

工程硕士研究生教材

工 程 数 学

(上册)

(数值分析与矩阵论)

同济大学应用数学系 编著

同济大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

工程数学. 上册/同济大学应用数学系编著. —上海:
同济大学出版社, 2002. 8

工程硕士研究生教材

ISBN 7-5608-2445-5

I. 工… II. 同… III. 工程数学—研究生—教材
IV. TB11

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 036287 号

工程硕士研究生教材

工程数学(上册)

(数值分析与矩阵论)

作 者 同济大学应用数学系

责任编辑 李炳钊 责任校对 郁 峰 装帧设计 李志云

出 版
发 行

同济大学出版社

(上海四平路 1239 号 邮编 200092 电话 021-65985622)

经 销

全国各地新华书店

印 刷

常熟市华顺印刷有限公司

开 本

787mm×960mm 1/16

印 张

20

字 数

400000

印 数

1—5200

版 次

2002 年 8 月第 1 版

2002 年 8 月第 1 次印刷

书 号

ISBN 7-5608-2445-5/O·213

定 价

27.00 元

前 言

培养工程硕士研究生是为适应我国经济建设中对应用型、复合型高层次工程技术和工程管理人才的需要所采取的一项重要举措。“工程数学”课程是工程硕士研究生培养中一门重要的基础课,它适应不同专业、不同学习内容的要求,以及在较少的学时内掌握其所学专业必须具备的数学基础这一实际情况,编写一本可以根据各专业实际情况进行教学的教材是十分必要的。

我们自 1998 年开始为工程硕士研究生讲授工程数学课程,针对实际情况编写了《工程数学》讲义,该讲义已经在工程硕士研究生工程数学课程的教学多次使用。根据近四年的使用情况,我们对原讲义进行了修改,形成了这本《工程数学》教材。

《工程数学》全书分上、下两册,上册由数值分析和矩阵论两部分组成;下册由数理统计和随机过程两部分组成。

本书为上册。数值分析部分内容有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、非线性方程的数值解法、插值与逼近、数值积分、常微分方程初值问题的数值解法等基本内容组成。矩阵部分内容有矩阵基础知识、线性空间与内积空间、线性变换、矩阵的标准型、矩阵函数、广义逆等基本内容组成。书中内容力求精简,系统性强,循序渐进,易于教学。

数值分析部分的第 1 章至第 4 章由黄自萍编写,第 5 章至第 8 章由沈剑华编写,吴雄华完成了矩阵论部分的编写。

本书在出版过程中,得到同济大学应用数学系领导和教师的大力支持,同济大学研究生院给予大力帮助,特此表示感谢。

由于编者水平有限,错误和不妥之处在所难免,恳请读者指正。

编 者

2002 年 1 月于同济大学

目 录

前言

第 I 部分 数值分析

第一章 绪论

§ 1.1	计算方法的意义	(3)
§ 1.2	误差及有关概念	(5)
§ 1.3	数值计算中必须注意的几个原则	(7)

第二章 解线性代数方程组的直接法

§ 2.1	Gauss 消去法	(10)
§ 2.2	矩阵的三角分解	(15)
§ 2.3	解三对角方程组的追赶法	(31)

第三章 解线性代数方程组的迭代法

§ 3.1	基本迭代法	(35)
§ 3.2	范数及方程组的性态、条件数	(41)
§ 3.3	收敛性分析	(46)
§ 3.4	共轭梯度法	(55)

第四章 矩阵的特征值和特征向量的计算

§ 4.1	引言	(61)
§ 4.2	乘幂法与反幂法	(62)
§ 4.3	Jacobi 方法	(69)
§ 4.4	QR 方法	(76)

第五章 非线性方程的数值解法

§ 5.1	二分法·····	(82)
§ 5.2	迭代法·····	(84)
§ 5.3	迭代法的收敛阶和加速收敛方法·····	(89)
§ 5.4	牛顿(Newton)迭代法 ·····	(92)
§ 5.5	弦截法·····	(96)

第六章 插值与逼近

§ 6.1	插值的基本概念·····	(99)
§ 6.2	拉格朗日(Lagrange)插值 ·····	(101)
§ 6.3	牛顿插值 ·····	(104)
§ 6.4	埃尔米特(Hermite)插值 ·····	(108)
§ 6.5	三次样条插值 ·····	(112)
§ 6.6	B-样条函数 ·····	(120)
§ 6.7	正交多项式 ·····	(123)
§ 6.8	最佳平方逼近 ·····	(129)
§ 6.9	曲线拟合的最小二乘法 ·····	(134)

