

从邻接矩阵 到拓扑网络

▼
马治 编著

——基于NetworkX的
网络与图分析



黄河出版传媒集团
宁夏人民教育出版社

宁夏大学优秀学术著作
出版基金资助

从邻接矩阵 到拓扑网络

马治 编著

基于NetworkX的
网络与图分析



黄河出版传媒集团
宁夏人民出版社

宁夏大学优秀学术著作
出版基金资助

从邻接矩阵 到拓扑网络

▼
马治 编著

——基于NetworkX的
网络与图分析



黄河出版传媒集团
宁夏人民出版社

图书在版编目(CIP)数据

从邻接矩阵到拓扑网络: 基于 NetworkX 的网络与图分析 / 马治编著. -- 银川: 宁夏人民教育出版社, 2021.5

ISBN 978-7-5544-4302-6

I. ①从… II. ①马… III. ①计算机网络-网络拓扑结构 IV. ①TP393.022

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2021)第 079368 号

从邻接矩阵到拓扑网络——基于NetworkX的网络与图分析

马 治 编著

责任编辑 王 宁

责任校对 超 楠

封面设计 木 叶

责任印制 殷 戈



黄河出版传媒集团 出版发行
宁夏人民教育出版社

地 址 宁夏银川市北京东路 139 号出版大厦(750001)

网 址 <http://www.yrpubm.com>

网上书店 <http://www.hh-book.com>

电子信箱 jiaoyushe@yrpubm.com

邮购电话 0951-5014284

经 销 全国新华书店

印刷装订 宁夏凤鸣彩印广告有限公司

印刷委托书号 (宁)0020664

开本 889 mm × 1194 mm 1/16

印张 14.25 字数 320 千字

版次 2021 年 5 月第 1 版

印次 2021 年 5 月第 1 次印刷

书号 ISBN 978-7-5544-4302-6

定价 36.00 元

版权所有 侵权必究

但这绝不是网络科学的精要所在。众所周知,网络科学是专门研究复杂网络系统的定性和定量规律的一门崭新的交叉科学。研究涉及复杂网络的各种拓扑结构及其性质与动力学特性之间相互关系,包括时空斑图的涌现、动力学同步及其产生机制,网络上各种动力学行为和信息的传播、预测、搜索与控制,以及工程实际所需的网络设计原理及其应用。网络科学在国家安全、军事指挥、计算机病毒和各种传染病传播、物联网、人际关系、物流运输、信息共享等方面作用凸显。若将网络科学与概率图模型、最优化理论、运筹学、博弈论、对策论结合起来,威力将变得异常巨大。从网络科学走向深度学习,这必将迎来一个人工智能的新时代。

我们的学习应该为人工智能时代做好准备。掌握基本的代码编写和绘图,正是为学习艰涩的精深理论做准备。直观的图谱,简易的函数,可以为深入分析复杂网络提供参考。网络,关注的是事物之间的联系。这和物理学中关注事物结构、运动与时空关联,并无本质区别。生命的存亡与演化,奥妙无穷又神秘难测。但究其根本,生命与时空万物相互作用,相互关联。古今中外的哲学与宗教,其大旨亦不外乎此吧?地球上的生命如何产生?消失了的生命又去往哪里?如果把生命的网络画在时空的隧道里,那将是怎样的图景?生命的产生与灭亡又存在怎样的原理?

现实世界,是包罗万象、错综复杂的。现代科学知识亦日新月异。用一本书来囊括许多学科的内容,是不现实的。但我试图积极寻找这些学科共同的基础,希望能把知识之间的“脉络”彼此融通,对解决真实世界中的复杂问题产生些许推动作用。因此,这次尝试更多关注计算程序,希望能为学生进一步地探索未知世界,标定一个可以“动手”的地方。然而,对于最为有用的概率图模型以及拓扑学,只简单介绍了纽结理论和辫子群,并未有过多说明,留些遗憾罢了。

