

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用中学学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来对待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
$$
\left[\begin{array}{l}
a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n=b_1\\
a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n=b_2\\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\\
a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array}\right].
$$
```

其中， a_{ij} 和 b_i 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,m$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $AX=BS$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
$$
\left[\begin{array}{cccc}
1&0&8&-4\\
0&1&2&12
\end{array}\right]\left[\begin{array}{c}
x_1\\
x_2\\
x_3\\
x_4
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
42\\
8
\end{array}\right]
$$
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

```
$$
\left[\begin{array}{l}
1\times x_1+0\times x_2+8\times x_3+(-4)\times x_4=42\\
0\times x_1+1\times x_2+2\times x_3+12\times x_4=8
\end{array}\right].
$$
```

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

```
$$
42\left[\begin{array}{l}
1\\
0\\
0\\
0
\end{array}\right]+8\left[\begin{array}{l}
0\\
1\\
0\\
0
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
42\\
8
\end{array}\right]
$$
```

这个解就是 $42\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix}+8\begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}$ ，也就是说四个未知变量分别为 $42S$ 、 $8S$ 、 $0S$ 、 $0S$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{l}
x_1=42\\
x_2=8\\
x_3=0\\
x_4=0
\end{array}\right].
$$
```

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

```
$$
8\left[\begin{array}{l}
1\\
0\\
0\\
1
\end{array}\right]+2\left[\begin{array}{l}
0\\
1\\
8\\
2
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{l}
0\\
8\\
2\\
0
\end{array}\right]
$$
```

通过计算 $AX=0S$ ，我们得出解 $8\begin{bmatrix}1\\0\\0\\1\end{bmatrix}+2\begin{bmatrix}0\\1\\8\\2\end{bmatrix}$ 。而事实上，这个解可以乘以任意实数 λ_1S ，使得 $AX=0S$ 成立。

```
$$
\left[\begin{array}{cccc}
1&0&8&-4\\
0&1&2&12
\end{array}\right]\left[\begin{array}{l}
\lambda_1\left[\begin{array}{l}
8\\
2\\
-1\\
0
\end{array}\right]
\end{array}\right]

```

```
\end{array}\right]
\end{array}\right)=0
$$
```

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $\mathbf{Ax}=\mathbf{0}$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12 \\
\end{array}\right]
\left[\begin{array}{l}
\lambda_2 \\
-4 \\
12 \\
0 \\
-1
\end{array}\right]
\end{array}\right)=0
$$
```

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

```
$$
x \in \mathbb{R}^4: x=\left[\begin{array}{c}
42 \\
8 \\
0 \\
0 \\
\end{array}\right]+\lambda_1\left[\begin{array}{c}
8 \\
2 \\
-1 \\
0 \\
\end{array}\right]+\lambda_2\left[\begin{array}{c}
-4 \\
12 \\
0 \\
-1
\end{array}\right], \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}
$$
```

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ ；
2. 找到 $\mathbf{Ax}=\mathbf{0}$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做**高斯消元法**。

高斯消元法的核心就是**线性方程组的初等变换**，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设a属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3 \\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2 \\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0 \\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right]
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{cccccc}
-2 & 4 & -2 & -1 & 4 & \mid & -3 \\
4 & -8 & 3 & -3 & 1 & \mid & 2 \\
1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\
1 & -2 & 0 & -3 & 4 & \mid & a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{cccccc}
1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\
4 & -8 & 3 & -3 & 1 & \mid & 2 \\
-2 & 4 & -2 & -1 & 4 & \mid & -3 \\
1 & -2 & 0 & -3 & 4 & \mid & a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{cccccc}
1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\
0 & 0 & -1 & 1 & -3 & \mid & 2 \\
-2 & 4 & -2 & -1 & 4 & \mid & -3 \\
1 & -2 & 0 & -3 & 4 & \mid & a
\end{array}\right]

```

```
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{cccccc}
1 & -2 & 1 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\
0 & 0 & -1 & 1 & -3 & 6 & \mid & 2 \\
0 & 0 & 0 & -3 & 6 & -3 & \mid & -3 \\
1 & -2 & 0 & -3 & 4 & 4 & \mid & a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{cccccc}
1 & -2 & 1 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\
0 & 0 & -1 & 1 & -3 & 6 & \mid & 2 \\
0 & 0 & 0 & -3 & 6 & -3 & \mid & -3 \\
0 & 0 & -1 & 1 & -2 & 3 & \mid & a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{cccccc}
1 & -2 & 1 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\
0 & 0 & -1 & 1 & -3 & 6 & \mid & 2 \\
0 & 0 & 0 & -3 & 6 & -3 & \mid & -3 \\
0 & 0 & 0 & -3 & 6 & -3 & \mid & a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{cccccc}
1 & -2 & 1 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\
0 & 0 & -1 & 1 & -3 & 6 & \mid & 2 \\
0 & 0 & 0 & -3 & 6 & -3 & \mid & -3 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1
\end{array}\right]
$$
```

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{cccccc}
1 & -2 & 1 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\
0 & 0 & 1 & -1 & 3 & -2 & \mid & -2 \\
0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & \mid & 1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1
\end{array}\right]
$$
```

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

```
$$
\left[\begin{array}{r}
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0 \\
x_3-x_4+3x_5=-2 \\
x_4-2x_5=1 \\
0=a+1
\end{array}\right]
$$
```

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\left[\begin{array}{l} 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{array}\right]^{\mathrm{T}}$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

```
$$
x \in \mathbb{R}^5: x = \left[\begin{array}{c} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{array}\right] + \lambda_1 \left[\begin{array}{c} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array}\right] + \lambda_2 \left[\begin{array}{c} 0 \\ 2 \\ -1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \end{array}\right]
\left[\begin{array}{c} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 2 \\ 1 \end{array}\right], \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}
$$
```

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} & \lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

A

```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SAS矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$$S(A^T A)^{-1} A^T S$$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

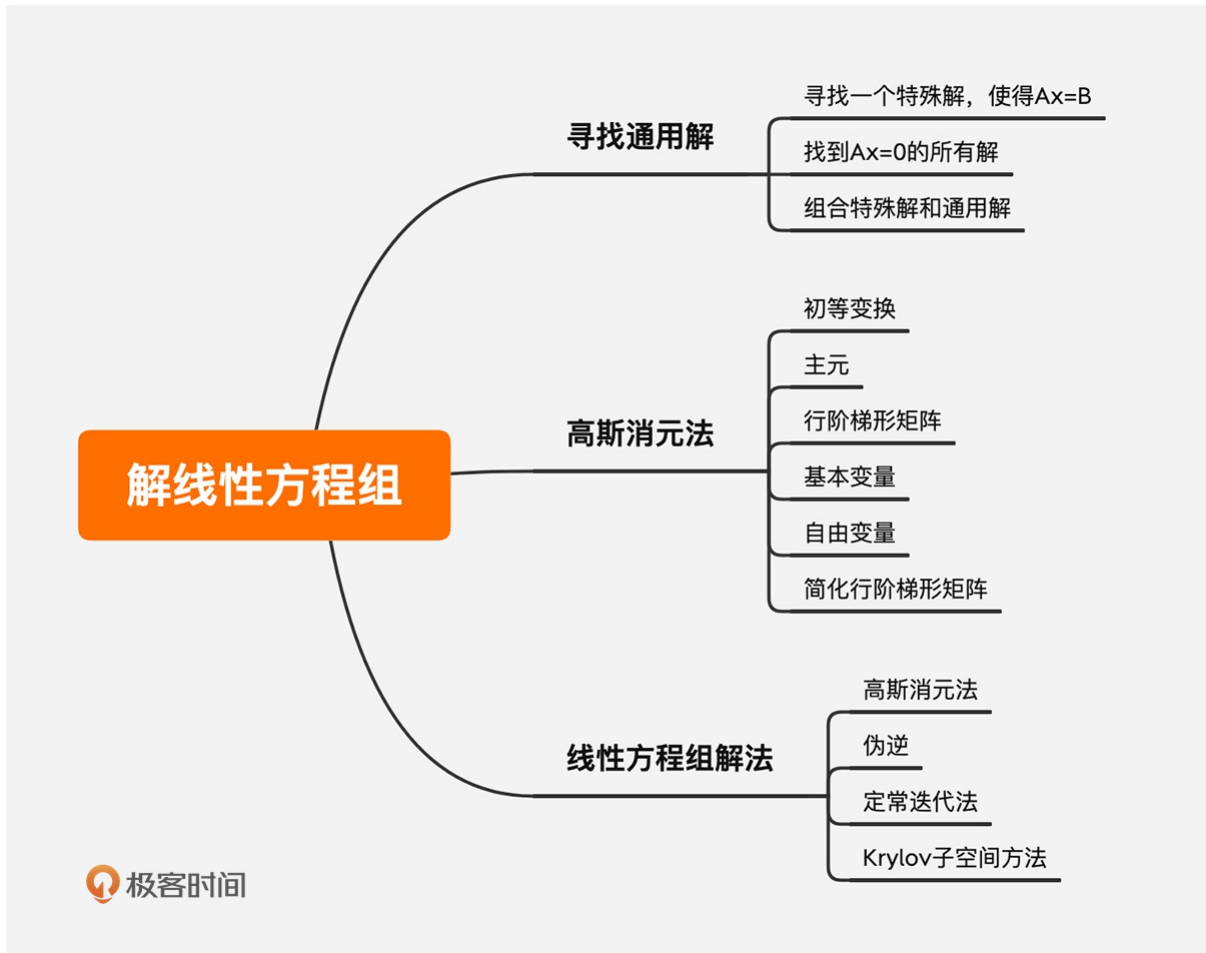
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[ \begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array} \right.
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[ \begin{array}{l}
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\cdots\cdots\cdots\cdots \\
a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array} \right.
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_i 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,n$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=B$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[ \begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12
\end{array} \right] \left[ \begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array} \right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任意实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4: x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设 a 属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```


