1.1 直接法

矩阵以及相关的概念在线性代数/高等代数等课程中已有完整的介绍． 关于矩阵的对称，正定，相似，逆，秩等概念参考线性代数/高等代数．

1.1.1 Gauss消元法

科学计算应用经过建模和数值离散(如数据的插值与拟合,微分方程离散等)之后,都归结于矩阵的数值分析。其中一个抽象的问题是求解一个或若干个线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ \vdots &= \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n &= b_n \end{cases} \tag{1.1}$$

如果引进矩阵向量记号：系数矩阵A

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

称为一个$m \times n$的矩阵，简记为A．特别地，当$n = 1$时为一个长度为m的向量(列向量,类似可定义行向量)． 关于矩阵的对称，正定，相似，逆，秩等概念参考线性代数/高等代数． 在线性代数中，人们往往用$Ax = b$来表示线性方程组(1.1)。求解该问题最经典的方法是Gauss消元法，读者可能已经在线性代数或高等代数课程中学习过。消元法是线性方程组问题的直接求解方法，迭代法是另一类在实用计算中更常用的方法将在下一章中讲。此处仅举一例，目的是为了展示如何完成算法实现。 本书中数值算法的实现采用了MATLAB，但是相关算法流程也被给出，因此读者可以根据自身情况采用其他任何一种计算机语言实现。

例 1.1.1 (Gauss消元法). 记矩阵A和向量b为某个线性方程组的系数矩阵和右端向量，请写出求解线性方程组$Ax = b$的Gauss消元法过程。

```
function x = gauss(A, b);
n = size(A,1);
for k = 1:n-1
    A(k,:) = A(k,:)/A(k,k);
    for j = k+1:n
        factor = -A(j,k)/A(k,k);
        A(j,k:end) = A(j,k:end) + factor*A(k,k:end);
        b(j) = b(j) + factor*b(k);
    end
end
b(n) = b(n)/A(n,n);
```

```
for k = n:-1:2
  b(1:k-1) = b(1:k-1) - A(1:k-1,k)*b(k);
end
x = b;
```

直接法的适定性:条件数与稳定性

时间复杂度: 考虑算法执行过程中所做的乘除法次数。一步消元过程所做的乘除适定性

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

回代过程所做的乘法次数为

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

综上,高斯消去法所需总的乘除法次数为

$$\sum_{k=1}^{n}(n-k+1)^2 + \sum_{k=1}^{n}(n-k) = \frac{1}{3}n(n^2+3n-1) \approx \frac{1}{3}n^3. \tag{1.2}$$

空间复杂度: 不需额外存储空间、原址存储分解结果

稳定性: 当 $|a_{kk}| \approx 0$时可导致浮点数溢出,用、条件数$\kappa(A)$衡量

系数矩阵的度量是衡量线性方程组求解难易程度的一个重要标识。

常用的矩阵范数的定义是常见的,$\|A\|_1 = \max\limits_{1\le j\le n}\sum\limits_{i=1}^{m}|a_{ij}|$,$\|A\|_\infty = \max\limits_{1\le i\le n}\sum\limits_{j=1}^{m}|a_{ij}|$,和谱范数$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{max}(A^TA)}$。 值得指出的是,任何矩阵范数满足 $\|A\| \ge \rho(A)$。

谱半径: $\rho(A) = \max|\lambda(A)|$,即绝对值最大的特征值。

矩阵的条件数: $\kappa(A) = \|A\|\cdot\|A^{-1}\|$。若取$L_2$范数$\|\cdot\|_2$,则$\kappa(A) = \frac{\sigma_{max}(A)}{\sigma_{min}(A)}$,其中,$\sigma$表示最大和最小奇异值,我们将在稍后的章节中介绍它们。 有如下性质:

1、若A是正规矩阵($A^TA = AA^T$),则$\kappa(A) = \frac{\lambda_{max}(A)}{\lambda_{min}(A)}$.

2、若A是酉矩阵($A^TA = AA^T = I$),则$\kappa(A) = 1$.

