3.线性方程组高斯消元

本节讨论n元线性方程组

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

的直接解法。方程组(1)的矩阵形式为$Ax = b$

其中

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

若矩阵A非奇异，即$|A| \neq 0$，则方程组(1)有唯一解。

本节中我所解的方程组及其对应的矩阵A，b如下：

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 - 2x_3 = 2 \\ x_1 - 3x_2 - 3x_3 = -1 \\ 4x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 3 \end{cases}, \quad A = \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 \\ 1 & -3 & -3 \\ 4 & 2 & 2 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

本节中所有矩阵的右上标的意思为当前矩阵或元素进行了多少次变换，右上标为1时表示未发生变化，为2时表示变化了1次，以此类推。

3.1顺序高斯消去法

3.1.1顺序高斯消去法介绍

1. 顺序Gauss消去法通常也简称为Gauss消去法.
2. 顺序Gauss消去法中的$a_{kk}^{(k)}\,(k = 1, 2, \cdots, n)$称为主元素
3. 主元素都不为零的充要条件为矩阵的各阶顺序主子式都不为零
4. Gauss消去法是一种规则化的加减消元法，其基本思想是通过逐次消元计算，把一般线性方程组的求解转化为等价的上三角形方程组的求解
5. 高斯消去法的局限性：当主元较小时，不适用，此时主元做除数的话，整体就会很大；解决方案是使用列主元高斯消去法

3.1.2顺序高斯消去法步骤

现求解线性方程组(1)的顺序Gauss消去法：

记 $A^{(1)} = A, b^{(1)} = b, a_{ij}^{(1)} = a_{ij}, b_i^{(1)} = b_i$，其中的右上标的意思为当前矩阵或元素进行了多少次变换，右上标为1时表示未发生变化，为2时表示变化了1次，以此类推。

线性方程组(1)的增广矩阵为

$$(A^{(1)},b^{(1)})=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(1)} & b_3^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

第一步，设$a_{11}^{(1)}\neq 0$，依次用$-l_{i1}=-\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}},\quad (i=2,3,\cdots,n)$

乘矩阵的第1行加到第i行(即矩阵的初等行变换)，得到矩阵：

$$(A^{(2)},b^{(2)})=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix}$$

其中

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

$$b_i^{(2)}=b_i^{(1)}-l_{i1}b_1^{(1)},\quad i=2,3,\cdots,n$$

第二步，设$a_{22}^{(2)}\neq 0$，依次用$-l_{i2}=-\frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}},\quad (i=3,4,\cdots,n)$

乘矩阵的第2行加到第i行(即矩阵的初等行变换)，得到矩阵：

$$(A^{(3)},b^{(3)})=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} & b_n^{(3)} \end{pmatrix}$$

其中

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

$$b_i^{(3)}=b_i^{(2)}-l_{i2}b_2^{(2)},\quad i=3,4,\cdots,n$$

如此继续消元下去，第n-1步结束后得到矩阵：

$$(A^{(n)},b^{(n)})=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{pmatrix}$$

这就完成了消元过程。对应的方程组变成：

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

对此方程组进行反向回代(从最后一个x_n开始往第一个x_1求)，就可求出方程组的解。

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} \div a_{nn}^{(n)} \\ x_i = (b_i^{(i)} - \sum\limits_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)}x_j) \div a_{ii}^{(i)}, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases}$$

3.1.3顺序高斯消去法示例

以本文顶部的线性方程组为例：

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 - 2x_3 = 2 \\ x_1 - 3x_2 - 3x_3 = -1 \\ 4x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 3 \end{cases} \xrightarrow{\text{消去后两个方程中的}x_1} \begin{cases} 2x_1 + 4x_2 - 2x_3 = 2 \\ \quad -5x_2 - 2x_3 = -2 \\ \quad -6x_2 + 6x_3 = -1 \end{cases}$$

$$\xrightarrow{\text{再消去最后一个方程的}x_2} \begin{cases} 2x_1 + 4x_2 - 2x_3 = 2 \\ \quad -5x_2 - 2x_3 = -2 \\ \qquad \frac{42}{5}x_3 = \frac{7}{5} \end{cases} \xrightarrow{\text{消元结束，经过回代得解}} \begin{cases} x_1 = \frac{1}{2} \\ x_2 = \frac{1}{3} \\ x_3 = \frac{1}{6} \end{cases}$$

