中国科学技术大学 21世纪教改系列教材

线性代数计算方法

蒋长锦　编著

中国科学技术大学出版社

中国科学技术大学21世纪教改系列教材

线性代数计算方法

蒋长锦　编著

中国科学技术大学出版社
2003・合肥

内容提要

本书讨论线性代数计算方法的基础理论和常用算法，内容包括解线性代数方程组的直接法、迭代法、共轭梯度法和线性最小二乘法；求一般 n 阶矩阵特征值问题的幂法、反幂法、矩阵收缩法、QR 方法和求广义特征值问题的 QZ 方法；求对称矩阵特征值问题的子空间迭代法、对称 QR 方法、Jacobi 方法、Givens-Householder 方法、矩阵奇异值分解和求对称广义特征值问题的广义 Givens-Householder 方法等. 对所讨论的方法，一般都提供算法的数学基础、计算过程，以及收敛性和稳定性的具体论述.

本书为理工科本科生计算数学和应用软件专业“线性代数计算方法(数值线性代数)”课程的教材，也可供理工科其他专业高年级学生、研究生、教师及计算数学工作者或从事科学与工程计算的科技人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

线性代数计算方法/蒋长锦编著. —合肥：中国科学技术大学出版社，2003.8

(中国科学技术大学21世纪教改系列教材)

ISBN 7-312-01565-4

Ⅰ. 线… Ⅱ. 蒋… Ⅲ. 线性代数—计算方法—高等学校—教材 Ⅳ. O151.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 033862 号

中国科学技术大学出版社出版发行
(安徽省合肥市金寨路 96 号，230026)
中国科学技术大学印刷厂印刷
全国新华书店经销

开本：850×1168/32 印张：12.875 字数：335 千
2003 年 8 月第 1 版 2003 年 8 月第 1 次印刷
印数：1—3000 册
ISBN 7-312-01565-4/O·271 定价：18.00 元

前　言

线性代数计算方法，又称为数值线性代数，主要研究线性代数方程组和矩阵特征值问题的数值计算问题.本书是作者在长期讲授“线性代数计算方法”课程和从事计算数学研究的基础上，参考国内外有关论著编写而成的，主要讨论了线性代数计算方法的基础理论和常用算法，并适当涉及了这些算法的最新发展.本书内容主要包括：

第1章讨论线性代数计算方法中的一些基本概念，如误差、条件、稳定性、范数、Givens 变换和 Householder 变换等.

第2章讨论解线性代数方程组的直接法，介绍 Gauss 消元法和矩阵的三角分解，解的摄动，计算解的误差估计和迭代改善，列主元素消元法的舍入误差分析，线性最小二乘法等.

第3章讨论解线性代数方程组的迭代法的一般理论，介绍点和块 Jacobi 迭代、Gauss-Seidel 迭代、SOR 迭代等迭代方法的迭代格式和收敛问题，SOR 迭代的最优松弛因子，迭代方法的 Chebyshev 加速，解线性代数方程组的变分方法——共轭梯度法.

第4章讨论非对称矩阵的基本性质和特征值问题的条件，介绍幂法、反幂法和矩阵收缩法，QR 方法、带原点位移的 QR 算法和实矩阵的双重步 QR 算法，广义特征值问题的 QZ 算法等.

第5章讨论实对称矩阵的基本性质和特征值的摄动，介绍子空间迭代法，对称 QR 方法和隐位移 QR 算法，Jacobi 方法，Givens-Householder 方法，矩阵的奇异值分解，对称广义特征值问题的广义 Givens-Householder 方法等.

每章都附有若干难度适中的习题.有的习题是为了加深对算法的理解和实践，有的习题是为了扩充算法的应用范围.书末附有

习题答案和提示，供读者参考.

使用和学习本书只需要具备微积分和线性代数方面的基本知识.

