The Unitary Transformation and Its Applications

酉变换及应用

所谓酉空间就是上帝的空间

李庆来 著

复矩阵计算C++源代码于丁酉年首次公开发行

· 化复矩阵为复上Hessenberg矩阵C++源程序
· 复矩阵*QR*酉分解、复系数线性方程组求解C++源程序
· 将“实矩阵”酉分解为“复酉矩阵”和复上三角矩阵之积
· *QR*酉分解法求复矩阵全部特征值C++源程序（直接法）
· 已知复矩阵特征值求对应特征向量C++源程序（直接法）
· 复矩阵重根特征值“概率修正”及特征向量“极大似然法”
· 复矩阵特征多项式展开、奇异值分解、Schur分解算例
· 正规矩阵谱分解、Jordan标准形、Hermite二次型
· 经典力学（柔度矩阵）、量子力学（厄米矩阵）本征值问题

上海科学普及出版社

The Unitary Transformation and Its Applications

酉变换及应用

李庆来　著

上海科学普及出版社

图书在版编目(CIP)数据

酉变换及应用/李庆来著. —上海：上海科学普及出版社，2016.12

ISBN 978-7-5427-6848-3

Ⅰ. ①酉… Ⅱ. ①李… Ⅲ. ①酉一研究 Ⅳ. ①O152

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 257788 号

责任编辑 林晓峰

酉变换及应用

李庆来 著

上海科学普及出版社出版发行

(上海中山北路 832 号 邮政编码 200070)

http://www.pspsh.com

各地新华书店经销 苏州市越洋印刷有限公司印刷

开本 787×1092 1/16 印张 16.75 字数 320 000

2016 年 12 月第 1 版 2016 年 12 月第 1 次印刷

ISBN 978-7-5427-6848-3 定价：95.00 元

序

2015 年 9 月，庆来出版了他的第一本专著《多元统计分析》；2016 年 8 月，他的第二本专著《酉变换及应用》又已完成。我向他表示祝贺，也愿意为这本新书作序。

中国的工程建设已经火爆了近三十年，它释放的巨大经济诱惑俘虏了无数才俊的青春、梦想和生命。工程建设领域内的工作者，能出版个人数学专著的，是鲜有其人；在不到一年的时间里能完成第二本数学专著的，更是前所未闻。

这本新书的问世，给读者带来的不仅仅是惊喜，更多的是深思。只有真正懂得枯燥的人们才会理解乐趣，枯燥至极终将归于乐趣无穷。我深深感受到，庆来在艰辛探索未知领域过程中的喜悦之情，以及他愿意和读者及时分享快乐成果的真挚情感。根据 Schur 定理，任意实方阵都酉相似于一个上三角矩阵，但目前已有算法给出的不是 Schur 定理所指的“复的酉矩阵”和“干净的上三角矩阵”。大概在 2016 年年初，庆来为实方阵的 Schur 分解找到了真正的酉分解算法，“是上帝凌晨告诉我的”，他的喜悦之情溢于言表。“我发现了一个关于厄米矩阵的构造方法”，宛如大海拾贝的孩童，还未拭去表面的全部泥沙，就把美丽珠贝给小伙伴们分享了。

这本新书提供了一般文献不写的 Windows 环境下 C＋＋程序设计语言的部分源代码，这是作者精心为邀约入场的读者铺设的红地毯，是为真正想解决实际问题的读者提供的利器。

我相信，读者一定会从书中得到启迪和帮助，也一定会有所收获。

2016 年 8 月 9 日于上海

目　　录

（带 * 号的章节为参考阅读内容）

第1章　绪　　论

酉空间的理论与欧氏空间的理论很相近，有一套平行的理论[15]。酉变换是复数域上内积空间 V 到 V 自身上的保长线性变换，可以认为酉变换是欧氏空间的实正交变换在酉空间内的推广[28]。然而，实正交变换的理论公式、数值算法和程序设计一定不能“原封不动地”、“平行地”应用于酉变换，必须从底层开始做最基础的工作。