\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{r} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} & \lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$

```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$$S(A^T A)^{-1} A^T S$$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

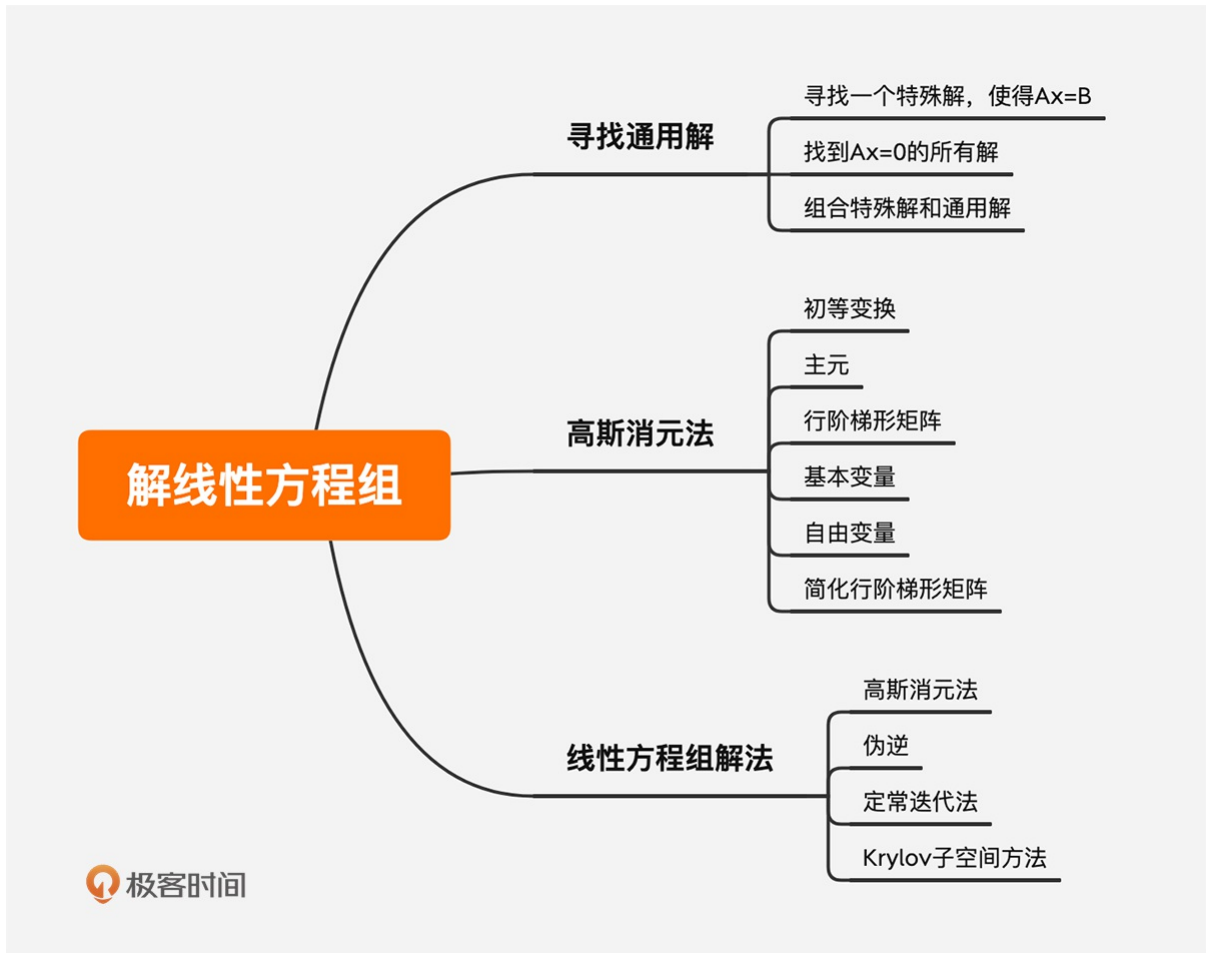
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[ \begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array} \right.
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来对待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[ \begin{array}{l}
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\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array} \right.
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_i 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,m$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=B$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[ \begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12
\end{array} \right] \left[ \begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array} \right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任意实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4 : x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设 a 属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```

\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{ccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{r} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} & \lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$


```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$SS(A^T A)^{-1} A^T A=I$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

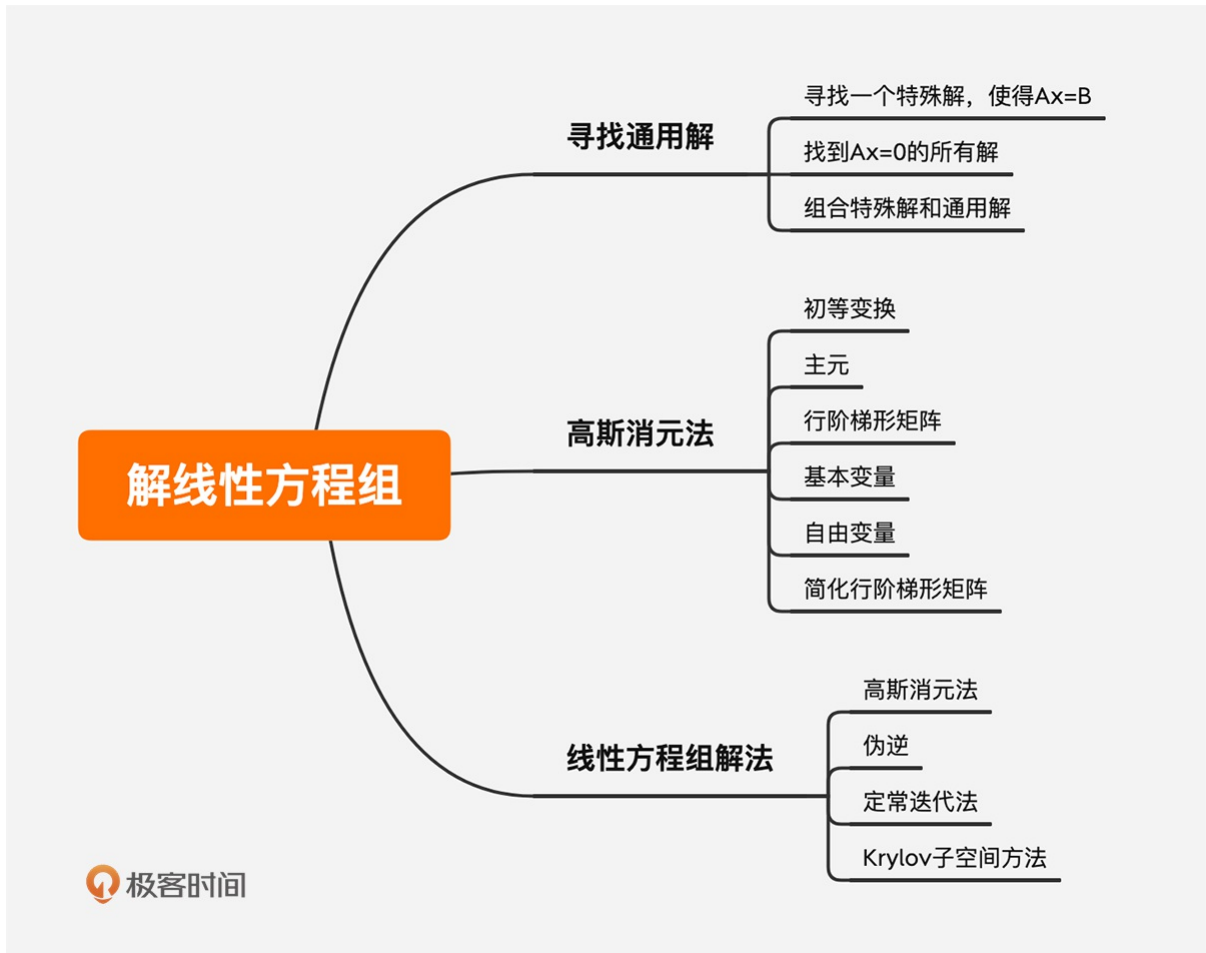
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[ \begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array} \right.
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[ \begin{array}{l}
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\cdots\cdots\cdots\cdots \\
a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array} \right.
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_j 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,m$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=BS$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[ \begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12
\end{array} \right] \left[ \begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array} \right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任意实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4 : x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设 a 属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```

\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{l} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} & \lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$

```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$SS(A^T A)^{-1} A^T A=I$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

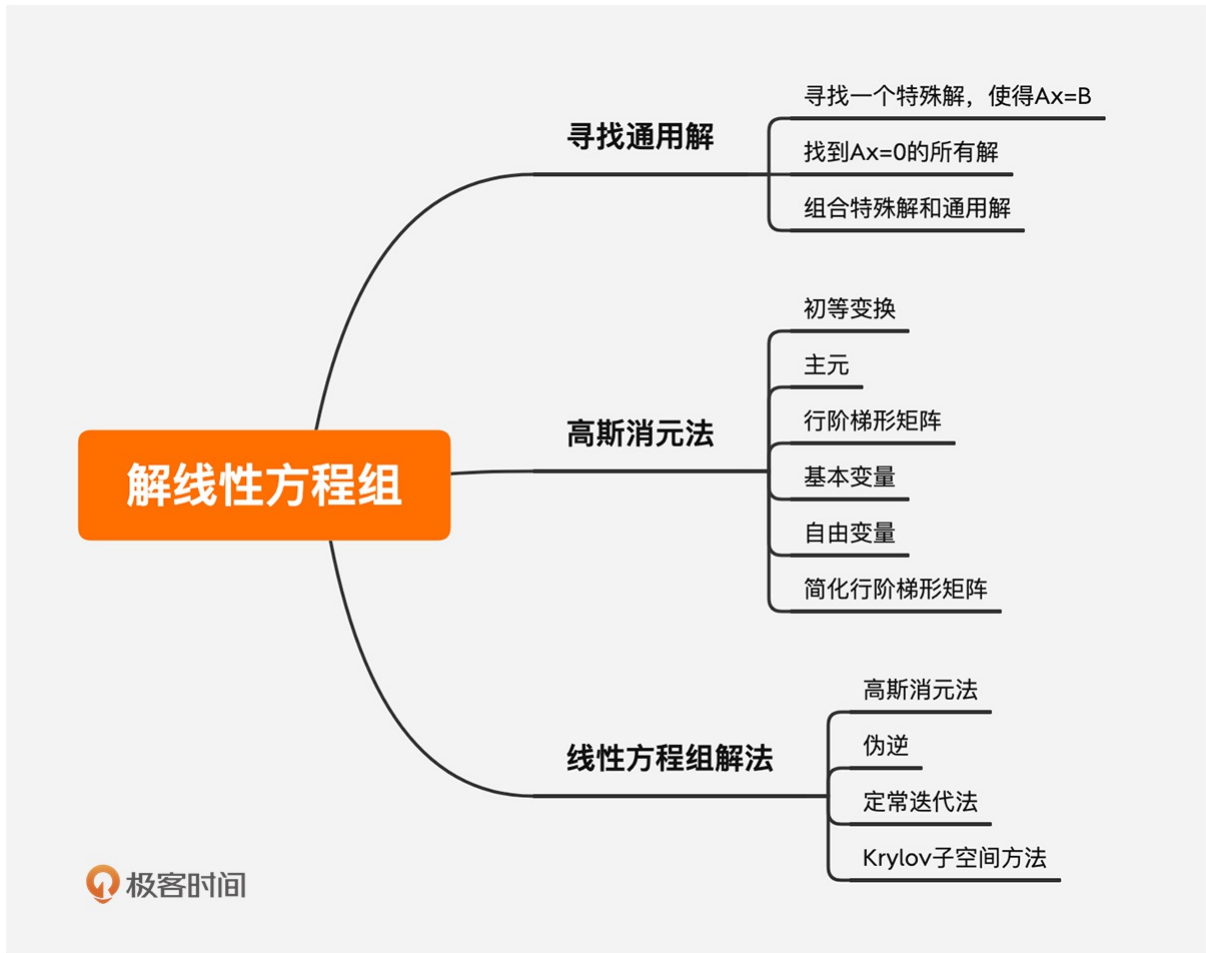
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[ \begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array} \right.
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[ \begin{array}{l}
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\cdots\cdots \\
a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array} \right.
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_i 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,n$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=BS$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[ \begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12
\end{array} \right] \left[ \begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array} \right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任意实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4: x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设a属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```

\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{l} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^5$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} &\lambda_1 \left[\begin{array}{l} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ &\quad + \lambda_2 \left[\begin{array}{l} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ &\quad + \lambda_3 \left[\begin{array}{l} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \\ &= \left[\begin{array}{l} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$

