

高等学校试用教材

物探数据处理的 数 学 方 法

下 册

长春地质学院 谢 靖

地 质 出 版 社

高等学校试用教材

物探数据处理的数学方法

下 册

长春地质学院 谢 靖

地质出版社

物探数据处理的数学方法

下册

长春地质学院 谢 睦

责任编辑 何宝侃

*
地质部教育司教材室编辑

地质出版社出版

(北京西四)

沧州地区印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行·各地新华书店经售

开本: 850×11681/32印张: 711/16字数: 202,000

1981年7月北京第一版·1981年7月沧州第一次印刷

印数1—4,620册·定价: 1.20元

统一书号: 15038·教122

目 录

第一章 线性方程组的直接解法	1
§ 1·1 高斯主元素消去法	2
§ 1·2 矩阵的LU分解及其应用	11
§ 1·3 对称正定矩阵的乔累斯基 (Cholesky) 分解	20
§ 1·4* 豪斯霍德尔 (Householder) 方法	23
§ 1·5 求解求逆并行法	31
§ 1·6 求对称矩阵特征值的雅可比方法	36
§ 1·7 计算特征值的Q R方法	43
§ 1·8* 向量和矩阵的范数	45
§ 1·9* 误差分析	53
第二章 解线性方程组的迭代法	60
§ 2·1 同步迭代法 (简单迭代法)	60
§ 2·2 异步迭代法 (高斯—塞得尔迭代法)	66
§ 2·3 超松弛迭代法	68
§ 2·4* 距离空间及其不动点原理	69
§ 2·5* 迭代法的收敛性	73
第三章 数值逼近	85
§ 3·1 平方逼近与拟合	86
§ 3·2* 切比雪夫多项式及平方逼近	88
§ 3·3* 弗尔塞广义正交多项式	97
§ 3·4 数据的平滑	101
§ 3·5 拉格朗日插值多项式	104
§ 3·6 牛顿插值多项式	107
§ 3·7 样条 (spline) 插值函数	111
§ 3·8 数值微分和积分	119

第四章 常微分方程的数值解	134
§ 4·1 边值问题的差分法	134
§ 4·2 初值问题的数值解法	142
第五章 解偏微分方程的差分方法	153
§ 5·1 调和方程第一边值问题的差分方法	153
§ 5·2 调和方程第三边值问题的差分方程	157
§ 5·3 波动方程混合问题的差分解法	160
§ 5·4 热传导方程的差分解法	165
§ 5·5* 波场延拓的差分方法	174
第六章 最优化方法	182
§ 6·1 最优化问题的例	182
§ 6·2 基本概念和基本理论	186
§ 6·3 直接搜索法	193
§ 6·4* 矛盾方程组的求解问题（线性最小二乘方参数 估计问题）	204
§ 6·5 多元函数最优化的间接方法	210
§ 6·6 非线性最小二乘方参数估计问题	215
§ 6·7* 非线性方程组的解法	224
参考文献	234
习题	235

$$\int_0^\infty f(x) \frac{e^{-tx}}{x} dx = \int_0^{\frac{\pi}{2}} f(cx) dx$$

1

$$\Rightarrow \int_0^\infty \frac{e^{-tx}}{x} dx = \frac{\pi}{2}$$

第一章 线性方程组的直接解法

在本章和第二章里，我们将叙述线性方程组的求解问题。这是一个重要而又基本的问题。很多类型的数值计算问题，如函数逼近，常、偏微分方程的数值解，积分方程的数值解等问题，最后都要归结为这个问题。在物探数据处理中，解线性方程组也是最基本的计算，例如位场延拓，重磁解释中的线性反演问题，最优化方法中的许多具体计算也都要归结为这个问题。解线性方程组的方法可分为两类，一类称为直接解法，另一类称为迭代法。所谓直接解法就是如果所有算术运算都是精确的，则通过有限次运算进行消元后，就可以求得问题的精确解的方法。迭代法必须经过无限次运算（极限运算），才能求得问题的精确解。本章只讲常用的直接解法，迭代法将在下一章再讲。

设有如下的线性方程组

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ \cdots &\quad \cdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n &= b_m \end{aligned} \quad (1 \cdot 1)$$

