

▶ 本书出版获国家自然科学基金项目资助 ◀

张正秋 编著

数值计算与数据处理 编程及实践



清华大学出版社

数值计算与数据处理编程及实践

张正秋 编著

清华大学出版社
北 京

内 容 简 介

编写高效率的数值计算处理程序，可以大大提高科研水平。本书共 13 章，分别介绍数值计算发展史、数据格式和压缩处理方法、自我描述格式的文件、无微分极值算法、高精度计算程序的设计、等高线制图、在数值计算中对字符串匹配的方法、从程序代码优化方法上对程序质量进行控制、可复用程序的设计方法、MPI 程序的编写方法、数值计算的混合编程技术以及 UNIX/Linux 系统下计算的辅助编程等知识。本书提供了很多有用的、完整的、用于数值处理软件制作的核心代码，如 LZSS 编码压缩、无微分算法程序、等高线制图等，经过简单的包装，这些程序就可以发展成不同的数值处理软件。

本书可供科学计算高年级本科生和研究生学习使用，也可以供科学计算科研人员参考使用。

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

数值计算与数据处理编程及实践 / 张正秋编著. —北京：清华大学出版社，2011.7
ISBN 978-7-302-24956-6

I. ①数… II. ①张… III. ①数值计算—计算方法—程序设计②数据库—程序设计
IV. ①O241②TP311.13

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2011) 第 041189 号

责任编辑：夏兆彦

责任校对：徐俊伟

责任印制：

出版发行：清华大学出版社

地 址：北京清华大学学研大厦 A 座

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

邮 编：100084

社 总 机：010-62770175

邮 购：010-62786544

投稿与读者服务：010-62795954, jsjic@tup.tsinghua.edu.cn

质量反馈：010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

印 刷 者：

装 订 者：

经 销：全国新华书店

开 本：185×260 印 张：21.5

字 数：540 千字

版 次：2011 年 7 月第 1 版

印 次：2011 年 7 月第 1 次印刷

印 数：1~ 000

定 价： 元

现代科学计算离不开计算机，编写高效率的数值计算处理程序，可以大大提高科研效率。并且，现代科学计算基本上都是在计算机上完成的，其准确性和速度决定于三个方面：数学模型、计算机及其系统、以及计算程序。也就是说，其中的一个方面出错，都会导致整个计算失败。在这三个方面中，计算程序是数学模型与计算机之间的中介，如何编写计算程序是科学计算中最为关键的一个环节。因此，掌握数值计算处理的编程技术有助于提高科学计算的准确性或正确性。

随着计算机技术和科学技术的发展，在科学计算中，越来越显示出编程技术的重要性。目前，在科学研究领域，很多数值计算研究是数学上的，如数学物理方法、数值计算方法等，而如何在计算机上实现这些计算，则研究相对较少。同时，对很多科研人员来说，掌握这些技术知识也十分必要。为此，本书试图介绍一些与此相关的内容。

本书介绍了如何编写程序进行数值计算与处理的各种方法，着重于高端科学计算的底层实现技术或技巧。一般工具书只介绍某种软件的使用方法，而本书则着力于介绍数据处理中所使用的核心技术，不仅介绍一般理论，而且提供了大量的编程实例。只有把理论与编程实践结合在一起，才能使编程水平得到提高，为读者学习数值计算处理程序设计提供最佳方法。其中给出了很多实例程序，不仅可以帮助读者了解这些技术，而且可以直接使用，或直接用于数据处理和软件制作中。

数值计算与处理技术涉及面较广，相应地，本书介绍的内容较多。虽然如此，但通过对每章的学习，读者可以弄通并掌握这些内容的精髓，并由此发挥编写出更为高效率的数值计算处理程序。本书编写出发点是基于启发性、技术性和实用性。

本书提供了很多有用的、完整的、用于数值处理软件制作的核心代码，如 LZSS 编码压缩、无微分算法程序、等高线制图等，经过简单的包装，这些程序就可以发展成不同的数值处理软件。

本书实例所用的语言

根据科学计算的特点，本书所提供的实例是以 Fortran 和 C 语言编写。这两种语言也是最古老和最基本的，很多计算机高级语言都是从此基础上发展起来的，因此使用它们编写的程序很容易移植成其它语言程序。例如，C 语言程序很容易被移植成 C++ 程序。

本书的内容简介

可以把本书内容分成 3 个部分，分别从数值计算和数据处理方法、程序质量控制以及混合编程等方面，介绍了如何编写数值计算和数据处理程序。

◆ 数值计算与处理方法

第 1 章介绍了数计算的发展史，包括算具、计算机、计算机系统的、高级语言、数

值模式、以及计算方法的发展。并介绍了计算程序的设计对数值计算速度和精度的影响，介绍了减少计算误差和提高计算速度的一些方法，列举出了数值计算中值得注意的几个问题。

第2章介绍了数据格式和压缩处理方法。在使用多个系统的计算中，由于数据存储格式不同，同一数据文件不能被不同系统识别。为了使它们能够在不同系统中通用和节省磁盘空间，以及提高不同系统之间的数据传递，本章介绍数据格式转换和压缩的方法，给出了一个 LZSS 算法完整实例。

