第 7 章 解线性方程组的直接方法

姚遥

南京大学智能科学与技术学院

本章目录

- 引言
- Guass消去法
- Guass主元素消去法
- Guass消去法的变形
- 向量和矩阵的范数
- 误差分析

直接方法 | 引言

在自然科学和工程技术中，很多问题的解决常常归结为求解线性代数方程组

- 建立三次样条函数问题
- 三维视觉中的相机姿态估计
- 用最小二乘法求实验数据的曲线拟合问题
- 解非线性方程组问题

方程组的系数矩阵大致分为两种

- 低阶稠密矩阵（如阶数上界大约为150的矩阵）
- 大型稀疏矩阵（即阶数高且零元素较多的矩阵）

直接方法 | 引言

直接法

- 经过有限步算术运算即可求得方程组精确解
- 但由于舍入误差的存在和影响，也只能求得近似解
- 是解低阶稠密矩阵方程组的有效方法，在解较大型稀疏矩阵方程组方面也有进展

迭代法

- 用某种极限过程去逐步逼近线性方程组精确解
- 具有存储单元较少、程序设计简单、原始系数矩阵在计算过程中始终不变等优点
- 存在收敛性及收敛速度方面的问题
- 是解大型稀疏矩阵方程组的重要方法

本章目录

直接方法 | Gauss消去法

介绍Gauss消去法（逐次消去法）以及消去法和矩阵三角分解之间的关系

- 是最基本的一种解线性方程组的直接方法
- 早在公元前250年我国就掌握了解三元一次联立方程组的方法
- 但由它改进、变形得到的主元素消去法、三角分解法仍然是目前计算机上常用的有效方法

直接方法 | Gauss消去法

设有线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \qquad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n, \end{cases} \tag{7.2.1}$$

- 可写成矩阵形式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$，其中 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵

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

- 下面举一个简单例子说明消去法的基本思想

直接方法 | Gauss消去法

例7.1 用消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, & (7.2.2) \\ 4x_2 - x_3 = 5, & (7.2.3) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (7.2.4) \end{cases}$$

- **基本思想**：用逐次消去未知数的方法把原来的方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 转化为与其等价的三角方程组，而求解三角方程组就容易了

- 第一步，将式(7.2.2)乘以 -2 加到式(7.2.4)上去，消去式(7.2.4)中的未知数 x_1

$$-4x_2 - x_3 = -11 \qquad (7.2.5)$$

- 第二步，将式(7.2.3)加到式(7.2.5)上，消去式(7.2.5)中的未知数 x_2 得到

$$-2x_3 = -6$$

例7.1 用消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, & (7.2.2) \\ 4x_2 - x_3 = 5, & (7.2.3) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (7.2.4) \end{cases}$$

- 得到与原方程组等价的三角方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, \\ \qquad 4x_2 - x_3 = 5, \\ \qquad\qquad -2x_3 = -6 \end{cases} \tag{7.2.6}$$

- 显然方程组(7.2.6)是容易求解的，解为 $x^* = (1,2,3)^{\mathrm{T}}$

例7.1 用消去法解方程组

$$
\begin{cases}
x_1 + x_2 + x_3 = 6, & (7.2.2)\\
4x_2 - x_3 = 5, & (7.2.3)\\
2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (7.2.4)
\end{cases}
$$

- 矩阵形式分析，上述过程相当于：

$$
(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b}) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & | & 6 \\ 0 & 4 & -1 & | & 5 \\ 2 & -2 & 1 & | & 1 \end{bmatrix} \xRightarrow{(-2)\times \boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_3 \to \boldsymbol{r}_3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & | & 6 \\ 0 & 4 & -1 & | & 5 \\ 0 & -4 & -1 & | & -11 \end{bmatrix} \xRightarrow{\boldsymbol{r}_2 + \boldsymbol{r}_3 \to \boldsymbol{r}_3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & | & 6 \\ 0 & 4 & -1 & | & 5 \\ 0 & 0 & -2 & | & -6 \end{bmatrix}
$$

直接方法 | 解 n 阶方程组的Gauss消去法

将式 (7.2.1) 记作 $\boldsymbol{A}^{(1)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(1)}$

- 其中$\boldsymbol{A}^{(1)} = (a_{ij}^{(1)}) = (a_{ij})$， $\boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{b}$

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

- 第一次消元
  - 设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$，首先对行计算乘数 $m_{i1} = a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}$，其中 $i = 2, 3, \cdots, n$
  - 用 $-m_{i1}$ 乘(7.2.1)的第 1 个方程，加到第 i 个方程上，消去(7.2.1)的第 2 到 n 个方程中的未知数 x_1

直接方法 | 解 n 阶方程组的Gauss消去法

➢ 得与式(7.2.1)等价的方程组

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix} \tag{7.2.7}$$

简记作 $\boldsymbol{A}^{(2)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(2)}$ ，其中

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

直接方法 | 解 n 阶方程组的Gauss消去法

- 一般第 k $(1 \leq k \leq n-1)$ 次消元
  - ➢ 设第 $k-1$ 步计算已经完成，即已得到等价方程组

$$\boldsymbol{A}^{(k)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(k)} \tag{7.2.8}$$

  - ➢ $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 已经消去未知数 $x_1, x_2, \cdots, x_{k-1}$，如下所示

