熊春光　李育安　主编

Computational Methods in Science & Engineering

科学与工程计算方法

（第二版）

清华大学出版社

熊春光 李育安 主编

Computational Methods in Science & Engineering

科学与工程计算方法

（第二版）

清华大学出版社

内 容 简 介

本书是“科学与工程计算方法”课程的配套教材，介绍了科学与工程计算中最常用和最基本的数值计算方法.

本书内容充实，重点突出，强调方法的构造与应用；推导过程既重视理论分析，又避免过多的理论证明；对每种方法都在计算机上编程实现，并给出真解、数值解和误差的曲面图，让读者有直观的感受. 全书共 9 章，分别是：两点边值问题的数值解法、刚性方程组的数值解法、偏微分方程的一般概念、抛物方程的差分格式、双曲方程的差分格式、对流扩散方程的差分格式，椭圆方程的差分格式、变分问题的近似计算方程、有限元方法.

本书适合非数学专业的工科研究生或者计算数学专业高年级本科生学习使用.

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。
版权所有，侵权必究。侵权举报电话：010-62782989　13701121933

图书在版编目（CIP）数据

科学与工程计算方法/熊春光，李育安主编. --2 版. --北京：清华大学出版社，2015
ISBN 978-7-302-41369-1

Ⅰ. ①科…　Ⅱ. ①熊…　②李…　Ⅲ. ①数值计算－计算方法－研究生－教材　Ⅳ. ①O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2015）第 209502 号

责任编辑：汪　操
封面设计：常雪影
责任校对：赵丽敏
责任印制：何　芊

出版发行：清华大学出版社
网　　址：http://www.tup.com.cn，http://www.wqbook.com
地　　址：北京清华大学学研大厦 A 座　　**邮　　编**：100084
社 总 机：010-62770175　　**邮　　购**：010-62786544
投稿与读者服务：010-62776969，c-service@tup.tsinghua.edu.cn
质 量 反 馈：010-62772015，zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn
印 装 者：北京密云胶印厂
经　　销：全国新华书店
开　　本：185mm×230mm　　**印　张**：17.75　　**字　　数**：387 千字
版　　次：2011 年 4 月第 1 版　　2015 年 10 月第 2 版　　**印　　次**：2015 年 10 月第1 次印刷
印　　数：1～2500
定　　价：39.00 元

产品编号：062075-01

再 版 序 言

现代科学、技术、工程中的大量数学模型都可以用微分方程来描述，很多近代自然科学的基本方程本身就是微分方程. 在科学的计算机化进程中，科学与工程计算作为一门工具性、方法性、边缘交叉性的新学科开始了自己的新发展，微分方程的求解方法也得到了前所未有的发展和应用. 求解方法总体上分为解析法和数值方法两大类，而绝大多数微分方程(特别是偏微分方程)定解问题都很难以使用解析形式来表示，本书主要关注数值方法.

本书为“科学与工程计算方法”课程的配套教材，书中主要讨论科学与工程研究中的数学建模，即得到微分方程的数学模型后，如何进行近似求解. 国内这方面的优秀教材不少，但都存在理论陈述与应用分析之间的巨大鸿沟. 科学与工程领域的工程师们在著书描述这些数值方法的时候，往往只关心如何在他们各自领域的应用，致使读者对数值方法基本原理的理解产生困难，妨碍他们对在其他领域应用的认知. 另一方面，数学工作者撰写此类书时，只着重于理论分析而忽视应用方面的细节. 比如，边界条件的处理、迭代法、软件的实施等细节往往被忽视. 本书着力于以简短易懂的语言和方法介绍基本的计算方法，并兼顾应用.

由于科学与工程计算方法的前沿发展迅速，与第一版相比，本书的目标之一就是引领学生尽快进入本学科的前沿，因此本书在内容的广度和深度上有所取舍. 有些传统的知识点在本书中不会特别详细的介绍，比如两点边值问题的数值解法、高维问题的数值解法等. 纵观全书，本书将数值方法(差分法和有限元方法)的基本思想和数学软件联系在一起. 通过对各种方法从理论上和实践上进行完整的描述，让读者更容易获取知识，进而帮助他们开发自己的应用程序或发展新的理论，也帮助从未接触过数值分析和编程的读者熟悉和掌握数值算法的分析技巧和相关编程技术.

