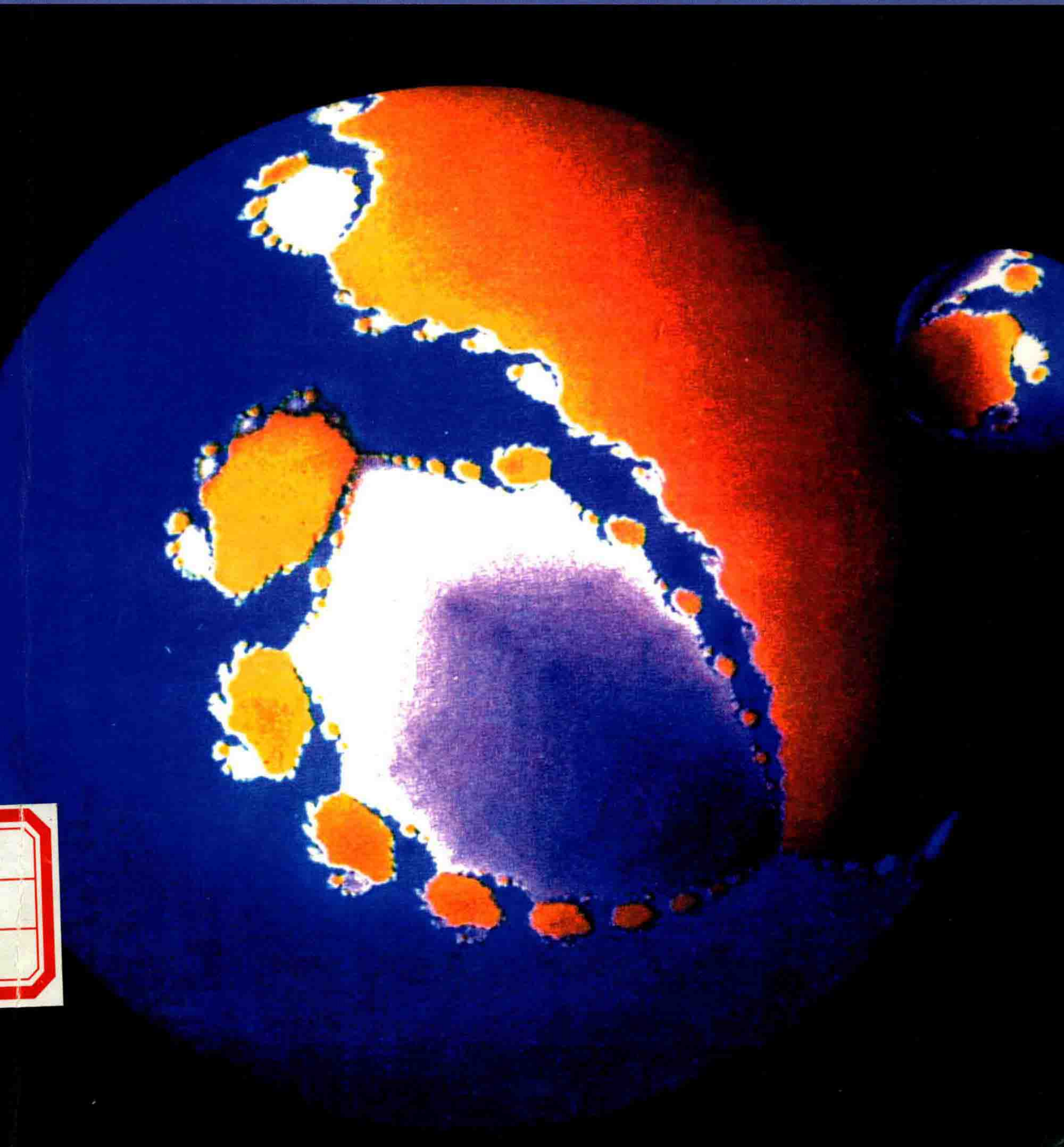
计算物理学

【美】Steven E.Koonin 著
秦克诚译

高等教育出版社



计算物理学

[美] Steven E. Koonin 著
秦克诚 译

高等教育出版社

〔京〕 112号

内容简介

计算物理学是物理学的新的极为重要的分支，它与理论物理和实验物理一起构成现代物理学的整体．目前，计算物理学作为一门大学本科及研究生物理课程已经成熟．1986年在美出版的 Steven E. Koonin 所著《计算物理学》，获得了有关专家的一致好评，并被国外不少著名大学采用作为计算物理课的教材．

本书全面介绍了计算物理中各种常用的计算方法，配置了内容新颖而丰富的遍及现代物理学各分支的例题和课题，书后附有全部例题和课题的程序．程序采用 IBM PC BASIC 语言，具有很强的通用性．

本书可作为高等学校物理专业高年级学生及研究生学习计算物理时的教材，对于广大物理教师和物理学工作者也很有参考价值．

Computational Physics
Steven E. Koonin

计算物理学
［美］Steven E. Koonin 著
秦克诚 译
*
高等教育出版社出版
高等教育出版社激光照排技术部照排
新华书店北京发行所发行
高等教育出版社印刷厂印装
*
开本 787×1092 1/16 印张 20.75 字数 490 000
1992年11月第1版 1992年11月第1次印刷
印数 0 001—2 242
ISBN7—04—002748—7/O·872
定价 11.20元