第3章介绍几个自我描述格式的文件。若读者使用 GrADS 程序绘图，则应该了解一下如何生存一个 GrADS 软件识别的 NetCDF 文件。

第4章介绍了几种无微分极值算法。计算机的迭代计算为无微分极值算法提供了基础，由于不需要进行微分计算，极大地方便了非线性计算。在本章中，基于现有的高级算法，作者提出了三种改进算法，即反二次插值试位法算法、改进的 Nelder-Mead 下山方向设置算法和中点反射法。测试结果表明，它们都具有较高的计算效率。

第5章介绍了高精度计算程序的设计。对于某些高精度计算，若不能在有限数位计算机上进行，则可以使用本章介绍的方法来实现。

第6章对等值线的制图做了全面的剖析。虽然等值线的作图技术在一些图形软件中得到了广泛的应用，但对很多人来说，这种技术的实现方法仍然是个“黑洞”。为了推广这种技术，开发出更多、更好的图形处理软件。本章介绍了方面的内容。

第7章和第8章介绍了在数值计算中处理字符串的方法。第7章介绍如何设计查找字符串匹配程序，有助于数据管理的编程；第8章介绍了如何编写简单的脚本解释程序，为编写灵活多样的数据处理程序提供参考。

◆ 高质量数值计算与处理程序的设计

本篇介绍了如何编写高质量的数值计算与处理程序的方法。

第9章介绍了从程序代码优化方法上对程序质量进行控制。通过对程序代码的优化，可以提高计算速度和减少程序占用内存。

第10章介绍了可复用程序的设计方法。编写可复用程序，可以提高程序或代码的可移植性，降低计算成本，提高工作效率。

◆ 数值计算与处理的混合编程

第11章介绍了 MPI 程序的编写方法，着重介绍 MPI 程序的基本思想，对主要的 MPI 函数进行了盘点，并给出了大量的实例，以说明如何使用这些函数。

第12章介绍了数值计算的混合编程技术。目前，有很多的编译器和计算软件，了解这方面的编程技术将使数值工作变得非常轻松。在这一章中，给出了大量的混合编程实例，供读者参考。

第13章介绍了 Unix/Linux 系统下的计算的辅助编程。编写这一章的主要原因是由于很多大型的科学计算都是在此种系统下完成的。若在该系统下编写一些计算辅助程序，则可以提供计算效率和工作效率。

本书的使用说明

本书的每一章介绍了数值计算某一方面技术，首先介绍此种技术的计算方法和相关

基础知识，然后给出完整实例。由于实例的代码太多，书中只列出了重点，完整的源程序代码可以在清华大学出版社网站下载（www.tup.tsinghua.edu.cn）。在每一章的最后给出了一些思考题，也是该章的重点，目的是引起读者对这些问题的注意。这些问题在该章中都可以直接或间接地找到答案。

其它说明

在编写本书过程中，得到了我的家人和朋友的大力支持和鼓励，如果没有他们的关爱和帮助，就不能写出这本书。本书的出版得到了国家自然科学基金重点项目经费的资助。在此一并表示谢意。

由于本人水平有限，错误在所难免，敬请广大读者不吝指正。

张正秋

2011-5-1 于北京

第 1 章 数值计算与计算机	1	2.3.1 环形字符串缓冲区	29
1.1 计算机发展史与数值模式	1	2.3.2 二叉查找树的应用	30
1.2 计算机软件与数值模式比较	3	2.3.3 LZSS 算法的实现方法	30
1.2.1 计算机软件和数值模式的特点	3	2.4 本章小结	35
1.2.2 计算机软件与数值模式的发展	4	思考题	35
1.3 程序设计对计算的影响	9	主要参考文献	36
1.3.1 计算方法对计算精度的影响	9	第 3 章 几种自我描述格式文件	37
1.3.2 程序设计对计算精度的影响	10	3.1 文件概述	37
1.3.3 程序设计对计算速度的影响	11	3.1.1 文件的组织结构	37
1.4 数值误差与科学预测	12	3.1.2 文件的存取方式	38
1.5 数值计算中值得注意的几个问题	13	3.1.3 文件的访问方式	38
1.6 本章小结	14	3.2 GRIB 文件及其使用工具	39
思考题	15	3.2.1 GRIB2 的格式	39
主要参考文献	15	3.2.2 GRIB2 压缩方法	41
第 2 章 数据储存格式变换和压缩	16	3.2.3 GRIB2 格式数据访问	42
2.1 计算机中数的表示和运算	16	3.3 HDF 文件及其使用工具	44
2.1.1 计算机内数的表示方法	16	3.3.1 HDF5 文件	44
2.1.2 原码、反码和补码	18	3.3.2 HDF5 工具软件	45
2.1.3 位运算方法	18	3.3.3 HDF5 库简介	46
2.1.4 Little-Endian 与 Big-Endian	20	3.3.4 使用 HDF5 库的实例	47
2.1.5 不同系统下数据格式变换	20	3.4 NetCDF 文件及其使用工具	50
2.2 几种常见的数据压缩算法	22	3.4.1 NetCDF 文件	51
2.2.1 行程编码	23	3.4.2 NetCDF 工具软件	52
2.2.2 Huffman 编码	23	3.4.3 NetCDF 库简介	52
2.2.3 算术编码	23	3.4.4 使用 NetCDF 库的实例	53
2.2.4 LZ 系列算法	24	3.5 并行 HDF 和 NetCDF 库的接口简介	57
2.2.5 整数编码	28	3.6 本章小结	58
2.3 LZSS 压缩实例	29	思考题	58
		主要参考文献	59
		第 4 章 无微分算法及其应用实例	60
		4.1 方程求解算法	60
		4.1.1 使用反拉格朗日多项式求解方程	60

