目　录

第一章　计算物理学概况

§1. 计算物理学的内容……（1）

§2. 计算物理学的性质和任务……（3）

§3. 计算物理学所用方法的特点……（5）

§4. 目前国内外发展简况……（6）

第二章　几个简单计算和计算正确性的检验

§1. 电场强度和超越方程根的近似计算……（8）

§2. 平均值、均方差和气垫实验数据处理…（20）

§3. 氢气在低温时定容热容量……（23）

§4. 虚宗量贝塞尔函数的计算……（27）

§5. 泰勒展开近似……（35）

§6. 计算正确性的检验……（42）

第三章　电阻网络和线性、非线性方程组的数值解法

§1. 电路中各电阻上的端电压和线性代数方程组的直接法……（45）

§2. 非线性方程组的牛顿法和下降法……（55）

第四章　静电场、电子线路、热传导和扩散

§1. 两个点电荷的电场中的电位……（70）

§2. 点电荷系的电场中的电位和定积分的近似计算……（73）

§3. 振荡积分的菲隆方法……（86）

§4. RC回路中电容器的放电和欧拉近似法……（94）
§5. 振荡电路和改进的欧拉法及龙格—库塔法……（96）
§6. 求解刚性常微分方程初值问题的特雷纳方法……（106）
§7. 误差、误差改善与误差估计……（118）
§8. 传热导与扩散过程的差分法……（123）
第五章 薛定谔方程及其解法
§1. 一维方势阱的计算……（136）
§2. 粒子在辏力场中运动和诺默若夫方法…（147）
第六章 薛定谔方程的矩阵解
§1. 本征值方程的矩阵表示……（154）
§2. 雅可比方法及其收敛性……（157）
第七章 实验数据处理
§1. 插值法……（171）
§2. 样条函数、插值和数值求积……（184）
§3. 实验数据的曲线拟合—最小二乘法……（198）
第八章 蒙特卡罗方法
§1. 蒙特卡罗方法的基本思想、特点及其局限性……（211）
§2. 蒙特卡罗方法计算积分……（224）
§3. 蒙特卡罗方法在粒子输运等问题中的应用……（231）
第九章 谐波分析与快速傅里叶变换
§1. 引言……（239）

§2. 离散傅里叶变换……（240）
§3. 快速傅里叶变换……（242）
§4. 快速傅里叶变换计算步骤举例……（245）
第十章 加速求积法在计算环形电流的势和场中的应用
§1. 引言……（264）
§2. 公式推导……（265）
§3. 加速求积法及其应用……（269）
§4. 数值例子……（270）
第十一章 多重积分的数论网格法
§1. 引言……（275）
§2. 求积公式……（276）
§3. 框图和程序……（283）
§4. 应用实例……（286）
第十二章 福克—普朗克方程的数值解
§1. 基本方程和定解条件……（293）
§2. 数值解法……（299）
§3. 计算结果及讨论……（306）
第十三章 轴对称自由边界磁流体平衡
§1. 隐式交替方向加三段迭代法……（310）
§2. 积分法……（320）
§3. 直接法……（326）
第十四章 一类常微分方程边值问题的数值解法
§1. 基本方程和边界条件……（340）
§2. 数值解法……（341）
第十五章 线性非线性撕裂模演化的数值研究
§1. 线性双撕裂模演化的数值方法……（348）

§2. 撕裂模非线性演化的数值解法…… (361)
上机实习题…… (377)

第一章　计算物理学概况

§1. 计算物理学的内容

计算物理学起源于第二次世界大战中美国研制核武器的工作，它是随着电子计算机的出现和发展而迅速发展起来的一门新兴的边缘学科，是介于理论物理与实验物理之间的一个新分支。顾名思义，计算要借助电子计算机，要选用计算方法，所以计算物理学是以电子计算机为工具，应用各种数学方法解决物理问题的应用科学，是物理、数学、计算机三者相结合的产物。计算物理学的出发点是物理问题，计算机是工具，计算方法和技巧是手段，归宿点是为了解决物理问题。

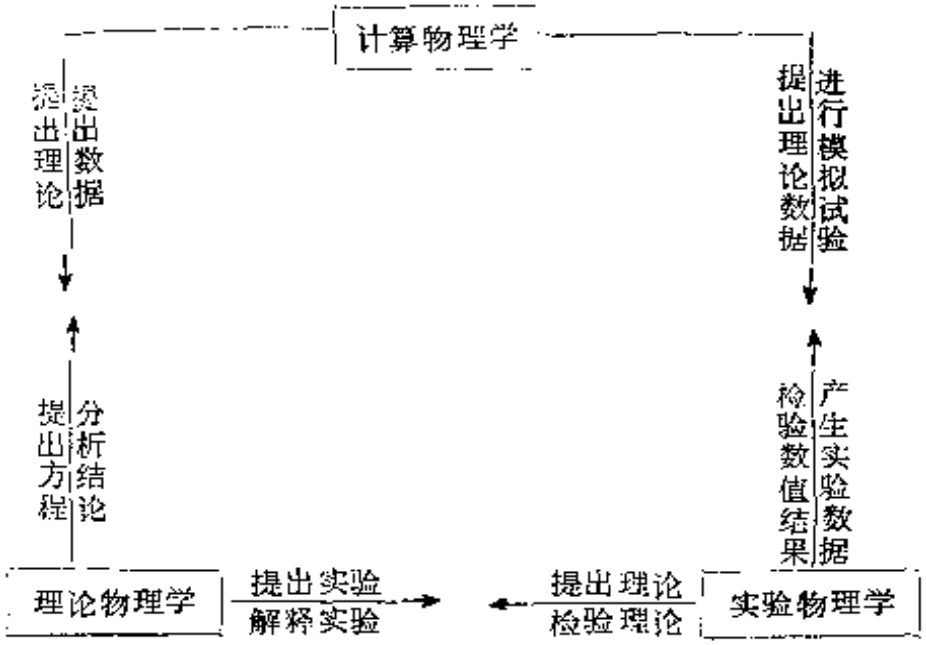
我们知道，传统的物理学（包括力学、天文学、物理学、化学等）分为理论物理和实验物理（包括应用物理）两大分支。理论物理是从一系列的基本物理原理（例如质量守恒、能量守恒、动量守恒、角动量守恒、电荷守恒、万有引力规律、电荷的吸引与排斥规律以及电磁感应规律等）出发，列出数学方程，并用传统的数学分析方法求出显式的解析解，利用这些显式解析解所得出的结论与实验和观测结果对比，用以解释已知的自然现象，并预测未来的发展。实验物理则以实验和观测为手段来发现新的物理现象，为理论物

理提供新的理论规律的素材，并检验理论物理推论的正确程度及应用范围等等。

然而自然界的现象是极其复杂的，很多实际问题用传统的物理学是难以解决或者无法解决的，所以要发展计算物理学。例如，由于天体物理学的发展，本世纪卅年代开始研究核能作为恒星能源以及恒星的演化问题。对这个问题，从实验物理的角度要观测多少亿年，而且在实验室内要放一个太阳也是不可能的；从理论物理的角度看，这要牵涉到核能释放、中微子输运、流体运动、热的辐射、传导与对流、重力场的约束等复杂的物理机制，虽然方程可列出一大片，但很难求解。四十年代初，在核武器的研制过程中，又遇到了极其复杂的理论和技术上的问题，如在原子弹的设计过程中碰到几何形状、尺寸大小、材料分配等一系列问题。这些问题列出的方程，都是极其复杂的非线性方程组，用传统的分析方法求解是根本不可能的。因此大量复杂的计算不得不乞求于电子计算机，这样便推动了计算机的发展。计算机的发展反过来又促进了计算物理学的产生和发展。

因此，可以形象化地说，计算物理学是用现代大型快速计算机武装起来的理论物理学和“纸上的”实验物理学。

所以，可以认为当前物理学的发展，在某种意义上，是在三个分支上向前发展：理论物理、实验物理和计算物理。虽然这三大分支是互相联系，互相依赖，相辅相成的，但也有相对的独立性。它们三者间的相互关系可用下面的图来说明。



§2. 计算物理学的性质和任务

由于计算物理学使用了计算机这一现代化的计算工具，所以从原则上说，凡是局部瞬时的物理规律为已知，或已被作为假设，就可研究大范围的长时间的物理现象。具体地说，大范围的数据靠计算机的大存贮量来记录，瞬时过程积累为长期过程靠计算机的高速运算来模拟。这样，人们便可从已知或已被假设的局部瞬时的物理规律，得出大范围长时间物理现象的变化过程。这便是计算物理学要进行工作的领域。

首先，以天体力学为例。我们知道三体问题（日、地、月）和多体问题（太阳系的行星和卫星）至今还没有显式的解析解。从局部瞬时的物理规律看来，这牵涉到的只是牛顿运动定律和万有引力定律等。这些规律都是已知的，方程组早已列出，问题只在于求解。因此，这是计算物理学可以起重要作用的领域。事实上，登月飞船的轨道以及一般的导弹的轨道选取和及时控制，都是通过快速计算机来进行的。

其次，以流体力学（包括空气动力学、气象学、海洋学等）为例。牵涉到的局部瞬时的物理规律是质量守恒、能量守恒、动量守恒以及物质状态方程（压强、温度和密度的关系），这些局部瞬时的物理规律都是已知的，但由于初始条件和边界条件的不同，情形千变万化，这组偏微分方程的定解问题是无穷无尽的。但从原则上说，这些问题可以利用电子计算机来求解。气象部门大量应用大型快速计算机就是明显的例子。

再以中子输运为例。在原子反应堆的设计与运行过程中，要研究千千万万个中子与特定原子核发生碰撞问题，其问题可用微分积分方程—Boltzmann 方程来描述。但由于堆内物质的分布不同，边界不规则，要解这种微分积分方程是极其困难的。但是，由于局部瞬时的物理规律已知，例如碰撞概率，碰撞后可能产生的散射、吸收以及引起裂变等概率，都可通过实验给出，因而要求出全局和长期的物理过程，这正是计算物理学的研究领域。

许多重大科技问题都是综合性很强的课题，例如天体物理学、受控核聚变与等离子体物理等都牵涉到许多物理过程，包括流体运动、粒子输运、热传导、核反应、电磁效应、重力影响等等。但只要局部瞬时的物理规律已知，极其复杂的过程也可以利用大型快速计算机来进行过程模拟，并求出大范围长时间的发展过程。

所以，可以说计算物理学已广泛地应用到自然科学研究的各个领域，工程技术的各个部门，它是一门与国民经济、科学研究、国防建设有密切联系，解决实际问题的应用科学。

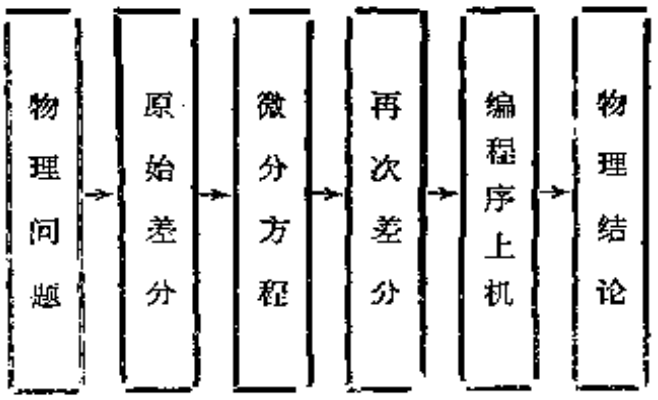
§3. 计算物理学所用方法的特点

计算物理学所使用的方法与纯粹研究计算方法的工作者所欣赏的方法并不一定都是相同的。它一方面吸取专门从事研究计算方法的工作者所创造出来的好办法，另一方面有结合需要解决物理问题本身所创造出来的富有特色的实用的计算方法。其特点大致如下：

（一）利用某些直观的物理现象，加上逻辑推理、判断和实验，而不拘于数学上的严格证明创造出的新的计算方法。例如计算流体力学中的冯·诺伊曼“人为粘性法”，解非定态中子输运方程的“人为次临界法”等。

（二）有时采用较简单可靠的物理意义清楚的算法，对复杂物理问题本身作种种近似。如非线性问题用一系列线性化的问题去逼近；非均匀介质问题用一批小的均匀介质的组合去逼近；变系数问题用一系列常系数问题去逼近；不规则几何形体用一批规则的几何形体的组合去逼近等等。

（三）计算物理以物理问题为出发点和归宿点，因此其思维方法有时与习惯作法有所不同。人们习惯的作法，常见的模式是：



由于计算机的计算是离散的数字计算。所以，可将上述过程中的中间两步省略。这种思维方法，取名为“天然差分”。如蒙特卡罗计算对物理问题直接模拟所采用的方法便是。

（四）计算物理工作者在使用计算机计算的同时，在得到大量数值结果基础上，将得出的物理结论以某种解析形式的近似解来表达，这对于理论推广和实际使用是必要的。

§4. 目前国内外发展简况

国际上除对计算物理学开设课程、出版书籍、召开学术会议外，还有三种系统的出版刊物：

（一）《计算物理学方法》丛书(Methods in Computational Physics)。1963年起由Livermore实验室的Berni Alder等人开始编辑，每年约一辑。到1977年已出版了17卷，其范围包括统计物理、量子力学、流体力学、核粒子运动学、核物理、天体物理、固体物理、等离子体物理、原子与分子散射、地震波、地球物理、射电天文、受控热核反应、大气环流等等。

（二）《计算物理杂志》(Journal of Computational Physics)。1966年由Berni Alder等人主编创刊，到1983年底已出刊52卷。

（三）《计算物理通讯》(Computer Physics Communication)。1969年由英国的P.G.Burki主编创刊，主要报导西欧各国的工作，到1983年底已出刊30卷。

中国的《计算物理》学报 (Chinese Journal of Computational Physics) 于1984年9月正式出版了。它是反映

计算物理学科领域内最新研究成果的一个综合性学术刊物。主要刊登：为解决物理、化学、生物、工程、力学、原子能、气象、地质、海洋、石油、航天、医学、能源、经济等方面的问题，用相应的计算方法，借助电子计算机求解而获得的各种研究成果及学术论文；此外，还刊登学术研究简报、有关计算物理方面的应用软件介绍等。

我国的计算物理学是从六十年代初期随着计算技术的发展而发展起来的，现在已形成了一支年轻的计算物理学科的技术队伍。这支队伍为我国的原子弹和氢弹的研制，人造卫星的上天，远程运载火箭的发射以及石油的开发等都作出了显著的贡献。今后，计算物理学必将更广泛地应用在原子能、航空、石油、气象、水利等各个领域。社会主义四化建设需要这门科学为它服务，计算物理学也必定会在为四化建设服务的过程中得到更快的发展。

第二章　几个简单计算和计算正确性的检验

本章通过一些实际例子，说明用计算机处理这类问题相当方便，并归纳出求解问题的大致过程和步骤。同时，介绍计算正确性的检验。

§1. 电场强度和超越方程根的近似计算

考虑静电问题。求相距为一米的两个点电荷q_1和q_2之间联线上场强为0的地点。

分两种情形进行讨论

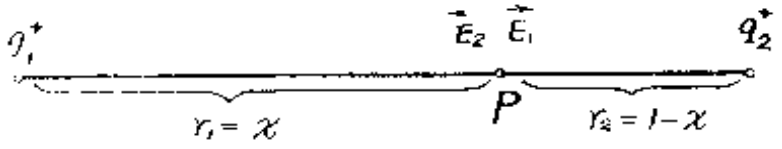


图 1　q_1 和 q_2 同号情形

1. q_1和q_2同号（无妨设皆带正电荷，见图1）设向右方向为正，则p点的场强

$$E_p = \frac{q_1}{\in r_1^2} - \frac{q_2}{\in r_2^2}$$

其中$\in$为介电系数。由$E_p = 0$，即

$$\frac{q_1}{x^2} - \frac{q_2}{(1-x)^2} = 0 \ .$$

解得

$$x=\frac{1}{1+\sqrt{\frac{q_2}{q_1}}}\qquad (q_1\neq 0)\qquad (1.1)$$

2. q_1和q_2异号（设q_1带负电荷，见图2）同样

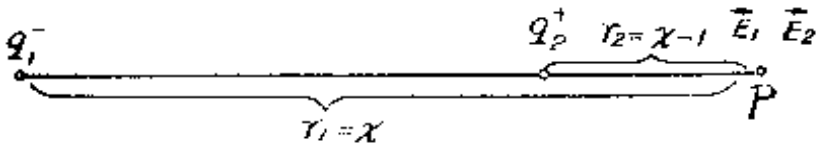


图2　q_1和q_2异号情形

$$E_p=-\frac{-q_1}{\in r_1^2}+\frac{q_2}{\in r_2^2}$$

由$E_p=0$，因此有

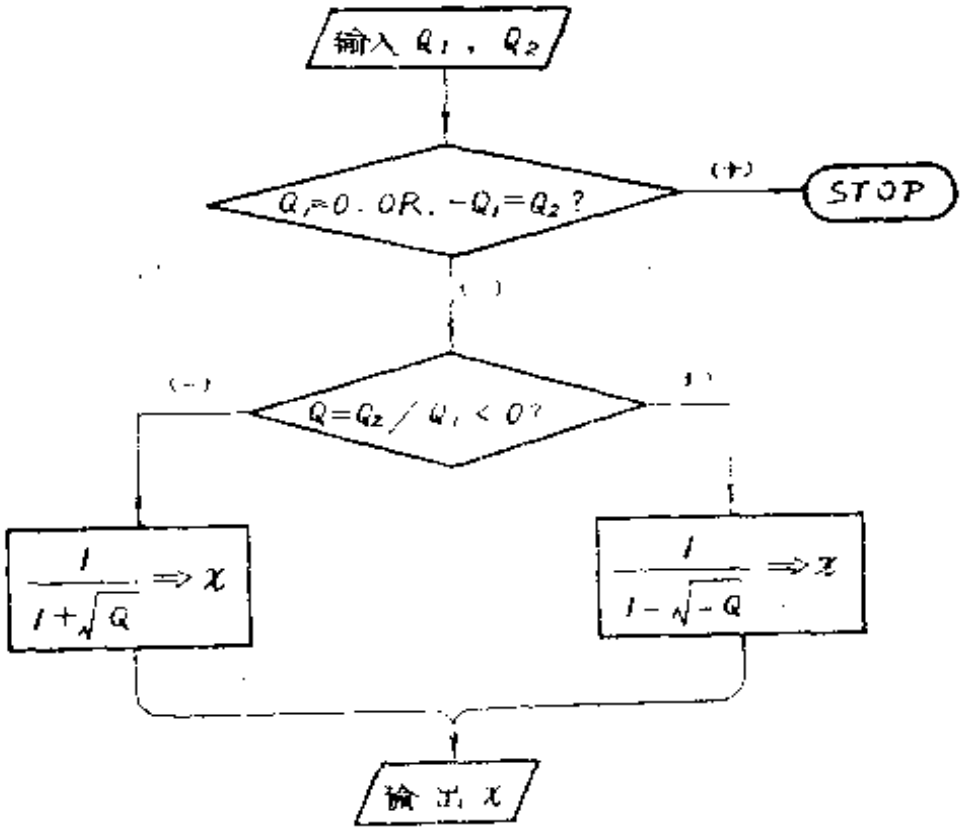
$$\frac{q_1}{x^2}+\frac{q_2}{(x-1)^2}=0,$$

解得

$$x=\frac{1}{1-\left(-\frac{q_2}{q_1}\right)^{\frac{1}{2}}}\qquad (q_1\neq 0,\ 并且-q_1\neq q_2)\qquad (1.2)$$

为上机计算，理顺逻辑思路如下：

首先，已知有解的先决条件是：$q_1\neq 0$，且$-q_1\neq q_2$（也即$q_1=0$或者$-q_1=q_2$时无解）。有解后，判断q_1和q_2是同号（$q_2/q_1>0$），还是异号（$q_2/q_1<0$）？然后，分别选用式（1.1）和（1.2）。于是，有框图和程序如下：



程序

```
      SUBROUTINE QDS(Q1, Q2, X)
      IF(Q1.EQ.0.0.OR.-Q1.EQ.Q2) STOP
      Q=Q2/Q1
      IF(Q.LT.0.0) GO TO 40
      X=1.0/(1.0+SQRT(Q))
      GO TO 60
40    X=1.0/(1.0-SQRT(-Q))
60    RETURN
      END
```

由上面分析，可见利用计算机求解实际问题，大致过程和步骤是：

第一步是根据选用的计算方法，将所求解的物理问题化成对应的数值计算公式。要求将问题严格形式化，翻译成接近程序语言的数学式子，并理顺逻辑思路。

第二步是根据拟定的计算方法，按照理顺的逻辑思路，设计出框图（复杂问题应先画粗框图，再画细框图），框图应真正反映计算方案的要求。

第三步根据框图和计算公式，编制语言程序。注意框图与语言程序要一一对应。

第四步最后上机计算并输出计算结果。

上述问题是简单的代数方程，解很容易求出。而实际碰到的问题要复杂得多，往往是超越方程求根问题。例如，在天体力学中，需要求解开普勒方程：$u-e\mathrm{Sin}u+At=0$。其中椭圆轨道时$0<e<1$，抛物线轨道时$e=1$，双曲线轨道时$e>1$。解决这类问题的方法很多，只介绍对分区间套法和弦截法。

一 对分区间套法（二分法）

设$f(x)$是x的连续函数。为方便起见，设$a<b$，$f(a)<0$，$f(b)>0$，由连续函数性质，方程$f(x)=0$在(a, b)区间一定有实根。用a和b的中点分(a, b)为两个区间，计算$f\left(\frac{a+b}{2}\right)$。如果碰巧$f\left(\frac{a+b}{2}\right)=0$，则找出了方程的一个根$\frac{a+b}{2}$，如果$f\left(\frac{a+b}{2}\right)<0$，则在$\left(\frac{a+b}{2}, b\right)$

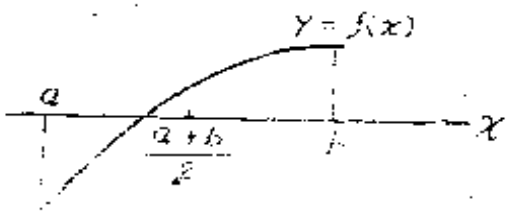


图 3

中有根，我们记$\frac{a+b}{2}=a_1$，$b=b_1$；如果

$f\left(\frac{a+b}{2}\right)>0$，则在$\left(a,\ \frac{a+b}{2}\right)$中有根，我们记$a=a_1$，

$\frac{a+b}{2}=b_1$。这就是说，在后两种情形中，$f(x)=0$在新区间(a_1, b_1)中一定有实根，而它的长度是旧区间长度的一半。再计算$f\left(\frac{a_1+b_1}{2}\right)$，如果碰巧$f\left(\frac{a_1+b_1}{2}\right)=0$，则$\frac{a_1+b_1}{2}$为根；否则，如果$f\left(\frac{a_1+b_1}{2}\right)<0$，则命$\frac{a_1+b_1}{2}=a_2$，$b_1=b_2$；如果$f\left(\frac{a_1+b_1}{2}\right)>0$，则命$a_1=a_2$，$\frac{a_1+b_1}{2}=b_2$，这时$f(x)=0$在新区间$(a_2, b_2)$中必有实根，而它的长度是区间$(a_1, b_1)$的一半，是$(a, b)$的1/4。如此这样做$n$次，如果还没有找出方程的根，就有一套有根区间：

$$(a, b)\ ,\ (a_1, b_1)\ ,\ (a_2, b_2)\ ,\ \cdots,\ (a_n, b_n)$$

并且$(a, b)\supset(a_1, b_1)\supset(a_2, b_2)\supset\cdots\supset(a_n, b_n)$。最后一个区间长度是$(a, b)$长度的$1/2^n$。当$n=10$时，是$(a, b)$长度的1/1024。

由区间套定理，知必存在一点c，使得$\lim_{n\to\infty}a_n=\lim_{n\to\infty}b_n=c$，且$f(c)=0$。

因此，当n充分大，我们可取最后区间中点作为$f(x)=0$

的根x的近似值x_n^*：

$$x_n^* = (a_n + b_n)/2$$

它的误差小于 $(b-a)/2^{n+1}$。

例。求$f(x) = x^3 - 2x - 5 = 0$在区间 (2，3) 中的一实根。

n	函数值	有根区间
0	f(2)<0，f(3)>0	(2，3)
1	f(2.5)>0	(2，2.5)
2	f(2.25)>0	(2，2.25)
3	f(2.125)>0	(2，2.125)
4	f(2.0625)<0	(2.0625，2.125)
5	f(2.09375)<0	(2.09375，2.125)
6	f(2.109375)>0	(2.09375，2.109375)

$x_6^* = 2.1015625$　　误差限$\frac{1}{2^7} = 0.0078125$

根的准确值$x = 2.0945515$，误差$e^* = 0.0070110$。

这样一来，求 (AA, BB) 中全部实根的步骤如下：

从$AA = a$开始，以h为基本步长，向前跨为h的小区间〔a，b〕，当跨得小区间两端函数值同号时，继续向前跨；异号时，用二分法找出该小区间中的一个实根，即反复计算f〔$(a+b)/2$〕；再以h为步长向前跨，……，直至$x > BB$时为止。

求根的原则是1。 函数值满足给定的函数值精度

2. 小区间长度满足根的允许误差限。步长 h 的选取，通常是将〔AA, BB〕分成n个小区间，每个小区间〔a_n, b_n〕长度为h，要求在每个小区间中至多有一个根。h要选取适当，太大了容易丢根，太小了浪费时间。

二分法的优点是简单、直观，局限性是不能求二重根，四重根，……，也不能求虚根。

二 弦截法（比例求根法）

弦截法的基本思想与二分法相同。所不同的是二分法取中点$c=\frac{a+b}{2}$，弦截法取$c=b-\frac{a-b}{f(a)-f(b)}f(b)$；二分法迭代程序是 $c_n=\frac{a_n+b_n}{2}$，

弦截法迭代程序是 $c_n=b_n-\frac{a_n-b_n}{f(a_n)-f(b_n)}f(b_n)$。

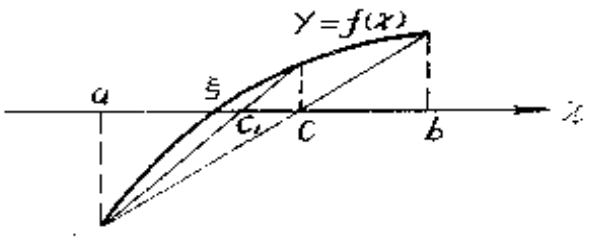


图 1

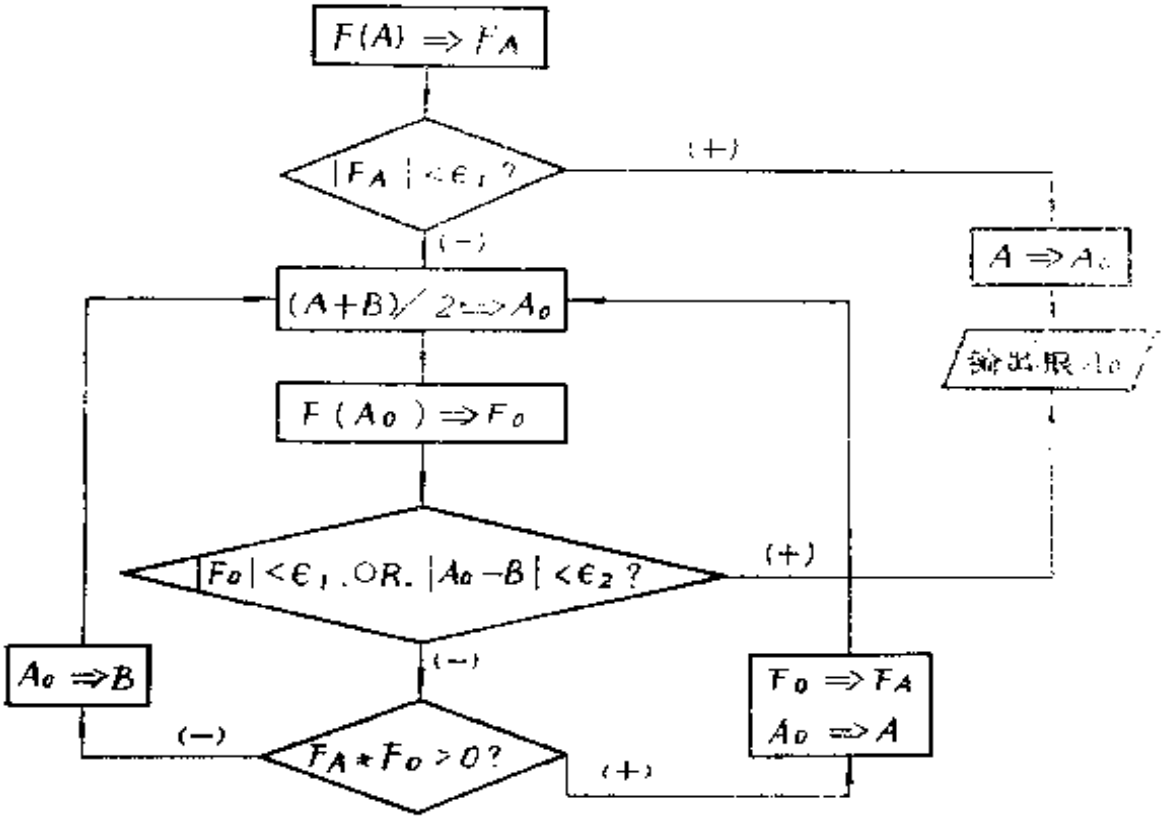
一般说来，弦截法求实根会有较好的收敛速度。特别当$f'(x)\neq 0$，也不很小时，其收敛性在根的附近是比较好的。

