



信息与计算机科学丛书 — 39

科学计算概论

陈传淼 著

024

20

2007

信息与计算科学丛书 39

科学计算概论

陈传淼 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书以统一而较简明的方式介绍现代科学计算的基本方法及新进展,主题围绕用有限元法求解各种偏微分方程. 特别强调分块逼近和正交投影思想的重要性以及对多维问题的张量积研究方法. 全书共 12 章和 1 个附录,主要内容分 3 部分. 第 1~5 章是本书的基本内容. 首先回顾科学计算的发展与现状,然后从变分问题入手,引进有限元法,以及线性和非线性方程求解. 第 6~9 章是继续深入的材料,介绍有限元的收敛及超收敛性分析、常微分方程初值问题差分法与有限元法、Hamilton 系统的辛算法,简介外推法和真实误差估计. 第 10~11 章是数值求解抛物与双曲问题以及非线性问题,是较难的部分. 第 12 章简要介绍当今困难的大课题——流体力学方程组. 附录简要介绍 Matlab,为初学者掌握数值计算提供捷径. 具有大学理工科数学水平即可读懂本书的基本内容,即第 1~5 章及第 7~9 章的前半部分. 而其他部分需要具备数学物理方程及泛函分析的知识.

本书可作为理工科相关专业的研究生教材或参考书,基本内容也可作为数学高年级学生的选修课之用,对涉及科学与工程设计的广大科技工作者也非常有益.

图书在版编目(CIP)数据

科学计算概论/陈传森著. —北京:科学出版社,2007

(信息与计算科学丛书; 39)

ISBN 978-7-03-018609-6

I. 科… II. 陈… III. 科学计算 IV. O24

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007) 第 022239 号

责任编辑: 陈玉琢 莫单玉 / 责任校对: 邹慧卿

责任印制: 赵德静 / 封面设计: 王 浩

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

陈海印刷有限责任公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2007 年 3 月第 一 版 开本: B5 (720×1000)

2007 年 3 月第一次印刷 印张: 19

印数: 1—4 000

字数: 373 000

定价: 48.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换〈环伟〉)

《信息与计算科学丛书》序

20 世纪 70 年代末, 由已故著名数学家冯康先生任主编、科学出版社出版了一套《计算方法丛书》, 至今已逾 30 多册. 这套丛书以介绍计算数学的前沿方向和科研成果为主旨, 学术水平高、社会影响大, 对计算数学的发展、学术交流及人才培养起到了重要的作用.

1998 年教育部进行学科调整, 将计算数学及其应用软件、信息科学、运筹控制等专业合并, 定名为“信息与计算科学专业”. 为适应新形势下学科发展的需要, 科学出版社将《计算方法丛书》更名为《信息与计算科学丛书》, 组建了新的编委会, 并于 2004 年 9 月在北京召开了第一次会议, 讨论并确定了丛书的宗旨、定位及方向等问题.

新的《信息与计算科学丛书》的宗旨是面向高等学校信息与计算科学专业的高年级学生、研究生以及从事这一行业的科技工作者, 针对当前的学科前沿、介绍国内外优秀的科研成果. 强调科学性、系统性及学科交叉性, 体现新的研究方向. 内容力求深入浅出, 简明扼要.

原《计算方法丛书》的编委和编辑人员以及多位数学家曾为丛书的出版做了大量工作, 在学术界赢得了很好的声誉, 在此表示衷心的感谢. 我们诚挚地希望大家一如既往地关心和支持新丛书的出版, 以期为信息与计算科学在新世纪的发展起到积极的推动作用.

石钟慈

2005 年 7 月

前 言

本书力图用较简明通俗的方式介绍现代科学计算的某些基本方法及最新进展. 有理工科大学数学水平, 即熟悉微积分、线性代数与常微分方程的读者, 就可读懂本书第 1~5 章的基本内容和第 7~9 章前半部分内容. 而其他章节的内容则要求数学物理方程和泛函分析的基本知识. 本书可作为大学理工科相关专业研究生教材或参考书, 也可为数学高年级学生选修课之用, 对涉及科学与工程设计的广大科技工作者也是非常有益的. 本书前半部分曾作为信息与计算科学专业高年级学生作选修课讲授过, 还为某些高校的青年教师讲过, 后半部为湖南师范大学计算数学硕士生与博士生专题讲授, 现经较大的扩充与修改后出版.

