1.传统高斯消元法 Gauss Elimination

1. 下面是应用于以下简单（但典型的）平方系统的高斯消去的详细描述：
2. 在每一步中，策略是专注于一个位置，称为主元位置，并使用三个基本操作来消除这个位置以下的所有项。主元位置中的系数称为主元元素（主元），而主元所在的方程则称为主元方程。
3. 只有非零数才被允许作为主元。如果一个主元位置的系数为0，则主元方程与主元方程下面的一个方程交换，从而产生一个非零主元。除非为0，否则取第一个方程的第一个系数作为第一个主元。

$$
\begin{array}{rcrcrcr}
2x & + & y & + & z & = & 1 \\
6x & + & 2y & + & z & = & -1 \\
-2x & + & 2y & + & z & = & 7
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{rcrcrcr}
\textcircled{2}x & + & y & + & z & = & 1, \\
6x & + & 2y & + & z & = & -1, \\
-2x & + & 2y & + & z & = & 7.
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{rcrcrcr}
\textcircled{2}x & + & y & + & z & = & 1 \\
 & - & y & - & 2z & = & -4 \\
 & & 3y & + & 2z & = & 8
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{rcrcrcrl}
2x & + & y & + & z & = & 1, & \\
 & & -\textcircled{1}y & - & 2z & = & -4, & \\
 & & & - & 4z & = & -4 & (E_3 + 3E_2)
\end{array}
$$

- [ ] 回代求值
- [ ] Gaussian elimination 复杂度

2.高斯-约旦消元法

区分高斯-约丹法与标准高斯消去法的两个特征如下。

1.在每个步骤中，枢轴元素都被强制设置为1

2.在每一步中，高于轴的所有项以及低于轴的所有项都将被消除。

$$
\left(\begin{array}{cccc|c}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n
\end{array}\right)
\rightarrow
\left(\begin{array}{cccc|c}
1 & 0 & \cdots & 0 & s_1 \\
0 & 1 & \cdots & 0 & s_2 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & 1 & s_n
\end{array}\right)
$$

$$
\begin{array}{rcrcrcr}
2x_1 & + & 2x_2 & + & 6x_3 & = & 4 \\
2x_1 & + & x_2 & + & 7x_3 & = & 6 \\
-2x_1 & - & 6x_2 & - & 7x_3 & = & -1
\end{array}
$$

$$
\left(\begin{array}{rrr|r}
\textcircled{2} & 2 & 6 & 4 \\
2 & 1 & 7 & 6 \\
-2 & 6 & 7 & -1
\end{array}\right)
\rightarrow
\left(\begin{array}{rrr|r}
\textcircled{1} & 1 & 3 & 2 \\
2 & 1 & 7 & 6 \\
-2 & 6 & 7 & -1
\end{array}\right)
\rightarrow
\left(\begin{array}{rrr|r}
\textcircled{1} & 1 & 3 & 2 \\
0 & -1 & 1 & 2 \\
0 & -4 & -1 & -3
\end{array}\right)
\rightarrow
\left(\begin{array}{rrr|r}
1 & 1 & 3 & 2 \\
0 & \textcircled{1} & -1 & -2 \\
0 & -4 & -1 & -3
\end{array}\right)
\rightarrow
$$

$$
\left(\begin{array}{rrr|r}
1 & 0 & 4 & 4 \\
0 & \textcircled{1} & -1 & -2 \\
0 & 0 & -5 & -5
\end{array}\right)
\rightarrow
\left(\begin{array}{rrr|r}
1 & 0 & 4 & 4 \\
0 & 1 & -1 & -2 \\
0 & 0 & \textcircled{1} & 1
\end{array}\right)
$$

- [ ] 复杂度计算

3.部分主元高斯消元法

程序应用时计算浮点数，将产生一种更可预测的错误：舍入误差

This means that for t-digit precision with $\beta = 10$,we need to look at digit d_{t+1} in $x = .d_1 d_2 \cdots d_t d_{t+1} \cdots \times 10^{\epsilon}$ and then set

$$fl(x)=\begin{cases} .d_1d_2\cdots d_t\times 10^{\epsilon} & if \quad d_{t+1}<5, \\ ([.d_1d_2\cdots d_t]+10^{-t})\times 10^{\epsilon} & if \quad d_{t+1}\ge 5. \end{cases}$$

