

- 国家特色专业建设点建设项目
- 广东省高等学校重点专业建设项目
- 广东省本科教学改革立项项目
- 华南师范大学卓越计划项目

数学实验系列教程
系列教程主编/冯伟贞

信息与计算科学 实验教程

XINXI YU JISUAN KEXUE SHIYAN JIAOCHENG

主 编 杨 坦 谢 骊 玲

内容简介

本书不是一本传统意义上的数值分析(或计算方法)课程的实验教材,没有按照定义、定理、算法、函数语法说明和实验题目这样的顺序组织内容。每章分为理论部分和实验部分。理论部分强调算法的来源、各种方法间的联系、每个算法优缺点的讨论以及算法的改进与完善,基本覆盖了目前国内本科计算方法课程中的内容,本书选择 MATLAB 作为数值算法的实现平台。在给出算法实现细节的同时介绍了 MATLAB 中与该算法相关的函数。这样的设计使得本书的难度具有层次性和一定的弹性。工科专业的学生可以理解算法的原理、掌握数值计算工具解决实际工程问题。信息与计算科学专业的学生则要求完成更有深度的算法设计问题。本书有相当多的延伸内容是以实验的形式出现的,以促使学生能够在解决实际问题过程中开拓眼界,学到新的知识。本书的实验内容铺排与一般计算方法课程教学展开同步,使教学双方能够在日常教学中同步融入实验。本书可作为信息与计算科学专业本科数值计算方法课程或其他有数值计算需求的工科专业的相关课程的配套实验教材或参考教材。

图书在版编目(CIP)数据

信息与计算科学实验教程/杨坦,谢骊玲主编. —广州:华南理工大学出版社, 2012. 7

(数学实验系列教程/冯伟贞主编)

ISBN 978-7-5623-3706-5

I. ①信… II. ①杨… ②谢… III. ①信息技术-实验-高等学校-教材
②计算机科学-实验-高等学校-教材 IV. ①G202-33 ②TP3-33

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 171554 号

信息与计算科学实验教程

杨 坦 谢骊玲 主编

出版发行:华南理工大学出版社

(广州五山华南理工大学 17 号楼,邮编 510640)

<http://www.scutpress.com.cn> E-mail: scute13@scut.edu.cn

营销部电话:020-87113487 87111048 (传真)

策划编辑:何丽云

责任编辑:兰新文

印刷者:广州市穗彩印厂

开 本:787mm×1092mm 1/16 印张:12.5 字数:259 千

版 次:2012 年 7 月第 1 版 2012 年 7 月第 1 次印刷

定 价:26.00 元

版权所有 盗版必究 印装差错 负责调换

 华南理工大学出版社
SOUTH CHINA UNIVERSITY OF TECHNOLOGY PRESS

前 言

科学计算或数值分析是信息与计算科学专业的核心内容之一，主要解决在计算机上求得科学与工程计算问题的近似解问题，所涉及的主要问题包括函数求值、数值逼近、数值积分、方程求解、特征值问题和数值优化等。本书基本覆盖了目前国内本科计算方法课程中的内容，包括：非线性方程求根、线性方程组求解、矩阵特征值计算、插值与拟合、数值积分和数值微分、常微分方程数值方法以及快速傅立叶变换与 JPEG 编码。

现有的数值分析实验教材中有两种比较典型的情况。一种是按照定义、定理、算法、例题和上机题目的顺序组织内容，基本上是数值分析教科书内容的精缩外加上机题目的形式。另一种则基于某种科学计算软件，如 MATLAB 或 Mathematica，讲述该软件中各种处理数值计算问题的函数的用法，类似于该软件数值计算工具箱的使用手册。第一种类型比较传统，内容抽象，算法实现起来难度比较高。第二种类型适合对数值分析有入门要求的工科专业学生，可以迅速掌握计算工具以解决一些实际问题，但对算法的理解不够深刻。本书力图在这两种“极端”情况中取得一个平衡，既生动有趣，又不失严谨。