现代科学计算已是一个庞大的体系, 它包含微分方程数值解 (差分法、有限元、谱方法等), 函数逼近 (C^k 插值、样条、正交逼近、小波等), 数值代数 (Cholesky 分解、迭代法、共轭梯度法等) 及最优化等方向, 但是大规模科学计算与工程设计计算的主线仍是围绕着微分方程数值求解, 因为大自然现象, 如流体力学、弹性力学、热传导、半导体、电磁波、现代光学等, 主要是用各种复杂的偏微分方程来描述. 在工程设计中, 如飞机、水坝、高层建筑、核反应、石油勘探、天气预报等, 多是高维问题, 规模之庞大, 计算之复杂, 即使有快速计算机也令人感到棘手. 而科学技术的发展却提出了越来越高的要求, 人们一直面临着大规模、高效率、高精度、真实地估计误差和自适应网格等难题困扰. 这些难题都在深入研究, 并提出了许多有效的解法. 因此让更多的科技工作者掌握现代科学计算方法, 让更多的理工科学生研究生了解现代科学计算的概况是很有益的.

应当指出, 科学计算与实验、理论已并列成为现代科学研究的三种方法. 科学计算不仅是一种数值计算的手段, 而且也是一种研究方法. 第 1 章 §6 作了简单阐述, 详见石钟慈院士专著《第三种科学方法——计算机时代的科学计算》([98], 2000 年). 本书第 11 章 §4~6 对非线性问题多解结构与 3 维激光孤波, 理论上研究很困难, 是作者近年用科学计算研究的一种探索.

清华大学蔡大用教授和白峰杉教授写了一本好书《现代科学计算》(科学出版社, 2000). 前言中提到撰写该书的若干原则: ① 突出特色, 力求内容有时代的气息; ② 增加可读性, 淡化数学推理, 突出科学计算, 利用归纳的方法研究科学计算; ③ 强调用数学软件 Matlab 解决科学计算问题. 我们非常赞成. 该书适合研究生水平, 较侧重矩阵代数. 作者希望本书读者面更宽些, 适合于科技工作者和理工科高年级学生及研究生, 内容更广些, 但重点围绕在微分方程数值求解这条主线上.

由于作者本人所熟悉领域的限制, 本书选取了从变分方法、有限元、线性与非线性方程组求解, 到求解初值与初边值问题及相应的非线性问题, 最终用数学软件

Matlab 实现这条主线. 现代科学计算领域已如此庞大, 我们尝试如何用一种统一而简明的框架阐述它. 本书撰写有两个特点: ① 注意到科学计算的发展有着两个越来越突出的特征或趋势: 即从过去的整体逼近到现今的分块逼近, 从以往的逐点逼近到今日的 (正交) 投影思想. 目前较好的方法, 如变分法、有限元、共轭梯度法、样条与小波等, 都与正交投影有关. 本书首次对时间也用有限元离散, 因此与研究时空变量是同一框架. 注意这些特征, 对进一步学习与研究都是非常重要的. ② 在研究方法上, 我们总是先研究简单的 1 维问题, 然后尽量用张量积的思想推广到多维. 如矩形元的研究看作是 1 维元的张量积, 抛物和双曲问题的全离散看作是将时间与空间变量离散的张量积等. 这样有助于理解, 并大大地简化论证. 有限元方法的思想是很美的, 我们希望同样能用很简练而优美的推理阐述它, 才能真正体现它整体的数学美.

应当提到, 中国科学院计算数学所张林波研究员将美国 Latex 英文软件 (它的绘图功能较差) 改造成中英文的 CTEX 软件 (可在网上 www.ctex.org 下载免费使用), 受到国内外学子称赞. 很重要的是, 用 Matlab 计算结果的图形, 改用 eps 文件格式附在 ctex 论文文件中, 可作为论文的插图调用, 非常方便. 这些基础性奉献工作, 对推动我国科技的发展起着重要的作用. 本书就是在这种工作环境下完成的.

为完成本书, 作者应特别感谢国家重点基础研究发展计划项目 (973) “大规模科学计算研究” 项目组同行朋友, 5 年合作共事使我加深了对科学计算的理解以及对他们的奉献的了解, 使我下决心撰写这本《科学计算概论》. 在书中多体现一点新时代的气息, 多反映一点我国老一辈和年轻一辈学者所做的创造工作. 作者要衷心感谢石钟慈院士、林群院士和钟万勰院士的支持与鼓励. 还要感谢项目组的许多同行的帮助, 他们有秦孟兆教授、张平文教授、陈志明教授、黄云清教授、白中治教授、周爱辉教授、严宁宁教授、唐贻发教授和李若博士等. 作者还感谢湖南师范大学谢资清教授和我们的学生们多年合作研究, 使本书能增加第 7 章 §3~4, 第 8 章 §4, 第 10 章 §4, 第 11 章 §5~6 等新内容, 并为本书增色不少.

最后作者对中华人民共和国科学技术部国家重点基础研究计划的大力资助, 国家自然科学基金委员会及湖南省教育厅的长期支持, 湖南省教育厅及湖南师范大学将本书列入研究生精品教材建设资助, 表示衷心的感谢.