目录

4.1.2	二分法算法	62	5.6	高精度乘方和开方	112
4.1.3	试位法算法	62	5.7	本章小结	113
4.1.4	雷德斯算法	63	思考题	113	
4.1.5	反二次插值试位法算法	65	主要参考文献	113	
4.2	单元函数的极值搜寻计算	66	第6章 等值线图制作技术及程序设计	115	
4.2.1	黄金分割搜寻	67	6.1	等值线标注字体和连线	115
4.2.2	斐波那契搜寻	68	6.1.1	点阵字体和矢量字体	115
4.3	多元函数的极值搜寻计算	70	6.1.2	作图连线方法	116
4.3.1	Nelder-Mead 算法	70	6.1.3	数字的矢量表示法	117
4.3.2	多元方向设置算法	78	6.1.4	小数点和负号的表示法	119
4.3.3	现代随机优化算法	82	6.2	等值线插值	119
4.4	无微分算法的应用实例	87	6.2.1	插值点的判别	119
4.5	本章小结	88	6.2.2	插值计算方法	119
思考题		89	6.2.3	插值过程和顺序	120
主要参考文献		89	6.3	等值线生成法	121
第5章 高精度计算程序设计		91	6.3.1	追踪法	121
5.1	高精度数的基本表示方法	91	6.3.2	拼图法	123
5.1.1	高精度数的储存形式	91	6.4	等值线图绘制的基本设计	124
5.1.2	高精度整数与小数	92	6.4.1	图形数据与图形显示	124
5.1.3	数字存放顺序	92	6.4.2	等值线标注	124
5.1.4	数的进制设置	92	6.4.3	等值线生成控制	125
5.1.5	数的输入与输出转换	93	6.4.4	等值线平滑	126
5.2	高精度加法和减法	94	6.4.5	等值线显示设计	128
5.3	高精度乘法的直接计算	98	6.5	等值线图填充	129
5.3.1	高精度乘法计算基础	99	6.5.1	一般的图形填充方法	129
5.3.2	高精度整数乘法	99	6.5.2	等值线图的填充方法	132
5.3.3	高精度浮点数乘法	101	6.6	等值线作图的实例	134
5.4	使用 FFT 进行高精度乘法的 计算	103	6.7	等值线作图的应用	139
5.4.1	快速傅里叶变换原理	103	6.7.1	等值线科学应用	139
5.4.2	使用 FFT 进行多项式乘法的 计算原理	106	6.7.2	等值面积和体积的计算	140
5.4.3	FFT 程序设计	107	6.7.3	等值线剖面图的绘制	140
5.4.4	使用 FFT 进行长整数乘法 计算的实例	109	6.8	本章小结	140
5.5	高精度除法	110	思考题	141	
5.5.1	直接进行高精度除法 计算	110	主要参考文献	141	
5.5.2	高精度除法快速计算	111	第7章 字符串表达式匹配的程序设计	143	
			7.1	字符及转义	143
			7.1.1	普通字符及其转义	143
			7.1.2	特殊字符及其转义	144

