矩阵计算

〔美〕G. H. 格罗布　C. F. 万罗安　著

廉庆荣　邓健新　刘秀兰

熊西文　审校

MATRIX COMPUTATIONS

Gene H. Golub　Charles F. Van Loan

MATRIX COMPUTATIONS

本书根据 The Johns Hopkins University Press 1983 年版译出

矩 阵 计 算

Juzhen Jisuan

〔美〕G. H. 格罗布　C. F. 万罗安　著

廉庆荣　邓健新　刘秀兰　译

熊西文　审校

大连理工大学出版社出版　辽宁省新华书店经销

(大连市凌水河)　朝阳新华印刷分厂印刷

开本：850×1168 1/32　印张：16 3/4　字数：430千字

印数：0001—3000册

1988年12月第1版　1988年12月第1次印刷

责任编辑：凌　子　封面设计：葛　明

责任校对：苗　田

ISBN 7-5611-0121-X/O·21　定价：4.11元

译者的话

本书译自《MATRIX COMPUTATIONS》（Gene H. Golub和Charles F. Van Loan 著，美国Johns Hopkins大学出版社1983年出版）一书。这是一部新的计算数学专著。它涉及到数值代数的各个重要方面，凝聚了矩阵计算理论与算法的大量新成就；它面向科学与工程计算所需要的数学软件，重点介绍矩阵计算中先进而有效的算法及其理论，实用性较强；它自成体系、条理清晰，将理论、算法、例题与正文后的习题有机地密切配合，便于教学，各章节后的注记和大量参考文献有利于读者进行全面了解和深入研究。

本书可作为计算数学专业的教材或教学参考书，对计算数学工作者有着重要的参考价值。从事科学与工程计算的软件工作者和工程技术人员也能从本书中获得不少的收益。

本书的翻译工作是在熊西文教授精心指导下完成的，并由他负责全书的审校，翻译“序言”和“本书用法”。刘秀兰译1至4章，邓健新译5、6及9至12章，廉庆荣译7、8章。在译校过程中，我们对已发现的原文中的错误作了更正，有的还加了译注。由于水平所限，难免还会有错误和不妥之处，恳请读者批评指正。

本书的翻译和出版曾得到中国科学院计算中心和大连理工大学等单位的专家和同事的关心与支持，在此表示衷心地感谢。

序　　言

认为数值分析的任务就是为科坛提供有效的软件工具这种论点或许尚有待商榷。但这正说明数值分析工作者们对于数学和计算机科学这两种素质的需要是何等地引人关注。实际上，一个好的软件开发有赖于人们从数学的角度对所要求解的问题、它的算法表达式的深义、它对有限算术运算的精度的评估等有深刻的理解。本书的目的就在于向致力于矩阵计算的读者提供这方面的素质。

自50年代中期以来，在矩阵计算的领域里取得了重大的进展。这可由线性方程组、最小二乘法和特征值问题等众多的高质量的程序的出现来证实。典型的程序就是 EISPACK 和 LINPACK，其广泛使用的效果在提高不同应用领域里的算法水平方面也表现了出来。利用这些程序包中的程序作为模块，科学家和工程师们可以量体裁衣地按照他们各自特有的需要组装出更为复杂的软件工具。这就激励着人们去写出结构优良的程序。一个值得欢迎的趋势出现了，这就是越来越多的科学研究工作均被明白无误地表现为软件。

数值线性代数的深刻影响是以另外的形式被感知的。习以为常的传统观念 诸如我们对正交矩阵的信赖，对敏感性问题的垂青，对舍入误差的细心思虑，这已贯注于许多科研领域。这方面最突出的例子就是由众多的统计学家和控制工程师们作为分析工具来使用的奇异值分解（SVD）应用的日益增长。在这些领域中从事工作的人们已经用 SVD 这种“语言”形成了许多理论概念，其结果是当出现舍入误差和数据不准的场合下，使得他们理