基于目前本书受众以及北京理工大学学习本课程学生的实际情况反馈，本书的读者只需学过微积分和线性代数的知识即可. 同时，在这些年的教学过程中，大部分同学一提到数学课程就头疼，一个字——“难”. 所以本书再版的宗旨就是让读者有兴趣、有能力去阅读数学，让“高大上”的数学远离，让朴素有用的数学回归. 本书会预留一些容易推导的细节给读者，鼓励读者补充那些被编者“遗忘的”(甚至“不会的”)细节作为课后习题. 课后练习不是以往的“例行公事”或者“俗套化”的求解问题，而是要帮助读者理解概念和熟悉方法，循序渐进地诱导读者深入到数值方法的本质中去.

第二版增加的章节有：第 1 章、第 2 章、3.4 节、4.1 节、6.3 节、7.5 节、9.2 节等，同时，删除了第一版的第 8 章统计计算以及部分方法，其他变化相对较小的内容在这里不一一表

述了.章节增加的主要原因有如下几点：

① 基于学生的真实需求.比如第 1 章、第 2 章、6.3 节的内容等，这些内容在硕士研究生的数值分析课程中基本不会涉及.在多年的一线教学中，经常遇到学生问到这些方面的知识，所以本次编写将它们增加进来，但只是简单介绍，旨在让读者初步地了解与以前课程所学知识的区别和联系.

② 源于课程生源结构的变化，由原来的机械与机电专业而扩展到所有理工科专业，于是在第 3 章的偏微分方程的数学建模中增加了许多工业、工程和经济方面的偏微分模型，也即增加了 3.4 节.

③ 加深读者对难点知识的理解.有些比较难懂抽象的知识点，学生总是知其然不知所以然.比如有限元方法，为了让读者更加易于理解，增加了 9.2 节和 9.4.2 节等，目的是为了解释为什么要这样考虑，或者为什么要继续下一步.

④ 尽量接近本学科的前沿.多重网格方法是最近 20 年迭代求解最重要的方法，于是增加了 7.5 节.差分格式的修正和创新离不开对原有差分格式的理论分析，因此数值色散关系是必不可少的工具，于是在讲授完抛物方程和双曲方程后，增加了此方面的内容，即 6.3 节.

除了正文的内容的增减外，课后习题也全部更换.编者参考了众多国外的文献后，重新编写了全书的所有习题.这些习题有助于读者深入理解，不再是例行公事般求解一个孤单的问题.此外，还应注意如下两点：①很多学生在学习本课程之前，没有接触过任何偏微分方程和数学软件的课程，所以对方程的解一无所知.为了增加同学们的感性与理性认识，于是就有了如第 1 章的习题 6 类型的习题；②有些习题的内容因课时所限，无法讲授，故安排在习题中，通过分步提示来帮助解决问题，让学生逐渐了解这些知识，比如，第 3 章习题 9、习题 10 和第 4 章习题 9 等.习题是宝库，花费了编者大量的精力，值得读者去开采.

本书共分 9 章，由北京理工大学熊春光老师和中国人民武装警察部队学院李育安老师合作编写，各章内容如下：

第 1 章和第 2 章讲述常微分方程的数值求解，分别介绍刚性问题和两点边值问题的数值求解方法，它们是先行课程涉及偏少或者几乎不讲述的内容，但非常有用.第 1 章两点边值问题的求解，简短地介绍了几种方法，有些方法可以认为是后面内容偏微分方程数值方法的特例，相当于偏微分方程数值方法的预热过程.第 2 章刚性问题的数值方法，简单罗列了隐式 Rung-Kuta 法和广义向后差分法，是求解刚性问题的主要方法.

