

地学中的矩阵计算 及计算机实现

姜佩仁 刘晓华 主编

吉林大学出版社

地学中的矩阵计算 及计算机实现

姜佩仁 刘晓华 主编

吉林大学出版社

内 容 提 要

本书系统地阐述了有关矩阵计算的主要内容：矩阵的约化与分解，线性代数方程组的数值解法，矩阵特征值问题的数值解法以及上述这些方法的计算程序和实例。最前面补充介绍了与本书内容有关的线性代数学的若干知识。

本书注重基本理论与基本算法，更注重算法的计算程序与实际算例，强调可行性与实用性。

本书可作为高等工科院校研究生及高年级学生教材或参考书，亦可供有关工程技术人员参考。

地学中的矩阵计算及计算机实现 姜佩仁、刘晓华 主编

责任编辑：崔晓光
吉林大学出版社出版
(长春市东中华路29号)

封面设计：孙 泓
吉林大学出版社发行
长春地质学院印刷厂印刷

开本：787×1092毫米 1/32 1993年12月第1版
印张：13,125 1993年12月第1次印刷
字数：292千字 印数：1 - 200 册

ISBN 7-5601-1466-0/G.167

定价：7.00元

前 言

随着近代科学技术的不断进步，应用数学（包括计算数学、运筹学、控制论、经济数学、信息科学、数理统计、离散数学等等）得到了迅速的发展和广泛的应用。正如美国数学家P·D·Lax院士1988年在美国数学会成立100周年大会上所说：“应用科学是技术的基本成份，而应用数学则是应用科学的核心部分。”美国埃克森石油公司研究开发部总裁Edward E·Da-Vid说：“当今如此称颂的高技术，本质上是一种数学技术。”而在应用数学中，矩阵的理论与计算，又渗透到各个方面，成为某些学科的核心或重要的基础，许多问题就直接归结为矩阵的计算，成为解决许多问题的有力工具。

在地学领域中，随着从定性描述到定量计算的巨大飞跃，随着计算机的广泛应用，更是离不开矩阵的理论与计算。例如，在地球物理场的正反演计算和数字信号处理中，在地下水流体计算和水质污染预测中，都要求一些数学物理方程的数值解，而这些问题最终都导致至矩阵的计算；在数学地质学中，一些多元统计方法本身，就是概率论、数理统计与矩阵理论相结合的产物。可见，矩阵的理论与计算，同样是解决地学中的许多问题的有力工具。

矩阵的计算主要包括线性代数方程组的数值解法和矩阵特征值问题的数值解法两大部分。当然，也包括了矩阵的各种约化与分解技术。随着计算机科学的进步，这些内容也越来越丰富，不仅有了许多好的算法，而且也有了在计算机上

实现这些算法的可靠的、完善的计算程序。

我们写这本书的目的，就是为了将应用数学中这一最基本、最常用的内容，介绍给我们的硕士和博士研究生们，使他们掌握近代科学中的这一有力工具，以利于他们将来的发展。当然，也可供有关的科技工作者们参考。

对于地学领域中的研究生和广大科技工作者来说，学习本书的目的不是为了当数学家，而是为了掌握这些基本理论与基本算法，特别是会用计算机进行实际计算，以便为自己的专业服务。所以，本书的最大特点是不仅有理论上的论证与推导，而且还给出具体的公式与算法，特别是又给出这些算法的计算程序及计算实例，充分体现了对读者负责到底的精神。为了便于读者学习本书的内容，在本书的前面特地补充了一章基础知识，使本书的内容与线性代数学的内容相衔接，又为本书后面的内容打好必要的基础。