```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$SS(A^T A)^{-1} A^T A=I$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

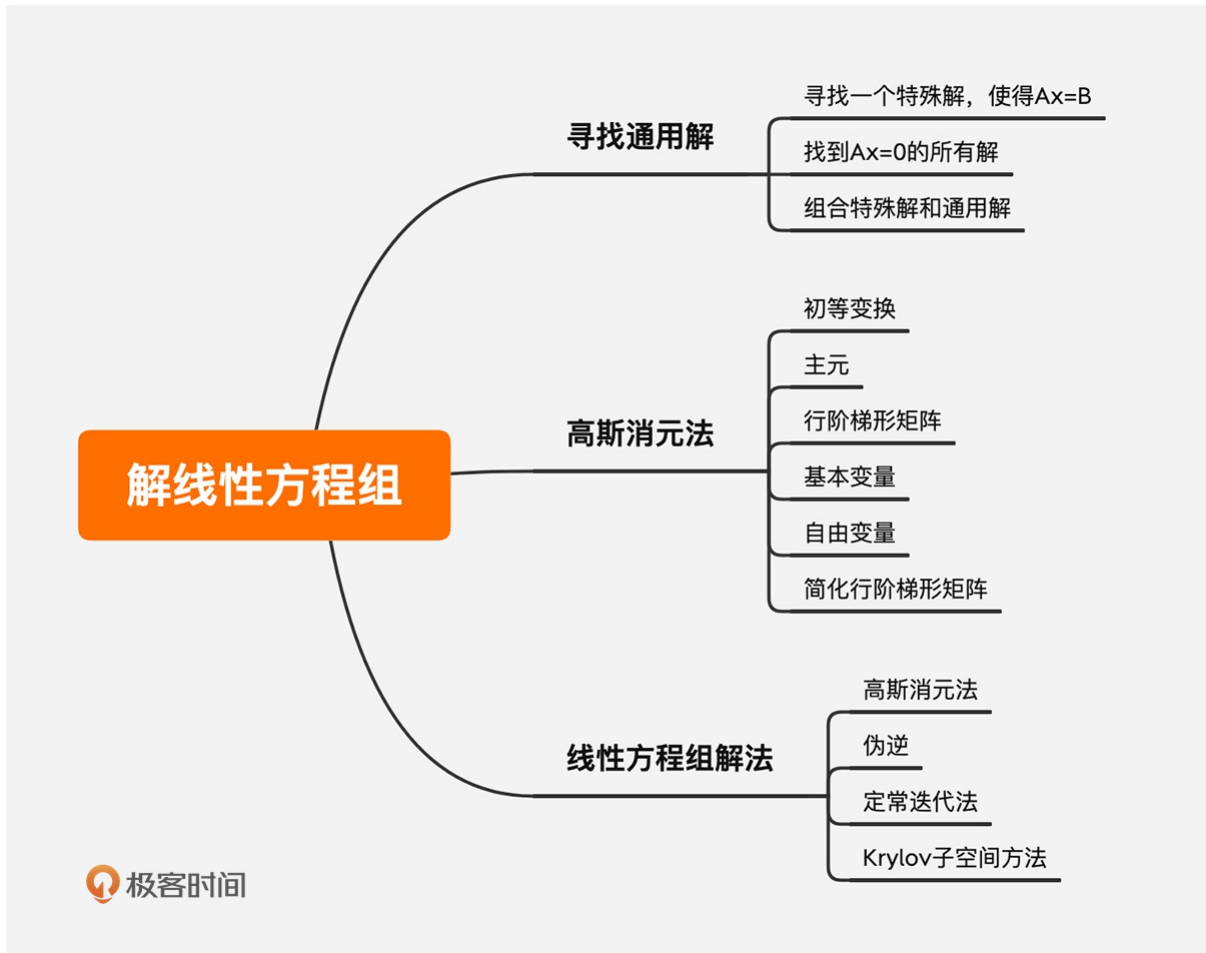
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[\begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array}\right]
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[\begin{array}{l}
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_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array}\right]
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_i 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,n$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=B$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[\begin{array}{cccc}
1&0&8&-4 \\
0&1&2&12
\end{array}\right]\left[\begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array}\right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任意实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4: x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设 a 属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```


\$\$

8.第二行乘以-1, 第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

```

\begin{array}{cccccc}
1 & -2 & & 1 & -1 & 1 & & \mid & & 0 & \backslash \\
0 & & 0 & 1 & & -1 & & 3 & & \mid & & -2 & \backslash \\
0 & & 0 & & 0 & 1 & & -2 & & \mid & & 1 & \backslash \\
0 & & 0 & & 0 & & 0 & 0 & & \mid & & a+1
\end{array}

```

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form, REF）。

```

SS
\left\{\begin{array}{r}
x_1-x_2+x_3-x_4+x_5=0 \\
x_3-x_4+3x_5=2 \\
x_4-2x_5=1 \\
0=a+1
\end{array}\right.
\end{array}\right.
SS

```

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件:

- 如果它既有零行, 又有非零行, 则零行在下, 非零行在上;
- 如果它有非零行, 则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升, 正如之前的这个矩阵, 列号自上而下是1、3、4, 是严格单调上升的.

10. 你可以看出，只有在 $a=1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

11.最后,我们得出这个线性方程组的通用解,如下图所示。

$$\begin{aligned} & \mathbb{S} \\ & x \in R^{\wedge} \{5\} : x = \left\lfloor \begin{array}{l} \end{array} \right\rfloor \{c\} \\ & \begin{array}{l} 2 \\\backslash \\ 0 \\\backslash \\ -1 \\\backslash \\ 1 \\\backslash \\ 0 \end{array} \\ & \left\lfloor \begin{array}{l} \end{array} \right\rfloor + \lambda_1 \left\lfloor \begin{array}{l} \end{array} \right\rfloor \\ & \begin{array}{l} 2 \\\backslash \\ 0 \\\backslash \\ -1 \\\backslash \\ 1 \\\backslash \\ 0 \end{array} \\ & \left\lfloor \begin{array}{l} \end{array} \right\rfloor + \lambda_2 \left\lfloor \begin{array}{l} \end{array} \right\rfloor \{c\} \\ & \begin{array}{l} 2 \\\backslash \\ 0 \\\backslash \\ -1 \\\backslash \\ 1 \\\backslash \\ 0 \end{array} \\ & \left\lfloor \begin{array}{l} \end{array} \right\rfloor, \lambda_1, \lambda_2 \in R \\ & \mathbb{S} \end{aligned}$$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} &\lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &+ \lambda_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &+ \lambda_3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

A

```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$$S(A^T A)^{-1} A^T S$$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

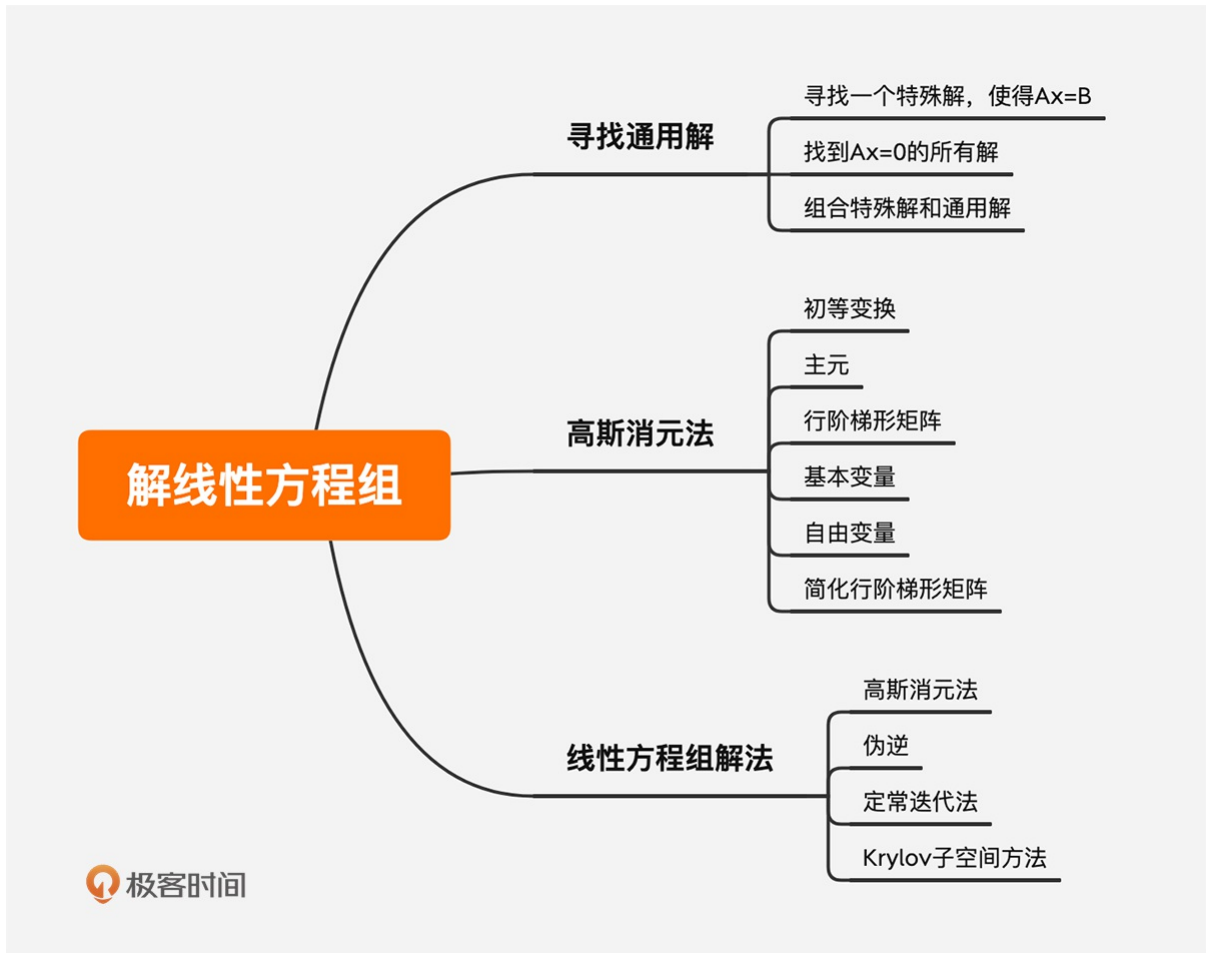
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[\begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array}\right]
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[\begin{array}{l}
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_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array}\right]
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_i 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,n$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=BS$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[\begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12
\end{array}\right]\left[\begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array}\right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任意实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4: x = \begin{cases} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{cases} + \lambda_1 \begin{cases} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{cases} + \lambda_2 \begin{cases} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{cases}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设 a 属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4\\
4&-8&3&-3&1\\
1&-2&1&-1&1\\
1&-2&0&-3&4
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
\\
\\
0\\
a
\end{array}
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1\\
4&-8&3&-3&1\\
-2&4&-2&-1&4\\
1&-2&0&-3&4
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
0\\
a\\
-3\\
a
\end{array}
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1\\
0&0&-1&1&-3\\
-2&4&-2&-1&4\\
1&-2&0&-3&4
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
0\\
a\\
-3\\
a
\end{array}
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1\\
0&0&-1&1&-3\\
0&0&0&-3&6\\
1&-2&0&-3&4
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
0\\
a\\
-3\\
a
\end{array}
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1\\
0&0&-1&1&-3\\
0&0&0&-3&6\\
0&0&-1&-2&3
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
0\\
a\\
-3\\
a
\end{array}
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1\\
0&0&-1&1&-3\\
0&0&0&-3&6\\
0&0&0&-3&6
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
0\\
a\\
-3\\
a-2
\end{array}
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1\\
0&0&-1&1&-3\\
0&0&0&-3&6\\
0&0&0&0&0
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
0\\
a\\
-3\\
a+1
\end{array}

