第5章 线性方程组的数值解法

本章主要讨论线性方程组的数值解法,包括直接法和迭代法。

n 阶线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \tag{5.1}$$

的矩阵形式为

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{5.2}$$

其中

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

分别称为式(5.2)的系数矩阵、解向量和右端向量。若 $\boldsymbol{A}$ 可逆,则式(5.2)存在唯一解。本章恒设该条件成立。

在第1章中曾经提到,Cramer 法则只适用于方程组的阶数 n 很小的情况。因此,研究解线性方程组的数值方法就显得很重要了。线性方程组的数值解法大致可分为两类。

(1) 直接法。假设计算过程中没有舍入误差,经过有限步算术运算就可求得方程组精确解的方法,称为直接法。但在实际计算中舍入误差是不可避免的,因此这种方法求得的也是近似解。直接法是解低阶稠密矩阵方程组的有效方法。

(2) 迭代法。从解向量的某一组初始近似值出发,按照一个迭代公式逐步逼近精确解的方法,称为迭代法。它具有存储量小、算法简单等优点,但存在收敛性及收敛速度问题。迭代法是解大型稀疏矩阵方程组的重要方法,也常用于提高已知近似解的精度。

线性方程组的简单形式

5.1　高斯消去法

5.1.1　三角形方程组的解法

系数矩阵为上三角阵或下三角阵的线性方程组称为三角形方程组，即

$$\begin{cases} u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n = b_1 \\ \qquad\quad u_{22}x_2 + \cdots + u_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad\qquad\quad \vdots \\ \qquad\qquad\qquad u_{nn}x_n = b_n \end{cases} \tag{5.3}$$

其矩阵形式为

$$\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{b} \quad (\text{当 } i > j \text{ 时 } u_{ij} = 0)$$

或

$$\begin{cases} l_{11}x_1 \qquad\qquad\qquad\qquad = b_1 \\ l_{21}x_1 + l_{22}x_2 \qquad\qquad = b_2 \\ \qquad \vdots \\ l_{n1}x_1 + l_{n2}x_2 + \cdots + l_{nn}x_n = b_n \end{cases} \tag{5.4}$$

其矩阵形式为

$$\boldsymbol{Lx} = \boldsymbol{b} \quad (\text{当 } i < j \text{ 时 } l_{ij} = 0)$$

三角形方程组易于求解。以上三角形方程组(5.3)为例，其有且仅有一组解的充要条件是 $u_{ii} \neq 0 (i = 1, 2, \cdots, n)$。从最后一个方程开始，逐次向上回代可得

$$\begin{cases} x_n = b_n / u_{nn} \\ x_{n-1} = (b_{n-1} - u_{n-1,n}x_n) / u_{n-1,n-1} \\ \qquad \vdots \\ x_1 = (b_1 - u_{12}x_2 - u_{13}x_3 - \cdots - u_{1n}x_n) / u_{11} \end{cases} \tag{5.5}$$

这个过程称为回代过程。规定当 $m > n$ 时 $\sum_{m}^{n} f(\cdot) = 0$（$f(\cdot)$ 代表任意表达式，没有具体式子），则式(5.5)可归结为

$$x_i = (b_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{ik}x_k) / u_{ii} \quad (i = n, n-1, \cdots, 1) \tag{5.6}$$

对于式(5.4)，类似地有

$$x_i = \left(b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}x_k\right) / l_{ii} \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

5.1.2　高斯消去法

高斯消去法手算

高斯消去法的基本思想：对于一般的线性方程组，将其消元为同解的上三角形方程组，然后回代，即可得到原方程组的解。先看一个简单的例子，用以说明高斯消去法的计算过程。

【例 5.1】 解方程组

$$\begin{array}{l} ① \\ ② \\ ③ \end{array}\qquad \begin{cases} x_1+x_2+x_3=6 \\ 2x_1+4x_2-x_3=7 \\ 2x_1-2x_2+x_3=1 \end{cases}$$

解消元:

第一步:计算①×(−2)+②、①×(−2)+③,得

$$\begin{array}{l} ① \\ ④ \\ ⑤ \end{array}\qquad \begin{cases} x_1+x_2+x_3=6 \\ \qquad 2x_2-3x_3=-5 \\ \;-4x_2-x_3=-11 \end{cases}$$