1.1.2 矩阵分解 — 消元法的实现

LU分解 — L(下三角)U(上三角)矩阵分解: $A = LU$

若对矩阵A的高斯消去过程时稳定的,则存在

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 3 & 3 & 12 & 6 \\ 2 & 4 & -1 & 2 \\ 4 & 2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{k=1} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ \frac{3}{2} & -3 & 6 & 3 \\ 1 & 0 & -5 & 0 \\ 2 & -6 & -7 & -3 \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{k=2}\begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ \frac{3}{2} & -3 & 6 & 3 \\ 1 & 0 & -5 & 0 \\ 2 & 2 & -19 & -9 \end{bmatrix} \xrightarrow{k=3}\begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ \frac{3}{2} & -3 & 6 & 3 \\ 1 & 0 & -5 & 0 \\ 2 & 2 & \frac{19}{5} & -9 \end{bmatrix}$$

由最后一步的结果可以分离出L和U分别为：

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{3}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 2 & \frac{19}{5} & 1 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 2 & 4 & 4 & 2 \\ 0 & -3 & 6 & 3 \\ 0 & 0 & -5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -9 \end{bmatrix}$$

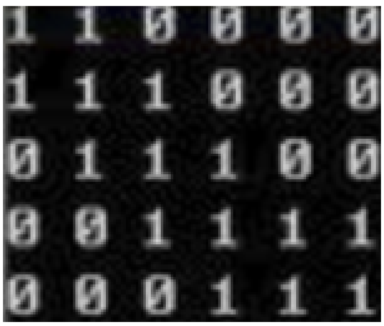
```
function [L, U] = lu_primer(A);
n = size(A,1);
for k = 1:n-1
    A(k+1:n,k) = A(k+1:n,k)/A(k,k);
    for i = k+1:n
        A(i,k+1:end) = A(i,k+1:end) + A(i,k)*A(k,k+1:end);
    end
end
L = tril(A); U = triu(A) + diag(A);
```

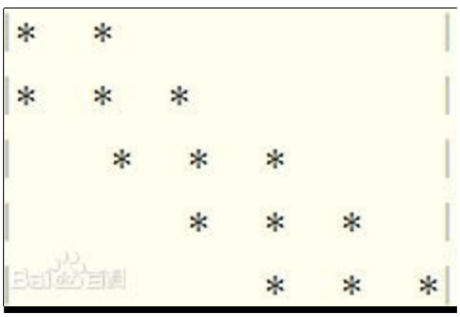
值得指出的是，当矩阵A是对称情形，显然分解所得的两个三角矩阵也是对称的，即$U = L^T$。 这也被称为对称矩阵的Dolittle分解。

三对角矩阵的追赶法

矩阵中非零元素只占极少部分，带状矩阵与一般稀疏矩阵。可以设计特殊的存储结构以加快运算的速度。

两点边值问题有限差分或有限元离散将会得到带三对角系数矩阵的线性方程组问题。所谓“三对角”，意味着只有矩阵的主对角线及其与其平行的上下两条对角线上的元素非零的情形，其结构如下所示：

