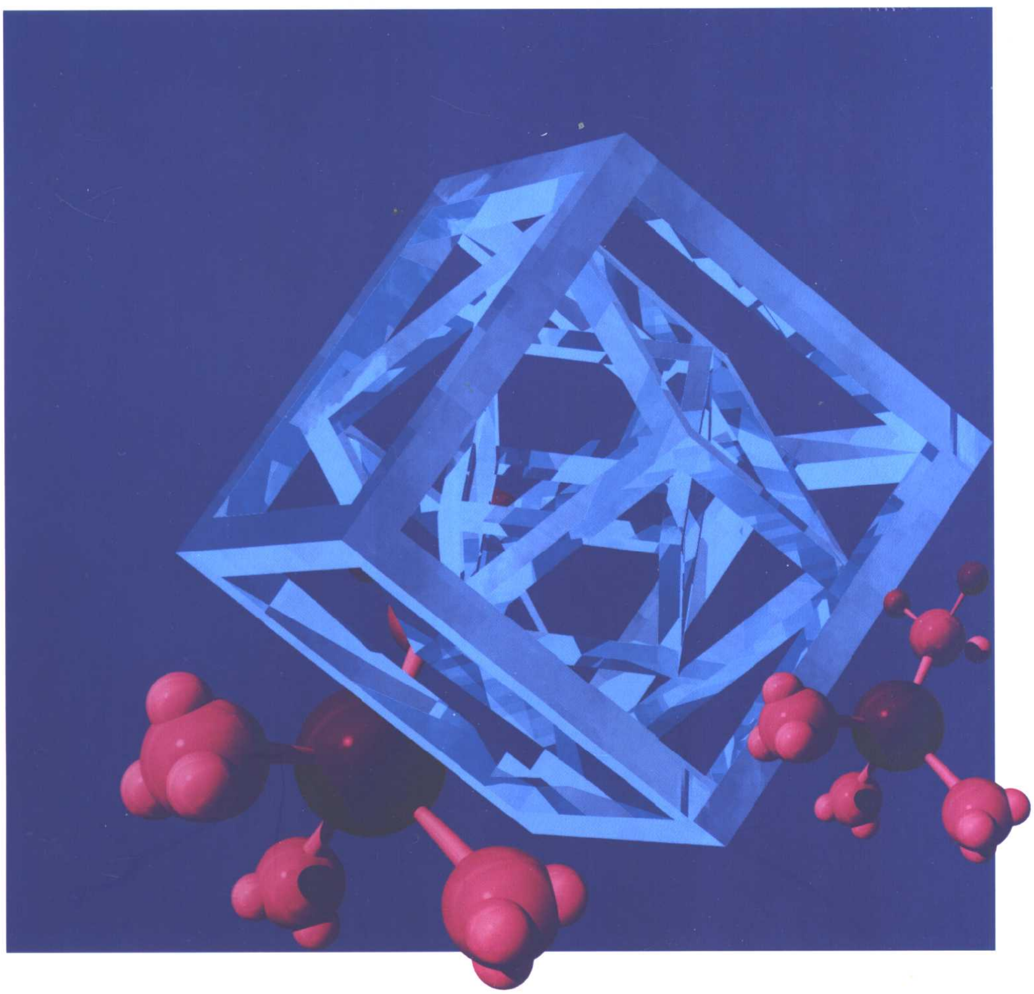
郝金库 王万得 主编　杨恩翠 梁炳恒 曹映玉 韩晓燕 编著

HuaXue ShengWu shuxue

化学生物数学简明教程

JianMing JiaoCheng



国防工业出版社
National Defence Industry Press
http://www.ndip.cn

天津市高校“十五”重点学科资助项目

化学生物数学简明教程

郝金库　王万得　主编

杨恩翠　梁炳恒
曹映玉　韩晓燕　编著

国防工业出版社

·北京·

图书在版编目(CIP)数据

化学生物数学简明教程／郝金库,王万得主编．—北京:国防工业出版社，2003.7

ISBN 7-118-03164-X

Ⅰ.化… Ⅱ.①郝… ②王… Ⅲ.①高等数学-应用-化学 ②高等数学-应用-生物学 Ⅳ.013

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 042357 号

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号)

