数值分析及其应用

沈连山 编著

东北大学出版社
1996 年

图书在版编目(CIP)数据

数值分析及其应用/沈连山　编著。—沈阳・东北大学出版社，1996
ISBN 7-81054-100-5
Ⅰ.数…　Ⅱ.沈…　Ⅲ.数学应用　Ⅳ.O17

(沈阳・南湖 110006)

阜新蒙古族自治县民族印刷厂印刷	东北大学出版社发行
1996年8月第1版	1996年8月第1次印刷
开本：787×1092毫米 1/16	印张：13.00
字数：3[illegible]千字	印数 1～4000

ISBN 7-81054-100-5/O・3

定价：14.80元

内 容 提 要

本书阐述数值计算中常用方法的基本理论、算法的实现以及应用。全书共分九章，并配有足够数量的习题及答案，以方便学习。

本书取材新颖、利于应用。针对不同层次读者的需要，分层次论述，而内容由浅入深，体系完整。

本书可作为工科大学本科高年级学生和研究生的教材，并可供有关科研和工程技术人员参考。

前　言

随着科学技术的发展以及计算机的普及，许多来自工程或科学中的问题，借助于计算机得到了解答。一些被人们认为个性极强的非线性问题，曾被人们视为无从逾越的难题，利用新的特殊算法，通过计算机可以得到解决。可以说计算机推动了非线性科学乃至科学技术的全面发展，计算技术在其发展中起到了关键作用。现在计算技术已经成为科技人员所必须掌握的基础知识。它为人们认识复杂的自然现象、解算大型工程实际问题提供了手段和工具。科技工作者已经取得共识：研究和解决现代科技问题离不开电子计算机；掌握和使用计算技术是科技工作者必须具备的能力。

培养未来的科学技术人员掌握计算技术，并具备一定的科研和工程计算能力，是学习数值分析及其应用的目的之所在。

严谨的数值分析原理以及数值实践的分析与比较，是培养上述之能力的两个重要方面。严谨的分析有利于打好基础；数值实践结果的分析与比较，可以帮助我们吸取前人的经验，提高解决实际问题的能力。

传统的数值分析书籍，一般理论上都较严谨，但缺少数值实践的分析与比较，更缺乏工程应用中算法选择的分析与指导原则。

本书在重视基本概念、原理和算法的实现基础上，对于工程技术人员感兴趣的诸如：如何选择算法问题、理论结合实际中的问题以及如何改进算法等问题进行了剖析，以使读者获取有用的信息。

考虑到不同层次读者的需要，对适合本科生学习的内容，适当减弱了理论分析，注重掌握方法的原理并指导应用；对于适合研究生和工程技术人员阅读的章节，书中加了“*”号并加强了这部分内容的理论分析和应用问题的剖析，以利于引导进一步的科研和应用。

作者将自己多年来为研究生讲授数值分析课程的讲稿、讲义整理修改，并参考了大量有关资料，结合自己的研究和应用体会，编著成此书。作者主观上尽力想使读者能通过阅读此书，获得数值计算的基本技能和基础知识，同时，若能对读者的科研和应用有所帮助，作者将感到欣慰。

辽宁大学数学系吕方教授和董学军副研究员审阅了全部书稿，并提出了中肯的宝贵意见。谨此表示深深的感谢。

由于作者的学识和水平有限，书中缺点甚或错误在所难免，敬请读者指正。

编著者

1995 年 12 月

0 引　论

01　数值分析的任务

工程的基础是科学，科学必须以应用数学为其重要手段。而应用数学的有力工具之一就是计算机。计算机的发展和普及又促使工程中许多传统的领域经历了巨大的变革。

计算机的发展大大加速了各门科学的数学化；计算机的普及使科技工作者从繁杂的计算中解放出来；计算机的应用使得工程和实验的自动化、最优化乃至智能化成为可能；数学与计算机的结合将使得更多的自然与社会运动的规律得到进一步的认识，诠解现象并能解决复杂的实际问题。

数值分析是数学与计算机结合的产物。它是伴随着电子计算机广泛应用而茁壮成长的一门新兴的学科。它的根本任务是**研究计算机上使用的数学方法，即将描述实际问题的数学模型经过数学方法的推演，导出适合计算机计算的数值方法、并分析方法的可靠性**。当然，如何选择一种数值方法解算具体的工程问题，这是数值分析的应用方面。

