

高等院校信息与计算科学专业系列教材

计算方法

周 铁 徐树方 编著
张平文 李铁军



清华大学出版社

高等院校信息与计算科学专业系列教材

计算方法

周 铁 徐树方 张平文 李铁军 编著

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

本书是为普通高等院校“信息与计算科学专业”的学生学习“计算方法”课程所编写的教材。全书共分11章,内容包括:误差分析、多项式插值、数值微分与积分、线性方程组的数值解法、线性最小二乘问题的数值解法、矩阵特征值和特征向量的计算、非线性方程与优化问题的数值解法、常微分方程初值问题的数值解法、偏微分方程的数值解法、快速算法、随机模拟方法。本书不仅介绍各种数值算法的数学原理,而且强调算法实现过程中必须注意的一些基本问题。

本书还可作为其他理工专业本科生学习“计算方法”课程的教材或参考书,也可供从事与数值计算相关工作的科技人员参考。

版权所有,翻印必究。举报电话:010-62782989 13501256678 13801310933

本书封面贴有清华大学出版社防伪标签,无标签者不得销售。

本书防伪标签采用特殊防伪技术,用户可通过在图案表面涂抹清水,图案消失,水干后图案复现;或将表面膜揭下,放在白纸上用彩笔涂抹,图案在白纸上再现的方法识别真伪。

图书在版编目(CIP)数据

计算方法/周铁,徐树方,张平文,李铁军编著. —北京:清华大学出版社,2006.3

(高等院校信息与计算科学专业系列教材)

ISBN 7-302-12412-4

I. 计… II. ①周… ②徐… ③张… ④李… III. 计算方法-高等学校-教材
IV. O241

中国版本图书馆CIP数据核字(2006)第005026号

出 版 者:清华大学出版社

<http://www.tup.com.cn>

社 总 机:010-62770175

地 址:北京清华大学学研大厦

邮 编:100084

客户服务:010-62776969

责任编辑:范素珍

印 刷 者:北京密云胶印厂

装 订 者:北京市密云县京文制本装订厂

发 行 者:新华书店总店北京发行所

开 本:140×203 印张:12 字数:318千字

版 次:2006年3月第1版 2006年3月第1次印刷

书 号:ISBN 7-302-12412-4/TP·7955

印 数:1~4000

定 价:19.00元

高等院校信息与计算科学专业系列教材

编辑委员会名单

主编 张平文

编委 (按姓氏笔画排序)

白峰杉 (清华大学数学科学系)

张平文 (北京大学数学科学学院)

张林波 (中国科学院数学与系统科学研究院)

张兆田 (国家自然科学基金委信息学部)

姜 明 (北京大学数学科学学院)

查红彬 (北京大学信息科学技术学院)

责任编辑 范素珍

序 言

数学科学不仅是自然科学的基础，也是一切重要技术发展的基础。电子计算机的发明及计算技术的发展都以数学为其理论基础。计算机技术的发展使得数学的应用更加直接和广泛，同时也正在改变人们对数学的传统认识。数学素质已成为今天培养高层次人才的重要基础。

计算数学是一门随着计算机发展而形成的学科，研究如何应用计算机有效地求解各类计算问题的方法和理论，其中涉及的计算问题主要来源于科学研究和工程设计，因此人们又称这门学科为科学计算。今天，计算和实验、理论分析一起成为当今科学活动的主要方式。在物理、化学、力学、材料科学、环境科学、信息科学和生物科学等领域，计算方法和技术已经成为被广泛接受的科学研究手段，这一系列计算性的分支学科统称为计算科学。现在，计算在科学研究和工程设计中几乎无处不在，对科技的发展起到举足轻重的作用。由于计算数学的发展已有 50 多年的历史，在教学科研方面有着深厚的积累，传统的教材建设也相对比较规范。伴随着计算机技术突飞猛进的发展，特别是超大规模计算机平台的建立和使用，以及科学研究中不断增长的对计算方法和技术的需求，传统的计算数学教材已不能满足教学的需要。

信息化已成为当今世界发展的重要趋势，也是衡量一个国家现代化水平的重要标志。信息科学可以理解与信息获取、传输、处理与控制的科学。我国信息科学发展的时间相对较短，但发展迅猛。发展信息科学需要数学基础，当然也离不开计算机科学。由于信息科学的多学科交叉的特点，在不同院校和专业，信息科学都得

