

● 高等学校教材

计算方法简明教程

王能超 编著



高等教育出版社
HIGHER EDUCATION PRESS

图书在版编目(CIP)数据

计算方法简明教程/王能超编著. —北京: 高等教育出版社, 2004. 1

ISBN 7-04-013304-0

I. 计... II. 王... 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(2003)第 099608 号

出版发行 高等教育出版社
社 址 北京市西城区德外大街 4 号
邮政编码 100011
总 机 010-82028899

购书热线 010-64054588
免费咨询 800-810-0598
网 址 <http://www.hep.edu.cn>
<http://www.hep.com.cn>

经 销 新华书店北京发行所
印 刷 高等教育出版社印刷厂

开 本 787×960 1/16
印 张 18.75
字 数 350 000

版 次 2004 年 1 月第 1 版
印 次 2004 年 1 月第 1 次印刷
定 价 21.80 元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题, 请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

内 容 提 要

本书力图改革计算方法课程的教学体系。新的体系立足于数学思维而面向科学计算的实际需要,内容处理上突出数值算法的基本设计技术。本书分上、下两篇:上篇“计算方法讲义”运用算法设计技术设计了科学计算中的一些常用算法,下篇“高效算法讲座”着重推荐高效算法设计的二分技术。

计算机科学在某种意义上就是算法学。数学思维的化归策略贯穿于数值算法设计的全过程。数值算法设计的基本技术包括:化大为小的缩减技术,化难为易的校正技术以及化粗为精的松弛技术等。本书上篇基于这些技术设计并剖析了一些常用的数值算法,其内容涵盖插值方法、数值积分与数值微分、常微分方程的数值解法、方程求根以及线性方程的解法等有关知识。

计算方法是一门开拓性很强的学科。随着计算机体系结构的更新,计算机上的数值算法也正从串行算法向并行算法转变。本书下篇侧重于介绍实现这种转化的二分技术,其内容包括递推计算的并行化以及快速变换等。这些资料供读者自学时参考。

本书追求简明实用。书中所阐述的算法设计原理容易理解,而所推荐的算法设计技术也不难掌握。作为计算机科学重要基础的数值算法设计学,其设计思想的简朴、设计方法的协调、设计技术的实用,体现了这门学科内在的科学美。

本书所面向的读者没有刻意追求。上篇内容大学的理科、工科、文科各个专业均能采用,下篇则主要面向硕士、博士研究生。本书亦可供从事科学计算的工程技术人员以及其他科技人员阅读参考。

王能超教授是我国并行算法设计的先驱者之一,他在这方面有许多独特的重要贡献,其中最主要的是他巧妙地运用二分技术于并行算法设计,把相当多的一类串行算法需 N 次运算的问题,只要提供足够数量的处理机进行并行计算,即可把运算次数从 N 降到 $\log_2 N$ 。串行算法中的快速算法如 FFT 把运算次数从 N^2 阶降到 $N\log_2 N$ 阶而著称于世,而并行算法利用二分技术则能对许多类型的大量计算问题的运算次数下降到相应程度。

王能超教授在并行算法设计中所以能取得巨大进展,主要由于他对算法设计的基本原理有深刻的研究,这反映在他的专著《数值算法设计》一书中^①。该书有许多独到的论点。他首先不同意国际上流行的所谓并行算法是一门“全新”的算法,必须摆脱传统的算法设计的“束缚”。他认为从传统算法到快速算法,进而到今日正在兴起的并行算法,是算法设计的深化与提高。他运用二分技术于并行算法设计并取得丰硕成果,正好说明并行算法设计的研究不应脱离串行算法,而应从中吸取其基本原理并加以深化与提高。另外,他一方面指出计算数学是一门新兴学科,但它又深深扎根于数学的肥沃土壤之中,并从数学的母体里吸取了极为丰富的营养;另一方面他又指出计算数学应当是数学与计算机科学的交叉学科,它应兼有这两门学科的基本特征,从而提出了“面向计算机”的数值算法设计学的尝试。正是由于这些独到的论点,使他在并行算法设计的研究中取得巨大的、实质性的进展,推动了这门算法设计学的发展。他的这本专著曾获中南地区大学出版社协会优秀学术专著一等奖,这确是一本在算法设计学中独具特色富有创造性的优秀学术著作,为此我热烈建议授予(国家教委科技进步奖)一等奖。

