普通高等教育"十一五"国家级规划教材

北京大学数学教学系列丛书

本科生
数学基础课教材

数值线性代数

（第二版）

徐树方 高 立 张平文 编著

北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

普通高等教育"十一五"国家级规划教材

北京大学数学教学系列丛书

数值线性代数

(第二版)

徐树方　高　立　张平文　编著

北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

数值线性代数 / 徐树方，高立，张平文编著. —2 版. —北京：北京大学出版社，2013.1

（北京大学数学教学系列丛书）

ISBN 978-7-301-21141-0

Ⅰ. ① 数…　Ⅱ. ① 徐…　② 高…　③ 张…　Ⅲ. ① 线性代数计算法 – 高等学校 – 教材　Ⅳ. ① O241.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2012）第 193969 号

书　　名：数值线性代数（第二版）
著名责任者：徐树方　高　立　张平文　编著
责 任 编 辑：曾琬婷
标 准 书 号：ISBN 978-7-301-21141-0/O・0882
出 版 发 行：北京大学出版社
地　　址：北京市海淀区成府路 205 号　100871
网　　址：http://www.pup.cn　新浪官方微博：@北京大学出版社
电 子 邮 箱：zpup@pup.cn
电　　话：邮购部 62752015　发行部 62750672　编辑部 62767347
出版部 62754962
印　刷　者：北京大学印刷厂
经　销　者：新华书店
880 mm×1230 mm　A5　8.25 印张　238 千字
2000 年 9 月第 1 版
2013 年 1 月第 2 版　2013 年 1 月第 1 次印刷(总第 11 次印刷)
印　　数：34001—37000 册
定　　价：24.00 元

内 容 简 介

本书是为高等院校数学系计算数学专业本科生编写的数值代数课程的教材. 全书共分八章, 内容包括: 绪论, 求解线性方程组的 Gauss 消去法、平方根法、古典迭代法和共轭梯度法,线性方程组的敏度分析和消去法的舍入误差分析, 求解线性最小二乘问题的正交分解法, 求解矩阵特征值问题的乘幂法、反幂法、Jacobi 方法、二分法、分而治之法和 QR 方法. 本书在选材上既注重基础性和实用性, 又注重反映该学科的最新进展; 在内容的处理上, 在介绍方法的同时, 尽可能地阐明方法的设计思想和理论依据, 并对有关的结论尽可能地给出严格而又简洁的数学证明; 在叙述表达上, 力求清晰易读, 便于教学与自学. 每章后配置了较丰富的练习题和上机习题, 其目的是为学生提供足够的练习和实践的素材, 以便学生复习、巩固和拓广课堂所学知识.

这是本书的第二版. 该版是在保持第一版的基本结构不变的前提下做了一些必要的修订.

本书可作为综合大学、理工科大学、高等师范院校计算数学、应用数学、工程计算等专业本科生的教材或教学参考书, 也可供从事科学与工程计算的科技人员参考.

序　言

自 1995 年以来, 在姜伯驹院士的主持下, 北京大学数学科学学院根据国际数学发展的要求和北京大学数学教育的实际, 创造性地贯彻教育部“加强基础, 淡化专业, 因材施教, 分流培养”的办学方针, 全面发挥我院学科门类齐全和师资力量雄厚的综合优势, 在培养模式的转变、教学计划的修订、教学内容与方法的革新, 以及教材建设等方面进行了全方位、大力度的改革, 取得了显著的成效. 2001 年, 北京大学数学科学学院的这项改革成果荣获全国教学成果特等奖, 在国内外产生很大反响.

在本科教育改革方面, 我们按照加强基础、淡化专业的要求, 对教学各主要环节进行了调整, 使数学科学学院的全体学生在数学分析、高等代数、几何学、计算机等主干基础课程上, 接受学时充分、强度足够的严格训练; 在对学生分流培养阶段, 我们在课程内容上坚决贯彻“少而精”的原则, 大力压缩后续课程中多年逐步形成的过窄、过深和过繁的教学内容, 为新的培养方向、实践性教学环节, 以及为培养学生的创新能力所进行的基础科研训练争取到了必要的学时和空间. 这样既使学生打下宽广、坚实的基础, 又充分照顾到每个人的不同特长、爱好和发展取向. 与上述改革相适应, 积极而慎重地进行教学计划的修订, 适当压缩常微、复变、偏微、实变、微分几何、抽象代数、泛函分析等后续课程的周学时, 并增加了数学模型和计算机的相关课程, 使学生有更大的选课余地.