第 3 章基于大部分同学没有学习偏微分方程课程，讲述偏微分方程的起源，如何由实际问题导出经典方程，然后讲述偏微分方程的基本理论.为了让各专业的学生了解偏微分方程在他们各自专业中的应用，最后再讲述工业与工程中出现的各种偏微分方程.

第 4 章到第 7 章，是本书的核心之一，主要讲述四大类的偏微分方程（抛物方程、双曲方程、对流扩散方程和椭圆方程）最主要的数值求解方法——差分方法.介绍各种差分格式是如何精巧的构造出来的，各种方法的性质和特点以及如何在实践中应用.

第 8 章和第 9 章讲述有限元方法.第 8 章的变分法为第 9 章的有限元方法做准备工作，

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

是必不可少的一章,有助于学生理解为什么要这样“做”有限元.第 8 章主要讲述变分法的基本概念、相关的近似计算方法以及它们的缺点.第 9 章介绍有限元方法的基本思想和几类特殊的有限元(线性有限元、双线性有限元以及二次有限元),最后介绍有限元方法的收敛性.

全书各章内容相互独立,因此授课老师可以根据课时长短选取教学内容.使用本教材的课时建议(52~56 学时):第 1 章(3 学时)、第 2 章(2 学时)、第 3 章(5 学时)、第 4 章(8~10 学时)、第 5 章(10 学时)、第 6 章(6 学时)、第 7 章(6 学时)、第 8 章(4 学时)、第 9 章(8~10 学时).

本书的再版编写历时两年,期间得到了北京理工大学研究生院和数学学院的大力支持,在此表示衷心感谢.特别地,编者要深深地感谢第一版的读者们,他们纠正了很多错误并提出了非常宝贵的意见,特别是哈尔滨工程大学的沈艳老师.另外,感谢李志荣重新调试了全书新增的程序.最后,感谢清华大学出版社责任编辑的辛勤工作.

限于编者水平,书中定有不少错误,敬请读者指正.希望读者在使用本书时能反馈宝贵意见,不胜感激.

编　者

2015 年 6 月

给学生的建议

祝贺你，成为工科研究生，并选择了"科学与工程计算方法"这门课程，你的决策是如此的睿智和英明. 自然界的各种规律基本都以常微分方程或者偏微分方程的语言进行描述. 因此，它们大量出现在工程各个领域，成为终生不舍弃你的朋友. 为了得到微分方程描述的最终结果，你必须求解它们，很不幸，99.999%的方程无法得到准确解，只能通过各种数学手段求它的近似解，这是一个五彩缤纷的神奇的世界. 欢迎你的到来，你的到来会让它更加绚丽多彩，更加迷人. 本书的目的就是帮助你畅游这个领域，像爱丽丝在绿野仙踪的世界里畅游一样.

"科学与工程计算方法"是工程与科学研究中出现的微分方程数学模型或者统计模型的数值近似求解的方法，目前这版本的教材暂时只涉及微分模型的数值计算. 为了成功地阅读此书，你需要遵循如下几个步骤：

首先，你仅仅需要微积分和线性代数的基础，这对你阅读本书已经足够了(这真是个好消息啊!)，因为此时的你已经能阅读其中 95%的内容和习题了. 当然如果你还有点数值分析的先验知识，那就更完美了，你完全可以胜任阅读完此书以及课后习题.

其次，中国有句古语"好记性不如烂笔头"，阅读数学书更是如此. 在阅读本书的同时，你应该准备一支铅笔和一张白纸. "高大上"的数学书会留很多细节给读者自己进行推导演算，尽管本书不会留很多细节给你们，而是提供足够的细节让你们跟随它不费脑地讨论和学习，但是铅笔和白纸还是必需的，至少你需要简单验算或者证明书中讨论的结果. 相信我，这些努力不会让你白费，它能帮助你理解加固所学习的内容，更加接近事物的本质.

最后，练习题是如此的重要，它是本书不可分割的有机组成部分. 你应该尽力解决其中大部分甚至全部问题. 除了少数习题是循规蹈矩的例行公事的求解问题外，大部分都是带有提示型激励你解决问题的习题、将分析与编程很协调地融为一体的习题，解决了它们将会飞速提升你的分析问题与编程的能力.