第二步:计算④×2+⑤,得到与原方程组同解的三角形方程组

$$\begin{array}{l} ① \\ ④ \\ ⑥ \end{array}\qquad \begin{cases} x_1+x_2+x_3=6 \\ \quad 2x_2-3x_3=-5 \\ \qquad\quad -7x_3=-21 \end{cases}$$

回代:

由⑥得 $x_3=3$。

将 x_3 的值代入④得 $x_2=2$。

将 x_2、x_3 的值代入①得 $x_1=1$。

高斯消去法的算法

即原方程组的解为

$$\begin{cases} x_1=1 \\ x_2=2 \\ x_3=3 \end{cases}$$

对于一般的 n 阶线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$,即

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

首先进行消元:

第一步(第一次消元):

设 $a_{11}\neq 0$,令

$$l_{i1}=a_{i1}/a_{11}\quad (i=2,3,\cdots,n)$$

用($-l_{i1}$)乘式(5.1)的第一个方程并加到第 i 个方程上($i=2,3,\cdots,n$),得到同解方程组

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{bmatrix} \tag{5.7}$$

记为 $\boldsymbol{A}^{(1)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(1)}$，其中

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

$$b_i^{(1)}=b_i-l_{i1}b_1\quad(i=2,3,\cdots,n)$$

第二步(第二次消元)：

设 $a_{22}^{(1)}\neq 0$，令

$$l_{i2}=a_{i2}^{(1)}/a_{22}^{(1)}\quad(i=3,4,\cdots,n)$$

用$(-l_{i2})$乘式(5.7)的第二个方程加到第 i 个方程上($i=3,4,\cdots,n$)，得到同解方程组

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix}$$

记为 $\boldsymbol{A}^{(2)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(2)}$，其中

$$a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-l_{i2}a_{2j}^{(1)}\quad(i,j=3,4,\cdots,n)$$

$$b_i^{(2)}=b_i^{(1)}-l_{i2}b_2^{(1)}\quad(i=3,4,\cdots,n)$$

一般地，经过 $k-1$ 次消元后，得到方程组(5.1)的同解方程组为

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & a_{1,k+1} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & a_{2,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & a_{k+1,k}^{(k-1)} & a_{k+1,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k-1)} \\ & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & & & a_{nk}^{(k-1)} & a_{n,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_k^{(k-1)} \\ b_{k+1}^{(k-1)} \\ \vdots \\ b_n^{(k-1)} \end{bmatrix}\tag{5.8}$$

第 k 步(第 k 次消元)：

设 $a_{kk}^{(k-1)}\neq 0$(称 $a_{kk}^{(k-1)}$ 为主元素)，令

$$l_{ik}=a_{ik}^{(k-1)}/a_{kk}^{(k-1)}\quad(i=k+1,k+2,\cdots,n)\tag{5.9}$$

用$(-l_{ik})$乘式(5.8)的第 k 个方程并加到第 i 个方程上($i=k+1,k+2,\cdots,n$)，得到同解方程组为

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & a_{1,k+1} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2k}^{(1)} & a_{2,k+1}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & & a_{kk}^{(k-1)} & a_{k,k+1}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} \\ & & & & \vdots & & \vdots \\ 0 & & & & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_k^{(k-1)} \\ b_{k+1}^{(k)} \\ \vdots \\ b_n^{(k)} \end{bmatrix}$$

记为 $\boldsymbol{A}^{(k)}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}^{(k)}$，其中

$$a_{ij}^{(k)}=a_{ij}^{(k-1)}-l_{ik}a_{kj}^{(k-1)}\quad(i,j=k+1,k+2,\cdots,n)\tag{5.10}$$

$$b_i^{(k)}=b_i^{(k-1)}-l_{ik}b_k^{(k-1)}\quad(i=k+1,k+2,\cdots,n)\tag{5.11}$$

如此继续下去,完成 $n-1$ 次消元后,方程组(5.1)即化成同解的上三角形方程组

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

于是就可以进行回代,求出原方程组(5.1)的解

$$x_i=\left(b_i^{(i-1)}-\sum_{k=i+1}^{n}a_{ik}^{(i-1)}x_k\right)/a_{ii}^{(i-1)}\quad(i=n,n-1,\cdots,1)\tag{5.12}$$