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

直接方法 | 解 n 阶方程组的Gauss消去法

- 设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$，计算乘数 $m_{ik} = a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$，其中 $i = k+1,\cdots,n$
- 用 $-m_{ik}$ 乘式(7.2.8)的第 k 个方程，加到第 i 个方程上，消去第 $k+1$ 到 n 个方程中的未知数 x_k，得

$$\boldsymbol{A}^{(k+1)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(k+1)}$$

- $\boldsymbol{A}^{(k+1)}$ 元素的计算公式为

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

- 显然，$\boldsymbol{A}^{(k+1)}$ 的第 1 行直到第 k 行与 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 相同

- 继续这一过程，直到完成第 $n-1$ 次消元，得到与原方程组等价的三角方程组

$$\boldsymbol{A}^{(n)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(n)} \tag{7.2.10}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

由式(7.2.1)约化为式(7.2.10)的过程称为消元过程

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n, \end{cases} \tag{7.2.1}$$

直接方法 | 解 n 阶方程组的Gauss消去法

消元后，接下来求解三角方程组 (7.2.10)

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

- 设 $a_{ii}^{(i)} \neq 0 \ (i = 1, 2, \cdots, n)$，易得求解公式

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{n} \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) \Big/ a_{kk}^{(k)} \end{cases} \quad (k = n-1, n-2, \cdots, 2,$$

- 式 (7.2.10) 的求解过程称为回代过程

直接方法 | 消元过程的注意事项

如果 $a_{11}^{(1)} = 0$

- 由于 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵，所以 $\boldsymbol{A}$ 的第 1 列一定有元素不等于零，例如 $a_{i_1,1}^{(1)} \neq 0$，于是可以先交换两行元素 $(\boldsymbol{r_1} \leftrightarrow \boldsymbol{r_{i_1}})$，然后再进行消元运算
- 这时$\boldsymbol{A}^{(2)}$右下角的 $n-1$ 阶矩阵亦为非奇异矩阵，继续上述过程，Gauss消去法可继续计算

定理7.1 如果 A 为 n 阶非奇异矩阵，则可以通过Gauss消去法（及交换两行的初等变换）将方程组 $Ax = b$ 化为三角方程组 $A^{(n)}x = b^{(n)}$

直接方法 | Gauss消去法引理

A 在什么条件下才能保证 $a_{kk}^{(k)} \neq 0\ (k = 1,2, \dots,\ n)$?

- 这样在实现Gauss消去法时不需要交换行

引理 约化的主元素 $a_{ii}^{(i)} \neq 0\ \ (i = 1, 2, \cdots, k)$ 的充要条件是矩阵 A 的顺序主子式 $D_i \neq 0\ \ (i = 1, 2, \cdots, k)$，即

$$D_1 = a_{11} \neq 0,$$

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \dots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (i = 2, 3, \cdots, k)$$

利用归纳法证明引理的充分性

- 显然，当 $k=1$ 时引理的充分性是成立的
- 假设引理对 $k-1$ 成立，求证引理对 k 成立
- 设 $a_{ii}^{(i)} \neq 0\ (i=1,2,\cdots,k-1)$，可用Gauss消去法将 $\boldsymbol{A}^{(1)}=\boldsymbol{A}$ 约化到 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 中，即

$$\boldsymbol{A}^{(1)} \to \boldsymbol{A}^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$

直接方法 | Gauss消去法引理

充分性：利用归纳法证明引理

- 注意到Gauss消去法不改变行列式，因此

$$D_2 = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)}, \qquad D_3 = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} a_{33}^{(3)}$$

$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{kk}^{(k)} \tag{7.2.13}$$

- 由设 $D_i \neq 0 \ (i = 1, 2, \cdots, k)$ 及式 (7.2.13)，有 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$， 即引理充分性对 k 成立

必要性：由 $a_{ii}^{(i)} \neq 0 \ (i = 1, 2, \cdots, k)$，利用式(7.2.13)亦可推出 $D_i \neq 0 \ (i = 1, 2, \cdots, k)$

推论 如果 A 的顺序主子式 $D_k \neq 0$ $(k = 1, 2, \cdots, n-1)$，则

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} = D_1, \\ a_{kk}^{(k)} = \dfrac{D_k}{D_{k-1}} \quad (k = 2, 3, \cdots, n) \end{cases}$$

定理7.2 如果 n 阶矩阵 A 的所有顺序主子式均不为零，即 $D_i \neq 0$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$，则可通过Gauss消去法（不进行交换两行的初等变换），将方程组 (7.2.1) 化为三角方程组 (7.2.10)

直接方法 | 简化的Gauss消去法

- 消元计算 $(k = 1, 2, \cdots, n-1)$

$$m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)} \qquad (i = k+1, \cdots, n),$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} \qquad (i, j = k+1, \cdots, n),$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} \qquad (i = k+1, \cdots, n).$$

- 回代计算（与之前相同）

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^n \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) \Big/ a_{kk}^{(k)} \qquad (k = n-1, n-2, \cdots, 2, 1) \end{cases}$$

