4.1 Gauss消去法

第4章 线性方程组的直接解法

教学目的

1. 掌握解线性方程组的高斯消去法、高斯选主元素消去法；
2. 掌握用直接三角分解法解线性方程组的方法；
3. 了解解对称正定矩阵线性方程组的平方根法与解三对角线方程组的追赶法；
4. 掌握向量，矩阵范数，矩阵的条件数等概念及方程组的扰动分析。

教学重点及难点

重点是

1. 解线性方程组的高斯消去法、高斯选主元素消去法；
2. 直接三角分解法解线性方程组的方法；
3. 向量，矩阵范数，矩阵的条件数等概念及方程组的扰动分析；

难点是方程组的扰动分析。

第4章 线性方程组的直接解法

实际中，存在大量的解线性方程组的问题。很多数值方法到最后也会涉及到线性方程组的求解问题：如样条插值的**M**和**m**关系式，曲线拟合的法方程，方程组的**Newton**迭代等问题。

对线性方程组：

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

或者： $Ax = b$

我们有**Gram**法则：当且仅当 $\det(A) \neq 0$ 时，有唯一的解，而且解为：

$$x_i = \frac{D_i}{D}, D = \det(A), D_i = \det\begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1i-1} & b_1 & a_{1i+1} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{ni-1} & b_n & a_{ni+1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

但Gram法则不能用于计算方程组的解，如n＝100，10^{33}次/秒的计算机要算10^{120}年

解线性方程组的方法可以分为2类：

①直接法：准确，可靠，理论上得到的解是精确的

②迭代法：速度快，但有误差

对于中小型方程组，常用直接解法。从本质上来说，直接方法的原理是找一个可逆矩阵M，使得MA是一个上三角阵，这一过程一般称为“消元”过程，消元之后再进行“回代”，即求解MAx=Mb。本章讨论Gauss消去法及其变形，以及一些情况下的特殊方法，最后进行误差分析。

本章讲解直接法

4.1 Gauss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

（n＋1）n/2次运算

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

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**.**

4.1.1 Gauss消去法的计算过程

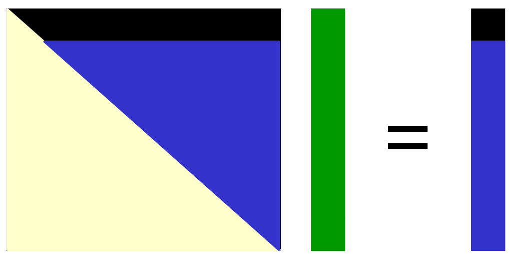
我们把方程组**Ax=b**写成

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 = a_{1,n+1} \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 = a_{2,n+1} \\ \qquad \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n = a_{n,n+1} \end{cases} \tag{4.1.1}$$

设方程组**(4,.1.1)**的系数矩阵**A**非奇异,记

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} \quad (i = 1,2,\cdots,n;\ j = 1,2,\cdots,n) \quad (A^{(1)}, b^{(1)}) = (A, b)$$

思路 首先将A化为上三角阵，再回代求解 。



，这样,方程组(4.1.1)又可写成 $\boldsymbol{A}^{(1)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(1)}$ 。消元过程就是要按确定的计算过程对方程组进行初等行变换,将方程组化为上三角方程组.

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

步骤如下：

第一步消元:假设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$,作初等行变换运算

$$\text{第1行} \times \frac{-a_{i1}}{a_{11}} + \text{第}i\text{行}, i = 2, \cdots, n$$

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

运算量： ***(n-1)*(1+n)***

第二步：$第2行\times\dfrac{-a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}+第i行, i=3,\cdots,n$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} & b_n^{(3)} \end{pmatrix}$$

运算量： ***(n-2)*(1+n-1)=(n-2)n***

第**k**步消元**:**设消去法已进行**k-1**步**,**得到方程组 $A^{(k)}x = b^{(k)}$ **,**此时对应的增广矩阵是

类似的做下去，我们有：

第**k**步：$$第k行\times\frac{-a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}+第i行, i=k+1,\cdots,n$$

运算量：***(n－k)*(1＋n－k＋1)=(n－k)(n－k＋2)***

n－1步以后，我们可以得到变换后的矩阵为：

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{pmatrix} \quad \textbf{(4.1.4)}$$

