第7章 解线性方程组的直接方法

张利军
zlj@nju.edu.cn
http://cs.nju.edu.cn/zlj

目录

引言

- 在自然科学和工程技术中，很多问题的解决常常归结为求解线性代数方程组
  - 电学中的网络问题
  - 船体数学放样中建立三次样条函数问题
  - 用最小二乘法求实验数据的曲线拟合问题
  - 解非线性方程组问题

- 方程组的系数矩阵大致分为两种
  - 低阶稠密矩阵（如阶数上界大约为150的矩阵）
  - 大型稀疏矩阵（即阶数高且零元素较多的矩阵）

线性方程组的数值解法

□ 直接法

- 经过有限步算术运算即可求得方程组精确解
- 但由于舍入误差的存在和影响，也只能求得近似解
- 这类方法是解低阶稠密矩阵方程组的有效方法，在求解较大型稀疏矩阵方程组方面也取得了进展

□ 迭代法

- 用某种极限过程去逐步逼近线性方程组精确解
- 具有存储单元较少、程序设计简单、原始系数矩阵在计算过程中始终不变等优点
- 存在收敛性及收敛速度方面的问题
- 是解大型稀疏矩阵方程组的重要方法

目录

- 引言
- Guass消去法
- Guass主元素消去法
- Guass消去法的变形
- 向量和矩阵的范数
- 误差分析

Guass消去法

- 介绍Gauss消去法（逐次消去法）以及消去法和矩阵三角分解之间的关系
  - 是最基本的一种解线性方程组的直接方法
- Gauss消去法是一个古老的求解线性方程组的方法
  - 早在公元前250年我国就掌握了解三元一次联立方程组的方法
  - 但由它改进、变形得到的主元素消去法、三角分解法仍然是目前计算机上常用的有效方法

消元手续

- 设有线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \qquad\qquad\qquad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n, \end{cases} \tag{7.2.1}$$

或写成矩阵形式$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$，其中

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

其中$\boldsymbol{A}$为非奇异矩阵

- 下面举一个简单例子说明消去法的基本思想

例7.1

□ 用消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, & (7.2.2) \\ 4x_2 - x_3 = 5, & (7.2.3) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (7.2.4) \end{cases}$$

- 基本思想：用逐次消去未知数的方法把原来的方程组$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$转化为与其等价的三角方程组，而求解三角方程组就容易了

- 换言之，用行的初等变换将原方程组系数矩阵化为简单形式，从而将求解原方程组(7.2.1)的问题转化为求解简单方程组的问题

例7.1

- 用消去法解方程组

$$
\begin{cases}
x_1 + x_2 + x_3 = 6, & (7.2.2) \\
4x_2 - x_3 = 5, & (7.2.3) \\
2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (7.2.4)
\end{cases}
$$

- 第一步，将式(7. 2. 2)乘以−2加到式(7. 2. 4)上去，消去式(7. 2. 4)中的未知数x_1得到

$$-4x_2 - x_3 = -11 \qquad (7.2.5)$$

- 第二步，将式(7.2.3)加到式(7.2.5)上，消去式(7. 2. 5)中的未知数x_2得到

$$-2x_3 = -6$$

例7.1

- 用消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, & (7.2.2) \\ 4x_2 - x_3 = 5, & (7.2.3) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (7.2.4) \end{cases}$$

- 得到与原方程组等价的三角方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, \\ \qquad 4x_2 - x_3 = 5, \\ \qquad\quad -2x_3 = -6 \end{cases} \qquad (7.2.6)$$

- 显然方程组(7.2.6)是容易求解的，解为$x^* = (1,2,3)^{\mathrm{T}}$

例7.1

用消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 6, & (7.2.2) \\ 4x_2 - x_3 = 5, & (7.2.3) \\ 2x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 & (7.2.4) \end{cases}$$

- 上述过程相当于

$(-2) \times \boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_3 \to \boldsymbol{r}_3$

$$(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b}) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & | & 6 \\ 0 & 4 & -1 & | & 5 \\ 2 & -2 & 1 & | & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & | & 6 \\ 0 & 4 & -1 & | & 5 \\ 0 & -4 & -1 & | & -11 \end{bmatrix}$$

$\boldsymbol{r}_2 + \boldsymbol{r}_3 \to \boldsymbol{r}_3$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & | & 6 \\ 0 & 4 & -1 & | & 5 \\ 0 & 0 & -2 & | & -6 \end{bmatrix}$$

解n阶方程组的Gauss消去法

- 将式(7.2.1)记作$\boldsymbol{A}^{(1)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(1)}$
  - 其中$\boldsymbol{A}^{(1)} = (a_{ij}^{(1)}) = (a_{ij})$， $\boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{b}$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \qquad\qquad\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n, \end{cases} \tag{7.2.1}$$

1. 第一次消元

- 设$a_{11}^{(1)} \neq 0$，首先对行计算乘数$m_{i1} = a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}$，其中$i = 2, 3, \cdots, n$
- 用$-m_{i1}$乘(7.2.1)的第1个方程，加到第i个方程上，消去(7.2.1)的第2到n个方程中的未知数x_1

解n阶方程组的Gauss消去法（续）

- 得与式(7.2.1)等价的方程组

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix} \qquad (7.2.7)$$

- 简记作$\boldsymbol{A}^{(2)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(2)}$，其中