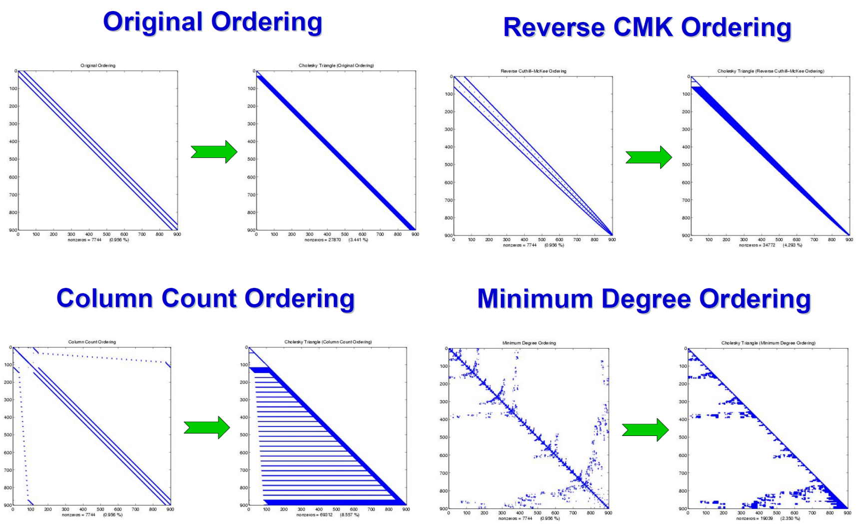


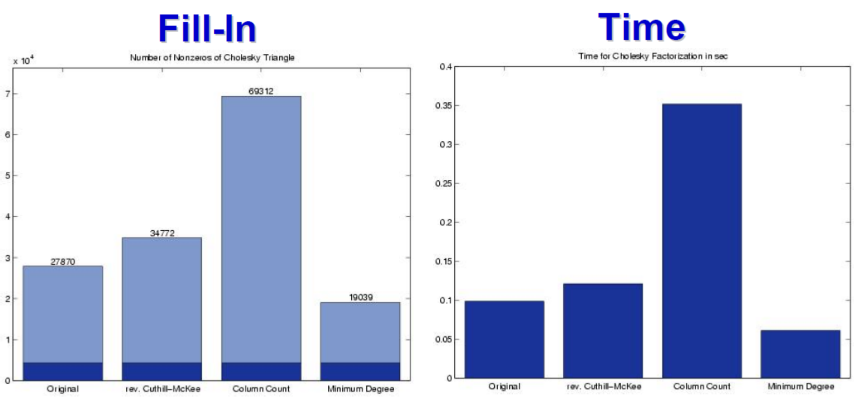


t	-1.0	-0.5	0.0	0.5	1.0
y	1.0	0.5	0.0	0.5	2.0

一般稀疏矩阵结构

稀疏矩阵排序技术主要是通过减少“填零”来实现的。如下所示的是一种减少“带宽”的技术： 通过重排序，直接消元的过程所占用的时间开销对比如下：

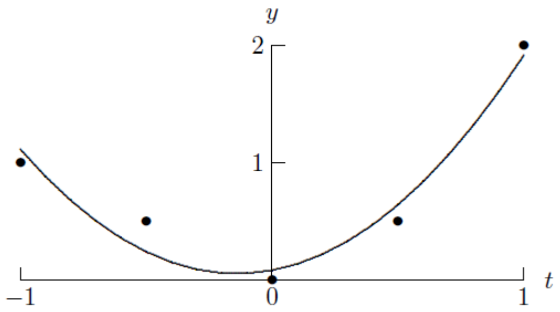




1.1.3 最小二乘法 — 求解超定线性方程组

例 1.1.2 (数据拟合). 找一条二次曲线逼近如下观测点： 类似问题：多元线性回归、非多项式数据拟合等

分析：若$span(A)$是图凸集、r = b − Ax是凸映射，则存在唯一；A列满秩$\leftrightarrow$ 存在唯一；A秩亏损，解仍存在，但不唯一！



正规方程解法

为了求解$A\mathrm{x}=\mathrm{b}$，寻找使$\|A\mathrm{x}-\mathrm{b}\|_2$的梯度为零的x,故有
正规方程（相对易求解）

$$(A^TA)\mathrm{x}=A^T\mathrm{b}$$

不管m与n的大小关系，上述方程组总是具有n个未知n个方程。Hessian矩阵A^TA是对称的、正定的。

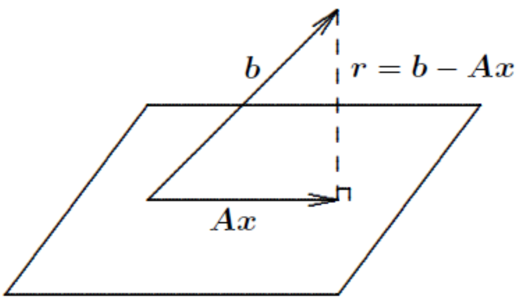
以上述例子为例，容易列出正规方程组 可求得正规方程的解为$\mathrm{x}^T=[1236,1943,2416]^T$，

