

第五章

线性方程组直接解法

—— Gauss 消去法

内容提要

- **矩阵基础知识**
- **Gauss 消去法**
- **矩阵三角分解**
- **向量与矩阵范数**
- **误差分析**

本讲内容

■ 矩阵基础知识

- 向量与矩阵
- 特征值与谱半径
- 一些特殊矩阵

■ Gauss 消去法

- 一般过程
- 对应的矩阵三角分解
- 列主元 Gauss 消去法

预备知识

- 向量与矩阵：定义，基本运算，行列式
- 特征值与特征向量，特征多项式，特征方程，矩阵相似

$$Ax = \lambda x \quad (\lambda \in C, x \in C^n, x \neq 0)$$

- 矩阵的谱： $\sigma(A) = \{ A \text{ 的所有特征值} \}$

- 矩阵的谱半径： $\rho(A) = \max_{\lambda \in \sigma(A)} \{ |\lambda| \}$

- 矩阵的迹： $\text{tr}(A) = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{nn}$

矩阵基本性质

- A^T 与 A 有相同的特征值，但特征向量不同
- A^{-1} 的特征值与特征向量

$$Ax = \lambda x \Leftrightarrow A^{-1}x = \lambda^{-1}x$$

- 矩阵的迹与特征值

$$\text{tr}(A) = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n$$

- 矩阵行列式与特征值

$$\det(A) = \lambda_1 \lambda_2 \cdots \lambda_n$$

- 相似矩阵的特征值与特征向量

一些特殊矩阵

- 对角矩阵、三角矩阵、三对角矩阵
- 对称矩阵、Hermite 对称矩阵、对称正定矩阵
- 正交矩阵、酉矩阵
- 初等置换阵、置换阵（排列阵）
- 上 Hessenberg 矩阵

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ & a_{32} & a_{33} & & a_{3n} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$a_{ij} = 0 \quad \text{for } i > j + 1$$

一些重要性质

定理 1 (解的存在唯一性)

$Ax = b$ 存在唯一解 $\iff \det(A) \neq 0$
 $\iff A$ 可逆
 $\iff Ax = 0$ 只有零解
 $\iff A$ 满秩, 即 A 的秩为 n

一些重要性质

定理 2 (对称正定矩阵的性质)

若 A 对称正定, 则

- (1) A 非奇异, 且 A 也对称正定;
- (2) A 的所有顺序主子矩阵都对称正定;
- (3) A 的所有特征值都是正实数;
- (4) A 的所有顺序主子式都大于 0.

定理 3 (对称正定矩阵的判定)

- (1) 若 A 对称, 且所有顺序主子式都大于 0, 则 A 对称正定.
- (2) 若 A 对称, 且所有特征值都大于 0, 则 A 对称正定.

线性方程组直接解法

$$Ax = b$$

$$A \in \mathbb{R}^{n \times n}, b \in \mathbb{R}^n$$

自然科学和工程计算中, 很多问题最终都需要求解一个或多个线性代数方程组。

- 目前常用的数值求解方法:

- (1) **直接法**: 适合低阶方程组或某些特殊大型稀疏方程组
- (2) **迭代法**: 解大型稀疏线性方程组的主流算法

注：在本章中，我们总是假定 A 是 n 阶非奇异方阵。

Gauss 消去法

例：用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：

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

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 0 & 61 & -61 \end{array} \right] \xrightarrow{\text{red arrow}} \begin{cases} x_3 = -1 \\ x_2 = 8 + 7x_3 = 1 \\ x_1 = -2 + 2x_2 - 2x_3 = 2 \end{cases}$$

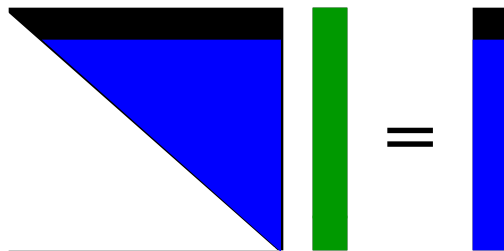
Gauss 消去法

考虑 n 阶线性方程组：

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

● 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 1 步：消第 1 列

设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$, **计算** $m_{i1} = a_{i1}^{(1)} / a_{11}^{(1)}$ ($i = 2, \dots, n$)

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

$$A^{(2)} = \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{array} \right) \quad \text{其中} \quad \begin{cases} a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)} \\ b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1} b_1^{(1)} \end{cases}$$

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

第 2 步：消第 2 列

设 $a_{22}^{(2)} \neq 0$, 计算 $m_{i2} = a_{i2}^{(2)} / a_{22}^{(2)}$ ($i = 3, \dots, n$)

依次将 $A^{(2)}$ 的第 i 行 $-m_{i2} \times$ 第 2 行 , 得

$$A^{(3)} = \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} & b_n^{(3)} \end{array} \right)$$

其中 $\begin{cases} a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - m_{i2} a_{2j}^{(2)} \\ b_i^{(3)} = b_i^{(2)} - m_{i2} b_2^{(2)} \end{cases} \quad (i, j = 3, \dots, n)$