7.2 正则表达式·····145	8.4.2 递归式解释的用户 自定义函数·····176
7.2.1 单元符·····145	8.4.3 递归式解释的循环控制·····177
7.2.2 定位符·····146	8.4.4 递归式解释的条件控制·····179
7.2.3 限定符·····146	8.5 利用堆栈原理设计解释程序·····180
7.3 通配符·····147	8.6 一个对脚本文件解释的实例·····185
7.3.1 常见的通配符·····147	8.7 本章小结·····187
7.3.2 通配符与正则表达式的 区别·····148	思考题·····188
7.4 字符串匹配过程中的问题·····148	主要参考文献·····188
7.5 字符串匹配程序的设计方法·····149	第9章 计算程序代码的优化设计 ·····189
7.6 正则表达式匹配的编程实例·····150	9.1 程序优化概述·····189
7.6.1 正则表达式字符串的 解释·····151	9.1.1 程序优化层次·····189
7.6.2 一个简单的正则表达式 匹配程序·····154	9.1.2 程序优化分类·····190
7.7 通配符匹配的编程实例·····156	9.2 程序可维护性的优化设计·····190
7.8 本章小结·····159	9.3 程序代码优化的基本方法·····191
思考题·····160	9.3.1 删除冗余代码·····191
主要参考文献·····160	9.3.2 提出公用子表达式·····192
第8章 简单脚本运行程序的设计 ·····161	9.3.3 简化运算步骤·····193
8.1 解释程序的工作原理·····161	9.3.4 减小计算强度·····194
8.1.1 解释程序的运行过程·····161	9.4 程序代码结构的优化·····196
8.1.2 解释程序工作环境的 设计·····162	9.4.1 变量的优化·····197
8.2 解释程序设计的技术基础·····163	9.4.2 表达式的优化·····198
8.2.1 脚本语言的关键字·····164	9.4.3 一般函数结构的优化·····198
8.2.2 控制语句分类·····164	9.4.4 减小程序复杂度·····200
8.2.3 对脚本解释的方法·····165	9.4.5 降低数组维数·····201
8.2.4 对单语句的规定·····166	9.5 程序控制结构的优化·····201
8.2.5 对程序块的处理方法·····167	9.5.1 顺序结构的优化·····201
8.3 解释程序运行过程的初步设计·····169	9.5.2 选择结构的优化·····202
8.3.1 脚本的装载·····169	9.5.3 循环结构的优化·····208
8.3.2 脚本关键字的确定和关键字 查寻表·····170	9.6 内存使用的优化·····213
8.3.3 脚本程序的主函数·····171	9.7 与编译器或处理器相关的优化·····215
8.3.4 脚本打印语句的解释方法·····172	9.7.1 使用修饰符·····215
8.3.5 脚本函数的解释方法·····173	9.7.2 对字节对齐优化·····217
8.4 利用递归原理设计解释程序·····175	9.7.3 数组下标排列及其优化·····218
8.4.1 递归式解释的主控函数·····175	9.7.4 使用2的乘方数·····221
	9.7.5 合理分配寄存器·····221
	9.8 递归函数的优化·····222
	9.9 本章小结·····225
	思考题·····226

主要参考文献	226	11.1.5 并行计算的工作原理	258
第 10 章 可复用计算程序的设计	227	11.2 MPI 并行程序设计入门	259
10.1 可复用程序的设计概述	227	11.3 MPI 的基本通信操作	261
10.1.1 复用程序与设计可复用程序	227	11.3.1 点对点通信 (P2P)	261
10.1.2 影响程序可复用性的因素	228	11.3.2 集合通信	262
10.1.3 通用程序与可复用程序	228	11.3.3 通信阻塞与同步	267
10.1.4 可复用程序的“手性”特点	229	11.4 MPI 进程组和通信子	268
10.2 “手掌型”可复用程序的设计	230	11.4.1 进程组管理	268
10.2.1 程序的封装	230	11.4.2 通信集管理	270
10.2.2 使用模板	231	11.4.3 通信分组应用实例	271
10.2.3 使用共享环境	234	11.5 进程拓扑结构	272
10.2.4 使用泛型	236	11.5.1 笛卡儿拓扑结构	272
10.3 “掌指关节型”可复用程序的设计	237	11.5.2 图拓扑结构	276
10.3.1 代码替换	237	11.5.3 进程拓扑应用实例	277
10.3.2 变量替换	240	11.6 派生数据类型	279
10.3.3 函数调用接口覆盖	241	11.6.1 数据类型查询函数	279
10.3.4 使用类型转换共享函数调用接口	245	11.6.2 新类型的构建	280
10.3.5 共享 I/O 接口	247	11.6.3 提交和释放	282
10.4 “手指型”可复用程序的设计	249	11.6.4 派生数据类型应用实例	282
10.4.1 “手指型”与“手掌型”可复用程序设计的比较	249	11.7 本章小结	284
10.4.2 使用相对性对象	249	思考题	284
10.4.3 使用情景函数	250	主要参考文献	285
10.5 C++程序的复用机制	250	第 12 章 数值计算的混合编程	286
10.6 本章小结	252	12.1 混合编程的实现方法	286
思考题	253	12.1.1 结合式的连接方法	286
主要参考文献	253	12.1.2 调用式连接的方法	287
第 11 章 并行计算 MPI 程序设计基础	254	12.1.3 中介式连接的方法	288
11.1 并行程序的设计基础	254	12.2 Fortran 与 C/C++ 语言的混合编程	289
11.1.1 线程与进程	254	12.2.1 Fortran 与 C/C++ 比较	290
11.1.2 并行程序设计模型	255	12.2.2 Fortran 与 C/C++ 混合编程的简单实例	291
11.1.3 并行计算的通信	257	12.2.3 Fortran 与 C/C++ 程序之间的参数传递方法	296
11.1.4 并行程序的工作任务分解	257	12.2.4 通过库文件进行 Fortran 与 C/C++ 的混合编程	300
		12.3 低版本与高版本语言的混合编程	303
		12.3.1 C 与 C++ 间的混合编程	303