把它写成矩阵和向量的形式则有

$$AX = b \quad (1 \cdot 1')$$

这里 A 是 (1·1) 的系数矩阵，它是一个 $m \times n$ 矩阵， b 是以 (1·1') 的右端项 b_1, b_2, \dots, b_m 为分量的 m 维列向量， X 是以未知数 x_1, x_2, \dots, x_n 为分量的 n 维列向量。

在~~代数~~代数中知道，若方程组 (1·1) 的系数矩阵 A 的秩和 (1·1) 的增广矩阵的秩相等，则 (1·1) 是相容方程组，当 A 的秩小于 (1·1) 的增广矩阵的秩时，(1·1) 是不相容的，这时 (1·1) 称为矛盾方程组。关于矛盾方程组的问题，将在第三章再

讲。在本章和下一章里，我们总假定方程组是相容的，并设 $m = n$ ，这时 A 是 $n \times n$ 方阵，并且 A 的行列式 $\det A \neq 0$ 。由熟知的克莱姆法则可得到(1·1)的解

$$x_i = \frac{\Delta_i}{\Delta} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (1 \cdot 2)$$

式中 $\Delta = \det A$ ， Δ_i 是以(1·1)的右端的列向量 b 来替换 Δ 中的第 i 列后所得到的行列式。

克莱姆法则对 n 很大时是不实用的。在近代的大型计算中， n 往往是几百或几千的大数，由于一个 n 阶行列式展开后有 $n!$ 项，而每项都是 n 个因子的乘积，若用(1·2)来计算(1·1)的解，则需计算 $n+1$ 个 n 阶行列式，对于这样的 n ，计算量是大得惊人的。所以我们在以下介绍一些在应用上实际可行的方法。

§ 1·1 高斯主元消去法

高斯主元消去法（以下简称主元消去法）就是一种有效的直接方法。为此，我们先在下面介绍。

一、高斯消去法

现在考虑方程组(1·1)的一个特例，即当 $i > j$ 时， $a_{ij} = 0$ ($i, j = 1, 2, \dots, n$) 的情形。这时(1·1)有如下形式：

$$\left. \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots \cdots \cdots \cdots \\ a_{nn}x_n = b_n \end{array} \right\} \quad (1 \cdot 3)$$

其系数矩阵

$$A = \left| \begin{array}{cccc} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & & \cdots & \\ a_{nn} \\ 0 \end{array} \right| \quad (1 \cdot 3')$$

称为上三角阵。(1·3)也称为上三角方程组。这种方程组很容

易求解的，只要从(1·3)的最后一个方程中解出 x_n ，代入前一个方程中去，就可解出 x_{n-1} ，这样，把所求得的未知数逐个代入前一方程，就可以求得 x_{n-2}, \dots, x_2, x_1 了。我们把这样逐步代回去的办法叫做“回代”，对于上三角方程组(1·3)，只需通过回代就可以求解。因此，对于一般情形的方程组(1·1)，怎样把它化为上三角方程组(1·3)就是本章的主要内容。

1. 高斯消去法的计算过程

现在以三阶线性方程组为例来阐明高斯消去法的计算过程和计算公式。

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= b_1 & (1) \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 &= b_2 & (2) \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 &= b_3 & (3) \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} (1) \\ (2) \\ (3) \end{array} \right\} (1·4)$$

我们用熟知的消去法：

首先把(1)作为保留方程，用它消去(2)、(3)中的 x_1 ，为此，作如下运算

$$\begin{aligned} (2) - (1) \times \frac{a_{21}}{a_{11}} &\quad \left(a_{22} - \frac{a_{21}a_{12}}{a_{11}} \right) x_2 + \left(a_{23} - \frac{a_{21}a_{13}}{a_{11}} \right) x_3 = b_2 - \frac{a_{21}b_1}{a_{11}} \\ (3) - (1) \times \frac{a_{31}}{a_{11}} &\quad \left(a_{32} - \frac{a_{31}a_{12}}{a_{11}} \right) x_2 + \left(a_{33} - \frac{a_{31}a_{13}}{a_{11}} \right) x_3 = b_3 - \frac{a_{31}b_1}{a_{11}} \end{aligned}$$