实正交变换在自然科学、社会科学和工程技术中已有广泛的应用，但针对酉变换的理论公式、数值算法和程序设计的文献很少[32]。20 世纪初，工程振动和量子力学的问题已经开始应用酉变换的一些理论。随着科学技术的不断发展，尤其是计算机(包括量子计算机)的迅速发展，酉空间内的酉变换将逐渐成为人们认识世界的一种重要方法。

1.1　复数及物理意义

1.1.1　复数

复数(complex number)最早出现在文艺复兴时期意大利数学家 G. Cardano(卡尔达诺，1501—1576 年)的名著《大术》(1545 年)中，他把复数看成是无价值的、不合用的，并称 $i=\sqrt{-1}$ 这样的数为虚数[11]。到了 17 世纪，英国物理学家、数学家 Isaac Newton(牛顿，1642—1727 年)把虚数排斥在数的概念之外；而德国物理学家 G. W. Leibniz(莱布尼兹，1646—1716 年)则说：“复数是精神世界的一个奇妙的避难所，好像是存在又不存在的两栖动物”。1799 年，德国数学家 Gauss(高斯，1777—1855 年)给出了代数基本定理的第一个证明，他的证明依赖于对复数的承认，从而巩固了复数的地位。直到 19 世纪，复数才有了现代的意义。

算例 1.1　二次方程的根

求二次方程

$$\begin{cases} x^2-x+1=0 \\ x^2-(1+i)x+i=0 \end{cases}$$

的根。

这两个二次方程，分别为实系数和复系数二次方程，它们的根都可以通过中学阶段学过的求根公式来求解。两个方程的根分别为

$$\begin{cases} x_{1,2} = \dfrac{(1 \pm \sqrt{3}i)}{2} \\ x_1 = 1, x_2 = i \end{cases}$$

从算例 1.1 可以看出，这里的实系数二次方程的根为一对共轭复根，而复系数二次方程的根一个是 1，另一个是纯虚数 i。

二次方程的根式解在复矩阵全部特征值求解、复系数代数方程全部根求解中有应用，相关内容见第 4 章。

1.1.2 复数的物理意义

复数在数学上有了合法地位之后，人们开始应用复数来表示和解答自然科学和工程技术中的问题，从而发现了复数的物理意义。例如，在电工技术中，正弦量可以用复数(称为相量)来表示，相应电流和电压也可以用复数来表示，但这只是数学上的一种变换和表示。

可以认为，矩阵力学的应用才使复数有了物理意义。例如，在有阻尼振动问题及相应的代数特征值问题中，可以通过复数及复矩阵的计算来求解结构的振型和振动频率；在量子计算和量子通信的理论中，复数一开始就有了物理意义，并可以通过复数和复矩阵的计算来解释微观世界的现象；自动控制论中的“根轨迹法[19]”，闭环系统的极点一般是一对共轭复数。有关酉变换在经典力学和量子力学中的应用，见第 8 章。

所谓复矩阵，就是是指矩阵元素中含有复数的矩阵。虽然可以认为“实矩阵就是复矩阵一种”，但为了便于区分实矩阵与复矩阵，这里所说的复矩阵，专指所有元素的虚部不全为零的矩阵。

1.2 欧氏空间与酉空间

欧氏空间(Euclid space)与酉空间(Unitary space)是两类重要的线性空间。简单地说，欧氏空间(实内积空间)是实数域上一个特殊的实线性空间，而酉空间(复内积空间)是复数域上一个特殊的复线性空间[15]。

欧氏空间定义 设 V 是实数域 R 上的线性空间，对于 V 中任意两个向量 x 和

y,按某规则有一实数(x,y)与之对应,它满足下面的四个条件:

(1) 交换率　$(x,y)=(y,x)$;

(2) 分配率　$(x,y+z)=(x,y)+(x,z)$;