本书提供较多的实际背景。很多作者强调理论上的完整性，却忽视了数值分析这一学科的魅力亦来自于科学和工程计算中的实际问题。源自于计算数学专业的信息与计算科学专业 2005 年成为我国理科规模最大的本科专业之一，开设该专业的院校数和进入该专业的学生数大大增加。培养数值计算的应用型人才在专业培养方案中的比例越来越重。该专业众多的本科毕业生不会大量地进入传统的计算数学方向的研究生学习阶段，而是从事相关领域的应用性工作或者攻读其他专业方向的研究生学位。这个大背景要求强调数值分析课程的入门性质和趣味性，吸引更多的学生了解和掌握数值分析这一有力工具，会使用计算机解决实际科学与工程计算问题。传统的数值分析教材和相应的实验教材，问题的背景往往被高度地做了数学上的抽象。本书引入了较多的实际问题，不少是信息技术领域的现代内容。这一方面使得学习变得更有趣，另一方面是想强调计算数学作为一门应用性的学科，实际的科学与工程计算问题是它不断向前发展的重要推动力。掌握了数值分析的理论，并不意味着形成了解决科学与工程中提出的实际计算问题的能力。而减小两者之间的差距，是本书的写作目的之一。

本书强调问题解决的策略。从数值分析课本中的一个理论，到一个高效、可靠、经得起实践检验的算法，中间有很长的距离。数值计算理论好比软件设计中

的概念模型，相对抽象，而将要运行在计算机上的代码可以类比物理模型。考虑到计算的稳定性、精度、速度和存储空间，以及所要解决的计算问题的特性，同一个概念模型有多种不同的物理实现，其中有些问题可以使用理论进行分析，还有一些问题更强调解决问题的思路和策略。以第1章非线性方程求根为例，传统的数值分析课本都会给出二分法、割线法、牛顿法的推导和收敛性、收敛速度的分析。大名鼎鼎的牛顿法在数值计算领域有着非常广泛的应用，但在非线性方程求根方面，牛顿法由于收敛条件不便于验证，丧失了鲁棒性。因为无法保证使用牛顿法一定可以可靠地求得方程在给定初始值附近的根。所以在 MATLAB 中并没有内置一个实现在理论上具有重要地位的牛顿法的函数。这说明目前很多的数值计算教科书还是偏重理论分析，而并没有让学生了解到它和科学计算所要求的普适性与实用性之间的区别。MATLAB 求解非线性方程根的内置函数 `fzero` 中并没有使用牛顿法，而是结合了二分法和逆二次插值法的一个自适应算法。解决实际问题时所采用的策略和逻辑，在作者看来同算法的收敛性、稳定性等方面的理论分析同样重要，而这种观点，并不是现有主流实验教材所体现出来的。

本书在引入一个算法之后更注重分析方法之间的联系，引导学生进行思考。例如对 A 算法，它有哪些优缺点？它适合所要解决的实际问题吗？算法有没有关键性的假设？为了克服它的缺点，该从什么方面进行改进？它与 B 算法在解决问题的思路上有哪些联系与区别？与目前常见的直接列出定理、公式和算法的实验教材相比，本书语言生动，加入作者对问题的分析和理解。在比较深入地分析基本算法后，不断地对算法进行改进和完善。

本书对很多实际计算中的重要问题作了比较深入的介绍。在常微分方程数值解法这一部分中，数值方法的误差控制在实际计算时是非常重要的一个问题，它决定了如何确定合适的步长以及得到的数值解能否被采用。传统教材更多关注算法的构造及其稳定性、收敛性、精度方面的分析，而对如何进行误差的估计，以及如何通过调整步长来实现误差的控制重视不足。反观 MATLAB 的内置微分方程求解函数，在这方面下足了工夫。和传统教科书在上机练习中给出龙格-库塔方法的计算公式及固定步长要求学生上机计算不同，MATLAB 中的 `ode` 系列函数提供了丰富的选项和功能，以及复杂的处理逻辑，让我们从一个侧面了解到实际科学与工程计算对算法提出的具体要求。本书详细地讨论了各种算法在处理误差控制问题上的策略。

本书在实验的设计方面，强调算法的实现，给出了比较详细的实现的引导。实验的难度具有一定的弹性，可适用于多种不同的专业要求。作为数值分析课程的实验，自然是遵循算法设计、算法实现、性能分析等内容。对于信息与计算科学专业的学生，算法的设计和理论分析是必不可少的。要理解算法的原理和实现细节，并针对不同情况作应有的改进，学生必须自己动手编写、调试函数和程

