

第二讲 线性方程组的直接解法

— Gauss 消去法与 LU 分解

- 1 Gauss 消去过程
- 2 矩阵 LU 分解
- 3 列主元 Gauss 消去法与 PLU 分解

Gauss 消去法

Gauss 消去法的基本思想是消元.

早在 2000 年前, 中国古代学者就提出了消元思想 (记载在公元初《九章算术》方程章中), 后来 Newton, Lagrange, Gauss, Jacobi 等都对此做过研究.

我们目前采用的算法描述方式是十九世纪三十年代后期才形成的.

 L.N. Trefethen, Numerical Analysis, *Princeton Companion to Mathematics*, 2008.

 J. F. Grcar, Mathematicians of Gaussian Elimination, *Notices of the AMS*, 2011.

一个例子

例 求解下面的线性方程组

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

Gauss 消去法: 先写出增广矩阵, 然后通过初等变换将其转换为阶梯形

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 2 & -3 & -3 & 4 \\ 4 & 1 & 6 & 3 \end{array} \right] \xrightarrow[\textcircled{3}-\textcircled{1} \times 4]{\textcircled{2}-\textcircled{1} \times 2} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 9 & -2 & 11 \end{array} \right] \xrightarrow{\textcircled{3}-\textcircled{2} \times 9} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & -2 & 2 & -2 \\ 0 & 1 & -7 & 8 \\ 0 & 0 & 61 & -61 \end{array} \right]$$

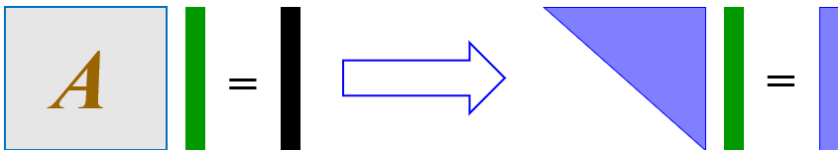
通过回代求解可得

$$x_3 = -1, \quad x_2 = 8 + 7x_3 = 1, \quad x_1 = -2 + 2x_2 - 2x_3 = 2.$$

推广到一般线性方程

[illegible]

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:



高斯消去法是求解线性方程组的经典算法，它在当代数学中有着非常重要的地位和价值，是线性代数的重要组成部分。高斯消去法除了用于线性方程组求解外，还用于计算矩阵行列式、求矩阵的秩、计算矩阵的逆等。

Gauss 消去过程的详细执行过程

写出相应算法, 并编程实现. 记增广矩阵

$$A^{(1)} = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{array} \right],$$

其中

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

第 1 步: 消第 1 列.

设 $a_{11}^{(1)} \neq 0$, 计算 $m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$, $i = 2, 3, \dots, n$. 对增广矩阵 $A^{(1)}$ 进行 $n-1$ 次初

等变换, 即依次将 $A^{(1)}$ 的第 i 行 ($i > 1$) 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 $m_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$, $i = 3, 4, \dots, n$. 依次将 $A^{(2)}$ 的第 i 行 ($i > 2$) 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 $A^{(k)}$:

$$A^{(k)} = \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1k}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ & & & & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} & b_k^{(k)} \\ & & & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} & b_n^{(k)} \end{array} \right], \quad (1.1)$$

第 k 步: 消第 k 列.

设 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, 计算 $m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$, $i = k+1, \dots, n$. 依次将 $A^{(k)}$ 的第 i 行 ($i > k$)

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

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, \quad b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}, \quad i, j = k+1, k+2, \dots, n. \quad (1.2)$$

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

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

以上就是 Gauss 消去法的整个计算过程.

 由上面的计算过程可知, Gauss 消去法能顺利进行下去的充要条件是 $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, $k = 1, 2, \dots, n$, 这些元素被称为 **主元**.