第七章 数值积分

§ 7.1	数值积分概述 ·····	(139)
§ 7.2	牛顿-柯特斯(Newton-Cotes)求积公式 ·····	(141)
§ 7.3	自适应积分法 ·····	(148)
§ 7.4	龙贝格(Romberg)求积算法 ·····	(151)
§ 7.5	高斯(Gauss)求积方法 ·····	(156)

第八章 常微分方程初值问题的数值解法

§ 8.1	尤拉(Euler)方法 ·····	(165)
§ 8.2	龙格-库塔(Runge-Kutta)方法 ·····	(170)
§ 8.3	收敛性与稳定性 ·····	(178)

习题 I	(183)
习题 I 答案	(191)
参考书目 I	(196)

第 II 部分 矩阵论

第一章 矩阵基础知识

§ 1.1 基本概念	(199)
§ 1.2 矩阵的初等变换	(201)
§ 1.3 相似矩阵	(209)
§ 1.4 广义特征值	(211)

第二章 线性空间与内积空间

§ 2.1 线性空间的基本概念	(214)
§ 2.2 维数,基与坐标	(215)
§ 2.3 子空间的直和	(219)
§ 2.4 基变换与转移矩阵	(219)
§ 2.5 实内积空间	(221)
§ 2.6 正交子空间	(225)
§ 2.7 复内积空间	(228)
§ 2.8 正规阵	(230)

第三章 线性变换

§ 3.1 线性变换	(234)
§ 3.2 线性变换的矩阵表示	(235)
§ 3.3 线性变换的像和核	(237)
§ 3.4 正交变换	(239)

第四章 矩阵的标准型

§ 4.1 λ -阵的标准形	(241)
§ 4.2 Jordan 标准形	(246)

§ 4.3	最小多项式	(250)
-------	-------------	-------

第五章 矩阵函数

§ 5.1	λ -矩阵的极限,微分与积分	(253)
§ 5.2	矩阵的幂级数	(255)
§ 5.3	矩阵函数	(259)
§ 5.4	矩阵函数的应用	(267)

第六章 广义逆

§ 6.1	预备知识	(276)
§ 6.2	广义逆矩阵 A^+	(277)
§ 6.3	A^+ 的计算方法	(280)
§ 6.4	广义逆的应用	(283)

习题 II	(287)
-------------	-------

习题 II 答案	(299)
----------------	-------

参考书目 II	(309)
---------------	-------

第 I 部分 数值分析

数值分析是工程类型硕士生的一门应用性很强的重要基础课程. 通过本课程的学习, 学生要掌握数值分析的基本概念和基本理论, 并侧重于数值计算方法的应用. 通过本课程的学习, 学生应初步具有数值分析的思想和方法, 并学会用计算机解决科研和工程应用中的数值计算问题的能力.

数值分析是近代数学的一个重要分支, 它是计算机科学的重要内容, 当前, 由于科学技术的迅速发展和计算机的广泛应用, 使继实验方法、理论方法之后, 科学计算已成为科学研究的第三种方法, 学习和掌握计算机上常用的数值计算方法及有关的基础理论, 已成为现代科学教育的重要内容, 这方面的知识对于当代的工程硕士生来说, 是非常需要的.

本书是为工程类硕士生学习“工程数学”课程而编写的基础教材, 本部分共分八章, 内容主要包括: 线性代数方程组的数值解法, 矩阵的特征值和特征向量的计算, 非线性方程的数值解法, 插值与逼近, 数值积分与常微分方程初值问题的数值解法等计算机上常用的数值计算方法及有关的理论分析.