12.3.2 F77 与 F90/95 间的 混合编程	305	13.1.1 system()函数	313
12.4 脚本与计算程序的混合编程	306	13.1.2 文件和目录管理函数	314
12.4.1 计算作业自动提交脚本的 设计	306	13.1.3 文件的遍历查找	319
12.4.2 绘图程序与计算程序的 混合编程	308	13.2 编写一个在 Xnix 系统下运行的 服务程序	320
12.5 本章小结	311	13.3 在 Xnix 系统下建立回收站	326
思考题	312	13.4 SSH 自动登录	328
主要参考文献	312	13.4.1 公钥与私钥的设置方法	328
第 13 章 UNIX/Linux 系统下计算的 辅助编程	313	13.4.2 使用 expect 的方法	330
13.1 文件和目录管理操作	313	13.5 本章小结	330
		思考题	331
		主要参考文献	331

第 1 章 数值计算与计算机

现代科学计算离不开计算机，计算机科学技术的发展为数值计算技术的发展提供了基础。计算机的计算是通过计算机软件或程序来实现的，其硬件和软件的工作状况影响计算精度和速度。在计算机硬件、操作系统和计算方法一定的情况下，合理地设计计算程序是提高计算精度和速度的主要途径。

要编写出一种高效率的计算程序，需要具备很多知识，既需要掌握一定的编程技术，也需要对计算机的特点有所认识。同时，还需要了解计算机操作系统以及编程语言的发展史。只有这样，才能知道如何设计最先进的计算程序。

1.1 计算机发展史与数值模式

计算工具是在人类生活的实际需要中发展起来的，现代计算机的诞生是人类文明的必然产物，它的诞生使数值模式的发展和数值天气预报成为可能。

1. 计算工具发展史

计算工具简称算具，是帮助人们计算的工具，它的发展是与计算技术发展相联系的。随着生产的发展和社会的进步，算具经历了从简单到复杂、从低级到高级的发展过程，其历史可追溯至远古时期。

人的手指是一种天然的计算工具，也是最古老的计算工具之一。远古时期，人们借助手指数数。可是，人类手指只有 10 个，不能进行更复杂的计算，于是人们使用小石头、贝壳、木棍、草绳等作为运算工具。

算筹、算盘是人类最早的手动计算工具。我国春秋时期出现的算筹，是世界上最古老的算具，例如，春秋战国时期的《老子》中记述了“善数者不用筹策”。根据史书的记载和考古材料，我国古代的算筹实际上是一根根同样长短和粗细的小棍子，多用竹子制成，也有用木头、象牙、金属等材料制成的，因此，在英语中，“算筹”被翻译成“Counting rod”（计数棒）。古代算筹不仅是正、负整数与分数的四则运算和开方的运算工具，而且还包含着各种特定的演算。算筹促进了中国古代数学的早期发达与持续发展。

在算筹之后，随着社会的进步，我国劳动人民又发明了算盘作为运算工具。早在公元 15 世纪，算盘已经在我国广泛使用，后来流传到日本、朝鲜等国。算盘已经基本具备了现代计算器的主要结构特征。

在此之后，1642 年法国人帕斯卡设计出了机械式加法机，这是世界上第一台机械式数字计算机。为了制作这台机器，帕斯卡花了 3 年时间。这台加法机是利用齿轮传动原理，通过手工操作来实现加、减运算的。帕斯卡的加法机当时在法国引起了轰动。

世界上第一台能够自动运算的计算器，是 1822 年由英国数学家巴贝其发明的，是以蒸汽为动力代替人类进行具体运算。1946 年发生了人类历史上一件划时代的大事——世

界上第一台电子数字计算机 ENIAC 在美国诞生。

2. 计算机发展历程

电子计算机在短短的几十年里经过了电子管、晶体管、集成电路（IC）和超大规模集成电路（VLSI）等阶段的发展，使计算机的体积越来越小、功能越来越强、价格越来越低、应用越来越广泛，目前正朝着智能化计算机方向发展。

第一代计算机（约从 1946 年到 1958 年），体积较大，运算速度较低，存储容量不大，而且价格昂贵，使用也不方便。为了解决一个问题，所编制的程序的复杂程度难以表述。这一代计算机主要用于科学计算，只在重要部门或科学研究部门使用。

第二代计算机（约从 1958 年到 1965 年），全部采用晶体管作为电子器件，与第一代计算机相比，其运算速度提高了近百倍，而体积只有原来的几十分之一。在软件方面，开始使用计算机算法语言。这一代计算机不仅用于科学计算，还用于数据和事务处理以及进行工业控制。

第三代计算机（约从 1965 年到 1970 年），主要特征是以中、小规模集成电路为电子器件，并且出现操作系统，使计算机的功能越来越强，应用范围越来越广。它们不仅用于科学计算，还用于文字处理、企业管理、自动控制等领域，出现了计算机技术与通信技术相结合的信息管理系统，可用于生产管理、交通管理、情报检索等领域。