译者前言

计算机和计算科学的飞速发展，使计算方法广泛应用于各个科学领域，形成了一组边缘学科，如计算物理学、计算力学、计算化学等．有的科学家提出，计算已成为人类科学活动的第三种手段，与实验和理论鼎足而三，相辅相成．而计算物理也就同理论物理和实验物理并列，成为物理学的三大分支之一．是否同意这种提法可以讨论；但是，计算机在物理学中的作用越来越重要、计算物理已成为一门独立的学科，对物理系学生必须加强计算机教育和通过计算解决物理问题能力的训练，则是非常清楚、无需争辩的了．

有鉴于此，译者早就想在物理系开设计算物理课，但是一直找不到合适的教材．我心目中一本好的计算物理教材应当是这样的：首先，它应当是一本物理教材．计算物理学书籍当然要介绍计算方法，但是其目的是为了解决物理问题，因此，对计算方法的选题和讲述方式，都应当带有物理学的特色．介绍的计算方法应当是物理学中最常用的，讲述的方式应当符合物理学家的口味：启发式，要而不繁，实用，不因追求数学的严格性而陷于枯燥、琐细的论证中．书中应当穿插足够的物理例题，以阐明所介绍的数值方法的应用；在这些例题中，对物理模型和计算模型的建立、如何根据问题的特点选择计算方法．计算结果的分析，都应作充分的讨论．其次，计算物理是一门正在发展中的前沿学科，又是一门方法性的学科，在物理学的各个部门中都有广泛的应用；但是作为一本教材，应当具有基本性和典型性．它不可能也不应该包罗一切计算方法和应用，只能选择在物理学中广为应用的基本算法，在物理例题的选择上，也应当选择那些典型的、必须通过数值计算才能解决而且在物理上有基本意义和广泛兴趣的问题．

1986 年 10 月，在北京国际书展上，我看到了 Koonin 教授写的这本当时出版不久的书．翻阅之后，我欣喜地发现，这正是我寻求已久的那种书．带回给虞福春教授看了之后，他对这本书也给予高度评价．在他的鼓励和高等教育出版社的大力支持下，译者决定把这本书译成中文，这就是现在奉献在读者面前的这本书．两年来，本书已被美国不少著名大学(如加州理工学院、麻省理工学院、哈佛大学和普林斯顿大学等)采用作为教材．除中译本外，德译本和日译本也已经或将要出版．在国际理论物理中心(ICTP)举办的计算物理学习班上和其他许多场合，译者都听到对这本书的推荐和交口称誉．看来我们对它的评价和选择是对的．我希望，中译本的出版，对我国高等学校中计算物理教育的开展将起促进作用．

这本书符合我前面所说的要求．在计算方法上，它取舍得宜，总的内容并不很多，但是对于一些在物理学中广为应用的计算方法，象解二阶常微分方程的 Numerov 方法、常微分方程边值问题的解法、Metropolis 的随机抽样方法等，虽然一般的计算方法书讲得很少甚至根本不提，这里却作了比较详细的介绍．对计算方法的介绍是结合在物理例题中的应用，从一个物理学家的角度来进行的，例如对数值稳定性的讨论(§2.4)．物理例题的选择更加精彩．作者 Koonin 教授是一位知名的理论核物理学家，擅长高能物理中的大规模数值计算．他丰富的科研经验使他为本书设计了非常有趣的物理例子．其中，不含时间和含时间的 Schrödinger 方程

(例题 3和7)、Laplace 方程(例题6)和 Navier－Stokes 方程(课题Ⅵ)都是物理学中的基本方程；课题Ⅰ(经典力学散射)、例题4和课题Ⅳ(量子散射)及例题5(散射的逆问题)比较系统地研究了散射问题；原子结构(课题Ⅲ)、H_2 分子结构(课题Ⅷ)、原子核模型(例题 5和课题Ⅴ)是物质结构的基础；而混沌(例题2)、自组织(课题Ⅶ)、高能电子散射(例题5)、白矮星结构(课题Ⅱ)和Ising 模型(例题8)则是来自科研前沿的题目．作者为选择物理例子定下了物理上有意义、不能解析求解、计算量的大小可以在PC机上处理三条标准，这三条标准是合理的，作者的具体选题也是成功的．由于作者的背景，这些例子比较偏重微观物理，这对一般的计算物理书籍偏重宏观物理方面的应用，是一个很好的补充．作者对这些题目进行了剪裁，使之适合于教学，每个问题的程序长度为 300～1000行，这对初学者是合适的．作者还对材料进行了精心组织，每一章都有一个例题和一个课题，使读者学完一章计算方法后立即有机会应用．

除了以上内容和体例上的优点之外，本书还有下述特点：第一，重视图形显示，每个题目的结果均以图形方式输出．开发计算机的绘图功能对物理系学生是非常重要的，应当加强这方面的训练．第二，本书的全部问题可以在PC机上处理．这对于在我国这样一个硬件缺乏、教育经费困难的国家有重要的意义．许多大学的物理系可能只配备有PC机．实际上，今天的PC机的功能，已经达到以往的小型机甚至中型机的水平，而且它有很好的图形功能，用来开展计算物理教学是非常合适的．第三，本书附有程序，这对学生写自己的程序时作为范型和教员备课，都带来很大的方便．

