

工科硕士研究生数学用书

GONGKE SHUOSHI
YANJIUSHENG
SHUXUE YONGSHU

数值分析

杨凤翔 陆君良 编

天津大学出版社

丁福初 丁福初 丁福初

丁福初 丁福初
丁福初 丁福初
丁福初 丁福初

数值分析

丁福初 丁福初 丁福初

丁福初 丁福初 丁福初

工科硕士研究生数学用书

数值分析

杨凤翔 陆君良 编

天津大学出版社

内 容 提 要

本书介绍有关数值计算方面的基本知识,侧重于计算机上常用数值方法的分析与运用。全书包括线性代数方程组解法与矩阵特征值问题、插值法与函数逼近、数值微分与积分、常微分方程数值解法等内容,选材精练,叙述简明。书中配有适量例题与习题。

本书可作为理工科(非计算数学)各专业研究生及大学本科高年级学生的教科书或数学参考书,也可供工程技术人员参考。

数 值 分 析

杨凤翔 陆君良 编

天津大学出版社出版
(天津大学校内)

天津大学印刷厂印刷
新华书店天津发行所发行

开本: 787×1092 毫米 1/16 印张 13¹/₂ 字数 321 千字

1985 年 9 月第一版 1985 年 9 月第一次印刷

印数: 1—8000

统一书号: 13401·2 定价 3.50 元

前 言

本书是根据编者多年来在天津大学为研究生讲授数值分析课所用讲义整理、修改写成的。旨在向读者介绍有关数值计算方面的基本理论与方法。选材力求精练，侧重于计算机上常用算法的描述与运用，以培养读者实际从事数值计算工作的能力。对于必要的理论推导与分析，力求清晰、简明。全书包括线性代数方程组解法与矩阵特征值问题，插值法与函数逼近，数值微分与积分，常微分方程数值解等内容，分八章予以介绍。各章选配了适量的例题与习题，并在书后附有答案。

本书可作为理工科（非计算数学）各专业研究生、大学本科高年级学生的计算数学教材或教学参考书，也可供工程师及从事数值计算工作的工程技术人员参考。

承蒙刘冠副教授审阅了全部书稿并提出了宝贵意见。此外，在编写过程中参考了国内外一些教科书、文献资料，在此向审稿人及参考资料的编（著）者一并致谢。

由于水平有限，书中不妥或谬误之处难免，恳切希望读者批评指正。

编者

1985年3月于天津大学

目 录

绪 论	(1)
第一章 解线性代数方程组的直接方法	(5)
§ 1.1 消去法	(6)
1.1 三角形方程组的解法 1.2 消去法 1.3 消去法与矩阵的约化	
1.4 消去法的条件与计算量 1.5 主元素法	
§ 1.2 矩阵的三角分解	(16)
2.1 矩阵的三角分解 2.2 直接三角分解法 2.3 列主元三角分解法	
§ 1.3 平方根法	(22)
3.1 对称正定矩阵的三角分解 3.2 平方根法	
§ 1.4 追赶法	(28)
§ 1.5 行列式的计算与求逆矩阵的方法	(27)
5.1 行列式的计算 5.2 求逆矩阵	
§ 1.6 方程组的状态与误差分析	(29)
6.1 方程组的状态, 条件数 6.2 舍入误差的分析	
习 题	(32)
第二章 解线性代数方程组的迭代法	(34)
§ 2.1 雅可比迭代法与塞德尔迭代法	(34)
1.1 雅可比迭代法 1.2 塞德尔迭代法 1.3 迭代公式的矩阵形式	
§ 2.2 迭代的收敛性	(38)
2.1 几个收敛定理 2.2 雅可比迭代与塞德尔迭代收敛的充分条件	
§ 2.3 松弛迭代法	(43)
习 题	(45)
第三章 矩阵特征值问题	(47)
§ 3.1 幂法与反幂法	(47)
1.1 幂法 1.2 瑞利商及原点平移加速 1.3 降阶法 1.4 反幂法	
§ 3.2 平面旋转与镜象变换	(56)
2.1 平面旋转变换 2.2 镜象变换 2.3 化矩阵为准三角形	
§ 3.3 雅可比方法	(61)
3.1 经典雅可比方法 3.2 阈雅可比方法	
§ 3.4 QR方法	(66)

