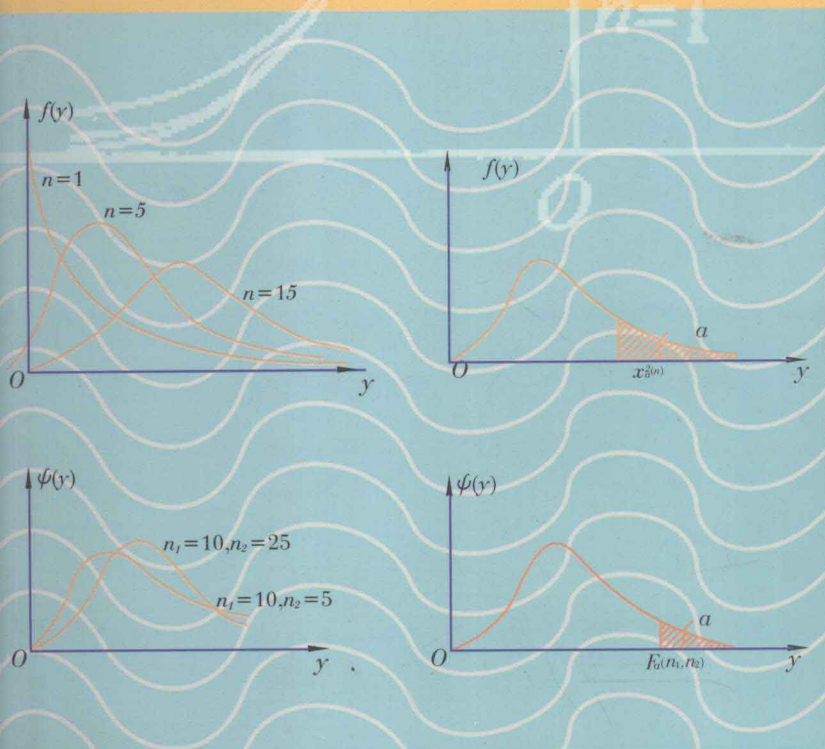


吴有炜 著

$h(t)$

$n \rightarrow \infty$ (正态)

试验设计与数据处理



◆ 苏州大学出版社

试验设计与数据处理

吴有炜 著

苏州大学出版社

内 容 简 介

本书结合试验设计与数据处理工作的实际需要,比较全面地介绍了试验设计和数据处理常用的方法及其理论背景,每种方法尽可能结合实例,介绍 SAS 软件相应的应用程序,强调培养统计应用的实际操作能力。

本书可供大专院校作为研究生或本科生相关课程的教材与教学参考书,亦可供广大从事试验工作及数据分析处理工作的有关人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

试验设计与数据处理/吴有炜著. —苏州:苏州大学出版社, 2002. 3

ISBN 7-81037-940-2

I. 试… II. 吴… III. ①试验设计(数学)—高等学校—教材②数据处理—高等学校—教材
IV. O212.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 010681 号

试验设计与数据处理

吴有炜 著

责任编辑 陈孝康

苏州大学出版社出版发行

(地址:苏州市干将东路 200 号 邮编:215021)

宜兴文化印刷厂印装

(地址:宜兴市南漕镇 邮编:214217)

开本 787×1092 1/16 印张 26.75 字数 668 千

2002 年 3 月第 1 版 2002 年 3 月第 1 次印刷

印数 1—3550 册

ISBN 7-81037-940-2/O·44(课) 定价:45.50 元

苏州大学版图书若有印装错误,本社负责调换

苏州大学出版社营销部 电话:0512-7258815

前 言

“试验设计与数据处理”作为工科研究生课程,是概率论数理统计、计算数学与计算机应用相结合的应用性分支学科. 试验设计与数据处理方法近年来在科研与生产实践中获得了广泛的应用,其原因一是它在高效率获取信息与充分利用信息方面的重要作用;其二是计算机技术的普及,统计软件如 SAS、SPSS 的推广应用,为数据处理方法的广泛应用提供了便捷有力的计算手段. 上述两个原因使本课程具有强烈的应用背景和旺盛的生命力.

本教材应用背景广泛,涉及内容丰富,包含了大量实用方法,并将 SAS 软件与实例紧密结合,强调培养学生统计应用的实际操作能力,有很强的指导性和实用性. 在方法的理论背景部分,本教材尽可能以几何直观理解代替推导的严谨性,或与解析推导证明并存,以适合工科院校的教学特点,利于学生理解掌握.

全书分为十七章,前二章矩阵代数、概率论与抽样分布除对有关内容作一简单回顾外,还补充了一些内容,为以后公式的推导铺垫了必要的基础. 本书在第三、四章介绍了统计推断、方差分析和协方差分析. 在第五、七、八、九、十章介绍了试验设计常用的方法如均匀设计、正交试验设计、单纯形优化设计、正交回归设计和析因设计,分析了各种方法的特点、应用条件与适用范围. 在第六章比较详尽地介绍了回归分析,包括最小二乘估计、显著性检验、逐步回归、复共线性和残差分析等,第十一章介绍了测试误差,在第十二章到第十六章多指标综合评判内容部分包括了主成分分析法和因子分析法、聚类分析和判别分析、模糊综合评判以及典型相关分析. 在数据处理各章中结合方法,利用范例介绍了 SAS 软件相关程序的应用. 第十七章介绍了处理数据最有力的 SAS 软件系统和常用程序. 每章配有习题和上机实习题. 书后附有必要的各种统计用表、数据统计处理常用术语中英文对照及习题答案.

