

# Numerical Methods

Design, Analysis, and  
Computer Implementation of  
Algorithms

# 数值方法

设计、分析和算法实现

[美] 安妮·戈林鲍姆 蒂莫西 P. 夏蒂埃 著  
( Anne Greenbaum ) ( Timothy P. Chartier )

吴兆金 王国英 范红军 译



机械工业出版社  
China Machine Press

# Numerical Methods

Design, Analysis, and  
Computer Implementation of  
Algorithms

# 数值方法

## 设计、分析和算法实现

[美] 安妮·戈林鲍姆 蒂莫西 P. 夏蒂埃 著  
(Anne Greenbaum) (Timothy P. Chartier)

吴兆金 王国英 范红军 译



机械工业出版社  
China Machine Press

## 图书在版编目 (CIP) 数据

数值方法: 设计、分析和算法实现 / (美) 戈林鲍姆 (Greenbaum, A.), (美) 夏蒂埃 (Chartier, T. P.) 著; 吴兆金, 王国英, 范红军译. —北京: 机械工业出版社, 2016.4 (华章数学译丛)

书名原文: Numerical Methods: Design, Analysis, and Computer Implementation of Algorithms

ISBN 978-7-111-53147-0

I. 数… II. ①戈… ②夏… ③吴… ④王… ⑤范… III. 电子计算机—数值计算  
IV. TP301.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 041224 号

本书版权登记号: 图字: 01-2013-0216

Anne Greenbaum, Timothy P. Chartier: Numerical Methods: Design, Analysis, and Computer Implementation of Algorithms (ISBN 978-0-691-15122-9).

Original English language edition copyright © 2012 by Princeton University Press.

Simplified Chinese Translation Copyright © 2016 by China Machine Press.

Simplified Chinese translation rights arranged with Princeton University Press through Bardon-Chinese Media Agency.

No part of this book may be reproduced or transmitted in any form or by any means, electronic or mechanical, including photocopying, recording or any information storage and retrieval system, without permission, in writing, from the publisher.

All rights reserved.

本书中文简体字版由 Princeton University Press 通过 Bardon-Chinese Media Agency 授权机械工业出版社在中华人民共和国境内独家出版发行。未经出版者书面许可, 不得以任何方式抄袭、复制或节录本书中的任何部分。

本书介绍了传统数值分析教材所涵盖的内容, 也介绍了非传统的内容, 比如数学建模、蒙特卡罗方法、马尔可夫链和分形。书中选取的例子颇具趣味性和启发性, 涉及信息检索和动画等现代应用领域以及来自物理和工程的传统主题。习题用 MATLAB 求解, 使计算结果更容易理解。各章都简短介绍了数值方法的历史。

本书理论和应用完美结合, 适合作为数学、计算机科学的本科生教材, 以及其他理工科硕士公共必修课“数值分析”的教材, 授课老师可以根据是侧重数学理论还是应用领域而灵活选取内容。

出版发行: 机械工业出版社 (北京市西城区百万庄大街 22 号 邮政编码: 100037)

责任编辑: 和 静

责任校对: 董纪丽

印 刷: 三河市宏图印务有限公司

版 次: 2016 年 4 月第 1 版第 1 次印刷

开 本: 186mm×240mm 1/16

印 张: 23

书 号: ISBN 978-7-111-53147-0

定 价: 69.00 元

凡购本书, 如有缺页、倒页、脱页, 由本社发行部调换

客服热线: (010) 88378991 88361066

投稿热线: (010) 88379604

购书热线: (010) 68326294 88379649 68995259

读者信箱: hzsj@hzbook.com

版权所有·侵权必究

封底无防伪标均为盗版

本书法律顾问: 北京大成律师事务所 韩光/邹晓东

## 译者序

本书是由美国华盛顿大学的 Anne Greenbaum 和 Timothy P. Chartier 教授合著的一本内容丰富、结构合理、颇有特色的教材,既具有纯数学理论的抽象性和严谨性,又具有实用性和实验性,适合数学、工程、计算机科学或相关领域的大学生和研究生作为数值分析课程的教材或参考书。书中不仅介绍了科学计算中常用的算法和方法,给出了样本程序,而且十分注重这些方法的数学基础,并配备了大量的习题供教师和学生选用。除了注重分析的习题外,本书还将 MATLAB 的使用和编程的基本技巧渗透其中,作者不仅鼓励学生自行设计程序,加深对数值方法原理的理解,还建议学生使用现成的 MATLAB,让学生从中获得更多的知识,得到更全面的提升。

本书的翻译工作是由吴兆金、王国英和范红军合作完成的,其中前言、第 4 章、第 6~8 章、第 12 章、目录和附录由吴兆金翻译,第 9~11 章、第 13~14 章和索引由王国英翻译,第 1~3 章和第 5 章由范红军翻译,最后由吴兆金负责统稿。

南京大学郑维行教授和沈祖和教授对本书的部分章节进行了细致的审校,在此表示感谢。

由于本书内容丰富,涉及面宽,故深感时间紧迫。在机械工业出版社多位编辑的理解与支持下,终于按时完成。由于水平有限,书中的错误和不足之处在所难免,恳请专家、教学同仁和广大读者批评指正。

吴兆金

本书在编写过程中,参考了国内外许多优秀的教材和文献,在此表示衷心的感谢。

本书在编写过程中,参考了国内外许多优秀的教材和文献,在此表示衷心的感谢。

本书在编写过程中,参考了国内外许多优秀的教材和文献,在此表示衷心的感谢。

## 前言

本书试图结合一些富有启发性的例子、应用以及相关历史背景对初等数值分析给予适当严格的数学描述。它可作为数学系、计算机科学系或相关领域高年级本科生数值分析课程的教科书。要求学生具有微积分课程基础并了解 Taylor 定理, 尽管这些内容已在书中作了介绍。另外还要求学生具备线性代数课程知识。部分内容要求多变量微积分知识, 而这些部分可以被省略。根据学生的兴趣、背景和能力, 讲授时可突出这一课程的不同方面——算法的设计、分析和计算机实现。