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

2. 一般第$k(1 \le k \le n-1)$次消元

- 设第$k-1$步计算已经完成，即已得到等价方程组

$$\boldsymbol{A}^{(k)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(k)} \qquad (7.2.8)$$

解n阶方程组的Gauss消去法（续）

- $\boldsymbol{A}^{(k)}$已经消去未知数 $x_1, x_2, \cdots, x_{k-1}$，如下所示

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

- 设$a_{kk}^{(k)} \neq 0$，计算乘数$m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$，其中$i = k+1, \cdots, n$
- 用$-m_{ik}$乘式(7.2.8)的第k个方程，加到第i个方程上，消去第$k+1$到n个方程中的未知数x_k

解n阶方程组的Gauss消去法（续）

- 得与式(7.2.1)等价的方程组

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

- $\boldsymbol{A}^{(k+1)}$元素的计算公式为

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

- 显然，$\boldsymbol{A}^{(k+1)}$ 的第1行直到第k行与$\boldsymbol{A}^{(k)}$相同

3. 继续这一过程，直到完成第$n-1$次消元

- 最后得到与原方程组等价的三角方程组

$$\boldsymbol{A}^{(n)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(n)} \tag{7.2.10}$$

解n阶方程组的Gauss消去法（续）

- 即

$$
\begin{bmatrix}
a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\
 & & \ddots & \vdots \\
 & & & a_{nn}^{(n)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}
\tag{7.2.10}
$$

- 由式(7.2.1)约化为式(7.2.10)的过程称为消元过程

$$
\begin{cases}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1, \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2, \\
\qquad \vdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n,
\end{cases}
\tag{7.2.1}
$$

解n阶方程组的Gauss消去法（续）

- 求解三角方程组(7.2.10)

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix} \qquad (7.2.10)$$

- 设$a_{ii}^{(i)} \neq 0\ (i = 1, 2, \cdots, n)$，易得求解公式

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{n} \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) \Big/ a_{kk}^{(k)} \qquad (k = n-1, n-2, \cdots, 2, 1) \end{cases}$$

- 式(7.2.10)的求解过程称为回代过程

消元过程的注意事项

- 如果$a_{11}^{(1)} = 0$
  - 由于$\boldsymbol{A}$为非奇异矩阵，所以$\boldsymbol{A}$的第1列一定有元素不等于零，例如$a_{i_1,1}^{(1)} \neq 0$，于是可以先交换两行元素$(\boldsymbol{r_1} \leftrightarrow \boldsymbol{r_{i_1}})$，然后再进行消元运算
  - 这时$\boldsymbol{A}^{(2)}$右下角矩阵（$n-1$阶）亦为非奇异矩阵，继续上述过程，Gauss消去法可继续计算

- **定理7.1** 如果$\boldsymbol{A}$为n阶非奇异矩阵，则可以通过Gauss消去法（及交换两行的初等变换）将方程组$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$化为三角方程组$\boldsymbol{A}^{(n)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(n)}$

消元过程的注意事项（续）

- $\boldsymbol{A}$在什么条件下才能保证$a_{kk}^{(k)} \neq 0\ (k = 1,2, \ldots , n)$?
  - 这样在实现Gauss消去法时不需要交换行
- 引理 约化的主元素$a_{ii}^{(i)} \neq 0\ (i = 1, 2, \cdots, k)$的充要条件是矩阵$\boldsymbol{A}$的顺序主子式$D_i \neq 0\ (i = 1, 2, \cdots, k)$，即

$$D_1 = a_{11} \neq 0,$$

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \ldots & a_{ii} \end{vmatrix} \neq 0 \quad (i = 2, 3, \cdots, k)$$

引理（证明）

- 利用归纳法证明引理的充分性
  - 显然，当$k=1$时引理的充分性是成立的
  - 现假设引理对$k-1$成立，求证引理对k成立
  - 设$a_{ii}^{(i)}\neq 0\ (i=1,2,\cdots,k-1)$，于是可用Gauss消去法将$\boldsymbol{A}^{(1)}=\boldsymbol{A}$约化到$\boldsymbol{A}^{(k)}$中，即

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

引理（证明）

- 注意到Gauss消去法不改变行列式，因此

$$D_2 = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)}, \qquad D_3 = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} a_{33}^{(3)}$$

$$D_k = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2k}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{kk}^{(k)} \qquad (7.2.13)$$

- 由设$D_i \neq 0\ (i = 1, 2, \cdots, k)$及式(7.2.13)，有 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$， 即引理充分性对k成立

- 显然，由假设$a_{ii}^{(i)} \neq 0\ (i = 1, 2, \cdots, k)$，利用式(7.2.13)亦可推出$D_i \neq 0\ (i = 1, 2, \cdots, k)$

简化的Gauss消去法

- **推论** 如果$\boldsymbol{A}$的顺序主子式$D_k \neq 0$（$k = 1,2,\cdots,n-1$），则

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} = D_1, \\ a_{kk}^{(k)} = \dfrac{D_k}{D_{k-1}} \quad (k = 2,3,\cdots,n) \end{cases}$$

- **定理7.2** 如果n阶矩阵$\boldsymbol{A}$的所有顺序主子式均不为零，即$D_i \neq 0$（$i = 1,2,\cdots,n$），则可通过Gauss消去法（不进行交换两行的初等变换），将方程组(7.2.1)化为三角方程组(7.2.10)

