

工程中常用的矩阵计算

—理论算法与FORTRAN程序

史明仁 杨中华 编著
陈 志 高旅端

北京工业大学出版社

内 容 简 介

本书挑选矩阵计算中有代表性的、最常用的算法，介绍它们的理论依据、算法步骤与计算机程序，使有关矩阵计算的理论、方法与算法语言三者融为一体，对读者在学习矩阵计算的基本理论、常用算法以及使用FORTRAN语言编制计算机程序等方面会大有帮助。

本书介绍的算法主要有求解线性方程组的消去法与矩阵分解法、行列式求值与矩阵求逆、一般实矩阵与实对称矩阵的特征根与特征向量的计算，以及矩阵的广义逆和求解线性与非线性最小二乘问题。本书可作为高校教师、本科生、研究生与工程技术人员讲授或学习矩阵计算的教材，也可作为学习线性代数及其计算方法与算法语言的参考书。

工程中常用的矩阵计算 ——理论、算法与FORTRAN程序

史明仁等 编著

*

北京工业大学出版社出版发行
各地新华书店经销
北京通县燕山印刷厂印刷

*

1991年3月第1版 1991年3月第1次印刷
787×1092毫米 16开本 21.875印张 544千字

印数：1~3 000册

ISBN7-5639-0126-4/O·7

定价：8.70元

前 言

随着计算机技术的迅速发展,科学与工程计算的应用范围已扩大到所有的学科领域.实验、理论、科学计算已三足鼎立,相辅相成,成为人类科学活动的三大方法.

矩阵计算是科学计算中最常用、最基本的部分.作者在多次为高校工科教师与科技工作者讲解《常用算法》^[1]的基础上,将讲稿经充实整理,编成此书,希望对读者在掌握矩阵计算的基本理论与常用算法,以及学会用FORTRAN语言编制程序方面有所帮助.

我国各高校在文革以后才开设线性代数与计算方法课,其中的基本理论与算法不能满足科学与工程计算的需要.我们正是针对这一情况,选择矩阵计算中有代表性的、最常用的算法,介绍它们的理论依据、算法概要与计算机程序,使有关矩阵计算的理论、方法及算法语言三者融为一体.

本书的理论基本上是自满足的,不需要读者另外参看其它线性代数或计算方法的参考书,这样便于读者自学.其中的算法采用介于程序与计算公式之间的语言来描述,以帮助读者学会如何把计算公式“翻译”为计算机程序.其中的子程序用FORTRAN-77语言编制,并在IBM-PC微型计算机上试算通过.程序中有许多中文说明,使读者便于阅读.我们编制程序时,着重考虑程序的易读性,而不过分追求节省工作单元的技巧,考虑到FORTRAN语言的发展趋势,我们在编制程序时尽量少使用GOTO语句,不使用IF算术语句,不使用赋值语句作为循环终端语句(均以CONTINUE语句结尾)等等.另外,为防止由于校对疏漏而造成程序的印刷错误,程序部分(包括通用子程序、计算实例的主程序与计算结果)由计算机打印,然后胶版印刷,附于书的末尾部分.

书中有少量的有关算法的问题,希望读者认真解答并编制程序,在计算机上试算验证,不要急于去看习题参考答案.每个算法后的计算实例也请读者先编制主程序试算,然后与书中所附的主程序与计算结果核对,这样才有收获.

限于作者的理论水平与实算经验,特别是算法的写法属于新的尝试,错漏之处定然不少,希冀广大读者与师长、同行的批评指正.

谨向指导、帮助本书编写工作的邓乃扬教授与诸梅芳教授表示衷心的感谢.

作 者

1990年6月于北京工业大学应用数学系

目 录

第一章 矩阵与向量	(1)
§1 矩阵的定义及其线性运算	(1)
§2 矩阵的乘法	(4)
§3 矩阵乘法的几种算法	(9)
算法1-1 二维数组存储的实矩阵乘法	(9)
算法1-2 一维数组存储的实矩阵乘法	(10)
算法1-3 同时计算行元素的实矩阵乘法	(11)
§4 向量及其线性运算	(12)
§5 向量的内积	(15)
算法1-4 防止上溢与下溢的向量模长算法	(19)
§6 矩阵的分块运算	(20)
第二章 向量组的秩与线性方程组的解	(25)
§1 向量的线性相关	(25)
§2 极大无关组与向量组的秩	(31)
§3 线性方程组解的存在性与唯一性	(33)
§4 矩阵的初等变换与初等矩阵	(35)
§5 n 维向量空间	(39)
第三章 方阵的行列式与逆	(46)
§1 n 阶行列式的定义	(46)
§2 n 阶行列式的性质	(49)
§3 行列式按一行(列)展开与Cramer法则	(53)
§4 Laplace 定理与行列式的乘法定理	(58)
§5 矩阵的秩	(61)
§6 方阵的逆与正交矩阵	(64)
§7 线性方程组解的结构	(68)
第四章 解 n 阶线性方程组的消去法	(74)
§1 Gauss 顺序消去法	(75)
算法4-1 Gauss 顺序消去法解线性方程组系	(81)
§2 Gauss 主元素消去法	(82)
算法4-2 列主元Gauss 消去法解线性方程组系	(85)
算法4-3 全主元Gauss 消去法解线性方程组系	(87)
§3 列主元Gauss-Jordan 消去法	(89)
算法4-4 列主元Gauss-Jordan消去法解线性方程组系(兼求系数矩阵的行列式值)	(90)
§4 行主元Gauss-Jordan 逐行消去法	(91)