到了一定的发展。但也正是这些原因,使得信息科学的学科定位,尤其是教材建设百家争鸣,缺乏统一的规范,为教学带来了很大的实际困难。

教育部 1998 年颁布的普通高等院校专业目录中,“信息与计算科学专业”被列为数学类下的一个新专业。这一新专业的设置很好地适应了新世纪以信息和计算技术为核心的数学人才的培养。然而,作为一个新专业,对其专业内涵、专业规范、教学内容与课程体系等有一个认识与探索的过程。教育部数学与统计学教学指导委员会经过多年艰苦细致的工作,对一些问题有了比较明确的指导意见,发表了《关于信息与计算科学专业办学现状与专业建设相关问题的调查报告》及《信息与计算科学专业教学规范》(讨论稿)(见《大学数学》第 19 卷 1 期(2003))。按照新的教学规范,信息与计算科学专业是以信息技术和计算技术的数学基础为研究对象的理科类专业。其目标是培养具有良好的数学基础和数学思维能力,掌握信息与计算科学基础理论、方法与技能,能解决信息技术和科学与工程计算中实际问题的高级专门人才。

近年来在教育部领导下,高等院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 400 所高校开办了“信息与计算科学专业”,每年招收 3 万名左右的本科生。其中大部分学校缺乏从事该领域教学科研经验的教师,对专业的定位和课程设置也不明确。即使是全国一流的高校,也是偏向于单一学科,新专业没有一个完整的切实可行的教学大纲,适合交叉学科专业的教材极其匮乏。

“信息与计算科学专业”属于数学类,前两年的课程基本上是明确的,教材也很多。本套系列教材重点建设后两年的专业课。由于重点高校大部分有自己的课程体系和教材建设,本系列教材主要针对普通高等院校开办的该专业。依据教育部“强基础,宽口径,重实际,有侧重,创特色”的办学指导思想,清华大学出版社《高

等院校信息与计算科学专业系列教材》编委会成员对专业定位、课程设置、教材内涵等进行了深入的探讨,并邀请有多年教学和科研经验的教师编写系列教材。特别是北京大学姜明教授等对涉及信息科学的教材建设花费了大量心血,在此对他们表示感谢。

为适应不同类型院校和不同层次要求的课程需求,教材建设也需要多样化、层次化。我们相信,该系列教材的出版对缓解本专业教材的紧缺局面,逐步形成专业定位与课程设置,推动信息与计算科学的发展,培养适应时代发展的交叉学科人才,提高中国数学教育水平会起到一定的作用。

张平文

2005年9月6日

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应用数学专业人才培养和学科发展的需要。本书就是为这一专业的学生学习“计算方法”课程编写的教材。

“计算方法”是应用数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 20 世纪 50 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,在本书中增加了一些传统的教材中并不涉及的内容,如第 8 章的 8.6 节、第 10 章的 10.2~10.4 节和第 11 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、数学物理方程和概率统计。但第 1 章到第 8 章只涉及微积分和线性代数。我们认为“计算方法”课程应该在学生学完第一学年的基础课以后开设。建议将这门课程的教学时间定为两个学期。第一个学期用 48~54 学时讲授第 1 章到第 8 章的内容,这是这门课程的基础内容。而第 9 章到第 11 章则可以在学生学完数学物理方程和概率统计以后,再用一学期 48~54 学时讲授。

“计算方法”课程的学习与其他数学基础课有很大的不同,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。建议读者在学习本书的同时能

学会使用数学软件。本书第 1 章 1.6 节对现有的软件做了简单介绍。在这些软件中,建议把 MATLAB 作为首选。

随着计算技术的不断发展,计算机的日益普及,许多其他理工专业也都提出了学习“计算方法”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,本书也适合作为给理工科高年级本科生开设此课程的教材。

