



北京市高等教育精品教材立项项目

北京大学数学教学系列丛书

本科生

数学基础课教材

数值分析

张平文 李铁军 编著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

0241

145

2007

北京大学数学教学系列丛书

数值分析

张平文 李铁军 编著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

图书在版编目 (CIP) 数据

数值分析 / 张平文, 李铁军编著. — 北京: 北京大学出版社, 2007.1

(北京大学数学教学系列丛书)

ISBN 978-7-301-10794-2

I. 数… II. ①张… ②李… III. 数值分析 — 高等学校 — 教材 IV. O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 062032 号

书 名: 数值分析

著作责任者: 张平文 李铁军 编著

责任编辑: 曾琬婷

标准书号: ISBN 978-7-301-10794-2/O · 0700

出版者: 北京大学出版社

地 址: 北京市海淀区成府路 205 号 100871

网 址: <http://www.pup.cn>

电 话: 邮购部 62752015 发行部 62750672 理科编辑部 62752021

出版部 62754962

电子信箱: zpup@pup.pku.edu.cn

印刷者: 北京大学印刷厂

发 行 者: 北京大学出版社

经 销 者: 新华书店

890 mm × 1240 mm A5 8.75 印张 250 千字

2007 年 1 月第 1 版 2007 年 1 月第 1 次印刷

印 数: 0001—4000 册

定 价: 18.00 元

内 容 简 介

本书是高等院校计算数学专业本科生学习数值分析课程的教材。全书内容除包括传统数值分析课程讲授的误差分析、多项式插值、数值微分与积分、非线性方程的数值解法、常微分方程初值问题的数值解法等以外，还加入了快速 Fourier 变换和 Monte Carlo 方法。此外，在传统的内容中也加入了新的元素，例如在多项式插值中加入了有理逼近，数值积分中介绍了谱精度的概念，常微分方程数值解中加入了刚性方程的介绍，等等。本书不仅强调各种数值算法的数学分析与原理，而且强调算法实现过程中必须注意的一些基本问题。另外，本书还介绍了一些实现算法的常用数学软件及其获取的途径，以便于读者学习和使用。每章末尾都附有相当数量的理论和上机计算的习题，并对有一定难度的部分给出提示，以供读者选用。

本书也可供从事与数值计算相关工作的科技人员参考。

《北京大学数学教学系列丛书》编委会

名 誉 主 编: 姜伯驹

主 编: 张继平

副 主 编: 李 忠

编 委: (按姓氏笔画为序)

王长平 刘张炬 陈大岳 何书元

张平文 郑志明

编委会秘书: 方新贵

责 任 编 辑: 刘 勇

作者简介

张平文 北京大学数学科学学院教授, 博士生导师, 教育部长江特聘教授, 主要从事科学计算、复杂流体多尺度建模与计算、移动网格等方面的研究。现任科学与工程计算系主任, 北京大学科学与工程计算中心常务副主任。兼任 973 项目“高性能科学计算研究”第四课题“材料物性多物理多尺度计算研究”课题组长; 中国计算数学学会副理事长及青年工作委员会和高校工作委员会主任; 中国工业与应用数学学会副理事长及学术委员会主任; “SIAM Journal on Numerical Analysis”等国内外杂志编委。发表论文 50 余篇, 出版专著《涡度法》、教材《数值线性代数》和《计算方法》(合编)。1999 年获冯康科学计算奖, 霍英东教育基金会第七届高等院校青年教师奖(研究类)一等奖; 2000 年获教育部首届高等学校优秀青年教师教学科研奖励计划青年教师奖; 2002 年国家杰出青年基金获得者并于同年获北京市五四青年奖章。

李铁军 北京大学数学科学学院科学与工程计算系副教授, 博士。研究方向为复杂流体多尺度分析、随机建模与算法、随机微分方程数值解。2001 年开始从事数值分析、流体力学引论、随机模拟等课程的建设 and 教学工作。出版教材《计算方法》(合编)。

序 言

自 1995 年以来,在姜伯驹院士的主持下,北京大学数学科学学院根据国际数学发展的要求和北京大学数学教育的实际,创造性地贯彻教育部“加强基础,淡化专业,因材施教,分流培养”的办学方针,全面发挥我院学科门类齐全和师资力量雄厚的综合优势,在培养模式的转变、教学计划的修订、教学内容与方法的革新,以及教材建设等方面进行了全方位、大力度的改革,取得了显著的成效。2001 年,北京大学数学科学学院的这项改革成果荣获全国教学成果特等奖,在国内外产生很大反响。