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}3 & -1 & -1\\ -1 & 3 & -1\\ -1 & -1 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-651\\ 2177\\ 4069\end{bmatrix}=\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}.$$

将该数值解代入原问题，可得到原方程残量的范数为$\|\mathrm{r}\|_2^2=35$。

几何的观点：正交投影法

也可以直接考虑求解$A\mathrm{x}=\mathrm{b}$)。 对于$m>n$的问题，一般$\mathrm{b}\notin span(A)$，则由投影关系 可



知r垂直于$A\mathrm{x}-\mathrm{b}$，即（等同于正规方程组）

$$A^T(A\mathrm{x}-\mathrm{b})=0$$

上述正规方程组方法即求A的广义逆

$$A^{-*} = (A^TA)^{-1}A^T$$

其中，$P = A^TA$是在$span(A)$上的正交投影阵，$cond_2(A) = \|A\|_2\|A^{-*}\|_2$ 这个量体现了与秩亏损矩阵的接近程度，也容易因此知道正规方程组的条件数与原问题条件数几乎成平方关系。

扰动分析

求解$A^TA\mathrm{x} = A^T\mathrm{b}$，此时考虑右端项引起的扰动

$$A^TA(\mathrm{x} + \delta\mathrm{x}) = A^T(\mathrm{b} + \delta\mathrm{b})$$

$$\frac{\|\delta\mathrm{x}\|_2}{\|\mathrm{x}\|_2} \le \cdots \le cond(A)\left(\frac{\|\mathrm{b}\|_2}{\|A\mathrm{x}\|_2}\right)\left(\frac{\|\delta\mathrm{b}\|_2}{\|\mathrm{b}\|_2}\right)$$

对于例1的分析:

$$cond(A) = \|A\|_2 \cdot \|A^{-*}\|_2 = 2 \cdot 1 = 2$$

$$\cos(\theta) = \frac{\|\mathrm{b}\|_2}{\|A\mathrm{x}\|_2} \approx 0.99999868$$

此例的条件数和角度θ都足够小，问题良态！ 忽略高阶项并简化之后，有 因此，

对于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的扰动 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E}$,解的扰动由正规方程

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E})(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$$

$$\Delta\boldsymbol{x} \approx (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{E}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r} - (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{E}\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{E}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r} - \boldsymbol{A}^{+}\boldsymbol{E}\boldsymbol{x},$$

$$\begin{aligned}
\frac{\|\Delta\boldsymbol{x}\|_2}{\|\boldsymbol{x}\|_2} &\lessapprox \|(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\|_2 \cdot \|\boldsymbol{E}\|_2 \cdot \frac{\|\boldsymbol{r}\|_2}{\|\boldsymbol{x}\|_2} + \|\boldsymbol{A}^{+}\|_2 \cdot \|\boldsymbol{E}\|_2 \\
&= [\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})]^2 \cdot \frac{\|\boldsymbol{E}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2} \cdot \frac{\|\boldsymbol{r}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2 \cdot \|\boldsymbol{x}\|_2} + \mathrm{cond}(\boldsymbol{A})\frac{\|\boldsymbol{E}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2} \\
&\leqslant \left([\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})]^2 \cdot \frac{\|\boldsymbol{r}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2} + \mathrm{cond}(\boldsymbol{A})\right)\frac{\|\boldsymbol{E}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2} \\
&= ([\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})]^2\tan\theta + \mathrm{cond}(\boldsymbol{A}))\frac{\|\boldsymbol{E}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2}.
\end{aligned}$$

一个反例

考虑到数值稳定性，也可以将最小二乘问题转换为其对于的增广(Augment)方程组或者三角最小二乘问题求解。

例 3.6 条件数平方效应 考虑如下矩阵及扰动

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1\\ \varepsilon & -\varepsilon\\ 0 & 0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{E}=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 0\\ -\varepsilon & \varepsilon\end{bmatrix},$$

