



普通高等教育“十五”国家级规划教材

# 计算机科学计算

施吉林 张宏伟 金光日 编

 高等教育出版社

## · 内容提要

本书为普通高等教育“十五”国家级重点教材。全书主要介绍在计算机上求解数值问题的各种数值方法,包括矩阵计算、插值与逼近及其应用、数值微积分、常微分方程数值解法和小波变换等,以及以附录形式出现的矩阵分析、计算理论简介和数值实验。由浅入深,叙述严谨,方法的系统性较强,偏重于数值计算方法的一般原理。每章均附有习题,并提供三个附录供任课教师选用。

本书可作为数学与应用数学、概率统计等专业本科生,以及理工科非数学专业硕士研究生的“数值计算方法”课程教材,也可供科学计算工作人员学习和参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

计算机科学计算/施吉林,张宏伟,金光日编. —北京:  
高等教育出版社,2005.6

ISBN 7-04-016384-5

I. 计... II. ①施...②张...③金... III. 电子  
计算机—科学计算—高等学校—教材 IV. TP301.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 028649 号

---

出版发行	高等教育出版社	购书热线	010-58581118
社 址	北京市西城区德外大街 4 号	免费咨询	800-810-0598
邮政编码	100011	网 址	<a href="http://www.hep.edu.cn">http://www.hep.edu.cn</a>
总 机	010-58581000		<a href="http://www.hep.com.cn">http://www.hep.com.cn</a>
经 销	北京蓝色畅想图书发行有限公司	网上订购	<a href="http://www.landaco.com">http://www.landaco.com</a>
印 刷	北京市鑫霸印务有限公司		<a href="http://www.landaco.com.cn">http://www.landaco.com.cn</a>
开 本	787×960 1/16	版 次	2005 年 6 月第 1 版
印 张	19.25	印 次	2005 年 6 月第 1 次印刷
字 数	350 000	定 价	26.20 元

---

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

物料号 16384-00

# 前 言

“计算机科学计算”是普通高等教育“十五”国家级规划教材,适于作为数学与应用数学、概率统计专业,以及理工科非数学专业硕士研究生的“数值计算方法”课程的教材。自计算机深入到人类社会的各个领域以来,科学计算、理论计算和实验并列为三大科学方法,特别是它改变了传统的计算数学研究的内容和方法,使数值计算方法与计算机的关系更为密切。为了突出计算机的作用,以及本书与传统数值计算方法有所不同,定名为“计算机科学计算”。它是在2001年8月完成的《计算机现代数值方法》讲义的基础上,经三年多试用和两次修改而成的,目标是培养读者具有以计算机为工具进行科学计算的能力,能掌握初步的数值计算理论基础。本书具有如下特点:

1) 在体系上尽量改变以数学内容为块块的数值方法分割体系,建立以数值方法为内容,并将不同数学内容的方法尽可能串联起来的新体系,不但便于教学,而且有助于学员对公式、方法有连贯性了解,便于记忆。

2) 在教学内容上,精选了常用的数值方法,尽可能引进一些科学与工程技术上有广泛应用前景的现代方法和内容,如小波变换、计算理论(附录)、精细积分法等。考虑到有些学员矩阵知识的不足,增写了矩阵分析介绍(附录),以供参考。

3) 在内容的处理方法上,考虑本教材的学习对象已具有一定的数学基础,对前五章的内容介绍较为精练,对后面的内容着重拓宽知识面,并向学员指明如何进一步学习及学习参考书。

4) 为了缩小数值计算方法与数学软件平台使用上的差异,不但在方法介绍上尽量突出方法的特点及其功能,而且选择有代表性的数值问题让学员使用数学软件包上机进行数值实验,为此编写了数值实验附录。

全书共分九章,包括矩阵计算、函数逼近与数值微积分、迭代法与常微分方程数值解等内容 and 三个附录。由施吉林、张宏伟主编,并由施吉林、张宏伟、金光日各负责三章和有关附录而完成全书的编写。讲完全书的主要内容约需60学时左右。考虑教学对象的不同,根据需要可以对内容进行适当的删改。