本书介绍的是常用算法的原理及其应用。

由于应用数学的特点是用数学工具研究其它学科，它强调的是边缘研究，进行纸上试验（数值分析）。因此，对复杂的工程实际或科学问题，建立相应的数学模型，用计算机进行数值模拟、数学仿真，已经成为应用数学工作者和其它科技人员的共同任务。从这个意义上说，掌握数值分析工具是每个技术人员的必备技能。

02　数值分析中的误差

用应用数学方法研究工程或科学问题，一般只能得到问题的近似解。造成所求结果与实际问题差异的原因主要有四个方面。

(1) 模型误差：我们对实际问题或现象的研究，是通过抓住主要因素而忽略次要因素的方式，建立起问题的数学模型。否则就无法研究复杂的问题。这样的模型显然与实际问题有差异，我们称这个差异为模型误差。

(2) 观测误差：建立数学模型时，所使用的数据一般都是通过试验、量测等方式得到的，这种数据必然带有一定的误差，称这个误差为观测误差。

(3) 截断误差：由于计算机本身的特性，要求算法必须在有限步内完成，这就要求把数学模型用数值分析方法导出一个计算公式来近似，由此而产生的误差称为截断误差或称为方法误差。例如，由 Taylor 公式求 e^x 的近似值，由于 $e^x=1+x+\frac{x^2}{2}+\cdots+\frac{x^n}{n!}+\frac{e^{\theta x}}{(n+1)!}x^{n+1}$ 取 n 项

近似则有

$$e^x \approx 1+x+\frac{x^2}{2}+\cdots+\frac{x^n}{n!}$$

截断误差为$\frac{e^{\theta x}}{(n+1)!}x^{n+1}$

(4)舍入误差：由于计算机字长有限，参加运算的数据只能截取有限位，由此而产生的误差称为舍入误差。

在数值分析中，我们主要关心截断误差和舍入误差。

我们来叙述近似值的绝对误差、相对误差和有效数字概念。

定义 1 若 x^* 是 x 的近似数，称 $E(x)=x-x^*$ 为近似数的绝对误差。如果 $|E(x)|\leqslant\varepsilon$，称 ε 为近似数 x^* 的绝对误差限。

用绝对误差来刻划近似数的精确程度是有局限性的，因为它没有反映出它在原数中所占的比例。

定义 2 称 $E_r(x)=(x-x^*)/x$ 为近似数 x^* 的相对误差。若 $|E_r(x)|\leqslant\varepsilon_r$ 则称 ε_r 为近似数 x^* 的相对误差限。

实际运算时，常常将 $E_r^*(x)=(x-x^*)/x^*$ 称为相对误差。

例如，$x^*=3.14$ 是 $x=\pi$ 的近似值，

$$|E(X)|=|\pi-3.14|<0.002, \text{即 } \varepsilon=0.002$$

而

$$|E(X)|\leqslant\frac{0.002}{\pi}\approx\frac{0.002}{3.14}=6.36942\times10^{-4}$$

舍入误差是与参加运算的数字截取的位数密切相关的，如何取近似数的问题就是有效数字的选取问题。

定义 3 设 x 的近似值 x^* 可表示为

$$x^*=\pm10^m\times0.a_1a_2\cdots a_n$$

其中 a_1 是 1 到 9 中的一个数字，m 为整数，若使成立

$$|x-x^*|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-n}$$

则称 x^* 近似 x 有 n 位有效数字。

例如，$x=0.002567$，$x^*=0.00256=10^{-2}\times0.256$

$$|x-x^*|\leqslant0.00005=\frac{1}{2}\times10^{-4}$$

而 $m=-2$，所以 $n=2$，即 x^* 有 2 位有效数字；而 $x=8.00001$，$x^*=8.000$ 具有 5 位有效数字。

在数值分析中，准确求出截断误差并不容易，实际上只要能估计误差限，也就可能控制误差。然而，有时舍入误差也会导致计算结果面貌全非。例如，对于积分

$$\int_0^1\frac{x^n}{x+999}\mathrm{d}x, m=0,1\cdots$$

显然由 $0\leqslant x\leqslant1$ 时 $x^n\leqslant x^{n-1}$ 知

$$0<\int_0^1\frac{x_n}{x+999}\mathrm{d}x<\int_0^1x^{n-1}\mathrm{d}x=\frac{1}{n}$$