```

\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{r} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} &\lambda_1 \left[\begin{array}{l} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ &\quad + \lambda_2 \left[\begin{array}{l} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ &\quad + \lambda_3 \left[\begin{array}{l} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \\ &= \left[\begin{array}{l} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$


```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=BS$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}BS$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$SSAx=B \Leftrightarrow A^TAx=A^TB \Leftrightarrow x=(A^TA)^{-1}A^TB$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$SS(A^TA)^{-1}A^T$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

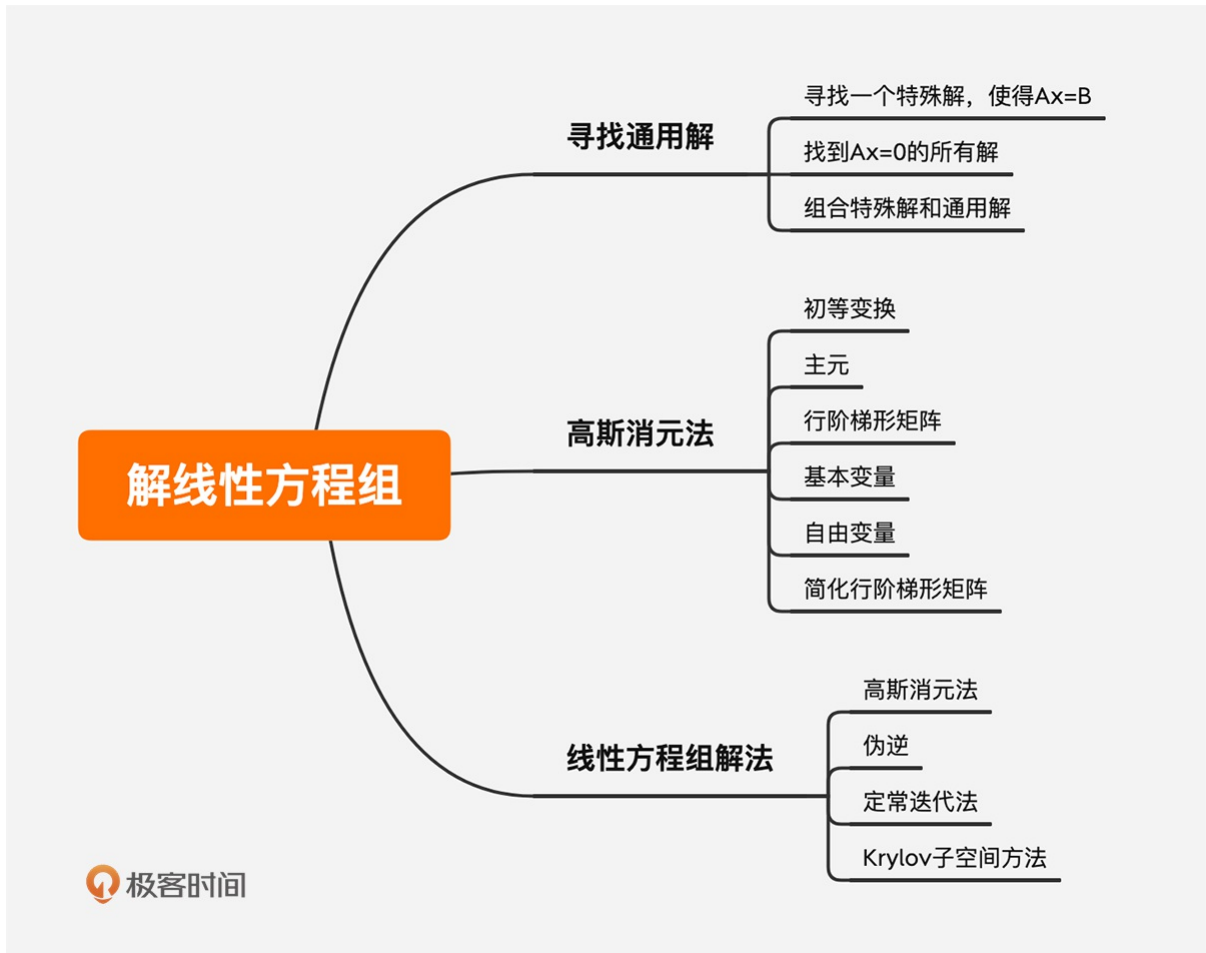
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[ \begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array} \right.
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来对待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[ \begin{array}{l}
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_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array} \right.
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_i 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,n$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=BS$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[ \begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12
\end{array} \right] \left[ \begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array} \right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任意实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4 : x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设 a 属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```

\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{r} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \in \mathbf{T}$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbf{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbf{R} \end{array}$$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} &\lambda_1 \left[\begin{array}{l} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ &\quad + \lambda_2 \left[\begin{array}{l} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ &\quad + \lambda_3 \left[\begin{array}{l} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \\ &= \left[\begin{array}{l} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$

```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & 0 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & \mid & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$S(A^T A)^{-1} A^T S$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

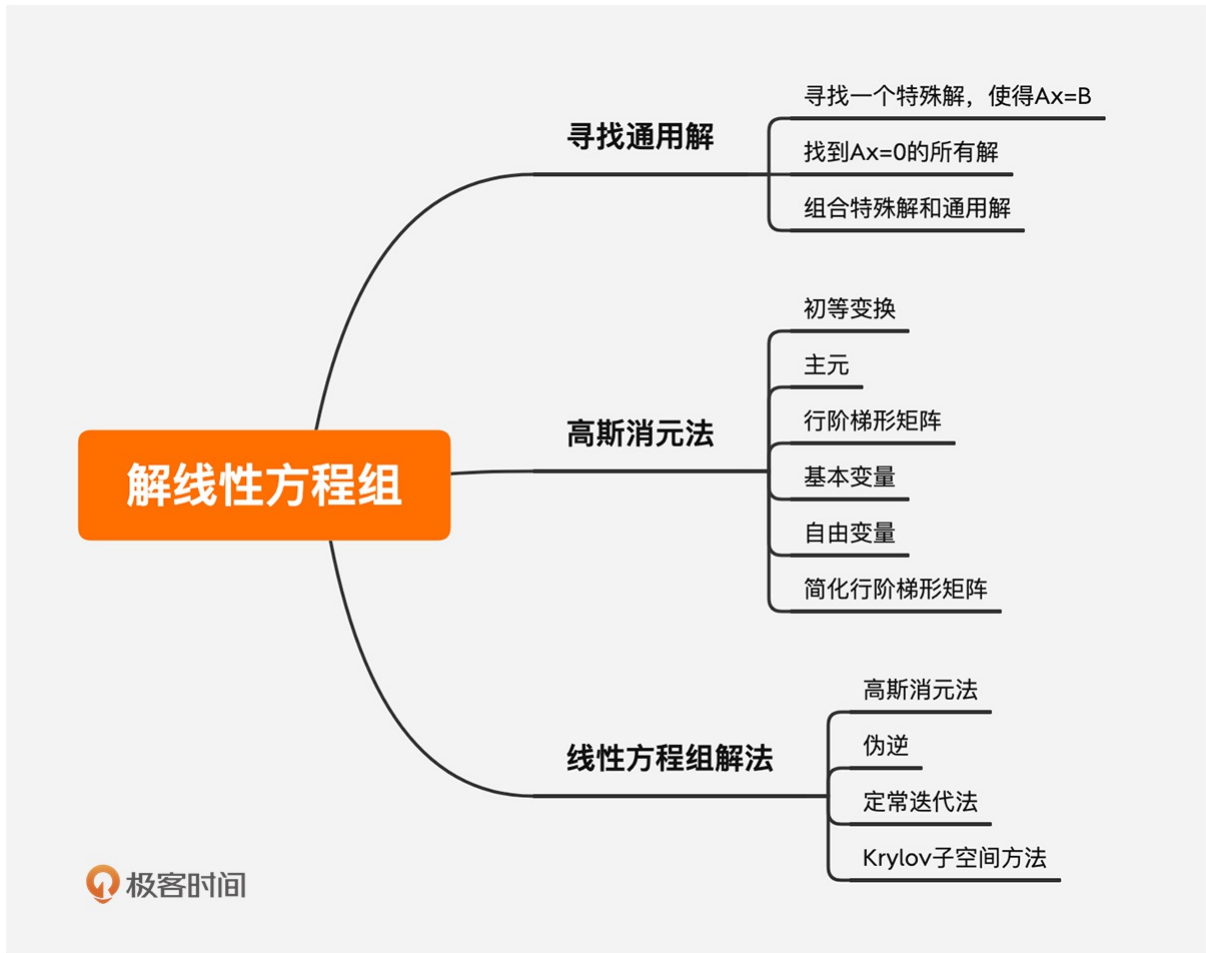
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[ \begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array} \right.
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[ \begin{array}{l}
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\cdots\cdots\cdots\cdots \\
a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array} \right.
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_i 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,n$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=BS$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[ \begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12
\end{array} \right] \left[ \begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array} \right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任何实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4 : x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设 a 属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```