直接方法 | Gauss消去法：矩阵分解

Gauss消去法可从矩阵因式分解的视角分析

设式 $Ax = b$ 中 A 的各顺序主子式均不为零

- 对 $\boldsymbol{A}$ 施行行的初等变换相当于用初等矩阵左乘 $\boldsymbol{A}$
- 对式 $\boldsymbol{A}^{(1)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(1)}$ 施行第一次消元后化为式 $\boldsymbol{A}^{(2)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(2)}$，这时 $\boldsymbol{A}^{(1)}$ 化为 $\boldsymbol{A}^{(2)}$，$\boldsymbol{b}^{(1)}$ 化为 $\boldsymbol{b}^{(2)}$，即

$$\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}^{(1)} = \boldsymbol{A}^{(2)}, \qquad \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{b}^{(2)},$$

$$\boldsymbol{L}_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -m_{21} & 1 & & & \\ -m_{31} & & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & & 1 \end{bmatrix}$$

直接方法 | Gauss消去法：矩阵分解

- 第 k 步消元，$\boldsymbol{A}^{(k)}$ 化为 $\boldsymbol{A}^{(k+1)}$，$\boldsymbol{b}^{(k)}$ 化为 $\boldsymbol{b}^{(k+1)}$，相当于

$$\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{A}^{(k)} = \boldsymbol{A}^{(k+1)}, \qquad \boldsymbol{L}_k\boldsymbol{b}^{(k)} = \boldsymbol{b}^{(k+1)}$$

- 重复这一过程，最后得到

$$\begin{cases} \boldsymbol{L}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}^{(1)} = \boldsymbol{A}^{(n)} \\ \boldsymbol{L}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{b}^{(n)} \end{cases} \tag{7.2.14}$$

其中

$$\boldsymbol{L}_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -m_{nk} & & & 1 \end{bmatrix}$$

直接方法 | Gauss消去法：矩阵分解

- 将上三角矩阵 $\boldsymbol{A}^{(n)}$ 记作 $\boldsymbol{U}$，由式 (7.2.14) 可得

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{L}_{n-1}^{-1}\,\boldsymbol{U} \; = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U},$$

其中

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_1^{-1}\,\boldsymbol{L}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{L}_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & \dots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

为单位下三角矩阵

➢ 即对角元素为 1 的下三角矩阵

➢ $\boldsymbol{L}$ 中的元素是消元计算所得的系数

直接方法 | Gauss消去法：矩阵分解

Gauss消去法实质上产生了一个将 A 分解为两个三角矩阵相乘的因式分解

定理7.3（矩阵的LU分解） 设 A 为 n 阶矩阵，如果 A 的顺序主子式 $D_i \neq 0\ (i = 1, 2, \cdots, n-1)$，则 A 可分解为一个单位下三角矩阵 L 和一个上三角矩阵 U 的乘积，且这种分解是唯一的

直接方法 | Gauss消去法：矩阵分解

根据Gauss消去法的矩阵分析，$A = LU$ 的存在性得到了证明，下面证明唯一性

- 设

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{U}_1,$$

- 由于$\boldsymbol{L}^{-1}, \boldsymbol{U}_1^{-1}$ 存在，故

$$\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}_1^{-1} = \boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_1^{-1}$$

$$\Rightarrow \quad \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}_1^{-1} = \boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{L}_1$$

- 根据三角矩阵的性质，$\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}_1^{-1}$为上三角矩阵，$\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{L}_1$为单位下三角矩阵

- 从而上式两端都必须等于$\boldsymbol{I}$，故$\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}_1, \boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_1$

直接方法 | Gauss消去法：矩阵分解

例7.2 对于例7.1, 其系数矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 0 & 4 & -1\\ 2 & -2 & 1\end{bmatrix},$$

- 由Gauss消去法，有

$$m_{21}=0,\qquad m_{31}=2,\qquad m_{32}=-1,$$

- 故

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 2 & -1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 0 & 4 & -1\\ 0 & 0 & -2\end{bmatrix}=\boldsymbol{LU}$$

直接方法 | Gauss消去法：计算量

1. 消元过程的计算量

$$m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)} \qquad (i = k+1, \cdots, n),$$
$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} \qquad (i, j = k+1, \cdots, n)$$

- $k = 1$：计算 m_{i1} $(i = 2,3, \cdots, n)$ 需要 $n-1$ 次除法运算
- $k = 1$：计算 $a_{ij}^{(2)}$ $(i, j = 2,3, \cdots, n)$ 需要 $(n-1)^2$ 次乘法及 $(n-1)^2$ 次加减法运算
- 消元过程需的乘除法 $MD = n(n^2-1)/3$ 次，加减法 $AS = n(n-1)(2n-1)/6$ 次

第 k 步	加减法次数	乘法次数	除法次数
1	$(n-1)^2$	$(n-1)^2$	$n-1$
2	$(n-2)^2$	$(n-2)^2$	$n-2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$n-1$	1	1	1
合 计	$n(n-1)(2n-1)/6$	$n(n-1)(2n-1)/6$	$n(n-1)/2$

直接方法 | Gauss消去法：计算量

2. 计算 $b^{(n)}$ 的计算量

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} \qquad (i = k+1, \cdots, n)$$