4.1 矩阵的正交三角分解	4.2 QR方法	
§ 3.5 特征值的敏感性		(69)
习 题		(70)
第四章 代数插值		(72)
§ 4.1 拉格朗日插值		(73)
1.1 拉格朗日插值多项式	1.2 线性插值与抛物线插值	1.3 插值余项
§ 4.2 差商与差分		(76)
2.1 差商及其性质	2.2 差分及其性质	
§ 4.3 牛顿插值公式		(81)
3.1 牛顿基本插值公式	3.2 等距节点的牛顿插值公式	
§ 4.4 埃尔米特插值		(84)
§ 4.5 分段插值		(88)
5.1 分段线性插值	5.2 分段三次埃尔米特插值	5.3 分段插值函数的收敛性
§ 4.6 样条插值		(90)
习 题		(94)
第五章 函数逼近		(96)
§ 5.1 正交多项式		(96)
1.1 函数的正交性	1.2 常用的正交多项式	
§ 5.2 最佳一致逼近多项式		(102)
2.1 最佳一致逼近概念	2.2 最佳一致逼近多项式的存在性	
2.3 最佳一致逼近多项式的唯一性	2.4 一次最佳一致逼近	
2.5 切比雪夫多项式在函数逼近中的应用		
§ 5.3 最佳平方逼近		(113)
3.1 函数的最佳平方逼近	3.2 用正交多项式作函数的平方逼近	
3.3 函数展开为切比雪夫级数		
§ 5.4 曲线拟合的最小二乘法		(119)
习 题		(122)
第六章 数值微分与数值积分		(126)
§ 6.1 数值微分		(126)
§ 6.2 牛顿—柯特斯公式		(128)
2.1 插值型求积公式	2.2 求积公式的代数精度	2.3 牛顿—柯特斯公式
2.4 牛顿—柯特斯公式的余项	2.5 复化求积法	
§ 6.3 龙贝格算法		(137)
3.1 李查逊外推加速法	3.2 龙贝格算法	

§ 6.4 高斯型求积公式	(140)
4.1 不带权的高斯型求积公式 4.2 高斯型求积公式的收敛性和稳定性 4.3 带权的高斯型求积公式	
习 题	(150)
第七章 常微分方程初值问题数值解法	(152)
§ 7.1 尤拉方法	(152)
1.1 尤拉公式 1.2 梯形公式 1.3 截断误差 1.4 预测——校正格式	
§ 7.2 龙格——库塔方法	(158)
2.1 台劳展开方法 2.2 二阶龙格——库塔公式 2.3 四阶龙格——库塔公式 2.4 步长的选择	
§ 7.3 收敛性与稳定性	(162)
3.1 收敛性 3.2 稳定性	
§ 7.4 线性多步法	(167)
4.1 亚当姆斯外推法 4.2 亚当姆斯内插法 4.3 一般线性多步法的构成 4.4 哈明方法	
§ 7.5 一阶方程组与高阶方程情形	(174)
5.1 一阶方程组情形 5.2 高阶方程情形	
习 题	(177)
第八章 常微分方程边值问题数值解法	(179)
§ 8.1 试射法	(179)
§ 8.2 差分方法	(180)
2.1 差分方程的建立 2.2 差分方程的可解性及求解方法	
2.3 差分方法的收敛性 2.4 关于第三边值问题 2.5 非线性方程情形	
习 题	(186)
附 录	
范 数	(188)
§ 1 范数概念	(188)
1.1 线性空间的范数 1.2 线性空间的内积	
§ 2 向量的范数	(191)
§ 3 矩阵的范数	(195)
3.1 矩阵范数 3.2 从属于向量范数的矩阵范数 3.3 矩阵的 1——范数 3.4 矩阵的 ∞ ——范数 3.5 矩阵的 2——范数 3.6 矩阵的 F ——范数 3.7 矩阵的谱半径	
习 题	(203)
习题解答	(204)

