线性方程组的直接解法

Gauss消去法

直接三角分解方法

方程组的性态与误差估计

I. 在自然科学与工程技术中，很多问题的解决常常归结为解线性方程组的问题：

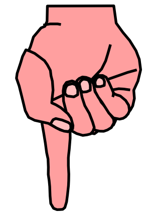
如电学中的网络问题，机械和建筑结构的设计和计算等。

电子计算机

II. 很多数值计算方法到最后也涉及到线性方程组的求解问题：

如求样条插值的M和m的关系式，解曲线拟合的法方程，求矩阵特征值的反幂法等问题。

线性方程组及方法分类



线性方程组

- 稠密和稀疏（按系数矩阵含零元多少分）
- 高阶和低阶（按阶数的高低分）
- 对称正定、对角占优等（按系数矩阵的形状性质分）

基 本 解 法

- 直接法（通过有限步计算得到精确解，适用于低阶、大型带型阵）
- 迭代法（通过逐次迭代逼近得到近似解，适用于大型稀疏、非带型阵）

对此方程组进行求解有两种方法：采用Cramer法则、消元法。

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

线性方程组的矩阵形式为 $A_{n\times n}x = b$

$$
A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots\cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots\cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}
$$

若$|A| \neq 0$,解存在且唯一.

Cramer(克莱姆)法则

定理：如果线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \quad\cdots \qquad \cdots \qquad \cdots \\ a_{n1}x_1 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

的系数行列式非零，即

$$|A| = \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \cdots & & \cdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} \neq 0$$

计算量大

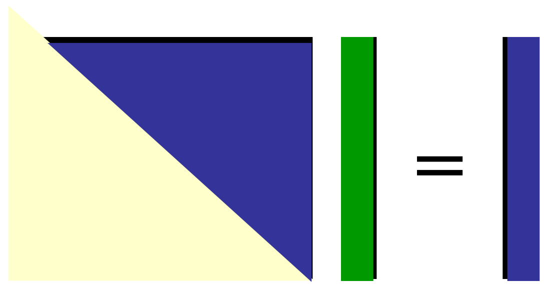
则方程组有唯一解：$x_1 = \frac{|A_1|}{|A|}, \cdots, x_n = \frac{|A_n|}{|A|}$

其中A_k是将 A 的第 k 列元素依次换成常数项$b_1,\ldots,b_n$得到的行列式。

对于20阶的线性方程组, 若用Cramer法则求解, 其乘、除运算次数为$9.7*10^{20}$, 用一亿次/秒的计算机, 要30.8万年！若用高斯消去法进行数值求解，乘、除运算只需约3060次。

Gauss消去法

思路 首先将A化为上三角阵 /* upper-triangular matrix */，再回代求解 /* backward substitution */。



一、 高斯顺序消去法

是一种古老的求解线性方程组的方法, 按自然顺序进行消元的方法.

例1 解方程组 $\begin{cases} 2x_1+x_2+x_3=7 \\ 4x_1+5x_2-x_3=11 \\ x_1-2x_2+x_3=0 \end{cases}$

解 **step1** 消元

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 7 \\ 4 & 5 & -1 & 11 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \end{array}\right] \xrightarrow[r_3-\frac{1}{2}r_1]{r_2-2r_1} \left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 7 \\ 0 & 3 & -3 & -3 \\ 0 & -2.5 & 0.5 & -3.5 \end{array}\right]$$

$$\xrightarrow{r_3-(-\frac{2.5}{3})r_2} \left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 7 \\ 0 & 3 & -3 & -3 \\ 0 & 0 & -2 & -6 \end{array}\right]$$

得同解方程组

$$\begin{cases} 2x_1+x_2+x_3=7 \\ 3x_2-3x_3=-3 \\ -2x_3=-6 \end{cases}$$

Step2 对上三角形方程进行**回代**求解, 得

同解方程组:

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 7 \\ \qquad 3x_2 - 3x_3 = -3 \\ \qquad\qquad -2x_3 = -6 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_3 = \dfrac{-6}{-2} = 3 \\ x_2 = (-3 + 3x_3)/3 = 2 \\ x_1 = (7 - x_2 - x_3)/2 = 1 \end{cases}$$

下面我们来一般性地讨论求解n阶线性方程组的**高斯顺序消去法**.