- 乘、除法次数MD及加、减法次数AS分别为

$$MD = (n-1) + (n-2) + \cdots + 2 + 1 = \frac{n(n-1)}{2}$$

$$AS = \frac{n(n-1)}{2}$$

3. 解 $A^{(n)}x = b^{(n)}$ 所需的计算量

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^n \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) \Big/ a_{kk}^{(k)} \end{cases} \qquad (k = n-1, n-2, \cdots, 2, 1)$$

直接方法 | Gauss消去法：计算量

- 乘、除法次数MD及加、减法次数AS分别为

$$MD = n(n+1)/2, \qquad AS = n(n-1)/2$$

4. 解式 $\boldsymbol{Ax = b}$ 所需的总的计算量为

$$MD = n^3/3 + n^2 - n/3 \approx n^3/3 \qquad (\text{当 } n \text{ 比较大时})$$

$$AS = n(n-1)(2n+5)/6 \approx n^3/3 \qquad (\text{当 } n \text{ 比较大时})$$

定理7.4 如果 $\boldsymbol{A}$ 为 n 阶非奇异矩阵，则用Gauss消去法解式 $\boldsymbol{Ax = b}$ 所需乘除法次数及加减法次数分别为

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

$$AS = \frac{n(n-1)(2n+5)}{6}$$

本章目录

- 引言
- Guass消去法
- Guass主元素消去法
- Guass消去法的变形
- 向量和矩阵的范数
- 误差分析

直接方法 | Gauss消去法：局限性

- 由Gauss消去法知，消元过程中可能出现 $a_{kk}^{(k)}=0$ 的情况，这时消去法将无法进行

$$m_{ik}=a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}\qquad(i=k+1,\cdots,n)$$

- 有可能主元素 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$ 但数值很小，用其作除数也会导致其他元素数量级的严重增长和舍入误差的扩散，最后会使得计算解不可靠

例7.3 求解方程组

$$\begin{bmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 \\ -2.000 & 1.072 & 5.643 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1.000 \\ 2.000 \\ 3.000 \end{bmatrix}$$

- 用四位浮点数进行计算，精确解为 $\boldsymbol{x}^*=(-0.4904,\quad -0.05104,\quad 0.3675)^{\mathrm{T}}$

直接方法 | Gauss消去法：局限性

方法一：用Gauss消去法求解

$$(\boldsymbol{A},\quad \boldsymbol{b})=\begin{bmatrix}0.001 & 2.000 & 3.000 & | & 1.000\\ -1.000 & 3.712 & 4.623 & | & 2.000\\ -2.000 & 1.072 & 5.643 & | & 3.000\end{bmatrix}$$

$$m_{21}=-1.000/0.001=-1000$$
$$m_{31}=-2.000/0.001=-2000$$

$$\rightarrow\begin{bmatrix}0.001 & 2.000 & 3.000 & | & 1.000\\ 0 & 2004 & 3005 & | & 1002\\ 0 & 4001 & 6006 & | & 2003\end{bmatrix}$$

$$m_{32}=4001/2004=1.997$$

$$\rightarrow\begin{bmatrix}0.001 & 2.000 & 3.000 & | & 1.000\\ 0 & 2004 & 3005 & | & 1002\\ 0 & 0 & 5.000 & | & 2.000\end{bmatrix}$$

- 解得 $\bar{\boldsymbol{x}}=(-0.4000,\quad -0.09980,\quad 0.4000)^{\mathrm{T}}$
- 显然，计算解 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 是一个很坏的结果，不能作为方程组的近似解。原因是在消元计算时用了小主元 0.001，使得约化后的方程组元素数量级大大增长

直接方法 | Gauss消去法：局限性

方法二：交换行，避免绝对值小的主元作除数，再用Gauss消去法求解

$$(\boldsymbol{A},\quad \boldsymbol{b}) \xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_3} \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 & 2.000 \\ 0.001 & 2.000 & 3.000 & 1.000 \end{array}\right] \quad \begin{array}{l} m_{21} = 0.5000 \\ m_{31} = -0.0005 \end{array}$$

$$\to \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ 0 & 3.176 & 1.801 & 0.5000 \\ 0 & 2.001 & 3.003 & 1.002 \end{array}\right] \quad m_{32} = 0.6300$$

$$\to \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ 0 & 3.176 & 1.801 & 0.5000 \\ 0 & 0 & 1.868 & 0.6870 \end{array}\right]$$

- 解得 $\boldsymbol{x} = (-0.4900,\quad -0.05113,\quad 0.3678)^{\mathrm{T}} \approx \boldsymbol{x}^*$

采用Gauss消去法时小主元可能产生麻烦，故应避免采用绝对值小的主元素 $a_{kk}^{(k)}$

直接方法 | 完全主元素消去法

对一般矩阵来说，最好每一步都选取系数矩阵（或消元后的低阶矩阵）中绝对值最大的元素作为主元素，以使Gauss消去法具有较好的数值稳定性

设方程组 $Ax = b$ 的增广矩阵为

$$
\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1j_1} & \cdots & a_{1n} & | & b_1 \\
a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2j_1} & \cdots & a_{2n} & | & b_2 \\
\vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & | & \vdots \\
a_{i_1 1} & a_{i_1 2} & \cdots & a_{i_1 j_1} & \cdots & a_{i_1 n} & | & b_{i_1} \\
\vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & | & \vdots \\
a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nj_1} & \cdots & a_{nn} & | & b_n
\end{bmatrix}
$$