绪 论

运用数学方法解决科学研究或工程技术中的实际问题,通常总是首先建立描述问题的数学模型,经必要的推理和计算,最终以某种形式(解析的、数值的或其他别的形式)给出模型问题的解,再回到实践中去加以检验。不过在一般情况下,由于数学方法本身的局限性、计算工具的限制或其他方面的原因,试图获得模型问题的准确解,往往十分困难甚至是不可能的,因此研究模型问题的近似解法是非常有意义的。数值分析就是专门研究数值方法的一个学科,尤其注重于在电子计算机上行之有效的一些数值方法的研究。包括各种数值方法的推导与描述,收敛性与数值稳定性的研究以及误差分析等等。既重视与方法有关的理论,又重视方法的实际运用,内容相当丰富。

所谓数值方法,泛指这样一类方法——根据一组原始数据(如模型的某些参数),按照确定的运算规则(由模型问题决定的,包括某些逻辑运算)进行计算,最后给出结果(模型问题的数值形式的解)。例如,对于微分方程初值问题

$$\begin{cases} y' = f(x, y), & x > a, \\ y(a) = s. \end{cases} \quad (1)$$

只在极其特殊的情形,才能求得其准确解 $y(x)$ (解析形式的解)。一般情况下,可以运用数值方法求解,

首先,取定一系列等距节点

$$x_n = a + nh, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

其中 $h > 0$, 称为步长。

其次,将初值问题(1)离散化,为此在台劳(Taylor)展开式

$$y(x_{n+1}) = y(x_n) + hy'(x_n) + O(h^2) \quad (2)$$

中略去余项 $O(h^2)$, 注意 $y'(x_n) = f(x_n, y(x_n))$, 并以 y_n 、 y_{n+1} 分别代替 $y(x_n)$ 及 $y(x_{n+1})$, 则得到在节点上逼近于微分方程的差分方程

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n). \quad (3)$$

最后,求解差分方程(3),即根据原始数据 $y_0 = s$,按照(3)确定的运算规则,逐次求出

$$y_1, y_2, \dots, y_n, \dots,$$

这就是该数值方法给出的数值结果。最终我们没有获得初值问题(1)的准确解 $y(x)$,而是给出了 $y(x)$ 在一系列节点处的近似值

$$y_n \approx y(x_n), \quad n = 1, 2, \dots,$$

称其为初值问题(1)的数值解。

大家一定注意了,由于微分方程初值问题(1)是一个连续型问题,而我们运用了所谓的“离散化”方法,将其化为一个离散型问题——差分方程(3),这对于处理连续型问题是很关键的一步。

此外,数值方法的收敛性是我们十分关心的问题,即随着步长 $h \rightarrow 0$ (此时应有 $n \rightarrow \infty$),数值解 y_n 是否收敛于准确解 $y(x_n)$,只有收敛的方法才能给出可靠的数值解,不收敛的方

法毫无实用价值。

再者，数值方法的稳定性问题也是不可忽视的，因为数值解 $y_1, y_2, \dots, y_n, \dots$ ，是逐步求出的，前一步数值解的误差必然要影响到后一步数值解，这就是误差的传播。能够控制误差传播的方法，称为稳定的数值方法。如果随着 n 的增大，误差的累积愈来愈大失去控制，则称数值方法是不稳定的。只有稳定的数值方法才可能给出可靠计算结果，不稳定的数值方法同样毫无实用价值。下面举一个数值例子：

对于 $n = 0, 1, 2, \dots, 8$ 计算定积分

$$y_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx \quad (4)$$

的值。由于

$$\begin{aligned} y_n + 5y_{n-1} &= \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1}}{x+5} dx \\ &= \int_0^1 x^{n-1} dx = \frac{1}{n}, \end{aligned}$$

所以有递推公式

$$y_n = \frac{1}{n} - 5y_{n-1}, \quad (5)$$

初值

$$y_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln 6 - \ln 5 \approx 0.182.$$

利用(5)可以逐次求得

$$y_1 = 1 - 5y_0 \approx 0.09,$$

$$y_2 = \frac{1}{2} - 5y_1 \approx 0.05,$$

$$y_3 = \frac{1}{3} - 5y_2 \approx 0.083,$$

$$y_4 = \frac{1}{4} - 5y_3 \approx -0.165,$$

$$y_5 = \frac{1}{5} - 5y_4 \approx 1.025,$$

.....