本书的练习题不仅是你巩固课堂学习内容的手段，也是你学习新知识的途径. 比如，如果你是数值世界的新闯入者，尚未学习任何数值计算的工具，那么第 2 章习题 4 将是你快速了解常微分方程求解方法基本思想最理想最便捷的途径；如果你是数值世界中贪得无厌的高手，那么下面很多习题就是你的私人定制，比如：第 1 章习题 7、第 2 章习题 4、第 3 章习题 3、

第 4 章习题 7～11 等，每一章都有宝藏等你发掘. 习题对你们如此重要，千万别辜负编者的期望.

最后，作为过来人的建议：即使你被其中的某个问题阻碍，你依然要通过解决它来学习数学，哪怕是一次不成功的努力尝试也能帮你理解概念并巩固知识. 切记不要拒绝尝试，直接放弃，这是学习数学最大的忌讳.

目　　录

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

第 1 章　两点边值问题的数值解法

科学与工程计算方法，顾名思义，是讲述科学与工程中所用的数学方法，它一般包括微分方程的数值计算和统计上的数值计算. 目前，本教材只讲述微分方程的数值计算. 微分和方程的词语表示求解包含导数的方程，正如读者在中学时代花了大量的时间学习求解的

$$x^2+3x+2=0$$

这样的带变量 x 的代数方程一样，在这门课程中，希望求解的是带有导数项

$$y''+2y'+1=x \quad \text{或者} \quad \frac{\partial u}{\partial t}+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}=\sin(xt)$$

这样的常微分方程或者偏微分方程.

数值计算又是什么含义呢？对于 $x-\frac{5}{2}=\sin x$ 这样的方程，显然存在唯一解. 但是，通过以前所学的知识无法得到它的准确解，那么自然而然寻求比较接近准确解的近似解. 通过数学方法得到近似解的过程就是数值计算. 同样的问题也会出现在微分方程的求解过程中，我们无法得到微分方程的准确解或者解析解，只能求它的近似解. 比如下列方程.

1. 悬垂的电线所满足的微分方程：

$$y''=\mu\sqrt{1+(y')^2}.$$

2. 冬天教室的暖气片的热量如何在教室传播，教室里的温度所满足的方程：

$$u_t=a^2(u_{xx}+u_{yy}+u_{zz}).$$

3. 当你将一滴墨水滴入盛水的容器中，墨水在水中扩散的规律所满足的方程：

$$u_t+\beta\cdot\nabla u+\varepsilon\Delta u=f(t,x,y,z).$$

4. 当你使劲地敲了下桌面，桌面振动时所满足的方程：

$$u_{tt}=a^2(u_{xx}+u_{yy}).$$

这类方程与我们的生活息息相关，因此我们要关注它们如何发生，如何发展，如何结束. 下面，从两点边值问题开始本书的内容.

1.1　两点边值问题

在具体求解常微分方程的特解时，必须附加某些定解条件. 定解条件一般分为两种：一种是与时间相关的初始条件，称为初值问题；另外一种是与空间位置相关的边界条件，称为边值问题. 由于本书仅介绍二阶常微分方程的数值解，需要定解区间两边端点的边界条件，

因此,又称为两点边值问题.首先,通过如下两个例子认识两点边值问题.

1.1.1　电线上的小鸟

假设一根两端固定的电线上面每个点都停留一只小鸟,每只小鸟的重量是关于它所在位置的函数,描述此问题的数学模型:

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2}=f(x), \quad 0<x<l,\\ y(0)=y(l)=0.\end{cases} \tag{1}$$

其中 y 为电线上每点的垂直方向上的位移,$f(x)$为 x 点处小鸟的重量.