直接方法 | 完全主元素消去法

- 首先在 $\boldsymbol{A}$ 中选取绝对值最大的元素作为主元素，例如 $\left|a_{i_1 j_1}\right| = \max\limits_{1 \le i,j \le n}\left|a_{ij}\right| \neq 0$，然后交换 $\boldsymbol{B}$ 的第 1 行与第 i_1 行，第 1 列与第 j_1 列，经第一次消元计算得

$$(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}) \to \left(\boldsymbol{A}^{(2)}, \boldsymbol{b}^{(2)}\right)$$

- 重复上述过程，设已完成第 $k-1$ 步的选主元素、交换两行及交换两列、消元计算，$(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b})$ 约化为

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

直接方法 | 完全主元素消去法

- 第 k 步选主元素（在 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 右下角方框内选），即确定 i_k, j_k 使

$$\left|a_{i_k j_k}\right| = \max_{k \leq i,j \leq n} \left|a_{ij}\right| \neq 0$$

交换 $\left(\boldsymbol{A}^{(k)}, \boldsymbol{b}^{(k)}\right)$ 第 k 行与 i_k 行元素，交换 $\left(\boldsymbol{A}^{(k)}\right)$ 第 k 列与 j_k 列元素，将 $a_{i_k j_k}$ 调到 (k, k) 位置，再进行消元计算

- 持续上述过程，最后将原方程组化为

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

其中 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 的次序为未知数 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 调换后的次序，回代求解可得 $\boldsymbol{y}$

直接方法 | 完全主元素消去法：算法实现

算法 1：用数组 $\mathrm{idx}(n)$ **记录未知数** $x_1, x_2, \cdots, x_n$ **的次序（下标），**k **为消元次数**

1. 对于 $i = 1,2,\cdots,n$，有 $\mathrm{idx}(i) \leftarrow i$；

For k in $[1,\cdots,n-1]$

2. 选主元素 $\left|a_{i_k j_k}\right| = \max\limits_{k \le i,j \le n}\left|a_{ij}\right|$

3. 如果$a_{i_k j_k} = 0$，则计算停止（这时$\det \boldsymbol{A} = 0$）

4.1 如果 $i_k = k$，则转 4.2；否则换行: $a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j}$ $(j = k, k+1, \cdots, n)$， $b_k \leftrightarrow b_{i_k}$

4.2 如果 $j_k = k$，则转 5；否则换列: $a_{ik} \leftrightarrow a_{i j_k}$ $(i = 1,2,\cdots,n)$，$\mathrm{idx}(k) \leftrightarrow \mathrm{idx}(j_k)$

5. 计算乘数：$a_{ik} \leftarrow m_{ik} = a_{ik}/a_{kk} \quad (i = k+1,\cdots,n)$

6. 消元计算：$a_{ij} \leftarrow a_{ij} - m_{ik}a_{kj}$ $(i,j = k+1,\cdots,n)$

$$b_i \leftarrow b_i - m_{ik}b_k \quad (i = k+1,\cdots,n)$$

直接方法 | 完全主元素消去法：算法实现

算法 1：用数组 $\mathrm{idx}(n)$ 记录未知数 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的次序（下标），k 为消元次数

7. 回代求解

$$b_n \leftarrow b_n / a_{nn}$$

$$b_i \leftarrow \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} b_j\right) / a_{ii} \qquad (\ i = n-1, \cdots, 1\ )$$

8. 调整未知数的次序

$$a_{1,\mathrm{idx(i)}} \leftarrow b_i \qquad (\ i = 1, \cdots, n\ )$$

$$b_i \leftarrow a_{1i} \qquad (\ i = 1, \cdots, n\ )$$

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

直接方法 | 列主元素消去法

完全主元素消去法在选主元素时要花费较多机器时间，而列主元素消去法仅考虑依次按列选主元素，然后换行使之变到主元位置上，再进行消元

- 设用列主元素消去法解 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 已完成 $k-1$ 步计算

$$(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) \to \left(\boldsymbol{A}^{(k)},\boldsymbol{b}^{(k)}\right) = \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{array}\right]$$

- 第 k 步选主元素（在 $\boldsymbol{A}^{(k)}$ 第 k 列方框内选），即确定 i_k 使 $\left|a_{i_k,k}^{(k)}\right| = \max\limits_{k\le i\le n}\left|a_{ik}^{(k)}\right|$
- 交换 $\left(\boldsymbol{A}^{(k)},\boldsymbol{b}^{(k)}\right)$ 第 k 与 i_k 行元素再消元，其余步骤与完全主元素消去法相同

例7.3 的方法 2 用的就是列主元素消去法

直接方法 | 列主元素消去法：算法实现

算法 2：无需使用 $\mathrm{idx}(n)$ 记录未知数 x_i 的次序， A的行列式存放在 $\det A$ 中

1. $\det \boldsymbol{A} \leftarrow 1$

For k in $[1, \cdots, n-1]$

2. 按列选主元素 $|a_{i_k k}| = \max\limits_{k \le i \le n} |a_{ik}|$
3. 中止：如果 $a_{i_k k} = 0$，则 $\det \boldsymbol{A} \leftarrow 0$，计算停止
4. 换行：如果 $i_k != k$，则 $a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j}$ $(j = k, k+1, \cdots, n)$, $b_k \leftrightarrow b_{i_k}$, $\det \boldsymbol{A} \leftarrow -\det \boldsymbol{A}$
5. 计算乘数：$m_{ik} a_{ik} \leftarrow m_{ik} = a_{ik}/a_{kk} \quad (i = k+1, \cdots, n)(|m_{ik}| \le 1)$
6. 消元计算： $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - m_{ik} a_{kj} \quad (i, j = k+1, \cdots, n)$