消元

令$A^{(0)} = A = (a_{ij}^{(0)})_{n\times n}$,$b^{(0)} = b = \begin{pmatrix} b_1^{(0)} \\ \vdots \\ b_n^{(0)} \end{pmatrix}$则(1)式变为$A^{(0)}x = b^{(0)}$

$$A^{(0)} = A = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(0)} & a_{n2}^{(0)} & \cdots & a_{nn}^{(0)} \end{pmatrix}, \quad b^{(0)} = b = \begin{pmatrix} b_1^{(0)} \\ \vdots \\ b_n^{(0)} \end{pmatrix}$$

Step 1： 设 $a_{11}^{(0)} \neq 0$，计算因子 $l_{i1} = a_{i1}^{(0)} / a_{11}^{(0)} \quad (i = 2, ..., n)$

将增广矩阵/* augmented matrix */ 第 i 行 $- \, l_{i1} \times$ 第1行，得到与(1)式等价的方程组

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

简记为$A^{(1)}x = b^{(1)}$,

其中$a_{ij}^{(1)} = a_{ij}^{(0)} - l_{i1}a_{1j}^{(0)}$,

$b_i^{(1)} = b_i^{(0)} - l_{i1}b_1^{(0)}$

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

Step 2： 一般第 k 次消元 $(1\leqslant k\leqslant n-1)$

设第 $k-1$ 步计算已完成，即已计算出与 (1)式等价的方程组 $A^{(k-1)}x=b^{(k-1)}$，其中 $A^{(k-1)}$ 具有形式

$$A^{(k-1)}=\begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{pmatrix}$$

设 $a_{kk}^{(k-1)}\neq 0$，以第 k 行为基础，将以后各行中的 $a_{ik}^{(k-1)}(i=k+1,\ldots,n)$ 化为 0.

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

然后用第i行减去第k行乘以l_{ik},即

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - l_{ik} a_{kj}^{(k-1)}, \qquad (j = k+1, \ldots, n)$$

$$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - l_{ik} b_k^{(k-1)} \qquad (i = k+1, k+2, \ldots, n)$$

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} \\ & & & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}$$

Step 3： 继续上述过程, 且设 $a_{ii}^{(i-1)} \neq 0(i=1,2,\ldots,n-1)$,直到完成第 n-1 次消元, 最后得到与 $A^{(0)}x=b^{(0)}$ 等价的三角形方程组 $A^{(n-1)}x=b^{(n-1)}$.

$$A^{(n-1)}x = b^{(n-1)} \qquad (2)$$

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \cdots & \mathrm{L} \\ & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \mathrm{M} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(1)} \\ \mathrm{M} \\ b_n^{(n-1)} \end{bmatrix}$$

将(1)式化为(2)式的过程称为消元过程.

Gauss消去法的消元过程算法

for $k = 1, 2, \mathrm{L}\ , n-1$

  for $i = k+1, k+2, \mathrm{L}\ , n$

$$a_{ik} = {a_{ik}}\Big/{a_{kk}} ;$$

  for $j = k+1, k+2\mathrm{L}\ , n$

$$a_{ij} = a_{ij} - a_{ik} a_{kj}$$

Gauss消去法工作量为 $\dfrac{2}{3} n^3 + O(n^2)$

回代 求解三角形方程组(2),得求解公式:

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

$$(k = n-1, n-2, \cdots, 1)$$

定理 若A的所有顺序主子式 /* determinant of leading principal submatrices */ 均不为0，则高斯消元无需换行即可进行到底，得到唯一解。