即随 n 的增大，积分值 $I_n=\int_0^1\frac{x^n}{x+999}\mathrm{d}x$ 接近于零。但是，采用递推算法，即由

$$(x^n+999x^{n-1})/(x+999)=x^{n-1}$$

在[0,1]上积分，得到递推公式：$I_n=-999I_n+\frac{1}{n}$，　$n=1,2,\cdots$，计算至 $n=6$ 时，$I_6=-587006.106$，从这个结果可见，舍入误差会造成不可估量的危害。

如果某算法在运算的过程中舍入误差的积累对计算结果影响不大，则这种算法是稳定算法，否则称算法数值不稳定。

算法的稳定性与算法的复杂度相关。称算法的计算量为算法的时间复杂度；算法需占用存储空间的量度称为空间复杂度。时间复杂度与空间复杂度的统称为算法复杂度。分析算法复杂度是算法在计算机上实现的可能性分析，它也是应用中的一个问题。

数值分析中研究算法误差、复杂度的另一个原因是，工程或科学问题，有时可能有几种算法，有些算法对具体的问题也有好、坏之分。如何从算法中选择最佳方法，是工程技术人员必须面对而又难于处理的问题。从数值分析的观点认为，应根据具体问题的特殊性，来选择复杂度，截断误差、稳定性兼顾的最佳方法。

03　若干注意事项

数值计算中，计算结果有一定误差是难免的。只要我们能把误差控制在允许范围内、而无须精确算出每步的误差。事实上，我们也不可能算出这种误差。但为控制误差，我们在每步计算中，就应该尽量减小误差。为此，下面几点是数值计算中的应注意问题：

(1)应避免两相近的数相减。因为相近的数相减，会造成有效数字的损失。例如

$$1-\cos 2^\circ\approx 1-0.9994=0.0006$$

只有一位有效数字。

(2)要选择数值稳定的计算公式。

(3)要尽量减少运算次数，简化计算。因为这样可以降低舍入误差的影响。

(4)要避免绝对值很小的数做除数。

(5)两数相加要防止大数“吃”掉小数。

习　　题

(1) 对函数

$$F(x)=\frac{1}{x}\int_0^x \mathrm{e}^{-t^2}\mathrm{d}t$$

构造 Taylor 级数，当从第 n 项截断后，估计误差。

(2) 给定方程 $x^2+ax+b=0$，设计一个算法，要避免两相近的数相减。

(3) 求积分　$I_n=\int_0^1\frac{x^n}{x+5}\mathrm{d}x, n=0,1,\cdots,$

的递推公式为 $I_{n-1}=\frac{1}{5n}-\frac{1}{5}I_n$，$n=20,19,\cdots$，计算分析算法的稳定性。

(4)取 $\sqrt{2}\approx 1.4$,试计算$(\sqrt{2}-1)^6$的近似值,又已知

$$(\sqrt{2}-1)^6=(3-2\sqrt{2})^3=90-70\sqrt{2}=\frac{1}{(\sqrt{2}+1)^6}$$

$$=\frac{1}{(3+2\sqrt{2})^3}=\frac{1}{90+70\sqrt{2}}$$

试分析哪一种算法更好。

目　录

1 线性代数方程组的直接解法

线性代数方程组的求解，有着广泛的应用。有些物理现象的数学模型，直接给出线性方程组。还有许多实际问题，最终也归结为线性代数方程组的求解问题。这些实际问题存在于自然科学、生物科学和社会科学等各领域中。由于方程组阶数较高，研究其适用于计算机的算法是非常必要的。

数值求解线性代数方程组的方法较多。归纳起来大体可分成两大类算法：其一是直接法，即如果在每步运算中不存在舍入误差时，经过有限步骤四则运算、可求出精确解的方法；另一类是迭代法，迭代法是指从某一猜测值出发，按某种手续构造求近似解的序列，进而以近似解序列的极限过程逐步逼近方程组的精确解，这两类方法都包含许多行之有效的具体方法，本章和下一章将分别介绍常用的数值解法。

需要指出，虽然线性代数理论中已经研究了线性代数方程组解的结构和求解方法，但是那里的方法或因为计算量大(如克莱姆法则)，或不易于编写计算程序(如行的初等变换法)，从而都不适合于在计算机上实现。本章介绍几种实用的直接法。