作者在三十余年与计算数学和应用软件的不解之缘中，特别是在作者涉足的常微分方程组的初、边值问题和周期解问题的数值方法、偏微分方程数值解、孤立子数值模拟、Hamilton 系统的辛几何算法、Hamilton 型 PDEs 的多辛积分、有限元、样条函数、多重网格方法、非线性方程组的数值解、最优化问题、计算机图形学等的研究中，深深地体会到，最有效的数值计算方法最终都将归结为线性代数的数值计算问题. 因此，线性代数计算方法在现代计算数学中占有非常重要的基础地位，起着十分关键的作用，是科学和工程计算的核心. 在计算机科学飞速发展和广泛应用的今天，广大本科生、研究生、科学工作者学习、掌握和应用线性代数计算方法是非常重要的.

作者感谢中国科学院院士石钟慈先生对本书写作和出版给予的热情关怀、指导和帮助，感谢中国科学技术大学教务处、研究生院、科技处、出版社、数学系等部门的关心和支持，感谢蒋勇同志用 C 语言完成习题答案，感谢李洪梅、蒋智同志为排版付出的辛勤劳动，感谢夫人吴康平为保证作者全身心投入写作承担全部家务做出的默默无闻的奉献.

由于作者水平所限，对尚存的错误或不妥之处，恳请读者批评指正.

中国科学技术大学数学系

蒋长锦

2003 年 4 月

目　次

第1章　绪　　论

1.1　线性代数计算方法的重要性

1.1.1　用计算机解决实际问题

在生产和科学研究中，人们使用数学作为研究的手段和工具，在大多数情况下，是希望通过数学的研讨最终获得解决问题所需要的数值结果.

对于需要求解的实际问题，首先必须使用物理、化学、工程等学科的定理、定律和实验数据来表示实际问题的量和量之间的相互关系，即建立数学模型.由于实际问题的复杂性，在这一步往往需要进行抽象、简化，以抓住问题的主要矛盾或主要方面.只有这种抽象、简化是合理的，所得的数学模型才能正确地反映实际问题的客观规律，由数学模型得到正确的结果.

当由实际问题建立了数学模型之后，我们就将实际问题的求解转化为对数学模型的求解.在大多数情况下，用解析的方法求解数学模型是不可能的，有时虽然是可能的，由于其表达式十分复杂，难以为实践所接受.生产和科学研究中提出的大多数数学模型问题的求解往往是使用计算工具来获得数值结果.

计算工具，从算盘、机械式手摇计算机到当今的数字式电子计

算机,它们的构造不同,工作原理不同,运算速度不同,但就其本质来说,它们都具有以下的共同特点:

(1) 所有实数都只能用有限个物理器件及其状态来近似表示.

(2) 只能作加、减、乘、除四则运算和逻辑运算.

由于数字式计算机的这种局限性,决定了它们不能直接用来精确求解一般的数学模型问题. 为了能使用数字式计算机求解一般的数学模型问题,就必须根据数字式计算机的特点对数学模型问题进行适当处理.

数值计算方法的基本任务就是将数学模型问题的求解归结为对有限位字长的近似数的有限次四则运算和逻辑运算. 它是为使用数字式计算机解题服务的,所以它又称为计算机上使用的数学方法.

1.1.2 研究线性代数计算方法的重要性

毫不夸张地说,相当一部分数值计算问题,特别是来源于工程、物理、生态等方面的微分方程、积分方程的求解问题和最优化问题的有效的数值计算方法,最终都归结为线性代数计算问题. 因此,线性代数计算方法在现代计算数学中占据特别重要的基础地位,应该得到充分的重视.

由于数值计算方法是和计算机紧密相关的,线性代数计算方法也不例外. 当今计算机仍处在飞速发展之中,内存在扩大,运算速度在提高,而且向量机、并行机等新型计算机的出现必然导致数值计算方法的不断更新和发展. 一方面,一些运算量较大,要求内存量和运算速度较高,难以在老的计算机上实现,但又十分有效和十分需要的方法,随着计算机的发展,变成可以实现而受到重视. 另一方面,科学技术的发展又促使数值计算方法提出一些具有更高精度和更大运算量的计算任务. 因此,根据当今计算机的特点,

对线性代数问题提出和选择实际可行和有效的算法是非常重要的,事实上,它决定了线性代数计算方法必须不断地更新和发展.