上述求解的消元过程可用矩阵表示为：

$$(A, b) = \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 2 \\ 1 & -3 & -3 & -1 \\ 4 & 2 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow[r_3 - 2r_1]{r_2 - \frac{1}{2}r_1} \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 2 \\ 0 & -5 & -2 & -2 \\ 0 & -6 & 6 & -1 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_3 - \frac{6}{5}r_2} \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 2 \\ 0 & -5 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & \frac{42}{5} & \frac{7}{5} \end{pmatrix}$$

这是Gauss消去法的计算形式，新的增广矩阵对应的线性方程组就是上三角形方程组，可进行回代求解。

3.1.4顺序高斯消去法代码解析

代码的完成思路在本文上述部分已解释，此处仅解释全局变量部分

请注意，代码中的下标起始值为0，而本文中的矩阵的下标起始值是从1算的，不一样

a[MAXN][MAXN]为线性方程组的系数矩阵A，a[0][0]对应矩阵A的a_{11}，以此类推

b[MAXN]为线性方程组的常数矩阵b，b[0]对应矩阵b的b_1，以此类推

c[MAXN]有两个作用：

- 一开始保存初等变换的系数，即$l_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{jj}}, \quad (i = j+1, j+2, \cdots, n; \quad j = 1, 2, \cdots, n-1)$；

  此处只用一维数组是因为一次主元消去的系数对应一次该数组，反复使用；

  以第一次主元消去为例,$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{a_{11}}, \quad (i = 2, 3, \cdots, n)$，c[1]对应$l_{21}$，c[2]对应$l_{31}$，以此类推
- 后来保存结果矩阵x，当主元消除全部完成时，开始进行回代，覆盖使用c数组，c[0]对应x_1，以此类推

3.2列主元高斯消去法

3.2.1列主元高斯消去法介绍

1. 列主元消去法是在每一步消元前，在主元所在的一列选取**绝对值**最大的元素作为主元素(一次初等行变换)。而**全主元Gauss消去法**是在每一步消元前，在所有元素中选取绝对值最大的元素作为主元素(初等行变换和初等列变换)，但由于运算量大增，实际应用中并不经常使用全主元Gauss消去法，故此文不介绍此法。
2. 列主元高斯消去法进行下去的充要条件是$|A| \neq 0$
3. 列主元消去法可以提高计算的数值稳定性，在消元过程中采用选择主元的方法
4. 当主元较小时，建议使用列主元高斯消去法

3.2.2列主元高斯消去法步骤

注意此法只是比顺序高斯消去法多了一个 在每一步消元前，选择主元所在列**绝对值最大**的元素作为主元素(一次初等行变换) 的步骤。

列主元Gauss消去法的具体过程如下：

首先在增广矩阵$(A^{(1)}, b^{(1)})$的第一列元素中，

$$\text{取}\left|a_{k1}^{(1)}\right| = \max_{1 \leq i \leq n}\left|a_{i1}^{(1)}\right| \text{为主元素，} r_k \leftrightarrow r_1.$$

再在矩阵$(A^{(2)}, b^{(2)})$的第二列元素中，

$$\text{取}\left|a_{k2}^{(2)}\right| = \max_{2 \leq i \leq n}\left|a_{i2}^{(2)}\right| \text{为主元素，} r_k \leftrightarrow r_2.$$

按此方法继续进行下去，经过n-1步选主元和消元(顺序高斯消去法)运算，得到增广矩阵$(A^{(n)}, b^{(n)})$.则方程组$A^{(n)}x = b^{(n)}$是与原方程组等价的上三角形方程组，可进行回代求解.

3.2.3列主元高斯消去法示例

以本文顶部的线性方程组为例，此处只给出消元过程的增广矩阵：

$$(A, b) = \begin{pmatrix} 2 & 4 & -2 & 2 \\ 1 & -3 & -3 & -1 \\ 4 & 2 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_3 \leftrightarrow r_1} \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 & 3 \\ 1 & -3 & -3 & -1 \\ 2 & 4 & -2 & 2 \end{pmatrix} \xrightarrow[r_3 - \frac{1}{2}r_1]{r_2 - \frac{1}{4}r_1} \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 & 3 \\ 0 & -\frac{7}{2} & -\frac{7}{2} & -\frac{7}{4} \\ 0 & 3 & -3 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_3 \leftrightarrow r_2} \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 & 3 \\ 0 & 3 & -3 & \frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{7}{2} & -\frac{7}{2} & -\frac{7}{4} \end{pmatrix} \xrightarrow{r_3 + \frac{7}{6}r_2} \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 & 3 \\ 0 & 3 & -3 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & -7 & -\frac{7}{6} \end{pmatrix}$$