本书是吴有炜副教授根据多年来给无锡轻工大学(现江南大学)研究生讲授的“试验设计与数据处理”课程和部分院系本科生相应选修课程的讲义修订、补充而成,信息量多于实际课程学时所包含的内容,以供今后试验设计与数据处理实际工作备查,因此也可以作为数据处理分析的科研人员的参考书.

参加此书编写和整理校对工作的还有王茂南、费文滔、刘琪老师. 徐振源教授、马恒新教授审阅了全稿.

面向 21 世纪的新教材应该是多模式、多品种、高起点、宽基础的,此书是针对我校研究生教学的具体情况在这方面所作的有益探索和尝试. 书中不足之处,请读者和同行指正.

著者

2002 年元月

目 录

第一章 矩阵代数	
第一节 定义	(1)
第二节 行列式、矩阵的逆和秩	(3)
第三节 向量的内积、方阵的特征值和特征向量	(5)
第四节 正定阵、非负定阵	(8)
第五节 线性空间和线性子空间上的投影阵	(10)
第二章 概率论与抽样分布	
第一节 随机事件与概率	(12)
第二节 随机变量及其分布	(14)
第三节 随机变量的数字特征	(16)
第四节 多维随机向量	(19)
第五节 随机向量的数字特征	(24)
第六节 多维正态分布	(27)
第七节 样本与抽样分布	(32)
第三章 统计推断	
第一节 参数的点估计与估计量的评选标准	(39)
第二节 参数的区间估计	(43)
第三节 假设检验	(48)
第四章 方差分析和协方差分析	
第一节 单因素试验的方差分析	(58)
第二节 双因素试验的方差分析	(66)
第三节 协方差分析	(71)
第四节 利用 SAS 软件进行方差分析和协方差分析	(74)
第五章 正交试验设计	
第一节 正交表介绍	(85)
第二节 二水平正交试验和分批试验	(87)
第三节 多水平正交试验和水平趋势图	(93)
第四节 正交试验的优良性	(97)
第五节 突出重点的混合水平正交试验	(99)
第六节 正交表的灵活安排	(103)
第七节 正交试验中的多指标综合	(107)
第八节 可计算性正交试验	(109)

第六章 回归分析	
第一节 回归分析概念	(115)
第二节 多元线性回归的最小二乘估计	(118)
第三节 多元线性回归模型的检验	(123)
第四节 利用 SAS 软件进行回归分析	(126)
第五节 最优回归方程和逐步回归法	(129)
第六节 多项式回归	(133)
第七节 二次响应面分析法	(135)
第八节 非线性回归	(143)
第九节 复共线性	(148)
第十节 残差分析	(154)
第七章 回归正交设计	
第一节 正交设计的概念	(170)
第二节 正交多项式回归	(171)
第三节 一次回归的正交设计	(178)
第四节 一次回归正交设计的应用与快速登高法	(181)
第五节 多元二次回归的正交组合设计	(187)
第八章 均匀设计	
第一节 均匀设计表	(197)
第二节 用均匀设计表安排试验	(198)
第三节 试验结果的分析	(199)
第九章 单纯形优化设计	
第一节 单纯形优化法的原理	(202)
第二节 设计单纯形优化试验的一些考虑	(203)
第三节 双水平单纯形优化法	(207)
第十章 析因试验设计	
第一节 析因试验设计法	(209)
第二节 随机化区组试验设计法	(211)
第三节 分割试验设计法	(212)
第四节 拉丁区组	(217)
第五节 正交拉丁区组	(219)
第六节 平衡不完全区组	(220)
第七节 重复试验	(222)
第八节 试验设计方法的综合应用	(225)
第十一章 测试误差	
第一节 绝对误差和相对误差	(229)
第二节 随机误差、系统误差和过失误差	(229)
第三节 随机误差的估计	(230)
第四节 误差的传递	(232)

第五节	系统误差的检验	(233)
第六节	过失误差的检验	(234)
第十二章	多指标综合评价概论	
第一节	综合评价方法概述	(239)
第二节	评价指标的选取	(241)
第三节	指标无量纲化方法	(246)
第四节	指标赋权方法	(251)
第五节	指标评价值的综合方法	(255)
第十三章	主成分分析法和因子分析法	
第一节	主成分分析法原理	(261)
第二节	用主成分分析进行综合评价的实施步骤	(263)
第三节	利用 SAS 软件进行主成分分析	(268)
第四节	因子分析的数学模型	(271)
第五节	利用 SAS 软件进行因子分析	(273)
第十四章	模糊综合评价	
第一节	模糊集合与隶属度	(285)
第二节	模糊综合评价的基本步骤	(286)
第三节	模糊单指标评价	(290)
第四节	多个模糊评价指标的合成	(295)
第五节	模糊综合评价结果向量的分析	(297)
第六节	多级模糊综合评价	(300)
第十五章	聚类分析与判别分析	
第一节	综合评价的系统聚类法	(303)
第二节	利用 SAS 软件进行聚类	(309)
第三节	动态聚类	(315)
第四节	利用 SAS 软件进行动态聚类	(317)
第五节	判别分析的数学模型与判别方法	(319)
第六节	利用 SAS 软件进行判别分析	(323)
第十六章	典型相关分析	
第一节	典型相关分析的数学模型	(337)
第二节	利用 SAS 软件进行典型相关分析	(339)
第十七章	SAS 系统及常用程序简介	
第一节	SAS 显示系统简介	(345)
第二节	常用 SAS 语句简介	(346)
第三节	常用简单 SAS 操作符和 SAS 函数	(351)
第四节	常用 SAS 简单过程	(353)
附表 1	标准正态分布表	(357)
附表 2	χ^2 分布表	(358)
附表 3	t 分布表	(360)

