

中学生课外读物



科学计算入门

刘学宗 著



人民教育出版社

中学生课外读物
现代科学技术丛书

科学计算入门

刘学宗 著

人民教育出版社

中学生课外读物
现代科学技术丛书
科学计算入门
刘学宗 著

人民教育出版社出版
新华书店总店科技发行所发行
北京市房山区印刷厂印装

开本787×1092 1/32 印张4.375 字数87,500

1990年3月第1版 1990年3月第1次印刷

印数1—900

ISBN 7-107-10393-8

G·1487 定价1.50元

内 容 提 要

本书是介绍微型计算机在科学计算方面应用的通俗读物。简明地介绍了科学计算的基本知识；通过有趣的实例的具体分析，深入浅出地描述了科学计算的全过程；有选择地扼要地讲解了一些常用的计算方法。

本书内容比较全面，概念清晰，通俗易懂，可作为高中学生的课外读物，也可供中学计算机课教师，以及具有高中文化程度的企事业单位的干部和工人参考。

前 言

青少年朋友们，你们可能已经学会了某种计算机语言，或许是BASIC语言吧。或许还掌握了程序设计的基本技巧，编写过几个规模不大的程序，甚至还初步使用过微型计算机。计算机对你们已经不陌生了。再看看你们周围的朋友们，他们有的用微型计算机做了很多事情。如，统计同学们的考试成绩，编排全校的课程表，现场报告运动会的成绩和名次，以及编写饶有兴趣的智能游戏程序等等。同时使用打印机能输出排列整齐的表格，使用监视器能显示出色彩鲜艳的曲线和图形，这一切是多么引人入胜呀！

但是，你们可能要问，到底使用微型计算机能够做些什么呢？这本小册子不打算全面介绍微型计算机的所有用途，而只是想打开一扇微型计算机应用之门——微型计算机在科学计算方面的应用。在这本小册子中，作者介绍给大家一些有关科学计算的基本知识。

在古代，人类最初使用的计算工具是自己的手指，用手指只能表示数目不大的数字，进行十分简单的运算。后来，古代的埃及人发明使用沙盘和石子计数和运算；我们的祖先发明了算筹、算盘等计算工具，这就大大地增强了表达数字的能力，并且可以进行比较复杂的运算了。到十七世纪，欧洲人制造出机械式计算机。到本世纪四十年代，世界上第一

合现代的数字电子计算机诞生了。随着电子技术的不断进步，一代一代的电子计算机制造出来了。作为人类用于进行数字运算的工具，几千年来，确确实实取得了惊人的进步。然而，发明电子计算机的意义还不只是能够进行数字的运算，它还有逻辑判断、逻辑运算的能力，还有极其巨大的存储信息的能力，以及极快地运算速度，所以，电子计算机能够做许多复杂的工作。有些人把电子计算机的功能与人类大脑相比拟，因此电子计算机又有“电脑”之称，这是一个非常贴切的名字。目前，电子计算机已经深入到社会的每个角落，极大地推动着社会现代化的进程。特别是电子计算机的微型化和高效能化的统一，更加速了电子计算机的普及。因此，比较早，比较好地掌握微型计算机，比较多地熟悉微型计算机的用途，对于青少年朋友们献身祖国的四化建设事业是有很大帮助的。

现在，人们通常把计算机的应用分成二大类，一类是数值应用，也称为科学计算应用；另一类是非数值应用，有时也称为商业管理应用。这二类应用的共同特点都是把计算机作为工具，解决实际的应用问题。不同之处在于，所解决问题的类型不同。二类应用的数学基础和所使用的数学方法有着很大的差异。同时，对于计算机语言、计算机软件系统，甚至对于计算机本身都有着不同的要求。那么，什么是数值应用，什么是非数值应用呢？一般地说，计算机的数值应用是指，使用适当的数值方法，解决能够用数学公式描述的实际问题，包括自然科学中，工程技术中，甚至社会科学中的问题。简单一些的像计算采伐下的圆木体积，估计建筑施工

