《数值计算方法》教学大纲

(2025-2026年第一学期)

课程: 数值计算方法

课程序号: 0813 课程代码: 103567

授课教师: 冯银波

答疑时间: 预约或周二下午 15:00-17:00 办公室: 信息管理与工程学院 211 E-mail: feng.yinbo@mail.shufe.edu.cn

课程安排说明: 2025年9月9日—2025年12月23日

上课时间: 周二上午 10:05-12:40

授课地点: 三教 107

课程调整:无

期终考试时间: 2025年12月29日-2026年1月11日之间

教学学时分配表:

| 学分 | 总学时 | 理论教学学时 | 实践教学学时 | 实验教学学时 | 其他 |
|----|-----|--------|--------|--------|----|
| 3 | 48 | 48 | 0 | 0 | 0 |

课件网址: https://canvas.shufe.edu.cn/courses/20878

教材和参考书目:

指定教材:《数值线性代数》第二版,徐树方 高立 张平文著,背京大学出版社,2013

参考书目:《Applied Numerical Linear Algebra》, James W. Demmel, 1997

《线性代数计算方法》蒋长锦编,中国科学技术大学,2003

《Numerical Methods Using MATLAB》Mathews and Fink, 电子工业出版社

预备知识:

线性方程组、矩阵性质、特征值和特征向量性质

先修课程: 高等数学 线性代数,一门编程语言

课程达成目标:

由于计算机的普及,科学计算已成为各学科领域的一项重要工作。学习和掌握数值计算方法的基本原理及应用已成为现代科学工作者不可缺少的一个环节。数值计算是科学与工程计算的核心,研究如何针对各类科学与工程问题中所提出的矩阵计算问题的特点,设计出相

应的快速可靠的算法。通过对本课程的学习,是学生掌握数值计算的基本概念、基本方法及 其原理,培养应用计算机从事科学与工程计算的能力。具体能力包括:

- 1. 掌握科学计算中常用的算法,包括线性方程组求解算法、非线性方程组求解算法、最小二乘问题求解算法、矩阵的各类分解算法、积分和微分方程求解算法等,以及相应的程序设计,最重要的掌握这些算法背后的原理,理解用计算机求解和人脑求解在思路和逻辑上的区别;
- 2. 具有对经典算法进行拓展和理论分析的能力,理解为什么不同的算法所适用的情形不同,各自的优势是什么;
- 3. 掌握大规模科学计算和一般的小规模计算问题在求解上的区别;并能欧熟练掌握和 使用相关的数学软件,能够进行大型数值计算的能力。

思政育人元素:将思政育人的理念融入到教学当中,在提高学生文化知识水平的同时,页提高学生的思想政治素质。比如,结合国产计算软件发展相对不景气,而美国趁机禁止我国的部分高校使用 Matlab 软件这个案例,教导同学们学好理论知识,科技报国,将自己所学用于我过的计算软件开发中去;通过展示数值计算与理论计算之间的差异,让同学明白严谨治学的要义,关于科学计算问题,不可有半点马虎;通过对迭代算法的学习,让同学了解到局部最优和全剧最优的联系与区别,教导同学考虑问题要有系统思维。

课程设置知识要求:

学习本课程需要具备扎实的《线性代数》基础。由于数值计算方法广泛涉及矩阵运算、矩阵分解、特征值与特征向量、矩阵范数等内容,学生需熟练掌握线性代数中的核心概念和相关数学定理,并能够灵活运用于算法分析与计算实践中。此外,课程中还会涉及一些涉及数值稳定性与收敛性的理论分析,也依赖于对矩阵性质的深入理解。因此,学生不仅要对线性代数的公式和推理有清晰记忆,还要具备较强的理论分析能力。此外,学习本课程还需要一定的《高等数学》基础,主要体现在微积分、级数、误差分析等方面,为理解数值算法的基本原理提供支持。同时,学生还需具备一定的编程能力(如 MATLAB 或 Python),以完成算法实现与计算实验。但与线性代数相比,对高数和编程的要求相对较低,重在理解与应用。

