数值分析

主讲教师：贺慧霞

北京航空航天大学数学科学学院

第二章　线性方程组的解法

第2.1节

线性方程组的解法
-----高斯消去法

问题:

给定矩阵$A \in R^{n\times n}$,向量$b \in R^n$，求满足下列方程的n维向量x：

$$Ax = b$$

分量形式:

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

$|A| \neq 0$时,方程组有唯一解.

实际问题中的线性方程组分类：

按系数矩阵中零元素的个数：

稠密线性方程组

稀疏线性方程组

(80%)

按未知量的个数：

高阶线性方程组

(如1000)

低阶线性方程组

按系数矩阵的形状

对称正定方程组

三角形方程组

三对角占优方程组

Cramer法则求解的不可行性：

运算一个$n\times n$的行列式用$n!(n-1)$次乘法；

解一个方程组，乘法次数为$(n+1)!(n-1)$。

给一台10^9flops（floating point operations per second）

的计算机，解n阶的方程：

1. $n=10, t=0.4$ sec;

2. $n=20, t=17$ min;

3. $n=30, t=400,000$ *years*;

所以必须用其它算法来解决这个问题.

✓解线性方程组的两类方法:

■直接法: 经过有限次运算后可求得方程组精确解的方法(不计舍入误差)

■迭代法: 从解的某个近似值出发，通过构造一个无穷序列去逼近精确解的方法。（一般有限步内得不到精确解）

本章目的:

$$1.\text{直接法：有限步运算得到"精确解"}\begin{cases}\text{Gauss消去法}\\ \text{三角分解法}\end{cases}$$

数学本质一样，表现形式不同

$$2.\text{迭代法：无限步运算得到"近似解"}\begin{cases}\text{Jacobi迭代法}\\ \text{Gauss}-\textit{Seidel}\text{迭代法}\\ \text{逐次超松弛迭代法}\end{cases}$$

1. 对角形方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 & & & = b_1 \\ & a_{22}x_2 & & = b_2 \\ & & \cdots & \\ & & a_{nn}x_n & = b_n \end{cases} \qquad (1)$$

如果$a_{ii} \neq 0$,则 $x_i = \dfrac{b_i}{a_{ii}}, i = 1,2,\cdots,n.$

2. 上三角形方程组

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}.$$

x_1

x_n

3. 下三角形方程组

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}.$$

x_1

x_n

Gauss 消去法

例1：直接法解线性方程组

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

解：

$$(A,b) = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 2 & -3 & -3 & 4 \\ 4 & 1 & 6 & 3 \end{array}\right] \xrightarrow[r_3 - 4r_1]{r_2 - 2r_1} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 9 & -2 & 11 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{r_3 - 9r_2} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 0 & 61 & -61 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{cases} x_3 = -1 \\ x_2 = 8 + 7x_3 = 1 \\ x_1 = -2 + 2x_2 - 2x_3 = 2 \end{cases}$$

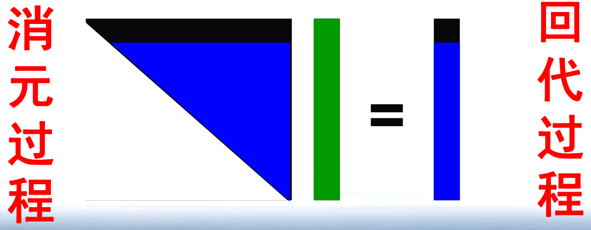
Gauss 消去法

考虑 n 阶线性方程组：

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad\vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad\quad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \xrightarrow{\text{矩阵形式}} Ax = b$$

高斯消去法的主要思路：

将系数矩阵 A 化为上三角矩阵，然后回代求解。



记 $A^{(1)} = (a_{ij}^{(1)})_{n\times n} = A,\ b^{(1)} = \begin{pmatrix} b_1^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{pmatrix} = b$ ，即 $a_{ij}^{(1)} = a_{ij},\ b_i^{(1)} = b_i$.