定理 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 则所有主元 $a_{kk}^{(k)}$ 都不为零的充要条件是 A 的所有顺序主子式都不为零, 即

$$D_1 \triangleq a_{11} \neq 0, \quad D_k \triangleq \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{vmatrix} \neq 0, \quad k = 2, 3, \dots, n.$$

 事实上, 如果 A 的所有顺序主子式都不为零, 则主元为

$$a_{11}^{(1)} = D_1, \quad a_{kk}^{(k)} = \frac{D_k}{D_{k-1}}, \quad k = 2, 3, \dots, n.$$

推论 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 消去法的复杂度

在第 k 步中, 我们需要计算

$$m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}, i = k + 1, \dots, n \rightarrow n - k \text{ 次}$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, i, j = k + 1, \dots, n \rightarrow (n - k)^2 \text{ 次}$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)}, i = k + 1, \dots, n \rightarrow n - k \text{ 次}$$

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

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

所以总运算量为

$$\frac{2n^3}{3} + \frac{3n^2}{2} - \frac{7n}{6} = \frac{2n^3}{3} + O(n^2)$$

✎ 评价算法的一个重要指标是 **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.

✎ 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.

Gauss 消去法与 LU 分解

换个角度看 Gauss 消去过程

每次都是做矩阵初等变换, 因此也可理解为不断地左乘初等矩阵. 将所有这些初等矩阵的乘积记为 $\tilde{L}$, 则可得 $\tilde{L}A = U$, 其中 U 是一个上三角矩阵. 记 $L \triangleq \tilde{L}^{-1}$, 则

$$A = LU,$$

这就是著名的矩阵 LU 分解.

 **矩阵分解**, 即将一个较复杂的矩阵分解成若干具有简单结构的矩阵的乘积, 是矩阵计算中的一个很重要的技术.

假定 Gauss 消去过程能顺利进行, 那么 U 一定是一个非奇异上三角矩阵. 下面我们主要研究 L 具有什么样的特殊结构或者特殊性质.

考察第 k 步的情形, 即 $A^{(k+1)}$ 与 $A^{(k)}$ 之间的关系式. 由 Gauss 消去过程 (1.2) 可得

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

其中

$$L_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -m_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -m_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix}, \quad m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad i = k+1, \dots, n. \quad (1.3)$$

令 $k = 1, 2, \dots, n-1$, 并将所有 Gauss 消去过程结合在一起即可得

$$A^{(n)} = L_{n-1} L_{n-2} \cdots L_1 A^{(1)},$$

即

$$A = A^{(1)} = (L_{n-1} L_{n-2} \cdots L_1)^{-1} A^{(n)}.$$

引理 $L_k^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & m_{k+1,k} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & m_{n,k} & & 1 \end{bmatrix}, \quad L_1^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ m_{31} & m_{32} & 1 & & \\ m_{41} & m_{42} & m_{4,3} & 1 & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & m_{n,n-1} \end{bmatrix}$

(证明留作练习)

记 $L \triangleq L_1^{-1} L_2^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1}$, $U \triangleq A^{(n)}$, 则

$$A = LU. \quad (1.4)$$

由引理 1.1 可知 L 是单位下三角矩阵, U 是非奇异上三角矩阵.

LU 分解的存在性和唯一性

由推论 1.2 可知, 如果 A 的所有顺序主子式都不为零, 则 Gauss 消去过程能顺利进行, 因此 LU 分解 (1.4) 也存在. 事实上, 我们有下面的结论.

定理 (LU 分解的存在性和唯一性) 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. 则存在唯一的单位下三角矩阵 L 和非奇异上三角矩阵 U , 使得 $A = LU$ 的充要条件是 A 的所有顺序主子矩阵 $A_k = A(1:k, 1:k)$ 都非奇异, $k = 1, 2, \dots, n$. (板书)

LU 分解的存在性和唯一性

由推论 1.2 可知, 如果 A 的所有顺序主子式都不为零, 则 Gauss 消去过程能顺利进行, 因此 LU 分解 (1.4) 也存在. 事实上, 我们有下面的结论.