孟郊诗云:“四时更变化,天道有亏盈。”历来所学,浅陋自知。《道德经》有言:“上士闻道,勤而行之;中士闻道,若存若亡;下士闻道,大笑之。不笑不足以为道。”盛夏又至,羞惭不已。天道有常,维笃信行。“焚膏油以继晷,恒兀兀以穷年”,书稿遂成,冀有所助。谬误之处,恳望指正。是为序。

马 治

初稿 二零二零年六月十六日

终定 二零二一年五月二十日

于南昌大学前湖校区材料楼

目 录

第 1 章 网络科学面对的问题	1
1.1 图论与网络简介	1
1.2 网络图所讨论的基本问题	2
1.3 矩阵、图、群、拓扑之间的关系	5
1.4 Python 语言基础	16
1.5 物理学中几个典型的网络图	23
第 2 章 图论的基本概念与图的矩阵	28
2.1 标号图(邻接表)	28
2.2 图论的基本概念与定理	29
2.3 对偶图、正常着色、图的特征多项式、对称图等	37
2.4 无权无向图的邻接矩阵、置换矩阵、循环矩阵、关联矩阵、圈矩阵	39
2.5 无权有向图的邻接矩阵、可达矩阵、距离矩阵、迂回矩阵	42
2.6 带权无向图的邻接矩阵	43
2.7 图的拉普拉斯矩阵	43
2.8 群的色图,图的自同构群	45
第 3 章 网络图绘制的基本数据结构	46
3.1 矩阵化的数据结构	46
3.2 字典化的数据结构	47
3.3 序列化的数据结构	49
3.4 列表化的数据结构	50



3.5	嵌套字典式的数据结构	51
3.6	将矩阵数据转换为字典数据	52
3.7	将矩阵数据转换为序列数据	53
3.8	将矩阵数据转化为列表数据	55
3.9	将矩阵数据转化为可编程矩阵数据	56
3.10	将矩阵数据转化为嵌套字典数据结构	56
3.11	五种主要数据结构之间的转化分析	56
3.12	最简单的数据结构	56
3.13	与 Numpy\ Scipy\ Pandas 的数据格式转化	57
第 4 章	NetworkX+Matplotlib+Seaborn+Bokeh 网络图分析	59
4.1	Python 模块安装的方法	59
4.2	构建网络图分析所需要的平台——使用国内镜像	60
4.3	各进制数的计算方法	62
4.4	Python 常用的绘图模块介绍	63
4.5	Seaborn 辅助绘图	64
4.6	Bokeh 辅助绘图	69
4.7	NetworkX 的常规运行方法	72
4.8	NetworkX 中的五句绘图法与节点标签重置	74
4.9	NetworkX 与 Matplotlib 结合的神奇	77
4.10	无向图 Graph() 命令的使用	79
4.11	有向图 DiGraph() 命令的使用	81
4.12	无向多边图 MultiGraph() 命令的使用	82
4.13	有向多边图 MultiDiGraph() 命令的使用	84
4.14	使用 Draw() 与 Draw_NetworkX() 绘制网络图	86
4.15	常用的绘图函数原型	87
4.16	图的框架结构(Layout)	89



第 5 章 Sagemath 网络图分析	91
5.1 NetworkX 模块导入	91
5.2 图的基本类型与绘图函数	91
5.3 Sagemath 网络图绘图举例	100
5.4 图论 Graphs 基本的绘图操作	106
5.5 图之积	109
5.6 路径与循环	110
5.7 线性代数	110
5.8 一些社交网络常用的函数	111
5.9 自同构群	112
5.10 图的类型与性质判断	112
5.11 距离	113
5.12 流、连通性、树	114
5.13 嵌入相关的方法	115
5.14 算法上很难的东西	116
第 6 章 Sagemath 中 Graphs 下的常见图	117
6.1 常见无向图绘图名称	117
6.2 小图绘图名称	120
6.3 柏拉图多面体图	130
6.4 图的分类	131
6.5 有限域上的经典几何图	135
6.6 棋盘图绘制	136
6.7 交叉图绘制	137
6.8 随机图的绘制	138
6.9 给定有序度的图	141
6.10 Sagemath 中 Graphs 模块的框架结构	143
6.11 Sagemath 中三维图的绘制	143