	算法4-5 行主元Gauss-Jordan逐行消去法求解高阶线性方程组	(96)
第五章	实对称矩阵与矩阵的相似	(99)
§1	二次型与实对称矩阵	(99)
§2	矩阵的相似与特征值、特征向量	(102)
§3	规范矩阵与酉相似	(112)
§4	对称正定矩阵	(118)
第六章	矩阵分解法求解线性方程组	(124)
§1	方阵的 LU 分解	(124)
§2	Doolittle 分解	(126)
	算法6-1 Doolittle (LU)分解求解线性方程组系	(130)
§3	LDL ^T 分解	(131)
	算法6-2 二维存储的LDL ^T 分解法求解对称线性方程组系	(133)
§4	平方根法	(135)
	算法6-3 一维存储的平方根法求解对称线性方程组系(兼求对称系数矩阵的行列式的值)	(142)
§5	行主元 LU 分解法	(144)
	算法6-4 行主元LU 分解法求解线性方程组系	(150)
§6	Householder 变换与 QR 分解	(152)
	算法6-5 QR 分解法求解线性方程组系	(158)
第七章	行列式求值与方阵求逆	(160)
§1	全主元Gauss消去法求实矩阵的行列式值	(160)
	算法7-1 全主元Gauss消去法求实矩阵的行列式值	(161)
§2	行主元Gauss-Jordan 消去法求逆阵	(163)
	算法7-2 行主元Gauss-Jordan 消去法求逆阵(兼求行列式的值)	(165)
§3	全主元Gauss-Jordan消去法求逆阵	(166)
	算法7-3 全主元Gauss-Jordan消去法求逆阵(兼求行列式的值)	(168)
§4	对称正定矩阵求逆阵	(170)
	算法7-4 二维存储的对称正定矩阵求逆阵	(175)
	算法7-5 一维存储的对称正定矩阵求逆阵	(175)
§5	求极大无关组并扩充为基底	(176)
	算法7-6 求极大无关组并扩充为基底	(179)
第八章	特征根与特征向量的计算	(181)
§1	Jacobi 方法求实对称矩阵的特征根与特征向量	(181)
	算法8-1 Jacobi 方法求实对称矩阵的特征根与特征向量	(189)
§2	Householder 相似变换化一般实矩阵为上 Hessenberg 矩阵	(191)
	算法8-2 用Householder相似变换化一般实矩阵为上 Hessenberg 阵	(193)
	算法8-3 求(算法8-2中)把一般实矩阵化为上 Hessenberg 阵时的变换矩阵	(196)
§3	求实数上Hessenberg 矩阵的特征根的双步 QR 算法	(197)
	算法8-4 双步QR算法求实上 Hessenberg 阵的特征根	(210)
§4	求实矩阵的特征根与特征向量	(213)
	算法8-5 双步QR算法求实上Hessenberg 阵的特征根与特征向量	(222)
第九章	矩阵的广义逆与最小二乘问题	(227)

§1 矩阵的广义逆	(227)
§2 广义逆在解线性方程组(系)上的应用	(232)
§3 广义逆在线性最小二乘问题上的应用	(234)
§4 用广义 QR 分解法求广义逆	(238)
算法9-1 广义QR分解求广义逆或求线性最小二乘解	(249)
§5 广义逆法解非线性最小二乘问题	(252)
算法9-2 广义逆法求解非线性最小二乘问题	(258)
习题参考答案	(262)
附录 FORTRAN-77源程序部分	(269)
参考文献	(341)

