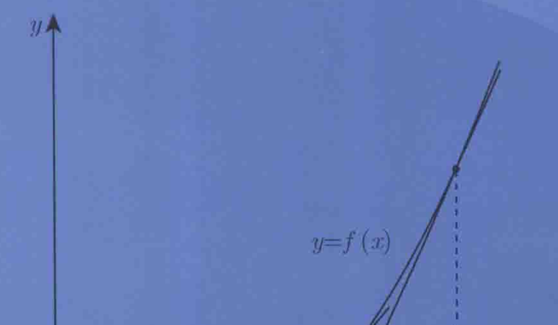
工科研究生数学类基础课程应用系列丛书

现代数值计算基础

(上册)

李永海　术洪亮　张德悦　宫成春　邹永魁　编



科 学 出 版 社

工科研究生数学类基础课程应用系列丛书

现代数值计算基础

（上册）

李永海　术洪亮　张德悦
宫成春　邹永魁　编

科学出版社
北京

内容简介

本书主要介绍科学与工程中一些基本数学问题的常用计算方法. 主要内容包括: 解线性代数方程组的直接法和迭代法、数值求解特征值和特征向量、非线性方程(组)求根、函数的插值与数值积分、常微分方程初值问题的数值解法、偏微分方程的差分法和有限元法.

本书适合于作为非数学专业理工科高年级本科生和硕士研究生“计算方法”课程教材使用, 也可供工程技术领域科技人员学习和参考.

图书在版编目(CIP)数据

现代数值计算基础. 上册/李永海等编. —北京: 科学出版社, 2016.6

(工科研究生数学类基础课程应用系列丛书)

ISBN 978-7-03-049230-2

Ⅰ. ①现… Ⅱ. ①李… Ⅲ. ①数值计算 Ⅳ. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016) 第 144359 号

责任编辑: 张中兴 / 责任校对: 彭 涛
责任印制: 白 洋 / 封面设计: 迷底书装

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码: 100717
http://www.sciencep.com

大厂书文印刷有限公司 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2016 年 6 月第 一 版 开本: 720×1000 1/16
2016 年 6 月第一次印刷 印张: 12 1/4
字数: 247 000

定价: 35.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

“工科研究生数学类基础课程应用系列丛书”
编委会名单

序　　言

“工科研究生数学类基础课程应用系列丛书”是根据教育部关于研究生培养指导规划和目标、结合当前研究生教育改革的实际情况, 借鉴国内外研究生教育的最新研究成果, 旨在规范和加强研究生公共基础课教学的一套研究生公共数学系列教材. 本系列教材经过对研究生公共数学课程整合、优化, 共编写教材 13 册, 具体包括:《现代分析基础》(上、下册)、《代数学基础》(上、下册)、《现代统计学基础》(上、下册)、《现代微分方程概论》(上、下册)、《现代数值计算基础》(上、下册)、《现代优化理论与方法》(上、下册)、《应用泛函分析》. 其中上册为非数学类硕士研究生教材, 下册为非数学类博士研究生教材.

本套丛书的编写体现了时代的特征, 本着加强基础、淡化证明、强调应用的原则, 力争做到科学性、系统性和实用性的统一, 着眼于传授教学知识和培养学生数学素养的高度结合.

本套丛书吸取国内外同类教材的精华, 参考近年来出版的一些新教材, 结合当前研究生公共数学教学改革的实际, 特别是综合性大学非数学类研究生公共数学的实际需求.

本套丛书体例科学、结构合理、内容经典而追求创新, 既是作者多年教学经验的总结, 又是作者长期教学研究和科学研究成果的体现. 每章后面配备巩固基本概念、基本理论、基本运算的基本题目, 又有提高学生抽象思维、逻辑推理和综合运用基础知识解题的提高题目, 为学生掌握教材基本内容, 运用教材基本知识开发创新思维提供了可行条件.

本套丛书适用面广、涉及专业全、教学内容新, 可作为综合性大学非数学专业研究生公共数学教材和教学参考书, 在教材体系与内容的编排上认真考虑不同专业, 不同学时的授课对象的需求, 可选择不同的教学模块, 以满足广大读者的实际需要.

本套丛书的编写过程中, 得到了吉林大学研究生院、吉林大学数学学院和数学研究所的大力支持, 也得到了科学出版社的领导和编辑的鼎力帮助, 在此一并致谢.

由于编者水平有限, 书中的不妥之处在所难免, 恳请广大读者批评指正, 以期不断完善.

丛书编委会

2015 年 3 月于长春

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, 我们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.