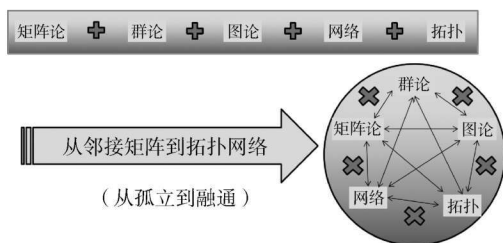
第 7 章 从邻接矩阵到可达矩阵的图示	147
7.1 Ucinet 的安装与使用	147
7.2 五点图的有向矩阵	148
7.3 从有向矩阵到无向矩阵	149
7.4 从无向矩阵到可达距离矩阵	152
7.5 从无向矩阵到可达矩阵	153
7.6 基于 Ucinet 的邻接矩阵绘图	155
7.7 矩阵的三种乘积运算	159
7.8 Sagemath 中的矩阵运算与操作	160
7.9 Sagemath 中的矢量之点积、叉积与外积	166
7.10 函数的梯度、散度与旋度	168
7.11 张量与矩阵以及张量积	169
第 8 章 纽结理论与绘图	173
8.1 纽结图及其分析	173
8.2 一些典型的纽结图	180
8.3 Sagemath 中包含的纽结函数	185
附录 1: Sagemath 包	188
附录 2: Graph 包	199
附录 3: Sage 包	202
附录 4: graphs 包	204
附录 5: sage 包	206
附录 6: sage0 包	207
参考文献	219
跋	220

第 1 章 网络科学面对的问题

1.1 图论与网络简介

我们这里讨论的图,与别处的图大不相同。因为这里讨论的图只由简单的点与线所构成。不关注点与线的大小、形状,而关心它们彼此之间的连接关系。当一个图中的点数和线数多起来,这样的图更像是一个现实中的蜘蛛网。但是,点与线多了就会不一样,它们之间的连接关系有时具有某种规律性,这种规律性叫作网络特性。当然,这样的网络,不论你怎样的撕扯与扭转,都不许改变网络的连接关系,因此,这样的网络,有时看起来千差万别,但它们的本质属性从来没有改变,准确来说,这样的网络应该叫作拓扑网络。由于社会现象的复杂多样,人们研究的问题也千差万别,但终归是,网络变得越来越复杂。这样高度复杂化的网络,叫作复杂网络。在科学世界,复杂网络有其科学的定义。复杂网络,是指具有自组织、自相似、吸引子、小世界、无标度中部分或全部性质的网络。复杂网络研究的内容包括:网络的几何性质、网络的形成机制、网络演化的统计规律,网络上的模型性质,网络的结构稳定性,网络的演化动力学机制等。需要说明的是,在这里并不专门讨论复杂网络的相关问题,只是给出图论与复杂网络的部分关联,意欲架设一座桥梁,横跨两者之间。

在图论问题与网络科学的研究中,我们总能找到它们的共同特点:一是它们的目的都是从若干可能的安排或方案中寻求某种意义下的最优安排或方案,数学上把这种问题称为最优化或优化问题;二是它们都易于用图形的形式直观地描述和表达,数学上把这种与图相关的结构称为网络。与图和网络相关的最优化问题就是网络最优化或称网络优化问题。此外,还有与图和网络相关的随机化问题,有时称为随机网络问题或者随机图问题,也可称为概率图模型问题。这些问题的求解极为复杂,本书只做图论相关简单的探讨和引导,试图将一个科目加法的规则逐渐过渡到乘法的世界,如下图所示:





1.2 网络图所讨论的基本问题

图论作为一个得力的工具,被广泛地应用于物理学、化学、生物学、计算机科学、运筹学、心理学、语言学、社会学等众多的自然科学和社会科学领域。它讨论的问题无疑是极为广泛而深刻的,但作为入门的介绍,可以从最简单的情况入手,对一些有趣的问题做个归纳,以激发阅读者的兴趣和关联思考。下面的例子部分来自 1985 年出版的《趣味图论》一书。

(1) 连接数问题

①参加聚会熟人问题。假设参加聚会的人共有 28769 个,而每个人在联欢会上都至少遇到了 1 个熟人,那么,你能证明其中必有 1 个人至少遇到了 2 个熟人吗?