附录 FORTRAN-77源程序部分

第一章	矩阵与向量	(266)
	算法1-1 二维数组存储的实矩阵乘法	(269)
	算法1-2 一维数组存储的实矩阵乘法	(269)
	算法1-3 同时计算行元素的实矩阵乘法	(269)
	算法1-4 防止上溢与下溢的向量模长算法	(272)
第四章	解n阶线性方程组的消去法	(274)
	算法4-1 Gauss顺序消去法解线性方程组系	(274)
	算法4-2 列主元Gauss消去法解线性方程组系	(276)
	算法4-3 全主元Gauss消去法解线性方程组系	(278)
	算法4-4 列主元Gauss-Jordan消去法解线性方程组系 (兼求系数矩阵的行列式值)	(281)
	算法4-5 行主元Gauss-Jordan逐行消去法求解高阶线性方程组	(283)
第六章	矩阵分解法求解线性方程组	(286)
	算法6-1 Doolittle (LU) 分解求解线性方程组系	(286)
	算法6-2 二维存储的LDL ^T 分解法求解对称线性方程组系	(288)
	算法6-3 一维存储的平方根法求解对称线性方程组系 (兼求对称系数矩阵的行列式的值)	(290)
	算法6-4 行主元LU分解法求解线性方程组系	(294)
	算法6-5 QR分解法求解线性方程组系	(297)
第七章	行列式求值与方阵求逆	(299)
	算法7-1 全主元Gauss消去法求实矩阵的行列式值	(299)
	算法7-2 行主元Gauss-Jordan消去法求逆阵 (兼求行列式的值)	(300)
	算法7-3 全主元Gauss-Jordan消去法求逆阵 (兼求行列式的值)	(303)
	算法7-4 二维存储的对称正定矩阵求逆阵	(306)
	算法7-5 一维存储的对称正定矩阵求逆阵	(307)
	算法7-6 求极大无关组并扩充为基底	(308)
第八章	特征根与特征向量的计算	(311)
	算法8-1 Jacobi方法求实对称矩阵的特征根与特征向量	(311)
	算法8-2 Householder相似变换化一般实矩阵为上 Hessenberg 阵	(314)
	算法8-3 求 (算法8-2中) 把一般实矩阵化为上 Hessenberg 阵时的变换矩阵	(315)
	算法8-4 双步QR算法求实上 Hessenberg 阵的特征根	(317)
	算法8-5 双步QR算法求实上 Hessenberg 阵的特征根和特征向量	(322)
第九章	矩阵的广义逆与最小二乘问题	(332)
	算法9-1 广义QR分解求广义逆或求线性最小二乘解	(332)
	算法9-2 广义逆法求解非线性最小二乘问题	(335)

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \quad (1.1.4)$$

线性方程组(1.1.3)的未知量采用什么记号不会影响它的解,重要的是它的系数矩阵与它的常数项各是什么.把一列常数项加入到系数矩阵A中(作为最后一列),可得到以下的 $m \times (n+1)$ 矩阵:

$$\bar{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} & b_m \end{pmatrix} \quad (1.1.5)$$

\bar{A} 称为线性方程组的增广矩阵.一旦 \bar{A} 确定以后,以 \bar{A} 为增广矩阵的线性方程组也就唯一确定.增广矩阵(1.1.5)可简记为

$$\bar{A} = [A, B] \quad (1.1.5)'$$

例1.1.4 有 m 个以 x_1, x_2, \dots, x_n 为自变量的多元函数

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (i=1, 2, \dots, m) \quad (1.1.6)$$

若令矩阵 $A = [a_{ij}]_{m \times n}$ 的元素 $a_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}$, 则

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} \quad (1.1.7)$$

称为这 m 个多元函数的Jacobi矩阵,它在多个多元函数的问题中起重要作用.

1.2 矩阵的相等与一元运算

定义1.1.5 两个矩阵 $A = [a_{ij}]_{m \times n}$ 、 $B = [b_{ij}]_{k \times t}$ 的行数、列数分别相等: $m = k$, $n = t$; 并且对应元素都相等: $a_{ij} = b_{ij}$, 对 $i = 1, 2, \dots, m$; $j = 1, 2, \dots, n$ 都成立时, 称这两个矩阵相等, 记为 $A = B$.

两张栏目完全相同, 且各项数据全对应相等的报表, 是两个矩阵相等的一个实例.

下面介绍矩阵的一元运算, 即一个矩阵的自身运算.

定义1.1.6 对换矩阵 $A = [a_{ij}]_{m \times n}$ 的行与列, 得到的 $n \times m$ 矩阵, 称为 A 的转置矩阵, 记为 A^T , 即 A 的 (j, i) 元素是 A^T 的 (i, j) 元素. 当记 $A^T = [a'_{ij}]_{n \times m}$ 时, 则有

$$a'_{ij} = a_{ji} \quad (i=1, 2, \dots, n; j=1, 2, \dots, m) \quad (1.1.8)$$

由 A 得到 A^T , 相当于把一张报表的行栏目与列栏目对换而得到的另一张报表.