把这两个方程和保留方程(1)联合起来，并引进符号

$$l_{1i} = \frac{a_{i1}}{a_{11}} \quad (i = 2, 3) \quad (a)$$

$$\left. \begin{aligned} a_{22}^{(1)} &= a_{22} - l_{21}a_{12}; & a_{23}^{(1)} &= a_{23} - l_{21}a_{13}; & b_2^{(1)} &= b_2 - l_{21}b_1 \\ a_{32}^{(1)} &= a_{32} - l_{31}a_{12}; & a_{33}^{(1)} &= a_{33} - l_{31}a_{13}; & b_3^{(1)} &= b_3 - l_{31}b_1 \end{aligned} \right\} (b)$$

于是得到经第一步消元后(1·4)的同解方程组

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= b_1 & (1') \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 &= b_2^{(1)} & (2') \\ a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 &= b_3^{(1)} & (3') \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} (1') \\ (2') \\ (3') \end{array} \right\} \quad (1 \cdot 4')$$

第二步消元只需在 (2')，(3') 两个方程中进行。把 (2') 作为保留方程，用它来消去 (3') 中的 x_2 ，为此作运算

$$(3') - (2') \times \frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \\ (a_{33}^{(1)} - \frac{a_{32}^{(1)}a_{23}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}) x_3 = b_3^{(1)} - \frac{a_{32}^{(1)}b_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$$

引进符号

$$l_{12} = \frac{a_{12}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \quad (i=3) \quad (c)$$

$$a_{33}^{(2)} = a_{33}^{(1)} - l_{32}a_{23}^{(1)}, \quad b_3^{(2)} = b_3^{(1)} - l_{32}b_2^{(1)} \quad (d)$$

于是 (3') 就化为

$$a_{33}^{(2)}x_3 = b_3^{(2)}$$

最后就得到 (1·4) 的同解方程组

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= b_1 & (1'') \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 &= b_2^{(1)} & (2'') \\ a_{33}^{(2)}x_3 &= b_3^{(2)} & (3'') \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} (1'') \\ (2'') \\ (3'') \end{array} \right\} \quad (1 \cdot 4'')$$

由此可见，一个三元线性方程组经过两步消元后，就化为上三角方程组了。在消元时，首先以第一个方程为保留方程，消去其余方程中的 x_1 ，得到 (1·4) 的同解方程组 (1·4')，然后以 (1·4') 的第二个方程为保留方程，消去 (1·4') 的第三个方程中的 x_2 ，得到 (1·4) 的同解方程组 (1·4'')。

2. 高斯消去法的计算公式

以上方法不难推广到一般情形，方程组 (1·1) 经过第 K 步消元后得到的同解方程组为

$$\left. \begin{aligned}
 & a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1k}x_k + a_{1k+1}x_{k+1} + \cdots \\
 & + a_{1n}x_n = b_1 \\
 & a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2k}^{(1)}x_k + a_{2k+1}^{(1)}x_{k+1} + \cdots \\
 & + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\
 & \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \\
 & a_{kk}^{(k-1)}x_k + a_{k+1}^{(k-1)}x_{k+1} + \cdots \\
 & + a_{kn}^{(k-1)}x_n = b_k^{(k-1)} \\
 & a_{k+1,k+1}^{(k)}x_{k+1} + \cdots + a_{k+1,n}^{(k)}x_n \\
 & = b_{k+1}^{(k)} \\
 & \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \\
 & a_{nn}^{(k)}x_n = b_n^{(k)}
 \end{aligned} \right\} \quad (1.5)$$

其中

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - l_{ik}a_{kj}^{(k-1)} \quad (1.6)$$

$$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - l_{ik}b_j^{(k-1)} \quad (1.7)$$

$$(k=1, 2, \dots, n-1; i, j = k+1, k+2, \dots, n)$$

$$l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \quad \left(\begin{array}{l} k=1, 2, \dots, n-1 \\ i=k+1, k+2, \dots, n \end{array} \right) \quad (1.8)$$