例如，2位的10浮点运算
$fl(3/80)=fl(0.0375)=fl(0.375\times 10^{-1})=0.38\times 10^{-1}=0.038.$
为了了解如何使用浮点运算来执行高斯消去，让我们比较一下使用精确运算和使用3位碱基-10运算来求解下面的系统:

$$\begin{aligned} 47x+28y&=19\\ 89x+53y&=36 \end{aligned}$$

利用精确算法的高斯消去，将第一个方程乘乘m = 89/47，减去第二个方程的结果，得到精确解x = 1和y=−1;使用3位运算，乘法器是fl (m) = 1.89。应用3位倒置替换，得到3位浮点解y = 1和x=−0.191。
在每一步中，搜索主元位置及其以下位置的系数，以找到具有最大幅值的系数。如有必要，进行适当的行交换，将该最大系数移到主元位置。下图展示了典型情况下的第三步操作:

$$\begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & s & * & * & * & * \\ 0 & 0 & S & * & * & * & * \\ 0 & 0 & S & * & * & * & * \end{pmatrix}$$

在标记为“S”的第三列中搜索最大幅值的系数，并在必要时交换行，将该系数移到圈定的主元位置。简而言之，此策略是通过仅使用行交换，在每一步中最大化主元的幅值。
从表面上看，部分主元为什么会起到重要作用可能并不明显。下面的例子不仅表明了部分旋转确实可以产生很大的影响，而且还表明了是什么使这种策略有效。
很容易验证该系统的精确解

$$\begin{aligned} -10^{-4}x+y&=1,\\ x+y&=2, \end{aligned}$$

$$x=\frac{1}{1.0001}\quad \text{and}\quad y=\frac{1.0002}{1.0001}.$$

如果使用不带部分主元的3位数算术，则结果为

$$\begin{pmatrix} -10^{-4} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} R_2+10^4R_1 \longrightarrow \begin{pmatrix} -10^{-4} & 1 & 1 \\ 0 & 10^4 & 10^4 \end{pmatrix}$$

because

$$fl(1+10^4)=fl(.10001\times 10^5)=.100\times 10^5=10^4$$

and

$$fl(2+10^4)=fl(.10002\times 10^5)=.100\times 10^5=10^4.$$

回代过程结果:

$$x=0\quad \text{and}\quad y=1.$$

尽管计算得到的 y 的解接近于 y 的精确解，但计算得到的 x 的解却不太接近 x 的精确解——计算得到的 x 的解显然没有达到你所期望的三位有效数字的精度。如果使用带部分选主元的三位数字运算，那么结果为

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} -10^{-4} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} &\longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ -10^{-4} & 1 & 1 \end{pmatrix} R_2+10^{-4}R_1 \\ &\longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

because

$$fl(1+10^{-4})=fl(.10001\times 10^1)=.100\times 10^1=1$$

and

$$fl(1+2\times10^{-4}) = fl(.10002\times10^{1}) = .100\times10^{1} = 1.$$

此时回代过程结果：

$$x = 1 \quad \text{and} \quad y = 1,$$

合理地期望计算出的解与三个有效数字的精确解一致$x = \frac{1}{1.0001} \quad \text{and} \quad y = \frac{1.0002}{1.0001}$.取三位精度

- [ ] 理解部分主元法为什么起作用，ppt上这一段很没有说服力
- [ ]
    - Why did partial pivoting make a difference?
    - In summary, the large multiplier prevents some smaller numbers from being fully accounted for, thereby resulting in the exact solution of another system that is very different from the original system.
    - When partial pivoting is used, no multiplier ever exceeds 1 in magnitude.

    $$\left(\begin{array}{ccccc|c} * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & p & * & * & * \\ 0 & 0 & q & * & * & * \\ 0 & 0 & r & * & * & * \end{array}\right) \begin{array}{l} \\ \\ \\ R_4-(q/p)R_3 \\ R_5-(r/p)R_3 \end{array} \longrightarrow \left(\begin{array}{ccccc|c} * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & p & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * & * \end{array}\right).$$