第一章 绪论

§ 1.1 计算方法的意义

随着现代科学技术的迅速发展,从实际问题中建立起来的数学模型越来越复杂,由于这些数学模型往往不能容易地求出精确解,于是人们就局限于讨论问题的特殊情形或简化了的模型,但这样做往往不能满足精度要求.因此,常用的处理方法就是对较少简化的数学模型运用数值计算方法在计算机上进行数值计算,计算时间的多少依赖于数值计算的计算量以及所用计算机的运行速度,而计算量的大小又依赖于所用的数值计算方法与需要达到的精度.因此,要更好更快地解决实际问题中的数学模型,必须提高人类的计算能力:即计算工具的性能与计算方法效率的总和,计算能力的提高有赖于双方,我们不但要改进计算机的硬件设备、提高计算机的运行速度,而且还必须提出具有高精度、低计算量的数值方法.对同一问题来讲,采用不同的数值计算方法,其计算工作量有时相差非常之大,譬如:对一个 n 阶的线代数方程组,当 $n=20$ 时,若用 Gramer 法则求解,其乘除法运算次数约需 9.7×10^{20} ,即使用每秒运算 1 亿次的计算机,也要算 30 多万年,而用 Gauss 消去法,大约只需 2660 次乘除法运算,并且, n 愈大,两种方法的计算时间相差就愈大,这个例子表明算法的好坏对计算能力的提高起着重要的作用.在 1955 年至 1975 年的 20 年间,计算机的计算速度提高了数千倍,而同一时间解决一定规模的椭圆型偏微分方程的数值计算方法的效率提高了约 100 万倍,所以,研究和选择好的计算方法是非常重要的.

由于我们讨论的数值计算方法是以计算机作为计算工具的,因此还必须考虑到有限字长给运算所带来的误差,若用计算机来解决一个实际问题,计算机算出的值与实际问题的值,往往存在着差异,两者之差称为误差,而引起误差的原因是多方面的.为了解决一个实际问题,首先必须对这个问题建立合理的数学模型,由于建模时要忽略某些次要因素,对原始问题进行近似,这个过程中产生的误差称之为模型误差,而数学模型中包含的若干参量往往是通过观测得到的,这种观测也难免产生误差,称它为观测误差,然后还要把数学模型运用数值计算方法转换成数值问题,这个过程引起的误差称为截断误差或方法误差,最后,用计算机对数值问题进行求解时,由于计算机的有限字长还会产生舍入误差,在上面的所有这些误差中,模型误差和观测误差是不属于本课程的讨论范围,本课程主要研究从数学模型到数值问题之间的误差,即方法误差.舍入误差也是我们要研究的.另外,数值计算方法的稳定与否还会影响到舍

入误差的增长. 我们可以来看这样的一个例子: 对 $n=0, 1, \dots, 8$, 计算积分

$$S_n = \int_0^1 \frac{x^n}{x+5} dx,$$

由于

$$S_n + 5S_{n-1} = \int_0^1 \frac{x^n + 5x^{n-1}}{x+5} dx = \int_0^1 x^{n-1} dx = \frac{1}{n}$$

$$S_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln 6 - \ln 5 = \ln(1.2)$$

若取 $S_0 = \ln(1.2) \approx 0.182$, 用公式

$$\bar{S}_n = \frac{1}{n} - 5\bar{S}_{n-1} \quad (n=1, 2, \dots, 8)$$

进行计算(精确到小数点后 3 位), 我们得到

$$\bar{S}_1 \approx 0.090, \quad \bar{S}_2 \approx 0.050, \quad \bar{S}_3 \approx 0.083, \quad \bar{S}_4 \approx -0.165,$$

$$\bar{S}_5 \approx 1.025, \quad \bar{S}_6 \approx -4.958, \quad \bar{S}_7 \approx 24.933, \quad \bar{S}_8 \approx -124.540,$$

若记 $\epsilon_n = S_n - \bar{S}$, 则

$$\epsilon_n = -5\epsilon_{n-1},$$

显然, 如果从 $\bar{S}_{n-1}$ 计算 $\bar{S}$, 误差将以每步 5 倍的速度增长, 这种计算是不稳定的, 反之, 如果从 $\bar{S}_n$ 计算 $\bar{S}_{n-1}$, 即

$$\bar{S}_{n-1} = \frac{1}{5n} - \frac{1}{5}\bar{S}_n \quad (n=8, 7, \dots, 1)$$

则误差的增长速度为每步 $\frac{1}{5}$ 倍, 即误差逐步减少, 计算稳定, 所以我们可以这样确定

$\bar{S}_n$, 设 $\bar{S}_8 \approx \bar{S}_9$, 从

$$\bar{S}_8 = \frac{1}{5 \times 9} - \frac{1}{5}\bar{S}_9$$

可得 $\bar{S}_8 \approx \bar{S}_9 \approx 0.019$, 再由逐次计算求得(精确到小数点后 3 位)

$$\bar{S}_7 \approx 0.021, \quad \bar{S}_6 \approx 0.024, \quad \bar{S}_5 \approx 0.028, \quad \bar{S}_4 \approx 0.034,$$

$$\bar{S}_3 \approx 0.043, \quad \bar{S}_2 \approx 0.058, \quad \bar{S}_1 \approx 0.088, \quad \bar{S}_0 \approx 0.182,$$

它与实际相似.

