力。假設某條路線的

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 18 \\ 42 \\ 3 \end{pmatrix}$$

表示 18 個電量單位、42 分鐘及 3 次職員介入。成本向量

$$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} 0.4 \\ 1.2 \\ 8 \end{pmatrix}$$

為各個分量賦予權重。總加權成本為

$$\mathbf{c} \cdot \mathbf{x} = 0.4(18) + 1.2(42) + 8(3) = 81.6.$$

這與第 6 講線性規劃目標 $\mathbf{c} \cdot \mathbf{x}$ 的概念相同。

線性組合與張成空間

$\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k$ 的線性組合為

$$c_1 \mathbf{v}_1 + \cdots + c_k \mathbf{v}_k.$$

所有這類組合所成的集合稱為張成空間，記作

$$\text{span}(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k).$$

若只有把所有係數設為零才能得到 $\mathbf{0}$ ，這些向量便線性獨立。

例題 2：偵測線性相依

令

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

由於

$$\mathbf{v}_1 + 2\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} + 2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 2 \end{pmatrix} = \mathbf{v}_3,$$

三個向量線性相依。以建模語言來說，第三項特徵沒有帶來新方向；它已由首兩項特徵解釋。

檢查點：檢查點

在 $\mathbb{R}^3$ 中，四個向量能否線性獨立？不作計算而加以解釋。

3 作為結構模型的矩陣

矩陣乘法

一個 $m \times n$ 矩陣 $\mathbf{A}$ 透過

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}$$

把 $\mathbb{R}^n$ 中的向量映射到 $\mathbb{R}^m$ 中。若 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 且 $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ ，則

$$(\mathbf{AB})_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik}b_{kj}.$$

乘積 $\mathbf{AB}$ 表示變換的合成：先進行 $\mathbf{B}$ ，再進行 $\mathbf{A}$ 。

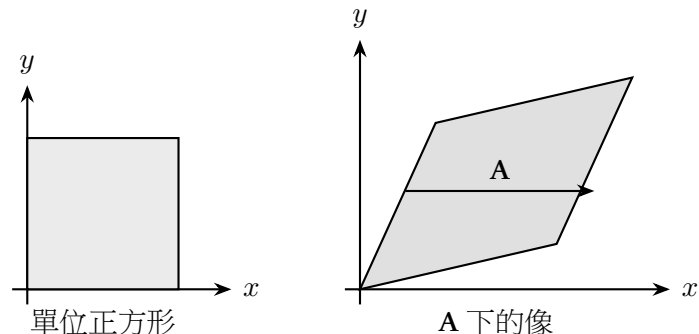


圖 2: 矩陣可以視為變換。 $\mathbf{A}$ 的各列向量顯示單位基向量會被移到何處。

例題 3：以矩陣乘積表示轉移

假設一個二狀態天氣模型使用轉移矩陣

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0.8 & 0.2 \\ 0.4 & 0.6 \end{pmatrix},$$