第一步：消去第一列

设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$， 计算

$$m_{i1} = a_{i1}^{(1)} \big/ a_{11}^{(1)} \quad (i = 2, \dots, n)$$

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{array}\right]$$

依次将增广矩阵的 第 i 行 - $m_{i1}\times$ 第 1 行，得

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & & & & \\ \vec{0} & & A^{(2)} & & b^{(2)} \end{array}\right]$$

其中 $\boxed{\begin{aligned} a_{ij}^{(2)} &= a_{ij}^{(1)} - m_{i1}a_{1j}^{(1)} \\ b_i^{(2)} &= b_i^{(1)} - m_{i1}b_1^{(1)} \end{aligned}}$

$(i, j = 2, \dots, n)$

第二步：消去第二列

设 $a_{22}^{(2)} \neq 0$，计算

$$m_{i2} = a_{i2}^{(2)} / a_{22}^{(2)} \quad (i = 3, \ldots, n)$$

$$\left(\begin{array}{cccc:c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{array}\right)$$

依次将上述矩阵的 第 i 行 - m_{i2} × 第 2 行，得

$$\left(\begin{array}{cccc:c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & A^{(3)} & & b^{(3)} \end{array}\right)$$

其中

$$\boxed{\begin{cases} a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - m_{i2} a_{2j}^{(2)} \\ b_i^{(3)} = b_i^{(2)} - m_{i2} b_2^{(2)} \end{cases}}$$

$(i, j = 3, \ldots, n)$

第k步：消去第k列

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

设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$,计算 $m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)} \; (i = k+1, \cdots, n)$

依次将上述矩阵的 第 i 行 - $m_{ik} \times$ 第 k 行,

计算 $$\boxed{\begin{aligned} a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)} &= b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} \end{aligned}}$$ $(i = k+1, \ldots, n)$

依此类推，直到第 n-1 步，原方程化为

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

回代求解：

$$
\begin{cases}
x_n = b_n^{(n)} \Big/ a_{nn}^{(n)}, \\
x_i = \left(b_i^{(i)} - \displaystyle\sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j\right) \Big/ a_{ii}^{(i)}, \quad (i = n-1, \cdots, 1)
\end{cases}
$$

1. 消元过程

对于 $k=1,2,\cdots,n-1$ 执行

(1) 如果 $a_{kk}^{(k)}=0$,则算法失效,停止计算;否则转(2)。

(2) 对于 $i=k+1,k+2,\cdots,n$ 计算

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

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

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

2. 回代过程

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

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

运算量 (比Gramer运算量少得多)

第 k 步：消第 k 列

计算 $m_{ik}=a_{ik}^{(k)}\big/a_{kk}^{(k)}$ $(i=k+1,\ldots,n)$

$n-k$ 次除法

计算 $a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-m_{ik}a_{kj}^{(k)}$

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

$(n-k)^2$ 次乘法

$n-k$ 次乘法

回代求解：

$$\begin{cases} x_n=b_n^{(n)}\big/a_{nn}^{(n)} \\ x_i=\left(b_i^{(i)}-\sum\limits_{j=i+1}^{n}a_{ij}^{(i)}x_j\right)\Big/a_{ii}^{(i)} \end{cases}$$

$(i=n-1,\ldots,2,1)$

计算x_i,1次除法
n-i次乘法

消元过程中：乘法---$\sum\limits_{k=1}^{n-1}[(n-k)^2+n-k]$,除法---$\sum\limits_{k=1}^{n-1}(n-k)=\dfrac{n}{2}(n-1)$;

回代过程中：乘法--$\sum\limits_{i=1}^{n-1}(n-i)=\dfrac{n}{2}(n-1)$,除法---$n$次;

Gauss 消去法的乘除运算量为: $\boxed{\dfrac{n^3}{3}+n^2-\dfrac{n}{3}}$

Gauss顺序消去法可以进行到底的条件是什么?