程民德

1992年5月22日

^① 1992年春,该书申报“国家教委科技进步奖”。本文是程先生写的“评审意见书”。

大家知道,应用于现代科学计算中的种种数值计算方法都是设计出来的。数值分析专家注注就是数值算法的设计者。

算法设计离不开哲学思想和科学方法论的指导,而且算法设计本身就是一种科学的思想方法的体现。王能超教授充分理解这一点,故能写出具有深刻思想的《数值算法设计》一书。^①

王能超教授的这本书,是一本富于哲学思想和科学方法论精神的著作。书中对各种不同的数值算法提出了几种富于概括性的设计思想和方法原则。这些思想和原则对从事研究和运用计算方法的科技工作者无疑会有深刻的启迪和指导作用。例如,书中所讲述的“缩减技术”、“校正技术”、“松弛技术”和快速算法及并行算法设计等,都是极为重要的方法原则,任何人如能精通并灵活运用这些方法原则,则不仅能圆满地解决实际计算问题,而且还可能有所创新,有所发展。

徐利治

1988年12月

^①《数值算法设计》一书,华中工学院出版社1988年出版。该书获中南地区大学出版社协会优秀学术专著一等奖。本文是徐先生写的“评审意见书”。

代 序^①

纵观上下数千年的科学史,科学的发展大致经历了古代科学、近代科学和现代科学三个历史阶段。

在遥远的古代,虽然人们在长期的社会实践中积累了不少知识,但这些知识是零碎的、不系统的和没有经过严格论证的。古人所获取的知识大都表现为经验性的总结或猜测性的思辨,其研究方法实际上是不科学的。在这个意义上,古代科学只是科学的萌芽,还不是真正的科学。

近代科学蓬勃兴起于 17 世纪,其奠基工作从 Galileo(1564—1642)开始,而由 Newton(1642—1727)所完成。近代科学方法强调实验和理论的紧密结合,即以实验的事实(数据和资料)为依据,通过严密的论证(数学推理)形成系统的理论。这种科学方法促进了科学的繁荣与发展。

电子计算机的问世开创了现代科学的新时代。随着计算机的广泛应用,科学计算正逐步上升为一种新的科学方法,与科学实验、科学理论并列,构成现代科学方法的三大组成部分。

在今天,为适应新的技术革命的需要,实际课题的规模空前扩大,所谓大型乃至超大型科学计算日益为人们所重视。与此相适应,巨型计算机在科学计算中正扮演着越来越重要的角色。计算机的更新换代强有力地推动着算法研究的深入。科学计算正处于蓬勃发展的新时代。

计算数学是科学计算的一门主体学科。它伴随着电子计算机的推广应用而成长壮大,是一门仅有几十年历史的新兴学科。在科学计算蓬勃发展的今天,迫切要求充实完善计算数学的学科体系。

翻开科学发展史,可以看到,一门学科的形成可以有不同的方式、方法和途径。诚如吴文俊先生所指出的^②:“古希腊时代,对待几何学就有两种不同的方法:一种可以欧几里得的《几何原本》为代表,把数量关系完全排除在外,而单纯追求各种几何事实的逻辑关系,以此建立几何公理体系,成为数学中演绎推理方

① 该文引自作者的专著《数值算法设计》(武汉:华中工学院出版社,1988 年)。

② 吴文俊. 几何定理机器证明的基本理论(初等几何部分). 北京:科学出版社,1984

法的典范;另一种可以阿基米德的有关著作作为代表,着重研究几何图形的数量特征或其量度。……尽管这二者各具特色,风格殊异,体现了几何发展中的两种不同体系,但都为数学发展做出了巨大贡献。”

传统的计算数学的理论体系,是从属于数学——作为它的一个分支而为人们所认识的。这门学科被深深地打上了数学的烙印,以至于人们在讲述计算方法时,往往习惯于“面向数学”:从数学问题出发,经过数学方法的推演,提出数学的定理或命题。这种理论体系过于偏重数学上的演绎论证,满足于各种算法的罗列堆积,在深度上难而玄,而广度上多而杂。因此,为促进科学计算的深入开展,革新计算数学的学科体系势在必行。

我们认为,计算数学实际上是数学与计算机科学的交叉学科,它应兼有这两门学科的基本特征,即既有数学的抽象性与严密性,又有计算机科学的实践性与技术性。从计算机的角度考察计算数学,形成“面向计算机”的数值算法设计学,看来是一项有意义的尝试。

今天,在科学技术的各个领域,用电子计算机承担的科学计算越来越显示出强大的威力。计算机能力之高超,是其他计算工具所无法比拟的。电子计算机为什么会如此神通广大,其解题的奥秘何在?