这就完成了消元过程。

因此，总的运算量为：

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+2)$$

加上 解上述上三角阵的运算量**(n+1)n/2**，总共为：

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

因为A非奇异，所以可求解上三角方程组（4.1.4），通过逐次代入计算可得方程组的解，其计算公式为

$$\begin{cases} x_n = a_{n,n+1}{}^{(n)} / a_{nn}{}^{(n)}, \\ x_i = (a_{i,n+1}{}^{(i)} - \sum_{j=k+1}^{n} a_{n,n+1}{}^{(n)} x_j / a_{ii}{}^{(i)}, i = n-1, n-2, \cdots, 1. \end{cases} \qquad (4.1.5)$$

求解上式的过程称为回代过程。

以上由消去过程和回代过程合起来求解（4.1.1）的过程就称为Gauss消去法，或称为顺序Gauss消去法。

如果我们用Cramer法则计算（4.1.1）的解，要计算n+1个阶行列式，并作n次除法。如果用子式展开的方法计算行列式，则计算每个行列式有n！次乘法。所以用Cramer法则大约需要（n+1）！次乘除法运算。例如，当n=10时，约需乘除法运算，而用Gauss消去法只需430次乘除法运算。

例4.1 用Gauss消去法解方程组

$$\begin{cases} x_1 + \frac{2}{3}x_2 + \frac{1}{3}x_3 = 2, \\ \frac{9}{20}x_1 + x_2 + \frac{11}{20}x_3 = 2, \\ \frac{2}{3}x_1 + \frac{1}{3}x_2 + x_3 = 2. \end{cases}$$

解 第一步消元，令 $l_{21} = 9/20, l_{31} = 2/3$，得增广矩阵

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & 2 \\ 0 & \frac{7}{10} & \frac{2}{5} & \frac{11}{10} \\ 0 & -\frac{1}{9} & \frac{7}{9} & \frac{2}{3} \end{bmatrix}.$$

第二步消元，令 $l_{32}=-10/63$，得增广矩阵

$$\begin{bmatrix} 1 & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & 2 \\ 0 & \frac{7}{10} & \frac{2}{5} & \frac{11}{10} \\ 0 & 0 & \frac{53}{63} & \frac{53}{63} \end{bmatrix}.$$

利用回代公式（4.1.5）依次得到 $x_3=1, x_2=1, x_1=1.$

在这个例子中我们写出的是分数运算的结果。如果在计算机上进行计算，系数矩阵和中间结果都用经过舍入的机器数表示，中间结果和方程组的解都会有误差。

4.1.2 矩阵的三角分解

从上面的消元过程可以看出，消元过程能顺利进行的重要条件是主元素 $a_{kk}^{k}\neq 0, k=1,2,\cdots,n-1.$。若用 A_k 表示矩阵A的k阶顺序主子阵，则有下面的定理。

定理4.1 $a_{ii}^{(i)} \neq 0, (i=1,2,\cdots,k)$. 全不为零的充要条件是A的顺序主子式 $D_i = \det A_i \neq 0, i = 1,2,\cdots k$, 其中 $k \le n$ 。

证 先证必要性设 $a_{ii}^{(i)} \neq 0, (i=1,2,\cdots,k)$.，则可进行k-1步消元程。显然 $a_{11}^{(1)} = D_1 \neq 0$ ，对 $i \ge 2$ ，由于每步进行的初等变换不改变顺序主子式的值，所以第i-1步消元后有

$$D_i = \begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1i}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2i}^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & a_{ii}^{(i)} \end{vmatrix} = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{ii}^{(i)} \neq 0.$$

用归纳法证充分性。k=1时，命题显然成立。设命题对m-1成立。现设 $D_i = \det A_i \neq 0, i = 1,2,\cdots m$, 由归纳假设有 $a_{ii}^{(i)} \neq 0, i = 1,2,\cdots,m-1.$ Gauss消去法可进行第m-1步，矩阵A变换为

$$A^{(m)} = \begin{bmatrix} A_{11}^{(m)} & A_{12}^{(m)} \\ 0 & A_{22}^{(m)} \end{bmatrix},$$

其中$A_{11}^{(m)}$是对角元素为 $a_{11}^{(1)},a_{22}^{(2)},\cdots,a_{m-1,m-1}^{(m-1)},a_{mm}^{(m)}$ 的上三角阵。因 $A_{11}^{(m)}$是通过消元过程由A逐步经初等变换得到的，A的m 阶顺序主子式等于$A^{(m)}$的m 阶顺序主子式，即 $a_{11}^{(1)},a_{22}^{(2)},\cdots,a_{m-1,m-1}^{(m-1)},a_{mm}^{(m)}$ 由 $D_m \neq 0$ 可推出 $a_{mm}^{(m)} \neq 0$ ，定理得证。