其中各行表示今日狀態，各列表示明日狀態：晴天 S 或雨天 R 。若今日肯定是晴天，行向量為

$$\mathbf{x}_0^\top = (1, 0).$$

一日後，

$$\mathbf{x}_1^\top = \mathbf{x}_0^\top \mathbf{P} = (0.8, 0.2).$$

兩日後，

$$\mathbf{x}_2^\top = \mathbf{x}_0^\top \mathbf{P}^2 = (0.72, 0.28).$$

矩陣的冪描述反覆轉移，是馬爾可夫鏈建模的核心。

模型檢視：模型批判：矩陣假設了甚麼？

轉移矩陣假設下一個狀態以固定方式取決於目前狀態。對天氣、顧客移動或疾病進程，應考慮：

- 轉移概率會否隨時間保持穩定？
- 明日狀態只取決於今日，還是亦取決於上一週？
- 所有相關狀態是否均已納入？

矩陣雖然精簡，但精簡的符號亦可能隱藏很強的假設。

4 利用高斯消元法求解方程組

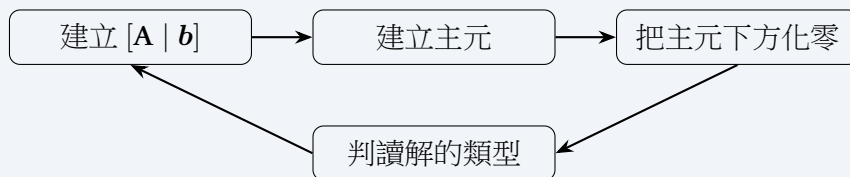
線性方程組

n 個未知數的 m 條線性方程可寫成

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}.$$

高斯消元法對增廣矩陣 $[\mathbf{A} \mid \mathbf{b}]$ 進行行運算，從而顯示主元、自由變量及方程組是否相容。

高斯消元流程



例題 4：一個 3×3 方程組

求解

$$\begin{cases} x + 2y + z = 6, \\ 2x + 3y - z = 4, \\ -x + y + 4z = 9. \end{cases}$$

增廣矩陣可作如下化簡：

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 6 \\ 2 & 3 & -1 & 4 \\ -1 & 1 & 4 & 9 \end{array} \right] \xrightarrow{R_2 - 2R_1, R_3 + R_1} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 6 \\ 0 & -1 & -3 & -8 \\ 0 & 3 & 5 & 15 \end{array} \right]$$

$$\xrightarrow{R_3 + 3R_2} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 1 & 6 \\ 0 & -1 & -3 & -8 \\ 0 & 0 & -4 & -9 \end{array} \right].$$

回代得 $z = 9/4$ 、 $y = 5/4$ 及 $x = 5/4$ 。因此

$$(x, y, z) = \left(\frac{5}{4}, \frac{5}{4}, \frac{9}{4} \right).$$

秩與解的類型

矩陣的秩是行階梯形中主元的數目。方程組有：

- 無解，若行化簡得到 $[0 \ 0 \ \cdots \ 0 \mid c]$ 且 $c \neq 0$ ；
- 唯一解，若每一個變量列均有主元；
- 無限多個解，若方程組相容但具有自由變量。

對 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ，

$$\dim(\text{零空間}) = n - \text{rank}(\mathbf{A}).$$

例題 5：零空間與無量綱乘積

對單擺模型，假設週期 T 可能取決於長度 L 、質量 m 及重力加速度 g 。無量綱乘積具有下列形式：

$$T^a L^b m^c g^d.$$

在 M, L, T 各行中使用量綱 $[T] = (0, 0, 1)$ 、 $[L] = (0, 1, 0)$ 、 $[m] = (1, 0, 0)$ 及 $[g] = (0, 1, -2)$ ，所得量綱方程為

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix} = \mathbf{0}.$$

方程為 $c = 0$ 、 $b + d = 0$ 及 $a - 2d = 0$ 。取 $d = 1$ ，得

$$(a, b, c, d) = (2, -1, 0, 1),$$

所以其中一個無量綱乘積是

$$\Pi = \frac{T^2 g}{L}.$$

這正是白金漢 Π 定理背後的零空間計算。

5 以線性代數表達最小二乘法

殘差向量與正規方程

對數據 (x_i, y_i) 及直線 $y = a + bx$ ，定義

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_m \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}.$$

預測值為 $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ ，殘差則為

$$\mathbf{r} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}.$$

最小二乘法選取 $\boldsymbol{\beta}$ ，使 $\|\mathbf{r}\|^2$ 最小。正規方程為

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{X}^\top \mathbf{y}.$$

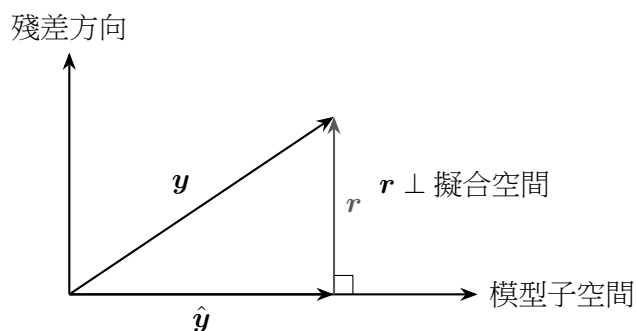


圖 3: 最小二乘法選取擬合向量 $\hat{\mathbf{y}}$ ，使殘差向量與模型子空間正交，從而得到 $\mathbf{X}^\top \mathbf{r} = \mathbf{0}$ 。

