高斯消元法

方程组化简—消元过程

高斯消元与矩阵分解

三对角方程组的追赶法

➢线性方程组的矩阵形式

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

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j = b_i$$

$$(i=1,2,\cdots,n)$$

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

$$AX = b \qquad X ? \rightarrow b$$

线性方程组求解:

1. 直接方法;
2. 基本迭代法;
3. 子空间方法.

➢解线性方程组的克莱姆方法

1. 输入矩阵 A 和右端向量 b;

2. 计算 A 的行列式 D,如果 $D=0$,则输出错信息结束,否则进行 *3* ;

3. 对 $k=1,2,\cdots,n$ 用 b 替换 A 的第 k 列数据,并计算替换后矩阵的行列式值 D_k;

4. 计算并输出 $x_1 = D_1 / D,\cdots, x_n=D_n/D$, 结束。

计算量: $(n+1)n!(n-1)$

高斯消元法

第一步:将方程组化简为三角形方程组;

第二步:解三角形方程组,获方程组的解。

➢解上三角方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \qquad (a_{11}\ldots a_{nn} \neq 0)$$

计算：$x_n = b_n / a_{nn}$

$$x_k = [b_k - (a_{k,k+1}x_{k+1} + \ldots + a_{kn})] / a_{kk}$$

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

除法: n次；乘法: $n(n-1)/2$次,

乘、除法运算共 $n(n+1)/2$ 次, 简记为 $O(n^2)$

➢消元过程(化一般方程组为上三角方程组)

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 = b_3 \\ a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 = b_4 \end{cases}$$

$$\rightarrow \begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 = b_1 \\ \qquad a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + a_{24}^{(1)}x_4 = b_2^{(1)} \\ \qquad\qquad a_{33}^{(2)}x_3 + a_{34}^{(2)}x_4 = b_3^{(2)} \\ \qquad\qquad\qquad a_{44}^{(3)}x_4 = b_4^{(3)} \end{cases}$$

增广矩阵

$$\overline{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & b_3 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & b_4 \end{bmatrix}$$

计算: $[m_{21} \;\; m_{31} \;\; m_{41}]^T = [a_{21} \;\; a_{31} \;\; a_{41}]^T / a_{11}$

用$-m_{21}$乘矩阵第一行加到矩阵第二行;
用$-m_{31}$乘矩阵第一行加到矩阵第三行;
用$-m_{41}$乘矩阵第一行加到矩阵第四行;

实现第一轮消元

$$\overline{A}^{(1)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & a_{24}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & a_{34}^{(1)} & b_3^{(1)} \\ & a_{42}^{(1)} & a_{43}^{(1)} & a_{44}^{(1)} & b_4^{(1)} \end{bmatrix}$$

计算: $[m_{32} \quad m_{42}]^T = \quad [a_{32}^{(1)} \quad a_{42}^{(1)}] / a_{22}^{(1)}$

用$-m_{32}$乘矩阵第二行加到矩阵第三行;
用$-m_{42}$乘矩阵第二行加到矩阵第四行;
实现第二轮消元、第三轮消元………

上三角方程组 $\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & a_{24}^{(1)} \\ & & a_{33}^{(2)} & a_{34}^{(2)} \\ & & & a_{44}^{(3)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(2)} \\ b_4^{(3)} \end{bmatrix}$

n阶方程组消元过程乘法次数:

$$(n-1)n+(n-2)(n-1)+\ldots+1\times 2=(n^3-n)/3$$

除法次数：$(n-1)+(n-2)+\ldots+1=n(n-1)/2$

回代过程：$n(n+1)/2$ 总：$n^2+(n^3-n)/3$, 简记 $O(n^3)$

n	2	3	4	5	6
高斯	6	17	36	65	106
克莱姆	8	51	364	2885	25206

原始高斯消元法算法:

1. For $k=1,\cdots,n$-1 Do
2. For $i=k+1,\cdots,n$ Do
3. $a_{ik} \leftarrow a_{ik} / a_{kk}$
4. For $j=k+1,\cdots,n$ Do
5. $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - a_{ik} \times a_{kj}$
6. EndDo
7. $b_i \leftarrow b_i - a_{ik} \times b_k$
8. EndDo
9. EndDo