在本书所给出的计算程序中，需要经常调用的一些公用子程序，我们将它们集中放在本书第六章公用子程序集 PUBLIC.FOR 中，以便查阅，在此特别说明。

由于编写时间紧迫，书中如有不当之处，恳请读者批评指正。

编著者
于长春地质学院

目 录

第一章	若干基础知识	1
§ 1	向量与空间	1
1.1	向量及其线性相关性	1
1.2	线性空间的概念	3
1.3	基底、坐标与维数	4
1.4	线性子空间	6
1.5	子空间的和与交	7
1.6	子空间的直和	10
1.7	Euclid空间	11
1.8	Euclid空间的标准正交基	13
1.9	子空间的正交关系	14
1.10	向量到子空间的距离 最小二乘法	16
§ 2	矩阵与范数	18
2.1	矩阵及其各种特殊类型	18
2.2	矩阵的分块	25
2.3	矩阵的数量特征	30
2.4	向量的范数和极限定理	32
2.5	矩阵的范数	38
2.6	矩阵级数的收敛性	43
第二章	矩阵的约化与分解	46
§ 1	矩阵的初等变换	46
1.1	初等变换与初等矩阵	46
1.2	初等消去变换与初等消去矩阵	49

§ 2	矩阵的三角约化	50
2.1	Gauss消去法	50
2.2	Gauss主元素消去法	57
§ 3	矩阵的三角——三角分解	63
3.1	非奇异方阵的LU分解	63
3.2	对称正定矩阵的Cholesky分解	73
3.3	带状矩阵的LU分解	77
§ 4	正交变换与正交矩阵	84
4.1	正交变换	84
4.2	平面旋转阵	89
4.3	镜象反射阵	91
4.4	旋转与反射的关系	94
§ 5	矩阵的正交——三角分解	96
5.1	Householder变换与矩阵的正交——三角分解	96
5.2	Givens变换与矩阵的正交——三角分解	106
5.3	矩阵的直接正交三角化	113
§ 6	正交相似变换与实对称矩阵的谱分解	122
6.1	正交相似变换	123
6.2	实对称矩阵的谱分解定理	124
6.3	谱分解的计算——Jacobi旋转法	130
§ 7	任意矩阵的奇异值分解	143
7.1	奇异值分解定理	143
7.2	奇异值分解的算法	147
§ 8	化一般非奇异矩阵为上Hessenberg阵	153
§ 9	矩阵约化与分解的计算程序	157
9.1	非奇异阵LU分解的计算程序	157

9.2	Cholesky分解的计算程序	159
9.3	带状矩阵LU分解的计算程序	160
9.4	矩阵的QR分解的计算程序	163
9.5	矩阵的奇异值分解的计算程序	167
9.6	化一般实矩阵为上Hessenberg阵的计算程序	177
第三章	解线性方程组的直接法	180
§ 1	关于线性方程组的基本知识	181
1.1	线性方程组的各种形状	181
1.2	线性方程组的各种写法	181
1.3	线性方程组解的存在与唯一性	182
1.4	线性方程组解的结构	184
§ 2	Gauss消去法	187
2.1	计算公式	187
2.2	可行性定理与计算工作量	189
§ 3	Gauss主元素消去法	190
3.1	列主元消去法	190
3.2	全主元消去法	191
§ 4	LU分解法	193
4.1	不选主元的LU分解法	193
4.2	选列主元的LU分解法	195
4.3	全主元原位分解法	197
§ 5	Cholesky分解法	205
§ 6	带状方程组的解法	208
6.1	解三对角方程组的追赶法	209
6.2	解一般带状方程组的LU分解法	211
6.3	解大型稀疏方程组的技巧问题	213