我们从第 1 章“数学建模”开始, 使读者了解数值计算问题的起源以及数值方法的许多用途。在数值分析课程中, 可以通读该章所有或部分应用, 或者只是指定学生去阅读。第 2 章介绍 MATLAB<sup>[94]</sup> 基础, 它在全书中用作样本程序与练习。只要它能容易执行像解线性方程组或计算 QR 分解等高水平线性代数的程序语言, 就能代替另一种如 SAGE<sup>[93]</sup> 那样的高级语言。这就使学生专心于这些程序的使用与特性, 而非程序的细节, 但为了给出结果的确切解释, 程序执行的主要方面都包含在本教程中。

第 3 章扼要介绍蒙特卡罗方法。此方法通常不包含在数值分析课程中, 但应当包含进去, 因为它们是非常广泛使用的计算技术并体现了数学建模与数值方法之间的紧密联系。在学生将要进入的几乎所有领域中, 了解这些结果的基础统计都很有用。

第 4~7 章包括数值分析中的更多标准主题——一元非线性方程的解、浮点运算、问题的条件化与算法的稳定性、线性方程组的解与最小二乘问题, 以及多项式与分段多项式插值。这些内容多数是标准的, 但是我们着重加入关于用 Chebyshev 点作为插值基点时多项式插值有效性的一些新结果。我们指明, 被称作 chebfun 的 MATLAB 软件包在进行插值时的用途, 这种插值要求适当选择插值多项式的次数以使精确水平接近机器精度。第 8~9 章讨论这种方法在数值微分与积分中的应用。我们发现有关多项式与分段多项式插值的内容可以用于一学季, 而一学期课程还要包括数值微分与积分甚至一些关于常微分方程 (ODE) 数值解的内容。附录 A 介绍了关于线性代数的背景材料, 以备复习之需。

本书的其余几章讨论微分方程的数值解。第 11 章介绍常微分方程初值问题的数值解。11.5 节介绍非线性方程组的求解, 此内容是关于求解一元非线性方程的方法的简单推广, 要求学生有多元微积分知识。多元的基本 Taylor 定理放在附录 B 中。关于这一点, 在一学年情形中, 我们通常在第 12 章中覆盖相关内容, 包括特征值问题与求解大线性方程组的迭代法。第 13~14 章讨论两点边值问题与偏微分方程 (PDE) 的数值解, 其中包括快速 Fourier 变换 (FFT), 它可以用于 Poisson 方程的快速求解。FFT 也是前面讲过的 chebfun 包的积分部分, 因此可以多告诉读者一些关于如何有效地进行多项式插值的内容。

可以安排每个学季 (或学期) 的内容使之依赖于前一学季 (学期), 也可以把每个主题安排成独立的课程。这样便要求在每一课程开始时复习 MATLAB, 通常还要复习带余项的 Taylor 定理以及前几章少量内容, 但是要求复习 (如复习线性代数章节) 以便学习 ODE 章

节)的量必须足够少,并且通常能与这样的课程相适应。

我们试图通过描述数学建模在各种新的应用领域的广泛应用,例如电影制作与信息检索,来表明数值方法不仅在工程与科学计算中,而且在很多其他领域十分重要。通过各种例子与习题,我们在强调结果的分析与理解的同时希望表明数值方法各种各样的应用。习题很少仅由一问组成;在大多数情形下一个计算题由收敛性、精度的阶或舍入效果组成。重要的问题往往是,“你的计算结果有多大的可信度”?我们希望证实令人兴奋的新应用与传统分析的混合是成功的。

## 致谢

感谢 Richard Neidinger 于 Davidson 大学用本书稿教学之后的贡献与高见。也感谢 Davidson 大学的学生们为改进本书而给予的宝贵意见,特别感谢 Daniel Orr 对习题的贡献。附加题是 Washington 大学的 Peter Blossey 与 Ramdall LeVeque 提供的。还要感谢 Macalester 大学的 Danny Kaplan 在教学中使用本书的早期版本,并且感谢 Dan Goldman 提供了关于数值方法在特殊方面应用的信息。

# 目 录

|                       |                              |    |
|-----------------------|------------------------------|----|
| 译者序                   | 3.2.2 连续随机变量                 | 39 |
| 前言                    | 3.2.3 中心极限定理                 | 41 |
|                       | 3.3 蒙特卡罗积分                   | 43 |
| 第1章 数学建模              | 3.3.1 布丰的针                   | 43 |
| 1.1 计算机动画中的建模         | 3.3.2 估计 $\pi$               | 45 |
| 1.2 物理建模: 辐射的传播       | 3.3.3 蒙特卡罗积分的另一个例子           | 46 |
| 1.3 运动建模              | 3.4 网上冲浪的蒙特卡罗模拟              | 49 |
| 1.4 生态模型              | 3.5 第3章习题                    | 52 |
| 1.5 对网络冲浪者和谷歌的建模      | 第4章 一元非线性方程的解                | 54 |
| 1.5.1 向量空间模型          | 4.1 分半法                      | 57 |
| 1.5.2 谷歌的 PageRank 算法 | 4.2 Taylor 定理                | 61 |
| 1.6 第1章习题             | 4.3 牛顿法                      | 63 |
| 第2章 MATLAB 的基本操作      | 4.4 拟牛顿法                     | 68 |
| 2.1 启动 MATLAB         | 4.4.1 避免求导数                  | 68 |
| 2.2 向量                | 4.4.2 常数梯度法                  | 68 |
| 2.3 使用帮助              | 4.4.3 正割法                    | 69 |
| 2.4 矩阵                | 4.5 不动点分析法                   | 71 |
| 2.5 生成和运行 M 文件        | 4.6 分形、Julia 集和 Mandelbrot 集 | 75 |
| 2.6 注释                | 4.7 第4章习题                    | 78 |
| 2.7 绘图                | 第5章 浮点运算                     | 82 |
| 2.8 生成自己的函数           | 5.1 因舍入误差导致的重大灾难             | 83 |
| 2.9 输出                | 5.2 二进制表示和基数为 2 的算术运算        | 84 |
| 2.10 更多的循环语句和条件语句     | 5.3 浮点表示                     | 85 |
| 2.11 清除变量             | 5.4 IEEE 浮点运算                | 87 |
| 2.12 记录会话             | 5.5 舍入                       | 89 |
| 2.13 更多的高级命令          | 5.6 正确地舍入浮点运算                | 90 |
| 2.14 第2章习题            | 5.7 例外                       | 91 |
| 第3章 蒙特卡罗方法            | 5.8 第5章习题                    | 92 |
| 3.1 数学纸牌游戏            | 第6章 问题的条件化和算法的稳定性            | 95 |
| 3.2 基础统计              | 6.1 问题的条件化                   | 95 |
| 3.2.1 离散随机变量          |                              |    |