记 $a_{ij}^{(0)}=a_{ij}(i,j=1,2,\cdots,n)$。易见,在上述消元过程中,每次都是顺序地选取主对角线上的元素 $a_{kk}^{(k-1)}$ 作为主元素,所以高斯消去法又称为顺序高斯消去法。

定理 5.1 线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 能用高斯消去法求解的充要条件是系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的各阶顺序主子式 $\boldsymbol{D}_k\neq0(k=1,2,\cdots,n)$,即

$$\boldsymbol{D}_1=a_{11}\neq0$$

$$\boldsymbol{D}_k=\begin{vmatrix}a_{11} & \cdots & a_{1k}\\ \vdots & & \vdots\\ a_{k1} & \cdots & a_{kk}\end{vmatrix}\neq0\quad(k=2,3,\cdots,n)$$

证明从略。

在计算机上实现时,常把方程组的系数矩阵及右端向量存放在一个 n 行、$n+1$ 列的二维数组中。考虑到在消元过程中,算出 $a_{ij}^{(k)}$ 后,$a_{ij}^{(k-1)}$ 就没有保留的必要了,所以可让 $a_{ij}^{(k)}$ 仍占用 $a_{ij}^{(k-1)}$ 所在单元。另外,消元为 0 的元素就不必计算了。

高斯消去法算法:

(1) 消元过程:

当 $k=1,2,3,\cdots,n-1$ 时,对 $i=k+1,k+2,\cdots,n$,做

① $l=a_{ik}/a_{kk}$。

② 对 $j=k+1,k+2,\cdots,n+1$,做 $a_{ij}-la_{kj}\Rightarrow a_{ij}$。

(2) 回代过程:

对 $k=n,n-1,\cdots,1$,做 $\left(a_{k,n+1}-\sum\limits_{j=k+1}^{n}a_{kj}x_j\right)/a_{kk}\Rightarrow x_k$。

由于计算机完成一次乘(除)法花费的时间远远多于做一次加(减)法的时间,而且按照统计规律,在一个算法中,乘除法与加减法的运算次数大体相当,所以通常用所做乘除法的次数来衡量算法的运算量。

由式(5.9)~式(5.11)可知,在第 k 次消元中,做了 $(n-k)^2+2(n-k)$ 次乘除法运算,于是 $n-1$ 次消元所做乘除法的次数为

$$\sum_{k=1}^{n-1}[(n-k)^2+2(n-k)]=\frac{n^3}{3}+\frac{n^2}{2}-\frac{5n}{6}$$

而由式(5.12)可知,回代过程所做乘除法的次数为

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

故高斯消去法的运算量为

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

5.1.3　主元素消去法

在高斯消去法消元过程中，若出现主元素 $a_{kk}^{(k-1)}$ 等于 0 的情况，消去法将无法进行；若主元素 $a_{kk}^{(k-1)}$ 不等于 0，但其绝对值很小，则由第 1 章的讨论可知，用它作为除数将会导致计算结果有很大误差，甚至于完全失真。

【例 5.2】　解线性方程组。

$$\begin{matrix}①\\②\end{matrix}\qquad\begin{cases}0.00001x_1+x_2=1.00001\\2x_1+x_2=3\end{cases}$$

【解】　准确解是 $(1,1)^{\mathrm{T}}$。现设所用计算机为四位浮点数计算机。

(1) 方程组输入计算机后成为

$$\begin{bmatrix}0.1000\times10^{-4} & 0.1000\times10^{1}\\0.2000\times10^{1} & 0.1000\times10^{1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.1000\times10^{1}\\0.3000\times10^{1}\end{bmatrix}$$

用高斯消去法对其消元后得

$$\begin{bmatrix}0.1000\times10^{-4} & 0.1000\times10^{1}\\0 & -0.2000\times10^{6}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.1000\times10^{1}\\-0.2000\times10^{6}\end{bmatrix}$$

