计算方法及MATLAB实现

郑勋烨　编著

主审：高世臣　褚宝增　王祖朝　王翠香

副审：李少琪　李明霞　赵琳琳　赵俊芳

国防工业出版社

§5.1 Gauss 消去法

5.1.4 Gauss 消去法的算法体系

显然， Gauss 消去法的核心思想丝毫不稀奇。下边我们给出更一般的叙述形式，将上述讨论加以推广和抽象，同学们不要被这些繁琐的符号和指标吓着，这仅仅是披挂着坚硬盔甲的软体动物而已，其美味我们早已品尝。

【**定理** 1. **Gauss 消去法的算法体系**】 Gauss 消去法的算法体系由 消元过程(Gaussian Elimination) 和 回代过程 (Backward Substituition) 构成.

1. 消元过程 (Gaussian Elimination)

标记首行向量
$(a_{11}^{(1)}, a_{12}^{(1)}, \cdots, a_{1n}^{(1)}, b_1^{(1)}) = (a_{11}, a_{12}, \cdots, a_{1n}, b_1)$. 对于满足条件“顺序主子式非零”的矩阵 $A = (a_{ij})$, 其顺序消元和主元素 $a_{ij}^{(k)}$ 不为 0 (此论断由下述的“约化定理”决定)，可以直接利用 Gauss 消去法消元；对于非奇异矩阵 $A = (a_{ij})$, 其元素 a_{ij} 不全为 0 ，我们总能取到 $a_{ij} \neq 0$ ，再通过适当的初等易位变换 (交换行列位置) 放到 a_{11} 的位置上，故不妨设 $a_{11} \neq 0$. 原方程组的增广矩阵可以标记为初始形式，上标以 (1):

$$
(A|b) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} =
$$

$$
(A^{(1)}|b^{(1)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix}.
$$

1 、方程组的第 1 次消元 —- 第 1 行不变，矩阵首列除基准元素 a_{11} 外均化为 0 ：

$$(A|b) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \longrightarrow$$

$$(A^{(2)}|b^{(2)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix}.$$

2 、方程组的第 k-1 次消元 —- 前 $k-1$ 行不变，矩阵化为上梯形形式

$$(A|b) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \longrightarrow$$

$$
(A^{(k)}|b^{(k)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{pmatrix}.
$$

称为方程组的第 $k-1$ 次消元.

3、第 n-1 次消元 —- 所有主对角线左下方元素消去为 0，矩阵化为上三角形形式：

$$(A|b) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \longrightarrow$$

$$
(A^{(n)}|b^{(n)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{pmatrix}.
$$

2. 回代过程 (Backward Substituition)

$$
\begin{cases}
a_{nn}^{(n)} x_n = b_n^{(n)} \Rightarrow x_n = \dfrac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}} \\
a_{n-1,n-1}^{(n-1)} x_{n-1} + a_{n-1,n}^{(n-1)} x_n = b_{n-1}^{(n-1)} \\
\Rightarrow x_{n-1} = \dfrac{b_{n-1}^{(n-1)} - a_{n-1,n}^{(n-1)} x_n}{a_{n-1,n-1}^{(n-1)}} \\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots
\end{cases}
$$

$$
\left\{
\begin{array}{ll}
a_{kk}^{(k)} x_k + \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j = b_k^{(k)} & \Rightarrow x_k = \dfrac{b_k^{(k)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j}{a_{kk}^{(k)}} \\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots & \cdots \\
a_{11}^{(1)} x_1 + \sum\limits_{j=2}^{n} a_{1j}^{(2)} x_j = b_1^{(1)} & \Rightarrow x_1 = \dfrac{b_1^{(1)} - \sum\limits_{j=2}^{n} a_{1j}^{(1)} x_j}{a_{11}^{(1)}}
\end{array}
\right.
$$

【 定理 2. 主元素非零条件 】

矩阵 A 的约化主元素非零 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ 的充分必要条件是矩阵 A 的 顺序主子式 $D_k \neq 0$. 即

$$D_1 = a_{11} \neq 0, D_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \neq 0,$$

