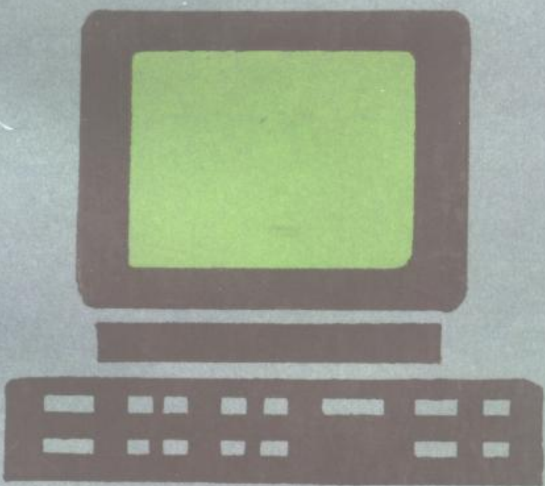
矩阵语言与多元分析

吕纯濂 陈舜华 编著



气象出版社

(京)新登字 046 号

内 容 简 介

本书以精炼的矩阵代数的叙述方法，介绍了方差分析、协方差分析、判别分析、聚类分析、典型相关分析、回归分析、主成份分析及因子分析等多元统计分析方法。对每一种方法先介绍一般概念，接着以全书贯一的数值简例，说明计算步骤和结果，再给出有关理论的说明和推导，最后，结合自然科学和社会科学的实际进行习题作业。此外，本书还介绍了美国阿普特西系统公司的矩阵程序设计语言“高斯”2.0 版本的概要。

本书可作为非数学专业的研究生、高年级本科生的教材，对应用多元统计分析方法的科技工作者也有参考价值。

矩阵语言与多元分析

吕纯濂　陈舜华　编著

责任编辑：杨长新　终审：徐　昭

封面设计：严瑜仲　责任技编：岳景增　责任校对：白　璐

气象出版社出版

（北京西郊白石桥路46号）

北京印刷一厂排版　北京市顺义兴华印刷厂印刷

新华书店总店科技发行所发行　全国各地新华书店经销

1994年 5 月第一版　　1994年 5 月第一次印刷

开本：850×1168　1/32　印张：11.25　字数：170千字

印数：1—1200　　定价：10.60 元

ISBN 7-5029-1555-9/O·0030

前　言

矩阵语言系统是新一代的程序设计语言，目前世界上流行的有GAUSS、APL和SAS/IML 等。本书介绍高斯矩阵程序设计语言系统，该矩阵语言系统只有两个基本数据类型：矩阵和字符串。矩阵包括了向量和单个的数，矩阵间的各种运算可以象类似于书写那样简单地写在程序中，这对用矩阵形式描述的许多运算过程是非常方便的。多元统计分析方法需要进行大量的矩阵运算。

人们可在很短的时间内，用多元统计分析方法来分析他们的观测数据，因为可以通过简单的过程指令，在计算机相应的软件库(如BMDP——生物医学计算机程序、SPSS——社会科学统计库、SAS——统计分析系统等）中获得所需要的统计分析方法。这就允许人们能更好地和更适时地分析问题的多样性和复杂性，这种有意识的应用，要求人们不仅要知道与这些统计分析方法有关的前提条件，而且也要求人们能正确地解释用简单的按键所得到的可支配的结论。

本书以精炼的矩阵代数的叙述方法，配以数值例子及习题作业，介绍了方差分析、协方差分析、判别分析、聚类分析、典型相关分析、回归分析、主成份分析及因子分析等多元统计分析方法。在不损失数学严密性的前提下，避免了繁琐的数学推导。特别适用于想用矩阵程序设计语言系统编制程序的科学工作者的需求。

感谢丑纪范教授的关心和大力支持，更感谢他在百忙中审阅了全部书稿。

吕纯濂
陈舜华 于南京 1993.春节

目　录

第一篇 预 备

第一章 矩阵代数概要

§1.1 矩阵的类型

1. 以下列形式排列的一些数字称为矩阵 $\boldsymbol{A}$：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}(n\times m)=\begin{pmatrix} a_{11}\cdots a_{1m} \\ \vdots \quad a_{ij} \quad \vdots \\ a_{n1}\cdots a_{nm}\end{pmatrix}$$

数字 a_{ij}是矩阵的元素，第一下标 i 和第二下标 j 分别给出元素所在矩阵中的行数与列数，具有 n 行和m列的矩阵是$(n\times m)$矩阵，$n\times m$称为矩阵的维数。