回代得 $x_2=1,x_1=0$，即为$(0,1)^{\mathrm{T}}$，解严重失真。

(2) 若先交换方程组的两个方程①、②的顺序，成为

$$\begin{bmatrix}0.2000\times10^{1} & 0.1000\times10^{1}\\0.1000\times10^{-4} & 0.1000\times10^{1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.3000\times10^{1}\\0.1000\times10^{1}\end{bmatrix}$$

用高斯消去法对其消元后得

$$\begin{bmatrix}0.2000\times10^{1} & 0.1000\times10^{1}\\0 & 0.1000\times10^{1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.3000\times10^{1}\\0.1000\times10^{1}\end{bmatrix}$$

回代得 $x_2=1,x_1=1$，即为$(1,1)^{\mathrm{T}}$，得到了准确解。

为何(1)、(2)两种解法计算结果相差如此之大？原因就在于解法(1)进行消元时用了绝对值较小的主元素 $a_{11}=0.00001$ 作为除数，因此带来了较大的误差；而解法(2)交换方程顺序后，用绝对值较大的主元素作为除数，便具有了较好的数值稳定性。

主元素消去法的基本思想是在逐次消元时总是选绝对值最大的元素作为主元素，常用的主元素消去法有列主元素消去法和全主元素消去法。列主元素消去法简称列主元法，就是在第 k 次消元之前在 $a_{ik}^{(k-1)}(i=k,k+1,\cdots,n)$ 中选出绝对值最大的元素，经行交换，将它置于 $a_{kk}^{(k-1)}$ 处再进行消元。全主元素消去法简称全主元法，就是在第 k 次消元之前在 $a_{ij}^{(k-1)}(i,j=k,k+1,\cdots,n)$ 中选出绝对值最大的元素，经行交换、列交换，将它置于 $a_{kk}^{(k-1)}$ 处，再进行消元。

可以证明，只要系数矩阵非奇异，列主元法在计算过程中的舍入误差是基本能控制的，且其选主元的工作量相对较小，所以列主元法最常用。现举一例，用以说明列主元高

斯消去法的计算过程。

列主元高斯消去法

【例 5.3】 用列主元高斯消去法解线性方程组。

$$\begin{cases} x_1 - x_2 + x_3 = -4 \\ 3x_1 - 4x_2 + 5x_3 = -12 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 = 11 \end{cases}$$

【解】 消元过程列表如表 5-1 所示。

表 5-1 消元过程列表

序号	x_1	x_2	x_3	右端项	说明
(1)	1	−1	1	−4	
(2)	$\boxed{3}$	−4	5	−12	在第一列上选主元 3
(3)	1	1	2	11	
(4)	$\boxed{3}$	−4	5	−12	(1)↔(2)
(5)	1	−1	1	−4	计算 $l_{21}=1/3=0.33333$
(6)	1	1	2	11	$l_{31}=1/3=0.33333$
(7)	3	−4	5	−12	(4)×($-l_{21}$)+(5)
(8)	0	0.33332	−0.66665	0.000040	(4) ×($-l_{31}$)+(6)
(9)	0	$\boxed{2.33332}$	0.33335	14.99996	在第二列的子列上选主元 2.33332
(10)	3	−4	5	−12	
(11)	0	$\boxed{2.33332}$	0.33335	14.99996	(8)↔(9) 计算 $l_{32}=0.33332/2.33332=0.14285$
(12)	0	0.33332	−0.66665	0.00004	
(13)	3	−4	5	−12	
(14)	0	2.33332	0.33335	14.999960	(11)×($-l_{32}$)+(12)
(15)	0	0	−0.71427	−2.14270	

回代得 $\begin{cases} x_1=-0.99972 \\ x_2=6.00002 \\ x_3=2.99985 \end{cases}$，精确解是 $\begin{cases} x_1=-1 \\ x_2=6 \\ x_3=3 \end{cases}$。

列主元高斯消去法算法：

(1) 消元过程：

对于 $k=1,2,\cdots,n-1$，做

① 选主元(即确定 r，使得 $|a_{rk}|=\max\limits_{k\leqslant i\leqslant n}|a_{ik}|$)。

$k\Rightarrow r$。对 $i=k+1,k+2,\cdots,n$，若 $|a_{rk}|<|a_{ik}|$，则 $i\Rightarrow r$。