|                             |     |                                 |     |
|-----------------------------|-----|---------------------------------|-----|
| 6.2 算法的稳定性 .....            | 96  | 第 9 章 数值微分和 Richardson          |     |
| 6.3 第 6 章习题 .....           | 99  | 外推 .....                        | 165 |
| 第 7 章 解线性方程组的直接方法和          |     | 9.1 数值微分 .....                  | 165 |
| 最小二乘问题 .....                | 101 | 9.2 Richardson 外推 .....         | 172 |
| 7.1 复习矩阵的乘法 .....           | 101 | 9.3 第 9 章习题 .....               | 175 |
| 7.2 Gauss 消元法 .....         | 102 | 第 10 章 数值积分 .....               | 177 |
| 7.2.1 运算计数 .....            | 105 | 10.1 Newton-Cotes 公式 .....      | 177 |
| 7.2.2 LU 分解 .....           | 107 | 10.2 基于分段多项式插值的                 |     |
| 7.2.3 选主元 .....             | 108 | 公式 .....                        | 181 |
| 7.2.4 带状矩阵和不需选主元            |     | 10.3 Gauss 求积公式 .....           | 183 |
| 的矩阵 .....                   | 111 | 10.4 Clenshaw-Curtis 求积公式 ..... | 188 |
| 7.2.5 高性能实现条件 .....         | 114 | 10.5 Romberg 积分 .....           | 189 |
| 7.3 解 $Ax=b$ 的其他方法 .....    | 116 | 10.6 周期函数和 Euler-Maclaurin      |     |
| 7.4 线性方程组的条件化 .....         | 119 | 公式 .....                        | 191 |
| 7.4.1 范数 .....              | 119 | 10.7 奇异性 .....                  | 194 |
| 7.4.2 线性方程组解的敏感性 .....      | 122 | 10.8 第 10 章习题 .....             | 195 |
| 7.5 部分主元的 Gauss 消元法的        |     | 第 11 章 常微分方程初值问题的               |     |
| 稳定性 .....                   | 127 | 数值解 .....                       | 197 |
| 7.6 最小二乘问题 .....            | 128 | 11.1 解的存在性和唯一性 .....            | 198 |
| 7.6.1 法方程组 .....            | 129 | 11.2 单步方法 .....                 | 201 |
| 7.6.2 QR 分解 .....           | 130 | 11.2.1 Euler 方法 .....           | 202 |
| 7.6.3 数据的多项式拟合 .....        | 133 | 11.2.2 基于 Taylor 级数的高阶          |     |
| 7.7 第 7 章习题 .....           | 136 | 方法 .....                        | 205 |
| 第 8 章 多项式和分段多项式插值 ..        | 140 | 11.2.3 中点方法 .....               | 206 |
| 8.1 Vandermonde 方程组 .....   | 140 | 11.2.4 基于求积公式的方法 .....          | 207 |
| 8.2 插值多项式的 Lagrange         |     | 11.2.5 经典四阶 Runge-Kutta 和       |     |
| 形式 .....                    | 140 | Runge-Kutta-Fehlberg            |     |
| 8.3 插值多项式的牛顿形式 .....        | 143 | 方法 .....                        | 208 |
| 8.4 多项式插值的误差 .....          | 147 | 11.2.6 用 MATLAB 常微分方程           |     |
| 8.5 在 Chebyshev 点的插值和       |     | 解题器的例子 .....                    | 210 |
| chebfun .....               | 149 | 11.2.7 单步方法分析 .....             | 211 |
| 8.6 分段多项式插值 .....           | 152 | 11.2.8 实际执行的考虑 .....            | 214 |
| 8.6.1 分段三次 Hermite 插值 ..... | 155 | 11.2.9 方程组 .....                | 215 |
| 8.6.2 三次样条插值 .....          | 156 | 11.3 多步方法 .....                 | 216 |
| 8.7 若干应用 .....              | 158 | 11.3.1 Adams-Bashforth 和 Adams- |     |
| 8.8 第 8 章习题 .....           | 160 | Moulton 方法 .....                | 216 |
|                             |     | 11.3.2 一般线性 $m$ 步方法 .....       | 218 |

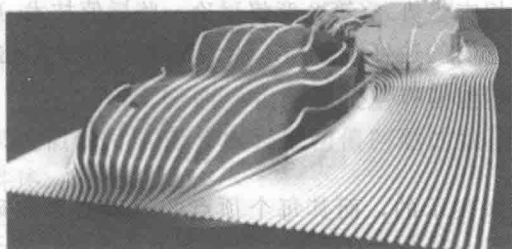
|                                                          |            |
|----------------------------------------------------------|------------|
| 11.3.3 线性差分方程 .....                                      | 220        |
| 11.3.4 Dahlquist 等价定理 .....                              | 222        |
| 11.4 Stiff 方程 .....                                      | 223        |
| 11.4.1 绝对稳定性 .....                                       | 225        |
| 11.4.2 向后微分公式(BDF 方法) .....                              | 228        |
| 11.4.3 隐式 Runge-Kutta(IRK)<br>方法 .....                   | 229        |
| 11.5 隐式方法解非线性方程组 .....                                   | 230        |
| 11.5.1 不动点迭代 .....                                       | 230        |
| 11.5.2 牛顿法 .....                                         | 231        |
| 11.6 第 11 章习题 .....                                      | 232        |
| <b>第 12 章 数值线性代数的更多讨论:<br/>特征值和解线性方程组的<br/>迭代法 .....</b> | <b>236</b> |
| 12.1 特征值问题 .....                                         | 236        |
| 12.1.1 计算最大特征对的幂法 .....                                  | 244        |
| 12.1.2 逆迭代 .....                                         | 247        |
| 12.1.3 Rayleigh 商迭代 .....                                | 249        |
| 12.1.4 QR 算法 .....                                       | 249        |
| 12.1.5 谷歌的 PageRank .....                                | 252        |
| 12.2 解线性方程组的迭代法 .....                                    | 257        |
| 12.2.1 解线性方程组的基本<br>迭代法 .....                            | 257        |
| 12.2.2 简单迭代 .....                                        | 258        |
| 12.2.3 收敛性分析 .....                                       | 260        |
| 12.2.4 共轭梯度法 .....                                       | 264        |
| 12.2.5 解非对称线性方程组<br>的方法 .....                            | 269        |
| 12.3 第 12 章习题 .....                                      | 270        |

