计算方法

第6章 线性方程组的直接法

胡 敏
合肥工业大学 计算机与信息学院
jsjxhumin@hfut.edu.cn

求解线性方程组的另一类重要方法是直接法。直接法利用一系列递推公式计算有限步能直接得到方程组的精确解。当然，实际计算结果仍有误差，譬如舍入误差。舍入误差的积累有时甚至会严重影响解的精度。

求解线性方程组最基本的一种直接法是消去法。这是一个众所周知的古老方法，但用在现代电子计算机上仍然十分有效。

第 6 章 线性方程组的解法

6.1 消去法

6.2 追赶法

6.3 平方根法

6.4 误差分析

6.1 消去法

消去法的基本思想是

通过将一个方程乘或除以某个常数，以及将两个方程相加减这两种手续，逐步减少方程中的变元的数目，最终使每个方程仅含一个变元，从而得出所求的解。

1 约当消去法

所谓约当消去法 ，其特点是:

它的每一步仅在一个方程中保留某个变元，而从其它的各个方程中消去该变元，这样经过反复消元后，所给方程组中的每个方程最终被加工成仅含一个变元的形式，从而得出所求的解。

例1：用消去法求解线性方程组

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 + 3x_3 = 1 & (1) \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 4 & (2) \\ x_1 + 2x_2 \quad\quad = 7 & (3) \end{cases}$$

解： 先将方程（1）中 x_1 的系数化为1，并从其余方程中消去 x_1，得：

（1）/2 $\Longrightarrow$

$$\begin{cases} x_1 - 0.5x_2 + 1.5x_3 = 0.5 & (1) \\ 4x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 4 & (2) \\ x_1 + 2x_2 \quad\quad = 7 & (3) \end{cases}$$

（2）-（1）×4 $\Longrightarrow$

$$\begin{cases} x_1 - 0.5x_2 + 1.5x_3 = 0.5 & (1) \\ 4x_2 - x_3 = 2 & (2) \\ x_1 + 2x_2 \quad\quad = 7 & (3) \end{cases}$$

（3）-（1）

$$\begin{cases} x_1 - 0.5x_2 + 1.5x_3 = 0.5 & (1) \\ 4x_2 - x_3 = 2 & (2) \\ 2.5x_2 - 1.5x_3 = 7 & (3) \end{cases}$$

再将方程（2）中 x_2 的系数化为1，并从其余方程中消去 x_2 ，得：

（2）/4

$$\begin{cases} x_1 - 0.5x_2 + 1.5x_3 = 0.5 & (1) \\ x_2 - 0.25x_3 = 0.5 & (2) \\ 2.5x_2 - 1.5x_3 = 7 & (3) \end{cases}$$

（1）+（2）/2

$$\begin{cases} x_1 \quad + 1.375x_3 = 0.75 & (1) \\ x_2 - 0.25x_3 = 0.5 & (2) \\ 2.5x_2 - 1.5x_3 = 7 & (3) \end{cases}$$

（3）-（2）×2.5 $\Rightarrow$

$$\begin{cases} x_1 \qquad\quad +1.375x_3 = 0.75 & (1) \\ \qquad x_2 - 0.25x_3 = 0.5 & (2) \\ \qquad\quad -0.875x_3 = 5.25 & (3) \end{cases}$$

再将方程（3）中 x_3 的系数化为1，并从其余方程中消去 x_3 ，得：

（3）/-0.875 $\Rightarrow$

$$\begin{cases} x_1 \qquad\quad +1.375x_3 = 0.75 & (1) \\ \qquad x_2 - 0.25x_3 = 0.5 & (2) \\ \qquad\qquad\qquad x_3 = -6 & (3) \end{cases}$$

（2）+0.25×(3) $\Rightarrow$

$$\begin{cases} x_1 \qquad\quad +1.375x_3 = 0.75 & (1) \\ \qquad x_2 \qquad\qquad = -1 & (2) \\ \qquad\qquad\qquad x_3 = -6 & (3) \end{cases}$$