$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix} \neq 0.$$

【**证明**】证明是平易的．用数学归纳法，先证明充分性．设如对 $k-1$ 成立，即 $D_i \neq 0$ 时有
$a_{ii}^{(i)} \neq 0,, i=1,2,3,\cdots,k-1$，往证对 k 成立，即 $D_i \neq 0$ 时有 $a_{ii}^{(i)} \neq 0, i=1,2,3,\cdots,k$，由归纳假设，即只要证
$a_{kk}^{(k)} \neq 0$. 因矩阵 A 的顺序主子式 $D_i \neq 0, i=1,2,3,\cdots,k$，由 Gauss 消去法，可将 $A^{(1)}$ 约化为 $A^{(k)}$，即

$$(A) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \longrightarrow$$

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

此时有

$$D_1 = a_{11} \neq 0, D_2 = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} \end{vmatrix} \neq 0,$$

$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{kk}^{(k)} \end{vmatrix} \neq 0.$$

从而

$$a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{kk}^{(k)} \neq 0$$

即 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$. 于是对 k 成立.

对必要性，由 $a_{ii}^{(i)} \neq 0, i = 1, 2, 3, \cdots, k$, 亦可知

$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{kk}^{(k)} \end{vmatrix} =$$

$a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{kk}^{(k)} \neq 0.$

【**推论.**】若 $D_k \neq 0, k = 1, 2, 3, \cdots, n-1$, 则

$$a_{11}^{(1)} = D_1, a_{kk}^{(k)} = \frac{D_k}{D_{k-1}}, k = 2, 3, \cdots, n$$

我们便知道：方程组的 Gauss 消去法的矩阵本义就是系数方阵的 LU 三角分解：将系数方阵分解为一个单位下三角阵 L 和一个上三角阵 U 的乘积。于此成立如下分解定理。

【定理 3. Gauss **消去法的矩阵本义** —-LU **三角分解】**

Gauss 消去法的矩阵本义是 LU 三角分解. n 阶系数方阵可分解为一个单位下三角阵 L 和一个上三角阵 U 的乘积 (此种分解称为杜利特尔 Doolittle 分解; 若分解为一个下三角阵 L 和一个单位上三角阵 U 的乘积，则称为克儒 Crout 分解)：
$A = LU$, 即

$$
\begin{pmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}
\end{pmatrix}
= \begin{pmatrix}
1 & 0 & \cdots & 0 \\
l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\
0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0 & 0 & \cdots & u_{nn}
\end{pmatrix}.
$$

【证明】

标记 $A^{(1)}=(a_{ij}^{(1)})=A=(a_{ij})$, 对 $A^{(1)}$ 实施初等行变换相当于以初等变换矩阵 L_1 左乘 $A^{(1)}$，即 $L_1A^{(1)}=A^{(2)}$, 其中初等变换矩阵 L_1 为单位下三角阵

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -l_{n1} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

其中 $l_{i1}=\dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}=\dfrac{a_{i1}}{a_{11}}, i=2,3,\cdots,n.$ 同理若主元素 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$，可令 $l_{ik}=\dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, i=k+1,k+2,\cdots,n,$ 定义初等变换矩阵

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ 0 & 1 & & & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & & & \\ 0 & 0 & \cdots & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & \cdots & -l_{n,k} & \cdots & & 1 \end{pmatrix}$$

则 $L_k A^{(k)} = A^{(k+1)}$, 如是递推可得
$L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1 A^{(1)} = A^{(n)}$, 记
$U = A^{(n)}$,$L = L_1^{-1}\cdots L_{n-2}^{-1}L_{n-1}^{-1}$, 则 $A = LU$. 其中

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

【 定理 4. LU **三角分解的唯一性 】**

n 阶系数方阵 A 的顺序主子式 $D_k \neq 0$，则三角分解是存在唯一的．即 $A = LU$．

【 证明 】

三角分解存在性已证. 对于唯一性，设如有两种 Doolittle 分解 $A = LU = L_1U_1$, 其中 L, L_1 为单位下三角阵， U, U_1 为上三角阵，则有 $L^{-1}L_1 = UU_1^{-1}$ ，等式左边为单位下三角阵，右边为上三角阵，故只有两边均为单位阵，即
$L^{-1}L_1 = UU_1^{-1} = I$ ，从而 $L = L_1$ ， $U = U_1$ ，即分解是唯一的.

