第六章 解线性方程组的直接法

6.1 消去法

方程组系数矩阵的分类

- 低阶稠密矩阵（例如，阶数不超过150）

  （一般用直接法来求解）

- 大型稀疏矩阵（即矩阵阶数高且零元素较多）

  （一般用迭代法来求解）

线性方程组的数值解法分类

- 直接法

  经过有限步算术运算，可求得方程组精确解的方法。

- 迭代法

  用某种极限过程去逐步逼近线性方程组精确解的方法。

消去法的基本思想

通过将一个方程乘或除以某个常数，以及将两个方程相加减这两种手续，逐步减少方程中变元的数目，最终使每个方程仅含一个变元，从而得出所求的解.

- 约当（Jordan)消去法
- 高斯（Gauss)消去法

约当消去法

特点

它的每一步仅在一个方程中保留某个变元，而从其余的各个方程中消去该变元，这样经过反复消元后，所给方程组最终被加工成一个方程仅含一个变元的形式，从而得出所求的解.

方程组的向量表示形式

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

$$\boldsymbol{AX} = \boldsymbol{b}$$

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

方程形态的演变（0）

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \cdots & a_{2k}^{(0)} & \cdots & a_{2n}^{(0)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ a_{k1}^{(0)} & a_{k2}^{(0)} & & a_{kk}^{(0)} & \cdots & a_{kn}^{(0)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & & a_{nk}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(0)} \\ \vdots \\ b_k^{(0)} \\ \vdots \\ b_n^{(0)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（1）

$$
\begin{bmatrix}
1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \cdots & a_{2k}^{(0)} & \cdots & a_{2n}^{(0)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
a_{k1}^{(0)} & a_{k2}^{(0)} & & a_{kk}^{(0)} & \cdots & a_{kn}^{(0)} \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & & a_{nk}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_1^{(1)} \\ b_2^{(0)} \\ \vdots \\ b_k^{(0)} \\ \vdots \\ b_n^{(0)}
\end{bmatrix}
$$

方程形态的演变（1）

$$
\begin{bmatrix}
1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
0 & a_{k2}^{(1)} & & a_{kk}^{(1)} & \cdots & a_{kn}^{(1)} \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
0 & a_{n2}^{(1)} & & a_{nk}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_k^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)}
\end{bmatrix}
$$

方程形态的演变（2）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{k2}^{(1)} & & a_{kk}^{(1)} & \cdots & a_{kn}^{(1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & & a_{nk}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（2）

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & a_{1k}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{kk}^{(2)} & \cdots & a_{kn}^{(2)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{nk}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(2)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（k-1）

$$
\begin{bmatrix}
1 & 0 & \cdots & a_{1k}^{(k-1)} & \cdots & a_{1n}^{(k-1)} \\
0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(k-1)} & \cdots & a_{2n}^{(k-1)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_1^{(k-1)} \\ b_2^{(k-1)} \\ \vdots \\ b_k^{(k-1)} \\ \vdots \\ b_n^{(k-1)}
\end{bmatrix}
$$

方程形态的演变（k）

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & a_{1k}^{(k-1)} & \cdots & a_{1n}^{(k-1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(k-1)} & \cdots & a_{2n}^{(k-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 1 & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(k-1)} \\ b_2^{(k-1)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（k）

$$
\begin{bmatrix}
1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & a_{1n}^{(k)} \\
0 & 1 & \cdots & 0 & \cdots & a_{2n}^{(k)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & 1 & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & 0 & \cdots & a_{nn}^{(k)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_1^{(k)} \\ b_2^{(k)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)}
\end{bmatrix}
$$

方程形态的演变（n）

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 1 & \cdots & 0 \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(n)} \\ b_2^{(n)} \\ \vdots \\ b_k^{(n)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

约当消去法第（1）步

初始状态

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^{(0)} x_j = b_i \qquad i = 1,2,\cdots,n$$