本书的编写和出版均得到了高等教育出版社及其理科分社、大连理工大学研究生院和应用数学系的大力支持与资助,并得到我们的同事和讲课教师的鼓

励和帮助,在此我们一并表示衷心的感谢。限于作者的水平,书中不当乃至错误难免,恳请同行与读者批评指正。

作 者

2004年10月

# 目 录

第 1 章 绪论 .....	1
1.1 计算机科学计算研究的对象和特点 .....	1
1.2 向量与矩阵的范数 .....	3
1.2.1 向量范数 .....	3
1.2.2 范数的等价性 .....	4
1.2.3 矩阵范数 .....	5
1.2.4 相容矩阵范数的性质 .....	8
1.3 误差分析与数值方法的稳定性 .....	9
1.3.1 误差的来源与分类 .....	9
1.3.2 误差的基本概念和有效数字 .....	9
1.3.3 函数计算的误差估计 .....	11
1.3.4 计算机浮点数表示和舍入误差 .....	12
1.3.5 数值方法的稳定性和避免误差危害的基本原则 .....	13
习题 1 .....	16
第 2 章 矩阵变换和计算 .....	18
2.1 矩阵的三角分解及其应用 .....	18
2.1.1 Gauss 消去法与矩阵的 $LU$ 分解 .....	18
2.1.2 Gauss 列主元消去法与带列主元的 $LU$ 分解 .....	22
2.1.3 对称矩阵的 Cholesky 分解 .....	27
2.1.4 三对角矩阵的三角分解 .....	28
2.1.5 条件数与方程组的性态 .....	30
2.1.6 矩阵的 QR 分解 .....	33
2.2 特殊矩阵的特征系统 .....	36
2.3 矩阵的 Jordan 分解介绍 .....	38
2.4 矩阵的奇异值分解 .....	45
2.4.1 矩阵奇异值分解的几何意义 .....	45
2.4.2 矩阵的奇异值分解 .....	46
2.4.3 用矩阵的奇异值分解讨论矩阵的性质 .....	48
习题 2 .....	49
第 3 章 逐次逼近法 .....	52
3.1 解线性方程组的迭代法 .....	52

3.1.1	简单迭代法 .....	53
3.1.2	迭代法的收敛性 .....	58
3.2	非线性方程的迭代解法 .....	63
3.2.1	简单迭代法 .....	63
3.2.2	Newton 迭代法及其变形 .....	68
3.2.3	多根区间上的逐次逼近法 .....	73
3.3	计算矩阵特征问题的幂法 .....	76
3.3.1	幂法 .....	76
3.3.2	反幂法 .....	81
3.4	迭代法的加速 .....	83
3.4.1	基本迭代法的加速 .....	84
3.4.2	Aitken 加速 .....	86
3.5	共轭梯度法 .....	90
3.5.1	最速下降法 .....	91
3.5.2	共轭梯度法(简称 CG 法) .....	92
	习题 3 .....	96
第 4 章	插值与逼近 .....	102
4.1	引言 .....	102
4.1.1	插值问题 .....	102
4.1.2	插值函数的存在唯一性、插值基函数 .....	103
4.2	多项式插值和 Hermite 插值 .....	104
4.2.1	Lagrange 插值公式 .....	104
4.2.2	Newton 插值公式 .....	105
4.2.3	插值余项 .....	107
4.2.4	Hermite 插值 .....	108
4.2.5	分段低次插值 .....	111
4.3	三次样条插值 .....	113
4.3.1	样条函数 .....	113
4.3.2	三次样条插值及其收敛性 .....	114
4.4	$B$ -样条函数 .....	119
4.4.1	$B$ -样条函数及其基本性质 .....	119
4.4.2	$B$ -样条函数插值 .....	122
4.5	正交函数族在逼近中的应用 .....	125
4.5.1	正交多项式简介 .....	125
4.5.2	函数的最佳平方逼近 .....	128
4.5.3	数据拟合的最小二乘法 .....	129

