第三章 线性代数方程组的数值解法

第一节 引言

线性代数方程组的一般形式

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots \qquad \cdots \qquad \cdots \qquad \cdots \qquad \cdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

用矩阵形式表示为 $Ax = b$

其增广矩阵记为 $\tilde{A} \in R^{m\times(n+1)}$

$$\tilde{A} = [A, b] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} & b_m \end{bmatrix}$$

定理1 （线性代数方程组有解判别定理） 线性方程组

$Ax=b$有解的充分必要条件是：秩（A）=秩（$\tilde{A}$）

定理2 线性方程组$Ax=b$有解（即相容）时，

(1)$秩(A)=秩(\tilde{A})=r=n$,则方程组$Ax=b$存在唯一解。

(2)$r(A)=r(\tilde{A})=r<n$，方程组$Ax=b$有无穷多解。

通解=原方程组一个特解+对应齐次方程组的基础解系的线性组合。

常见是$m<n$，称为欠定方程组（方程数少于未知数）此时，从$Ax=b$的无穷多个解中需求出2−范数最小的解。即求$\bar{x}$,使$\|\bar{x}\|_2=\min\|x\|_2$，$x$满足$Ax=b$。

$r(A) \neq r(\tilde{A})$方程组$Ax=b$无解（即不相容）。

常见是$m>n$，称为超定方程组（又称矛盾方程组）

此时，向量b不在A的列空间$R(A)$之中，原方程组无解，但可求出最小二乘意义下的解$\overline{x}$。

即求$\overline{x}$使$\|b-A\overline{x}\|_2^2=\min$

MATLAB实现: x=A\b

本章介绍求解n阶线性方程组的数值方法

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

数值求解方法有以下三条途径（三种框架）

直接法：利用Gauss消元或矩阵分解，通过有限次运算可求出精确解。

迭代法：构造迭代格式，产生迭代序列，通过无限次迭代过程求解。有限次截断得近似解。

极小化方法：构造二次模函数，用迭代过程求二次模函数的极小化问题，即变分法（经n次运算，理论上得精确解）要求A对称正定(S.P.D)

第二节　高斯消元法

求解 $Ax=b$ 　　$A\in R^{n\times n}$

将原方程组 $Ax=b$ 化为同解的上三角方程组 $Ux=g$

$$\begin{bmatrix} * & \cdots & * \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ * & \cdots & * \end{bmatrix}\begin{bmatrix} * \\ \vdots \\ * \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} * \\ \vdots \\ * \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{初等变换}} \begin{bmatrix} * & \cdots & * \\ & \ddots & \vdots \\ & & * \end{bmatrix}\begin{bmatrix} * \\ \vdots \\ * \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} * \\ \vdots \\ * \end{bmatrix}$$

$$Ax=b \quad \underset{\text{同解}}{\Leftrightarrow} \quad Ux=g$$

用增广矩阵表示为

$$\begin{array}{c} \qquad\qquad\qquad \mathbf{A} \qquad\qquad\qquad\qquad \mathbf{b} \\ \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_{1}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_{2}^{(1)} \\ \cdots\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_{n}^{(1)} \end{bmatrix} \end{array}$$

$$\longrightarrow \begin{array}{c} \qquad\qquad\qquad \mathbf{U} \qquad\qquad\qquad\qquad \mathbf{g} \\ \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_{1}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_{2}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} & b_{n}^{(n)} \end{bmatrix} \end{array}$$

一、三角形方程组的解法

三角形方程组包括上三角形方程组和下三角形方程组，是最简单的线性方程组之一。上三角方程组的一般形式是:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots\cdots\cdots\ \cdots\cdots\cdots\ \cdots\cdots\cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad a_{22}x_2 + \cdots\cdots\cdots\ \cdots\cdots\cdots\ \cdots\cdots\cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad\qquad \cdots\cdots\cdots\ \cdots\cdots\cdots\ \cdots\cdots\cdots\ \cdots\cdots\cdots = \cdots \\ \qquad\qquad a_{n-1n-1}x_{n-1} + a_{n-1n}x_n = b_{n-1} \\ \qquad\qquad\qquad a_{nn}x_n = b_n \\ \text{其中} a_{ii} \neq 0 \quad (i = 1,2,\ldots\ldots, n) \end{cases}$$

