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
uhnim@163.com

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

线性方程组求解

- n个方程、 n 个未知量的线性方程组的解

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

的系数行列式D不等于零， 则方程组有唯一解

$$x_1=\frac{D_1}{D},\ x_2=\frac{D_2}{D},\ \cdots,\ x_n=\frac{D_n}{D}$$

线性方程组求解

- 系数行列式:

$$D = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

$$D_j = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1\,j-1} & b_1 & a_{1\,j+1} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2\,j-1} & b_2 & a_{2\,j+1} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{n\,j-1} & b_n & a_{n\,j+1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} \qquad j = 1,2,\cdots,n$$

用常数项列替换 *D* 的第 *j* 列，其余列不变。

线性方程组求解

- Crammer法则的使用有极大的局限性
  - 只能用于求解方程个数与未知数个数相等的线性方程组
  - 只能求得系数行列式不为零时的线性方程组的唯一解；
    - 即如果方程个数与未知数个数不相等，或系数行列式等于零，则Crammer法则失效。
  - 计算量大，要计算 n+1 个 n 阶行列式的值。
  - 理论价值高于计算价值

$$\text{如}n = 100, 10^{33}\text{次} / \text{秒的计算机要算}10^{120}\text{年。}$$

- ---------消去（元）法

6.1 消去法

我们知道，下面有3种方程的解我们可以直接求出：

①

n次运算

$$A = diag(a_{11}, a_{22}, \cdots, a_{nn}) \Rightarrow x_i = \frac{b_i}{a_{ii}}, i = 1, \cdots, n$$

②

（n＋1）n/2次运算

$$A = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix} \Rightarrow x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} x_j}{l_{ii}}, i = 1, \cdots, n$$

③

$$A=\begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{pmatrix} \Rightarrow x_i=\frac{b_i-\sum\limits_{j=i+1}^{n}u_{ij}x_j}{u_{ii}}, i=n,\cdots,1$$

（n＋1）n/2次运算

对方程组，作如下的变换，解不变

①交换两个方程的次序

②一个方程的两边同时乘以一个非0的数

③一个方程的两边同时乘以一个非0数，加到另一个方程

因此，对应的对增广矩阵 (A, b)，作如下的变换，解不变

①交换矩阵的两行

②某一行乘以一个非0的数

③某一个乘以一个非0数，加到另一行

消元法就是对增广矩阵作上述行的变换，变为我们已知的3种类型之一，而后求根

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

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

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 $\Longrightarrow$

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

（2）-（1）×4 $\Longrightarrow$

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

（3）-（1）

$$\begin{cases} x_1 - 0.5x_2 + 1.5x_3 = 0.5 & (1) \\ 4x_2 - x_3 = 2 & (2) \\ 2.5x_2 - 1.5x_3 = 6.5 & (3) \end{cases}$$

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

$$\begin{cases} x_1 \qquad + 1.375x_3 = 0.75 & (1) \\ x_2 - 0.25x_3 = 0.5 & (2) \\ 2.5x_2 - 1.5x_3 = 6.5 & (3) \end{cases}$$

（3）-（2）×2.5 $\Rightarrow$

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

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 $\Rightarrow$

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

（2）+0.25×(3) $\Rightarrow$

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

$$(1)-1.375\times(3) \Rightarrow \begin{cases} x_1 \qquad\qquad = 9 & (1) \\ \qquad x_2 \qquad = -1 & (2) \\ \qquad\qquad x_3 = -6 & (3) \end{cases}$$

最终得到方程组的解：

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

上述方法就是所谓**约当消去法**，其消元过程可归纳如下：

第一步：将第一个方程中x_1的系数化为1，并从其余方程中消去x_1。

第二步：将第二个方程中x_2的系数化为1，并从其余方程中消去x_2。

… … …

以此类推，直到每个方程仅有一个变元为止。

方程形态的演变（0）

$$
\begin{bmatrix}
a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\
a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \cdots & a_{2k}^{(0)} & \cdots & a_{2n}^{(0)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
a_{k1}^{(0)} & a_{k2}^{(0)} & & a_{kk}^{(0)} & \cdots & a_{kn}^{(0)} \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & & a_{nk}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_1^{(0)} \\ b_2^{(0)} \\ \vdots \\ b_k^{(0)} \\ \vdots \\ b_n^{(0)}
\end{bmatrix}
$$

方程形态的演变（1）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \cdots & a_{2k}^{(0)} & \cdots & a_{2n}^{(0)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ a_{k1}^{(0)} & a_{k2}^{(0)} & & a_{kk}^{(0)} & \cdots & a_{kn}^{(0)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & & a_{nk}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(0)} \\ \vdots \\ b_k^{(0)} \\ \vdots \\ b_n^{(0)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（1）

$$
\begin{bmatrix}
1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
0 & a_{k2}^{(1)} & & a_{kk}^{(1)} & \cdots & a_{kn}^{(1)} \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
0 & a_{n2}^{(1)} & & a_{nk}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_k^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)}
\end{bmatrix}
$$