（1）-1.375×(3)

$$\begin{cases} x_1 \qquad\qquad = 9 & （1） \\ \qquad x_2 \qquad = -1 & （2） \\ \qquad\qquad x_3 = -6 & （3） \end{cases}$$

最终得到方程组的解：

$$x_1 = 9, \qquad x_2 = -1, \qquad x_3 = -6$$

上述算法就是所谓**约当消去法**。

就一般方程而言

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j = b_i \qquad i = 1,2,\cdots,n \qquad (4)$$

以 $a_{ij}^{(k)}$，$b_i^{(k)}$ 表示经过k步消元后相应的系数和右端项

令 $a_{ij}^{(0)} = a_{ij}$， $b_i^{(0)} = b_i$， $i, j = 1,2,\cdots,n$ （5）

第一步

先将方程（4）$_1$中 x_1 的系数化为1，并从其余方程中消去 x_1 ，使之变为：

$$\begin{cases} x_1 + \sum_{j=2}^{n} a_{ij}^{(1)} x_j = b_1^{(1)} \\ \sum_{j=2}^{n} a_{ij}^{(1)} x_j = b_i^{(1)} \qquad i = 2,3,\cdots,n \end{cases} \qquad (6)$$

为此，先用 a_{11} 遍除方程 $(4)_1$ ，即进行运算

$$
\begin{aligned}
a_{1j}^{(1)} &= \frac{a_{ij}}{a_{11}}, \qquad j = 2,3,\cdots,n \\
b_1^{(1)} &= \frac{b_1}{a_{11}}
\end{aligned}
\qquad (7)
$$

然后， $(4)_i - (6)_1 \times a_{i1}$ 即令

$$
\begin{aligned}
a_{ij}^{(1)} &= a_{ij} - a_{i1}a_{1j}^{(1)} \\
b_i^{(1)} &= b_i - a_{i1}b_1^{(1)} \qquad i, j = 2,3,\cdots,n
\end{aligned}
\qquad (8)
$$

第二步

再将方程$(6)_2$ 中 x_2的系数化为1，并从其余方程中消去 x_2 。

设经过k−1 步以后，方程组为：

$$\begin{cases} x_i + \sum_{j=k}^{n} a_{ij}^{(k-1)} x_j = b_1^{(k-1)} & i = 1,2,\cdots,k-1 \\ \sum_{j=k}^{n} a_{ij}^{(k-1)} x_j = b_i^{(k-1)} & i = k,k+1,\cdots,n \end{cases} \qquad (9)$$

第k 步

再将方程 （9）$_k$中 x_k 的系数化为1，并从其余方程中消去 x_k 。

$$
\begin{cases}
x_i + \sum\limits_{j=k}^{n} a_{ij}^{(k)} x_j = b_1^{(k)} & i = 1,2,\cdots,k \\
\sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{ij}^{(k)} x_j = b_i^{(k)} & i = k+1, k+2, \cdots, n
\end{cases} \qquad (10)
$$

为此，要实施运算

$$
a_{kj}^{(k)} = \frac{a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}, \qquad j = k+1, k+2, \cdots, n
$$

$$
b_k^{(k)} = \frac{b_k^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \qquad (11)
$$

和

$$
a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} a_{kj}^{(k)} \qquad j = k+1, k+2, \cdots, n
$$

$$
b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} b_i^{(k)} \qquad i = 1,2,\cdots,k-1,k+1,\cdots,n \qquad (12)
$$

这样，经过 n 步以后，所给方程组最终被加工成：

$$x_i = b_i^{(n)}, \qquad i = 1,2,\cdots,n \qquad (13)$$

即为所给方程组的解

约当消去法的总计算量为：$\sum_{k=1}^{n}(n-k+1)\times n \approx \frac{n^3}{2}$

约当消去法在加工过程中，用老系数计算新系数，而进一步的计算中只用到新系数，故老系数可以不再保留。

故可动态地计算（11）、（12）

$$\frac{a_{kj}}{a_{kk}} \Rightarrow a_{kj}, \qquad j = k+1, k+2, \cdots, n$$

$$\frac{b_k}{a_{kk}} \Rightarrow b_k$$

$$a_{ij} - a_{ik} a_{kj} \Rightarrow a_{ij} \qquad j = k+1, k+2, \cdots, n$$

$$b_i - a_{ik} b_i \Rightarrow b_i \qquad i = 1, 2, \cdots, k-1, k+1, \cdots, n$$