例1 用回代法求解线性方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_4 = 4 \\ -x_2 - x_3 - 5x_4 = -7 \\ 3x_3 + 13x_4 = 13 \\ -13x_4 = -13 \end{cases}$$

解:

$x_4 = 1$

$x_3 = (13 - 13x_4)/3 = 0$

$x_2 = -(-7 + 5x_4 + x_3) = -(-7 + 5 + 0) = 2$

$x_1 = 4 - x_4 - x_2 = 4 - 1 - 2 = 1$

所以，解为 $(x_1, x_2, x_3, x_4)^T = (1, 2, 0, 1)^T$

为求解上三角方程组，从最后一个方程入手，先解出 $x_n=b_n/a_{nn}$，然后按方程由后向前的顺序，从方程中依次解出$x_{n-1},x_{n-2},\dots,x_1$。这样就完成了上三角方程组的求解过程。这个过程被称为回代过程其计算步骤如下：

$$\boxed{\begin{aligned} & x_n = b_n / a_{nn} \\ & x_i = (b_i - \sum_{k=i+1}^{n} a_{ik} x_k) / a_{ii} \\ & \qquad i = n-1, \cdots, 1 \end{aligned}}$$

返回变量　　函数名　　参数表

```
function X=backsub(A,b)
%Input—A is an n×n upper- triangular nonsingullar matrix
%         ---b is an n×1 matrix
%Output—X is the solution to the system AX=b
n=length(b);
X=zeros(n,1);
X(n)=b(n)/A(n,n);
for i=n-1:-1:1
   X(i)=(b(i)-A(i,i+1:n)* X(i+1:n))/A(i,i);
end
```

$$x_n = b_n / a_{nn}$$

$$x_i = (b_i - \sum_{k=i+1}^{n} a_{ik} x_k) / a_{ii}$$

$$i = n-1, \cdots, 1$$

A的第i行、第i+1到n列元素构成的行向量

下三角方程组的一般形式为：

$$\begin{cases} a_{11}x_1 & = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 & = b_2 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots & \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n & = b_n \end{cases}$$

其中$a_{ii} \neq 0, i = 1, 2, \cdots, n$

下三角形方程组可以参照上三角形方程组的解法来求解，下三角形方程组的求解顺序是从第一个方程开始，按从上到下的顺序，依次解出：$x_1, x_2, \cdots, x_n$，其计算公式为：

$$\begin{cases} x_1 = b_1 / a_{11} \\ x_i = (b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{ik} x_k) / a_{ii} \quad (i = 2, 3, \cdots, n) \end{cases}$$

如上解三角形方程组的方法称为回代法.

二、顺序高斯消元法

高斯消元法是一个古老的直接法,由它改进得到的选主元法,是目前计算机上常用于求低阶稠密矩阵方程组的有效方法,其特点就是通过消元将<u>一般线性方程组</u>的求解问题转化为<u>三角方程组</u>的求解问题。

高斯消元法的求解过程,可大致分为两个阶段:首先,把原方程组化为上三角形方程组,称之为"消元"过程;然后,用逆次序逐一求出上三角方程组(原方程组的等价方程组)的解,称之为"回代"过程.