定理 (LU 分解的存在性和唯一性) 设 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. 则存在唯一的单位下三角矩阵 L 和非奇异上三角矩阵 U , 使得 $A = LU$ 的充要条件是 A 的所有顺序主子矩阵 $A_k = A(1:k, 1:k)$ 都非奇异, $k = 1, 2, \dots, n$. (板书)

 如果 A 存在 LU 分解, 则 $Ax = b$ 就等价于求解下面两个方程组

$$\begin{cases} Ly = b, \\ Ux = y. \end{cases}$$

LU 分解算法

算法 1.1 LU 分解

```
1: Set  $L = I$ ,  $U = 0$     % 将  $L$  设为单位矩阵,  $U$  设为零矩阵
2: for  $k = 1$  to  $n - 1$  do
3:   for  $i = k + 1$  to  $n$  do
4:      $m_{ik} = a_{ik} / a_{kk}$     % 计算  $L$  的第  $k$  列
5:   end for
6:   for  $i = k$  to  $n$  do
7:      $u_{ki} = a_{ki}$     % 计算  $U$  的第  $k$  行
8:   end for
9:   for  $i = k + 1$  to  $n$  do
10:    for  $j = k + 1$  to  $n$  do
11:       $a_{ij} = a_{ij} - m_{ik}u_{kj}$     % 更新  $A(k + 1 : n, k + 1 : n)$ 
12:    end for
13:  end for
14: end for
```

实施细节: 矩阵 L 和 U 的存储

观察发现

- 当 A 的第 i 列被用于计算 L 的第 i 列后, 后面的计算中不再被使用
- 同样, A 的第 i 行被用于计算 U 的第 i 行后, 后面的计算中也不再使用

因此, 可以将 L 的第 i 列存放在 A 的第 i 列, 将 U 的第 i 行存放在 A 的第 i 行.

算法 1.2 LU 分解

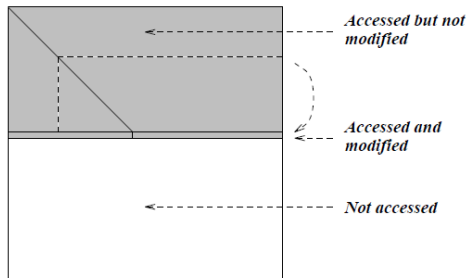
```
1: for  $k = 1$  to  $n - 1$  do
2:   for  $i = k + 1$  to  $n$  do
3:      $a_{ik} = a_{ik} / a_{kk}$ 
4:     for  $j = k + 1$  to  $n$  do
5:        $a_{ij} = a_{ij} - a_{ik}a_{kj}$ 
6:     end for
7:   end for
8: end for
```

根据指标的循环次序, 上述算法也称为 KIJ 型 LU 分解. 在实际计算中, 我们一般不建议使用这个算法. 因为对于指标 k 的每次循环, 都需要更新 A 的第 $k+1$ 至第 n 行. 这种反复读取数据的做法会使得计算效率大大降低.

对于按行存储的数据结构, 如 C/C++, 我们一般采用下面的 IKJ 型 LU 分解.

算法 1.3 LU 分解 (IKJ 型)

```
1: for  $i = 2$  to  $n$  do
2:   for  $k = 1$  to  $i - 1$  do
3:      $a_{ik} = a_{ik} / a_{kk}$ 
4:     for  $j = k + 1$  to  $n$  do
5:        $a_{ij} = a_{ij} - a_{ik}a_{kj}$ 
6:     end for
7:   end for
8: end for
```



列主元 Gauss 消去法与 PLU 分解

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, 即可能会出现主元为零的情形, 此时算法就进行不下去.

列主元 Gauss 消去法与 PLU 分解

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, 即可能会出现主元为零的情形, 此时算法就进行不下去.

例 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.

列主元 Gauss 消去法与 PLU 分解

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, 即可能会出现主元为零的情形, 此时算法就进行不下去.

例 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, 也可能给计算结果带来很大的误差.