|                                |            |
|--------------------------------|------------|
| <b>第 13 章 两点边值问题的数值解 .....</b> | <b>273</b> |
| 13.1 应用: 稳态温度分布 .....          | 273        |
| 13.2 有限差分方法 .....              | 274        |
| 13.2.1 精确性 .....               | 276        |
| 13.2.2 更一般的方程和边界条件 .....       | 281        |
| 13.3 有限元方法 .....               | 285        |
| 13.4 谱方法 .....                 | 293        |
| 13.5 第 13 章习题 .....            | 294        |
| <b>第 14 章 偏微分方程的数值解 .....</b>  | <b>296</b> |
| 14.1 椭圆型方程 .....               | 297        |
| 14.1.1 有限差分方法 .....            | 297        |
| 14.1.2 有限元方法 .....             | 301        |
| 14.2 抛物型方程 .....               | 303        |
| 14.2.1 半离散化和直线法 .....          | 303        |
| 14.2.2 时间离散化 .....             | 304        |
| 14.3 分离变量 .....                | 310        |
| 14.4 双曲线方程 .....               | 314        |
| 14.4.1 特征 .....                | 314        |
| 14.4.2 双曲线型方程组 .....           | 315        |
| 14.4.3 边界条件 .....              | 316        |
| 14.4.4 有限差分方法 .....            | 316        |
| 14.5 Poisson 方程的快速方法 .....     | 320        |
| 14.6 多重网格法 .....               | 324        |
| 14.7 第 14 章习题 .....            | 327        |
| <b>附录 A 线性代数复习 .....</b>       | <b>329</b> |
| <b>附录 B 多元 Taylor 定理 .....</b> | <b>340</b> |
| <b>参考文献 .....</b>              | <b>342</b> |
| <b>索引 .....</b>                | <b>348</b> |

## 第1章 数学建模

数值方法在现代科学中扮演着重要的角色,科研工作往往在计算机上进行,而不是依赖于种种实验设备.当然,科学实验室的角色极少能被计算机模拟完全取代,后者通常作为实验手段的补充而存在.

例如,在图 1-1a 中描绘的是对两辆纳斯卡汽车进行的空气动力学模拟.为实现这一模拟,我们需要求出相关偏微分方程组(Partial Differential Equation, PDE)的数值解,这组方程对流过车体的气流建立数学模型.由于汽车的车身必须光滑平顺,所以我们对它的建模常常用上三次(或更高次)的样条函数.类似的建模方法也在飞机设计当中使用.第 8 章和第 14 章将探讨使用样条函数求解偏微分方程组的数值问题.



a) 两辆纳斯卡汽车描绘的当其中一辆刚经过另一辆时引起的空气流线型模拟(用STAR-CCM+模拟)



b) 利用数值优化求解蛋白质折叠模型

图 1-1

生物数学这一在工业、学术和政界中都火热的研究领域,为我们提供了另外的例子,数值算法在其中扮演了关键性的角色.比如,蛋白质折叠模型通常作为一个大规模的优化(optimization)问题得以解决,而蛋白质本身是用“最小能量原则”来确定自身形状的——对大自然来说,这样的设定是小事一桩,不足挂齿,但对人类的计算来说,它就很难了.数值最优化本身是一个完整的主题,本书不便多涉;然而,大多数优化过程的核心内容仍由本书所述的数值方法所组成.

在学习如何分析和应用诸多有效而精确的数值方法之前,我们不妨先一窥数学建模这个主题,它能将现实世界中的问题转化成一系列方程,使得数值分析师有其用武之地.数学上的方程通常不过是表示真实的物理状态的一个模型(model),因此,对数值分析家或计算机科学家而言,对这一模型的来源能有所认识,是至关重要的.实际上,数值分析师有时与设计出这些模型的科学家、工程师一起工作.这样的互动之所以重要有着以下的原因:第一,许多算法无法求出真实解,而只能获得近似解,为判断什么样的近似解精确到可以接受,人们必须明了原问题的来源.若是在战场上定位敌方坦克,数厘米的误差足可容忍;但是在激光外科手术中确定肿瘤位置时,这种误差将是无法容忍的.第二,即使算法在理论上能有精确解,但在一台精度有限的计算机上应用时,求得的结果也大多是不精

确的；弄明白有限精度运算对结果准确性的影响，也是数值分析的任务之一。有关有限精度计算的问题，将在第5章研究。本章将介绍数值计算的大量应用，它们来自各行各业的数学建模实践。

## 1.1 计算机动画中的建模

计算机生成的许多主导银幕的图像是由动态模拟技术产生的，即，运用物理定律建立模型，然后用数值方法计算该模型的结果。本节将展示在2002年电影《星球大战前传II：克隆人的进攻》的动画中数字的作用。特别是，我们要仔细考察用于创造绝地大师尤达这个角色的一些数值特效。尤达大师在1980年的《星球大战2：帝国反击战》首次出现，彼时他是由一个线控木偶饰演的。而在2002年的电影里，尤达已经鸟枪换炮，由采用大量数值算法的数码技术来打造了。