定理4.2 在方程组$Ax=b$中，A非奇异，则当A的所有顺序主子式均不为零时，可用Gauss消去法求解出方程组的解。

特别地，若A为对称正定矩阵，则由对称正定矩阵的性质可知，对原方程组不必作任何处理，可直接Gauss消去法求解方程组。

下面将消元过程用矩阵运算表示。对第k步，利用（4.1.3）给出的乘数 l_{ik} ，记 $l^{(k)}=(0,\cdots,0,l_{k+1,k},\cdots,l_{nk})^T$ ，又记 $e_k=(0,\cdots,0,1,0,\cdots,0)^T$ 为第k 个分量为1的单位向量，令

$$L_k = I - l^{(k)} e_k^{(T)} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{nk} & & & 1 \end{bmatrix}, \qquad (4.1.6)$$

不难验证

$$(I-l^{(k)}e_k{}^T)(I+l^{(k)}e_k{}^T)=(I+l^{(k)}e_k{}^T)(I-l^{(k)}e_k{}^T)=I$$

即 $L_k{}^{-1}=I+l^{(k)}e_k{}^T$

利用矩阵（4.1.6），第k步消元过程相当于

$$L_k(A^{(k)},b^{(k)})=(A^{(k+1)},b^{(k+1)}).$$

这样经过n-1步消元过程得到

$$L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1A^{(1)}=A^{(n)},$$
$$L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1b^{(1)}=b^{(n)},$$

这里，$A^{(n)}$ 是上三角阵。记 $U=A^{(n)}$，又记

$$L=(L_{n-1}L_{n-2}\cdots L_1)^{-1}=\begin{bmatrix}1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1\end{bmatrix},$$

这种矩阵称为单位下三角阵。L的对角线以下各元素就是各步消元过程的乘数。最后我们得到

$$A=LU \qquad (4.1.7)$$

称该式为A的LU分解。

定理4.3 矩阵 $A\in R^{n\times n}$，若其顺序主子式 $D_i(i=1,2,\cdots,n)$ 皆非零，则存在唯一的单位下三角阵L和上三角阵U，使A=LU。

证 以上的分析已证明了A可作LU分解，下面证明分解的唯一性。设A有两个分解式 $A=LU=\tilde{L}\tilde{U}$,

其中，$L,\tilde{L}$ 都是单位下三角阵，$U,\tilde{U}$ 都是上三角阵。因A非奇异，则 $L,\tilde{L},U,\tilde{U}$ 都可逆。A左乘 L^{-1}，右乘 $\tilde{U}^{-1}$即得 $U\tilde{U}^{-1}=L^{-1}\tilde{L}$.

因 $\tilde{U}^{-1}$ 仍为上三角阵，$U\tilde{U}^{-1}$ 也是上三角阵，同理是单位下三角阵，所以只能有

$$U\tilde{U}^{-1}=L^{-1}\tilde{L}=I,$$

即 $U=\tilde{U},L=\tilde{L}$.。定理得证

分解式（4.1.7）也称为Doolittle分解。由（4.1.7）式可求出A的行列式，即

$$\det A = a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{nn}^{(n)}.$$

若将上三角U写成 $U = D\tilde{U}$，其中D是对角阵，$\tilde{U}$ 是单位上三角阵，则有

$$A = LD\tilde{U} \qquad (4.1.8)$$

称该式为A的LDU分解，显然，这种分解具有唯一性。

4.1.3 主元素消去法

在以上的Gauss消去法中，消元过程能进行的条件是主元素 $a_{ii}^{(i)} \neq 0, i = 1, 2, \cdots, n-1$。例如，若 $a_{11} = 0$，消去过程的第1步就不能进行。有时虽然 $a_{ii}^{(i)} \neq 0$，但是 $\left|a_{ii}^{(i)}\right|$ 很小，这时计算过程的舍入误差会导致消去法数值不稳定，以致结果不可靠。

例4.2 用三位十进制浮点运算求解

$$\begin{cases} 1.00\times 10^{-5} x_1 + 1.00 x_2 = 1.00, \\ 1.00 x_1 + 1.00 x_2 = 2.00. \end{cases}$$