附表 4	F 分布表	(361)
附表 5	正交表	(367)
附表 6	正交多项式表	(374)
附表 7	均匀设计表	(382)
附表 8	随机数表	(387)
附表 9	正交拉丁方	(388)
附表 10	平衡不完全区组(BIB)	(389)
附表 11	$d(m, l)$ 表	(390)
附表 12	秩和检验表	(390)
附表 13	戈罗伯斯检验表	(391)
附表 14	狄克松检验表	(391)
附录 1	数据统计处理常用术语中英文对照	(392)
附录 2	磷脂酶 D 催化反应中溶剂化效应的综合表征	(410)
部分习题答案		(416)

第一章 矩阵代数

矩阵代数是多元分析的重要工具,在本书中应用很广.本书假定读者已具备一定的代数基础,故先对必要的知识作一个简单的回顾,同时为了学习的方便,增加了一些不是每本线性代数教科书都能找到的内容.

本章介绍矩阵、行列式、矩阵的逆、特征根及特征向量的定义和性质,向量组的秩、线性相关性及向量的内积,讨论了线性空间和线性空间上的投影阵.

第一节 定 义

将 $n \times p$ 个实数 $a_{11}, a_{12}, \dots, a_{np}$ 排成一个矩形表

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1p} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2p} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{np} \end{bmatrix},$$

则称为 $n \times p$ 矩阵,常记为 $A = (a_{ij})$,其中 $a_{ij} (i=1, 2, \dots, n; j=1, 2, \dots, p)$ 是 A 的元素.当 $n=p$ 时, A 称为 n 阶方阵.若 $p=1$,称为列向量;若 $n=1$,称为行向量,为与列向量区分,记为 $a' = (a_{11}, \dots, a_{1p})$.本书约定:若不特别说明,记号 a 均指列向量.若 A 的元素全为零,称 A 为零矩阵,记作 $A=0$.若 A 是方阵, a_{11}, \dots, a_{nn} 称为它的对角线元素,其他元素 $\{a_{ij}, i \neq j\}$ 称为 A 的非对角线元素;若 A 的非对角线元素全为零,称 A 为对角阵,简记为 $A = \text{diag}(a_{11}, \dots, a_{nn})$,进一步,若 $a_{11} = \dots = a_{nn} = 1$,称 A 为 n 阶单位阵,简记为 $A = I_n$,或 $A = I$ (I 的阶数由上下文可知).

若 A 为 $n \times p$ 阵,它的转置 A' 是 $p \times n$ 阵,是将 A 的行(列)变成列(行)而得到的,即

$$A' = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{n1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{1p} & a_{2p} & \cdots & a_{np} \end{bmatrix}.$$

若 A 是方阵,且 $A' = A$,则称 A 为对称阵;若方阵 $A = (a_{ij})$ 的元素 $a_{ij} = 0$,对一切 $i < j$ 成立,则称 A 为下三角阵;若 $a_{ij} = 0$,对一切 $i > j$ 成立,则 A 称为上三角阵.显然,同时是上、下三角阵的方阵必为对角阵.关于矩阵的运算定义如下:

若 A 和 B 都是 $n \times m$ 阵, α 为一常数,则

$$A + B = (a_{ij} + b_{ij}), \alpha A = (\alpha a_{ij});$$

若 A 和 B 分别是 $p \times q$ 和 $q \times r$ 阵,则 AB 的第 i 行第 j 列 ($i=1, 2, \dots, p; j=1, 2, \dots, r$)

的元素 C_{ij} 等于 A 的第 i 行的元素与 B 的第 j 列的对应元素的乘积的和, 即

$$C_{ij} = \left(\sum_{k=1}^q a_{ik} b_{kj} \right)_{p \times r}.$$

上述三个运算符合下述规律:

$$A + (-1)A = 0,$$

$$(AB)' = B'A',$$

$$(A')' = A,$$

$$(A+B)' = A' + B',$$

$$A(BC) = (AB)C,$$

$$A(B+C) = AB + AC,$$

$$(B+C)A = BA + CA,$$

$$AI = IA = A,$$

$$\alpha(A+B) = \alpha A + \alpha B,$$

$$\alpha(AB) = (\alpha A)B = A(\alpha B).$$

若 $AA' = A'A = I$, 则方阵 A 称为正交阵.

若 a 是一个 p 维(列)向量, 则 $a'a = \sum_{i=1}^p a_i^2$ 是一个数, 而 aa' 是一个 p 阶的方阵.

设 $A = (a_{ij})$ 是一个 $p \times q$ 阵, 将它分成四块, 使 $A_{11}: k \times l, A_{12}: k \times (q-l), A_{21}: (p-k) \times l, A_{22}: (p-k) \times (q-l)$, 且

$$B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}$$

与 A 有相同的分块, 则

$$A+B = \begin{bmatrix} A_{11}+B_{11} & A_{12}+B_{12} \\ A_{21}+B_{21} & A_{22}+B_{22} \end{bmatrix}.$$

若 C 为 $q \times r$ 阵, 它分成 $C_{11}: l \times m, C_{12}: l \times (r-m), C_{21}: (q-l) \times m, C_{22}: (q-l) \times (r-m)$. 则由矩阵乘法的定义, 有

$$\begin{aligned} AC &= \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} A_{11}C_{11} + A_{12}C_{21} & A_{11}C_{12} + A_{12}C_{22} \\ A_{21}C_{11} + A_{22}C_{21} & A_{21}C_{12} + A_{22}C_{22} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

这就是说, (前面)矩阵 A 列的分法与(后面)矩阵 C 行的分法一致后, 可以把每个块看成一个“元素”, A 和 C 看成“ 2×2 矩阵”, 然后按通常的乘法去进行, 就得上式的右端.