注意在 $[0, 1]$ 上被积函数 $\frac{x^n}{x+5} \geq 0$ (仅当 $x = 0$ 时为零)，且当 $m > n$ 时 $\frac{x^m}{x+5} \geq \frac{x^n}{x+5}$ (仅当 $x = 0$ 时，等号成立)，所以有

$$y_0 > y_1 > y_2 > \dots > y_8 > 0.$$

上述计算结果显然不可靠，但并不是计算错误所致，而是误差传播造成的。由递推公式(5)看出， y_{n-1} 的误差扩大到5倍传给 y_n ，因而初值 y_0 的误差对以后各步计算结果的影响随

着 n 的增大愈来愈严重。此外，还应注意计算 y_3 、 y_4 时又引进了新的误差，这就造成计算结果严重失真。

如果改用递推公式

$$y_{n-1} = \frac{1}{5n} - \frac{1}{5} y_n, \quad (6)$$

情况就不同了。我们看到 y_n 的误差减小到 $\frac{1}{5}$ 后传给 y_{n-1} ，因而初值的误差对以后各步计算结果的影响是随着 n 的增大愈来愈小的。

初值可以这样确定，因随 n 增大而 y_n 的值迅速减小，故不妨假设 $y_9 = y_{10}$ ，于是由

$$y_9 = \frac{1}{50} - \frac{1}{5} y_{10},$$

可求得 $y_9 \approx 0.017$ ，按 (6) 可逐次求得

$$\begin{array}{ll} y_8 \approx 0.019, & y_7 \approx 0.021, \\ y_6 \approx 0.024, & y_5 \approx 0.028, \\ y_4 \approx 0.034, & y_3 \approx 0.043, \\ y_2 \approx 0.058, & y_1 \approx 0.088, \\ y_0 \approx 0.182, & \end{array}$$

计算结果相当可靠。

比较以上两个计算方案，前者误差迅速增长，而后者误差不增长，即方法是稳定的。在实际应用中，应避免采用不稳定的数值方法。

研究数值方法，必须注重误差分析，分析误差的来源、误差的传播情况以及对计算结果给出合理的误差估计。误差的来源是多方面的，从实际问题建立起来的数学模型总不会完全符合客观情况，数学模型与被描述的问题之间的差异称为模型误差。研究数值方法并不涉及模型误差，总认为模型是正确无误的。

数值方法的建立，通常总要经过一些简化（近似）的手续。如前面关于求解初值问题 (1) 的例子中，经过离散化的手续在 (2) 式中又略去余项 $O(h^2)$ ，从而得到差分方程 (8)，我们称 $O(h^2)$ 为截断误差，截断误差是方法固有的，因而又称方法误差。很显然，它必然影响数值解的精度。我们不妨再举一个数值例子：

计算积分

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx,$$

我们利用Taylor级数

$$\frac{\sin x}{x} = 1 - \frac{x^2}{3!} + \frac{x^4}{5!} - \frac{x^6}{7!} + \dots,$$

逐项积分，则

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx = 1 - \frac{1}{8} \frac{1}{3!} + \frac{1}{5} \frac{1}{5!} - \frac{1}{7} \frac{1}{7!} + \dots$$

显然欲求准确解，必须经过无限多步运算，这实际上是办不到的，我们只能经有限步运算给出近似解。譬如，取前三项之和 S_3 作为积分的近似值，则

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \approx S_3 = 1 - \frac{1}{3} \frac{1}{3!} + \frac{1}{5} \frac{1}{5!}.$$