第（1）步

$$\begin{cases} x_1 + \sum\limits_{j=2}^{n} a_{1j}^{(1)} x_j = b_1^{(1)} \\ \sum\limits_{j=2}^{n} a_{ij}^{(1)} x_j = b_j^{(1)}, i = 2,3,\cdots,n \end{cases}$$

约当消去法第（1）步

运算过程

$$\begin{cases} a_{1j}^{(1)} = a_{1j} / a_{11}, j = 2,3,\cdots,n \\ b_1^{(1)} = b_1 / a_{11} \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - a_{i1} a_{1j}^{(1)}, \\ b_i^{(1)} = b_i - a_{i1} b_1^{(1)}, \end{cases} \quad i,j = 2,3,\cdots,n$$

约当消去法第（k）步

第（k-1）步

$$\begin{cases} x_i + \sum\limits_{j=k}^{n} a_{ij}^{(k-1)} x_j = b_i^{(k-1)}, i = 1,2,\cdots,k-1 \\ \sum\limits_{j=k}^{n} a_{ij}^{(k-1)} x_j = b_i^{(k-1)}, i = k,k+1,\cdots,n \end{cases}$$

第（k）步

$$\begin{cases} x_i + \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{ij}^{(k)} x_j = b_i^{(k)}, i = 1,2,\cdots,k \\ \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{ij}^{(k)} x_j = b_i^{(k)}, i = k+1,k+2,\cdots,n \end{cases}$$

约当消去法第（k）步

运算过程

$$\begin{cases} a_{kj}^{(k)} = a_{kj}^{(k-1)} \big/ a_{kk}^{(k-1)}, j = k+1, k+2, \cdots, n \\ b_k^{(k)} = b_k^{(k-1)} \big/ a_{kk}^{(k-1)} \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} \cdot a_{kj}^{(k)}, j = k+1, k+2, \cdots, n \\ b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} \cdot b_k^{(k)}, i = 1, \cdots, k-1, k+1, \cdots, n \end{cases}$$

约当消去法的计算量与存储空间

计算量

$$\sum_{k=1}^{n}(n-k+1)\times n \approx \frac{n^3}{2}$$

存储空间

$$\begin{cases} a_{kj}/a_{kk} \Rightarrow a_{kj}, j=k+1,k+2,\cdots,n \\ b_k/a_{kk} \Rightarrow b_k \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_{ij}-a_{ik}a_{kj} \Rightarrow a_{ij}, j=k+1,k+2,\cdots,n \\ b_i-a_{ik}b_k \Rightarrow b_i, i=1,\cdots,k-1,k+1,\cdots,n \end{cases}$$

高斯消去法

虽然高斯消去法是一个古老的求解线性方程组的方法（早在公元前250年我国就掌握了解方程组的消去法），但是由它改进、变形得到的选主元素消去法、三角分解法仍然是目前计算机上常用的有效方法。

举例（一）

- 例：直接法解线性方程组

$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 + 2x_3 = -2 \\ 2x_1 - 3x_2 - 3x_3 = 4 \\ 4x_1 + x_2 + 6x_3 = 3 \end{cases}$$

解：

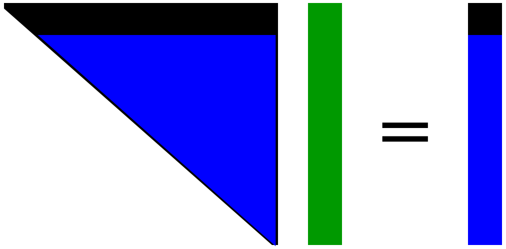
$$(A,b) = \left[\begin{array}{ccc:c} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 2 & -3 & -3 & 4 \\ 4 & 1 & 6 & 3 \end{array}\right] \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 9 & -2 & 11 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 0 & 61 & -61 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{cases} x_3 = -1 \\ x_2 = 8 + 7x_3 = 1 \\ x_1 = -2 + 2x_2 - 2x_3 = 2 \end{cases}$$

高斯消去法的基本思想

考虑 n 阶线性方程组：

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad\vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \xrightarrow{\text{矩阵形式}} Ax = b$$



