普通高等教育“十一五”国家级规划教材

工程数学
计算方法

（第二版）

吉林大学数学学院
术洪亮　张静

高等教育出版社

普通高等教育“十一五”国家级规划教材

工程数学
计算方法
（第二版）

吉林大学数学学院
术洪亮　张静

Gongcheng Shuxue
Jisuan fangfa

高等教育出版社·北京

内容提要

本书依据“数值计算方法”课程的教学基本要求，结合工程技术领域中常用的计算方法，系统地介绍了求解线性代数方程组的直接法和迭代法、非线性方程与方程组的求根、函数的插值与最佳平方逼近、数值积分、常微分方程初值问题的数值解、求矩阵特征值和特征向量的迭代法等。全书注重基础知识与基本方法的科学性、严谨性和实用性。各章配备一定数量的实例和习题，书末附有部分习题参考答案。

本书可作为非数学类专业理工科高年级本科生和硕士研究生“计算方法”课程的教材，也可供工程技术人员学习和参考。

图书在版编目（CIP）数据

工程数学. 计算方法 / 术洪亮，张静编. -- 2 版
. -- 北京：高等教育出版社，2016.1
ISBN 978-7-04-044552-7

Ⅰ. ①工… Ⅱ. ①术… ②张… Ⅲ. ①工程数学-高等学校-教材②计算方法-高等学校-教材 Ⅳ. ①TB11 ②O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2015）第 311897 号

策划编辑 兰莹莹　　责任编辑 高 丛　　封面设计 赵 阳　　版式设计 杜微言
插图绘制 杜晓丹　　责任校对 刘娟娟　　责任印制 刘思涵

出版发行	高等教育出版社	网　　址	http://www.hep.edu.cn
社　　址	北京市西城区德外大街 4 号		http://www.hep.com.cn
邮政编码	100120	网上订购	http://www.hepmall.com.cn
印　　刷	北京丰源印刷厂		http://www.hepmall.com
开　　本	787mm×960mm　1/16		http://www.hepmall.cn
印　　张	12.25	版　　次	2005 年 11 月第 1 版
字　　数	220 千字		2016 年 1 月第 2 版
购书热线	010-58581118	印　　次	2016 年 1 月第 1 次印刷
咨询电话	400-810-0598	定　　价	19.70 元

物 料 号　44552-00

第二版前言

在科学研究和工程技术领域中，我们经常会遇到许多数学模型的求解问题，但由于实际问题的复杂性，常常得不到模型的精确解。随着科学计算方法和计算机技术的发展及广泛应用，数值计算方法已成为各领域中解决这类问题的一个重要的手段。数值计算方法就是将所研究的数学模型进行离散化，给出一种结构简单、便于编程、又具有很好稳定性和收敛性的一种算法，通过此算法编写程序，由计算机进行计算，最后得到满足精度要求的近似解的方法。

本书是普通高等教育"十一五"国家级规划教材，第一版自 2005 年出版至今已十年有余，根据计算方法课程近几年教学改革的实际情况，有必要进行修订和完善。本次修订不仅在内容结构与体系上进行了重新规划和调整，且增加和改编了各章节的部分例题与习题。第一、二、三、四、六、八章由术洪亮修订，第五、七章由张静修订。

本次修订得到了吉林大学数学学院和高等教育出版社的大力支持，得到了王新民教授极大的支持和帮助，吴晓俐老师为本次修订付出了辛勤的劳动，在此一并表示衷心的感谢。

由于编者水平所限，书中难免存在不妥之处，欢迎广大读者多提宝贵意见，编者将不胜感谢。

编者

2015 年 4 月于长春

第一版前言

自然科学、军事科学、社会科学以及其他科学的技术发展已经从定性走向了定量化,要想使我们国家的科学技术赶超发达国家的水平,首先要强化数学、发展数学。尤其在21世纪这个信息时代,各种问题以其不同的数学形式出现在各个科学。譬如,利用小波方法可以提供各种信息的压缩技术,利用求极值的共轭梯度法可以建立经济发展的最优计划模型,利用有限元等数值手段可以预测地下的矿藏储量,就连现代医学上使用的CT技术也是以数学上的"拉东变换"为理论依据的。现在数学的应用已经无处不在,它的重要性不言而喻。