习题 4 .....	132
第 5 章 插值函数的应用 .....	134
5.1 基于插值公式的数值微积分 .....	134
5.1.1 数值求积公式及其代数精度 .....	134
5.1.2 复化求积公式 .....	137
5.1.3 数值微分公式 .....	139
5.2 Gauss 型求积公式 .....	141
5.2.1 基于 Hermite 插值的 Gauss 型求积公式 .....	142
5.2.2 常见的 Gauss 型求积公式与 Gauss 型求积公式的数值稳定性 .....	144
5.3 外推加速原理与 Romberg 算法 .....	145
5.3.1 逐次分半算法 .....	145
5.3.2 外推加速公式与 Romberg 算法 .....	147
5.4 常微分方程数值解法 .....	150
5.4.1 基于数值积分的解法 .....	150
5.4.2 Runge-Kutta 显化求解公式 .....	153
习题 5 .....	154
第 6 章 数值积分 .....	156
6.1 引言 .....	156
6.2 反常积分的数值方法 .....	156
6.2.1 无界函数的数值积分 .....	156
6.2.2 无穷区间上函数的数值积分 .....	159
6.3 振荡函数的数值积分法 .....	161
6.4 二重积分的机械求积法 .....	164
6.5 重积分 Monte-Carlo 求积法 .....	170
习题 6 .....	172
第 7 章 常微分方程的数值解法 .....	173
7.1 引言 .....	173
7.2 基于 Taylor 展开式的求解公式 .....	174
7.2.1 基于 Taylor 展开式的求解公式 .....	174
7.2.2 四阶显式 Runge-Kutta 法 .....	178
7.3 刚性问题及其求解公式 .....	188
7.3.1 刚性问题 .....	189
7.3.2 隐式 Runge-Kutta 法 .....	192
7.3.3 线性多步法 .....	195
7.4 边值问题的数值解法 .....	197

7.4.1 打靶法	197
7.4.2 差分法	201
7.5 暂态历程的精细计算方法	204
7.5.1 关于暂态计算的方法	204
7.5.2 齐次方程的精细积分	205
7.5.3 非齐次方程的精细积分	207
7.5.4 数值例题	207
7.5.5 精度分析	209
习题 7	210
第 8 章 小波变换	213
8.1 从 Fourier 变换到小波变换	213
8.1.1 Fourier 变换	213
8.1.2 窗口 Fourier 变换	215
8.1.3 小波变换	216
8.2 多分辨率分析与正交小波基的构造	218
8.3 Mallat 算法	221
习题 8	223
第 9 章 矩阵特征对的数值解法	224
9.1 求特征方程根的方法	224
9.1.1 $A$ 为 Jacobi 矩阵	224
9.1.2 $A$ 为对称矩阵	228
9.2 分二治之法	231
9.2.1 矩阵的分块	232
9.2.2 分二治之计算	235
9.3 QR 法	238
9.3.1 QR 迭代的基本方法	238
9.3.2 Hessenberg 矩阵的 QR 法	239
9.3.3 带有原点位移的 QR 法	242
9.3.4 对称 QR 法	245
9.4 Lanczos 算法	246
9.4.1 Lanczos 迭代	247
9.4.2 Lanczos 迭代的收敛性讨论	249
习题 9	253
附录 1 矩阵分析介绍	256
一、矩阵序列与矩阵级数	256
1. 矩阵序列	256



---

2. 矩阵级数 .....	258
二、矩阵幂级数 .....	261
三、矩阵的微积分 .....	267
1. 相对于数量变量的微分和积分 .....	267
2. 相对于矩阵变量的微分 .....	268
3. 矩阵微积分在微分方程中的应用 .....	269
习题 .....	272
附录2 有关计算理论简介 .....	274
一、关于误差分析 .....	274
1. 关于数值问题的性态 .....	274
2. 关于算法的稳定性 .....	279
二、关于计算复杂性 .....	280
1. 简述“问题复杂度” .....	280
2. 算法的有效性 .....	282
附录3 数值实验 .....	285
符号说明 .....	294
参考文献 .....	296

# 第 1 章 绪 论

## 1.1 计算机科学计算研究的对象和特点

20 世纪最伟大的科学技术发明——计算机问世以来,它已“无孔不入”地深入到人类社会的各个领域,正在改变着人们的生活、社会交往、劳动方式、政府决策和科学技术研究方法等,使科学计算、理论计算和实验并列为三大科学方法,特别是改变了传统计算数学的研究方法、内容和它的地位与作用.传统的计算数学主要研究各种计算问题的有效算法及其相关数学理论.而现代意义下的计算数学主要研究的是在计算机上计算的有效算法及其相关理论,从而使它成为一门新学科——科学计算.为了突出计算机的作用和有别于以往的科学和工程计算,本书定名为“计算机科学计算”.算法是本书研究的主要内容.根据课程设置的目的是和课时的限制,本课程只能研究基本数值算法,对于偏微分方程数值解法和非数值算法,以及算法的设计与表达只能割爱了.