简化的计算公式

1. 消元计算$(k = 1, 2, \cdots, n-1)$

$$
\begin{aligned}
m_{ik} &= a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)} & (i = k+1, \cdots, n), \\
a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} & (i, j = k+1, \cdots, n), \\
b_i^{(k+1)} &= b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} & (i = k+1, \cdots, n).
\end{aligned}
$$

2. 回代计算（与之前相同）

$$
\begin{cases}
x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{n} \\
x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) \Big/ a_{kk}^{(k)} & (k = n-1, n-2, \cdots, 2, 1)
\end{cases}
$$

Gauss消去法的矩阵描述

- 建立Gauss消去法与矩阵因式分解的关系
- 设式$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$中$\boldsymbol{A}$的各顺序主子式均不为零
  - 对$\boldsymbol{A}$施行行的初等变换相当于用初等矩阵左乘$\boldsymbol{A}$
  - 对式$\boldsymbol{A}^{(1)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(1)}$施行第一次消元后化为式$\boldsymbol{A}^{(2)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(2)}$，这时$\boldsymbol{A}^{(1)}$化为$\boldsymbol{A}^{(2)}$，$\boldsymbol{b}^{(1)}$化为$\boldsymbol{b}^{(2)}$，即

$$\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}^{(1)} = \boldsymbol{A}^{(2)}, \quad \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{b}^{(2)},$$

其中
$$\boldsymbol{L}_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -m_{21} & 1 & & & \\ -m_{31} & & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Gauss消去法的矩阵描述（续）

- 一般第k步消元，$\boldsymbol{A}^{(k)}$化为$\boldsymbol{A}^{(k+1)}$，$\boldsymbol{b}^{(k)}$化为$\boldsymbol{b}^{(k+1)}$，相当于

$$\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{A}^{(k)}=\boldsymbol{A}^{(k+1)},\qquad \boldsymbol{L}_k\boldsymbol{b}^{(k)}=\boldsymbol{b}^{(k+1)}$$

- 重复这一过程，最后得到

$$\begin{cases}\boldsymbol{L}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}^{(1)}=\boldsymbol{A}^{(n)}\\ \boldsymbol{L}_{n-1}\cdots\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{b}^{(1)}=\boldsymbol{b}^{(n)}\end{cases}\tag{7.2.14}$$

其中

$$\boldsymbol{L}_k=\begin{bmatrix}1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -m_{nk} & & & 1\end{bmatrix}$$

Gauss消去法的矩阵描述（续）

- 将上三角矩阵$\boldsymbol{A}^{(n)}$记作$\boldsymbol{U}$，由式(7.2.14)可得

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}_1^{-1}\boldsymbol{L}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{L}_{n-1}^{-1}\,\boldsymbol{U} \;= \boldsymbol{L}\boldsymbol{U},$$

其中

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_1^{-1}\,\boldsymbol{L}_2^{-1}\cdots\boldsymbol{L}_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & \dots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

为单位下三角矩阵

- 即对角元素为1的下三角矩阵
- $\boldsymbol{L}$中的元素是消元计算所得的系数

矩阵的三角分解

- Gauss消去法实质上产生了一个将$\boldsymbol{A}$分解为两个三角矩阵相乘的因式分解
  - 得到如下重要定理，在解方程组的直接法中起着重要作用

- **定理7.3**（矩阵的LU分解） 设$\boldsymbol{A}$为n阶矩阵，如果$\boldsymbol{A}$的顺序主子式$D_i \neq 0 \ (i = 1, 2, \cdots, n - 1)$，则$\boldsymbol{A}$可分解为一个单位下三角矩阵$\boldsymbol{L}$和一个上三角矩阵$\boldsymbol{U}$的乘积，且这种分解是唯一的

定理7.3（证明）

- 根据Gauss消去法的矩阵分析，$A = LU$的存在性已经得到证明
- 下面在A为非奇异矩阵的假定下，证明唯一性
  - 设 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{U}_1,$

    其中$\boldsymbol{L}, \boldsymbol{L}_1$为单位下三角矩阵， $\boldsymbol{U}, \boldsymbol{U}_1$为上三角矩阵
  - 由于$\boldsymbol{L}^{-1}, \boldsymbol{U}_1^{-1}$ 存在，故

    $$\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}_1^{-1} = \boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_1^{-1} \Rightarrow \quad \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}_1^{-1} = \boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{L}_1$$
  - 根据三角矩阵的性质，$\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}_1^{-1}$为上三角矩阵，$\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{L}_1$为单位下三角矩阵
  - 从而上式两端都必须等于$\boldsymbol{I}$，故$\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}_1, \boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_1$

例7.2

- 对于例7.1, 其系数矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 0 & 4 & -1\\ 2 & -2 & 1\end{bmatrix},$$

由Gauss消去法，有

$$m_{21}=0,\qquad m_{31}=2,\qquad m_{32}=-1,$$

故

$$A=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 2 & -1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 0 & 4 & -1\\ 0 & 0 & -2\end{bmatrix}=LU$$

Gauss消去法的计算量（续）

1. 消元过程的计算量

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

- 第一步计算乘数m_{i1} $(i = 2,3,\cdots,n)$需要$n-1$次除法运算
- 计算$a_{ij}^{(2)}$ $(i,j = 2,3,\cdots,n)$需要$(n-1)^2$次乘法运算及$(n-1)^2$次加、减法运算