(3) 齐次性　$(kx,y)=k(x,y), \forall k \in R$;

(4) 非负性　$(x,x) \geqslant 0$,当且仅当 $x=0$ 时,实数 $(x,x)=0$。

则称该实数(x,y)为向量 x 和 y 的内积,而称 V 为欧氏空间。

酉空间定义　设 V 是复数域 C 上的线性空间,对于 V 中任意两个向量 x 和 y,按某规则有一复数(x,y)与之对应,它满足下面的四个条件:

(1) 交换率　$(x,y)=\overline{(y,x)}$,这里 $\overline{(y,x)}$ 是 (x,y) 的共轭复数;

(2) 分配率　$(x,y+z)=(x,y)+(x,z)$;

(3) 齐次性　$(kx,y)=k(x,y), \forall k \in C$;

(4) 非负性　$(x,x) \geqslant 0$,当且仅当 $x=0$ 时,实数 $(x,x)=0$。

则称(x,y)为向量 x 和 y 的内积,而称 V 为酉空间。在 n 维酉空间中,任意线性无关的向量组都可以用 Schmidt 正交化方法正交之。有关在酉空间内 Schmidt 正交化方法,见第 2 章。

可以说,酉空间的理论与欧氏空间的理论很相近,有一套平行的理论[15]。然而,欧氏空间的理论公式、数值方法和程序设计,一定不能"原封不动地"、"平行地"应用于酉空间。具体地讲,要编写酉空间计算的程序,必须首先给出在酉空间中的理论公式的具体表达式,然后给出实用的数值方法,最后还要从底层编写所有的代码才能实现计算机的计算。

注意,欧氏空间与酉空间虽然都是内积空间,但内积的定义不同。在欧氏空间定义的对称性条件:$(x,y)=(y,x)$,在酉空间中就不能成立,酉空间中用 $(x,y)=\overline{(y,x)}$ 来替代。这说明,在酉空间中向量内积的计算,不能沿用欧氏空间的公式。

假设 α 与 β 是复 n 维向量空间中的两个复列向量

$$\alpha=\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\\ \vdots\\ \alpha_n\end{bmatrix}, \beta=\begin{bmatrix}\beta_1\\ \beta_2\\ \vdots\\ \beta_n\end{bmatrix}$$

则 α 与 β 的内积为

$$(\alpha,\beta)=\beta^H\alpha=\begin{bmatrix}\bar{\beta}_1 & \bar{\beta}_2 & \cdots & \bar{\beta}_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\\ \vdots\\ \alpha_n\end{bmatrix}=\bar{\beta}_1\alpha_1+\bar{\beta}_2\alpha_2+\cdots+\bar{\beta}_n\alpha_n$$

这个内积公式，与欧氏空间的内积公式完全不同。注意，虽然内积定义不同，但当 $(\alpha,\beta)=0$ 时，在酉间内仍称复向量 α 与 β 正交。

学习、理解和掌握抽象的数学定义、定理和公式的最好办法是计算，这或许是因为“大哉数学之为用[1,4,5]”的根本道理和基本方法。

算例 1.2 复、实对称矩阵的性质不完全相同

验证复对称矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1+3i & 2 & 6+8i\\ 2 & -1-4i & -1-2i\\ 6+8i & -1-2i & 3+5i\end{bmatrix}=[\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3]$$

是否存在谱分解。

根据谱分解理论，实对称矩阵存在谱分解。但在酉空间内，复对称矩阵就没有实对称矩阵的这个特点。有关正规矩阵的谱分解，见第 8 章。

这里略去 A 的特征值 $(\lambda_1,\lambda_2,\lambda_3)$ 及对应特征向量 (x_1,x_2,x_3) 的计算细节（参见算例 5.2），结果见表 1.1。