在本书的编写过程中,参考了国内外许多有关的书籍、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。

编 者

2006 年 1 月

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 误差的基本概念	4
1.3 浮点数系	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	19
上机习题	21
第 2 章 多项式插值方法	22
2.1 引言	22
2.2 插值多项式的存在惟一性	23
2.3 Lagrange 插值方法	25
2.4 Newton 插值方法	28
2.5 分段低阶多项式插值方法	33
2.5.1 Runge 现象	33
2.5.2 分段线性插值方法	35
2.5.3 两点三次 Hermite 插值方法	37
2.5.4 分段三次 Hermite 插值方法	39
2.5.5 三次样条插值方法	41
习题	44
上机习题	46

第 3 章 数值微分与数值积分	48
3.1 引言	48
3.2 数值微分	48
3.2.1 差商型求导公式	48
3.2.2 插值型求导公式	52
3.3 数值积分	55
3.3.1 数值积分的基本概念	55
3.3.2 中点公式、梯形公式与 Simpson 公式	56
3.3.3 复合求积公式	58
3.3.4 加速收敛技术与 Romberg 求积方法	62
3.3.5 Gauss 求积公式	64
3.3.6 积分方程的数值解	70
习题	71
上机习题	74
第 4 章 线性方程组的数值解法	77
4.1 消元法	78
4.1.1 三角形方程组的解法	79
4.1.2 消元法和矩阵的三角分解	80
4.1.3 列选主元的三角分解	84
4.2 平方根法和追赶法	87
4.2.1 平方根法	88
4.2.2 追赶法	91
4.3 敏感性与稳定性分析	93
4.3.1 向量范数和矩阵范数	94
4.3.2 线性方程组的敏感性分析	95
4.3.3 数值方法的稳定性分析	97

4.4 古典迭代法	98
4.4.1 基本迭代法	99
4.4.2 收敛性分析	102
4.4.3 收敛速度	104
4.5 Krylov 子空间方法	105
4.5.1 最速下降法	106
4.5.2 共轭梯度法	108
4.5.3 广义极小剩余法	112
习题	115
上机习题	119
第 5 章 最小二乘问题的数值解法	123
5.1 引言	123
5.2 变换法	126
5.3 正交分解法	128
5.3.1 Householder 变换	130
5.3.2 Givens 变换	133
5.3.3 计算 QR 分解的 Householder 方法	134
5.4 亏秩最小二乘问题的数值解法	136
习题	138
上机习题	139
第 6 章 矩阵特征值和特征向量的计算	141
6.1 基本迭代法	142
6.1.1 幂法	142
6.1.2 反幂法	145
6.1.3 Rayleigh 商迭代	147
6.1.4 收缩技巧	149

6.1.5 子空间迭代法	150
6.2 QR 方法	152
习题	159
上机习题	161
第 7 章 非线性方程(组)与无约束最优化问题的数值解法	163
7.1 引言	163
7.2 非线性方程的迭代解法	164
7.2.1 对分区间法	164
7.2.2 不动点迭代法	166
7.2.3 Newton 迭代法	170
7.3 非线性方程组的迭代解法	173
7.3.1 非线性古典迭代法	174
7.3.2 Newton 迭代法及其改进算法	175
7.4 无约束最优化问题的迭代解法	179
7.4.1 一维搜索法	180
7.4.2 最速下降法	184
7.4.3 共轭梯度法	186
7.4.4 Newton 法	187
7.4.5 拟 Newton 法	188
7.5 非线性最小二乘问题	192
7.5.1 Gauss-Newton 法	194
7.5.2 Levenberg-Marquardt 方法	196
习题	197
上机习题	199
第 8 章 常微分方程初值问题的数值解法	203
8.1 基本概念	203

8.2 Euler 方法	205
8.2.1 Euler 格式及其稳定性	205
8.2.2 局部误差和方法的阶	209
8.2.3 Euler 方法的误差分析	211
8.3 Runge-Kutta 方法	213
8.3.1 Runge-Kutta 方法的基本思想	213
8.3.2 显式 Runge-Kutta 方法及其稳定性	217
8.3.3 隐式 Runge-Kutta 方法	222
8.4 线性多步法与预估-校正格式	226
8.5 方程组及高阶方程数值解法	230
8.6 分子动力学的数值方法	232
习题	234
上机习题	235
第 9 章 偏微分方程数值解法	237
9.1 引言	237
9.2 抛物型方程的差分方法	238
9.3 双曲型方程的差分方法	250
9.4 椭圆型方程的有限元方法	257
9.4.1 两点边值问题的 Galerkin 方法与有限元方法	257
9.4.2 二维 Poisson 方程的有限元方法	265
习题	271
上机习题	273
第 10 章 快速算法	274
10.1 快速 Fourier 变换	274
10.1.1 离散 Fourier 变换	274
10.1.2 快速算法	276
10.1.3 应用举例	281