\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{r} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} & \lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$

```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & 0 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & \mid & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=BS$ ，那 SxS 解就可以写成 $Sx=A^{-1}BS$ ，但如果SAS矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求 SxS 解了。

$SSAx=B \Leftrightarrow A^TAx=A^TB \Leftrightarrow x=(A^TA)^{-1}A^TB$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$SS(A^TA)^{-1}A^T$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

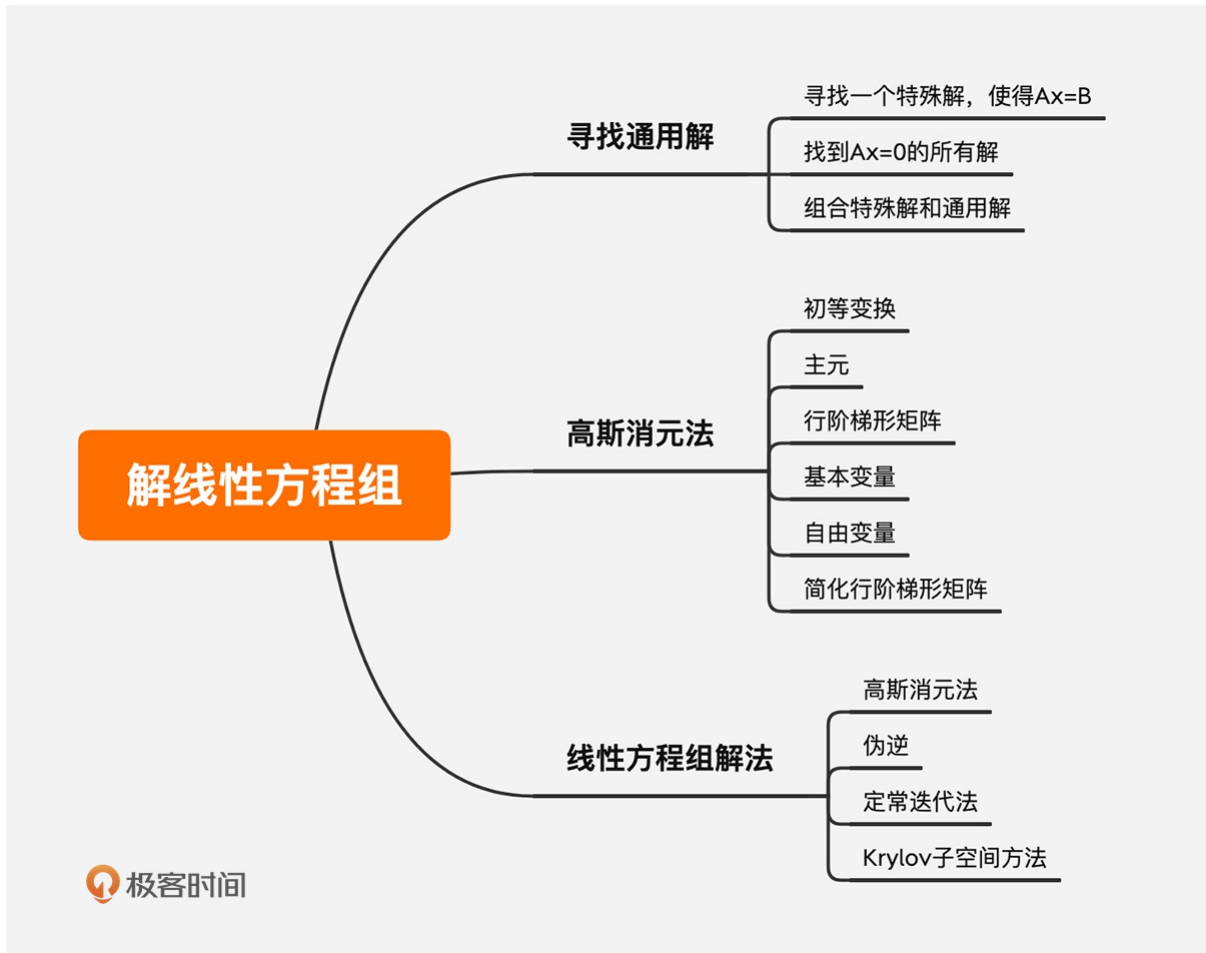
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[ \begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array} \right.
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[ \begin{array}{l}
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\cdots\cdots\cdots\cdots \\
a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array} \right.
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_i 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,m$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=B$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[ \begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12
\end{array} \right] \left[ \begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array} \right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任意实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4 : x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设 a 属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```


\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{r} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} &\lambda_1 \left[\begin{array}{l} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ &\quad + \lambda_2 \left[\begin{array}{l} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ &\quad + \lambda_3 \left[\begin{array}{l} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \\ &= \left[\begin{array}{l} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$

```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$$S(A^T A)^{-1} A^T S$$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

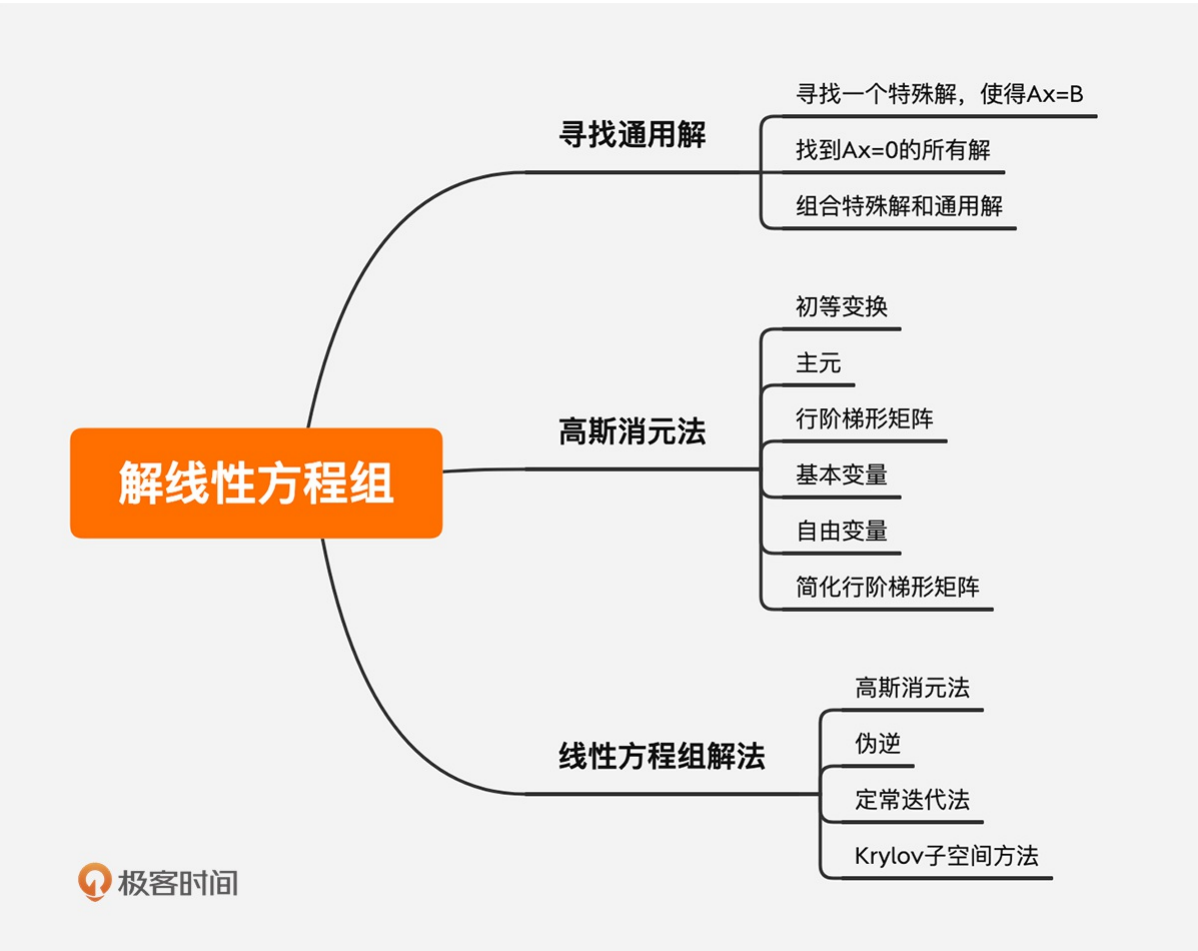
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[\begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array}\right.
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[\begin{array}{l}
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_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array}\right.
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_j 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,m$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=BS$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[\begin{array}{cccc}
1&0&8&-4 \\
0&1&2&12
\end{array}\right]\left[\begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array}\right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任意实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4: x = \begin{cases} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{cases} + \lambda_1 \begin{cases} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{cases} + \lambda_2 \begin{cases} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{cases}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设 a 属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```

\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{r} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} & \lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$


```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$SS(A^T A)^{-1} A^T A=I$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

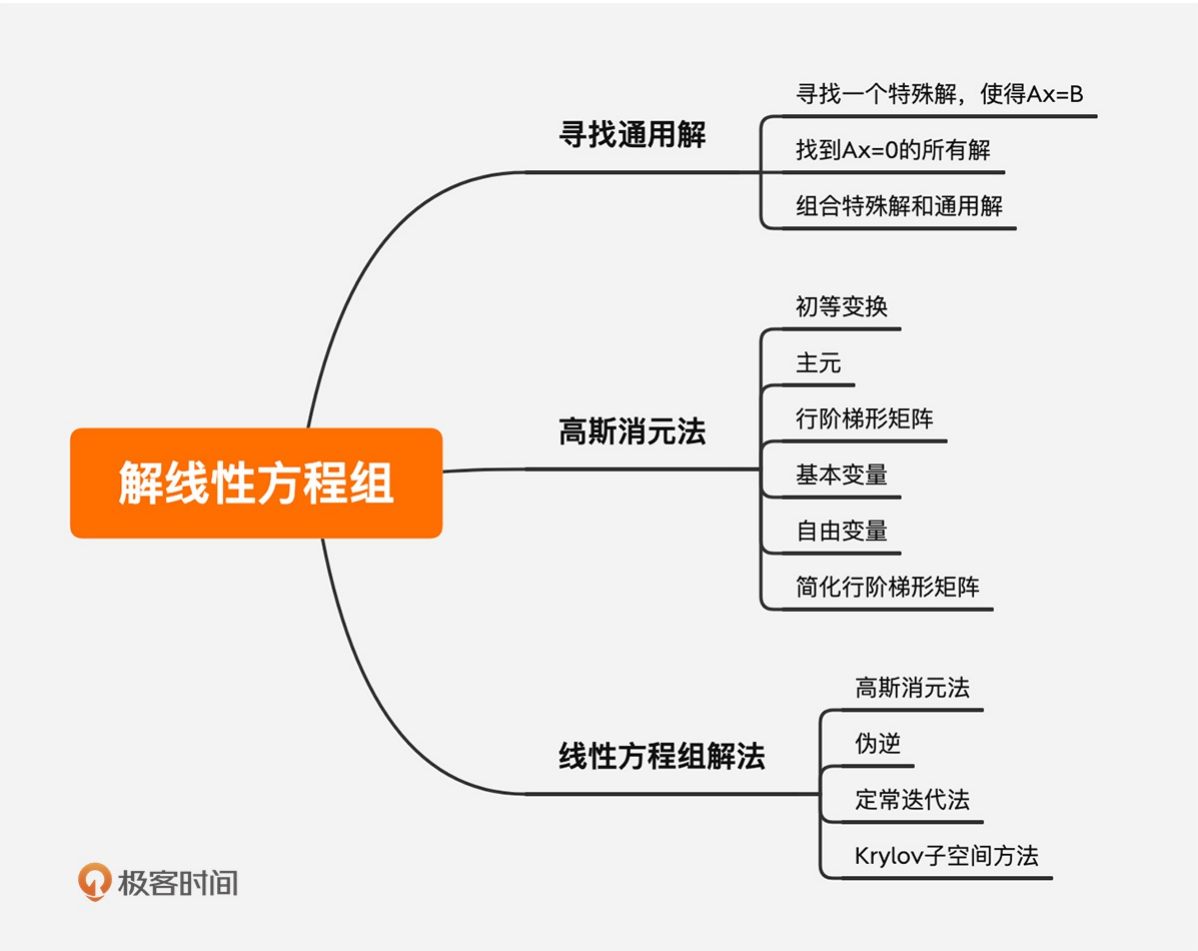
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[\begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array}\right]
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[\begin{array}{l}
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_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array}\right]
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_i 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,n$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=BS$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[\begin{array}{cccc}
1&0&8&-4 \\
0&1&2&12
\end{array}\right]\left[\begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array}\right]=\left[\begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array}\right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任何实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4 : x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设a属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```

\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{r} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} &\lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &+ \lambda_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &+ \lambda_3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$

```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$SS(A^T A)^{-1} A^T A=I$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