Koonin 教授在他的序言中谈到他建立计算物理实验室的想法和实际经验．我很赞成这个想法．这是因为：第一，计算物理这门学科的研究方法本身更接近于实验科学．由于计算物理问题的复杂性，要弄清楚所采用的方法的收敛性和稳定性常常是很困难的．通常的做法是，不要等待收敛性稳定性问题的解决，而是选取不同的计算方法和计算参数，在计算机上进行数值实验．这需要一个实验室的工作环境．第二，计算物理课程要培养的是通过计算解决物理问题的能力，它需要物理学理论、数值计算方法和程序设计这三方面知识的综合，只有在一个实验室中的工作经验才有利于培养这种综合能力．第三，计算物理是一门方法性的学科，应用遍及各个领域．不同专业的学生总是希望看到自己领域内的熟悉的题目．这样，他学了这门课以后，才会觉得立刻就有用，很有收获．要在教材内或课堂上照顾到各方面的兴趣是困难的，例如本书中就缺乏凝聚态方面的题目．如果有一个计算物理实验室，准备了40～50个从物理学各个领域选出的典型题目，每个课程都写好讲义，编好程序，讲义中写清楚物理原理、计算模型和计算方法，那么，选这门课的学生，就可以根据他的专业和兴趣选作某些题目．根据学生的情况和问题的难易程度，可以要求学生自己写程序(允许用任何语言)，也可以修改和运行实验室提供的程序以模拟不同的物理情况(例如不同的位势)，提取物理结论．这样做，不但加强了计算物理课程的适应性，满足不同专业的需要，而且有利于培养学生的独立工作能力．

作者在“怎样使用本书”和寄给译者的资料中，介绍了他是怎样教这门课的．他采用实验室模式．整个课程分为8个单元，相当于本书的八章．每一单元，学生自己阅读前面的计算方法部分，然后上机做例题和课题，以直接经验为师．上机基本上独立进行，按照自己的进度，选择自己的时间．(他们的大学生每个人有自己的计算机，这是和我国国情不同之处．)作者和一个助教每周抽出一定的办公时间，学生可以在这些时间内来向教员请教和讨论．每一单元结束时，对每个学生进行半小时的个别质疑，来判定他们的进步情况和理解程度．一个典型的学

生，每周工作 6～7小时，可以在10周内完成3～4个单元，其中自己写两个课题的程序，其它则用作者的程序．译者也用这本书作教材教过一个学期，对象是四年级学生．由于准备不及，仍采用课堂讲授加上机的形式．每周上课3学时．上机6小时．上课内容按照本书，并补充一些算法；上机内容则要求学生用FORTRAN(我系的第一计算机语言)写出三个题目的程序，交实验报告，此外则运行书中提供的程序，并完成其他一些布置的习题．在一学期内，讲完本书内容嫌紧一些(有几个物理例子来不及讲)，若能有4学时更好一些．学生对这门课的反应是好的，很有兴趣，也能完成上机作业．

译者还想趁此机会在这里说一下对物理系设置与计算机有关的课程的看法．程序设计语言是使用计算机的一种基本技能，物理系学生至少应当掌握一种程序设计语言，计算机语言应当是必修课，一年级就应当开设．物理学界最常用的语言是FORTRAN．有时间与可能时(例如暑期课)，也可以开设一些别的计算机语言，如PASCAL、C或其他的与计算机有关的课程，应当根据计算机在物理学中应用的情况来开设。今天所谓的计算物理学，从其用途和目的来划分，大致有以下几个方面：数值计算、计算机 模拟和用符号演算推导公式。数值计算的应用和计算机模拟并没有明确的分界，其分别主要在于目的的不同。数值计算在于求得定量的结果，而大多数计算机模拟的目的则是定性的，用计算机来得到对物理系统定性行为的理解。与此对应，在三年级，可以开设选修的计算方法课。对四年级学生或一年级研究生，可以开设选修的计算物理、统计物理中的Monte Carlo方法和计算机代数(如Derive、REDUCE 或MATHEMATICA)等课程。计算物理课是一门全面介绍计算物理学的课程，它最好分成两个阶段，头一阶段内容不要过于专门，最好采用实验室形式；后一阶段与各专门组的科研方向紧密结合，可以采用专题讲座的形式．从一年级到四年级，要使学生对计算机使用不断线，例如用计算机处理各种实验数据；普通物理、量子力学、数学物理方法等课，都可以结合计算机进行教学．此外，某些同学，出于实验工作需要或个人兴趣，可能还要学习一些有关硬件和接口的课程，例如微机原理与应用或计算机体系结构．译者对这方面没有什么经验，就不在此讨论．

本书涉及的面较广，对译文中的错误，欢迎读者批评指正，也欢迎使用本书的教师和学生来信交流计算物理课程的教学经验和探讨物理系计算机教育的内容．我们正在编写本书各例题和课题的FORTRAN程序软盘，适用于IBM－PC/XT，AT和IBM5550机，大约在90年年底可以提供．

秦克诚

1989年12月于北京大学物理系

作 者 序

计算是现代科学的一个不可或缺的组成部分，因此，具有高效率地开发和利用计算机提供的巨大能力的本领，对一个实际工作的物理学家(working physicist)是很重要的．正确地应用计算机来模拟物理系统绝不只是埋头苦算(blind number crunching)，一个成功的计算物理学家要同时均衡地依靠可以解析求解的例子、物理直观和数值计算工作来解决不如此就无法处理的问题．

可是，进行计算的本领很难通过标准的大学物理系课程安排来培养，因为它需要三方面训练(物理学、数值分析和计算机程序设计)的综合，而这三种训练是在互无联系的课程中进行的．很少有物理系学生毕业时知道如何进行计算；那些具有这种知识的学生则通常是在独立工作的过程中，比如通过一项研究课题或者一篇毕业论文，而学到有限的一些技巧的．