此时误差

$$R_3 = -\frac{1}{7} \frac{1}{7!} + \frac{1}{9} \frac{1}{9!} \dots,$$

就是截断误差，且有

$$|R_3| < \frac{1}{7} \frac{1}{7!} < 10^{-4}.$$

如果在计算 S_3 时，每一项都按“四舍五入”的原则取到小数点后第四位，则

$$S_3 \approx 1.0000 - 0.0556 + 0.0017 = 0.9461.$$

在计算过程中，参与运算的数据或计算结果，因舍入造成的误差，称为舍入误差。上述计算过程中，每个数据的舍入误差皆不超过 5×10^{-5} ，于是计算结果的舍入误差不超过 $5 \times 10^{-5} \times 4 = 2 \times 10^{-4}$ 。那么，积分的近似值

$$\int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx \approx 0.9461$$

的总误差（包括截断误差和舍入误差）不超过 3×10^{-4} ，即

$$\left| \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx - 0.9461 \right| \leq 3 \times 10^{-4}.$$

截断误差是方法决定的，舍入误差既与方法有关，又依赖于计算工具。大家知道，计算机数系只包含了具有一定数位的有限个数，因此象无理数或某些有理数，计算机是无法识别也是不能进行运算的，这样的数只能由计算机数系中与之最相近的数代替，于是就产生舍入误差。计算所依据的初始数据本身就可能带有舍入误差（或称初始误差），而几乎每步运算又要引进新的舍入误差，再加上截断误差，这些误差都要影响最终的计算结果。研究数值方法，误差分析是重要的，但往往是十分困难的，特别是关于舍入误差的分析，更是如此。

任何数值方法只有运用它在计算机上很快地算出可靠结果时，才显示出它的实用价值。评价一个数值方法的好坏，应考虑以下几点原则：①计算量小，这不仅计算速度快而且误差累积较小。②计算过程简单、有规律，这便于编制计算机程序。③需要存贮的原始数据及需要记录的中间结果较少，这样可以少占用计算机的存贮单元和工作单元。④具有较好的数值稳定性，这可以控制误差的传播，给出可靠的计算结果。当然方法好坏总是相对的，上述各点常不能兼备。在实际运用时，应根据对计算结果的精度要求及计算机的速度、容量等条件选择较为适宜的方法。

数值分析是数学的一个分支，它属于应用数学的范畴，它所研究的各种数值方法在各个学科领域有着广泛地应用。尽管某些传统的数值方法，很早就出现了，但是数值分析作为一个学科，它的发展与计算机科学的发展是分不开的。特别是计算机作为当代最先进的计算工具，被广泛地用于工业、农业、国防以及科学技术各个领域，促使数值分析这个学科在科学计算和科学管理方面发挥更大的作用。可以想象今后数值分析这个学科不论是在深度还是广度方面将会更加迅速地发展。

第一章 解线性代数方程组的直接方法

求解线性代数方程组，是数值分析的一个重要课题。科学研究与工程技术中的一些实际问题，常常直接或间接地归结为求解一个线性代数方程组。因此，研究线性代数方程组的解法，特别是一些便于在电子计算机上实现的方法，是十分必要的。

设有 $n \times n$ 方程组

[illegible]

或写成矩阵形式

$$Ax = b. \quad (0.2)$$

其中 $A = [a_{ij}]_{n \times n}$, 是由系数组成的 n 阶矩阵, 称为系数矩阵; $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^T$ 是由右端项组成的 n 维列向量, 称为右端向量; $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 是由未知元组成的 n 维列向量。

大家知道, 当且仅当 $\det A \neq 0$ ($\det A$ 表示矩阵 A 的行列式), 即 A 非奇异时, 方程组 (0.1) 有而且仅有一组解。克莱姆 (Cramer) 规则给出了解的表达式

$$x_j = \frac{\det A_j}{\det A}, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (0.3)$$