回代得：$x_3 = \frac{1}{6}, x_2 = \frac{1}{3}, x_1 = \frac{1}{2}$

3.2.4列主元高斯消去法代码解析

相比顺序高斯消去法只是多了在每一步消元前，选择主元所在列绝对值最大的元素作为主元素(一次初等行变换)的步骤，另外无解的判断改变成当前主元所在列全为零，即行列式为零。

3.3Doolittle三角分解法

3.3.1Doolittle三角分解法引入

该法是对**系数矩阵**进行消元(矩阵运算)，而非前两种方法的增广矩阵

- 每进行一次消元就是对系数矩阵实施了一次初等行变换；
- 而对一个矩阵实施一次初等行变换等价于把该矩阵左乘一个相应的初等矩阵；
- 故当我们进行第一步消元(顺序高斯消去法)的过程当中，实际上是对n-1个元素进行了消元，把它们变成了零，这样就是对系数矩阵$A^{(1)}$分别左乘了n-1个相应的初等矩阵，这些初等矩阵都是可以通过计算各两行之间的比例系数得到的；
- $A^{(12)}$表示A的第一步消元中的第一个子步，即消第二行第一列的零；当到$A^{(1n)}$时，表示第一步完全消完，即$A^{(1n)}=A^{(2)}$，以此类推，下面矩阵上标为两个数的，均为此意，表示子步。
- 若$a_{11}^{(1)}\neq 0$，令$l_{i1}=a_{i1}^{(1)}\div a_{11}^{(1)},i=2,3,\cdots,n$；
- 第一步第一子步消元时，先消第二行第一列的零，即

$$A^{(1)}\xrightarrow{r_2-l_{21}r_1}\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}=A^{(12)} \tag{2}$$

将同样的操作作用于单位矩阵E_n，得到一个初等矩阵L_{12}：

$$E_n\xrightarrow{r_2-l_{21}r_1}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}=L_{12}$$

(2)式的消元过程等价于原系数矩阵$A^{(1)}$左乘初等矩阵L_{12}，即

$$L_{12}A^{(1)}=A^{(12)}$$

下面进行第一步第二子步消元，即消第三行第一列的零，即

$$A^{(12)}\xrightarrow{r_3-l_{31}r_1}\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}=A^{(13)} \tag{3}$$

将同样的操作作用于单位矩阵E_n，得到一个初等矩阵L_{13}：

$$E_n\xrightarrow{r_3-l_{31}r_1}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -l_{31} & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}=L_{13}$$

(3)式的消元过程等价于系数矩阵$A^{(12)}$左乘初等矩阵L_{13}，即

$$L_{13}A^{(12)}=A^{(13)}$$

除此之外，当L_{12},L_{13}依次左乘原系数矩阵$A^{(1)}$后，亦能得到$A^{(13)}$，即

$$L_{13}L_{12}A^{(1)}=A^{(13)}$$

如此进行下去，直到第一步消元完全结束，即到达$A^{(1n)}=A^{(2)}$这一步，有下式：

$$L_{1n}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -l_{n1} & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

以及下式：

$$L_{1n}\cdots\cdots L_{13}L_{12}A^{(1)}=A^{(1n)}=A^{(2)}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix}$$

- 在整个第一次消元过程中，我们令

  $$L_1=L_{1n}\cdots\cdots L_{13}L_{12}$$

  由线代知识有，

  $$L_1=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -l_{31} & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -l_{n1} & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix},\quad L_1A^{(1)}=A^{(2)}$$

  我们称该类型的矩阵L_1为**单位下三角矩阵**，即主对角线元素均为1，上三角元素均为0，但下三角元素并不一定为1，要注意此处。

  至此，我们完成了将一步消元的各子步全部合为一步的工作，即之后直接使用L_i左乘系数矩阵$A^{(i)}$即可得到每一整步的消元结果
- 下面我们从原系数矩阵$A^{(1)}$开始，重新进行每一步的消元工作，此时可以每一步整体来做，而无需再分解成上述的每一子步