因此,在讨论数值计算方法时还必须考虑算法的稳定性,数值不稳定的算法是不能使用的.

§ 1.2 误差及有关概念

人们常用绝对误差、相对误差或有效数字来说明一个近似值的准确程度,这些概念在高等数学、物理以及力学等课程中早已接触过.由于它们在科学计算中的重要性,下面我们再对有关的概念作一回顾.

一、误差的来源

一个物理量的真实值和我们算出的值往往存在差异.它们之差称为误差,引起误差的原因是多方面的,从实际问题提出数学问题(即数学模型)时往往忽略了许多次要因素,因而即使数学问题能准确求解,也与实际问题的真解有所不同.它们之差称为模型误差.一般数学问题包含若干参量,它们的值往往通过观测得到,而观测难免不带误差.这种误差称为观测误差或数据误差、模型参量误差.一般数学问题难以求解,往往要通过近似替代,简化为较易求解的问题.简化引起的误差称为方法误差或截断误差.计算时只能对有限位数进行运算,从而往往会对数据进行舍入,此时产生的误差为舍入误差或计算误差.计算数学主要研究数值问题的数值解法,所以不讨论模型误差.

二、绝对误差与相对误差

确切地说,若 x 是真正值, $\bar{x}$ 是近似值,则称

$$\Delta x = E(x) = x - \bar{x}$$

为近似值 $\bar{x}$ 的绝对误差或简称误差.一般来说, Δx 的准确值很难求出,只能知道 $|\Delta x|$ 不超过某个数 ϵ , 即

$$|\Delta x| = |x - \bar{x}| \leq \epsilon$$

数 ϵ 称为 $\bar{x}$ 的绝对误差限,或简称误差限.有了误差限 ϵ ,就可知道真正值 x 的范围

$$\bar{x} - \epsilon \leq x \leq \bar{x} + \epsilon.$$

这范围有时也表示为

$$x = \bar{x} \pm \epsilon.$$

误差限的大小不能很好表示近似值的精确程度,例如测量真空中光速 c 的某一实验近似值 $\bar{c} = 299791.5 \text{ km/s}$, 误差限约为 0.9 km/s , 约为光速本身的 0.0003% , 显然, 这个测量是非常准确的. 如果测量运动员奔跑的速度, 误差限为 0.01 km/s , 即 10 m/s , 这与运动员真正奔跑的速度差不多, 显然这种测量标准是错误的, 为了较好地反映近似值的精确程度, 必须考虑误差与真正值的比值, 即相对误差.

若 x 是真正值, $\bar{x}$ 是近似值, 则称

$$\delta(x) = \Delta(x)/x = (x - \bar{x})/x$$

为近似值 $\bar{x}$ 的相对误差, 如果已知数 ϵ_r , 使

$$|\delta(x)| = |x - \bar{x}|/|x| < \epsilon_r,$$

则称 ϵ_r 为 $\bar{x}$ 的相对误差限. 实用中, 由于真正值 x 往往难以求出, 当 ϵ_r 很小时, 也取

$$\delta(x) = \Delta(x)/\bar{x}$$

三、准确位数与有效数字

大家知道, 当 x 有很多位数字时, 常常按照“四舍五入”原则取前几位数字作为 x 的近似值 $\bar{x}$. 例如, $x = \sqrt{2} = 1.41421356237\cdots$, 取前五位数字得

$$\bar{x} = 1.4142$$

其误差为 $0.00001356\cdots$, 误差限为 $0.00005 = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$. 此时, 称 $\bar{x}$ 准确到小数点后第四位, 并称由此算起的前五位数字 14142 为 $\bar{x}$ 的有效数字.