(邮政编码 100044)

北京奥隆印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 787×1092 1/16 印张 16 368 千字

2003 年 7 月第 1 版 2003 年 7 月北京第 1 次印刷

印数:1—3000 册 定价:20.00 元

前　言

数学不仅是现代一切科学的基础，而且是一门思想、思维方法的科学。计算机、网络技术、信息技术、数学方法的迅速发展，极大地促进了现代物理学、化学、生物生命科学的发展与进步，出现了计算化学、计算生物学等交叉学科以及虚拟工程学、虚拟科学等学科的迅猛发展，使科学技术到达了一个崭新的时代。

为让学习化学、生物、生命科学的专科和本科生，在已有的数学基础上，进一步结合化学和生物学的学科知识结构的需要，学以致用，不打破数学的知识结构体系，能更好地掌握高等数学的基础知识、基本概念，特别是掌握高等数学的逻辑推理、思维方法和哲理，以利他们今后在所从事的化学、生物学的工作和科研中发挥更好的作用，我们编著了本教程。编著本教程，力求简洁、明了，因此，对数学中的基本概念、基本方法，力求准确，避开一些偏难、偏复杂的习题；对一些概念、方法也尽可能地结合化学、生物学知识加以解释和应用举例，让学生能尽快地掌握，并在化学、生物学领域开拓数学应用的方法和技巧，使他们今后在化学、生物学科的工作、研究中能自觉地学习和创造性地应用数学方法。无疑本教程对培养有坚实数学基础的化学、生物学专业的复合型、创造型人材是有所帮助的。

参加本书编写的编者，主要都是从事化学、生物学的教学与研究的工作者。本书由郝金库编写第 3、15 章；王万得编写第 1、2、7、11 ~ 14 章；杨恩翠编写第 10 章；梁炳恒编写第 4 章；曹映玉编写第 5 章；韩晓燕编写第 6 章；杨琨编写第 8 章；赵妍编写第 9 章；全书由郝金库统稿。

限于编者的水平，本书难免存在一些不足，希望读者指正。同时希望本书能起到抛砖引玉的作用，以期引起数学或化学生物学家的注意，能为本书提出更好的建议，指出其中的不足，以便进一步修订完善。

内 容 简 介

本书结合化学和生物学的有关知识，较系统地介绍了高等数学的基础知识。

全书共十五章，主要包括行列式、矩阵、群的基本概念和它的矩阵表示，还讨论了它们在化学和生物学中的一些应用。较系统地讨论了函数及极限、导数、微积分的基础知识和基本计算方法，介绍了级数、微分方程的一般知识。

本书适于化学和生物专业的本科和专科学生使用，亦可为专升本及高年级本科生学习化学和生物学时提供相关的数学知识。

目　　录

第1章 行列式和线性方程组

§1－1 二阶、三阶行列式和斯莱特行列式

1. 定义

二阶行列式必有二行二列，可用记号$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}$表示，其中横着排列的称为行，例如$a_{21}$、$a_{22}$称为第二行；竖着排列的称为列，例如$a_{11}$、$a_{12}$称为第一列。$a_{21}$称为第二行第一列的元素，$a_{ij}$为第$i$行第$j$列的元素。行列式的行数总是等于列数的。行列式可以展开（这一点和矩阵是不同的）。例如上面的行列式可展开为$a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}$。如果$a_{11}$、$a_{22}$、$a_{12}$、$a_{21}$是具体数，我们还可以计算出它的值。例如$\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 2 \end{vmatrix}=1\times2-(-1)\times0=2$

三阶行列式可表示为$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}$。二阶、三阶行列式都可以用对角线法展开，从左向右的对角线各项乘积作为正项，从右至左的对角线作为负项，例如上面的三阶行列式可展开为$a_{11}a_{22}a_{33}+a_{21}a_{32}a_{13}+a_{31}a_{23}a_{12}-a_{13}a_{22}a_{31}-a_{23}a_{32}a_{11}-a_{33}a_{21}a_{12}$，一共六项，即$3!=3\times2=6$。二阶行列式展开为$2!=2\times1=2$项。