解 这个方程组的准确解显然应接近 $(1.00,1.00)^T$.但是系数 a_{11}是个小主元，如果用Gauss消去法求解，则有

$$l_{21}=\frac{a_{21}}{a_{11}}=1.00\times10^5, a_{22}^{(2)}=a_{22}-l_{21}a_{12}=1.00-1.00\times10^5,$$

$$a_{23}^{(2)}=a_{23}-l_{23}a_{13}=2.00-1.00\times10^5.$$

在三位十进制运算的限制下，得到 $x_2=a_{23}^{(2)}/a_{22}^{(2)}=1.00$，代回第1个方程得 $x_1=0$，这个显然不是正确的解。因为用小主元 a_{11}做除法，使乘数 l_{21} 是个大数，在 $a_{22}^{(2)}$ 的计算中，a_{22}的值完全被掩盖了。

如果先把两个方程的次序交换，再用Gauss消去法，就不会出现上述问题，解得$x_1=1.00, x_2=1.00$，这就是列主元素消去法的思想。

列主元素消去法也称按列部分主元的消去法。一般地，在完成了第k-1步消元运算后，在 $(A^{(k)},b^{(k)})$ 的第k 列元素 $a_{kk}^{(k)}$之下的所有元素中选一个绝对值最大的元素作为主元素，即若

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

则以 $a_{kk}^{(k)}$ 为主元素，这里 $i_k \geq k$,且 $A^{(k)}$由于非奇异，有 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$.这样，$|l_{ik}| = |a_{ik}^{(k)}| / |a_{i_k,k}^{(k)}| \leq 1$ 有达到控制舍入误差的作用。

选出主元素后，若则进行顺序Gauss消去法的第k步若 $i_k > k$ ，则将 $(A^{(k)}, b^{(k)})$ 的第 i_k 行与第k行交换，然后进行消元运算。

完成了n-1步主元，换行与消元运算后，得到 $A^{(n)}x = b^{(n)}$，这是与原方程组等价的方程组, $A^{(n)}$是一个上三角阵,再代回求解.这就是列主元素消去法的计算过程.

除了列主元素消去法外,还有一种完全主元素消去法.在其过程的第k步 $(k \geq 1)$,不是按列来选主元,而是在 $A^{(k)}$ 右下角的n-k+1阶子阵中选主元 $a_{i_k,j_k}^{(k)}$,即

$$|a_{i_k,j_k}^{(k)}| = \max_{k \leq i,j \leq n} |a_{ij}^{(k)}|.$$

然后将 $(A^{(k)}, b^{(k)})$ 的第 i_k行与第k行交换将第 k 列与第k列交换,同时将自变量 x_k 与 x_{jk} 的位置交换并记录自变量的排列次序.直到消去法完成后,再按记录恢复自变量为自然次序.完全主元法比列主元法

运算量大得多,由于列主元法的舍如误差一般已较小,所以在实际计算中多用列主元法.

例4.3 用列主元素消去法解方程组Ax=b,计算过程中五位有效数字进行运算,其中

$$(A,b)=\begin{bmatrix} -0.002 & 2 & 2 & 0.4 \\ 1 & 0.78125 & 0 & 1.3816 \\ 3.996 & 5.5625 & 4 & 7.4178 \end{bmatrix}.$$

解 记 $(A^{(1)},b^{(1)})=(A,b)$. 第一步选列主元为 $a_{31}{}^{(1)}=3.996$ ，交换第1行与第3行，再消元计算得

$$(A^{(2)},b^{(2)})=\begin{bmatrix} 3.996 & 5.5625 & 4 & 7.4178 \\ 0 & -0.61077 & -1.0010 & -0.47471 \\ 0 & 2.0028 & 2.0020 & 0.40371 \end{bmatrix}.$$

第二步选列主元为 $a_{32}{}^{(2)}=2.0028$,交换第2行与第3行，再消元计算得

$$(A^{(3)},b^{(3)})=\begin{bmatrix} 3.996 & 5.5625 & 4 & 7.4178 \\ 0 & 2.0028 & 2.0020 & 0.40371 \\ 0 & 0 & -0.39047 & -0.35159 \end{bmatrix}.$$