在本科教育改革方面,我们按照加强基础、淡化专业的要求,对教学各主要环节进行了调整,使数学科学学院的全体学生在数学分析、高等代数、几何学、计算机等主干基础课程上,接受学时充分、强度足够的严格训练;在对学生分流培养阶段,我们在课程内容上坚决贯彻“少而精”的原则,大力压缩后续课程中多年逐步形成的过窄、过深和过繁的教学内容,为新的培养方向、实践性教学环节,以及为培养学生的创新能力所进行的基础科研训练争取到了必要的学时和空间。这样既使学生打下宽广、坚实的基础,又充分照顾到每个人的不同特长、爱好和发展取向。与上述改革相适应,积极而慎重地进行教学计划的修订,适当压缩常微、复变、偏微、实变、微分几何、抽象代数、泛函分析等后续课程的周学时,并增加了数学模型和计算机的相关课程,使学生有更大的选课余地。

在研究生教育中,在注重专题课程的同时,我们制定了 30 多门研究生普选基础课程(其中数学系 18 门),重点拓宽学生的专业基础和加强学生对数学整体发展及最新进展的了解。

教材建设是教学成果的一个重要体现。与修订的教学计划相配合,我们进行了有组织的教材建设。计划自 1999 年起用 8 年的

时间修订、编写和出版 40 余种教材。这就是将陆续呈现在大家面前的《北京大学数学教学系列丛书》。这套丛书凝聚了我们近十年在人才培养方面的思考，记录了我们教学实践的足迹，体现了我们教学改革的成果，反映了我们对新世纪人才培养的理念，代表了我们新时期的数学教学水平。

经过 20 世纪的空前发展，数学的基本理论更加深入和完善，而计算机技术的发展使得数学的应用更加直接和广泛，而且活跃于生产第一线，促进着技术和经济的发展，所有这些都正在改变着人们对数学的传统认识。同时也促使数学研究的方式发生巨大变化。作为整个科学技术基础的数学，正突破传统的范围而向人类一切知识领域渗透。作为一种文化，数学科学已成为推动人类文明进化、知识创新的重要因素，将更深刻地改变着客观现实的面貌和人们对世界的认识。数学素质已成为今天培养高层次创新人才的重要基础。数学的理论和应用的巨大发展必然引起数学教育的深刻变革。我们现在的改革还是初步的。教学改革无禁区，但要十分稳重和积极；人才培养无止境，既要遵循基本规律，更要不断创新。我们现在推出这套丛书，目的是向大家学习。让我们大家携起手来，为提高中国数学教育水平和建设世界一流数学强国而共同努力。

张继平

2002 年 5 月 18 日

于北京大学蓝旗营

前 言

在教育部 1998 年颁布的普通高等学校专业目录中, 出现了“信息与计算科学”这一数学类新专业. 它包含了原有的计算数学及应用软件和信息科学专业. 它的出现很好地适应了目前以信息技术和计算技术为核心的专业人才培养和学科发展的需要.

另外, 近年来在教育部领导下, 高等学校每年大量扩大招生, 从而使得我国的高等教育从精英化向大众化转变. 现在全国大约有四百所高校开办了“信息与计算科学”专业. 虽然数学与统计学教学指导委员会对这个新的数学类专业课程设置开展了研究, 但专业课程设置与凝练及教材建设还需要很长一段时间. 现阶段, 北京大学还是采取计算科学与信息科学分开设置课程, 尽量保持精英化教育的一些特色.

数值分析是计算科学的重要专业基础课, 它讨论的是如何运用现代计算工具高效求解科学与工程中的数值计算问题. 这门课程在我国高等学校中最早是为计算数学专业的学生开设的, 时间可以追溯到 1950 年代. 从那时开始, 就有很多优秀的教材在国内出版. 为适应科学计算迅速发展的需要, 我们在本书中增加了一些传统的教材中并不涉及的内容, 如第五章、第六章的 §6.7 ~ §6.10 和第七章.

学习本书的所有内容必须具备的数学基础是微积分、线性代数和概率统计. 但第一章到第六章只涉及微积分和线性代数. 我们建议这门课程的教学时间为 48 ~ 54 学时.

数值分析课程作为计算数学专业的必修课程, 学生很容易感觉为不断地使用 Taylor 公式, 美感不如数学分析. 为了扭转这种看法, 老师在讲授方法时应尽可能体现一些普遍原则:

- 冯康原理: 同一物理问题可以有許多不同的数学形式, 这些数学形式在理论上等价, 但在实践中并不等效, 从不同的数学形式可能导致不同的数值计算方法. 原问题的基本特征在离散后应尽可能

能得到保持.