四、 Gauss 消去算法

我们将适合于程序运行的 Gauss 消去算法完整地归结如下。

【 算法 1.Gauss 消去算法 】

设 n 阶矩阵 A 的约化主元素非零： $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ ，本高斯消去算法将 A 约化为上三角形，用约化矩阵 $A^{(k)}$ 覆盖初始矩阵 A ，用乘数 l_{ik} 覆盖 a_{ik}.

（ 1 ）若 $a_{kk} = 0$ ，则计算终止；

（ 2 ）对于 $i = k+1, k+2, \cdots, n$(行标大于变换主元素行标，比如 a_{43}, a_{53} 等等)

（ 2a ） $a_{ik} \leftarrow l_{ik} = \dfrac{a_{ik}}{a_{kk}}, i = k+1, k+2, \cdots, n;$

（ 2b ）对于 $j = k+1, k+2, \cdots, n$(列标大于变换主元素列标，比如 a_{34}, a_{35} 等等)

$a_{ij} \leftarrow a_{ij} - l_{ik} * a_{kj}, i, j = k+1, k+2, \cdots, n;$

【**算法** 2.Gauss **回代算法**】

设“终极矩阵”是 n 阶非奇异上三角形矩阵 $U = A^{(n)}$：$u_{kk} \neq 0, k = 1, 2, \cdots, n$，本高斯回代算法计算上三角形方程组 $Ux = b$ 的解.

对于 $i = n, n-1, \cdots, 2, 1$(倒向回代)：

（1）$x_i \leftarrow b_i$；

（2）对于 $j = i+1, i+2, \cdots, n,$

$x_i \leftarrow x_i - u_{ij} * x_j, j = i+1, i+2, \cdots, n;$

（3）$x_i \leftarrow x_i / u_{ii}$；

【命题 1. Gauss **消去法的计算量】** Gauss 消去法的计算量约为 $\dfrac{n^3}{3}$.

【证明】 Gauss 消去法的计算量，从第 1 步到第 k 步需要作 $n-k$ 次除法（用来计算 $l_{ik}=\dfrac{a_{ik}}{a_{kk}}, i=k+1,k+2,\cdots,n;$ ），并作 $(n-k)*(n-k)=(n-k)^2$ 次乘法（用来计算 $l_{ik}*a_{kj}, i,j=k+1,k+2,\cdots,n;$ ）.

倘若只算乘法的计算量（它是二次项，矩阵阶数很高时可以忽略掉除法的计算量，比如 $n = 10$, 则 $n^2 = 100$ ，相距整整一个数量级），则从第 1 步到第 $n-1$ 步 Gauss 消去法的总计算量约为

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)^2 = \sum_{k=1}^{n-1}(n^2 - 2nk + k^2) = \sum_{k=1}^{n-1} n^2 - 2n\sum_{k=1}^{n-1} k + \sum_{k=1}^{n-1} k^2$$

$$= (n-1)n^2 - 2n\frac{(n-1)n}{2} + \frac{(n-1)n(2n-1)}{6}$$

$$= (n-1)[n^2 - n^2 + \frac{n(2n-1)}{6}] = \frac{(n-1)n(2n-1)}{6}$$

$$= \frac{n^3}{3} - \frac{n^2}{2} + \frac{n}{6} \approx \frac{n^3}{3}.$$

倘若合计乘法和除法的计算量，则从第 1 步到第 $n-1$ 步 Gauss 消去法的总计算量约为

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)^2+2\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)$$

$$=\frac{n^3}{3}-\frac{n^2}{2}+\frac{n}{6}+\frac{n(n-1)}{2}$$

$$=\frac{n^3}{3}+\frac{n^2}{2}-\frac{5n}{6}$$

$$\approx\frac{n^3}{3}.$$

回代过程的计算量为

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

相对数量级较高的乘除法的计算量，可以忽略．因此总而言之， Gauss 消去法的总计算量约为 $\dfrac{n^3}{3}$.