在研究生教育中, 在注重专题课程的同时, 我们制定了 30

多门研究生普选基础课程 (其中数学系 18 门), 重点拓宽学生的专业基础和加强学生对数学整体发展及最新进展的了解.

教材建设是教学成果的一个重要体现. 与修订的教学计划相配合, 我们进行了有组织的教材建设. 计划自 1999 年起用 8 年的时间修订、编写和出版 40 余种教材. 这就是将陆续呈现在大家面前的《北京大学数学教学系列丛书》. 这套丛书凝聚了我们近十年在人才培养方面的思考, 记录了我们教学实践的足迹, 体现了我们教学改革的成果, 反映了我们对新世纪人才培养的理念, 代表了我们新时期的数学教学水平.

经过 20 世纪的空前发展, 数学的基本理论更加深入和完善, 而计算机技术的发展使得数学的应用更加直接和广泛, 而且活跃于生产第一线, 促进着技术和经济的发展, 所有这些都正在改变着人们对数学的传统认识. 同时也促使数学研究的方式发生巨大变化. 作为整个科学技术基础的数学, 正突破传统的范围而向人类一切知识领域渗透. 作为一种文化, 数学科学已成为推动人类文明进化、知识创新的重要因素, 将更深刻地改变着客观现实的面貌和人们对世界的认识. 数学素质已成为今天培养高层次创新人才的重要基础. 数学的理论和应用的巨大发展必然引起数学教育的深刻变革. 我们现在的改革还是初步的. 教学改革无禁区, 但要十分稳重和积极; 人才培养无止境, 既要遵循基本规律, 更要不断创新. 我们现在推出这套丛书, 目的是向大家学习. 让我们大家携起手来, 为提高中国数学教育水平和建设世界一流数学强国而共同努力.

张继平

2002 年 5 月 18 日

于北京大学蓝旗营

第二版前言

本书自 2000 年出版之后, 已经重印了 10 次, 共出版发行了 3 万 4 千册, 已经成为全国大多数高等院校计算数学专业和相关专业本科生的主要教学参考书. 在这十多年的使用过程中也发现了不少不当和不足之处. 因此有必要对全书进行一次仔细的修订, 以更适应新世纪教学的需求.

本书第二版和第一版的不同之处, 主要有如下 6 点:

1. 改写了 §2.4 之中关于 LU 分解的误差分析.

2. 修改了 §4.1 和 §4.2 的标题, 增加了两个小标题, 将 §4.2 之中前面的一段移到了 §4.1 的后面; 修改了定理 4.2.2 到定理 4.2.6 这 5 个定理的叙述表达和证明, 并且删除了定理 4.2.7 的证明.

3. 修改了定理 6.2.1 的证明.

4. 增加了 3 道上机习题: 第四章增加了 1 道, 第五章增加了 2 道.

5. 增加了 6 个实际计算的例子: 例 1.2.2, 例 1.3.2, 例 3.3.1, 例 5.4.1, 例 6.4.1 和例 6.4.2.

6. 增加了 §7.6 奇异值分解的计算.

作者感谢对本书原版中不足之处进行指正并且提出建设性意见的同行们, 希望大家能够继续关注本书, 如果发现任何不足和错误, 请随时告诉我们.

编　者

2011. 12

第一版前言

这本教材是在作者多年来开设“数值线性代数”课程所用讲义的基础上经补充、整理编写而成. 本书自 1995 年起在北京大学数学科学学院曾对各届计算数学专业的学生讲授过多次, 其间作过几次大的修改, 其主要内容包括线性代数方程组的数值解法和矩阵特征值和特征向量的计算方法. 这本教材在选材上, 基于目前学时较少的特点, 我们既注重了基础性和实用性, 又注意了讲授所需的课时要求; 在内容的处理上, 基于我们系历来比较注重基础理论这一特点, 我们在介绍方法的同时, 尽可能地阐明方法的设计思想和理论依据, 并对有关的结论尽可能地给出严格而又简洁的数学证明; 在叙述表达上, 我们力求清晰易读, 便于教学与自学. 此外, 在每章后还编写了较丰富的练习题和上机实验题, 其目的是为学生提供足够的练习和实践的素材, 以便学生复习、巩固和拓广课堂所学知识. 根据我们的教学实践, 讲授全书内容需要 60 学时左右.

