21 世纪高等院校教材

数值分析

首都师范大学数学系 组编
黄 铎 陈兰平 王 风 编著

科学出版社
www.sciencep.com

21世纪高等院校教材

数值分析

首都师范大学数学系 组编
黄 铎 陈兰平 王 风 编著

科学出版社
北京

内 容 简 介

本书是高等师范院校及一般理工科大学 70 学时左右的数值分析或计算方法课的教材．主要包括误差、线性代数方程组的直接解法和迭代解法、矩阵特征值问题、插值逼近、最佳平方逼近与曲线拟合、数值积分与数值微分、非线性方程求根及常微分方程初值问题的数值解法．

本书试图用典型有效的方法说明构造数值方法的基本思想，尽可能准确地叙述基本概念．每章均附有上机实习的练习题，循序渐进、宜于教学．具有微积分和高等代数基础及常微分方程初步知识人员即可自学本书．

图书在版编目（CIP）数据

数值分析/黄铎，陈兰平，王风编著．－北京：科学出版社，2000．8
（21 世纪高等院校教材）
ISBN 7-03-008502-7

Ⅰ．数… Ⅱ．①黄… ②陈… ③王… Ⅲ．计算方法-高等学校-教材
Ⅳ．O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2000）第 08572 号

责任编辑：吕虹　姚莉丽/封面设计：黄华斌　槐寿明

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
新蕾印刷厂 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销
*
2000 年 8 月第 一 版　开本：B5（720×1000）
2005 年 6 月第四次印刷　印张：17 3/4
印数：11 501—13 500　字数：318 000
定价：23.00 元
（如有印装质量问题，我社负责调换〈环伟〉）

目　录

第一章　误　　差

§1.1　误差的来源

早在中学我们就接触过误差的概念,如在做热力学实验中,从温度计上读出的温度是23.4度,这23.4就不是一个精确的值,而是含有误差的近似值.事实上,误差在我们的日常生活中无处不在,无处不有.如量体裁衣,量与裁的结果都不是精确无误的,都含有误差.人们可能会问:如果使用计算机来解决问题,结果还会有误差吗?下面我们通过考察用数学方法解决实际问题的主要过程来思考这个问题.

用数学方法解决一个具体的实际问题,首先要建立数学模型,这就要对实际问题进行抽象、简化,因而数学模型本身总含有误差,这种误差叫做模型误差.在数学模型中通常包含各种各样的参变量,如温度、长度、电压等,这些参数往往都是通过观测得到的,因此也带来了误差,这种误差叫做观测误差.当数学模型不能得到精确解时,通常要建立一套行之有效的数值方法求它的近似解,近似解与准确解之间的误差就称为截断误差或方法误差.由于在计算机中浮点数只能表示实数的近似值,因此用计算机进行实际计算时每一步都可能有误差,这种误差称为舍入误差.

例如,函数 $f(x)$ 用泰勒(Taylor)多项式

$$P_n(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n$$

近似代替,则数值方法的截断误差是

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}x^{n+1} \quad (\xi \text{ 介于 } 0 \text{ 与 } x \text{ 之间})$$

又如在计算时用3.14159近似代替 π,产生的误差 $R = \pi - 3.14159 = 0.0000026\cdots$ 就是舍入误差.

上述种种误差都会影响计算结果的准确性,因此需要了解与研究误差.在数值分析中将着重研究截断误差,舍入误差,并对它们的传播与积累作出分析.

§1.2 绝对误差、相对误差与有效数字

本节介绍误差的基本概念.

1.2.1 绝对误差与绝对误差限

定义 1.1 设 x 为准确值,x^* 为 x 的一个近似值,称 $e^* = x^* - x$ 为近似值的绝对误差,或误差.

通常我们无法知道准确值 x,也不能算出误差的准确值 e^*,只能根据测量或计算估计出误差的绝对值不超过某正数 ε^*,即 $|x - x^*| \leqslant \varepsilon^*$,则称 ε^* 为绝对误差限.有了绝对误差限就可知道 x 的范围 $x^* - \varepsilon^* \leqslant x \leqslant x^* + \varepsilon^*$,即 x 落在区间 $[x^* - \varepsilon^*, x^* + \varepsilon^*]$ 内.

例如用毫米测度尺测量一长度 x,读出的长度为 23mm,则有 $|23 - x| \leqslant 0.5$mm.由此例也可以看到绝对误差是有量纲和单位的.