方程形态的演变（2）

$$
\begin{bmatrix}
1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
0 & a_{k2}^{(1)} & & a_{kk}^{(1)} & \cdots & a_{kn}^{(1)} \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
0 & a_{n2}^{(1)} & & a_{nk}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)}
\end{bmatrix}
$$

方程形态的演变（2）

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & a_{1k}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{kk}^{(2)} & \cdots & a_{kn}^{(2)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{nk}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(2)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（k-1）

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & a_{1k}^{(k-1)} & \cdots & a_{1n}^{(k-1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(k-1)} & \cdots & a_{2n}^{(k-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(k-1)} \\ b_2^{(k-1)} \\ \vdots \\ b_k^{(k-1)} \\ \vdots \\ b_n^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（k）

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & a_{1k}^{(k-1)} & \cdots & a_{1n}^{(k-1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(k-1)} & \cdots & a_{2n}^{(k-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 1 & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(k-1)} \\ b_2^{(k-1)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（k）

$$
\begin{bmatrix}
1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & a_{1n}^{(k)} \\
0 & 1 & \cdots & 0 & \cdots & a_{2n}^{(k)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & 1 & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & 0 & \cdots & a_{nn}^{(k)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_1^{(k)} \\ b_2^{(k)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)}
\end{bmatrix}
$$

方程形态的演变（n）

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 1 & \cdots & 0 \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(n)} \\ b_2^{(n)} \\ \vdots \\ b_k^{(n)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

约当消去法第（1）步

初始状态

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^{(0)} x_j = b_i \qquad i = 1,2,\cdots,n$$

第（1）步

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

方程形态的演变（1）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{k2}^{(1)} & & a_{kk}^{(1)} & \cdots & a_{kn}^{(1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & & a_{nk}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_k^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

约当消去法第（1）步

运算过程

$$\begin{cases} a_{1j}^{(1)} = a_{1j} / a_{11}, j = 2,3,\cdots,n \\ b_1^{(1)} = b_1 / a_{11} \end{cases}$$

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

约当消去法第（k）步

第（k-1）步

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

第（k）步

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

方程形态的演变（k）

$$
\begin{bmatrix}
1 & 0 & \cdots & a_{1k}^{(k-1)} & \cdots & a_{1n}^{(k-1)} \\
0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(k-1)} & \cdots & a_{2n}^{(k-1)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & 1 & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} b_1^{(k-1)} \\ b_2^{(k-1)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k-1)} \end{bmatrix}
$$

约当消去法第（k）步

运算过程

$$\begin{cases} a_{kj}^{(k)} = a_{kj}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)}, j = k+1, k+2, \cdots, n \\ b_k^{(k)} = b_k^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)} \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} \cdot a_{kj}^{(k)}, j = k+1, k+2, \cdots, n \\ b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} \cdot b_k^{(k)}, i = 1, \cdots, k-1, k+1, \cdots, n \end{cases}$$

这样，经过 n 步以后，所给方程组最终被加工成：

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。

存储空间

$$\begin{cases} a_{kj}/a_{kk} \Rightarrow a_{kj}, j = k+1, k+2, \cdots, n \\ b_k / a_{kk} \Rightarrow b_k \end{cases}$$

$$\begin{cases} a_{ij} - a_{ik}a_{kj} \Rightarrow a_{ij}, j = k+1, k+2, \cdots, n \\ b_i - a_{ik}b_k \Rightarrow b_i, i = 1, \cdots, k-1, k+1, \cdots, n \end{cases}$$

2 高斯消去法

例： 用消去法解方程组

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

解：

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

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

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 $x_1=1$

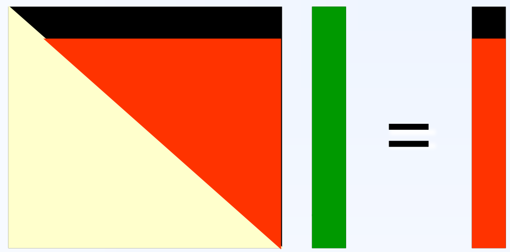
这种求解线性方程组的方法就是高斯消去法

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。

高斯消去法的基本思想

思路 首先将*A*化为上三角阵，再回代求解 。



$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{pmatrix}$$

- **高斯消元法：**

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

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

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

其增广矩阵为：

$$(A^{(0)},\mathbf{b}^{(0)})=\begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} & b_1^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \cdots & a_{2n}^{(0)} & b_2^{(0)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)} & b_n^{(0)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（0）