下面给出二分法求实根的框图和程序。

框图（〔A, B〕中只有一个实根的情形）

程序

```
SUBROUTINE ROOT(AA, BB, H, M, N, E1,
E2, RT)
DIMENSION RT(M)
N = 0
A = AA
```




```
      FA = F(A)
10    B = A + H
      B1 = B
      FB1 = F(B1)
      IF(ABS(FA)• LE• E1) GO TO 16
      IF(ABS(FB1)• LE• E1) GO TO 11
      IF(FA*FB1• GT• 0• 0)GO TO 11
12    A0 = (A + B)/2.0
      F0 = F(A0)
      IF(ABS(F0)• LE• E1)GO TO 13
      IF(ABS(B − A0). LE• E2)GO TO 13
      IF(FA*F0• GT• 0.0 )GO TO 14
```

```
      B = A0
      GO TO 12
14    FA = F0
      A = A0
      GO TO 12
16    A0 = A
13    N = N + 1
      RT(N) = A0
      IF(N. GE. M)GO TO 15
11    IF(B1. GT. BB)GO TO 15
      A = B1
      FA = FB1
      GO TO 10
15    RETURN
      END
```

程序功能

本程序采用二分法求任意实函数方程 $f(x)=0$ 在区间 (a, b) 内的单重实根。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE ROOT (AA, BB, H, M, N, E_1, E_2, RT)

2. 哑元说明

AA：实变量，输入参数，根之下界。

BB：实变量，输入参数，根之上界。

H ：实变量，输入参数，步长。

M ：整变量，输入参数，欲求根的个数。

N ：整变量，输出参数，求出根的个数。

E_1：实变量，输入参数，函数值的精度。

E_2：实变量，输入参数，根的精度。

RT：M个元素的一维实数组，输出参数，存放计算结果。

3. 所调用的过程

FUNCTION F(X)，表示计算$f(x)$的函数段，由使用者自行编写。

例题

求方程$\mathrm{Sin}X=0$在区间 $(-2, 7)$ 内的全部实根。精确结果$X_1=0$，$X_2=\pi$，$X_3=2\pi$。取$H=0.1$，$E_1=10^{-7}$，$E_2=10^{-8}$时，计算结果 $X_1=-0.57742000\times10^{-7}$，$X_2=3.1415927$，$X_3=6.2831853$。

同样，可给出弦截法程序如下：

```
      SUBROUTINE ROOT2(AA, BB, H, N, I, E1,
     E2, RT)
      DIMENSION RT(N)
      WT=0.0
      I=0
      X=AA
      F0=F(X)
4     X=X+H
      F1=F(X)
      IF(ABS(F0).LE.E1) GO TO 100
      IF(ABS(F1)·LE·E1)GO TO 101
      IF(F0*F1·GT·0.0)GO TO 101
```

```
      FA = F0
      FB = F1
      A = X - H
      B = X
1     C = B - (A - B) * FB/(FA - FB)
      IF(WT)5, 7, 5
7     WT = 1.0
      GOTO 6
5     IF(ABS(C1 - C).LT.E2) GOTO 3
6     C1 = C
      FC = F(C)
      IF(FC * FA.GT.0.0) GOTO 2
      FB = FC
      B = C
      GOTO 1
2     FA = FC
      A = C
      GOTO 1
100   C = X - H
3     I = I + 1
      RT(I) = C
      IF(I.GE.N)GOTO 8
101   F0 = F1
      IF(X - BB)4, 4, 8
8     RETURN
      END
```

程序功能

本程序采用弦截法（比例求根法），求任意实函数方程$f(x)=0$在区间〔a，b〕内的全部单重实根。

使用说明

1。 子程序语句

SUBROUTINE ROOT$_2$(AA，BB，H，N，I，E_1，E_2，RT)

2。 哑元说明

AA：实变量，输入参数，根之下界a。

BB：实变量，输入参数，根之上界b。

H ：实变量，输入参数，步长。

N ：整变量，输入参数，欲求根的个数。

I ：整变量，输出参数，求出根的个数。

E_1：实变量，输入参数，函数值的精度。

E_2：实变量，输入参数，根的精度。

RT：N个元素的一维实数组，输出参数，存放计算结果(根)。

3。 所调用的过程

FUNCTION $F(X)$，表示计算$f(x)$的函数段，由使用者自行编写。

例题

求方程$f(x)=x^4-10x^3+35x^2-50x+24=0$ 在区间〔0，4〕内的全部实根。精确结果$x_1=1$，$x_2=2$，$x_3=3$，$x_4=4$。取$H=0.1$，$E_1=10^{-7}$，$E_2=10^{-8}$时，计算结果$x_1=1$，$x_2=2$，$x_3=3$，$x_4=4$。

§2. 平均值、均方差和气垫实验数据处理

我们知道用来作随机变量的一般数量指标的常数里最主要的是数学期望和方差。平均值相应于数学期望，方差可以看作随机变量的值围绕数学期望的疏散程度。所以，在大量实际问题中，经常碰到求平均值和均方差，特别在统计物理中求平均值和均方差是不可缺少的。例如，全国人口普查中，要求出平均年龄、平均身高、平均寿命等；做实验时，往往在同一条件下做多次测量，又在不同条件下做多次测量，得出的大量实验数据要处理：求平均值、误差和作图。下面我们以气垫实验数据处理为例进一步说明这个问题。

由于气垫的功能是尽可能减小摩擦力，所以近些年气垫原理在工农业生产等许多部门得到了广泛应用。如气垫船，

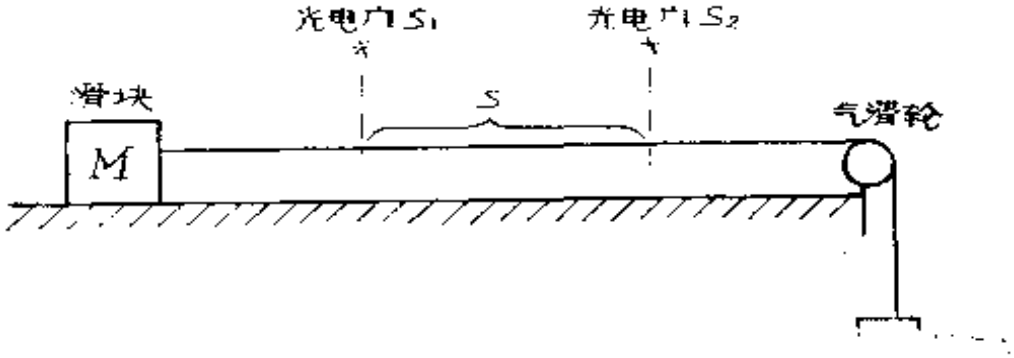


图5　气垫实验示意图

在船底形成一个有一定压力的气垫，使船离开水面，这样船在航行时的阻力就可大大减小，提高了航速，每小时可达八十海里；气垫火车也同普通火车一样是靠路轨来导向的。但承载火车的重量是气垫，而不是车轮，可使火车时速达每小时二百至四百公里，从而为发展高速火车开辟了新途径。我

们采用气垫原理来测量加速度。实验装置的示意图如图5所示。导轨是一根非常平直的三角形管件，两侧有许多均匀分布的小孔，从导轨的一端通进压缩空气，气体从小孔喷出，于是在导轨和滑块间形成了气垫，结果滑块和导轨间摩擦很小，并各处均匀，这样一来，就可用气垫实验测量加速度。

考虑在滑块质量M和力F固定的条件下，做N次实验，求滑块加速度a的平均值和均方差。

为此，设ΔX = 滑块的长度，

S = 光电管S_1和S_2之间的距离，

Δt_1和Δt_2分别表示实验测定滑块通过光电管S_1和S_2的时间。

显然，$\Delta x/\Delta t_1$和$\Delta x/\Delta t_2$分别为滑块在光电管S_1和S_2处的平均速度。如果Δx，Δt_1和Δt_2足够小，其平均速度趋近于瞬时速度。

由运动力学可知

$$\frac{1}{2}MV_2^2-\frac{1}{2}MV_1^2=MaS$$

$$\therefore \quad a=\frac{V_2^2-V_1^2}{2S} \tag{2.1}$$

其中 $V_1=\Delta x/\Delta t_1$，$V_2=\Delta x/\Delta t_2$

于是，加速度a的平均值：

$$\bar{a}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}a_i\equiv AP \tag{2.2}$$

均方差：

$$\Delta a=\sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(a-\bar{a})^2}\equiv DA \tag{2.3}$$

计算 (2.2) 和 (2.3) 式的程序如下：

```
SUBROUTINE GSD(DX,S,N,T1,T2,A,AP,DA)
DIMENSION T1(N), T2(N), A(N)
AP=0.0
DO 20 I=1, N
V1=DX/T1(I)
V2=DX/T2(I)
A(I)=(V2**V2-V1**V1)/(S+S)
20 AP=AP+A(I)
AP=AP/FLOAT(N)
DA=0.0
DO 5 I=1, N
5 DA=DA+(A(I)-AP)**2
DA=SQRT(DA/FLOAT(N-1))
RETURN
END
```

程序功能

本程序用来计算N次实验的滑块加速度的平均值和均方差。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE GSD (DX, S, N, T_1, T_2, A, AP, DA)

2. 哑元说明

DX：实变量，输入参数，滑块的长度。

S：实变量，输入参数，光电管S_1和S_2之间的距离。

N：　整变量，输入参数，实验次数。

T_1，T_2：N个元素的一维实数组，输入参数，分别表示每次实验滑块通过光电管S_1和S_2的时间。

A：　N个元素的一维实数组，表示所需的一组工作单元。

AP：实变量，输出参数，表示加速度的平均值。

DA：实变量，输出参数，表示均方差。

§3. 氢气在低温时定容热容量

氢原子问题在量子物理学中所起的作用，就好比行星的运动问题在经典物理学中的作用一样。这个问题可以有严格的解，从这个解得出的结果可以直接和实验相比较，理论与实验结果完全相符。因此，从这个意义上说，对氢原子进行的分析与计算检验了整个量子物理学。所以，我们研究一下二原子分子的氢气在低温时定容热容量的计算。

在统计物理中，将氢气看作理想气体，它满足麦克斯韦——玻耳兹曼分布。在室温条件下，一般理想气体，由于量子条件，分子的振动能对气体的内能和比热没有贡献，可以用能量均分定理来求，但在92K 时，由于转动能量的量子化，分子转动能对比热的贡献减少，需要特殊计算。

设有 1 摩尔的气体，在等容过程中吸收热量 $(dQ)_V$，温度升高dT，则气体的定容分子热容量为：

$$C_V = \frac{(dQ)_V}{dT} = \frac{dE}{dT}$$

所以要求热容量只须求出能量平均值。一个分子能量平均值的公式是

$$\bar{E}=\frac{\sum \in_n e^{-\in n/KT}}{\sum e^{-\in n/KT}} \qquad (3.1)$$

其中K是玻耳兹曼常数，T是绝对温度，$\in_n$是第n个量子态的能量，求和是对量子态进行的。

要求得$\bar{E}$，必须知道每一量子态的能量$\in_n$。由于氢气是二原子分子，其运动可分解成平动、转动和振动，相应地有平动能量、转动能量和振动能量。从量子力学观点看，平动是平面波形式，相应地平动能量是准连续的，可直接用能量均分定理求得。对一个氢分子，其平动能量的平均值为$\frac{1}{2}m\bar{v}^2=\frac{3}{2}KT$。而振动能量量子化效应显著，而且能级间隔特别大，一般温度时不能被激发，一直处在基态，对热容量没有贡献。

由上面分析，平均能量$\bar{E}$可表示为：

$$\bar{E}=\bar{E}^t+\bar{E}^v+\bar{E}^r \qquad (3.2)$$

其中$\bar{E}^t$表示平均平动能量等于$\frac{3}{2}KT$，$\bar{E}^v$表示振动的平均能量等于某一常数，$\bar{E}^r$表示转动的平均能量。下面考虑$\bar{E}^r$的计算。

量子力学给出二原子分子的转动能级和能级简并度为

$$\begin{cases}\in^r=\dfrac{h^2}{8\pi^2 I}l(l+1) & (3.3)\\ \omega=2l+1 \qquad l=0,\ 1,\ 2,\ \cdots\end{cases}$$

其中h为普朗克常数，I是氢分子的转动惯量。有了能级和简并度，可写出平均转动能量公式

$$\bar{E}^r = \frac{\sum_{l=0}^{\infty} \frac{h^2}{8\pi^2 I} l(l+1)\ (2l+1)\ e^{-\frac{h^2}{8\pi^2 I}l(l+1)/KT}}{\sum_{l=0}^{\infty}\ (2l+1)\ e^{-\frac{h^2}{8\pi^2 I}l(l+1)/KT}} \tag{3.4}$$

其中求和是对能级而言。

实验上发现，自然界的氢气是正氢（占四分之三）和仲氢（占四分之一）的混合物。正氢的转动量子数l只能取为奇数的那些态；仲氢的转动量子数l只能取为偶数的那些态。用$\bar{E}^r_0$和$\bar{E}^r_p$分别代表正氢和仲氢的平均转动能量，则

$$\bar{E}^r = \frac{3}{4}\bar{E}^r_0 + \frac{1}{4}\bar{E}^r_p \tag{3.5}$$

其中

$$\begin{cases} \bar{E}^r_0 = \dfrac{1}{w_0} \sum\limits_{l=1,3,\cdots} Al(l+1)(2l+1)e^{-Bl(l+1)} \\ \bar{E}^r_p = \dfrac{1}{w_p} \sum\limits_{l=0,2,\cdots} Al(l+1)(2l+1)e^{-Bl(l+1)} \\ w_0 = \sum\limits_{l=1,3,\cdots} (2l+1)e^{-Bl(l+1)} \\ w_p = \sum\limits_{l=0,2,\cdots} (2l+1)e^{-Bl(l+1)} \\ A = \dfrac{h^2}{8\pi^2 I} = \text{常数} \\ B = \dfrac{A}{KT} = B(T) \end{cases} \tag{3.6}$$

计算$\bar{E}'_0$和$\bar{E}'_0$是比较麻烦的，所以用计算机来近似求解。由于随着l的增大，（3.6）式中的e指数函数衰减得非常快，所以可用截断办法，即用有限项代替无穷项求和，例如求和取到M项。当然，也可根据要求的精度$\in$，找出这样的M，使得（$M+1$）项的和的值与前面M项之和的差小于$\in$来截断。我们采用取到M项给出计算（3.6）式的程序如下：

```
      SUBROUTINE ERH(A, B, M, L0, E)
      W = 0.0
      E = 0.0
      DO 25 L = L0, M, 2
      X1 = FLOAT(L * (L + 1))
      X2 = EXP(- B * X1) * FLOAT(2 * L + 1)
      W = W + X2
25    E = E + A * X1 * X2
      IF(L0.EQ.2) W = W + 1.0
      E = E/W
      RETURN
      END
```

当$L_0=1$时计算$\bar{E}'_0$值，当$L_0=2$时计算$\bar{E}'_0$值。给不同的T值，表示给不同的B值，就可得到不同温度时$\bar{E}'$的近似值。因此，可画出$\bar{E}'$—T图的曲线，曲线的斜率就是转动部分对比热的贡献。再加上平动部分对比热的贡献，结果得到总的比热。

§4. 虚宗量贝塞尔函数的计算

在解决数学物理问题时，例如考虑柱形区域的热传导和圆膜振动问题，常遇到下列形状的微分方程：

$$\frac{d^2y}{dx^2}+\frac{1}{x}\frac{dy}{dx}+\left(1-\frac{m^2}{x^2}\right)y=0 \qquad (4.1)$$

通常称（4.1）式为m阶贝塞尔方程。该方程的解叫做“柱函数”，它是最重要的特殊函数之一。在无线电、雷达和一些空间技术中，经常碰到这类函数，其应用非常广泛，并且有了较详细的表册。

将（4.1）式中的x换为ix，就得到虚宗量贝塞尔方程。如果m不是整数，两个线性独立解是：

$$I_m(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!\,\Gamma(m+k+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^{m+2k} \qquad (4.2)$$

$$I_{-m}(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!\,\Gamma(-m+k+1)}\left(\frac{x}{2}\right)^{-m+2k} \qquad (4.3)$$

如果m是整数，其两个线性独立解是m阶虚宗量贝塞尔函数和m阶虚宗量诺伊曼函数。

由于$$I_{m+1}(x)=I_{m-1}(x)-\frac{2mI_m(x)}{x} \qquad (4.4)$$

所以，要计算$I_m(x)$，就只须计算$I_0(x)$和$I_1(x)$。下面给出计算$I_0(x)$和$I_1(x)$的近似公式：

设$t=x/3.75$，当$-3.75\leqslant x\leqslant 3.75$时

$$I_0(x)=1+3.5156229t^2+3.0899424t^4+1.2067492t^6$$
$$+0.2659732t^8+0.0360768t^{10}+0.0045813t^{12}$$
$$+\in,\ |\in|<1.6\times10^{-7} \qquad (4.5)$$

$$x^{-1}I_1(x)=0.5+0.87890594t^2+0.51498869t^4$$
$$+0.15084934t^6+0.02658733t^8$$
$$+0.00301532t^{10}+0.00032411t^{12}+\in,$$
$$|\in|<8\times10^{-9} \qquad (4.6)$$

当$3.75\leqslant x<\infty$时

$$x^{\frac{1}{2}}e^{-x}I_0(x)=0.39894228+0.01328592t^{-1}$$
$$+0.00225319t^{-2}-0.00157565t^{-3}$$
$$+0.00916281t^{-4}-0.02057706t^{-5}$$
$$+0.02635537t^{-6}-0.01647633t^{-7}$$
$$+0.00392377t^{-8}+\in,|\in|<1.9\times10^{-7}$$
$$(4.7)$$

$$x^{\frac{1}{2}}e^{-x}I_1(x)=0.39894228-0.03988024t^{-1}$$
$$-0.00362018t^{-2}+0.00163801t^{-3}$$
$$-0.01031555t^{-4}+0.02282967t^{-5}$$
$$-0.02895312t^{-6}+0.01787654t^{-7}$$
$$-0.00420059t^{-8}+\in,|\in|<2.2$$
$$\times10^{-7} \qquad (4.8)$$

计算第二类虚宗量贝塞尔函数$k_0(x)$和$k_1(x)$的近似式是：

当$0<x\leqslant2$时

$$k_0(x)=-\ln(x/2)I_0(x)-0.57721566$$
$$+0.42278420(x/2)^2+0.23069756(x/2)^4$$
$$+0.03488590(x/2)^6+0.00262698(x/2)^8$$
$$+0.00010750(x/2)^{10}+0.00000740(x/2)^{12}$$
$$+\in,\ |\in|<1\times10^{-8} \qquad (4.9)$$

$$xk_1(x)=x\ln(x/2)I_1(x)+1+0.15443144(x/2)^2$$
$$-0.67278579(x/2)^4-0.18156897(x/2)^6$$
$$-0.01919402(x/2)^8-0.00110404(x/2)^{10}$$
$$-0.00004686(x/2)^{12}+\in,\ |\in|<8\times10^{-9}$$
(4.10)

当$2\leqslant x<\infty$时

$$x^{\frac{1}{2}}e^xk_0(x)=1.25331414-0.07832358(2/x)+$$
$$0.02189568(2/x)^2-0.01062446(2/x)^3$$
$$+0.00587872(2/x)^4-0.00251540\times$$
$$(2/x)^5+0.00053208(2/x)^6+\in,$$
$$|\in|<1.9\times10^{-7}$$ (4.11)

$$x^{\frac{1}{2}}e^xk_1(x)=1.25331414+0.23498619(2/x)$$
$$-0.03655620(2/x)^2$$
$$+0.01504268(2/x)^3-0.00780353\times$$
$$(2/x)^4+0.00325614(2/x)^5$$
$$-0.00068245(2/x)^6+\in,\ |\in|<2.2$$
$$\times10^{-7}$$ (4.12)

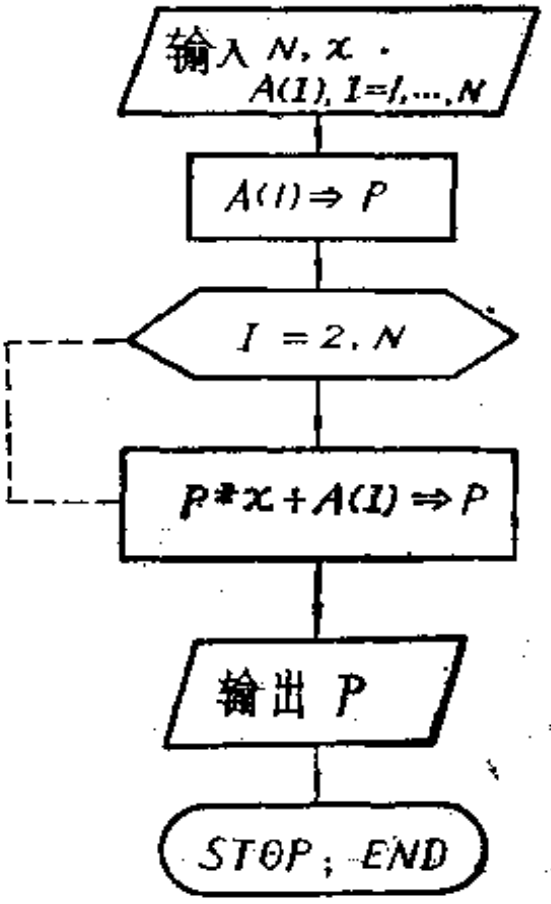
可见，计算$I_0(x)$，$I_1(x)$，$k_0(x)$，$k_1(x)$实际上归结为计算多项式

$$P(x)=\sum_{i=1}^{n}a_ix^{n-i}$$ (4.13)

把式（4.13）改写成递推公式

$$P_{k+1}=P_k*x+a_{k+1},\ k=0,\ 1,\ \cdots,$$
$$n-1,\ P_0=0$$ (4.14)

于是，计算多项式$P(x)$的框图和程序如下：




```
      FUNCTION POLY
     (N, X, A)
      DIMENSION A(N)
      P = A(1)
      DO  1 I = 2, N
1     P = P * X + A(I)
      POLY = P
      RETURN
      END
```

程序功能

本过程用来计算实自变量多项式$P(x)=\sum_{i=1}^{n}a_i x^{n-i}$的值。

使用说明

1. 函数语句

FUNCTION POLY(N, X, A)

2. 哑元说明

N：整变量，输入参数，为多项式最高次数加1。例如M次多项式，则$N=M+1$。

X：实自变量，输入参数。

A：N个元素的一维实数组，存放多项式系数。

这样一来，计算$I_0(x)$，$I_1(x)$，$K_0(x)$和$K_1(x)$的程序如下：

```
      SUBROUTINE BSI(X, I0, I1)
      DIMENSION A(9)
```

```
      REAL I0, I1
      T=X/3.75
      IF(X.GT.3.75) GOTO 1
      F=T*T
      A(1)=0.0045813
      A(2)=0.0360768
      A(3)=0.2659732
      A(4)=1.2067492
      A(5)=3.0899424
      A(6)=3.5156229
      A(7)=1.0
      I0=POLY(7, F, A)
      A(1)=0.00032411
      A(2)=0.00301532
      A(3)=0.02658733
      A(4)=0.15084934
      A(5)=0.51498869
      A(6)=0.87890594
      A(7)=0.5
      I1=POLY(7, F, A)*X
      RETURN
1     D=1.0/T
      GT=EXP(X)/SQRT(X)
      A(1)=0.00392377
      A(2)=-0.01647633
      A(3)=0.02635537
```

```
A(4) = -0.02057706
A(5) = 0.00916281
A(6) = -0.00157565
A(7) = 0.00225319
A(8) = 0.01328592
A(9) = 0.39894228
I0 = POLY(9, D, A) * GT
A(1) = -0.00420059
A(2) = 0.01787654
A(3) = -0.02895312
A(4) = 0.02282967
A(5) = -0.01031555
A(6) = 0.00163801
A(7) = -0.00362018
A(8) = -0.03988024
A(9) = 0.39894228
I1 = POLY(9, D, A) * GT
RETURN
END

SUBROUTINE BSK(X, K0, K1)
DIMENSION A(7)
REAL K0, K1, I0, I1
T = X * 0.5
IF(X.GT.2.0) GOTO 2
F = T * T
```

```
      CALL BSI(X, I0, I1)
      AN = ALOG(T)
      A(1) = 0.00000740
      A(2) = 0.00010750
      A(3) = 0.00262698
      A(4) = 0.03488590
      A(5) = 0.23069756
      A(6) = 0.42278420
      A(7) = -0.57721566
      K0 = POLY(7, F, A) - AN*I0
      A(1) = -0.00004686
      A(2) = -0.00110404
      A(3) = -0.01919402
      A(4) = -0.18156897
      A(5) = -0.67278579
      A(6) = 0.15443144
      A(7) = 1.0
      K1 = POLY(7, F, A)/X + AN*I1
      RETURN
    2 D = 1.0/T
      GT = EXP(X) * SQRT(X)
      A(1) = 0.00053208
      A(2) = -0.00251540
      A(3) = 0.00587872
      A(4) = -0.01062446
      A(5) = 0.02189568
```

```
A(6) = -0.07832358
A(7) = 1.25331414
K0 = POLY (7, D, A) /GT
A(1) = -0.00068245
A(2) = 0.00325614
A(3) = -0.00780353
A(4) = 0.01504268
A(5) = -0.03655620
A(6) = 0.23498619
A(7) = 1.25331414
K1 = POLY (7, D, A) /GT
RETURN
END
```

程序功能

这两个过程分别用来计算当 $x \geqslant -3.75$ 时，$I_0(x)$，$I_1(x)$的值和当$x>0$时，$K_0(x)$，$K_1(x)$的值。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE BSI(X, I_0, I_1)

SUBROUTINE BSK(X, K_0, K_1)

2. 哑元说明

X：实变量，输入参数，自变量。

I_0，I_1：实变量，输出参数，第一类虚宗量贝塞尔函数$I_0(x)$和$I_1(x)$的值。

K_0，K_1：实变量，输出参数，第二类虚宗量贝塞尔函数

$K_0(x)$和$K_1(x)$的值。

例

取$x=0.5$ (0.25) 10计算，以下给出部分结果：

x	0.5	1.5	2.5	3.5	4.5	5.5
I_0	1.063	1.647	3.290	7.378	17.48	42.69
I_1	0.2579	0.9817	2.517	6.206	15.39	38.59
K_0	0.9244	0.2138	0.0623	0.0196	0.0064	0.0021
K_1	1.6564	0.2774	0.0739	0.0222	0.0071	0.0023