第四代计算机（约从 1970 年到 1981 年）采用大规模集成电路（LSI）和超大规模集成电路（VLSI）为主要电子器件制成的计算机。例如，80386 微处理器，在面积约为 $10\text{mm} \times 10\text{mm}$ 的单个芯片上，可以集成大约 32 万个晶体管。

第五代计算机（约从 1981 年到现在）把信息采集、存储、处理、通信和人工智能结合在一起具有形式推理、联想、学习和解释能力。它的系统结构将突破传统的冯·诺依曼机器的概念，能够实现高度的并行处理。

有趣的是，算盘和计算机的发明都与中国古代的《易经》相关。有人研究发现，算盘的结构与中国《易经》中的河图相似。计算机的二进制也是与中国《易经》八卦结构排列相对应的，八卦图其实是一种八进制图形。

3. 数值模式与计算机

数值模式是数值求解基于有限认识的基础上建立的描述某种物理、化学等变化规律的近似理论模型，它是一种离散化的数值模型，是数值模拟和预报的一种工具。可以说，没有电子计算机，也就不会有数值模式的发展。

数值模式有不同的种类，如大气模式、海洋模式、生物模式等。按尺度划分，有小尺度、中尺度和大尺度预报模式等；按时间划分，有短期、中期和长期预报模式等；按其离散化和求解方法，有网格点模式、谱模式等。

数值模拟大气运动可以帮助进行天气预报，这种思想可追溯到 20 世纪 20 年代英国数学家 Richardson 的工作。Richardson(1922)论述了数值预报的原理和可能性，并且应用完全的原始方程组，并对欧洲地区的地面气压场进行了 6 个小时的预报，但结果很不理想。这次失败曾使人们一度对数值天气预报的可能性产生怀疑。直到第二次世界大战结束之后，由于电子计算机的出现，加上气象观测网以及高空观测的发展，数值模式和天

气预报又引起了人们的注意。

1950 年, Charney 等人用准地转正压模式, 在电子计算机上首次成功地对北美地区 500 百帕高度的气压场, 做了 24 小时的预报。这一结果的公布被认为是数值模式和数值预报发展的重要里程碑。而当时所用的计算工具是一台可编程式的电子数字积分计算机。

借助计算机, 从 Charney 等的成功工作开始, 数值模式和数值预报步入了繁荣发展的时期。数值模式的发展与计算机的发展紧密相联, 计算机由传统的单核 CPU 的处理器发展为多核 CPU 的处理器, 而数值模式也由单 CPU 的串行计算, 发展到多 CPU 的并行计算, 这大大提高了模式的计算速度。随着计算机发展, 数值模式的计算方式、程序结构也将不断得到改进, 这将使数值模式的模拟能力和预报能力不断得到提高。

1.2 计算机软件与数值模式比较

数值模式是一种特殊的计算机软件, 它与一般的计算机软件有很多共同之处, 但它们之间又存在一定的差别。

1.2.1 计算机软件和数值模式的特点

计算机软件是指计算机系统上的程序及其文档。计算机程序简称为程序, 是指一组指示计算机每一步动作的指令, 通常用某种程序设计语言编写, 运行于某种目标体系结构上。文档是为了便于了解程序所需的阐明性的技术资料。程序必须装入机器内部才能工作, 文档不一定保存在计算机里。

在一定意义上, 数值模式可以称为一种计算机软件, 它与一般软件程序一样, 具有以下特性。

1. 程序的静态与动态属性

(1) 静态: 程序就是用计算机语言描述某一问题的解决步骤, 其表示是静态的。

(2) 动态: 程序代码通过编译或解释成计算机指令代码, 称为可执行程序。它的动态执行就是人们常说的“进程”。

2. 程序是由程序语言抽象的符号表达

计算机的指令代码是以二进制表示的机器码。在高级设计语言以八进制、十进制、十六进制表示。因为语言越高级, 越好使用, 翻译程序的任务越重, 所以程序设计语言对软件开发起很大作用。

3. 程序是对数据施行算法的过程

程序中包括一定的算法和数据。程序执行后, 对数据进行了加工或提供了一组动作的计算办法, 即算法。它使数据由初始态变为终止态, 并且, 同样的数据改变可使用不同的算法实现。

程序的数据一般用于刻画事物的属性和状态。合理设计数据结构是提高程序质量的

先决条件。

4. 程序具有分层嵌套的结构

程序的结构是分层嵌套的，例如，主程序 P 调用子程序 A，而 A 又调用子程序 B，环环相扣，而子程序都具有一定的通用性。若不采用此种结构，虽然可以实现同样的程序功能，但将增加计算程序代码长度。

数值模式与一般的商业软件有一定的不同。一般商业软件具有很强的人机对话界面操作，适合于广大的人群使用，趋向于简单化操作发展；而数值模式的重点在于计算，其模式本身不仅具有一般软件的设计结构，而且具有物理、化学等规律的描述以及一定的计算方法，只适合专业技术人员来操作。