这一问题也可以表述为:宴会上,熟人见面互相握手。证明:握过奇数次手的人有偶数个。

也可表述为:参加某次学术讨论会的共有 263 个人。已知每个人至少和 3 位与会学者讨论过问题,证明:至少有一个人和 4 位以上学者讨论过问题。

②语句结构分析问题。在语言学中,可以利用图来分析语句结构。当一个句子的结构是“名词+动词+形容词+名词”的时候,这样的句子叫作合式,否则就是非合式。

③人际关系稳定问题。在社会学或心理学中,可利用图来分析一群人之间的相互关系,探讨怎样保持一个稳定的社会结构。比如由 3 个人组成的一个小组,任何 2 个人能很好地共事,也可能情况相反。那么在三人构成的小组中,哪种结构是一种稳定关系呢?

(2) 图的通路与连通性问题

迷宫问题。Maze 型迷宫包含了入口和出口,而 Labyrinth 型迷宫只有入口,返回时只能原路返回,怎样尽快找出这两类迷宫的最快通路呢?

(3) 图的一笔画问题

①逛街问题。你来到了某个从未到过的城市,总希望有机会能把城市里的几条最繁华的街道都逛上一遍而不走重复的路。该从哪里出发,选择怎样的道路呢?

②邮递员问题。工作中,邮递员投递信件,怎样才能走不重复的路,尽快完成工作任务呢?

③洒水车问题。洒水车给街道洒水,怎样才能走不重复的路,尽快完成城市的洒水任务呢?

④哥尼斯堡七桥问题。古代哥尼斯堡的普莱格尔河里有一个岛 A。在这个岛和 3 块陆地 B、C、D 之间共有 7 座桥。当地的居民热衷于解这样一个难题:能否从某处出发,把这七座桥都走到并且每座桥只走过一次?如何找到这种走法呢?

(4) 完全图问题

①在一次会议上,每位与会者都和其他参加会议的每个人握过 1 次手。已知总共握手 66 次,你能求出有多少人参加会议吗?

②在 9 个人中,如果任意 3 个人之间都至少有 2 个人彼此认识,那么一定有 4 个人彼此认识。

(5) 哈密顿通路和回路

①环游世界问题。有 20 个城市间通过水路或陆路相连,问:是否存在一条环游世界的路线,使得一位旅行者从任一城市出发,经过其他 19 个城市各 1 次后又回到原来的出发地?



②排座位问题。在一次国际学生联欢会上,有7位来自不同国家的学生会话能力如下:A会讲英语;B会讲英语和汉语;C会讲英语、意大利语和西班牙语;D会讲汉语和日语;E会讲德语和意大利语;F会讲法语、日语和西班牙语;G会讲法语和德语。问:怎样安排这7个人围着一个圆桌坐下,使得每个人都能和他身边的两个人交谈?

③挑选双色布问题。某工厂生产由6种不同颜色的纱织成的双色布。已知花布品种中,每种颜色至少分别和其他3种不同的颜色搭配。要求证明:可以挑出3种双色布,它们恰好含有6种不同的颜色。

④棋盘上跳马问题。在半个国际象棋棋盘中,问:马能否连续地把棋盘上所有的格都跳到一次并且仅仅一次?如果去掉了棋盘对角线上两个黑色方格,又将如何?

⑤考试安排问题。在7天中安排7门课的考试,要使得同一位老师教的两门课考试不排在接连的两天里。如果同一位老师教的考试课程最多4门,证明:这种安排总是可以的。

(6) 有向图

把25个重量各不相等的苹果放在桌子上,排成一个 5×5 的方阵,先从每一行里挑出一个最重的苹果,再在挑出的5个苹果中选出一个最轻的,标上记号 a ,然后把这几个苹果放回原处。接着,从每一列里挑出一个最轻的苹果,再在这5个苹果中选出一个最重的,标上记号 b ,然后把各苹果放回原处。已知 a 、 b 是不同行也不同列的苹果,现在要问:苹果 a 和苹果 b 哪个重?