消去过程至此结束。回代计算依次得到解

$$x_3=0.90043, x_2=-0.69850, x_1=1.9273$$

这个例题的精确解是

$$x=(1.92730,-0.698496,0.900423)^T,$$

而用不选住主元的顺序**Gauss**消去法，则解得

$$x=(1.9300,-0.68695,0.88888)^T,$$

这个结果误差较大，这是因为消去法的第**1**步中，$a_{11}^{(1)}$按绝对值比其他元素小很多所引起的。从此例看到列主元素消去法是有效的方法。

下面讨论矩阵的含换行的三角分解，即列主元法中消去过程的矩阵表示。一般的，将矩阵**A**的第**i**行与第**j**行交换，其结果相当于矩阵**A**左乘一个初等排列矩阵 I_{ij} ，即 $I_{ij}A$ ，这里 I_{ij} 是单位阵I交换第**i**行与第**j**行后所得的矩阵，不难验证

$$I_{ij}=I_{ji},I_{ij}^{-1}=I_{ij},\det I_{ij}=-1.$$

若矩阵A右乘 I_{ij}得 $I_{ij}A$ ，其结果是将A的第**i**列与第**j**列交换后所得的矩阵。

我们把若干个初等排列矩阵的乘积称作排列矩阵，其结果是将单位矩阵经过若干次交换所得的矩阵。

列主元素消去法的每一步，一般是先按列选主元再交换行，然后进行消元计算，所以有

$$A^{(k+1)}=L_kI_{k,i_k}A^{(k)},$$

其中 L_k 为**(4.1.6)**所示， I_{k,i_k} 是初等排列阵，i_k 是第**k**步列选主元所在的行号。如果第**k**步不需换行，则 $i_k=k,I_{kk}=I.$

列主元素消去法的消元过程进行n-1步之后得到上三角阵 $A^{(n)}$，记

$$U = A^{(n)} = L_{n-1} I_{n-1,i_{n-1}} \cdots L_2 I_{2,i_2} L_1 I_{1,i_1} A. \qquad (4.1.9)$$

这就是列主元法消去过程的矩阵表示。由于列主元的选取，我们可知 L_k 及 L_k^{-1} 原始的绝对值不大于1。

定理4.4 设A为非奇异矩阵，则存在排列阵，单位小三角矩阵L和上三角阵U，使$PA=LU$.

证 从(4.1.9)可得

$$A = I_{1,i_1} L_1^{-1} I_{2,i_2} L_2^{-1} \cdots I_{n-1,i_{n-1}} L_{n-1}^{-1} U,$$

其中U为上三角阵。令排列阵

$$P = I_{n-1,i_{n-1}} \cdots I_{2,i_2} I_{1,i_1},$$

则利用 $I_{ij}^{-1} = I_{ij}$ 有

$$\begin{aligned} PA &= (I_{n-1,i_{n-1}} \cdots I_{2,i_2} L_1^{-1} I_{2,i_2} \cdots I_{n-1,i_{n-1}}) \bullet I_{n-1,i_{n-1}} \cdots I_{3,i_3} L_2^{-1} I_{3,i_3} \cdots I_{n-1,i_{n-1}} L_{n-1}^{-1} U \\ &= (I_{n-1,i_{n-1}} \cdots I_{2,i_2} L_1^{-1} I_{2,i_2} \cdots I_{n-1,i_{n-1}}) \\ &\bullet (I_{n-1,i_{n-1}} \cdots I_{3,i_3} L_2^{-1} I_{3,i_3} \cdots I_{n-1,i_{n-1}} L_{n-1}^{-1}) \cdots (I_{n-1,i_{n-1}} L_{n-2}^{-1} I_{n-1,i_{n-1}}) L_{n-1}^{-1} U. \end{aligned}$$

由此，若记

$$\tilde{L}_k = I_{n-1,i_{n-1}} \cdots I_{k+1,i_{k+1}} L_k^{-1} I_{k+1,i_{k+1}} \cdots I_{n-1,i_{n-1}}, k = 1,2,\cdots,n-2$$

$$\tilde{L}_{n-1} = L_{n-1}^{-1},$$

$$L = \tilde{L}_1 \tilde{L}_2 \cdots \tilde{L}_{n-1}$$

则得**PA=LU**。由初等排列阵的性质 $\tilde{L}_k$ 是一个单位下三角阵，**L**也是一个单元下三角阵。定理得证。

4.1.4 Gauss-Jordan消元法

考虑**Gauss**消去法的一种修正：消去对角线下方和上方的元素。称这种方法为**Gauss-Jordan**消去法。设用**Gauss-Jordan**消去法已完成**k-1**步，得到与方程$Ax=b$等价的方程组 $A^{(k)}x = b^{(k)}$此时对应的增广矩阵是

