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

5.1.2 Gauss 消去法基本概念

Gauss 消去法是我国先民早在秦始皇灭六国之前（公元前 250 年）便掌握的古老方法，但由它经过改进和变形得到的 Gauss 主元素消去法和相应的矩阵分解法至今仍是计算机上常用的求解低阶稠密矩阵线性代数方程组的有效方法，犹如同样古老的汉字一样表现出了令人叹为观止的活力。

事实上， Gauss 消去法的秘密即是“初等变换” —— 通过行或列的初等变换把一个矩阵化为上梯形（对于方阵是上三角形）。这是我们早在线性代数课程中便已熟悉的方法。

【定义 2. 矩阵的 Gauss 消去法】

将一个正方形矩阵（对于方程组我们经常讨论的对象是其 *增广矩阵*），通过初等变换中的 Gauss *消去法变换* 化为上三角形式的矩阵的方法：

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

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

称为 矩阵的 Gauss 消去法.

注意，我们在此所作的仅仅只有 消法变换 ，而没有进行 互易变换和 数乘变换 ！

【引例 1】求解非齐次线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + 4x_2 + 7x_3 & = 1 \\ 2x_1 + 5x_2 + 8x_3 & = 1 \\ 3x_1 + 6x_2 + 11x_3 & = 1 \end{cases}$$

【解】我们对增广矩阵作初等行变换

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 & 1 \\ 2 & 5 & 8 & 1 \\ 3 & 6 & 11 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_2 - 2r_1,\, r_3 - 3r_1}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 & 1 \\ 0 & -3 & -6 & -1 \\ 0 & -6 & -10 & -2 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_3 - 2r_2} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 & 1 \\ 0 & -3 & -6 & -1 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

这样我们通过上述消元过程获得了一个以上三角形矩阵作为系数矩阵的方程组

$$
\left\{
\begin{array}{rrl}
x_1 + 4x_2 & +7x_3 & = 1 \\
-3x_2 & -6x_3 & = -1 \\
 & 2x_3 & = 0
\end{array}
\right.
$$

再经过简单的“自下而上”的回代运算，先由最后一个方程求得 $x_3 = 0$ ，代入倒数第二个方程获得 $x_2 = \dfrac{1}{3}$ ，最后代入第一个方程求得 $x_1 = -\dfrac{1}{3}$ ，易知其惟一解为

$x_1 = -\dfrac{1}{3}, x_2 = \dfrac{1}{3}, x_3 = 0.$ 或写为向量解的形式即

$x = (-\dfrac{1}{3}, \dfrac{1}{3}, 0)^T.$

由此我们看到，利用“先消元再回代”的 Gauss 消去法求解线性代数方程组是极其简捷的，下面我们从两方面着手考察：一方面给出 Gauss 消去法的矩阵本义即 LU 三角分解；另一方面研究 Gauss 消去法的算法体系。从低阶的具象的数字矩阵引入，再推广到高阶的抽象的代数矩阵情形。

5.1.3 Gauss 消去法的矩阵本义 ——LU 三角分解

一个方程组的增广矩阵囊括了方程组的所有“数字特征”。对于方程组使用 Gauss 消去法，事实上就是对于其增广矩阵使用。我们现在来重新审视这一过程，对于方程组的 *系数矩阵* 到底意味着什么？同样以我们此前讨论过的一个正方形的低阶非齐次线性方程组为例.

【引例 2】将求解下述非齐次线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + 4x_2 + 7x_3 & = 1 \\ 2x_1 + 5x_2 + 8x_3 & = 1 \\ 3x_1 + 6x_2 + 11x_3 & = 1 \end{cases}$$

的 Gauss 消去法用系数矩阵分解的语言描述。

【解】我们对增广矩阵作初等 Gauss 消去法行变换，自然也就是同时对系数矩阵所作的。通过变换我们把一个一般形式的矩阵变成了上三角形的。即

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 11 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_2 - 2r_1, r_3 - 3r_1}$$

$$\longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & -6 & -10 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_3 - 2r_2} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