高斯"消元"过程可通过矩阵运算来实现。具体过程如下:

例3 用*Gauss*消元法求解方程组

$$\begin{cases} x_1+2x_2+3x_3=6 \\ 2x_1+3x_2+4x_3=9 \\ x_1+3x_2+2x_3=6 \end{cases}$$

解: 增广矩阵: $\overline{A}^{(1)}=[A\ b]=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 6 \\ 2 & 3 & 4 & 9 \\ 1 & 3 & 2 & 6 \end{bmatrix}$

$n=3, a_{11}=1\neq 0$

$$m_{21}=a_{21}/a_{11}=2/1=2$$

$$m_{31}=a_{31}/a_{11}=1/1=1$$

$\mathrm{L}_1=\begin{bmatrix} 1 & & \\ -2 & 1 & \\ -1 & & 1 \end{bmatrix}$, $L_1Ax=L_1b$完成第一步消元,得:

$$\overline{A}^{(2)}=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3 & 6\\ 0 & -1 & -2 & -3\\ 0 & 1 & -1 & 0\end{bmatrix}$$

$$a_{22}^{(2)}=-1\neq 0, m_{32}=a_{32}^{(2)}/a_{22}^{(2)}=1/(-1)=-1$$

$L_2=\begin{bmatrix}1 & & \\ & 1 & \\ & 1 & 1\end{bmatrix}$, $L_2L_1Ax=L_2L_1b$完成第二步消元,得

$$\overline{A}^{(3)}=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3 & 6\\ 0 & -1 & -2 & -3\\ 0 & 0 & -3 & -3\end{bmatrix}\Leftrightarrow\begin{cases}x_1+2x_2+3x_3=6\\ \quad -x_2-2x_3=-3\\ \quad\quad -3x_3=-3\end{cases}$$

回代求得 $x_3=-3/-3=1$

$$x_2=-(-3+2x_3)=-(-3+2\times 1)=1$$

$$x_1=6-2x_2-3x_3=6-2\times 1-3\times 1=1$$

故所求解为 $x_1=1, x_2=1, x_3=1$

将方程组$Ax=b$的系数矩阵与右端项合并为

$$[A,b] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ & \cdots & \cdots & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{bmatrix} = \overline{A}$$

记$\overline{A} = \overline{A}^{(1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{bmatrix} = \left[\alpha_1^{(1)}, \alpha_2^{(1)}, \ldots, \alpha_n^{(1)}, b^{(1)}\right]$

第一步: 设$a_{11}^{(1)} \neq 0$,取$m_{i1} = \dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad i = 2, \ldots, n$

对$A^{(1)}$的第一列 $\alpha_1^{(1)}$ 构造L_1,使$L_1\alpha_1^{(1)} = \left(a_{11}, 0, \ldots, 0\right)^T$.

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -m_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$L_1\overline{A}^{(1)}=\begin{bmatrix}1 & & & \\ -m_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)}\end{bmatrix}$$

$$L_1\overline{A}^{(1)}=\begin{bmatrix}a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)}\end{bmatrix}\overset{\Delta}{=}\overline{A}^{(2)}=\left[\alpha_1^{(2)},\alpha_2^{(2)},\ldots,\alpha_n^{(2)},b^{(2)}\right]$$

$$a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-m_{i1}a_{1j}^{(1)} \qquad i=2,\cdots,n,\ j=2,\cdots,n$$

$$b_i^{(2)}=b_i^{(1)}-m_{i1}b_1^{(1)}, \qquad i=2,\cdots,n$$

对方程组$A^{(1)}x=b^{(1)}$从左边乘以L_1

$$L_1A^{(1)}x=L_1b^{(1)}$$

第二步: 设$a_{22}^{(2)} \neq 0$，取$m_{i2} = \dfrac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$，$i = 3, \ldots, n$

对$\overline{A}^{(2)}$的第二列 $\alpha_2^{(2)}$ 构造 $L_2 = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & -m_{32} & 1 & & \\ & \vdots & & \ddots & \\ & -m_{n2} & & & 1 \end{bmatrix}$,