   $b_i \leftarrow b_i - m_{ik} b_k \quad (i = k+1, \cdots, n)$
7. $\det \boldsymbol{A} \leftarrow a_{kk} \det \boldsymbol{A}$

直接方法 | 列主元素消去法：算法实现

算法 2：无需使用 $\mathrm{idx}(n)$ 记录未知数 x_i 的次序， A的行列式存放在 $\det A$ 中

8. 回代求解

$$b_n \leftarrow b_n / a_{nn}$$

$$b_i \leftarrow \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} b_j\right) / a_{ii} \quad (i = n-1, n-2, \cdots, 1)$$

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

9. $\det \boldsymbol{A} \leftarrow a_{nn} \det \boldsymbol{A}$

直接方法 | 列主元素消去法：矩阵描述

下面用矩阵运算来描述列主元素消去法

$$\begin{cases} \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{I}_{1i_1} \boldsymbol{A}^{(1)} = \boldsymbol{A}^{(2)}, & \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{I}_{1i_1} \boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{b}^{(2)} \\ \boldsymbol{L}_k \boldsymbol{I}_{ki_k} \boldsymbol{A}^{(k)} = \boldsymbol{A}^{(k+1)}, & \boldsymbol{L}_k \boldsymbol{I}_{ki_k} \boldsymbol{b}^{(k)} = \boldsymbol{b}^{(k+1)} \end{cases} \tag{7.3.1}$$

- $\boldsymbol{L}_k$ 的元素满足 $|m_{ik}| \le 1 \ (k = 1, 2, \cdots, n-1)$
- $\boldsymbol{I}_{ki_k}$ 是初等排列矩阵（通过交换单位矩阵 $\boldsymbol{I}$ 的第 k 行和第 i_k 行得到）

利用式(7.3.1)得到

$$\boldsymbol{L}_{n-1} \boldsymbol{I}_{n-1,i_{n-1}} \cdots \boldsymbol{L}_2 \boldsymbol{I}_{2i_2} \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{I}_{1i_1} \boldsymbol{A} = \widetilde{\boldsymbol{P}} \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^{(n)} = \boldsymbol{U}$$

- $\boldsymbol{U}$ 为列主元素消去法得到的上三角矩阵
- 上式简记为 $\widetilde{\boldsymbol{P}} \boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}$, $\widetilde{\boldsymbol{P}} \boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}^{(n)}$

直接方法 | 列主元素消去法：矩阵描述

$n = 4$ **时**

$$\boldsymbol{U} = \boldsymbol{A}^{(4)} = \boldsymbol{L}_3 \boldsymbol{I}_{3i_3} \boldsymbol{L}_2 \boldsymbol{I}_{2i_2} \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{I}_{1i_1} \boldsymbol{A}$$

$$= \boldsymbol{L}_3 \left(\boldsymbol{I}_{3i_3} \boldsymbol{L}_2 \boldsymbol{I}_{3i_3}\right)\left(\boldsymbol{I}_{3i_3} \boldsymbol{I}_{2i_2} \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{I}_{2i_2} \boldsymbol{I}_{3i_3}\right)\left(\boldsymbol{I}_{3i_3} \boldsymbol{I}_{2i_2} \boldsymbol{I}_{1i_1}\right) \boldsymbol{A}$$

$$= \tilde{\boldsymbol{L}}_3 \tilde{\boldsymbol{L}}_2 \tilde{\boldsymbol{L}}_1 \boldsymbol{P} \boldsymbol{A}$$

- 其中

$$\tilde{\boldsymbol{L}}_1 = \boldsymbol{I}_{3i_3} \boldsymbol{I}_{2i_2} \boldsymbol{L}_1 \boldsymbol{I}_{2i_2} \boldsymbol{I}_{3i_3}, \qquad \tilde{\boldsymbol{L}}_2 = \boldsymbol{I}_{3i_3} \boldsymbol{L}_2 \boldsymbol{I}_{3i_3},$$

$$\tilde{\boldsymbol{L}}_3 = \boldsymbol{L}_3, \qquad \boldsymbol{P} = \boldsymbol{I}_{3i_3} \boldsymbol{I}_{2i_2} \boldsymbol{I}_{1i_1}$$

- 可以证明，$\tilde{\boldsymbol{L}}_k$ $(k = 1,2,3)$ 亦为单位下三角阵，其元素的绝对值不大于 1

直接方法 | 列主元素消去法：矩阵描述

$n = 4$ **时**

- 记

$$\boldsymbol{L}^{-1} = \tilde{\boldsymbol{L}}_3 \tilde{\boldsymbol{L}}_2 \tilde{\boldsymbol{L}}_1$$