这些结果与贝塞尔函数表相符合。有了上述基本程序，其它类型的贝塞尔函数，只要根据有关公式作些变动，基本上均可计算。

§5. 泰勒展开近似

泰勒 (Taylor) 展开近似是非常有用的，而且是基本的近似，它在物理学中得到广泛的应用。例如量子力学中微扰论，统计物理中求范德瓦尔斯状态方程等都是利用泰勒展开的性质。在计算物理中，泰勒展开更是不可缺少的可靠的手段。例如按小参量（小参数）展开成级数，用泰勒展开式求方程解的近似值。特别是常常用泰勒展开近似作误差分析、误差估计等等。

设$f(x)$及各次微分系数皆为x的连续函数，则泰勒展式的一般形式是

$$f(x+h)=f(x)+\frac{f'(x)}{1!}h+\cdots+\frac{f^{(n)}(x)}{n!}h^n+$$

$$+\frac{f^{(n+1)}(x+\theta h)}{(n+1)!}h^{n+1}, \qquad (0<\theta<1) \qquad (5.1)$$

同样，对二元函数$f(x, y)$，其泰勒展式为

$$f(x+h, y+k)=f(x,y)+\left(h\frac{\partial}{\partial x}+k\frac{\partial}{\partial y}\right)f+\frac{1}{2!}\left(h\frac{\partial}{\partial x}+k\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 f+\cdots+\frac{1}{n!}\left(h\frac{\partial}{\partial x}+k\frac{\partial}{\partial y}\right)^n f+$$

$$+\frac{1}{(n+1)!}\left(h\frac{\partial}{\partial x}+k\frac{\partial}{\partial y}\right)^{n+1}$$

$$\times f(x+\theta h, y+\theta k) \qquad (5.2)$$

为了看出泰勒展开的基本性质和重要性，我们举两个例子。

例1. 函数$f(x)=x^n$

由二项式展开知：

$$f(x+h)=(x+h)^n=x^n+\binom{n}{1}x^{n-1}h+\cdots+\binom{n}{k}x^{n-k}h^k+\cdots+h^n. \qquad (5.3)$$

利用泰勒展式，在x处展开有

$$f'(x)=n(x+h)^{n-1}\big|_{h=0}=nx^{n-1},$$
$$f''(x)=n(n-1)(x+h)^{n-2}\big|_{h=0}=n(n-1)x^{n-2},$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$f^{(k)}(x)=n(n-1)\cdots(n-k+1)x^{n-k},$$
$$f^{(k+1)}(x)=0, \qquad \text{当}n=k\text{时}.$$

将它们代入（5.1）式得

$$f(x+h)=(x+h)^n=x^n+nx^{n-1}h+\cdots+$$

$$\frac{n(n-1)\cdots(n-k+1)}{k!}x^{n-k}h^k \qquad (5.3')$$

可见（5.3′）就是二项展开式。二项展开式只是泰勒展式取到有限项$n=k$的特殊情形。

例2. 函数$f(x)=e^x$

在$x=0$处展开，由$f(0)=1$，　　$f'(0)=e^x|_{x=0}=1$，…，$f^{(n)}(0)=e^x|_{x=0}=1$，于是得

$$f(x)=e^x=1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}+\cdots=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!} \qquad (5.4)$$

(5.4) 式就是指数函数的幂级数展开式，也就是它的泰勒展开表示式。

仿此，还可得到如下的展开式，这是数值近似计算中常碰到的，必须牢牢记住它们：

$$e^x=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}\quad,\quad(-\infty<x<\infty)$$

$$\sin x=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}\quad,\quad(-\infty<x<\infty)$$

$$\cos x=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{x^{2n}}{(2n)!}\quad,\quad(-\infty<x<\infty) \qquad (5.5)$$

$$\ln(1+x)=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{x^{n+1}}{n+1}\quad,\quad(-1<x\leqq 1)$$

$$\operatorname{arctg}x=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{x^{2n+1}}{2n+1}\quad,\quad(-1\leqq x\leqq 1)$$

$$(1+x)^\alpha=1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha(\alpha-1)\cdots(\alpha-n+1)}{n!}x^n\quad(-1<x<1)$$

我们看到用泰勒展式作近似计算是无穷项求和，必须取有限项代替无穷项，这就带来了误差。这里，以指数函数为例，说明计算过程要注意考虑误差问题以及改进的办法。

例.计算$e^{-3.5}$的值

解：利用泰勒展式，$e^x = 1 + x + x^2/2! + x^3/3! + \cdots$，取$x = -3.5$，有$e^{-3.5} = 1 - 3.5 + 12.25/2 - 42.875/6 + \cdots$，这是交错级数，一正一负，收敛很慢，即使取到20项，结果误差还是很大。为了加快收敛，要减小误差，可通过先计算$e^{3.5}$的近似值后，再取倒数即$e^{-3.5} = 1/e^{3.5}$。因为$e^{3.5}$是一个大数，其倒数是一个小数。一个大数虽然存在误差，但是倒数以后，其误差减小。这点也可通过直接计算$e^{-3.5}$和计算$e^{3.5}$后取倒数都取相同项来证实。

一般说来，用泰勒展开作近似计算，用有限项代替无穷项求和，要求是按小量展开，这样能保证收敛快，误差小。因此，e^x的计算，应先判断x的绝对值。如果$|x|<1$，取有限项和，其项数由所给精度确定；如果$|x|>1$，则需预先作变换：

$$e^{|x|} = e^{(|x|)+(|x|)} = e^{L+S} = e^{(1+\cdots+1)L} = (ce^{\frac{S}{L}})$$

$$= \left(e \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{S}{L}\right) \frac{1}{n!}\right) \qquad (5.6)$$

其中L为$|x|$的整数部分，S为$|x|$的小数部分。

下面我们采用“分层分解”法先分析

$$e^x \approx 1 + \frac{1}{1!}x + \frac{1}{2!}x^2 + \cdots + \frac{1}{n!}x^n + \cdots = S,$$

的程序的编制。

首先看第一层求和：

开始　　$S=1.0$，

第一次　　$S=S+\frac{1}{1!}x$，

第二次　　$S=S+\frac{1}{2!}x^2$，

⋮　　⋮

一般　S＝S＋某一项≡S＋TERM。

然后看第二层中的每一项TERM：

开始　TERM＝1.0，

第一次　：　$\text{TERM}=\frac{1}{1!}x=\text{TERM}*\ x/1.0$，

第二次　　$\text{TERM}=\frac{1}{2!}x^2=\text{TERM}*\ x/2.0$，

⋮　　⋮

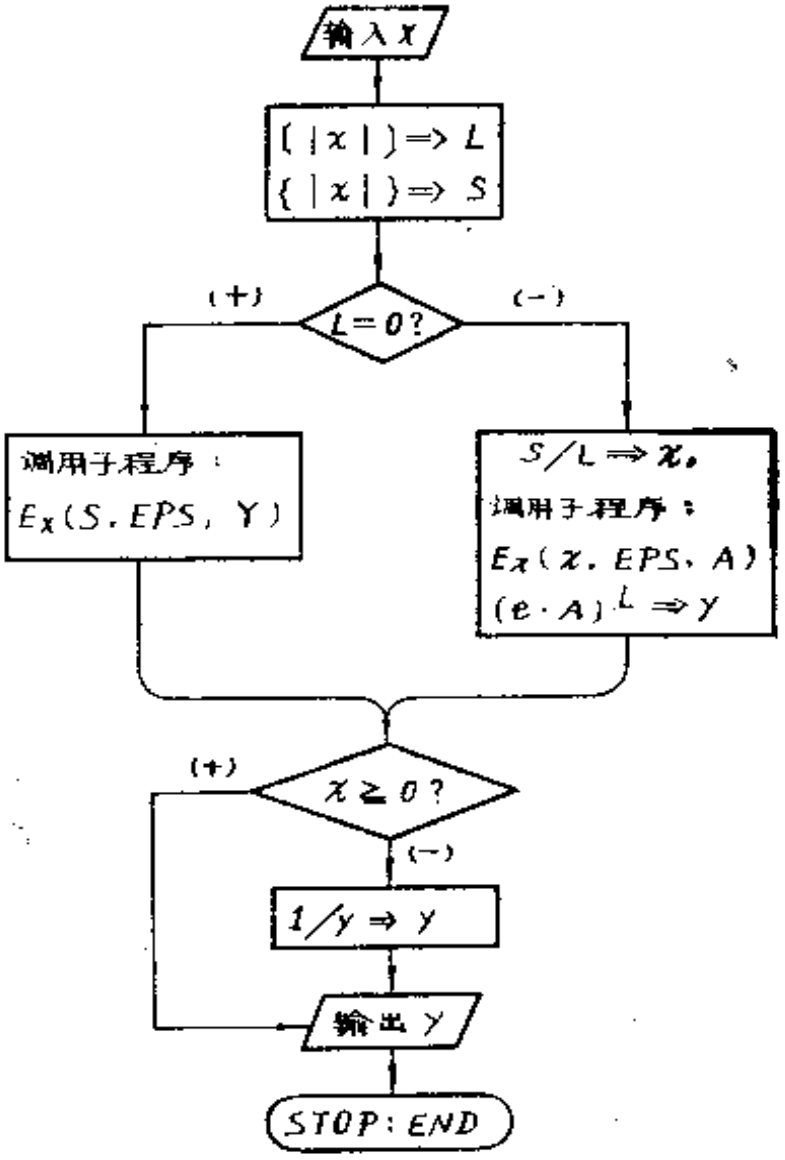
一般　TERM＝TERM＊ x/T。（开始置T＝1.0）

于是，我们给出计算e^x的子程序如下：

```
      SUBROUTINE EX(X, EPS, S)
      S=1.0
      TERM=1.0
      T=1.0
5     TERM=TERM* X/T
      S=S+TERM
      T=T+1.0
      IF(ABS(TERM). GT. EPS)GO TO 5
      RETURN
```

END

这样一来，可给出高精度e^x近似计算的框图和程序。



其程序如下：

```
SUBROUTINE GEX(X0, EPS, Y)
L=INT(ABS(X0))
```

```
      S=ABS(X0)-FLOAT(L)
      IF(L.EQ.0) GO TO 2
      X=S/FLOAT(L)
      CALL EX(X, EPS, A)
      Y=(2.7182818* A)* *L
      GO TO 3
2     CALL EX(S, EPS, Y)
3     IF(X0)4, 5, 5
4     Y=1.0/Y
5     RETURN
      END
      SUBROUTINE EX(X, EPS, S)
      ⋮本子程序段体部分
      END
```

程序功能

本程序用泰勒展式计算高精度的exp(x)值。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE GEX(X_0, EPS, Y)

2. 哑元说明

X_0：输入参数，实自变量。

EPS：输入参数，实变量，用于控制精度的量。

Y：输出参数，实变量，存放计算结果。

3. 所调用的过程

SUBROUTINE EX(X, EPS, S)，表示计算exp(x)的过程。

其中X代表自变量，EPS代表误差精度，S存放结果exp(x)。

例题

求e^{-1}，e，e^{-2}和e^{2}的值。（取$EPS=10^{-7}$）

计算结果

$e^{-1}=0.3678794$，　　$e=2.7182818$，

$e^{-2}=0.1353353$，　　$e^{2}=7.3890561$。

§6. 计算正确性的检验

编制解题程序是一项繁琐而又十分细致的工作。特别是对于大型的科学计算问题，要想一次就编出无差错的程序是相当困难的。因此，在正式计算之前，应该对程序进行严格而细致的检查，以保证程序的正确性。

程序正确性的检查方法通常分为两种：一种是由人工进行检查，即所谓静态检查；另一种是利用机器进行检查，即所谓动态检查。

一　静态检查

静态检查是保证程序正确性的一个重要环节。其实质是：检查者按照机器执行程序的顺序，采用人工模拟机器的方法来执行程序，并且依照模拟计算的结果，对程序进行深入细致的分析，从而判断程序的正确性，查出编制上的差错。一般可按“顺过程”和“逆过程”进行。所谓“顺过程”就是以框图为依据，按照执行顺序检查各段程序是否真正实现了框图的要求。“逆过程”是以程序为依据，按照程序的执行顺序，把各段程序还原为框图和计算公式，再把还原结果与原始公式和框图进行核对比较，查出程序中的差错。只要静态检查做得很充分，就可以在上机计算前消除绝

大部分问题和差错。

对物理模型的检查中，应着重于物理过程主次因素的选取是否合理，各物理量和参数的量纲是否相容，定解条件对于求解是否已经足够，对某些特异的定解条件（如介质的密度分布有强间断）可能引起的异常结果是否有相应的措施等等。

在检查计算方案时要注意离散变量的时间和空间标号的正确性和计算公式推导的正确性。尤其要注意计算公式在交界面和边界点处的特殊形式是否有错，定解条件离散化后在某些计算点的迭加是否会造成不正常的结果，公式中各量的计算次序是否错乱等等。

静态检查的重点是框图检查。应着重放在逻辑控制部分，例如在各种特殊情况下的程序措施（循环的起终点，边界点，界面点等）是否正确，循环的初态和终态所需信息和计算是否有错乱，各循环和各块框图间的交接是否正确，应保存的结果在各部分交接时是否被破坏。还应注意更正各种类型的程序错误，如数组越界、数型错乱、数组与工作单元符号用重、函数与子程序的使用有错、判断条件写反等等。

二　动态检查

静态检查后，并不能保证所有差错都已消除，尚须作动态检查对程序作调整和试算。动态检查的基本思想是：首先根据原始问题建立一个具有相同性质和功能的简化模型问题，并事先由人工对模型问题算出结果，然后上机利用程序对模型问题进行计算，把机器算出的结果与人工计算结果相比较，如果相符就认为程序是正确的，否则说明程序中还有错误存在。动态检查可采用如下一些方法：

1.设计一些便于计算的原始数据代替正常计算所用的数据，并在程序中插入一些输出中间结果的卡片，在机器上运行后得出计算结果，与手算结果比较。

2.编制调试程序，用来控制原有程序按给定的原始数据和指定的路线运行，得出中间结果作验证。通常是按照问题特点把程序划分成若干块，使各块具有相对独立性。先分别对各块进行独立的检查与调整（通常称为“分调”）；然后把各块联系起来进行综合调整（称为“总调”）。分调目的在于把存在错误的区域明显化、局部化，发现错误就只须在个别块中查找。又各块具有独立性，所以当某块有错时不会影响其它各块的检查调整。在分调完成的基础上进行总调，总调目的是检查各块联系起来工作的正确性。

3.将数学模型简化为精确解的形式，并对程序作相应处理，将所得的计算结果与精确解比较。

4.将计算结果与已知的结果比较，或与粗估结果和实验结果比较，定量或定性地判断结果的可靠性。

5.根据物理学的基本守恒定律对计算结果进行守恒检验，并输出守恒检验结果，若其相对误差很小，则从总体上可以肯定结果的正确性。

当然，数值计算中还应考虑如何节省机时，大量数据的处理，计算故障的排除以及充分利用计算机空间和时间的一些方法等等。

第三章　电阻网络和线性、非线性方程组的数值解法

解线性及非线性电阻网络，可以利用节点电压等方法，列出电路方程。在线性系统里，方程组的形式为$AX=B$，其中$A=(a_{ij})$为$n\times n$的系数矩阵，B为给定的n维列向量，X为n维解向量。在非线性系统里，解向量X满足一个非线性向量方程。

许多其它类型的问题，诸如流体网络，电力系统，广义流以及某些静态经济问题等，虽然它们的物理性质是不一样的，但往往都归结成上述方程组的形式。

本章重点介绍线性代数方程组的直接法——高斯消去法和非线性方程组的牛顿法与下降法。

§1. 电路中各电阻上的端电压和线性代数方程组的直接法

许多实际问题的解决，常常要化到求解线性代数方程组。如求图6电路中各电阻上的端电压v_i $(i=1,2,3,4,5,6)$。

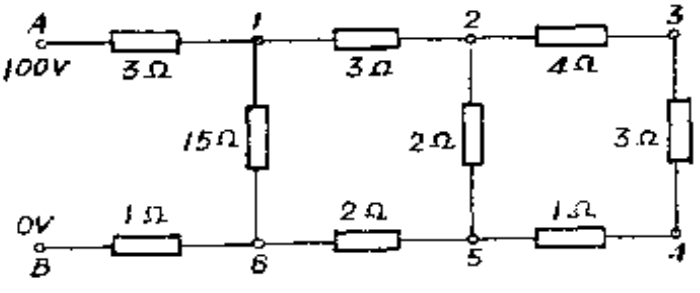


图　6

根据电学知识，电路图中各节点上的电流堆积应为0，

如对节点1应有

$$i_{A1}+i_{21}+i_{61}=\frac{100-v_1}{3}+\frac{v_2-v_1}{3}+\frac{v_6-v_1}{15}=0,$$

即

$$11v_1-5v_2-v_6=500$$

类似地，列出其他节点上的公式，则得

$$\begin{cases}
11v_1-5v_2 & & & & & -v_6=500,\\
4v_1-13v_2+3v_3 & & & +6v_6 & & =0,\\
& 3v_2-7v_3+4v_4 & & & & =0,\\
& & v_3-4v_4+3v_5 & & & =0,\\
& v_2 & & +2v_4-4v_5+v_6 & & =0,\\
2v_1 & & & & +15v_6-47v_6 & =0.
\end{cases}$$

若表示为矩阵形式，则有

$$\boldsymbol{KV}=\boldsymbol{F}$$

其中

$$K=\begin{vmatrix}
11 & -5 & 0 & 0 & 0 & -1\\
4 & -13 & 3 & 0 & 6 & 0\\
0 & 3 & -7 & 4 & 0 & 0\\
0 & 0 & 1 & -4 & 3 & 0\\
0 & 1 & 0 & 2 & -4 & 1\\
2 & 0 & 0 & 0 & 15 & -47
\end{vmatrix},$$

$$V=\begin{vmatrix}
v_1\\ v_2\\ v_3\\ v_4\\ v_5\\ v_6
\end{vmatrix},\qquad
F=\begin{vmatrix}
500\\ 0\\ 0\\ 0\\ 0\\ 0
\end{vmatrix}.$$

这是含有六个未知量的线性代数方程组的求解问题。上海文化广场的钢架屋顶，要计算钢管的拉力、张力，需要解算包含107个未知数的联立方程。用差分法求解偏微分方程时，最后往往都归结为求解代数方程组。因此在这里作一简单介绍。

求解线性代数方程组有两类方法。一类所谓直接解法，是指在计算过程中所有的运算都是精确的前提下，经过有限多次运算就可得到准确解的那一类解法；另一类解法一般说来不具有上述特征，称之为迭代方法。我们只叙述直接法—消去法。

用矩阵和向量的记号，线性代数方程组可以简单地表示成

$$AX = B \tag{1.1}$$

其中$A = (a_{ij})$为$n \times n$的系数矩阵，B为给定的n维列向量，X为所求的解向量，也是n维的。

我们知道，如果A的行列式$\det A \neq 0$，则方程组（1.1）有唯一解，并且可用克来姆法则将解表示出来，即

$$X_j = \frac{D_j}{D}, \qquad j = 1, 2, \cdots, n \tag{1.2}$$

其中X_j为X的第j个分量，$D = \det A$，D_j为用B代替A的第j列后所得矩阵的行列式。今后总假定$D = \det A \neq 0$。

（1.2）式虽然给出了精确解，然而由于需要计算$n+1$个n阶行列式，其运算量很大，很不经济。下面叙述的消去法，其运算量比用（1.2）式要小得多。

在初等数学中，曾学过用消去法解二元或三元一次联立方程组。这个办法便是我们要讲述的消去法，它对于多个未

知数仍然适用。

现在，我们以四个未知数为例，叙述消去法的基本思想，从而可找出对于n个未知数的一般有规律的计算公式。

已知方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 = b_1, & (1.3) \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 = b_2, & (1.4) \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 = b_3, & (1.5) \\ a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 = b_4. & (1.6) \end{cases}$$

消去法的基本思想是将（1.3）—（1.6）式化成阶梯形方程组

$$\left.\begin{aligned} x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + a_{14}^{(1)}x_4 &= b^{(1)}_1 \\ x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + a_{24}^{(2)}x_4 &= b^{(2)}_2 \\ x_3 + a_{34}^{(3)}x_4 &= b^{(3)}_3 \\ a_{44}^{(3)}x_4 &= b^{(3)}_4 \end{aligned}\right\} \quad (1.7)$$

这个步骤称为消元过程。然后由方程组（1.7）最下面的解起，往上回代，逐次解得x_4，x_3，x_2，x_1这个步骤称为回代过程。具体步骤是：先将（1.3）式写成

$$x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + a_{14}^{(1)}x_4 = b^{(1)}_1 \quad (1.3')$$

消去法的第一步是将（1.4）—（1.6）式中的未知数x_1消去，为此，

（1.3′）式*（$-a_{21}$）+（1.4）式得

$$a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + a_{24}^{(1)}x_4 = b^{(1)}_2 \quad (1.8)$$

（1.3′）式*（$-a_{31}$）+（1.5）式得

$$a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 + a_{34}^{(1)}x_4 = b^{(1)}_3 \quad (1.9)$$

（1.3′）式*（$-a_{41}$）+（1.6）式得

$$a_{42}^{(1)}x_2 + a_{43}^{(1)}x_3 + a_{44}^{(1)}x_4 = b^{(1)}_4 \quad (1.10)$$

其中

$$\begin{cases} b_1^{(1)} = \dfrac{b_1}{a_{11}}, \\ a_{1j}^{(1)} = \dfrac{a_{1j}}{a_{11}}, \qquad j = 2, 3, 4 \\ a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - a_{i1}a_{1j}^{(1)}, \quad i, j = 2, 3, 4 \\ b_i^{(1)} = b_i - a_{i1}b_1^{(1)}. \quad j = 2, 3, 4 \end{cases} \tag{1.11}$$

同样，将（1.8）式写成

$$x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + a_{24}^{(2)}x_4 = b_2^{(2)} \tag{1.8'}$$

下一步是将（1.9）和（1.10）式中的未知数 x_2 消去，为此，（1.8′）式*（$-a_{32}^{(1)}$）+（1.9）式得

$$a_{33}^{(2)}x_3 + a_{34}^{(2)}x_4 = b_3^{(2)} \tag{1.12}$$

（1.8′）式*（$-a_{42}^{(1)}$）+（1.10）式得

$$a_{43}^{(2)}x_3 + a_{44}^{(2)}x_4 = b_4^{(2)} \tag{1.13}$$

其中

$$\begin{cases} b_3^{(2)} = \dfrac{b_3^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}, \\ a_{2j}^{(2)} = \dfrac{a_{2j}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}, \qquad j = 3, 4 \\ a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - a_{i2}^{(1)}a_{2j}^{(2)}, \quad i, j = 3, 4 \\ b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - a_{i2}^{(1)}b_2^{(2)}. \quad j = 3, 4 \end{cases} \tag{1.14}$$

继续这个过程，即将（1.13）式中的未知数 x_3 消去，则方程组最后化成（1.7）式的形式。

其中

$$\begin{cases} b_3^{(3)}=\dfrac{b_3^{(2)}}{a_{33}^{(2)}}, \\ a_{3j}^{(3)}=\dfrac{a_{3j}^{(2)}}{a_{33}^{(2)}}, & j=4 \\ a_{ij}^{(3)}=a_{ij}^{(2)}-a_{i3}^{(2)}a_{3j}^{(3)}, & i,\ j=4 \\ b_i^{(3)}=b_i^{(2)}-a_{i3}^{(2)}b_3^{(3)}. & j=4 \end{cases} \tag{1.15}$$

显然，（1.7）式很容易求解：先从第四个方程算出 $x_4=b_4^{(3)}/a_{44}^{(3)}$，然后代入到第三个方程中算出$x_3$；将$x_4$，$x_3$代入到第二个方程中算出$x_2$；再将$x_4$，$x_3$，$x_2$代入到第一个方程中算出$x_1$。

消去法即如上所述。四个未知数的消去过程，要三个步骤。因此，对n个未知数说来，应该有$n-1$步。至于系数的计算公式，不难从（1.11），（1.14）和（1.15）式中看出有如下一般规律：

$$\begin{cases} \dfrac{B_k}{A_{kk}}=>B_k, & k=1,\ 2,\ \cdots,\ N-1 \\ \dfrac{A_{kj}}{A_{kk}}=>A_{kj}, & j=k+1,\ k+2,\ \cdots,\ N \\ A_{ij}-A_{ik}*A_{kj}=>A_{ij}, & i,\ j=k+1,\ k+2,\ \cdots,\ N \\ B_i-A_{ik}*B_k=>B_i. & j=k+1,\ k+2,\ \cdots,\ N \end{cases}$$

这样一来，我们可直接写出高斯消去法程序。

```
SUBROUTINE GSX(N, A, B)
DIMENSION A(N, N) , B(N)
```

```
      N1 = N - 1
      DO 15 K = 1, N1
      C = 1.0/A(K, K)
      B(K) = B(K) * C
      KP1 = K + 1
      DO 10 J = KP1, N
      A(K, J) = A(K, J) * C
      DO 20 I = KP1, N
   20 A(I, J) = A (I, J) - A(I, K) * A(K, J)
   10 B(J) = B(J) - A(J, K) * B(K)
   15 CONTINUE
      B(N) = B(N)/A(N, N)
      DO 40 K = 1, N1
      I = N - K
      C = 0.0
      IP1 = I + 1
      DO 50 J = IP1, N
   50 C = C + A(I, J) * B(J)
   40 B(I) = B(I) - C
      RETURN
      END
```

程序功能

本过程采用高斯消去法解代数方程组

$$AX = b$$

其中$A = (a_{ij})$为$n \times n$阶系数矩阵，X为解向量$(X_1, X_2,$

…，$X_n)^T$，b为右端列向量 $(b_1, b_2, \cdots, b_n)^T$。

当A的对角线元素a_{ii} $(i=1, 2, \cdots, n)$ 的绝对值比它同一行的其它元素的绝对值都大时，所得解的精度较好。

使用说明

1。 子程序语句

SUBROUTINE GSX(N, A, B)

2。 哑元说明

N：输入参数，整变量，方程组的阶数。

A：$N\times N$个元素的二维实数组，输入参数，按行存放矩阵A的元素。工作结束时A被破坏。

B：N个元素的一维实数组。开始存放右端列向量B，最终存放解向量X。

例题　　求解方程组

$$\begin{pmatrix} 2 & 6 & -1 \\ 5 & -1 & 2 \\ -3 & -4 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -12 \\ 29 \\ 5 \end{pmatrix}$$

计算结果

$$X_1=3,\ X_2=-2,\ X_3=6.$$

要说明一点的是，在高斯消去法中，逐次用系数a_{11}，$a_{22}^{(1)}$，$a_{33}^{(2)}$，…作为除数进行除法运算。如果这些数中有一个为零，或者是绝对值较小的话，计算中可能出现除法溢出。解决的办法是：在消去X_1时，选X_1中的系数具有绝对值最大的一个方程作为第一个方程，用它的X_1的系数a_{11}作为除数进行运算。同样，在消X_2时，选第二和第二个以后的X_2中的系数中绝对值最大的一个作为第二个方程，用它的X_2的系数

$a_{22}^{(1)}$作为除数进行运算.继续这个过程，就可得到精度较高的解。这种处理方法，称为主元素消去法。

这个过程的计算方法与上面的高斯消去法基本相同，只是在正消过程中每次进行消元之前，对$A^{(K-1)}$的第k列选取绝值最大的元素$a_{i_0,k}^{(K-1)}$，即

$$|a_{i_0,k}^{(K-1)}| = \max_{K\le i\le n}\{|a_{i,K}^{(K-1)}|\}$$

并把主行（第i_0行）与第k行的元素互换，然后才开始正消过程的计算，其余的计算公式与高斯消去法公式相同。下面给出列主元高斯消去法程序，其功能和使用说明同高斯消去法，只是EPS代表值参，作控制常数用。

```
      SUBROUTINE GSL(N, A, B, EPS)
      DIMENSION A(N, N) , B(N)
      NE = N - 1
      DO 10 K = 1, NE
      C = 0.0
      DO 2 I = K, N
      IF(ABS(A(I, K)).LE.ABS(C) ) GOTO 2
      C = A(I, K)
      I0 = I
    2 CONTINUE
      IF(ABS(C).GE.EPS) GOTO 3
      STOP 2222
    3 IF(I0.EQ.K) GOTO 6
      DO 4 J = K, N
      T = A(K, J)
      A(K, J) = A(I0, J)
```

```
4     A(I0, J) = T
      T = B(K)
      B(K) = B(I0)
      B(I0) = T
6     KPI = K + 1
      C = 1.0/C
      B(K) = B(K) * C
      DO 10 J = KPI, N
      A(K, J) = A(K, J) * C
      DO 20 I = KPI, N
20     A(I, J) = A(I, J) - A(I, K) * A(K, J)
10     B(J) = B(J) - A(J, K) * B(K)
      B(N) = B(N)/A(N, N)
      DO 40 K = 1, NE
      I = N - K
      C = 0.0
      IPI = I + 1
      DO 50 J = IPI, N
50     C = C + A(I, J) * B(J)
40     B(I) = B(I) - C
      RETURN
      END
```