2 高斯消去法

例： 用消去法解方程组

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

解：

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 \\ \quad 4x_2 - x_3 = 5 \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 \end{cases} \quad (3)+(1)\times(-2)\rightarrow \quad \begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6 \\ \quad 4x_2 - x_3 = 5 \\ -4x_2 - x_3 = -11 \end{cases}$$

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

由（3）得 $x_3=3$

把 $x_3=3$ 代入（2）得 $x_2=2$

把 $x_2=2$ 、$x_3=3$ 代入（1）得 $x_1=1$

这种求解线性方程组的方法就是高斯消去法

将线性方程组化为上三角形方程组的计算过程叫消元，自下而上解三角形方程组，计算 x_1, x_2, x_3 的过程叫回代。

由此看出，用高斯消去法解方程组的基本思想是用逐次消去未知数的方法把原来方程组化为与其等价的三角形方程组，而求解三角形方程组就容易了。

下面我们来讨论一般的解 n 阶方程组的高斯消去法。

设线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \qquad (6.1)$$

写为矩阵形式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$，其中

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

将 $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$ 记为 $A^{(1)}\mathbf{x}=\mathbf{b}^{(1)}$ ，假定 $a_{11}^{(1)}\neq 0$

其增广矩阵为：

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

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

顺序Gauss消去法的消元过程可表述如下：

第一步，设 $a_{11}^{(1)}\neq 0$，将第一列中$a_{11}^{(1)}$以下的各元素消成零

即依次用

$$-l_{i1}=-\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$$

消元因子(行乘数)

$(i=2，3，\ldots，n)$

乘以矩阵$[A^{(1)}，b^{(1)}]$的第一行再加到第i行，得到矩阵

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

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

第二步，设 $a_{22}^{(2)} \neq 0$ ，将第二列$a_{22}^{(2)}$以下各元素消成零，

即依次用
$$-l_{i2} = -\frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \quad （i=3，4，\ldots，n）$$

乘以矩阵$[A^{(2)}，b^{(2)}]$的第二行再加到第i行，得到矩阵

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

其中

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

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

如此继续消元下去直到第$n-1$步结束后，得到矩阵

21

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

增广矩阵$[A^{(n)}, b^{(n)}]$对应如下上三角形方程组

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

这是与原线性方程组（6.1）等价的方程组.

对于等价方程组

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

进行回代求解，可以得到：

$$x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}}$$

$$x_k = \frac{1}{a_{kk}^{(k)}}\left(b_k^{(k)} - a_{kk+1}^{(k)}x_{k+1} - a_{kk+2}^{(k)}x_{k+2} - \cdots - a_{kn}^{(k)}x_n\right)$$

$$= \frac{1}{a_{kk}^{(k)}}\left(b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)}x_j\right), \quad k = n-1, \cdots, 2, 1$$

于是，采用Gauss消去法求解方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \qquad (6.1)$$

首先写出增广矩阵

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

然后进行消元，采用公式

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik}a_{kj}^{(k)}, \quad i,j = k+1, k+2, \cdots, n$$

$$b_{i}^{(k+1)} = b_{i}^{(k)} - l_{ik}b_{k}^{(k)}, \quad i = k+1, k+2, \cdots, n$$

$$l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \quad (i=k+1, k+2, \ldots, n)$$

$$k = 1,2,\cdots,n-1$$

得到相似增广矩阵

$$\left[A^{(n)}, b^{(n)}\right] = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_{1}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_{2}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_{3}^{(3)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_{n}^{(n)} \end{bmatrix}$$