1.2.2 相对误差与相对误差限

只用绝对误差还不能说明数的近似程度,例如甲打字时平均每百个字错一个,乙打字时平均每千个字错一个,他们的误差都是错一个,但显然乙要准确些.这就启发我们除了要看绝对误差大小外,还必须顾及量的本身.

定义 1.2 把近似值的误差 e^* 与准确值 x 的比值

$$\frac{e^*}{x} = \frac{x^* - x}{x}$$

称为近似值 x^* 的相对误差,记作 e_r^*.

实际计算时,由于真值 x 通常是不知道的,通常取 $e_r^* = \dfrac{e^*}{x^*}$.相对误差也可正可负,它的绝对值的上界叫做相对误差限.记作 ε_r^*.即 $\varepsilon_r^* = \dfrac{\varepsilon^*}{|x^*|}$.根据定义,甲打字时的相对误差 $|e_r^*| \leqslant \dfrac{1}{100} = 1\%$,乙打字时的相对误差 $|e_r^*| \leqslant \dfrac{1}{1000} = 0.1\%$.易知相对误差是一个无量纲量.

1.2.3 有效数字

当准确值 x 有多位时,常常按四舍五入的原则得到 x 的前几位近似值 x^*,例如

$$x = \pi = 3.14159265\cdots$$

取 3 位 $x_3^* = 3.14$, $\varepsilon_3^* \leqslant 0.002$;

取 5 位 $x_5^* = 3.1416$, $\varepsilon_5^* \leqslant 0.00005$;

它们的误差都不超过末位数字的半个单位,即

$$\left|\pi - 3.14\right| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-2}, \left|\pi - 3.1416\right| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{-4}$$

现在我们将四舍五入抽象成数学语言,并引入一个新名词“有效数字”来描述它.

定义 1.3 若近似值 x^* 的误差限是某一位的半个单位,该位到 x^* 的第一位非零数字共有 n 位,我们就说 x^* 有 n 位有效数字.

如取 $x^* = 3.14$ 作 π 的近似值,x^* 就有 3 位有效数字;取 $x^* = 3.1416$ 作 π 的近似值,x^* 就有 5 位有效数字.

x^* 有 n 位有效数字可写成标准形式

$$x^* = \pm 10^m \times (a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}) \tag{2.1}$$

其中,a_1 是 1 到 9 中的某一个数字,$a_2, a_3, \cdots, a_n$ 是 0 到 9 中的一个数字,m 为整数,且

$$|x - x^*| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1} \tag{2.2}$$

例1 依四舍五入原则写出下列各数具有5 位有效数字的近似数

913.95872, 39.1882, 0.0143254, 8.000033

解 按定义,上述各数具有 5 位有效数字的近似数分别为

913.96, 39.188, 0.014325, 8.0000

注意,8.000033 的 5 位有效数字的近似数是 8.0000 而不是 8,8 只有一位有效数字.从例 1 可以看出,有效位数与小数点后有多少位无直接关系.那么有效数字与绝对误差、相对误差有何关系呢?有效数字位多好呢,还是少好呢?

不难看出,若由(2.1)给出某近似数有 n 位有效数字,则可从(2.2)求得这个近似数的绝对误差限

$$\varepsilon^* = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$$

因此在 m 相同的情况下,n 越大则 10^{m-n+1}就越小,故有效数字位数越多,绝对误差限越小.

定理 1.1 用(2.1)表示的近似数 x^*,若 x^* 具有 n 位有效数字,则其相对误差限为

$$\varepsilon_r^* \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

反之,若 x^* 的相对误差限 $\varepsilon_r^* \leqslant \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)}$,则 x^* 至少具有 n 位有

效数字.

证明 由(2.1),可得

$$a_1 \times 10^m \leqslant |x^*| \leqslant (a_1+1) \times 10^m$$

当 x^* 有 n 位有效数字时

$$\varepsilon_r^* = \frac{|x-x^*|}{|x^*|} \leqslant \frac{0.5 \times 10^{m-n+1}}{a_1 \times 10^m} = \frac{1}{2a_1} \times 10^{-n+1}$$

反之,由

$$\begin{aligned} |x-x^*| &= |x^*|\varepsilon_r^* \leqslant (a_1+1) \times 10^m \times \frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)} \\ &= 0.5 \times 10^{m-n+1} \end{aligned}$$

故 x^* 至少有 n 位有效数字,证毕.

定理 1.1 说明,有效数字位数越多,相对误差限越小.

例 2 要使$\sqrt{20}$的近似值的相对误差限小于 0.1%,要取几位有效数字?