§ 7	解方程组的直接法的误差分析	214
7.1	计算机上的舍入误差	214
7.2	方程组对舍入误差的敏感性	215
7.3	消元误差的估计	218
7.4	三角方程组解的误差估计	218
§ 8	矛盾方程组的近似解法	219
8.1	矛盾方程组与最小二乘方解	219
8.2	最小二乘方解与广义逆矩阵	222
8.3	线性最小二乘方问题的法方程组	223
8.4	解 $LS-A, b$ 问题的 QR 分解法	225
§ 9	解线性方程组的直接法的计算程序及实例	227
9.1	LU 分解法的计算程序	227
9.2	Cholesky 分解法的计算程序	229
9.3	解三对角方程组的追赶法的计算程序及实例	230
9.4	解一般带状方程组的 LU 分解法的计算程序	232
9.5	解 $LS-A, b$ 问题的 QR 分解法的计算程序及实例	234
9.6	广义逆矩阵 A^+ 的计算程序及实例	240
第四章	解线性方程组的迭代法	246
§ 1	Jacobi 迭代法	246
§ 2	Gauss — Seidel 迭代法	249
§ 3	松弛法	251
§ 4	迭代法的收敛定理及误差估计	254
4.1	问题的引出	254
4.2	准备知识	255

4.3	迭代法的收敛定理	256
§ 5	最速下降法	261
5.1	最速下降法的基本思想	261
5.2	迭代公式的构造	264
5.3	最速下降法的收敛性定理	267
§ 6	共轭梯度法	268
6.1	算法的构造	269
6.2	算法的特征	273
6.3	极小化性质	276
§ 7	解线性方程组的迭代法的计算程序及实例	280
7.1	Jacobi迭代法的计算程序及实例	280
7.2	G—S迭代法的计算程序及实例	283
7.3	SOR法的计算程序及实例	286
7.4	共轭梯度法的计算程序及实例	292
第五章	矩阵特征值问题的数值解法	297
§ 1	补充知识	297
1.1	矩阵的特征值与特征向量	297
1.2	矩阵特征值的估计	301
1.3	矩阵特征值问题的敏感性	305
1.4	矩阵特征值问题的解法概述	306
§ 2	乘幂法与反幂法	307
2.1	乘幂法	307
2.2	反幂法	314
§ 3	对称矩阵的子空间迭代法	319
3.1	基本算法	319
3.2	收敛性定理	321
§ 4	QR方法	324

4.1	基本QR方法	326
4.2	原点移位QR算法	327
4.3	特征向量的计算	331
§ 5	广义特征值问题简介	332
§ 6	矩阵特征值问题的计算程序及实例	333
6.1	实对称矩阵特征值问题的计算程序及实例	333
6.2	一般实矩阵特征值问题的计算程序及实例	336
6.3	用QR方法解Hessenberg型矩阵特征值问题的 计算程序	339
6.4	用QL方法解三对角阵特征值问题的计算程 序及实例	348
6.5	广义特征值问题的计算程序及实例	353
第六章	公用子程序集PUBLIC.FOR	356
1	BEBAK	356
2	BEBALC	356
3	BEHQR	359
4	BEQL2	363
5	BEQLRT	365
6	BETRAN	367
7	BETRD1	368
8	BETRD2	370
9	BJAZX	372
10	BUEROR	372
11	ISAMAX	373
12	JACOBI	374

13	REDUCE	376
14	SASUM	378
15	SAXPY	378
16	SCOPY	379
17	SDOT	380
18	SERROR	381
19	SMACH	382
20	SNRM2	382
21	SROT	384
22	SROTG	384
23	SSCAL	385
24	SSWAP	386
25	SVTMRX	387
26	TMX8X5	389
27	UERSET	390
28	UERTST	391
29	UGETIO	396
30	USPKD	398
31	VSH12	398
32	WLGING	395
33	WLSVDB	399
34	WLSVG1	403
36	WLSVG2	404
	主要参考书	405
	人名索引	406
	常用符号	407

第一章 若干基础知识

§1 向量与空间

讲矩阵离不开向量. 可以认为矩阵就是由向量构成的. 矩阵的一些性质或特征, 往往是由向量的特性决定的. 例如, 矩阵的秩, 就是由其行向量或列向量的线性无关性决定的. 为此, 我们首先复习一下有关向量的基本知识, 特别是向量的线性相关性问题.

1.1 向量及其线性相关性

定义 1.1 由数域 P 中的 n 个数按照一定的次序排列成的一个 n 元有序数组 (a_1, a_2, \dots, a_n) , 称为数域 P 上的一个 n 维向量, 记为

$$a = (a_1, a_2, \dots, a_n)$$

其中 a_i ($i=1, 2, \dots, n$) 称为向量 a 的分量.