定理1 约化主元$a_{k+1,k+1}^{(k)} \neq 0$ $(k=0,1,\cdots,n-1)$的充分必要条件是 矩阵A的各阶顺序主子式不为零.即

$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix} \neq 0 \qquad (k = 1,2,\cdots,n)$$

例1（8位浮点数）
$$\begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 \\ -2 & 1.072 & 5.643 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

第一列中绝对值最大为– 2， 取– 2为主元

$$\begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ -1 & 3.712 & 4.623 & 2 \\ 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 10^{-8} & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 0.2\times10^{9} & 0.3\times10^{9} & 0.1\times10^{9} \\ 0 & 0.4\times10^{9} & 0.6\times10^{9} & 0.2\times10^{9} \end{bmatrix} \rightarrow \text{Error}$$

例1续 列主元法

$$
\rightarrow \begin{bmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ 0 & 0.3176\times 10 & 0.18015\times 10 & 0.5 \\ 0 & 0.2\times 10 & 0.3\times 10 & 0.1\times 10 \end{bmatrix}
$$

$$
\rightarrow \begin{bmatrix} -2 & 1.072 & 5.643 & 3 \\ 0 & 0.3176\times 10 & 0.18015\times 10 & 0.5 \\ 0 & 0 & 0.18655541\times 10 & 0.68513854\times 10 \end{bmatrix}
$$

回代计算

x_1=-0.49105820, x_2=-0.050886075, x_3=0.367257384

MATLAB计算

-0.49105816158235　-0.05088609088002　0.36725741028862

2. 高斯消元与矩阵分解

$$\begin{cases} 8x_1 - 6x_2 + 2x_3 = 28 \\ -4x_1 + 11x_2 - 7x_3 = -40 \\ 4x_1 - 7x_2 + 6x_3 = 33 \end{cases}$$

$$F_1 A = \begin{bmatrix} 1 & & \\ 0.5 & 1 & \\ -0.5 & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 8 & -6 & 2 \\ -4 & 11 & -7 \\ 4 & -7 & 6 \end{bmatrix} = A^{(1)} = \begin{bmatrix} 8 & -6 & 2 \\ & 8 & -6 \\ & -4 & 5 \end{bmatrix}$$

经过第一轮消元:

$$\begin{aligned} 8x_1 - 6x_2 + 2x_3 &= 28 \\ 8x_2 - 6x_3 &= -26 \\ -4x_2 + 5x_3 &= 19 \end{aligned}$$

注释: 8是主元(pivot), -0.5和0.5是乘子(multiplier)。

$$F_2 A^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & 0.5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 8 & -6 & 2 \\ & 8 & -6 \\ & -4 & 5 \end{bmatrix} = A^{(2)} = \begin{bmatrix} 8 & -6 & 2 \\ & 8 & -6 \\ & & 2 \end{bmatrix}$$

经过第二轮消元:

$$\begin{aligned} 8x_1 - 6x_2 + 2x_3 &= 28 \\ 8x_2 - 6x_3 &= -26 \\ 2x_3 &= 6 \end{aligned}$$

注释: 8是主元(pivot), -0.5是乘子(multiplier)。

$$F_2F_1A = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & 0.5 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & & \\ 0.5 & 1 & \\ -0.5 & & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 8 & -6 & 2 \\ -4 & 11 & -7 \\ 4 & -7 & 6 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 8 & -6 & 2 \\ & 8 & -6 \\ & & 2 \end{bmatrix} = A^{(2)}$$

$$A = F_1^{-1}F_2^{-1}A^{(2)}$$

$$A = \begin{bmatrix} 8 & -6 & 2 \\ -4 & 11 & -7 \\ 4 & -7 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ -0.5 & 1 & \\ 0.5 & & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & -0.5 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 8 & -6 & 2 \\ & 8 & -6 \\ & & 2 \end{bmatrix}$$

$$= F_1^{-1}F_2^{-1}A^{(2)}$$

$$A = LU$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & \\ -0.5 & 1 & \\ 0.5 & -0.5 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ -0.5 & 1 & \\ 0.5 & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & -0.5 & 1 \end{bmatrix},$$