创建一个数字化的尤达大师，关键就是要让这个角色的举止看上去逼真。尤达身体的动作采用关键帧动画技术来描绘。在关键帧技术里，一个姿势是由某些特定点确定的，之后计算机将采用插值法来自动决定中间帧的相应姿势。（第8章将讨论一些插值技术。）动画师对运动的对象可施以多重控制，比如指定它们的速度和方向。当绘制者们确定尤达大师身体如何运动时，计算机必须把其长袍的拂动给刻画出来。

### 长袍模型

参见图1-2，我们看到长袍是用三角形来表示的，而其每个顶点的运动必须要确定。将每个顶点看作是一个具有质量、位置、速度，对外力有反应，但没有大小的点状粒子。

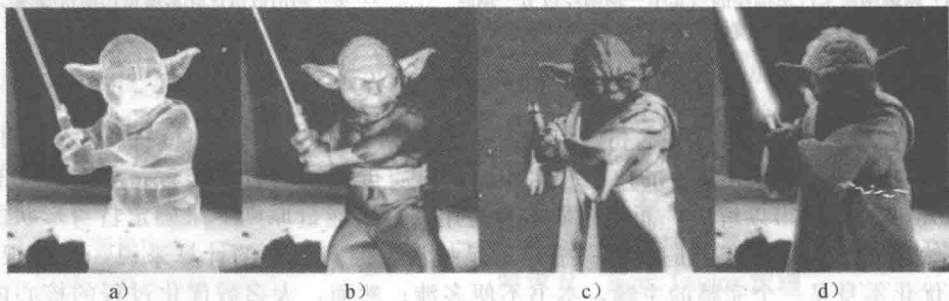


图 1-2

图1-2是《星球大战前传II》中尤达大师和杜库伯爵战斗场景的各个模拟阶段的示意。在b和c里能看到尤达的两层衣服，它们是分开计算的。一个称作“碰撞检测”的方法保证不会透过外衣看见他的内衣。简化的衣物图饰模型构建一个真正衣服的外观，最终渲染出d的效果<sup>[22]</sup>。（图片由Lucasfilm有限公司提供。《星球大战前传II：克隆人的进攻》中©2002 Lucasfilm公司。版权所有。授权使用。非授权复制违反相关法律。数字化的工作由工业光魔公司完成。）粒子的运动要遵守牛顿第二定律，它由以下方程表示

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} = m(d^2\mathbf{y}/dt^2) \quad (1.1)$$

其中， $\mathbf{y}$ 是时间 $t$ 的距离函数。请注意，因为我们在三维空间中计算，所以方程涉及向量

值函数。由于粒子具有质量( $m \neq 0$ )，式(1.1)可以改写为二阶常微分方程(ODE)

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = \frac{F}{m} \quad (1.2)$$

因为在某个初始时刻粒子的状态已经给定了，所以这个常微分方程是一个初值问题的一部分。在电影的情况下，这个初始时刻指的是在一个可能持续几秒或几分之一秒的场景的开始。

为了保持长袍的形状，相邻粒子会用弹力相互连接到一起。胡克定律规定弹簧对两端施加的力  $F$  是与弹簧当前长度及其不受力时的长度  $x_0$  的差成正比的。数学表达式为

$$F_s = -k(x - x_0)$$

其中， $x$  表示弹簧的当前长度， $k$  是弹性系数。为简单起见，我们给出的是胡克定律在一维情况下的公式，但模拟尤达大师的长袍需要一个三维版本。

在制造尤达大师长袍的动画时，许多其他的力也要考虑到，包括重力、风力、碰撞力、摩擦力，甚至其他凭空造出来的力，它们的存在仅仅是为了实现满足导演要求的动作。在最简单的情况下，这个长袍模型的解析解可能存在。然而，在计算机动画设计中，作用于粒子的力在不断地改变，因此要在每一帧找到一个分析解，即便可能，也是不切实际的。相反，数值方法通过模拟粒子在离散时间下每一步的状况，用来求近似解。常微分方程组初值问题的数值解有很多文献，其中有一些方法会在第11章讲述。

### 对物理定律的扭曲

在模拟《星球大战 II》中尤达大师的长袍的运动时，动画师发现，如果实际执行这个特效，那么长袍将会被强大的加速度给撕开。为解决这个问题，动画师特意在模拟中加入了为这款袍子量身定做的“保护”特效，使得加速度能降低。最终，通过超人的运动，穿在数字演员身上的衣服变形较小，在左侧的图中，我们看到欧比旺·克诺比(由伊万·麦格雷戈饰演)在《星球大战 II》中表演一个对大活人来说极其危险的特技。注意，他的头发就像衣服一样，用一束束被弹簧串联在一起的粒子来模拟<sup>[22]</sup>。(图片由 Lucasfilm 有限公司提供。《星球大战前传 II：克隆人的进攻》中 ©2002 Lucasfilm 公司。版权所有。授权使用。非授权复制违反相关法律。数字化的工作由工业光魔公司完成。)



创造令观众信服的模拟效果，是动画电影的一个目标。作为科学模拟的首要目标，准确性可能与这个目标产生了冲突。虽然数值模拟被科学家和娱乐业用于不同目的，但它们有很多共同的数学工具和策略。现在，让我们把注意力转向科学中的模拟。

## 1.2 物理建模：辐射的传播

辐射传输可以用随机过程描述，用蒙特卡罗模拟来建模。蒙特卡罗方法将在第3章讲

述。辐射传输的模型，也可以由微分-积分方程——玻尔兹曼迁移方程建立。这是一个带有积分式的偏微分方程。第 14 章会讨论偏微分方程数值解，而第 10 章将讨论数值积分方法。结合这些想法以及用于求解大型线性系统的迭代方法(12.2 节)，可用来求玻尔兹曼迁移方程的近似解。

你知道你的身体接受一次牙科 X 射线检查所受的辐射量有多大吗？你大概还记得在检查的时候穿的防护衣吧？还记得在 X 光机打开的时候牙医助理匆忙离开的背影吗？穿上防护衣是为了屏蔽辐射。为了有助于设计这样的保护材料和验证其有效性，我们应该怎样对 X 射线光子的传播建模呢？在这里，光子是随着电子束的开关而产生的。单个光子的能量和方向无法预测，但是 X 射线的整体能量分布和方向能够被近似估算出来。