中需要填挖的土方量，土地测绘中的高程，面积计算等等。复杂一些的有计算导弹和卫星的飞行轨道，计算水坝和大型建筑各部位的受力情况，用数值方法进行天气预报，还有计算分子的结构，以及其他举不胜举的大量例子。由于这一类应用大都出现在科技计算中，所以也常常称为计算机的科学计算应用。至于计算机的非数值应用，则是一个更为广泛的领域，涉及到计算机在社会生活各个方面的应用。例如，政府系统，银行系统，公路、航空等运输系统，医院系统的管理，图书和情报的检索，各种仪器设备、工矿设备的自动控制，以及语言翻译，智能游戏，辅助设计等等。由于计算机的非数值应用主要出现在商业管理中，所以有时称为商业管理应用。计算机的这二类应用很不相同，但它们之间并没有一条截然的分界线。反而，现在的一种发展趋势是互相渗透，互相结合，发展高效能的、广泛适用的巨型软件系统。

早期的电子计算机几乎全部用于科学计算。后来，随着计算机技术的发展和人们对计算机能力的理解的深入，逐步开拓出新的应用领域，也就是计算机的非数值应用。迄今，世界上现有的计算机中的绝大部分都用于商业管理。但这并不是说，科学计算应用就不重要了，实际上，科学计算在人类利用原子能，征服宇宙空间和制造飞机、巨型轮船，建造大型土木工程等方面，已经立下汗马功劳。同时，在自然科学方面，也使许多的崭新学科应运而生。这些学科通常以“计算”这个词冠首，如，计算数学，计算力学，计算物理，计算化学等等。从而在许多自然科学领域中形成了理论研

究，实验研究和使用计算机进行数值计算，三种研究手段相互独立又相互补充的格局。这是人类认识客观世界的方法论的巨大进步。目前，世界上许多国家的大型实验室都拥有每秒钟可以进行几千万次算术运算的最先进的计算机，科学家们正在使用它们解决更为复杂的实际问题，和发展着科学理论，为工程技术的进步和科学的发展，做着不懈的努力。今后，人类必将在各个领域，愈来愈多地把使用计算机进行数值计算作为认识自然和征服自然的强有力的手段，充分发挥它的省时间、省经费、省人力和适用性广泛的优点，加速科学的进步和社会生产力的发展。总之，计算机的科学计算应用一直是电子计算机的非常重要的应用之一。

由于微型计算机具有体积小、价格低、使用方便、易于维修等特点，尤其是近年来微型计算机的能力日益增强，原来必须要用中型电子计算机解决的问题，现在可以在微型计算机上解决了。所以，最近人们十分重视使用微型计算机开展科学计算的工作。

写这本小册子的目的就是为了发展和提高青少年朋友们使用微型计算机进行科学计算的能力，展示给青少年朋友们一个比较完整的关于计算机科学计算应用的面貌。这本小册子包括三部分内容，首先介绍一些基本知识，如，怎样对一个问题进行分析和组织，什么是算法，以及流程图的功能等等。然后，介绍一些简单的数值计算例子，通过这些例子说明一些有关数值计算的基本知识，以及怎样对一个问题建立数学模型，画出流程图，编写出程序和输出结果。最后，用比较多的篇幅介绍一些常用的数值算法。掌握了这

些常用的数值算法，就可以解决更多的比较复杂的实际问题。

在这里，作者对中国科学院计算中心李荫藩同志表示深切感谢。他一直关心着这本小册子的写作，仔细地阅读了全书的手稿，提出了许多的宝贵建议并给作者很多的鼓励和帮助。

目 录

前 言	1
一、一些基本知识	1
(一)分析和组织	1
(二)算法	6
(三)流程图	7
二、简单的数值计算	19
例1 关于舍入误差	20
例2 使用近似公式	24
例3 多项式计算	26
例4 温度转换	29
例5 气体定律	30
例6 圆台体积	34
例7 圆锥体积	38
例8 平面三角形计算	41
例9 球面三角形计算	47
三、常用的数值算法	61
(一)代数方程的求根	61
1. 二分法	63
2. 逐次近似法	66
3. 牛顿(Newton)法	70

(二) 面积的近似计算	74
4. 矩形公式	75
5. 梯形公式	77
6. 辛普生(Simpson)公式	79
7. 蒙特·卡罗(Monte Carlo)方法	81
(三) 求解线性代数方程组	85
8. 高斯(Gauss)消去法	87
9. 追赶法	90
10. 高斯-赛德尔(Gauss-Seidel)迭代法	94
11. 逐次超松弛方法	95
(四) 插值和拟合	97
12. 线性插值和二次多项式插值	98
13. 样条(Spline)函数插值	102
14. 最小二乘法	106
(五) 其他	111
15. 频数分布表、均值和方差	111
16. 线性回归和相关	115
17. 单纯形算法	120