计算机是计算模型的具体体现,凡是用算法(满足一定条件的计算过程)能解决的问题,一定也能用计算机解决;算法解决不了的问题,计算机也解决不了,因此,算法与计算机在功能上具有等价性.任何数学问题只要完成了它的算法设计,就等于该问题可以用计算机进行计算,并得到问题的结论.

当今计算机发展日新月异,但是它的结构基本上还属 Von Neumann 结构,其基本原理仍未背离 Turing 机,只是根据实际需要进行了重新设计.1945 年第一台计算机问世时,它的运算需要由人来控制,换算一道题时需要改造计算机的结构,即计算机的解题要依靠计算机硬件的结构. Von Neumann 1946 年提出了将解题的步骤也放在计算机中,从而可以将解题依靠“硬”办法,改变成依靠“软”办法,即依靠算法的设计.此举不但在技术上来了个飞跃,而且大大地提高了计算速度,为计算机的发展和广泛应用扫清了障碍.因此,直到现在还有人将电子计算机称为 Von Neumann 计算机.

算法,它是解决某一类问题且满足目的性、机械性、离散性、有穷性和可执行性的计算过程,而不是单指解决某个数值问题的数值计算方法,所谓“数值问题”是指“输入数据与输出数据之间函数关系的一个确定而无歧义的描述”.算法中所指的“一类问题”,是根据算法的可计算否来划定的,它将所有问题划分成三

类,即算法“计算不了”的问题;算法“实际计算不了”的问题和算法“可以计算”的问题.本书主要研究“可以计算”问题中的微积分、常微分方程和代数等内容中数值问题的算法,简称数值算法.数值算法就其内容而言,应包括数值计算方法(简称数值方法),数据的输入、输出,以及解题的步骤,而且数值方法中的运算只能是四则运算和逻辑运算.将算法的内容进行有机组合而形成完整的解题计算过程就是算法设计.算法用计算机高级语言进行完整的表达就是计算机程序.因此,计算机程序是算法用计算机语言的一种表达形式.算法的计算过程可以只有一个进程,也可以有几个进程,前者称串行算法,对应的计算机称串行计算机,后者称并行算法,对应的计算机称并行计算机.

算法“可以计算”的问题,并不等于该问题用任何具体算法都能计算出满意的结果.事实上,同一个数值问题,对于解决问题的算法甲能计算出满意的结果,对解该问题的算法乙却计算不出满意的结果,甚至“实际计算不了”.对于同样都能计算出满意结果的算法,也有“好”、“坏”之分,在同样计算精度下好坏的标准主要用计算速度和占用计算机内存来分,即用计算复杂性的好坏来衡量,计算速度快、占用内存少的算法,即时、空复杂性好的算法,称之为有效算法.算法好坏的关键是数值方法,而数值方法又随着科学技术的发展而在不断改进和更新,因此,数值方法的好坏具有时代的烙印,过去的好数值方法并不等于就是现代行之有效的数值方法.本书主要研究现代还行之有效的数值方法.

例如,线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

的求解.

早在18世纪Cramer已给出了求解法则,即设 $D$ 为方程组的系数行列式, $D_i$ 为系数行列式中的第 $i$ 列换成常数列后的行列式,若 $D \neq 0$ 则 $x_i = \frac{D_i}{D}, i = 1, 2, \cdots, n$ .

从理论上讲它是一个求线性方程组解的数值方法,且对阶数不高的方程组行之有效.但是到了20世纪50年代出现电子计算机后,对原有的数值方法的“实际可计算性”引起了充分重视,即理论正确的数值方法在计算机上是否实际可行.对于20阶线性方程组,如果用Cramer法则求解,在算法中的乘、除运算将达 $9.7 \times 10^{20}$ 次,使用每秒一亿次的串行计算机计算也需要30万年才能算得它的解,对于20世纪的计算机,这种算法是“实际计算不了”的.从而人们开始研究

其他数值方法,例如 Gauss 消去法,虽然它最终还是要用 Cramer 法则来计算结果,但是对它的计算过程已作根本改进,从而使设计出的算法乘、除运算仅 3 060 次,这在任何一台电子计算机上都能完成.随着科学技术的发展,出现的数学问题也越来越多样化,有些问题用消去法求解达不到精度,甚至算不出结果,从而促使人们对消去法进行改进,又出现了主元消去法,大大提高了消去法的计算精度.但是随着求解方程组的阶数越来越高,当达到百万阶、千万阶时,用主元消去法往往也会出现与 Cramer 法则同样的命运,需要寻求新的数值方法,这就是计算机科学计算生命力的来源.