学。对于工科专业或其他只需掌握数值计算工具的专业的学生，除了了解算法的基本原理外，更多的是要熟练使用已有的 MATLAB 函数和各种工具，改进和优化求解过程。

本教材选用 MATLAB 作为数值分析课程的实验平台，目前要求使用者具备初步的 MATLAB 应用能力。有关的实验教材主要有两种实验平台，多数使用 MATLAB，少数使用 C、C++ 或 Mathematica。MATLAB 界面友好、易学，有方便和强大的绘图功能，代码的执行使用解释方式，便于交互。这些特点决定了 MATLAB 非常适合作为数值实验的平台。MATLAB 可以说是目前商业上最成功的数值计算软件，提供了丰富的专业函数，它的有效性和可靠性经受了大量工业用户的检验。在某些领域，MATLAB 的工具箱已经成为行业标准的软件包。MATLAB 同时也是一个非常开放的软件系统，允许用户编写自己的函数。互联网上有相当多的有关 MATLAB 的资源，包括各种组织和个人开发的工具箱，以及大量的讨论组。对初学者来说，使用互联网是获得帮助和提高的重要手段。

本书在给出各种算法细节的同时，也介绍了使用对应的 MATLAB 内置函数的实现方法。这样做有 4 个好处。

第一，当我们编写代码实现一个算法后，可以使用 MATLAB 来检验自己结果的正确性。MATLAB 作为商业化的“工业软件”，对一般规模的计算问题，在正确使用的前提下，计算结果可以作为检验算法正确性与性能的一种可靠手段。

第二，MATLAB 中的函数是我们学习的典范。MATLAB 函数不是简单地把数值算法翻译成代码，它在诸如防错性设计结构、多输入多输出、自适应处理、向量化处理等程序设计方面值得我们深入学习。MATLAB 代码体现了简洁、稳定、高质量的工业化软件标准。

第三，在 MATLAB 平台下数值实验的难度具有相当的弹性。例如第 3 章中求解矩阵特征值的 QR 迭代方法。工科专业的学生，可能只需要掌握现成的 eig 函数的使用方法，通过一些数值算例了解算法的性能和优化方法即可。如果要再深入探究其中的过程，可以使用 MATLAB 内置的 QR 分解函数 qr，或者更进一步使用命令“gallery('house',x,k)”生成相应的 Householder 变换来实现矩阵的 QR 分解，还可以使用函数 hess 直接得到一个矩阵的上 hessenberg 形式。对于要从事数值算法设计和开发的信息与计算科学专业的学生，则必须自己实现并测试上面所有这些算法。

第四，MATLAB 是一个开放的数值计算平台，允许我们修改已有的代码和编写新的函数。虽然它并不是开源软件，部分函数实现的细节无法查看，但大多数函数是可以查看源代码的。学习 MATLAB 可以沿着读懂程序、修改已有程序到编写自己的程序这样的过程进行。

本书的每个章节分为理论部分和实验部分。理论部分强调算法的来源、各种

本书在编写过程中，力求做到对理论和算法的完善与发展，并不过分强调理论推导和证明，而是注重让学生在对相关算法形成一个直观的感受和思想方法的过程中，体会到数值分析的基本思想。本书内容非常基本、易懂，涵盖了数值分析课程的主要内容，且全书内容更适于在实验部分使用，有相当多的延伸内容是以实验形式呈现的。在解决实际问题的过程中学到的知识，会更鲜活和生动。

本书可作为信息与计算科学专业本科数值计算方法课程或其他有数值计算需求的专业或专业的计算方法课程的配套实验教材或参考教材。

本书的第1、第3、第6、第7章由杨坦编写，第2、第4、第5章由谢骊玲编写，全书由杨坦总纂定稿。

在本书的编写与出版过程中，华南师范大学数学科学学院和华南理工大学出版社给予了很大的支持和帮助。特别是数学科学学院的冯伟贞教授，从教材的立意到写作风格都给两位作者提出了很多宝贵的意见。感谢所有使得本书能够顺利付梓的同事和家人。

限于编者的经验和水平，书中一定有疏漏和不足之处，敬请读者批评指正。

编者
2012年6月