其中 A_j 是 A 的第 j 列 $(a_{1j}, a_{2j}, \dots, a_{nj})^T$ 换成右端向量 b 而成的 n 阶矩阵。

按照克莱姆规则, 求解方程组 (0.1), 需要计算 $n+1$ 个行列式, 而每个行列式需要进行 $(n-1) \cdot n!$ 次乘法运算和 $n!-1$ 次加法运算。最后还要进行 n 次除法运算, 才最终求得 (0.1) 的解。克莱姆规则尽管在理论上是完善的, 但是仅就上述如此大的计算量来说, 也是不实用的。

目前，计算机上常用的解线性代数方程组的方法很多，大致可以分为两大类：一类是直接法；另一类是迭代法（迭代法见第二章）。所谓直接法，是指经有限步运算（如果这些运算都是准确进行的话），就可以求得方程组的准确解的一类方法。本章介绍的一些方法，都属于直接方法。

本章将介绍求解线性代数方程组的高斯 (Gauss) 消去法, 以及基于矩阵三角分解的其他方法。由于求逆矩阵、计算行列式与解方程组在方法是相通的, 因此顺便简单地介绍一下求逆矩阵和计算行列式的问题。另外, 虽然理论上用直接法经有限步运算可以求得方程组的准确解, 但是实际在计算机上进行运算, 不可能保证每步运算都是准确的, 因而往往求得的只是方程组的近似解 (以下称为计算解)。这就要求我们对误差进行分析, 所以本章最后还要讨论一下误差分析的问题。

§1.1 消 去 法

1.1 三角形方程组的解法

如下形式的方程组

$$\begin{cases} u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n = b_1 \\ \quad u_{22}x_2 + \cdots + u_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \quad \quad \cdots \cdots \cdots \\ \quad \quad \quad \quad u_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (1.1)$$

或

$$\begin{cases} l_{11}x_1 & = b_1 \\ l_{21}x_1 + l_{22}x_2 & = b_2 \\ \quad \quad \quad \cdots \cdots \cdots \\ l_{n1}x_1 + l_{n2}x_2 + \cdots + l_{nn}x_n = b_n, \end{cases} \quad (1.2)$$

称为三角形方程组。若写成矩阵形式，即

$$Ux = b \text{ 或 } Lx = b,$$

其中系数矩阵 $U = [u_{ij}]_{n \times n}$ 是上三角矩阵，即当 $i > j$ 时， $u_{ij} = 0$ 。系数矩阵 $L = [l_{ij}]_{n \times n}$ 是下三角矩阵，即当 $i < j$ 时， $l_{ij} = 0$ 。

三角形方程组很容易求解，下面以解方程组 (1.1) 为例。

显然，(1.1) 有且仅有一组解的充分必要条件是系数矩阵的对角元 $u_{11}, u_{22}, \dots, u_{nn}$ 都不为零。求解过程可以从最后一个方程入手，采取逆推的方式进行。由第 n 个方程解得

$$x_n = \frac{b_n}{u_{nn}},$$

代入第 $n-1$ 个方程，进而得

$$x_{n-1} = \frac{b_{n-1} - u_{n-1,n}x_n}{u_{n-1,n-1}},$$

如此继续……。假设已求得了 $x_n, x_{n-1}, \dots, x_{i+1}$ ，则 x_i 的计算公式为

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{k=i+1}^n u_{ik}x_k}{u_{ii}} \quad (*) \quad (1.3)$$

$$i = n, n-1, \dots, 2, 1.$$

求解一个 $n \times n$ 的三角形方程组，需要进行 $\frac{n(n-1)}{2}$ 次乘法运算及相同次数的加（减）

(*)：对于和式 $\sum_{k=i+1}^n$ ()，当 $i \geq n$ 时应理解为零，下同。

法运算, 还要进行 n 次除法运算, 由于在计算机上, 加(减)法运算远远快于乘、除法运算, 又当 n 较大时, $n^2 \gg n$, 因而通常用 $\frac{n^2}{2}$ 次乘(除)法运算标志求解 $n \times n$ 三角形方程组的计算量。

1.2 消去法

求解三角形方程组, 方法简单而且计算量又较小, 因此一个很自然的想法是先将给定的方程组化为与其等价(即指同解)的三角形方程组, 然后再求解。下面介绍的高斯(Gauss)消去法就是基于这样一种想法, 我们以 4×4 方程组为例, 叙述高斯消去法(以下简称消去法)的基本步骤。