其中 $\varepsilon \ll 1$，接近 $\sqrt{\varepsilon_{\mathrm{mach}}}$，计算

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})=1/\varepsilon,\quad \|\boldsymbol{E}\|_2/\|\boldsymbol{A}\|_2=\varepsilon.$$

对右端向量 $\boldsymbol{b}=[1,0,\varepsilon]^{\mathrm{T}}$，有 $\|\Delta\boldsymbol{x}\|_2/\|\boldsymbol{x}\|_2=0.5$，因此解的相对扰动大约为 cond($\boldsymbol{A}$) 乘以 $\boldsymbol{A}$ 的相对扰动. 对这个右端向量不存在条件数平方效应，这是因为此时残差较小，且 $\tan\theta\approx\varepsilon$，在条件数估计中扰动平方项被忽略了.

另一方面，对于右端向量 $\boldsymbol{b}=[1,0,1]^{\mathrm{T}}$，有 $\|\Delta\boldsymbol{x}\|_2/\|\boldsymbol{x}\|_2=0.5/\varepsilon$，因此解的相对扰动等于 cond($\boldsymbol{A}$)的平方乘以 $\boldsymbol{A}$ 的相对扰动. 对这样的右端向量，残差的范数大约为 1，且 $\tan\theta\approx 1$，此时在扰动估计式中条件数平方项不能忽略，这时解的敏感性非常高. ■

Augment方法

特点是化矩为方，设解向量x和残差向量r,让它们满足

$$\begin{aligned} \mathrm{r}+A\mathrm{x} &= \mathrm{b}\\ A^T\mathrm{r} &= 0\end{aligned}$$

写成矩阵形式，有

$$\begin{bmatrix} I & A\\ A^T & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathrm{r}\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathrm{b}\\ 0\end{bmatrix}$$

为了调节相对误差(rescale技巧)，有

$$\begin{bmatrix} \alpha I & A\\ A^T & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathrm{r}/\alpha\\ 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathrm{b}\\ 0\end{bmatrix}$$

一般地，取参数$\alpha=\max_{i,j}|a_{i,j}|/1000$。会导致计算量增加，但是对于大型问题可利用其结构的特殊性获得简化。在MATLAB中实际计算很有效!

三角最小二乘问题

- 正交变换保欧氏距离
- 等价的三角最小二乘问题
- QR分解实现矩阵的正交分解;

1.1.4 矩阵的正交变换

Gram-Schmidt正交化是一般技巧， 上述两种实现方式是等价的，只有在形式上的一些区别：被动减与主动消。另外，改进版本可以选主元，以增加稳定性！ 此外，常见的正交化方法还有Householder变换和 Givens旋转

算法 3.2 古典格拉姆-施密特正交化

for $k=1$ to n {列循环}
  $q_k=a_k$
  for $j=1$ to $k-1$ {从当前列
    $r_{jk}=q_j^{T}a_k$
    $q_k=q_k-r_{jk}q_j$
  end
  $r_{kk}=\|q_k\|_2$
  if $r_{kk}=0$ then stop {如果线性
  $q_k=q_k/r_{kk}$ {将当前列
end

算法 3.3 改进的格拉姆-施密特正交化

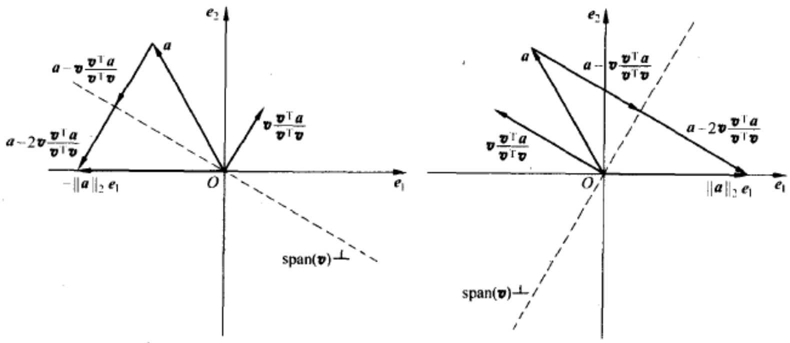
for $k=1$ to n {列循环}
  $r_{kk}=\|a_k\|_2$
  if $r_{kk}=0$ then stop {如果线性
  $q_k=a_k/r_{kk}$ {将当前列
  for $j=k+1$ to n {减去后续
    $r_{kj}=q_k^{T}a_j$
    $a_j=a_j-r_{kj}q_k$
  end
end