线性代数计算方法研究的大多是线性代数已研究过的相同问题,但线性代数计算方法是面向实际,面向计算机,并侧重于从技术上解决问题.由于数字式计算机数系的残缺不全和不完全遵循数学的运算规律,由于计算机运算速度有限,内存有限,又由于我们必须在有限的时间内完成计算任务,这就决定了一方面线性代数计算方法受线性代数一般理论的指导,但另一方面它又和线性代数存在着较大的差别.现以求解线性方程组为例来简单地说明这种区别的存在性.

设有一个 n 阶线性方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1.1.1}$$

若系数行列式 $\Delta = \det A \neq 0$,则方程组存在唯一解.由著名的 Cramer 法则,其解为

$$x_i = \frac{\Delta_i}{\Delta}, \quad i = 1,2,\cdots,n \tag{1.1.2}$$

这里,Δ_i 是用 $\boldsymbol{b}$ 代替 Δ 的第 i 列所得的行列式.因此,按此方法求解线性方程组,只需计算 $n+1$ 个行列式.如果按行列式的定义来计算行列式,即

$$\Delta = \det A = \sum_{(j_1\cdots j_n)} (-1)^{\tau(j_1 j_2\cdots j_n)} a_{1j_1} a_{2j_2} \cdots a_{nj_n} \tag{1.1.3}$$

其中,$j_1 j_2 \cdots j_n$ 为 $1,2,\cdots,n$ 的一个排列,排列共有 $n!$ 个.当逆序 $\tau(j_1 j_2 \cdots j_n)$是偶数时,此项前取正号,否则取负号.显然,此算法仅包括四则运算和逻辑运算,是可以用计算机实现的.

但是,通过以下简单的分析,不难发现该算法的时间复杂性过大,是不能实现的.这里仅考虑乘法运算量.计算一个行列式共有 $n!$ 项,求每个项需要$n-1$次乘法,计算 $n+1$ 个行列式的乘法总量为

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

当 $n=30$ 时，有

$$(n-1)(n+1)! \approx 2.38 \times 10^{35}$$

若用可实现 1 亿次/秒乘法的计算机来计算，则一年可完成的乘法运算量为

$$10^8 \times 365 \times 24 \times 3600 \approx 3.15 \times 10^{15}$$

因而，所需时间为

$$2.38 \times 10^{35} \div (3.15 \times 10^{15}) \approx 7.56 \times 10^{19} (\text{年})$$

这个运算时间显然是不可接受的. 当今求解的线性方程组要比 30 阶大许多许多倍. 因此，虽然 Cramer 法则在线性代数中十分重要，形式十分完美，且按定义计算行列式是基本方法，但是，从线性代数计算方法的角度看，以此为基础得到的这个算法运算量太大，耗时过长，是不可取的.

1.1.3 线性代数计算方法的基本内容

线性代数计算方法，又称为数值线性代数，主要研究解线性代数方程组的解法和矩阵特征值问题等. 其基本内容简要介绍如下：

解线性代数方程组的直接方法是指可通过有限步四则运算求得方程组解的方法. 该方法只有舍入误差，而无截断误差. 对于中等规模的线性代数方程组，通常采用直接法. 该类方法主要包括 Gauss 消元法、三角分解法、Gauss-Jordan 消元法，解线性最小二乘问题的有关方法，根据直接法的计算过程分析舍入误差，解的摄动问题和计算解的迭代改善等.