本书主要讨论在工程技术等领域中常用的计算方法。这些方法是在计算机技术的基础上发展起来的,因为在许多工程问题中,我们常常要把实际问题归结为数学模型,而由于问题的复杂性,常常得不到模型的准确解,只能将它离散化后求其数值解,这个过程没有计算机是不可想象的。

众所周知,微积分是数学的重要组成部分,所研究的对象是函数。而对于函数来说,一方面除了一些简单的函数外,它的求值、求导和求积分通常都很困难;另一方面,在实际应用中,更多的函数关系是由测量或观测数值给出的。为了对这些函数进行计算,本书介绍了数值逼近方法,即用一类"简单函数"来逼近(或称代替)这些函数,使其能在计算机上容易求函数值、导数值和积分值;本书还利用这一逼近思想讨论了非线性方程的求根问题、矩阵的特征值与特征向量的计算和常微分方程初值问题的求解;特别介绍了在工程中常见的线性代数方程组的数值解法问题。在讨论这些理论和算法构造的同时,本书对算法的稳定性、收敛性以及误差估计等也做出了较详细的分析。所有这些理论和方法都是解决工程问题时必不可少的工具。

本书作为非数学类专业研究生和高年级本科生的"计算方法"课程教材已使用多年,形成了自己的特色:

1. 具有很强的使用性:取材精练,难易适中,应用广泛,可靠性强。
2. 具有一定的可读性:深入浅出,推导翔实,重点明确,阐述严谨。
3. 具有较高的艺术性:语言流畅,结构紧凑,前后呼应,脉络分明。
4. 具有丰富的实践性:内容互动,例题丰富,习题充分,便于编程。

另外，本书还保持了数学知识的系统性、严密性以及连贯性等特点。

本书由王新民、术洪亮主编，其中第一、二、三、四、五、八章由王新民编写，第六章由王新民、术洪亮编写，第七章由术洪亮编写，张静汇编了大量习题，李辉来教授、吴晓俐女士对本书的编写给予了热情的支持和帮助，韩燕、吴丹阳、王军林、孙鹏为本书出版付出了辛勤的劳动，在此一并感谢！

冯果忱先生担任了本书的主审。

限于作者的学识和经验，本书难免存在不妥之处。如蒙赐教，不胜感谢。

编者

2005.08.03

目　录

第一章　解线性代数方程组的直接方法

在线性代数中，我们讨论了求线性代数方程组 $AX=b$ 解析解的方法，但随着系数矩阵阶数的增加，代数中的方法所需计算量会不断地增大，甚至很多情况下很难或无法求得解析解.实际问题中，许多科学计算和工程技术领域讨论的方程组 $AX=b$，往往是大型系数矩阵的方程组.因此，有必要讨论其他的求解方法，这里我们将介绍求线性代数方程组数值解的方法，称为数值计算方法.本章主要讨论求解线性代数方程组的直接方法，简称直接法.所谓直接法就是通过有限次的代数运算得到线性代数方程组精确解的一类数值计算方法.

§1.1　Gauss 消元法

考察的线性代数方程组是 $AX=b$，其中 $A\in\mathbf{R}^{n\times n}$，$b\in\mathbf{R}^{n}$，且 A 可逆.Gauss 消元法是最早使用的一种计算方法，特别是列主元 Gauss 消元法，当前在许多实际问题中有着广泛的应用.从本质上讲，Gauss 消元法给出了直接法的基本方法，通过此方法及矩阵表示，我们可以进一步总结出其他的直接法.

1.1.1　Gauss 消元法

首先考察上三角形方程组

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1+a_{12}^{(1)}x_2+\cdots+a_{1n}^{(1)}x_n=b_1^{(1)}, \\ \qquad\qquad a_{22}^{(2)}x_2+\cdots+a_{2n}^{(2)}x_n=b_2^{(2)}, \\ \qquad\qquad\qquad \cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad a_{nn}^{(n)}x_n=b_n^{(n)}. \end{cases} \tag{1.1.1}$$

若(1.1.1)中 $a_{kk}^{(k)}\neq 0(k=1,2,\cdots,n)$，则从方程组的最后一个方程出发，由公式

$$\begin{cases} x_n = \dfrac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}}, \\ x_k = \dfrac{b_k^{(k)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j}{a_{kk}^{(k)}}, \quad k = n-1, n-2, \cdots, 2, 1 \end{cases} \tag{1.1.2}$$

依次可以求出方程组(1.1.1)的解 $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_2, x_1$,称(1.1.2)为回代公式.