定理2.1 顺序Gauss消去法的前$n-1$个主元素$a_{kk}^{(k)}(k=1,2,\cdots,n-1)$均不为零的充分必要条件是方程组$AX=b$的系数矩阵$A$的顺序主子式$D_k \neq 0(k=1,2,\cdots,n-1)$.

这里$D_k = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{k1}^{(1)} & & a_{kk}^{(1)} \end{vmatrix} \neq 0,$

数学归纳法

分析：充分性

假设$D_k \neq 0, D_1 = a_{11}^{(1)} \neq 0, \quad A_2 = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} \end{pmatrix}$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} - \dfrac{a_{12}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} a_{21}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} \end{pmatrix}$$

$|A_2| = D_2 = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \neq 0, \quad \Rightarrow a_{22}^{(2)} \neq 0,$

证

充分性　设条件(2.6)成立。因 $D_1=a_{11}^{(1)}$，故 $a_{11}^{(1)}\neq 0$，因而可作顺序 Gauss 消去法的第一次消元，产生主元素 $a_{22}^{(2)}$。由行列式性质可知

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

故 $a_{22}^{(2)}\neq 0$。设已经过 $r-2(r\geqslant 3)$ 次消元，所产生的主元素 $a_{22}^{(2)},\cdots,a_{r-1,r-1}^{(r-1)}$ 均不为零，则可作顺序 Gauss 消去法的第 $r-1$ 次消元，产生主元素 $a_{rr}^{(r)}$。由行列式性质可知

$$D_r=\begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1r}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots \\ & & a_{rr}^{(r)} \end{vmatrix}=a_{11}^{(1)}a_{22}^{(2)}\cdots a_{rr}^{(r)}$$

故 $a_{rr}^{(r)}\neq 0$。当 $r=n-1$ 时，就得出 $a_{kk}^{(k)}\neq 0(k=1,2,\cdots,n-1)$。

必要性　设 $a_{kk}^{(k)}\neq 0(k=1,2,\cdots,n-1)$，则由

$$D_k=a_{11}^{(1)}a_{22}^{(2)}\cdots a_{kk}^{(k)}\quad(k=1,2,\cdots,n-1)$$

可知 $D_k\neq 0(k=1,2,\cdots,n-1)$。

定理2.1 顺序Gauss消去法的前$n-1$个主元素$a_{kk}^{(k)}(k=1,2,\cdots,n-1)$均不为零的充分必要条件是方程组$AX=b$的系数矩阵$A$的顺序主子式$D_k \neq 0(k=1,2,\cdots,n-1)$.

Gauss 消去法有效的条件是： 主元全不为零

算法修正： 1.某个主元$a_{ii}=0$;

2.主元全不为零，但某个主元很小.

例2. 解线性方程组(用8位十进制尾数的浮点数计算)

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

解: 这个方程组和例1一样,若用Gauss消去法计算会有小数作除数的现象,若采用换行的技巧,则可避免

$$(A,b)=\left[\begin{array}{ccc|c} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \end{array}\right]$$

$$\rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ 0 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & -6.352 & -3.603 & -1 \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ 0 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 5.925 & 2.176 \end{array}\right]$$

消元过程

回代过程

$$\left[\begin{array}{ccc|c} -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ 0 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 5.925 & 2.176 \end{array}\right] \Rightarrow \begin{cases} -x_1 + 3.712x_2 + 4.623x_3 = 2 \\ 2x_2 + 3x_3 = 1 \\ 5.925x_3 = 2.176 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_3 = 0.36725738 \\ x_2 = -0.05088607 \\ x_1 = -0.49105822 \end{cases}$$

即方程的解为：$x = (-0.49105822, -0.05088607, 0.36725738)^T$.