例1.1.7 (1.1.2)中的矩阵 A 与 B 的转置矩阵分别为

$$A^T = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & -1 \\ 0 & 2 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B^T = \begin{pmatrix} 1 & 1+i & -2 \\ 1-i & -1 & i \\ -2 & -i & 5 \end{pmatrix}$$

定义1.1.8 矩阵 $A = [a_{ij}]_{m \times n}$ 的每一个元素取其共轭复数后得到的 $m \times n$ 矩阵称为 A 的共轭矩阵, 记为 \bar{A} ; A 的共轭矩阵的转置矩阵 ($n \times m$ 阶) 称为 A 的共轭转置矩阵, 它等于 A 先转置后取共轭, 记为 A^H , 即

$$A^H = (A)^T = \bar{A}^T \quad (1.1.9)$$

由定义即可得以下结论.

定理1.1.9 当且仅当 A 为实矩阵时, $\bar{A} = A$.

例1.1.10 A, B 由 (1.1.2) 所示, 则

$$\begin{aligned} \bar{A} &= A, \quad A^H = (\bar{A})^T = A^T \\ B^H &= (\bar{B})^T = B \\ \bar{B} &= \begin{pmatrix} 1 & 1+i & -2 \\ 1-i & -1 & i \\ -2 & -i & 5 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

1.3 矩阵的线性运算

下面介绍矩阵的两种线性运算: 加减与数乘矩阵.

定义1.1.11 已知两个 $m \times n$ 矩阵 $A = [a_{ij}]$ 、 $B = [b_{ij}]$, 若 $m \times n$ 矩阵 $C = [c_{ij}]$ 的元素 c_{ij} 由

$$c_{ij} = a_{ij} + b_{ij} \quad (i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, n) \quad (1.1.10)$$

给出, 则称 C 为 A 与 B 的和, 记作 $C = A + B$.

矩阵 A 与 B 要相加, 它们的行数与列数必须分别相等. $A + B$ 表示它们的对应元素相加. 两张栏目完全相同的报表汇总是矩阵加法的一个实例.

定义1.1.12 (1) 矩阵 $B = [b_{ij}]_{m \times n}$ 的每个元素取相反数, 得到的矩阵称为 B 的负矩阵, 记为 $-B$, 即 $-B$ 的 (i, j) 元素为 $-b_{ij}$.

(2) 两个 $m \times n$ 矩阵的差 $A - B$ 定义为 $A + (-B)$, 也就是 A, B 矩阵对应元素之差, 所以若 $D = A - B = [d_{ij}]_{m \times n}$ 时,

$$d_{ij} = a_{ij} - b_{ij} \quad (i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, n) \quad (1.1.11)$$

例1.1.13 已知(其中 $i = \sqrt{-1}$)

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -5+i & 2i \\ -i & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} -6+2i & 3 & 1-i \\ 0 & i & -2 \end{pmatrix}$$

则

$$\begin{aligned} A+B &= \begin{pmatrix} -2+2i & -2+i & 1+i \\ -i & -1+i & -2 \end{pmatrix}, & -B &= \begin{pmatrix} 6-2i & -3 & -1+i \\ 0 & -i & 2 \end{pmatrix} \\ A-B &= A+(-B) = \begin{pmatrix} 10-2i & -8+i & -1+3i \\ -i & -1-i & 2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

定义1.1.14 已知 $m \times n$ 矩阵 $A = [a_{ij}]$ 与数 (实数或复数) λ , 则 $m \times n$ 矩阵

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

称为 λ 与 A 的数量乘积, 记为 λA 或 $A\lambda$. 也就是说, 以数 λ 乘以矩阵 A , 就是把 A 的每个元素都乘以 λ .

当有 λ 张(λ 是正整数)完全相同的报表汇总时, 可用矩阵的数乘运算来实现.

矩阵的加减运算与数乘运算统称为线性运算. 由矩阵的线性运算定义, 可以把一个复矩阵 A 表示为 $P+iQ$ 的形式, 其中 P 与 Q 均为实矩阵, 它们分别为 A 的每个元素的实部与虚部系数所成的矩阵, 称为 A 的实部与虚部. 也就是说, $A=[a_{ij}]_{m \times n}$, 而 $a_{ij}=\alpha_{ij}+i\beta_{ij}$, 则 $A=P+iQ$, 其中 $P=[\alpha_{ij}]_{m \times n}$, $Q=[\beta_{ij}]_{m \times n}$.

例1.1.15

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -5+i & 2i \\ -i & -1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & -5 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.1.12)$$

定义1.1.16 元素全部为零的 $m \times n$ 矩阵称为 $m \times n$ 零矩阵, 记为 $O_{m \times n}$. 在不致于混淆的情况下, 简记为 O .

矩阵的线性运算具有以下规则.