第二节 行列式、矩阵的逆和秩

1. 行列式

若 A 为 n 阶方阵, 记

$$|A| = \sum_k \varepsilon_k a_{1j_1} a_{2j_2} \cdots a_{nj_n},$$

其中 (j_1, \dots, j_n) 为 $(1, \dots, n)$ 的任一置换, \sum_k 是对可能的 $n!$ 个置换求和, $\varepsilon_k = 1$ 或 -1 相应地取决于 (j_1, \dots, j_n) 是偶置换或奇置换.

$|A|$ 称为 A 的行列式.

行列式具有下面一些性质:

(1) $|A'| = |A|$;

(2) 若 A 的某行(或列)为零向量, 或 A 的两行(或列)相等, 则 $|A| = 0$;

(3) $|aA| = a^n |A|$, 其中 n 为 A 的阶数;

(4) 若 A 的行(列)向量组线性相关, 则 $|A| = 0$;

(5) 若将 A 的两行(或列)互换, 所得矩阵之行列式等于 $-|A|$;

(6) 若将 A 的某一行(或列)所有元素乘上常数 $k (k \neq 0)$, 所得矩阵之行列式等于 $k|A|$;

(7) 若将 A 的某一行(或列)乘上一个常数加到另一行(或列)相应的元素上, 所得矩阵的行列式等于 $|A|$;

(8) 若 A_1, \dots, A_k 均为 n 阶方阵, 则

$$|A_1 A_2 \cdots A_k| = \prod_{i=1}^k |A_i|;$$

(9) $\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & A_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A_{11} & 0 \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix} = |A_{11}| |A_{22}|$, 其中 A_{11}, A_{22} 为方阵;

(10) 若 A 为正交阵, 则 $|A| = \pm 1$;

(11) 若 A 为三角阵(无论上或下三角阵), 则 $|A| = \prod_i a_{ii}$;

(12) 若 A 为 n 阶方阵, 将其第 i 行和第 j 列划去所得子矩阵的行列式, 称为元素 a_{ij} 的余子式, a_{ij} 的代数余子式 A_{ij} 是 a_{ij} 的余子式再乘上 $(-1)^{i+j}$, 则

$$|A| = \sum_{j=1}^n a_{ij} A_{ij} = \sum_{i=1}^n a_{ij} A_{ij}.$$

2. 逆矩阵

设 A 为 n 阶方阵, 若 $|A| \neq 0$, 则称 A 为非奇异阵; 反之, 若 $|A| = 0$, 则称 A 为奇异阵.

若 A 为 n 阶非奇异阵, 则存在唯一的 n 阶方阵 B , 使

$$AB = BA = I_n,$$

B 称为 A 的逆, 并记 $B = A^{-1}$, B 的元素 b_{ij} 可以表示成

$$b_{ij} = A_{ji} / |A|.$$

上述公式一般只有理论价值,在多元分析中求逆阵是通过矩阵的初等变换来实现的.矩阵的初等变换还可用于求矩阵的行列式.

逆矩阵有如下基本性质:

- (1) $(A')^{-1} = (A^{-1})'$;
- (2) 若 A 和 C 均为 n 阶非奇异阵,则 $(AC)^{-1} = C^{-1}A^{-1}$;
- (3) $|A^{-1}| = |A|^{-1}$;
- (4) 若 A 是正交阵,则由 $AA' = I$,知 $A^{-1} = A'$;若 $A = \text{diag}(a_{11}, \dots, a_{mm})$,且 $a_{ii} \neq 0, i = 1, 2, \dots, n$,则 $A^{-1} = \text{diag}(a_{11}^{-1}, \dots, a_{mm}^{-1})$;
- (5) 上(下)三角阵的逆阵仍为上(下)三角阵.

3. 向量组的线性相关性,向量组和矩阵的秩

n 维向量组 $A = \{a_1, a_2, \dots, a_k\}$ 线性无关 \Leftrightarrow

方程组 $x_1a_1 + x_2a_2 + \dots + x_ka_k = 0$ 只有零解 \Leftrightarrow

$\{a_1, a_2, \dots, a_k\}$ 中任一向量均不能被其余向量线性表示 \Leftrightarrow

向量组的秩 $\text{rank}(A) = k$ (满秩).

n 维向量组 $A = \{a_1, a_2, \dots, a_k\}$ 线性相关 \Leftrightarrow

方程组 $x_1a_1 + x_2a_2 + \dots + x_ka_k = 0$ 有非零解 \Leftrightarrow

$\{a_1, a_2, \dots, a_k\}$ 中至少有一个向量可被其余向量线性表示 \Leftrightarrow

向量组秩 $\text{rank}(A) < k$ (非满秩).

向量组 $A = \{a_1, a_2, \dots, a_k\}$ 不同的最大线性无关部分组中所含向量个数相同,这个数称为向量组的秩,记成 $\text{rank}(A)$.