1.1 Gauss 消 去 法

Gauss 消去法是古老而有效的一种直接方法。它是在解代数方程组的行初等变换方法的基础上，整理而成的计算机算法。由 Gauss 消去法可以演变成其它一些有效的直接法。

设 n 阶线性代数方程组为

$$\mathrm{A}\mathrm{x}=\mathrm{b} \tag{1.1}$$

其中系数矩阵 A 和右端列向量分别为

$$\mathrm{A}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & & \cdots\cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix},\qquad \mathbf{b}=\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

为使叙述思想方法清晰起见，先考虑上三角方程组

$$\begin{cases} u_{11}x_1+u_{12}x_2+\cdots+u_{1n}x_n=b_1 \\ \qquad\quad u_{22}x_2+\cdots+u_{2n}x_n=b_2 \\ \qquad\qquad\qquad \cdots \quad \cdots \quad \cdots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad u_{nn}x_n=b_n \end{cases} \tag{1.2}$$

的求解。设方程组(1.2)有唯一解,则 $u_{ii}\neq 0(i=1,2,\cdots,n)$,从而由(1.2)的第 n 个方程可解出 x_n,再代回到第 $n-1$ 个方程中,解出 x_{n-1},依次便有

$$\begin{cases}x_n=b_n/a_{nn} \\ x_i=(b_i-\sum_{j=i+1}^{n}u_{ij}x_j)/u_{ii} \quad i=n-1,n-2,\cdots,2,1\end{cases} \tag{1.3}$$

这就是用来求(1.2)解的公式。由于这个公式是由 x_n 代回公式,求出 x_{n-1},再逐次代回,求出 $x_{n-2},x_{n-3},\cdots,x_2,x_1$,因此称其为回代求解公式。

本着化繁为简的原则,将一般的方程组用初等行变换手续,化为上三角方程组求解。这就是 Gauss 消元的基本想法。

为使公式整齐,记方程组(1.1)为

$$\begin{cases}a_{11}^{(1)}x_1+a_{12}^{(1)}x_2+\cdots+a_{1n}^{(1)}x_n=b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)}x_1+a_{22}^{(1)}x_2+\cdots+a_{2n}^{(1)}x_n=b_2^{(1)} \\ \cdots\quad\cdots\quad\cdots\quad\cdots\quad\cdots\cdots \\ a_{n1}^{(1)}x_1+a_{n2}^{(1)}x_2+\cdots+a_{nn}^{(1)}x_n=b_n^{(1)}\end{cases} \tag{1.4}$$

其对应的增广矩阵为

$$[A^{(1)},b^{(1)}]=\begin{bmatrix}a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)}\cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)}\cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)}\cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)}\end{bmatrix} \tag{1.5}$$

Gauss 消元的具体手续,是按顺序从第一列到第 $n-1$ 列将对角线下方的元素消为零。称这 $n-1$ 轮运算为消元。在第一轮消元中,当 $a_{11}^{(1)}\neq 0$ 时,用第 i 行减去第一行的 $l_{i1}=a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}\quad(i=2,3,\cdots,n)$倍,得到等价矩阵

$$[A^{(2)},b^{(2)}]=\begin{bmatrix}a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)}\cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)}\cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)}\cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)}\end{bmatrix} \tag{1.6}$$

在这里

$$\begin{aligned}a_{ij}^{(2)}&=a_{ij}^{(1)}-l_{i1}a_{1j}^{(1)} \qquad i,j=2,3,\cdots,n \\ b_i^{(2)}&=b_i^{(1)}-l_{i1}b_1^{(1)} \qquad i,j=2,3,\cdots,n\end{aligned} \tag{1.7}$$

当 $a_{22}^{(2)}\neq 0$ 时，进行第二轮消元，即用第 i 行减去第二行的 $l_{i2}=a_{i2}^{(2)}/a_{22}^{(2)}(i=3,4,\cdots,n)$ 倍，得到

$$[A^{(3)},b^{(3)}]=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)}\cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)}\cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)}\cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)}\cdots & a_{nn}^{(3)} & b_n^{(3)} \end{bmatrix} \tag{1.8}$$

其中

$$a_{ij}^{(3)}=a_{ij}^{(2)}-l_{i2}a_{2j}^{(2)},b_i^{(3)}=b_i^{(2)}-l_{i2}b_2^{(2)},i,j=3,4,\cdots,n \tag{1.9}$$