例题

求解方程组

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 5 & -4 & 3 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -4 \\ -12 \\ 11 \end{pmatrix}$$

计算结果

$$X_1 = 3,\ X_2 = 6,\ X_3 = -1.$$

§2. 非线性方程组的牛顿法和下降法

当求解非线性电阻网络的支路电流和电压时，常常归结为求解如下形式的联立方程组：

$$\begin{cases} x_1 = g_1(x_1, x_2, \cdots, x_n), \\ x_2 = g_2(x_1, x_2, \cdots x_n), \\ \vdots \\ x_n = g_n(x_1, x_2, \cdots, x_n), \end{cases}$$

亦即

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0, \\ f_2(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0, \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \cdots, x_n) = 0. \end{cases}$$

解非线性方程组，通常采用两种方法：一种是属于线性化方法，即将非线性方程组以一线性方程组来近似，由此构造一种迭代格式，用以逐次逼近所求的解答。另一种是属于求函数极小值的方法，即由这些非线性函数$f_1, f_2, \cdots, f_n$构造一个指标函数，如令$F(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \sum_{i=1}^{n} f_i^2$，然后，用

下降法求模函数的极小值点，此极小值点即是非线性方程组的一组解。

一　牛顿迭代法

牛顿法的实质是把非线性问题线性化。为叙述简便起见，我们以两个方程组为例来介绍。显然，该方法可推广到一般n个方程组的情形。下面考虑非线性方程组

$$\begin{cases} f_1(x, y) = 0 \\ f_2(x, y) = 0 \end{cases} \tag{2.1}$$

设(x_0, y_0)是方程组的一组近似解，我们要求更精确的解。为此，把$f_1(x, y)$和$f_2(x, y)$在(x_0, y_0)附近作泰勒展开，并取其线性部分，得到方程组

$$\begin{cases} \dfrac{\partial f_1(x_0, y_0)}{\partial x}(x - x_0) + \dfrac{\partial f_1(x_0, y_0)}{\partial y}(y - y_0) = -f_1(x_0, y_0) \\ \dfrac{\partial f_2(x_0, y_0)}{\partial x}(x - x_0) + \dfrac{\partial f_2(x_0, y_0)}{\partial y}(y - y_0) = -f_2(x_0, y_0) \end{cases} \tag{2.2}$$

只要系数矩阵的行列式

$$J_0 = \left| \begin{matrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial x} & \dfrac{\partial f_1}{\partial y} \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial x} & \dfrac{\partial f_2}{\partial y} \end{matrix} \right|_{x_0, y_0} \neq 0$$

则方程组（2.2）的解可写成

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + \dfrac{1}{J_0}\begin{vmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial y} & f_1 \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial y} & f_2 \end{vmatrix}_{(x_0,\ y_0)} \\ y_1 = y_0 + \dfrac{1}{J_0}\begin{vmatrix} f_1 & \dfrac{\partial f_1}{\partial x} \\ f_2 & \dfrac{\partial f_2}{\partial x} \end{vmatrix}_{(x_0,\ y_0)} \end{cases} \tag{2.3}$$

于是，从 $(x_n,\ y_n)$ 计算 $(x_{n+1},\ y_{n+1})$ 的迭代公式便是

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n + \dfrac{1}{J_n}\begin{vmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial y} & f_1 \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial y} & f_2 \end{vmatrix}_{(X_n,\ Y_n)} \\ y_{n+1} = y_n + \dfrac{1}{J_n}\begin{vmatrix} f_1 & \dfrac{\partial f_1}{\partial x} \\ f_2 & \dfrac{\partial f_2}{\partial x} \end{vmatrix}_{(X_n,\ Y_n)} \end{cases} \tag{2.4}$$

计算直到相邻两次近似值满足

$$\max(\delta_x,\ \delta_y) < \in \tag{2.5}$$

时为止。

其中$\delta_x = |x_{n+1} - x_n|$，$\delta_y = |y_{n+1} - y_n|$，$\in$为容许误差限。

例　设

$$\begin{cases} f_1(x,\ y) = x^2 + y^2 - 5 = 0 \\ f_2(x,\ y) = (x+1)y - (3x+1) = 0 \end{cases}$$

用牛顿法求在 $(x_0, y_0)=(1, 1)$ 附近的解。

解　先计算偏导数矩阵

$$\begin{vmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2x & 2y \\ y-3 & x+1 \end{vmatrix}$$

从 $(x_0, y_0)=(1, 1)$ 出发，计算

$$f_1(x_0, y_0)=-3, \quad f_2(x_0, y_0)=-2, \quad J_0=8\neq 0,$$

于是

$$x_1=1+\frac{1}{8}\begin{vmatrix} 2 & -3 \\ 2 & -2 \end{vmatrix}=1+\frac{1}{4}$$

$$y_1=1+\frac{1}{8}\begin{vmatrix} -3 & 2 \\ -2 & -2 \end{vmatrix}=2+\frac{1}{4}$$

再从 (x_1, y_1) 出发算出

$$x_2=1, \quad y_2=2+\frac{1}{36}$$

如此继续下去，直到相邻两次近似值满足 (2.5) 式为止。

可以证明，当初值充分接近解时，牛顿迭代过程是按平方收敛速度收敛的。但每步需要的计算量较大（矩阵求逆），同时实际使用中表明，该方法需要有较好的初值，否则很可能发散。下面给出牛顿迭代法程序：

```
SUBROUTINE NEWTON(N, XN, XNE, Y,
YF, DY, W, EP, EPS)
DIMENSION XN(N), XNE (N), Y(N),
YF(N), DY(N, N)
```

```
      NT = N
7     DO 1 I = 1, N
1     XN(I) = XNE(I)
      CALL F(XN, Y)
      DO 2 I = 1, N
      XNE(I) = XN(I)
2     YF(I) = - Y(I)
      DO 4 I = 1, N
      DO 3 J = 1, N
3     XN(J) = XNE(J)
      XN(I) = (1.0 + W) * XN(I)
      CALL F(XN, Y)
      DO 4 J = 1, N
4     DY(J, I) = (Y(J) + YF(J))/(W * XNE(I))
      CALL GSL(NT, DY, YF, EPS)
      DO 5 I = 1, N
5     XNE(I) = XNE(I) + YF(I)
      C = - 1.0
      DO 6 I = 1, N
      D = ABS(YF(I))
      IF(C.LT.D)C = D
6     CONTINUE
      IF(C.GE.EP) GOTO 7
      RETURN
      END
```

程序功能

本过程采用牛顿迭代法，求实系数非线性方程组$f_i(x_1, x_2, \cdots, x_n)=0$，$(i=1, 2, \cdots, n)$，的一组实根。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE NEWTON(N,XN, XNE, Y, YF, DY, W, EP, EPS)

2. 哑元说明

N: 整变量，输入参数，表示方程组的个数。

XN: N个元素的一维实数组，程序的工作单元。

XNE: N个元素的一维实数组，输入、输出参数，调用前，存放根的迭代初始值，调用后，存放计算结果（根）。

Y: N个元素的一维实数组，存放函数值。

YF: N个元素的一维实数组，程序的工作单元。

DY: $N*N$个元素的二维实数组，程序的工作单元。

W: 实变量，输入参数，表示求偏导数的步长因子，通常取为10^{-5}或10^{-6}。

EP: 实变量，输入参 ，表示所求根的容许误差限。

EPS: 实变量，输入参数，在列主元高斯消去法中作控制常数用。

3. 所调用的过程

SUBROUTINE F(X, Y)，表示计算函数值的过程，由使用者自行编写。其中，数组$X(N)$存放函数的自变量值，$Y(N)$存放函数值。

SUBROUTINE GSL(N, A, B, EPS)，其用法见列主元高斯消去法程序的说明。

例题

求下列非线性方程组

$$\begin{cases} f_1 = x_1 - 5x_2^2 + 7x_3^2 + 12 = 0, \\ f_2 = 3x_1x_2 + x_1x_3 - 11x_1 = 0, \\ f_3 = 2x_2x_3 + 40x_1 = 0, \end{cases}$$

的一组实根。

精确解：$x_1 = 1$，$x_2 = 5$，$x_3 = -4$。取初始迭代值 $(x_1^0, x_2^0, x_3^0) = (1.5, 7.5, -6)$，$W = 10^{-6}$，$EP = 10^{-8}$，$EPS = 10^{-8}$时，计算结果：$x_1 = 1.000000$，$x_2 = 5.000000$，$x_3 = -3.999999$。

二 下降法

所谓最速下降法亦称梯度法是求函数极小值的方法中最简单，最直观，也是最流行的方法之一，利用它可提高收敛速度。

假设你跳伞降落到一个充满迷雾的山谷斜坡上，并希望下到山谷底部去，因为那里有掩蔽所。由于有雾，你看不见掩蔽所，问题是怎样选择行进的方向呢？当然，你总应该朝下坡方向走，但某些下坡方向比其它方向更好。如果你手头有个小弹子，让它掉下，它就将沿局部下降最陡（即坡度最大）的方向往山下滚。于是，你就知道了自己应选取的行进方向（至少在一段时间内）。走几步，停下来，让弹子再掉一次，并以此来改变行进方向。不断重复这一步骤，除非你陷入了一个无掩蔽所的局部山凹，否则这个步骤显然能保证带你到山底下。

上述步骤（和所有下降算法一样）的每一阶段都要确定两个特征：

1。 什么是好的方向？

2。 按这个“好”的方向，能走多远，需要再提问题1？

为简便起见，我们仍以两个方程组为例。考虑（2.1）式，并构造一指标函数：

$$F(x,\ y) = f_1^2 + f_2^2 \qquad (2.6)$$

用求F的零极小值点来得到方程组的解。

函数$F(x,\ y)$在几何上是一空间曲面，它与XOY面相切的点即是它的零极小值点（图7、图8）

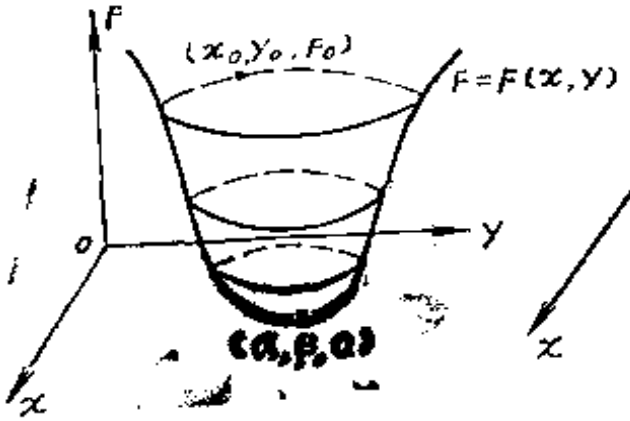


图 7

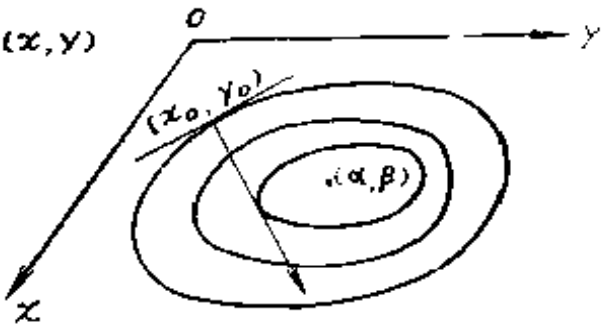


图 8

对于空间曲面$F = F(x,\ y)$，如果用一系列平行XOY面的平面F等于常数相截之，可得一族平面曲线，将它们投影于xoy平面，得到图8的曲线族，称为曲面的等高线族，处在同一条等高线上的F值相同。每条等高线对应一个F值，在极小值点$(\alpha,\ \beta)$附近，其等高线形成以$(\alpha,\ \beta)$为中心的封闭曲线族，且相应的F值由外往里不断下降，当达到$(\alpha,\ \beta)$时，F值为零。

对于处在$F(x,\ y)$定义域D内的任何点，总存在族中一条等高线通过它。如果从D内的某一点$(x_0,\ y_0)$出发，沿

着使F值下降的方向逐步下降F值，一直降到它的零极小值，就可得到所求的解。

我们知道，在一点处等高线的法向，也即函 $F(x, y)$ 在该点的梯度方向：

$$\vec{G}=\mathrm{grad}F=\left(\frac{\partial F}{\partial x}, \frac{\partial F}{\partial y}\right),$$

是使F值上升最快的方向。因此，沿其反方向就是使$F(x, y)$值下降最快的方向。最速下降法就是沿着这样的方向来逐步下降F值的。具体作法是：

设 (x_0, y_0)是解的一个近似值，计算F在此点的梯度值

$$\vec{G}_0=(g_{10}, g_{20})^T,$$

其中

$$g_{10}=\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_{(x_0, y_0)}=2\left[\left(\frac{\partial f_1}{\partial x}\right)f_1+\left(\frac{\partial f_2}{\partial x}\right)f_2\right]_{(x_0, y_0)}$$

$$g_{20}=\left(\frac{\partial F}{\partial y}\right)_{(x_0, y_0)}=2\left[\left(\frac{\partial f_1}{\partial y}\right)f_1+\left(\frac{\partial f_2}{\partial y}\right)f_2\right]_{(x_0, y_0)}$$

从 (x_0, y_0) 出发，沿负梯度方向 $-\vec{G}_0$ 跨一适当步长，问题是应该跨多大。为此，引进参数λ，设新得到的点为

$$\begin{cases}x_1=x_0-\lambda g_{10}\\ y_1=y_0-\lambda g_{20}\end{cases}\tag{2.7}$$

我们看λ应如何选择，才能使新的点 (x_1, y_1) 是 $F(x, y)$在此方向 $-\vec{G}_0$上的相对极小值，即

$$F(x_1, y_1)=\min\{F(x_0-\lambda g_{10}, y_0-\lambda g_{20})\}$$

由于目的是要定出在 (x_0, y_0) 附近的另一近似值，

故将$f_1(x_0-\lambda g_{10},\ y_0-\lambda g_{20})$和$f_2(x_0-\lambda g_{10},\ y_0-\lambda g_{20})$在$(x_0,\ y_0)$处作泰勒展开，并略去$\lambda^2$及以后的项，得到$F$的近似值为

$$F(x_0-\lambda g_{10},\ y_0-\lambda g_{20})=[f_1(x_0-\lambda g_{10},\ y_0-\lambda g_{20})]^2+[f_2(x_0-\lambda g_{10},\ y_0-\lambda g_{20})]^2$$

$$\approx\Big[f_1^2-2\lambda f_1\Big(g_{10}\frac{\partial f_1}{\partial x}+g_{20}\frac{\partial f_1}{\partial y}\Big)+\lambda^2\Big(g_{10}\frac{\partial f_1}{\partial x}+g_{20}\frac{\partial f_1}{\partial y}\Big)^2+f_2^2-2\lambda f_2\Big(g_{10}\frac{\partial f_2}{\partial x}+g_{20}\frac{\partial f_2}{\partial y}\Big)+\lambda^2\Big(g_{10}\frac{\partial f_2}{\partial x}+g_{20}\frac{\partial f_2}{\partial y}\Big)^2\Big]_{(x_0,\ y_0)}$$

由极值必要条件，令$\dfrac{\partial F}{\partial\lambda}=0$，得

$$\lambda=\left|\frac{\Big(g_{10}\dfrac{\partial f_1}{\partial x}+g_{20}\dfrac{\partial f_1}{\partial y}\Big)f_1+\Big(g_{10}\dfrac{\partial f_2}{\partial x}+g_{20}\dfrac{\partial f_2}{\partial y}\Big)f_2}{\Big(g_{10}\dfrac{\partial f_1}{\partial x}+g_{20}\dfrac{\partial f_1}{\partial y}\Big)^2+\Big(g_{10}\dfrac{\partial f_2}{\partial x}+g_{20}\dfrac{\partial f_2}{\partial y}\Big)^2}\right|_{(x_0,\ y_0)}\tag{2.8}$$

将它代入式（2.7），就得到新的$(x_1,\ y_1)$。

为编制程序简便，有时，我们像采用牛顿迭代法那样，把$F(x_1,y_1)$在$(x_0,\ y_0)$附近直接作泰勒展开，并略去λ^2及其以后各项，得

$$F(x_1,\ y_1)=F(x_0,\ y_0)-\lambda\Big[g_{10}\frac{\partial F}{\partial x}+g_{20}\frac{\partial F}{\partial y}\Big]_{(x_0,\ y_0)}\tag{2.9}$$

于是，在$(x_0,\ y_0)$附近，式（2.9）的近似式为

$$F(x_0,\ y_0)-\lambda\left[g_{10}\frac{\partial F}{\partial x}+g_{20}\frac{\partial F}{\partial y}\right]_{(x_0,\ y_0)}=0,$$

解得

$$\lambda=\frac{F(x_0,\ y_0)}{\left[\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial F}{\partial y}\right)^2\right]_{(x_0,\ y_0)}} \tag{2.10}$$

将它代入到式（2.7），就得到新的 $(x_1,\ y_1)$，以此作为 F 沿 $-\vec{G}_0$ 方向的相对极小值点的近似值。然后，再从新的近似值 $(x_1,\ y_1)$ 出发，重复上述过程，直到 F 降到充分小的时候为止。

显然，可将结果推广到 n 个联立方程组

$$f_i(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n)=0,\quad i=1,\ 2,\ \cdots,\ n \tag{2.11}$$

上去，定义指标函数

$$F(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n)=\sum_{i=1}^{n}f_i^2 \tag{2.12}$$

则下降法的迭代公式为

$$x^{m+1}=x^m-\lambda_m\frac{\partial F_m}{\partial x^m} \tag{2.13}$$

其中 m 表示计算到第 m 步，

$$\lambda_m=\frac{F_m(x_1^m,\ x_2^m,\ \cdots,\ x_n^m)}{\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial F_m}{\partial x^m}\right)^2} \tag{2.14}$$

于是，下降法的整个计算步骤如下：

（1）先从给定一组不全为0的初值 $x_1^0,\ x_2^0,\ \cdots,\ x_n^0$ 出发，假设已经计算到第 m 步，得 $x_1^m,\ x^m,\ \cdots,\ x_n^m$。

（2）然后，计算指标函数 $F_m=F_m(x_1^m,\ x_2^m,\ \cdots,\ x_n^m)$。

(3) 若F_m<EPS，则认为x_1^m，x_2^m，…，x_n^m即为所求的解，否则计算偏导数：

$$\frac{\partial F_m}{\partial x_i^m}=\frac{F(x_1^m,\cdots,x_{i-1}^m,x_i^m+h_i,x_{i+1}^m,\cdots,x_n^m)-F(x_1^m,x_2^m,\cdots,x_n^m)}{h}$$

$$i=1,\ 2,\ \cdots,\ n.$$

其中$h=w*x^m$，w为控制收敛常数，一般选为10^{-6}或10^{-8}，EPS为控制精度常数，一般也选为10^{-5}或10^{-8}。

(4) 再计算新的迭代值：

$$x^{m+1}=x^m-\lambda_m\frac{\partial F_m}{\partial x^m},\qquad i=1,\ 2,\ \cdots,\ n.$$

其中

$$\lambda_m=\frac{F_m}{\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial F_m}{\partial x^m}\right)^2},$$

重复以(2)开始的计算过程。

按上述计算步骤，可编制出如下程序：

```
      SUBROUTINE ROTLS(N, X, Y, W, EPS,
      XT, C)
      DIMENSION X(N), Y(N), XT(N), C(N)
   10 CALL F(X, Y)
      A = 0.0
      DO 20 I = 1, N
      A = A + Y(I) * Y(I)
   20 XT(I) = X(I)
      IF(A.LT.EPS)GOTO 55
      DO 40 I = 1, N
```

```
      DO 30 J = 1, N
30    X(J) = XT(J)
      X(I) = (1.0 + W) * X(I)
      CALL F(X, Y)
      B = 0.0
      DO 35 J = 1, N
35    B = B + Y(J) * Y(J)
40    C(I) = (B - A)/(W * XT(I))
      B = 0.0
      DO 45 I = 1, N
45    B = B + C(I) * C(I)
      DO 50 I = 1, N
50    X(I) = XT(I) - A * C(I)/B
      GOTO 10
55    RETURN
      END
```

程序功能

本过程采用下降法求实系数非线性联立方程组：$f_i(x_1, x_2, \cdots x_n) = 0$，$(i = 1, 2, \cdots, n)$，的一组实根。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE ROTLS(N, X, Y, W, EPS, XT, C)

2. 哑元说明

N：整变量，输入参数，表示方程组的个数。

X：N个元素的一维实数组，输入、输出参数，调用前存放迭代初始值，调用后存放计算结果（根）。

Y：N个元素的一维实数组，存放函数值。

W：实变量，输入参数，表示求偏导数的步长因子，通常选为10^{-5}或10^{-6}。

EPS：实变量，输入参数，表示对指标函数要求的精确度，一般选为10^{-5}或10^{-6}。

XT，C：N个元素的一维实数组，程序所需的两套工作单元。

3. 所调用的过程

SUBROUTINE F(X, Y)，表示计算函数值的过程，由使用者自行编写。其中数组X(N)存放函数的自变量的值，Y(N)存放函数值。

4. 说明

若所选初值靠近方程组的根，则本过程计算一般是收敛的。若计算出现不收敛的情况，可采用在函数f_i上加权的办法使迭代过程收敛，或者，当精确度要求不高时，也可放大允许误差EPS。

例题

求下列方程组

$$\begin{cases} f_1 = x_1 + x_2^2 + x_3 - 1 = 0, \\ f_2 = 2x_1 + x_2 - 4x_3 = 0, \\ f_3 = 3x_1 - 4x_2 + x_3^2 = 0, \end{cases}$$

的一组实根。

取初值$(x_1^0, x_2^0, x_3^0) = (0.5, 0.5, 0.5)$，$W = 10^{-5}$，

EPS = 10^{-8}时，计算结果$x_1 = 0.78518136$，$x_2 = 0.49659783$，$x_3 = 0.36991140$。

一般说来，下降法对任意初值都能收敛，但其收敛速度是线性的，在开始几步以后，其收敛速度变得很慢。特别，当接近解答时，计算精确度的改善却很慢。因此，实际应用时，人们常常采用混合算法，即开始采用最速下降法使计算结果迅速到达解答附近，然后转牛顿算法，使计算结果进一步直趋解答。同时，监视牛顿法的进程，如发现有发散的趋势，就倒回到最速下降法去。这种联合起来使用，互相取长补短，达到既能保证收敛，又能加快收敛的目的。

最速下降法简单、直观（沿着最陡方向下坡）。但是很明显，当$F(x_1, x_2, \cdots, x_n)$的形状有如狭长山谷时，即使用了最佳步距控制，其效果仍不好。因此，发展出许多新方法，它们仍然需要在每一步确定方向和最佳步距，但方向不再是最陡下降方向，而是一个经修改过的方向，例如共轭梯度法和弗莱彻—鲍威尔方法等便是。

第四章　静电场、电子线路、热传导和扩散

本章介绍利用计算机处理静电场、电子线路、热传导和扩散问题的数值解。重点介绍计算定积分的辛甫生公式、龙贝格方法和振荡积分的菲隆（Filon）方法；介绍常微分方程的欧拉折线法、四阶龙格—库塔法和特雷纳方法；介绍抛物型方程的“追赶”法。另外，对误差与误差估计也做简单的介绍。

§1. 两个点电荷的电场中的电位

我们知道，静电场中某点的电位在数值上等于放在该点的单位正电荷的电位能，亦等于单位正电荷从该点经过任意的路径移到无限远时电场力所做的功。

设有点电荷q在无限大均匀电介质中产生一个电场，我们计算电场中任一点p处的电位。设q到p的距离为r，电介质的介电系数为$\in = 1$，则由电位的定义可得：

$$U = \frac{W_p}{q} = \frac{q}{\in r} = \frac{q}{r}$$

于是，两个点电荷到空间中任一点的电位为

$$U = \frac{q_1}{r_1} + \frac{q_2}{r_2} \qquad (1.1)$$

其中q_1和q_2代表两个点电荷所带的电量，r_1和r_2分别代表所求的电位点到两个点电荷的距离。

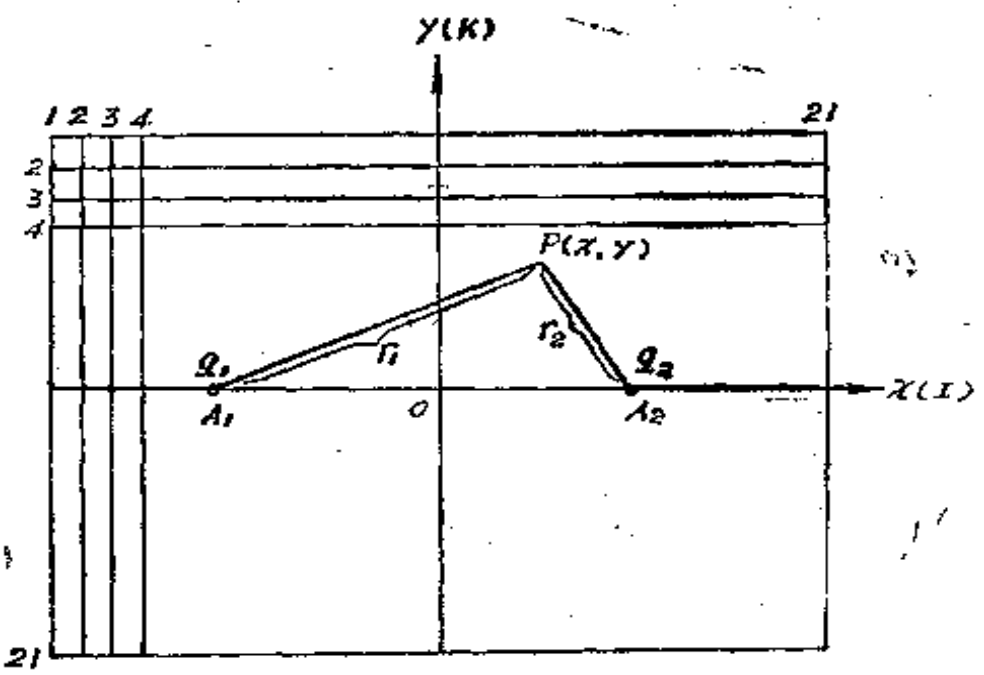


图 9　格点的电位

我们求空间每一点的电位。为简便起见，只考虑平面情形。并假设两个点电荷都处在X轴上，如图9所示。将x—y平面分成若干方格，例如x的变化在－10到10之间，y的变化也在－10到10之间。令

$$\begin{cases} x = I - 11, \ I = 1, \ 2, \ \cdots, \ 21 \\ y = 11 - k, \ k = 1, \ 2, \ \cdots, \ 21 \end{cases} \tag{1.2}$$

则所求电位点p（x，y）到q_1和q_2的距离r_1和r_2分别为

$$\begin{cases} r_1 = \sqrt{(x - A_1)^2 + y^2} \\ r_2 = \sqrt{(x - A_2)^2 + y^2} \end{cases} \tag{1.3}$$