根据第七章式(7.4)的右端计算，可知复对称矩阵 A 不存在谱分解，见表 1.1。

表 1.1 复对称矩阵不存在谱分解的计算

	x_1	x_2	x_3	$A\neq\lambda_1 x_1 x_1^H+\lambda_2 x_2 x_2^H+\lambda_3 x_3 x_3^H$		
实部	0.646406	0.645565	0.397626	1.231943	1.703144	5.834684
	−0.057193	−0.475117	0.862313	0.888840	−1.132541	−0.729494
	0.758040	−0.572407	−0.272756	5.675278	−2.866164	2.900598
虚部	0.006540	−0.000000	0.145161	2.386029	−0.080262	8.024633
	−0.064973	−0.162579	0.000000	0.292491	−3.413368	−1.990803
	−0.000000	−0.058559	−0.053303	8.333076	−0.557074	5.027339
λ_r	7.951408	−5.066319	0.114911	—	—	—
λ_c	12.110240	−5.141347	−2.968893	—	—	—

注：λ_r 和 λ_c 分别表示复矩阵特征值的实部和虚部。

从算例 1.2 可以看出，对于复对称矩阵的一些性质和方法，不能沿用实对称矩阵的性质和方法。然而，复对称矩阵的有些性质还是和实对称矩阵是一样的，例如复对称矩阵的逆矩阵仍是复对称矩阵（相关内容见算例 3.3）。实际上，在酉空间

内，Hermite 矩阵和实对称矩阵有很多相同的特点，它们都是正规矩阵，也可以认为实对称矩阵是实 Hermite 矩阵；此外，有相同特征值的 Hermite 矩阵和实对称矩阵还可以相互转换，相关内容见第 6 章。

1.3 酉变换与酉矩阵

酉空间 V 中的线性变换 T，如果满足

$$(x,x)=(Tx,Tx),x\in V$$

则称 T 为 V 的酉变换[14,27](unitary transformation)。

酉空间 V 的线性变换 T 为酉变换的充要条件是，对于 V 中任意两个向量 x 和 y，都有

$$(x,y)=(Tx,Ty)$$

有关酉变换的具体应用见第 3 章至第 8 章，相关程序见第 9 章。

酉变换在酉空间的标准正交基下的矩阵 U 是酉矩阵(unitary matrix)，即 U 满足下式

$$U^HU=UU^H=I$$

式中 I 为单位矩阵。

酉变换是复数域上内积空间 V 到 V 自身上的保长线性变换，而实正交变换是实数域上内积空间 V 到 V 自身上的保长线性变换。酉变换与实正交变换都属于正交变换，可以认为酉变换是实正交变换在酉空间内的推广。例如，当酉矩阵 U 是实矩阵时，它满足

$$U'U=UU'=I$$

算例 1.3　酉矩阵的几个特点

试探讨酉矩阵

$$A=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}}i\\ \frac{2}{\sqrt{5}}i & \frac{1}{\sqrt{5}}\end{bmatrix}=[\alpha_1,\alpha_2]$$

的几个特点。

容易验证 A 为酉矩阵。通过计算,可以验证酉矩阵的 3 个特点。

(1) 酉矩阵 A 是个正规矩阵

因为 A 满足正规矩阵的条件,即

$$A^H A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = A A^H$$

所以,它一定存在谱分解

$$A = \lambda_1 x_1 x_1^H + \lambda_2 x_2 x_2^H$$

式中

$$\lambda_1 = \frac{1}{\sqrt{5}} - \frac{2}{\sqrt{5}} i, \lambda_2 = \frac{1}{\sqrt{5}} + \frac{2}{\sqrt{5}} i$$

$$x_1 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}, x_2 = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

(2) 酉矩阵的特征向量是正交的

可以验证

$$(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} = 0$$

(3) 酉矩阵行列式的模为 1

可以验证

$$|\det(A)| = 1$$

注意,酉矩阵的行列式的模为 1,并不是指酉矩阵的行列式为 1。显然,因为酉矩阵的行列式是个复数,存在虚部不为零的情况,具体参见算例 2.3。

通过矩阵 A,读者还可以验证酉矩阵的其它性质,这里从略。

特别地,这里的酉矩阵 A 是个复对称矩阵(并不是所有的酉矩阵都是复对称矩阵)。另外,这里的酉矩阵 A 的特征值是一对共轭复根,不仅可以求得对角阵形式的 Jordan 标准形 J,还可以进一步求出 Schur 分解的上三角矩阵 **Я**,相关内容见第 7 章。

