附录 A 应用举例

A.3 应用: Gauss 消去法求解线性方程组

首先看一个例子.

例 A.1 求解下面的线性方程组

$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 + 2x_3 = -2 \\ 2x_1 - 3x_2 - 3x_3 = 4 \\ 4x_1 + x_2 + 6x_3 = 3. \end{cases}$$

解. 利用 Gauss 消去法求解: 先写出增广矩阵, 然后通过初等变换将其转换为阶梯形, 最后通过回代求解. 具体过程可写为

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 2 & -3 & -3 & 4 \\ 4 & 1 & 6 & 3 \end{bmatrix} \xrightarrow[③-①\times 4]{②-①\times 2} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 9 & -2 & 11 \end{bmatrix} \xrightarrow{③-②\times 9} \begin{bmatrix} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 0 & 61 & -61 \end{bmatrix}$$

通过回代求解可得

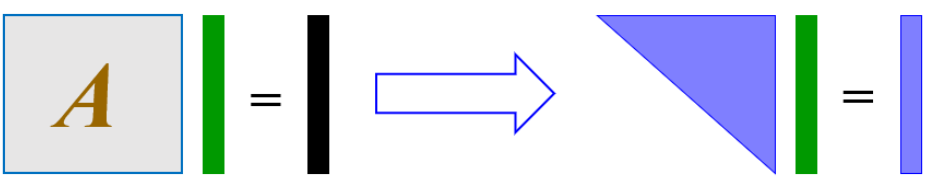
$$\begin{cases} x_3 = -1, \\ x_2 = 8 + 7x_3 = 1, \\ x_1 = -2 + 2x_2 - 2x_3 = 2. \end{cases}$$

□

将以上的做法推广到一般线性方程 $Ax = b$, 即

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

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:



A.3.1 Gauss 消去过程

本节给出 Gauss 消去过程的详细执行过程, 写出相应算法, 并编程实现.

记 $A^{(1)}=[a_{ij}^{(1)}]_{n\times n}=A$, $b^{(1)}=[b_1^{(1)},b_2^{(1)},\dots,b_n^{(1)}]^{\intercal}=b$, 即

$$a_{ij}^{(1)}=a_{ij},\quad b_i^{(1)}=b_i,\quad i,j=1,2,\dots,n.$$

第 1 步: 消第 1 列.

设 $a_{11}^{(1)}\neq 0$, 计算 $m_{i1}=\dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$, $i=2,3,\dots,n$. 对增广矩阵进行 $n-1$ 次初等变换, 即依次将增广矩阵的第 i 行减去第 1 行的 m_{i1} 倍, 将新得到的矩阵记为 $A^{(2)}$, 即

$$A^{(2)}=\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{array}\right],$$

其中

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

第 2 步: 消第 2 列.

设 $a_{22}^{(2)}\neq 0$, 计算 $m_{i2}=\dfrac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$, $i=3,4,\dots,n$. 依次将 $A^{(2)}$ 的第 i 行减去第 2 行的 m_{i2} 倍, 将新得到的矩阵记为 $A^{(3)}$, 即

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

其中

$$a_{ij}^{(3)}=a_{ij}^{(2)}-m_{i2}a_{2j}^{(2)},\quad b_i^{(3)}=b_i^{(2)}-m_{i2}b_2^{(2)},\quad i,j=3,4,\dots,n.$$

依此类推, 经过 $k-1$ 步后, 可得新矩阵 $A^{(k)}$:

$$A^{(k)}=\left[\begin{array}{ccccc|c} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & \ddots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(3k)} & b_n^{(k)} \end{array}\right],$$

第 k 步: 消第 k 列.

设 $a_{kk}^{(k)}\neq 0$, 计算 $m_{ik}=\dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$, $i=k+1,k+2,\dots,n$. 依次将 $A^{(k)}$ 的第 i 行减去第 k 行的 m_{ik} 倍, 将新得到的矩阵记为 $A^{(k+1)}$, 矩阵元素的更新公式为

$$a_{ij}^{(k+1)}=a_{ij}^{(k)}-m_{ik}a_{kj}^{(k)},\quad b_i^{(k+1)}=b_i^{(k)}-m_{ik}b_k^{(k)},\quad i,j=k+1,k+2,\dots,n. \tag{A.1}$$

这样, 经过 $n-1$ 步后, 即可得到一个上三角矩阵 $A^{(n)}$:

$$A^{(n)} = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{array}\right].$$

最后, 回代求解

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

✍ **注记:** 由上面的求解过程可知, Gauss 消去法能顺利进行下去的充要条件是 $a_{ii}^{(i)} \neq 0, i = 1, 2, \ldots, n$, 这些元素被称为 **主元**.