其次考察求解一般的 n 阶线性代数方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n. \end{cases} \tag{1.1.3}$$

用矩阵和向量的记号表示,则有

$$\boldsymbol{AX} = \boldsymbol{b}, \tag{1.1.4}$$

其中 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})_{n\times n}$ 为可逆矩阵,$\boldsymbol{X} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}}$,$\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \cdots, b_n)^{\mathrm{T}}$.

若能把方程组(1.1.3)转化为(1.1.1)的形式,那么方程组的求解将会变得很容易,这个过程在线性代数中我们讨论过,可以通过消元过程来完成,这里称为 Gauss 消元法,其实质是对增广矩阵$(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b})$作一系列初等行变换,最后把 $\boldsymbol{A}$ 化为上三角形矩阵 $\boldsymbol{A}^{(n)}$,得$(\boldsymbol{A}^{(n)}, \boldsymbol{b}^{(n)})$,因为对$(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b})$每作一次初等行变换,相当于对方程组(1.1.3)进行一次同解变换,所以与$(\boldsymbol{A}^{(n)}, \boldsymbol{b}^{(n)})$相对应的上三角形方程组(1.1.1)是(1.1.3)的同解方程组.

设方程组(1.1.3)的增广矩阵为$(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}) = (\boldsymbol{A}^{(1)}, \boldsymbol{b}^{(1)})$,不妨设 $a_{11} \neq 0$,并令 $m_{i1} = \dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}(i = 2, 3, \cdots, n)$,第一步消元是用 $-m_{i1}$ 乘第一行然后加到第 $i(i = 2, 3, \cdots, n)$ 行上去,从而把第一列对角元以下的元素全化为 0,得

$$(\boldsymbol{A}^{(2)}, \boldsymbol{b}^{(2)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix}. \tag{1.1.5}$$

第二步,假设 $a_{22}^{(2)} \neq 0$,令 $m_{i2} = \dfrac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$ $(i = 3, 4, \cdots, n)$,于是用上述方法又可把(1.1.5)化为

$$(\boldsymbol{A}^{(3)},\boldsymbol{b}^{(3)})=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} & b_n^{(3)} \end{pmatrix}. \tag{1.1.6}$$

假设我们进行了前 $k-1$ 步消元，下面讨论第 k 步消元，不妨设 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$，用 $-m_{ik}=-\dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$ $(i=k+1,k+2,\cdots,n)$ 乘第 k 行后加到第 $i(i=k+1,k+2,\cdots,n)$ 行上去，从而把第 k 列对角元以下的元素全化为 0，得

$$(\boldsymbol{A}^{(k+1)},\boldsymbol{b}^{(k+1)})=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3k}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ & & & & \vdots & & \vdots \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & a_{k+1,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k+1)} \\ & & & & \vdots & & \vdots \\ & & & & a_{n,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{nn}^{(k+1)} \end{pmatrix}, \tag{1.1.7}$$

其中 $\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-m_{ik}a_{kj}^{(k)},\ i,j=k+1,k+2,\cdots,n, \\ b_i^{(k+1)}=b_i^{(k)}-m_{ik}b_k^{(k)},\ i=k+1,k+2,\cdots,n. \end{cases}$

如此继续，通过消元公式

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-m_{ik}a_{kj}^{(k)},\ i,j=k+1,k+2,\cdots,n, \\ b_i^{(k+1)}=b_i^{(k)}-m_{ik}b_k^{(k)},\ i=k+1,k+2,\cdots,n, \end{cases} \quad k=1,2,\cdots,n, \tag{1.1.8}$$

共作 $n-1$ 步即可把方程组(1.1.3)化为形如(1.1.1)的上三角形方程组

$$\boldsymbol{A}^{(n)}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{b}^{(n)}, \tag{1.1.9}$$

其中 $\boldsymbol{A}^{(n)}$ 和 $\boldsymbol{b}^{(n)}$ 分别为方程组(1.1.1)的系数矩阵和右端向量.这样就完成了消元过程，最后利用回代公式(1.1.2)可求得方程组的解.