- 在研究数学和计算方法时,要尽可能注重物理、力学思想.
- 算法可以是小范围低精度重复使用,也可以在大范围用高精度格式,实践表明前者有较好的稳定性,这是为什么实践中大量使用线性及二次逼近的原因.要正确对待高精度方法,在设计算法增加精度时,要以不重算为好,如果能考虑并行更好.高精度格式依赖于解的光滑性,实践中并不是精度越高越好.
- 很多情况下,可以用逐次一维求解高维问题,但直接研究高维问题的计算方法,很多情况下是必须的.
- 外推可以用于各种问题改进精度,但同样依赖于解的光滑性,并不是外推依次数越多越好.
- 计算机数系不是数域,算术运算的一般法则不成立,必须小心处理,这是为什么要研究算法的收敛性和稳定性的原因之一.

数值分析课程的学习与其他数学基础课有一点很大的不同,那就是必须使用计算机完成一些计算实习.本书每章最后都把需要使用计算机完成的习题单独列出.我们还建议读者在学习本书的同时能学会使用数学软件.本书第一章的 §1.6 对现有的软件作了一个简单介绍.在这些软件中,我们建议把 MATLAB 作为首选.对将来准备从事计算科学研究的同学,希望尽量先用 C 或 FORTRAN 语言来编写程序完成上机习题.

随着计算技术的不断发展,计算机的日益普及,许多其他理工科专业也都提出了学习“计算方法”或“数值分析”的需求.到目前为止,国内各理工科高校都为高年级本科生开设了这门课.除了作为“信息与计算科学”专业课教材之外,我们认为本书也适合给理工科高年级本科生作为此课程的教材或参考书使用.

在本书的编写过程中,我们参考了国内外许多有关的书、讲义和论文.我们将它们一一列在本书最后的参考文献中.本书中很多章节的内容、例题和习题都并非作者原创,而是取材于这些参考文献,在此一并致谢.由于水平所限,本书难免有错漏与不足,欢迎读者批评指正.

作者特别要感谢雷功炎教授,雷教授不仅审阅了全稿,而且

提出了大量宝贵的建议。本书初稿在北京大学数学科学学院 2001 ~ 2003 级试用过，很多学生提出了大量的修改意见，在此对他们表示感谢。另外，感谢北京大学出版社对此书的支持。

编 者

2006 年 5 月

目 录

第一章 绪论	(1)
§1.1 引言	(1)
§1.2 误差的基本概念	(4)
1.2.1 误差来源	(5)
1.2.2 绝对误差、相对误差和有效数字	(5)
1.2.3 运算误差分析	(7)
§1.3 浮点数系统	(8)
§1.4 计算复杂性和收敛速度	(11)
§1.5 敏度分析与误差分析	(12)
§1.6 常用数学软件介绍	(14)
习题一	(18)
上机习题一	(20)
第二章 函数的多项式插值与逼近	(22)
§2.1 引言	(22)
§2.2 多项式插值问题的提法	(23)
§2.3 Lagrange 插值方法	(24)
§2.4 Newton 插值方法	(30)
§2.5 分段低次多项式插值	(34)
2.5.1 等距节点上高次插值多项式的 Runge 现象	(34)
2.5.2 分段线性插值	(36)
2.5.3 Hermite 插值	(38)
2.5.4 分段三次 Hermite 插值	(40)
2.5.5 三次样条插值	(42)
2.5.6 B-样条函数	(46)

§2.6 最佳一致逼近	(50)
§2.7 最小二乘多项式拟合	(58)
§2.8 最佳平方逼近	(60)
§2.9 正交多项式	(62)
§2.10 有理插值与逼近	(65)
2.10.1 有理插值	(65)
2.10.2 Padé 逼近	(67)
习题二	(72)
上机习题二	(75)
第三章 数值微分与数值积分	(76)
§3.1 引言	(76)
§3.2 数值微分	(76)
3.2.1 Taylor 展开法	(76)
3.2.2 插值型求导公式	(80)
§3.3 数值积分	(82)
3.3.1 中点公式、梯形公式与 Simpson 公式	(82)
3.3.2 Newton-Cotes 求积公式	(85)
3.3.3 复合求积公式	(88)
3.3.4 加速收敛技术与 Romberg 求积方法	(91)
3.3.5 Gauss 求积公式	(97)
3.3.6 积分方程的数值解	(102)
习题三	(104)
上机习题三	(106)
第四章 非线性方程组数值解法	(110)
§4.1 引言	(110)
§4.2 非线性方程的迭代解法	(111)
4.2.1 二分法	(111)
4.2.2 不动点迭代法	(115)
4.2.3 Newton 迭代法	(117)