现在只看开头和尾巴上的两个矩阵。“初始矩阵”是一个“一般的”矩阵（当然，事实上要能够对它使用消去法，我们对它还有“约化主元素非零”的要求）

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 11 \end{pmatrix}$$

“终极矩阵” 则是一个上三角形矩阵

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

在第一步消去过程中，是作行变换，将首列元素消为 0，即以一个“单位下三角初等矩阵”（单位下三角阵就是主对角线元素全为 1 的下三角阵）L_1 乘到原初始矩阵左边（根据线性代数的初等矩阵理论，作行变换等价于左乘初等矩阵，作列变换等价于右乘初等矩阵）得到矩阵 $A^{(2)}$

$$A^{(2)} = L_1 A = L_1 A^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{1} & 1 & 0 \\ -\frac{3}{1} & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 11 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & -6 & -10 \end{pmatrix}$$

然后，进行第二步消元，我们继续是以一个“单位下三角初等矩阵” L_2 乘到矩阵 $A^{(2)}$ 的左边得到 $A^{(3)}$，对于三阶矩阵，现在这个 $A^{(3)}$ 就是我们的“终极矩阵”上三角形矩阵 U，即：

$$U = A^{(3)} = L_2 A^{(2)} = L_2 L_1 A$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{-6}{-3} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & -6 & -10 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

于是我们结合以上消元过程有

$$U = A^{(3)} = L_2 A^{(2)} = L_2 L_1 A$$

或者等价地写为

$$A = L_1^{-1} L_2^{-1} U$$

我们知道，初等变换矩阵的逆矩阵仍是初等变换矩阵，而上（下）三角形矩阵的逆矩阵仍是上（下）三角形矩阵。很容易计算，

即是

$L = L_1^{-1} L_2^{-1} =$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{2}{1} & 1 & 0 \\ \frac{3}{1} & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{-6}{-3} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

从而我们最终获得了一种乘积形式的矩阵分解 $A = LU$, 即

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 11 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

现在我们思考一个问题－－能否不通过初等行变换获得上述分解矩阵，而直接利用矩阵的乘积，利用“比较元素法”直接获得分解矩阵呢？答案是肯定的。并且，这种“比较元素法”对于低阶矩阵的三角分解是非常方便实用的。

对此种三阶矩阵的分解，我们有下边的实用的命题。

【 **命题** 1. **三阶矩阵的** Doolittle **分解**：】

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \dfrac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ \dfrac{a_{31}}{a_{11}} & \dfrac{a_{32} - l_{31}a_{12}}{u_{22}} & 1 \end{pmatrix} \times$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} - \dfrac{a_{21}}{a_{11}}a_{12} & a_{23} - \dfrac{a_{21}}{a_{11}}a_{13} \\ 0 & 0 & a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23} \end{pmatrix}$$

【证明】 我们用极其简单的思想即“待定系数法”来证明。假设出分解矩阵的形式，计算矩阵的常义乘积 LU，与被展开的原矩阵 A 的元素相比较，令对应位置的元素相等，我们可以获得一系列的等式，由此建立分解矩阵的所有元素。自然，求解这些等式的步骤是有原则的，即“自上而下，自左至右”地确定 l_{ik} 和 u_{kj}，可以参考以下的证明流程——这同时也是我们常用的对一个矩阵进行三角分解的流程，而并不需要记忆任何冗长的公式。

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix} =$$

$$
\begin{pmatrix}
u_{11} & u_{12} & u_{13} \\
l_{21}u_{11} & l_{21}u_{12} + u_{22} & l_{21}u_{13} + u_{23} \\
l_{31}u_{11} & l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22} & l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + u_{33}
\end{pmatrix}
$$

比较对应位置元素，依照如下流程顺序计算得

(1)$u_{11}=a_{11}, u_{12}=a_{12}, u_{13}=a_{13}$, 即上三角矩阵 U 的首行元素与 A 的首行元素相等，不用计算;