在几何上用有向线段 \overline{AB} 表示一个向量, 既有大小, 又有方向, 而将有向线段放在三维直角坐标系中, 起点 A 与坐标原点重合, 终点 B 的坐标 (x, y, z) , 就是这里所说的一个 3 维向量. 这个数组 (x, y, z) 既能表示向量的大小, 也能表示向量的方向.

对于 n 维向量也定义了一些基本运算法则, 例如相等, 加法, 数量乘法, 内积, 模, 夹角, 正交等等, 这里就不作重复了. 我们重点复习一下向量的线性相关性问题.

定义 1.2 设 m 个 n 维向量

$$\begin{aligned}
 \mathbf{a}_1 &= (a_{11}, a_{12}, \dots, a_{1n}) \\
 \mathbf{a}_2 &= (a_{21}, a_{22}, \dots, a_{2n}) \\
 &\dots\dots\dots \\
 \mathbf{a}_m &= (a_{m1}, a_{m2}, \dots, a_{mn})
 \end{aligned}
 \tag{1.1}$$

如果存在一组不全为零的常数

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$$

使得

$$\lambda_1 \mathbf{a}_1 + \lambda_2 \mathbf{a}_2 + \dots + \lambda_m \mathbf{a}_m = \mathbf{0} \tag{1.2}$$

成立, 则称这 m 个向量是线性相关的; 如果只有当 m 个常数全为零时, (1.2) 式才成立, 则称这 m 个向量是线性无关的.

(1.2) 式左端的形式, 称为是 m 个向量的线性组合.

关于 n 维向量的线性相关性, 有两个基本定理, 三个判定方法, 这里只作简单复习, 不作证明.

定理 1.1 向量组 (1.1) 线性相关的充分必要条件是, 其中某一向量为其余诸向量的线性组合.

定理 1.2 若向量 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_r$ 线性无关, 而向量 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_r, \mathbf{b}$ 线性相关, 则 \mathbf{b} 可唯一地由前 r 个向量线性表出, 即

$$\mathbf{b} = \lambda_1 \mathbf{a}_1 + \lambda_2 \mathbf{a}_2 + \dots + \lambda_r \mathbf{a}_r, \tag{1.3}$$

判定向量组 (1.1) 线性相关与否的方法, 有三种情况:

(1) 若 $m=n$, 则当

$$\begin{vmatrix}
 a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\
 a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\
 \dots & \dots & \dots & \dots \\
 a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn}
 \end{vmatrix} \neq 0$$

时, 向量组 (1.1) 线性无关, 否则, 线性相关.

(2) 当 $m > n$ 时, 其中必有一向量是其余诸向量的线性组

合，故由定理 1.1 向量组 (1.1) 线性相关。

(3) 当 $m < n$ 时，如果能找到一个 m 阶子式不等于零，例如

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mm} \end{vmatrix} \neq 0$$

则向量组 (1.1) 线性无关，否则，线性相关。

判定向量组 (1.1) 是否线性相关的这三种方法，和以后判定一个矩阵的秩，有直接的关系。因为向量组 (1.1) 可以排列成一个 $m \times n$ 阶矩阵，其中线性无关的向量的个数，就是矩阵的秩。

1.2 线性空间的概念

定义 1.3 设 V 是向量的一个非空集合， P 是一个数域。在集合 V 中定义了一种运算——加法，即给出了一个运算法则，对于任意的 $\alpha, \beta \in V$ ，总有唯一的 $\gamma \in V$ 与它们对应，称为 α 与 β 的和，记为 $\gamma = \alpha + \beta$ ；在 P 与 V 之间定义了一种运算——数量乘法，即对于任一 $\lambda \in P$ 及任一 $\alpha \in V$ ，总有唯一的 $\delta \in V$ 与它们对应，称为 λ 与 α 的数量积，记为 $\delta = \lambda\alpha$ 。如果这两种运算——加法与数量乘法（称为线性运算）满足下述八条规则，则称 V 为数域 P 上的线性空间。