        - The pivot is p, while q/p and r/p are the multipliers.
        - If partial pivoting has been employed, then $|p| \geq |q|$ and $|p| \geq |r|$ so that

    $$\left|\frac{q}{p}\right| \leq 1 \quad and \quad \left|\frac{r}{p}\right| \leq 1.$$
- [ ]

Other example:

The exact solution to the system

$$-10x + 10^5 y = 10^5,$$
$$x + \quad y = 2,$$

is given by

$$x = \frac{1}{1.0001} \quad \text{and} \quad y = \frac{1.0002}{1.0001}.$$

Suppose that 3-digit arithmetic with partial pivoting is used. Since $|-10| > 1$, no interchange is called for and we obtain

$$\left(\begin{array}{cc|c} -10 & 10^5 & 10^5 \\ 1 & 1 & 2 \end{array}\right) R_2 + 10^{-1} R_1 \longrightarrow \left(\begin{array}{cc|c} -10 & 10^5 & 10^5 \\ 0 & 10^4 & 10^4 \end{array}\right)$$

because

$$fl(1 + 10^4) = fl(.10001 \times 10^5) = .100 \times 10^5 = 10^4$$

and

$$fl(2 + 10^4) = fl(.10002 \times 10^5) = .100 \times 10^5 = 10^4.$$

Back substitution yields

$$x = 0 \quad \text{and} \quad y = 1,$$

which must be considered to be very bad—the computed 3-digit solution for y is not too bad, but the computed 3-digit solution for x is terrible!

4.完全主元法

1. 定义：如果 $[A|b]$ 是高斯消元法第 k 步的增广矩阵，那么在 A 中寻找主元位置时，需检查当前主元位置之下或右侧的所有位置，以找到具有最大数值的系数。如果有必要，进行适当的行和列交换，以将具有最大数值的系数放置在主元位置。下面展示了典型情况下的第三步：

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} * & * & * & * & * & * \\ 0 & * & * & * & * & * \\ 0 & 0 & S & S & S & * \\ 0 & 0 & S & S & S & * \\ 0 & 0 & S & S & S & * \end{array}\right)$$

在标有“S”的位置中寻找具有最大数值的系数。如果有必要，交换行和列，将该最大系数移到圈出的主元位置。
问题：使用三位有效数字的算术和完全主元选择来求解以下方程组：

$$x - y = -2, -9x + 10y = 12.$$

解答：由于 10 是在搜索模式中找到的最大系数，交换第一行和第二行，然后交换第一列和第二列：

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & -1 & -2 \\ -9 & 10 & 12 \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{cc|c} -9 & 10 & 12 \\ 1 & -1 & -2 \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{cc|c} 10 & -9 & 12 \\ -1 & 1 & -2 \end{array}\right) \to \left(\begin{array}{cc|c} 10 & -9 & 12 \\ 0 & 0.1 & -0.8 \end{array}\right).$$

列交换的效果是将未知数重命名为 $\hat{x}$ 和 $\hat{y}$，其中 $\hat{x} = y$ 且 $\hat{y} = x$。回代得到 $\hat{y} = -8$ 和 $\hat{x} = -6$，因此：

$$x = \hat{y} = -8 \quad 和 \quad y = \hat{x} = -6.$$

有些系统对小的扰动存在极强的敏感，是病态的系统，最好重新设计。但这意味着你必须能够回答一些额外的问题。

- 例如，如何提前判断一个给定的系统是否病态？
- 如何衡量一个线性系统的病态程度？

一种确定病态程度的方法是通过轻微扰动选定的系数，并观察解的变化情况。

- 如果对于某组系数的微小扰动，观察到解的显著变化，那么你已经发现了一个病态情况。

- 如果给定的扰动没有导致解的显著变化，则无法得出结论——可能你扰动了错误的系数组。

通过对不同的系数组进行多次这样的实验，可以获得对病态程度的直觉（但不能保证）。