例2. 解线性方程组(用8位十进制尾数的浮点数计算)

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

解：

$$\overline{A} = (A, b) = \left(\begin{array}{ccc|c} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \end{array}\right)$$

10^{-8}很小,绝对值最大的列元素为$a_{13} = -2$,因此1,3行交换

$$\xrightarrow{r_1 \Leftrightarrow r_3} \left(\begin{array}{ccc|c} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \end{array}\right) = (A^{(1)}, b^{(1)})$$

绝对值最大
不需换行

$$\xrightarrow[m_{31}=-0.5\times10^{-8}]{m_{21}=0.5} \left(\begin{array}{ccc|c} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ 0 & 0.3176\times10 & 0.18015\times10 & 0.5 \\ 0 & 0.2\times10 & 0.3\times10 & 0.1\times10 \end{array}\right) = (A^{(2)}, b^{(2)})$$

$$\xrightarrow{m_{32}=0.629\,722\,92}$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ 0 & 0.3176\times10 & 0.18015\times10 & 0.5 \\ 0 & 0 & 0.18655541\times10 & 0.68513854 \end{array}\right)$$

$$= (\boldsymbol{A}^{(3)}, \boldsymbol{b}^{(3)})$$

经过回代后可得

$$x_3 = \frac{b_3^{(3)}}{a_{33}^{(3)}} = \frac{0.68513854}{0.18655541 \times 10} = 0.36725739$$

$$x_2 = \frac{b_2^{(2)} - a_{23}^{(2)} x_3}{a_{22}^{(2)}} = \frac{0.5 - 0.18015 \times 10 \times x_3}{0.3176 \times 10} = -0.05088607$$

$$x_1 = \frac{b_1^{(1)} - a_{12}^{(1)} x_2 - a_{13}^{(1)} x_3}{a_{11}^{(1)}} = -0.49105820$$

事实上,方程组的准确解为

$$x^* = (-0.49105820, -0.05088607, 0.36725739)^T$$

列主元素消去法是为控制舍入误差而提出来的一种算法，列主元素消去法计算基本上能控制舍入误差的影响，其基本思想是：在进行第 $k(k=1,2,...,n-1)$步消元时，从第k列的 a_{kk}及其以下的各元素中选取绝对值最大的元素，然后通过行变换将它交换到主元素a_{kk}的位置上，再进行消元。

Gauss 消去法有效的条件是：主元全不为零

例：解线性方程组 $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

列主元 Gauss 消去法

1 消元过程

在第 k 步消元时，在第 k 列的剩余部分选取主元

① 先选取列主元：$|a_{i_k k}^{(k)}| = \max\limits_{k \le i \le n} \{|a_{ik}^{(k)}|\} \ne 0$

第k个列主元素,总是被交换到第k个主对角元素的位置.

② if $i_k \ne k$ then 交换第 k 行和第 i_k 行

③ 消元

计算 $m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)} \quad (i = k+1, \ldots, n)$

计算
$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}$$
$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}$$
$(i, j = k+1, \ldots, n)$

2. 回代过程：

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

$$x_i = \left(b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j\right) \Big/ a_{ii}^{(i)} \qquad (i = n\text{-}1, \ldots, 2,1)$$

- 列主元 Gauss 消去法比普通 Gauss 消去法要多一些**比较**运算，但比普通高斯消去法稳定
- 列主元 Gauss 消去法是目前直接法的首选算法

列主元Gauss消去法

每次消元前增加一个选主元的过程和行交换过程:

$$\begin{cases} k = 1,2,\ldots,n-1 \\ |a_{rk}^{(k)}| = \max\limits_{k\le i\le n} |\mathrm{a}_{ik}^{(k)}| \\ \begin{cases} j = k, k+1, \ldots, n \\ T = a_{kj}^{(k)}; a_{kj}^{(k)} = a_{rj}^{(k)}; a_{rj}^{(k)} = T; \quad (a_{rj}^{(k)} \Leftrightarrow a_{kj}^{(k)}) \end{cases} \\ T = b_k^{(k)}; b_k^{(k)} = b_r^{(k)}; b_r^{(k)} = T. \quad (b_r^{(k)} \Leftrightarrow b_k^{(k)}) \end{cases}$$