定理1.1.17 已知 A, B, C 为 $m \times n$ 矩阵, λ, μ 为数, 则

- (1) $A+B=B+A$. (加法交换律)
- (2) $(A+B)+C=A+(B+C)$. (加法结合律)由此, 3个矩阵相加可以记为 $A+B+C$.
- (3) $A+O=O+A$.
- (4) $A+(-A)=O$.
- (5) $(\lambda+\mu)A=\lambda A+\mu A$. (矩阵对数的分配律)
- (6) $\lambda(A+B)=\lambda A+\lambda B$. (数对矩阵的分配律)
- (7) $\lambda(\mu A)=(\lambda\mu)A$. (数的结合律)
- (8) $1 \cdot A=A$.
- (9) 若 $\lambda A=O$, 则 $\lambda=0$ 或 $A=O$ 两者必居其一.
- (10) $\overline{(A+B)}=\overline{A}+\overline{B}$, $(A+B)^T=A^T+B^T$, $(A+B)^H=A^H+B^H$,
 $\overline{(\lambda A)}=\overline{\lambda} \overline{A}$, $(\lambda A)^H=\overline{\lambda} A^H$.

以上性质均可用定义来验证.

由矩阵的线性运算规则, 两个复矩阵 A 与 B 的加减, 可用实矩阵来实现, 就象两个复数加减等于它们的实、虚部分别加减一样. 例如 A 与 B 分别按例1.1.15的方法写为 $A=P+iQ$, $B=R+iS$, 其中 P, Q, R, S 均为实矩阵, 则 $A \pm B=(P \pm R)+i(Q \pm S)$.

§2 矩阵的乘法

2.1 矩阵乘法的定义与例子

定义1.2.1 已知矩阵 $A=[a_{ik}]_{m \times n}$, $B=[b_{kj}]_{n \times l}$, 作矩阵 $C=[c_{ij}]_{m \times l}$, 使

$$c_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \cdots + a_{in}b_{nj} = \sum_{k=1}^n a_{ik}b_{kj}$$

$$(i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, l) \quad (1.2.1)$$

则矩阵 C 称为 A 左乘 B (或 B 右乘 A) 的乘积, 记为 $C=AB$.

注意两个矩阵要相乘, 左边矩阵 A 的列数必须等于右边矩阵 B 的行数. 而乘积 C 的行数等于左边矩阵的行数, 列数等于右边矩阵的列数, 可简单记忆为

$$(m \times n)(n \times l) = m \times l$$

而求 $C=AB$ 的元素 c_{ij} 时, 可划出 A 的第 i 行与 B 的第 j 列, 把它们的对应元素分别相乘, 然后相加. 例如, 3×4 矩阵 A 左乘 4×4 矩阵 B 时, 乘积 C 的 $(2, 3)$ 元素 c_{23} 可图示为

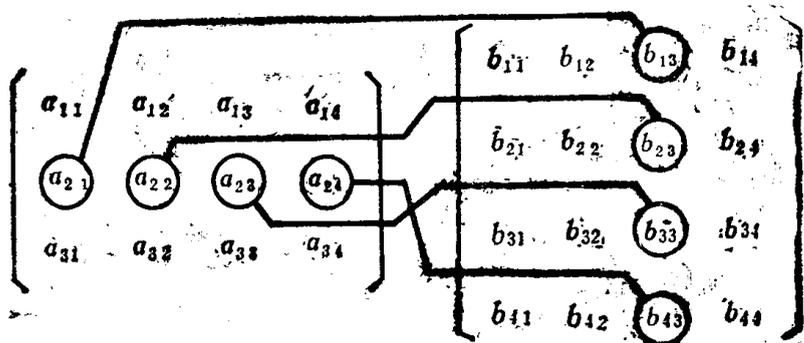


图 1-2-1

$$c_{23} = a_{21}b_{13} + a_{22}b_{23} + a_{23}b_{33} + a_{24}b_{43}$$

例 1.2.2 设

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 & -1 \\ 0 & 4 & -6 & 3 \\ -2 & 5 & 0 & -3 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} -1 & 15 \\ 3 & -1 \\ 0 & -2 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$$

则

$AB =$

$$\begin{bmatrix} 1 \times (-1) + 0 \times 3 + 2 \times 0 + (-1) \times 2 & 1 \times 15 + 0 \times (-1) + 2 \times (-2) + (-1) \times 4 \\ 0 \times (-1) + 4 \times 3 + (-6) \times 0 + 3 \times 2 & 0 \times 15 + 4 \times (-1) + (-6) \times (-2) + 3 \times 4 \\ (-2) \times (-1) + 5 \times 3 + 0 \times 0 + (-3) \times 2 & (-2) \times 15 + 5 \times (-1) + 0 \times (-2) + (-3) \times 4 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} -5 & 7 \\ 18 & 20 \\ 11 & -47 \end{bmatrix}$$

而 BA 无意义, 因为 B 的列数 $\neq A$ 的行数.

例 1.2.3 设

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

则

$$AB = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad BA = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ -2 & -2 \end{bmatrix}$$

上面的例子说明矩阵乘法与数的乘法有两个重要区别:

(1) 当 AB 有意义时, BA 不一定有意义, 即使都有意义, 矩阵的乘法一般不具有交换律, 即一般 $AB \neq BA$. 因此, 不能笼统地说“ A 、 B 相乘”, 而应说明是 A “左乘” B , 还是 A “右乘” B .