由以上分析可以看出，Gauss 消元法通过两个过程来完成方程组的求解，一个是消元过程，一个是回代过程，计算量是第 k 步共含除法运算 $n-k$ 次，乘法运算 $(n-k)(n-k+1)$ 次，所以消元过程共含乘除法次数为

$$\sum_{k=1}^{n}(n-k)+\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+1)=\frac{n^3}{3}+\frac{n^2}{2}-\frac{5n}{6},$$

而回代过程的乘除法运算次数为

$$\sum_{k=1}^{n}(n-k+1)=\frac{n^2}{2}+\frac{n}{2},$$

所以 Gauss 消元法总的乘除法次数为

$$\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3}\approx\frac{n^3}{3}.$$

如果我们用 Cramer 法则计算(1.1.3)的解,要计算 $n+1$ 个 n 阶行列式并作 n 次除法.而计算每个行列式,若用子式展开的方法,则有 $n!$ 次乘法,所以用 Cramer 法则大约需要 $(n+1)!$ 次乘除法运算.例如,当 $n=10$ 时约需 4×10^7 次运算,而用 Gauss 消元法只需 430 次乘除法.

例 1.1.1　利用 Gauss 消元法求解方程组 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{b}$,其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1&2&1&-2\\2&5&3&-2\\-2&-2&3&5\\1&2&2&4\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}4\\7\\-1\\0\end{pmatrix}.$$

解　(1) 消元过程用矩阵表示为

$$(\boldsymbol{A}^{(1)},\boldsymbol{b}^{(1)})=\begin{pmatrix}1&2&1&-2&4\\2&5&3&-2&7\\-2&-2&3&5&-1\\1&2&2&4&0\end{pmatrix}\xrightarrow[\substack{r_2-2r_1\\r_3+2r_1\\r_4-r_1}]{\text{第一步}}\begin{pmatrix}1&2&1&-2&4\\0&1&1&2&-1\\0&2&5&1&7\\0&0&1&6&-4\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow[r_3-2r_2]{\text{第二步}}\begin{pmatrix}1&2&1&-2&4\\0&1&1&2&-1\\0&0&3&-3&9\\0&0&1&6&-4\end{pmatrix}\xrightarrow[r_4-\frac{1}{3}r_3]{\text{第三步}}\begin{pmatrix}1&2&1&-2&4\\0&1&1&2&-1\\0&0&3&-3&9\\0&0&0&7&-7\end{pmatrix}.$$

经三步消元后,原方程组化为同解的上三角形方程组 $\boldsymbol{A}^{(3)}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{b}^{(3)}$,

(2) 回代过程.由回代公式($n=4$)

$$\begin{cases}x_n=\dfrac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}},\\[2ex] x_k=\dfrac{b_k^{(k)}-\sum\limits_{j=k+1}^{n}a_{kj}^{(k)}x_j}{a_{kk}^{(k)}},\quad k=n-1,n-2,\cdots,2,1\end{cases}$$

可求得原方程组的解为 $x_4=-1,x_3=2,x_2=-1,x_1=2$.

上面在 $a_{kk}^{(k)}\neq0\ (k=1,2,\cdots,n)$ 的情况下,我们讨论了 Gauss 消元法,但在实际问题中我们还应注意舍入误差的积累对解的影响.

例 1.1.2 用 Gauss 消元法求解方程组

$$\begin{cases}0.000\ 3x_1+3.000\ 0x_2=2.000\ 1, & (1)\\ 1.000\ 0x_1+1.000\ 0x_2=1.000\ 0. & (2)\end{cases}$$

计算中取 5 位有效数字.

解 方程(1)×(−1)/0.000 3+方程(2)得

$$\begin{cases}0.000\ 3x_1+3.000\ 0x_2=2.000\ 1,\\ \qquad\qquad 9\ 999.0x_2=6\ 666.0.\end{cases}$$

所以 $x_2=0.666\ 7$,代入方程(1)得 $x_1=0$,而其精确解为 $x_1=\dfrac{1}{3}, x_2=\dfrac{2}{3}$,由此得到的解完全失真.如果交换两个方程的顺序,得到等价方程组

$$\begin{cases}1.000\ 0x_1+1.000\ 0x_2=1.000\ 0,\\ 0.000\ 3x_1+3.000\ 0x_2=2.000\ 1.\end{cases}$$

经 Gauss 消元后有

$$\begin{cases}1.000\ 0x_1+1.000\ 0x_2=1.000\ 0,\\ \qquad\qquad 2.999\ 7x_2=1.999\ 8.\end{cases}$$

得到的解为 $x_2=0.666\ 7, x_1=0.333\ 3$.