4.2.4 割线法	(119)
§4.3 非线性方程组的迭代解法	(122)
4.3.1 非线性 Jacobi 迭代、Gauss-Seidel 迭代 和 SOR 迭代	(123)
4.3.2 Newton 迭代法及其改进算法	(124)
§4.4 大范围算法简介	(128)
习题四	(130)
上机习题四	(131)
第五章 快速 Fourier 变换	(134)
§5.1 引言	(134)
§5.2 Fourier 变换与离散 Fourier 变换	(134)
5.2.1 Fourier 变换	(134)
5.2.2 离散 Fourier 变换	(135)
§5.3 快速 Fourier 变换	(138)
5.3.1 基本算法	(139)
5.3.2 具体实例	(140)
§5.4 快速 Fourier 变换的应用	(142)
5.4.1 计算卷积	(142)
5.4.2 求解系数矩阵为循环矩阵的线性方程组	(143)
5.4.3 求解微分方程	(144)
习题五	(148)
上机习题五	(149)
第六章 常微分方程数值方法	(151)
§6.1 引言	(151)
§6.2 Euler 方法	(153)
6.2.1 Euler 方法及其稳定性	(153)
6.2.2 局部误差和方法的阶	(157)
6.2.3 Euler 方法的误差分析	(158)
§6.3 Runge-Kutta 方法	(161)

6.3.1	Runge-Kutta 方法的基本思想	(161)
6.3.2	显式 Runge-Kutta 方法及稳定性	(162)
6.3.3	隐式 Runge-Kutta 方法	(171)
§6.4	线性多步法与预估 - 校正格式	(174)
§6.5	理论分析	(178)
6.5.1	单步法的收敛性分析	(178)
6.5.2	稳定性	(180)
6.5.3	收敛性	(182)
§6.6	方程组及高阶方程数值方法	(183)
§6.7	刚性方程组	(184)
§6.8	分子动力学中的数值方法	(189)
§6.9	Hamilton 系统的辛几何算法	(191)
6.9.1	辛几何与辛代数的基本概念	(192)
6.9.2	线性 Hamilton 系统的辛差分格式	(196)
6.9.3	辛 Runge-Kutta 方法	(199)
§6.10	边值问题	(202)
6.10.1	问题提法	(202)
6.10.2	打靶法	(202)
习题六		(205)
上机习题六		(207)
第七章	Monte Carlo 方法	(209)
§7.1	引言	(209)
§7.2	随机数的产生	(213)
7.2.1	$U[0, 1]$ 伪随机数的产生	(214)
7.2.2	一般分布的随机变量的产生	(215)
§7.3	减小方差的技巧	(219)
7.3.1	重要性抽样法	(219)
7.3.2	控制变量法	(221)
7.3.3	分层抽样法	(222)

7.3.4 对偶变量法	(224)
§7.4 Metropolis 算法	(225)
7.4.1 基本思想	(226)
7.4.2 物理直观	(227)
7.4.3 数学表述	(229)
7.4.4 理论框架	(235)
§7.5 模拟退火算法	(236)
7.5.1 基本框架	(238)
7.5.2 理论结果	(240)
§7.6 拟 Monte Carlo 方法	(241)
7.6.1 差异	(241)
7.6.2 变差	(242)
7.6.3 拟 Monte Carlo 积分	(243)
7.6.4 拟 Monte Carlo 方法的缺陷	(244)
习题七	(245)
上机习题七	(246)
参考文献	(250)
符号说明	(254)
名词索引	(255)

第一章 绪 论

§1.1 引 言

计算数学是一门随着计算机的发展而形成的新兴学科,是数学、计算机科学与其他学科交叉的产物.它是专门研究如何利用计算机有效地求解各类计算问题的有关方法和理论的一门学科.由于其所涉及的计算问题主要来源于科学研究和工程设计,因此近年来人们常常称这门科学为科学计算.

对于一些复杂的科学与工程问题,理论分析往往无能为力,而实验又无法进行,社会的发展和科学的进步呼唤着新的科学研究方法的出现.20世纪40年代,电子计算机的发明为计算成为第三种科学研究手段提供了可能.半个世纪来,计算机的飞速发展已把计算推向人类科学活动的前沿,它作为科学研究方法的地位不断地上升.现在,实验、理论分析和计算“三足鼎立”,已成为当今科学活动的主要方式(见图1.1).在自然科学和工程技术的发展过程中,先后产生了计算

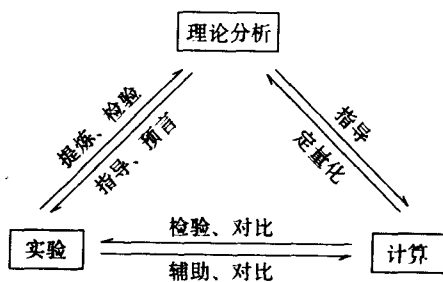


图 1.1

数学、计算力学、计算物理、计算化学、计算材料学、计算生物学等一系列计算性的分支学科,我们统称为计算科学.今天,计算在科学