想的实现变得分外容易。

数值线性代数的深刻影响的进一步证据还表现在硬件设计领域中。浮点算术和并行计算机的新近发展，在颇大程度上就是矩阵计算领域里的活动所激起的。

为了在这个活跃且正在发展的领域中求得协调，我们写成了这本书。自1965年发表了 Wilkinson 的名著代数特征值问题以来，这方面已经进行了大量的工作，而有关这方面的近代发展在许多评论性文章和专著里，例如在Lawson 和 Hanson的最小二乘问题求解、Parlett 的对称特征值问题里都有详尽的讨论。我们感到对这些材料进行综合的时机已经成熟。约在10年前由Stewart发表的内容丰富而新颖的矩阵计算一书正具有此特色。

我们将本书的读者分成三种类型：技术性学科中的研究生、计算科学家和工程师以及我们数值分析界的同行。在取材上将顾及各类读者的特点。

对于研究生（及其导师），我们收集了大量的问题，其中大多是计算性的且可用作程序设计核心的。根据我们的经验，配合EISPACK和LINPACK来讲授本书，对灵活掌握本书的内容是极有好处的。把 C. B. Moler 的 MATLAB 与本书相联系，因其对矩阵计算系统的实现更为方便，所以这同样也是相当成功的。

对于从事实际工作的工程师和科学家，他们希望把本书当作参考性手册，我们在各章的开头为他们列出了章际间精化了的内部联系，并在每一节的后面几乎都列出了注释性的文献，以便他们对所给出的课题能及时找到参考资料。

对于数值分析界的同行，我们将把大量有关扰动理论和误差分析的算法性讨论分散地进行处理；并试图向他们提供如何理解和解决工作中出现的矩阵问题的细节。数值线性代数的研究常常得力于其他数值分析领域中的研究工作。例如，求解稀疏线性方程组的最好方法，是由从事偏微分方程数值解的研究人员发展起

来的，而拟牛顿法领域中的活动亦同样影响着矩阵分解中各种形式的修改技术的发展。

本书用六年的时间写成，它的名字却经历了好几次改变：（1）矩阵计算的终极教程，（2）应用矩阵计算，（3）高等矩阵计算。第一个名字，除了“善意的”理解外应是错误的，我们对矩阵计算的处理不能妄称全面，特别在振动研究中有关稀疏矩阵计算的许多课题就没有收入本书，其理由简单地说就是不想深究图论和数据结构。取消第二个名字的原因是因为我们没有用很大的篇幅去涉及应用，在多数情况下，我们考虑的矩阵问题都仅给出它的原型而并未求其水落石出。这似乎是一个教学法上的缺点，但对一个有经验的教师来说，这是可望得到弥补的。此外，由于读者也会逐步获得经验，因而就没有必要进行大的改动了。最后，由于本书特别是前四章没有包含引论性的材料，所以最后的名字也被放弃了。为了全面一些，也为了使我们对主题基础的处理能引起在大学中任教于数值分析的教师的兴趣，因此还选进了一些初等的课题。

既然这本书并不全面，应用也较少，而且又不完全是高等的，那么它到底是什么呢？这个问题可由其简短的大纲来回答。

前三章包括一些必要的基础性材料，回顾了矩阵代数，并建立了一些重要算法，而进度则是轻车快马式的。如果读者对前几章的问题感到吃力，毫无疑问，他对本书的其余部分亦将感到吃力。

第 4 章提出并分析了高斯消去法。专家们对本章的所有部分都可能认为是自然的，除了对我们的误差分析的风格和条件数估计的讨论以外，甚或还会感到有些烦琐。

数值线性代数中许多带有倾向性的研究都在具有特殊形式结构的矩阵问题——例如大而且稀疏的问题上集中起来，第 5 章的中心论题就是讨论利用这种结构的技巧和描述目的不同的各种线性方程组解算器。

第 6 章是根据这一领域中的另一倾向，即人们对正交阵信赖的日益增长来选材的。我们讨论了几种正交化方法，并指出怎样把它们应用于最小二乘问题的可能性，对于掌握降秩问题给予了特殊的注意。