课程设置能力要求:

本课程属于数学和计算机的交叉学科,比较侧重于数学,需要学生除了完成作业之外还要花大量的时间理解和吸收课上所讲的知识点,尤其是《线性代数》较差的学生,需要先花费大量的时间弥补《线性代数》的基础知识,然后将该课程的知识点与《线性代数》以及其他相关课程的知识点串联起来,形成一个整体。这需要学生有极强的自学能力和求知欲。

考核形式:

期末考试采用闭卷方式, 学生的最后的总分计算方法如下: 平时作业 20%

| 考 | 勤 | 5% |
|----|----|-----|
| 课堂 | 参与 | 5% |
| 上机 | 考试 | 20% |
| 期末 | 考试 | 50% |

试卷结构:(以具体试卷为准)

| 简答题 | 25% |
|-----|-----|
| 计算题 | 60% |
| 证明题 | 15% |

学术诚实

涉及学生的学术不诚实问题主要包括考试作弊、抄袭、伪造或不当使用在校学习成绩、 未经老师允许获取或利用考试材料。对于学术不诚实的最低惩罚是考试给予 0 分。其它的惩 罚包括报告学校相关部门并按照有关规定进行处理。

概率论课程教学要点 教学大纲

第一章 数值计算方法绪论

1. 数值计算的研究对象和基本问题:

主要知识点包括:数值计算的研究对象是利用计算机对数学问题进行近似求解的方法,主要关注算法的稳定性、收敛性和计算效率。通过数值方法解决方程求根、线性代数、插值逼近等基础问题,为工程和科学计算提供可靠工具。

2. 研究数值方法的必要性:

主要知识点包括:数值方法解决了解析解难以获得或不存在的问题,弥补了传统数学的局限。它在科学与工程计算中不可或缺,提高计算精度与效率,确保结果稳定可靠,是现代计算技术的重要基础。

3. 介绍科学计算软件 Matlab (思政元素: 科技报国):

主要知识点包括: Matlab 是一款功能强大的科学计算软件,广泛应用于数值分析、数据处理和工程模拟。通过学习 Matlab,学生不仅掌握计算工具,还能体验我国科技创新的成果,激发报效国家、推动科技发展的使命感。

4. 介绍算法设计的主要技巧——矩阵分解:

主要知识点包括:矩阵分解是算法设计的重要技巧,通过将复杂矩阵拆解成简单矩阵,提高计算效率和数值稳定性。常用方法包括 LU 分解、QR 分解、谱分解、SVD 分解等,广泛应用于线性方程组、特征值、奇异值问题的求解。

5. 介绍敏度分析和误差分析的含义:

主要知识点包括:敏感度分析研究输入数据变化对计算结果的影响,帮助评估算法的鲁棒性。误差

分析则量化计算中的近似误差来源,指导改进算法精度和稳定性,确保数值结果的可靠性。

6. 介绍算法复杂性的含义:

主要知识点包括:算法复杂性衡量算法在计算时间和空间上的资源消耗,反映其效率。通过分析复杂性,能够预测算法在大规模问题中的表现,指导优化设计,提高计算性能。

【本章教学重难点】: 敏度分析和误差分析的含义

第二章 非线性方程数值解

1. 逐步搜索法:

主要知识点包括:逐步搜索法的基本思想,通过等间距采样检测函数符号变化定位根的近似区间;算法简单直观,适合作为根的初步估计工具;方法的优缺点及适用范围;采样步长对精度和效率的影响;为后续精确求解方法提供初始区间。

2. 区间二分法:

主要知识点包括:区间二分法的基本原理及算法步骤;利用连续函数的介值性质确定根所在区间;收敛过程及收敛速度分析;方法的稳定性和适用条件;实现中的注意事项如终止准则;该方法作为保证收敛的基础,为其他迭代法提供初始区间。