解 由定理 1.1,有 $\varepsilon_r^* \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$;由于$\sqrt{20}=4.\cdots$,知 $a_1=4$,令

$$\frac{1}{2 \times 4} \times 10^{-(n-1)} \leqslant 0.1\%$$

故取 $n=4$ 即可满足.

1.2.4 数值运算的误差估计

一般情况,当自变量有误差时计算相应的函数值也会产生误差,其误差限可利用函数的泰勒展开式进行估计.

设 $f(x)$是一元函数,x 的近似值为 x^*,以 $f(x^*)$近似 $f(x)$,其误差界记作 $\varepsilon(f(x^*))$,可用泰勒展开式

$$f(x)-f(x^*) = f'(x^*)(x-x^*) + \frac{f''(\xi)}{2}(x-x^*)^2$$

ξ 介于 x, x^*之间,取绝对值得

$$|f(x)-f(x^*)| \leqslant |f'(x^*)|\varepsilon(x^*) + \frac{|f''(\xi)|}{2}\varepsilon^2(x^*)$$

假定 $f'(x^*)$与 $f''(x^*)$的比值不太大,可忽略 $\varepsilon(x^*)$的高阶项,于是可得计算函数值的误差限

$$\varepsilon(f(x^*)) \approx |f'(x^*)|\varepsilon(x^*)$$

当 f 为多元函数时,如计算 $A=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$. 如果 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的近似值为 $x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*$,则 A 的近似值为 $A^*=f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$,于是函数值 A^* 的误差 $e(A^*)$由泰勒展开得

$$e(A^*) = A^* - A = f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*) - f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$$

$$\approx \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)}{\partial x_k}\right)(x_k^*-x_k)$$
$$\approx \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^* e_k^*$$

于是误差限

$$\varepsilon(A^*)\approx \sum_{k=1}^{n}\left|\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)^*\right|\varepsilon(x_k^*) \tag{2.3}$$

例3 已测得某场地长 l 的值为 $l^*=110\text{m}$，宽 d 的值为 $d^*=80\text{m}$，已知 $|l-l^*|\leqslant 0.2\text{m}$，$|d-d^*|\leqslant 0.1\text{m}$，试求面积的绝对误差限与相对误差限.

解 因 $s=ld$，$\frac{\partial s}{\partial l}=d$，$\frac{\partial s}{\partial d}=l$，那么

$$\varepsilon(s^*)\approx\left|\left(\frac{\partial s}{\partial l}\right)^*\right|\varepsilon(l^*)+\left|\left(\frac{\partial s}{\partial d}\right)^*\right|\varepsilon(d^*)$$

其中

$$\left(\frac{\partial s}{\partial l}\right)^*=d^*=80\text{m},\left(\frac{\partial s}{\partial l}\right)^*=l^*=110\text{m}$$
$$\varepsilon(d^*)=0.1\text{m},\varepsilon(l^*)=0.2\text{m}$$

于是绝对误差限

$$\varepsilon(s^*)\approx 80\times 0.2+110\times 0.1=27(\text{m}^2)$$

相对误差限

$$\varepsilon_r(s^*)=\frac{\varepsilon(s^*)}{|s^*|}=\frac{\varepsilon(s^*)}{l^*d^*}\approx\frac{27}{8800}=0.31\%$$

§1.3 误差传播与若干防治办法

由前述可知，在数值计算中每步都可能产生误差．而一个问题的解决，往往要经过成千上万次运算，我们不可能每步都加以分析．下面，通过对误差的某些传播规律的简单分析，指出在数值计算中应注意的几个原则，它有助于鉴别计算结果的可靠性并防止误差危害现象的产生．

1.3.1 要避免两相近数相减

在数值运算中两相近数相减会使有效数字严重损失．例如 $x=532.65$，$y=532.52$都具有五位有效数字，但 $x-y=0.13$ 只有两位有效数字，所以要尽量避免这类运算．

通常采用的方法是改变计算公式．例如当 x_1 与 x_2 很接近时，由于

$$\lg x_1 - \lg x_2 = \lg \frac{x_1}{x_2}$$

那么可用右端的公式代替左端的公式计算,有效数字就不会损失.当 x 很大时,

$$\sqrt{x+1} - \sqrt{x} = \frac{1}{\sqrt{x+1} + \sqrt{x}}$$

也可用右端来代替左端.一般情况,当 $f(x) \approx f(x^*)$时,可用泰勒展开

$$f(x) - f(x^*) = f'(x^*)(x - x^*) + \frac{f''(x^*)}{2}(x - x^*)^2 + \cdots$$

取右端的有限项近似左端.