一、一些基本知识

在开始为一个实际问题选择数值方法，编写程序，并在微型计算机上应用这个程序之前，先了解一些有关的基本知识是十分必要的。掌握这些基本知识，会使你在考虑问题时有条有理、组织程序时严谨无误、给出的结果准确明了。在这一节中将介绍一些对于分析问题、设计流程图十分有用的基本知识。

(一)分析和组织 一个实际问题往往是比较复杂的，枝枝丫丫的，怎样用计算机解决，乍看起来难以下手。但是，通过仔细观察就可以发现，一个实际问题往往又是由几个比较小的，相互联系的问题组成的。因此，我们可以把求解一个复杂问题的全过程分解成几个比较小的阶段，对每一个阶段，既比较容易，又能够精确地加以描述。这叫做问题的分析。可是，这种分析的办法并不是唯一的，可以有多种，我们自然希望找到一种“最优的”分析。这里，所谓“最优的”是指为解决这个问题所花费的计算机时间最少。找出最优的分析，就叫做组织。具体一点说，在动手解决实际问题前，要认真考虑下面几个问题：

——要解决的问题是什么？也就是说，我们想用计算机做些什么？

- 问题由哪些主要部分组成？
 - 有哪些信息资源可以使用？
 - 有什么样的约束条件？
- } 问题的分析

此外，由于最终的目的是要得到问题的结果，因此必须考虑下面二个关于怎样对结果进行处理的问题。

——结果的详尽程度如何？这就是说，对于不同的使用目的，不同的使用者，需要给出不同详尽程度的结果。

——以什么形式给出结果？这就是说，是以让人们直接阅读的形式（如，显示出或打印出的数据，图表，曲线等），还是以提供给计算机做进一步的处理的形式（如，记录在磁带上或磁盘上）。

正如在前言中所说的那样，计算机不仅可以解决以数字运算为主的问题，而且也能解决以逻辑判断，逻辑运算等非数字运算为主的问题。因此对一个实际问题，我们首先要区分它的主要特征是以数字运算为主，还是以非数字运算为主。对于这样二类具有不同特征的问题，问题的分析方法也有所不同。对于数字运算型问题，问题的分析和组织的主要部分是在形成数学模型的过程中完成的。可以说，发展一个数学公式就是分析的一个例子，简化一个数学描述就是组织的一个例子。而在非数字运算型问题中，虽然有一些简单的计算，但不是主要的，主要的是信息的传递和处理。对这一类问题，分析和组织往往是比较复杂的。在这本小册子中，不准备详细地讨论。

下面举一个数字运算型问题的例子，说明怎样进行问题的分析和组织。

在进行任何一项土木工程建设以前，都要对土地进行测量。如何使用测量的有关数据计算三角形的面积，以及三角形的边、角参数，是一个很有趣，而又实用的问题。这个问题叫做平面三角形计算问题。在航海和航空作业中，也会遇到类似的问题。图1-1给出一个任意平面三角形的示意图。三个顶点分别记为A、B和C，它们的对边分别记为 a 、 b 和 c 。

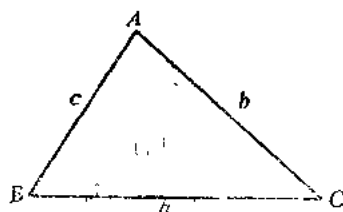


图1-1 平面三角形示意图。

在实际测量时，由于种种地形上的困难，不可能同时得到上述三角形的三个角和三个边六个数据。另一方面，为了确定三角形的面积等参数，也无需知道所有的六个数据。现在提出一个简单的问题，在知道三个数据的情况下，怎样确定这个三角形的面积？