2. $(n\times m)$矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的转置是$(m\times n)$矩阵 $\boldsymbol{A}^T$，其行是原矩阵的列：

$$\boldsymbol{A}^T=\begin{pmatrix} a_{11}\cdots a_{n1} \\ \vdots \\ a_{1m}\cdots a_{nm}\end{pmatrix},(\boldsymbol{A}^T)^T=\boldsymbol{A}$$

3. 具有一行 n 列或 n 行一列的矩阵称为向量，列向量是$(n\times 1)$矩阵，行向量是$(1\times n)$矩阵(它可写成列向量的转置)：

$$\boldsymbol{a}=\begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n\end{pmatrix},\boldsymbol{a}^T=(a_1,\cdots,a_n)$$

向量的元素称为分量。

4. 矩阵可以如下分割为部份矩阵(子矩阵)：

$$A=\begin{pmatrix} A_{11}\cdots A_{1t} \\ \vdots \qquad \vdots \\ A_{s1}\cdots A_{st} \end{pmatrix}$$

其中具有相同行下标的部份矩阵具有相同的行数，具有相同列下标的部份矩阵有具有相同列数。

5. 下表列出矩阵的一些特殊类型。

名　称	定　　义	符号	例
1.标量	$n=m=1$	a,b	(1)
2.a）零向量	$(0,\cdots,0)^T$	$\mathbf{0}^T$	$(0,0)^T$
b）壹向量	$(1,\cdots,1)^T$	$\mathbf{1}^T$	$(1,1)^T$
c）单位向量	$(0,\cdots,1,\cdots,0)^T$	$\boldsymbol{i}_i^T$	$(1,0)^T$
3.零矩阵	$a_{ij}=0,\forall i,j$	$\mathbf{0}$	$\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}$
4.a）方阵	$n=m$	$\boldsymbol{A}(n\times n)$	$\begin{pmatrix}1&2\\3&4\end{pmatrix}$
b）对称阵	$a_{ij}=a_{ji}$		$\begin{pmatrix}1&2\\2&4\end{pmatrix}$
c）上三角阵	$a_{ij}=0.\forall i>j$	$\boldsymbol{A}$	$\begin{pmatrix}1&4&5\\0&2&6\\0&0&3\end{pmatrix}$
d）下三角阵	$a_{ij}=0,\forall i<j$	$\boldsymbol{A}^T$	$\begin{pmatrix}1&0&0\\4&2&0\\5&6&3\end{pmatrix}$
e）对角阵	$a_{ij}=0,\forall i\neq j$	diag $\boldsymbol{A}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&2\end{pmatrix}$
f）单位阵	$a_{ii}=1$ $a_{ij}=0,\forall i\neq j$	$\boldsymbol{I}$	$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}$
g）壹矩阵	$a_{ij}=1$	$\boldsymbol{J}$	$\begin{pmatrix}1&1\\1&1\end{pmatrix}$

§ 1.2 矩阵的运算

1. 对加法和减法以下运算法则有效：

a. $\boldsymbol{A}\pm\boldsymbol{B}=(a_{ij}\pm b_{ij})$，若 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 有相同维数

b. $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}$

c. $(\boldsymbol{A}\pm\boldsymbol{B})\pm\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}\pm(\boldsymbol{B}\pm\boldsymbol{C})$

d. $(\boldsymbol{A}\pm\boldsymbol{B})^T=\boldsymbol{A}^T\pm\boldsymbol{B}^T$

2. 对标量积有效：

a. $c\cdot\boldsymbol{A}=(c\cdot a_{ij})$

b. $a\cdot(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})=a\cdot\boldsymbol{A}+a\cdot\boldsymbol{B}$

c. $(a+b)\cdot A=a\cdot\boldsymbol{A}+b\cdot\boldsymbol{A}$

3. 对矩阵相乘有效：

a. 若 $\boldsymbol{A}$ 的列数等于 $\boldsymbol{B}$ 的行数$(=m)$，则

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}=\boldsymbol{C}=\left(\sum_{k=1}^{m}a_{ik}\cdot b_{kj}\right),\forall i,j$$

乘积矩阵 $\boldsymbol{C}$ 有 $\boldsymbol{A}$ 的行数和 $\boldsymbol{B}$ 的列数

b. 一般不成立 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{A}$

c. $(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\cdot\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}),\boldsymbol{A}\cdot(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C}$

d. $(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})^T=\boldsymbol{B}^T\cdot\boldsymbol{A}^T$