我们知道,用电子计算机解题,首先必须编制程序。所谓编程,就是将解题过程逐步进行分解,最后归结为四则运算和逻辑运算的有限序列。当然,实现这种化繁为简的分解需要耗费巨大的计算量,但这正好发挥了计算机的特长。电子计算机的一个重要特点是高速度,它每秒钟能运算几百万、几千万甚至万亿次。此外,电子计算机在工作过程中能“不厌其烦”,不怕繁琐重复,而且能无限地连续工作,“不知疲倦”。为适应电子计算机的这种特性,算法设计的基本原则是以简驭繁,将质的困难转化为量的繁复。就是说,以耗费计算量为代价,设法将复杂的计算过程化简,逐步归结为一系列简单过程。

电子计算机的出现使数学的面貌也焕然一新。计算机将某些数学定理精美而玄妙的证明改变为“精细”而“机械”的程序设计,把灵活的数学技巧改变为“呆板”的编程技术。吴文俊先生在几何证明的机械化方面做过一系列卓越的工作,他曾借用别人的话来抒发自己的感叹^③:如果真能做到有效的机械化,“为几何巨厦添砖加瓦,从此就用不着天才那样的人物了。”

随着电子计算机的广泛应用,人们已经就各种数值问题提出了大量的算法,所涉及的文献著作数以千万计,形成浩繁的卷帙。面对这知识的汪洋大海,该如

^③ 吴文俊. 几何定理机器证明的基本理论(初等几何部分). 北京:科学出版社,1984

何进行有效的学习和研究呢?许多有志于投身计算数学的青年正为这门学科知识的庞杂所困扰。

在人类智力解放的漫长道路上,现代的大型计算机远不是终点。非 Neumann 结构的并行机已显示出提高计算机性能的无穷潜力。未来的智能机更为人们展现了无限美好的前景。新一代的计算机将采用并行化的结构,并以并行化的方式运用。顺应电子计算机的发展潮流,算法设计必须实现并行化。

国外一些专家权威强调,并行算法是一门“全新”的算法,必须首先摆脱传统的算法设计思想的“束缚”,才能研制出好的并行算法。

这种“不破不立”的论调自然会使人产生危机感,人类长期积累的众多的优秀算法,以及耗费了大量人力、财力研制而成的丰富的数值软件,这些人类社会宝贵的财富,难道会由于电子计算机的改朝换代而被摒弃吗?

在科学计算蓬勃发展、计算数学正面临深刻变革的今天,人们既感到兴奋又抱有忧虑。

计算数学虽是一门新兴学科,但这门学科深深地扎根于数学的肥沃土壤中,它从数学的母体里吸取了极为丰富的营养。我们知道,自从有了数学,同时就有了关于数学的近似计算。随着电子计算机的实际应用,许多近似方法已被加工改造成为有效的算法。正是由于计算数学这种独特的天赋,它虽仅有几十年的历史却历经沧桑,从传统算法到快速算法,进而到今日正在兴起的并行算法,已成为一株枝繁叶茂、覆荫广阔的大树耸立于学科之林。

我国魏晋大数学家刘徽(公元3世纪)说过^④，“事类相推，各有攸归，故枝条虽分而同本干者，知发其一端而已。”他还说：“触类而长之，则虽幽遐诡伏，靡所不入。”一门学科就像树干上长出许多枝条一样，应当有着共通的基本原理可循；而掌握了基本原理，就可以举一反三，触类旁通。

探究计算数学这门学科的基本原理，依据各种算法潜在的共性，提炼出算法设计的一般性、普遍性技术，这正是我们所要追求的目标。

古今许多名人学者都崇尚简朴。1976年，英国著名数学家 Atiyah 在他就任伦敦数学会主席时，发表了题为“数学的统一性”的演讲^⑤。在这次演讲中，他突出强调数学的简单性和统一性。他说：“数学的目的，就是用简单而基本的词汇去尽可能多地解释世界。……如果我们积累起来的经验要一代一代传下去的话，我们就必须不断地努力把它们加以简化和统一。”

^④ 刘徽,《九章算术注》“自序”。

^⑤ Atiyah M. 数学的统一性. 数学译林, 1980(1)