三阶行列式各项a_{ij}若为具体数也可以计算出其数值，例如

$$\Delta=\begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & -1 \end{vmatrix}=-1+0+4-6-(-1)-0=-2$$

2. 二阶、三阶行列式的主要性质

我们这里只讲和化学有关的一些性质，并介绍一些必要的不可少的性质。

(1) 行列式转置。即将其行变为列，列变为行，行列式的值不变。

例如
$$\Delta=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}=$$
$$a_{11}a_{22}a_{33}+a_{21}a_{32}a_{13}+a_{31}a_{23}a_{12}-a_{13}a_{22}a_{31}-a_{23}a_{32}a_{11}-a_{33}a_{21}a_{12}$$
$$\tilde{\Delta}=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{vmatrix}=$$
$$a_{11}a_{22}a_{33}+a_{12}a_{23}a_{31}+a_{13}a_{32}a_{21}-a_{31}a_{22}a_{13}-a_{32}a_{23}a_{11}-a_{33}a_{12}a_{21}$$

我们应当注意到，转置后的各项均可在转置前的各项中找到，反之亦然。例如转置后的第三项 $a_{13}a_{32}a_{21}$和转置前的第二项是一样的，第四项 $-a_{31}a_{22}a_{13}$和转置前的第四项是一致的，符号也是相同的，其它各项均如此，皆有其对应的项存在。显然若 a_{ij}为数值为 Δ，则转置后的数值 $\tilde{\Delta}$ 应等于转置前的，即 $\tilde{\Delta}=\Delta$。

(2) 如将行列式的两行或两列对调，行列式要改变符号，但绝对值不变。

例如 $\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 2 \end{vmatrix}=2 \qquad \begin{vmatrix} -1 & 2 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}=0-2=-2$

一般的例如 $\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = -\begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}$

可以按对角线展开，证明对调了第一个行列式的第一行和第二行后其展开的各项应加上一个负号，才和未对调前的行列式的值相等，即 $\Delta=-\Delta$。

(3) 有两行或两列相同的行列式其值必为零。事实上，把两行或两列对调，根据性质(2)，行列式符号将改变，但绝对值不变。若此两行或两列均相同，则对调与否并无差别，但亦应符合性质(2)，即 $\Delta=-\Delta$，若 $-\Delta$ 即是 Δ，则 Δ 只能为零。

上面讨论的行列式的定义、展开和诸性质，被巧妙地运用于斯莱特行列式以表达多电子体系的电子波函数。

例如，对于锂原子的基态 $1S_\alpha^1 1S_\beta^1 2S_\alpha^1$，即在锂原子的 1S 上有两个自旋分别为 α 与 β 的电子，而在 2S 轨道上有一个自旋为 α 的电子，共有三个电子。而电子是不可辨认的全同粒子，人们无法说明哪一个电子处于什么状态，而只能以几率的概念去说明它们，即锂原子所具有的三个电子有六种可能的存在形式：

$1S_\alpha(1)1S_\beta(2)2S_\alpha(3)$；$1S_\beta(1)2S_\alpha(2)1S_\alpha(3)$；$2S_\alpha(1)1S_\beta(3)1S_\alpha(2)$；$1S_\alpha(3)1S_\beta(2)2S_\alpha(1)$；$1S_\beta(3)2S_\alpha(2)1S_\alpha(1)$；$2S_\alpha(3)1S_\beta(1)1S_\alpha(2)$。而且每种可能出现的几率是一样的，都是 1/6。这用行列式表达就较为明了和简洁，即：

$$\sqrt{3!}\begin{vmatrix} 1S_\alpha(1) & 1S_\alpha(2) & 1S_\alpha(3) \\ 1S_\beta(1) & 1S_\beta(2) & 1S_\beta(3) \\ 2S_\alpha(1) & 2S_\alpha(2) & 2S_\alpha(3) \end{vmatrix}$$

(其中$\sqrt{3!}$为归一化常数。)