Gauss消去法的计算量（续）

1. 消元过程的计算量

- 消元过程所需的乘、除法次数MD及加、减法次数AS分别为

$$MD = n(n^2-1)/3, \qquad AS = n(n-1)(2n-1)/6$$

第 $\boldsymbol{k}$ 步	加、减法次数	乘法次数	除法次数
1	$(n-1)^2$	$(n-1)^2$	$n-1$
2	$(n-2)^2$	$(n-2)^2$	$n-2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$n-1$	1	1	1
合　计	$\dfrac{n(n-1)(2n-1)}{6}$	$\dfrac{n(n-1)(2n-1)}{6}$	$\dfrac{n(n-1)}{2}$

Gauss消去法的计算量（续）

2. 计算$\boldsymbol{b}^{(n)}$的计算量

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

- 乘、除法次数MD及加、减法次数AS分别为

$$MD = (n-1) + (n-2) + \cdots + 2 + 1 = n(n-1)/2$$
$$AS = n(n-1)/2$$

3. 解$\boldsymbol{A}^{(n)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(n)}$ 所需的计算量

$$\begin{cases} x_n = b_n^{(n)} / a_{nn}^{n} \\ x_k = \left(b_k^{(k)} - \sum\limits_{j=k+1}^{n} a_{kj}^{(k)} x_j \right) \Big/ a_{kk}^{(k)} \qquad (k = n-1, n-2, \cdots, 2, 1) \end{cases}$$

Gauss消去法的计算量（续）

- 乘、除法次数MD及加、减法次数AS分别为

$$MD = n(n+1)/2, \qquad AS = n(n-1)/2$$

4. 解式$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$所需的总的计算量为

乘除法次数 $MD = n^3/3 + n^2 - n/3 \approx n^3/3$ (当n比较大时)

加减法次数 $AS = n(n-1)(2n+5)/6 \approx n^3/3$ (当n比较大时)

- **定理7.4** 如果A为n阶非奇异矩阵，则用Gauss消去法解式$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$所需乘除法次数及加减法次数分别为

$$MD = n^3/3 + n^2 - n/3$$
$$AS = n(n-1)(2n+5)/6$$

目录

- 引言
- Guass消去法
- Guass主元素消去法
- Guass消去法的变形
- 向量和矩阵的范数
- 误差分析

Gauss消去法的局限

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

- 由Gauss消去法知道，在消元过程中可能出现$a_{kk}^{(k)} = 0$的情况，这时消去法将无法进行

- 即使在主元素$a_{kk}^{(k)} \neq 0$但很小时，用其作除数，也会导致其他元素数量级的严重增长和舍入误差的扩散，最后会使得计算解不可靠

例7.3

□ 求解方程组

$$\begin{bmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 \\ -2.000 & 1.072 & 5.643 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.000 \\ 2.000 \\ 3.000 \end{bmatrix}$$

用四位浮点数进行计算。精确解为

$$\boldsymbol{x}^* = (-0.4904, \quad -0.05104, \quad 0.3675)^{\mathrm{T}}$$

1. 用Gauss消去法求解

$$(\boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{b})$$

$$= \begin{bmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 & | & 1.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 & | & 2.000 \\ -2.000 & 1.072 & 5.643 & | & 3.000 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} m_{21} &= -1.000/0.001 = -1000 \\ m_{31} &= -2.000/0.001 = -2000 \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{x}^* = (-0.4904, \quad -0.05104, \quad 0.3675)^{\mathrm{T}}$$

例7.3（续）

$$\rightarrow \begin{bmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 & | & 1.000 \\ 0 & 2004 & 3005 & | & 1002 \\ 0 & 4001 & 6006 & | & 2003 \end{bmatrix} \quad m_{32} = 4001/2004 = 1.997$$

$$\rightarrow \begin{bmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 & | & 1.000 \\ 0 & 2004 & 3005 & | & 1002 \\ 0 & 0 & 5.000 & | & 2.000 \end{bmatrix}$$

- 计算解为

$$\bar{\boldsymbol{x}} = (-0.4000, \quad -0.09980, \quad 0.4000)^{\mathrm{T}}$$

- 显然，计算解 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 是一个很坏的结果，不能作为方程组的近似解
- 原因是在消元计算时用了小主元0.001，使得约化后的方程组元素数量级大大增长

例7.3（续）

$$\rightarrow \begin{bmatrix} 0.001 & 2.000 & 3.000 & | & 1.000 \\ 0 & 2004 & 3005 & | & 1002 \\ 0 & 0 & 5.000 & | & 2.000 \end{bmatrix}$$

- 经再舍入使得在计算第3行第3列的元素时发生了严重的相消情况（第3行第3列的元素舍入到第四位数字的正确值是5.922）

2. 交换行，避免绝对值小的主元作除数

$(\boldsymbol{A},\quad \boldsymbol{b})$

$$\xrightarrow{r_1 \leftrightarrow r_3} \begin{bmatrix} -2.000 & 1.072 & 5.643 & | & 3.000 \\ -1.000 & 3.712 & 4.623 & | & 2.000 \\ 0.001 & 2.000 & 3.000 & | & 1.000 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} m_{21} &= 0.5000 \\ m_{31} &= -0.0005 \end{aligned}$$

$$\boldsymbol{x}^* = (-0.4904,\quad -0.05104,\quad 0.3675)^{\mathrm{T}}$$

例7.3（续）

$$\rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ 0 & 3.176 & 1.801 & 0.5000 \\ 0 & 2.001 & 3.003 & 1.002 \end{array}\right] \quad m_{32} = 0.6300$$

$$\rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} -2.000 & 1.072 & 5.643 & 3.000 \\ 0 & 3.176 & 1.801 & 0.5000 \\ 0 & 0 & 1.868 & 0.6870 \end{array}\right]$$