依此类推，第 $k-1$ 步 后可得

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

第 k 步：消第 k 列

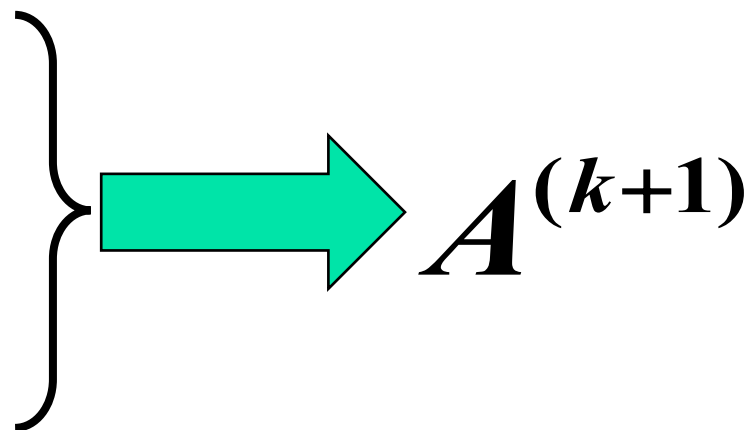
设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$

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

($i = k+1, \dots, n$)

再计算：
$$\begin{aligned} a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)} &= b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} \end{aligned}$$

($i = k+1, \dots, n$)



第 $n-1$ 步后

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

回代求解：

[demo_5_1.m](#)

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

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

几点注意

- 主元： $a_{ii}^{(i)} \quad (i = 1, 2, \dots, n)$
- Gauss 消去法能进行到底的条件：主元全不为 0

定理： $a_{ii}^{(i)} \neq 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n)$ 的充要条件是 A 的顺序主子式不为零，即

$$D_1 = a_{11} \neq 0, \quad D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

推论： $a_{11}^{(1)} = D_1, \quad a_{ii}^{(i)} = D_i / D_{i-1}, \quad i = 2, \dots, n$

运算量

● 乘除运算 的次数

第 k 步：消第 k 列

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

$n - k$ 次

计算 $a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} \quad (i = k+1, \dots, n)$

$(n - k)^2$ 次

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

$n - k$ 次

回代求解：

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{(n)} \\ x_i = (b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{(i)} x_j) / a_{ii}^{(i)} \quad (i = n-1, \dots, 2, 1) \end{cases}$$

$n(n+1)/2$ 次

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

● 加减运算 的次数

$$\frac{n^3}{3} + \frac{n^2}{2} - \frac{5n}{6}$$

LU 分解

- 换个角度看 Gauss 消去法

 矩阵的三角分解过程

矩阵分解，即将一个较复杂的矩阵分解成若干结构简单的矩阵的乘积，是矩阵计算中的一个很重要的技术。

LU 分解

将 Gauss 消去过程中第 $k-1$ 步消元后的系数矩阵记为：

$$A^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix} \quad (k = 1, \dots, n-1)$$

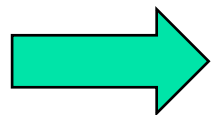
则 $A^{(k)}$ 与 $A^{(k+1)}$ 之间的关系式可以表示为：

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

其中：

$$L_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & -m_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} m_{ik} &= a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)} \\ (i &= k+1, \dots, n) \end{aligned}$$

于是有： $A^{(n)} = L_{n-1} \cdots L_2 L_1 A^{(1)}$



$$A = A^{(1)} = (L_{n-1} \cdots L_2 L_1)^{-1} A^{(n)}$$

容易验证：

$$L_k^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & m_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix} \quad (k = 1, \dots, n-1)$$

$$\text{且 } L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ m_{2,1} & 1 & & & & \\ m_{3,1} & m_{3,2} & 1 & & & \\ m_{4,1} & m_{4,2} & m_{4,3} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \\ m_{n,1} & m_{n,2} & m_{n,3} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

记： $L = L_1^{-1}L_2^{-1}\cdots L_n^{-1}$ ， $U = A^{(n)}$ ，则

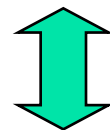
$$\boxed{A = LU} \longrightarrow \text{LU 分解}$$

其中： L --- 单位下三角矩阵， U --- 非奇异上三角矩阵

注：LU 分解中要求 L 是单位下三角， U 是非奇异上三角！

LU 分解存在唯一性

LU 分解存在 \longleftrightarrow 高斯消去法不被中断



所有顺序主子式不为零 $\longleftrightarrow a_{kk}^{(k)} \neq 0$

定理： A 存在唯一的 LU 分解的充要条件是 A 的所有顺序主子式都不为零。

证明唯一性

列主元 Gauss 消去法

- 为什么要选主元？

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

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：
$$|a_{i_k k}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} \{|a_{ik}^{(k)}|\} \neq 0$$

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

③ 消元

算法 (列主元 Gauss 消去法)

for $k=1$ **to** $n-1$

find $|a_{i_k k}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} \{|a_{ik}^{(k)}|\}$

if $a_{i_k k}^{(k)} = 0$ **then stop**

if $i_k \neq k$ **then swap** k -th and i_k -th row (including b)

for $i=k+1$ **to** n

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

$$a_{ij} = a_{ij} - m_{ik} a_{kj}, \quad j = k+1, k+2, \dots, n$$

$$b_i = b_i - m_{ik} b_k$$

end

end

$$x_n = b_n / a_n, \quad x_i = \left(b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j \right) / a_{ii}, \quad i = n-1, \dots, 2, 1$$

PLU 分解

- 列主元 Gauss 消去法对应的矩阵分解为 **PLU 分解**
(板书：列主元 Gauss 消去法对应的矩阵分解)

定理：若 A 非奇异，则存在排列矩阵 P ，使得

$$PA = LU$$

其中 L 为单位下三角矩阵， U 为上三角矩阵

- 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

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： $|a_{i_k j_k}^{(k)}| = \max_{k \leq i, j \leq n} \{|a_{ij}^{(k)}|\}$

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，在实际计算中一般很少采用