重复上述手续，设进行 $k-1$ 轮消元后得到等价矩阵

$$[A^{(k)},b^{(k)}]=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)}\cdots & a_{1k}^{(1)}\cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)}\cdots & a_{2k}^{(2)}\cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & \ddots & a_{kk}^{(k)}\cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ & & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)}\cdots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{bmatrix}, \tag{1.10}$$

只要 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$，就可以进行第 k 轮消元，即用第 i 行元素减去第 k 行元素的 $l_{ik}=a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}(i=k+1,k+2,\cdots,n)$ 倍，得等价矩阵

$$[A^{(k+1)},b^{(k+1)}]=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)}\cdots & a_{1k}^{(1)} & a_{1k+1}^{(1)}\cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)}\cdots & a_{2k}^{(2)} & a_{2k+1}^{(2)}\cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & a_{kk+1}^{(k)}\cdots & a_{kn}^{(kn)} & b_k^{(k)} \\ & & & a_{k+1k+1}^{(k+1)}\cdots & a_{k+1n}^{(k+1)} & b_{k+1}^{k+1} \\ & & & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nk+1}^{(k+1)}\cdots & a_{nn}^{(k+1)} & b_n^{(k+1)} \end{bmatrix}, \tag{1.11}$$

其中

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-l_{ik}a_{kj}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)}=b_i^{(k)}-l_{ik}b_k^{(k)} \end{cases},i,j=k+1,\cdots,n, \tag{1.12}$$

显然(1.12)式是(1.7)、(1.9)式的一般情形。因此，对 $k=1,2,\cdots,n-1$，按公式(1.12)就完成了 $n-1$ 轮消元，可得到

$$[A^{(n)},b^{(n)}]=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

记$U=A^{(n)}$,则已经把方程组(1.4)化成了上三角方程组。我们称按(1.12)式的计算过程为Guass 消元过程,而(1.12)式称为消元公式。按回代求解公式解上三角方程组的过程称为回代过程。消元及回代求解的全过程,称为 Gauss 消去法。一般的 n 阶方程组,只要用公式(1.12)和(1.3)就可求出解。

在上述消元运算过程中,我们假定 $a_{ii}^{(i)}\neq0,i=1,2,\cdots,n$,这是可以进行各轮消元运算的条件。由代数理论知道,这些条件等价于要求系数矩阵 A 的顺序主子式都不为零,即有

$$a_{11}\neq0,\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}\neq0,\cdots,\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix}\neq0,\cdots,|A|\neq0, \qquad (1.13)$$

一旦上述条件不满足,也就是某个 $a_{ii}^{(i)}=0$,此时消元运算无法进行,我们将在下节中处理这个问题。

我们来分析 Gauss 消去法的运算量。如果只考虑乘除法,由于第一轮消元运算需要作乘法 $n\times(n-1)$次,除法 $n-1$ 次;第二轮消元作乘法$(n-1)\times(n-2)$次,除法 $n-2$ 次,一般地,第 K 轮消元作乘法$(n-k+1)\times(n-k)$次,除法 $n-k$ 次,因此完成消元的过程共作乘法

$$\sum_{k=1}^{n-1}[(n-k+1)\times(n-k)]=\frac{1}{3}n(n^2-1)$$

做除法

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

完成回代求解全过程的乘除法总运算量$\frac{n}{2}(n+1)$,Gauss 消去法的总运算量为

$$\frac{1}{3}n(n^2-1)+\frac{n}{2}(n-1)+\frac{n}{2}(n+1)=\frac{1}{3}(n^3+3n^2-n)$$

若用克莱姆法则解方程组,利用子式展开计算行列式的话,总运算量为$(n+1)!$。当 $n=10$ 时,$(n+1)!=39916800$,而用 Gauss 消去法,只运算 430 次。可见 Gauss 消去法的运算量远比克莱姆法则运算量小得多。

Gauss 消去法不但计算量小,而且程序实现也很方便。具体计算过程如下

步 1，定义数组 A,B,x；

步 2，输入 A,B,Eps；

步 3，对 $k=1$ 到 $n-1$ 进行消元：

$$\begin{cases} a_{ij}\Leftarrow a_{ij}-a_{ik}a_{kj}/a_{kk}, |a_{kk}|>Eps, \\ b_i\Leftarrow b_i-a_{ik}b_k/a_{kk} \\ i,j=k+1,k+2,\cdots,n \end{cases}$$