数值模式与一般的商业软件最大的不同在于，数值模式运行结果的正确性有一定的不可知性，而一般的商业软件运行结果的正确性可以立即得到证实。数值模式计算结果的正确与否只有在事件发生后才能确定，有时实测资料也无法获得，正因为如此，有些数值模式的计算结果虽然看上去似乎“合理”，但实际上可能存在一些代码描述错误。因此说，数值模式的发展比一般商业软件的开发难度更大，要求更高。

然而，在编写数值模式时，也需要像编写计算机软件一样，只有掌握一定的规则、技巧，才能提高程序的性能和便于以后的维护。

1.2.2 计算机软件与数值模式的发展

计算机软件的发展可以看作数值模式发展的晴雨表。了解了软件的发展，在一定程度上有助于发展数值模式。数值模式与商业软件的发展具有一定的相似性。

1. 计算机软件发展

计算机软件可以分为系统软件（操作系统、数据库等）、支撑软件（高级语言编译器、程序库、CASE 工具等）和应用软件。计算机软件随着计算机硬件的发展而发展。

计算机软件发展的历史不长，世界上第一台电子数字式计算机 ENIAC 于 1946 年 2 月在美国宾夕法尼亚大学正式投入运行，自那时起，计算机软件业才开始萌芽。计算机软件的发展具体表现在计算机系统、编程语言、程序结构和计算方式等方面的发展，它们之间又是相互联系的。

(1) 计算机操作系统的发展

首先，所谓的操作系统是指计算机系统中的一个系统软件，它是管理和控制计算机系统硬件和软件资源、合理地组织计算机工作流程以及方便用户使用的程序集合。

操作系统是随着计算机硬件的发展和人们对于计算机技术要求的提高而逐步发展形成的。早期的计算机没有操作系统，人们是通过各种操作按钮来控制计算机的。后来出现了汇编语言，操作人员通过有孔的纸带将程序输入电脑进行编译和运行。由于程序难免有误，机器通常会中途崩溃。这给用户带来极大的不便，并且不利于设备和程序的共用。为了解决这些问题，于是出现了操作系统。

计算机操作系统的发展经历了两个阶段。第一个阶段为单用户、单任务的操作系统，

继 CP/M 操作系统之后, 还出现了 C-DOS、M-DOS、TRS-DOS、S-DOS 和 MS-DOS 等磁盘操作系统。第二个阶段为多用户多道作业和分时系统。其典型代表有 UNIX、Xenix、OS/2 以及 Windows 操作系统。分时的多用户、多任务、树形结构的文件系统以及重定向和管道是 UNIX 的三大特点。

其中, UNIX 系统是 1969 年问世的, 最初是在中小型计算机上运用。最早移植到 80286 微机上的 UNIX 系统, 称为 Xenix。Xenix 系统的特点是短小精悍, 系统开销小, 运行速度快。经过多年的发展, Xenix 已成为十分成熟的系统。

MS-DOS 是在 IBM-PC 及其兼容机上运行的操作系统, 它起源于 SCP86-DOS, 是 1980 年基于 8086 微处理器而设计的单用户操作系统。后来, 微软公司获得了该操作系统的专利权, 配备在 IBM-PC 上, 并命名为 PC-DOS。

Windows 是微软公司在 1985 年 11 月发布的第一代窗口式多任务系统, 它使 PC 开始进入了所谓的图形用户界面时代。

Linux 是目前全球最大的一个自由软件, 它是一个可与 UNIX 和 Windows 相媲美的操作系统, 具有完备的网络功能。Linux 最初由芬兰人 Linus Torvalds 开发, 其源程序在 Internet 上公开发布, 由此, 全球电脑爱好者可以根据自己的意愿参与 Linux 某一方面功能的完善或开发。因此, Linux 将发展成为一个全球最稳定的、最有应用前景的操作系统之一。

总之, 计算操作系统的出现是人们对计算机技术要求的必然结果, 它的发展将会使计算速度不断得到提高, 并且使人们更加方便地进行数据共享、程序代码和设备公用。同时, 也将给数值模式的计算提供更良好的工作环境。

(2) 编程语言的发展

早期程序员们是使用机器语言来进行编程运算的, 并直接对以数字表示的机器代码进行操作。机器语言是用由“0”和“1”组成的二进制代码表示的、计算机能直接识别和执行的一种机器指令的集合。

使用机器语言是十分痛苦的, 特别是在程序有错需要修改时, 更是如此。而且, 由于每台计算机的指令系统往往各不相同, 所以, 在一台计算机上执行的程序, 要想在另一台计算机上执行, 必须重新编写程序。为了减轻使用机器语言编程的痛苦和便于阅读, 人们进行了一种有益的改进, 把机器代码用英文字符串来表示, 于是出现了汇编语言。