(2) 两个非零矩阵 A 与 B 的乘积 AB 可能是零矩阵. 也就是说, 在矩阵乘法中从 $AB=O$ 一般不能推出“ $A=O$ 或 $B=O$, 两者必居其一”的结论.

矩阵的普通乘法不定义为两个矩阵的对应元素相乘(尽管这种定义自然得多, 并且此时乘法交换律也会成立), 而由(1.2.1)式来定义, 这使得矩阵这一工具在实际应用中发挥了巨大的作用.

例1.2.4 当我们把线性方程组(1.1.3)的系数、未知量与常数项分别用 $m \times n$ 矩阵 A 、 $n \times 1$ 矩阵 X 与 $m \times 1$ 矩阵 B 表示后, 则 A 左乘 X 的乘积为

$$AX = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \\ \cdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n \end{pmatrix} \quad (1.2.2)$$

AX 与 B 均为 $m \times 1$ 矩阵, 而(1.1.3)的 m 个等式表明 AX 与 B 的元素对应相等, 按照矩阵相等的定义1.1.5有

$$AX = B \quad (1.2.3)$$

这就是线性方程组的矩阵形式, 它的样子与一元一次方程 $ax=b$ 相似.

例1.2.5 平面解析几何中的坐标旋转变换为

$$\begin{cases} x = \cos\theta \cdot x' - \sin\theta \cdot y' \\ y = \sin\theta \cdot x' + \cos\theta \cdot y' \end{cases} \quad (1.2.4)$$

分别作矩阵

$$Z = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad Z' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \quad (1.2.5)$$

按照矩阵乘法与相等的定义, 可得

$$Z = UZ' \quad (1.2.6)$$

矩阵 U 称为变换(1.2.4)的系数矩阵(简称变换矩阵).

2.2 矩阵乘法的运算规则

矩阵乘法尽管与数的乘法有重要区别, 但它的运算规则与数的乘法也有很多相似之处. 下面先给出一种简单而重要的矩阵.

定义1.2.6 主对角元全为1, 其余元素全为零的 n 阶方阵, 称为 n 阶单位阵, 记为 I_n . 在不致混淆的情况下, 记为 I , 即

$$I_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \quad (1.2.7)$$

定理1.2.7 设以下各矩阵的阶数使得相应的加法或乘法相容(即有意义), λ 为数, 则

- (1) $(AB)C = A(BC)$, (乘法结合律) 这样, 三矩阵相乘可记为 ABC .
 (2) $A(B+C) = AB+AC$; $(B+C)A = BA+CA$. (乘法对加法分配律)
 (3) A 为 $m \times n$ 矩阵, 则

$$AI_n = A, I_m A = A$$

若 A 为 n 阶方阵, 则

$$AI = IA = A$$

(单位阵在矩阵乘法中作用, 与数1在数的乘法中的作用相同).

(4) $\lambda(AB) = (\lambda A)B = A(\lambda B)$.

(5) $(A_1 A_2 \cdots A_k)^T = A_k^T \cdots A_2^T A_1^T$ (转置的反向规则)

$$\overline{A_1 A_2 \cdots A_k} = \overline{A_1} \overline{A_2} \cdots \overline{A_k}$$

$(A_1 A_2 \cdots A_k)^H = A_k^H \cdots A_2^H A_1^H$ (共轭转置的反向规则)

证明: 仅证(1)与(5)中“转置的反向规则”.

(1) 设 $A = [a_{ij}]_{m \times n}$, $B = [b_{jk}]_{n \times s}$, $C = [c_{kl}]_{s \times t}$, 令

$$U = BC = [u_{jl}]_{n \times t}, V = AB = [v_{ik}]_{m \times s}$$

则由乘法公式(1.2.1), 可得

$$u_{jl} = \sum_{k=1}^s b_{jk} c_{kl} \quad (j=1, 2, \dots, n; l=1, 2, \dots, t)$$

$$v_{ik} = \sum_{j=1}^n a_{ij} b_{jk} \quad (i=1, 2, \dots, m; k=1, 2, \dots, s) \quad (1.2.8)$$

因此 $A(BC) = AU$ 的 (i, l) 元素为

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} u_{jl} = \sum_{j=1}^n a_{ij} \left(\sum_{k=1}^s b_{jk} c_{kl} \right) = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^s a_{ij} b_{jk} c_{kl} \quad (1.2.9)$$

而 $(AB)C = VC$ 的 (i, l) 元素为

$$\sum_{k=1}^s v_{ik} c_{kl} = \sum_{k=1}^s \left(\sum_{j=1}^n a_{ij} b_{jk} \right) c_{kl} = \sum_{k=1}^s \sum_{j=1}^n a_{ij} b_{jk} c_{kl} \quad (1.2.10)$$

因双重连加号可交换次序, 因此(1.2.9)式与(1.2.10)式的右端相等, 从而 $A(BC)$ 与 $(AB)C$ 的任何 (i, l) 元素都相等, 这就证明了 $A(BC) = (AB)C$.