步 4，$x_n=b_n/a_{nn}$；对 $i=N-1$ 到 1 回代求解

$$x_i=(b_i-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j)/a_{ii}$$

步 5，输出 $x_i, i=1,2,\cdots,n$；

步 6，结束。

注：此算法中一旦出现 $|a_{kk}|\leqslant Eps$（Eps 是给定的小正数）程序便终止，此种情况放到下节中加以解决。

例 1.1 利用 Gauss 消去法解下列方程组：

$$\begin{cases} 4x_1-9x_2+2x_3=5 \\ 2x_1-4x_2+6x_3=3 \\ -x_1+x_2-3x_3=-4 \end{cases}$$

解：方程组的增广矩阵是

$$[A\quad b]=\begin{bmatrix} 4 & -9 & 2 & 5 \\ 2 & -4 & 6 & 3 \\ -1 & 1 & -3 & -4 \end{bmatrix}$$

消元运算如下：

$$[A\quad b]\xrightarrow[l_{21}=\frac{2}{4},l_{31}=-\frac{1}{4}]{\text{第一轮消元}}\begin{bmatrix} \boxed{4} & -9 & 2 & 5 \\ 0 & 0.5 & 5 & 0.5 \\ 0 & -1.25 & -2.5 & -2.75 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[l_{32}=\frac{-1.25}{0.5}=-2.5]{\text{第二轮消元}}\begin{bmatrix} 4 & -9 & 2 & 5 \\ 0 & \boxed{0.5} & 5 & 0.5 \\ 0 & 0 & 10 & -1.5 \end{bmatrix}$$

回代求解，$x_3=-1.5/10=-0.15$，$x_2=[0.5-5\times(-0.15)]/0.5=2.5$，$x_1=(5+9\times2.5+2\times0.15)/4=6.95$。

1.2 主元素消去法

在 Gauss 消去法中，每进行一轮消元运算都要用到 $a_{kk}^{(k)}$，如果出现 $a_{kk}^{(k)}=0$ 就无法继续消元，我们称 $a_{kk}^{(k)}$ 为消元运算的主元素。如果主元素不为零，但绝对值是很小的数，此时，用其作除数，也会导致消元过程某元素的数量级快速增长和舍入误差的扩散，因而计算结果不可靠。下面的例题说明了这一点。

例 1.2 用 Gauss 消去法取三位有效数字解方程组

$$\begin{cases}0.0120x_1+1.00x_2+2.00x_3=1.00\\1.00x_1+2.63x_2+5.24x_3=2.00\\-2.00x_1+1.04x_2+4.57x_3=3.00\end{cases}$$

解：方程组的精确解 $x^*=(-0.645,0.476,0.266)^T$，用 Gauss 消去法求解时

$$[A\quad b]=\begin{bmatrix}0.0120 & 1.00 & 2.00 & 1.00\\1.00 & 2.63 & 5.24 & 2.00\\-2.00 & 1.04 & 4.57 & 3.00\end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[l_{31}=-167]{l_{21}=83.3}\begin{bmatrix}0.0120 & 1.00 & 2.00 & 1.00\\0 & -80.7 & -162 & -81.3\\0 & -166 & -329 & -164\end{bmatrix}\xrightarrow{l_{32}=2.06}\begin{bmatrix}0.0120 & 1.00 & 2.00 & 1.00\\0 & -80.7 & -162 & -81.3\\0 & 0 & 5.00 & 3.00\end{bmatrix}$$

解出 $x\approx(-0.25,-0.197,0.60)^T$。

为了避免小主元消去带来的麻烦，下面介绍选主元素的消去法。

选主元素消去法的基本思想是在每轮消元之前，选一个绝对值较大的元素，当做主元素。选择的方式有几种，下面按列选主元是最常用的一种方法。

设已进行 k 轮消元，得矩阵

$$A^{(k)}=\begin{bmatrix}a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)}\\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)}\\ & & \ddots & \vdots & & \vdots\\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)}\\ & & & \vdots & & \vdots\\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)}\end{bmatrix}$$

进行下一轮消元之前，在第 k 列，第 k 至 n 行中选出绝对值最大者，当做主元素。即

$$|a_{i_0k}^{(k)}|=\max_{k\leqslant i\leqslant n}|a_{ik}^{(k)}| \tag{1.14}$$