物理化学中的线性代数方法

Н. Ф. 斯捷潘诺夫
〔苏〕М. Е. 叶尔雷金娜 著
Г. Г. 菲利波夫

科学出版社

物理化学中的线性代数方法

Н. Ф. 斯捷潘诺夫
〔苏〕М. Е. 叶尔雷金娜 著
Г. Г. 菲利波夫

王正刚 译

周起槐 刘 颖 校

科学出版社

1982

内 容 简 介

本书阐述现代物理化学的一个重要分支——应用线性代数方法描述复杂的化学反应，研究物理化学中经常遇到的一些复杂计算问题，并提出了解决方法. 这些问题一般都与化学计量方程的线性组合、线性函数以及级差函数的排列位置有关. 首先，定义了多原子和多分子体系及其化学反应的线性空间. 其次，讨论了计算热力学函数的方法，并对各种计算物理化学性质的加和方法进行了比较. 最后，对复杂的稳态反应的机理进行了分析和探讨.

本书可供高等院校高年级大学生、研究生和教师以及从事物理化学研究的科学工作者参考.

Н. Ф. Степанов, М. Е. Ерлыкина, Г. Г. Филиппов

МЕТОДЫ ЛИНЕЙНОЙ АЛГЕБРЫ В ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Издательство Московского Университета, 1976

物理化学中的线性代数方法

Н. Ф. 斯捷潘诺夫

〔苏〕 М. Е. 叶尔雷金娜 著

Г. Г. 菲利波夫

王正刚 译

周起槐 刘 颖 校

责任编辑 白明珠

科学出版社出版

北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1982年12月第一版 开本：850×1168 1/32

1982年12月第一次印刷 印张：11 1/2

印数：0001—7,500 字数：302,000

统一书号：13031・2090

本社书号：2854・13—4

定价：2.15元

译 者 的 话

当前各学科相互渗透，新的边缘学科不断产生，表现出所谓“横向”发展；同时由于数学工具的广泛运用，学科本身也在内容和方法上更深化、更定量化了，表现出所谓“纵向”发展．当然化学科学也不例外．特别是作为整个化学领域重要基础理论的物理化学（包括量子化学），其发展的一个重要标志就是运用现代数学方法处理问题，特别是计算机在研究中的广泛应用．但就国内情况来看，对于经典物理化学，主要是化学热力学和化学动力学，人们对数学方法的作用还没有引起(象对量子化学那样)广泛注意．这就是翻译此书的目的．在翻译过程中对原文的遗误进行了补正，并作了注释．但因译者水平所限，译文中错误及不当之处一定不少，诚恳希望读者指正．

北京工业学院数学教研室刘宝光、沈一淡、熊大国；外语教研室卢一生等同志帮助审校本书有关章节的译稿，译者特此表示衷心感谢．

译　者

1980.10

前　　言

物理化学是把物理学和化学的理论和方法结合起来，应用定量方法处理化学问题的学科，因而必须有一个包括近代数学各部门的高深而扎实的数学基础．如微积分学、微分几何学、变分法、函数分析、复变函数理论、数理统计等学科，都被广泛地应用于化学领域．本书提出了一个有限维线性分析方法．最近十年到十五年来，由于电子计算机的应用，引起了人们对这种分析方法的越来越大的兴趣．

用线性代数方法可以进行多组分复杂体系的平衡计算，可以计算各类化合物的物理化学性质，同时也可以解决稳态动力学的一些问题，还可以精确地处理大量实验数据等等．一般说来，对这些问题的兴趣，一方面来源于工业和新技术的实际需要，另一方面也来源于计算和模拟试验过程(由很多相互反应的化合物参加)的需要．另外，处理实验数据的可靠性问题，所得方程的解的稳定性问题，外推公式选择得是否合适问题等，也都起着同样重要的作用．

最近几年来，化学工作者对线性代数的需要是非常迫切的，以致许多高等学校(包括国立莫斯科大学化学系)都把它列为大学生必修课程．在给化学家作的报告的基础上，已编写了一些教学参考书，例如 Л. И. Головина 所著的《线性代数及其应用》(М.,《Наука》, 1971)．然而，我们决定在讲授物理化学部分之前，先把有关线性代数理论及其与其它数学分支相衔接的一些问题放在本书第一部分讲授．这是因为，以后几章所必需的数学知识在一般物理化学教科书中是没有的．这些数学内容或是分散在某些专著中，或是目前仅在某些杂志文献中．