由于篇幅限制与作者研究的局限, 许多相关的重要内容, 如并行算法、矩阵分析、逼近理论以及目前热门的新材料、超导和分子计算等, 都只好舍弃. 时间仓促, 撰写疏漏之处在所难免, 祈望指正.

陈传森

2006 年 9 月于长沙岳麓山

目 录

《信息与计算科学丛书》序

前言

第 1 章 从经典数学到科学计算	1
§ 1.1 解非线性代数方程	1
§ 1.2 解线性代数方程组	4
§ 1.3 函数逼近	5
§ 1.4 积分问题	10
§ 1.5 微分方程求解	12
§ 1.6 科学计算的意义与作用	15
第 2 章 变分方法	18
§ 2.1 最速降线与 Euler 方程	18
§ 2.2 极值的充分条件	23
§ 2.3 Sobolev 函数空间 $W^{k,p}(\Omega)$, $H^k(\Omega)$ 简介	25
§ 2.4 二次泛函的极值问题	31
§ 2.5 极小化序列与 Ritz 方法	34
第 3 章 解变分问题的有限元法	39
§ 3.1 有限元法及其高精度	39
§ 3.2 矩形元	47
§ 3.3 三角形元	52
§ 3.4 3 维单元	57
§ 3.5 坐标变换和等参元	61
§ 3.6 奇异解和局部加密网格	64
§ 3.7 后验误差估计和自适应方法	69
第 4 章 大型线性方程组求解	74
§ 4.1 Gauss 消元和 Cholesky 分解	74
§ 4.2 3 种古典迭代法	77
§ 4.3 对称正定组的共轭梯度法(CGM)	83

§ 4.4 多网格法和瀑布式多网格法	88
§ 4.5 预处理(Precondition)	97
第 5 章 非线性方程组求解	100
§ 5.1 Newton 法及其变体	100
§ 5.2 延拓法和多启动延拓法	103
§ 5.3 数例及解的吸引域	106
§ 5.4 搜索所有解的长方体算法	110
第 6 章 有限元收敛与超收敛分析	115
§ 6.1 插值误差估计	115
§ 6.2 椭圆边值问题解的正则性	120
§ 6.3 有限元误差与对偶论证	122
§ 6.4 超收敛与单元正交分析法	127
§ 6.5 有限元超收敛分析	130
§ 6.6 使用超收敛的五大法则	135
第 7 章 常微分方程初值问题数值解	138
§ 7.1 经典差分格式综述	138
§ 7.2 精细积分法	146
§ 7.3 连续有限元法	147
§ 7.4 间断有限元法	152
§ 7.5 二阶常微分方程的有限元法	157
第 8 章 Hamilton 系统的辛算法及守恒性	160
§ 8.1 Hamilton 系统的辛结构和守恒性	160
§ 8.2 辛几何的某些性质	164
§ 8.3 Hamilton 系统的辛差分格式	166
§ 8.4 有限元法保能量与高精度保辛	168
第 9 章 外推法和真实误差估计	178
§ 9.1 外推及其两个条件	178
§ 9.2 多维数值求积	180
§ 9.3 常微分方程初值问题	183
§ 9.4 两点边值问题	185
§ 9.5 椭圆边值问题	188

第 10 章 线性热传和波动问题的数值解	191
§ 10.1 热传问题计算与方向交替法.....	191
§ 10.2 波动问题计算.....	198
§ 10.3 一阶对称双曲组的可解性.....	203
§ 10.4 一阶对称双曲组的间断有限元法.....	207
§ 10.5 积分微分方程综述.....	214
第 11 章 非线性问题计算研究	217
§ 11.1 非线性椭圆问题.....	217
§ 11.2 非线性热传问题.....	223
§ 11.3 半线性方程的插值系数有限元法.....	226
§ 11.4 非凸问题的临界点理论简介.....	229
§ 11.5 非线性问题多解计算的搜索延拓法.....	236
§ 11.6 非线性 Schrödinger 方程与 1+3 维激光孤波计算.....	243
第 12 章 流体力学方程组研究简介	249
§ 12.1 流体力学方程的守恒形式和偏微分方程组.....	249
§ 12.2 热力学基本知识.....	251
§ 12.3 双曲模型问题和本质困难, 间断解.....	253
§ 12.4 气体动力学和激波.....	256
§ 12.5 不可压缩流体运动.....	265
附录 数学软件 Matlab 简介	268
参考文献	283

计算不仅仅只是作为验证理论模型的正确性的手段,大量的事实表明它已成为重大科学发现的一种重要手段……所有这一切都充分说明,科学计算与实验,理论三足鼎立,相辅相成,成为当今科学活动的三大方法.