第 7 章的中心内容是对非对称特征值问题也普遍有效的 QR 算法。其中的启发性推导将有助于掌握该算法的技巧。我们还对不变子空间计算和广义特征值问题做了注释。

第 8 章继续讨论特征值问题，但把重点放在重要的对称矩阵的情形。我们首先描述了对称QR 算法，然后指出对称情形下的几种变形的计算程序。

这样一来，本书对稀疏性问题的处理势必应是分散的。带状线性方程组解算器在第 5 章中讨论，同时迭代法放在第 7 章进行描述，而Ray leigh 商迭代在第 8 章等等。第 9 和第10两章则完全致力于解决稀疏矩阵问题，讨论是围绕着Lanczos方法以及与其一脉同宗的共轭斜量法进行的。我们将指明如何利用这一重要算法去解决稀疏特征值问题、最小二乘问题以及线性方程组问题。

本书的最后两章将阐述在第 4 - 8 章中所提出的那些算法的广泛应用性，第11章将涉及一个矩阵函数的计算，这是在控制理论应用中常常用到的，第12章选择并描述了一些特殊的矩阵问题，它们从几个侧面显示了奇异值分解的威力。实际上，本书最重要的主题也许应在矩阵分解的实用性及其理论价值方面。几乎在每一章中算法和数学性质都起着关键的作用。就象我们的同行 Alan Cline 所说的“关于奇异值分解的每一件事情您都希望知道（但又不敢直说）”那样，矩阵计算一书在颇大程度上也象是一部经过润色的手稿。

关于应用软件的参考文献，还需重申一下。我们曾经着重地介绍了EISPACK和LINPACK，且在本书中几乎涉及了这两个包的每一个子程序，此外，在许多注释性文献中还引证了大量的

"技术报告"，实际上，它们也是软件的参考文献。值得指出的是：除EISPACK和LINPACK外，我们对于所引证的软件尚缺乏直接的经验。幸勿误会。

许多人帮助了本书的出版，Richard Bartels帮助搜集了文献并对前几章的初稿进行了修改。本书的编写还曾得到过他于1977年8月在Johns HoPkin大学组成的矩阵计算小组的支持与帮助。

Bob Plemmons, John Dennis, Alan Laub和Don Heller曾分别讲授过这本书的不同部分，并提出过很多建设性意见。George Cybenko把他写的ToePlitz矩阵一节也慷慨地支援了我们，而Bo Kagstorm为我们对不变子空间计算所进行的处理提供了许多有益的注释。Per-Ake Wedin阅读了第2章和第6章的初稿，对版本的重修也是卓有贡献的。Uri Ascher和Roger Horn作为无名的评论家曾提出过许多有价值的意见，包括对书题的独到的见解。

最后，对我们的同行Cleve Moler和Pete Stewart所发挥的作用表示衷心地感谢。他们在这一领域中的工作相当完善而且硕果累累，曾深刻地影响着我们在表述方面的布局与风格。

本 书 用 法

编写

本书中经常引证下列文献

SLE　G. E. Forsythe 和 C. B. Moler (1967). *Computer Solution of Linear Algebraic Systems*, Prentice-Hall, Englewood Clifts.

SLS　C. L. Lawson 和 R. J. Hanson (1974). *Solving Least Squeres Prcblems*, Prentice-

Hall, Englewood Clifts.

SEP　B.N.Parlett(1980). *The Symmetric Eigenvelue problem*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs.

IMC　G. W. Stewarte (1973). *Introduction to Matrix Computations*, Academic Press, New York.

AEP　J. H. Wilkinson (1965). *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Clarendon Press, Oxford.

这些缩写将用于标识"全局性"的参考，例如，"Wilkinson (AEP, ChaP.5)"，所有其余的指出了章节的文献信息都是局部的。在本书的末尾有一个文献的总目录。

关于软件包LINPACK和EISPACK的参考文献自然是指与之相应的参考手册：

EISPACK　B. T. Smith, J. M. Boyle, Y. Ikebe, V. C. Klema和G. B. Moler (1970). *Matrix Eigensystem Routines EISPACK Guide*, 2nd ed., SPringer-Verlag, New York.

EISPACK2　B. S. Garbow, J. M. Boyle, J. J. Dongarra和C. B. Moler (1972). *Matrix Eigensystem Routines EISPACK Guide Extension*, SPringer-Verlag, New York.