从最初与计算机交流的痛苦经历中, 人们意识到, 应该设计一种语言, 这种语言接近于数学语言或人的自然语言, 同时又不依赖于计算机硬件, 编出的程序能在所有机器上通用。经过努力, IBM 公司的 John Backus 领导的研究小组于 1954 年首次推出了第一代 Fortran (Formula Translator) 语言。Fortran 语言以它的简洁、高效性, 成为此后几十年科学和工程计算的主流语言, 除了 Fortran 以外, 还有 ALGOL60 等科学和工程计算语言。随着计算机应用的深入, 产生了使用计算机来进行商业管理的需求, 于是 COBOL 这类商业和行政管理语言出现了, 并一直流行至今。

早期的这些编程语言都是面向计算机专业人员的, 为了普及编程语言, 使计算机更为大众化, 美国的达尔摩斯学院的 Thomas Kurtz 和 John Kemeny 于 1964 年编制了一种入门级的 Basic 语言, 这种语言简单易学、功能较全, 比较适合初学者, 广泛用于中小型、微型计算机中。

20 世纪 60 年代初, 结构化程序设计的思想就已产生, 1960 年第一种结构化程序设计语言 ALGOL 被推出。在这种思想的指导下, 20 世纪 70 年代初, 人们又推出了两种典型的结构化程序设计语言, 一种是 PASCAL 语言, 另一种是 C 语言。PASCAL 语言, 以 17 世纪法国数学家兼哲学家 Blaise Pascal 的名字命名, 1970 年问世, 是由 ALGOL 60 发展而来的结构化编程语言, 能够利用组合块结构及多种数据类型。这种语言直观易懂, 可用于科学计算, 也可用于编写系统程序, 它是由瑞士苏黎世工学院的教授 Niklano Wirth 编制的。C 语言, 最早由贝尔实验室的 Dennis Ritchie 开发, 于 1972 年正式发表。C 语言具有高级语言和汇编语言的双重特色, 书写简便灵活, 有助于缩短程序的长度, 提高工效, 便于移植, 常用于编写系统软件, 主要是为专业程序员设计的。

20 世纪 80 年代, 在软件设计思想上, 又产生了一次革命, 其成果就是面向对象的程序设计。在众多的面向对象语言当中, 最为突出的就是 C++ 语言。1980 年, 美国贝尔实验室的 Bjarne Stroustrup 博士及其同事开始对 C 语言进行改进和扩充, 最初被称为“带类的 C”, 1983 年才取名为 C++。这种语言继承了 C 语言的所有优点, 如简洁性和高效性, 同时引入了面向对象的思想, 如类、封装、继承、多态等。像任何人类的自然语言一样, C++ 语言提供一种表达思想和概念的方法, 当问题变得大而复杂时, 使用 C++ 语言来解决问题将会比使用其他语言更加容易、更加灵活。在最早的面向对象语言中, 除了 C++ 以外, 还有一种纯面向对象语言也十分流行, 如 Smalltalk 语言等。

20 世纪 90 年代, 计算机图像技术和网络技术发展占主导地位, 一些相关的编程语言被发展起来。1991 年, 美国微软公司推出了 Visual Basic (简称 VB)。Visual 意即可视的、可见的, 是指在开发时不需要编写大量代码去描述界面元素的外观和位置, 只需把预先建立好的对象拖放到屏幕上的相应位置。翌年, 即 1992 年, 美国微软公司又推出了 Visual VC++ 语言。在这段时期, 出现的另一种编程语言是 Java, 它诞生于 1991 年, 最初被称为 OAK 语言, 是 SUN 公司为一些消费性电子产品而设计的一个通用环境。在网络出现之前, OAK 可以说是默默无闻, 直到网络的出现, 才被重视。1995 年, 美国 Sun Microsystems 公司正式向 IT 业界推出了 Java 语言, 该语言具有安全、跨平台、面向对象、简单、适用于网络等显著特点, 当时以 Web 为主要形式的互联网正在迅猛发展, Java 的出现迅速引起所有程序员和软件公司的极大关注, 目前 Java 已成为动态网页和网络数据库访问程序的主要编写工具。

2000 年后, 编程语言继续发展, 又涌现出很多的新语言, 如 VB.NET、C#、J# 等。这些语言集合了许多其他语言的优点, 并增加了新的功能。例如, 2000 年随 Microsoft.NET Framework 一起发布的 Microsoft C# 集合了 C 以及 C++, 甚至 Java 的许多优点; 与 C++ 相比较, C# 语言中的 class 类安全性更强。

总之, 编程语言的发展经历了从机器语言、汇编语言到高级语言的历程。编程语言的发展史也是人们不断追求更高的独立于硬件的抽象化、模块化和封装化的历史。

(3) 程序结构设计的发展

程序结构设计是伴随编程语言的变化而发展的。程序结构设计经历了无序化、结构化程序设计、面向对象程序设计和组件模型等发展过程。

结构化程序设计的思想是在 20 世纪 60 年代末、70 年代初为解决“软件危机”而形成的。在以往的编程过程中, 人们经常使用转移语句 (GOTO), 虽然它可以使程序的控