4. 对维数 $n\times n$ 的方阵的迹：

$$\mathrm{tr}\,\boldsymbol{A}=\mathrm{sp}\boldsymbol{A}=\sum_{i=1}^{n}a_{ii}$$

有以下法则：

a. $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\pm\boldsymbol{B})=\mathrm{tr}\,\boldsymbol{A}\pm\mathrm{tr}\,\boldsymbol{B}$

b. 若 $\boldsymbol{C}$ 有维数 $p\times n$，$\boldsymbol{D}$ 有维数 $n\times p$，则

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{D})=\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{n}c_{ij}d_{ji}$$

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{C}^T)=\sum_{i=1}^{p}\sum_{j=1}^{n}c_{ij}^2$$

5．方阵的行列式为一数量函数：

$$\det \boldsymbol{A}=|\boldsymbol{A}|$$

2 × 2 方阵有以下法则：

$$|\boldsymbol{A}|=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}=a_{11}a_{12}-a_{12}a_{21}$$

$n\times n$ 方阵的行列式由 Laplace 法则确定：

$$|\boldsymbol{A}|=\sum_{i=1}^{n}a_{ij}c_{ij} \quad \forall j$$

$$=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}c_{ij} \quad \forall i$$

其中 c_{ij} 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 中元素 a_{ij} 的代数余子式：

$$c_{ij}=(-1)^{i+j}|\boldsymbol{A}_{ij}|$$

其中 $\boldsymbol{A}_{ij}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的除去其第 i 行和第 j 列的子矩阵。

6．具有$|\boldsymbol{A}|=0$ 的矩阵称为奇异的或非正则的；若$|\boldsymbol{A}|\neq 0$，则称 $\boldsymbol{A}$ 为正则的或非奇异的，行列式的下列性质可简化其运算：

a．当一行中或一列中所有元素为零，或

当两行或两列相等，或

当一行或一列是另一行或另一列的倍数，则 $|\boldsymbol{A}|=0$

b．若 $\boldsymbol{A}$ 为维数为 n 的三角阵或对角阵，

则

$$|\boldsymbol{A}|=\prod_{i=1}^{n}a_{ii}$$

c．$|\boldsymbol{A}|=|\boldsymbol{A}^T|$

d．若$|\boldsymbol{A}_{11}|\neq 0$ 且 $\boldsymbol{A}_{22}$ 为方阵，则在矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分为四个子矩阵时有：

$$|A|=|A_{11}|\cdot|A_{22}-A_{21}\cdot A_{11}^{-1}\cdot A_{12}|,(\text{或}$$
$$|A|=|A_{22}|\cdot|A_{11}-A_{12}\cdot A_{22}^{-1}\cdot A_{21}|)$$

可证明如下：因有

$$\begin{pmatrix} I & 0 \\ -A_{21}\cdot A_{11}^{-1} & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & A_{22}-A_{21}\cdot A_{11}^{-1}\cdot A_{12} \end{pmatrix}$$

两边取行列式则得证。

7．方阵 A 的转置伴随阵是这样的矩阵，由 A 每一元素 a_{ij} 的代数余子式 c_{ij} 按 a_{ij} 的排列再转置而成：

$$adj\, A=C^T=A^*$$

8．方阵 A 称为可逆的，当存在 A^{-1} 使：

$$A\cdot A^{-1}=A^{-1}\cdot A=I$$

称 A^{-1} 为 A 的逆，当且仅当 A 正则，即 $|A|\neq 0$，则 A 的逆才存在。

9．对于逆，有以下性质：

a．$A^{-1}=adj\, A/|A|=A^*/|A|$

b．$(A^{-1})^{-1}=A,\ |A^{-1}|=1/|A|$

c．$(A^T)^{-1}=(A^{-1})^T$

d．$(A\cdot B)^{-1}=B^{-1}\cdot A^{-1}$

e．若 A 对称，则 A^{-1} 也对称

f．对角阵 D，有

$$D^{-1}=\begin{pmatrix} 1/d_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1/d_{nn} \end{pmatrix}$$

g．2×2 矩阵的逆：

$$A^{-1}=\frac{1}{a_{11}\cdot a_{22}-a_{12}\cdot a_{21}}\cdot\begin{pmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{pmatrix}$$