LINPACK　J. Dongarra, J.R. Bunch, C.B. Moler和G. W. Stewart(1978). *LINPACK Users Guide*, SIAM Publications, Phiadelphia.

于是"子程序xyz可以从LINPACK(ChaP.2)中找到"就表示子程序xyz在LINPACK手册的第2章中有所描述。关于EISPACK和LINPACK中的许多ALGOL子程序在下述资料中可以找到

HACLA J.H.Wilkinson 和 C.Reinsch, eds(1971). *Handbook for Automatic Computatation*, Vol.2, *Linear Algebra*, Springer-VerLag, New York.

各章节间的内部联系

在查阅本书的个别章节时，我们向读者建议一个恰当的“阅读路线”。该路线印在第5—12章的开头部分，它们集中地指出了本书所有章节间的逻辑关系（第1—4章的知识被视为是贯穿全书的）。

对教师们的建议

本书可以充任几种不同类型的教材，这里列出几个样本：

题目：矩阵计算引论（1学期）

题材：第2—4章,5.1—5.3，6.1—6.5，7.1—7.6，8.1—8.2

题目：矩阵计算（2学期）

题材：第1—12章

题目：线性方程组与最小二乘问题（1学期）

题材：第4—6章，9—10章，12.1—12.4，12.6.

题目：特征值问题（1学期）

题材：第7—9章，11章和12.5

在上述的每一种情况下，我们都极力主张应包括象EISPACK和LINPACK这一类软件包的使用技巧的内容。还可以通过便于实现矩阵运算的MATLAB这本资料，而使内容更为生动，见

C. B. Moler (1980)."MATLAB User's Guide",Technical Report CS81-1, Department of Computer Science, University of New Mexico, Albuquerque New Mexico, 87131.

内容提要

本书是计算数学专著，重点介绍矩阵计算的基本知识、基础理论和最先进的方法。全书分为十二章：矩阵代数基础；向量、矩阵和子空间的度量及线性方程组的敏感性；数值矩阵代数；Gauss消元法；特殊的线性方程组；正交化和最小二乘法；非对称特征值问题；对称特征值问题；Lanczos方法；线性方程组的迭代法；矩阵函数；特殊的课题 各章节后配有不少习题和大量参考文献 对读者是很有参考价值的.

本书可作为计算数学专业的教材和教学参考书，也可供理工科其他专业师生、计算数学工作者及从事科学与工程计算的工作人员参考.

目　　录

第一章　矩阵代数基础

这一章复习基本的矩阵代数，主要目的是作一个概念和符号的汇编。希望得到更多入门知识的读者可以查阅本章末尾给出的参考文献。

§1.1　向量和矩阵

$R^{m\times n}$表示全部$m\times n$实矩阵的向量空间：

$$A\in R^{m\times n}\Longleftrightarrow A=[a_{ij}]=\begin{bmatrix} a_{11}\cdots a_{1n} \\ \vdots \quad\quad \vdots \\ a_{m1}\cdots a_{mn}\end{bmatrix}$$

其中一个大写字母表示一个矩阵（如A、B、Δ），有下标ij的小写字母指的是（i，j）分量（如a_{ij}、b_{ij}、δ_{ij}）。

矩阵的一些基本运算有：

矩阵加法（$R^{m\times n}+R^{m\times n}\rightarrow R^{m\times n}$）

$$C=A+B \qquad c_{ij}=a_{ij}+b_{ij}$$

矩阵与标量的乘法（$R\times R^{m\times n}\rightarrow R^{m\times n}$）

$$C=\alpha A \qquad c_{ij}=\alpha a_{ij}$$

矩阵与矩阵的乘法（$R^{m\times n}\times R^{n\times p}\rightarrow R^{m\times p}$）

$$C=AB \qquad c_{ij}=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}b_{kj}$$