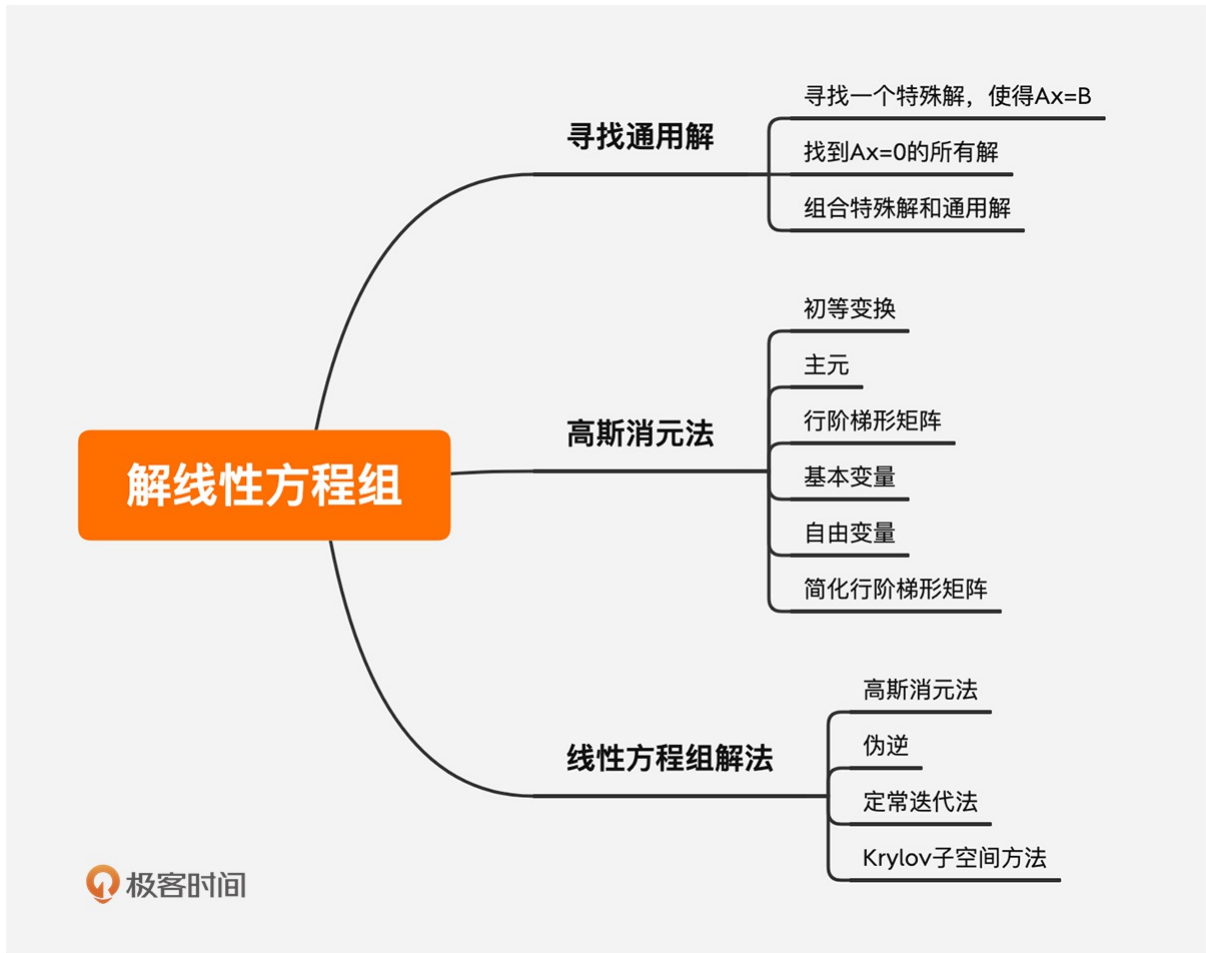
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[ \begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array} \right.
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[ \begin{array}{l}
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\cdots\cdots\cdots\cdots \\
a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array} \right.
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_j 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,n$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=BS$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[ \begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12
\end{array} \right] \left[ \begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array} \right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任意实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4: x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设 a 属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```

\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{r} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} &\lambda_1 \left[\begin{array}{l} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ &\quad + \lambda_2 \left[\begin{array}{l} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\ &\quad + \lambda_3 \left[\begin{array}{l} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \\ &= \left[\begin{array}{l} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right] \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$

```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$SS(A^T A)^{-1} A^T SS$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

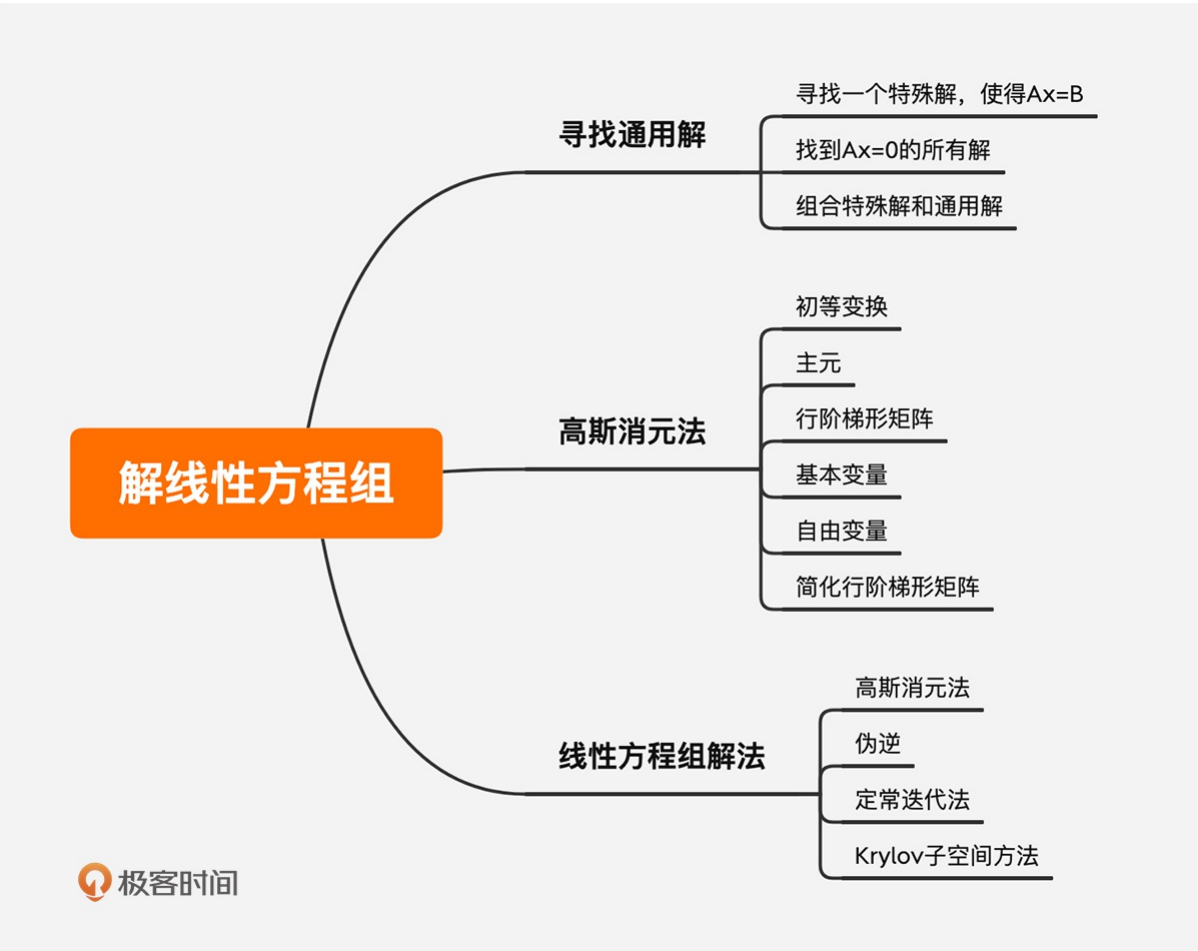
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[ \begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array} \right.
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[ \begin{array}{l}
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_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array} \right.
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_j 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,m$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=BS$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[ \begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12
\end{array} \right] \left[ \begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array} \right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任何实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4 : x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设a属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4\\
4&-8&3&-3&1\\
1&-2&1&-1&1\\
1&-2&0&-3&4
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
\\
\\
\\
a
\end{array}
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1\\
4&-8&3&-3&1\\
-2&4&-2&-1&4\\
1&-2&0&-3&4
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
\\
\\
\\
a
\end{array}
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1\\
0&0&-1&1&-3\\
-2&4&-2&-1&4\\
1&-2&0&-3&4
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
\\
\\
\\
a
\end{array}
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1\\
0&0&-1&1&-3\\
0&0&0&-3&6\\
1&-2&0&-3&4
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
\\
\\
\\
a
\end{array}
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1\\
0&0&-1&1&-3\\
0&0&0&-3&6\\
0&0&-1&-2&3
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
\\
\\
\\
a
\end{array}
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1\\
0&0&-1&1&-3\\
0&0&0&-3&6\\
0&0&0&-3&6
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
\\
\\
\\
a-2
\end{array}
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1\\
0&0&-1&1&-3\\
0&0&0&-3&6\\
0&0&0&0&0
\end{array}\right]
\begin{array}{c}
\\
\\
\\
a+1
\end{array}