我们深信,由于电子计算机解题的原理是简单的,算法设计的基本思想和基本技术也应当是简单的。本书提出了数值算法设计的几种基本技术,这些技术的设计思想如此简单,以致读者只需具备一些初等的数学知识就能接受。然而这些设计技术有着广泛的实际应用。我们将会看到,电子计算机上一系列常用算法,包括高效的加速算法、快速算法和并行算法,均可概括为所述的设计模式。

科学理论是按照美的规律来创造的。所谓科学美,通常以科学理论的简朴、和谐、新奇为其重要标志。徐利治先生曾指出^⑥:“闪烁着真理之光的数学成果,要么有一种和谐美,要么有一种奇异美。这大概可以成为在数学探索中旁证其正确性的准则。”

我们认为,作为计算数学重要基础的数值算法设计学,其算法设计思想的简朴、算法设计技术的协调和算法设计原则的实用,体现了这门学科内在的科学美:简朴的美,统一的美,和谐的美,奇异的美。

王能超

1987年12月12日

^⑥ 徐利治,隋永康.关于数学创造规律的断想暨对教改方向的建议.高等工程教学研究,1987(3)

前言

对作者来说,本书的撰写过程是激动人心的。

20年前的1984年秋,作者曾艰难地在钢板腊纸上耕耘,编写出一份“Taylor公式包打天下”的计算方法教材《数值分析简明教程》(高等教育出版社,1984年),该书获国家教委优秀教材二等奖。这本《计算方法简明教程》同前书题材相同,但风格迥异。本书基本上排斥了Taylor公式,而是代之以几种简易的算法设计技术。“以己之矛,攻己之盾”。这是一本“矛盾篇”。

1986年夏,作者应邀在全国计算数学教学研究会(桂林会议)上,举办以“数值算法设计”为题的学术讲座,倡导用算法设计的几种简单技术(所谓缩减技术、校正技术和松弛技术)编织一套计算方法的教学体系。参加这次讲座的大多是从事计算方法教学的老师,他们对这一设想的认可使作者深受鼓舞。相关专著《数值算法设计》(华中工学院出版社,1988年)获中南地区大学出版社协会优秀学术专著一等奖。

为考验算法设计技术的有效性,在20世纪80年初作者又将它们应用于并行算法的研究,并于1984年秋提炼出并行算法设计的二分技术。20年来,这项研究始终得到北京大学何新贵教授、国防科技大学李晓梅教授、北京九院九所张宝琳教授等资深学者们的真诚鼓励和热情支持。

俗说“十年磨一剑”。以数值算法设计技术为主线编写计算方法教材,这一设想从酝酿到完成书稿,前后竟经历了20年时光。这是一本“拖沓篇”。

辗转磨炼,志在创新。从Taylor公式“包打天下”到Taylor公式“靠边站”,先后撰写的两本教材反差鲜明。这番尝试会得到广大读者的理解、接受和喜爱吗?在书稿即将付梓的前夕,作者的心情是忐忑不安的。这又是一本“忐忑篇”。

“文章千古事,得失寸心知!”书稿的撰写使作者对杜甫的这句名言有了更为深切的体会。

王能超

2003年8月28日

11/12/05

郑 重 声 明

高等教育出版社依法对本书享有专有出版权。任何未经许可的复制、销售行为均违反《中华人民共和国著作权法》，其行为人将承担相应的民事责任和行政责任，构成犯罪的，将被依法追究刑事责任。为了维护市场秩序，保护读者的合法权益，避免读者误用盗版书造成不良后果，我社将配合行政执法部门和司法机关对违法犯罪的单位和个人给予严厉打击。社会各界人士如发现上述侵权行为，希望及时举报，本社将奖励举报有功人员。

反盗版举报电话：(010) 58581897/58581698/58581879/58581877

传 真：(010) 82086060

E - mail：dd@hep.com.cn 或 chenrong@hep.com.cn

通信地址：北京市西城区德外大街4号

高等教育出版社法律事务部

邮 编：100011

购书请拨打电话：(010)64014089 64054601 64054588

策划编辑	刘建元
责任编辑	康兆华
封面设计	王凌波
责任绘图	朱 静
版式设计	陆瑞红
责任校对	王效珍
责任印制	韩 刚

总 目 录

上篇：计算方法讲义

引 论	9
第一章 插值方法	27
第二章 数值积分	62
第三章 常微分方程的差分法	91
第四章 方程求根的迭代法	121
第五章 线性方程组的迭代法	139
第六章 线性方程组的直接法	157

下篇：高效算法讲座

导 论	197
第七章 叠加计算	204
第八章 一阶线性递推	217
第九章 三角方程组	236
第十章 三对角方程组	248
第十一章 快速 Fourier 变换	255
第十二章 快速 Walsh 变换	268