为便于统一计算公式, 将 4×4 方程组写成如下形式

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + a_{14}^{(1)}x_4 = a_{15}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)}x_1 + a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + a_{24}^{(1)}x_4 = a_{25}^{(1)} \\ a_{31}^{(1)}x_1 + a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 + a_{34}^{(1)}x_4 = a_{35}^{(1)} \\ a_{41}^{(1)}x_1 + a_{42}^{(1)}x_2 + a_{43}^{(1)}x_3 + a_{44}^{(1)}x_4 = a_{45}^{(1)} \end{cases} \quad (1.4)$$

假设系数矩阵非奇异, 从而有且仅有一组解。

首先, 若 $a_{11}^{(1)} \neq 0$, (1.4) 中第 1 个方程保持不变, 将其余方程中 x_1 的系数化为零。为此, 记

$$l_{21} = \frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad l_{31} = \frac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad l_{41} = \frac{a_{41}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}},$$

以 $-l_{21}$ 遍乘第 1 个方程各项, 然后加到第 2 个方程上去; 以 $-l_{31}$ 遍乘第 1 个方程各项, 然后加到第 3 个方程上去; 以 $-l_{41}$ 遍乘第 1 个方程各项, 然后加到第 4 个方程上去, 结果就得到与 (1.4) 等价的方程组

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + a_{14}^{(1)}x_4 = a_{15}^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + a_{24}^{(2)}x_4 = a_{25}^{(2)} \\ a_{32}^{(2)}x_2 + a_{33}^{(2)}x_3 + a_{34}^{(2)}x_4 = a_{35}^{(2)} \\ a_{42}^{(2)}x_2 + a_{43}^{(2)}x_3 + a_{44}^{(2)}x_4 = a_{45}^{(2)} \end{cases} \quad (1.5)$$

其中

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - l_{i1}a_{1j}^{(1)}, \quad j = 2, 3, 4, 5, \\ i = 2, 3, 4.$$

其次, 若 $a_{22}^{(2)} \neq 0$, (1.5) 中第 1、2 个方程保持不变, 将其余方程中 x_2 的系数化为零。为此, 记

$$l_{32} = \frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}, \quad l_{42} = \frac{a_{42}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}},$$

以 $-l_{32}$ 遍乘第 2 个方程各项, 然后加到第 3 个方程上去; 以 $-l_{42}$ 遍乘第 2 个方程各项, 然后加到第 4 个方程上去, 结果得到与 (1.5) 等价的方程组

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + a_{14}^{(1)}x_4 = a_{15}^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + a_{24}^{(2)}x_4 = a_{25}^{(2)} \\ a_{33}^{(3)}x_3 + a_{34}^{(3)}x_4 = a_{35}^{(3)} \\ a_{43}^{(3)}x_3 + a_{44}^{(3)}x_4 = a_{45}^{(3)}, \end{cases} \quad (1.6)$$

其中

$$a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - l_{i2}a_{2j}^{(2)}, \quad j = 3, 4, 5, \quad i = 3, 4.$$

再者, 若 $a_{33}^{(3)} \neq 0$, (1.6) 中第 1, 2, 3 三个方程保持不变, 将第 4 个方程中 x_3 的系数化为零。为此, 记

$$l_{43} = \frac{a_{43}^{(3)}}{a_{33}^{(3)}},$$

以 $-l_{43}$ 遍乘第 3 个方程各项, 然后加到第 4 个方程上去, 结果就得与 (1.6) 等价的方程组

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + a_{14}^{(1)}x_4 = a_{15}^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + a_{24}^{(2)}x_4 = a_{25}^{(2)} \\ a_{33}^{(3)}x_3 + a_{34}^{(3)}x_4 = a_{35}^{(3)} \\ a_{44}^{(4)}x_4 = a_{45}^{(4)}. \end{cases} \quad (1.7)$$