10.2	预处理加速技术	282
10.3	迭代法的磨光性质	285
10.3.1	两点边值问题	286
10.3.2	Richardson 迭代	286
10.3.3	迭代的光滑作用	288
10.4	多重网格法简介	291
10.4.1	粗网格校正和二重网格方法	291
10.4.2	多重粗网格校正和多重网格方法	295
	习题	297
	上机习题	298
第 11 章	随机模拟方法	299
11.1	Monte Carlo 方法	299
11.1.1	引言	299
11.1.2	随机数的产生	303
11.1.3	减小方差技巧	309
11.1.4	Metropolis 算法	316
11.1.5	模拟退火算法	326
11.1.6	拟 Monte Carlo 方法	331
11.2	随机微分方程的数值解	336
11.2.1	引言	336
11.2.2	随机过程	337
11.2.3	Brown 运动	340
11.2.4	随机微分方程与 Itô 积分	345
11.2.5	随机微分方程的数值解	353
	习题	359
	上机习题	359
	参考文献	361

第1章 绪 论

1.1 引 言

计算方法又名数值分析, 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的手段提供了可能. 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. 今天, 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. 在自然科学和工程技术的发展过程中, 先后产生了计算数学、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, 统称为计算科学. 今天, 计算在科学研究和工程设计中几乎无处不在, 对科技的发展起到了举足轻重的作用.

计算科学是通过计算的手段来解决实际问题的一门科学, 其处理问题的过程主要有 3 个环节:

- 建立数学模型;
- 设计计算方案 (简称算法), 编制程序, 上机运行, 展示数值结果;
- 将数值结果与理论分析和实验的结果相结合给出实际问题的

答案, 或提出对模型的修正方案。

上述第二个环节正是计算方法这门学科所研究的主要内容, 其核心是算法的设计。不同的学科, 不同的工程应用会提出不同的问题, 其中多数都可归结为若干典型的数学模型。给出这些典型问题的数值求解方法, 也就为大多数科学与工程计算问题的解决提供了可能性。因此, 本课程将着重介绍几类典型问题的数值解法。

大家知道, 电子计算机的运算速度越来越快, 可以承担大运算量的工作。这是否意味着计算机上的算法可以随意选择呢? 事实上, 对于一个具体的计算问题, 所使用算法的优劣, 不仅影响计算结果的精确程度, 而且有的甚至关系到计算的成败。请看下例: 假设用著名的 Cramer 法则去求解一个 25 个未知数的线性方程组 (这需要计算 26 个 25 阶的行列式), 再假定是按照行列式的定义来计算行列式的值, 则完成这一计算任务需要的乘法次数约为 $26!$ 。如忽略存取数和加减运算等计算机操作所需要的时间, 用每秒可做万亿次乘法的计算机来完成这一计算任务, 所需的时间大约是一千三百多万年。然而, 改用消去法, 则可在不到 1 秒的时间内即可完成求解上百阶线性方程组的计算任务。

此外, 许多科学与工程计算问题都有如下特点: 高维数、多尺度、非线性、不适定、长时间、奇异性、复杂区域、高度病态, 不仅计算规模大, 而且要求精度高。其计算困难也有各种不同的表现, 如计算规模大, 大得难以承受或失去时效; 计算不稳定, 数值结果不可信; 包含奇异性, 计算可能非正常终止等。这样的问题, 如果不进行深入细致的算法研究, 即使是现在最强大的计算机也无能为力。人类的计算能力既依赖于计算机的性能, 也取决于计算方法的效能。计算方法的发展对于提高人类计算能力的贡献与计算机的进步是同等重要的。计算数学与计算机的发展史也证明了这一论断。以典型的 Laplace 方程求解问题为例, 过去几十年中, 计算机的发展与计算方法的进步, 基本上平分秋色, 参见图 1.1.1。