它的展开正好得到 $3!=3\times2\times1=6$ 项，而且每一项正好和上面的六种可能组合相同。

行列式性质(1)说明斯莱特行列式将行作为列，将列作为行，即写成

$$\sqrt{3!}\begin{vmatrix} 1S_\alpha(1) & 1S_\beta(1) & 2S_\alpha(1) \\ 1S_\alpha(2) & 1S_\beta(2) & 2S_\alpha(2) \\ 1S_\alpha(3) & 1S_\beta(3) & 2S_\alpha(3) \end{vmatrix}。$$

所展开的各项和其在未转置前展开的各项是一一对应的，即所表达的数学和物理意义是一样的。所以斯莱特行列式的写法有两种形式，而且都是表达同一意义的。

行列式性质(2)被巧妙地运用到了电子波函数反对称性的性质,即交换任何两个电子的状态(位置),电子波函数形式不变,只是改变正负号。这正相当于我们对调锂原子基态波函数斯莱特行列式表达式的两列(对于第一个表达式)或两行(对于后一个表达式),此时行列式展开的值都不变,但改变了符号,即行列式的绝对值未变但改变了正负号。

行列式的性质(3)也被巧妙地运用到了斯莱特行列式表达式中,即表达了保里原理,在同一原子或分子中处于同一原子轨道或分子轨道的两个电子自旋必须相反。在我们举的实例中,若处于同一轨道的两个电子自旋相同,如两个电子同处于 $1S_\alpha$,则其斯莱特行列式的表达式应为:

$$\sqrt{3!}\begin{vmatrix} 1S_\alpha(1) & 1S_\alpha(2) & 1S_\alpha(3) \\ 1S_\alpha(1) & 1S_\alpha(2) & 1S_\alpha(3) \\ 2S_\alpha(1) & 2S_\alpha(2) & 2S_\alpha(3) \end{vmatrix}。$$

显然,其第一行和第二行是相同的,行列式的值应为零,即出现的几率应为零。这样的波函数是违背保里原理的。

对于 N 个电子的原子或分子,其斯莱特行列式应为 N 行 N 列,其写法和三行三列的锂原子的斯莱特行列式应有类似的表达形式。可以类推,对于 N 个电子体系的斯莱特行列式的展开式应有 $N! = (N-1)(N-2)\cdots 3\times 2\times 1$ 项。这在下节提到的高阶行列式中会有体现。

此外行列式还有许多其它性质,在此我们只简述一个性质,即

(4) 若用数 K 乘某一行或某一列,那么该行列式的值也增至 K 倍。

例如 $$\begin{vmatrix} Ka_{11} & Ka_{12} & Ka_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} =$$

$$Ka_{11}a_{22}a_{33} + Ka_{21}a_{32}a_{13} + Ka_{31}a_{23}a_{12} - Ka_{13}a_{22}a_{31} - Ka_{23}a_{32}a_{11} - Ka_{33}a_{21}a_{12} =$$

$$K\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}$$

如果 a_{ij} 为数值 Δ 则其乘积等于 $K\cdot\Delta$。(应注意这和矩阵用一个常数 K 相乘是不同的。)

§1-2 高阶行列式

三阶以上的行列式称为高阶行列式,除其展开方式不可用对角线法以外,上面所述的二、三阶行列式的性质对于高阶行列式也是成立的。只要明白高阶行列式的展开方法,这一点是不难理解的。例如

四阶行列式：$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} =$

$$(-1)^{1+1}a_{11}\begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} + (-1)^{1+2}a_{12}\begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{43} & a_{44} \end{vmatrix} +$$

$$(-1)^{1+3}a_{13}\begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{44} \end{vmatrix} + (-1)^{1+4}a_{14}\begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} \end{vmatrix}$$

上面是按第一行将一个四阶行列式展开为四个三阶行列式的和，其中每一项中后面的三阶行列式称为前面系数 a_{ij}的子行列式，它是划去该元素所在的 i 行和j 列所得到的。该子行列式再乘上$(-1)^{i+j}$即得该元素 a_{ij}的代数余子式，其中 i 为该元素所在的行数，j 为该元素所在的列数。此四阶行列式可用任意一行或一列将它展开，但必须是同一行或同一列，用同一行的元素，分别乘上它们的各自的代数余子式，再相加在一起即得此四阶行列式的展开式。对于高于四阶的行列式可用同样的方法按某一行或某一列展开成减少了一阶的行列式，直至三阶行列式，而三阶行列式即可用对角线法展开了。应指出，用对角线展开三阶行列式之所以正确，是因为它和用代数余子式展开的方法正好巧合。例如：

$$\begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & -1 \end{vmatrix} = -1+0+4-6-(-1)-0=-2$$