把物理化学的问题和线性代数基础理论放在一起阐述，不管

对科学工作者，还是对学生，都有利于他们更好地理解本书所提供的内容．因此，我们坚信，本书能够使读者在必要的时候（特别是当读者不具备线性代数基本知识时）不仅会尝到用代数方法处理物理化学问题的甜头，而且还会逐步感到它的确是一种有力的工具．

在物理化学领域里，实验技术方面已有不少的好书．当然，这些专门为从事实验工作者而写的书都是很需要的．但是，有关实验技术理论方面的书太少了，特别是应用数学工具处理物理化学问题方面的专门著作，其中包括专为物理化学工作者写的书那就更少了．这方面的著作和实验方面的著作一样迫切需要．因为对理论本身的理解以及发展，从本质上说，都决定于该理论所使用的研究手段．这就是我们写这本书的指导思想．

当然，由于篇幅所限，本书不可能把线性代数在物理化学各方面应用的全部实例都列举出来，虽然有些也是很重要的．这可能也许有点遗憾．但是，我们不希望读者只见树木不见森林．我们希望指明，有限维分析的方法和概念是如何深入到现代物理化学中的，它们在各个物理化学分支中又是如何表现出许多共同点的．如果我们能够部分地作到这一点，那么，我们的目的就算达到了．

本书目录已经把内容罗列得很清楚，没有必要再详尽介绍本书的结构和细节了．只说明以下几点：除了第二部分的第三章以外，第二部分其余章节和第三部分都带有一定程度的独立性，可以单独阅读．而第二部分的第三章是作为总的导论，熟悉它对于其它各章都是必要的．

在标记各种量、矩阵等符号时，我们尽量利用标准符号，然而，并不是总能做到这一点．因为，一方面，在不同的科学分支中，同样的物理量有时却用不同的标准符号；另一方面，不同的量有时又用相同的符号．本书每章末，都列出了参考文献，并按字母顺序排列．但我们并没有把问题所涉及的全部文献都列出来．通常只有当所需资料在教科书和著作中没有时，才引用某些杂志的文献．

本书的第一和第二部分由 M.E. 叶尔雷金娜和 H.Φ. 斯捷潘诺夫合著，第三部分由 M. E. 叶尔雷金娜，H. Φ. 斯捷潘诺夫和 Γ. Γ. 菲利波夫合著.

目　　录

第一部分　线性代数基础

第二部分　原子和分子组成的向量空间

第三部分　化学反应空间的线性函数

第一部分　线性代数基础

第　一　章
线性代数的一般概念

§1.1　矩阵及其有关的基本定义和基本量

由某个集合 $\mathfrak{M}$ 的一些元素组成的、含有 m 行和 n 列的如下的表式：

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \cdots & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \tag{1.1}$$

叫做 $m \times n$ 矩阵．矩阵的元素 a_{ij} 是集合 $\mathfrak{M}$ 中的元素，并且下标 i 表示元素 a_{ij} 所在行的序号，j 表示其列的序号．上述矩阵常写为

$$(a_{ij}) \qquad \begin{matrix} (i = 1, 2, \cdots, m) \\ (j = 1, 2, \cdots, n) \end{matrix} \tag{1.2}$$

或者简单地用一个记号 $\mathbf{A}$ 表示．

作为集合 $\mathfrak{M}$ 的元素，它可以是实数或复数，可以是整数，也可以是某变量 λ 的多项式或者是一个（或几个）变量的函数，等等．如果这些元素构成域，即对它们全体定义了单值施行的加法、减法、乘法和除法的运算，那么就说，矩阵 $\mathbf{A}$ 在域上给定了．下面我们将主要讨论在实数域 $\mathfrak{R}$ 上给定的矩阵．