- 根据 $\boldsymbol{U} = \tilde{\boldsymbol{L}}_3 \tilde{\boldsymbol{L}}_2 \tilde{\boldsymbol{L}}_1 \boldsymbol{P} \boldsymbol{A}$，可得

$$\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{LU}$$

- 其中 $\boldsymbol{P}$ 为排列矩阵，$\boldsymbol{L}$ 为单位下三角阵，$\boldsymbol{U}$ 为上三角阵

说明对 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 应用列主元素消去法相当于对 $(\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b})$ 先进行一系列行交换 $\boldsymbol{P}$ 后再对 $\boldsymbol{PAx} = \boldsymbol{Pb}$ 应用Gauss消去法

直接方法 | 列主元素消去法：矩阵描述

定理7.5（列主元素的三角分解定理）如果 $\boldsymbol{A}$ 为**非奇异矩阵**，则存在**排列矩阵** $\boldsymbol{P}$，使

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U},$$

其中 $\boldsymbol{L}$ 为单位下三角阵，$\boldsymbol{U}$ 为上三角阵

- 不再假设 $\boldsymbol{A}$ 的顺序主子式 $D_i \neq 0$

直接方法 | Gauss–Jordan消去法

Gauss消去法始终是消去对角线下方的元素，现考虑一种消去对角线下方和上方元素的方法，称为Gauss-Jordan消去法

- 设用Gauss-Jordan消去法已完成 $k-1$ 步，于是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 化为等价方程组 $\boldsymbol{A}^{(k)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(k)}$ ，其中

$$
\left(\boldsymbol{A}^{(k)},\boldsymbol{b}^{(k)}\right)=\left[\begin{array}{ccccccc|c}
1 & & & & a_{1k} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\
 & 1 & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & \ddots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & & 1 & a_{k-1,k} & \cdots & a_{k-1,n} & \vdots \\
 & & & & a_{kk} & \cdots & a_{kn} & b_k \\
 & & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & & & a_{nk} & \cdots & a_{nn} & b_n
\end{array}\right]
$$

直接方法 | Gauss–Jordan消去法

- 第 k 步计算时，考虑对上述矩阵的第 k 行上、下都进行消元计算

1. 按列选主元素，即确定 i_k 使 $\left|a_{i_k k}\right| = \max\limits_{k \le i \le n} |a_{ik}|$
2. 换行（当$i_k \ne k$）交换 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b})$ 第 k 行与第 i_k 行元素
3. 计算乘数

$$m_{ik} = -a_{ik}/a_{kk} \qquad (i = 1, 2, \cdots, n;\ i \ne k)$$

$$m_{kk} = 1/a_{kk}$$

4. 消元计算

$$a_{ij} \leftarrow a_{ij} + m_{ik} a_{kj} \qquad \begin{pmatrix} i = 1, 2, \cdots, n;\ i \ne k; \\ j = k+1, \cdots, n \end{pmatrix},$$

$$b_i \leftarrow b_i + m_{ik} b_k \qquad (i = 1, 2, \cdots, n; i \ne k)$$

5. 计算主行

$$a_{kj} \leftarrow a_{kj} \cdot m_{kk} \qquad (j = k, k+1, \cdots, n),$$

$$b_k \leftarrow b_k \cdot m_{kk}$$

直接方法 | Gauss–Jordan消去法

- 上述过程结束后，有

$$(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) \to \left(\boldsymbol{A}^{(k+1)},\boldsymbol{b}^{(k+1)}\right) \to \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & & & & \hat{b}_1 \\ & 1 & & & \hat{b}_2 \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & 1 & \hat{b}_n \end{array}\right]$$

- 说明用Gauss-Jordan消去法将 $\boldsymbol{A}$ 约化为单位矩阵，计算解就在常数项位置得到，因此不用回代求解

讨论：

- 该方法约需 $\frac{n^3}{2}$ 次乘除法运算，比Gauss消去法（ $MD=\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3}$ ）计算量大
- 用Gauss-Jordan消去法求一个矩阵的逆矩阵还是比较合适的

定理7.6（Gauss-Jordan消去法求逆矩阵）设 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异矩阵，方程组 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{I_n}$ 的增广矩阵为 $\boldsymbol{C}=(\boldsymbol{A}\mid\boldsymbol{I_n})$。如果对 C 应用Gauss-Jordan消去法得到 $(\boldsymbol{I_n}\mid\boldsymbol{T})$，则 $\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{T}$

- 求 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{A^{-1}}$，即求 $\boldsymbol{n}$ 阶矩阵 $\boldsymbol{X}$ 使 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{I_n}$，其中 $\boldsymbol{I_n}$ 为单位矩阵
- 根据Gauss-Jordan消去法， $\boldsymbol{T}$ 即为 $\boldsymbol{AX}=\boldsymbol{I_n}$ 的解，故 $\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{X}=\boldsymbol{T}$

例7.4 用Gauss-Jordan消去法求 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 4 & 5\\ 3 & 5 & 6\end{bmatrix}$$