石钟慈.《第三种科学方法——计算机时代的科学计算》(2000)

第 1 章 从经典数学到科学计算

当我们阅读 M.Klein 的名著《古今数学思想史》^[66],回顾几千年来的数学发展,特别是 Newton(1642~1725)和 Leibniz(1646~1716)创立微积分以来,数学的确已建立起一个非常庞大、优美、完整且严谨的理论体系,对科学技术的发展起着巨大的推动作用.数学与科学技术的发展是相互促进,共同进步的.过去,现在的情况都是如此.然而有许多数学问题,看似简单,人们却不能,甚至不可能按过去的思维与要求,以有限的形式完整地解决它们.

数学家较容易解决许多“正问题”,但“反问题”却很棘手.例如,人们容易计算多项式 $x^5 + 2x^2 + 3x + 4$,但要求 $x^5 + 2x^2 + 3x + 4 = 0$ 的根就很难.容易求微分 $(x^5 + 1)' = 5x^4$,但要求积分 $\int \frac{dx}{x^5 + 1}$ 就不容易.容易作微分运算 $y'' + q(x)y$,但求解微分方程 $y'' + q(x)y = 0$ 很难等等.由此看来,古典数学中求有限形式的解的理论与方法,面对解决这些现实问题还是显得力不从心.

自然界中各种现象的规律是客观存在的,但它秘而不露.人们只能根据已有的部分实验与观察、猜想与分析,它就像一个蒙着面纱的阿拉伯女人,只偶尔露出了眼睛或嘴唇,你如何判断她是不是一个美人呢?不幸的是,大自然却偏偏给人类展示了众多的令人头痛的反问题.令一代代的科学家思索不完的“秘”,解决不尽的“谜”,真是大自然对人类的作弄!然而科学家也正是在揭示大自然的奥秘中,开拓着各种研究方法手段,逐渐深入地达到真正认识大自然的规律,见文献 [118].由理论思维,实验观察,到今日的科学计算,形成了科学研究的三种基本的研究方法,见文献 [98].由于计算机的发展,科学计算已起着越来越重要的作用.本章将从几个侧面来阐述古典数学遇到的困境,并如何引向今日的科学计算.同时也对科学计算的经典方法、历史和现状作个简要的综述(本章为综述性材料).

§1.1 解非线性代数方程

世界上许多民族很早就会求解一元一次方程 $ax + b = 0$.古希腊人对二次方程

$ax^2 + bx + c = 0$, 已经知道解的公式

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}. \quad (1.1)$$

但直到 16 世纪才有办法解决三次方程 $y^3 + ay^2 + by + c = 0$. 方法是令 $y = x - a/3$, 将它化为不完全的三次方程

$$x^3 + px + q = 0.$$

然后寻求形如 $x = \alpha + \beta$ 的解, 代入上式得到 $\alpha\beta = -p/3$, $\alpha^3 + \beta^3 = -q$, 由此又有 $\alpha^3\beta^3 = -p^3/27$. 因此由韦达定理, 可将 α^3, β^3 看作是二次方程 $z^2 + qz - p^3/27 = 0$ 的根, 并导出著名的 Cardan(1501~1576) 公式

$$x = \sqrt[3]{\frac{-q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} + \sqrt[3]{\frac{-q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}}. \quad (1.2)$$

当判别式 $\Delta = q^2/4 + p^3/27 > 0$ 时, 由公式可得一个实根, 两个共轭复根. 当 $\Delta < 0$ 时有三个实根. 现在用微积分考察函数 $f(x) = x^3 + px + q$, 其导数 $f'(x) = 3x^2 + p = 0$ 有两个根 $x = \pm\sqrt{-p/3}$, 即有两个极值 $f(\pm\sqrt{-p/3}) = \pm\frac{2p}{3}\sqrt{-p/3} + q$. 当此两极值反号时, $f(x_1)f(x_2) = q^2 + 4p^3/27 < 0$, 易知 $f(x)$ 应有三个实根.

研究三次方程成功了, 接下来研究 4 次方程 $y^4 + ay^3 + by^2 + cy + d = 0$. 仍用 $y = x - a/4$, 可将它简化为

$$x^4 + px^2 + qx + r = 0.$$

Cardan 的学生 Ferrari 引进一待定参数 α , 希望将上式配成完全平方

$$(x^2 + p/2 + \alpha)^2 - 2\alpha(x - q/4\alpha)^2 = 0.$$

由此可知 α 是某个三次方程的解. 原问题化为求解相应的两个二次方程, 并可用公式 (1.2) 求出 4 个根, 但它们的表达式已经非常复杂了.