矩阵 $\mathbf{A} = (a_{ij})$，如果其中 $m \neq n$，则称为长方矩阵，如果 $m = n$，则 $\mathbf{A}$ 称为方阵．如果矩阵中 m 或 n 等于 1，这样的矩阵还有个专有名称，若 $m = 1$，即

$$\mathbf{A} = (a_{11}, a_{12}, \cdots, a_{1n}) \tag{1.3}$$

则该矩阵 $\mathbf{A}$ 称为行向量或行矩阵；若 $n=1$，即

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix} \tag{1.4}$$

则矩阵 $\mathbf{A}$ 称为列向量或列矩阵．若矩阵的所有元素都等于零，则矩阵称为零矩阵．

一个方阵中的 $i=j$ 的元素称为处于主对角线上的元素．如果方阵中除了主对角线上的元素以外，其它所有元素都等于零，则方阵

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ & & \cdots & \\ 0 & 0 & \cdots & a_{mm} \end{pmatrix} \tag{1.5}$$

称为对角方阵；此外，如果主对角线上所有元素彼此相等，$a_{11}=a_{22}=a_{33}=\cdots=a_{mm}$，则方阵称为纯量方阵．如果 $m\times m$ 纯量方阵的主对角元素都等于 1，则称为单位矩阵，并用 $\mathbf{E}_m$ 或者简单地用 $\mathbf{E}$ 表示

$$\mathbf{E}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ & & \cdots & \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \tag{1.6}$$

由于方阵的行数 m 和列数 n 是相等的，因此不用 $m\times n$ 表示它，通常说，方阵 $\mathbf{A}$ 具有阶 n．

矩阵的元素不仅可以是数或函数，而且还可以是矩阵，例如

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{pmatrix}$$

这里 $\mathbf{A}_{ij}$ 是某些矩阵．为了使 $\mathbf{A}$ 成为一个矩阵，很显然，$\mathbf{A}_{11}$ 和 $\mathbf{A}_{12}$ 中的行数以及 $\mathbf{A}_{21}$ 和 $\mathbf{A}_{22}$ 中的行数应当相等．同样，$\mathbf{A}_{11}$ 和 $\mathbf{A}_{21}$ 以及 $\mathbf{A}_{12}$ 和 $\mathbf{A}_{22}$ 中的列数也应当是相等的．矩阵 $\mathbf{A}_{ij}$ 称为块或子矩阵．（在更一般的意义下，子矩阵这个术语也用来表示从原

矩阵去掉某些行或列所得到的矩阵.）特别是，每个矩阵 $\mathbf{A}$，可以写为行矩阵

$$\mathbf{A} = (\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \cdots, \mathbf{A}_n)$$

它的元素是原来的矩阵 $\mathbf{A}$ 的列向量

$$\mathbf{A}_j = \begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{mj} \end{pmatrix}$$

或者写为列矩阵

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{A}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \mathbf{A}_m^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}$$

它的元素是原来矩阵 $\mathbf{A}$ 的行向量

$$\mathbf{A}_i^{\mathrm{T}} = (a_{i1}, a_{i2}, \cdots, a_{in})$$

对于列向量也可用符号 $|\mathbf{A}_j\rangle$ 表示，而对于行向量也可用 $\langle\mathbf{A}_i|$ 表示.

例：设给定 2×3 矩阵

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

此矩阵之元素取自实数域. 它的列向量为

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 3 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{A}_3 = \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \end{pmatrix}$$

而行向量为

$$\mathbf{A}_1^{\mathrm{T}} = (1, -1, 2), \qquad \mathbf{A}_2^{\mathrm{T}} = (1, 3, -3)$$

上面列举的矩阵 $\mathbf{A}$ 具有形式

$$\mathbf{A} = (\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3) \quad 或 \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{A}_2^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}$$

现在我们定义矩阵的一些基本运算.

1. 两个 $m \times n$ 矩阵 $\mathbf{A} = (a_{ij})$，$\mathbf{B} = (b_{ij})$ 的和是指 $m \times n$ 矩阵 $\mathbf{C} = (c_{ij})$，$\mathbf{C}$ 的元素 c_{ij} 等于 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 相应的元素的和，即

$$c_{ij} = a_{ij} + b_{ij} \quad (i = 1, 2, \cdots, m; j = 1, 2, \cdots, n) \tag{1.7}$$

求两个矩阵之和的运算称为矩阵的加法

$$\mathbf{A}+\mathbf{B}=\mathbf{C}$$

例:

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B}=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{C}=\mathbf{A}+\mathbf{B}=\begin{pmatrix} a_{11}+b_{11} & a_{12}+b_{12} & a_{13}+b_{13} \\ a_{21}+b_{21} & a_{22}+b_{22} & a_{23}+b_{23} \end{pmatrix}$$

根据定义,两个矩阵只有当具有同样的行数和列数时,才能进行相加. 显然,矩阵加法也具有数量加法所具有的性质,即具有交换律和结合律.