例題 6：擬合直線

對以下數據擬合 $y = a + bx$ ：

$$(0, 1), (1, 2), (2, 2), (3, 4).$$

則

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

計算

$$\mathbf{X}^\top \mathbf{X} = \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 14 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}^\top \mathbf{y} = \begin{pmatrix} 9 \\ 18 \end{pmatrix}.$$

求解

$$\begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 14 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 \\ 18 \end{pmatrix}.$$

解為 $a = 0.9$ 、 $b = 0.9$ 。擬合模型為

$$\hat{y} = 0.9 + 0.9x.$$

模型檢視：模型批判：矩陣計算並非完整模型

正規方程在平方誤差準則下計算最佳直線。建模報告仍須討論殘差形態、單位、離群值、關係是否應為線性，以及預測範圍是否適當。

6 特徵值、平穩狀態與長期行為

特徵值與特徵向量

對方陣 $\mathbf{A}$ ，若非零向量 $\mathbf{v}$ 滿足

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v},$$

則 $\mathbf{v}$ 是對應特徵值 λ 的特徵向量。在變換下， $\mathbf{v}$ 的方向保持不變，只有大小改變。

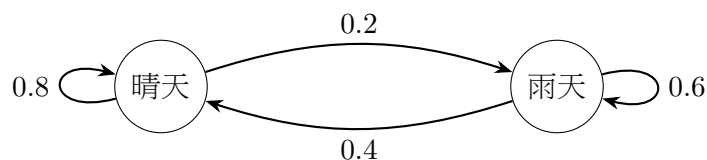


圖 4: 一個二狀態馬爾可夫鏈。平穩分佈是轉移矩陣對應特徵值 1 的左特徵向量。

例題 7：平穩分佈

對

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 0.8 & 0.2 \\ 0.4 & 0.6 \end{pmatrix},$$

平穩分佈 $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \pi_2)$ 滿足

$$\boldsymbol{\pi}\mathbf{P} = \boldsymbol{\pi}, \quad \pi_1 + \pi_2 = 1.$$

第一條方程給出

$$0.8\pi_1 + 0.4\pi_2 = \pi_1 \quad \Rightarrow \quad 0.4\pi_2 = 0.2\pi_1 \quad \Rightarrow \quad \pi_1 = 2\pi_2.$$

結合 $\pi_1 + \pi_2 = 1$ ，可得

$$\boldsymbol{\pi} = \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3} \right).$$

在此模型中，長期而言約三分之二的日子是晴天。

例題 8：種群矩陣

令 J_n 與 A_n 分別表示第 n 年的幼年及成年種群數量。假設每個成年個體產生 0.6 個幼年個體，30% 的幼年個體成熟，而 80% 的成年個體存活。則

$$\begin{pmatrix} J_{n+1} \\ A_{n+1} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0.6 \\ 0.3 & 0.8 \end{pmatrix}}_{\mathbf{M}} \begin{pmatrix} J_n \\ A_n \end{pmatrix}.$$

$\mathbf{M}$ 的主導特徵值描述長期增長因子。求解

$$\det(\mathbf{M} - \lambda\mathbf{I}) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & 0.6 \\ 0.3 & 0.8 - \lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 0.8\lambda - 0.18 = 0$$

得 $\lambda \approx 0.983$ 。由於主導增長因子略低於 1，模型預測種群長期緩慢下降。

7 分層建模工作坊

建模工作坊

按準備程度選擇一條路線。

核心路線。利用消元法求解一個 3×3 線性方程組，並解釋解的類型。

挑戰路線。利用正規方程對五個數據點擬合直線，並計算殘差向量。

延伸路線。求一個三狀態轉移矩陣的平穩分佈，並解釋長期狀態比例。

每組應在計算前，以一小段文字解釋矩陣所代表的事物。

競賽式表達

建模報告可以簡潔地寫成：

我們以向量表示系統狀態，並利用矩陣編碼轉移。反覆行為透過矩陣乘法計算；長期分佈則連同 $\sum_i \pi_i = 1$ ，求解平穩方程 $\pi P = \pi$ 而得。此解釋假設轉移概率保持穩定，而且目前狀態已包含足夠資訊以預測下一步。