转置（$R^{m\times n}\rightarrow R^{n\times m}$）

$$C=A^T \qquad c_{ij}=a_{ji}$$

以及微分（$R^{m\times n}\rightarrow R^{m\times n}$）

$$C=(c_{ij}(\alpha)) \qquad \dot{c}=\frac{d}{d\alpha}C=[\dot{c}_{ij}(\alpha)]$$

$n\times n$矩阵称为方阵。$n\times n$ **单位矩阵**用 I_n表示，它的第 k 列用$e_k^{(n)}$表示：

$$I_n=\begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \qquad e_k^{(n)}=(0,\ \cdots,\ 0,\underset{k}{1},\ 0,\cdots,0)^T$$

当维数从上下文中已能一目了然时，我们就简单地把它们分别写成 I 和e_k。

如果在$R^{n\times n}$中的A 和 B满足 $AB=I$，那么B是A的**逆阵**并记为 A^{-1}。如果A^{-1}存在，则称A是**非奇异矩阵**，否则称A是**奇异矩阵**。A^{-T}表示$(A^{-1})^T=(A^T)^{-1}$。

如果 $A=(a)\in R^{1\times 1}$，那么，它的**行列式**为 $\det(A)=a$。当$A\in R^{n\times n}$时，有

$$\det(A)=\sum_{j=1}^{n}(-1)^{j+1}a_{1j}\det(A_{1j})$$

其中A_{1j}是$(n-1)\times(n-1)$ 矩阵，它是由划去A的第一行和第 j 列得到的。有用的行列式性质包括

(i) $\det(AB)=\det(A)\det(B)$ $\qquad A,B\in R^{n\times n}$

(ii) $\det(A^T)=\det(A)$ $\qquad A\in R^{n\times n}$

(iii) $\det(cA)=c^n\det(A)$ $\qquad c\in R,\ A\in R^{n\times n}$

(iv) $\det(A)\neq 0\Longleftrightarrow A$是非奇异的 $\qquad A\in R^{n\times n}$

R^m 表示 $R^{m\times 1}$，我们习惯上用小写字母来表示这些列向量，而附加单个下标表示其分量。因此，如果$A\in R^{m\times n}$，$x\in R^n$同时$y=Ax$，那么

$$y_i=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j \qquad i=1,\ \cdots,\ m$$

$x\in R^m$和$y\in R^n$的**外积**由下式给定

$$x y^T = \begin{bmatrix} x_1 y_1 \cdots x_1 y_n \\ \vdots \quad \vdots \\ x_m y_1 \cdots x_m y_n \end{bmatrix} \in R^{m\times n}$$

它们的内积（如果$m=n$）为

$$x^T y = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i = y^T x$$

假设$A\in R^{n\times n}$是非奇异的，并且u和v属于R^n，如果$v^T A^{-1} u \neq -1$，那么

$$(A+uv^T)^{-1} = A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^TA^{-1}}{1+v^TA^{-1}u} \qquad (1.1\text{-}1)$$

这是有名的 Sherman-Morrison 公式。

式（1.1-1）的一个有用的推广是 Sherman-Morrison-Woodbury公式。

$$(A+UV^T)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(I+V^TA^{-1}U)^{-1}V^TA^{-1} \qquad (1.1\text{-}2)$$

其中$A\in R^{n\times n}$，$U\in R^{n\times k}$，$V\in R^{n\times k}$，并且A和$(I+V^TA^{-1}U)$都是非奇异的。

如果$A\in R^{m\times n}$，并且我们记

$$A=[c_1, \cdots, c_n]$$

那么$c_k\in R^m$是A的第k列。同样，

$$A=\begin{bmatrix} r_1^T \\ \vdots \\ r_m^T \end{bmatrix}$$

意味着r_k^T是A的第k行。如果

$$1\leqslant i_1<\cdots<i_r\leqslant m$$

并且 $$1\leqslant j_1<\cdots<j_s\leqslant n$$

那么由$b_{pq}=a_{i_p j_q}$定义的矩阵$B=(b_{pq})\in R^{r\times s}$是$A$的一个子矩阵。如果对于$p=1, \cdots, r$，有$r=s$和$i_p=j_p$，那么$B$是一个主子阵。如果对于$p=1, \cdots, r$，还有$i_p=j_p=p$，那么$B$是一个前主子阵。