② 若 $a_{rk}=0$(说明系数矩阵奇异)，则输出奇异信息，然后结束。

③ 若 $r\neq k$，则交换增广矩阵的第 k 行和第 r 行，即对 $j=k,k+1,\cdots,n+1$，做 $a_{kj}\Leftrightarrow a_{rj}$。

④ 对 $i=k+1,k+2,\cdots,n$，计算 $l=a_{ik}/a_{kk}$。

对 $j=k+1,k+2,\cdots,n+1$，做 $a_{ij}-la_{kj}\Rightarrow a_{ij}$。

(2) 回代过程：

对于 $k=n,n-1,\cdots,1$，做 $\left(a_{k,n+1}-\sum_{j=k+1}^{n}a_{kj}x_j\right)/a_{kk}\Rightarrow x_k$。

列主元高斯消去法在高斯消去法的基础上增加了选主元及行交换的操作，而运算次数并无改变，故其运算量仍约为 $\frac{n^3}{3}$。

直接法在计算过程中不可避免地存在舍入误差，所以应对所求解进行偏差校验，即将 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 代回原方程组。

$E_i=\left|b_i-\sum_{j=1}^{n}a_{ij}x_j\right|(i=1,2,\cdots,n)$ 称为第 i 个方程的偏差，$E=\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n}E_i$ 称为方程的最大偏差，用以校验解的可靠性。

5.1.4　用列主元高斯消去法求行列式值

列主元高斯消去法实际上就是对矩阵进行了两种初等变换：一种是对换两行的位置；另一种是将某行元素乘以同一数后加到另一行对应元素上。前者使行列式值变号，后者不改变行列式值。系数矩阵经消元后成为一上三角阵，而三角阵的行列式的值等于其主对角线元素之积，故可用列主元高斯消去法求行列式的值。下面通过一个例子来说明其求解过程。

【例 5.4】　求 $|A|=\begin{vmatrix}1&-1&1\\3&-4&5\\1&1&2\end{vmatrix}$ 的值。

【解】　$\begin{bmatrix}1&-1&1\\3&-4&5\\1&1&2\end{bmatrix}\xrightarrow[①\leftrightarrow②]{\text{选主元}}\begin{bmatrix}3&-4&5\\1&-1&1\\1&1&2\end{bmatrix}$

$$\xrightarrow[③-①\times0.33333]{②-①\times0.33333}\begin{bmatrix}3&-4&5\\0&0.33332&-0.66665\\0&2.33332&0.33335\end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[②\leftrightarrow③]{\text{选主元}}\begin{bmatrix}3&-4&5\\0&2.33332&0.33335\\0&0.33332&-0.66665\end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{③-②\times0.14285}\begin{bmatrix}3&-4&5\\0&2.33332&0.33335\\0&0&-0.71427\end{bmatrix}$$

于是 $|A|=(-1)^2\times(3)\times(2.33332)\times(-0.71427)\approx-4.99986$（进行了两次行交换，故乘以 $(-1)^2$）。

易见，在用列主元高斯消去法消元过程中就可把系数矩阵行列式的值同时求出来。程序中在进入消元之前，将系数矩阵行列式值的初值 d 赋为 1；在消元过程中，每进行一次行交换，便将 $-d$ 赋给 d；消元结束后，将 d 与主对角线元素 $a_{ii}(i=1,2,\cdots,n)$ 累乘即可得到系数矩阵行列式的值。

5.2 高斯-若尔当消去法

5.2.1 高斯-若尔当消去法简介

高斯-若尔当消去法是高斯消去法的一种变形。高斯消去法将对角线下方的元素消元为 0,若同时将对角线上方的元素也消元为 0,且将对角元皆化为 1,即将方程组(5.1)化成如下对角形方程组:

高斯-若尔当消去法

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$$

则无须回代就可得到方程组(5.1)的解:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$$

这种消去法称为高斯-若尔当消去法,也称为无回代的高斯消去法。

在实际计算中,常采用列主元高斯-若尔当消去法。下面用一个例子来说明该方法的计算过程。

【例 5.5】 用列主元高斯-若尔当消去法解线性方程组

$$\begin{cases} x_1 - x_2 + x_3 = -4 \\ 3x_1 - 4x_2 + 5x_3 = -12 \\ x_1 + x_2 + 2x_3 = 11 \end{cases}$$