- 得计算解为

$$\boldsymbol{x} = (-0.4900,\quad -0.05113,\quad 0.3678)^{\mathrm{T}} \approx \boldsymbol{x}^*$$

- 在采用Gauss消去法解方程组时，小主元可能产生麻烦，故应避免采用绝对值小的主元素$a_{kk}^{(k)}$

完全主元素消去法

- 对一般矩阵来说，最好每一步都选取系数矩阵（或消元后的低阶矩阵）中绝对值最大的元素作为主元素，以使Gauss消去法具有较好的数值稳定性
- 设方程组$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$的增广矩阵为

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1j_1} & \cdots & a_{1n} & | & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2j_1} & \cdots & a_{2n} & | & b_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & | & \vdots \\ a_{i_11} & a_{i_12} & \cdots & a_{i_1j_1} & \cdots & a_{i_1n} & | & b_{i_1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & | & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nj_1} & \cdots & a_{nn} & | & b_n \end{bmatrix}$$

完全主元素消去法（续）

1. 首先在$\boldsymbol{A}$中选取绝对值最大的元素作为主元素，例如$\left|a_{i_1 j_1}\right| = \max\limits_{1\le i,j\le n}\left|a_{ij}\right| \neq 0$，然后交换$\boldsymbol{B}$的第1行与第$i_1$行，第1列与第$j_1$列，经第一次消元计算得
$$(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) \to \left(\boldsymbol{A}^{(2)},\boldsymbol{b}^{(2)}\right)$$
2. 重复上述过程，设已完成第$k-1$步的选主元素、交换两行及交换两列、消元计算，$(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b})$约化为

$$\left(\boldsymbol{A}^{(k)},\boldsymbol{b}^{(k)}\right) = \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ & a_{22} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ & & \ddots & & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk} & \cdots & a_{kn} & b_k \\ & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nk} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array}\right].$$

完全主元素消去法（续）

3. 第k步选主元素（在$\boldsymbol{A}^{(k)}$右下角方框内选），即确定i_k, j_k使

$$\left|a_{i_k j_k}\right| = \max_{k \le i,j \le n} \left|a_{ij}\right| \ne 0$$

交换$\left(\boldsymbol{A}^{(k)}, \boldsymbol{b}^{(k)}\right)$第$k$行与$i_k$行元素，交换$\left(\boldsymbol{A}^{(k)}\right)$第$k$列与$j_k$列元素，将$a_{i_k j_k}$调到$(k,k)$位置，再进行消元计算

4. 持续上述过程，最后将原方程组化为

完全主元素消去法（续）

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

其中$y_1, y_2, \cdots, y_n$的次序为未知数$x_1, x_2, \cdots, x_n$调换后的次序

- 回代求解得

$$\begin{cases} y_n = b_n / a_{nn}, \\ y_i = \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} y_j \right) / a_{ii} \quad (i = n-1, \cdots, 2, 1) \end{cases}$$

算法1　完全主元素消去法

- 消元结果冲掉$\boldsymbol{A}$，乘数m_{ij}冲掉a_{ij}，计算结果$\boldsymbol{x}$冲掉常数项$\boldsymbol{b}$，使用整型数组$\mathrm{Iz}(n)$记录未知数$x_1, x_2, \cdots, x_n$的次序（下标），k表示消元次数

1. 对于$i = 1, 2, \cdots, n$，有$\mathrm{Iz}(i) \leftarrow i$；
   对于$k = 1, \cdots, n-1$，做到步6
2. 选主元素 $\left|a_{i_k j_k}\right| = \max\limits_{k \le i,j \le n} \left|a_{ij}\right|$
3. 如果$a_{i_k j_k} = 0$，则计算停止（这时$\det \boldsymbol{A} = 0$）
4. （1）如果$i_k = k$，则转（2）；否则换行：$a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j}$ $(j = k, k+1, \cdots, n)$，$b_k \leftrightarrow b_{i_k}$
   （2）如果$j_k = k$，则转步5；否则换列：$a_{ik} \leftrightarrow a_{i j_k}$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$，$\mathrm{Iz}(k) \leftrightarrow \mathrm{Iz}(j_k)$

算法1　完全主元素消去法（续）

5．计算乘数

$$a_{ik} \leftarrow m_{ik} = a_{ik}/a_{kk} \quad (i = k+1,\cdots,n)$$

6．消元计算

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

$$b_i \leftarrow b_i - m_{ik}b_k \quad (i = k+1,\cdots,n)$$

7．回代求解

（1）$b_n \leftarrow b_n/a_{nn}$

（2）对$i = n-1,\cdots,1$，$b_i \leftarrow \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}b_j\right)/a_{ii}$

8．调整未知数的次序

（1）对$i = 1,\cdots,n$，$a_{1,\mathrm{Iz}(i)} \leftarrow b_i$

（2）对$i = 1,\cdots,n$，$b_i \leftarrow a_{1i}$

列主元素消去法

- 完全主元素消去法在选主元素时要花费较多机器时间，而列主元素消去法仅考虑依次按列选主元素，然后换行使之变到主元位置上，再进行消元
- 设用列主元素消去法解$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$已完成$k-1$步计算