(5) 只对两个矩阵的情况证明, 即 $(AB)^T = B^T A^T$, 多个矩阵乘积转置的反向规则可由归纳法与结合律推出.

设 $A = [a_{ik}]_{m \times n}$, $B = [b_{kj}]_{n \times s}$, $A^T = [a'_{ki}]_{n \times m}$, $B^T = [b'_{jk}]_{s \times n}$. 由乘法公式(1.2.1)及转置公式(1.1.8)可知 $(AB)^T$ 的 (j, i) 元素, 即 AB 的 (i, j) 元素等于

$$\sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj}$$

而 $B^T A^T$ 的 (j, i) 元素为

$$\sum_{k=1}^n b'_{jk} a'_{ki} = \sum_{k=1}^n b_{kj} a_{ik}$$

因此 $(AB)^T = B^T A^T$. 定理证毕.

由于矩阵乘法满足结合律, 所以可定义方阵的乘幂: n 阶方阵 A 的 k (正整数) 次幂定义

为 k 个 A 连乘, 记为 A^k , 则它满足以下运算规则:

$$\begin{aligned} A^k \cdot A^l &= A^{k+l} \\ (A^k)^l &= A^{kl} \end{aligned} \quad (1.2.11)$$

其中 k, l 为正整数. 但要注意, 由于矩阵乘法一般不满足交换律, 所以一般来说, $(AB)^k \neq A^k B^k$. 例如, $(AB)^2 = ABAB \neq AAB B = A^2 B^2$.

另外要指出, 消去律在矩阵乘法中一般也不成立, 即从 $AB=AC$ 与 $A \neq O$ 不能推出 $B=C$. 因为从 $AB=AC$ 及分配律知 $A(B-C)=O$, 但由此式与 $A \neq O$ 不能推出 $B-C=O$, 即 $B=C$.

最后我们给出几种特殊矩阵的定义.

定义1.2.8 若 n 阶方阵 $A=[a_{ij}]$ 除主对角线及其右上部分元素外, 其余元素为0 ($i>j$ 时, $a_{ij}=0$), 即 A 形为

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \quad (1.2.12)$$

则称 A 为上三角矩阵. A^T 称为下三角矩阵. 主对角元全为1的上(下)三角矩阵称为单位上(下)三角矩阵.

若 n 阶方阵 B , 除主对角元以外, 其它元素全为零, 即 B 形为

$$B = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix} \quad (1.2.13)$$

则称 B 为对角矩阵, 并简记(1.2.13)式为

$$B = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \quad (1.2.14)$$

我们容易验证以下结论成立.

定理1.2.9 (单位)上三角矩阵的乘积仍为(单位)上三角矩阵; (单位)下三角矩阵的乘积仍为(单位)下三角矩阵; 对角矩阵的乘积仍为对角矩阵.

当 k 为正整数时,

$$[\text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)]^k = \text{diag}(\lambda_1^k, \lambda_2^k, \dots, \lambda_n^k) \quad (1.2.15)$$

2.3 乘法运算规则的应用举例

正确地应用矩阵乘法运算规则, 不仅在理论推导, 而且在矩阵的数值计算中十分重要. 特别是结合律的应用, 因为乘法的计算顺序具有举足轻重的作用.

例1.2.10 计算 ABC , 其中 A, B 均为100阶方阵, 而 C 为 100×1 矩阵, 应如何安排计算次序?

解: 若先计算 $V=AB$, 则计算 V 的每个元素要作100次乘法(加减法运算速度很快, 我们不去考虑), V 共 10^4 个元素, 共需作 10^6 次乘法; 再算 VC , 计算它的每个元素要作100次乘法, 共100个元素要作 10^4 次乘法. $(AB)C$ 这种方案总计作 $(10^6 + 10^4)$ 次乘法.

方案二是先算 $U=BC$, 再求 $AU=A(BC)$. 由上面分析可知, 总共只需作2000次乘法. 不仅节省计算时间, 更重要的是减少舍入误差的积累, 所以在编制程序前, 应事先作一番分

析.

例1·2·11 如何应用矩阵的线性运算的规则把两个复矩阵A与B的乘法用实矩阵的乘法来实现.

解: 由例1·1·15知A、B均可表为 $A=P+iQ$, $B=R+iS$, 其中P,Q,R,S均为实矩阵, $i=\sqrt{-1}$, 从而由运算规则

$$\begin{aligned} AB &= (P+iQ)(R+iS) = PR+iPS+iQR+(-1)QS \\ &= (PR-QS)+i(PS+QR) \end{aligned} \quad (1\cdot2\cdot16)$$

这与两个复数的乘法规则类似, 只是这里要注意, 因为是A左乘B, 因此化为实矩阵运算时, 凡出现两个实矩阵相乘时, A的实、虚部均在左边.