设 A 为 $n \times p$ 矩阵,若存在 A 的一个 r 阶子方阵的行列式不为 0,而 A 的一切 $(r+1)$ 阶子方阵的行列式均为零,则称 A 的秩为 r ,记作 $\text{rank}(A) = r$.

矩阵的秩也等于其最大线性无关行向量组中向量的个数及最大线性无关列向量组中向量的个数.即矩阵的秩等于矩阵行(或列)向量组的秩,均记成 $\text{rank}(A)$:

- (1) $\text{rank}(A) = 0 \Leftrightarrow A = 0$;
- (2) 若 A 为 $n \times p$ 阵,则 $0 \leq \text{rank}(A) \leq \min(n, p)$;
- (3) $\text{rank}(A) = \text{rank}(A')$;
- (4) $\text{rank} \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix} = \text{rank} \begin{bmatrix} 0 & A \\ B & 0 \end{bmatrix} = \text{rank}(A) + \text{rank}(B)$;
- (5) $\text{rank}(AB) \leq \min(\text{rank}(A), \text{rank}(B))$;
- (6) $\text{rank}(A+B) \leq \text{rank}(A) + \text{rank}(B)$;
- (7) 若 A 和 C 为非奇异阵,则 $\text{rank}(ABC) = \text{rank}(B)$.

第三节 向量的内积、方阵的特征值和特征向量

1. 向量的内积

设有 n 维向量

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}.$$

定义 $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} \stackrel{\text{def}}{=} x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_n y_n = \mathbf{x}' \mathbf{y} = \mathbf{y}' \mathbf{x}$, $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$ 称为向量 \mathbf{x} 与向量 \mathbf{y} 的内积. 内积满足下列运算规律(其中 $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$ 为 n 维向量, λ 为实数):

- (i) $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = \mathbf{y} \cdot \mathbf{x}$;
- (ii) $(\lambda \mathbf{x}) \cdot \mathbf{y} = \lambda(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}) = \mathbf{x} \cdot (\lambda \mathbf{y})$;
- (iii) $(\mathbf{x} + \mathbf{y}) \cdot \mathbf{z} = \mathbf{x} \cdot \mathbf{z} + \mathbf{y} \cdot \mathbf{z}$.

定义 $\|\mathbf{x}\| \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}} = \sqrt{\mathbf{x}' \mathbf{x}} = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2}$, $\|\mathbf{x}\|$ 称为 n 维向量 \mathbf{x} 的长度(或模).

向量的长度具有下述性质:

- (1) 非负性: 当 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ 时, $\|\mathbf{x}\| > 0$; $\mathbf{x} = \mathbf{0} \Leftrightarrow \|\mathbf{x}\| = 0$;
- (2) 齐次性: $\|\lambda \mathbf{x}\| = |\lambda| \|\mathbf{x}\|$;
- (3) 三角不等式: $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$.

当 $\|\mathbf{x}\| = 1$ 时, 称 \mathbf{x} 为单位向量.

令 $\mathbf{x}^0 = \frac{1}{\|\mathbf{x}\|} \mathbf{x}$, 称 \mathbf{x}^0 为 \mathbf{x} 的单位化(向量), 易见 \mathbf{x}^0 是单位向量, 且有 $\mathbf{x} = \|\mathbf{x}\| \mathbf{x}^0$.

当 $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}, \mathbf{y} \neq \mathbf{0}$ 时,

$$\langle \hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}} \rangle = \arccos \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|} = \arccos \mathbf{x}^0 \cdot \mathbf{y}^0 \quad (0 \leq \langle \hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}} \rangle \leq \pi)$$

称为 n 维向量 \mathbf{x} 与 \mathbf{y} 的夹角. 向量 \mathbf{x} 与 \mathbf{y} 夹角的余弦

$$\cos \langle \hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}} \rangle = \mathbf{x}^0 \cdot \mathbf{y}^0 = \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}}{\|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|}.$$

当 $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = 0$ (即 $\mathbf{x}' \mathbf{y} = 0$) 时, 称向量 \mathbf{x} 与 \mathbf{y} 正交.

对于 n 维向量 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)'$, 记 $\bar{x} = \frac{1}{n}(x_1 + x_2 + \cdots + x_n)$, 令 $\mathbf{x}^* = (x_1 - \bar{x}, x_2 - \bar{x}, \cdots, x_n - \bar{x})'$, 称 \mathbf{x}^* 为向量 \mathbf{x} 的中心化(向量), 本书约定记号 \mathbf{x}^0 和 \mathbf{x}^* 出现之处均分别表示向量 \mathbf{x} 的单位化和向量 \mathbf{x} 的中心化.

2. 方阵的特征值和特征向量

若 A 为 n 阶方阵, 则 $|A - \lambda I| = 0$ 是 λ 的 n 次方程, $|A - \lambda I|$ 称为 A 的特征多项式, 方程

的 n 个根(可以有重根)称为 A 的特征根(值). 为了强调特征根与 A 的关系, 记作 $\lambda_1(A), \dots, \lambda_n(A)$, 也可简记为 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. λ 若是 A 的特征根, 则 $|A - \lambda I| = 0$, 故矩阵 $A - \lambda I$ 退化, 从而存在 n 维非零向量 x_i , 使得 $Ax_i = \lambda x_i$ 或 $(A - \lambda I)x_i = 0$, x_i 称为对应于 λ_i 的 (A 的) 特征向量, 今后总设 $x_i' x_i = 1$, 在需要分辨的场合 A 的特征值 λ_i 记成 $\lambda_i(A)$.