10．方阵 A 称为正交的，若有

$$A\cdot A^T=A^T\cdot A=I$$

对正交阵有性质

$$A^{-1}=A^T,|A|=\pm 1$$

11．中心化矩阵在数据分析中起着重要作用，定义如下：

$$H=I-n^{-1}\cdot J=I-n^{-1}\cdot \mathbf{1}\cdot \mathbf{1}^T$$

$$=\begin{pmatrix} 1-\frac{1}{n} & -\frac{1}{n}\cdots & -\frac{1}{n} \\ -\frac{1}{n} & 1-\frac{1}{n}\cdots & -\frac{1}{n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ -\frac{1}{n} & -\frac{1}{n}\cdots & 1-\frac{1}{n} \end{pmatrix}$$

它具有性质：

a．$H^T=H$（对称性）

$H^2=H$（同幂性）

b．$H\cdot \mathbf{1}=\mathbf{0}$

$H\cdot J=J\cdot H=\mathbf{0}$

c．$H\cdot x=x-\bar{x}\cdot \mathbf{1}$，其中 $\bar{x}=\sum_{i=1}^{n} x_i/n$

d．$x^T\cdot H\cdot x=\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2$

12．Kronecker 直积定义如下：

设 $n\times m$ 矩阵 A 和 $p\times q$ 矩阵 B，则 $np\times mq$ 矩阵 $A\otimes B$ 定义为：

$$A\otimes B=\begin{pmatrix} a_{11}B\cdots & a_{1m}B \\ \vdots & \\ a_{n1}B\cdots & a_{nm}B \end{pmatrix}$$

称为 A 与 B 的 Kronecker 直积；具有性质：

a．$(A_1+A_2)\otimes B=(A_1\otimes B)+(A_2\otimes B)$

$A\otimes(B_1+B_2)=(A\otimes B_1)+(A\otimes B_2)$

b. $(c\boldsymbol{A})\otimes(d\boldsymbol{B})=cd(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})$，$c$、$d$ 为实数

$(\boldsymbol{A}_1\otimes\boldsymbol{B}_1)\cdot(\boldsymbol{A}_2\otimes\boldsymbol{B}_2)=(\boldsymbol{A}_1\cdot\boldsymbol{A}_2)\otimes(\boldsymbol{B}_1\cdot\boldsymbol{B}_2)$

c. $(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})^T=\boldsymbol{A}^T\otimes\boldsymbol{B}^T$

$(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}\otimes\boldsymbol{B}^{-1}$

$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})=(\mathrm{tr}\,\boldsymbol{A})(\mathrm{tr}\,\boldsymbol{B})$

d. 若$\boldsymbol{A}$ 为m阶方阵，$\boldsymbol{B}$ 为 n 阶方阵，则 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$的特征值为$\lambda\mu$，相应的特征向量为 $\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{v}$，其中 λ,μ 和 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}$ 分别是 $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$ 的特征值和相应的特征向量；且有

$$|\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}|=|\boldsymbol{A}|^n\cdot|\boldsymbol{B}|^m$$

e. 若 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 皆非负(正)定，则 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$ 亦是之。

§ 1.3 向 量 空 间

1. 关于加法和标量积封闭的所有具有n个分量的向量集合用向量空间 $\boldsymbol{V}$ 表示。

若 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\in\boldsymbol{V}$，且 $c\in\boldsymbol{R}$，则有

$$\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}\in\boldsymbol{V},c\cdot\boldsymbol{a}\in\boldsymbol{V}.$$

2. 向量$\boldsymbol{a}_1,\cdots,\boldsymbol{a}_k$称为线性相关的，若存在不全为零的数 $c_1,\cdots,c_k\in\boldsymbol{R}$，有

$$c_1\boldsymbol{a}_1+\cdots+c_k\boldsymbol{a}_k=0$$

若对 $\forall c_i\neq0$，有

$$c_1\boldsymbol{a}_1+\cdots+c_k\boldsymbol{a}_k\neq0$$

则称向量 $\boldsymbol{a}_1,\cdots,\boldsymbol{a}_k$ 是线性独立的。

3. $\boldsymbol{V}$ 中任意 n 个线性独立向量构成 $\boldsymbol{V}$ 的一个基，$\boldsymbol{V}$中的每个向量可表示为基向量的线性组合。