能量、位置、方向、制造光子的时间是系统模型中的自变量。可以认为每个变量都是随机的，但遵循着一定的分布。例如，光子能量的分布如图 1-3 所示。

假定入射光子在进入被测物之前是沿直线运动的，然后它们以一定的概率(具体概率依赖于射入材料的性质)和该物体的原子碰撞，如图 1-4 所示。这种碰撞通常会把光子的能量转移到原子内部的电子上去，之后光子能量减弱，方向也发生了变化。在最极端的情况下，光子会把自己所有的能量转移给电子，这样它就整个被原子吸收了。

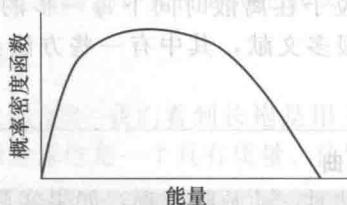


图 1-3 光子能量分布的一个例子

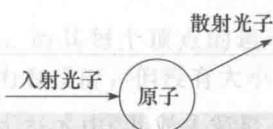
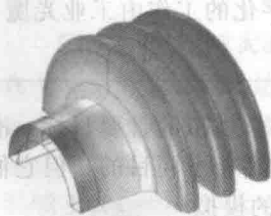


图 1-4 光子与原子的碰撞

为了做好模拟工作，以上事件发生的概率是需要知晓的。这些概率可以从 X 射线以及可能用来屏蔽的材料的理论和实测性质中推算出来。人们可以运行通常包含了百万数量级光子的计算机模拟程序，其中的每个光子都遵守由概率分布决定的随机路径。每个光子都会被追踪，直到它们被吸收，或飞出系统一去不复返为止。模拟的平均结果可以用来确定在特定位置接受到的辐射量。

### 研究半导体



研究半导体材料中电子的行为需要求解玻尔兹曼迁移方程，该方程包含复杂的积分。确定性方法和蒙特卡罗方法有时可用于这种情形。左边的图是用在辐射迁移问题的确定性模型中的有限元离散化方法(图像源自伦敦帝国学院和 EDF 能源办的应用模型及计算小组，保留版权归拥有者的所有其他版权)。

### 1.3 运动建模

在世界杯足球赛中, 球员们总是尝试利用足球在空中飘忽迷离的曲线和回旋的轨迹来迷惑守门员, 把球送入球门. 世界级的球员(如巴西的罗伯特·卡洛斯, 德国的巴拉克和英格兰的贝克汉姆)尤其擅长从任意球中踢出这样的曲线来.

根据谢菲尔德大学体育工程研究组和福鲁特欧洲公司(Fluent Europe)的计算流体力学(CFD)的研究, 足球的形状和表面, 以及它的初始方向, 对球在空中的轨迹起重要的作用. 特别地, 这项研究增加了人们对“旋转球”效果的了解, 有时这种效果让众多站在最后一道防线的守门员困惑. 为了得到这种结果, 人们把足球分块数字化了, 再如图 1-5 所示拼接起来. 注意, 在接缝附近的分块格外细, 这是边界层恰当建模所需要的.

有时候任意球的初速会高达每小时 70 英里<sup>①</sup>. 风洞实验表明根据足球表面结构和纹理, 足球的运动以每小时 20~30 英里的速度由层流转向湍流, 如图 1-6 所示.

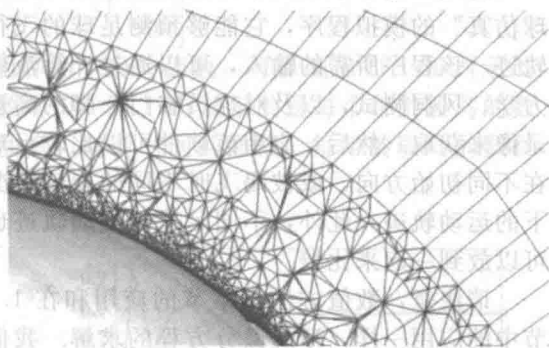
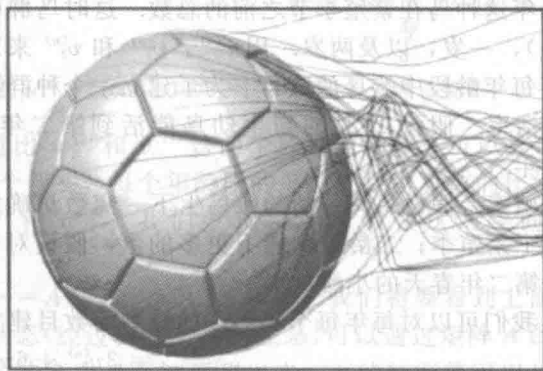


图 1-5 在谢菲尔德大学进行的计算流体力学模拟中, 重要的一步是用一台三维接触式激光扫描仪捕捉足球的几何构型. 本图显示了由约 900 万个单元所构成的足球网格的一部分(图片由谢菲尔德和安塞思大学提供)



a) 接受风洞测试的无自旋足球



b) 计算流体力学模拟出的无自旋足球的尾迹线, 气流速度是 27 英里/小时 (图片由谢菲尔德和安塞思大学提供)

图 1-6

贝克汉姆在 2001 年世界杯预选赛英格兰对阵希腊的比赛中有一个令人难忘的进球, 谢菲尔德大学开发的技术促进了对这个进球的详细分析. 从某种意义上说, 贝克汉姆的临门一脚运用了复杂的物理学. 虽然谢菲尔德的 CFD 研究仅仅在超过平均时间时能够准确地模

① 1 英里/小时 = 0.44704 米/秒.