16 世纪的这些成果, 激励着数学家研究更高次的方程, 但是历时 2 个世纪没有进展. 挪威年轻的数学家 Abel(1802~1829) 在 1826 年证明, 高于 5 次含文字系数的代数方程不可能用有限的根式求解, 给人们泼了一瓢冷水. 但法国年轻数学家 Galois(1811~1832) 在 1831 年证明, 对高于 5 次的方程, 当系数满足某些群条件时, 解仍可用根式表示. 看来这条路子已经越走越窄了, 就像 $x^5 - 4x - 2 = 0$ 如此简单的方程, 不满足 Galois 的群条件, 仍不可能用根式求解.

然而, 在求解高次方程时面临的重重困难并没有阻挡另一批数学家, 特别是天文学家与物理学家求高次方程数值解的热情. 对具体数值系数的高次方程, 他们提

出了各种各样的数值求根的有效方法. 例如, 我国古代的秦九韶法. 微积分的创建者 Newton 本人, 就提出了著名的求解一般的非线性方程 $f(x) = 0$ 的切线法. 设它的根 x^* 未知, 但已知其近似值 $x_0 \approx x^*$, 由 Taylor 展开

$$f(x^*) - f(x_0) = f'(x_0)(x^* - x_0) + \frac{1}{2}f''(\xi)(x^* - x_0)^2,$$

因 $f(x^*) = 0$, 将它写为

$$x^* - x_0 = -f(x_0)/f'(x_0) - \frac{1}{2}f'(x_0)^{-1}f''(\xi)(x^* - x_0)^2,$$

并弃去右边的高阶项, 可得到更好的近似值 (Newton 公式)

$$x^* \approx x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0). \quad (1.3)$$

又可取 x_1 为新初值重复迭代计算. Newton 法具有二次收敛性. 事实上前两式相减可直接得到估计

$$|x^* - x_1| \leq C|x^* - x_0|^2, \quad C = \max_{\xi \in (x_0, x^*)} \frac{1}{2}|f''(\xi)/f'(x_0)|.$$

在天文史上, 冥王星的发现归结为求解一个 8 次方程, 它只能用数值求解. 不仅如此, 人们还要求解超越方程, 如确定轨道上行星位置的 Kepler(1571~1630) 方程 (椭圆轨道的偏心率 q 非常接近 1)

$$x = q \sin x + a, \quad 0 < q < 1.$$

可改写为

$$\sin x = Ax + B, \quad A = 1/q > 1.$$

为了显示这个方程的根, 可分别绘出两条曲线 $y = \sin x$ 及 $y = Ax + B$. 根据 A 的不同, 他们可有 1, 2, 3, $\dots$ 个交点 (根). 但当 $A > 1$ 时只有一个交点. 用上述图解法, 可以得到这些根的近似值, 然后用 Newton 切线法多次逼近, 求得更准确的根.

Newton 切线法至今都是基本且非常重要的, 它对求解非线性方程组也有效. 以后 Newton 法还有其他各种变体. Newton 法有二次收敛速度, 但它要求已知的初始近似值 x_0 非常接近根 x^* , 因此 Newton 迭代只在根的很小邻域中收敛. 这是 Newton 法一个很严重的限制. 为克服这种缺点, 1934 年出现了大范围收敛的延拓法 (又叫连续性法、同伦法) 及求一个近似根的单纯形法 (1977). 我们改用多启动延拓, 进一步拓宽延拓法的收敛范围. 它们将在第 5 章进一步介绍. 近年还提出了遗传算法.

从自然科学发展的历史作用来说, 或者从其实际应用价值来说, 这些近似方法的重要性并不亚于严格求解理论的研究. 他们不仅给数学研究注入了新的活力, 而且也加强了人们解决实际问题的信心.

§1.2 解线性代数方程组

解大型线性方程组是科学计算的基本内容之一, 出现在科学技术中的许多问题中. 例如大地测量数据处理采用最小二乘法, 可直接归结为求解 n 阶线性方程组

$$Ax = b, \quad x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}^T, \quad b = \{b_1, b_2, \dots, b_n\}^T, \quad (1.4)$$

其中 $n \times n$ 阶方阵

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

如果其系数行列式 $D = \det(A) \neq 0$, 由 Cramer 法则, 此方程组的解可写为

$$x_1 = \frac{D_1}{D}, x_2 = \frac{D_2}{D}, \dots, x_n = \frac{D_n}{D},$$

这里 D_j 是系数矩阵 A 的第 j 列换为 b 后所得方阵的行列式.

从数学理论的角度来说, Cramer 法则已经彻底地解决了问题. 但是从实际计算来说, 当阶数 n 较大时, 例如 $n \geq 30$, 此法则对实际数值计算却毫无帮助!

(1) 怎么知道此行列式 $D \neq 0$?

(2) 用行列式 $D, D_1, D_2, \dots, D_n$ 来计算解 $x_1, x_2, \dots, x_n$, 其计算工作量大得惊人!

