

现代数值分析

数值线性代数

潘建瑜

华东师范大学数学系



数值分析是什么

Numerical analysis: the study of quantitative approximations to the solutions of mathematical problems including consideration of and bounds to the errors involved.

—— The dictionary by Merriam-Webster (韦氏英语词典), 2021

Numerical analysis the study of methods of approximation and their accuracy, etc.

—— The Chambers Dictionary (钱伯斯英语词典), 2021

Numerical analysis is the study of algorithms for solving the problems of continuous mathematics, by which we mean problems involving real or complex variables.

—— Lloyd N. Trefethen, *Princeton Companion to Mathematics*, 2008

 L.N. Trefethen, *Numerical Analysis, Princeton Companion to Mathematics*, 2008. (普林斯顿数学指南)



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**和**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



本课程内容

数值线性代数 + 微分方程数值解

任课教师：潘建瑜 + 郑海标

成绩评定

- 平时成绩（考勤 + 小测 + 作业）60%，期末成绩（笔试）40%
- 数值线性代数 50%，微分方程数值解 50%



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.

数值线性代数，又称**矩阵计算**，是**计算数学**的一个重要分支/基础。

Lloyd L. 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




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 $A^T Ax = \sigma^2 x$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\sigma \geq 0$, $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$
- 其它问题: 广义特征值问题, 二次特征值问题, 非线性特征值问题, 矩阵方程, 特征值反问题, 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

数值线性代数


- **线性方程组** 的直接解法 (讲义第二讲)
线性方程组的迭代方法 (讲义第六讲)
- **线性最小二乘问题** 的数值算法 (讲义第三讲)
- 非对称 **矩阵特征值** 计算 (讲义第四讲)
对称矩阵 **矩阵特征值** 计算 (讲义第五讲)



主要参考资料 (数值线性代数)

 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.

 D.S. Watkins, **Fundamentals of Matrix Computations (2nd)**, 2002

 徐树方, **矩阵计算的理论与方法**, 北京大学出版社, 1995.

 曹志浩, **数值线性代数**, 复旦大学出版社, 1996.

 本课程需要 MATLAB 编程, 请自学.

 课程主页 (数值线性代数)

<http://math.ecnu.edu.cn/~jypan/Teaching/MNA>