若按代数余子式展开，如按第一行展开：

$$\begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & -1 \end{vmatrix} = (-1)^{1+1}\times\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{vmatrix} + (-1)^{1+2}2\times\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 2 & -1 \end{vmatrix} +$$

$$(-1)^{1+3}3\times\begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 2 & -1 \end{vmatrix} =$$

$$-1-(-1)-0+4+0-6=-2$$

应着重指出，用第一行的代数余子式法展开和用对角线法展开的结果是一样的，且各项都是一一对应的。

应当指出，四阶及其以上的各阶行列式是不可用对角线法展开的。例如四阶行列式若按对角线法展开只能得到 8 项，但正确的方法用代数余子式法展开四阶行列式应得到 24 项，即 $4!=4\times3\times2\times1=24$。显然和用对角线法得到的八项是相矛盾的。只有二阶和三阶行列式用对角线法和用代数余子式法得到的展开式是相同的。

对于具有四个电子的体系,例如铍原子的基态斯莱特行列式应为

$$\sqrt{4!}\begin{vmatrix} 1S_\alpha(1) & 1S_\alpha(2) & 1S_\alpha(3) & 1S_\alpha(4) \\ 1S_\beta(1) & 1S_\beta(2) & 1S_\beta(3) & 1S_\beta(4) \\ 2S_\alpha(1) & 2S_\alpha(2) & 2S_\alpha(3) & 2S_\alpha(4) \\ 2S_\beta(1) & 2S_\beta(2) & 2S_\beta(3) & 2S_\beta(4) \end{vmatrix}。$$

显然,其展开可得到 24 个不同的项,正好是四个电子可能状态的 24 种组合,符合实际的情况。

§1-3　线性方程组

1. 二元线性方程组

考察两个二元线性方程组:

$$\begin{cases} a_{11}x + a_{12}y = b_{11} & ① \\ a_{21}x + a_{22}y = b_{21} & ② \end{cases} \qquad (1.3.1)$$

若

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \neq 0$$

$$x = \frac{\begin{vmatrix} b_{11} & a_{12} \\ b_{21} & a_{22} \end{vmatrix}}{\Delta} \qquad y = \frac{\begin{vmatrix} a_{11} & b_{11} \\ a_{21} & b_{21} \end{vmatrix}}{\Delta} \qquad (1.3.2)$$

证明:可用 $a_{22}\times$①得　　$a_{22}a_{11}x + a_{22}a_{12}y = a_{22}b_{11}$　　③

再以 $a_{12}\times$②得　　$a_{12}a_{21}x + a_{12}a_{22}y = a_{12}b_{21}$　　④

以③-④得　　$(a_{22}a_{11} - a_{12}a_{21})x = a_{22}b_{11} - a_{12}b_{21}$

则有:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} x = \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix}$$

$$\Delta \cdot x = \Delta x \qquad ⑤$$

同样方法可得

$$\Delta \cdot y = \Delta y \qquad ⑥$$

这就是上面所述的结果 $x = \frac{\begin{vmatrix} b_{11} & a_{12} \\ b_{21} & a_{22} \end{vmatrix}}{\Delta}(\Delta\neq 0)$,同理可证 $y = \frac{\begin{vmatrix} a_{11} & b_{11} \\ a_{21} & b_{21} \end{vmatrix}}{\Delta}(\Delta\neq 0)$。

上面的结果也可以写成 $x = \frac{\Delta x}{\Delta}, y = \frac{\Delta y}{\Delta}(\Delta\neq 0)$,其中 Δx 可看成 Δ 中与 x 相关的系数,第一列$[a_{11}\quad a_{21}]^T$以$[b_{11}\quad b_{21}]^T$代替;而 Δy 可看成 Δ 中与 y 相关的系数,即第二列$[a_{12}\quad a_{22}]^T$以$[b_{11}\quad b_{21}]^T$代替。