```


\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{r} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} & \lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$

```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$SS(A^T A)^{-1} A^T A=I$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

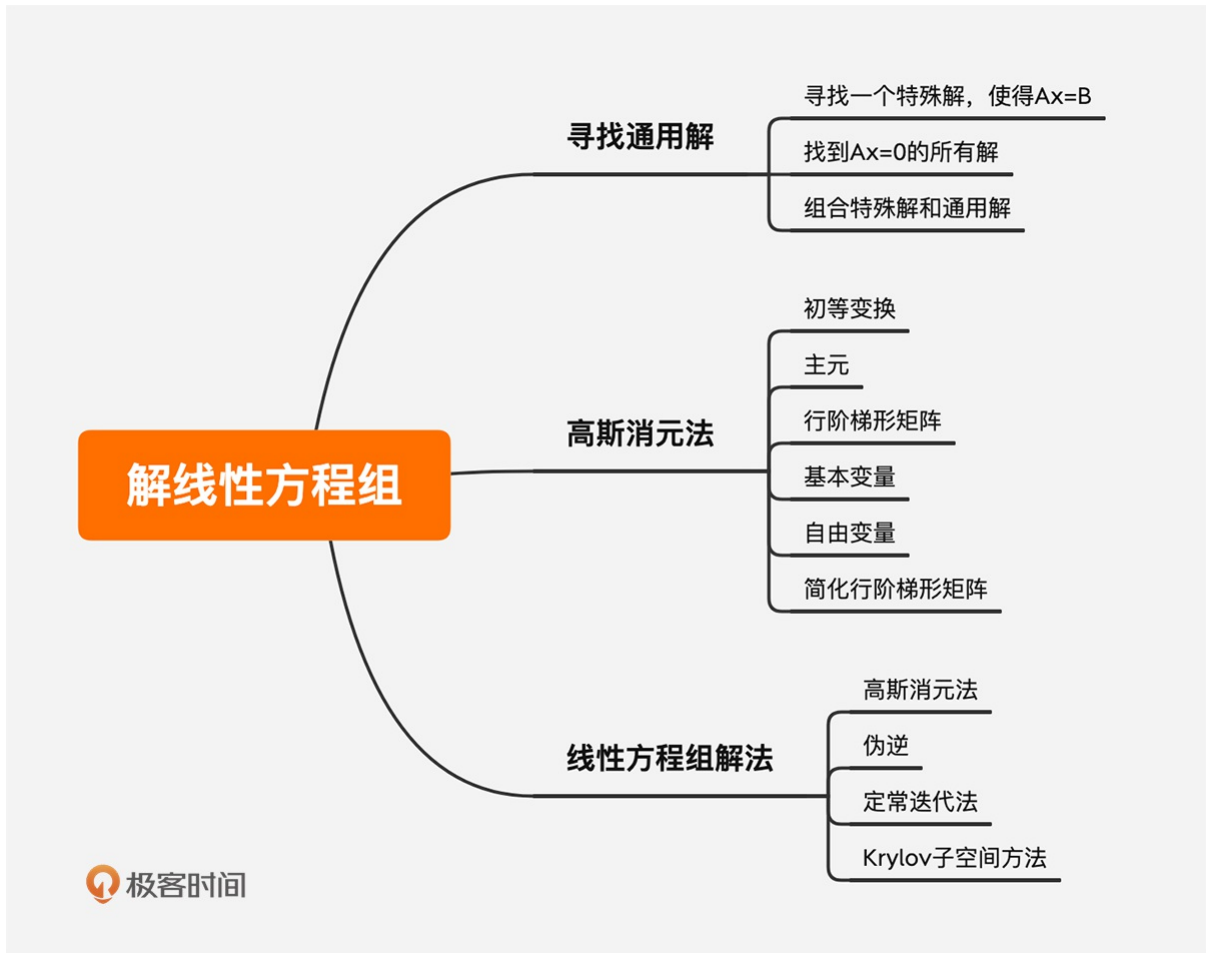
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[ \begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array} \right.
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[ \begin{array}{l}
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_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array} \right.
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_i 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,m$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=BS$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[ \begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12
\end{array} \right] \left[ \begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array} \right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任何实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4: x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设 a 属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```

\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{l} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in R^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} & \lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

A


```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$SS(A^T A)^{-1} A^T A=I$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

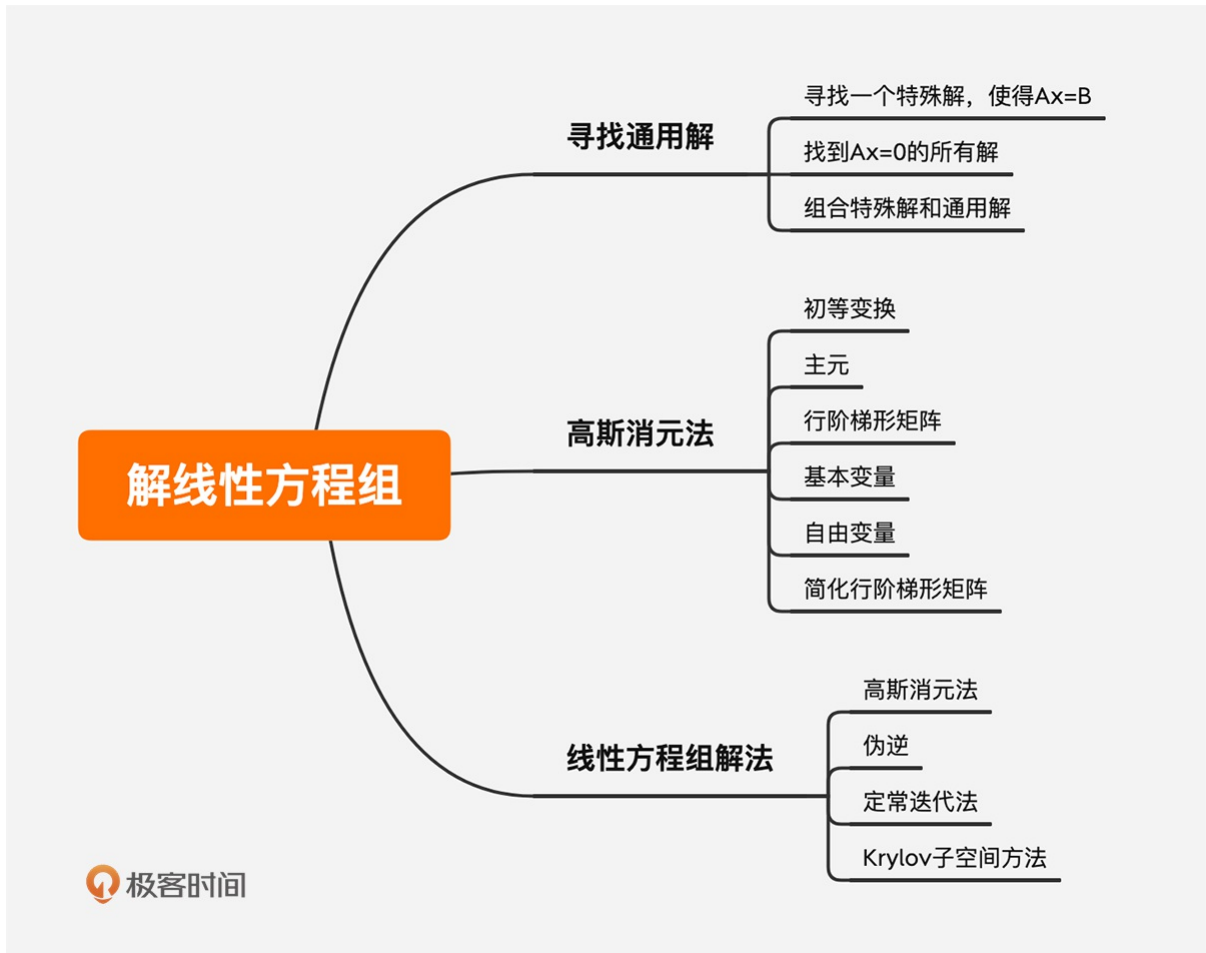
- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
SS
\left[ \begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array} \right.
SS
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。

你好，我是朱维刚。欢迎你跟我一起重学线性代数！

在上一节课中，我讲解了线性方程组的另一种表达——矩阵。那么今天，我们就来讲解一下如何使用矩阵来解线性方程组，也就是如何求线性方程组的特殊解和通用解。

简单的线性方程组，我们当然可以运用初中学过的知识来求解，那复杂的呢？硬来几乎是不可能的了，一方面是因为人工计算的错误率很高，另一方面，即使我们使用计算机，用类似for或while循环来实现算法，它的计算效率也是极低的。你需要用更科学的方式、方法，从另一个角度来看待和求解线性方程组。

而矩阵就是为我们打开高效之门的钥匙，从计算机科学的角度来说，使用矩阵的运算效率实在是高太多了，因为它可以利用计算机的并行能力，甚至在一些迭代法中，还能实现分布式并行计算（迭代法会在后面“应用篇”中讲解）。

线性方程组解的寻找

现在，就让我们开始去寻找线性方程组的解。在之前的课程中，我们已经引入了线性方程组的一般表达，你可以看看下面的例子。

```
SS
\left[ \begin{array}{l}
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\cdots\cdots\cdots\cdots \\
a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m
\end{array} \right.
SS
```

其中， a_{ij} 和 b_i 属于实数，而且是已知常数，而 x_j 是未知变量， i 和 j 的取值范围分别是： $i=1,\dots,n$ ； $j=1,\dots,n$ 。如果我们用矩阵的简单表达方式来的话，就是 $Ax=BS$ 。

要搞清楚概念，我们还是要多看具体的例子。让我们先来看一个实例，来加深一下理解。

```
SS
\left[ \begin{array}{cccc}
1 & 0 & 8 & -4 \\
0 & 1 & 2 & 12
\end{array} \right] \left[ \begin{array}{c}
x_1 \\
x_2 \\
x_3 \\
x_4
\end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c}
42 \\
8
\end{array} \right]
SS
```

很明显，这是一个矩阵表达方式。它的一般线性方程组表达方式是中学的基础知识，你应该很熟悉了。

$$\begin{cases} 1 \times x_1 + 0 \times x_2 + 8 \times x_3 + (-4) \times x_4 = 42 \\ 0 \times x_1 + 1 \times x_2 + 2 \times x_3 + 12 \times x_4 = 8 \end{cases}$$

在这个一般线性方程组中，有四个未知变量，但只有两个等式，这就意味着这个线性方程组有无穷多个解（这个是中学数学的范畴）。通过细心观察，我们可以发现第一列和第二列都是由0和1组成的，因此你很容易就能发现其中一个解。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 42 \\ 8 \end{cases}$$

这个解就是 $\begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ ，也就是说四个未知变量分别为\$42\$、\$8\$、\$0\$、\$0\$。

$$\begin{cases} x_1 = 42 \\ x_2 = 8 \\ x_3 = 0 \\ x_4 = 0 \end{cases}$$

这个解也叫做特殊解。我们刚才已经说过，这个线性方程组有无穷多个解，那我们确实需要一个聪明的方式来找到其他的解，最直观的方式就是通过矩阵的列来构造0。例如，对于第三列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达。

$$\begin{cases} 1 \\ 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 8 \\ 2 \end{cases}$$

通过计算 $Ax=0$ ，我们得出解 $\begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}^T$ 。而事实上，这个解可以乘以任意实数 λ_1 ，使得 $Ax=0$ 成立。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{cases}$$

同理，对于第四列来说，我们可以使用第一和第二列的组合形式来表达，得出另一套解，使得 $Ax=0$ 。

$$\begin{cases} 1 & 0 & 8 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 12 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

现在，我们可以把之前的特殊解与刚得出的两套解相组合，得出最终解，这个解也就是我们所说的通用解了。

$$x \in \mathbb{R}^4: x = \begin{pmatrix} 42 \\ 8 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_1 \begin{pmatrix} 8 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} -4 \\ 12 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R}$$

我来总结一下寻找通用解的过程，这个过程分为三步：

1. 我们要寻找一个特殊解，使得 $AX=b$ ；
2. 找到 $AX=0$ 的所有解；
3. 组合第一和第二步的解形成通用解。

看到了这里，你有没有发现有些奇怪呢？或者说，有没有觉得哪里有点别扭？是的，好像有点太顺利了。那是因为这个线性方程组比较特别，第一列和第二列是由1和0组成的。所以，我们只通过观察就能得出特殊解和通用解。

然而，你不可能每次都行大运，就像我们在现实中碰到的这类线性方程组，一般都比这个复杂得多。不过不要慌，有一个算法可以帮助我们转换任意线性方程组，形成类似的特殊形式，这个算法叫做高斯消元法。

高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，于是，我们可以通过高斯消元法，得到围绕初等变换形成的简单矩阵表达式，接下来我们就可以运用之前的三个步骤来寻找通用解了。