例 求解线性方程组 $Ax = b$, 其中 $A = \begin{bmatrix} 0.02 & 61.3 \\ 3.43 & -8.5 \end{bmatrix}$, $b = \begin{bmatrix} 61.5 \\ 25.8 \end{bmatrix}$, 要求在运算过程中保留 3 位有效数字.

解. 根据 LU 分解算法 1.1, 我们可得

$$\begin{aligned}l_{11} &= 1.00, \quad l_{21} = a_{21}/a_{11} = 1.72 \times 10^2, \quad l_{22} = 1.00, \\u_{11} &= a_{11} = 2.00 \times 10^{-2}, \quad u_{12} = a_{12} = 6.13 \times 10, \\u_{22} &= a_{22} - l_{21}u_{12} \approx -8.5 - 1.05 \times 10^4 \approx -1.05 \times 10^4,\end{aligned}$$

即

$$A \approx \begin{bmatrix} 1.00 & 0 \\ 1.72 \times 10^2 & 1.00 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2.00 \times 10^{-2} & 6.12 \times 10 \\ 0 & -1.05 \times 10^4 \end{bmatrix}.$$

解方程组 $Ly = b$ 得 $y_1 = 6.15 \times 10$, $y_2 = b_2 - l_{21}y_1 \approx -1.06 \times 10^4$.

解方程组 $Ux = y$ 得 $x_2 = y_2/u_{22} \approx 1.01$, $x_1 = (y_1 - u_{12}x_2)/u_{11} \approx -0.413/u_{11} \approx -20.7$

实际上, 方程的精确解为 $x_1 = 10.0$ 和 $x_2 = 1.00$. □

解决上面问题的一个有效手段就是 **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**: $\left| a_{i_k, k}^{(k)} \right| = \max_{k \leq i \leq n} \left\{ \left| a_{i, k}^{(k)} \right| \right\}$
- ② 交换: 如果 $i_k \neq k$, 则交换第 k 行与第 i_k 行

即第 k 步时, 先在 $A^{(k)}$ 中第 k 列的第 k 至 n 的元素中选取绝对值最大的元素:

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

然后根据需要判断是否需要更换两行.

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形 (除非 A 是奇异的).

带这种选主元方法的 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).

算法 1.4 列主元 Gauss 消去法

```
1: for  $k = 1$  to  $n - 1$  do
2:    $a_{i_k,k} = \max_{k \leq i \leq n} |a_{i,k}|$     % 选列主元
3:   if  $i_k \neq k$  then
4:     for  $j = 1$  to  $n$  do
5:        $a_{tmp} = a_{i_k,j}$ ,  $a_{i_k,j} = a_{k,j}$ ,  $a_{k,j} = a_{tmp}$     % 交换  $A$  的第  $i_k$  行与第  $k$  行
6:     end for
7:      $b_{tmp} = b_{i_k}$ ,  $b_{i_k} = b_k$ ,  $b_k = b_{tmp}$     % 交换  $b$  的第  $i_k$  与第  $k$  个分量
8:   end if
9:   for  $i = k + 1$  to  $n$  do
10:     $a_{ik} = a_{ik}/a_{kk}$     % 计算  $L$  的第  $i$  列
11:    for  $j = k + 1$  to  $n$  do
12:       $a_{ij} = a_{ij} - a_{ik} * a_{kj}$     % 更新  $A(k+1:n, k+1:n)$ 
13:    end for
14:     $b_i = b_i - a_{ik}b_k$ 
15:  end for
16: end for
17:  $x_n = b_n/a_{nn}$     % 向后回代求解  $Ux = y$ 
```

定理 (列主元 LU 分解) 若矩阵 A 非奇异, 则存在置换矩阵 P , 使得

$$PA = LU, \quad (1.5)$$

其中 L 为单位下三角矩阵, U 为上三角矩阵.

(板书)

$$Ax = b \iff Ly = Pb, \quad Ux = y$$

例 用部分选主元 LU 分解求解线性方程组 $Ax = b$, 其中 $A = \begin{bmatrix} 0.02 & 61.3 \\ 3.43 & -8.5 \end{bmatrix}$,
 $b = \begin{bmatrix} 61.5 \\ 25.8 \end{bmatrix}$, 要求在运算过程中保留 3 位有效数字.