上

篇

计算方法讲义

上 篇 目 录

引 论

§ 1 算法重在设计	(9)
1-1 科学计算离不开算法设计	(9)
1-2 算法设计要有“智类之明”	(10)
1-3 数学思维的化归策略	(10)
§ 2 化大为小的缩减技术	(11)
2-1 Zeno 悖论的启示	(11)
2-2 数列求和的累加算法	(13)
2-3 缩减技术的设计思想	(14)
2-4 多项式求值的秦九韶算法	(15)
2-5 秦九韶算法的计算流程	(16)
§ 3 化难为易的校正技术	(17)
3-1 Zeno 悖论中的“Zeno 钟”	(17)
3-2 求开方值的迭代公式	(18)
3-3 校正技术的设计思想	(20)
§ 4 化粗为精的松弛技术	(21)
4-1 Zeno 算法的升华	(21)
4-2 千古绝技“割圆术”	(21)
4-3 求倒数值的迭代算法	(22)
4-4 松弛技术的设计思想	(23)
§ 5 会通古今的中华数学	(24)
5-1 中华民族是个擅长计算的民族	(24)
5-2 《周易》论“简易”	(25)
习题 0	(25)

第一章 插 值 方 法

1.1 插值问题的提法	(27)
1.1.1 什么是插值	(27)

1.1.2 插值平均的概念	(28)
1.1.3 代数精度的概念	(28)
1.1.4 Lagrange 插值的提法	(29)
1.2 Lagrange 插值公式	(30)
1.2.1 插值基函数的概念	(30)
1.2.2 两点插值	(31)
1.2.3 三点插值	(32)
1.2.4 多点插值	(32)
1.2.5 Lagrange 插值公式的计算流程	(33)
1.3 Neville 逐步插值算法	(34)
1.3.1 两点插值的松弛公式	(34)
1.3.2 插值公式的逐步构造	(35)
1.3.3 逐步插值的计算流程	(37)
1.4 Newton 插值多项式	(39)
1.4.1 插值逼近的概念	(39)
1.4.2 插值多项式的逐步生成	(40)
1.4.3 差商及其性质	(43)
1.4.4 差商形式的插值公式	(44)
1.4.5 差分形式的插值公式	(45)
1.5 Hermite 插值	(46)
1.5.1 Taylor 插值	(47)
1.5.2 构造插值多项式的待定系数法	(48)
1.5.3 构造插值多项式的余项校正法	(49)
1.5.4 构造插值多项式的基函数方法	(50)
1.6 分段插值	(51)
1.6.1 高次插值的 Runge 现象	(51)
1.6.2 分段插值的概念	(52)
1.6.3 分段三次 Hermite 插值	(53)
1.7 样条插值	(53)
1.7.1 样条函数的概念	(54)
1.7.2 三次样条插值	(55)
小结	(58)
习题一	(58)

第二章 数值积分

2.1 机械求积	(62)
2.1.1 求积方法的历史变迁	(62)
2.1.2 机械求积的概念	(64)
2.1.3 求积公式的精度	(65)
2.1.4 一点注记	(66)
2.2 Newton-Cotes 公式	(67)
2.2.1 Newton-Cotes 公式的设计方法	(67)
2.2.2 Newton-Cotes 公式的精度分析	(69)
2.3 Gauss 公式	(70)
2.3.1 Gauss 公式的设计方法	(70)
2.3.2 带权的 Gauss 公式举例	(73)
2.4 复化求积法	(74)
2.4.1 复化求积公式	(74)
2.4.2 变步长的梯形法	(76)
2.5 Romberg 算法	(79)
2.5.1 梯形法的加速	(79)
2.5.2 Simpson 法再加速	(80)
2.5.3 Cotes 法的进一步加速	(80)
2.5.4 Romberg 算法的计算流程	(81)
2.6 数值微分	(83)
2.6.1 数值求导的差商公式	(83)
2.6.2 数值求导公式的设计方法	(84)
小结	(85)
习题二	(87)

第三章 常微分方程的差分法

3.1 Euler 方法	(91)
3.1.1 Euler 格式	(92)
3.1.2 隐式 Euler 格式	(93)
3.1.3 Euler 两步格式	(93)
3.1.4 梯形格式	(94)
3.1.5 改进的 Euler 格式	(94)
3.1.6 Euler 方法的分类	(96)