例 1　在四位十进制的限制下，试分别用顺序 Gauss 消去法和列主元素 Gauss 消去法求解下列线性方程组

$$\begin{cases} 0.012\,x_1 + 0.01\,x_2 + 0.167\,x_3 = 0.678\,1 \\ x_1 + 0.833\,4\,x_2 + 5.91\,x_3 = 12.1 \\ 3\,200\,x_1 + 1\,200\,x_2 + 4.2\,x_3 = 981 \end{cases}$$

解　用顺序 Gauss 消去法求解，消元过程如下：

$$\begin{bmatrix} 0.012\,00 & 0.010\,00 & 0.167\,0 & 0.678\,1 \\ 1.000 & 0.833\,4 & 5.910 & 12.10 \\ 3\,200 & 1\,200 & 4.200 & 981.0 \end{bmatrix} \xrightarrow[③-①\times\frac{3200}{0.012}]{②-①\times\frac{1}{0.012}}$$

$$\begin{bmatrix} 0.012\,00 & 0.010\,00 & 0.167\,0 & 0.678\,1 \\ 0 & 0.100\,0\times10^{-3} & -8.010 & -44.41 \\ 0 & -1\,467 & -4\,454\times10 & -1\,798\times10^{2} \end{bmatrix} \xrightarrow{③-②\times\frac{-1467}{0.1\times10^{-3}}}$$

$$\begin{rcases} x_3 = 5.546 \\ x_2 = 100.0 \\ x_1 = -104.0 \end{rcases} \Leftarrow \begin{bmatrix} 0.012\,00 & 0.010\,00 & 0.167\,0 & 0.678\,1 \\ 0 & 0.100\,0\times10^{-3} & -8.010 & -44.41 \\ 0 & 0 & -1\,175\times10^{5} & -6\,517\times10^{5} \end{bmatrix}$$

用列主元素 Gauss 消去法，消元过程如下(带框者为主元素)：

$$\begin{bmatrix} 0.01200 & 0.01000 & 0.1670 & 0.6781 \\ 1.000 & 0.8334 & 5.910 & 12.10 \\ \boxed{3200} & 1200 & 4.200 & 981.0 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 3200 & 1200 & 4.200 & 981.0 \\ 0 & \boxed{0.4584} & 5.909 & 11.79 \\ 0 & 0.5500\times 10^{-2} & 0.1670 & 0.6744 \end{bmatrix} \to$$

$$\begin{bmatrix} 3200 & 1200 & 4.200 & 981.0 \\ 0 & 0.4584 & 5.909 & 11.79 \\ 0 & 0 & 0.09609 & 0.5329 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} x_3 = 5.546 \\ x_2 = -45.77 \\ x_1 = 17.46 \end{cases}$$

顺序**Gauss**消去法得解

$$\begin{cases} x_3 = 5.546 \\ x_2 = 100.0 \\ x_1 = -104.0 \end{cases}$$

本例题的线性方程组的精确解舍入到四位有效数字是

$$x_3 = 5.546,\quad x_2 = -45.76,\quad x_1 = 17.46$$

由此看出，列主元素 Gauss 消去法的精度显著高于顺序 Gauss 消去法。

全主元Gauss消去法

❑ 全主元高斯消去法：

第 k 步消元时，在剩余的 n-k 阶子矩阵中选取主元

① 先选取全主元：$|a_{i_k j_k}^{(k)}| = \max\limits_{k \le i, j \le n} \left\{ |a_{ij}^{(k)}| \right\} \neq 0$