(7) 图的同构

如何判断两个图是同构的?从图论的角度来看,如果两个图同构,意味着它们有相同的顶点数,并且两个图各顶点的邻接关系也是相同的。也就是说,这两个图的顶点和顶点之间,边和边之间存在一一对应的关系。

(8) 树的概念

要在校8位乒乓球运动员中选1位参加本区乒乓球比赛,采取单淘汰的方法进行选拔,问:一共要进行多少场比赛才能确定最后的人选?

(9) 概率树

若干个红球和黑球,分别放在3个相同的袋子里。已知一个袋子里有3个红球5个黑球,另一个袋子里有6个红球2个黑球,余下的一个袋子里有红球和黑球各4个。随意选其中一个袋子,从袋子里取出一个球,问取出的球是红色或黑色的概率各是多少?

(10) 平面图

如何判断一个图是否是平面图?如何去掉一些边,使得非平面图转化为平面图?判断方法依赖于平面图的欧拉公式: $v - e + r = 2$,即图中的顶点数与区域数之和减去边数,得到一个拓扑不变量,其值为2。判断平面图的充要条件叫“库拉托夫斯基定理”。

(11) 平面图的着色

“四色猜想”是怎么一个问题呢?它是说:在一个平面或球面上的任何地图都能够最多用四种颜色着色,使得没有两个相邻的国家或地区有相同的颜色。

(12) 最短路径问题

图论的思想和方法,在日常生活和生产实践中有广泛的应用。最常见的应用之一是,在一个网络图中两点之间找捷径,就是求最短路径问题。



① 快递问题。例如一名快递车司机奉命在最短的时间内将一车货物从甲地运往乙地。从甲地到乙地的公路网纵横交错,因此有多种行车路线,这名司机应选择哪条线路呢?

② 中国邮递员问题。一名邮递员负责投递某个街区的邮件,如何为他(她)设计一条最短的投递路线(从邮局出发,经过投递区内每条街道至少一次,最后返回邮局)?由于这一问题是我国管梅谷教授 1960 年首先提出的,所以国际上称之为中国邮递员问题。

(13) 关键路径问题

一项工程任务,大到建造一座大坝、一座体育中心,小至组装一台机床、一台电视机,都要包括许多工序。这些工序相互约束,只有在某些工序完成之后,一个工序才能开始。即它们之间存在完成的先后次序关系,一般认为这些关系是预知的,而且也能够预计完成每个工序所需要的时间。这时工程领导人员迫切希望了解最少需要多少时间才能够完成整个工程项目,影响工程进度的要害工序是哪几个?

(14) 成本控制问题

① 公路成本控制问题。某一地区有若干个主要城市,现准备修建高速公路把这些城市连接起来,使得从其中任何一个城市都可以经高速公路直接或间接到达另一个城市。假定已经知道了任意两个城市之间修建高速公路的成本,那么应如何决定在哪些城市间修建高速公路,使得总成本最小?

② 运输成本控制问题。某种原材料有若干个产地,现在需要将原材料从产地运往若干个使用这些原材料的工厂。假定每个产地的产量和加工厂的需求量已知,单位产品从任一产地到任一工厂的运费已知,那么如何安排运输方案可以使总运输成本最低?

(15) 偶图和对策

① 农民过河问题。一个农民带了一条狗、一只羊和一颗白菜来到河边准备过河。岸边有一艘小船,只允许农民每次带一样东西渡河。如果农民把狗和羊留下,狗就要咬羊;如果把羊和白菜留下,羊就会吃白菜。问农民应该怎样渡河,才不会发生麻烦? 夫妻过河问题:三对夫妻要过河,河中只有一条小船,可容纳两人。每个丈夫都不愿让自己的妻子和另一个男人在一起,除非自己也在场,问如何过河? 若是四对或者五对夫妻,如何过河?