在这本教材的编写过程中, 曾得到北京大学课程建设基金的资助, 也得到了北京大学数学科学学院科学与工程计算系全体教师的鼓励和帮助; 责任编辑刘勇为本书的出版付出了辛勤的劳动, 在此一并表示诚挚的谢意.

编　者

1999. 12

目　　录

绪　论

自从 1946 年第一台电子计算机问世以来, 科学与工程计算经过半个世纪的发展已经成为本世纪最重要的科学进步之一. 科学计算已与理论研究及科学试验并列成为当今世界科学活动的三种主要方式. 在许多科学与工程领域如果没有计算就不可能有第一流的研究成果. 为众多的科学与工程问题提供计算方法, 提高计算的可靠性、有效性和精确性, 便是科学与工程计算这一领域的主要研究内容.

数值线性代数又称矩阵计算, 它是科学与工程计算的核心. 可以毫不夸张地讲, 大部分科学与工程问题最终都要归结为一个矩阵计算问题, 其中具有挑战性的问题是大规模矩阵计算问题. 数值线性代数研究的主要内容就是, 如何针对各类科学与工程问题所提出的矩阵计算问题的特点, 设计出相应的快速可靠的算法.

一、数值线性代数的基本问题

数值线性代数主要包括如下三大矩阵计算问题:

(1) 求解线性方程组的问题, 即给定 n 阶非奇异矩阵 A 和 n 维向量 b, 求一个 n 维向量 x, 使得

$$Ax = b;$$

(2) 线性最小二乘问题, 即给定 $m \times n$ 矩阵 A 和 m 维向量 b, 求一个 n 维向量 x, 使得

$$\|Ax - b\|_2 = \min\{\|Ay - b\|_2 : \ y \in \mathbf{R}^n\};$$

(3) 矩阵特征值问题, 即给定一个 n 阶方阵 A, 求它的部分或全部特征值以及对应的特征向量.

除此之外, 还有一些其他问题也是十分重要和基本的, 如约束最小二乘问题、完全最小二乘问题、矩阵方程的求解问题、矩阵函数的计

算问题、广义特征值问题、非线性特征值问题、特征值反问题、奇异值分解的计算问题等. 特别是奇异值分解的计算, 由于其应用十分广泛, 目前有的教科书已经将其列为数值线性代数的第四大问题.

二、研究数值方法的必要性

众所周知, 线性方程组、线性最小二乘问题和矩阵特征值问题的数学理论已经发展得相当完善了. 但是这些理论上非常漂亮的结果应用于实际计算时往往是行不通的. 例如, 线性方程组的 Cramer 法则表明: 如果 n 阶线性方程组 $Ax = b$ 的系数矩阵 A 的行列式不为零, 则此方程组有唯一的解, 并且其解可以通过系数表示为

$$x_i = \frac{d_i}{d}, \quad i = 1, \cdots, n,$$

其中 $d = \det A$, $d_i = \det A_i$, 这里 A_i 是将 A 的第 i 列换为 b 而得到的矩阵. 这一结果理论上是非常漂亮的, 它把线性方程组的求解问题归结为计算 $n+1$ 个 n 阶行列式的问题. 而对于行列式的计算, 理论上又有著名的 Laplace 展开定理:

$$d = \det A = a_{i1}A_{i1} + a_{i2}A_{i2} + \cdots + a_{in}A_{in},$$

其中 A_{ij} 表示元素 a_{ij} 的代数余子式. 按照这一定理我们就可从二阶行列式出发逐步递推地计算出任意阶行列式的值. 这样, 理论上我们就有了一种非常漂亮的求解线性方程组的方法. 然而我们做一简单的计算就会发现, 由于这一方法的运算量大得惊人, 以至于完全不能用于实际计算.