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

列主元素消去法（续）

- 第k步选主元素（在$\boldsymbol{A}^{(k)}$第k列方框内选），即确定i_k使

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

交换$\left(\boldsymbol{A}^{(k)}, \boldsymbol{b}^{(k)}\right)$第$k$行与$i_k$行元素，再进行消元计算

- 其余步骤与完全主元素消去法相同

□ 例7.3的方法2用的就是列主元素消去法

算法2 列主元素消去法

- 消元结果冲掉$\boldsymbol{A}$，乘数m_{ij}冲掉a_{ij}，计算结果$\boldsymbol{x}$冲掉常数项$\boldsymbol{b}$，行列式存放在$\det \boldsymbol{A}$，k表示消元次数

1. $\det \boldsymbol{A} \leftarrow 1$，对于$k = 1, \cdots, n-1$，做到步7
2. 按列选主元素$\left|a_{i_k k}\right| = \max\limits_{k \le i \le n} |a_{ik}|$
3. 如果$a_{i_k k} = 0$，则$\det \boldsymbol{A} \leftarrow 0$，计算停止
4. 如果$i_k = k$，则转步5；否则换行

$a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j}$ $(j = k, k+1, \cdots, n)$，$b_k \leftrightarrow b_{i_k}$，$\det \boldsymbol{A} \leftarrow -\det \boldsymbol{A}$

算法2 列主元素消去法（续）

5. 计算乘数m_{ik}

$$a_{ik} \leftarrow m_{ik} = a_{ik}/a_{kk} \quad (i = k+1, \cdots, n)(|m_{ik}| \le 1)$$

6. 消元计算

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

$$b_i \leftarrow b_i - m_{ik}b_k \quad (i = k+1, \cdots, n)$$

7. $\det \boldsymbol{A} \leftarrow a_{kk} \det \boldsymbol{A}$

8. 回代求解

$$b_n \leftarrow b_n/a_{nn}$$

$$b_i \leftarrow \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}b_j\right)/a_{ii} \quad (i = n-1, n-2, \cdots, 1)$$

9. $\det \boldsymbol{A} \leftarrow a_{nn} \det \boldsymbol{A}$

矩阵描述

- 下面用矩阵运算来描述列主元素消去法

$$\begin{cases} \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{I}_{1i_1}\boldsymbol{A}^{(1)} = \boldsymbol{A}^{(2)}, & \boldsymbol{L}_1\boldsymbol{I}_{1i_1}\boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{b}^{(2)} \\ \boldsymbol{L}_k\boldsymbol{I}_{ki_k}\boldsymbol{A}^{(k)} = \boldsymbol{A}^{(k+1)}, & \boldsymbol{L}_k\boldsymbol{I}_{ki_k}\boldsymbol{b}^{(k)} = \boldsymbol{b}^{(k+1)} \end{cases} \quad (7.3.1)$$

  - $\boldsymbol{L}_k$的元素满足$|m_{ik}| \le 1 \ \ (k = 1, 2, \cdots, n-1)$
  - $\boldsymbol{I}_{ki_k}$是初等排列矩阵（由交换单位矩阵$\boldsymbol{I}$的第k行和第i_k行得到）

- 利用式(7.3.1)得到

$$\boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{I}_{n-1,i_{n-1}} \cdots \boldsymbol{L}_2\boldsymbol{I}_{2i_2}\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{I}_{1i_1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^{(n)} = \boldsymbol{U}$$

  - $\boldsymbol{U}$为列主元素消去法得到的上三角矩阵

矩阵描述（续）

- 上式简记为

$$\widetilde{\boldsymbol{P}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}, \qquad \widetilde{\boldsymbol{P}}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}^{(n)}$$

其中 $\widetilde{\boldsymbol{P}} = \boldsymbol{L}_{n-1}\boldsymbol{I}_{n-1,i_{n-1}} \cdots \boldsymbol{L}_2\boldsymbol{I}_{2i_2}\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{I}_{1i_1}$

- $n = 4$时

$$\begin{aligned}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{A}^{(4)} &= \boldsymbol{L}_3\boldsymbol{I}_{3i_3}\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{I}_{2i_2}\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{I}_{1i_1}\boldsymbol{A} \\ &= \boldsymbol{L}_3\left(\boldsymbol{I}_{3i_3}\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{I}_{3i_3}\right)\left(\boldsymbol{I}_{3i_3}\boldsymbol{I}_{2i_2}\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{I}_{2i_2}\boldsymbol{I}_{3i_3}\right)\left(\boldsymbol{I}_{3i_3}\boldsymbol{I}_{2i_2}\boldsymbol{I}_{1i_1}\right)\boldsymbol{A} \\ &\equiv \widetilde{\boldsymbol{L}}_3\widetilde{\boldsymbol{L}}_2\widetilde{\boldsymbol{L}}_1\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}\end{aligned}$$

其中

$$\widetilde{\boldsymbol{L}}_1 = \boldsymbol{I}_{3i_3}\boldsymbol{I}_{2i_2}\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{I}_{2i_2}\boldsymbol{I}_{3i_3}, \qquad \widetilde{\boldsymbol{L}}_2 = \boldsymbol{I}_{3i_3}\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{I}_{3i_3},$$

$$\widetilde{\boldsymbol{L}}_3 = \boldsymbol{L}_3, \qquad \boldsymbol{P} = \boldsymbol{I}_{3i_3}\boldsymbol{I}_{2i_2}\boldsymbol{I}_{1i_1}$$