② 课程安排问题。计算机系教学主任准备安排四位教师张、王、李、赵去教四门课:数学、程序、电路和计算机原理。已知张老师能教程序和电路,王老师能教数学和计算机原理,李老师能教数学、程序和电路,赵老师只能教电路。问应该怎样安排,才能使每门课都有教师教,并且每位教师都能教一门胜任的课程? 这就是典型的偶图与对策问题。

那么,到底在什么情况下偶图才存在匹配呢? 下面给出两个判断偶图是否存在匹配的定理。第一条定理是:一个偶图,当且仅当它的第一组顶点中每 k 个顶点(k 是不大于这组顶点总数的自然数)至少邻接到第二组顶点中的 k 个顶点的时候,它才有一个从第一组顶点到第二组顶点的匹配。这个条件又叫作“相异性条件”,是判断匹配存在的充分必要条件。第二条定理是:一个偶图,如果它的第一组顶点中每个顶点至少关联 t 条边(t 是一个不大于第一组顶点总数的自然数),而它的第二组顶点中每个顶点最多关联 t 条边,那么这图存在一个从第一组顶点到第二组顶点的匹配。这是一个判断匹配存在的充分条件,但不是必要条件。

③ 取火柴游戏。一堆火柴有 10 根,选手 a 和 b 轮流取火柴,每次只能取 1 根或 2 根,但是不能不取。哪个选手取到最后 1 根就算得胜。问:应该怎样取才能取胜? 升级版:有两堆火柴,一堆有



40根,另一堆有35根。 a, b 两人轮流取,每次只能从一堆里取,可以取10以内的任意根数,但是不能不取。谁取到最后剩下的根数不超过10,谁就获胜。问怎样才能取胜?

④ 指派问题。一家公司经理准备安排若干名员工去完成若干项任务,每人一项。由于各员工的特点不同,不同的员工完成同一项任务时所获得的回报是不同的。如何分配工作方案可以使总回报最大?

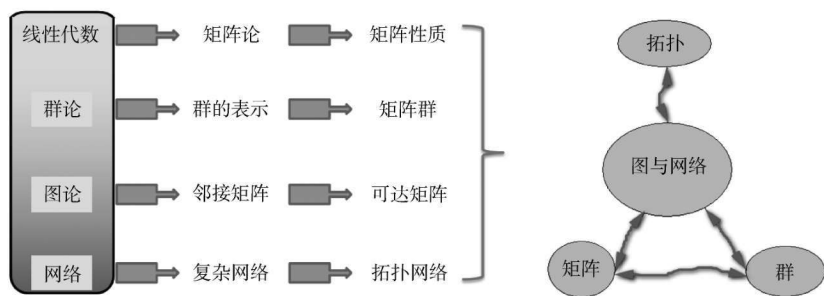
⑤ 胜任工作安排问题。给 n 个工作人员 x_1, x_2, \dots, x_n ,安排 n 项工作 y_1, y_2, \dots, y_n 。 n 个工作人员中每个人能胜任一项或几项工作,但并不是所有工作人员都能从事任何一项工作。比如 x_1 能做 y_1 工作, x_2 能做 y_2, y_3, y_4 工作等。这样便提出一个问题,对所有的工作人员能不能都分配一件他所能胜任的工作?

⑥ 效率优化问题。给 n 个工作人员 x_1, x_2, \dots, x_n ,安排 n 项工作 y_1, y_2, \dots, y_n 。如果每个工作人员工作效率不同,要求工作分配的同时考虑总效率最高。

上面我们总结出了15类常见的问题,但并没有涉及策略研究的问题,比如疾病的诊断和病理的机制解释。这个问题可以这样描述:不同的季节,不同的天气状况,不同的性别,不同的年龄,不同的生活习惯,不同的人种,可能导致某个人患有某些症状的某种疾病。那么,我们如何根据一个人的某些症状来确定其所患何种疾病呢?已知的疾病有几千种,如何区分这些疾病?如何确定某个人具体患有的是哪种疾病或者哪几种疾病呢?这些疾病又是如何产生的呢?网络科学,可以给我们人类的健康提供医学研究的思路和方法。