本书选材的目标在于，通过提供用计算机模拟物理系统的直接经验，来提高高年级大学生或刚入学的研究生的计算技巧．它的范围包括了要在计算机上从事物理学工作所需要的最低限度的数值计算方法．每种方法先在正文中介绍(常常只作启发式介绍)，然后应用它来解经典物理学、量子物理学和统计物理学中有意义的问题．这些问题是选来深化或扩展标准的大学物理课程的，因此除了它们所说明的计算原理之外，它们本身也使人相当感兴趣．

不要把本书看成是定下了一门一成不变的或完全确定的课程的格局．我把本书的范围限于这样一些计算，它们同时满足以下的判据：能够说明一种广为应用的数值方法；可以在微机上处理；并且在物理上有某种特殊的兴趣．因此，有几种重要的数值方法被略去了，其中包括样条插值和快速 Fourier 变换．也许最好是把本书看成是建立了一个提供进一步开发机会的环境．对书中叙述的材料可以作各种各样的推广和细节上的补充；沿着这些线索发挥自己的想象力是钻研本书时更值得一试的一个方面．

本书首先是一本物理教材．为了最大限度地得益，学生应当已经修过或者正在修关于经典力学、量子力学、统计力学、高等微积分或者数学物理方法的大学课程．它不是一本数值分析的教材，因为作者没有试图在任何关于数值方法的说明中做到严格性和完备性．但是它并不一定需要一门数值分析方面的先行课；本书对数值方法的讨论应当是一个具有以上物理学背景知识的学生可以接受的，也许再指定一本优秀的数值分析教材(例如 [Ac 70]、[Bu 81] 或 [Sh 84])做参考书．本书也不是一本计算机程序设计教材．虽然我试图始终都遵循良好的程序设计原则(见附录 B)，但并不打算在本书中教程序设计．的确，组织和编写程序的技巧是有点偏离本书的主要目标的．因此，对程序设计的某种熟悉是必要的，至少要修过一个学期的任何一种标准的高级语言(BASIC, FORTRAN, PASCAL, C)的入门课程．

选择什么语言总是会在使用计算机的科学家中间引发强烈的感情问题．不过，任何一种语言毕竟只是用来表达一个程序的思路的一种手段．因此，不论你用哪种语言工作，本书的内容

都是合适的．但是，总得选用某种语言来写出程序，为此目的我选的是标准 BASIC 在 IBM PC/XT/AT 机上的 Microsoft 方言．BASIC 语言具有许多众所周知的缺点，其中最重要的是缺少局部子程序变量以及表示结构化程序时的笨拙不灵．然而我相信，这些缺点被它的以下优点所抵偿：语言的简单性和它的广泛流传；几乎一切微机(本书最可能用在微机上)都装有 BASIC；既存在 BASIC 解释程序，便于书写和调试程序，又存在有编译程序，可以产生能迅速执行的可执行目标程序；以及这种语言的强有力的绘图功能和输入/输出语句．我预期，熟悉别的某种高级语言的读者能够很快学会足够的 BASIC 知识，使得能够使用本书．附录 A 中包含有这种语言的概要，以在这方面助一臂之力，进一步的信息可以在很容易得到的手册中找到．当然，读者也可以选用任何他认为方便的语言来写书中建议的程序．

本书是 1984 学年冬季和春季在加州理工学院为物理系三、四年级学生所开的高级计算物理实验室课程的产物．本书的内容和表述形式，从 M. －C. Chu, V. Pönisch, R. Williams 和 D. Meredith 的许多富于启发的建议中得益很多．Meredith 夫人对本书手稿和程序最后打印成书也给了很大的帮助．我还要感谢我的妻子 Laurie，她在我从事这一课题的两年时间里，表现了非常大的耐心、理解和支持．

Steven E. Koonin

1985 年 5 月于 *Pasadena*

怎样使用本书

本书分成八章，每章都包括正文部分、一个例题和一个课题．每一节正文简短地讨论一种或几种有联系的数值方法，常常用简单的数学例子来具体说明．正文中穿插有若干习题，在这些习题里，读者通过进行一次解析推导或者编写和运行一个简单程序，可以巩固和扩展对正文材料的理解．

每章的例题和课题是该章的数值方法对具体的物理问题的应用．不论例题还是课题都包括有对物理内容的简短说明，然后讨论数值方法如何应用．例题和课题的差别只在于:对于例题，我们期望学生使用(也许加上修改)附录B中给出的程序；而对于课题，则书中提供了指导，指导如何写出程序来一步一步处理这个课题．但是，课题的程序也在附录C中印出；它们可以作为学生自己写程序的范型，也可以用作研究该课题的物理内容的手段，而不必从零开始写一个大程序．伴随着每个例题和课题有一系列建议的研究项目，它们指导着学生如何开发利用程序以及理解所涉及的物理原理和数值方法．

本书所附的软盘[①](360 K字节．双面双密度格式)也包含了各个例题和课题的BASIC源程序；它们适合在任何运行MS－DOS 2.0版或更高版本的操作系统的计算机上使用．关于这些程序的更多的信息可以在附录B的开头和软盘上的文件README中找到，把软盘插入约定的磁盘驱动器并送入DOS命令“TYPE README”，就可把此文件读出．注意在使用程序之前，最好是为这个写保护的软盘复制一个后备盘．

我曾试着只用最基本的BASIC语句，使得我们的例题程序和课题程序对大多数BASIC方言都可以用．所有的程序在BASIC解释程序下都会运行，但是大多数程序需要大量的计算，这使得执行速度成为一个重要的考虑因素．因此我建议：若要认真地钻研，最好是通过IBM或Microsoft的BASIC编译程序对源程序进行编译，编译后的程序的运行速度将提高五至十倍．写程序时我还注意了使得它们可以比较容易地改写为别种高级语言，比如FORTRAN.