方程形态的演变（0）

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \cdots & a_{2k}^{(0)} & \cdots & a_{2n}^{(0)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ a_{k1}^{(0)} & a_{k2}^{(0)} & & a_{kk}^{(0)} & \cdots & a_{kn}^{(0)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & & a_{nk}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(0)} \\ \vdots \\ b_k^{(0)} \\ \vdots \\ b_n^{(0)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（1）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \cdots & a_{2k}^{(0)} & \cdots & a_{2n}^{(0)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ a_{k1}^{(0)} & a_{k2}^{(0)} & & a_{kk}^{(0)} & \cdots & a_{kn}^{(0)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & & a_{nk}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(0)} \\ \vdots \\ b_k^{(0)} \\ \vdots \\ b_n^{(0)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（1）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{k2}^{(1)} & & a_{kk}^{(1)} & \cdots & a_{kn}^{(1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & & a_{nk}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_k^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（2）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{k2}^{(1)} & & a_{kk}^{(1)} & \cdots & a_{kn}^{(1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & & a_{nk}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（2）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{kk}^{(2)} & \cdots & a_{kn}^{(2)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{nk}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（k-1）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k-1)} \\ \vdots \\ b_n^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（k）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{21}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 1 & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（k）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{21}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 1 & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 0 & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（n）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{21}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 1 & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

高斯消去法的回代过程

$$
\begin{cases}
x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 + \cdots + a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)} \\
\qquad x_2 + a_{23}^{(2)} x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)} x_n = b_2^{(2)} \\
\qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
\qquad x_{n-1} + a_{n-1,n}^{(n-1)} x_n = b_{n-1}^{(n-1)} \\
\qquad x_n = b_n^{(n)}
\end{cases}
$$

$$
x_i = b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j,\quad i = n, n-1, \cdots, 1
$$

高斯消去法的计算量分析

消元第**k**步的计算量为

$$(n-k+1)(n-k+1)$$

回代第**k**步的计算量为**(k-1)**

高斯消去法总的乘除运算量为:

$$\boxed{\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3}}$$

高斯主元素消去法

由高斯消去法知道，在消元的过程中可能出现 $a_{kk}^{(k)}=0$ 的情况，这是消去法将无法进行即使主元素$a_{kk}^{(k)}\neq 0$ 但很小时，用其作除数，会导致其他元素数量级的严重增长和舍入误差的扩散，最后也使得计算解不可靠。

例2错误算法

$$\begin{cases} 10^{-5}x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} x_1 + 10^5 x_2 = 10^5 \\ (1 - 10^5)x_2 = 2 - 10^5 \end{cases}$$

$$1 - 10^5 \triangleq -10^5,\ 2 - 10^5 = -10^5$$

$$\longrightarrow \begin{cases} x_1 + 10^5 x_2 = 10^5 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

例2改进算法

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ 10^{-5}x_1 + x_2 = 1 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ (1 - 10^{-5})x_2 = 1 \end{cases}$$

$$1 - 10^{-5} \triangleq 1$$

$$\longrightarrow \begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

全主元高斯消去法

第 k 步消元时选 $A^{(k)}$ 中绝对值最大的元素为主元，即

① 先选取全主元：$|a_{i_k j_k}^{(k)}| = \max\limits_{k \le i,j \le n} \left\{ |a_{ij}^{(k)}| \right\} \ne 0$

② if $i_k \ne k$ then 交换第 k 行和第 i_k 行；

if $j_k \ne k$ then 交换第 k 列和第 j_k 列；

③ 消元

列交换改变了 x_i 的顺序，须记录交换次序，解完后再换回来。

全主元高斯消去法具有很好的稳定性，但选全主元比较费时，故在实际计算中很少使用。

定理

定理1

假设方程组（4）是对角占优的，则a_{kk}^{k-1}（**k=1，2，…，n**）全不为 **0.**

定理2

假设方程组（4）对称并且是对角占优的，则 a_{kk}^{k-1}（**k=1，2，…，n**）全是主元素.