3. 普通迭代法 (思政元素: 系统思维):

主要知识点包括:普通迭代法的基本原理和迭代函数构造;收敛条件与收敛速度分析;方法的优缺点及适用范围;系统思维在算法设计中的体现——整体与局部的协调优化;通过迭代过程理解问题求解的系统性和动态性,培养学生综合分析和解决问题的能力。

4. 牛顿法:

主要知识点包括: 牛顿法的基本原理和迭代公式; 利用函数及其导数信息实现快速收敛; 初值选择对收敛性的影响; 方法的收敛速度和适用条件; 计算中可能遇到的陷阱如导数为零或震荡; 以及实际应用中如何结合其他方法提高稳定性和效率。

5. 弦截法 (割线法):

主要知识点包括: 弦截法的迭代思想及公式,利用两点函数值近似导数替代牛顿法中的导数计算;方法的收敛性质和速度分析;与牛顿法的比较及适用场景;初始点选择对算法表现的影响;算法的实现步骤及数值稳定性问题。掌握弦截法有助于处理导数难以计算的非线性方程。

【本章教学重难点】: 牛顿法的收敛速度和适用条件, 割线法相对于牛顿法的优劣势

第三章 线性方程组的直接解法

1. Gauss 消去法:

主要学习:线性方程组的消元思想; Gauss 消去法的步骤和流程; 如何通过初等行变换实现矩阵上三角化; 回代求解方法; 消元过程中避免除零及数值稳定性问题; 该方法的计算复杂度及适用范围。理解这些内容为掌握矩阵分解和后续求解方法奠定基础。

2. 矩阵的三角分解及其在解线性方程组中的应用:

主要知识点包括:矩阵三角分解的基本概念和目的;LU分解的定义及计算步骤;如何利用分解简化线性方程组求解过程;分解过程中对矩阵可逆性和行列变换的要求;分解方法的数值稳定性和计算效率;实际应用中的优势及局限性。掌握这些知识有助于理解直接解法和迭代法的联系。

3. 解对称正定矩阵方程组的平方根解法:

主要知识点包括:重点介绍平方根法,针对对称正定矩阵,将矩阵分解为下三角矩阵与其转置的乘积,实现高效稳定求解。内容涵盖分解过程、算法步骤及数值特性,强调该方法在工程和科学计算中的应用价值。

4. 带状线性方程组直接解法:

主要知识点包括: 带状矩阵的定义及结构特点; 带状线性方程组的存储优化方法; 针对带状矩阵的 Gauss 消去法改进, 减少计算量和存储需求; 算法实现步骤及数值稳定性分析; 该方法在工程和科学 计算中解决大规模稀疏问题的优势。

5. 向量和矩阵的范数:

主要知识点包括:向量范数和矩阵范数的定义及常见类型(如 1 范数、2 范数、无穷范数和 Frobenius 范数);范数的性质及其在误差分析中的作用;范数在衡量向量和矩阵大小、稳定性及敏感度分析中的应用;范数计算方法及其对算法设计的影响。

6. 线性方程组的敏度分析和误差分析(思政元素:严谨治学):

主要知识点包括:线性方程组解的敏感性分析,了解系数矩阵扰动对解的影响;条件数的定义及其意义;舍入误差和输入误差的传播机制;通过范数定量分析误差界;引导学生树立严谨治学的态度,强调在数值计算中保持精确与稳健的重要性。

【本章教学重难点】LU 分解和 LDL 分解, 范数, 条件数; 理解平方根法和三角分解的关系; 向量范数与矩阵范数的核心区别; 算子范数与特征值的关系; 条件数的大小、矩阵范数大小、行列式大小, 三者之间的关系

第四章 最小二乘问题的解法

1. 最小二乘问题的由来及特点:

主要知识点包括:最小二乘问题的提出背景,源于拟合无法精确满足的超定方程组;基本思想是最小化残差平方和;问题的几何意义与解析表达;最小二乘解的存在性与唯一性条件;该问题在数据拟合、误差处理和工程建模中的广泛应用。

2. 初等正交变换:

主要知识点包括:初等正交变换的定义及其性质,保持向量长度和内积不变;常见类型如 Givens 旋转和 Householder 变换;其在线性变换中的作用,尤其是在 QR 分解和最小二乘问题中的应用;该方法的数值稳定性及其在高精度计算中的重要性。

3. 正交化方法:

主要知识点包括:正交化的基本概念及目的;Gram-Schmidt正交化过程及其改进形式(如改进型GS 和 Householder 变换);正交向量组的构造与数值稳定性分析;正交化在QR分解与最小二乘问题求解中的应用;理解正交性对提高计算精度和减少误差传播的意义。

【本章教学重难点】Householder 和 Givens 变换, QR 分解,最小线性二乘问题与线性方程组的关系,不同通过正交变换实现 QR 分解在计算量上的区别

第五章 线性方程组的迭代解法

1. Jacobi 迭代法:

主要知识点包括: Jacobi 迭代法的基本思想和算法流程,通过分离对角元素实现逐步更新;收敛条件(如对角占优)及其判定方法;算法的实现简便但收敛速度较慢;理解其在大规模稀疏线性方程组中的应用价值;为后续迭代法如 Gauss-Seidel 法打基础。

2. Gauss-Seidel 方法:

主要知识点包括: Gauss-Seidel 方法在 Jacobi 迭代基础上利用已更新值加快收敛; 迭代公式与实现步骤; 收敛条件及其与矩阵性质(如对角占优或正定性)的关系; 方法的收敛性与误差分析; 与 Jacobi 方法的比较及其在实际工程问题中的应用。

3. SOR 方法:

主要知识点包括:超松弛迭代法(SOR)的基本原理,在 Gauss-Seidel 方法基础上引入松弛因子以加快收敛; SOR 迭代公式及参数选择对收敛性的影响;适用条件(如矩阵正定性)与收敛性分析; SOR 方法在求解大型稀疏线性方程组中的高效性与实用性。

4. 迭代法的收敛性:

主要知识点包括: 迭代法收敛性的定义与判断标准; 谱半径在收敛性分析中的作用; 误差递推公式与收敛速度关系; 不同迭代方法的比较与适用条件; 如何通过矩阵性质(如对角占优、正定性)分析方法是否收敛; 强调构造收敛迭代法在数值计算中的重要意义; 矩阵分裂迭代法和直接解法的区别。

5. 最速下降法:

主要知识点包括:最速下降法用于求解对称正定线性方程组,基本思想是在负梯度方向上迭代寻优;每步通过精确线搜索确定步长;算法的推导、几何解释及实现步骤;收敛性分析及与共轭梯度法的比较;方法简单但收敛速度较慢,常用于理论分析和算法引导。

6. 共轭梯度法:

主要知识点包括:共轭梯度法专用于求解对称正定线性方程组;通过在共轭方向上最小化误差实现快速收敛;算法的推导、迭代步骤及与最速下降法的区别;共轭向量的构造与正交性维护;数值稳定性分析及在大型稀疏系统中的实际应用优势;和最速下降法的本质区别;和直接解法的区别。

【本章教学重难点】几种分裂迭代法的核心原理,分裂迭代法与直接解法相比的优势, 共轭梯度法相对与最速下降法的优势,用共轭梯度法与直接解法求线性方程组的时的优 劣势;对共轭梯度法的深层次理解

第六章 矩阵特征值问题的计算方法

1. 矩阵特征值问题:

主要知识点包括:矩阵特征值与特征向量的定义及物理意义;特征值问题在工程和科学计算中的重要性;特征值存在性和唯一性条件;特征值问题的分类(如实对称矩阵、非对称矩阵);求解特征值问题的基本方法及其挑战。