- 应用Gauss-Jordan消去法，按列选主元素

$$\boldsymbol{C}=\left[\begin{array}{ccc|ccc}1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0\\ 2 & 4 & 5 & 0 & 1 & 0\\ 3 & 5 & 6 & 0 & 0 & 1\end{array}\right]\xrightarrow{r_1\leftrightarrow r_3}\left[\begin{array}{ccc|ccc}3 & 5 & 6 & 0 & 0 & 1\\ 2 & 4 & 5 & 0 & 1 & 0\\ 1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0\end{array}\right]$$

$$\xrightarrow{\text{第一次消元}}\left[\begin{array}{ccc|ccc}1 & 5/3 & 2 & 0 & 0 & 1/3\\ 0 & \boxed{2/3} & 1 & 0 & 1 & -2/3\\ 0 & 1/3 & 1 & 1 & 0 & -1/3\end{array}\right]$$

$\boldsymbol{c}_3$

直接方法 | Gauss–Jordan消去法：求逆矩阵

$$\xrightarrow{\text{第二次消元}} \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & -1/2 & 0 & -5/2 & 2 \\ 0 & 1 & 3/2 & 0 & 3/2 & -1 \\ 0 & 0 & \boxed{1/2} & 1 & -1/2 & 0 \end{array}\right]$$

$$\boldsymbol{c}_2$$

$$\xrightarrow{\text{第三次消元}} \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & 1 & -3 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & -3 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & -1 & 0 \end{array}\right] = (\boldsymbol{I}_n | \boldsymbol{A}^{-1})$$

$$\boldsymbol{c}_1$$

- 小红框内为每次按列所选的主元素，且蓝框内

$$\boldsymbol{m}_1 = (m_{11}, m_{21}, m_{31})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{c}_3$$
$$\boldsymbol{m}_2 = (m_{12}, m_{22}, m_{32})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{c}_2$$
$$\boldsymbol{m}_3 = (m_{13}, m_{23}, m_{33})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{c}_1$$

直接方法 | Gauss–Jordan消去法：求逆矩阵

- （省空间操作）了节省内存单元，不必将单位矩阵存放起来，$\boldsymbol{c}_3$ 存放在 $\boldsymbol{A}$ 的第 1 列位置，$\boldsymbol{c}_2$ 存放在 $\boldsymbol{A}$ 的第 2 列位置，$\boldsymbol{c}_1$ 存放在 $\boldsymbol{A}$ 的第 3 列位置

- 第 k 步消元时候，由 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 列

$$\boldsymbol{a}_k = (a_{1k}, \cdots, a_{kk}, \cdots, a_{nk})^{\mathrm{T}}$$

  计算 $\boldsymbol{m}_k = (-a_{1k}/a_{kk}, \cdots, 1/a_{kk}, \cdots, -a_{nk}/a_{kk})^{\mathrm{T}}$ 且替换 $\boldsymbol{a}_k$ （省空间操作）

- 经消元计算，最后再调整一下列就可在 $\boldsymbol{A}$ 的位置得到 $\boldsymbol{A}^{-1}$
  - 事实上，在 $\boldsymbol{A}$ 位置最后得到矩阵$\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{A}_1$（其中$\boldsymbol{P}$为排列矩阵）的逆矩阵$\boldsymbol{A}_1^{-1}$
  - 于是 $\boldsymbol{A}^{-1} = (\boldsymbol{PA}_1)^{-1} = \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{P}$，需要交换列

直接方法 | Gauss–Jordan消去法：求逆矩阵算法实现

算法 3：用整型数组 $\mathrm{idx}(n)$ 记录主行，A 的行列式存放在 $\det \boldsymbol{A}$，k 表示消元次数

1. $\det \boldsymbol{A} \leftarrow 1$

For k in $[1, \cdots, n-1]$

2. 按列选主元素 $\left|a_{i_k k}\right| = \max\limits_{k \le i \le n} |a_{ik}|$，$c_0 \leftarrow a_{i_k k}$，$\mathrm{idx}(k) \leftarrow i_k$

与算法1中 $\mathrm{idx}(\cdot)$ 的记录方式不一样（只是逐步记录）

3. 如果 $c_0 = 0$，则计算停止（此时 $\boldsymbol{A}$ 为奇异矩阵）

4. 如果 $i_k != k$ 则换行：$a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j}$ $(j = k, k+1, \cdots, n)$，$\det \boldsymbol{A} \leftarrow -\det \boldsymbol{A}$

5. $\det \boldsymbol{A} \leftarrow \det \boldsymbol{A} \cdot c_0$

6. 计算 $h \leftarrow a_{kk} \leftarrow 1/c_0$，$a_{ik} \leftarrow m_{ik} = -a_{ik} \cdot h (i = 1,2, \cdots, n; i \neq k)$

7. 消元计算$a_{ij} \leftarrow a_{ij} + m_{ik} a_{kj}$ $\begin{pmatrix} i = 1,2, \cdots, n; i \neq k \\ j = 1,2, \cdots, n; j \neq k \end{pmatrix}$

8. 计算主行$a_{kj} \leftarrow a_{kj} \cdot h$ $(j = 1,2, \cdots, n;\ j \neq k)$

直接方法 | Gauss–Jordan消去法：求逆矩阵算法实现

算法 3：用整型数组 $\mathrm{idx}(n)$ 记录主行，A 的行列式存放在 $\det A$，k 表示消元次数

9. 交换列对于 $k = n-1, n-2, \cdots, 2, 1$

    1）$t = \mathrm{idx}(k)$

    2）如果 $t \le k$，则转（3）；否则换列 $a_{ik} \leftrightarrow a_{it}$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$

    3）继续循环