1.1.2　化学反应的动力学模型

某种化学化合物的反应可以通过下面的问题描述:

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2}=-r\mathrm{e}^y, \quad 0<x<l,\\ y\,|_{x=0}=y\,|_{x=l}=0.\end{cases} \tag{2}$$

两点边值问题的一般形式为

$$\begin{cases}y''=f(x,y,y'), \quad a<x<b,\\ y(a)=\alpha, \quad y(b)=\beta.\end{cases} \tag{3'}$$

首先讨论线性问题,也即考虑如下的问题:

$$\begin{cases}y''+p(x)y'+q(x)y=f(x), \quad 0<x<l,\\ y\Big|_{x=0}=\alpha, \quad y\Big|_{x=l}=\beta.\end{cases} \tag{3}$$

其中 l,α,β 为固定常数,$p(x)$,$q(x)$连续函数,且 $q(x)\leqslant 0(0\leqslant x\leqslant l)$.称问题(3′)或者(3)为两点边值问题(BVP).

1.2　几种经典方法

1.2.1　导数逼近方法(有限差分法)

第一步:将区间$[0,l]$划分为 $0=x_0<x_1<x_2<\cdots<x_{N-1}<x_N=l$. 为了讨论方便,一般采用等距节点,即 $x_i=ih,i=0,1,2,\cdots,N$; $h=\dfrac{l}{N}$,称 x_i 为节点,称 h 为步长.

第二步:考虑微分方程两边在节点 x_i 处的取值,即

$$y''(x_i)+p(x_i)y'(x_i)+q(x_i)y(x_i)=f(x_i). \tag{4}$$

第三步:使用适当的有限差商近似导数,如中心差商

$$y'(x_i)=\frac{y(x_{i+1})-y(x_{i-1})}{2h}-\frac{1}{6}h^2y'''(\eta_i), \quad \eta_i\in(x_{i-1},x_{i+1}),$$

$$y''(x_i)=\frac{y(x_{i+1})-2y(x_i)+y(x_{i-1})}{h^2}-\frac{h^2}{12}y^{(4)}(\bar{\eta}_i),\quad \bar{\eta}_i\in(x_{i-1},x_{i+1}),$$

则

$$\frac{y(x_{i+1})-2y(x_i)+y(x_{i-1})}{h^2}+p(x_i)\frac{y(x_{i+1})-y(x_{i-1})}{2h}+q(x_i)y(x_i)+R_i=f(x_i).\tag{5}$$

其中

$$R_i=-\frac{h^2}{12}y^{(4)}(\bar{\eta}_i)-\frac{1}{6}h^2y'''(\eta_i)p(x_i)=O(h^2),\tag{6}$$

称式(6)为局部截断误差.

将式(5)化简为

$$c_iy(x_{i+1})-a_iy(x_i)+b_iy(x_{i-1})+h^2R_i=h^2f(x_i),\tag{7}$$

其中

$$a_i=-2+h^2q(x_i),\quad b_i=1-\frac{h}{2}p(x_i),\quad c_i=1+\frac{h}{2}p(x_i).$$

第四步：忽略式(7)中的高阶无穷小项 h^2R_i,并用 y_i 代替 $y(x_i)(i=1,2,\cdots,N-1)$,得

$$\begin{cases}c_iy_{i+1}-a_iy_i+b_iy_{i-1}=h^2f(x_i),\quad i=1,2,\cdots,N-1,\\ y_0=\alpha,\quad y_N=\beta.\end{cases}\tag{8}$$

第五步：引入向量,将式(8)改写成矩阵的形式

$$\boldsymbol{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_N)^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{b}=(h^2f_1-\alpha b_1,h^2f_2,\cdots,h^2f_{N-2},h^2f_{N-1}-\beta c_{N-1})^{\mathrm{T}}.$$

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}a_1 & c_1 & & \\ b_2 & a_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & c_{N-2}\\ & & b_{N-1} & a_{N-1}\end{pmatrix},$$

则式(8)可以写为 $\boldsymbol{Ay}=\boldsymbol{b}$.

1.2.2 基函数法

设函数 $Y(x)=\sum\limits_{k=0}^{N}a_k\phi_k$ 是式(3)的近似解,其中 ϕ_k 是基函数,a_k 是系数.基函数的类型选取不同,得到的离散格式也不同,下面列举几种常用的基函数.