一般来说, 如果 $\bar{x}$ 的误差限界为 $\frac{1}{2} \times 10^{-n}$, 即

$$|x - \bar{x}| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-n}$$

则称 $\bar{x}$ 准确到小数点后第 n 位, 并称 $\bar{x}$ 的第一个非零数字到这一位的全部数字为 x 的有效数字, 此时, 若 $\bar{x}$ 的形式为

$$\pm x_1 x_2 \cdots x_m . \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n \cdots, x_1 \neq 0,$$

则 $\bar{x}$ 具有 $n+m$ 位有效数字, 若 $\bar{x}$ 的形式为

$$\pm 0.00 \cdots 0 \alpha_{m+1} \alpha_{m+2} \cdots \alpha_n \cdots, \alpha_{m+1} \neq 0,$$

则 $\bar{x}$ 具有 $n-m$ 位有效数字. 由此可见, 此时若 $\bar{x}$ 的形式为

$$\pm 10^m \times 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n, \quad \alpha_1 \neq 0, \quad (1-1)$$

则 $\bar{x}$ 具有 $n+m$ 位有效数字, 且 $\bar{x}$ 的相对误差满足

$$|\delta(x)| \leq \frac{\frac{1}{2} \times 10^{-n}}{10^m \times 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n} \leq \frac{1}{2\alpha_1} \times 10^{-(m+n-1)}$$

反过来, 若 $\bar{x}$ 中的相对误差限为

$$\frac{1}{2(\alpha_1+1)} \times 10^{-(m+n-1)} \quad (1-2)$$

且具有式(1-1)的形式, 则

$$|\Delta(x)| \leq \frac{10^m \times 0.\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n}{2(\alpha_1+1)} \times 10^{-(m+n-1)} \leq \frac{1}{2} \times 10^{-n}$$

即 $\bar{x}$ 至少准确到小数后 n 位, 至少具有 $n+m$ 位有效数字. 由此可知, 若 $\bar{x}$ 的相对误差限为 $\frac{1}{2} \times 10^{-(m+n)}$, 即比式(1-2)还小, 则 $\bar{x}$ 至少具有 $n+m$ 位有效数字.

§ 1.3 数值计算中必须注意的几个原则

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(也不必要)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该注意的几个问题.

一、相近两数应避免相减

在数值计算中, 两个相近的数作减法时有效数字会损失. 例如, 求:

$$y = \sqrt{x+1} - \sqrt{x} \quad (1-3)$$

之值, 当 $x=1000$ 时, 取 4 位有效数字计算得

$$\sqrt{x+1} = 31.64, \quad \sqrt{x} = 31.62$$

两者相减得

$$y=0.02,$$

这个结果只有一位有效数字,损失了三位有效数字,从而绝对误差和相对误差都变得很大,严重影响计算结果的精度,必须尽量避免出现这种运算,遇到这种运算时,最好是改变计算公式,防止这种情形的出现.

例如把公式(1-3)处理成

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

按此公式可求得 $y=0.01581$, 则 y 有三位有效数字,可见改变计算公式,可以避免两相近数相减引起的有效数字的损失,而得到较精确的结果.

类似地,由

$$\ln x - \ln y = \ln \frac{x}{y},$$

$$\sin(x+\epsilon) - x = 2\cos\left(x+\frac{\epsilon}{2}\right)\sin\frac{\epsilon}{2} \quad (\text{当 } \epsilon \text{ 很小时})$$

当 x 和 y 很接近时,采用等号右边的算法,有效数字就不损失.

二、绝对值太小的数不宜作除数

在用计算机作运算时,很小的数作除数会溢出停机,而且当很小的数稍有一点误差时,对计算结果影响很大.例如:

$$\frac{2.7182}{0.001} = 2718.2$$

如果分母变为 0.0011,也即分母只有 0.0001 的变化时,

$$\frac{2.7182}{0.0011} \approx 2471.1,$$

计算结果起了很大变化.因此,在计算中必须避免绝对值很小的数作除数.

三、要注意计算机字长有限等特点,采取相应的措施,以保证计算结果的准确性

由于计算机字长有限,绝对值相差很大的两个数进行加、减法运算时,绝对值较小的那个数往往被另一个数“吃掉”,不能发挥其作用,有时会严重影响计算结果的准确性.