特征值与特征向量是两个极为重要的概念, 它们在响应面分析、判别分析、主成分分析、典型相关分析等方法中起到了重要的作用. 下面介绍有关的一些性质.

(1) 若 A 为实对称阵, 则 A 的特征根全是实数, 故可以按大小排序: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{n-1} \geq \lambda_n$, 若 $\lambda_i \neq \lambda_j$, 则相应的特征向量 x_i 与 x_j 必正交, 即 $x_i' x_j = 0$.

(2) 相似变换不改变方阵的特征值, 即:

若 A, B 为 n 阶方阵, 且存在可逆阵 P , 使 $P^{-1}AP = B$, 则 A 与 B 的特征多项式满足

$$|A - \lambda I| = |B - \lambda I|,$$

从而 A 与 B 有相同的特征多项式.

(3) 设 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 为 n 阶方阵 A 的特征值(允许相同), 则 $|A| = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n$.

A 非奇异 $\Leftrightarrow \lambda_i \neq 0 (i = 1, 2, \dots, n)$.

证明: 因为 $|A - \lambda I| = \prod_{i=1}^n (\lambda_i - \lambda)$, 所以特征多项式的常数项为 $\prod_{i=1}^n \lambda_i$, 可在特征多项

式中令 $\lambda = 0$ 而得到, 将 $\lambda = 0$ 代入, $|A - \lambda I| = |A|$, 所以 $|A| = \prod_{i=1}^n \lambda_i$.

因为 A 非奇异 $\Leftrightarrow |A| \neq 0$, 所以 A 非奇异 $\Leftrightarrow \lambda_i \neq 0, i = 1, 2, \dots, n$.

(4) 设 A 的特征根为 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, 则 cA 的特征根为 $c\lambda_1, \dots, c\lambda_n$; $A - cI$ 的特征根为 $\lambda_1 - c, \dots, \lambda_n - c$; A^{-1} 的特征根为 $\lambda_1^{-1}, \dots, \lambda_n^{-1}$.

证明: 很容易由特征根定义加以证明, 如 x_i 为 A 相应于非零特征根 λ_i 的特征向量, 则 $Ax_i = \lambda_i x_i$, 上式两边同时左乘 $\frac{1}{\lambda_i} A^{-1}$, 得

$$\lambda_i^{-1} x_i = A^{-1} x_i,$$

所以 x_i 是 A^{-1} 相应于特征根 λ_i^{-1} 的特征向量. 类似可证另一个结论.

(5) 若 A 为正交阵, 则 $\|Ax\| = \|x\|$; 进而, 若 λ_i 是 A 的特征值, 则 $|\lambda_i| = 1, i = 1, 2, \dots, n$.

证明: $\|Ax\|^2 = (Ax)'(Ax) = x'A'Ax = x'Ix = x'x = \|x\|^2$; 因为正交变换前后长度保持不变, 设 A 的任一特征值 λ_i 所对应特征向量为 x_i , 则 $Ax_i = \lambda_i x_i$, 因为 $\|x_i\| = \|Ax_i\| = \|\lambda_i x_i\| = |\lambda_i| \|x_i\|$, 所以 $|\lambda_i| = 1, i = 1, 2, \dots, n$.

(6) $A = \text{diag}(a_1, \dots, a_n)$ 则 a_1, \dots, a_n 为 A 的特征根, $e'_1 = (1, \dots, 0, 0), \dots, e'_n = (0, \dots, 0, 1)$ 为对应的特征向量.

证明: 由定义立得.

(7) 若 A 是三角阵(无论上三角阵或下三角阵), 则 A 的特征根恰为对角线元素.

证明: A 的特征多项式 $|A - \lambda I|$ 是三角阵所对应的行列式, 所以 $|A - \lambda I| = \prod_{i=1}^n (a_{ii} - \lambda)$, 所以 A 的特征根为 $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}$.

(8) 若实对称阵 A 有 r 个相同的特征根 (r 重根), 则相应于这个特征根有 r 个特征向量, 而且这 r 个特征向量可张成一 r 维线性空间, 称为该特征根所对应的特征子空间(该空

间中每一向量都是该特征根所对应的特征向量). 若特征根不同, 则它们相应的特征子空间相互正交.

性质(9)在主成分分析中有重要的应用, 其证明过程为主成分分析一部分内容.

(9) 实对称阵必与对角阵相似, 即对于 n 阶实对称阵 A , 必存在正交阵 P , 使

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_n \end{bmatrix}.$$

证明: 由方程 $|A - \lambda I| = 0$, 解出 A 的各不相同的特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$. 特征值 λ_i 为 r_i 重根, $i = 1, 2, \dots, k, r_1 + r_2 + \dots + r_k = n$. 对每个特征值 λ_i , 由性质(8), 方程 $(A - \lambda_i I)x = 0$ 有 r_i 个线性无关的解向量 $q_{i1}, q_{i2}, \dots, q_{ir_i}$ 作为 λ_i 相应的特征向量, 对 $\{q_{i1}, q_{i2}, \dots, q_{ir_i}\}$ Schmidt 正交化得 λ_i 的 r_i 个两两正交的特征向量 $p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{ir_i}$, 再由性质(1)知 A 不同的特征值 λ_i 与 λ_j 对应的特征向量两两正交. 由此得 n 个两两正交的特征向量. 以这 n 个经单位化的特征向量为列向量得正交阵 P :

$$P = [p_{11}^0 p_{12}^0 \dots p_{1r_1}^0 \mid p_{21}^0 p_{22}^0 \dots p_{2r_2}^0 \mid \dots \mid p_{k1}^0 p_{k2}^0 \dots p_{kr_k}^0],$$