由此可以看到,在有些情况下,调换方程组的次序对方程组的解是有影响的,从而在消元法中抑制舍入误差的增长是十分重要的.

1.1.2 主元消元法

在 Gauss 消元法中,假设 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$,我们称 $a_{kk}^{(k)}(k=1,2,\cdots,n)$为消元过程中的主元素,或简称为主元.消元过程中的每一步都要选取主元.前面仅要求主元非零,但从数值计算的角度看,主元在计算过程中要作为除数,其绝对值愈大,引起的舍入误差愈小,因此,在消元法中,我们应该选择绝对值大的元素作为主元,由此产生的方法叫**选主元消元法**.

1. 列选主元消元法就是在第 k 步消元时,在 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的第 k 列元素 $a_{ik}^{(k)}(i\geqslant k)$中选取绝对值最大者作为主元,并将其对换到第 k 行第 k 列位置上,简称为(k,k)元,然后再进行消元计算.

例 1.1.3 用列主元消元法求解方程组 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{b}$,其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}-3 & 2 & 6\\ 10 & -7 & 0\\ 5 & -1 & 5\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix}4\\7\\6\end{pmatrix}.$$

解 消元过程用矩阵表示为

$$(\boldsymbol{A}^{(1)},\boldsymbol{b}^{(1)})=\begin{pmatrix}-3 & 2 & 6 & 4\\ 10 & -7 & 0 & 7\\ 5 & -1 & 5 & 6\end{pmatrix}\xrightarrow[r_1\leftrightarrow r_2]{\text{选主元}}\begin{pmatrix}10 & -7 & 0 & 7\\ -3 & 2 & 6 & 4\\ 5 & -1 & 5 & 6\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow[\substack{r_2+\frac{3}{10}r_1\\ r_3-\frac{1}{2}r_1}]{\text{第一步消元}}\begin{pmatrix}10 & -7 & 0 & 7\\ 0 & -\dfrac{1}{10} & 6 & \dfrac{61}{10}\\ 0 & \dfrac{5}{2} & 5 & \dfrac{5}{2}\end{pmatrix}\xrightarrow[r_2\leftrightarrow r_3]{\text{选主元}}\begin{pmatrix}10 & -7 & 0 & 7\\ 0 & \dfrac{5}{2} & 5 & \dfrac{5}{2}\\ 0 & -\dfrac{1}{10} & 6 & \dfrac{61}{10}\end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow[r_3+\frac{1}{25}r_2]{\text{第二步消元}}\begin{pmatrix}10 & -7 & 0 & 7\\ 0 & \dfrac{5}{2} & 5 & \dfrac{5}{2}\\ 0 & 0 & \dfrac{31}{5} & \dfrac{31}{5}\end{pmatrix}.$$

回代求解得 $x_3=1,x_2=-1,x_1=0$.

2. 全主元消元法就是在第 k 步消元时,从 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 的右下方 $n-k+1$ 阶矩阵的所有元素 $a_{ij}^{(k)}(i,j\geqslant k)$ 中,选取绝对值最大者作为主元,并将其对换到 (k,k) 元位置上,再作消元计算.但此时进行了列交换,要记住交换后的列元素是哪个对应变量的系数.

由于选取绝对值最大者作为主元,因此在主元消元法中初始误差得到了控制,不再扩大,保证了算法的稳定性.

在一般情况下,列主元消元法所求得的解可以达到精度的要求,而计算过程要比选全主元简单,又节省时间,因此列主元消元法在实际问题中更被广泛地应用.特别地,当系数矩阵为对角占优的对称矩阵时,所有的 $a_{kk}^{(k)}(k=1,2,\cdots,n)$ 都是列主元素.