如果计算公式不能改变,则可采用增加有效位数的方法.

1.3.2 要防止大数“吃掉”小数

若参加运算的数的数量级相差很大,而计算机的位数有限,如不注意运算次序,就可能出现大数“吃掉”小数的现象,影响计算结果.

例如在五位十进制计算机上,计算

$$A = 52492 + \sum_{i=1}^{1000} 0.1$$

写成规格化形式

$$A = 0.52492 \times 10^5 + \sum_{i=1}^{1000} 0.000001 \times 10^5$$

由于计算时要对阶,0.000001×10^5 在计算机中表示为 0,因此,计算出来 $A = 0.52492 \times 10^5$,结果严重失真!如果计算时,先将 $\sum_{i=1}^{1000} 0.1$ 计算出来,再与 52492 相加,就不会出现大数“吃掉”小数的现象了.

1.3.3 注意简化计算步骤,减少运算次数

同样一个计算问题,如果能减少运算次数,不但可节省计算机的计算时间,还能减少舍入误差.

例如,计算 x^{255}的值,如果逐个相乘要用 254 次乘法,但若写成

$$x^{255} = x \cdot x^2 \cdot x^4 \cdot x^8 \cdot x^{16} \cdot x^{32} \cdot x^{64} \cdot x^{128}$$

只要做 14 次乘法运算即可.

1.3.4 绝对值太小的数不宜作除数

设 x 与 y 分别有近似值 x^* 与 y^*,$z = \frac{x}{y}$ 的近似值 $z^* = \frac{x^*}{y^*}$,则其绝对误差

$$|e^*(z)| \approx \left| \frac{1}{y^*} e^*(x) - \frac{x^*}{(y^*)^2} e^*(y) \right|$$

$$\leqslant \frac{1}{|y^*|}|e^*(x)| + \frac{|x^*|}{(y^*)^2}|e^*(y)|$$

显然，当$|y^*|$很小时，近似值 z^* 的绝对误差 $e^*(z)$有可能很大. 因此，不宜把绝对值太小的数作除数.

1.3.5 要注意计算过程中误差的传播与积累，防止误差被恶性放大

解决一个数学问题往往有多种数值方法. 在选择数值方法时，一定要注意所用的数值方法不应将计算过程中难以避免的误差恶性放大，造成计算结果完全不可信.

例 求积分

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x + 10}\mathrm{d}x$$

若选择迭代公式

$$\begin{cases} I_{n+1} = \dfrac{1}{n+1} - 10I_n \\ I_0 = 0.0953102 \end{cases} \tag{3.1}$$

由上式，从 I_0 出发，可计算 I_1，再由 I_1 可计算 I_2，依此类推，则有下面数表：

I_0	0.0953102	I_9	0.0091673
I_1	0.0468982	I_{10}	0.00832705
I_2	0.0310180	I_{11}	0.00763864
I_3	0.0231535	I_{12}	0.0069473
I_4	0.0184647	I_{13}	0.0074503
I_5	0.0153529	I_{14}	−0.0030745
I_6	0.0131377	I_{15}	0.0974113
I_7	0.0114806	I_{16}	−0.911613
I_8	0.0101944		

注意到积分

$$I_{n+1} = \int_0^1 \frac{x^{n+1}}{x + 10}\mathrm{d}x > 0$$

因此，I_{16}显然是不正常的，其实不正常现象从 I_{13}就已显露出来. 因为 $I_{13} = \int_0^1 \frac{x^{13}}{x+10}\mathrm{d}x < \int_0^1 \frac{x^{12}}{x+10}\mathrm{d}x = I_{12}$. 但从上表上看 $I_{13} > I_{12}$，这是不可能的. 原因何在？我们在计算 I_0 时由于舍入原因，有误差 $\varepsilon_0 = I_0 - \tilde{I}_0$，$\tilde{I}_0$ 表示 I_0 的计算值. 这里$|\varepsilon_0| < \frac{1}{2}\times 10^{-7}$. 为便于分析起见，设以后的计算完全准确. 下述

的分析将使我们看到，仅仅 I_0 的计算有一个小小的误差 ε_0，会导致什么后果.

注意 $I_1=1-10I_0$.