方法一：多项式插值型

取基函数 $\phi_k=x^k$,则 $Y(x)=\sum\limits_{k=0}^{N}a_kx^k=a_0+a_1x+\cdots+a_Nx^N$,将它代入 BVP 中,然后比较系数,得到关于系数 $a_0,a_1,\cdots,a_N$ 的代数方程组.具体过程不在书中赘述,作为课后练习题,读者自行推导.此方法实际上是 N 次 Lagrange 插值,它的致命缺点是：高次多项式会出现 Runge 现象.

方法二：B-样条插值型逼近方法

为了解决高次插值的 Runge 现象，在多项式插值中会采用分段 Lagrange 插值，但是在这里面对的对象二阶常微分方程，对插值函数需要满足一定的光滑性，即二阶连续可导.常用的三次 B-样条插值函数可以满足二阶可导的光滑性要求，故取三次样条插值的基函数作为这里的基函数，令 $\phi_k = B_k(x)$，$B_k(x)$表达式为

$$B_k(x) = \begin{cases} 0, & x \leqslant x_{k-2}, \\ \dfrac{(x-x_{k-2})^3}{6h^3}, & x_{k-2} < x \leqslant x_{k-1}, \\ \dfrac{1}{6} + \dfrac{x-x_{k-1}}{2h} + \dfrac{(x-x_{k-1})^2}{2h^2} - \dfrac{(x-x_{k-1})^3}{2h^3}, & x_{k-1} < x \leqslant x_k, \\ \dfrac{1}{6} - \dfrac{x-x_{k+1}}{2h} + \dfrac{(x-x_{k+1})^2}{2h^2} + \dfrac{(x-x_{k+1})^3}{2h^3}, & x_k < x \leqslant x_{k+1}, \\ -\dfrac{(x-x_{k+2})^3}{6h^3}, & x_{k+1} < x \leqslant x_{k+2}, \\ 0, & x_{k+2} < x. \end{cases} \tag{9}$$

$B_k(x)$从函数表达式来看，貌似有些繁琐，是一个分成六段的分段函数，仔细观察表达式，对应段之间是对称的，下面的函数图像也表明了这一点.关于它的二阶可导性，作为练习，读者可以自行验证.样条基函数的图像见图 1.1(以 $k=6$ 为例)：

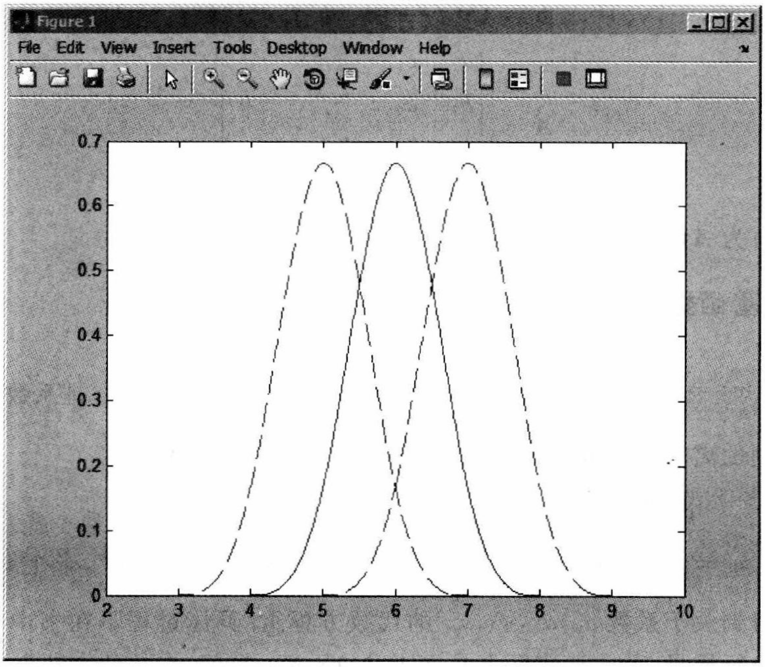

图 1.1

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com