由定义 $AP_{ij}^0 = \lambda_i P_{ij}^0 (i = 1, 2, \dots, k; j = 1, 2, \dots, r_i)$, 这 n 个等式等价于矩阵等式

$$AP = P \text{diag}(\underbrace{\lambda_1, \dots, \lambda_1}_{r_1 \text{ 个}}, \underbrace{\lambda_2, \dots, \lambda_2}_{r_2 \text{ 个}}, \dots, \underbrace{\lambda_k, \dots, \lambda_k}_{r_k \text{ 个}}),$$

P 是正交阵, $P^{-1} = P'$, 即 $P^{-1}AP = P'AP = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_k)$. 证毕.

若 A 是 n 阶方阵, 其对角线元素之和称为迹, 记作 $\text{tr}A$, 即

$$\text{tr}A = a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn}.$$

若 A 的特征根为 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$, 则

$$\text{tr}A = \lambda_1 + \dots + \lambda_n.$$

证明: A 的特征多项式 $|\lambda I - A|$ 是 λ 的 n 次多项式, 因为 λ_i 是 A 的特征根, 所以 $|\lambda I - A|$

$= \prod_{i=1}^n (\lambda - \lambda_i)$, 由此可知 λ^{n-1} 的系数为 $-\sum_{i=1}^n \lambda_i$, 但

$$|\lambda I - A| = \begin{vmatrix} \lambda - a_{11} & -a_{12} & \dots & -a_{1n} \\ -a_{21} & \lambda - a_{22} & & -a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \dots & \lambda - a_{nn} \end{vmatrix}$$

中 λ^{n-1} 的系数, 一定由 n 个对角线元素相乘 $\prod_{i=1}^n (\lambda - a_{ii})$ 而产生, 同时应为 $-\sum_{i=1}^n a_{ii}$, 由多项

式相等的定义知, 则有 $\text{tr}A = \sum_{i=1}^n a_{ii} = \sum_{i=1}^n \lambda_i$. 证毕.

迹还有如下性质:

$$\text{tr}AB = \text{tr}BA,$$

$$\text{tr}A = \text{tr}A',$$

$$\text{tr}(A + B) = \text{tr}A + \text{tr}B.$$

第四节 正定阵、非负定阵

若 A 是 n 阶对称阵, 且对一切 $x \neq 0, x \in \mathbf{R}^n$, 都有 $x'Ax > 0 (< 0)$, 则称 A 是正(负)定阵, 记作 $A > 0 (< 0)$; 若对一切 $x \in \mathbf{R}^n$, 都有 $x'Ax \geq 0$, 则称 A 是非负定阵, 记作 $A \geq 0$.

$A \geq B$ 表示 $A - B \geq 0, A > B$ 表示 $A - B > 0$.

下面介绍正定阵和非负定阵的一些性质:

(1) 一个对称阵是正(负、非负)定的 \Leftrightarrow 它的特征根全是正(负、非负)的.

证明: 对角阵是正(负、非负)定的, 显然当且仅当对角线元素(即矩阵的特征根)全是正(负、非负)数. 而对称阵可以相似对角化, 且相似变换不改变矩阵的特征根, 所以对称阵是正(负、非负)定的充要条件是它的特征根全是正(负、非负)数.

(2) (霍尔维茨定理) 设 A_k 表示 n 阶方阵 A 的左上角的 k 阶方阵:

n 阶实对称阵 A 正定 $\Leftrightarrow |A_k| > 0 (k=1, 2, \dots, n)$;

n 阶实对称阵 A 负定 $\Leftrightarrow (-1)^k |A_k| > 0 (k=1, 2, \dots, n)$.

(3) $BB' \geq 0$ 对于一切矩阵 B 成立.

证明: 因为 $(BB')' = BB'$, 故 BB' 是对称阵, $\forall y, y'BB'y = (B'y)'(B'y) \geq 0$.

由定义, $BB' \geq 0$.

(4) 若 $A > 0$, 则 $A^{-1} > 0$.

证明: $A > 0$, 则 $\lambda_i(A) > 0, i=1, 2, \dots, n$, $|A| = \prod_{i=1}^n \lambda_i(A) \neq 0$, 所以 $\lambda_i(A) \neq 0, i=1, \dots, n$, $\lambda_i^{-1}(A) > 0, i=1, 2, \dots, n$, 所以 $A^{-1} > 0$.

(5) $A \geq 0$, 则 $A > 0$ 当且仅当 $|A| \neq 0$.

证明: $A \geq 0$, 则 $\lambda_i(A) \geq 0, i=1, 2, \dots, n$, $|A| = \prod_{i=1}^n \lambda_i(A) \neq 0$, 所以 $\lambda_i(A) \neq 0, i=1, 2, \dots, n$, 所以 $A > 0$, 反之 $A > 0, \lambda_i(A) > 0, i=1, \dots, n$, 所以

$$|A| = \prod_{i=1}^n \lambda_i(A) > 0.$$

(6) 若 $A > 0, c$ 是正数, 则 $cA > 0$.