檢查點：離堂短答

以三句話回答：

1. 高斯消元法中的主元告訴你甚麼？
2. 殘差向量為何對最小二乘法有用？
3. 平穩分佈在馬爾可夫鏈模型中有甚麼意義？

8 練習

練習 1：向量

1. 求 $(3, 4, 0)$ 方向上的一個單位向量。
2. 計算 $(1, 2, 3)$ 與 $(4, -1, 2)$ 的內積，再求兩者的夾角。
3. 判斷 $(1, 0, 2)$ 、 $(3, 1, 4)$ 與 $(2, 1, 0)$ 是否線性獨立。
4. 在送貨模型中， $\mathbf{x} = (8, 20, 2)$ 記錄距離、時間及延誤次數。若 $\mathbf{c} = (1.5, 0.8, 10)$ ，解釋 $\mathbf{c} \cdot \mathbf{x}$ 。

向量核查

單位向量為 $(3/5, 4/5, 0)$ 。第 2 題的內積為 8，故 $\cos \theta = 8/\sqrt{294}$ 且 $\theta \approx 62.19^\circ$ 。第 3 題中，以三個向量構成的行列式為 -2 ，故它們線性獨立。加權送貨成本在 $\mathbf{c}$ 所定義的成本尺度下為 48。

練習 2：矩陣與方程組

1. 對

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 1 & 2 \end{pmatrix},$$

計算 $\mathbf{AB}$ 與 $\mathbf{BA}$ 。

2. 利用高斯消元法求解：

$$\begin{cases} 2x + y - z = 3, \\ x - y + 2z = 1, \\ 3x + 2y + z = 10. \end{cases}$$

3. 解釋方程組

$$x + 2y + 3z = 1, \quad 2x + 4y + 6z = 3$$

為何無解。

4. 求以下方程組的所有解：

$$\begin{cases} x_1 + x_2 - x_3 + 2x_4 = 0, \\ 2x_1 - x_2 + x_3 + x_4 = 0. \end{cases}$$

矩陣與方程組核查

$$\mathbf{AB} = \begin{pmatrix} 7 & 4 \\ 19 & 8 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{BA} = \begin{pmatrix} 5 & 10 \\ 7 & 10 \end{pmatrix}.$$

第 2 題的解為 $(x, y, z) = (4/5, 3, 8/5)$ 。第 3 題中，第二條方程的左方是第一條的兩倍，但 $3 \neq 2(1)$ ，故方程組不相容。對第 4 題，令自由參數 $s, t \in \mathbb{R}$ ，則

$$(x_1, x_2, x_3, x_4) = s(0, 1, 1, 0) + t(-1, -1, 0, 1).$$

練習 3：建模連繫

1. 利用 $\mathbf{X}^T \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$ ，對 $(1, 2), (2, 3), (3, 5), (4, 4), (5, 6)$ 擬合 $y = a + bx$ 。

2. 對

$$P = \begin{pmatrix} 0.7 & 0.2 & 0.1 \\ 0.3 & 0.5 & 0.2 \\ 0.2 & 0.3 & 0.5 \end{pmatrix},$$

求平穩分佈。

3. 一個零和博弈的收益矩陣為

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

令列玩家無差異，求行玩家的混合策略。

4. 在量綱分析中，解釋無量綱獨立群的數目為何等於「變量數目減去量綱矩陣的秩」。

建模核查

擬合直線為 $\hat{y} = 1.3 + 0.9x$ 。平穩分佈為 $(19/41, 13/41, 9/41)$ 。行玩家的混合策略為 $(1/3, 2/3)$ ，它由令兩個列收益相等而得。對量綱分析，利用秩一零化度定理，把自由指數方向的數目連繫至量綱矩陣的零化度。

練習 4：延伸

1. 求 $\begin{pmatrix} 4 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}$ 的特徵值與特徵向量。