定理1

假设方程组（4）是对角占优的，则（k=1，2，…，n）全不为 0.

证：

$$|a_{11}| > \sum_{j=2}^{n} |a_{1j}|$$

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - \frac{a_{i1}a_{1j}}{a_{11}},\ i,j = 2,3,\cdots,n$$

定理1

$$\sum_{\substack{j=2\\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}^{(1)}| \leqslant \sum_{\substack{\boxed{j=2}\\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| + \frac{|a_{i1}|}{|a_{11}|}\sum_{\substack{j=2\\ \boxed{j\neq i}}}^{n} |a_{1j}|$$

$$= \sum_{\substack{\boxed{j=1}\\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}| - |a_{i1}| + \frac{|a_{i1}|}{|a_{11}|}\left(\sum_{j=2}^{n} |a_{1j}| - |a_{1i}|\right)$$

定理1

$$\sum_{\substack{j=2 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}^{(1)}| < |a_{ii}| - |a_{i1}| + \frac{|a_{i1}|}{|a_{11}|}(|a_{11}| - |a_{1i}|)$$

$$= |a_{ii}| - \frac{|a_{i1}||a_{1i}|}{|a_{11}|}$$

定理1

$$|a_{ii}^{(1)}| = \left|a_{ii} - \frac{a_{i1}a_{1i}}{a_{11}}\right| \geqslant |a_{ii}| - \frac{|a_{i1}||a_{1i}|}{|a_{11}|}$$

$$\sum_{\substack{j=2\\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}^{(1)}| < |a_{ii}^{(1)}|, \quad i = 2,3,\cdots,n$$

变换以后仍然是对角占优的，以此类推，则命题得证。

例题2

用列主元消去法求解下列方程组

$$\begin{cases} x_1 - x_2 + x_3 = -4 \\ 5x_1 - 4x_2 + 3x_3 = -12 \\ 2x_1 + x_2 + x_3 = 11 \end{cases}$$

写成向量表示形式

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 5 & -4 & 3 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -4 \\ -12 \\ 11 \end{pmatrix} \longrightarrow$$

增广矩阵

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -4 \\ 5 & -4 & 3 & \vdots -12 \\ 2 & 1 & 1 & 11 \end{pmatrix}$$

消元（1）

选主元素

$$\left(\begin{array}{cccc} 1 & -1 & 1 & -4 \\ 5 & -4 & 3 \vdots & -12 \\ 2 & 1 & 1 & 11 \end{array}\right)$$

交换

$$\left(\begin{array}{cccc} 5 & -4 & 3 & -12 \\ 1 & -1 & 1 \vdots & -4 \\ 2 & 1 & 1 & 11 \end{array}\right)$$

消元

$$\left(\begin{array}{cccc} 1 & -0.8 & 0.6 & -2.4 \\ 0 & -0.2 & 0.4 & \vdots -1.6 \\ 0 & 2.6 & -0.2 & 15.8 \end{array}\right)$$

消元（2）

选主元素

$$\left(\begin{array}{cccc} 1 & -0.8 & 0.6 & -2.4 \\ 0 & -0.2 & 0.4 & \vdots -1.6 \\ 0 & 2.6 & -0.2 & 15.8 \end{array}\right)$$

交换

$$\left(\begin{array}{cccc} 1 & -0.8 & 0.6 & -2.4 \\ 0 & 2.6 & -0.2 \vdots & 15.8 \\ 0 & -0.2 & 0.4 & -1.6 \end{array}\right)$$

消元

$$\left(\begin{array}{cccc} 1 & -0.8 & 0.6 & -2.4 \\ 0 & 1 & -0.077 \vdots & 6.077 \\ 0 & 0 & 0.385 & -0.385 \end{array}\right)$$

回代

得到方程

$$\begin{cases} x_1 - 0.8x_2 + 0.6x_3 = -2.4 \\ x_2 - 0.077x_3 = 6.077 \\ 0.385x_3 = -0.385 \end{cases}$$