【解】

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -4 \\ 3 & -4 & 5 & -12 \\ 1 & 1 & 2 & 11 \end{bmatrix} \xrightarrow[\text{①}\leftrightarrow\text{②}]{\text{选主元 } 3} \begin{bmatrix} 3 & -4 & 5 & -12 \\ 1 & -1 & 1 & -4 \\ 1 & 1 & 2 & 11 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{将主元 3 化为 1}} \begin{bmatrix} 1 & -1.33333 & 1.66667 & -4 \\ 1 & -1 & 1 & -4 \\ 1 & 1 & 2 & 11 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[\text{③}-\text{①}]{\text{②}-\text{①}} \begin{bmatrix} 1 & -1.33333 & 1.66667 & -4 \\ 0 & 0.33333 & -0.66667 & 0 \\ 0 & 2.33333 & 0.33333 & 15 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[\text{②}\leftrightarrow\text{③}]{\text{选主元 } 2.33333} \begin{bmatrix} 1 & -1.33333 & 1.66667 & -4 \\ 0 & 2.33333 & 0.33333 & 15 \\ 0 & 0.33333 & -0.66667 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{将主元 2.33333 化为 1}}\begin{bmatrix}1 & -1.33333 & 1.66667 & -4\\0 & 1 & 0.14286 & 6.42858\\0 & 0.33333 & -0.66667 & 0\end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[\text{③}-0.33333\times\text{②}]{\text{①}+1.33333\times\text{②}}\begin{bmatrix}1 & 0 & 1.85715 & 4.57142\\0 & 1 & 0.14286 & 6.42858\\0 & 0 & 0.71429 & -2.14284\end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{将主元 0.71429 化为 1}}\begin{bmatrix}1 & 0 & 1.85715 & 4.57142\\0 & 1 & 0.14286 & 6.42858\\0 & 0 & 1 & 3.00000\end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow[\text{②}-0.14286\times\text{③}]{\text{①}-1.85715\times\text{③}}\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & -1.00003\\0 & 1 & 0 & 6.00000\\0 & 0 & 1 & 3.00000\end{bmatrix}$$

于是解为$\begin{cases}x_1=-1.00003\\x_2=6.00000\\x_3=3.00000\end{cases}$（精确解是$\begin{cases}x_1=-1\\x_2=6\\x_3=3\end{cases}$）。

列主元高斯-若尔当消去法算法（存储情况与高斯消去法类似）：

对 $k=1,2,\cdots,n$：

(1) 按列选主元，即确定 r 使 $|a_{rk}|=\max\limits_{k\leqslant i\leqslant n}|a_{ik}|$。

(2) 若 $a_{rk}=0$（说明系数矩阵奇异），则输出奇异信息，然后结束。

(3) 若 $r\neq k$，则交换增广矩阵的第 k 行和第 r 行，即

对 $j=k,k+1,\cdots,n+1$，做 $a_{kj}\Leftrightarrow a_{rj}$。

(4) 将主元 a_{kk} 化为 1。

对 $j=k+1,k+2,\cdots,n+1$，做 $a_{kj}/a_{kk}\Rightarrow a_{kj}$。

(5) 消元。

当 $i=1,2,\cdots,n$ 时，若 $i\neq k$，则对 $j=k+1,k+2,\cdots,n+1$，做 $a_{ij}-a_{ik}a_{kj}\Rightarrow a_{ij}$。

算法完成后，增广矩阵的第 $n+1$ 列即为原方程组的解。

可以看出，高斯-若尔当消去法的消元过程比高斯消去法略复杂，但省去了回代过程。它的运算量约为$\frac{n^3}{2}$，大于高斯消去法。因此，用其求解线性方程组不见得最好，不过用它求逆矩阵却有方便之处。

5.2.2　逆矩阵的计算

用列主元高斯-若尔当消去法求矩阵的逆实际上就是线性代数中学过的初等变换方法求逆的一种规范化算法。下面通过一个例子来说明其计算过程。

【例 5.6】　求 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & -1 & 0\\2 & 2 & 3\\-1 & 2 & 1\end{bmatrix}$的逆矩阵。