比如，同样对于一个 20 阶的方程组， Gauss 消去法的乘法计算量约为

$$\frac{n^3}{3} = \frac{20^3}{3} = \frac{8000}{3} \approx 2667$$

显然，这比我们使用 Cramer 法则计算行列式需要的乘法计算量 $n!(n^2-1) \approx 9.7 \times 10^{20}$ 划算多了。

【证毕】

- **五、例题选讲**

【例 1】用 Gauss 消去法求解非齐次线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 & = 6 \\ 4x_2 - x_3 & = 5 \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 & = 1 \end{cases}$$

【解】 增广矩阵

$$(A|b) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & -1 & 5 \\ 2 & -2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\underline{r_3 - 2r_1}}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & -1 & 5 \\ 0 & -4 & -1 & -11 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{\underline{r_3 + r_2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 6 \\ 0 & 4 & -1 & 5 \\ 0 & 0 & -2 & -6 \end{pmatrix}$$

方程组化为上三角形式

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 & = 6 \\ 4x_2 - x_3 & = 5 \\ -2x_3 & = -6 \end{cases}$$

回代求解得

$$\begin{cases} x_3 & = 3 \\ x_2 = \dfrac{5 + x_3}{4} & = 2 \\ x_1 = 6 - x_2 - x_3 & = 1 \end{cases}$$

解向量 $\overrightarrow{x} = (1, 2, 3)^T$.

【**例** 2】用 Gauss 消去法求解非齐次线性方程组

$$\begin{cases} x_1 - x_2 + 2x_3 - x_4 & = -8 \\ 2x_1 - 2x_2 + 3x_3 - 3x_4 & = 20 \\ x_1 + x_2 + x_3 & = -2 \\ x_1 - x_2 + 4x_3 + 3x_4 & = 4 \end{cases}$$

【解】 增广矩阵

$$(A|b) = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 & -8 \\ 2 & -2 & 3 & -3 & -20 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & -2 \\ 1 & -1 & 4 & 3 & 4 \end{pmatrix} \xrightarrow{\underline{r_2 - 2r_1, r_3 - r_1, r_4 - r_1}} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 & -8 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -4 \\ 0 & 2 & -1 & 1 & 6 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & 12 \end{pmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_2 \leftrightarrow r_3} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 & -8 \\ 0 & 2 & -1 & 1 & 6 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -4 \\ 0 & 0 & 2 & 4 & 12 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_4 + 2r_3}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 & -8 \\ 0 & 2 & -1 & 1 & 6 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -4 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

方程组化为上三角形式

$$
\begin{cases}
x_1 - x_2 + 2x_3 - x_4 & = -8 \\
2x_2 - x_3 + x_4 & = 6 \\
-x_3 - x_4 & = -4 \\
2x_4 & = 4
\end{cases}
$$

回代求解得

$$\begin{cases} x_4 & = 2 \\ x_3 = \dfrac{-4 + x_4}{-1} & = 2 \\ x_2 = \dfrac{6 - x_4 + x_3}{2} & = 3 \\ x_1 = -8 + x_2 - 2x_3 + x_4 & = -7 \end{cases}$$

解向量 $\overrightarrow{x} = (-7, 3, 2, 2)^T$.

由于我们在增广矩阵的初等变换过程中，主对角线上出现了 0，这不可作为除数；所以为了进一步变换，我们使用了行的*互易变换*，把非零元素调整到主对角线上，所以上述算法并非严格意义的常规 Gauss 消去法，而是所谓 Gauss *列主元素消去法*. 这就是我们将要为诸君介绍的另一种重要的方法.