1.3 矩阵、图、群、拓扑之间的关系

下面我们来说明矩阵、图、群、拓扑之间的关系。



线性代数中主要研究矩阵的性质,群中对称元素的表示是矩阵,研究事物之间的联系有邻接矩阵,那么,矩阵与网络之间是什么关系?怎么分析一个网络图的性质?如何绘制一个网络图?借助什么工具?如何使用工具研究拓扑网络的性质?上图给出了图与网络,和矩阵、群、拓扑之间的关系。首先,对于抽象群的同构映射来说,只要能找到这些对称群同构的一般先行矩阵群(即所谓表示),就可以从矩阵群的结构知道相应对称群的结构,获得对应系统的许多对称性质和演化规律。

(1) 说明群与矩阵的关系

通过群论知识我们知道,空间的对称操作只有四种,绕一个固定点的反演、绕固定轴的转动、对一个镜面进行反映、沿着某个方向进行平移。每一种操作,都可以用矩阵进行表示。我们以常



见的旋转操作为例来说明群的矩阵表示。对处于三维右手直角坐标系中的物体来说,有两种操作方式,一种是转动物体,这种体系描述称为主动描述。另一种是物体不动,转动坐标系,这种体系描述称之为被动描述。现在,让直角坐标系 $O-xyz$ 绕着 x 轴发生转动,转动的角度为 φ ,则转动后的坐标系为 $O-x'y'z'$ 。如果画图,根据三角形关系,很快就会得到下面的结果:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi \\ 0 & \sin \varphi & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

此时的操作矩阵为:

$$\widehat{R}(x) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi \\ 0 & \sin \varphi & 1 \end{pmatrix}$$

同理,我们可以推导出其他的两种情况:

$$\widehat{R}(y) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \varphi & 0 & \cos \varphi \end{pmatrix} \text{ 和 } \widehat{R}(z) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

我们可以对上面的矩阵求其行列式的值,比如:

$$\left| \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right| = \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi = 1$$

对于操作矩阵的行列式为 1 的转动,称为正当转动,行列式为 -1 的转动,称为非正当转动。

对于正当转动,绕任意轴转动角的矩阵 A ,可以用并矢 A 表示为:

$$\vec{A} = \hat{u}\hat{u} + (\vec{I} - \hat{u}\hat{u})\cos \varphi + (\vec{I} \times \hat{u})\sin \varphi$$

式中 $\vec{I} = \hat{i}\hat{i} + \hat{j}\hat{j} + \hat{k}\hat{k}$

而 \hat{u} 是沿着某转动轴的单位矢量,若为绕 x 轴,则 $\hat{u} = \hat{i}$ 。

对于非正当转动,绕任意轴转动角的矩阵 A ,可以用并矢 A 表示为:

$$\vec{A} = -\hat{u}\hat{u} + (\vec{I} - \hat{u}\hat{u})\cos \varphi + (\vec{I} \times \hat{u})\sin \varphi$$

一般情况下,可以将并矢 A 写成:

$$\begin{aligned} \vec{A} &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \hat{i}\hat{i} & \hat{i}\hat{j} & \hat{i}\hat{k} \\ \hat{j}\hat{i} & \hat{j}\hat{j} & \hat{j}\hat{k} \\ \hat{k}\hat{i} & \hat{k}\hat{j} & \hat{k}\hat{k} \end{pmatrix} \\ &= a_{11} \hat{i}\hat{i} + a_{12} \hat{i}\hat{j} + a_{13} \hat{i}\hat{k} + a_{21} \hat{j}\hat{i} + a_{22} \hat{j}\hat{j} + a_{23} \hat{j}\hat{k} + a_{31} \hat{k}\hat{i} + a_{32} \hat{k}\hat{j} + a_{33} \hat{k}\hat{k} \end{aligned}$$