由于 I_0 计算有误差，故 I_1 的计算也会有误差.（此误差主要是由 I_0 的误差传播造成.）

设 I_1 的计算值为 $\tilde{I}_1$，则

$$\tilde{I}_1 = 1 - 10\tilde{I}_0$$

令　$\varepsilon_1 = I_1 - \tilde{I}_1$，则

$$\varepsilon_1 = -10\varepsilon_0$$

完全类似的推理，我们有

$$\varepsilon_{n+1} = -10\varepsilon_n = (-10)^2\varepsilon_{n-1} = \cdots = (-10)^{n+1}\varepsilon_0$$

即初始误差 ε_0 被逐次放大，乃至于最后淹没真解，这就是问题的症结所在.在选择数值方法时，应该不使用类似于(3.1)这样的递推公式.

习　题

1.序列 $\{y_n\}$ 满足递推关系

$$y_{n+1} = 10y_{n-1}$$

若 $y_0=\sqrt{2}\approx 1.41$（三位有效数字），计算 y_{10}时误差有多大？

2. $f(x)=\ln(x-\sqrt{x^2-1})$，求 $f(30)$的值，若开平方用 6 位函数表，求对数时误差有多大？若改用另一等价公式

$$\ln(x-\sqrt{x^2-1}) = -\ln(x+\sqrt{x^2-1})$$

计算，求对数时误差有多大？

3.已知三角形面积 $S=\frac{1}{2}ab\sin C$，其中 C 为 a、b 两边的夹角.用弧度度量且 $0<C<\frac{\pi}{2}$.若测量 a、b、C 时误差分别为 Δa、Δb、ΔC.证明面积的误差 ΔS 满足

$$\left|\frac{\Delta S}{S}\right| \leqslant \left|\frac{\Delta a}{a}\right| + \left|\frac{\Delta b}{b}\right| + \left|\frac{\Delta C}{C}\right|$$

4.设计一算法，使计算两复数相乘时仅用三次乘法.

5.对于下列各项运算，如何避免有效数字严重丢失？

①e^x-e^{-x}　　　x 在 0 附近

②$\sin x-\cos x$　　　x 在$\frac{\pi}{4}$附近

③$1-\cos x$　　　x 在 0 附近

④$(\sqrt{1+x^2}-\sqrt{1-x^2})^{-1}$　　　x 在 0 附近

6. $f(x)=\sqrt{x}$，用近似值$\tilde{x}$代替 x，$x=\tilde{x}+\varepsilon$，$f(x)$用 $f(\tilde{x})$代替时误差是多少？

7.假如有一种算法求$\sqrt{a}$可得到 6 位有效数字，为了使$\sqrt{\pi}$有 4 位有效数字，π 应取几位有效数字？

第二章　线性方程组的直接解法

§2.1　引　　言

在科技、工程、医学、经济等各个领域中，很多问题常常归结为解线性方程组.有些问题的数学模型虽不直接表现为求解线性方程组，但其数值解法中却需将该问题“离散化”或“线性化”为线性方程组.例如电学中的网络问题，经济学中的投入产出问题，用最小二乘法求实验数据的曲线拟合问题，工程中的三次样条函数的插值问题，用迭代法解非线性方程组的问题，用差分法或者有限元法解微分方程问题等都导致求解线性代数方程组.

n 阶线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \tag{1.1}$$

其中系数 $a_{ij}(i,j=1,2,\cdots,n)$ 和右端项 $b_i(i=1,2,\cdots,n)$ 均为实数，且 b_i 不全为零，方程组(1.1)可简记为矩阵形式

$$Ax = b \tag{1.2}$$

此时 A 是一个 $n\times n$ 方阵，x 和 b 是 n 维列向量.

关于线性方程组的解法一般分为两类：

1.直接法　即经过有限次的算术运算，可求得(1.1)的精确解(假定计算中没有舍入误差)的方法。如线性代数中的克拉默算法就是一种直接法，但该方法用于高阶方程组时计算量太大而不实用.实用的直接法中具有代表性的算法是高斯(Gauss)消去法，其它算法大都是它的变形.这类方法是解具有稠密矩阵或非结构矩阵(零元分布无规律)方程组的有效方法.

2.迭代法　就是用某种极限过程去逐步逼近线性方程组的精确解的方法.它将(1.1)变形为某种迭代公式，给出初始解 $x^{(0)}$，用迭代公式得到近似解的序列 $\{x^{(k)}\}$，$k=0,1,2,\cdots$，在一定的条件下 $x^{(k)}\rightarrow x^*$(精确解).迭代法具有需要计算机的存贮单元较少，程序设计简单，原始系数矩阵在计算过程中始终不变等优点，但显然存在一个收敛条件和收敛速度问题.迭代法是解大型稀

疏矩阵方程组的有效方法.