注：事实上，只要 A 非奇异，即 A^{-1} 存在，则可通过逐次消元及行交换，将方程组化为三角形方程组，求出唯一解。

高斯顺序消去法流程图

输入方程阶数 n，增广矩阵 $a(n, n+1), k = 1, D = 1$

$a_{kk} = 0$

F：$i = k+1, \ldots, n,\quad a_{ik} = a_{ik} / a_{kk}$

T：输出失败信息，停

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

$D = D \bullet a_{kk}$

k=k+1

消元过程

$a_{nn} = 0$

F：$D = D \bullet a_{nn}$

T：输出失败信息，停

$$a_{k,n+1} = (a_{k,n+1} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{kj} a_{jn}) / a_{kk}, \quad k = n, n-1, \ldots, 1$$

回代过程

输出 $a_{k,n+1}$（即 x_k）$(k = 1, \ldots, n)$，系数行列式 D，结束

定义　称第k步消元时保留的第k个方程为主方程,其首项系数$a_{kk}^{(k-1)}$为第k步的主元.

顺序消去法的缺点为:

1. 当主元$a_{kk}^{(k-1)}=0$时, 消元过程不能继续进行;

2. 当$a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$时, 虽然消元过程可以进行, 但若$a_{kk}^{(k-1)} \approx 0$时, 计算$l_{ik}=a_{ik}^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)}$时, 会出现很小的数作除数的现象,使舍入误差增大,导致解的严重失真.

二、主元素消去法

例2　解方程组 $\begin{cases} 0.00001x_1 + x_2 = 1.00001 \\ 2x_1 + x_2 = 3 \end{cases}$

/* 精确解为 $x_1 = 1, x_2 = 1$ */

用Gauss消去法计算：

$$\begin{pmatrix} 0.1000\times 10^{-4} & 0.1000\times 10 & 0.1000\times 10 \\ 0.2000\times 10 & 0.1000\times 10 & 0.3000\times 10 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_2-2\times 10^5 r_1}$$

$$\begin{pmatrix} 0.1000\times 10^{-4} & 0.1000\times 10 & 0.1000\times 10 \\ 0 & -0.2000\times 10^{6} & -0.2000\times 10^{6} \end{pmatrix}$$

回代求解 $x_2 = 1, x_1 = 0$ ？ 若将1,2两行互换得

$$\begin{pmatrix} 0.2000\times 10 & 0.1000\times 10 & 0.3000\times 10 \\ 0.1000\times 10^{-4} & 0.1000\times 10 & 0.1000\times 10 \end{pmatrix} \xrightarrow{r_2-0.5\times 10^{-5} r_1}$$

$$\begin{pmatrix} 0.2000\times 10 & 0.1000\times 10 & 0.3000\times 10 \\ 0 & 0.1000\times 10 & 0.1000\times 10 \end{pmatrix} \Rightarrow \quad x_2 = 1, \quad x_1 = 1$$

由上例可以看出,为提高算法的数值稳定性, 应选取绝对值尽可能大的元素作主元.

按列部分选主元的消去法也称列主元消去法。

设已用列主元消去法完成$k-1$步消元$(1 \le k \le n-1)$

方程组变为$A^{(k-1)}x = b^{(k-1)}$,此时增广矩阵为

$$(A^{(k-1)}, b^{(k-1)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1n}^{(0)} & b_1^{(0)} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & \cdots & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ & & \ddots & & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} & b_k^{(k-1)} \\ & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} & b_n^{(k-1)} \end{pmatrix}$$

在进行第k步消元时,在方框内选取绝对值最大的元素$a_{i_k,k}^{(k-1)}$,作为主元,即 $|a_{i_k,k}^{(k-1)}| = \max\limits_{k \le i \le n} |a_{ik}^{(k-1)}| \ne 0$

交换i_k行与k行元素,然后继续消元.