证明: $A > 0$, 所以 $\lambda_i(A) > 0, i=1, 2, \dots, n$, 又因为 $c > 0$, 所以 $c\lambda_i(A) > 0, i=1, 2, \dots, n$, 而 $c\lambda_i(A)$ 是 cA 的特征根, 所以 $cA > 0$.

(7) 若 $A > 0$, 将 A 分块为

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix},$$

其中 A_{11} 为方阵, 则 $A_{11} > 0, A_{22} > 0$,

$$A_{11.2} \stackrel{\text{def}}{=} A_{11} - A_{12}A_{22}^{-1}A_{21} > 0, A_{22.1} \stackrel{\text{def}}{=} A_{22} - A_{22}A_{11}^{-1}A_{12} > 0.$$

(8) 若 $A \geq 0 (> 0)$, 则存在 $A^{\frac{1}{2}} \geq 0 (> 0)$, 使得 $A = A^{\frac{1}{2}}A^{\frac{1}{2}}$.

证明: 因为 $A \geq 0 (> 0)$, 所以 $A' = A$ 可以相似对角化, 必存在正交阵 Q , 使

$$Q^{-1}AQ = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \stackrel{\text{def}}{=} \Lambda.$$

式中 $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 为 A 的特征根, Q 的列向量为相应的特征向量, 因为 $Q' = Q^{-1}$, 于是

$$A = Q\Lambda Q'.$$

由性质(1) $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ 均非负, $\Lambda \geq 0$, $\Lambda^{\frac{1}{2}} \stackrel{\text{def}}{=} \text{diag}(\lambda_1^{\frac{1}{2}}, \dots, \lambda_n^{\frac{1}{2}})$, 则 $A^{\frac{1}{2}} \stackrel{\text{def}}{=} Q\Lambda^{\frac{1}{2}}Q'$, 因为 $\Lambda^{\frac{1}{2}} \geq 0$, Q 为正交阵, 相似变换不改变特征根, 所以 $A^{\frac{1}{2}} \geq 0$. 且

$$A^{\frac{1}{2}}A^{\frac{1}{2}} = Q\Lambda^{\frac{1}{2}}Q'Q\Lambda^{\frac{1}{2}}Q' = Q\Lambda Q' = A.$$

$$(9) \text{rank}(B) = \text{rank}(B'B) = \text{rank}(BB') = \text{rank}(B').$$

证明: 由代数知识知 $\text{rank}(B) = \text{rank}(B')$, 故只要证明 $\text{rank}(B) = \text{rank}(B'B)$ 即可. 因为若 $Bx = 0$, 则 $B'Bx = 0$, 则 $x'B'Bx = 0 = (Bx)'(Bx)$, 所以 $Bx = 0$. 综上所述 $Bx = 0$ 与 $B'Bx = 0$ 对应的方程组同解, 所以 $\text{rank}(B) = \text{rank}(B'B)$.

最后我们讨论与特征根有关的极值问题, 它将在主成分分析和典型相关分析、判别分析中用到.

设 A 为 n 阶对称阵, $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ 为其特征根, x_1, \dots, x_n 为相应的标准化(长度为1)的特征向量, 则

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i x_i x_i'.$$

我们欲求

$$\sup_{x \neq 0} x'Ax / x'x = \sup_{\|x\|=1} x'Ax,$$

式中 $x'x = \|x\|^2$. 由于 x_1, \dots, x_n 组成 \mathbf{R}^n 空间中一组标准正交基, \mathbf{R}^n 中任一向量 x 可表示为

$$x = \sum_{i=1}^n a_i x_i, \text{ 从而}$$

$$x'Ax = \sum_{i=1}^n a_i x_i' A \sum_{j=1}^n a_j x_j = \sum_{i=1}^n a_i x_i' \sum_{j=1}^n a_j \lambda_j x_j = \sum_{i=1}^n a_i^2 \lambda_i.$$

其中最后一个等式利用了 $x_i'x_j = 0, i \neq j$ 及 $x_i'x_i = 1, i = 1, 2, \dots$, 于是立即可得

$$\sup_{x \neq 0} x'Ax / x'x = \sup_{\|x\|=1} x'Ax = \sup_{\sum_{i=1}^n a_i^2 = 1} \sum_{i=1}^n a_i^2 \lambda_i = \lambda_1,$$

$$\inf_{x \neq 0} x'Ax / x'x = \inf_{\|x\|=1} x'Ax = \inf_{\sum_{i=1}^n a_i^2 = 1} \sum_{i=1}^n a_i^2 \lambda_i = \lambda_n.$$

对于约束条件下极值问题, 有

$$\sup_{\substack{x'x=0, \\ i=1,2,\dots,k, \\ x \neq 0}} x'Ax / x'x = \sup_{\substack{x'x=0, \\ i=1,2,\dots,k, \\ \|x\|=1}} x'Ax,$$

因为 $x'x_i = 0, i = 1, 2, \dots, k$, 而 x_1, x_2, \dots, x_n 组成 \mathbf{R}^n 中一组标准正交基, 所以 x 可表示为 $x = \sum_{i=k+1}^n a_i x_i$, 即 x 关于 x_1, \dots, x_k 的坐标为零. 因为 $0 = x'x_j = \sum_{i=1}^n a_i x_i'x_j = a_j, j = 1, 2, \dots, k$. 故

$$\sup_{\substack{x'x=0, \\ i=1,2,\dots,k, \\ \|x\|=1}} x'Ax = \sup_{\sum_{i=k+1}^n a_i^2 = 1} \sum_{j=k+1}^n a_j^2 \lambda_j = \lambda_{k+1}.$$