方程组的解

$$\begin{cases} x_3 = -1 \\ x_2 = 6 \\ x_1 = 3 \end{cases}$$

矩阵的三角分解

- 高斯消元法的矩阵形式:

Step 1: $m_{i1} = a_{i1} / a_{11} \quad (a_{11} \neq 0)$

记 $L_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -m_{21} & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ -m_{n1} & 0 & & 1 \end{pmatrix}$

$$L_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ m_{21} & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ m_{n1} & 0 & & 1 \end{pmatrix}$$

记 $A^{(1)} \equiv A$

于是

矩阵的三角分解

$$LA^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -\frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -\frac{a_{n1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} & & & \ddots 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} \cdots a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & A_{22}^{(1)} \\ \vdots & \\ a_{n1}^{(1)} & \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{c_1}{a_{11}^{(1)}} & I_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & r_1^T \\ c_1 & A_{22}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & r_1^T \\ 0 & A_{22}^{(1)} - \frac{c_1 r_1^T}{a_{11}^{(1)}} \end{pmatrix}$$

矩阵的三角分解

$$
= \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & \vdots & & \vdots \\ & a_{2n}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}^{(2)} & A_{12}^{(2)} \\ 0 & A_{22}^{(2)} \end{pmatrix} = A^{(2)}
$$

$$
\boldsymbol{L_2 A^{(2)}} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & & \mathbf{0}^T \\ & \mathbf{0} & \mathbf{0}^T \\ \mathbf{0} & -\dfrac{\boldsymbol{c_2}}{\boldsymbol{a_{22}^{(2)}}} & \boldsymbol{I_{n-2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{a_{11}} & & \boldsymbol{r_1^T} \\ & \boldsymbol{a_{22}^{(2)}} & \boldsymbol{r_2^T} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{c_2} & \boldsymbol{A_{33}^{(2)}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{A_{11}^{(3)}} & \boldsymbol{A_{12}^{(3)}} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{A_{22}^{(3)}} \end{pmatrix} = \boldsymbol{A^{(3)}}
$$

Step $n-1$:

$$L_{n-1}L_{n-2}\ldots L_1\ A=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & & \cdot \\ & & \cdots & \cdot \\ & & & \cdot \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix}$$

其中 $\boldsymbol{L}_k=\begin{pmatrix} 1 & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & \ddots & & \\ 0 & & \vdots & & 0 & \\ & & -m_{n,k} & & & 1 \end{pmatrix}$ $\qquad \boldsymbol{L}_k^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & m_{k+1,k} & \ddots & & \\ 0 & & \vdots & & 0 & \\ & & m_{n,k} & & & 1 \end{pmatrix}$

矩阵的三角分解

$$L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & \bigcirc \\ & 1 & \\ m_{i,j} & & \ddots \\ & & & 1 \end{pmatrix} \xlongequal{\text{记为}} L$$

$$\text{记 } U = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & \bigcirc & \cdots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{pmatrix} \Rightarrow \quad A = LU$$

矩阵的三角分解

定理1: （矩阵的三角分解）设A为$n \times n$实矩阵，如果解$AX=b$用高斯消去法能够完成（限制不进行行的交换，即 $a_{kk}^{(k)} \neq 0, \quad k=1,2,\cdots,n$ ），则矩阵A可分解为单位下三角矩阵L与上三角知阵U的乘积。

$$A = LU$$

且这种分解是唯一的。

矩阵的三角分解法

将高斯消去法改写为紧凑型时，可以直接从矩阵A的元素得到计算L,U元素的递推公式，而不需要任何中间步骤，这就是所谓直接三角分解法。一旦实现了矩阵A的LU分解，那么求解Ax=b的问题就等价于求解两个三角形方程组