使 $L_2 \overline{A}^{(2)} = L_2 L_1 \overline{A}^{(1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1,n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2,n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3,n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{n,n}^{(3)} & b_n^{(3)} \end{bmatrix} \stackrel{\Delta}{=} \overline{A}^{(3)}$

$$L_2\overline{A}^{(2)}=\begin{bmatrix}1&&&&\\&1&&&\\&-m_{32}&1&&\\&\vdots&&\ddots&\\&-m_{n2}&&&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_{11}^{(1)}&a_{12}^{(1)}&\cdots&a_{1n}^{(1)}&b_1^{(1)}\\0&a_{22}^{(2)}&\cdots&a_{2n}^{(2)}&b_2^{(2)}\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots\\0&a_{n2}^{(2)}&\cdots&a_{nn}^{(2)}&b_n^{(2)}\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}a_{11}^{(1)}&a_{12}^{(1)}&a_{13}^{(1)}&\cdots&a_{1,n}^{(1)}&b_1^{(1)}\\0&a_{22}^{(2)}&a_{23}^{(2)}&\cdots&a_{2,n}^{(2)}&b_2^{(2)}\\0&0&a_{33}^{(3)}&\cdots&a_{3,n}^{(3)}&b_3^{(3)}\\\vdots&\vdots&\vdots&\cdots&\vdots&\vdots\\0&0&a_{n3}^{(3)}&\cdots&a_{n,n}^{(3)}&b_n^{(3)}\end{bmatrix}\overset{\Delta}{=}\overline{A}^{(3)}$$

$$L_2L_1A^{(1)}x=L_2L_1b^{(1)}$$

$$m_{i2}=\frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}},$$

$$a_{ij}^{(3)}=a_{ij}^{(2)}-m_{i2}a_{2j}^{(2)},\qquad i,j=3,\cdots,n$$

$$b_i^{(3)}=b_i^{(2)}-m_{i2}b_2^{(2)}\qquad i=3,4,\ldots,n$$

进行到第k步消元时

$$\overline{A}^{(k)}=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & a_{33}^{(3)} & & \cdots & \cdots & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ & & & \ddots & & & & \vdots & \vdots \\ & & & & a_{kk}^{(k)} & a_{kk+1}^{(k)} & \cdots & \cdots & b_k^{(k)} \\ & & & & a_{k+1,k}^{(k)} & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & \cdots & b_{k+1}^{(k)} \\ & & & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & & a_{nk}^{(k)} & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{bmatrix}$$

下一步消元，从$\overline{A}^{(k)}\to\overline{A}^{(k+1)}$，将$\overline{A}^{(k)}$的第$k$列的对角元以下的元素化为零。

设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$，取 $m_{ik} = a_{ik}^{(k)} \Big/ a_{kk}^{(k)}$

$(i = k+1, \ldots, n)$，

构造 Gauss 变换阵 $L_k = I - \bar{l}_k e_k^T = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & 1 & & & \\ & & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & & \vdots & & \ddots & \\ & & & -m_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix}$

$a_{kk}^{(k)}$ 称为主元素.
$(k = 1, 2, \cdots, n-1)$

$$\overline{A}^{(k+1)} = L_k \overline{A}^{(k)}$$

消元计算递推公式：

$i = k+1, \cdots, n$

（1）$m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$

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

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

最后得 $$\bar{A}^{(n)}=\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & \cdots & \cdots & & \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

$$L_{n-1}\cdots L_2L_1A^{(1)}x=L_{n-1}\cdots L_2L_1b^{(1)}$$

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

计算量

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

用回代过程求解上三角方程组，即可得解向量 $(x_1^*,x_2^*,\ldots,x_n^*)^T$.