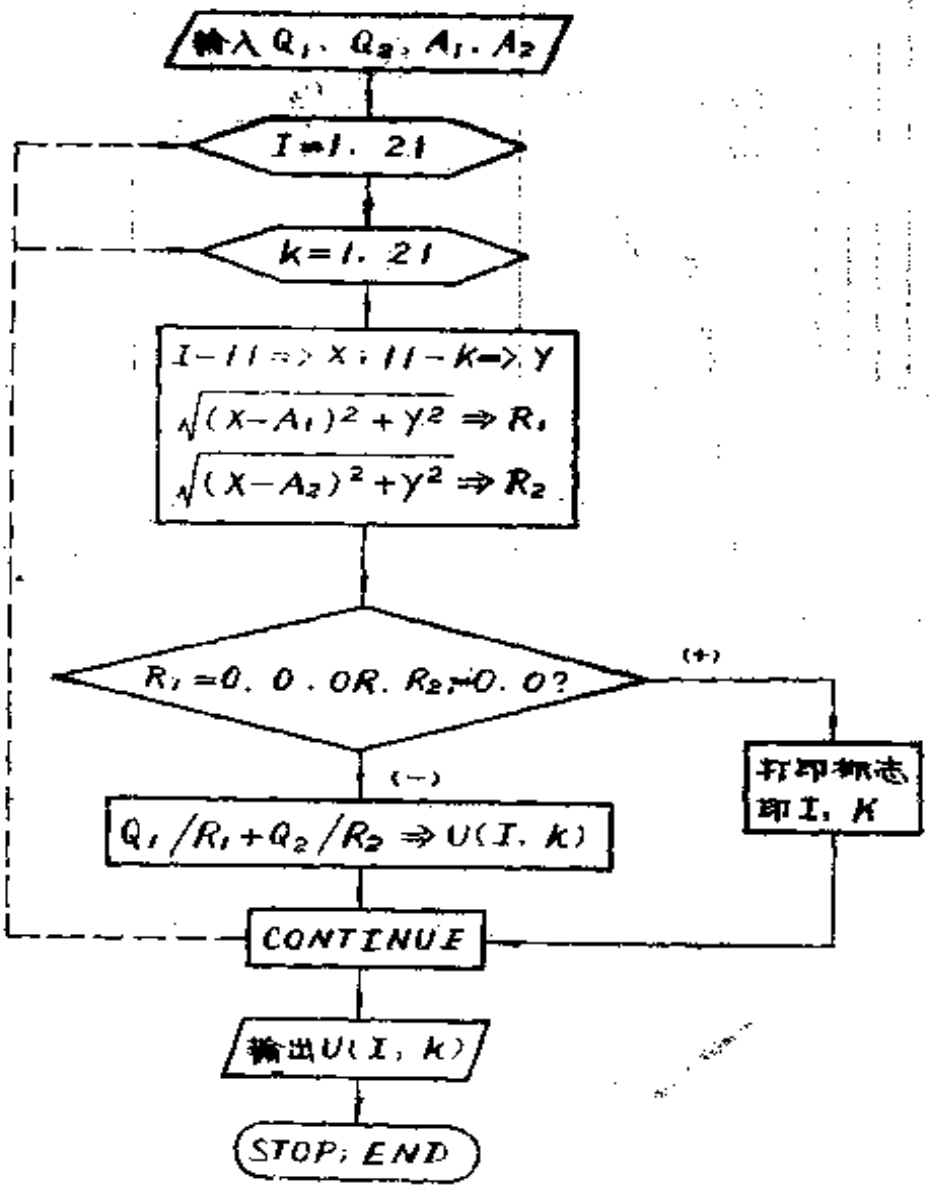
这里的A_1和A_2分别是q_1和q_2在X轴上的坐标。将（1.2）和

(1.3) 式代入 (1.1) 式，就可求得各格点的电位。

如果我们将平面格子分得足够小，求出电位值，将相同电位值的点用曲线联起来，就得到平面上的等电位曲线。

用完全类似的方法，可求三维空间中每一点的静电位以及求两个以上点电荷的静电位等。

下面给出两个点电荷产生静电位的框图：



§2. 点电荷系的电场中的电位和定积分的近似计算

如果电场是由q_1，q_2，……等若干点电荷产生的，则因任何一段路程上合力所做的功等于各分力所做功的代数和，所以

$$U_p = \frac{W_p}{q_0} = \frac{1}{4\pi\in_0}\sum_{i=1}^{n}\frac{q_i}{r_{ip}} \qquad (2.1)$$

式（2.1）表明，电场中第i个点电荷在P点产生的电位为

$$U_{ip} = \frac{1}{4\pi\in_0}\frac{q_i}{r_{ip}},$$

而总电位

$$U_p = \sum_{i=1}^{n} U_{ip}.$$

如果产生电场的电荷是连续分布的，则上述式中的求和可代换成积分。用dq表示分布电荷的任一电荷元（视为点电荷），设dq到电场中计算电位的P点的距离为r，则P点的电位为

$$U_c = \frac{1}{4\pi\in_0}\int\frac{dq}{r} \qquad (2.1')$$

当电荷呈体分布时，$dq=\rho dv$，有

$$U_c = \frac{1}{4\pi\in_0}\int\frac{\rho dv}{r} \qquad (2.2)$$

当电荷呈面分布时，$dq=\sigma ds$，有

$$U_p = \frac{1}{4\pi\in_0}\int_s\frac{\sigma ds}{r} \qquad (2.3)$$

当电荷呈线分布时，$dq=\eta dl$，有

$$U_{\circ}=\frac{1}{4\pi\in_{0}}\int_{l}\frac{\eta dl}{r} \qquad (2.4)$$

已知电荷密度ρ，σ，η的分布，便可用上面诸式计算出相应的电位。

像上面需要计算积分的问题，在科学实验和实际生产中经常碰到。例如力学和电学中功与功率的计算，电流，电压平均值和有效值的计算，以及一些几何图形的面积、体积和弧长的计算等等。

直观上看，求积分$U=\int_{a}^{b}f(x)dx$就是求曲线下的面积问题。因此，可选用如下近似公式：

一　矩形近似—矩形公式

将区间〔a，b〕N等分，在每个小区间里用常数（0次多项式）代替曲线，即

$$\begin{cases} x_k=a+(k-1)h,\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ N+1 \\ h=\dfrac{b-a}{N}, \end{cases}$$

$$\text{取}\ \widetilde{U}=h\sum_{i=1}^{N}f(x_i) \qquad (2.5)$$

显然，这个近似不是很好的。

二　梯形近似—梯形公式

将区间〔a，b〕N等分，在每个小区间里用折线（一次多项式）代替曲线，即

$$\begin{cases} x_k=a+(k-1)h,\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ N+1 \\ h=(b-a)/N, \end{cases}$$

取 $\widetilde{U}=h\left\{\frac{1}{2}[f(x_1)+f(x_{N+1})]+\sum_{i=2}^{N}f(x_i)\right\}$ (2.6)

这个近似程度好了一些。

三 抛物线近似—辛甫生公式

将区间〔a, b〕$2N$等分，在每个小区间里用抛物线（二次多项式）代替曲线，即

$$\begin{cases} x_k=a+(k-1)h,\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ 2N+1 \\ h=\dfrac{b-a}{2N} \end{cases}$$

取 $\widetilde{U}=\sum_{i=1}^{2N+1}A_if(x_i)$ (2.7)

下面我们来确定系数A_i。为此，设有一条抛物线通过曲线上三点：〔x_1, $f(x_1)$〕，〔x_2, $f(x_2)$〕，〔x_3, $f(x_3)$〕，则这条抛物线可写成：

$$y(x)=\sum_{i=1}^{3}\left(\prod_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{3}\frac{x-x_k}{x_i-x_k}\right)f(x_i)$$

显然，y (x)过上述三点且唯一。

于是，
$$\int_{x_1}^{x_3}y(x)dx=\sum_{i=1}^{3}\left(\int_{x_1}^{x_3}\prod_{\substack{k=1\\k\neq i}}^{3}\frac{x-x_k}{x_i-x_k}dx\right)f(x_i)$$
$$=\sum_{i=1}^{3}A_if(x_i)$$

令
$$\begin{cases} x=x_1+ht, \\ x_2=x_1+h, \\ x_3=x_1+2h, \end{cases}$$

则

$$\begin{cases} A_1 = h\int_0^2 \dfrac{h(t-1)h(t-2)}{(-h)(-2h)}\,dt = \dfrac{1}{3}h, \\ A_2 = h\int_0^2 \dfrac{hth(t-2)}{h(-h)}\,dt = \dfrac{4}{3}h, \\ A_3 = h\int_0^2 \dfrac{hth(t-1)}{2hh}\,dt = \dfrac{1}{3}h. \end{cases}$$

于是，得

$$\int_{x_1}^{X_{2N+1}} y(x)dx = \frac{h}{3}\left\{[f(x_1)+f(x_{2N+1})]+4\sum_{k=1}^{N} f(x_{2k}) + 2\sum_{k=1}^{N-1} f(x_{2k+1})\right\} \qquad (2.7')$$

（2.7′）式称为辛甫生（Simpson）公式。

编制程序通常采用变步长求积即节点（分点）加倍或步长减半，直到相邻两次求积结果满足给定误差精度要求时为止。

将（2.7′）式写成

$$\begin{cases} S_{2N} = \dfrac{h}{3}\{[f(a)+f(b)]+2*[\text{原各奇点处函数值}]+ \\ \qquad\qquad 4*[\text{原各偶点处函数值}]\} \\ h = (b-a)/2N \end{cases}$$

注意节点加倍后，原来各分点皆变成新的奇数点，于是

$$S_{4N} = \frac{h^*}{3}\{[f(a)+f(b)]+2*[\text{新各奇点处函数值}]+ 4*[\text{新各偶点处函数值}]\}$$

$$= \frac{h^*}{3}\{[f(a)+f(b)]+2*[\text{原各分点处函数值}] + 4*[\text{新添各分点处函数值}]\}$$

引入记号：

$$\begin{cases} FP = \{[f(a) + f(b)] + 2* \text{（原各分点处函数值）}\}, \\ CI = \{\text{新添各分点处函数值}\}, \end{cases}$$

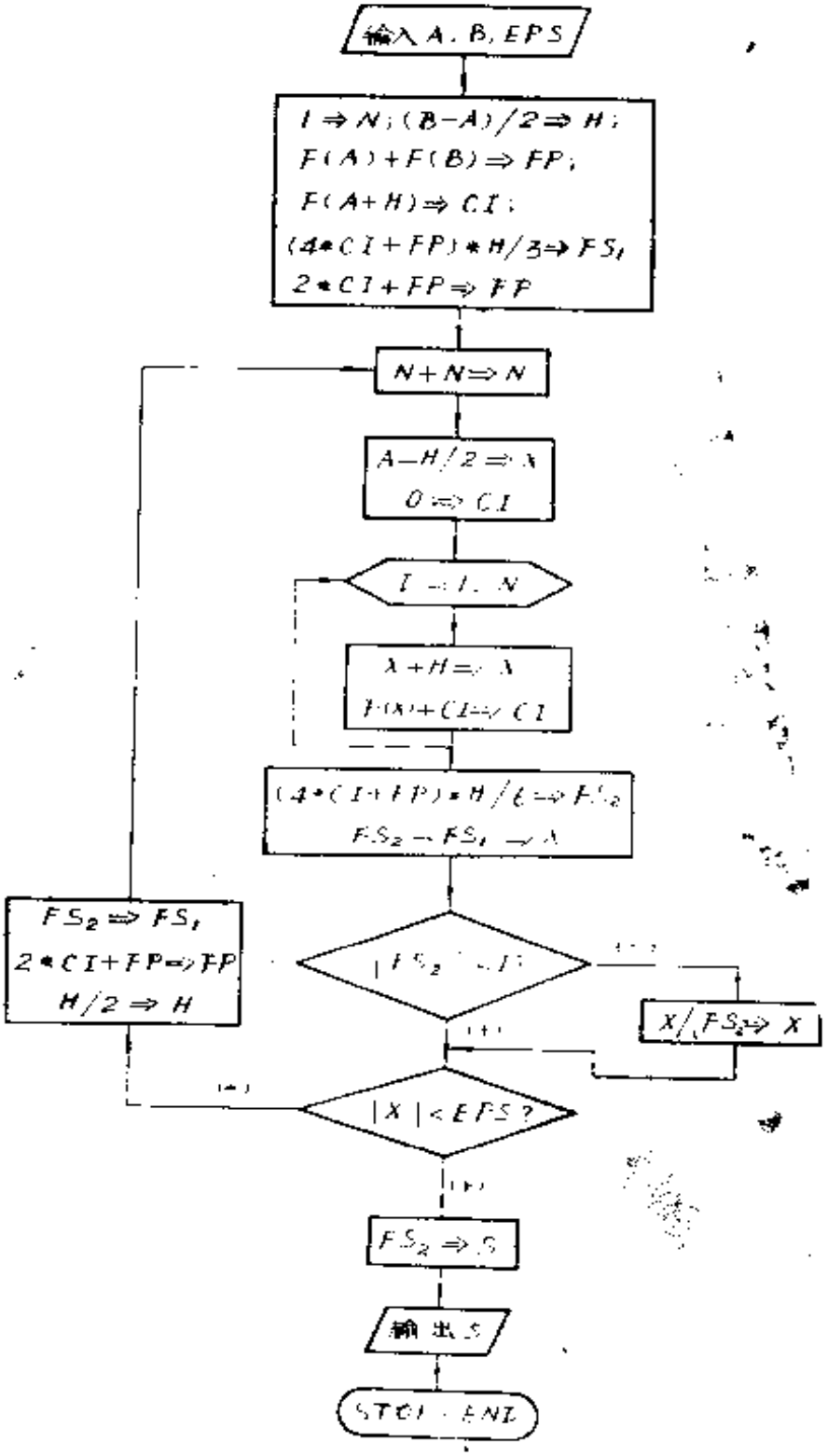
则有

$$\begin{cases} S_{2N} = \dfrac{h^*}{3}(FP + 4* CI), \\ h^* = \dfrac{h}{2} \end{cases}$$

这里FP不用重新算，需要新算的是CI。而新添各点可从起点左退半步（即$h/2$）后，再用h为步长向前跨得到。

这样，可给出用*Simpson*公式求积的框图和程序如下：

```
      SUBROUTINE SIMP(A, B, EPS, S)
      N = 1
      H = (B - A)/2.0
      FP = F(A) + F(B)
      CI = F(A + H)
      FS1 = (4.0* CI + FP)* H/3.0
      FP = 2.0*CI + FP
1     N = N + N
      X = A - 0.5*H
      CI = 0.0
      DO 2 I = 1, N
      X = X + H
2     CI = F(X) + CI
      FS2 = (4.0* CI + FP)* H/6.0
      X = FS2 - FS1
      IF(ABS(FS2) - 1.0)4, 3, 3
```


输入 A, B, EPS
1 ⇒ N; (B−A)/2 ⇒ H;
F(A)+F(B) ⇒ FP;
F(A+H) ⇒ CI;
(4*CI+FP)*H/3 ⇒ FS1
2*CI+FP ⇒ FP
N+N ⇒ N
A−H/2 ⇒ X
0 ⇒ CI
I = 1, N
X+H ⇒ X
F(X)+CI ⇒ CI
(4*(CI+FP)*H/6 ⇒ FS2
FS2 − FS1 ⇒ X
FS2 ⇒ FS1
2*CI+FP ⇒ FP
H/2 ⇒ H
X/FS2 ⇒ X
|X| < EPS ?
FS2 ⇒ S
输出 S
STOP END

```
3       X = X/FS2
4       IF(ABS(X) - EPS)6, 5, 5
5       FS1 = FS2
        FP = 2.0* CI + FP
        H = H/2.0
        GO TO 1
6       S = FS2
        RETURN
        END
```

程序功能

本过程采用辛甫生公式计算定积分，可自动选择积分步长以满足精度要求。

使用说明

1.子程序语句

SUBROUTINE SIMP (A, B, EPS, S) 。

2.哑元说明

A：实变量，输入参数，积分下限。

B：实变量，输入参数，积分上限。

EPS：实变量，输入参数；相邻两次结果的容许误差。

S：实变量，输出参数，积分结果

3.所调用的过程

FUNCTION F(X)，表示计算被积函数$f(x)$的函数段，由使用者自行编写。

例题

计算积分 $S_1 = \int_0^1 \frac{1}{1+x}dx$和$S_2 = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$

精确结果 $S_1 = \ln 2$， $S_2 = \pi$。取$EPS = 10^{-8}$，计算结果 $S_1 = 0.69314718$， $S_2 = 3.14159268$。

四 龙贝格求积

龙贝格（Romberg）求积法的思想是古老的。考虑得到π近似值的过程，在半径为1的圆中，作内接正n边形，如图10所示。

图中的角$\theta = \frac{2\pi}{n}$，

虚线所圈的三角形面积是 $\frac{1}{2}\sin\frac{2\pi}{n}$，因此内接正$n$边形的面积是 $\frac{n}{2}\sin\frac{2\pi}{n}$，

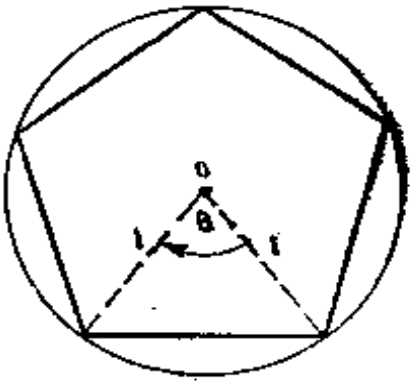


图 10

记为$\pi_n = \frac{n}{2}\sin\frac{2\pi}{n}$。于是当$n$很大时，有

$$\pi_n = \frac{n}{2}\left[\frac{2\pi}{n} - \frac{1}{6}\left(\frac{2\pi}{n}\right)^3 + \frac{1}{120}\left(\frac{2\pi}{n}\right)^5 - \frac{1}{7!}\left(\frac{2\pi}{n}\right)^7 + \cdots\right] \equiv \pi - \frac{c_2}{n^2} + \frac{c_4}{n^4} - \frac{c_6}{n^6} + \cdots \quad (2.8)$$

可见，第n次近似误差$\pi - \pi_n$给出与内接正多边形边数有关的同零量级是n^{-2}。对（2.8）式通过取$\pi_{2n} = \pi - c_2/(4n^2) + c_4/(16n^4) - c_6/(2^6 n^6) + \cdots$，消去（2.8）中的$c_2/n^2$项，得到

$$\frac{4\pi_{2n} - \pi_n}{3} = \pi + \frac{d_4}{n^4} + \frac{d_6}{n^6} + \cdots, \quad (2.9)$$

记　　$$\pi_n' = \frac{4\pi_{2n} - \pi_n}{3} \qquad (2.10)$$

与π的差给出同零量级是n^{-4}，同样有

$$\frac{16\pi_{2n}' - \pi_n'}{15} = \pi + \frac{c_6}{n^6} + \frac{c_8}{n^8} + \cdots \qquad (2.11)$$

记　　$$\pi_n'' = \frac{16\pi_{2n}' - \pi_n'}{15} \qquad (2.12)$$

与π的差给出同零量级是n^{-6}。

一般地，可以定义

$$\pi_n^{(k+1)} = \frac{4^{k+1}\pi_{2n}^{(k)} - \pi_n^{(k)}}{4^{k+1} - 1} \qquad (k = 0,\ 1,\ \cdots)$$

用这种办法我们可得到比“未加工数据”π_1，π_2，π_4，……更接近π的近似值。

应用这种加速收敛的基本原理进行数值求积。其依据是当被积函数f足够光滑时，积分$I = \int_a^b f(x)dx$有下述的欧拉—马克劳林公式：

$$\int_{Xo=a}^{Xm=b} f(x)dx = \frac{h}{2}\left\{\left[\ f(x_0) + f(x_m)\ \right] + 2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_i)\right\}$$

$$+ \sum_{i=1}^{m} \frac{B_{2i}}{(2i)!} h^{2i}\left[f^{(2i-1)}(x_0) - f^{(2i-1)}(x_m)\right] + E_m$$

式中B_{2i}为贝努里数，E_m为余项。

以$T(h)$表示步长为h的梯形公式算得的近似值，则

$$T(h) = I + c_2h^2 + c_4h^4 + c_6h^6 + \cdots\cdots \qquad (2.13)$$

和上面计算π的情况一样，由于

$$T'(h)=\frac{4T(h)-T(2h)}{3}=I+d_4h^4+d_6h^6+\cdots,$$

所以可以期望$T'(h)$将比$T(h)$或$T(2h)$更近似于I。于是我们这样设计求积方法：先用步长h，再用步长$2h, 4h, 8h, \cdots\cdots, 2^Nh$，分别用梯形法计算$I$的近似值。用这一系列数值，从误差估计中消去$h^2$项，算得$T'(h)$，$T'(2h)$，……再从这些新数值中消去误差估计中的$h^4$项，又可算得$T''(h)$，$T''(2h)$，……等等。到了某一步就可得到一个数值$T^{(m)}(h)$，将它作为“答案”。

为编制程序方便，令$T_0^{(k)}$表示将区间等分成2^k个子区间后用梯形公式所算得的和，即

$$T_0^{(k)}=h\left\{\frac{1}{2}f(a)+f(a+h)+\cdots+\frac{1}{2}f(b)\right\}(k=0,\ 1,\ \cdots)$$

这里$h=\frac{b-a}{2^k}$。于是，龙贝格法求积步骤是：

首先作基本序列：

$$\begin{cases}T_0^{(0)}=\dfrac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]\\[2ex] T_0^{(n)}=\dfrac{1}{2}T_0^{(n-1)}+h_n\sum\limits_{i=1}^{2^{n-1}}f[a+(2i-1)h_n]\end{cases}\quad(2.14)$$

其中　　$h_n=\frac{b-a}{2^n}$　　$n=1,\ 2,\ \cdots$

然后由基本序列作出新的二重序列：

$$T_m^{(k)}=\frac{4^mT_{m-1}^{(k+1)}-T_{m-1}^{(k)}}{4^m-1}=T_{m-1}^{(k+1)}+\frac{T_{m-1}^{(k+1)}-T_{m-1}^{(k)}}{4^m-1}$$

$$k=0,\ 1,\ \cdots;m=1,\ 2,\ \cdots\qquad(2.15)$$

能够证明$\lim\limits_{\substack{m\to\infty\\ k\text{定固}}} T_m^{(k)} = \lim\limits_{\substack{k\to\infty\\ m\text{固定}}} T_m^{(k)} = \int_a^b f(x)dx$。特别当$f(x)$在$[a, b]$解析时，以序列$T_m^{(0)}$的收敛速度为最快。

实际计算时，在下列三角阵中按行从左到右进行迭代以求得诸近似值$T_0^{(0)}$，$T_1^{(0)}$，$T_2^{(0)}$，…，$T_{(k)}^{(0)}$。

$$\begin{array}{ccccc}
T_0^{(0)} & & & & \\
\big\} & & & & \\
T_0^{(1)} & \to T_1^{(0)} & & & \\
\big\} & \big\} & & & \\
T_0^{(2)} & \to T_1^{(1)} & \to T_2^{(0)} & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \\
T_0^{(k)} & T_1^{(k-1)} & T_2^{(k-2)} & \cdots & T_k^{(0)}
\end{array}$$

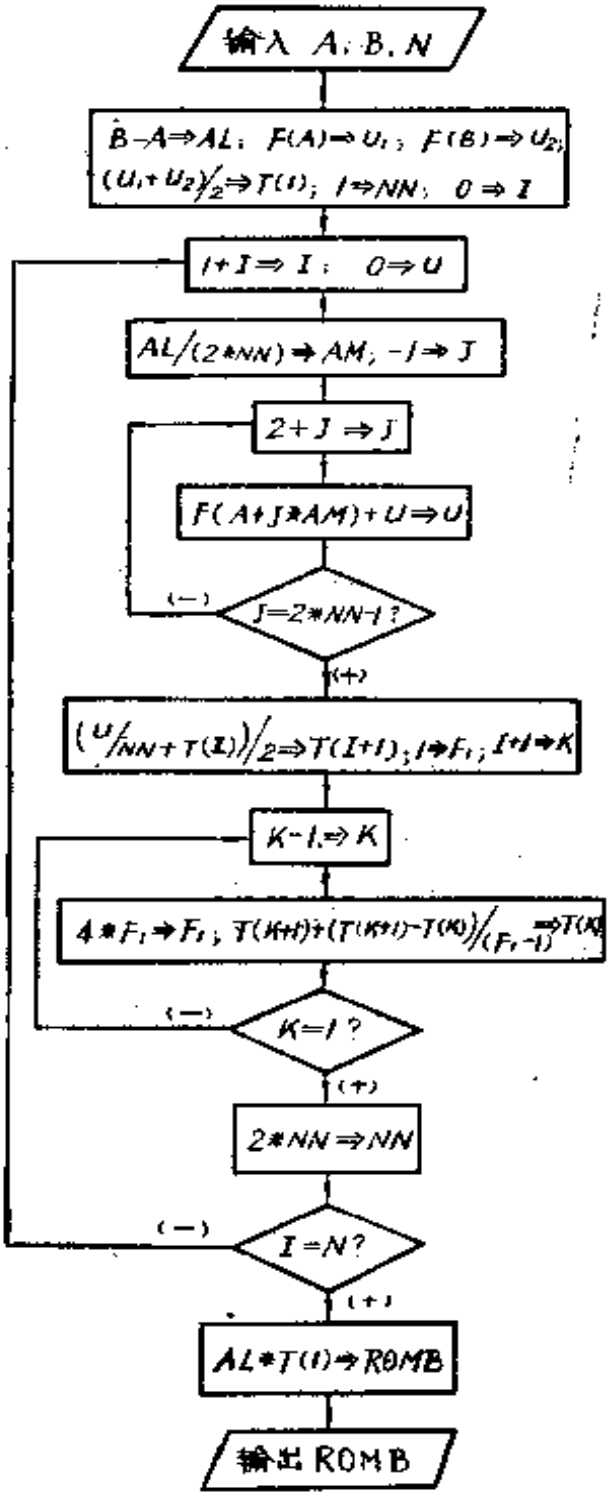
不难看出，$T_0^{(k)}$，$T_1^{(k)}$分别就是当积分步长为$(b-a)/2^k$时的梯形公式及辛甫生公式。因此龙贝格求积效果比用梯形公式或辛甫生公式都要好一些。

能够证明，龙贝格求积法的余项的误差估计式为

$$E_m(f) = \frac{2(b-a)\sum\limits_{\mu=1}^{\infty}\frac{1}{\mu^{2m+2}}}{2^{m(m+1)}}\left(\frac{b-a}{2\pi}\right)^{2m+2} f^{(2m+2)}_{(\xi)_{\xi\in[a,b]}} \qquad (2.16)$$

下面给出龙贝格求积的框图和程序。

```
FUNCTION ROMB (A, B, N, T)
DIMENSION T(N)
AL = B - A
U1 = F(A)
U2 = F(B)
T(1) = (U1 + U2)/2.0
NN = 1
NE = N - 1
```


输入 A, B, N
B-A⇒AL; F(A)⇒U1; F(B)⇒U2;
(U1+U2)/2⇒T(1); 1⇒NN; 0⇒I
I+1⇒I; 0⇒U
AL/(2*NN)⇒AM; -1⇒J
2+J⇒J
F(A+J*AM)+U⇒U
(-)
J=2*NN-1?
(+)
(U/NN+T(I))/2⇒T(I+1); I⇒F1; I+1⇒K
K-1⇒K
4*F1⇒F1; T(K+1)+(T(K+1)-T(K))/(F1-1)⇒T(K)
(-)
K=1?
(+)
2*NN⇒NN
(-)
I=N?
(+)
AL*T(1)⇒ROMB
输出 ROMB

```
      DO 1 I=1, NE
      U=0.0
      AM=AL/FLOAT(2* NN)
      NRE=2* NN-1
      DO 2 J=1, NRE, 2
2     U=F(A+FLOAT(J)* AM)+U
      T(I+1)=(U/FLOAT(NN)+T(I))/2.0
      F1=1.0
      DO 3 K=1, I
      M=I+1-K
      F1=4.0* F1
3     T(M)=T(M+1)+(T(M+1)-T(M))/(F1-1.0)
1     NN=2* NN
      ROMB=T(1)* AL
      RETURN
      END
```

程序功能

本过程用龙贝格（Romberg）积分法计算定积分

$$\int_a^b f(x)dx。$$

使用说明

1. 函数语句

FUNCTION ROMB(A, B, N, T)