事实上,因系数矩阵为对角占优的对称矩阵,于是有

$$|a_{11}^{(1)}|\geqslant\sum_{i=2}^{n}|a_{i1}^{(1)}|\geqslant\max_{2\leqslant i\leqslant n}|a_{i1}^{(1)}|,$$

故 $a_{11}^{(1)}$ 是主元素,又因为

$$a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-\frac{a_{i1}^{(1)}a_{1j}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}=a_{ji}^{(1)}-\frac{a_{1i}^{(1)}a_{j1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}=a_{ji}^{(2)},\quad i,j=2,3,\cdots,n,$$

所以第一步消元后得到的系数矩阵也是对称的,而

$$\sum_{\substack{j=2\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}^{(2)}|\leqslant\sum_{\substack{j=2\\ j\neq i}}^{n}|a_{ij}^{(1)}|+\frac{|a_{i1}^{(1)}|}{|a_{11}^{(1)}|}\sum_{\substack{j=2\\ j\neq i}}^{n}|a_{1j}^{(1)}|$$

$$= \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}^{(1)}| - |a_{i1}^{(1)}| + \frac{|a_{i1}^{(1)}|}{|a_{11}^{(1)}|} \left(\sum_{j=2}^{n} |a_{1j}^{(1)}| - |a_{1i}^{(1)}| \right),$$

利用对角占优性有

$$\sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}^{(2)}| \leqslant |a_{ii}^{(1)}| - |a_{i1}^{(1)}| + \frac{|a_{i1}^{(1)}|}{|a_{11}^{(1)}|} (|a_{11}^{(1)}| - |a_{1i}^{(1)}|)$$

$$= |a_{ii}^{(1)}| - \frac{|a_{i1}^{(1)}|\,|a_{1i}^{(1)}|}{|a_{11}^{(1)}|} \leqslant \left| a_{ii}^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)} a_{1i}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \right| \leqslant |a_{ii}^{(2)}|, \quad i = 2,3,\cdots,n.$$

这说明第一步消元后得到的系数矩阵也是对角占优的对称矩阵,因此 $a_{22}^{(2)}$ 也是主元素,依此类推,我们可以断定所有的 $a_{kk}^{(k)}(k=1,2,\cdots,n)$ 都是主元素.

1.1.3 Gauss 消元法的矩阵形式

Gauss 消元法的消元过程就是将方程组(1.1.3)的系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 化为上三角形矩阵的过程.由于对增广矩阵施行一次初等行变换,相当于用一个对应的初等矩阵去左乘增广矩阵$(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$的结果.从而 Gauss 消元过程可以通过矩阵的乘法来完成.

第一步,相当于用可逆矩阵

$$\boldsymbol{M}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -m_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -m_{31} & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ -m_{n1} & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

左乘增广矩阵得到$(\boldsymbol{A}^{(2)},\boldsymbol{b}^{(2)})$,即

$$\boldsymbol{M}^{(1)}(\boldsymbol{A}^{(1)},\boldsymbol{b}^{(1)}) = (\boldsymbol{A}^{(2)},\boldsymbol{b}^{(2)}).$$

第二步,相当于用可逆矩阵

$$\boldsymbol{M}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ 0 & 1 & & & \\ 0 & -m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ 0 & -m_{n2} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

左乘矩阵$(\boldsymbol{A}^{(2)},\boldsymbol{b}^{(2)})$,即

$$\boldsymbol{M}^{(2)}(\boldsymbol{A}^{(2)},\boldsymbol{b}^{(2)}) = (\boldsymbol{A}^{(3)},\boldsymbol{b}^{(3)}).$$

类似地,第 k 步相当于用可逆矩阵

$$M^{(k)}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & -m_{k+1,k} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -m_{nk} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

左乘矩阵$(\boldsymbol{A}^{(k)},\boldsymbol{b}^{(k)})$,依此下去,通过 $n-1$ 个可逆矩阵 $\boldsymbol{M}^{(k)}(k=1,2,\cdots,n-1)$ 便得

$$\boldsymbol{M}^{(n-1)}\boldsymbol{M}^{(n-2)}\cdots\boldsymbol{M}^{(2)}\boldsymbol{M}^{(1)}(\boldsymbol{A}^{(1)},\boldsymbol{b}^{(1)})=(\boldsymbol{A}^{(n)},\boldsymbol{b}^{(n)}). \tag{1.1.10}$$