4. 两个向量 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}\in\boldsymbol{R}^n$ 的内积(标量积)为

$$\boldsymbol{a}^T\cdot\boldsymbol{b}=\sum_{i=1}^{n}a_ib_i$$

向量 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}$ 称为正交的，当

$$a^T \cdot b = 0$$

5．向量 a 的模或长度是其与其自身标量积的平方根：

$$\|a\| = (a^T \cdot a)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^{n} a_i^2\right)^{1/2}$$

长度为 1 的向量称为标准化的，向量 a 的标准化可由 a 与 $\|a\|$ 的倒数的乘积得到：

$$a^* = \frac{1}{\|a\|} \cdot a$$

列向量两两标准正交的矩阵，称为标准正交阵。

6．每一矩阵的线性独立的行向量数等于线性独立的列向量数，该数称为矩阵 A 的秩 $r(A)$；若矩阵 A 的维数是 $n \times m$，则秩

$$r(A) \leqslant \min(n, m)$$

若 $r(A) = \min(n, m)$，则称矩阵 A 的秩是满的。秩有以下性质：

a. $r(A) = r(A^T)$，$r(A^T \cdot A) = r(A \cdot A^T) = r(A)$

b. $r(A \cdot B) \leqslant \min(r(A), r(B))$

c. 方阵 A 称为满秩的，当它是正则的，即 $|A| \neq 0$

d. 对角阵的秩等于不为零的元素个数

§ 1.4 特征值与特征向量

1．对维数为 $n \times n$ 的方阵 A，

$$p(\lambda) = |A - \lambda \cdot I|$$

是一 n 次多项式，$p(\lambda)$ 的 n 个根：

$$\lambda_1, \cdots, \lambda_n$$

称为 A 的特征值，这些特征值可以是实的也可以是复的，一些 λ_i 也可以相等。

2．因为对每一特征值有 $|A - \lambda_i I| = 0$，故 $(A - \lambda_i \cdot I)$ 是奇异的，因而对每一特征值有一非零向量 e，它满足方程

$$A \cdot e = \lambda_i \cdot e$$

每个满足该方程的向量称为 A 对应于特征值 λ_i 的特征向量；具有

实分量的特征向量 $\boldsymbol{e}$，若有

$$\boldsymbol{e}^T \cdot \boldsymbol{e} = 1$$

则称之为标准的。

3．对维数 $n \times n$ 的方阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 $\lambda_1, \cdots, \lambda_n$ 有：

a．$\operatorname{tr}\boldsymbol{A} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$, $|\boldsymbol{A}| = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i$

b．$\boldsymbol{A}$ 的秩等于非零特征值的个数

c．$\boldsymbol{A}^{-1}$ 的特征值为

$$\lambda_i^{-1}, \ i = 1, \cdots, \ n$$

d．对角阵的特征值为对角线上的元素

e．若 $\boldsymbol{C}$ 为正则矩阵，对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 有

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{C}^{-1} \cdot \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{C}$$

则 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 有相同的特征值，且称 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 为相似矩阵，记为

$$\boldsymbol{A} \approx \boldsymbol{B}$$

f．若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 为相似矩阵，且 $\boldsymbol{e}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量，则$\boldsymbol{B}$的特征向量为 $\boldsymbol{C}^{-1} \cdot \boldsymbol{e}$。

g．2×2 矩阵的特征值为：

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}\operatorname{tr}\boldsymbol{A} \pm \left(\frac{1}{4}(\operatorname{tr}\boldsymbol{A})^2 - |\boldsymbol{A}|\right)^{\frac{1}{2}}$$

§ 1.5 对 称 矩 阵

1．若 $\boldsymbol{A}$ 为$(n \times m)$矩阵，则 $\boldsymbol{A}^T \cdot \boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{A}^T$ 皆为对称矩阵；对称矩阵有：

a．对称阵的特征值皆为实的，且对应于不同特征值的特征向量两两正交。

b．若维数为 $n \times n$ 的对称阵 $\boldsymbol{A}$ 具有 n 个不同的特征值 $\lambda_1, \cdots, \lambda_n$ 及对应的特征向量 $\boldsymbol{e}_1, \cdots, \boldsymbol{e}_n$，且该 n 个向量是标准化的，则由特征向量作为列的矩阵 $\boldsymbol{E}$ 是正交标准的，且有

$$E^T=E^{-1}\text{，即 } E^T\cdot E=I$$

c．任一具有特征值 $\lambda_1,\cdots,\lambda_n$ 的对称的 $n\times n$ 矩阵 A 与 A 的特征值为元素的对角阵 D 相似；若 E 为 A 的特征向量构成的正交阵，则有