算法的计算机执行是通过程序来完成,程序已从用机器语言发展到用高级语言,现在已从用高级语言发展到使用软件平台,这种发展对与程序密切相关的算法设计也带来了技术上和要求上的变化,原来需要数个语句才能完成的计算任务,现在只需要一个指令就能完成,因此,算法设计也相应地变得简单,但是它们的数值方法可能是一样的.因此,本书注重数值方法的介绍.在数值方法的内容选取上不但充分考虑科学与工程计算中应用较广和已展示应用前景的新内容、新方法,并尽可能照顾不同读者的需要,而且充分注意内容的实际背景和发挥数学软件平台在教学中的作用.

## 1.2 向量与矩阵的范数

把任何一个向量或矩阵与一个非负实数联系起来,在某种意义下,这个实数提供了向量和矩阵的大小的度量.由于多方面的用途,这样做是方便的.我们希望这样一个数量类似于一个复数的模.一个向量的 Euclid 长度和一个矩阵(当把它看作  $mn$  维向量时)的 Euclid“长度”,都可以作为这样的数量.当一个向量或矩阵的 Euclid 长度小时,我们可以说这个向量或矩阵是小的.把这个数量——范数视为向量或矩阵的一个函数,并且把这样的函数所具有的、看起来是自然的性质列出来.可以看出,能有很多这样的函数. Euclid 长度就是一种.范数函数具有为合理度量一个向量或矩阵的大小所期望的性质.对于每一个范数,相应地有一类矩阵函数,其中每一个函数都可以看作矩阵大小的一种度量.关于范数的第一个应用就是研究这些矩阵和向量的误差估计.第二个应用就是研究矩阵和向量的序列以及级数的收敛准则.

### 1.2.1 向量范数

**定义 1.1** 定义在  $\mathbf{C}^n$  ( $n$  维复向量空间)上的一个非负实值函数,记为  $\|\cdot\|$ ,若该函数满足以下三个条件:即对任意向量  $x$  和  $y$  以及任意常数  $\alpha \in \mathbf{C}$

(复数域),有

(1)  $\|x\| \geq 0$ , 并且  $\|x\| = 0$  的充分必要条件为  $x = 0$ ;

(2)  $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ ;

(3)  $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$ ,

则称函数  $\|\cdot\|$  为  $C^n$  上的一个向量范数,

条件(1)表明非零向量的范数一定为正数,条件(2)表明向量和的范数不超过每一个向量范数的和,该性质亦称为三角不等式,条件(3)表明数乘向量的范数性质,它表明向量范数的齐次性.

设任意  $n$  维向量  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ , ( $x^T$  为向量  $x$  的转置),常用的向量范数有

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|, \quad (1-1)$$

$$\|x\|_2 = \left( \sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{1/2} = \sqrt{x^H \cdot x}, \quad (x^H \text{ 为向量 } x \text{ 的共轭转置}) \quad (1-2)$$

$$\|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|, \quad (1-3)$$

$$\|x\|_p = \left( \sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p}, \quad 1 \leq p < +\infty. \quad (1-4)$$

其中  $|x_i|$  表示  $x_i$  的模.上述四种范数分别称为 1, 2,  $\infty$  范数和  $p$ -范数,而且前面三种范数都为  $p$ -范数当  $p = 1, 2, \infty$  时的范数,它们满足范数定义中的三个条件,其证明可参阅[1]、[2].

除上述范数外,最常用的范数是加权的  $p$ -范数,即向量空间每一个坐标分量均带有自己的权.一般情况下,对给定的任意一种向量范数  $\|\cdot\|$ ,其加权的范数可以表示为

$$\|x\|_w = \|Wx\|,$$

其中  $W$  为对角矩阵,其对角元便是它的每一个分量的权系数,如加权的 2-范数为

$$\|x\|_w = \left( \sum_{i=1}^n |\omega_i x_i|^2 \right)^{1/2}, \quad (1-5)$$

更一般地,  $W$  可以是任意的非奇异的矩阵.在实际中最常用的向量范数是向量的 2-范数和加权的向量 2-范数.