设计算 k 阶行列式所需要的乘法运算的次数为 m_k, 则容易推出

$$m_k = k + km_{k-1}.$$

于是, 我们有

$$\begin{aligned} m_n &= n + nm_{n-1} = n + n[(n-1) + (n-1)m_{n-2}] \\ &= \cdots \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= n + n(n-1) + n(n-1)(n-2) + \cdots + n(n-1)\cdots 3 \cdot 2 \\
&> n!.
\end{aligned}
$$

这样, 利用 Cramer 法则和 Laplace 展开定理来求解一个 n 阶线性方程组, 所需要的乘法运算的次数就大于

$$(n+1)n! = (n+1)!.$$

因此, 若在一个百亿次计算机上求解一个 25 阶线性方程组, 则至少需要

$$\frac{26!}{10^{10} \times 3600 \times 24 \times 365} \approx \frac{4.0329 \times 10^{26}}{3.1536 \times 10^{17}} \approx 13\text{亿 (年)},$$

它远远超出目前所了解的人类文明历史! 然而如果改用下一章将要介绍的消元法, 则在不到一秒钟之内即可完成这一计算任务.

再如, 对矩阵特征值问题, 理论上有著名的 Jordan 分解定理. 这一定理告诉我们, 只要知道了一个矩阵的 Jordan 分解, 就可很清楚地知道其所有与特征值有关的信息, 如一个特征值的几何重数、代数重数以及对应的特征向量等. 然而这一分解在实际计算时是难以实现的. 这是因为矩阵的 Jordan 分解是十分不稳定的 (即矩阵元素有微小的变化, 其 Jordan 分解往往就会发生很大的变化), 而且其变换矩阵常常是非常病态的. 事实上, 真正用于实际计算的是另一具有良好数值性态的 Schur 分解.

因此, 如何利用计算机快速有效地求解矩阵计算的三类基本问题并不是一件容易的事, 而是有许多理论和实际问题值得深入细致地研究的. 经过这半个世纪来众多数值代数专家的不断探索和研究, 目前有关的方法和理论已经发展得相对较为成熟, 得到了一大批十分漂亮的实用算法, 但仍有不少问题有待进一步研究解决, 特别是大规模矩阵计算问题仍然是目前科学与工程计算研究的核心问题之一.

三、矩阵分解是设计算法的主要技巧

对于一个给定的矩阵计算问题, 我们研究的首要问题就是, 如何根据给定问题的特点, 设计出求解这一问题的有效的计算方法. 设计算

法的基本思想就是设法将一个一般的矩阵计算问题转化为一个或几个易于求解的特殊问题, 而通常完成这一转化任务的最主要的技巧就是矩阵分解, 即将一个给定的矩阵分解为几个特殊类型的矩阵的乘积. 例如, 如下的两个三角形方程组是容易求解的:

$$\begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

和

$$\begin{bmatrix} u_{11} & \cdots & u_{1,n-1} & u_{1n} \\ & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & u_{n-1,n-1} & u_{n-1,n} \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}.$$

对于一般的线性方程组 $Ax = b$, 我们就可首先将矩阵 A 作分解 $PA = LU$, 其中 P 是排列方阵, L 是下三角阵, U 是上三角阵; 然后再通过求解两个三角形方程组

$$Ly = Pb \quad \text{和} \quad Ux = y$$

来得到原方程组的解. 这样, 就将如何求解线性方程组的问题转化为如何实现上述矩阵分解的问题. 这正是下一章将要介绍的主要内容.

四、敏度分析与误差分析

由于误差的存在, 用计算机做数值计算所得到的结果很少是精确的. 通常误差主要有两个来源: 一是原始数据本身就有误差, 这是由测量或观察不准确所引起的; 二是由计算过程产生的误差. 因此, 当我们用某种算法求解某一矩阵计算问题得到计算解之后, 自然要问: 计算解与真解相差多少? 这就是计算的精确性问题. 要回答这一问题, 需要做两个方面的理论分析: 敏度分析与误差分析.