6

拟湍流，因此还不能给出所有情况下的轨迹，但这样的研究已经足以影响从初学到专业的各个层次的运动员。例如，足球制造商们可以利用现有的研究成果来制造轨迹更一致的或更有趣的足球，以满足不同层次球友的需要。这一研究工作也能影响到足球运动员的训练。参考文献[6]和[7]能提供更多的信息。

为此，谢菲尔德大学开发了一个名叫“足球仿真”的模拟程序，它能够预测足球的飞行轨迹。该程序所需的输入，可以通过计算流体力学、风洞测试，以及对球员临门一脚的高速录像来获取。然后，应用该软件可以比较足球在不同初始方向，或被踢飞时不同的旋转状况下的运动轨迹。此外，不同足球的运动轨迹也可以放到一起来比较。

请注意，数值方法在本节的应用和在 1.1 节中的应用一样，涉及微分方程的求解。我们讨论的下一个应用涉及离散现象。

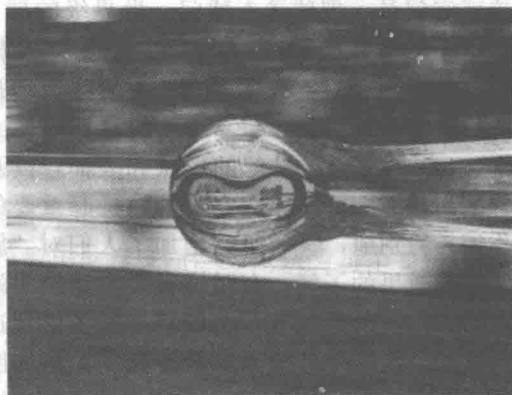


图 1-7 2006 年“团队之星”足球的局部速度着色的高速气流迹线(由谢菲尔德和安塞恩大学授权使用)

7

## 1.4 生态模型

数值方法在计算生物学领域的应用日益增长。本节将要探索生态学中一个简化的例子。

假设我们要研究某种鸟的种群数目，这些鸟在每年春天出生，至多有三年寿命。我们将跟踪每年这种鸟在繁殖季节之前的总数。这时鸟群可以分成 3 个年龄段：零岁(在上一个春季出生)，一岁，以及两岁。用  $v_0^{(n)}$ 、 $v_1^{(n)}$  和  $v_2^{(n)}$  来表示对第  $n$  年的种群进行观察时，得到第  $n$  年每年龄段中雌鸟的数目。为了建立一个种群数量模型，我们需要知道：

- 存活率。假设 20% 的新生幼鸟能活到第二年春天，50% 的一龄鸟将会存活到下一年。
- 繁殖率。假设每只一龄的雌鸟生下一窝数量确定的蛋，平均有三只小雌鸟能活到下一个繁殖季；二龄雌鸟能下更多的蛋，假设对于每只这样的雌鸟，能有六只成功活到第二年春天的小雌鸟。

那么我们可以对每年每个年龄段的雌鸟的数目建立以下模型：

$$\begin{aligned} v_0^{(n+1)} &= 3v_1^{(n)} + 6v_2^{(n)} \\ v_1^{(n+1)} &= 0.2v_0^{(n)} \\ v_2^{(n+1)} &= 0.5v_1^{(n)} \end{aligned}$$

用矩阵-向量的形式来表示，则为

$$\mathbf{v}^{(n+1)} = \mathbf{A}\mathbf{v}^{(n)} = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 6 \\ 0.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_0^{(n)} \\ v_1^{(n)} \\ v_2^{(n)} \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

式(1.3)中的这个矩阵  $\mathbf{A}$  可以用来预测种群未来的数目以及长期的变化规律。这种可以反映存活率和繁殖率的矩阵，叫作**莱斯利矩阵**(Leslie matrix)。

假设在一开始，种群里有 3000 只雌鸟，每个年龄段各 1000 只。代入式(1.3)，得到

8

$$\begin{aligned}
 \mathbf{v}^{(0)} &= \begin{pmatrix} 1000 \\ 1000 \\ 1000 \end{pmatrix} & \mathbf{v}^{(1)} &= \mathbf{A}\mathbf{v}^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & 3 & 6 \\ 0.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{v}^{(0)} = \begin{pmatrix} 9000 \\ 200 \\ 500 \end{pmatrix} \\
 \mathbf{v}^{(2)} &= \mathbf{A}\mathbf{v}^{(1)} = \begin{pmatrix} 3600 \\ 1800 \\ 100 \end{pmatrix} & \mathbf{v}^{(3)} &= \mathbf{A}\mathbf{v}^{(2)} = \begin{pmatrix} 6000 \\ 720 \\ 900 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

以年份为自变量, 将每个年龄组的鸟的数目作为年份的函数, 可以画出如 1-8a 所示的种群数目示意图. 显然, 种群里鸟的数量呈指数增长. 图 1-8b 显示的是每个年龄段鸟的数目占种群总数的比例, 同样以年份为自变量. 注意, 随着时间的推移, 每年龄段鸟的数目占总数的比例会稳定下来.

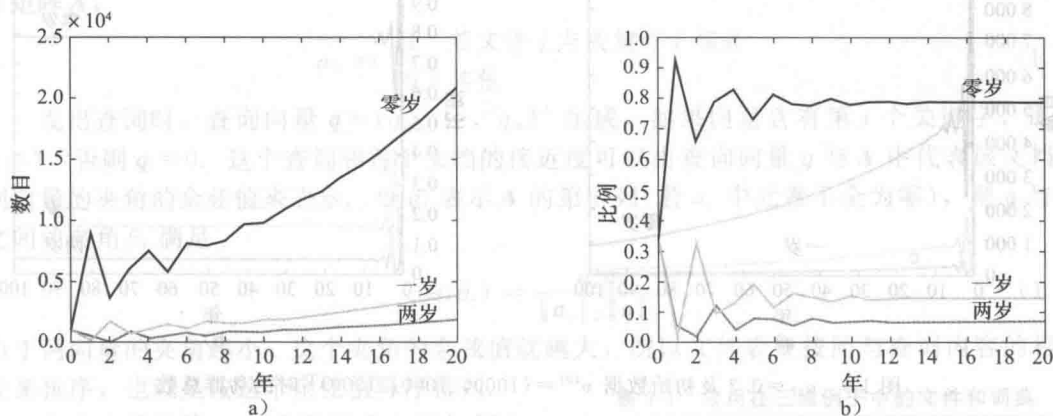


图 1-8  $a_{32}=0.5$  及初始数据  $\mathbf{v}^{(0)}=(1000, 1000, 1000)^T$  时的鸟群总数

为了做得更定量一些, 我们可以对比  $\mathbf{v}^{(20)}$  和  $\mathbf{v}^{(19)}$  这两个种群数向量. 可以算出  $\mathbf{v}^{(20)}=(20\ 833, 3873, 1797)^T$ , 这表示在第 20 个年头, 每个年龄段的鸟的数目占总数的比例分别为  $(0.7861, 0.1461, 0.0068)^T$ . 比较  $\mathbf{v}^{(20)}$  和  $\mathbf{v}^{(19)}$ , 我们发现种群总数在这两年间增长了 1.0760 倍.