以上讨论的皆 $\Delta\neq 0$ 的情况,下面再讨论 $\Delta = 0$ 的情况。

显然，由⑤知 $x\cdot\Delta=\Delta x$，由⑥知 $y\cdot\Delta=\Delta y$，若 $\Delta=0$，而 Δx 或 Δy 中有一个不为零，或皆不为零的方程组是无解的。

若 $\Delta=0,\Delta x=\Delta y=0$，此时因 $a_{11}a_{22}-a_{21}a_{12}=0,a_{22}b_{11}-a_{12}b_{21}=0,a_{11}b_{21}-a_{21}b_{11}=0$，则有 $a_{11}a_{21}=a_{12}a_{22}=b_{11}b_{21}$方程组中的一个方程可由另一个方程乘上一个适当的常数而得到。实际上解一个方程就够了。此时如解第一方程 $a_{11}x-a_{12}y=b_{11}$，$x=\dfrac{b_{11}-a_{12}y}{a_{11}}$（$y$ 为任意常数），此时方程组有无数多组解。

3. 三元线性方程组

考察三元线性方程组：

$$\begin{cases}a_{11}x+a_{12}y+a_{13}z=b_{11}\\a_{21}x+a_{22}y+a_{23}z=b_{21}\\a_{31}x+a_{32}y+a_{33}z=b_{31}\end{cases}\tag{1.3.3}$$

若方程组的系数行列式：

$$\Delta\cdot x=\Delta x\qquad \Delta\cdot y=\Delta y\qquad \Delta\cdot z=\Delta z$$

其中：$\Delta x=\begin{vmatrix}b_{11}&a_{12}&a_{13}\\b_{21}&a_{22}&a_{23}\\b_{31}&b_{32}&b_{33}\end{vmatrix}\quad \Delta y=\begin{vmatrix}a_{11}&b_{11}&a_{13}\\a_{21}&b_{21}&a_{23}\\a_{31}&b_{31}&b_{33}\end{vmatrix}\quad \Delta z=\begin{vmatrix}a_{11}&b_{12}&b_{11}\\a_{21}&b_{22}&b_{21}\\a_{31}&a_{32}&b_{31}\end{vmatrix}$

Δx 可以记为由$[b_{11}\quad b_{21}\quad b_{31}]^T$代换了 Δ 中$[a_{11}\quad a_{21}\quad a_{31}]^T$；$\Delta y$ 可以记为由$[b_{11}\quad b_{21}\quad b_{31}]^T$代换了 Δ 中$[a_{11}\quad a_{21}\quad a_{31}]^T$；$\Delta z$ 可以记为由$[b_{11}\quad b_{21}\quad b_{31}]^T$代换了 Δ 中$[a_{13}\quad a_{23}\quad a_{33}]^T$。显然，若 $\Delta\neq0$，则 $x=\dfrac{\Delta x}{\Delta},y=\dfrac{\Delta y}{\Delta},z=\dfrac{\Delta z}{\Delta}$

例：解方程组 $\begin{cases}2x-3y+z+1=0\\x+y+z=6\\3x+y-2z=-1\end{cases}$

解：

$$\Delta=\begin{vmatrix}2&-3&1\\1&1&1\\3&1&-2\end{vmatrix}=-23$$

$$\Delta x=\begin{vmatrix}-1&-3&1\\6&1&1\\-1&1&-2\end{vmatrix}=-23$$

$$\Delta y=\begin{vmatrix}2&-1&1\\1&6&1\\3&-1&-2\end{vmatrix}=-46$$

$$\Delta z=\begin{vmatrix}2&-3&-1\\1&1&6\\3&1&-1\end{vmatrix}=-69$$

$x=\frac{\Delta x}{\Delta}=\frac{-23}{-23}=1, y=\frac{\Delta y}{\Delta}=\frac{-46}{-23}=2, z=\frac{\Delta z}{\Delta}=\frac{-69}{-23}=3$,可将上面结果代入原方程组,确实满足原方程组。