初等变换的一般形式

既然高斯消元法的核心就是线性方程组的初等变换，那为了方便你使用高斯消元法，我就有必要来讲一讲初等变换的一般形式有哪些：

1. 两个等式的交换，也就是矩阵行交换；
2. 一个等式，或者说矩阵行乘以一个实数常量；
3. 两个等式相加，或者说矩阵的两行相加。

道理是这样的道理，那我们通过一个例子来看看，究竟该怎么做线性方程组的初等变换。假设a属于实数，现在我们试着来寻找下面这个线性方程组的所有解。我把这个过程细细地拆解为11个步骤，建议你仔细看过并理解后，再进入下一阶段的学习。

```
$$
\left[\begin{array}{c}
-2x_1+4x_2-2x_3-x_4+4x_5=-3\\
4x_1-8x_2+3x_3-3x_4+x_5=2\\
x_1-2x_2+x_3-x_4+x_5=0\\
x_1-2x_2-3x_4+4x_5=a
\end{array}\right].
$$
```

1.我们要把这个线性方程组转换成矩阵的表达式， $AX=b$ 。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

2.接着我们来交换第一和第三行。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
4&-8&3&-3&1&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

注意，你知道我们为什么选择第一行和第三行交换吗？其实，这是为了便于计算。而具体交换哪一行是有个小技巧的，如果某行的第一个元素有1，我们就可以把这一行移到第一行。

3.我们以第一行为基础，开始执行乘和加变换，将第一行乘以-4的结果和第二行相加，从而获得了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
-2&4&-2&-1&4&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

4.然后，我们用同样的方法，将第一行乘以2的结果，再和第三行相加，得到了下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
1&-2&0&-3&4&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

5.以此类推，我们将第一行乘以-1的结果，和第四行相加，继续获得新矩阵。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&-1&-2&3&\mid&a
\end{array}\right]
$$
```

6.将第二行乘以-1的结果，和第四行相加，得到下面这样的结果。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&-3&6&\mid&a-2
\end{array}\right]
$$
```

7.将第三行乘以-1的结果，和第四行相加。

```
$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1&-2&1&-1&1&\mid&0\\
0&0&-1&1&-3&\mid&2\\
0&0&0&-3&6&\mid&-3\\
0&0&0&0&0&\mid&a+1
\end{array}\right]

```

\$\$

8.第二行乘以-1，第三行乘以 $-\frac{1}{3}$ 。

\$\$

$$\begin{array}{cccccc} 1 & -2 & 1 & -1 & 1 & \mid & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 3 & \mid & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & \mid & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mid & a+1 \end{array}$$

\$\$

9.现在，这个矩阵就是一个简单形式的矩阵，也叫做行阶梯形矩阵（Row-Echelon Form，REF）。

\$\$

$$\begin{array}{r} x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 + x_5 = 0 \\ x_3 - x_4 + 3x_5 = -2 \\ x_4 - 2x_5 = 1 \\ 0 = a+1 \end{array}$$

\$\$

一个矩阵成为行阶梯形矩阵需满足两个条件：

- 如果它既有零行，又有非零行，则零行在下，非零行在上；
- 如果它有非零行，则每个非零行的第一个非零元素所在列号自上而下严格单调上升，正如之前的这个矩阵，列号自上而下是1、3、4，是严格单调上升的。

10.你可以看出，只有在 $a=-1$ 的情况下，这个线性方程组才有解，特殊解是 $\begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T$ 。

11.最后，我们得出这个线性方程组的通用解，如下图所示。

\$\$

$$\begin{array}{l} x \in \mathbb{R}^5: x = \begin{pmatrix} c \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \\ \quad + \lambda_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

\$\$

注意，这里有一个概念很重要，那就是主元。主元就是在矩阵消元过程中，每列要保留的非零元素，我们可以用它把该列其他元素消去。在阶梯型矩阵中，每个非零行第一个非零元素就是主元。

拿之前的第8步计算后的结果来举例，第一行的第一个元素1就是主元，第二行第三个元素1是主元，第三行的第四个元素1也是主元。

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应行阶梯形矩阵主元的变量叫做基本变量，而其他的变量叫做自由变量，这个例子中， x_1 、 x_3 、 x_4 就是基本变量， x_2 、 x_5 则是自由变量。使用行阶梯形矩阵能更简单地得出特殊解，所以我们可以使用主元列来表达线性方程组：

$$b = \sum_{i=1}^P \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i=1, \dots, P$$

在之前的例子中，我们使用主元列来表达成下面这样的矩阵形式：

$$\begin{aligned} & \lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & + \lambda_3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ & = \begin{bmatrix} 0 \\ -2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

于是，我们最终得出 $\lambda_3=1$ ， $\lambda_2=-1$ ， $\lambda_1=2$ ，分别对应于 x_4 、 x_3 、 x_1 。不要忘了，对于非主元列，我们已经隐式地把系数设置成了0，所以这个线性方程组的特殊解是 $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ 。

简化行阶梯形矩阵

这里我们再引入一个概念，简化行阶梯形矩阵，因为引入简化行阶梯形矩阵对于线性方程组的求解来说会更简单。其实，高斯消元法的核心就是通过初等变换，把线性方程组转换成简化行阶梯形矩阵。那么一个方程组是简化行阶梯形矩阵，必须满足哪几个条件呢？

1. 这个方程组必须是行阶梯形矩阵；
2. 方程组的每一个主元都是1；
3. 主元在它的列中是唯一的非0元素。

现在，我们再通过一个实例，看看该如何通过高斯消元法计算一个矩阵的逆矩阵。设矩阵 A 如下图：

\$\$

```
A=\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array}\right]
```

首先，我们形成SAS的增广矩阵（具体方法参见上一节）。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 2 & 0 & \mid & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & \mid & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hline 1 & 2 & 0 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 1 & \mid & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline \end{array}\right]
```

其次，使用我们前面刚刚讲过的高斯消元法计算出简化行阶梯形矩阵。

```
\left[\begin{array}{|c|} \hline 1 & 0 & 0 & 0 & \mid & -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & \mid & 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & \mid & 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & \mid & -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

最后，我们就得到SAS的逆矩阵，如下图所示。

```
A^{-1}=\left[\begin{array}{|c|} \hline -1 & 2 & -2 & 2 \\ \hline 1 & -1 & 2 & -2 \\ \hline 1 & -1 & 1 & -1 \\ \hline -1 & 0 & -1 & 2 \\ \hline \end{array}\right]
```

接下来，我们只要使用公式 $SA^{-1}=I$ 就可以对结果进行验证了。

更多解线性方程组的方法

到目前为止，相信你已经了解了如何解线性方程组，包括特殊解和通用解，以及如何使用高斯消元法来解线性方程组。最后，我再总结一些解方法来作为你的知识扩展。

第一个方法，假设一个矩阵A是方阵（行数与列数相等的矩阵），并且可逆， $SAx=B$ ，那SxS解就可以写成 $x=A^{-1}B$ ，但如果SA矩阵不可逆，也不是方阵，那我们就只能使用下面这个变换来求SxS解了。

$SAx=B \Leftrightarrow A^T Ax=A^T B \Leftrightarrow x=(A^T A)^{-1} A^T B$

其中，矩阵A的转置矩阵和A相乘的逆矩阵，再和A的转置矩阵相乘，我们把它叫做穆尔彭罗斯伪逆矩阵（Moore-Penrose pseudo inverse），简称伪逆。

$SS(A^T A)^{-1} A^T A=I$

这个方法有两个弊端：第一，矩阵乘和逆矩阵的计算太复杂；第二，数值精确度不高。因此，从实践角度来说，我一般不推荐使用。

第二个方法是高斯消元法。高斯消元法是非常直观的，它在很多计算中都起到了关键的作用，比如：

- 1. 计算行列式；
- 2. 检查向量是否是线性独立的；
- 3. 计算矩阵的逆矩阵；
- 4. 计算矩阵的铁；
- 5. 决定向量空间的基。

但当高斯消元法面对百万、千万级别的变量时，就捉襟见肘了。而这类级别的计算才是我们在实践中经常会遇到的，因此从实践角度来说，我也一般不推荐使用。因为高斯消元法属于直接法，直接法是经历有限次的运算得到方程组精确解的方法。但是，学习直接法是有意义的，虽然直接法在实际工作中不常用，但是它也能处理一些日常小问题，更重要的是，它稳固了我们进一步学习其它方法的基础。

我要讲的第三种方法，就是与直接法对应的间接法了。在实践中，线性方程组的求解都是间接的，也就是运用迭代法。

迭代法是采用极限过程，用线性方程组的近似解逐步逼近精确解的方法。所以，迭代法的关键在于每次迭代残余错误的减少，以及如何能够收敛到解。常见的迭代法有两类，定常迭代法（Stationary iterative method）和Krylov子空间方法（我会在应用篇中讲解）。

- 定常迭代法：理查德森迭代法（Richardson method）、雅可比方法（Jacobi method）、Gauß-Seidel方法、逐次超松弛法（Successive over-relaxation method，简称SOR）。
- Krylov子空间方法：共轭梯度法（Conjugate gradient）、广义极小残余算法（Generalized minimal residual）、双共轭梯度法（Biconjugate gradient）。

这里提到的几种迭代法都是在实践中比较常用的，也是计算机编程中经常实现的算法，但由于迭代法更多属于微分和极限领域，所以这里就不详细介绍了，我会在线性代数应用篇的“数值线性代数”那节课中再做讲解。

如果在课程内容结束后，你还有余力学习更多的内容，这里我先推荐两本书给你作参考，一本是《Introduction to Numerical Analysis》，另一本是《Linear Algebra》。这两本书里面都有进一步地讲解了线性方程组的迭代法求解的内容。

- 1. 《Introduction to Numerical Analysis》
作者：Stoer, Josef, Bulirsch, R.
2002年出版
- 2. 《Linear Algebra》
作者：Liesen, Jörg, Mehrmann, Volker
2015年出版

本节小结

好了，到这里解线性方程组这一讲就结束了，最后我再总结一下前面讲解的内容。

首先，我用一个简单的线性方程组，通过直接观察的方法来计算这个方程组的特殊解和通用解，接着通过实例详细地介绍了高斯消元法，最后我给出了一些在实践中常用的线性方程组解方法。只有弄清楚这些基础知识的本质，你才能更进一步，去了解其他计算方法。

线性方程组的求解已经成为了世界上最快计算机的测试标准，因为通过矩阵运算，计算机的并行计算能力暴露无遗。希望你能够在这些基础之上，阅读我推荐的两本书，并且把这些方法运用到实践中，特别是机器学习，因为机器学习也用到了很多迭代方法。

解线性方程组

寻找通用解

寻找一个特殊解，使得 $Ax=B$

找到 $Ax=0$ 的所有解

组合特殊解和通用解

高斯消元法

初等变换

主元

行阶梯形矩阵

基本变量

自由变量

简化行阶梯形矩阵

线性方程组解法

高斯消元法

伪逆

定常迭代法

Krylov子空间方法



线性代数练习场

练习时刻到了，今天的练习题比较简单，请你用高斯消元法求下面的线性方程组。

```
$$
\left\{\begin{array}{c}
x_1+x_2-2x_3-x_4=1 \\
x_1+5x_2-3x_3-2x_4=0 \\
3x_1-x_2+x_3+4x_4=2 \\
-2x_1+2x_2+x_3-x_4=1
\end{array}\right.
$$
```

欢迎在留言区和[部落](#)里晒出你的运算过程和结果，留下你的学习痕迹。如果你有所收获，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友。