本章主要介绍求解线性方程组的直接法.

§2.2 高斯消去法

高斯消去法是一种古老的方法，基于高斯消去法的基本思想而改进、变形得到的主元素消去法、三角分解法仍是目前计算机上常用的有效算法.

2.2.1 高斯消去法的基本思想

例 1 解方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 & (2.1) \\ 4x_2 - x_3 = 5 & (2.2) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (2.3) \end{cases}$$

下述过程实际是将我们中学学过的消元法标准化.

第一步 将方程(2.1)乘上 -2 加到方程(2.3)上去，消去(2.3)中的未知数 x_1，得到

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 & (2.1) \\ 4x_2 - x_3 = 5 & (2.2) \\ -4x_2 - x_3 = -11 & (2.4) \end{cases}$$

第二步 将方程(2.2)加到方程(2.4)上去，消去方程(2.4)中的未知数 x_2，得到与原方程组等价的三角形方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 & (2.1) \\ 4x_2 - x_3 = 5 & (2.2) \\ -2x_3 = -6 & (2.5) \end{cases}$$

第三步 回代：解(2.5)得 x_3，将 x_3 代入(2.2)得 x_2，将 x_2、x_3 代入(2.1)得 x_1，从而求得到方程组的解

$$x^* = (1,2,3)^{\mathrm{T}}$$

上述消元过程相当于对增广矩阵 $[A \mid b]$ 作行变换，用 r_i 表示增广矩阵 $[A|b]$ 的第 i 行

$$[A \mid b] = \left[\begin{array}{ccc:c} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & -1 & 5 \\ 2 & -2 & 1 & 1 \end{array}\right] \xrightarrow{-2\times r_1 + r_3 \to r_3} \left[\begin{array}{ccc:c} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & -1 & 5 \\ 0 & -4 & -1 & -11 \end{array}\right]$$

$$\xrightarrow{r_2 + r_3 \to r_3} \left[\begin{array}{ccc:c} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & -1 & 5 \\ 0 & 0 & -2 & -6 \end{array}\right]$$

由此看出,用消去法解方程组的基本思想是设法消去方程组的系数矩阵 A 的主对角线下的元素,而将 $Ax=b$ 化为等价的上三角形方程组,然后再通过回代过程便可获得方程组的解.这种求解线性代数方程组的方法,往往称之为高斯消去法,其实我国早在公元 250 年就有这种思想.

2.2.2 高斯消去法计算公式

下面我们来讨论一般的 n 阶方程的高斯消去法.

记 $Ax=b$ 为 $A^{(1)}x=b^{(1)}$, $A^{(1)}$和 $b^{(1)}$的元素分别记为 $a_{ij}^{(1)}$和 $b_i^{(1)}$, $i,j=1,2,\cdots,n$.

第一次消元　设 $a_{11}^{(1)}\neq 0$,将增广矩阵的第 i 行减去第 1 行的 $m_{i1}=a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}(i=2,\cdots,n)$倍,目的是将增广矩阵的第一列内除第一个元素不变外,其余全部消为零.得到 $A^{(2)}x=b^{(2)}$,即

$$[A^{(1)}\mid b^{(1)}]=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{bmatrix} \xrightarrow[i=2,3,\cdots,n]{-m_{i1}\times r_1+r_i\to r_i} \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{bmatrix}=[A^{(2)}\mid b^{(2)}]$$

其中

$$\begin{aligned} &m_{i1}=\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, && i=2,3,\cdots,n \\ &a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-m_{i1}a_{1j}^{(1)}, && i,j=2,3,\cdots,n \\ &a_{i1}^{(2)}=0, && i=2,3,\cdots,n \\ &b_i^{(2)}=b_i^{(1)}-m_{i1}b_1^{(1)}, && i=2,3,\cdots,n \end{aligned}$$

第 k 次消元$(2\leqslant k\leqslant n-1)$　设第 $k-1$ 次消元已完成,且 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$,此时增广矩阵如下:

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

类似于第 $k-1$ 次消元,但只改变矩阵$[A^{(k)}\mid b^{(k)}]$的第 $k+1$ 行至第 n 行,方法是将矩阵$[A^{(k)}\mid b^{(k)}]$的第 k 行的 $-m_{ik}=-\dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}(i=k+1,\cdots,n)$倍加到第 i 行,目的是将该矩阵第 k 列中$a_{kk}^{(k)}$以下的元素全部消为零,而 $a_{kk}^{(k)}$及