若方程组(1.3.3)的 $\Delta=0$,但 $\Delta x,\Delta y,\Delta z$ 中至少有一个不等于零,则方程组(1.3.3)是无解的。因为无论 x,y,z 取什么值不能完全满足 $\Delta\cdot x=\Delta x,\Delta\cdot y=\Delta y,\Delta\cdot z=\Delta z$,故亦不能满足方程组(1.3.3),方程组(1.3.3)无解。

若方程组(1.3.3)的 $\Delta=0,\Delta x=\Delta y=\Delta z=0$,此时方程组可能没有解,也可能有无数多组解。例如

方程组: $\begin{cases} x+y+z=1 \\ x+y+z=2 \\ x+y+z=3 \end{cases}$

显然 $\Delta=0,\Delta x=\Delta y=\Delta z=0$,但方程组的三个方程是相互矛盾的,因而无解。

又如

方程组: $\begin{cases} x+y+z=1 \\ 2x+2y+2z=2 \\ 3x+3y+3z=3 \end{cases}$

显然 $\Delta=0,\Delta x=\Delta y=\Delta z=0$。

可以看出,第一方程乘以 2 即得第二个方程,第一个方程乘以 3 即得第三个方程。三个方程实为一个方程,只解其中任一个即可,例如解第一个方程得:$x=1-y-z$(y 和 z 可为任意常数),显然方程组有无数多组解。

§1-4 齐次线性方程组和久期方程

我们称下面的方程组为齐次线性方程组。

$$\begin{cases} a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n=0 \\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n=0 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n1}x_1+a_{n2}x_2+\cdots+a_{nn}x_n=0 \end{cases} \tag{1.4.1}$$

其中 $x_1,x_2,x_3,\cdots,x_n$ 为未知量;$a_{11},a_{12},\cdots,a_{1n}$及 $a_{21},a_{22},\cdots,a_{2n}$;$a_{31},a_{32},\cdots,a_{3n},\cdots,a_{n1},a_{n2},\cdots,a_{nn}$为常量。

齐次线性方程组显然有一组零解,即 $x_1=x_2=\cdots=x_n=0$,只需将它们代入原方程组,即知这组零解满足之。现在我们还要找出方程组(1)在什么条件下具有非零解,及如何求解它们。

1. 含有两个方程的三元齐次线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3=0 \\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+a_{23}x_3=0 \end{cases} \tag{1.4.2}$$

方程组(1.4.2)除了零解或称为寻常解外,是否还有非零解,在什么条件下存在,如何去求解?下面我们分两种情形来讨论。

(1) 方程组(1.4.2)的系数组成的三个行列式：$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}$，$\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix}$，$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{21} & a_{23} \end{vmatrix}$中至少有一个不为零，例如第一个不为零。将方程组(1.4.2)改写为

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = -a_{13}x_3 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = -a_{23}x_3 \end{cases} \tag{1.4.3}$$

在此可给未知数 x_3 以任意数值。当 x_3 的数值给定后，则方程组(1.4.3)有唯一的一组解。根据(1.3.2)公式可以求得在 $\Delta \neq 0$ 时方程组(1.4.3)有

$$x_1 = \frac{\begin{vmatrix} -a_{13}x_3 & a_{12} \\ -a_{23}x_3 & a_{22} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}}, \qquad x_2 = \frac{\begin{vmatrix} a_{11} & -a_{13}x_3 \\ a_{21} & -a_{23}x_3 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}}$$

又 $$\begin{vmatrix} -a_{13}x_3 & a_{12} \\ -a_{23}x_3 & a_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix} x_3, \quad \begin{vmatrix} a_{11} & -a_{13}x_3 \\ a_{21} & -a_{23}x_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{13} & a_{11} \\ a_{23} & a_{21} \end{vmatrix} x_3$$

故 $$x_1 = \frac{\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix} x_3}{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}}, \quad x_2 = \frac{\begin{vmatrix} a_{13} & a_{11} \\ a_{23} & a_{21} \end{vmatrix} x_3}{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}}$$