$$U = \begin{bmatrix} 8 & -6 & 2 \\ & 8 & -6 \\ & & 2 \end{bmatrix}$$

Guass消元法和LU分解的关系？

$$A=\begin{bmatrix} 8 & -6 & 2 \\ -4 & 11 & -7 \\ 4 & -7 & 6 \end{bmatrix}$$

$$A=LU=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0.5 & 1 & 0 \\ 0.5 & -0.5 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 8 & -6 & 2 \\ 0 & 8 & -6 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

可以证明：高斯消元法可以用如下矩阵形式来表示：

$$A = \underbrace{L}_{L}\ \underbrace{A^{(n-1)}}_{U}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ m_{21} & \ddots & & \\ \vdots & \ddots & 1 & \\ m_{n1} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & \cdots \\ & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix}$$

矩阵的三角分解：$A = L\,U$

例2 消元与矩阵分解方法

$$\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 + 4x_3 = 6 \\ 3x_1 + 5x_2 + 2x_3 = 5 \\ 4x_1 + 3x_2 + 30x_3 = 32 \end{cases}$$

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 5 & 2 \\ 4 & 3 & 30 \end{bmatrix} \qquad A \to \begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 1.5 & 0.5 & -4 \\ 2 & -6 & -2 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1.5 & 1 & 0 \\ 2 & -6 & 1 \end{bmatrix} \qquad U = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 0 & 0.5 & -4 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix}$$

$$A = LU$$

$$Ax = b \Rightarrow LU\,x = b$$

$$LY = b$$

$$Ux = Y$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1.5 & 1 & 0 \\ 2 & -6 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 5 \\ 32 \end{bmatrix}$$

$y_1 = 6$

$y_2 = -4$

$y_3 = -4$

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 0 & 0.5 & -4 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ -4 \\ -4 \end{bmatrix}$$

$x_1 = -13$

$x_2 = 8$

$x_3 = 2$

3. 三对角方程组的追赶法

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta_1 & & & \\ \gamma_2 & \delta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \gamma_n & \delta_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \beta_1 & & \\ & 1 & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

其中δ_k，β_k，γ_k 为待定系数。

比较上式两边得

$$\begin{cases} b_1 = \delta_1, c_1 = \delta_1\beta_1, \\ a_k = \gamma_k, b_k = \gamma_k\beta_{k-1} + \delta_k (k = 2, \cdots, n), \\ c_k = \delta_k\beta_k (k = 2, 3, \cdots, n-1). \end{cases}$$

上式中γ_k不用再计算，而L和U中的主要元素δ_k和β_k的计算公式如下：

$$\begin{cases} \delta_1 = b_1, \beta_1 = c_1 / \delta_1, \\ \delta_k = b_k - a_k\beta_{k-1} (k = 2, 3, L, n), \\ \beta_k = c_k / \delta_k \quad (k = 2, 3, L, n-1). \end{cases} \qquad (*)$$

定理2 如果三对角矩阵A的元素满足条件：

$$(1)\ |b_1| > |c_1| > 0,$$

$$(2)\ |b_k| \ge |a_k| + |c_k|,\ a_k c_k \ne 0\ (k = 2, 3, \cdots, n),$$

$$(3)\ |b_n| > |a_n| > 0.$$

则δ_k，β_k由公式(*)可计算出,且

$$|\delta_k| > |c_k| \ne 0,\quad (k = 1, 2, \cdots, n-1).$$

求解三对角方程组$Ax=f$等价于解两个三角形方程组

（1）求解$Ly=f$，得向量y；

（2）求解$Ux=y$，得方程组的解x。

具体计算公式如下：

$$\begin{cases} y_1 = f_1 / \delta_1, \\ y_i = \left(f_i - a_i y_{i-1}\right) / \delta_i \ , \ (i = 2, \cdots, n), \\ x_n = y_n, x_i = y_i - \beta_i x_{i+1} \ , \ (i = n-1, \cdots, 2, 1). \end{cases}$$