这里直接给出酉矩阵 A 的特征多项式

$$f(\lambda)=\lambda^2-\frac{2}{\sqrt{5}}\lambda+1=0$$

以及酉矩阵 A 的伙伴矩阵

$$C_p=\begin{bmatrix}\frac{2}{\sqrt{5}} & -1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$$

注意，这里的酉矩阵 A 虽然是个复矩阵，但它的特征多项式的系数却都是实系数，而与其酉相似的伙伴矩阵也是个实矩阵。有关复矩阵特征多项式展开及伙伴矩阵的构造方法，见第 6 章。

1.4 主 要 内 容

为便于读者阅读，本书没有采用《几何原本》(古希腊 Euclid)那种以演绎为主的叙述方式，即“先定理、后证明、最后是算例”，也没有采用《九章算术》(汉代张苍，《九章算术》是最早提出负数的文献)那种以归纳为主的叙述方式[6,10]，即“先算例、后归纳”。本书采用文献[2]的叙述方式，试图将酉变换的理论公式、数值计算、程序设计和工程应用统一起来，力争成为一个相对完整的系统，最终实现“大哉数学之为用”。

本书提供的公式、算例和程序是描述酉变换不可缺少的三个组成部分。考虑到复矩阵计算的繁琐，大部分算例都是通过自编计算机程序的计算来完成。一方面，本书提供的公式，是编写计算机程序的依据；另一方面，所有公式都经过了程序计算的检验。

通过了解和掌握本书提供的算例，读者可以根据计算步骤自行编程来完成计算，必要时也可参考本书所附程序。注意，本书所附程序的数组都比较小，处理的一般是小型复矩阵；随着 64 位计算机的出现，在 C++语言中，读者可以通过定义指针数组的方法来处理大型复矩阵。

本书各章节涉及的主要内容和方法，见表 1.2。

表 1.2 主要内容和方法一览

章	主要内容和数值方法	程序
1	略	—
2	复矩阵 QR 酉分解，任意 QR 酉分解，实矩阵的“QR 酉分解”，QR 正分解，QR 反分解，孪生矩阵	有

表 1.2　主要内容和方法一览(续 1)

章	主要内容和数值方法	程序
3	复系数线性方程组求解，复矩阵求逆，复系数线性方程组有解的判定	有
4	复矩阵特征值的 QR 酉分解法，复系数代数方程的根，“析出降阶”的 QR 酉分解法，重根的概率修正	有
5	特征向量 f_zM 法，正规矩阵的特征向量，重根特征向量的极大似然法	有
6	特征多项式展开，构造伙伴矩阵、实对称矩阵、Hermite 矩阵，虚实转换定理	—
7	谱分解，SVD(奇异值)分解，Jordan 标准形(伪特征向量矩阵 P)，Schur 分解(干净的上三角矩阵 Я)，实对称矩阵的复特征向量，Hermite 二次型	—
8	结构力学(柔度矩阵)和量子力学(厄米矩阵)本征值问题，酉密码	—
9	QR 酉分解 C++类，化复矩阵为复上 Hessenberg 矩阵，求复矩阵的秩、行列式	有

1.5　符 号 约 定

矩阵和行列式是最容易混淆的两个概念，它们均有严格的数学定义和表示方法[29]，这里从略。简单地说，前者就是二维数据，而后者实际就是一个数，但矩阵和行列式还是有很多联系的。对于复(实)矩阵和复(实)行列式，本书主要用“[]”来表示矩阵(向量也用“[]”来表示)，用“| |”来表示行列式。例如，2 阶矩阵 A 及其行列式的表示方法：