2. 乘幂法和反幂法:

主要知识点包括:乘幂法通过反复乘以矩阵逼近最大特征值及对应特征向量;反幂法则用于求最小特征值;算法步骤、收敛条件及速度分析;方法简单,适合大规模稀疏矩阵;注意数值稳定性及初值选择对结果的影响。

3. 子空间迭代法:

主要知识点包括:子空间迭代法通过同时迭代多个向量构造近似特征子空间;提高计算效率,适合求解多个特征值;方法步骤包括正交化和投影运算;收敛性分析及与单向量迭代法的比较;广泛应用于大型稀疏对称矩阵特征值计算。

4. QR 方法:

主要知识点包括: QR 方法通过矩阵的 QR 分解实现特征值的迭代计算; 算法核心为先上 Hessenberg 化, 再反复进行 QR 迭代; 收敛性强, 适用于求解一般矩阵特征值问题; 方法的数值稳定性和计算复杂度; 在现代数值线性代数中的广泛应用。

5. 对称矩阵特征值的 OR 方法:

主要知识点包括:对称矩阵 QR 方法的特殊性,利用对称矩阵的三对角化简化计算;算法步骤包括三对角化与 QR 迭代;收敛速度快且数值稳定;保证特征值实数且易于求特征向量;该方法是求解对称矩阵特征值问题的经典且高效工具。

6. 奇异值分解:

主要知识点包括: 奇异值分解 (SVD) 的定义及数学表达,将任意矩阵分解为三个特定矩阵的乘积; 奇异值的非负性及其与矩阵秩、范数的关系; SVD 在数据降维中的应用; 计算方法。

【本章教学重难点】幂法和反幂法的核心原理及主要应用,Householder 变换和 Givens 变换在 QR 迭代法中的应用,QR 迭代法的加速,隐式 QR 迭代法的原理

第七章 数值积分

1. 复化求积法:

主要知识点包括:复化求积法通过将积分区间细分并应用基本求积公式提高积分精度;常用公式如复化梯形法和复化 Simpson 法;误差估计与收敛性分析;方法适合处理连续且光滑函数的数值积分;掌握复化求积法有助于解决复杂积分问题。

2. Romberg 求积公式:

主要知识点包括: Romberg 求积利用梯形法的递推改进,通过 Richardson 外推提高积分精度;算法结构清晰,收敛速度快;误差分析和递推公式推导;适用于光滑函数的高精度数值积分;强调算法的效率与数值稳定性。

3. Gauss 求积公式:

主要知识点包括: Gauss 求积通过选取最优积分节点和权重实现对多项式的最高阶精确度; 原理基于正交多项式理论; 与复化求积法的区别和优势; 算法实现及误差分析; 广泛应用于高精度数值积分和工程计算。

【本章教学重难点】Gauss 求积公式的核心原理, Gauss 求积公式与插值型公式的核心区别, 自适应 Gauss-Kronrod 积分公式的原理

第八章 常微分方程数值解(本学期可能会由于放假原因讲不到这一章)

1. Euler 法和改进 Euler 法:

主要知识点包括: Euler 法的基本思想与迭代公式,作为最简单的显式数值积分方法; 改进 Euler 法 (梯形法)的步骤及其提高精度的原理; 两种方法的稳定性和误差分析; 适用范围及数值解常微分方程的基本入门工具。

2. Runge-Kutta 法:

主要知识点包括: Runge-Kutta 方法通过多阶段加权平均提高数值解常微分方程的精度; 经典四阶 Runge-Kutta 算法的步骤和公式; 方法的稳定性和误差控制; 适用于刚性和非刚性问题的广泛应用; 相比 Euler 法具有更高的效率和精确度。

【本章教学重难点】Runge-Kutta 方法的原理