② if $i_k \neq k$ then 交换第 k 行和第 i_k 行

if $j_k \neq k$ then 交换第 k 列和第 j_k 列

③ 消元

- 列交换改变了 x_i 的顺序，须记录交换次序，解完后再换回来
- 全主元高斯消去法具有更好的稳定性，但很费时，在实际计算中很少使用

例1：全主元的Gauss消去法

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

解：

$$\begin{array}{c} \begin{array}{ccc} x_1 & x_2 & x_3 \end{array} \\ (A,b)=\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 2 & -3 & -3 & 4 \\ 4 & 1 & 6 & 3 \end{array}\right] \end{array} \longrightarrow \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} x_1 & x_2 & x_3 \end{array} \\ \left[\begin{array}{cccc} 4 & 1 & 6 & 3 \\ 1 & -2 & 2 & -2 \\ 2 & -3 & -3 & 4 \end{array}\right] \end{array} \longrightarrow \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} x_3 & x_2 & x_1 \end{array} \\ \left[\begin{array}{cccc} 6 & 1 & 4 & 3 \\ 2 & -2 & 1 & -2 \\ -3 & -3 & 2 & 4 \end{array}\right] \end{array}$$

$$\longrightarrow \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} x_3 & x_2 & x_1 \end{array} \\ \left[\begin{array}{cccc} 6 & 1 & 4 & 3 \\ 0 & -2\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -3 \\ 0 & -2\frac{1}{2} & 4 & 5\frac{1}{2} \end{array}\right] \end{array} \longrightarrow \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} x_3 & x_2 & x_1 \end{array} \\ \left[\begin{array}{cccc} 6 & 1 & 4 & 3 \\ 0 & -2\frac{1}{2} & 4 & 5\frac{1}{2} \\ 0 & -2\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -3 \end{array}\right] \end{array} \longrightarrow \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} x_3 & x_1 & x_2 \end{array} \\ \left[\begin{array}{cccc} 6 & 4 & 1 & 3 \\ 0 & 4 & -2\frac{1}{2} & 5\frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{3} & -2\frac{1}{3} & -3 \end{array}\right] \end{array}$$

$$
\begin{array}{cccc}
x_3 & x_1 & x_2 & \\
\end{array}
\begin{bmatrix}
6 & 4 & 1 & 3 \\
0 & 4 & -2\frac{1}{2} & 5\frac{1}{2} \\
0 & -\frac{1}{3} & -2\frac{1}{3} & -3
\end{bmatrix}
\quad
\begin{array}{cccc}
x_3 & x_1 & x_2 & \\
\end{array}
\begin{bmatrix}
6 & 4 & 1 & 3 \\
0 & 4 & -2\frac{1}{2} & 5\frac{1}{2} \\
0 & 0 & -\frac{61}{24} & -\frac{61}{24}
\end{bmatrix}
$$

$$
\begin{cases}
-\frac{61}{24}x_2 = -\frac{61}{24} \\
4x_1 - \frac{5}{2}x_2 = 5\frac{1}{2} \\
6x_3 + 4x_1 + x_2 = 3
\end{cases}
\quad
\begin{cases}
x_2 = 1 \\
x_1 = 2 \\
x_3 = -1
\end{cases}
$$

定理2.2 设方程组$AX=b$的系数矩阵A非奇异，则用选主元的Gauss消去法求解时,各个列主元均不为0.

定理2.3 设方程组$AX=b$的系数矩阵A非奇异，则用全主元的Gauss消去法求解时,各个主元均不为0.

高斯-若当消去法(Gauss – Jordan Method)

例3 用列主元G-J消去法求 $A=\begin{bmatrix}1&2&3\\2&4&5\\3&5&6\end{bmatrix}$ 的逆矩阵 A^{-1}.

