

矩阵计算

Matrix Computations

数值线性代数

Numerical Linear Algebra

潘建瑜

华东师范大学数学系



计算数学

1947 年 Von Neumann 和 Goldstine 在《美国数学会通报》发表了题为“高阶矩阵的数值求逆”的著名论文, 开启了**现代计算数学**的研究。

一般来说, 计算数学主要研究如何求出数学问题的**近似解 (数值解)**, 包括算法的设计、分析与计算机实现。

计算数学主要研究内容:

数值代数, 数值逼近, 数值微积分, 微分方程数值解, 数值优化等



为什么计算数学

计算科学是 21 世纪确保国家核心竞争能力的战略技术之一。

—— 计算科学: 确保美国竞争力, 2005 年总统信息技术咨询委员会报告

科学计算是 20 世纪重要科学技术进步之一, 已与理论研究 and 实验研究相并列成为科学研究的第三种方法. 现今科学计算已是体现国家科学技术核心竞争力的重要标志, 是国家科学技术创新发展的关键要素

—— 国家自然科学基金·重大项目指南, 2014

科学计算的核心/数学基础: 计算数学.



国家自然科学基金委员会关于计算数学的分类 (2018):

- 计算数学与科学与工程计算 (A0117)
 - 偏微分方程数值解 (A011701)
 - 流体力学中的数值计算 (A011702)
 - 一般反问题的计算方法 (A011703)
 - 常微分方程数值计算 (A011704)
 - 数值代数 (A011705)
 - 数值逼近与计算几何 (A011706)
 - 谱方法及高精度数值方法 (A011707)
 - 有限元和边界元方法 (A011708)
 - 多重网格技术与区域分解 (A011709)
 - 自适应方法 (A011720)
 - 并行计算 (A011711)
- 运筹学 (数值最优化, 非线性方程, ...)



国家自然科学基金委员会关于计算数学的分类 (2021):

- A05 计算数学
 - A0501 算法基础理论与构造方法
 - A0502 数值代数
 - A0503 数值逼近与计算几何
 - A0504 微分方程数值计算
 - A0505 反问题建模与计算
 - A0506 复杂问题的可计算建模与数值模拟
 - A0507 新型计算方法
- A04 统计与运筹: 连续优化, 离散优化, 随机优化与统计优化, ...
- A06 数学与其他学科的交叉: 符号计算, 人工智能, 数据科学
 - A0813 计算固体力学
 - A0910 计算流体力学
- F02 计算机科学: 信息安全, 数据科学与大数据计算
- F06 人工智能



计算数学的主要任务

- **算法设计**: 构造求解各种数学问题的数值方法
- **算法分析**: 收敛性、稳定性、复杂性、计算精度等
- **算法实现**: 编程实现、软件开发



好的数值方法一般需满足以下几点

- 有可靠的理论分析, 即收敛性、稳定性等有数学理论保证
- 有良好的计算复杂性 (时间和空间)
- 易于在计算机上实现
- 要有具体的数值试验来证明是行之有效的



数值线性代数

If any other mathematical topic is as fundamental to the mathematical sciences as **calculus** and **differential equations**, it is **numerical linear algebra**.

— Trefethen & Bau, 1997.

Lloyd N. Trefethen



- Professor of University of Oxford, Head of Oxford's Numerical Analysis Group
- First customer to buy MATLAB
- Royal Society (英国皇家学会), National Academy of Engineering (美国国家工程院), Academia Europaea (欧洲人文与自然科学学院)
- President of SIAM
- IMA Gold Medal, LMS Naylor Prize, SIAM Pólya Prize
- SIAM John von Neumann Prize
- Invited speaker at ICIAM, ICM, and ECM congresses
- Author of SIAM's all-time bestseller
- Winner of teaching prizes at MIT, Cornell and Oxford
- Winner of the first Fox Prize in Numerical Analysis

 L.N. Trefethen and D. Bau, III, *Numerical Linear Algebra*, 1997.




Linear algebra — in particular, the solution of linear systems of equations — lies at **the heart** of most calculations in scientific computing.

— Dongarra & Eijkhout, 2000.

Jack J. Dongarra



- 世界知名的超级计算机与并行计算专家
- 美国田纳西大学电子工程与计算机科学杰出教授
- Director of Innovative Computing Laboratory
- Distinguished Research Staff, Oak Ridge National Laboratory
- Turing Fellow at Manchester University
- 清华大学的 IV 讲座访问教授
- National Academy of Engineering, British Royal Society, Russian Academy of Sciences
- Fellow of AAAS, ACM, IEEE and SIAM
- first IEEE Medal of Excellence in Scalable Computing,
first recipient of the SIAM Special Interest Group on Supercomputing's award, ...
- EISPACK, LINPACK, BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, Netlib, PVM, MPI, Top500, ...

 J.J. Dongarra and V. Eijkhout, Numerical linear algebra algorithms and software, *JCAM*, 123 (2000), 489–514.
(Numerical Analysis 2000, Vol. III: Linear Algebra)



数值线性代数基本问题

数值线性代数主要研究以下问题:

- 线性方程组求解 $Ax = b$, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 非奇异
- (线性) 最小二乘问题 $\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$
- 矩阵特征值问题 $Ax = \lambda x$, $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\lambda \in \mathbb{C}$, $x \in \mathbb{C}^n$, $x \neq 0$
- 矩阵奇异值问题 $A^T Ax = \sigma^2 x$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\sigma \geq 0$, $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$
- 其它: 广义特征值问题, 非线性特征值问题, 矩阵方程, 张量计算,



数值线性代数常用方法（技术或技巧）

- 矩阵分解: LU, QR, SVD,
- 矩阵分裂
- 扰动分析和误差估计

🔧 问题的特殊结构对算法的设计具有非常重要的影响.

🔧 自己动手编程实现算法对理解算法非常有帮助!

🔧 在实际计算时, 要充分利用现有的优秀程序库.



二十世纪十大优秀算法 (SIAM News, 2000)

1. Monte Carlo method (1946)
2. Simplex Method for Linear Programming (1947)
3. **Krylov Subspace Iteration Methods** (1950)
4. **The Decompositional Approach to Matrix Computations** (1951)
5. The Fortran Optimizing Compiler (1957)
6. **QR Algorithm for Computing Eigenvalues** (1959-61)
7. Quicksort Algorithm for Sorting (1962)
8. Fast Fourier Transform (1965)
9. Integer Relation Detection Algorithm (1977)
10. Fast Multipole Method (1987)



课程主要内容




- 线性方程组的直接解法 (第二讲)
- 线性最小二乘问题的数值算法 (第三讲)
- 非对称矩阵特征值计算 (第四讲)
- 对称矩阵矩阵特征值计算与奇异值计算 (第五讲)
- 线性方程组的定常迭代方法 (第六讲)
- 线性方程组的 Krylov 子空间方法 (第七讲)
- 预处理方法 (第八讲)
- 矩阵特征值的迭代方法 (第九讲)



成绩评定

平时成绩（考勤 + 小测 + 编程作业）50%，期末成绩（笔试）50%

主要参考资料

-  G.H. Golub and C. F. van Loan, **Matrix Computations (4th)**, 2013.
-  J.W. Demmel, **Applied Numerical Linear Algebra**, 1997.
-  L.N. Trefethen and D. Bau, III, **Numerical Linear Algebra**, 1997.

📖 本课程需要 MATLAB 编程, 请自学.

📖 课程主页: <http://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/MatrixComp>