$$Ly = b,$$

$$Ux = y$$

分解方式A=LU的唯一性

为保证分解方式A=LU的唯一性，要求将分解阵L与U中的一个单位化，即令其主对角元素全为1

这里区分两种情况：

- 如果限定L为单位下三角阵，则称矩阵分解为**Doolittle**分解
- 如果限定U为单位上三角阵，这时矩阵分解成为**Crout**分解

矩阵的三角分解

于是有： $A^{(n)} = L_{n-1} \cdots L_2 L_1 A^{(1)}$

$$\Rightarrow \boxed{A = A^{(1)} = (L_{n-1} \cdots L_2 L_1)^{-1} A^{(n)}}$$

容易验证：

$$L_k^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -m_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix} \quad (k = 1, \ldots, n\text{-}1)$$

矩阵的三角分解

记：$L = L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_k^{-1}$，$U = A^{(n)}$，则

$\boxed{A = LU}$ $\longrightarrow$ LU 分解 (杜利脱尔Doolittle分解)

其中：L --- 单位下三角矩阵，U --- 上三角矩阵

直接利用矩阵乘法来计算 *LU* 分解

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$L \quad \times \quad U \quad = \quad A$$

①比较等式两边的第一行得：$u_{1j} = a_{1j} \quad (j = 1, \dots, n$ *U* 的第一行

比较等式两边的第一列得：$l_{i1} = a_{i1} / u_{11} \quad (i = 2, \dots$ *L* 的第一列

②比较等式两边的第二行得：$u_{2j} = a_{2j} - l_{21} u_{1j} \quad (j =$ *U* 的第二行

比较等式两边的第二列得：$l_{i2} = \left(a_{i2} - l_{i1} u_{12}\right) / u_{22} \quad ($ *L* 的第二列

直接利用矩阵乘法来计算 *LU* 分解

第 k 步：此时 U 的前 k-1 行和 L 的前 k-1 列已经求出

比较等式两边的第 k 行得:

$$\boxed{u_{kj}=a_{kj}-\left(l_{k1}u_{1j}+\cdots+l_{k,k-1}u_{k-1,j}\right)=a_{kj}-\sum_{s=1}^{k-1}l_{ks}u_{sj}}$$

$$(j=k,\ \ldots,\ n)$$

比较等式两边的第 k 列得:

$$\boxed{l_{ik}=\left(a_{ik}-l_{i1}u_{1k}-\cdots-l_{i,k-1}u_{k-1,k}\right)\Big/u_{kk}=\left(a_{ik}-\sum_{s=1}^{i-1}l_{is}u_{sk}\right)\Bigg/u_{kk}}$$

$$(i=k+1,\ \ldots,\ n)$$

直到第 n 步，便可求出矩阵 L 和 U 的所有元素。

例题1

设L为下三角阵，$L=(l_{ij})_{n\times n}$,当$j>i$时$l_{ij}=0$

试导出方程组$Lx=b$的求解公式

解

$$x_i=(b_i-\sum_{j=1}^{i-1}l_{ij}x_j)/l_{ii}, i=1,2,\cdots,n$$

例题2

设U为下三角阵， $U=(u_{ij})_{n\times n}$,当$i>j$时$u_{ij}=0$

试导出方程组$Ux=b$的求解公式

解

$$x_i=(b_i-\sum_{j=i+1}^{n}u_{ij}x_j)/u_{ii},i=1,2,\cdots,n$$

例题3

试考察四阶方阵$A=(\mathrm{a}_{\mathrm{ij}})_{4\times4}$的*Doolittle*分解$A=LU$

并针对n阶方阵A列出分解公式

解

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ & & u_{33} & u_{34} \\ & & & u_{44} \end{pmatrix}$$

例题4

基于矩阵A的$Doolittle$分解$A=LU$,试给出方程组

$Ax=b$的求解公式

解

$Ax=b$化归为两个三角方程组$Ly=b$与$Ux=y$

$$y_i=b_i-\sum_{j=1}^{i-1}l_{ij}y_j, i=1,2,\cdots,n$$ 追

$$x_i=(y_i-\sum_{j=i+1}^{n}u_{ij}x_j)/u_{ii}, i=1,2,\cdots,n$$ 赶

追赶法

在数值计算中，如三次样条插值或用差分方法解常微分方程边值问题，常常会遇到求解以下形式的方程组

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & a_i & b_i & c_i & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_i \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_i \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix}$$