定理 A.1 *所有主元都不为零的充要条件是 A 的所有顺序主子式都不为零.*

推论 A.2 *Gauss 消去法能顺利完成的充要条件是 A 的所有顺序主子式都不为零.*

Gauss 消去法的运算量

下面统计整个 Gauss 消去法的乘除运算的次数.

在第 k 步中, 我们需要计算

$$\begin{aligned} m_{ik} &= a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}, \quad i = k+1, \ldots, n \quad \to \quad n-k \text{ 次} \\ a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ij}^{(k)} - m_{ik}a_{kj}^{(k)}, \quad i = k+1, \ldots, n \quad \to \quad (n-k)^2 \text{ 次} \\ b_i^{(k+1)} &= b_i^{(k)} - m_{ik}b_k^{(k)}, \quad i = k+1, \ldots, n \quad \to \quad n-k \text{ 次} \end{aligned}$$

所以整个消去过程的乘除运算为

$$\sum_{k=1}^{n-1} 2(n-k) + (n-k)^2 = \sum_{\ell=1}^{n-1} 2\ell + \ell^2 = n(n-1) + \frac{n(n-1)(2n-3)}{6}.$$

易知, 回代求解过程的乘除运算为

$$1 + \sum_{i=1}^{n-1} n - i + 1 = \frac{n(n+1)}{2}.$$

所以整个 Gauss 消去法的乘除运算为

$$\frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{n}{3}.$$

同理, 也可统计出, Gauss 消去法中的加减运算次数为

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

✍ **注记：** 评价算法的一个主要指标是执行时间，但这依赖于计算机硬件和编程技巧等，因此直接给出算法执行时间是不太现实的. 所以我们通常是统计算法中算术运算 (加减乘除) 的次数. 在数值算法中，大多仅仅涉及加减乘除和开方运算. 一般地，加减运算次数与乘法运算次数具有相同的量级，而除法运算和开方运算次数具有更低的量级.

✍ **注记：** 为了尽可能地减少运算量，在实际计算中，数，向量和矩阵做乘法运算时的先后执行次序为：先计算数与向量的乘法，然后计算矩阵与向量的乘法，最后才计算矩阵与矩阵的乘法.

A.3.2 选主元 Gauss 消去法

我们知道，只要系数矩阵 A 非奇异，则线性方程组就存在唯一解，但 Gauss 消去法却不一定有效.

例 A.2 求解线性方程组 $Ax = b$，其中 $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$，$b = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$.

由于主元 $a_{11} = 0$，因此 Gauss 消去法无法顺利进行下去.

在实际计算中，即使主元都不为零，但如果主元的值很小，由于舍入误差的原因，也可能会给计算结果带来很大的误差.

解决这个问题的一个有效方法就是选主元，具体做法就是：在执行 Gauss 消去过程的第 k 步之前，插入下面的选主元过程.

① 选取 **列主元**：$\left|a_{i_k,k}^{(k)}\right| = \max\limits_{k\le i\le n}\left\{\left|a_{i,k}^{(k)}\right|\right\}$

② 交换：如果 $i_k \neq k$，则交换第 k 行与第 i_k 行，相应地，也要交换 b 的第 k 个与第 i_k 个元素.

上面选出的 $a_{i_k,k}^{(k)}$ 就称为 **列主元**. 加入这个选主元过程后，就不会出现主元为零的情况 (除非 A 是奇异的). 由此，Gauss 消去法就不会失效. 这种带选主元的 Gauss 消去法就称为 **列主元 Gauss 消去法** 或 **部分选主元 Gauss 消去法** (Gaussian Elimination with Partial Pivoting, GEPP). 这是当前求解中小规模线性方程组的首选方法.