由于 $|a_{21}| > |a_{11}|$, 需要选主元, 并交换第 1 行与第 2 行, 即取 $P = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$, 然后计算

$\tilde{A} = PA = \begin{bmatrix} 3.43 & -8.5 \\ 0.02 & 61.3 \end{bmatrix}$ 的 LU 分解, 即设

$$\tilde{A} = LU = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ l_{21} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} \\ 0 & u_{22} \end{bmatrix}.$$

直接比较等式两边可得

$$u_{11} = \tilde{a}_{11} = 3.43, \quad u_{12} = \tilde{a}_{12} = -8.5,$$

$$l_{21} = \tilde{a}_{21}/u_{11} \approx 5.83 \times 10^{-3},$$

$$u_{22} = \tilde{a}_{22} - l_{21}u_{12} \approx 61.3 + 0.0496 \approx 61.3,$$

即

$$PA \approx \begin{bmatrix} 1.00 & 0 \\ 5.83 \times 10^{-3} & 1.00 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3.43 & -8.50 \\ 0 & 61.3 \end{bmatrix}.$$

解方程组 $Ly = Pb$ 可得

$$y_1 = 25.8, \quad y_2 \approx 61.2.$$

解方程组 $Ux = y$ 可得

$$x_2 = y_2/u_{22} \approx 0.998, \quad x_1 = (y_1 - u_{12}x_2)/u_{11} \approx 10.0.$$

所以, 数值解具有 3 位有效数字. (精确解为 $x_1 = 10, x_2 = 1$)

即

$$PA \approx \begin{bmatrix} 1.00 & 0 \\ 5.83 \times 10^{-3} & 1.00 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3.43 & -8.50 \\ 0 & 61.3 \end{bmatrix}.$$

解方程组 $Ly = Pb$ 可得

$$y_1 = 25.8, \quad y_2 \approx 61.2.$$

解方程组 $Ux = y$ 可得

$$x_2 = y_2/u_{22} \approx 0.998, \quad x_1 = (y_1 - u_{12}x_2)/u_{11} \approx 10.0.$$

所以, 数值解具有 3 位有效数字. (精确解为 $x_1 = 10, x_2 = 1$)

 列主元 Gauss 消去法要多做一些比较运算, 但

- (1) 对系数矩阵要求低, 只需非奇异即可;
- (2) 比普通 Gauss 消去法更稳定.

列主元 Gauss 消去法是当前求解线性方程组的直接法中的首选算法.

在列主元 Gauss 消去法中, 我们只在某一列中进行选主元, 比如第 k 步时的第 k 列 $A^{(k)}(k:n, k)$. 事实上, 我们也可以在剩余的子矩阵中选取主元, 以获得更好的稳定性, 即在第 k 步时, 在 $A^{(k)}(k:n, k:n)$ 中选取绝对值最大的元素作为主元. 此时可能需要同时做行交换和列交换, 以便将主元移到 (k, k) 位置.

- ① 选取 **全主元**: $|a_{i_k, j_k}^{(k)}| = \max_{k \leq i, j \leq n} \{|a_{i, j}^{(k)}|\}$
- ② 行交换: 如果 $i_k \neq k$, 则交换第 k 行与第 i_k 行
- ③ 列交换: 如果 $j_k \neq k$, 则交换第 k 列与第 j_k 列

需要指出的是, 如果有列交换, 则会改变 x_i 的顺序, 因此需要记录每次的列交换次序.

定理 (全主元 LU 分解) 设矩阵 A 非奇异, 则存在置换矩阵 P_l, P_r , 以及单位下三角矩阵 L 和非奇异上三角矩阵 U , 使得

$$P_l A P_r = LU.$$

 全主元高斯消去法具有更好的稳定性, 但很费时, 在实际计算中一般很少采用.