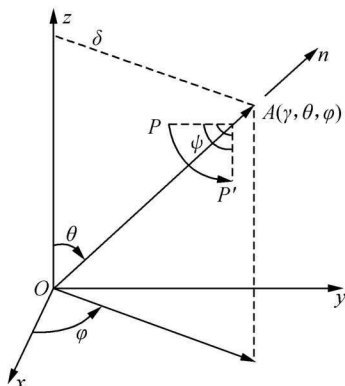


这里的乘法,显然不是通常意义上的矩阵乘法,叫作 Hadamard 乘积。

事实上,如果给出直角坐标系中任意轴的方向余弦为:

$$\begin{cases} l = \sin \theta \cos \varphi \\ m = \sin \theta \sin \varphi \\ n = \cos \theta \end{cases}$$

式中的角度 θ, φ 如下图所示:



则绕任意轴转动角度为 ψ 时,其转动矩阵可以表示为:

$$\begin{aligned} \widehat{R}(\psi, lmn) &= \widehat{R}_a^{-1} \widehat{R}_k(\psi) \widehat{R}_a \\ &= \begin{pmatrix} \cos \psi + l^2(1 - \cos \psi) & lm(1 - \cos \psi) - n \sin \psi & ln(1 - \cos \psi) + m \sin \psi \\ lm(1 - \cos \psi) + n \sin \psi & \cos \psi + m^2(1 - \cos \psi) & mn(1 - \cos \psi) - l \sin \psi \\ ln(1 - \cos \psi) - m \sin \psi & mn(1 - \cos \psi) + l \sin \psi & \cos \psi + n^2(1 - \cos \psi) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

如果采用纯角度表示,为下面的矩阵乘积:

$$\begin{aligned} \Gamma(\psi, \hat{n}) &= R(-\theta, \hat{a}) R(\psi, \hat{k}) R(\theta, \hat{a}) \\ &= R(-\theta, \hat{j}) R(-\varphi, \hat{k}) R(\psi, \hat{k}) R(\theta, \hat{j}) R(\varphi, \hat{k}) \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\theta) & 0 & \sin(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta) & 0 & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) & 0 \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\psi) & \sin(\psi) & 0 \\ -\sin(\psi) & \cos(\psi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\theta) & 0 & -\sin(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin(\theta) & 0 & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & \sin(\varphi) & 0 \\ -\sin(\varphi) & \cos(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

显然,上面的计算中,绕着轴 \hat{a} 的转动是互逆的,即

$$R(-\theta, \hat{a}) = R^{-1}(\theta, \hat{a})$$

由于 n 轴与 z 轴构成一个平面,这里的 \hat{a} 轴,是垂直于该平面且过 O 点的轴。

上面的推导基于这样的两步操作,首先,将 n 轴绕 \hat{a} 轴转动 $-\theta$ 到 z 轴,绕 z 轴转动角度 ψ 后,再将 n 轴转回原来的位置。



而绕 \hat{a} 轴转动 $-\theta$ 角度的操作, 相当于先绕 z 轴转动 $-\phi$ 角度, 转至 xOz 平面内, 再绕 y 轴转动 $-\theta$ 角度, 转至 z 轴。

这里用到了并矢计算, 下面简单介绍一下。

单位矢量的列向量表示为:

$$\hat{i} = [1, 0, 0] = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \hat{j} = [0, 1, 0] = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \hat{k} = [0, 0, 1] = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

根据并矢的张量积定义, 我们可以分别得到并矢空间中各个基本并矢元:

$$\begin{aligned} \hat{i}\hat{i} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes (1 \ 0 \ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{i}\hat{j} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes (0 \ 1 \ 0) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{i}\hat{k} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes (0 \ 0 \ 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{j}\hat{i} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes (1 \ 0 \ 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{j}\hat{j} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes (0 \ 1 \ 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{j}\hat{k} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes (0 \ 0 \ 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{k}\hat{i} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes (1 \ 0 \ 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{k}\hat{j} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes (0 \ 1 \ 0) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{k}\hat{k} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes (0 \ 0 \ 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

上面给出了我们所需要的 9 个基本的并矢, 构成并矢空间的基本张量基, 或者叫作并矢的标准基。下面举例来说明现实中常见的角度限定, 这在网络上随处可见的。