最后进行回代得到方程组的解

$$
\begin{cases}
x_n = \dfrac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}} \\[2ex]
x_k = \dfrac{1}{a_{kk}^{(k)}}\left(b_k^{(k)} - \displaystyle\sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right), \quad k = n-1, \cdots, 2, 1
\end{cases}
$$

在编程计算时，最后的增广矩阵存放的元素是：

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

下面给出Gauss消去法的计算流程：

消元过程: 对于 $k=1, 2, \ldots, n-1,$ 执行计算
$i=k+1, k+2, \ldots, n$

$$l_{ik} = a_{ik}^{(k)} \Big/ a_{kk}^{(k)}$$

除法 n-k 次

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik} a_{kj}^{(k)}, \quad j=k+1, \ldots, n$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - l_{ik} b_k^k$$

乘法(n-k)(n-k+1)次

回代过程: 令 $x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)}$

对于$i=n-1, n-2, \ldots, 1$，计算

$$x_i = \left(b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j \right) \Big/ a_{ii}^{(i)}$$

$$
\left[A^{(n)}, b^{(n)}\right] = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(1)} & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2,n-1}^{(2)} & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3,n-1}^{(3)} & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \ddots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{n-1,n-1}^{(n-1)} & a_{n-1,n}^{(n-1)} & b_{n-1}^{(n-1)} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{bmatrix}
$$

消元条件: $a_{ii}^{(i)} \neq 0, i = 1, 2, \cdots, n-1$ 回代条件: $a_{nn}^{(n)} \neq 0$

消元法是将某行的若干倍加到另一行

故A的各阶顺序主子式D_i(i=1~n)不变

$$
D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1i} \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{i1} & \dots & a_{ii} \end{vmatrix}
$$

$$D_1 = a_{11}^{(1)}, D_2 = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)}, \ \dots,$$

$$D_i = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{ii}^{(i)}, \ \dots,$$

$$D_n = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{nn}^{(n)}$$

消元条件: $D_i \neq 0, i = 1 \sim n-1$

回代条件: $D_n \neq 0, |A| \neq 0$

用Gauss消去法解方程组，应注意：

1. 适用条件： 原方程组系数矩阵的各阶顺序主子式不等于零。

2．运算量小： 共有乘除法次数为

第 k 步消元，乘法(n-k)(n-k+1)次，除法 n-k 次，故完成 n-1步消元乘除法总数为 $$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+2)=\frac{n^3}{3}+\frac{n^2}{2}-\frac{5n}{6}$$

回代过程乘除法总数为 $$\sum_{i=1}^{n}(n-i+1)=\frac{n^2}{2}+\frac{n}{2}$$

总数为 $$\frac{1}{3}\left(n^3-n\right)+2\times\frac{n(n-1)}{2}+n=\frac{1}{3}(n^3+3n^2-n)$$

而Gramer 法则的乘除法次数为: $(n^2-1)\,n\,!$

当 n=20 时 $$\begin{cases} N=(n^2-1)n!=9.7\times10^{20} \\ N=\frac{1}{3}(n^3+3n^2-n)=3060 \end{cases}$$

2 选主元素

不带行交换的高斯消去法能进行到底的条件：

$$a_{kk}^{(k)} \neq 0 \quad (1 \le k \le n)$$

即使 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$

但若 $|a_{kk}^{(k)}|$ 过小，也会造成舍入误差积累很大导致计算解的精度下降, 进而使高斯消去法的求解失去意义。

例：用高斯消去法解线性方程组

$$\begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 \\ -2 & 1.072 & 5.643 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

用8位十进制尾数的浮点数计算。

解：

$$(A, \mathbf{b}) = (A^{(1)}, \mathbf{b}^{(1)}) = \begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \end{bmatrix}$$