注意,  $\mathbf{v}^{(n)}=\mathbf{A}\mathbf{v}^{(n-1)}=\mathbf{A}^2\mathbf{v}^{(n-2)}=\cdots=\mathbf{A}^n\mathbf{v}^{(0)}$ . 在第 12 章里, 我们将要看到上面的这个式子是如何表明这个线性系统的渐近性态(经过长时间后的性态)可以通过矩阵  $\mathbf{A}$  的主特征值(绝对值最大的特征值)和与之联系的特征向量而被预测出来.  $\mathbf{A}$  的特征值可以被算出是  $1.0759, -0.5380+0.5179i, -0.5380-0.5179i(i=\sqrt{-1})$ . 其中模最大的特征值是 1.0759, 在各分量的和为 1 这一条件的约束下, 相应的特征向量是  $\hat{\mathbf{v}}=(0.7860, 0.1461, 0.0679)^T$ . 模最大的特征值决定了经过足够长时间后种群数目的增长率, 特征向量  $\hat{\mathbf{v}}$  的元素给出了各年龄段的鸟的数目占种群总数的比例. 像  $\mathbf{A}$  一样  $3\times 3$  矩阵的特征值和特征向量可以通过分析计算得到, 在第 12 章, 我们将学习一些方法来以数值形式模拟更大矩阵的特征值和特征向量.

#### 捕捉策略 (Harvesting Strategies)

我们采用这个模型去研究以下问题: 假设我们为了控制生物数目的指数式增长, 或者

为了利用它们作为食物来源(或者兼有以上两种目的),需要捕捉整个种群中一定比例的成员,那么我们需要捕捉多少,才能既有效控制它们的增长,又不至于让这种生物灭绝呢?

捕捉将会降低生存率.我们希望把生存率降低到一个值上,使得相关问题里矩阵的主特征值的绝对值非常接近1,这意味着长期来看,这种生物的总数会保持稳定.如果我们把生存率降得太低,使得所有特征值的绝对值都小于1,那么该生物种群的数量将会指数型减少,以至灭绝.

例如,假设我们捕猎了20%的一龄鸟,使得存活率从0.5降到0.3.这么一来,矩阵 $A$ 的元素 $a_{32}$ 将会从0.5降到0.3,使得最大特征值降到0.9830.图1-9是这些参数下种群数目变化的模拟图.

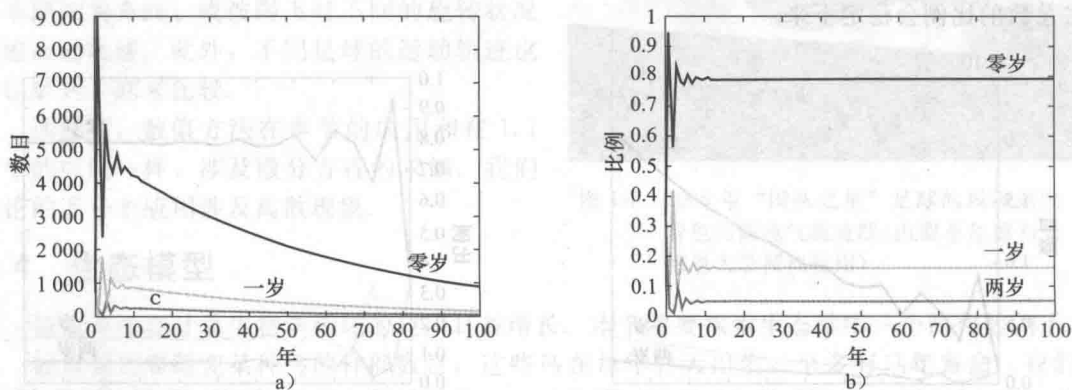


图 1-9  $a_{32}=0.3$  及初始数据  $v^{(0)}=(1000, 1000, 1000)^T$  时的鸟群总数

注意,此时这种鸟的数量面临指数式的衰减,最终面临灭绝.数目的减少是逐渐的,在100年之内,鸟的数目将会从3000降到1148.渐渐地(长期来看),每年鸟的总数会降到上一年的0.9830.所以,如果我们花了100年的时间,才把鸟的数量降到1148只,那么还需要多少年才能把它们的数目降到小于1(也就是灭绝)呢?这个年数 $k$ 将满足方程  $1148(0.9830)^k=1$ ,经计算得出  $k=-\log(1148)/\log(0.9830)\approx 411$ 年.

人们可以尝试求出 $a_{32}$ 的值使得该问题 $A$ 中模最大特征值大小恰好为1,从种群数量控制的角度来看,这是一个有趣的数学问题,但它可能会成为徒劳无功之举.毕竟,上面的这个模型是高度简化的,即使是存活率和繁殖率,也会随着时间变化,而不是像假设那样保持不变.为了对特别的捕捉策略进行调整以适应环境的变化,必须频繁地监测种群的数目.

## 1.5 对网络冲浪者和谷歌的建模

向搜索引擎提交查询是信息检索的常用方法.众多公司为了占据搜索引擎网页上靠前的位置而竞争.事实上,一些公司的业务就是帮助付费客户使其网页能在被搜索的时候更靠前一些.这是通过利用搜索引擎算法相关的知识而得以实现的.虽然有不少关于搜索算法的知识是公开的,但仍有一些仅为公司所有,不为外人所知的部分.本节将讨论如何基于网页的内容对其排序,本质上是介绍性的.欢迎感兴趣的读者进一步研究搜索引擎分析的文献,这是一个不断发展的领域.在这里,我们会考虑一个简单的向量空间模型,用于