### 1.2.2 范数的等价性

在  $C^n$  上可以定义各种向量范数,其数值大小一般不同.但是在这些向量范数之间存在下述重要的关系.根据向量范数的定义可以验证

$$\begin{aligned}\|x\|_{\infty} &\leq \|x\|_1 \leq n \|x\|_{\infty}; \\ \frac{1}{\sqrt{n}} \|x\|_1 &\leq \|x\|_2 \leq \|x\|_1; \\ \frac{1}{\sqrt{n}} \|x\|_2 &\leq \|x\|_{\infty} \leq \|x\|_2.\end{aligned}$$

更一般地有,

**定理 1.1** 设  $\|\cdot\|_{\alpha}$  和  $\|\cdot\|_{\beta}$  为线性空间  $C^n$  上的任意两种向量范数, 则存在两个与向量  $x$  无关的正常数  $c_1$  和  $c_2$ , 使得下面的不等式成立

$$c_1 \|x\|_{\beta} \leq \|x\|_{\alpha} \leq c_2 \|x\|_{\beta}, \text{ 其中 } \forall x \in C^n. \quad (1-6)$$

并称  $\|\cdot\|_{\alpha}$  和  $\|\cdot\|_{\beta}$  为  $C^n$  上的等价范数. 定理 1.1 称为范数等价性定理, 它说明了  $C^n$  上的所有范数彼此等价, 其证明可参考文献[17].

### 1.2.3 矩阵范数

#### 1. 矩阵范数

一个  $m \times n$  矩阵可以看成  $mn$  维向量空间中的一个向量; 矩阵的  $mn$  个分量中的每一个分量均可以看成是一个坐标, 因此任意  $mn$  维的向量范数均可以用来测量矩阵  $A$  的“大小”. 但是矩阵之间还有乘法运算, 因此在定义矩阵范数时应考虑两个矩阵乘积的范数与原有两个矩阵范数间的关系.

**定义 1.2** 定义在  $C^{m \times n}$  ( $m \times n$  维复矩阵集合) 上的一个非负实值函数, 记为  $\|\cdot\|$ , 对任意的  $A, B \in C^{m \times n}$  均满足以下条件:

(1) 非负性: 对任意矩阵  $A \in C^{m \times n}$ , 均有  $\|A\| \geq 0$ , 并且  $\|A\| = 0$  的充分必要条件为  $A = O$ ;

(2) 齐次性:  $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\|, \alpha \in C$ ;

(3) 三角不等式:  $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$ ;

(4) 相容性:  $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|, B \in C^{n \times l}$ ,

则称  $\|\cdot\|$  为  $C^{m \times n}$  上的矩阵范数.

**例 1** 对任意  $m \times n$  矩阵  $A$ , 将其按列分块为  $A = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ , 因此矩阵  $A$  与  $mn$  维向量  $\alpha = (a_1^T, a_2^T, \dots, a_n^T)^T$  是一一对应的, 由向量的范数可定义:

$$\|A\|_{m_1} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|, \quad (1-7)$$

$$\|\alpha\|_F = \left( \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (a_{ij})^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1-8)$$

显然上述两个函数均满足矩阵范数定义中的(1)~(3), 下面验证它们满足相容条件(4). 假设矩阵  $A$  和  $B$  分别为  $m \times l$  和  $l \times n$  阶,

$$\begin{aligned}
\| \mathbf{AB} \|_{m_1} &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \cdots + a_{il}b_{lj}| \\
&\leq \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (|a_{i1}b_{1j}| + |a_{i2}b_{2j}| + \cdots + |a_{il}b_{lj}|) \\
&\leq \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (|a_{i1}| + |a_{i2}| + \cdots + |a_{il}|) \cdot (|b_{1j}| + |b_{2j}| + \cdots + |b_{lj}|) \\
&= \left( \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^l |a_{ik}| \right) \left( \sum_{k=1}^l \sum_{j=1}^n |b_{kj}| \right) = \| \mathbf{A} \|_{m_1} \| \mathbf{B} \|_{m_1}.
\end{aligned}$$

证明(1-8)满足相容条件留作习题.