(1) 矩阵的表示方法

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}_{2\times 2}$$

(2) 矩阵的行列式的表示方法

$$\det(A)=\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}=a_{11}\,a_{22}-a_{12}\,a_{21}$$

与行列式的表示方法容易混淆的还有变量的绝对值、向量的范数和复数的模。这里，绝对值用“| |”来表示，例如：$|a|=|-3.0|=3.0$；向量的范数用“‖ ‖”来表示，例如向量 $e=[1.0,1.0,0.0]'$ 的范数为：

$$\| e \| = \sqrt{1.0^2+1.0^2+0.0^2}=\sqrt{2}$$

而复数的模用“| |”表示，例如复数 $1.0+2.0i$ 的模：

$$|1.0+2.0i|=\sqrt{1.0^2+2.0^2}=\sqrt{5.0}$$

第 2 章　复矩阵 QR 酉分解

若实(复)非奇异矩阵 A 能够化成正交(酉)矩阵 Q 和实(复)非奇异上三角矩阵 R 的乘积(即 $A = QR$),则称这个变换为 A 的 QR 分解[15](QR factorization,或 QR decomposition)。目前,大多数文献中的 QR 分解理论及计算方法是针对实矩阵的,而对于复矩阵尚没有具体的、实用的计算方法[32,33],编写计算机程序所需要的复矩阵 QR 酉分解算例几乎没有。

矩阵的 QR 分解,是在 20 世纪 60 年代前后根据 Givens 变换和 Householder 变换发展起来的一种正交三角分解[15],它在自然科学、社会科学和中工程技术都有广泛的应用[9]。英国的 J. G. F. Francis 和苏联的 Vera Kublanovskaya 分别、几乎同时提出了计算矩阵特征值的 QR 算法[36-40],它被评为 20 世纪科学和工程上有最大贡献与影响的十大算法之一[7]。J. G. F. Francis 提出的求解矩阵特征值的双实步 QR 算法,是为了在求解实矩阵的一对共轭复数特征值过程中避免复数计算[2,8],这或许是因为 Francis 无法使用汇编语言来编写复杂的和繁琐的复数运算程序的缘故。

由于 J. G. F. Francis 在实矩阵 QR 分解算法上的巨大成功,所以"一般不用施密特正交化方法作 QR 分解[14]",更谈不上复矩阵的 Schmidt 正交化 QR 酉分解。

本章介绍了复矩阵 Schmidt 正交化 QR 酉分解的数学原理、计算方法和具体算例,并提供了相应的 C++语言源程序。通过本章的阅读,读者可以发现:在复矩阵 QR 酉分解的计算中,不仅直接进行复数计算是可行的,而且求得的酉矩阵和复上三角矩阵还是"精确解";实矩阵不仅可以 QR 分解成实正交矩阵 Q 和实上三角矩阵 R 的乘积,通过 QR 酉分解的特殊算法,实矩阵还可以分解成复酉矩阵 U 和复上三角矩阵 T 的乘积。

2.1　引　　言

为叙述方便和程序设计的需要,相对于实矩阵的 QR 分解,将复非奇异矩阵 A 存在的 QR 酉分解式记为

$$A = UT \tag{2.1}$$

式中 U 为酉矩阵，其定义见第 1 章；T 为复上三角矩阵；A 可以是 n 阶方阵，也可以是 $m\times n(m\neq n)$ 矩阵。本书提供的程序所处理的矩阵(如 A)均是 n 阶方阵，修改程序后，就可以处理 $m\times n(m\neq n)$ 矩阵。

从后面的分析可以看出，酉矩阵 U 与正交实矩阵 Q 有很大不同，对于 n 阶实非奇异矩阵 A 的 Q 满足

$$Q'Q = QQ' = I, Q' = Q^{-1} \tag{2.2}$$

而对于 n 阶复非奇异矩阵 A 的 U 满足：

$$U^H U = U U^H = I, U^H = U^{-1} \tag{2.3}$$

式(2.2)和式(2.3)中，I 均为 n 阶单位矩阵

$$I = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix}_{n\times n} \tag{2.4}$$