2. 哑元说明

A：实变量，输入参数，积分下限。

B：实变量，输入参数，积分上限。

N：整变量，输入参数，表示所需要的精确度，通常取N = 5或6即可。

T：N个元素的一维实数组，表示所需的一组工作单元。

3.所调用的过程

FUNCTION F(X)，表示计算$f(x)$的函数段，由使用者自行编写。

例题

计算积分 $S=\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$

精确结果$S=\pi$，取$N=6$，计算结果$S=3.1415927$。

§3. 振荡积分的菲隆方法

在数学和物理的应用中，时常会碰到下述类型的激烈振荡函数积分的近似计算问题：

$$\begin{cases} S=\int_a^b f(x)\sin kx\,dx, & (3.1) \\ C=\int_a^b f(x)\cos kx\,dx. & (3.2) \end{cases}$$

如果k很大，则sinkx和coskx就会在－1和＋1之间急剧地变化，因此（3.1）和（3.2）式是激烈振荡函数的积分。用通常的积分方法，就需要把区间分得非常细小，从而带来了计算量的增加。而菲隆（Filon）方法就是专来计算这类积分的。

假设已知积分区间$[a, b]$，精度要求$\in$，最小步长参数n_1及k值，用Filon方法可计算出S和C值，其方法如下：

一 Filon求积公式

把区间〔a, b〕$2n$等分，每份长为h，设

$$\begin{cases} b = a + 2nh = x_0 + 2nh = x_{2n}, \\ x_{i+1} = x_i + h, \\ f_i = f(x_i), \qquad i = 0, 1, \cdots, 2n \\ \theta = kh. \end{cases}$$

则计算S和C的公式是：

$$\begin{cases} S = h\{\alpha[f_0\cos(kx_0) - f_{2n}\cos(kx_{2n})] + \beta S_{2n} + \gamma S_{2n-1}\} + E_s \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad (3.3) \\ C = h\{\alpha[f_{2n}\sin(kx_{2n}) - f_0\sin(kx_0)] + \beta C_{2n} + \gamma C_{2n-1}\} + E_c \\ \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad (3.4) \end{cases}$$

其中

$$\begin{cases} S_{2n} = \sum_{i=0}^{n} f_{2i}\sin(kx_{2i}) - 0.5[f_0\sin(kx_0) + \\ \qquad\qquad\qquad\qquad f_{2n}\sin(kx_{2n})], \\ C_{2n} = \sum_{i=0}^{n} f_{2i}\cos(kx_{2i}) - 0.5[f_0\cos(kx_0) + \\ \qquad\qquad\qquad\qquad f_{2n}\cos(kx_{2n})], \qquad (3.5) \\ S_{2n-1} = \sum_{i=1}^{n} f_{2i-1}\sin(kx_{2i-1}), \\ C_{2n-1} = \sum_{i=1}^{n} f_{2i-1}\cos(kx_{2i-1}). \end{cases}$$

E_s和E_c是积分余项。

当$\theta > \frac{1}{6}$时，取

$$\begin{cases}\alpha = \dfrac{1}{\theta} + \dfrac{\sin 2\theta}{2\theta^2} - \dfrac{2\sin^2\theta}{\theta^3}, \\ \beta = 2\left(\dfrac{1+\cos^2\theta}{\theta^2} - \dfrac{\sin 2\theta}{\theta^3}\right), \\ \gamma = 4\left(\dfrac{\sin\theta}{\theta^3} - \dfrac{\cos\theta}{\theta^2}\right). \end{cases} \tag{3.6}$$

当$\theta \leqq \dfrac{1}{6}$时，取

$$\begin{cases}\alpha = \dfrac{2\theta^3}{45} - \dfrac{2\theta^5}{315} + \dfrac{2\theta^7}{4725}, \\ \beta = \dfrac{2}{3} + \dfrac{2\theta^2}{15} - \dfrac{4\theta^4}{105} + \dfrac{2\theta^6}{567} - \dfrac{4\theta^8}{22275}, \\ \gamma = \dfrac{4}{3} - \dfrac{2\theta^2}{15} + \dfrac{\theta^4}{210} - \dfrac{\theta^6}{11340} \end{cases} \tag{3.7}$$

二　公式的推导

只推导（3.4）式〔（3.3）式的推导完全类似〕。

在区间$[x_{i-1}, x_{i+1}]$中用抛物线$g_i(x) = a_0 + a_1(x-x_i) + a_2(x-x_i)^2$，来近似函数$f(x)$，则有

$$\begin{cases} a_0 = f_i, \\ a_1 = f_i' = \dfrac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}, \\ a_2 = \dfrac{f_i''}{2} = \dfrac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{2h^2} \end{cases} \tag{3.8}$$

对$g_i(x)$微分，有

$$g_i'(x_{i+1}) = a_1 + 2a_2(x_{i+1} - x_i) = \frac{3f_{i+1} + f_{i-1} - 4f_i}{2h},$$

$$g_i'(x_{i-1}) = a_1 + 2a_2(x_{i-1} - x_i) = \frac{4f_i - f_{i+1} - 3f_{i-1}}{2h}.$$

记

$$I_i = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)\cos kx\,dx, \qquad I_i^* = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} g_i(x)\cos kx\,dx,$$

利用分部积分公式，得

$$I_i^* = \int_{X_{i-1}}^{X_{i+1}} g_i(x)\frac{1}{k}d\sin kx$$

$$= g_i(x)\left[\frac{\sin kx}{k} + \frac{1}{k^2}g_i'(x)\cos kx\right]_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} -$$

$$\frac{1}{k^2}\int \cos kx\, g_i'(x)\,dx = g_i(x)\frac{\sin kx}{k} +$$

$$\left[\frac{1}{k^2}g_i'(x)\cos kx - \frac{2a_2}{k^3}\sin kx\right]_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}, \text{ 即}$$

$$kI_i^* = \left[\left(g_i(x) - \frac{2a_2}{k^2}\right)\sin kx + g_i'(x)\frac{\cos kx}{k}\right]_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}.$$

把 (3.8) 式中的a_2代入，并注意$x_{i+1} = x_i + h$，$\theta = kh$和$kx_i = kx_{i+1} - \theta = kx_{i-1} + \theta$，再利用三角公式，整理之有：

$$k\theta I_i^* = (f_{i+1} - f_{i-1})(\theta\cos\theta - \sin\theta)\sin kx_i + (f_{i+1} + f_{i-1})(\theta\sin\theta - 2\theta^{-1}\sin\theta + 2\cos\theta)\cos kx_i +$$

$$4f_i\left(\frac{\sin\theta}{\theta} - \cos\theta\right)\cos kx_i.$$

上式中f_{i+1}和f_{i-1}对应的kx_i分别取成$kx_{i+1} - \theta$及$kx_{i-1} + \theta$，则

f_{i+1}和f_{i-1}的系数分别为

$$(1+\cos^2\theta-2\theta^{-1}\sin\theta\cos\theta)\cos kx_{i+1}+(\theta+\sin\theta\cos\theta-2\theta^{-1}\sin^2\theta)\sin kx_{i+1},$$

和 $$(1+\cos^2\theta-2\theta^{-1}\sin\theta\cos\theta)\cos kx_{i-1}-(\theta+\sin\theta\cos\theta-2\theta^{-1}\sin^2\theta)\sin kx_{i-1}。$$

利用（3.6）式和$h=\frac{\theta}{k}$，就有

$$I_i^*=h\{\alpha(f_{i+1}\sin kx_{i+1}-f_{i-1}\sin kx_{i-1})+\frac{\beta}{2}(f_{i+1}\cos kx_{i+1}+f_{i-1}\cos kx_{i-1})+\gamma f_i\cos kx_i\}$$

现令$i=1, 3, \cdots, 2n-1$，对I_i^*求和就得（3.4）式

我们选用$\theta=1/6$作为α，β，γ两套公式的分水岭是和机器对数表示的位数有关。如果尾数字长在27—44位（二进制）之间，选用$\theta=1/6$是较好的。当$\theta\leqq 1/6$时，用（3.6）式计算α，β，γ会因有效数字的损失，而影响结果的精度。故这时选用它们的级数展开式（3.7）。

计算直至选n_1（初始$n=2^{n_1}$），$n_2=2n_1$，$n_3=2n_2$，…，作序列S_{n1}^*，S_{n2}^*，…；C_{n1}^*，C_{n2}^*，…，对给定精度$\in$，当$|S_{n_{i+1}}^*-S_{ni}^*|<\in$和$|C_{n_{i+1}}^*-C_{ni}^*|<\in$同时满足时为止。

注意n_1选取不能太小，但也不能太大，一些算例表明，在$f(x)$相对三角函数变化慢时，n_1的选取和$b-a$及k有关。可取

$$n_1=\mathrm{Entier}\{\ln(2*k*(b-a)/\pi)/0.693\}$$

$\in$的选取也不能太大或太小。

根据公式（3.3）—（3.7），可直接写出Filon求积的

FORTRAN语言程序如下：

```
      SUBROUTINE FILON(A, B, NRE, CK, X,
      F, SI, CS, S, C)
      DIMENSION X(NRE), F(NRE) , SI(NRE),
      CS(NRE)
      NR = NRE - 1
      H = (B - A)/FLOAT(NR)
      O = CK* H
      DO 2 I = 1, NRE
      X(I) = A + FLOAT(I - 1)*
      XK = CK* X(I)
      SI(I) = SIN(XK)
2     CS(I) = COS(XK)
      CALL FCT(X, F)
      SN1 = 0.0
      SN2 = 0.0
      CN1 = 0.0
      CN2 = 0.0
      DO 3 I = 1, NRE, 2
      SN2 = SN2 + F(I)* SI(I)
3     CN2 = CN2 + F(I)* CS(I)
      SN2 = SN2 - 0.5* (F(1)* SI(1) + F(NRE)
      * SI(NRE))
      CN2 = CN2 - 0.5* (F(1)* CS(1) + F(NRE)
      * CS(NRE))
      DO 4 I = 2, NR, 2
```

```
      SN1 = SN1 + F(I)* SI(I)
4     CN1 = CN1 + F(I)* CS(I)
      OP = O* O
      IF(O.GT.0.16666667) GOTO  5
      RF = ((OP/4725.0 - 1.0/315.0)*OP + 1.0/ 45. 0)
           *OP*O*2.0
      BT = ((((- 2.0*OP/22275.0 + 1.0/567.0)*OP -
           2.0/105.0)*OP + 1.0/15.0)*OP + 1./3.)*2.0
      GM = ((- OP/11340.0 + 1.0/210.) * OP -
           2.0/15.0)*OP + 4.0/3.0
      GOTO 6
5     RF = ((- 2.0*SIN(O)**2/O + SIN(O + O)/2.0)/
           O + 1.0)/O
      BT = (- SIN(O + O)/O + 1.0 + COS(O)**2)/OP*
                2.0
      GM = (SIN(O)/O - COS(O))/OP*4.0
6     S = H*(RF*(F(1)*CS(1) - F(NRE)*CS(NRE))
              + BT*SN2 + GM*SN1)
      C = H*(RF*(F(NRE) *SI(NRE) - F(1)*SI(1))
          + BT*CN2 + GM*CN1)
      RETURN
      END
```

程序功能

本程序用Filon方法计算形如：

$$\begin{cases} S = \int_a^b f(x)\sin(kx)\,dx, \\ C = \int_a^b f(x)\cos(kx)\,dx, \end{cases}$$

的振荡积分。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE FILON (A, B, NRE, CK, X, F, SI, CS, S, C)

2. 哑元说明

A：实变量，输入参数，积分下限。

B：实变量，输入参数，积分上限。

NRE：整变量，输入参数，总分点数目，NRE = 2n + 1。

CK：实变量，输入参数，被积函数中正弦和余弦函数里自变量的系数K。

X，F，SI，CS：$2n+1$个元素的一维实数组，表示所需的四组工作单元。

S，C：实变量，输出参数，积分结果。

3. 所调用的过程

SUBROUTINE FCT(X, F)，表示求被积函数中$f(x)$的过程。其中数组X，F分别表示在节点处的自变量x值和函数$f(x)$的值。

例题

计算积分 $$\begin{cases} S \approx \int_0^\infty e^{-x}\sin(100x)\,dx, \\ C = \int_0^\infty e^{-x}\cos(100x)\,dx。 \end{cases}$$

取$A=0$，$B=20$，$NRE=401$，$CK=100$，计算结果如下：

积　　分	计算结果	真　　值
$S=\int_0^{\infty} e^{-x}\sin 100x\,dx$	0.99990000×10^{-2}	0.99990001×10^{-2}
$C=\int_0^{\infty} e^{-x}\cos 100x\,dx$	0.99931852×10^{-4}	0.99990001×10^{-4}

§4. RC回路中电容器的放电和欧拉近似法

考虑一个由电阻R，电容C和开关S组成的电路（见图11）。开始时，电容器C充有电荷Q_0，当开关S接通后，电容器就放电，研究电容器上的电荷随时间的变化规律。

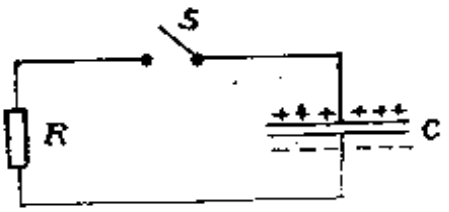


图11　RC回路

由于没有外电压，所以电阻R上的电压V_R和电容器C上的电压V_C加起来为零，即

$$V_R+V_C=0 \tag{4.1}$$

根据欧姆定律有

$$V_R=IR=R\frac{dQ}{dt} \tag{4.2}$$

根据电容定义有

$$C=\frac{Q}{V_C} \tag{4.3}$$

将（4.2），(4.3)式代入（4.1）式，整理后得

$$\frac{dQ}{dt} = -\frac{Q}{T}, \tag{4.4}$$

$$Q_0 = Q(t=0)\ . \tag{4.5}$$

其中$T = RC$称为RC回路的时间常数。

求解上述微分方程，得

$$Q = Q_0 e^{-t/T} \tag{4.6}$$

通常情况下，微分方程是难以求得严格解的。因此我们采用数值法求近似解。

考虑一般形式的一阶微分方程

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x,\ y)\ , \\ y_0 = y(x = x_0)\ . \end{cases} \tag{4.7}$$

采用欧拉折线法的公式是

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n,\ y_n)\ , \\ x_n = x_0 + nh\ . \end{cases} \tag{4.8}$$

该方法的实质是用差商代替微商 即$\frac{dy}{dx} \approx \frac{\Delta y}{\Delta x}$，于是（4.7）式可近似成

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y(x+\Delta x) - y(x)}{\Delta x} \approx f(x,\ y)$$

此即（4.8）式。

由Taylor展式容易看出，Euler折线法每步的误差量级是$O(h^2)$。

下面，我们将Euler折线法用在（4.4）式上，变成：

$$\begin{cases} Q_{n+1}=Q_n+\Delta t(-Q_n/T)\ , \\ t_n=t_0+n\Delta t. \end{cases} \qquad (4.5')$$

当$Q_0=1$，$T=RC=10$，$\Delta t=1$时，利用（4.5′）式算得结果与真值的比较见下表：

结果 / 方法	Q_0	Q_1	Q_2	Q_3	Q_4	Q_5
欧拉法	1.0	0.9	0.81	0.729	0.6561	0.5905
解析法	1.0	0.9048	0.8187	0.7408	0.6703	0.6065

从上表可以看出：（1）相对说来结果是比较一致的，随Δt间隔越小，结果越接近。但Δt取的越小，随之带来了计算量的增加。（2）随时间t的增加，近似值与真值之差越来越大。

由此可见，欧拉折线法优点是简便，在求解区间不太大而精度要求不很高时可用。缺点是精度不高，随时间t的增加，近似值与真值之差越来越大。

§5. 振荡电路和改进的欧拉法及龙格—库塔法

考虑一个由电阻R，电感L，电容器C，开关S组成的串联振荡电路（见图12）。我们来研究当开关S合上后，电路中电流随时间变化的规律。根据基尔霍夫（Kirchhoff）第二方程系（或第二支路法则）

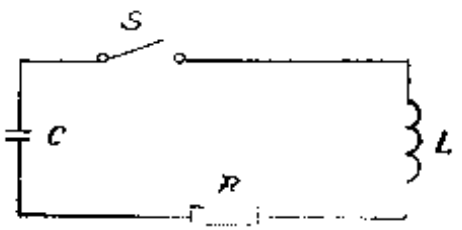


图 12 RLC串联电路

知，电路中外电压等于电路内各元件电压之和，即

$$V_R + V_L + V_C = 0 \tag{5.1}$$

将$V_R = IR$，$V_L = L\frac{dI}{dt}$和$V_C = \frac{Q}{C}$代入（5.1）式得

$$L\frac{dI}{dt} + IR + \frac{Q}{C} = 0 \tag{5.2}$$

为了找出电流随时间的变化规律，还必须加上关系式：

$$\frac{dQ}{dt} = I \tag{5.3}$$

和初始条件：

$$\begin{cases} Q_0 = Q(t=0)\ , \\ I_0 = I(t=0)\ . \end{cases} \tag{5.4}$$

（5.2）—（5.4）式是两个一阶的微分方程组求解的问题。用欧拉折线法，其计算公式是：

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= I + \frac{dI}{dt}\Big|_n \Delta t, \\ Q_{n+1} &= Q_n + \frac{dQ}{dt}\Big|_n \Delta t, \\ t_{n+1} &= t_n + \Delta t. \end{aligned} \tag{5.5}$$

为了提高精度，一个改进的办法是（5.5）式中的$\frac{dI}{dt}\Big|_n$，$\frac{dQ}{dt}\Big|_n$分别用$\frac{1}{2}\left(\frac{dI}{dt}\Big|_n + \frac{dI}{dt}\Big|_{n+1}\right)$和$\frac{1}{2}\left(\frac{dQ}{dt}\Big|_n + \frac{dQ}{dt}\Big|_{n+1}\right)$代替。这样做，它的精度确实比欧拉法提高了，其精度是$O(\Delta t^3)$。称这种方法为改进的欧拉法（也称梯形法则）。

欧拉法与梯形法则在计算上的差别是：欧拉法中每个I_n（或Q_n）都是已知的，或已经算出来的量，求I_{n+1}（或Q_{n+1}）不必解方程，这类情形通常叫显式方法；梯形法则中，右端包含未知量$\frac{dI}{dt}|_{n+1}\left(\text{或}\frac{dQ}{dt}|_{n+1}\right)$，必须通过解方程才能得到，这类情形通常叫隐式方法。解决隐式方法求解的困难，通常采用迭代法，由欧拉法给出迭代的初值。下面我们仍以一个一阶方程（一个n阶方程可化为等价的n个一阶联立方程组）为例，写出改进欧拉法（梯形法则）的计算公式如下：

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf_n, \\ y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + \frac{h}{2}[f_n + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)})], k = 0, 1, \cdots \end{cases} \tag{5.6}$$

梯形法则虽然比欧拉法精确，但是计算量大。关键问题是用迭代法解方程不知要迭代多少次，而且迭代次数越多越不理想。为此，有时只迭代一次就算了（当然，也可多迭代几次）。这时，计算公式变为：

$$\begin{cases} y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf_n & \cdots\cdots\text{预报公式} \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}[f_n + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)})] & \cdots\cdots\text{校正公式} \end{cases} \tag{5.7}$$

这类公式通常叫做预报校正公式。这样一来，每求一个y_n，计算量约为欧拉法的一倍。校正一次的公式可改写成：

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{2}K_1 + \frac{1}{2}K_2 \\ K_1 &= hf(x_n,\ y_n)\ , \\ K_2 &= hf\ (x_n + h,\ y_n + K_1)\ . \end{aligned} \tag{5.8}$$

为给出误差估计，将（5.8）式写成更一般形式：

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + R_1 K_1 + R_2 K_2, \\ K_1 &= hf(x_n,\ y_n)\ , \\ K_2 &= hf(x_n + ah,\ y_n + bK_1)\ . \end{aligned} \tag{5.8'}$$

我们说，适当选择参数 R_1，R_2，a，b 的值，就能在 $y(x_n) = y_n$ 的假定下，使其误差 $y(x_{n+1}) - y_{n+1}$ 的阶尽可能的高。为此，将 $y_{n+1} = y_n + R_1K_1 + R_2K_2$ 作 Taylor 展开。由 K_2 的展式为：

$$K_2 = hf(x_n,\ y_n) + ah \cdot h\frac{\partial f}{\partial x} + bK_1 h\frac{\partial f}{\partial y} + h\frac{1}{2!}$$

$$\left(ah\frac{\partial}{\partial x} + bK_1\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 f + \cdots$$

$$= hf_n + ah^2\ \frac{\partial f}{\partial x} + bh^2 f_n\ \ \frac{\partial f}{\partial y} + 0(h^3)$$

所以 $$y_{n+1} = y_n + (R_1 + R_2)hy_n' + h^2\left(aR_2\frac{\partial f}{\partial x} + bR_2 y_n'\frac{\partial f}{\partial y}\right) + 0(h^3) \tag{5.9}$$

而 $$y(x_{n+1}) = y_n + hy_n' + \frac{h^2}{2!}y_n' + 0(h^3)$$

$$= y_n + hy_n' + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x} + y_n'\frac{\partial f}{\partial y}\right) + 0(h^3), \tag{5.10}$$

故欲使$y(x_{n+1})-y_{n+1}=0(h^3)$，必须且只须$R_1+R_2=1$，$aR_2=bR_2=\frac{1}{2}$。若取$R_1=R_2=\frac{1}{2}$，$a=b=1$，这便是（5.8）式；若取$R_1=0$，$R_2=1$，$a=b=\frac{1}{2}$，则计算公式变为：

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+K_2, \\ K_1=hf(x_n,\ y_n), \\ K_2=hf(x_n+h/2,\ y_n+K_1/2). \end{cases} \tag{5.11}$$

其误差都是$0(h^3)$，将在这一原则下构造出的计算公式，称为二阶龙格—库塔公式。

同样，可构造出三阶龙格—库塔公式，其误差$y(x_{n+1})-y_{n+1}=0(h^4)$。$y_{n+1}$的形式取成：

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+R_1K_1+R_2K_2+R_3K_3, \\ K_1=hf(x_n,\ y_n), \\ K_2=hf(x_n+a_1h,\ y_n+b_{21}K_1), \\ K_3=hf(x_n+a_2h,\ y_n+b_{31}K_1+b_{32}K_2). \end{cases}$$

其中相应的一组计算公式为：

$$\begin{cases} y_{n+1}=y_n+\frac{1}{6}k_1+\frac{4}{6}k_2+\frac{1}{6}k_3, \\ k_1=hf(x_n,\ y_n), \\ k_2=hf(x_n+\frac{1}{2}h,\ y_n+\frac{1}{2}k_1) \\ k_3=hf(x_n+h,\ y_n-k_1+2k_2). \end{cases} \tag{5.12}$$

通常采用四阶龙格—库塔公式，它的截断误差为$0(h^5)$，易知y_{n+1}的形式是：

$$
\begin{cases}
y_{n+1} = y_n + R_1K_1 + R_2K_2 + R_3K_3 + R_4K_4, \\
K_1 = hf(x_n,\ y_n)\ , \\
K_2 = hf(x_n + a_1h,\ y_n + b_{21}K_1)\ , \\
K_3 = hf(x_n + a_2h,\ y_n + b_{31}K_1 + b_{32}K_2)\ , \\
K_4 = hf(x_n + a_3h,\ y_n + b_{41}K_1 + b_{42}K_2 + b_{43}K_3)\ .
\end{cases}
$$

其中a_i，b_{ij}，R_i都是待定参数。由于推导较复杂，而且与低阶情形无原则差别，故从略。但必须指出，通常参数的选择如下：

$$
\begin{cases}
y_{n+1} = y_n + \dfrac{1}{6}[k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4], \\
k_1 = hf(x_n,\ y_n)\ , \\
k_2 = hf\left(x_n + \dfrac{1}{2}h,\ y_n + \dfrac{1}{2}k_1\right), \\
k_3 = hf\left(x_n + \dfrac{1}{2}h,\ y_n + \dfrac{1}{2}k_2\right)\ , \\
k_4 = hf(x_n + h,\ y_n + k_3)\ .
\end{cases}
\tag{5.13}
$$

下面，给出求解方程

$$
\begin{cases}
\dfrac{dy}{dx} = f(x,\ y)\ , \\
y_0 = y(x_0).
\end{cases}
$$

的四阶龙格—库塔法程序。

```
SUBROUTINE RK(A, B, YA, X, Y, N)
DIMENSION X(N), Y(N)
AN = N
H = (B - A)/AN
HALF = H*0.5
```

```
      X1 = A
      Y1 = YA
      DO 10 I = 1,
      Y0 = Y1
      X0 = X1
      X1 = X0 + H
      X2 = X0 + HALF
      H1 = F(X0, Y0) * H
      H2 = F(X2, Y0 + H1 * 0.5) * H
      H3 = F(X2, Y0 + H2 * 0.5) * H
      H4 = F(X1, Y0 + H3) * H
      Y1 = (H1 + 2.0 * (H2 + H3) + H4)/6.0 + Y0
      X(I) = X1
10    Y(I) = Y1
      RETURN
      END
```

程序功能

本过程用龙格—库塔(Runge-Kutta) 法解一阶常微分方程的初值问题。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE RK (A, B, Y_A, X, Y, N)

2. 哑元说明

A：实变量，输入参数，区间左端点（x初值）。

B：实变量，输入参数，区间右端点（x终值）。

Y_A：实变量，输入参数，y的初值。

X：N个元素的一维实数组x值向量。

Y：N个元素的一维实数组。近似解y向量。

3． 所调用的过程

FUNCTION $F(x, y)$，表示计算$y'(x)=f(x, y)$的右端的函数段，由使用者自行编写

例题

已知微分方程初值问题：

$$\begin{cases} y' = y - \dfrac{2x}{y}, \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

在区间〔0，1.6〕内以步长$h=0.2$求解。计算结果见下表：

N	x_i	计算结果	N	x_i	计算结果
1	0.20	1.183229	5	1.00	1.732142
2	0.40	1.341667	6	1.20	1.844040
3	0.60	1.483281	7	1.40	1.949547
4	0.80	1.612514	8	1.60	2.049660

同样，对给定一阶常微分方程组的初值问题：

$$\begin{cases} y_i' = f_i(t, y_1, y_2, \cdots, y_n), \\ y_i(t_0) = y_{i0}, \qquad i = 1, 2, \cdots, n \end{cases}$$

采用四阶龙格—库塔法公式是：

$$y_{im+1} = y_{im} + \frac{h}{6}(k_{i1} + 2k_{i2} + 2k_{i3} + k_{i4})$$

其中

$$
\begin{cases}
k_{i1} = f_i(t_m,\ y_{1m},\ \cdots,\ y_{nm}), \\
k_{i2} = f_i\left(t_m + \dfrac{h}{2},\ y_{1m} + \dfrac{h}{2}k_{11},\ \cdots,\ y_{nm} + \dfrac{h}{2}k_{n1}\right), \\
k_{i3} = f_i\left(t_m + \dfrac{h}{2},\ y_{1m} + \dfrac{h}{2}k_{12},\ \cdots,\ y_{nm} + \dfrac{h}{2}k_{n2}\right), \\
k_{i4} = f_i(t_m + h,\ y_{1m} + hk_{13},\ \cdots,\ y_{nm} + hk_{n3}),
\end{cases}
$$

$$
i = 1,\ 2,\ \cdots,\ n;\quad m = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots,
$$

这里y_{im}是第i个因变量y_i在节点$t_m = t_0 + mh$处的近似值，h是积分步长。

其程序如下：

```
      SUBROUTINE RKN(N, T, H, Y, F, P, YW)
      DIMENSION Y(N),P(N),F(N), YW(N), U(5)
      U(1) =0.5*H
      U(2) =0.5*H
      U(5) =0.5*H
      U(3) =H
      U(4) =H
      TW =T
      DO 1 I=1, N
      P(I) =Y(I)
1     YW(I) =Y(I)
      DO 2 J=1, 4
      CALL FCT(T, P, F)
      T =TW+U(J)
      DO 2 I=1, N
      P(I) =U(J)*F(I)+YW(I)
```

```
2       Y(I) = U(J + 1) * F(I)/3.0 + Y(I)
        RETURN
        END
```