经过 $n-1$ 步消元后，(1.1) 化为上三角方程组

$$\begin{aligned}
 & a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\
 & a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\
 & \cdots \cdots \cdots \cdots \\
 & a_{nn}^{(n-1)}x_n = b_n^{(n-1)}
 \end{aligned} \quad (1.9)$$

经过回代得到方程组(1.1)的解 x_1, x_2, \dots, x_n 的公式

$$\left\{ \begin{aligned}
 & x_k = \left((b_k^{(k-1)} - \sum_{j=k+1}^n a_{kj}^{(k-1)}x_j) / a_{kk}^{(k-1)} \right) \\
 & (k=1, 2, \dots, n-1; a_{kk} = a_{kk}) \\
 & x_n = \frac{b_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}}
 \end{aligned} \right. \quad (1.10)$$

以上的系数公式 (1.6), (1.7), (1.8) 必须在 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$ 时才能得到。也就是说，要进行第 k 步消元，必须在 $k-1$ 步消元

后的第 k 个方程中的第一个系数 $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$, 否则, 按自然顺序的消元过程到此即告中断。这时我们须要在尚未消元的后 $n-k$ 个方程中任挑一个 x_k 的系数不为零的方程和第 k 个方程交换位置, 把它作为保留方程, 即可继续进行消元了。

二、主元消去法

如果在各步消元时, 计算都是精确的 (不存在舍入误差), 则所求得的解是精确的。如在计算中进行了舍入, 则我们得到的解是近似的。当计算中微小的舍入误差积累起来, 导致了解的显著偏差时, 我们说这样的计算是“数值不稳定”的, 否则, 我们说它是“数值稳定”的。关于计算方法和方程组本身对解的影响, 以后还要分析, 现在举一实例来说明采用不同的方法计算时对解的影响。

1. 对一个实例的分析

例 1 用高斯消去法解方程组

$$\begin{cases} 0.0001x_1 + 8x_2 = 2.6664 \\ 42x_1 + 1200x_2 = 405.9576 \end{cases} \quad (1) \quad (2)$$

解 这是最简单的消元问题。用公式 (1·8)、(1·6)、(1·7) 可计算出

$$l_{21} = \frac{42}{0.0001}$$

$$a_{22}^{(1)} = 1200 - \frac{42}{0.0001} \times 8 = -3358800$$

$$b_{2}^{(1)} = 405.9576 - \frac{42}{0.0001} \times 2.6664 = -1119482.042.$$

于是, 消元后的同解方程组为

$$0.0001x_1 + 8x_2 = 2.6664$$

$$3358800x_2 = 1119482.042$$

由回代得到

$$\begin{cases} x_2 = 0.3333 \\ x_1 = 0 \end{cases}$$

但若把原方程组交换一下次序有

$$\left\{ \begin{array}{l} 42x_1 + 1200x_2 = 405.9576 \\ 0.0001x_1 + 8x_2 = 2.6664 \end{array} \right. \quad (1')$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 42x_1 + 1200x_2 = 405.9576 \\ 0.0001x_1 + 8x_2 = 2.6664 \end{array} \right. \quad (2')$$

以(1')为保留方程来消元，这时

$$l_{21} = \frac{0.0001}{42}$$

$$a_{22}^{(1)} = 8 - \frac{0.0001}{42} \times 1200 = 7.9971$$

$$b_{22}^{(1)} = 2.6664 - \frac{0.0001}{42} \times 405.9576 = 2.6654$$

于是得到同解方程组为

$$42x_1 + 1200x_2 = 405.9576$$

$$7.9971x_2 = 2.6654$$

经回代得

$$\left\{ \begin{array}{l} x_2 = 0.3333 \\ x_1 = 0.1428 \end{array} \right.$$

很容易验证，它们正是这方程组的精确解。为什么用后一种方式消元，得到的解是精确的而用前一种方式消元，所得到的解和精确解比较，差别如此大呢？原来在第一种方式消元中，我们用了0.0001作除数，把方程的系数扩大了一万倍，从而在计算数值时，把运算过程中的舍入误差也放大了一万倍，以致这个解和精确解比起来，已经面目全非了。