我们分别称由(1-7)和(1-8)所定义的范数为矩阵的  $m_1$  范数和 Frobenius 范数(简称  $F$ -范数). 由于矩阵运算中, 我们常常要考虑矩阵与向量的乘积, 因此应该考虑矩阵范数与向量范数的相容性的问题.

**定义 1.3** 对于一种矩阵范数  $\| \cdot \|_M$  和一种向量范数  $\| \cdot \|_V$ , 如果对任意  $m \times n$  矩阵  $\mathbf{A}$  和任意  $n$  维向量  $\mathbf{x}$ , 满足

$$\| \mathbf{Ax} \|_V \leq \| \mathbf{A} \|_M \| \mathbf{x} \|_V,$$

则称矩阵范数  $\| \cdot \|_M$  与向量范数  $\| \cdot \|_V$  是相容的.

由例 1 知, 矩阵  $m_1$  范数与向量的 1-范数是相容的, 而矩阵的  $F$ -范数与向量的 2-范数是相容的. 可以证明任意一种相容的矩阵范数必然存在与之相容的向量范数.

## 2. 算子范数

在实际中, 最常用的矩阵范数为由下面定义引出的算子范数.

**定理 1.2** 已知  $C^n$  和  $C^n$  上的同类向量范数  $\| \cdot \|_V$ ,  $\mathbf{A}$  为  $m \times n$  矩阵, 定义

$$\| \mathbf{A} \|_M = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\| \mathbf{Ax} \|_V}{\| \mathbf{x} \|_V} = \max_{\| \mathbf{x} \|_V = 1} \| \mathbf{Ax} \|_V, \quad (1-9)$$

则  $\| \mathbf{A} \|_M$  是一种矩阵范数, 且与已知的向量范数相容.

**证** 由(1-9)立刻可得到  $\| \mathbf{Ax} \|_V \leq \| \mathbf{x} \|_V \| \mathbf{A} \|_M$ , 即相容性成立. 由于  $\| \mathbf{Ax} \|_V$  是  $C^n$  中的有界闭集  $D = \{ \mathbf{x} \mid \| \mathbf{x} \|_V = 1, \mathbf{x} \in C^n \}$  上的连续函数, 故对每个矩阵  $\mathbf{A}$  而言, 都能找到向量  $\mathbf{x}_0$ , 使得  $\| \mathbf{x}_0 \|_V = 1$ , 且  $\| \mathbf{Ax}_0 \|_V = \| \mathbf{A} \|_M$ . 下面证明  $\| \mathbf{A} \|_M$  是一种矩阵范数. 其中(1)非负性和(2)齐次性是显然的. 在此证明(3)和(4).

(3)三角不等式. 假设  $\mathbf{A}$  和  $\mathbf{B}$  分别为  $m \times n$  阶矩阵, 则存在  $\mathbf{x}_1 \in C^n$  满足  $\| \mathbf{x}_1 \|_V = 1$ , 使得

$$\| \mathbf{A} + \mathbf{B} \|_M = \| (\mathbf{A} + \mathbf{B}) \mathbf{x}_1 \|_V = \| \mathbf{Ax}_1 + \mathbf{Bx}_1 \|_V$$

$$\leq \|Ax_1\|_v + \|Bx_1\|_v \leq \|A\|_M + \|B\|_M.$$

(4) 相容性.  $AB = O$  时显然. 设  $AB \neq O$ ,  $A$  和  $B$  分别为  $m \times l$  和  $l \times n$  阶矩阵, 存在  $x_2 \in C^n$  满足  $\|x_2\|_v = 1$ , 使得  $\|AB\|_M = \|(AB)x_2\|_v$ , 并且  $y = Bx_2 \neq 0$ , 因此

$$\|AB\|_M = \frac{\|(AB)x_2\|_v}{\|Bx_2\|_v} \|Bx_2\|_v \leq \frac{\|Ay\|_v}{\|y\|_v} \|B\|_M \leq \|A\|_M \|B\|_M.$$

因此,  $\|\cdot\|_M$  是一种矩阵范数, 并且是一种与向量范数  $\|\cdot\|_v$  相容的矩阵范数.

我们称由关系式(1-9)定义的矩阵范数为从属向量范数  $\|\cdot\|_v$  的矩阵范数简称从属范数或算子范数. 在向量范数中, 最常用的范数为向量的 1-范数、2-范数和  $\infty$ -范数, 下面分别导出从属这三种向量范数的矩阵范数.