矩阵描述（续）

$$\boldsymbol{U}=\tilde{\boldsymbol{L}}_3\tilde{\boldsymbol{L}}_2\tilde{\boldsymbol{L}}_1\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}$$

- 可以证明，$\tilde{\boldsymbol{L}}_k$ $(k=1,2,3)$亦为单位下三角阵，其元素的绝对值不大于1
- 记 $$\boldsymbol{L}^{-1}=\tilde{\boldsymbol{L}}_3\tilde{\boldsymbol{L}}_2\tilde{\boldsymbol{L}}_1$$

  由上式可得 $$\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$$

  其中$\boldsymbol{P}$为排列矩阵，$\boldsymbol{L}$为单位下三角阵，$\boldsymbol{U}$为上三角阵

- 说明对$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$应用列主元素消去法相当于对$(\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b})$先进行一系列行交换后再对$\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{b}$应用Gauss消去法

矩阵描述（续）

- **定理7.5**（列主元素的三角分解定理）如果$\boldsymbol{A}$为非奇异矩阵，则存在排列矩阵$\boldsymbol{P}$，使

$$\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{LU},$$

其中$\boldsymbol{L}$为单位下三角阵，$\boldsymbol{U}$为上三角阵

  - 不再假设$\boldsymbol{A}$的顺序主子式$D_i \neq 0$

- 在算法2“列主元素消去法”中
  - $\boldsymbol{L}$元素存放在数组$\boldsymbol{A}$的下三角部分
  - $\boldsymbol{U}$元素存放在$\boldsymbol{A}$的上三角部分
  - 额外引入整型数组$\mathrm{Ip}(n)$，可以记录$\boldsymbol{P}$的情况

Gauss-Jordan消去法

- Gauss消去法始终是消去对角线下方的元素，现考虑一种消去对角线下方和上方元素的方法，称为Gauss-Jordan消去法
  - 设用Gauss-Jordan消去法已完成$k-1$步，于是$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$化为等价方程组$\boldsymbol{A}^{(k)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(k)}$，其中

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

Gauss-Jordan消去法（续）

- 第k步计算时，考虑对上述矩阵的第k行上、下都进行消元计算

1. 按列选主元素，即确定i_k使$|a_{i_k k}| = \max\limits_{k \le i \le n} |a_{ik}|$

2. 换行（当$i_k \ne k$）交换$(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b})$第$k$行与第$i_k$行元素

3. 计算乘数 $m_{ik} = -a_{ik}/a_{kk} \ (i = 1, 2, \cdots, n;\ i \ne k)$

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

（m_{ik}可保存在存放a_{ik}的单元中）

Gauss-Jordan消去法（续）

4. 消元计算

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

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

5. 计算主行

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

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

- 上述过程结束后，有

$$(\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}) \rightarrow \left(\boldsymbol{A}^{(k+1)},\boldsymbol{b}^{(k+1)}\right) \rightarrow \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & & & & \hat{b}_1 \\ & 1 & & & \hat{b}_2 \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & 1 & \hat{b}_n \end{array}\right]$$

Gauss-Jordan消去法（续）

- 说明用Gauss-Jordan消去法将$\boldsymbol{A}$约化为单位矩阵，计算解就在常数项位置得到，因此用不着回代求解
  - 该方法的计算量大约需要$n^3/2$次乘除法运算，比Gauss消去法计算量大
  - 用Gauss-Jordan消去法求一个矩阵的逆矩阵还是比较合适的
- Gauss消去法计算量

$$MD = n^3/3 + n^2 - n/3$$
$$AS = n(n-1)(2n+5)/6$$

Gauss-Jordan消去法（续）

- 定理7.6（Gauss-Jordan消去法求逆矩阵）设$\boldsymbol{A}$为非奇异矩阵，方程组$\boldsymbol{AX} = \boldsymbol{I}_n$的增广矩阵为$\boldsymbol{C} = (\boldsymbol{A}|\boldsymbol{I}_n)$。如果对$\boldsymbol{C}$应用Gauss-Jordan消去法为$(\boldsymbol{I}_n|\boldsymbol{T})$，则$\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{T}$
- 事实上，求$\boldsymbol{A}$的逆矩阵$\boldsymbol{A}^{-1}$，即求n阶矩阵$\boldsymbol{X}$，使$\boldsymbol{AX} = \boldsymbol{I}_n$，其中$\boldsymbol{I}_n$为单位矩阵
  - 将$\boldsymbol{X}$按列分块$\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_n), \boldsymbol{I} = (\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_n)$
  - 求解$\boldsymbol{AX} = \boldsymbol{I}_n$等价于求解$n$个方程组$\boldsymbol{Ax}_j = \boldsymbol{e}_j$（$j = 1, 2, \cdots, n$）
  - 因此可用Gauss-Jordan消去法求解$\boldsymbol{AX} = \boldsymbol{I}_n$

例7.4

- 用Gauss-Jordan消去法求

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 4 & 5\\ 3 & 5 & 6\end{bmatrix}$$