解线性代数方程组的迭代法是对选定的解的初始近似 $\boldsymbol{x}^{(0)}$，按某种规则生成向量序列 $\{\boldsymbol{x}^{(k)}\}$，且 $\lim\limits_{k\to\infty}\boldsymbol{x}^{(k)}=\boldsymbol{x}^*$，则 $\boldsymbol{x}^*$ 是方程组的解. 由于时间的有限性，通常是取某个 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ 作为 $\boldsymbol{x}^*$ 的近似，因此，对于迭代法，存在截断误差和舍入误差. 迭代法的重点在于方法的构造和收敛性讨论. 迭代法由于不存储线性方程组系数矩阵的零元素，主要应用于求解大型稀疏矩阵的线性方程组. 基本的迭代方法

包括Jacobi迭代法、Gauss-Seidel 迭代法、松弛迭代法等. 解线性代数方程组的变分方法——共轭梯度法,形式上是迭代法,我们将它归为迭代法来讨论,但理论上它具有有限步收敛的特点,也就是说,它也可以看作直接法.

对于矩阵特征值问题,主要包括求模最大或最小特征值及其特征向量的幂法和反幂法,一般矩阵全部特征值和特征向量的 QR 方法,带原点位移的 QR 算法和实矩阵的双重步 QR 算法,求实对称矩阵全部或部分特征值和特征向量的幂法和子空间迭代法,对称 QR 方法和隐位移 QR 算法,奇异值分解,Jacobi 方法和 Givens-Householder 方法,广义特征值问题的 QZ 方法和对称广义特征值的广义 Givens-Householder 方法等. 特征值的分布理论和条件问题对矩阵特征值的计算和线性方程组的性态判断十分重要,也作适当的介绍.

以上所述也正好构成本书的主要内容.

1.2 误　　差

1.2.1 误差基本知识

1. 误差和误差限

定义 设 x 为准确值,$\tilde{x}$ 为 x 的近似值,称

$$e = \tilde{x} - x \tag{1.2.1}$$

为近似值 $\tilde{x}$ 的绝对误差,简称为误差.

通常,准确值 x 是未知的,因此误差 e 的准确值难以确定. 但是,根据测量工具的精密度或计算的实际过程,一般可以确定误差

的绝对值不超过某一正数 ε，它是误差绝对值的一个上界，称为误差限. 即

$$|e| = |\tilde{x} - x| \leqslant \varepsilon \tag{1.2.2}$$

由此得

$$\tilde{x} - \varepsilon \leqslant x \leqslant \tilde{x} + \varepsilon$$

这个不等式有时也写成

$$x = \tilde{x} \pm \varepsilon \tag{1.2.3}$$

2. 相对误差和相对误差限

误差限的大小有时不能表示近似值的好坏. 例如，有两个数 $x = 10 \pm 1 = \tilde{x} \pm 1, y = 1000 \pm 1 = \tilde{y} \pm 1$，显然 $\tilde{y}$ 近似 y 的程度比 $\tilde{x}$ 近似 x 的程度要好得多. 所以，除考虑 $\tilde{x}$ 误差的大小外，还应考虑准确值 x 本身的大小.

定义 误差 e 与准确值 x 的比值

$$\frac{e}{x} = \frac{\tilde{x} - x}{x} \tag{1.2.4}$$

称为近似值 $\tilde{x}$ 的相对误差，记作 e_r.

在实际应用中，由于准确值 x 是不知道的，通常取

$$e_r = \frac{e}{\tilde{x}} = \frac{\tilde{x} - x}{\tilde{x}} \tag{1.2.5}$$

作为 $\tilde{x}$ 的相对误差. 当 $\frac{e}{\tilde{x}} = e_r$ 的绝对值很小时，两者的差

$$\frac{e}{x} - \frac{e}{\tilde{x}} = \frac{e(\tilde{x} - x)}{\tilde{x}(\tilde{x} - e)} = \frac{\left(\dfrac{e}{\tilde{x}}\right)^2}{1 - \dfrac{e}{\tilde{x}}} = \frac{e_r^2}{1 - e_r}$$

是 e_r 的平方级，故可忽略不计.

通常，相对误差的准确值也是难以确定的. 和绝对误差情况相似，可确定相对误差的绝对值不超过某一正数 ε_r，它是相对误差绝对值的一个上界，称为相对误差限.