2. 按列选主元的方法。

由上例可见，为了避免解的误差过大，我们在消元时，尽量不用较小的数作除数。这里所介绍的按列选主元的方法，就是根据这个道理。第一步消元时在(1·1)的系数矩阵第一列中选取绝对值最大的元素所在的方程作为保留方程，置于第一个方程的位置上，把这个系数称为主元（具体说它是第一步消元时的主元），用它消去其余方程中的 x_1 。第二步消元时，在第一步消元后所得的方程组中除第一个方程外，在其它所有方程中来找 x_2 的

系数绝对值最大的方程作为保留方程，把它交换到第二个方程的位置，以它作为第二步消元的主元来消去除前两个方程以外所有方程中的 x_2 ，一般说来，第 k 步消元时，在第 $k-1$ 步消元后的方程中第 k 个方程以后的所有方程中选取 x_k 的系数绝对值最大的那个方程作为第 k 个保留方程，用它消去第 k 个方程以后所有方程中的 x_k 。这样，在消元完毕以后，(1·1)化为上三角方程组，且其主对角线上的元素都是相应各步的主元，这就是按列选主元的消去法。总之，它与按自然顺序的消去法所不同的就在于每步选定主元之后，要进行适当的行交换。

除了按列选元的方法以外，还有按总体选主元的方法，它不仅要进行适当的行交换，还要进行适当的列交换，这里就不介绍了。

现在把按列选主元的消去法过程归纳如下

1) 选主元，求 r 使

$$|a_{r,k}^{(k-1)}| = \max_{i \geq k} |a_{i,k}^{(k-1)}|, (k = 1, 2, \dots, n-1) \quad (1 \cdot 11)$$

当 $k=1$ 时， $a_{1,1}^{(0)} = a_{1,1}$ 。

2) 计算

$$l_{ik} = \frac{a_{i,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}} \quad (k = 1, 2, \dots, n-1) \quad (1 \cdot 12)$$

3) 计算

$$a_{i,i}^{(k)} = a_{i,i}^{(k-1)} - l_{ik} a_{k,i}^{(k-1)}, \quad (k = 1, 2, \dots, n-1) \quad (1 \cdot 13)$$

4) 计算

$$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - l_{ik} b_k^{(k-1)}, \quad (k = 1, 2, \dots, n-1) \quad (1 \cdot 14)$$

5) 回代公式

$$\begin{aligned} x_k &= \left[b^{(k-1)} - \sum_{i=k+1}^n a^{(k-1)}_{ki} x_i \right] / a^{(k-1)}_{kk} \\ x_n &= \frac{b^{(n-1)}}{a^{(n-1)}} \end{aligned} \quad (1 \cdot 15)$$

其中规定 $\sum_{n=1}^n = 1$ 。

例 2 用主元消去法求解四元线性方程组的解

$$\left(\begin{array}{cccc} 5 & -4 & 1 & 0 \\ -4 & 6 & -4 & 1 \\ 1 & -4 & 6 & -4 \\ 0 & 1 & -4 & 5 \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right)$$

解 首先选出第一步的主元 $a_{11} = 5$ ，这里 $k = 1$ ， $r = 1$ ，
不需做行交换，由 (1·12) 计算出

$$l_{21} = -\frac{4}{5}, \quad l_{31} = -\frac{1}{5}, \quad l_{41} = 0$$

并由此及 (1·13) 计算出

$$a_{22}^{(1)} = -\frac{14}{5}, \quad a_{23}^{(1)} = -\frac{16}{5}, \quad a_{24}^{(1)} = 1,$$

$$a_{32}^{(1)} = -\frac{16}{5}, \quad a_{33}^{(1)} = -\frac{29}{5}, \quad a_{34}^{(1)} = -4,$$

$$a_{42}^{(1)} = 1, \quad a_{43}^{(1)} = -4, \quad a_{44}^{(1)} = 5.$$

于是得到第一步消元后的系数矩阵

$$\left(\begin{array}{cccc} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 \\ 0 & \frac{16}{5} & \frac{29}{5} & -4 \\ 0 & 1 & -4 & 5 \end{array} \right)$$