其中

$$a_{4j}^{(4)} = a_{4j}^{(3)} - l_{43}a_{3j}^{(3)}, \quad j = 4, 5.$$

(1.7) 是一个三角形方程组, 最后解此方程组, 得

$$\begin{cases} x_4 = \frac{a_{45}^{(4)}}{a_{44}^{(4)}} \\ x_3 = \frac{a_{35}^{(3)} - a_{34}^{(3)}x_4}{a_{33}^{(3)}} \\ x_2 = \frac{a_{25}^{(2)} - a_{23}^{(2)}x_3 - a_{24}^{(2)}x_4}{a_{22}^{(2)}} \\ x_1 = \frac{a_{15}^{(1)} - a_{12}^{(1)}x_2 - a_{13}^{(1)}x_3 - a_{14}^{(1)}x_4}{a_{11}^{(1)}}. \end{cases} \quad (1.8)$$

由于 (1.7) 与 (1.4) 等价, 因而 (1.8) 就是 (1.4) 的解。将方程组 (1.4) 化为三角形方程组 (1.7) 的过程, 称为消元过程, 以上共进行了三步消元, $a_{11}^{(1)}$, $a_{22}^{(2)}$, $a_{33}^{(3)}$ 分别称为各步消元的主元素, l_{21} , l_{31} , l_{41} , l_{32} , l_{42} , l_{43} 分别称为各步消元的乘数。求解三角形方程组 (1.7) 的过程, 称为回代过程, 消元过程与回代过程一起, 组成消去法的全过

程。

1.3 消去法与矩阵的约化

由于方程组的解只依赖于系数及右端项, 求解过程也只是对系数及右端项做一些必要的运算, 因此不难想象, 若将系数及右端项从方程中分离出来, 那么求解过程(此处指消元过程)完全可以用矩阵来描述。下面针对一般的 $n \times n$ 方程组, 从矩阵变换和运算的角度, 对消去法做进一步分析, 并同时给出一般的计算公式。

为了便于统一计算公式, 将 $n \times n$ 方程组(0.1)改写为

$$A^{(1)}x = b^{(1)}, \quad (1.9)$$

其中系数矩阵 $A^{(1)} = [a_{ij}^{(1)}]_{n \times n}$, 右端向量 $b^{(1)} = (a_{1n+1}^{(1)}, a_{2n+1}^{(1)}, \dots, a_{nn+1}^{(1)})^T$ 。仍然假设 $A^{(1)}$ 非奇异。此外, 称矩阵

$$[A^{(1)}, b^{(1)}] = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} & a_{1n+1}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} & a_{2n+1}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} & a_{nn+1}^{(1)} \end{bmatrix} \quad (1.10)$$

为(1.9)的增广矩阵。

我们用消去法解方程组(1.9), 假设已经完成了前 $k-1$ 步消元 ($1 \leq k < n$), 得到与(1.9)等价的方程组

$$A^{(k)}x = b^{(k)}, \quad (1.11)$$

其增广矩阵形如

$$[A^{(k)}, b^{(k)}] = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1k}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} & a_{1n+1}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2k}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} & a_{2n+1}^{(2)} \\ & & \ddots & & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} & a_{kn+1}^{(k)} \\ & & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & & a_{nn}^{(k)} & a_{nn+1}^{(k)} \end{bmatrix}. \quad (1.12)$$

当主元素 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 时, 进行第 k 步消元, 目的在于将方程组(1.11)的后 $n-k$ 个方程中 x_k 的系数化为零, 从而得到与(1.11)等价的方程组

$$A^{(k+1)}x = b^{(k+1)}. \quad (1.13)$$

从矩阵变换的角度讲, 这相当于将增广矩阵(1.12)中第 k 列的后 $n-k$ 个元素化为零。为此计算乘数

$$l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad i = k+1, k+2, \dots, n. \quad (1.14)$$

以 $-l_{ik}$ 乘(1.12)的第 k 行, 然后加到第 i 行上去 ($i = k+1, k+2, \dots, n$), 结果得到矩阵