1° $\mathbf{A}+\mathbf{B}=\mathbf{B}+\mathbf{A}$

2° $(\mathbf{A}+\mathbf{B})+\mathbf{C}=\mathbf{A}+(\mathbf{B}+\mathbf{C})$(关于加法的结合律).

这里 $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ 和 $\mathbf{C}$ 是行数和列数相同的任意矩阵.

2. 矩阵 $\mathbf{A}=(a_{ij})$ 与属于给定数域的数 α 的积,是指矩阵 $\mathbf{C}=(c_{ij})$,其元素 c_{ij} 是由 $\mathbf{A}$ 中相应的元素与 α 相乘而得到

$$c_{ij}=\alpha a_{ij} \quad (i=1,2,\cdots,m;j=1,2,\cdots,n) \tag{1.8}$$

求这个积的运算称为矩阵与数的乘法

$$\mathbf{C}=\alpha\mathbf{A}$$

例:

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \qquad \alpha=5$$

$\mathbf{A}$ 与 $\alpha=5$ 的乘积是

$$\mathbf{C}=5\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 5a_{11} & 5a_{12} \\ 5a_{21} & 5a_{22} \end{pmatrix}$$

矩阵与数的乘积具有如下的性质:

1° $\alpha(\mathbf{A}+\mathbf{B})=\alpha\mathbf{A}+\alpha\mathbf{B}$

2° $(\alpha+\beta)\mathbf{A}=\alpha\mathbf{A}+\beta\mathbf{A}$

3° $(\alpha\beta)\mathbf{A}=\alpha(\beta\mathbf{A})$

其中 α 和 β 是给定数域内的某些数.

从矩阵与数的乘法运算以及矩阵的加法运算可以定义两个具

有相同的行数和列数的矩阵的差

$$\mathbf{A}-\mathbf{B}=\mathbf{A}+(-1)\mathbf{B}$$

3. 两个分别为 $m\times n$ 和 $n\times p$ 的矩阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 的乘积是指 $m\times p$ 矩阵 $\mathbf{C}$,$\mathbf{C}$ 的元素可由下式决定

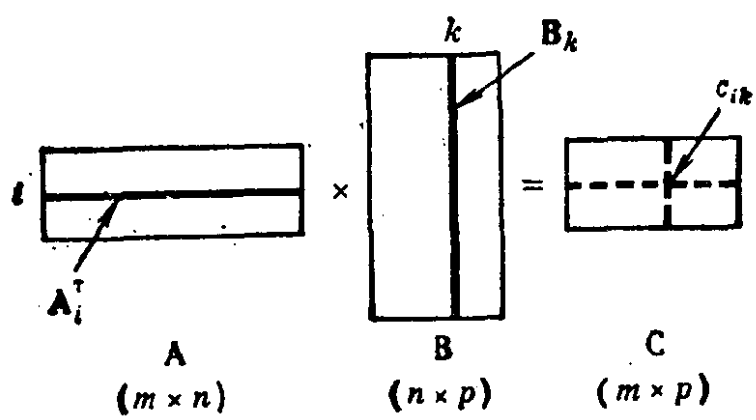
$$c_{ik}=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}b_{jk}\quad(i=1,2,\cdots,m;\ k=1,2,\cdots,p)\qquad(1.9)$$

把 $\mathbf{A}$ 乘以 $\mathbf{B}$ 的积 $\mathbf{C}$ 表示为

$$\mathbf{C}=\mathbf{AB}\qquad(1.10)$$

求积的运算叫做矩阵的乘法（$\mathbf{A}$ 乘以 $\mathbf{B}$）. 同时，也可以说 $\mathbf{C}$ 是 $\mathbf{B}$ 用 $\mathbf{A}$ 左乘的结果，或是 $\mathbf{A}$ 用 $\mathbf{B}$ 右乘的结果.