由于

$$3.712+2\times10^{8}=0.000000003712\times10^{9}+0.2\times10^{9}=0.2\times10^{9}$$

$$\cdots$$

所以

$$(A^{(2)},\mathbf{b}^{(2)})=\begin{bmatrix}10^{-8} & 2 & 3 & 1\\ & 0.2\times10^{9} & 0.3\times10^{9} & 0.1\times10^{9}\\ & 0.4\times10^{9} & 0.6\times10^{9} & 0.2\times10^{9}\end{bmatrix}$$

$$(A^{(3)},\mathbf{b}^{(3)})=\begin{bmatrix}10^{-8} & 2 & 3 & 1\\ & 0.2\times10^{9} & 0.3\times10^{9} & 0.1\times10^{9}\\ & & 0 & 0\end{bmatrix}$$

说明原方程组有无穷多解，但事实上 $|A| \approx 11.850$，原方程组应该有唯一解。

为什么？（主元素绝对值过小）

此例是由于顺序Gauss消去法中的主元素绝对值非常小，使消元因子绝对值非常大，某些数也变得很大，计算过程中出现“大数吃掉小数”现象，产生较大的舍入误差。

为避免这种现象发生，关键在于使主元绝对值尽量地大，可以对原方程组作等价变换，再利用顺序Gauss消去法求解。

（方程组的行交换不影响结果）

$$(A,\mathbf{b}) = (A^{(1)},\mathbf{b}^{(1)}) = \begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

$$(A^{(2)},\mathbf{b}^{(2)})=\begin{bmatrix}-2 & 1.072 & 5.643 & 3\\ & 3.712 & 1.8015 & 0.5\\ & 2 & 3 & 1\end{bmatrix}$$

$$(A^{(3)},\mathbf{b}^{(3)})=\begin{bmatrix}-2 & 1.072 & 5.643 & 3\\ & 3.712 & 1.8015 & 0.5\\ & & 1.865541 & 0.68513854\end{bmatrix}$$

回代求解得

$$\bar{\mathbf{x}}=(-0.4910582,-0.050886076,0.36725739)^T$$

而准确解

$$\mathbf{x}=(-0.491058221,-0.0508860774,0.367257387)^T$$

为避免小主元作除数，在高斯消去法中加入选主元过程

即在第 k $(k=1,\cdots,n-1)$ 步消元时

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

首先在 $A^{(k)}$ 的第 k 列主对角元以下元素 $a_{ik}^{(k)}$ $(k\le i\le n)$ 中挑选绝对值最大者 $a_{i_k k}^{(k)}$ $(k\le i_k\le n)$，并通过交换 $(A^{(k)},\mathbf{b}^{(k)})$ 的第 k 行与第 i_k 行对应元素，使$a_{i_k k}^{(k)}$位于主对角线上，仍记为 $a_{kk}^{(k)}$ ，然后再进行消元计算。

列主元消去法计算步骤：

1、**输入矩阵阶数n，增广矩阵 A(n,n+1);**

2、**对于** $k = 1,2,\cdots,n$

(1) **按列选主元：选取** l **使**

$$|a_{lk}| = \max_{k\le i\le n} |a_{ik}| \ne 0$$

(2) **如果** $l \ne k$ **交换 A(n,n+1) 的第** k **行与第** l **行元素**

(3) **消元计算：**

$$m_{ik} \leftarrow \frac{a_{ik}}{a_{kk}} \qquad i = k+1,\cdots,n$$

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

3、回代计算

$$x_i \leftarrow (a_{i,n+1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j)/a_{ii} \qquad i = n, n-1,\cdots,1$$

容易证明，只要det（A）$\neq 0$，列主元Gauss消去法就可以顺利完成，即不会出现主元素为零或者绝对值太小的情形出现。

定理1：假设方程组是对角占优的，则 $a_{kk}^{(k-1)}\quad (k=1,2,\cdots,n)$ 全不为0。（高斯消去法能进行到底的条件）

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j = b_i \qquad i=1,2,\cdots,n \qquad (4)$$

定理2：假设方程组对称并对角占优的，则 $a_{kk}^{(k-1)}\quad (k=1,2,\cdots,n)$ 全是主元素。

总　结

1. 解线性方程组Gauss消去法的计算程序如何实现？可以进行Gauss消去法的条件是什么？

2. 解线性方程组列主元Gauss消去法的计算程序如何实现？可以进行列主元Gauss消去法的条件是什么？