若按定义计算行列式, 一个 n 阶行列式含 $n!$ 项, 每项是 n 个数的乘积, 共需作 $(n-1)n!$ 个乘法. 为了计算所有的解, 要计算 $n+1$ 个行列式, 总工作量 $N_n = (n+1)(n-1)n! \approx n^2 n!$. 回忆微积分中的 Sterling 公式, $n \approx \sqrt{2n\pi}(n/e)^n$, 我们有 $N_n \approx \sqrt{2\pi} n^{2.5} (n/e)^n$. 取 $n = 30$ 为例, $n/e > 10$, 于是 $N_{30} > \sqrt{60\pi} \times 30^2 \times 10^{30} > 10^{34}$. 即使用目前最快的每秒作万亿次乘除法 (10^{12} 次) 的计算机, 也要花费时间 $T = 10^{34}/10^{12}/3600 = 3 \times 10^{18} \text{h} = 10^{14} \text{年}$. 这是不可能的事! 我们再回忆经典的 Gauss 消元法, 需用大约 $N_n \approx n^3/3$ 个乘除法, 它已经比 Cramer 法则不知好了多少. 若用 Gauss 消元法求解 $n = 10^4$ 个未知数的线性方程, 需作 $N_n = 0.33 \times 10^{12}$ 次乘除法, 用 1 台每秒作 10^8 (1 亿) 次乘除法的微机求解, 费时 $T = 3.3 \times 10^3 \text{s} = 1 \text{h}$, 仍然是不容易的.

而现代科学技术, 例如大型喷气客机、核裂变等的设计计算、石油与油藏模拟、流体涡度结构的模拟等, 未知数常常超过百万. 美国最近对一项等离子体作为团粒研究, 团粒数目达到 1 亿个. 因此必须创立全新的计算方法才能解决新时代所提出的要求.

由于这些大型方程组往往来自微分方程数值求解, 它们常具有对称、正定、高度稀疏等重要特性, 因此又产生了多种多样的快速解法. 由 A 的正定性, 保证了其行列式 $D > 0$. 大家知道, 由代数中的 Sylvester 定理, n 阶方阵 A 正定的充要条件是所有的主子式为正. 最大主子式就是行列式 $D > 0$. 另外, 由于 A 高度稀疏, 大多数甚至绝大多数元素是 0. 人们设计了一些计算方法, 对这些 0 元素既不存贮也不计算, 这就大大提高了求解效率. 例如, 对 d 维偏微分方程问题导出的线性方程组, Cholesky 三角分解法的总工作量已降至 $O(n^{3-2/d})$, 而共轭梯度法可将总计算量降至 $O(n^{1+1/d})$, 见第 5 章. 因此, 近代的数值代数有许多精彩的内容.

现代科学计算追求的目标是: 为求解一个由偏微分方程导出的 n 阶线性方程组, 使总工作量降为

$$N_n = O(n), \text{ 或 } N_n = O(n \ln n).$$

这是最佳 (或几乎最佳) 阶数, 因为即使求解一个对角线方程组, 也要作 n 个除法. 而近 20 年来紧张研究求解偏微分方程的多网格法 (最近十几年又推出瀑布式多网格方法) 正是这种理想的方法, 它们将在第 4 章介绍.

§1.3 函数逼近

在微积分学里, 我们常将一个函数展开为 Taylor 多项式级数, 如 $\sin x, \cos x, e^x$ 等. 从复变函数的观点看, 这只对解析函数可行, 而且只在被展开的点附近收敛较快. 对一般的连续可微函数不可能作出这种级数展开, 但可以作插值逼近.

历史上最重要的是 Lagrange 多项式插值. 设在区间 $(0, h)$ 上给定 $n+1$ 个节点 $x_0 = 0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = h$ 及其函数值 $y_j = f(x_j)$, 可作出 n 次 Lagrange 插值

$$I_n f(x) = \sum_{j=0}^n L_j(x) f(x_j), \quad L_j(x) = \prod_{i=1, i \neq j}^n \frac{x - x_i}{x_j - x_i}, \quad (1.5)$$

(这里 $\prod$ 是连乘号, 如 $\prod_{j=1}^n j = n!$) 其误差为

$$\epsilon_n(x) = f - I_n f = \frac{1}{n!} (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n) f^{(n)}(\xi), \quad \xi \in J. \quad (1.6)$$

最简单而重要的有线性插值和二次插值

$$I_1 f(x) = \frac{h-x}{h} f(0) + \frac{x}{h} f(h),$$

$$I_2 f(x) = \frac{(h-x)(h-2x)}{h^2} f(0) + \frac{4x(h-x)}{h^2} f(h/2) + \frac{x(2x-h)}{h^2} f(h).$$

若将此两式在区间 $(0, h)$ 上积分, 就分别得到梯形求积公式与 Simpson 求积公式.