先让我们回忆一下在中学的代数和几何中已经学到的四个计算三角形面积的公式、把面积记作 Δ ，半周长记作 P ，边长分别记作 a 、 b 、 c ，对角分别记作 A 、 B 、 C ， a 边上的高记作 h 。这四个公式如下：

$$\Delta = \frac{1}{2} ah, \quad \text{①}$$

$$\Delta = \frac{1}{2} ab \sin C, \quad \text{②}$$

$$\Delta = \sqrt{P(P-a)(P-b)(P-c)},$$

$$\text{其中 } P = \frac{1}{2}(a+b+c), \quad (3)$$

$$\Delta = \frac{c^2 \sin A \sin B}{2 \sin(A+B)}. \quad (4)$$

下面分析一下这个问题：

问题 已知三角形边、角中的三个数据，求三角形的面积。

问题的分析

(1) 有四个计算三角形面积的公式。

(2) 边、角中给定三个数据的可能组合有六种。

(I) 边/边/边，记作 $\langle a, b, c \rangle$ ；

(II) 角/边/角，记作 $\langle A, c, B \rangle$ ；

(III) 边/角/角，记作 $\langle c, B, C \rangle$ ；

(IV) 边/角/边，记作 $\langle b, A, c \rangle$ ；

(V) 边/边/角，记作 $\langle b, c, B \rangle$ ；

(VI) 角/角/角，记作 $\langle A, B, C \rangle$ 。

(3) 前四种情况有唯一解。

对(I)使用公式③；

对(II)使用公式④；

对(III)首先由 $A+B+C=180^\circ$ ，求出角A，然后使用公式④；

对(IV)使用公式②。

(4) 情况(V)的解不一定是唯一的；

当 $c \leq b$ 时，可以唯一确定边长a(图1-2示)，

$$a = c \cos B + \sqrt{b^2 - c^2 \sin^2 B}.$$

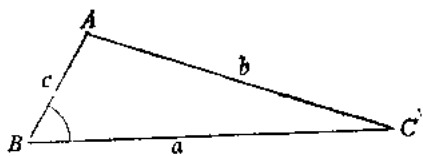


图1-2 $c \leq b$ 时的三角形示意图。

当 $c > b$, 且 $b = c \sin B$ 时, 有唯一解(参看图 1-3), $a = c \cos B$ 。

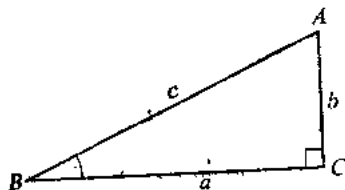


图1-3 $c > b$ 且 $b = c \sin B$ 时的三角形示意图。

当 $c > b$, 且 $b > c \sin B$ 时, 有二个解(参看图 1-4), 一大一小,

$$a_{\text{大}} = c \cos B + \sqrt{b^2 - c^2 \sin^2 B},$$

$$a_{\text{小}} = c \cos B - \sqrt{b^2 - c^2 \sin^2 B}.$$

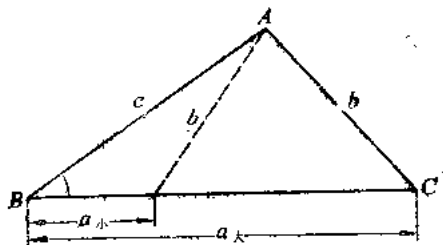


图1-4 $c > b$ 且 $b > c \sin B$ 时的二种可能三角形的示意图。

当 $c > b$, 且 $b < c \sin B$ 时, 不能构成封闭的三角形, 因此无解。

对于以上的情况, 先计算出另一边长, 知道了三个边长, 再用公式③计算面积。

(5) 情况(VI)具有无穷多组解。

通过这个例子可以看出, 对数字运算型问题的分析, 与形成数学模型给出数学公式是一致的。选择最合适的数学公式就是问题的组织。如果你们有兴趣的话, 可以对下面的问题进行分析并组织, 已知三角形边、角中的三个数据, 求出剩下的未知的边、角数据。

(二) 算法 算法是一个专用的名词, 有着科学的定义。然而, 人们平时常常把算法与方法混在一起使用。在今天计算机的使用日益广泛的情况下, 对于算法这个概念有一个比较准确的理解还是很有必要的。

算法在英文中写作 Algorithm, 来自公元九世纪的一位数学家 Al-Khowarizmi 的名字。这位数学家给出了关于算法的规则。自本世纪初以来, 人们一直在研究着算法的一般特点和性质。

一般来说, 一个算法就是规定一系列运算的指令表, 对于给定的一类问题能够给出答案。在这个指令表中, 有计算指令, 也有判断性的逻辑指令等等, 并且保证经过有限次运算得到结果。虽然这个说法不十分精确, 但是能够反映出关于算法的一般想法, 并且也已在数学中得到应用。至于从理论数学得到的更精确的定义, 这里就不叙述了。

在设计一个算法时, 应该注意到这个算法必须具有以下