HouseHolder变换

$$H\mathrm{a}=\alpha\mathrm{e}_1$$

其中，

$$H=I-\frac{2}{\mathrm{v}^T\mathrm{v}}\mathrm{v}\mathrm{v}^T$$



(a) (b)

根据几何意义，可取

$$\mathrm{v}=\mathrm{a}-\|\mathrm{a}\|_2\mathrm{e}_1$$

Household矩阵性质

- symmetric
- orthogonal

例：将向量$\mathrm{a}=[2,1,2]^T$实施household变换。第一步，取

$$\mathrm{v}=\mathrm{a}-\alpha\mathrm{e}_1=\begin{bmatrix}2\\1\\2\end{bmatrix}-(-3)\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5\\1\\2\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{Ha} = \boldsymbol{a} - 2\,\frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}\boldsymbol{v} = \begin{bmatrix}2\\1\\2\end{bmatrix} - 2\times\frac{15}{30}\times\begin{bmatrix}5\\1\\2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}-3\\0\\0\end{bmatrix}$$

第二步，实施变换，即矩阵向量乘法 思考： 一次H变换完成一个列向量单位化，那么，如何利用这个算法实现矩阵的QR分解？

Givens变换

记旋转矩阵

$$G = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix}$$

如：可把向量$[a_1, a_2]^T$旋转成$[\sqrt{a_1^2+a_2^2}, 0]^T$，此时，

$$\cos(\theta) = \frac{a_1}{\sqrt{a_1^2+a_2^2}}, \quad \sin(\theta) = \frac{a_2}{\sqrt{a_1^2+a_2^2}}$$

需要指出的是：变换矩阵G是正交矩阵，也不改变范数$\|\cdot\|_2$；G变换一次得一个0元，H变换一次只剩一个非0元；也可用于实现QR分解；G变换工作量、存储量均比H变换多。

1.1.5 矩阵分解

在求解线性方程组的直接法中，我们已经注意到Gauss消元法可以用矩阵的LU分解法实现。事实上，对于更一般的矩阵还有其他的分解方式，它们适用于不同

QR分解

定理 1.1.1. 设A是$m \times n$阶矩阵，$m \geq n$.假如A是列满秩的（非奇异），则存在一个唯一的正交阵$Q(Q^TQ = I)$和唯一的具有正对角元$r_{ii} > 0$ 的$n \times n$阶上三角阵R，使得$A = QR$

证明 记$A = [\mathrm{a}_1, \mathrm{a}_2, \ldots, \mathrm{a}_n]$的列向量形式，将这些列向量做正交化即得到正交矩阵$Q[\mathrm{q}_1, \mathrm{q}_2, \ldots, \mathrm{q}_n]$，记$r_{ji} = \mathrm{q}_j^T\mathrm{a}_i$，即有

$$\mathrm{a}_i = \sum_{j=1}^{i} r_{ji}\mathrm{q}_j,$$

QR分解的Gram-Schmit正交化实现

```
for i = 1,2,...,n do
    q_i = a_i;
    for j = 1,2,...,i do
        r_ji = q_j^T q_i 或 q_j^T a_i;
        q_i = q_i - r_ji q_j;
    end
    r_ii = ||q_i||_2;
    if r_ii == 0 then
        quit
    else
        q_i = q_i / r_ii
    end
end
```

当然在实际应用中，Givens 变换、Householder 变换以及 Gram-Schmidt 正交化等都能实现QR分解；» [Q,R]=qr(A);

例 1.1.3 (QR分解实例).