$a_{kk}^{(k)}\neq 0,(k=1,2,\cdots,n-1)$是高斯消元的前提。

求解的全过程包括两个步骤：消元和回代

1. 顺序消元

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

$$i=k+1,\cdots,n$$

（1）$m_{ik}=a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$

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

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

2. 回代求解

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

$$x_k=(b_k^{(k)}-\sum_{j=k+1}^{n}a_{kj}^{(k)}x_j)/a_{kk}^{(k)}$$

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

存储方式

在计算机中计算时，采用动态存储方式。最初用一个$n\times n$的二维数组存放A，第k步消元计算后

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

$$a_{ij}^{(k)} \leftarrow a_{ij}^{(k+1)} \qquad (i=k+1,\cdots,n; \quad j=k+1,\cdots,n)$$

$$A^{(k)}=\begin{bmatrix}
a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\
 & & a_{33}^{(3)} & & \cdots & \cdots & \cdots & a_{3n}^{(3)} \\
 & & & \ddots & & & & \vdots \\
 & & & & a_{kk}^{(k)} & a_{kk+1}^{(k)} & \cdots & \cdots \\
 & & & & a_{k+1,k}^{(k)} & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & \cdots \\
 & & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & & & a_{nk}^{(k)} & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)}
\end{bmatrix}$$

m_{ik}

$a_{ij}^{(k+1)}$

消元过程全部完成后，原来的二维数组中存放的元素实际上是一个新的矩阵，记为$\boldsymbol{A}^F$

用动态形式表示为 $\boldsymbol{A} \leftarrow \boldsymbol{A}^F$

$$A^F = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(1)} & a_{1n}^{(1)} \\ m_{21} & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2,n-1}^{(2)} & a_{2n}^{(2)} \\ m_{31} & m_{32} & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3,n-1}^{(3)} & a_{3n}^{(3)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & m_{n,n-1} & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix}$$

$$= \boldsymbol{L} - \boldsymbol{I} + \boldsymbol{U}$$

MATLAB For Gaussian Elimination

```
function X=gauss(A,b)
%Input—A is an
%      ---b is an
%Output—X is t
[n n]=size(A);  % 确
X=zeros(n,1);
```

$i = k+1, \cdots, n$

（1） $m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$

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

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

```
for k=1:n-1
    for i=k+1:n          % 消元过程
      A(i,k)=A(i,k)/ A(k,k);  % A(k,k) ≠0
      A(i,k+1:n)= A(i,k+1:n)- A(i,k) *A(k,k+1:n);
      b(i)= b(i)-A(i,k) *b(k);
    end
end
X=backsub(A, b);              %回代求解
```

定理：对线性代数方程组Ax=b，其中A非奇异，若系数矩阵A的顺序主子式全不为零，则可用顺序高斯消元法求解线性代数方程组Ax=b。

消元法是解线性方程组的基本方法，具有计算简单的优点，但有时由于主元过小，使得计算结果严重失真,实际中常采用选主元高斯消元法。

例:讨论下面方程组的解法

$$\begin{cases} 0.0001x_1+x_2=1 \\ x_1+x_2=2 \end{cases}$$

假设求解是在四位浮点十进制数的计算机上进行

解:本题用机器数系表示为

$$\begin{cases} \underline{0.1000\times10^{-3}}\,x_1 + 0.1000\times10^{1}\,x_2 = 0.1000\times10^{1} \\ 0.1000\times10^{1}\,x_1 + 0.1000\times10^{1}\,x_2 = 0.2000\times10^{1} \end{cases}$$

$\boxed{a_{11}=0.0001,}$ $m_{21}=a_{21}/a_{11}=1/0.0001=10^4$, 消元得

$$\begin{cases} 0.1000\times10^{-3}\,x_1 + 0.1000\times10^{1}\,x_2 = 0.1000\times10^{1} \\ \qquad -0.1000\times10^{5}\,x_2 = -0.1000\times10^{5} \end{cases}$$

$a_{22}^{(2)}= 0.1000\times10^{1} - 10^{4}\times 0.1000\times10^{1}$

$= 0.00001\times10^{5} - 0.1000\times10^{5}$ (对阶计算)