加法规则：

(1) $\alpha + \beta = \beta + \alpha$

(2) $(\alpha + \beta) + \gamma = \alpha + (\beta + \gamma)$ ；

(3) 对于元素 $O \in V$ 及任一 $\alpha \in V$ ，都有

$$\alpha + O = \alpha$$

(称此 O 为 V 的零元素)；

(4) 对于每一 $\alpha \in V$, 都有 $\beta \in V$, 使得

$$\alpha + \beta = 0$$

(称 β 为 α 的负元素).

数量乘法规则:

$$(5) 1\alpha = \alpha;$$

$$(6) \lambda(\mu\alpha) = (\lambda\mu)\alpha;$$

数量乘法与加法之间的规则:

$$(7) (\lambda + \mu)\alpha = \lambda\alpha + \mu\alpha;$$

$$(8) \lambda(\alpha + \beta) = \lambda\alpha + \lambda\beta.$$

其中 α, β, γ 是 V 中任意元素, λ, μ 是 P 中任意数.

我们理解定义 1.3 时, 要抓住三个要点:

(1) 有一个向量的非空集合 V 与一数域 P ;

(2) 在 V 内与 V, P 之间共定义了两种运算法则——加法与数量乘法(它们共有八条性质);

(3) 集合 V 对这两种运算具有封闭性, 即运算后得到的新的元素, 总还在 V 内.

例如, 实数域 R 上的全体 n 维向量的集合

$$R^n = \{x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \mid x_1, x_2, \dots, x_n \in R\}$$

可构成一个实数域 R 上的线性空间, 因为按已定义了的 n 维向量的加法及数量乘法的法则, 显然满足定义 1.3 中的八条规则, 并且 R^n 对这两种运算具有封闭性.

又如, 全体 $m \times n$ 阶矩阵的集合

$$R^{m \times n} = \{A = (a_{ij})_{m \times n} \mid a_{ij} \in R, i = 1, \dots, m; j = 1, \dots, n\}$$

也可以构成实数域 R 上的线性空间, 因为按已定义了的矩阵加法及数量乘法的法则, 显然满足定义 1.3 中的八条规则, 并且 $R^{m \times n}$ 对这两种运算具有封闭性.

1.3 基底、坐标与维数

定义 1.4 在线性空间 V 中, 如果存在一最大线性无关向量组

$$\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$$

使 V 中其余任一向量 β , 都可唯一地由这组向量线性表出, 即

$$\beta = \lambda_1 \alpha_1 + \lambda_2 \alpha_2 + \dots + \lambda_n \alpha_n$$

则称向量组 A 为线性空间 V 的一个基底(基底中的向量称为基向量); 称 n 个有序常数

$$(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$$

为向量 β 在这个基底下的坐标; 称基底中基向量的个数为这个线性空间的维数, 记为 $\dim V$. 这里

$$\dim V = n$$

例如, 在数域 R 上的全体 n 元有序数组(即 n 维向量)

$$(a_1, a_2, \dots, a_n)$$

构成的线性空间 R^n 中, 有一最大线性无关的向量组

$$e_1 = (1, 0, \dots, 0)$$

$$e_2 = (0, 1, \dots, 0)$$

.....

$$e_n = (0, 0, \dots, 1)$$

它就构成空间 R^n 的一个基底, R^n 中任一向量

$$\beta = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$$

都可唯一地由这组基向量线性表出, 即

$$\beta = \lambda_1 e_1 + \lambda_2 e_2 + \dots + \lambda_n e_n$$

而 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 就是向量 β 在这个基底下的坐标. 显然, 空间 R^n 的维数

$$\dim R^n = n$$

关于线性空间, 我们再做几点注解:

(1)“基底”是空间中的主要内容, 有了它就可以表示出空