的逆矩阵A^{-1}

  - 应用Gauss-Jordan消去法，按列选主元素

$$C=\left[\begin{array}{ccc|ccc}1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0\\ 2 & 4 & 5 & 0 & 1 & 0\\ \boxed{3} & 5 & 6 & 0 & 0 & 1\end{array}\right]\xrightarrow{r_1\leftrightarrow r_3}\left[\begin{array}{ccc|ccc}\boxed{3} & 5 & 6 & 0 & 0 & 1\\ 2 & 4 & 5 & 0 & 1 & 0\\ 1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0\end{array}\right]$$

例7.4（续）

$$\xrightarrow{\text{第一次消元}} \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 5/3 & 2 & 0 & 0 & 1/3 \\ 0 & \boxed{2/3} & 1 & 0 & 1 & -2/3 \\ 0 & 1/3 & 1 & 1 & 0 & -1/3 \end{array}\right]$$

$\boldsymbol{c}_3$

$$\xrightarrow{\text{第二次消元}} \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & -1/2 & 0 & -5/2 & 2 \\ 0 & 1 & 3/2 & 0 & 3/2 & -1 \\ 0 & 0 & \boxed{1/2} & 1 & -1/2 & 0 \end{array}\right]$$

$\boldsymbol{c}_2$

$$\xrightarrow{\text{第三次消元}} \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & 1 & -3 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & -3 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & -1 & 0 \end{array}\right] = (\boldsymbol{I}_n | \boldsymbol{A}^{-1})$$

$\boldsymbol{c}_1$

例7.4（续）

- 小红框内为每次按列所选的主元素，且蓝框内

$$\boldsymbol{m}_1 = (m_{11}, m_{21}, m_{31})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{c}_3$$
$$\boldsymbol{m}_2 = (m_{12}, m_{22}, m_{32})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{c}_2$$
$$\boldsymbol{m}_3 = (m_{13}, m_{23}, m_{33})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{c}_1$$

- 为了节省内存单元，不必将单位矩阵存放起来，$\boldsymbol{c}_3$存放在$\boldsymbol{A}$的第1列位置，$\boldsymbol{c}_2$存放在$\boldsymbol{A}$的第2列位置，$\boldsymbol{c}_1$存放在$\boldsymbol{A}$的第3列位置
- 第k步消元时候，由$\boldsymbol{A}$的第k列

$$\boldsymbol{a}_k = (a_{1k}, \cdots, a_{kk}, \cdots, a_{nk})^{\mathrm{T}}$$

计算$\boldsymbol{m}_k = (-a_{1k}/a_{kk}, \cdots, 1/a_{kk}, \cdots, -a_{nk}/a_{kk})^{\mathrm{T}}$且冲掉$\boldsymbol{a}_k$

例7.4（续）

- 经消元计算，最后再调整一下列就可在$\boldsymbol{A}$的位置得到$\boldsymbol{A}^{-1}$

最后，在$\boldsymbol{A}$位置如何调整列呢？

- 事实上，在$\boldsymbol{A}$位置最后得到矩阵$\boldsymbol{P}\boldsymbol{A} \equiv \boldsymbol{A}_1$（其中$\boldsymbol{P}$为排列矩阵）的逆矩阵$\boldsymbol{A}_1^{-1}$
- 于是$\boldsymbol{A}^{-1} = (\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}_1)^{-1} = \boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{P}$
  - ✓ 意味着需要交换列

算法3
Gauss-Jordan列主元素方法求逆

- 计算结果$\boldsymbol{A}^{-1}$存放在原矩阵$\boldsymbol{A}$的数组中，用整型数组$\mathrm{Ip}(n)$记录主行，$\boldsymbol{A}$的行列式存放在$\det \boldsymbol{A}$，k表示消元次数

1. $\det \boldsymbol{A} \leftarrow 1$，对于$k = 1, \cdots, n-1$，做到步8
2. 按列选主元素$\left|a_{i_k k}\right| = \max\limits_{k \le i \le n} |a_{ik}|$

   $$c_0 \leftarrow a_{i_k k}, \qquad \mathrm{Ip}(k) \leftarrow i_k$$

   与算法1中Iz(·)的记录方式不一样（只是逐步记录）
3. 如果$c_0 = 0$，则计算停止（此时$\boldsymbol{A}$ 为奇异矩阵）
4. 如果$i_k = k$，则转步5；否则换行：

$$a_{kj} \leftrightarrow a_{i_k j} \ (j = k, k+1, \cdots, n), \qquad \det \boldsymbol{A} \leftarrow -\det \boldsymbol{A}$$

算法3
Gauss-Jordan列主元素方法求逆

5. $\det \boldsymbol{A} \leftarrow \det \boldsymbol{A} \cdot c_0$
6. 计算$h \leftarrow a_{kk} \leftarrow 1/c_0$，
   $a_{ik} \leftarrow m_{ik} = -a_{ik} \cdot h(i = 1,2,\cdots,n; i \neq k)$
7. 消元计算$a_{ij} \leftarrow a_{ij} + m_{ik}a_{kj}$ $\begin{pmatrix} i = 1,2,\cdots,n; i \neq k \\ j = 1,2,\cdots,n; j \neq k \end{pmatrix}$
8. 计算主行$a_{kj} \leftarrow a_{kj} \cdot h\ (j = 1,2,\cdots,n;\ \ j \neq k)$
9. 交换列对于$k = n-1, n-2, \cdots, 2, 1$

反向执行列交换

（1）$t = \mathrm{Ip}(k)$

（2）如果 $t \leq k$，则转（3）；否则换列$a_{ik} \leftrightarrow a_{it}$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$

（3）继续循环

避免重复交换