本书结合工程技术领域中常用的计算方法, 主要介绍: 解线性代数方程组的直接法和迭代法、矩阵特征值和特征向量的计算、非线性方程 (组) 求根、函数的插值与数值积分、常微分方程初值问题的数值解法、偏微分方程的差分法和有限元法. 全书内容注重基础知识, 覆盖面较宽地介绍基本方法, 并且遵循通俗易懂、深入浅出的原则, 同时保证理论的科学性和严谨性, 方法的实用性, 每章配备了一定数量的数值算例和习题. 本书适合于作为非数学专业理工科高年级本科生和硕士研究生 "计算方法" 课程教材使用, 也可供工程技术领域科技人员学习和参考.

本书的第 1 章、第 2 章由术洪亮编写, 第 3 章、第 4 章由宫成春编写, 第 5 章、第 6 章由张德悦编写, 第 7 章由邹永魁编写, 第 8 章由李永海编写. 另外, 李永海主持了本书的编辑和修改、定稿工作.

本书的编写得到了吉林大学数学学院和科学出版社的大力支持, 在编写过程中得到了李勇老师极大的支持和帮助, 陈殿友老师对本书的编写付出了辛勤的组织工作, 在此一并表示衷心的感谢.

由于编者水平和经验有限, 书中难免出现不妥之处, 欢迎使用者多提宝贵意见和建议, 编者将不胜感谢.

编　者

2016 年 1 月

目　录

第 1 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 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{b}$ 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 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{b}$，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 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{b}$，其中 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{R}^{n\times n}$，$\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}^{n}$，且 $\boldsymbol{A}$ 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方法.

1.1.1　Gauss 消元法

首先考察上三角形方程组:

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

若方程组 (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

$$\left\{\begin{aligned} x_n&=\frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}},\\ x_k&=\frac{b_k^{(k)}-\displaystyle\sum_{j=k+1}^{n}a_{kj}^{(k)}x_j}{a_{kk}^{(k)}},\quad k=n-1,n-2,\cdots,2,1 \end{aligned}\right. \tag{1.1.2}$$

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:

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

用矩阵和向量的记号表示, 则有

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{b}, \tag{1.1.4}$$

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

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

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, 另一个是回代过程, 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、除法运算次数为

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

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、除法运算次数为

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

如果我们用 Cramer 法则计算方程组 (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　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 $(n=4)$

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

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 $a_{kk}^{(k)}\neq 0(k=1,2,\cdots,n)$ 的情况下, 我们讨论了 Gauss 消元法, 但在实际问题中我们还应该注意舍入误差的积累对解的影响.

例 1.2 用 Gauss 消元法求解方程组

$$\begin{cases} 0.0003x_1+3.0000x_2=2.0001, & (1.1.10)\\ 1.0000x_1+1.0000x_2=1.0000. & (1.1.11)\end{cases}$$

计算中取 5 位有效数字.

解 方程 (1.1.10) $\times(-1)/0.0003+$ 方程 (1.1.11) 得

$$\begin{cases} 0.0003x_1+3.000x_2=2.0001,\\ \qquad\qquad 9999.0x_2=6666.0.\end{cases}$$

所以 $x_2\approx 0.6667$, 代入方程 (1.1.10) 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

$$\begin{cases} 1.0000x_1+1.0000x_2=1.0000,\\ 0.0003x_1+3.0000x_2=2.0001.\end{cases}$$

经 Gauss 消元后有

$$\begin{cases} 1.0000x_1+1.0000x_2=1.0000,\\ \qquad\qquad 2.9997x_2=1.9998.\end{cases}$$

得到的解为 $x_2\approx 0.6667, x_1\approx 0.3333$.

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, 其绝对值越大, 引起的舍入误差越小, 因此, 在消元法中, 我们应该选择绝对值大的元素作为主元, 由此产生的方法叫主元消元法.

(1) 列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 1.3　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, 故有

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

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

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}^{(2)}| &\leqslant |a_{ii}^{(1)}| - |a_{i1}^{(1)}| + \frac{|a_{i1}^{(1)}|}{|a_{11}^{(1)}|} (|a_{11}|^{(1)} - |a_{1i}^{(1)}|) \\ &= |a_{ii}^{(1)}| - \frac{|a_{i1}^{(1)}||a_{1i}^{(1)}|}{|a_{11}^{(1)}|} \leqslant \left| a_{ii}^{(1)} - \frac{a_{i1}^{(1)} a_{1i}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \right| \leqslant |a_{ii}^{(2)}|, \quad i = 2, 3, \cdots, n. \end{aligned}$$

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