程序功能

本过程用定步长龙格—库塔法解一阶常微分方程组的初值问题。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE RKN(N, T, H, Y, F, P, YW)

2. 哑元说明

N：整变量，输入参数，方程个数。

T：实变量，存放自变量值。

H：实变量，输入参数，积分步长。

Y：N个元素的一维实数组，开始存放因变量初始值，最后存放积分结果。

F，P，YW：N个元素的一维实数组，表示所需的工作单元。

3. 所调用的过程

SUBROUTINE FCT (T, P, F)，表示计算微分方程组右函数的过程，由使用者自行编写。这里T是自变量，数组P(N) 存放计算右函数用的自变量值，数组F(N) 存放计算结果

4. 说明

本过程对给定的步长和初值$t = t_0$，$y_i(t_0) = y_{i0}$只能向前积分一步。因此，要继续积分，必须连续调用本过程。

例题

求解初值问题：

$$\begin{cases} y_1' = y_2, \\ y_2' = -y_1, \\ y_3' = -y_3, \\ y_1(0) = -1,\ y_2(0) = 0,\ y_3(0) = 1. \end{cases}$$

积分区间为〔0，0.15〕，步长取$h=0.01$，精确解是：

$$y_1 = -\cos t;\ y_2 = \sin t;\ y_3 = e^{-t}.$$

计算结果（部分）如下表：

t	y_1	y_2	y_3
0.01	−0.999950	0.999983×10^{-2}	0.990049
0.10	−0.995004	0.998334×10^{-1}	0.903981
0.15	−0.988771	0.149438	0.859408

§6. 求解刚性常微分方程初值问题的特雷纳方法

一 引言

特雷纳(Treanor)方法用于求解一阶刚性（stiff）常微分方程组的初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{d\mathbf{Y}}{dt} = \mathbf{F}(t,\ \mathbf{Y}) \\ \mathbf{Y}(t_0) = \mathbf{Y}_0 \end{cases} \tag{6.1}$$

的近似值。

其中$\mathbf{Y}=(y_1,\ y_2,\ \cdots,\ y_n)^T$，$\mathbf{F}=(f_1,\ f_2,\ \cdots,\ f_n)^T$，$\mathbf{Y}_0=$

$(y_{01}, y_{02}, \cdots, y_{0n})^T$。

在实际问题中，由于存在相差很大的时间常数，stiff微分方程是经常出现的，特别是网络分析和进行模拟时会碰到stiff微分方程，这些方程还出现在几乎所有化学动力学的研究中。

所谓“时间常数”是用来表示衰减速度的术语。例如，方程$y' = \lambda y$，其通解是$y = ce^{\lambda t}$。如果λ是负的，则在时间$-1/\lambda$内，y衰减e^{-1}倍，这里的$-1/\lambda$就是时间常数。λ负得越大，时间常数就越小。

实际的系统经常是以指数函数的方式变化的，至少在局部范围是这样（电容器的放电，化学反应趋于稳定等）。如果在一个系统中，不同的项以相差很大的速度衰减，即同时存在快变过程和慢变过程的话，那么在数值积分中就遇到了困难。这是因为积分步长由快变过程的时间所决定，即要描述这个过程，需要很小的时间步长，才能保证数值计算的稳定性（指计算中的误差当步长取定后，随步数的增加不会积累到超出我们所许可的范围），而积分区域则由慢变过程的时间来决定，即整个系统达到稳定时间却较长，这就是所谓的stiff问题。反映在数学问题上就是指如果矩阵$\left(\frac{\partial F}{\partial Y}\right)$在每个点$t$处的特征值$\lambda_i (i = 1, 2, \cdots, n)$有负实部，并且在数量级上相差很大，即1) $R_e\lambda_i < 0$，2) $\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n} |R_e\lambda_i| \gg \min\limits_{1\leqslant i\leqslant n} |R_e\lambda_i|$。

二　特雷纳方法的基本思想及计算公式

数值求解$y' = f(t, y)$，传统的方法是由$y(t)$或$f(t, y)$的多项式逼近来构造的。由于在大区间上用多项式逼近

stiff方程中的快变分量有困难。因此，自然希望在逼近式中能增加类似于快变分量的项。因为快变分量$e^{-\lambda t}$是方程$\tilde{y}' = -\lambda\tilde{y}$的解。特雷纳基于这种想法，用$-Py+Q(t)$来逼近$y'=f(t,\ y)$（即用一阶线性方程来近似$y'=f(t,y)$）得到了一个类似于龙格—库塔型的单步方法。其中$P$是常数（$P>0$），$Q(t)$是$t$的二次式。即如果假定方程（6.1）用

$$\frac{dy}{dt}=f(t,\ y)=-P(y-y_1)+A+B(t-t_1)+\frac{C}{2}(t-t_1)^2, \tag{6.2}$$

来近似，那么在区间上由$(t_1,\ y_1)$到$(t_1+h,\ y_1+\Delta y)$，方程（6·2）就能积分，并且Δy能写成

$$\Delta y=h\{AF_1+BhF_2+Ch^2F_3\} \tag{6.3}$$

其中F_n是ph的指数函数，A、B、C、P为待定系数，它们由$f(t,\ y)$在区间$[t_1,\ t_1+h]$的一些点上的值来确定。

对于数值公式取t_1，$t_1+\frac{h}{2}$，$t_1+\frac{h}{2}$，t_1+h四个点来说，可得修改的龙格—库塔型单步法公式如下：

$$y_{n+1}=y_n+\Delta y \tag{6.4}$$

其中

$$\Delta y=\begin{cases}(\Delta y)_{R,K}=\dfrac{h}{6}\left\{f_1+2(f_2+f_3)+f_4\right\},\ \text{当}P\leqslant 0,\\ h\{f_1F_1+[-3(f_1+Py_1)+2(f_2+Py_2)+2(f_3+Py_3)-(f_4+Py_4)]F_2+4[(f+Py_1)-(f_2+Py_2)-(f_3+Py_3)+(f_4+Py_4)]F_3\},\ \text{当}P>0\end{cases} \tag{6.5}$$

式中 $$P=-\frac{f_3-f_2}{y_3-y_2},\tag{6.6}$$

$$\begin{cases} F_0=e^{-Ph}, \\ F_1=\dfrac{F_0-1}{-Ph}, \\ F_2=\dfrac{F_1-1}{-Ph}, \\ F_3=\dfrac{F_2-0.5}{-Ph} \end{cases}\tag{6.7}$$

$$\begin{cases} t_1=t_1,\ y_1=y(t_1),\ f_1=f(t_1,\ y_1) \\ t_2=t_1+\dfrac{h}{2},\ y_2=y_1+\dfrac{h}{2}f_1,\ f_2=f(t_2,\ y_2) \\ t_3=t_1+\dfrac{h}{2},\ y_3=y_1+\dfrac{h}{2}f_2,\ f_3=f(t_3,\ y_3) \\ t_4=t_1+h,\ y_4=y_1+hS,\ f_4=f(t_4,\ y_4) \end{cases}\tag{6.8}$$

$$S=\begin{cases} f_3, & \text{当}P\leqslant 0, \\ 2(f_3-f_1)F_2+(f_1-f_2)F_1+f_2 & \text{当}P>0 \end{cases}\tag{6.9}$$

显然，当$P\leqslant 0$时，该方法退化为四阶的龙格 — 库塔方法。

三 公式推导

下面对$P>0$的情形，来推导式 (6.3)、(6.5) 和 (6.9)

首先，把式 (6.2) 写成

$$\frac{dy}{dt}+Py=Q(t),\tag{6.2}'$$

式中$Q(t)=Py_1+A+B(t-t_1)+\frac{C}{2}(t-t_1)^2$.则（6.2）′式的通解为

$$y(t)=e^{-\int pdt}\left[\int Q(t)e^{\int pdt}dt+C_0\right]$$

$$=y_1+\frac{A}{P}+\frac{B}{P}\left(t-t_1-\frac{1}{P}\right)+\frac{C}{2P}\left[(t-t_1)^2-\frac{2}{P}(t-t_1)+\frac{2}{P^2}\right]+C_0e^{-pt}, \qquad (6.10)$$

由$y_1=y(t_1)$，知$C_0=\left(\frac{B}{P^2}-\frac{C}{P^3}-\frac{A}{P}\right)e^{pt_1}$，

于是$y(t)=y_1+\frac{A}{P}+\frac{B}{P}\left(t-t_1-\frac{1}{P}\right)+\frac{C}{2P}\left[\left(t-t_1-\frac{1}{P}\right)^2+\frac{1}{P^2}\right]+\left(\frac{B}{P^2}-\frac{C}{P^3}-\frac{A}{P}\right)e^{p(t_1-t)}$。

(6.10)′

又由 $y(t_1+h)=y_1+\Delta y$，则从（6·10）′式可得

$$\Delta y=A\left(\frac{1-e^{-ph}}{P}\right)+B\left(\frac{h}{P}-\frac{1}{P^2}+\frac{e^{-ph}}{P^2}\right)+$$

$$C\left[\frac{1}{2P}\left(h-\frac{1}{P}\right)^2+\frac{1}{2P^3}-\frac{e^{-hp}}{P^3}\right]=h\{AF_1+BhF_2$$

$$+Ch^2F_3\}, \qquad \text{此即（6.3）式。}$$

在（6.2）式中，令（t，y）分别等于$(t_i, y_i)i=1, 2, 3, 4$。得到

$$f_1 = f(t_1,\ y_1) = A,$$

$$f_2 = f(t_2,\ y_2) = -P(y_2 - y_1) + f_1 + B\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{C}{2}\left(\frac{h}{2}\right)^2,$$

$$f_3 = f(t_3, y_3) = -P(y_3 - y_1) + f_1 + B\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{C}{2}\left(\frac{h}{2}\right)^2,$$

$$f_4 = f(t_4,\ y_4) = -P(y_4 - y_1) + f_1 + Bh + \frac{C}{2}h^2. \quad (6.11)$$

求解（6.11）式，得

$$P = -\frac{f_3 - f_2}{y_3 - y_2},$$ 此即（6.6）式，

和

$$Bh = -3(f_1 + Py_1) + 2(f_2 + Py_2) + 2(f_3 + Py_3) - (f_4 + Py_4),$$

$$Ch^2 = 4[(f_1 + Py_1) - (f_2 + Py_2) - (f_3 + Py_3) + (f_4 + Py_4)],$$

将它们代入（6.3）式，就得到（6.5）式。

正如我们所期望的那样，当$P \to 0$的极限情况下，（6.5）式就变成四阶龙格—库塔法公式。

利用$F_1 = 1 - \frac{Ph}{2} + P^2h^2F_3$，$F_2 = \frac{1}{2} - PhF_3$，

$$F_4 = \frac{\frac{1}{6} - F_3}{Ph}, \qquad F_5 = \frac{\frac{1}{24} - \frac{\frac{1}{6} - F_3}{Ph}}{Ph},$$

并将（6.5）式中的F_1，F_2都表示成F_3，则（6.5）式可改写为

$$\Delta y = (\Delta y)_{R,K} - h(Ph)^2[(f_2 - f_3)F_3 + (f_1 - 4f_2 + 2f_3 + f_4)F_4 - 4(f_1 - f_2 - f_3 + f_4)F_5] \qquad (6.12)$$

可见，当Ph很小时，其结果与四阶龙格—库塔法相同。如果Ph很大时，我们知道四阶龙格—库塔法是不稳定的（可以证明，当$Ph>5.6$时，四阶龙格—库塔法是不稳定的），而（6.5）式却能算出非常好的结果，这正是特雷纳方法的优点。

事实上，当Ph充分大时，利用$F_0 \approx 0$，$F_1 \approx \frac{1}{Ph}$，$F_2 \approx \frac{1}{Ph}$，

$F_3 \approx \frac{1}{2Ph}$，可知此时（6.5）式变成

$$y - y_1 = \lim_{ph\to\infty}\Delta y = \left(\frac{f_4 + Py_4}{P}\right) - y_1 = \tilde{y}_4 - y_1,$$

因此，y接近在$t = t_1 + h$处计算的平衡值$\tilde{y}_4$。

需要指出的是，不应该用式（6.12）来计算Δy，因为当P很大时，$(\Delta y)_{R,K}$和式（6.12）中右端第二项各自都是很大的数值，而它们的差Δy却是小量，因此，用（6.12）式来计算Δy不是好的方法。（6.12）式仅仅用来说明（6.5）式与龙格—库塔方法之间有密切的联系以及论证了其误差阶总是比用龙格—库塔法所得到的误差阶更高。

正因为当Ph很大时，不能用龙格—库塔法。所以，由龙格—库塔法中的y_4不能提供常数B和C的最好数值。为得到y_4的更好的近似式，可通过在（6.2）式中忽略二次项（即置$C=0$）来求得。

事实上，当$C=0$时，有

$$y_4 = y_1 + \frac{A}{P} + \frac{B}{P}\left(h - \frac{1}{P}\right) + \left(\frac{B}{P^2} - \frac{A}{P}\right)e^{-ph},$$

和

$$\begin{cases} f_2 = -P(y_2 - y_1) + f_1 + B\left(\dfrac{h}{2}\right), \\ f_3 = -P(y_3 - y_1) + f_1 + B\left(\dfrac{h}{2}\right), \end{cases} \qquad (6.11)'$$

求解式（6·11）′得到

$$\begin{cases} P = -\dfrac{f_3 - f_2}{y_3 - y_2}, \\ B = \dfrac{2[f_3 + P(y_3 - y_1) - f_1]}{h} = \dfrac{2(f_3 + Ph/2 f_2 - f_1)}{h} \end{cases}$$

故

$$y_4 = y_1 + f_1\left\{\frac{1 - e^{-ph}}{P} - \frac{2\left(h - \dfrac{1}{P} + \dfrac{e^{-ph}}{P}\right)}{Ph}\right\} +$$

$$f_2\left(h - \frac{1}{P} + \frac{e^{-ph}}{P}\right) + 2f_3\left(\frac{1}{P} + \frac{e^{-ph} - 1}{P^2 h}\right)$$

$$= y_1 + h\{2(f_3 - f_1)F_2 + (f_1 - f_2)F_1 + f_2\} \qquad (6.13)$$

此式右端第二项就是（6.9）式所需要的。

四　几点结论

1．特雷纳方法是一种简单易行的通用方法，其误差阶总是比四阶龙格—库塔法所得的误差阶更高，并且从本质上说，每步计算时间与龙格—库塔法是一样的。这是因为大部分计算时间都花费在计算导数值f_i上，所以从（6.5）式可知，用这两种方法计算Δy的时间大体相当。

2. 当$Ph>5.6$时，四阶龙格—库塔方法是不稳定的；而用特雷纳法却能算得非常满意的结果，特别当$Ph\to\infty$时，y接近在$t=t_1+h$处计算的平衡值$\tilde{y}$。

3. 当$Ph\to 0$时，特雷纳法退化为四阶龙格—库塔方法。

此外，计算中还应注意，当Ph很小时，为避免有效数字损失，计算F_j，$j=1$，2，3，要用相应的泰勒展开式。

最后，给出特雷纳方法的FORTRAN语言程序如下：

```
      SUBROUTINE TREANOR(N, L, H, Y, C,
      Y2, DY, DY1, P, F)
      DIMENSION Y(N), C(N), Y2(2, N), DY(N),
      DY1(3, N), P(N), F(3, N)
      IF(L)4, 4, 2
4     CALL TRF (N, Y, DY)
      RETURN
2     DO 5 K=1, 2
      DO 3 I=1, N
      DY1(K, I)=DY(I)
      C(I)=Y(I)+0.5*H*DY(I)
3     Y2(K, I)=C(I)
5     CALL TRF(N, C, DY)
      DO 7 I=1, N
      IF(((DY1(2, I)-DY(I))*(Y2(2, I)-Y2(1,
      I))*H).GT.0.0) GOTO 10
      P(I)=0.0
```

```
      S = DY(I)
      GOTO 6
10    P(I) = (DY1(2, I) - DY(I))/(Y2(2, I) - Y2
      (1, I))
      Q = -P(I) * H
      IF(ABS(Q).GT.1.E-5)GOTO 1
      A3 = 0.1666666667
      A4 = 0.0416666667
      A5 = 0.0083333333
      A6 = 0.0018888889
      F(1, I) = ((A4 * Q + A3) * Q + 0.5) * Q + 1.0
      F(2, I) = ((A5 * Q + A4) * Q + A3) * Q + 0.5
      F(3, I) = ((A6 * Q + A5) * Q + A4) * Q + A3
      GOTO 11
1     F(1, I) = (EXP(Q) - 1.0)/Q
      F(2, I) = (F(1, I) - 1.0)/Q
      F(3, I) = (F(2,I) - 0.5) /Q
11    S = 2. * (DY (I) - DY1 (1, I)) * F (2, I) + (DY1
      (1, I) - DY1 (2, I)) * F(1, I) + DY1 (2, I)
6     DY1 (3, I) = DY(I)
7     C(I) = Y(I) + S * H
      CALL TRF(N, C, DY)
      DO 9 I = 1, N
      IF(P(I).LE.0.0) GOTO 8
      Y(I) = Y(I) + H * (DY1(1, I) * F(1, I) + (4. *
      F(3, I) - 3. * F(2, I)) *
```

```
      (DY1(1, I) + P(I) * Y(I)) + (DY1(2, I) + P(I) *
      Y2(1, I) + DY1(3, I) + P(I) * Y2(2, I)) *
      (2.*F(2, I) - 4.*F(3, I)) + (4.* F(3, I) -
      F(2, I)) * (DY(I) + P(I) * C(I))
      GOTO 9
8     Y(I) = Y(I) + H * (DY1(1, I) + 2.* (DY1(2, I)
            + DY1(3, I)) + DY(I))/6.0
9     CONTINUE
      GOTO 4
      END
```

程序功能

本程序用Treanor方法求解一阶刚性（stiff）常微分方程组的初值问题的近似值。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE TREANOR (N, L, H, Y, C, Y_2, DY, DY_1, P, F)

2. 哑元说明

N：整变量，输入参数，表示方程个数。

L：整变量，输入参数，控制程序走向的信息。第一次调用时置L = −1，不积分仅对右函数求值一次，以后各次调用置L = 1。

H：实变量，输入参数，积分步长。

Y：N个元素的一维实数组，输入、输出参数，调用前需把积分初始值存放到本数组，调用后存放积分结果。

C，P：N个元素的一维实数组，工作单元。

DY：N个元素的一维实数组，输出参数，存放右函数值。

Y_2：2＊N个元素的二维实数组，工作单元。

DY_1，F：3＊N个元素的二维实数组，工作单元。

3． 所调用的过程

SUBROUTINE TRF (N, C, DY)，表示计算右函数的子程序段，由使用者自行编写。其中N为整变量，是方程个数；C是N个元素的一维实数组，存右函数自变量（右函数自变量取自该数组）；DY是N个元素的一维实数组，存放右函数值。

附注

1． 对于给定的初值和步长h，调用本程序只积分一步。因此，要继续积分必须连续调用本程序。

2． 自变量作为第零个方程来处理，其右函数为$f_0 \equiv 1$（即$\frac{dt}{dt}=1$）。这样，原来求解n个方程的方程组，实际变成求解$n+1$个方程的方程组。

例题

求解初值问题

$$\begin{cases} \dfrac{dt}{dt} = 1, \\ \dfrac{dy_1}{dt} = 998y_1 + 1998y_2, \\ \dfrac{dy_2}{dt} = -999y_1 - 1999y_2, \end{cases}$$

$$y_1(0) = 1,\quad y_2(0) = 0.$$

积分区间取〔0，1〕，积分步长$h=0.001$。精确解为

$$\begin{cases} y_1 = 2e^{-t} - e^{-1000t} \\ y_2 = -e^{-t} + e^{-1000t} \end{cases}$$

计算结果是

t	y_1	y_2
0	1.0	0
0.2	1.637461048	−0.8187305246
0.4	1.340639716	−0.6703198588
0.6	1.097622964	−0.5488114830
0.8	0.8986576774	−0.4493288386
1.0	0.7357586768	−0.3678793382

§7. 误差、误差改善与误差估计

一 误差的来源

用数值方法求解具体物理问题时，首先必须用数学公式将物理问题描述出来。而这些数学公式往往是通过对物理问题作了许多假定、近似得到的，这就是对物理问题进行简化带来的误差，也包括观测数据带来的“量测误差”。

其次，在计算过程中，还经常用收敛的无穷级数的有限项代替无穷项求和，这等于抛弃了无穷级数的后段；用差商代数微商；用有限区间代替无限区间上的积分等等。这样产生的误差称为“截断误差”。

还有一类是由于计算机字长有限所带来的计算机固有的

误差，有时称作“舍入误差”。这类误差相对说来比较小，一般不必考虑。

我们所关心和应该考虑的是第二类“截断误差”，即是由计算过程和采用的近似算法带来的误差。

二 相对误差、绝对误差和有效数字

人们特别关心的是计算结果的误差和有效数字。假设用x^*代表准确值x的一个近似值

定义1： 称$e^* = x^* - x$是关于准确值x的绝对误差（因为准确值往往不知道，在迭代过程中，绝对误差用$e^* = x^*_{n+1} - x^*_n$代替）。

定义2： 称$e_r^* = \dfrac{e^*}{x} = \dfrac{x^* - x}{x}$是关于准确值$x$的相对误差（迭代过程中常用$e_r^* = \dfrac{x^*_{n+1} - x^*_n}{x^*_n}$代替）。

一般是当$|x|<1$时用绝对误差，当$|x| \geqq 1$时用相对误差。注意，通常指的绝对误差或相对误差，都取绝对值，并且统一用$\in_r^*$表示。

定义3： 如果$0.05 < a \leqq 0.5$，$\in_r^* = a \cdot 10^{-m+1}$，$(m = 1, 2, \cdots)$就说计算结果具有$m$位有效数字。

三 计算过程中带来的误差

用下面例子说明计算过程的方向引起的误差，同时说明误差的消除办法。

考虑一个循环公式

$$\begin{cases} A_0 \text{已知}, \\ A_n = 1 - nA_{n-1}, \qquad n = 1, 2, \cdots \end{cases} \tag{7.1}$$

假设A_0值的误差为$\in$，则由（7.1）式知

$$\begin{cases} A_1 = 1-(A_0 \pm \in) = 1 - A_0 \mp \in, \\ A_2 = 1 - 2A_1 = 1 - 2(1 - A_0 \mp \in) = -1 + 2A_0 \mp 2! \in, \\ A_3 = 1 - 3A_2 = 1 - 3(-1 + 2A_0 \pm 2! \in) = 4 - 6A_0 \mp 3! \in, \\ \vdots \\ A_n = \cdots \mp n! \in. \end{cases}$$

可见，A_n的误差为$n! \in$，它随n的增大，误差急剧增加，将很快淹没真解。具体看下面积分：

$$\begin{cases} A_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx, \\ A_1 = 1/e. \end{cases} \tag{7.2}$$

利用分部积分，则

$$\begin{aligned} A_n &= \int_0^1 x^n de^{x-1} = x^n e^{x-1}\Big]_0^1 - n\int_0^1 x^{n-1} e^{x-1} dx \\ &= 1 - nA_{n-1} \end{aligned} \tag{7.3}$$

此即（7·1）式的形式。取$A_1 = 0.367879 \mp 10^{-7}$，利用（7·3）式，可算得其它$A^i$值，现列表如下：

	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7	A_8	A_9
值	0.264242	0.207274	0.170904	0.145480	0.127120	0.110160	0.118720	-0.068480

而用（7.2）式算得A_9的真值是$A_9 = 0.0916$。可见，用循环递推式（7.3）求得A_9的值和误差比较已经没有实际意义了。原因是误差按$n! \in$的规律急剧增加，所以再继续用循环递推式（7.3）求得的值与真值比较是面貌全非

回过头来，分析(7.2）式

$$A_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx \leqslant \int_0^1 x^n dx = \frac{1}{n+1}, \qquad (7.4)$$

可见，$\lim_{n\to\infty} A_n = 0$。

为解决上述计算的误差问题，采取将计算过程倒过来，即

$$A_{n-1} = \frac{1 - A_n}{n} \qquad (7.5)$$

从A_{20}出发，例如取$A_{20} = 0 \pm 2$，表示A_{20}取值为0，而误差为± 2，这时，由（7.5）式算得：

$$A_{19} = \frac{1 - A_{20}}{20} = \frac{1}{20} \pm \frac{2}{20},$$

$$A_{18} = \frac{1 - A_{19}}{19} = \frac{19}{20 \times 19} \pm \frac{2}{20 \times 19},$$

$$\vdots$$

$$A_9 = 0.091600 \pm \frac{2}{20 \times 19 \times 18 \times \cdots \times 10} \approx 0.91600 \pm 3 \times 10^{-13}.$$

这样可算得A_9的正确值，而误差由原来的± 2下降到$\pm 3 \times 10^{-13}$。所以，在计算过程中，必须注意方向。如果计算过程中，误差逐渐增加，那末必须倒过来计算。

四　一重定积分所用矩形法、梯形法和抛物线法的误差

注意当$f(x, y) \equiv f(x)$即与y无关时，常微分方程初值问题：

$$\begin{cases} \dfrac{dy}{dx} = f(x,\ y) = f(x), \\ y_0 = y(x = x_0)\ , \end{cases}$$

便简化为计算定积分，即

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} \frac{dy}{dx}dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x)\,dx = y_{n+1} - y_n$$

这时欧拉法就是求定积分的矩形公式（由$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x)\,dx = y_{n+1} - y_n = hf_n$），而欧拉法每步的误差是$0(h^2)$，所以矩形公式每步的误差也是$0(h^2)$；梯形法则以及只迭代一次的方法成为求定积分的梯形法（由$\int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x)\,dx = y_{n+1} - y_n = \frac{h}{2}(f^n + f_{n+1})$），而梯形法则以及只迭一次方法每步误差是$0(h^3)$，所以梯形公式每步的误差是$0(h^3)$；同样可知，此时四阶龙格—库塔法变成辛甫生公式，所以辛甫生公式（抛物线法）每步的误差是$0(h^5)$。

能够证明：如果$f^{(2)}(x)$在区间$[a,\ b]$有界，则复化梯形公式：$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{h}{2}[f(a) + f(b) + 2\sum_{i=2}^{N} f(x_i)]$的误差不超过$\frac{h^2}{12}(b-a)\max_{[a,b]}|f^{(2)}(x)|$（其中$h = \frac{b-a}{N}$）；如果$f^{(4)}(x)$在区间$[a,\ b]$有界，则复化辛甫生公式：

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{h}{3}[f(a) + f(b) + 4\sum_{k=1}^{N} f(x_{2k}) + 2\sum_{k=1}^{N-1} f(x_{2k+1})]$$

的误差不超过$\frac{h^4}{180}(b-a)\max_{a\le x\le b}|f^{(4)}(x)|$（其中$h=\frac{b-a}{2N}$）。

由此可知，梯形公式对一次多项式即$f(x)=ax+b$是精确的；辛甫生公式对三次多项式即$f(x)=ax^3+bx^2+cx+d$是精确的。

§8. 热传导与扩散过程的差分法

我们知道热传导或辐射热传导过程，气体扩散以及电磁场的传播等问题，常可归结为同一类型的抛物型方程，在研究生物化学，统计物理，水文地质，石油开采等问题时也会遇到这种类型的方程。

方程推导的大致步骤是：从局部、瞬时研究物理量的相互关系，再到大范围、长时间。具体做法是，从所研究系统中划出一个小部分，根据物理规律分析邻近部分和这个小部分的相互作用（抓住主要的，忽略次要因素），把这种相互作用在一个短时间段内对物理量的影响用算式表达出来，经过整理就得到所需要的方程。下面以最简单的典型方程—热传导方程为例说明之。

考察某物体G的热传导问题。用函数$u(x, y, z, t)$表示物体G在位置(x, y, z)处和时刻t的温度。

根据热传导的Fourier实验定律：物体在无穷小时间段dt内流过一个无穷小面积ds的热量dQ与物体温度沿曲面ds法线方向的方向导数$\frac{\partial u}{\partial n}$成正比，即

$$dQ=-k(x, y, z)\frac{\partial u}{\partial n}dsdt$$

其中$k(x, y, z)$为物体在点(x, y, z)处的热传导系数，负号表示热流方向与温度增大的方向相反。

在G内任取一闭曲面Γ，其所包围的区域记为Ω，则从时刻t_1到t_2流进此闭曲面的全部热量为

$$Q=\int_{t_1}^{t_2}\left\{\iint_{\Gamma} k(x, y, z)\frac{\partial u}{\partial n}ds\right\}dt$$