等式（1.9）表明，元素 c_{ik} 可以用以下的方法求出：矩阵中第 i 行的每个元素 a_{ij} 乘以矩阵 $\mathbf{B}$ 第 k 列的相应的元素（按 j 序号相应），然后把得到的所有积加起来. 这个运算可用如下方式来描绘：



实际上，元素 c_{ik}（数）是行矩阵 $\mathbf{A}_i^{\mathrm{T}}$ 与列矩阵 $\mathbf{B}_k$ 的乘积，或者说是行向量 $\mathbf{A}_i^{\mathrm{T}}$ 与列向量 $\mathbf{B}_k$ 的乘积.

例：

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}\\a_{21}&a_{22}\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{B}=\begin{pmatrix}b_{11}&b_{12}&b_{13}\\b_{21}&b_{22}&b_{23}\end{pmatrix}$$

$$\mathbf{AB} = \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} & a_{11}b_{13} + a_{12}b_{23} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} & a_{21}b_{13} + a_{22}b_{23} \end{pmatrix}$$

要注意的是，对于两个矩阵相加，曾要求矩阵必须有相同的行数和列数，而对于矩阵的乘法，则要求左边矩阵的列数与右边矩阵的行数相等。对于积矩阵的行数和列数，可形式上图解如下：

$$\underset{\mathbf{A}}{(m \times \boxed{n)\ (n} \times p)} = \underset{\mathbf{C}}{m \times p}$$

在上面的例子中，$\mathbf{A}$ 乘以 $\mathbf{B}$ 能实现，但 $\mathbf{B}$ 乘以 $\mathbf{A}$ 就没有意义。

矩阵乘法具有下列的性质：

1° $(\mathbf{AB})\mathbf{C} = \mathbf{A}(\mathbf{BC})$ （结合律）

$$\left.\begin{array}{ll} 2^\circ & (\mathbf{A}+\mathbf{B})\mathbf{C} = \mathbf{AC} + \mathbf{BC} \\ 3^\circ & \mathbf{A}(\mathbf{B}+\mathbf{C}) = \mathbf{AB} + \mathbf{AC} \end{array}\right\} \text{（分配律）}$$

一般情况下，乘积不具有交换律的性质，也就是说，如果这两个积已确定，可交换性不成立，即

$$\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$$

如果 $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$，就说矩阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 是可交换的。矩阵 $\mathbf{C} = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}$ 有时称为矩阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 的交换因子。

例 1. 设矩阵 $\mathbf{A}$ 是 $m \times n$ 矩阵，而 $\mathbf{B}$ 是 n 阶对角矩阵

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \cdots & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & b_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & b_{nn} \end{pmatrix}$$

矩阵 $\mathbf{C} = \mathbf{AB}$ 的元素 c_{ik} 为

$$c_{ik} = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} b_{jk}$$

对于固定的 k，当 $j \neq k$ 时，$b_{jk} = 0$；当 $j = k$ 时，$b_{jk} = b_{kk}$，得到

$$c_{ik} = a_{ik} b_{kk}.$$

因此，当 $\mathbf{B}$ 是对角矩阵时，$\mathbf{A}$ 用 $\mathbf{B}$ 右乘就是矩阵 $\mathbf{A}$ 的每一列 $\mathbf{A}_k$ 用数 b_{kk} 右乘.

例 2. 如果 $m \times n$ 矩阵 $\mathbf{A}$ 以 m 阶对角矩阵 $\mathbf{B}$ 左乘，可重复上例的讨论而得出结论：当 $\mathbf{A}$ 用对角矩阵 $\mathbf{B}$ 左乘时，就等于矩阵 $\mathbf{A}$ 的每一行 $\mathbf{A}_i^{\mathrm{T}}$ 用数 b_{ii} 左乘

$$c_{ik} = b_{ii} a_{ik}$$

例 3. 如果 $\mathbf{B}$ 是纯量矩阵，则在上面两个例子中，所有元素 b_{ii} 都彼此相等 $b_{ii} = b$. 因此，当矩阵 $\mathbf{A}$ 用具有元素 $b_{ii} = b$ 的纯量矩阵 $\mathbf{B}$ 左乘或右乘时，就等于 $\mathbf{A}$ 的所有元素用同一个数 b 去乘，亦即这个乘积与 $\mathbf{A}$ 用数 b 去乘的结果等价.