作者的实践表明，采用一种“实验室”的形式是在大学环境中介绍本书内容的一种有效的模式．学生们完全能够独立地从头至尾学完本书的内容，只要有教师答疑并且通过就每章内容进行简短的个别质疑来监督其进程．在十周(60小时)的教学中完成三章被证明是合理的进度，学生的典型情况是：自己写出其中两个课题的程存，并使用现成的程序来研究剩下的一个课题和各个例题的物理内容．因此，本书的八章已足够一门一学期的课程之用．另一种方式是，也可以用本书为通常的经典力学、量子力学和统计力学课程提供补充材料．本书的许多例题和课题都是这些学科中的基本观念的生动例证，因此适合于课堂演示和独立钻研．

不要把本书看成是定下了一门一成不变的或完全确定的课程的格局．我把本书的范围限于这

---

① 原书书后附有一张软盘．中译本不附，需要者可与高等教育出版社联系．　——译者注

样一些计算，它们同时满足以下判据：能够说明一种广为应用的数值方法；可以在微机上处理；并且在物理上有某种特殊的兴趣．因此，有几种重要的数值方法被略去了，其中包括样条插值和快速 Fourier 变换．也许最好把本书看成是建立了一个提供进一步开发机会的环境．对书中叙述的材料可以作各种各样的推广和细节上的补充；沿着这些线索发挥自己的想象力是钻研本书时更值得一试的一个方面．

第一章　基本数学运算

在绝大多数用计算机模拟物理系统的问题中，有三种数值运算是非常重要的，那就是微分、求积和求根．设我们能够计算一个函数 $f(x)$ 在自变量 x 的任何值上的函数值．微分就是要在给定的 x 值上求 f 的某一阶导数．求积粗略地说是微分的逆运算，它要求我们计算 f 在两个确定的积分限之间的定积分(我们对“求积”和“积分”两个术语加以区分，把“积分”这个术语保留给第二章讨论的解微分方程的过程)．而求根则是求使 f 为零的 x 值(可能不只一个)．

如果 f 的解析形式是已知的，那么几乎总可以(只要有足够的毅力)为 f 的导数推出显式的公式，对 f 的定积分也常常可以推出显式公式．但是，情况常常是不能用解析方法，尽管我们能够计算 $f(x)$ 本身的值．这可能是由于计算 f 需要用一些非常复杂的数值过程，我们没有能够对它应用微分规则和求积规则的适当的解析公式；或者更不好办的是，我们用以产生 f 的方法只向我们提供 f 在一组分立的坐标值上的数值．在这两种情况下，我们都必须使用近似公式，通过我们能够计算的 f 值来表示导数和积分．此外，除了最简单的函数之外，所有函数的根都不能用解析方法求出，因而必须用数值方法．

本章讨论如何在计算机上实现这三种基本运算．基本方法是用一个简单的函数(例如一次或二次多项式)来逼近 f，对这个简单函数很容易实行这三种运算．我们将只推导最简单和最常用的公式；进一步的讨论可以在许多数值分析教科书上找到．

1.1　数值微分

设我们想要求 $x=0$ 处的导数 $f'(0)$．(通过平移我们推导的公式可以很容易地推广到任意的 x 值．)假定我们知道 f 在一组等间隔的 x 值格点上的数值：

$f_n=f(x_n)$；$x_n=nh\ (n=0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$，

我们的目标是要通过 f_n 算出 $f'(0)$ 的一个近似值(见图 1.1)．

首先我们用 Taylor 级数在 $x=0$ 的邻域展开 f：

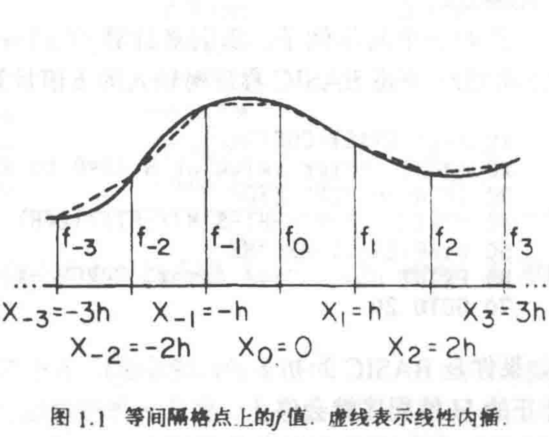


图 1.1　等间隔格点上的 f 值．虚线表示线性内插．

$$f(x)=f_0+xf'+\frac{x^2}{2!}f''+\frac{x^3}{3!}f'''+\cdots, \tag{1.1}$$

其中所有各阶导数都取 $x=0$ 处之值. 容易验证

$$f_{\pm1} \equiv f(x=\pm h)=f_0\pm hf'+\frac{h^2}{2}f''\pm\frac{h^3}{6}f'''+O(h^4), \tag{1.2a}$$

$$f_{\pm2} \equiv f(x=\pm 2h)=f_0\pm 2hf'+2h^2f''\pm\frac{4}{3}h^3f'''+O(h^4), \tag{1.2b}$$

其中 $O(h^4)$表示与 h^4 同阶或更高阶的一些项. 为了估计这些项的大小, 我们可以假定 f 及其各阶导数的大小都是同一数量级, 许多物理学中用到的函数属于这种情况.