但是 Lagrange 插值也存在严重的缺陷. 由 (1.6) 看到, 当 n 增大时, 若高阶导数 $|f^{(n)}(x)|$ 一致有界, 可保证余项迅速减小. 但是对任意连续函数, 当 $n \rightarrow \infty$ 时不能保证 $f_n(x)$ 一致收敛于 $f(x)$. 20 世纪初 Runge 曾给出一个有名的例子

$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}, \quad -1 < x < 1,$$

用等距节点, 作 10 次 Lagrange 插值 $I_{10}f$. 发现在 $|x| < 0.2$ 时逼近较好, 其他地方偏差振动很大, 例如在 $x = \pm 0.96$ 处 $f = 0.0416$, 而 $I_{10}f = 1.8044$, 误差却有 $\epsilon = 1.7628$, 见图 1.1.

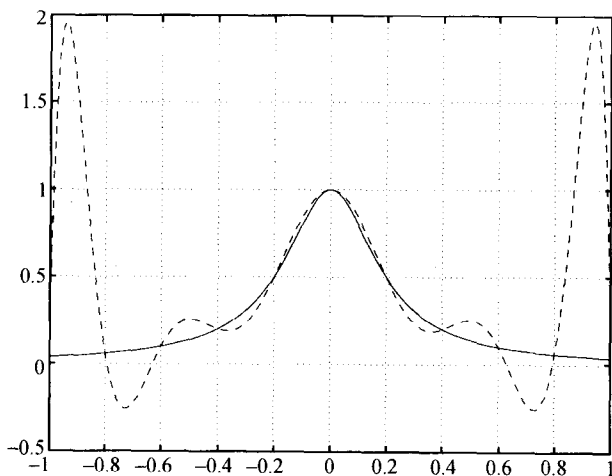


图 1.1 曲线 $f(x) = 1 + 25x^2^{-1}$ (实线) 及其 11 点插值 (虚线)

已经证明, 当 $n \rightarrow \infty$ 时, 此 $f_n(x)$ 只在 $|x| < 0.36$ 内收敛, 而在此区间外是发散的. 这就是著名的 Runge 现象. 为什么会有这种现象? 我们简单分析 $f(x) = g^{-1}(x)$, $g(x) = 1 + 25x^2$ 的高阶导数,

$$f' = -g^{-2}(x)(50x), \dots, f^{(n)}(x) = n!g^{-n-1}(x)(-50x)^n + \text{较小项},$$

其中的因子 $n!$ 将与余项 ϵ_n 的分母中的因子 $n!$ 约去了. 当 $x \approx 1$ 时, 余下的因子 $(50x/g(x))^n \approx (50/26)^n$, 因而余项将快速增长.

由此看到, 依靠高次多项式作整体的逼近有很大的局限性. 冲破这种约束的新思想就是采用分片的低次多项式逼近, 它已是现代科学计算中的基本思想. 如在每个单元 $e_j = (x_{j-1}, x_j)$ 上作线性插值

$$I_1 f(x) = \frac{x - x_{j-1}}{h} f(x_{j-1}) + \frac{x_j - x}{h} f(x_j) = L_1(x)f_{j-1} + L_2(x)f_j, \quad x \in e_j,$$

它们在整个区间上构成连续函数 (但导数在节点上有间断), 属 C^0 类, 且一致地有误差估计 $|\epsilon_n| \leq C_2 h^2$, $C_2 = \max |f''(x)|/4$. 使用与分析简单又方便.

若要求在整个区间上属 C^1 (即 f_l, f_l' 皆连续), 可采用 Hermite 型插值. 例如在每个节点 x_j 上给定了 $f_j = f(x_j)$ 及导数 $m_j = f'(x_j)$, 可在每个单元 $e_j = (x_{j-1}, x_j)$ 上构造三次 Hermite 插值

$$f_H(x) = (1 - 3t^3 + 2t^2)f_{j-1} + ht(t-1)^2m_{j-1} + t^2(3-2t)f_j + ht^2(t-1)m_j, \quad (1.7)$$

其中 $t = (x - x_{j-1})/h$. 求解 4 阶梁弯曲方程时可用 C^1 有限元.