$$D=E^T\cdot A\cdot E,\quad A=E\cdot D\cdot E^T=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i e_i e_i^T$$

d．若 A 为正则对称阵，则对整数 k 有

$$A^k=E\cdot D^k\cdot E^T$$

其中 $D^k=\mathrm{diag}(\lambda_i^k)$；若 A 的所有特征值为正，则对整数 $s>0$ 和 r，有

$$A^{r/s}=E\cdot D^{r/s}\cdot E^T$$

其中 $D^{r.s}=\mathrm{diag}(\lambda_i^{r/s})$。

2．若 A 为 $n\times n$ 维对称阵，x 为 n 维向量，则

$$Q(x)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_i x_j=x^T\cdot A\cdot x$$

表示 A 的变量为 x 的二次型。

3．二次型称为：

正定的，若除 $x=0$ 外，有 $Q(x)>0$；

半正定的，若 $Q(x)\geqslant 0$；

负定的，若除 $x=0$ 外，有 $Q(x)<0$；

半负定的，若 $Q(x)\leqslant 0$。

其他情况下的二次型为不定的。由于可从矩阵 A 的特性推出 $Q(x)$ 的符号，故也可类似地对相应的矩阵 A 定性。

4．对称阵 A 及其二次型 $x^T\cdot A\cdot x$ 是

正定的，若 $\lambda_i>0$，对 $i=1,\cdots,n$；

半正定的，若至少一个 $\lambda_i=0$，其余 $\lambda_i>0$；

负定的，若至少一个 $\lambda_i=0$，其余 $\lambda_i<0$。

其中 $\lambda_1,\cdots,\lambda_n$ 为矩阵 A 的特征值。

5．若 $\boldsymbol{A}$ 为 $(n\times m)$ 矩阵且秩为 $m(<n)$，则 $\boldsymbol{A}^T\cdot\boldsymbol{A}$ 不仅对称而且也正定。对正定矩阵 $\boldsymbol{A}$，约定写为 $\boldsymbol{A}>0$，且有：

a．$\boldsymbol{A}$ 正则且 $|\boldsymbol{A}|>0$；

b．$\boldsymbol{A}^{-1}$ 也正定；

c．$\boldsymbol{x}^T\cdot\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{x}=\mathrm{tr}(\boldsymbol{x}^T\cdot\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{x})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}^T)$。

§ 1.6 矩阵微商

1．设

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}=\left(\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{ij}}\right)$$

为数量矩阵函数关于矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的偏导数，其中

$$\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1m} \\ \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nm} \end{pmatrix},\quad \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}=\begin{pmatrix} \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{1m}} \\ \vdots & & \\ \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{n1}} & \cdots & \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial x_{nm}} \end{pmatrix}$$

则有

a．$$\frac{\partial \boldsymbol{a}^T\cdot\boldsymbol{X}\cdot\boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{X}}=\begin{cases}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}^T & \text{若 } \boldsymbol{X} \text{ 非对称}\\ 2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}^T-\mathrm{diag}(a_1^2,\cdots,a_n^2), & \text{若 } \boldsymbol{X} \text{ 对称}\end{cases}$$

b．$$\frac{\partial \boldsymbol{a}^T\cdot\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{a},\qquad \frac{\partial \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}}=2\cdot\boldsymbol{x}$$

c．$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^T\cdot\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}}=\begin{cases}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^T)\cdot\boldsymbol{x}, & \text{若 } \boldsymbol{A} \text{ 非对称}\\ 2\cdot\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{x}, & \text{若 } \boldsymbol{A} \text{ 对称}\end{cases}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^T\cdot\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{y}$$

d．$$\frac{\partial|\boldsymbol{X}|}{\partial x_{ij}}=\begin{cases}c_{ij}, & \text{若 } \boldsymbol{X} \text{ 的所有元素不同}\\ =\left\{\begin{matrix}c_{ii}, i=j\\ 2\,c_{ij}, i\neq j\end{matrix}\right\}, & \text{若 } \boldsymbol{X} \text{ 对称}\end{cases}$$

其中 c_{ij} 为 $\boldsymbol{X}$ 的第 i 行第 j 列的代数余子式，由 $\boldsymbol{X}^{-1}=\boldsymbol{X}^*/|\boldsymbol{X}|=[c_{ji}]/|\boldsymbol{X}|$，故有