从(1.2a)式给出的 f_1 减去 f_{-1}, 重新集项, 得

$$f'=\frac{f_1-f_{-1}}{2h}-\frac{h^2}{6}f'''+O(h^4). \tag{1.3a}$$

含有 f''' 的项当 h 很小时趋于零, 它是只保留第一项所得到的有限差分近似

$$f'\approx\frac{f_1-f_{-1}}{2h} \tag{1.3b}$$

的主要误差来源. 若 f 在这个3点区间 $[-h,h]$ 上是一个二次多项式, 那么这个"3点公式"将是精确的, 因为三阶导数和一切高阶导数都变为零. 因此, (1.3b)式的实质是假定函数 f 通过三点 $x=\pm h, 0$ 的二次多项式内插成立.

回忆初等微积分中定义导数的公式, (1.3b)式是很自然的结果. 通过使 h 值越来越小, 原则上可以使和 h^2 同阶的误差项任意小. 还要注意, 这里用的是 $x=0$ 两侧的对称差分, 它比下面两个前向差分和后向差分公式更精确(相差 h 的一阶):

$$f'\approx\frac{f_1-f_0}{h}+O(h); \tag{1.4a}$$

$$f'\approx\frac{f_0-f_{-1}}{h}+O(h). \tag{1.4b}$$

这两个"2点"公式的基础是, 假设 f 在 $x=0$ 和 $x=\pm h$ 之间的区间上可以用一个线性函数很好地逼近.

作为一个具体例子, 我们来计算 $f(x)=\sin x$ 的 $f'(x=1)$. 精确的答案当然是 $\cos 1=0.540302$. 下述 BASIC 程序对输入的 h 值计算(1.3b)式在这种情形下之值:

```
10 X=1: EXACT=COS(X)
20 INPUT "Enter value of h (<=0 to stop)";H
30 IF H<=0 THEN STOP
40 FPRIME=(SIN(X+H)-SIN(X-H))/(2*H)
50 DIFF=EXACT-FPRIME
60 PRINT USING "h=#.#####, ERROR=+#.#####";H,DIFF
70 GOTO 20
```

(如果你是 BASIC 的初学者, 请注意以下几点: 系统是怎样请求从键盘送入 H 值的; 若送入非正的 H 值程序就会停止; 变量名怎样根据其意义自然地选取①;40 行中用 SIN 函数重写了数

① 这一段程序所用的几个变量名中, EXACT 的英文意义是精确值, FPRIME 代表 F ′, DIFF 是 DIFFERENCE(差)的缩写. ——译者.

学公式(1.3b)；60 行中在要把结果输出到屏幕时如何规定有效数字位数；以及 70 行中的转移控制).

用这个程序所产生的结果. 以及用前向和后向差分公式(1.4a, b)算得的类似结果，通通列在表 1.1 中. 注意结果的精度随着我们减小 h 而改进，但只到某一 h 值为止，此后结果反而更差. 这是因为计算机中的算术运算只有有限的精度(对于 BASIC 中的单精度变量，其精度为十进制数 5— 6 位)，因此求得的近似公式分子中二项之差，当 h 很小因而 f_1 和 f_{-1} 相差很小时，就会发生很大的"舍入"误差. 例如，若 $h=10^{-6}$, 则

$$f_1=\sin(1.000001)=0.841472\ ;\quad f_{-1}=\sin(0.999999)=0.841470\ ,$$

因此，若取六位有效数字，则 $f_1-f_{-1}=0.000002$. 代入(1.3 b)后得 $f'\approx 1.000000$, 这个结果很不好. 但是，如果我们取 10 位有效数字进行算术运算，那么

$$f_1=0.8414715251; f_{-1}=0.8414704445\ ,$$

根据这些数据从(1.3b)式算出 $f'\approx 0.540300$, 这个结果还说得过去. 从这个意义上说，数值微分是一个具有固有不稳定性的过程($h\to 0$ 时没有确定的极限)，因此在实行时必须小心.

表 1.1 计算 $d\sin x/dx|_{x=1}=0.540302$ 的误差

h	对称3 点 (1.3b)式	前向 2 点 (1.4a)式	后向 2 点 (1.4b)式	对称 5 点 (1.5)式
0.50000	0.022233	0.228254	−0.183789	0.001092
0.20000	0.003595	0.087461	−0.080272	0.000028
0.10000	0.000899	0.042938	−0.041139	0.000001
0.05000	0.000225	0.021258	−0.020808	0.000000
0.02000	0.000037	0.008453	−0.008380	0.000001
0.01000	0.000010	0.004224	−0.004204	0.000002
0.00500	0.000010	0.002108	−0.002088	0.000006
0.00200	−0.000014	0.000820	−0.000848	−0.000017
0.00100	−0.000014	0.000403	−0.000431	−0.000019
0.00050	0.000105	0.000403	−0.000193	0.000115
0.00020	−0.000163	−0.000014	−0.000312	−0.000188
0.00010	−0.000312	−0.000312	−0.000312	−0.000411
0.00005	0.000284	0.001476	−0.000908	0.000681
0.00002	0.000880	0.000880	0.000880	0.000873
0.00001	0.000880	0.003860	−0.002100	0.000880