$$
(A^{(k)},b^{(k)})=\begin{bmatrix}
1 & & & a_{1k} & \cdots & a_{1n} & a_{1n+1} \\
 & \ddots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & 1 & a_{k-1,k} & \cdots & a_{k-1,n} & a_{k-1,n+1} \\
 & & & a_{kk} & \cdots & a_{kn} & a_{k,n+1} \\
 & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & & a_{nk} & \cdots & a_{nn} & a_{n,n+1}
\end{bmatrix},
$$

这里，略去了矩阵元素的上标。在第k步计算时，考虑对上述矩阵地k列中的第k行上，下都进行消元计算。若用列主元素消去法，仍然是第k列元素 a_{kk} 之下的所以元素中选一个绝对值最大的元素做为主元素，即

$$
|a_{i_k,k}|=\max_{k\le i\le n}|a_{ik}|.
$$

但是，将第k行与第行交换后，要通过住行将第k列的第 $i(i=1,\cdots,k-1,$ $k+1,\cdots,n)$ 个元素化为零，再将主行的对角线上元素化为1。最后得 $(A^{(k+1)},b^{(k+1)})$，这里，$A^{(n+1)}$ 是单位矩阵，$b^{(n+1)}$ 就是计算解。

可见，Gauss-Jordan消去法用不着回代求解，其计算量大约需要 $n^3/2$ 次乘除法运算，要比Gauss消去法的计算量大但用Gauss-Jordan消去法求一个矩阵的逆矩阵是很合适的。

定理4.5 设A为为n阶非奇异矩阵，方程组$Ax=I$的增广矩阵为C=（A，I）。如果对C用Gauss-Jordan消去法化为（I，T），则 $T=A^{-1}$.

证 设 $A^{-1}=X=(\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n)$,则 $AX=I, A\alpha_j=e_j, j=1,2,\cdots,n$
这里，e_j为单位矩阵I的第j列，用Gauss-Jordan消去法解方程组 $Ax_j=e_j$,其解在C中I的第j列，即为T的第j列，即 $\alpha_j=Te_j$.因此 $T=(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n)=X=A^{-1}$.定理得证.

例4.4 用Gauss-Jordan消去法求矩阵

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

的逆矩阵。

解 用列主元素消去法有

$$C=C^{(1)}=(A,I)=\begin{bmatrix}1&2&3&1&0&0\\2&4&5&0&1&0\\3&5&6&0&0&1\end{bmatrix},$$

$$C^{(2)}=\begin{bmatrix}1&5/3&0&0&0&1/3\\0&2/3&1&0&1&-2/3\\0&1/3&1&1&0&-1/3\end{bmatrix},$$

$$C^{(3)}=\begin{bmatrix}1&0&-1/2&0&-5/2&2\\0&1&3/2&0&3/2&-1\\0&0&1/2&1&-1/2&0\end{bmatrix},$$

$$C^{(4)}=\begin{bmatrix}1&0&0&1&-3&2\\0&1&0&-3&3&-1\\0&0&1&2&-1&0\end{bmatrix}=(I,A^{-1}).$$

在实际计算中，为了节省内存单元，单位矩阵不必存放。在上例中，可将$C^{(2)}$的最后一列放在**A**第**I**列，将$C^{(3)}$的第**5**列存放在**A**的第**2**列，将$C^{(4)}$的第**4**列存在**A**的第**3**列。一般地，第**k**步消元时，可将**A**的第**k**列 $a_k=(a_{1k},\cdots,a_{kk},\cdots,a_{nk})^T$

用向量

$$l_k=\left(-\frac{a_{1k}}{a_{kk}},\cdots,-\frac{a_{k-1,k}}{a_{kk}},\frac{1}{a_{kk}},-\frac{a_{k+1,k}}{a_{kk}},\cdots,\frac{a_{nk}}{a_{kk}}\right)^T$$

取代。最后再调整一下列就可以在**A**的位置得到A^{-1}。实际上，在

A的位置最后得到的矩阵 $\boldsymbol{PA}=\tilde{\boldsymbol{A}}$ 是的逆矩阵 $\tilde{A}^{-1}$，其中**P**为行变换形成的排列阵，于是 $\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{P}$.