2. 令 $\mathbf{R}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$ 。從幾何角度解釋為何 $\mathbf{R}(\alpha)\mathbf{R}(\beta) = \mathbf{R}(\alpha + \beta)$ 。

3. 證明：若 $\mathbf{v}$ 是 $\mathbf{A}$ 對應特徵值 λ 的特徵向量，則 $\mathbf{v}$ 是 $\mathbf{A}^k$ 對應特徵值 λ^k 的特徵向量。

4. 對方陣，列出三種與其可逆等價的說法。

延伸提示

特徵值—特徵向量配對為： $\lambda = 5$ 對應方向 $(1, 1)$ ， $\lambda = 2$ 對應方向 $(1, -2)$ 。對旋轉，可合成幾何作用，或使用角度和公式。第 3 題可對 k 使用數學歸納法。三項有效的可逆等價條件為：行列式非零、滿秩及零空間只含零向量。

附錄 A：算法總結

任務	實用方法
求解 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$	對 $[\mathbf{A} \mid \mathbf{b}]$ 作行化簡，再進行回代。
求零空間	對 $\mathbf{A}$ 作行化簡，為自由變量設定參數，並寫出基向量。
檢驗獨立性	把向量置於各列，核查每一列是否均有主元。
求最小二乘直線	建立 $\mathbf{X}$ ，計算 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 與 $\mathbf{X}^T \mathbf{y}$ ，並求解正規方程。
求平穩分佈	求解 $\boldsymbol{\pi} P = \boldsymbol{\pi}$ 及 $\sum_i \pi_i = 1$ 。
求特徵值	求解 $\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0$ 。
求特徵向量	對每個特徵值，求解 $(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I})\mathbf{v} = \mathbf{0}$ 。

附錄 B：與主課的連繫圖

工具	出現位置
內積與範數	第 3 講的殘差向量；第 6 講的線性目標 $\mathbf{c} \cdot \mathbf{x}$ 。
矩陣乘法	第 5 講的轉移矩陣；第 8 講的混合策略。
高斯消元法	第 6 講的單純形思想；第 11 講的無量綱乘積。
秩與零空間	第 11 講的白金漢 Π 定理；第 3 講的設計矩陣。
最小二乘法	第 3 講的模型擬合與殘差分析。
特徵值	第 5 講的馬爾可夫鏈；第 9 講的線性動力系統；第 12 講的離散系統。

模型審核卡

在信任或傳達模型之前先作審核			
目的	模型要回答甚麼問題或支援甚麼決策？	資料	哪些輸入屬觀測、推導或模擬資料？
假設	哪些簡化可能改變答案？	單位	量綱與尺度是否一致？
運算 / 程式核證	方程、程式、限制與極限情況是否已核對？	模型效度驗證	是否用獨立證據檢驗預定用途下的表現？
不確定性	測量、參數、求解器及模型結構誤差如何影響結論？	倫理	誰受益、誰承擔風險，公平準則是甚麼？
可重現性	是否記錄資料來源、版本、種子與轉換？	溝通	主張是否有條件、可追溯且與決策相關？

延伸閱讀

- 18.06SC 線性代數（MIT OpenCourseWare）

來源、資料脈絡與授權

本講義依循 SIAM / COMAP GAIMME 報告對反覆建模與評核的觀點。競賽相關說明於 2026 年 8 月 20 日依據官方 COMAP HiMCM 規則核對；提交前仍須查閱當時最新規則。除非另有明確來源，課堂資料與數值情境均屬合成或模擬教學例子，不構成任何真實機構的實證主張。第三方參考資料沿用各自條款。Kenneth Sok Kin Cheng 的原創教材採用 CC BY-NC-SA 4.0 授權。

學生作答指引與檢核準則
封閉式計算題請列出定義、代入、單位及至少一項獨立檢查；本課的完整例題可作方法提示，但須自行完成數值。開放建模題按五項檢核：目的與輸出是否明確、資料與來源是否交代、假設與適用範圍是否合理、運算／程式核證與模型效度驗證是否可追蹤，以及不確定性、限制與建議是否互相一致。每項須附具體證據，而非只寫「已完成」。