通过把 f 同离 $x=0$ 更远的格点联系起来，可以对 3 点公式(1.3b)作改进. 例如，应用(1.2)式容易证明，下述"5 点"公式:

$$f'\approx\frac{1}{12h}\,[f_{-2}-8f_{-1}+8f_1-f_2]+O(h^4)\qquad(1.5)$$

消去了 Taylor 级数中直到四阶的各阶导数. 用这种方法计算导数实质上是假定在 5 点区间 $[-2h, 2h]$ 上 f 被一个四次多项式很好地逼近. 它虽然需要更多的计算量，但得到的近似也

精确得多，这由表1.1可以看出．实际上，用(1.5)式以大约大10倍的步长就可以得到与(1.3b)式相当的精度．这在必须把多个f值储存在计算机内时可能是重要的，因为更高的精度就允许f排得更稀疏一些，从而节省存储空间．但是，因为(1.5)式要比(1.3b)式进行更多的数学运算，并且各项(既有正系数又有负系数)之间有很大程度的相互抵消，精度问题在h值更大时就显露出来．

取(1.2)式的适当组合可以构造出更高阶导数的公式．例如，容易看出

$$f_1-2f_0+f_{-1}=h^2f''+O(h^4), \tag{1.6}$$

因此，准确到h^2量级的二阶导数的近似公式为

$$f''\approx\frac{f_1-2f_0+f_{-1}}{h^2} \tag{1.7}$$

准确到h的更高次的f的各阶导数的差分公式可以直接推出．表1.2汇集了一些4点和5点表达式．

表1.2 各阶导数的4点和5点差分公式

	4点	5点
hf'	$\pm\frac{1}{6}(-2f_{\mp1}-3f_0+6f_{\pm1}-f_{\pm2})$	$\frac{1}{12}(f_{-2}-8f_{-1}+8f_1-f_2)$
h^2f''	$f_{-1}-2f_0+f_1$	$\frac{1}{12}(-f_{-2}+16f_{-1}-30f_0+16f_1-f_2)$
h^3f'''	$\pm(-f_{\mp1}+3f_0-3f_{\pm1}+f_{\pm2})$	$\frac{1}{2}(-f_{-2}+2f_{-1}-2f_1+f_2)$
$h^4f^{(iv)}$		$f_{-2}-4f_{-1}+6f_0-4f_1+f_2$

习题1.1　用任何一个能够以解析方法算出各阶导数的函数，考察表1.2中各个公式在不同的h值下的精度．

1.2 数值求积

求积问题是求f在两个积分限$a<b$之间的定积分．我们很容易把a,b两点之间的区间分为偶数个间隔，即

$$N=\frac{(b-a)}{h}$$

为偶数．于是只要推出从$-h$到$+h$的积分公式就够了，因为这个公式累用多次就得到

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x=\int_a^{a+2h}f(x)\mathrm{d}x+\int_{a+2h}^{a+4h}f(x)\mathrm{d}x+\cdots+\int_{b-2h}^{b}f(x)\mathrm{d}x \tag{1.8}$$

我们下面要讨论的一切求积公式(所谓闭合的Newton－Cotes型求积公式)的基本思想，是用一个可以精确求积的函数在$-h$和$+h$之间逼近f．例如，分别考虑区间$[-h,0]$和$[0,h]$，并且

假设 f 在每一个区间里是线性的(见图1.1).这种内插造成的误差之量级为 h^2f''，因此近似积分值为

$$\int_{-h}^{h} f(x)\mathrm{d}x = \frac{h}{2}\,(f_{-1}+2f_0+f_1)+O(h^3), \tag{1.9}$$

这就是人们熟知的梯形法则.

Taylor级数(1.1)可以给出对 f 的一个更好的内插，从而得到一个更好的近似. 应用关于 f' 和 f'' 的差分公式(1.3b)和(1.7)，对 $|x|<h$ 可得

$$f(x)=f_0+\frac{f_1-f_{-1}}{2h}\,x+\frac{f_1-2f_0+f_{-1}}{2h^2}\,x^2+O(x^3), \tag{1.10}$$

对它积分得出

$$\int_{-h}^{h} f(x)\mathrm{d}x = \frac{h}{3}\,(f_1+4f_0+f_{-1})+O(h^5). \tag{1.11}$$

这是 Simpson 法则，可以看出，它的精度要比梯形法则高两阶． 注意，实际误差要比简单地根据(1.10)式预期的误差小，因为 x^3 项对积分没有贡献. 按照(1.8)式累用这个公式，得

$$\int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \frac{h}{3}\,[f(a)+4f(a+h)+2f(a+2h)+4f(a+3h)+\cdots+4f(b-h)+f(b)] \tag{1.12}$$

作为一个例子，下面这个 BASIC 程序[1] 应用 Simpson 法则根据输入的 $N=1/h$ 值计算

$$\int_0^1 e^x\mathrm{d}x = e-1 = 1.718282.$$

(这种插在正文中的程序的源代码不包含在书后所附的软盘上，但是很容易用键盘送进读者的计算机.)

```
5   DEF FNF(X)=EXP(X)                           '被积函数
10  EXACT=EXP(1)-1
15  INPUT "Enter N (even,>=2)",N%
20  IF N%<2 THEN STOP
25  '
30  H=1/N%
35  SUM=FNF(0)                                  'X=0 的贡献
40  FAC=2                                       'Simpson 法则中的因子
45  '
50  FOR I%=1 TO N%-1                            '对格点进行循环
55     IF FAC=2 THEN FAC=4 ELSE FAC=2           '改换因子
60     X=I%*H                                   '该点的 X 值
65     SUM=SUM+FNF(X)*FAC                       '对积分的贡献
70  NEXT I%
75  '
80  SUM=SUM+FNF(1)                              'X=1 的贡献
85  INTEGRAL=H*SUM/3
90  DIFF=EXACT-INTEGRAL
95  PRINT USING "N=#### ERROR=#.######";N%,DIFF
100 GOTO 15                                     '取另一N%值
```

① 为了方便读者读懂程序，我们把正文中程序内的注解都译成中文. 将这些源程序送入计算机时，这些注解不必送入. ——译者注.