式(2.3)中，U^H 可以通过"先共轭后转置"获得

$$U^H = (\overline{U})' \tag{2.5}$$

也可以通过"先转置后共轭"获得

$$U^H = \overline{U'} \tag{2.6}$$

2.1.1 正交矩阵 Q 和实非奇异上三角矩阵 R 的构造

可以证明：利用正交变换将实矩阵 A 化成上三角化的过程实际上存在着 A 的一个 QR 分解[14]。对于实非奇异矩阵 A，目前构造 QR 分解主要有四种方法：

(1) 初等相似变换的方法[30]；

(2) Givens(初等旋转矩阵)正交变换[31]；

(3) Householder(初等反射矩阵)正交变换[14,15]；

(4) Gram-Schmidt 正交化 QR 分解方法[9,14]。

根据文献[33]："目前的大多数文献中也只对实矩阵利用 Givens 矩阵变换、Householder 矩阵变换、Doolittle 分解得到 QR 分解公式"，"而对复矩阵的 Givens 矩阵变换及其 QR 分解，尚没有具体方法"。简单地讲，实矩阵有成熟的三角分解

算法，复矩阵尚无好的三角分解算法，编写计算机程序所需要的复矩阵 QR 酉分解算例几乎没有，文献[33]也没有给出具体算例和相应计算机程序。

1959—1961 年，英国的 J. G. F. Francis（生于 1934 年，见图 2.1[8]）和苏联的 Vera Kublanovskaya（生于 1920 年，见图 2.2[8]）分别、几乎同时提出了计算矩阵特征值的 QR 算法[36-40]，它被评为 20 世纪科学和工程上有最大贡献与影响的十大算法之一[7]。J. G. F. Francis 提出的求解矩阵特征值的双实步 QR 算法，是为了在求解实矩阵的共轭复数特征值过程中避免复数计算[2,8]，这或许是因为 Francis 无法使用汇编语言（Francis 的 QR 算法是在"Pegasus Computer"计算机上实现的）来编写复杂的和繁琐的复数运算程序的缘故[37,38]。

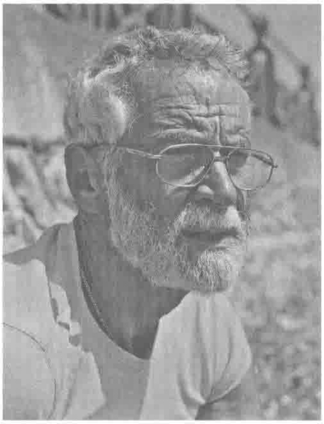

图 2.1　John Francis in July 2008

图 2.2　Vera Kublanovskaya in August 2008

由于 J. G. F. Francis 在实矩阵 QR 分解算法上的巨大成功，"一般不用施密特正交化方法作 QR 分解[14]"（以往文献还认为 Schmidt 正交化 QR 分解方法没有其它算法稳定），更谈不上复矩阵的 Schmidt 正交化 QR 酉分解。对于实矩阵，采用 Gram-Schmidt 正交化 QR 分解方法的介绍（包括理论、算法、算例和程序）见文献[9,35]。

2.1.2　酉矩阵 U 和复上三角矩阵 T 的构造

平行于实矩阵的 QR 分解理论，复矩阵的 QR 酉分解也有两个重要的结论：

(1) 设 A 是 n 阶复非奇异矩阵，则存在酉矩阵 U 和复非奇异上三角矩阵 T 使 A 有 QR 酉分解式(2.1)；且除去相差一个对角元素的绝对值（模）全等于 1 的对角矩阵因子外，分解是唯一的。

(2) 设 A 是 $m\times n$ 复矩阵，且其 n 个列线性无关，则 A 有分解 $A=UT$，其中 U