$$
\begin{aligned}
A &= \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{2}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{3}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ 0 & 0 & \frac{2}{\sqrt{3}} \end{bmatrix} \\
&:= QR
\end{aligned}
$$

奇异值分解

定理 1.1.2. 对于任意给定的$m \times n$矩阵A具有如下形式所谓SVD分解

$$A = U\Sigma V^T$$

其中，U是$m \times m$正交矩阵($U^H U = I$)，V是$n \times n$正交矩阵($V^H V = I$)，$\Sigma = diag(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n)$是一个$m \times n$对角矩阵。

其中，Σ对角上的数值称为矩阵A的奇异值:

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n \geq 0.$$

而U和V的列向量分别称为对应的左、右奇异向量。

例 1.1.4 (SVD分解的一个例子).

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} \\ 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2^{-\frac{1}{2}} & -2^{-\frac{1}{2}} \\ 2^{-\frac{1}{2}} & 2^{-\frac{1}{2}} \end{bmatrix} := U\Sigma V^T$$

当极小化$\|A\mathrm{x} - \mathrm{b}\|_2$时,若$A$秩亏或”接近”于秩亏，常称为秩亏的最小二乘问题。SVD可计算其低维近似解。

SVD在现代科学应用中具有广泛的应用，在求解诸如数字图像恢复、某些积分方程的解或从噪声数据中提取信号等病态问题中,常用的正则化（regularization）来解决秩亏问题。下面是几个参考链接，在图像分析中的应用，感兴趣的读者可以自行参考：

- http://zh.wikipedia.org/wiki/奇异值分解
- http://www.cnblogs.com/LeftNotEasy/archive/2011/01/19/svd-and-applications.html
- SVD的图像压缩

1.1.6 软件包与参考教材

blas

提供矩阵-向量 以及 矩阵-矩阵 运算得软件包,支持不同精度(如float,double)等类型的运算,是其他很多软件包的基础.

lapack

集成了大量基本数值线性代数运算,由计算数学领域多位专家主持开发工作.是数值代数研究人员的必备工具.

spooles

求解线性方程组的直接解法。开源库安装案例: Spooles 2.2

1. 下载最新版本，目前为2.2版本，更新慢;
2. 解压缩: tar -xvf spooles.2.2.tar.gz;
3. 修改目录下 Make.inc中的编译命令，最简单是gcc;
4. 构建库: make lib.

使用案例 - A为14922阶的稀疏矩阵 求解线性方程

$$AX = Y$$

where A is square, large and sparse, and X and Y are dense matrices with one or more columns. 在Spooles 2.2 中

1. 内存中建立线性方程组

   (a) Constructing an InpMtx object that holds the entries of A;

   (b) Constructing a DenseMtx objcet that holds the entries of Y;

   (c) Constructing a DenseMtx object to hold the entries of X.

2. 利用Spooles中的Bridge类进行求解:

   (a) Initialization and setup step;

   (b) Factorization step;

   (c) Solution step.

mumpus

求解线性方程组的直接解法的另一个常用软件包。

superLU

基于ＬＵ分解实现的线性方程求解器，有MPI/OpenMP并行版本以及串行版本

Intel MKL

非开源，但是Linux系统下可以免费使用. 针对Intel的CPU优化了编译指令,具有比其他开源软件快得多得执行速度.

数值线性代数算法是高性能科学计算的重要基础，有不少经典教材提供了更为详细的算法细节和拓展介绍，感兴趣的读者可以通过这些教材获得更多有用的信息：

1. Lloyd N. Trefethen & David Bau III: Numerical Linear Algebra

2. Gene H Golub & van Loan: Matrix Computation

3. James W. Demmel: Applied Numerical Linear Algebra

1.1.7 Exercises

1. write gs ellimination

2. perform dolittle decomposision

3. do the least square calculation

4. write gs ellimination

5. perform dolittle decomposision

6. do the least square calculation
7. write gs ellimination
8. perform dolittle decomposision
9. do the least square calculation
10. write gs ellimination
11. perform dolittle decomposision
12. do the least square calculation