而在 20 世纪中叶, Schoenberg 于 1946 年构造了样条 (spline) 函数, 即一种分片 n 次多项式, 在整个区间上属于 C^{n-1} (即 f 及其直到 $n-1$ 阶导数皆连续), 见文献 [76]. 这是目前已知光滑度最高的分片多项式. 我们以三次样条 $S(x)$ 为例加以说明. 记 $S = f_H, m_j = f'_j$, 由上述 Hermite 三次插值, 在单元 e_j 上可求出它在两个端点的二阶导数

$$S''(x_{j-1} + 0) = (2m_{j-1} + 4m_j)/h_j - 6(f_j - f_{j-1})/h_j^2,$$

$$S''(x_j - 0) = -(4m_{j-1} + 2m_j)/h_j + 6(f_j - f_{j-1})/h_j^2.$$

在单元 e_{j+1} 上也可写出类似的表示. 因此, 在内节点 $x_j, 1 \leq j \leq n-1$, 上要求 $S''(x)$ 连续, 就导致了连接条件

$$\frac{1}{h_j}m_{j-1} + 2\left(\frac{1}{h_j} + \frac{1}{h_{j+1}}\right)m_j + \frac{1}{h_{j+1}}m_{j+1} = 3\frac{f_j - f_{j-1}}{h_j^2} + 3\frac{f_{j+1} - f_j}{h_{j+1}^2}.$$

为了惟一确定 m_j , 可在区间的两端点规定各种边界条件, 如给定 $m_0 = f'_0, m_n = f'_n$. 上式是 $n-1$ 个方程, $n-1$ 个未知数的线性方程组. 由于其系数矩阵严格对角占优, 它是惟一可解的. 求出所有内节点的 m_j , 就得到一个属于 C^2 的分片三次样条函数. 由于有这种整体的光滑性, 因此三次样条可以写为更方便的形式

$$S_3(x) = a + bx + cx^2 + dx^3 + \sum_{j=1}^n a_j(x - x_j)_+^3,$$

其中 x_j 是节点, 当 $x > 0$ 时规定 $(x)_+ = x$, 当 $x < 0$ 时规定 $(x)_+ = 0$. 上述一元样条容易推广到二元矩形剖分. 人们对三角形剖分上的二元样条很感兴趣, 但目前仍未能得简单实用的结果.

三次样条已广泛用于船体放样、图形学等. 应当提到, 近年来, 国防科技大学王正明教授用三次样条拟合导弹飞行轨道的实测数据 [116, 117], 其基本思想是对不等距节点的坐标及节点值都用最小二乘作优化选择 (Gauss 研究数值求积公式时用过

这种优化思想), 得到了很好的模拟结果. 不仅找到了数据突变的地方, 而且对偏差及原因作出了科学的分析.

与逐点插值不同, 函数逼近中另一种思想是用平均逼近或正交投影. 在区间 (a, b) 上引进内积

$$(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)dx,$$

设已给一组线性无关的函数 $\phi_j(x)$ (称为基函数), 寻找它们的线性组合 $F_n(x) = \sum_{j=1}^n a_j \phi_j(x)$ (即确定所有系数 a_j), 使误差 $R = f - F_n$ 的平方在积分意义下达到最小 (称最佳平方平均, 或最小二乘法)

$$J(a_1, a_2, \dots, a_n) = \frac{1}{2} \int_a^b (f(x) - F_n(x))^2 dx = \min,$$

由微积分定理, 这要求对 a_i 的所有偏导数为 0,

$$\frac{DJ}{Da_i} = \int_a^b (f(x) - F_n(x))\phi_i(x)dx = (f, \phi_i) - \sum_{j=1}^n a_j (\phi_j, \phi_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

它是一个 n 阶线性方程组, 系数矩阵 $\{(\phi_j, \phi_i)\}$ 为 Gramer 矩阵, 其行列式不为 0, 故此方程组惟一可解. 特别地, 若 ϕ_j 是一组规范化正交基, 即 $(\phi_j, \phi_i) = \delta_{ij}$, 这里 δ_{ij} 是 Kronecker 记号, 即当 $i \neq j$ 时 $\delta_{ij} = 0$, 而 $\delta_{ii} = 1$, 则上述系数矩阵简化为单位阵, 因此解可表示为 $a_i = (f, \phi_i)$. 而上述逼近的误差为

$$\epsilon = \min J = (f, f) - \sum_{j=1}^n (f, \phi_j)^2 \rightarrow +0, \quad \text{当 } n \rightarrow \infty.$$

早在 200 年前, Fourier(1768~1830) 就作了有限区间上的三角级数展开和无穷数轴上的 Fourier 变换. Fourier 将它们用于解偏微分方程, 对科学发展影响了一个半世纪 (见 §1.5), 开创了调和研究的先河. 除了三角函数正交系, 还有其他许多重要的正交系. 在有限区间上, Legendre(1752~1833) 引进了正交多项式系. 如在 $E = (-1, 1)$ 上可直接定义 k 阶 Legendre 多项式

$$l_j(t) = \gamma_j D_t^j (t^2 - 1)^j, \quad \gamma_j = \sqrt{2/(2j+1)/(2^j j!)}, \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

它们构成了 E 上的完备规范化正交系. 任何平方可积函数都可展开为收敛的多项式级数

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j l_j(x), \quad a_j = (f, l_j) = \int_{-1}^1 f(t) l_j(t) dt, \quad (1.8)$$