这个程序对不同的 N 值的运行结果，连同应用梯形法则所得到的数值，都列在表 1.3 中．高阶公式带来的改进是明显的．注意结果是稳定的，意即随着 N 变得很大和格子间隔 h 变小会得到一个确定的极限．舍入误差在这个例子中不重要，因为所有的 f 值都以同样的符号进入求积公式，这同数值微分的例子中的情况相反．

表 1.3 计算 $\int_0^1 e^x dx = 1.718282$ 的误差

N	h	梯形法则 (1.9)式	Simpson 法则 (1.12)式	Bode 法则 (1.13b)式
4	0.2500000	−0.008940	−0.000037	−0.000001
8	0.1250000	−0.002237	0.000002	0.000000
16	0.0625000	−0.000559	0.000000	0.000000
32	0.0312500	−0.000140	0.000000	0.000000
64	0.0156250	−0.000035	0.000000	0.000000
128	0.0078125	−0.000008	0.000000	0.000000

求积时一个重要的问题是，为了把积分计算到给定的精度，h 必须小到什么程度．虽然对我们讨论过的公式能够推出严格的误差限，但实际中最简单的做法是，以越来越小的 h 值重复进行计算，而观察结果的变化．

在 Taylor 展开式中保留更多的项数以对格点之间的 f 值进行内插，同时对各阶导数相应采用更好的近似，可以导出更高阶的数值求积公式．用三次多项式和四次多项式进行内插所得出的对 Simpson 法则的推广分别叫做 Simpson $\frac{3}{8}$ 法则和 Bode 法则，它们是：

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \frac{3h}{8}[f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3] + O(h^5); \tag{1.13a}$$

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = \frac{2h}{45}[7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4] + O(h^7). \tag{1.13b}$$

应用Bode 法则的结果也列在表 1.3 中，它带来的改进是明显的，虽然是以更复杂的计算为代价．(注意：为了能够用这个方法，N 必须是 4 的倍数．)人们也许会以为，用次数很高的多项式作内插所得出的求积公式将会更为合用，但实际情况并非如此．这样的多项式容易发生激烈的振荡，从而导致不准确的内插．此外，在高阶公式中，不同格点上的 f 值前面的系数既可能带正号也可能带负号，这使舍入误差成为一个潜在的问题．因此，通常比较保险的改进精度的方法，是使用低阶方法并使 h 值小一些，而不是用高阶方法．如果我们放弃坐标格点等间隔的要求，可以导出精度达到很高阶的求积公式，这些将在第四章中讨论．

习题 1.2 用任何一个能够用解析方法计算其定积分的函数，考察上面讨论的各种求积方法在不同 h 值下的精度．

在应用上面讨论的数值求积公式时，必须注意若干事项并且具备某些常识．例如，上限很大的积分最好是通过一个变量替换来处理．比如用 Simpson 法则计算

$$\int_1^b dx \quad x^{-2} g(x),$$

其中 $g(x)$ 在 x 值很大时是常数，这个积分将导至一个有限和，它在 b 变大但 h 保持固定时收敛得很慢(因而要用很长的时间计算!)．但是，将积分变量换为 $t=x^{-1}$，则积分变为

$$\int_{b^{-1}}^1 g(t^{-1})dt,$$

它可以用我们讨论过的任何一个公式计算．

使简朴的求积公式失去意义的可积奇点也可以用下述简单方法处理．例如，

$$\int_0^1 dx(1-x^2)^{-1/2} g(x)$$

在 $x=1$ 有一个可积奇点(如果 g 在该点正则)，积分值是一个有限数．但是，由于 $f(x=1)=\infty$，上面讨论的各个求积公式给出一个无穷大结果．把积分变量换为 $t=(1-x)^{1/2}$ 可以得到准确的结果，这时积分变为

$$2\int_0^1 dt(2-t^2)^{-1/2} g(1-t^2),$$

它可以用以上的求积公式逼近而不会遇到麻烦了．

可积奇点也可以通过推导出专门对它们适用的公式来处理．设我们要计算

$$\int_0^1 f(x)dx=\int_0^h f(x)dx+\int_h^1 f(x)dx,$$

其中 $f(x)$ 在 $x=0$ 附近的行为近似于 $cx^{-1/2}$，c 是一个常数．从 h 到 1 的积分是正则的，容易处理，而从 0 到 h 的积分则可以近似为 $2ch^{1/2}=2hf(h)$．

习题 1.3 写一个程序，用上面讨论过的求积公式之一计算定积分

$$\int_0^1 t^{-2/3}(1-t)^{-1/3}dt=2\pi/\sqrt{3},$$

并且考察它对不同 h 值的精度．(提示：把积分域分为两部分，在每个积分中作不同的变量替换以处理奇点)．