解

$$(A,I)=\left[\begin{array}{ccc:ccc}1&2&3&1&0&0\\2&4&5&0&1&0\\\boxed{3}&5&6&0&0&1\end{array}\right]\xrightarrow[r_1\leftrightarrow r_3]{}\left[\begin{array}{ccc:ccc}3&5&6&0&0&1\\2&4&5&0&1&0\\1&2&3&1&0&0\end{array}\right]$$

$$\xrightarrow[\frac{1}{3}r_1]{}\left[\begin{array}{ccc:ccc}1&\frac{5}{3}&2&0&0&\frac{1}{3}\\2&4&5&0&1&0\\1&2&3&1&0&0\end{array}\right]\xrightarrow[\substack{r_2-2r_1\\r_3-r_1}]{}\left[\begin{array}{cccccc}1&\frac{5}{3}&2&0&0&\frac{1}{3}\\0&\boxed{\frac{2}{3}}&1&0&1&-\frac{2}{3}\\0&\frac{1}{3}&1&1&0&-\frac{1}{3}\end{array}\right]$$

$$\xrightarrow[\frac{3}{2}r_2]{} \begin{bmatrix} 1 & \frac{5}{3} & 2 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 1 & \frac{3}{2} & 0 & \frac{3}{2} & -1 \\ 0 & \frac{1}{3} & 1 & 1 & 0 & -\frac{1}{3} \end{bmatrix} \xrightarrow[\substack{r_1-\frac{5}{3}r_2 \\ r_3-\frac{1}{3}r_2}]{} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{5}{2} & 2 \\ 0 & 1 & \frac{3}{2} & 0 & \frac{3}{2} & -1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[2r_3]{} \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{5}{2} & 2 \\ 0 & 1 & \frac{3}{2} & 0 & \frac{3}{2} & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & -1 & 0 \end{bmatrix} \xrightarrow[\substack{r_1+\frac{1}{2}r_3 \\ r_2-\frac{3}{2}r_3}]{} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 & -3 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & -3 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$=(I，A^{-1})$，所以 $A^{-1}=\begin{pmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -3 & 3 & -1 \\ 2 & -1 & 0 \end{pmatrix}$.

例4 求线性方程 $Ax=\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}$,其中 $A=\begin{bmatrix}1&2&3\\2&4&5\\3&5&6\end{bmatrix}$.

解 由例3已知A可逆，且$A^{-1}=\begin{pmatrix}1&-3&2\\-3&3&-1\\2&-1&0\end{pmatrix}$.

$$Ax=\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}\Rightarrow A^{-1}Ax=A^{-1}\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}.$$

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

高斯-若当消去法： （Gauss-Jordan Method）

此算法与Gaussian Elimination的主要区别：

1.每步不计算m_{ik},而是先将当前主元$a_{kk}^{(k)}$变为1;

2.把$a_{kk}^{(k)}$所在的列的上、下元素全消为0;

3.把$Ax=b$变为$Ix=A^{-1}b$.

列主元高斯—约当（Gauss －Jordan)消去法

假设G-J消去法已完成第1步～第k-1步，得到与原方程组等价 的方程组 $A^{(k)}\vec{x}=\vec{b}^{(k)}$

$$A^{(k)}=\begin{bmatrix} 1 & & & a_{1k}^{(k)} & \cdots & a_{1n}^{(k)} \\ & \ddots & & \vdots & & \\ & & 1 & a_{k-1,n}^{(k)} & \cdots & a_{k-1,n}^{(k)} \\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix},\quad \vec{b}^{(k)}=\begin{pmatrix} b_1^{(k)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)} \end{pmatrix}$$

- 第k步消元步骤

（1）按列选主元 即确定 i_k 使 $\left|a_{i_k,k}\right|=\max\limits_{k\le i\le n}\left|a_{ik}\right|$；

（2）换行 当 $i_k\neq k$ 时，交换 $(A,\vec{b})$ 第 k 行与第 i_k 行元素；

$$A^{(k)}=\begin{bmatrix}1 & & & a_{1k}^{(k)} & \cdots & a_{1n}^{(k)}\\ & \ddots & & \vdots & & \\ & & 1 & a_{k-1,n}^{(k)} & \cdots & a_{k-1,n}^{(k)}\\ & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)}\\ & & & \vdots & & \vdots\\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)}\end{bmatrix}\xrightarrow{r_i\leftrightarrow r_{i_k}}\begin{bmatrix}1 & & & a_{1k}^{(k)} & \cdots & a_{1n}^{(k)}\\ & \ddots & & \vdots & & \\ & & 1 & a_{k-1,n}^{(k)} & \cdots & a_{k-1,n}^{(k)}\\ & & & a_{i_kk}^{(k)} & \cdots & a_{i_kn}^{(k)}\\ & & & \vdots & & \vdots\\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)}\end{bmatrix},$$