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1k}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \cdots & a_{2k}^{(0)} & \cdots & a_{2n}^{(0)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ a_{k1}^{(0)} & a_{k2}^{(0)} & & a_{kk}^{(0)} & \cdots & a_{kn}^{(0)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & & a_{nk}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(0)} \\ \vdots \\ b_k^{(0)} \\ \vdots \\ b_n^{(0)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（1）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ a_{21}^{(0)} & a_{22}^{(0)} & \cdots & a_{2k}^{(0)} & \cdots & a_{2n}^{(0)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ a_{k1}^{(0)} & a_{k2}^{(0)} & & a_{kk}^{(0)} & \cdots & a_{kn}^{(0)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & & a_{nk}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(0)} \\ \vdots \\ b_k^{(0)} \\ \vdots \\ b_n^{(0)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（1）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{k2}^{(1)} & & a_{kk}^{(1)} & \cdots & a_{kn}^{(1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & & a_{nk}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_k^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（2）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{k2}^{(1)} & & a_{kk}^{(1)} & \cdots & a_{kn}^{(1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & & a_{nk}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（2）

$$
\begin{bmatrix}
1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & a_{kk}^{(2)} & \cdots & a_{kn}^{(2)} \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & a_{nk}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)}
\end{bmatrix}
$$

方程形态的演变（k-1）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k-1)} \\ \vdots \\ b_n^{(k-1)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（k）

$$
\begin{bmatrix}
1 & a_{21}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & 1 & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k-1)} \end{bmatrix}
$$

方程形态的演变（k）

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{21}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 1 & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & 0 & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)} \end{bmatrix}$$

方程形态的演变（n）

$$
\begin{bmatrix}
1 & a_{21}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
0 & 1 & \cdots & a_{2k}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & 1 & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\
 & & & \vdots & & \vdots \\
0 & 0 & & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_k^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)}
\end{bmatrix}
$$

高斯消去法的回代过程

$$\begin{cases} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 + \cdots + a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)} \\ \qquad\quad x_2 + a_{23}^{(2)} x_3 + \cdots + a_{2n}^{(2)} x_n = b_2^{(2)} \\ \qquad\qquad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \qquad\qquad x_{n-1} + a_{n-1,n}^{(n-1)} x_n = b_{n-1}^{(n-1)} \\ \qquad\qquad\qquad x_n = b_n^{(n)} \end{cases}$$

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

①第一次消元：消去方程组第2—n行中x_1

(a) 计算行乘数 $m_{i1}=\dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \qquad (i=2,3,\cdots,n)$ ，

(b) 第i行元素减去第一行对应元素乘以m_{i1} ，即

$$a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-m_{i1}a_{1j}^{(1)} \qquad b_i^{(2)}=b_i^{(1)}-m_{i1}b_1^{(1)}$$

$$(i=2,3,\cdots,n,\ j=2,3,\cdots,n)$$

得到： $A^{(2)}\mathbf{x}=\mathbf{b}^{(2)}$

运算量： ***(n-1)*(1+n)***

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

乘法(n-1)n次， 除法 n-1 次， 故完成

第1步消元乘除法总数为： ***(n-1)*(1+n）***

②第 k 次消元：假定已完成 $k-1$ 步消元，得到：

$$A^{(k)}\mathbf{x}=\mathbf{b}^{(k)}$$

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

运算量：$(n-k)*(1+n-k+1)=(n-k)(n-k+2)$

不妨设$a_{kk}^{(k)} \neq 0$，消去方程组$A^{(k)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(k)}$ 的第$k+1$ 至n个方程中的 x_k ，

(a) 计算行乘数 $m_{ik} = \dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \qquad (i = k+1, \cdots, n)$

(b) 第 i 行元素减去第 k 行对应元素乘以m_{ik} ，即

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} \qquad b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}$$

$$(i = k+1, \cdots, n,\ j = k+1, \cdots, n)$$

得到 $A^{(k+1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(k+1)}$

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

③继续这过程，且设$a_{ii}^{(i)} \neq 0 \quad (i=1,2,\cdots,n-1)$，直到完成第$n-1$次消元

得到 $A^{(n)}\mathbf{x}=\mathbf{b}^{(n)}$

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

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

以上过程称为**消元过程**。

④求解上述三角形方程组，得到

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

此过程称为**回代过程**。

显然，不带行交换的**高斯消去法**能进行到底的条件：

$$a_{kk}^{(k)} \neq 0 \qquad (1 \leq k \leq n)$$

高斯消去法的运算量

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 $$\frac{n^3}{3}+n^2-\frac{n}{3}=\frac{n^3}{3}+O(n^2)$$

以10阶方程组为例，用高斯消去法需要430次乘除法，而用Cramer法则需要10！＝39916800次乘除法。

2 选主元素

不带行交换的高斯消去法能进行到底的条件：

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

即使 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$

但如果 $a_{kk}^{(k)}$ 过小，也会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）

怎样才能获得较精确的解？关键在于使主元绝对值尽量地大（方程组的行交换不影响结果）

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

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

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

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

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

(2) 如果 $l\neq k$ ，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

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

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。