### 定理 1.3

$$(1) \|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|; \quad (\text{列范数})$$

$$(2) \|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^H A)}, \quad (\text{谱范数})$$

其中  $\lambda_{\max}(A^H A)$  表示矩阵  $A^H A$  的最大特征值;

$$(3) \|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|. \quad (\text{行范数})$$

证 在此只给出(1)的证明. 设  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ , 则

$$\begin{aligned} \|Ax\|_1 &= \sum_{i=1}^m \left| \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right| \leq \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}| |x_j| = \sum_{j=1}^n \left( \sum_{i=1}^m |a_{ij}| \right) |x_j| \\ &\leq \left( \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}| \right) \sum_{j=1}^n |x_j| = \left( \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}| \right) \|x\|_1, \end{aligned}$$

因此

$$\|A\|_1 = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_1}{\|x\|_1} \leq \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|.$$

为了证明(1), 只需找到  $x_0$ , 使得

$$\frac{\|Ax_0\|_1}{\|x_0\|_1} = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|,$$

下面讨论  $x_0$  的选取.

如果  $\max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}| = \sum_{i=1}^m |a_{ij_0}|$ , 则取  $x_0 = e_{j_0} = (0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$ ,

$$\|Ax_0\|_1 = \|Ae_{j_0}\|_1 = \sum_{i=1}^m |a_{ij_0}|.$$



例2 设  $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$ , 求  $\|A\|_1$ 、 $\|A\|_2$  和  $\|A\|_\infty$ .

解 根据定理 1.3 中的(1)、(2)、(3)可以算得  $\|A\|_1 = 4$ ;  $\|A\|_2 \approx 2.9208$  和  $\|A\|_\infty = 3$ .

### 1.2.4 相容矩阵范数的性质

定理 1.4 设  $\|\cdot\|_M$  为  $C^{n \times n}$  中的一种矩阵范数, 则对任意的  $n$  阶方阵  $A$  均有

$$\rho(A) \leq \|A\|_M. \quad (1-10)$$

其中  $\rho(A)$  为方阵  $A$  的谱半径.

证 设  $|\lambda| = \rho(A)$ ,  $x$  满足  $Ax = \lambda x (x \neq 0)$ , 对于任意  $e \neq 0$ , 有

$$|\lambda| \|xe^T\|_M = \|\lambda xe^T\|_M = \|Axe^T\|_M \leq \|A\|_M \|xe^T\|_M,$$

从而得到  $\rho(A) = |\lambda| \leq \|A\|_M$ .

定理 1.5 对于任给的  $\varepsilon > 0$ , 存在  $C^{n \times n}$  上的一种算子范数  $\|\cdot\|_M$  (依赖矩阵  $A$  和常数  $\varepsilon$ ), 使得

$$\|A\|_M \leq \rho(A) + \varepsilon. \quad (1-11)$$

定理证明见第 2 章的 2.2 节定理 2.8.

定理 1.6  $C^{n \times n}$  上的一种算子矩阵范数  $\|\cdot\|$ , 如果  $A \in C^{n \times n}$  且  $\|A\| < 1$ , 则  $I_n \pm A$  可逆且

$$\|(I_n \pm A)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|A\|}. \quad (1-12)$$

证 用反证法. 若  $I_n \pm A$  奇异, 则齐次线性方程组  $(I_n \pm A)x = 0$  存在非零解  $x_0$ , 即  $(I_n \pm A)x_0 = 0$ . 因此  $Ax_0 = \pm x_0$ . 从而有  $\frac{\|Ax_0\|}{\|x_0\|} = 1$ . 根据矩阵算子范数定义有  $\|A\| \geq 1$ , 与定理假设矛盾. 故  $I_n \pm A$  是可逆的. 即

$$(I \pm A)(I \pm A)^{-1} = I.$$

展开有

$$(I \pm A)^{-1} = I \mp A(I \pm A)^{-1}.$$

利用范数性质有

$$\|(I \pm A)^{-1}\| \leq \|I\| + \|(I \pm A)^{-1}\| \|A\| = 1 + \|(I \pm A)^{-1}\| \|A\|.$$

整理便可得到(1-12)式.