§3 矩阵乘法的几种算法

3.1 矩阵的存贮形式

矩阵在计算机中可以用二维数组存贮, 也可以用一维数组来存贮. 用二维数组来存贮时, 其格式与矩阵的自然格式一致. 维数语句

$$\text{DIMENSION } A(M,N)$$

表示实矩阵 $A=[a_{ij}]_{m \times n}$ 以二维实数组形式存贮. M、N分别与A的行数、列数对应.

数组元素

$$A(2,3)$$

表示矩阵A的元素 a_{23} .

实矩阵 $A=[a_{ij}]_{m \times n}$ 也可以用有 $m \times n$ 个元素的一维实数组来存贮. 若用整型变量MN来表示 $m \times n$ 时, 它的维数语句为

$$\text{DIMENSION } A(M,N)$$

此时, 如果按行序存贮矩阵A时 (即先依次存放A的第1行元素, 接着依次存放A的第2行元素, ..., 最后依次存放A的第m行元素), 则数组元素

$$A(N * (I-1) + J) \text{ 或 } A(N * I + J - N)$$

表示矩阵A的元素 a_{ij} . 这是因为矩阵A每行有n个元素, 所以A的第i行、第j列元素应为数组A的第

$$n(i-1) + j = ni + j - n \quad (1\cdot3\cdot1)$$

个元素, 即

$$\begin{aligned} \text{数组下标值} &= \text{列数} \times (\text{行序号} - 1) + \text{列序号} \\ &= \text{列数} \times \text{行序号} + \text{列序号} - \text{列数} \end{aligned} \quad (1\cdot3\cdot1)'$$

一维数组存贮矩阵, 常可产生比二维数组存贮矩阵更为有效的程序.

3.2 矩阵乘法的几种算法

下面介绍3种关于矩阵乘法的算法:

- (1) 以二维数组存贮的实矩阵乘法;
- (2) 以一维数组存贮的实矩阵乘法;
- (3) 同时计算行元素的实矩阵乘法.

一、算法1-1 用二维数组存贮的实矩阵乘法.

1. 算法

已知实矩阵 $A = [a_{ik}]_{m \times n}$, $B = [b_{kj}]_{n \times l}$, 求 $C = AB = [c_{ij}]_{m \times l}$, 则 c_{ij} 的计算公式为

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj} \quad (i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, l)$$

把它写成一种介于“公式语言”与“程序语言”之间的算法:

1) 对 $i=1, 2, \dots, m$ 执行

1.1) 对 $j=1, 2, \dots, l$ 执行

$$c_{ij} \leftarrow \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj} \quad (1.3.2)$$

它对应到程序中即为: I 是第1层外循环的循环变量, 其初值为1, 终值为 M , 步长为1; J 是第二层循环的循环变量, 初值为1, 终值为 L , 步长为1. 而和式 $\sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj}$, 通常也用循环语句来实现, K 为循环变量, 初值为1, 终值为 N , 步长为1. 因此容易写出它的通用子程序.

2. 程序说明

(1) 子程序语句

```
SUBROUTINE MULTI2 (A,B,C,M,N,L)
```

(2) 哑元说明

A, B, C 分别为 $M \times N$, $N \times L$, $M \times L$ 个元素的二维实数组. A, B 为输入参数, C 为输出参数.

M, N, L 输入参数、整型变量. M 为矩阵 A 与 C 的行数, N 为矩阵 A 的列数与矩阵 B 的行数, L 为矩阵 B, C 的列数.

二、算法1-2 用一维数组存储的实矩阵乘法 (按行序存储矩阵).

1. 算法

它与算法1-1的差别仅在于需要根据(1.3.1)' 计算(1.2.1)式中 a_{ik} 、 b_{kj} 、 c_{ij} 的下标值. 它们分别为

$$\begin{cases} i_p = n \cdot (i-1) \\ ka = i_p + k \\ kb = l \cdot (k-1) + j \\ kc = l \cdot (i-1) + j \end{cases} \quad (1.3.3)$$

因此, 算法应为

0) 按行输入矩阵 A 和 B , 均用一维数组存储.

1) 对 $i=1, 2, \dots, m$ 执行

1.1) 对 $j=1, 2, \dots, l$ 执行

$$c_{kc} \leftarrow \sum_{k=1}^n a_{ka} \cdot b_{kb} \quad (1.3.4)$$

2. 程序说明

(1) 子程序语句

```
SUBROUTINE MULTI1 (A,B,C,MN,NL,ML,M,N,L)
```

(2) 哑元说明