$$\xrightarrow{\frac{1}{a_{i_kk}^{(k)}}r_i}\begin{bmatrix}1 & & & a_{1k}^{(k)} & \cdots & a_{1n}^{(k)}\\ & \ddots & & \vdots & & \\ & & 1 & a_{k-1,n}^{(k)} & \cdots & a_{k-1,n}^{(k)}\\ & & & 1 & \cdots & \frac{a_{i_kn}^{(k)}}{a_{i_kk}^{(k)}}\\ & & & \vdots & & \vdots\\ & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)}\end{bmatrix}\xrightarrow[j\neq k]{r_j-a_{jk}^{(k)}r_k}\begin{bmatrix}1 & & & a_{1k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{1n}^{(k+1)}\\ & \ddots & & \vdots & & \\ & & 1 & \frac{a_{i_kk+1}^{(k)}}{a_{i_kk}^{(k)}} & \cdots & \frac{a_{i_kn}^{(k)}}{a_{i_kk}^{(k)}}\\ & & & a_{k+1,k+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k+1)}\\ & & & \vdots & & \vdots\\ & & & a_{nk+1}^{(k+1)} & \cdots & a_{nn}^{(k+1)}\end{bmatrix}$$

第k步消元步骤

（1）按列选主元 即确定 i_k 使 $\left|a_{i_k,k}\right|=\max\limits_{k\le i\le n}\left|a_{ik}\right|$；

（2）换行 当 $i_k\neq k$ 时，交换 $(A,\vec{b})$ 第 k 行与第 i_k 行元素；

（3）消元计算 $m_{ik}=-a_{ik}/a_{kk} \quad (i=1,2,\cdots,n\text{且}i\neq k),$

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

$$a_{ij}\leftarrow a_{ij}+m_{ik}a_{kj} \quad \begin{pmatrix} i=1,2,\cdots,n\text{且}i\neq k \\ j=k+1,\cdots,n \end{pmatrix},$$

$$b_i\leftarrow b_i+m_{ik}b_k \quad (i=1,2,\cdots,n\text{且}i\neq k).$$

（4）计算主行（主元素所在行）

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

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

上述过程完成后,即 $k=1,2,\cdots,n$,均已完成,则有

$$[A,\vec{b}]\xrightarrow[n步]{}[A^{(n+1)},\vec{b}^{(n+1)}]=\left[\begin{array}{cccc:c}1 & & & & \bar{b}_1\\ & 1 & & & \bar{b}_2\\ & & \ddots & & \vdots\\ & & & 1 & \bar{b}_n\end{array}\right]$$

- 计算解 $x_i=\bar{b}_i(i=1,2,\cdots,n)$.

说明　在解方程组 $A\vec{x}=\vec{b}$ 时，一般不用高斯 $-$约当消去法.

因为计算量太大，但是在解多个方程组而它们的系数矩阵相同时，

用此方法，即是求系数矩阵的逆矩阵 A^{-1},有了 A^{-1} 则 $\vec{x}=A^{-1}\vec{b}$,

即 $A\vec{x}=\vec{b}\overset{G-J消去法}{\Longleftrightarrow}$ 解 $\vec{x}=A^{-1}\vec{b}$.

小 结

高斯消去法的应用领域：

1.求线性代数方程组的解；

2.求矩阵的行列式的值，事实上，$|A| = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \ldots a_{nn}^{(n)}$；

3.求非奇异矩阵的逆，$AX = I$；

4.矩阵的分解，$A = LU, A = QR$。

作　业

- 教材第45页，习题1