若令

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{M}^{(n-1)}\boldsymbol{M}^{(n-2)}\cdots\boldsymbol{M}^{(2)}\boldsymbol{M}^{(1)},$$
$$\boldsymbol{U}=\boldsymbol{A}^{(n)},\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{b}^{(n)},$$

则 (1.1.10) 式可写为

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})=(\boldsymbol{U},\boldsymbol{Y}).$$

由分块矩阵的乘法得

$$\boldsymbol{MA}=\boldsymbol{U},\ \boldsymbol{Mb}=\boldsymbol{Y}. \tag{1.1.11}$$

因 $\boldsymbol{M}^{(k)}(k=1,2,\cdots,n-1)$为可逆矩阵,设

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{M}^{-1}=(\boldsymbol{M}^{(1)})^{-1}(\boldsymbol{M}^{(2)})^{-1}\cdots(\boldsymbol{M}^{(n-1)})^{-1},$$

则由(1.1.11)式,有

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU},\quad \boldsymbol{LY}=\boldsymbol{b}, \tag{1.1.12}$$

其中

$$\boldsymbol{L}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ m_{n-1,1} & m_{n-1,2} & m_{n-1,3} & \cdots & 1 & 0 \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}.$$

这样矩阵 $\boldsymbol{A}$ 就可分解为一个单位下三角形矩阵 $\boldsymbol{L}$ 与一个上三角形矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的乘积,同时由方程组(1.1.12)解出 $\boldsymbol{Y}$,而回代过程则是解方程组 $\boldsymbol{UX}=\boldsymbol{Y}$.

§1.2 矩阵的三角分解法

在 Gauss 消元法矩阵形式中,给出了矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分解为一个单位下三角形矩阵

$\boldsymbol{L}$ 与一个上三角形矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的乘积,这种分解称为矩阵的三角形分解,简称 LU 分解.并且有如下定理.

定理 1.2.1 设 $\boldsymbol{A}$ 为 n 阶可逆矩阵,如果 $\boldsymbol{A}$ 的顺序主子式 $D_k \neq 0(k=1,2,\cdots,n)$,则 $\boldsymbol{A}$ 可分解为一个单位下三角形矩阵 $\boldsymbol{L}$ 与一个上三角形矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的乘积,且这种分解是唯一的.

证明 由 Gauss 消元法的矩阵形式,$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$ 的存在性已经得到证明,下面证明分解的唯一性.设 $\boldsymbol{A}$ 有两个分解式

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{U}_2.$$

因为 $\boldsymbol{A}$ 可逆,所以 $\boldsymbol{L}_1,\boldsymbol{L}_2,\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2$ 都可逆,上式左乘 $\boldsymbol{L}_1^{-1}$,右乘 $\boldsymbol{U}_2^{-1}$ 得

$$\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2^{-1}=\boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2.$$

因为 $\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2$ 为上三角形矩阵,从而 $\boldsymbol{U}_2^{-1},\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2^{-1}$ 仍为上三角形矩阵,同理 $\boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2$ 为单位下三角形矩阵,因此只有

$$\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2^{-1}=\boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2=\boldsymbol{I}(\boldsymbol{I}\text{ 是单位矩阵}).$$

故有 $\boldsymbol{U}_1=\boldsymbol{U}_2,\boldsymbol{L}_1=\boldsymbol{L}_2$.

上面讨论了矩阵三角形分解的存在性和唯一性,那么如何来确定 $\boldsymbol{L},\boldsymbol{U}$ 当中的元素呢? 下面给出具体的方法.

1.2.1 Doolittle 分解法

设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 存在 LU 分解,即有

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}, \tag{1.2.1}$$

这种形式的分解称作 Doolittle 分解.

利用矩阵的乘法和相等的关系,比较上式两端的第一行,有

$$u_{1j}=a_{1j},\quad j=1,2,\cdots,n.$$

比较两端的第一列,有

$$l_{i1}=\frac{a_{i1}}{u_{11}},\quad i=2,3,\cdots,n.$$

再比较两端第二行元素得

$$u_{2j}=a_{2j}-l_{21}u_{1j},\quad j=2,3,\cdots,n.$$

比较两端第二列元素得

$$l_{i2}=\frac{a_{i2}-l_{i1}u_{12}}{u_{22}},\quad i=3,\cdots,n.$$