(2) $\begin{cases} l_{21}u_{11}=a_{21} \\ l_{31}u_{11}=a_{31} \end{cases}$, 从而 $\begin{cases} l_{21}=\dfrac{a_{21}}{u_{11}}=\dfrac{a_{21}}{a_{11}} \\ l_{31}=\dfrac{a_{31}}{u_{11}}=\dfrac{a_{31}}{a_{11}} \end{cases}$

(3) $\begin{cases} l_{21}u_{12}+u_{22}=a_{22} \\ l_{21}u_{13}+u_{23}=a_{23} \end{cases}$，从而

$$\begin{cases} u_{22}=a_{22}-l_{21}u_{12}=a_{22}-\dfrac{a_{21}}{a_{11}}a_{12} \\ u_{23}=a_{23}-l_{21}u_{13}=a_{23}-\dfrac{a_{31}}{a_{11}}a_{13} \end{cases}$$

(4) $l_{31}u_{12}+l_{32}u_{22}=a_{32}$，从而

$$l_{32}=\frac{a_{32}-l_{31}u_{12}}{u_{22}}=\frac{a_{32}-l_{31}a_{12}}{u_{22}}$$

(5) $l_{31}u_{13}+l_{32}u_{23}+u_{33}=a_{33}$，从而

$$u_{33}=a_{33}-l_{31}u_{13}-l_{32}u_{23}$$

从而获得分解矩阵

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \dfrac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ \dfrac{a_{31}}{a_{11}} & \dfrac{a_{32} - l_{31}a_{12}}{u_{22}} & 1 \end{pmatrix}, \qquad U =$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} - \dfrac{a_{21}}{a_{11}}a_{12} & a_{23} - \dfrac{a_{21}}{a_{11}}a_{13} \\ 0 & 0 & a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23} \end{pmatrix}$$

其中 $\begin{cases} l_{31} = \dfrac{a_{31}}{u_{11}} = \dfrac{a_{31}}{a_{11}} \\ u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12} = a_{22} - \dfrac{a_{21}}{a_{11}}a_{12} \end{cases}$

得证.

【证毕】

【注记】

我们看到，对于一个 3 阶矩阵，需要确定总共 9 个分解元素；而其中有 5 个可以一下写出来，即

$$(1) u_{11} = a_{11}, u_{12} = a_{12}, u_{13} = a_{13} \text{ 和 } (2) \begin{cases} l_{21} = \dfrac{a_{21}}{a_{11}} \\ l_{31} = \dfrac{a_{31}}{a_{11}} \end{cases}$$

有 2 个可以通过简单的消法变换，利用计算好的元素写出来，即

$$(3)\begin{cases} u_{22} = a_{22} - l_{21}a_{12} \\ u_{23} = a_{23} - l_{21}a_{13} \end{cases}$$

比较复杂的计算量只集中于最后 2 个元素:

(4) $l_{32} = \dfrac{a_{32} - l_{31}a_{12}}{u_{22}}$ 和

(5) $u_{33} = a_{33} - l_{31}a_{13} - l_{32}u_{23}$

所以 3 阶矩阵的分解是相对很容易的.

【**引例** 4. **矩阵** Doolittle **分解法**】试作 3 阶矩阵的 Doolittle 分解

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 2 \\ 3 & 1 & 5 \end{pmatrix}$$

【解】

我们依照“待定系数法”的流程，计算矩阵的常义乘积 LU ，与被展开的原矩阵 A 的元素相比较，令对应位置的元素相等，我们可以获得一系列的等式，由此建立分解矩阵的所有元素.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 2 \\ 3 & 1 & 5 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{2}{1} & 1 & 0 \\ \frac{3}{1} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 5 - 2 \times 2 & 2 - 2 \times 3 \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix}$$

$$
= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & \dfrac{1 - 3 \times 2}{1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -4 \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix} =
$$

$$
\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -4 \\ 0 & 0 & 5 - 3 \times 3 - (-5) \times (-4) \end{pmatrix}
$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -4 \\ 0 & 0 & -24 \end{pmatrix}$$