

《数值代数》课程大纲

课程名称: 数值代数

英文名称: Numerical Linear Algebra

课程简介: 本课程为计算数学研究生的专业核心课，同时可做为数学学科其他专业及力学、计算机等专业研究生和高年级本科生的选修课。课程系统讲授线性方程组、最小二乘问题与特征值问题的数值解法，涵盖 QR 分解、LU 分解、Krylov 子空间方法、预条件方法等数值算法。课程强调数值稳定性与误差分析，突出稀疏矩阵结构在工程与科学计算中的作用，并结合人工智能与高性能计算的发展背景，介绍数值线性代数的前沿应用。通过本课程的学习，希望学生掌握数值线性代数的基本方法，对矩阵计算的最新动态有初步了解，理解线性代数在科学与工程计算中的重要地位。

英文简介: This course is a core course for graduate students in computational mathematics and an elective for graduate students and senior undergraduates in other mathematics disciplines, as well as in mechanics, computer science, and related fields. It covers numerical methods for solving linear equations, least squares problems, and eigenvalue problems, including algorithms such as QR decomposition, LU factorization, Krylov subspace methods, and preconditioning techniques. Emphasis is placed on numerical stability and error analysis, highlighting the role of sparse matrix structures in engineering and scientific computing. In the context of developments in artificial intelligence (AI) and high-performance computing (HPC), the course introduces cutting-edge applications of numerical linear algebra. Upon completion, students are expected to master fundamental methods in numerical linear algebra, acquire a solid understanding of the latest developments in matrix computations, and appreciate the critical role of linear algebra in scientific and engineering calculations.

预备知识: 高等数学、线性代数

课程性质: 计算数学专业核心课

总学时数: 60

课程大纲:

第一章、绪论与应用背景 (4课时, 理解)

- 数值线性代数的基本问题 (1课时)
 - 数值线性代数问题
 - 线性空间
 - 线性变换与矩阵
- 典型应用问题 (1/2课时)
 - 线性回归与正规方程
 - 聚类与特征值分解
 - 主成分分析与SVD
 - PageRank与特征向量
- 数值实现的核心挑战 (2课时)
 - 浮点运算与混合精度
 - 稠密矩阵与稀疏矩阵
 - 数据移动开销
 - 并行效率与性能建模
- 软件实现的挑战 (1/2课时)

第二章、线性代数基础 (7课时, 理解)

- 基础知识 (2课时)
 - 常用矩阵类型
 - 特征值和特征多项式
 - 代数重数和几何重数
- 距离与范数 (1课时)
 - 矩阵的范数与谱半径
 - 不可约矩阵
 - 非负矩阵 (Perron–Frobenius定理)
 - 正交变换与投影变换
 - 子空间的距离
- 奇异值分解 (2课时)
 - 矩阵的Schur分解
 - 矩阵的奇异值分解
 - Cosine–Sine分解
 - 低秩近似
- 矩阵的扰动特性 (2课时)

- 矩阵的条件数
- Bauer-Fike定理
- 正规矩阵的特征值扰动 (Hoffman-Wielandt定理)
- Hermite矩阵的特征值扰动 (Min-Max定理、Weyl定理)

第三章、矩阵计算基础 (8课时, 掌握)

- 浮点数与浮点误差 (1课时)
 - 浮点数的机器表示
 - 浮点误差估计
- 病态问题与条件数 (2课时)
 - 病态矩阵
 - 条件数及其估计
- 稳定性分析 (2课时)
 - 误差传播与误差分析
 - 算法的数值稳定性
 - 精度的迭代改进
- 矩阵计算基本工具 (3课时)
 - 正交化方法
 - Householder变换
 - Givens变换
 - QR分解
 - Lanczos方法

第四章、线性方程组的直接法 (7课时, 掌握)

- Gauss消去法与LU分解 (2课时)
 - 直接法简介
 - Gauss变换
 - Gauss消去
 - LU分解
- Gauss消去法的误差分析 (2课时)
- 特殊结构方程的直接法 (3课时)
 - 三对角矩阵
 - Vandermonde矩阵
 - Toeplitz矩阵
 - DFT和FFT
- 不定问题的直接法 (课外阅读)

第五章、线性方程组的迭代法（7课时，掌握）

- 经典迭代法（2课时）
 - 最速下降法
 - 线性定常迭代法
- 对称正定问题的迭代法（2课时）
 - 能量下降性质
 - 收敛性分析
 - 对称化迭代法
 - 子空间校正法
- 迭代停机与收敛性（1课时）
- Chebyshev加速方法（2课时）
 - 多项式加速
 - Chebyshev多项式
 - Chebyshev半迭代的收敛性
 - 图神经网络中的应用

第六章、最小二乘问题的数值方法（6课时，掌握）

- 数据拟合与最小二乘问题（1.5课时）
 - 线性最小二乘
 - 正规方程
 - 广义逆
- 线性最小二乘问题的直接求解方法（1.5课时）
 - 基于正规方程的方法
 - QR分解方法求解最小二乘
- 线性最小二乘问题的迭代求解方法（1.5课时）
 - 基于正规化方程的迭代法
 - 基于等价方程的迭代法
- 大规模问题的LSQR方法（1.5课时）
 - Lanczos三对角化方法
 - LSQR方法
- 亏秩最小二乘问题（课外阅读）

第七章、Krylov子空间方法（10课时，掌握）

- 共轭梯度法（3课时）
- 预条件技术（2课时）

- 预条件迭代法
- ILU预条件
- Arnoldi方法 (2课时)
- MINRES方法与GMRES方法 (2课时)
- Krylov方法的改进 (1课时)

第八章、特征值问题的数值方法 (10课时, 掌握)

- 特征值与不变子空间 (2课时)
 - 特征值与特征向量
 - 特征值问题的扰动分析
 - 谱与伪谱
- 幂法与反幂法 (1课时)
 - 乘幂法
 - 反幂法
 - 特征向量计算
- QR迭代法 (2课时)
 - QR迭代
 - 带位移的QR迭代
 - 实Schur分解
 - 上Hessenberg化
 - 对称QR迭代
- 实对称矩阵的特征值问题 (3课时)
 - 三对角分解
 - Jacobi方法
 - 二分法
 - 分而治之方法
- SVD分解方法 (2课时)

课程总结 (1课时, 了解)

英文大纲:

- Introduction and Applications
- Fundamentals of Linear Algebra
- Basics of Matrix Computations
- Direct Methods for Linear Systems
- Iterative Methods for Linear Systems

- Numerical Methods for Least Squares Problems
- Krylov Subspace Methods
- Numerical Methods for Eigenvalue Problems
- Course Summary

参考书目：

1. ISBN: 7301027427
徐树方. 《矩阵计算的理论与方法》, 北京大学出版社, 1995.
2. ISBN: 9781421407944
Golub G H, Van Loan C F. Matrix computations. JHU press, 2013.
3. ISBN: 9787302244936
Higham N J. Accuracy and stability of numerical algorithms. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2002.