例如,求 $x^2 + (\alpha + \beta)x + 10^9 = 0$ 的根,其中

$$\alpha = -10^9, \quad \beta = -1$$

根据韦达定理,方程有两个根:

$$x_1 = 10^9, \quad x_2 = 1$$

如果我们应用求根公式

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

编制程序,在能将规格化的数表示到小数点后八位的计算机上进行运算,则

$$-b = 10^9 + 1 = 0.1 \times 10^{10} = 0.000\,000\,000\,1 \times 10^9$$

由于第二项最后两位数“01”在计算机上表示不出来,故在计算机上运算(用记号 $\triangle$ 表示)时,

$$-b \triangleq 0.1 \times 10^{10} + 0.000\,000\,00 \times 10^{10}$$

$$\triangleq 0.1 \times 10^{10} \triangleq 10^9 \triangleq -\alpha$$

类似地可得

$$\sqrt{b^2 - 4ac} \triangleq |b| = 10^9$$

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \triangleq \frac{10^9 + 10^9}{2} \triangleq 10^9$$

$$x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \triangleq \frac{10^9 - 10^9}{2} \triangleq 0$$

显然,根 x_2 严重失真. 引起这种错误的主要原因是在计算机上进行加、减法运算时要对阶,使得绝对值大的数 α “吃掉”了绝对值小的数 β ,当然,只要采取适当措施,还是能够得到较好的结果的. 如在本例中,由于根 x_1 是可靠的,可以利用两根与系数的关系式

$$x_1 x_2 = \frac{c}{a}$$

来计算 x_2 , 此时,有

$$x_2 = \frac{c}{\alpha x_1} \triangleq \frac{10^9}{1 \times 10^9} = 1$$

第二章 解线性代数方程组的直接法

在自然科学与社会科学的研究中,常常需要求解线性代数方程组,例如:实验数据的曲线、曲面的拟合,用差分法或有限元法解偏微分方程等都要用到线性代数方程组的求解.由于从不同的问题导出的线代数方程组的系数矩阵不同,比如,矩阵阶数的大小,矩阵中的非零元稠密情况等,系数矩阵可以粗略地分为低阶稠密矩阵和大型稀疏矩阵.关于线性代数方程组的求解,主要分为两大类:直接法和迭代法.在理论上,用直接法可以通过有限步的计算得到精确解,而迭代法是通过逐次迭代逼近来求得近似解.实际上,由于舍入误差的影响,由直接法得到的解也不精确.因此,在某些需要高精度解的问题中,常常把由直接法得到的解同时再运用迭代法迭代若干步;以提高解的精度,一般地说,对于低价稠密的线性代数方程组以及大型带形方程组的求解,采用直接法比较有效,而对于大型稀疏(非带形)方程组,则用迭代法求解比较有利.当然,是采用直接法,还是采用迭代法,或是直接法与迭代法交替使用,要根据具体情况确定.

本章主要讨论一些最基本的直接法,并在此基础上讨论它的变形情况,对于求解线性代数方程组的迭代法,我们将在下一章中介绍.

§ 2.1 Gauss 消去法

考虑 n 阶线代数方程组

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

采用矩阵和向量记号,我们可以把式(2-1)改写成

$$Ax = b \quad (2-2)$$

其中

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

现在,我们给出用 Gauss 消去法求式(2-2)解的计算过程.

算法 2.1 用 Gauss 消去法求解线性代数方程组(2-2).

我们先分别记矩阵 $A^{(1)} = A$, 向量 $b^{(1)} = b$, 它们的元素分别为

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} \quad (i, j = 1, 2, \dots, n),$$

$$b_i^{(1)} = b_i \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

1) 消元过程

第一步:若 $a_{11}^{(1)} \neq 0$, 可对 $i = 2, 3, \dots, n$ 进行如下计算, 用 $m_{i1} = -a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)}$ 乘方程式(2-2)两边的第一行加到第 i 行中去, 得到

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix} \quad (2-3)$$

这里

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} + m_{i1} \cdot a_{1j}^{(1)}, \quad (i, j = 2, 3, \dots, n),$$

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} + m_{i1} \cdot b_1^{(1)}, \quad (i = 2, 3, \dots, n).$$

第二步:若 $a_{22}^{(2)} \neq 0$, 可对 $i = 3, \dots, n$ 进行如下计算, 用 $m_{i2} = -a_{i2}^{(2)} / a_{22}^{(2)}$ 乘方程组(2-3)两边的第二行加到第 i 行去, 得到

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(3)} \\ \vdots \\ b_n^{(3)} \end{bmatrix}$$

这里