例 4. 如果 $\mathbf{B}$ 是单位矩阵，与从例 3 得出的结论一样，用 $\mathbf{B}$ 左乘或右乘 $m \times n$ 矩阵 $\mathbf{A}$，结果还是原来的 $\mathbf{A}$

$$\mathbf{A}\mathbf{E}_n = \mathbf{E}_m\mathbf{A} = \mathbf{A} \tag{1.11}$$

例 5. 如果 $\mathbf{B}$ 是 $n \times p$ 零矩阵，则积 $\mathbf{AB}$ 显然是 $m \times p$ 零矩阵.

对于方阵，可以用下述方法确定其乘幂

$$\mathbf{A}^p = \underbrace{\mathbf{A}\mathbf{A}\cdots\mathbf{A}}_{p\text{个}} \qquad (p = 1, 2, \cdots) \tag{1.12}$$

从乘法的结合律得出，对于任何正整数 p 和 q

$$\mathbf{A}^p\mathbf{A}^q = \mathbf{A}^{p+q}$$

现在引入两个十分重要的定义.

(a) 如果矩阵 $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ 的每个元素 $(a^{\mathrm{T}})_{ij}$ 和相应的矩阵 $\mathbf{A}$ 的元素 a_{ji} 相等，即

$$(a^{\mathrm{T}})_{ij} = a_{ji} \tag{1.13}$$

则矩阵 $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ 叫做矩阵 $\mathbf{A}$ 的转置矩阵.

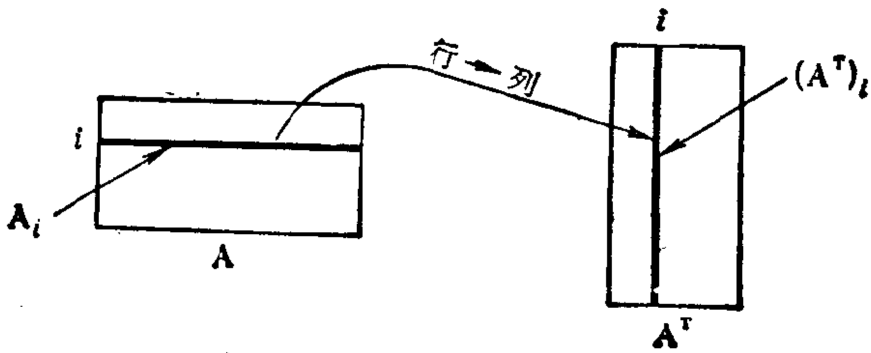
例： 设

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{pmatrix}$$

根据定义

$$\mathbf{A}^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} \end{pmatrix}$$

在转置时，矩阵 $\mathbf{A}$ 的每个行 $\mathbf{A}_i$ 变成矩阵 $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ 的具有相同下标的列.



转置运算具有下列性质:

1° $(\mathbf{A}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}=\mathbf{A}$

2° $(\mathbf{A}+\mathbf{B})^{\mathrm{T}}=\mathbf{A}^{\mathrm{T}}+\mathbf{B}^{\mathrm{T}}$

3° $(\alpha\mathbf{A})^{\mathrm{T}}=\alpha\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$

4° $(\mathbf{AB})^{\mathrm{T}}=\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$

前三个性质是显然的. 只证明第四个性质. 如果 $\mathbf{C}=\mathbf{AB}$, 则

$$(c^{\mathrm{T}})_{ik}=c_{ki}=\sum_j a_{kj}b_{ji}=\sum_j (a^{\mathrm{T}})_{jk}(b^{\mathrm{T}})_{ij}=\sum_j (b^{\mathrm{T}})_{ij}(a^{\mathrm{T}})_{jk}$$

因此

$$\mathbf{C}^{\mathrm{T}}=(\mathbf{AB})^{\mathrm{T}}=\mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$$

如果方阵 $\mathbf{S}$ 同它自己的转置矩阵相同,则称 $\mathbf{S}$ 是对称矩阵,即

$$\mathbf{S}^{\mathrm{T}}=\mathbf{S}$$

例: 考察矩阵 $\mathbf{A}$ 用它的转置矩阵右乘的乘积, $\mathbf{B}=\mathbf{AA}^{\mathrm{T}}$,以及转置矩阵用原来矩阵右乘的乘积 $\mathbf{C}=\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ 和 $\mathbf{C}$ 的转置矩阵将满足下列关系式

$$\mathbf{B}^{\mathrm{T}}=(\mathbf{AA}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}=(\mathbf{A}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}=\mathbf{AA}^{\mathrm{T}}=\mathbf{B}$$