$= -\ 0.1000\times10^{5}$

主元a_{11}过小

三、列主元高斯消元法

选主元基本思想

用高斯消元法求解线性方程组时,为避免小的主元.在进行第k步消元前,应该在第k列元素 $a_{ik}^{(k)}(i=k,\ldots,n)$ 中找出第一个出现的绝对值最大者,例如 $\left|a_{i_k k}^{(k)}\right| = \max\limits_{k\le i\le n}\left|a_{ik}^{(k)}\right|$ 再把第i_k个方程与第k个方程组进行交换,使 $a_{i_k k}^{(k)}$ 成为主元.我们称这个过程为选主元.由于只在第k列元素中选主元,通常也称为按列选主元.

如果在第k步消元前,在第k个方程到第n个方程所有的x_k到x_n的系数 $a_{ij}^{(k)}$($i=k,\ldots,n;j=k,\ldots,n$)中,找出绝对值最大者,例如

$$\left|a_{i_k j_k}^{(k)}\right| = \max_{k\le i,j\le n}\left|a_{ij}^{(k)}\right|$$

再交换第k,ik两个方程和第k,jk列,使 $a_{i_k j_k}^{(k)}$ 成为主元.

称这个过程为完全选主元.

在实际计算中,常用按列选主元的高斯消元法.

现在我们再用列主元法解例4

假设求解是在四位浮点十进制数的计算机上进行

$$\begin{cases} 0.0001x_1+x_2=1 \\ x_1+x_2=2 \end{cases}$$

将两个方程对调，得

$$\begin{cases} x_1+x_2=2 \\ 0.0001x_1+x_2=1 \end{cases}$$

消元，得

$$\begin{cases} x_1+x_2=2 \\ (1-0.0001)\,x_2=1 \end{cases}$$

在四位浮点十进制数的计算机上,上式为

$$\begin{cases} x_1+x_2=2 \\ (0.1000\times 10^1-0.00001\ \times 10^1)x_2=1 \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} x_1+x_2=2 \\ x_2=1 \end{cases}$$

解得： $x_1=1$， $x_2=1$ 准确解： $x_1= 10000/9999$, $x_2=9998/9999$

例：用列主元消去法解方程组

$$
\begin{cases}
-0.002x_1+2x_2+2x_3 = 0.4 \\
x_1+0.78125x_2 = 1.3816 \\
3.996x_1+5.5625x_2+4x_3=7.4178
\end{cases}
$$

解 第一次消元对

$$
[A^{(1)}|b^{(1)}]=\left(\begin{array}{ccc:c}
-0.002 & 2 & 2 & 0.4 \\
1 & 0.78125 & 0 & 1.3816 \\
\boxed{3.996} & 5.5625 & 4 & 7.4178
\end{array}\right)
$$

因列主元素为$a_{31}^{(1)}$,故先作行交换$E_1 \longleftrightarrow E_3$,然后进行消元计算可得

$$
[A^{(2)}|b^{(2)}]=\left(\begin{array}{ccc:c}
3.996 & 5.5625 & 4 & 7.4178 \\
0 & -0.61077 & -1.0010 & -0.47471 \\
0 & \boxed{2.0029} & 2.0020 & 0.40371
\end{array}\right)
$$

第二次消元对$[A^{(2)} \mid b^{(2)}]$,因列主元素为$a_{32}^{(2)}$,故先作行交换$E_2 \longleftrightarrow E_3$,然后进行消元计算可得

$$[A^{(3)} \mid b^{(3)}]=\left(\begin{array}{ccc:c} 3.996 & 5.5625 & 4 & 7.4178 \\ 0 & 2.0029 & 2.0020 & 0.40371 \\ 0 & 0 & -0.39050 & -0.35160 \end{array}\right)$$

由此回代,得解为 $x=(1.9272,-0.69841,0.90038)^T$与精确解 $x=(1.9273,-0.69850,0.90042)^T$相比较是比较准确的.