简记 $Ax = d.$

此系数矩阵的非零元素集中分布在主对角线及其相邻两次对角线上，称为三对角矩阵。方程组称为三对角方程组。

追赶法

定理 3 假设矩阵（26）为对角占优，即成立

$$|b_1| > |c_1|$$

$$|b_i| > |a_i| + |c_i|, i = 2,3,\cdots,n-1$$

$$|b_n| > |a_n|$$

则它是非奇异的,这时方程组（25）有唯一解。

追赶法

证　当 n =2 时，由条件（27）立即得知

$$\det(A)=\begin{vmatrix} b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix}\neq 0$$

进一步考察 n >2 的情形.将矩阵 A 的第 2 行减去第一行的a2/b1倍，使之变成

追赶法

$$\left[\begin{array}{c|cccc} b_1 & c_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & & & & \\ \vdots & & & A_1 & \\ 0 & & & & \end{array}\right]$$

追赶法

$$A_1 = \begin{bmatrix} b_2 - \dfrac{c_1}{b_1} a_2 & c_2 & & & 0 \\ a_3 & b_3 & c_3 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & & & a_n & b_n \end{bmatrix}$$

追赶法

$$\left|b_2 - \frac{c_1}{b_1} a_2\right| \geq |b_2| - |a_2| > |c_2|$$

可见矩阵 A1也是对角占优的.由于 det（A）=b1det（A1），而 b1≠0，由归纳法原理知所述命题成立.定理3 证毕.

据定理3，对角占优的三对角方程组（25）有唯一解.

定理：设三对角方程组系数矩阵满足下列条件：

$$\begin{cases} |b_1| > |c_1| > 0 \\ |b_i| \geq |a_i| + |c_i| \quad a_i c_i \neq 0 (i = 2, 3, \cdots, n-1) \\ |b_n| > |a_n| > 0 \end{cases}$$

则它可分解为

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_2 & 1 & & & \\ & l_3 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & l_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 & c_1 & & & \\ & u_2 & c_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & c_{n-1} \\ & & & & u_n \end{bmatrix}$$

其中$c_i (i = 1, 2, \cdots, n-1)$为已给出的，且分解是唯一的

追赶法

将上式右端按乘法规则展开,并与A进行比较,得

$$\begin{cases} b_1 = u_1 \\ a_i = l_i u_{i-1} \quad (i = 2,3,\cdots,m) \\ b_i = c_{i-1} l_i + u_i \end{cases}$$

如果$u_i \neq 0\,(i=1,2,\cdots,m)$，则由上式可得

$$\begin{cases} u_1 = b_1 \\ l_i = a_i / u_{i-1} \quad (i = 2,3,\cdots,m) \\ u_i = b_i - c_{i-1} l_i \end{cases}$$

追赶法

$A=LU$分解公式：
$$\begin{cases} u_1 = b_1 \\ l_i = a_i / u_{i-1} \quad (i=2,3,\cdots,m) \\ u_i = b_i - c_{i-1} l_i \end{cases}$$

解$Ly=d$得：
$$\begin{cases} y_1 = d_1 \\ y_k = d_k - l_k y_{k-1} \quad (k=2,3,\cdots,n) \end{cases}$$

再解$Ux=y$得:
$$\begin{cases} x_n = y_n / u_n \\ x_k = (y_k - c_k x_{k+1}) / u_k \quad (k=n-1,n-2,\cdots,1) \end{cases}$$

追赶法的基本思想与*Gause*消去法及三角分解法相同,只是由于系数中出现了大量的零,可使计算公式简化,减少了计算量。可证,当系数矩阵为严格对角占优时,此方法具有良好的数值稳定性。