其中 x_3 可取任意数值，令$\dfrac{x_3}{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}} = K$，则 $x_1 = \begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix} \cdot K$，$x_2 = \begin{vmatrix} a_{13} & a_{11} \\ a_{23} & a_{21} \end{vmatrix} \cdot K$，$x_3 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \cdot K$。若取 $K \neq 0$，则至少 $x_3 \neq 0$，即 x_1, x_2, x_3 可不全为零。这就是方程组(1.4.2)的非零解。但这是假定方程组(1.4.2)的系数行列式第一个系数行列式得出的结论。可以类推，如若是第二个或第三个系数行列式不为零，也会得出类似的结果，亦即必有非零解。

(2) 如若三个系数行列式全为零，则 $a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = 0$，$a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22} = 0$，$a_{11}a_{23} - a_{13}a_{21} = 0$，即$\dfrac{a_{11}}{a_{21}} = \dfrac{a_{12}}{a_{22}} = \dfrac{a_{13}}{a_{23}}$，因而在此条件下，方程组(1.4.2)实为一个方程，可解其任一个即可得出其非零解：

$$x_1 = \frac{-a_{12}x_2 - a_{13}x_3}{a_{11}} \qquad (若\ a_{11} \neq 0)$$

其中 x_2 和 x_3 为任意数值，此时方程组亦有非零解。

2. 含有三个方程的三元齐次线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = 0 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = 0 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = 0 \end{cases} \tag{1.4.4}$$

按前节所述可知方程组(4)的 $\Delta x_1=\Delta x_2=\Delta x_3=0$(因常数项为零),在此条件下,若 $\Delta\neq0$,显然方程组(1.4.4)只有零解。

现在我们要证明,如果 $\Delta=0$,方程组必有非零解。

现分两种情形证明:

(1) 如果 $\Delta=0$,但它的子行列式至少有一个不等于零,如 $\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}\neq0$,在此条件下,方程组(1.4.4)前两个方程即为方程组(1.4.2)了。此时前两个方程组成的方程组应有非零解:

$$x_1=\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix}\cdot K,\quad x_2=\begin{vmatrix} a_{13} & a_{11} \\ a_{23} & a_{21} \end{vmatrix}\cdot K,\quad x_3=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}\cdot K(K\text{ 为任意数值})$$

方程组(1.4.4)在 $\Delta=0$ 的条件下,将前两个方程组成的方程组所解的结果代入第三个方程,亦将满足之:

$$\begin{aligned}a_{31}x_1+a_{32}x_2+a_{33}x_3&=a_{31}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}K+a_{32}\begin{vmatrix} a_{13} & a_{11} \\ a_{23} & a_{22} \end{vmatrix}K+a_{33}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}K=\\ &K\left\{a_{31}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}+a_{32}\begin{vmatrix} a_{13} & a_{11} \\ a_{23} & a_{22} \end{vmatrix}+a_{33}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}\right\}=\\ &K\left\{a_{31}\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix}-a_{32}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix}+a_{33}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}\right\}=\\ &K\cdot\Delta\end{aligned}$$

因知 $\Delta=0$,故 $K\cdot\Delta=0$,亦即满足了第三个方程。

故前两个方程组成的方程组之解在 $\Delta=0$ 时亦是第三个方程之解，亦即是方程组（1.4.4）的解。若 $K\neq0$，则 x_1，x_2，x_3 即不会全是零。应注意到，在 $\Delta=0$ 时至少有一子行列式不为零的条件下，只需解子行列式不为零的两个方程的方程组就可以了。这样两个方程有三个未知数，其方程组之解至少有一个未知量是可以任意指定的。

(2) 如果 $\Delta=0$,且它的子行列式全都等于零。

此时方程组(1.4.4)的任何两个方程的系数均成比例,故实为一个方程,此方程之解即为方程组之解,此时方程组有无限多组非零解。因可给出三个未知量的两个以任意的数值。

可以看出,如 $\Delta\neq0$ 必无非零解,即没有条件 $\Delta=0$ 方程组必无非零解,因此称 $\Delta=0$ 是方程组(1.4.4)有非零解的必要条件。而后又证明了当 $\Delta=0$ 时方程组(1.4.4)定有非零解,故此称 $\Delta=0$ 为方程组(1.4.4)有非零解的必要且充分条件。

例 1　解方程组 $\begin{cases}2x_1-3x_2-x_3=0\\ x_1+x_2+x_3=0\\ 3x_1+x_2-2x_3=0\end{cases}$