再由 (1·14) 得到

$$b_{\frac{1}{2}}^{(1)} = 1, \quad b_{\frac{1}{3}}^{(1)} = 0, \quad b_{\frac{1}{4}}^{(1)} = 0$$

这就得到了经第一步消元后的同解方程组

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 5 & -4 & 1 & 0 & x_1 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 & x_2 \\ 0 & -\frac{16}{5} & \frac{29}{5} & -4 & x_3 \\ 0 & 1 & -4 & 5 & x_4 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right)$$

在以上矩阵的第二列中应取 $-\frac{16}{5}$ 为主元. 为此, 交换组中第二

第三两方程:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 5 & -4 & 1 & 0 & x_1 \\ 0 & -\frac{16}{5} & \frac{29}{5} & -4 & x_2 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 & x_3 \\ 0 & 1 & -4 & 5 & x_4 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right)$$

就 $k = 2$ 应用公式(1·12)、(1·13)、(1·14)得到

$$l_{32} = -\frac{7}{8}, \quad l_{42} = -\frac{5}{16}$$

$$a_{33}^{(2)} = \frac{15}{8}, \quad a_{34}^{(2)} = -\frac{5}{2}, \quad b_{\frac{3}{3}}^{(2)} = 1$$

$$a_{43}^{(2)} = -\frac{35}{16}, \quad a_{44}^{(2)} = \frac{5}{4}, \quad b_{\frac{4}{4}}^{(2)} = 0$$

这样, 就得到第二步消元后的同解方程组

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 5 & -4 & 1 & 0 & x_1 \\ 0 & -\frac{16}{5} & \frac{29}{5} & -4 & x_2 \\ 0 & 0 & \frac{15}{8} & -\frac{5}{2} & x_3 \\ 0 & 0 & -\frac{35}{16} & \frac{15}{4} & x_4 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right)$$

交换第三第四两方程

$$\left(\begin{array}{cccc} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{14}{5} & \frac{29}{5} & -4 \\ 0 & 0 & -\frac{35}{16} & \frac{15}{4} \\ 0 & 0 & \frac{15}{8} & -\frac{5}{2} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{array} \right)$$

就 $k = 3$ 应用公式(1·12)、(1·13)、(1·14)得到

$$l_{43} = -\frac{6}{7}, \quad a_{44}^{(3)} = \frac{5}{7}, \quad b_{44}^{(3)} = 1$$

最后就得到与原方程同解的上三角方程组

$$\left(\begin{array}{cccc} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{16}{5} & \frac{29}{5} & -4 \\ 0 & 0 & -\frac{35}{16} & \frac{15}{4} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{5}{7} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{array} \right)$$

由回代公式(1·15)得到

$$x_4 = \frac{7}{5}, \quad x_3 = \frac{12}{5}, \quad x_2 = \frac{13}{5}, \quad x_1 = \frac{8}{5}.$$

§ 1·2 矩阵的LU分解及其应用

一、矩阵的LU分解

现在把高斯消去法的过程用矩阵运算表示出来。这样，不但使这个方法的形式紧凑，易于掌握，并且这更有利揭露消去法的实质。现仍从 $n = 3$ 的情形开始，我们用 A^0 表示方程组(1·4)的系数矩阵 A ，用 $A^{(1)}$ 表示第一步消元以后的系数矩阵。用 $A^{(2)}$ 表示第二步消元后的系数矩阵。不难验证，第一步消元相当

于用下三角矩阵

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 \\ -l_{31} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

左乘 $A^{(0)}$, 即

$$L_1 A = A^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} \end{pmatrix}$$

第二步消元, 相当于用下三角矩阵

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -l_{32} & 1 \end{pmatrix}$$

左乘 $A^{(1)}$, 即

$$L_2 A^{(1)} = A^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} \end{pmatrix}$$

把这两步结合起来有

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 \\ -l_{31} & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} \end{pmatrix}$$

乘积矩阵

$$L_2 L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 \\ l_{32}l_{21} - l_{31} & -l_{32} & 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 \\ l_{32}l_{21} - l_{31} & -l_{32} & 1 \end{pmatrix}$$