流入的热量使物体内部温度发生变化。在t_1到t_2中物体温度从$u(x, y, z, t_1)$变到$u(x, y, z, t_2)$，它所应该吸收的热量是

$$\iiint_{\Omega} c(x, y, z)\ \rho(x, y, z)\ [u(x, y, z, t_2)-u(x, y, z, t_1)]dxdydz$$

其中c为比热，ρ为密度。因此成立：

$$\int_{t_1}^{t_2}\iint_{\Gamma} k\frac{\partial u}{\partial n}dsdt=\iiint_{\Omega}c\rho\left(\int_{t_1}^{t_2}\frac{\partial u}{\partial t}dt\right)dxdydz$$

由奥高定理知：

$$\iint_{\Gamma} k\frac{\partial u}{\partial n}ds=\iiint_{\Omega} div(k\nabla u)dxdydz$$

交换积分次序，得

$$\int_{t_1}^{t_2}\iiint_{\Omega}\left[c\rho\frac{\partial u}{\partial t}-\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial u}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(k\frac{\partial u}{\partial z}\right)\right)\right]dxdydzdt=0$$

由于t_1，t_2与区域Ω都是任意的，我们得到

$$c\rho\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial u}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial u}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(k\frac{\partial u}{\partial z}\right)$$

记作

$$c\rho\frac{\partial u}{\partial t}=\nabla\cdot k\nabla u \tag{8.1}$$

如果物体内部有热源，热源密度 $w=w(x, y, z, t)$，此时方程为

$$c\rho\frac{\partial u}{\partial t}=\nabla\cdot k\nabla u+w \tag{8.2}$$

最简单的情形是物体是均匀的，比时k，c及ρ为常数，记$\frac{k}{c\rho}=a^2$，由（8.1）式可得

$$\frac{\partial u}{\partial t}=a^2\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right)=a^2\Delta u \tag{8.3}$$

导致同一形式的方程还有许多现象，例如

〔例1〕 砷在硅单晶中的扩散方程就是（8.3）形式

〔例2〕 考虑化学反应系统，若把u解释为物质的浓度，k为扩散常数，$c\rho$取为1，w当作物质的生成率，则（8.2）式就描述物质通过一可渗透系统的扩散。

〔例3〕 若把u解释为电学中海底电缆的电压，取$a^2=RC$，其中R为电阻，C为电容。则（8.3）式就是电压u所满足的方程。

〔例4〕 一维的对流扩散方程为

$$\frac{\partial u}{\partial t}+a\frac{\partial u}{\partial x}-b\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}-q=0 \quad (a\leqq 0,\ b\geqq 0)$$

总之，由实际问题归结出的抛物型方程有线性和非线性的，常系数和变系数的，一维和多维的，单个的或方程组形式的等等。

为了唯一决定温度变化的函数$u(x, y, z, t)$，就不能只依赖于方程，还必须考虑物体所处的外界状况以及初始时

的状况。描述这种状况的数学条件分别称为边界条件和初始条件，常称为定解条件。由方程和定解条件就构成定解问题。我们研究的问题都限于适定的定解问题，即解存在、唯一且连续依赖初始条件。

现在转到用有限差分法求解抛物型方程。仍讨论最简单情况，例如在有限长的均匀杆件中，热的传播问题就是要求函数$U(x, t)$在区域$D(0<x<1;\ 0<t\leqslant T)$中满足

$$\frac{\partial U}{\partial t}=\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \tag{8.4}$$

和下述定解条件

$$\left.\begin{aligned} &U(x, 0)=f(x),\ 0\leqslant x\leqslant 1,\\ &U(0, t)=\varphi_1(t),\\ &U(1, t)=\varphi_2(t),\qquad 0\leqslant t\leqslant T \end{aligned}\right\} \tag{8.5}$$

一般还假定函数$f(x)$，$\varphi_1(t)$和$\varphi_2(t)$满足连接条件，即

$$f(0)=\varphi_1(0),\quad f(1)=\varphi_2(0)$$

定解条件（8.5）称为第一类边界条件。

一 显式差分格式

用差分法求解抛物型方程(8.4)和（8.5）式，首先是建立相应的差分方程，用差商代替微商。为此，在$x-t$平面区域内，用直线$x=i\Delta x$（$i=1, \cdots, n-1$）和直线$t=k\Delta t$（$k=1, \cdots, m$）划分格子点。即将x的变化区间$[0, 1]$用结点$0=x_0<x_1<\cdots x_{n-1}<x_n=1$分成$n$等分，步长$\Delta x=1/n$；将$t$变化区间$[0, T]$用结点$0=t_0<t_1<\cdots<t_m=T$分成$m$等分（$t$方向步长可以不等，考虑相等是为了叙述方便），于是$\Delta t=T/m$。

引入记号$U_{ik}=U(x_i,\ t_k)$。显式格式的特点是偏导数$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$用第$k$层上的二阶中心差分来代替。于是，由泰勒展式不难得到：

$$\left.\begin{aligned}\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{i,k}&=\frac{U_i^{k+1}-U_i^k}{\Delta t}+0(\Delta t)\\ \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)_{i,k}&=\frac{U^k_{i-1}-2U_i^k+U^k_{i+1}}{\Delta x^2}+0(\Delta x^2)\end{aligned}\right\}\qquad(8.6)$$

将（8.6）式代入到（8.4）式，得到：

$$\frac{U_i^{k+1}-U_i^k}{\Delta t}=\frac{U^k_{i-1}-2U_i^k+U^k_{i+1}}{\Delta x^2}+0(\Delta t+\Delta x^2)\qquad(8.6')$$

当Δt，Δx充分小时，可忽略$0(\Delta t+\Delta x^2)$，并把定解条件（8.5）相应地离散化，得到如下的差分格式：

$$\left\{\begin{aligned}&u_i^{k+1}=\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\left(u^k_{i-1}+u^k_{i+1}\right)+\left(1-2\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right)u_i^k,\\ &\qquad\qquad i=1,\ \cdots,\ n-1;k=0,\cdots,\ m-1\\ &u_i^0=f(i\Delta x),\qquad i=0,\ 1,\ \cdots,\ n\\ &u_0^k=\varphi_1(k\Delta t),\qquad k=0,\ 1,\ \cdots,\ m\\ &u_n^k=\varphi_2(k\Delta t),\end{aligned}\right.\qquad(8.7)$$

可见，知道第k排上的值，就可直接算出第$k+1$排上各点的值。这种差分格式称为显式格式。其稳定性的充分必要条件是

$$\Delta t/\Delta x^2\leqslant\frac{1}{2}\qquad(8.8)$$

二　隐式差分格式

显式格式虽然计算简单，但为了保证格式的稳定性，对步长Δt必须加上限制条件（8.8）式。这就使得时间步长十分小，从而大大增加了计算工作量，这就促使我们建立新的差分格式，以便放宽稳定性限制，于是引进隐式差分格式。即将（8.4）式中的$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$用$k+1$层上的二阶中心差分来代替，得到下面的四点差分格式：

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{u_i^{k+1}-u_i^k}{\Delta t}=\frac{u_{i-1}^{k+1}-2u_i^{k+1}+u_{i+1}^{k+1}}{\Delta x^2}\\
&u_i^0=f(i\Delta x)\\
&u_0^{k+1}=\varphi_1^{k+1}\\
&u_n^{k+1}=\varphi_2^{k+1}
\end{aligned}\right\}\qquad(8.9)$$

将（8.9）式写成如下形式的代数方程组：

$$a_{i-1}u_{i-1}^{k+1}+b_iu_i^{k+1}+c_iu_{i+1}^{k+1}=-u_i^k\equiv f_i^k\qquad(8.10)$$

其中系数：

$$\left\{\begin{aligned}
&a_{i-1}=c_i=\frac{\Delta t}{\Delta x^2},\\
&b_i=-\left(1+2\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right).
\end{aligned}\right.\qquad i=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1$$

考虑在应用上，边界条件还可能是如下形式：

$$\left\{\begin{aligned}
&x=0:\quad \frac{\partial u}{\partial x}=\alpha_1u+\beta_1,\\
&x=1:\quad \frac{\partial u}{\partial x}=\alpha_2u+\beta_2.
\end{aligned}\right.\qquad(8.5')$$

这里α_1，β_1，α_2，β_2都是已知常数。

于是，可将（8.10）式写成具有更一般的三对角矩阵形式

$$\begin{pmatrix} b_0 & c_0 & & & \\ a_0 & b_1 & c_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-2} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_{n-1} & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \\ \vdots \\ u_{n-1} \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix} \qquad (8.11)$$

显然，（8.11）式相应的系数矩阵是对角占优的，因此可采用“追赶”法求解。下面，给出“追赶”法求解的具体过程。

在（8.10）式中，令

$$u_{i-1}^{k+1} + e_{i-1} u_i^{k+1} = d_{i-1} \qquad i = 1, 2, \cdots, n \qquad (8.12)$$

我们来确定“追赶”系数e和d。为此，将（8.12）式代入（8.10）式，并整理得

$$u_i^{k+1} + \frac{c_i}{b_i - a_{i-1} e_{i-1}} u_{i+1}^{k+1} = \frac{f_i^k - a_{i-1} d_{i-1}}{b_i - a_{i-1} e_{i-1}} \qquad (8.12')$$

对照（8.12）式，可以定义：

$$\begin{cases} e_i = \dfrac{c_i}{b_i - a_{i-1} e_{i-1}}, \\ d_i = \dfrac{f_i^k - a_{i-1} d_{i-1}}{b_i - a_{i-1} e_{i-1}} \end{cases} \quad i = 1, 2, \cdots, n \qquad (8.13)$$

由（8.11）和（8.12）式知 $\begin{cases} b_0 u_0 + c_0 u_1 = f_0, \\ u_0 + e_0 u_1 = d_0. \end{cases}$

于是得 $e_0 = \dfrac{c_0}{b_0}$，$d_0 = \dfrac{f_0}{b_0}$。再利用（8.13）式，可“追”出全部系数e_i和d_i，$i = 1, 2, \cdots, n$。

同样，由（8.11）和（8.12）式知 $\begin{cases} a_{n-1}u_{n-1}+b_nu_n=f_n, \\ u_{n-1}+e_{n-1}u_n=d_{n-1}, \end{cases}$

解得 $u_n=\dfrac{f_n-a_{n-1}d_{n-1}}{b_n-a_{n-1}e_{n-1}}=d_n$。再利用（8.12）式：

$u_k=d_k-e_ku_{k+1}$，$k=n-1$，$n-2$，…，1，就可“赶”出全部解。

整理之，其计算公式如下：

$$\begin{cases} \beta_0=b_0, \\ e_k=c_k/\beta_k, \\ \beta_{k+1}=b_{k+1}-a_ke_k, \\ d_0=f_0/b_0, \qquad\qquad k=0,\ 1,\ \cdots,\ n-1 \\ d_k=(f_k-a_{k-1}d_{k-1})/\beta_k, k=0,\ 1,\ \cdots,\ n \end{cases} \tag{8.14}$$

$$\begin{cases} u_n=d_n, \\ u_k=d_k-e_ku_{k+1}. \quad k=n-1,\ n-2,\ \cdots,\ 1 \end{cases} \tag{8.15}$$

（8.14）式为“追”的过程，（8.15）式为“赶”的过程，故称该法为“追赶”法。下面给出“追赶”法解三对角型方程组：

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_1 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_{n-1} & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix}$$

的程序。

```
SUBROUTINE TRID(N, A, B, C, F)
DIMENSION A(N), B(N), C(N), F(N)
F(1) = F(1)/B(1)
```

```
      W = B(1)
      NE = N - 1
      DO 1 K = 1, NE
      B(K) = C(K)/W
      W = B(K + 1) - A(K) * B(K)
1     F(K + 1) = (F(K + 1) - A(K) * F(K))/W
      DO 2 J = 1, NE
      K = N - J
2     F(K) = F(K) - B(K) * F(K + 1)
      RETURN
      END
```

程序功能

本过程用以求解三对角型方程组。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE TRID(N, A, B, C, F)

2. 哑元说明

N：整变量，输入参数，方程组的阶数。

A：N个元素的一维实数组，存放a_1，a_2，…，a_{n-1}。

B：N个元素的一维实数组，存放b_1，b_2，…，b_n。

C：N个元素的一维实数组，存放c_1，c_2，…，c_{n-1}。

F：N个元素的一维实数组，开始存方程组右端向量，最终存放解向量x。

例题

求解三对角型方程组

$$\begin{array}{cccccc|c|c}
1 & 1 & & & & & x_1 & 3 \\
1 & 2 & 1 & & & 0 & x_2 & 8 \\
 & 1 & 3 & 1 & & & x_3 = & 15 \\
 & & 1 & 4 & 1 & & x_4 & 24 \\
 & 0 & & 1 & 5 & & x_5 & 29
\end{array}$$

计算结果 $x_1=1$，$x_2=2$，$x_3=3$，$x_4=4$，$x_5=5$。

从上述求解步骤看到，用“追赶”法求解时，碰到除法运算。因此，除要求$b_0\neq 0$外，还要求分母$b_i-a_{i-1}e_{i-1}$ $(i=1,\ \cdots,\ n)$都不为零。我们下面叙述并证明一个定理——主对角线元素占优定理。

定理：如果方程（8.11）的系数满足

（1）一切a_k $(k=0,\ 1,\ \cdots,\ n-1)$，b_k $(k=0,\ 1,\ \cdots,\ n)$，$c_k(k=0,\ 1,\ \cdots,\ n-1)$ 均不为零；

（2）成立

$$\begin{cases} |b_0|>|c_0|, \\ |b_k|\geqslant |a_{k-1}|+|c_k|, & (k=1,\ 2,\ \cdots,\ n-1) \\ |b_n|\geqslant |a_{n-1}|. \end{cases}$$

时，则恒有

$$b_k-a_{k-1}e_{k-1}\neq 0 \qquad (k=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$$

于是方程（8.11）的解可唯一地确定。

证明：用数学归纳法来证明对一切k $(k=0,\ \cdots,\ n)$成立不等式$|e_k|<1$。

事实上，由$|e_0|=\left|\dfrac{c_0}{b_0}\right|<1$，假定$k$时有$|e_k|<1$，由$|b_{k+1}-a_ke_k|\geqslant |b_{k+1}|-|a_ke_k|>|b_{k+1}|-|a_k|$，所以

$|e_{k+1}| = \left| \dfrac{c_{k+1}}{b_{k+1} - a_k e_k} \right| < \dfrac{|c_{k+1}|}{|b_{k+1}| - |a_k|} \leqq 1$，于是

$|b_{k+1} - a_k e_k| > |c_{k+1}| > 0$ $(k = 1, \cdots, n-2)$，又

$$|b_n - a_{n-1} e_{n-1}| \geqq |b_n| - |a_{n-1} e_{n-1}| = \begin{cases} > |b_n| - |a_{n-1}| \geqq 0, & \text{当 } a_{n-1} \neq 0, \\ = |b_n| > 0, & \text{当 } a_{n-1} = 0. \end{cases}$$

这就证明了：$b_k - a_{k-1} e_{k-1} \neq 0$ $(k = 1, 2, \cdots, n)$，于是方程（8.11）的解可唯一地确定。

〔注〕：定理中条件（2）改成

$$\begin{cases} |b_0| \geqq |c_0|, \\ |b_k| \geqq |a_{k-1}| + |c_k|, & (k = 1, \cdots, n-1) \\ |b_n| > |a_{n-1}|. \end{cases}$$

时，结论亦真。

对二维问题，例如

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \tag{8.16}$$

可采用隐式交替方向法，其C—N格式（Crank——Nicalsion）如下：

$$\frac{u_{i,j}^{k+1/2} - u_{i,j}^{k}}{\Delta t/2} = \frac{u_{i+1,j}^{k+1/2} - 2u_{i,j}^{k+1/2} + u_{i-1,j}^{k+1/2}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^{k} - 2u_{i,j}^{k} + u_{i,j-1}^{k}}{\Delta y^2} \tag{8.17}$$

$$\frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^{k+1/2}}{\Delta t/2} = \frac{u_{i+1,j}^{k+1/2} - 2u_{i,j}^{k+1/2} + u_{i-1,j}^{k+1/2}}{\Delta x^2} + \frac{u_{i,j+1}^{k+1} - 2u_{i,j}^{k+1} + u_{i,j-1}^{k+1}}{\Delta y^2} \tag{8.18}$$

交替方向法的基本思想是将x，y的二维问题，逐次地化为关于x和y的两个一维问题来解决。前者关于x方向，先走半步；后者关于y方向，再走半步，两个半步作为一步。这样就使两个变量分开了，使每一时间层上所要解的方程组都是三对角型，均能采用三对角矩阵的“追赶”法求解。

第五章　薛定谔方程及其解法

十九世纪末，物理学的经典理论取得了重大成就：物体的机械运动速度远远小于光速时，准确地遵从牛顿力学；电磁现象和光的现象都可归结为麦克斯韦方程；热现象有热力学和经典统计物理学来解决。但另一方面，人们发现了一些用经典理论无法解决的新的物理现象。主要是黑体辐射，光电效应，原子光谱线以及固体比热等。为了解决经典理论所遇到的困难，普朗克提出了能量量子化的概念，认为能量不能取连续值，而只能取分立值。这个概念导致力学规律巨大变革。通过普朗克、爱因斯坦、玻尔、索末菲和德布罗意等人的工作，揭示出微观粒子具有波粒二重性，微观粒子服从量子力学规律。量子力学的基本方程是薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=H\Psi \qquad (1)$$

其中 $\hbar=\frac{h}{2\pi}$，h 为普朗克常数；H为粒子的哈密顿量；Ψ为波函数，用来描述粒子的微观运动状态，通常是位置和时间的函数。H可表示为

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U \qquad (2)$$

其中Δ是拉普拉斯算符，U是势能。

可见，薛定谔方程是一个偏微分方程，但是要同时求本征值和本征波函数。下面考虑几种特殊情况下，薛定谔方程求解问题。

§1. 一维方势阱的计算

考虑一维空间中的粒子运动，它的势能U取为

$$U=\begin{cases}V_0, & 0<x<w\\ 0, & \text{其它}\end{cases} \tag{1.1}$$

由于势能和时间无关，属于定态情形，又是一维问题，因此可用分离变量法求解。为此，设

$$\Psi(x,\ t)=\varphi(x)f(t), \tag{1.2}$$

并代入（1）式，得

$$i\hbar\frac{df(t)}{dt}\Big/f(t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2}+U\varphi(x)\right)\Big/\varphi(x)\equiv E \tag{1.3}$$

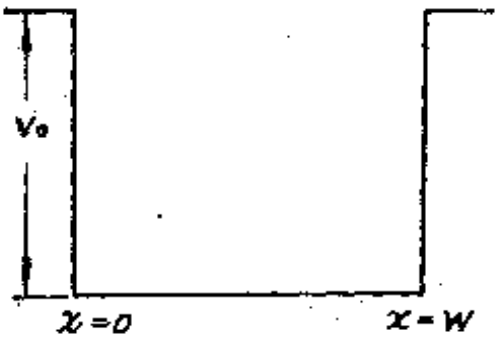


图13 方势阱

亦即

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{df}{dt}=Ef, & (1.4)\\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2\varphi}{dx^2}+U\varphi=E\varphi. & (1.5)\end{cases}$$

这里E为波函数的本征值。

由（1.4）式，解得 $f(t)=ce^{-\frac{iE}{\hbar}t}$

其中c为任意常数。于是波函数Ψ可表示成

$$\Psi(x,\ t)=\varphi(x)e^{-\frac{iE}{\hbar}t} \tag{1.6}$$

这样，问题变成求解（1.5）式。（1.5）式与时间无关，称为定态薛定谔方程。为讨论简便，取$\hbar=1$，$m=1/2$，于是（1.5）式变为

$$\begin{cases}\dfrac{d^2\varphi}{dx^2}=(U(x)-E)\varphi,\\ \lim\limits_{x\to\pm\infty}\varphi(x)=0.\end{cases} \tag{1.7}$$

这是一个二阶常微分方程，并附有边界条件。满足这些边界条件的非零解往往不存在，除非方程中的参数E取某些特定值（固有值），这些特定值叫作本征值，相应的非零解叫作本征函数。

事实上，显然$E\geqq 0$时，问题没有非零解。因此求解方程（1.7）式是求本征值问题。

下面我们先来分析一下波函数的一般性质。

在方势阱内

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}=-r_1^2\varphi \tag{1.8}$$

其中$r_1^2=E-V_0>0$，方程（1.8）的通解为

$$\varphi(x)=A_1\sin(r_1x)+B_1\cos(r_1x) \tag{1.9}$$

在方势阱外

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}=r_2^2\varphi \tag{1.10}$$

其中$r_2^2 = -E$，方程(1.10)的通解为

$$\varphi(x) = C_j e^{r_2 x} + D_j e^{-r_2 x} \qquad (1.11)$$

其中$j=0$，1。$j=0$表示势阱左边的波函数，$j=1$表示势阱右边的波函数。A_1，B_1，C_0，D_0，C_1和D_1是待定系数。

由边界条件$\lim_{x\to\pm\infty}\varphi(x)=0$，应该有$C_1=D_0=0$。但是，对任意$E$值说来，$D_0=0$和$C_1=0$的要求不可能同时得到满足。这可从以下推导过程知$C_0$，$D_0$这两个值一旦确定，就完全决定了$A_1$，$B_1$，$C_1$和$D_1$的值看出。

为此，无妨取$D_0=0$和$C_0=1$，由在$x=0$处波函数一阶导数连续可定出A_1和B_1的值。

事实上，由(1.9)和(1.11)式，有

$$\varphi(0) = B_1 = C_0 = 1 \qquad (1.12)$$

和 $\varphi'(0) = r_1 A_1 = r_2 C_0$，所以 $A_1 = r_2/r_1$ (1.13)

同样，利用在方势阱右边$x=w$处波函数及一阶导数连续可定出C_1和D_1的值。

由(1.9)式，得

$$\begin{cases}\varphi(w) = r_2/r_1 \sin(wr_1) + \cos(wr_1)\\ \varphi'(w) = r_2\cos(wr_1) - r_1\sin(wr_1)\end{cases} \qquad (1.14)$$

由(1.11)式，得

$$\begin{cases}\varphi(w) = C_1 e^{r_2 w} + D_1 e^{-r_2 w}\\ \varphi'(w) = C_1 r_2 e^{r_2 w} - D_1 r_2 e^{-r_2 w}\end{cases} \qquad (1.15)$$

解(1.15)式，得

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{2} e^{-r_2 w}[\varphi(w) + \varphi'(w)/r_2]\\ D_1 &= \frac{1}{2} e^{r_2 w}[\varphi(w) - \varphi'(w)/r_2]\end{aligned} \qquad (1.16)$$

可见，C_0和D_0的值完全决定了A_1，B_1，C_1和D_1的值，结果完全决定了波函数。所以，一般情况下C_1值不一定为零。为了满足边界条件$\lim_{x\to\infty}\varphi(x)=0$，必须要求$C_1=0$，这就对$E$的取值进行了限制，不能取任意值，只能取某些特定值，才能保证$C_1=0$的要求。

再用图解法来说明上面的情况。

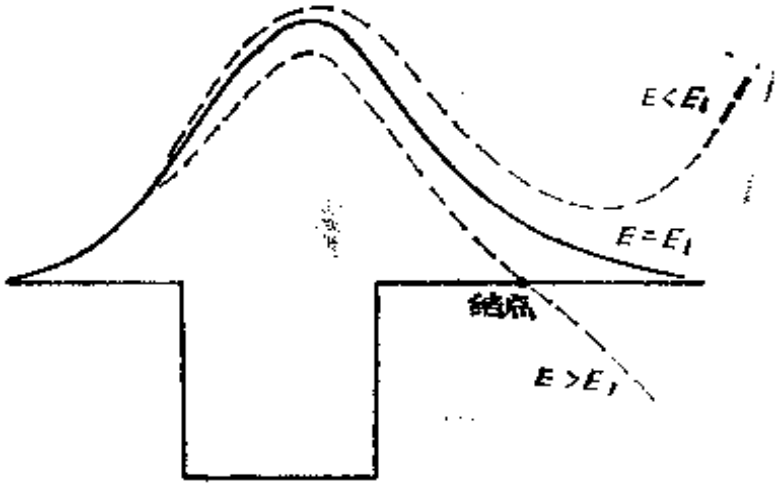


图14　本征值为E_1时

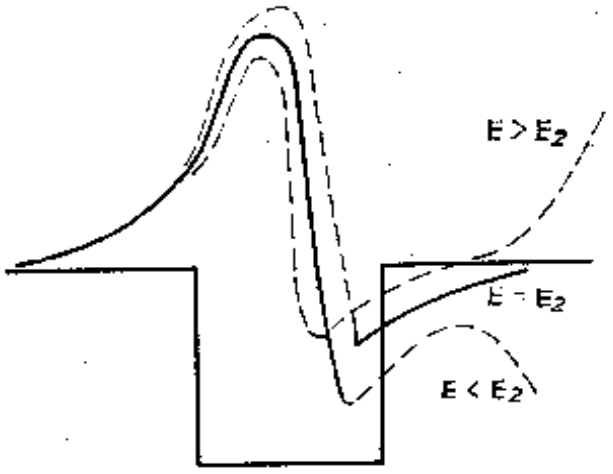


图15　本征值为E_2时

设E_1是能量本征值，其相应波函数如图14所示。我们知道二阶导数的正负号决定曲线的凹或凸的方向，又曲率$k=|y''|/(1+y'^2)^{\frac{3}{2}}$，对圆说来，$k=1/r$，半径越小（即$k$越大），圆周弯曲的越厉害。我们看，在方势阱外：$\varphi''=-E\varphi$。如果$-E$越大，$\varphi''$就越大，表明曲线更曲。所以$E<E_1$，即$-E>-E_1$，此时曲线应更曲（如图14所示）。所以，$E<E_1$，当$x\to\infty$时，波函数(凹)向上发散；同理，$E>E_1$，$x\to\infty$时，波函数向下发散。

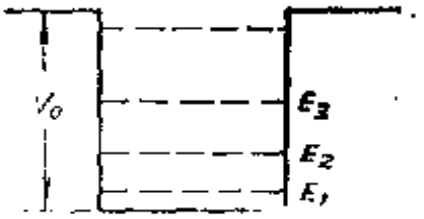


图16　粒子运动的能级

对第二个本征值E_2，同样存在E值大于、等于和小于E_2的三种情况，如图15所示。

所以说粒子的能量只能取某些分裂的值，如图16所示。E的取值与势阱参数V_0和W有关。

进一步分析图14和15的波函数。波函数通过x轴的交点称为结点，在图14中，能量E低于E_1的波函数没有结点，能量E高于E_1的波函数有一个结点；在图15中，能量E低于E_2的波函数有一个结点，能量E高于E_2的波函数有两个结点；……由此可推广到一般规律：若φ_a和φ_b是薛定谔方程的两个解（不一定是本征波函数），其相应的能量为E_a和E_b，φ_a对应$n-1$个结点，φ_b对应n个结点，则第n个能量本征值必处在E_a和E_b之间，因此可取$E_n=\frac{1}{2}(E_a+E_b)$。一般情形若φ_a、φ_b分别对应$n-1$和$n+k$个结点，则能量本征值$E_n, E_{n+1}, \cdots\cdots E_{n+k}$必处在$E_a$和$E_b$之间。

由上面分析，可得结论：E_1的本征波函数没有结点，E_2

的本征波函数有一个结点，E_3的本征波函数有二个结点等等。我们可用计算机通过确定结点数来求单势阱情况时薛定谔方程（1.7)的本征值和本征波函数。

第一步，给定参数，设

V = 势阱深度，

W = 势阱宽度，

E_{max} = 猜测能量本征值的上限（取为0），

E_{min} = 猜测能量本征值的下限（取为V）。

第二步，将下限到上限间的能量分成M个能级，其增量

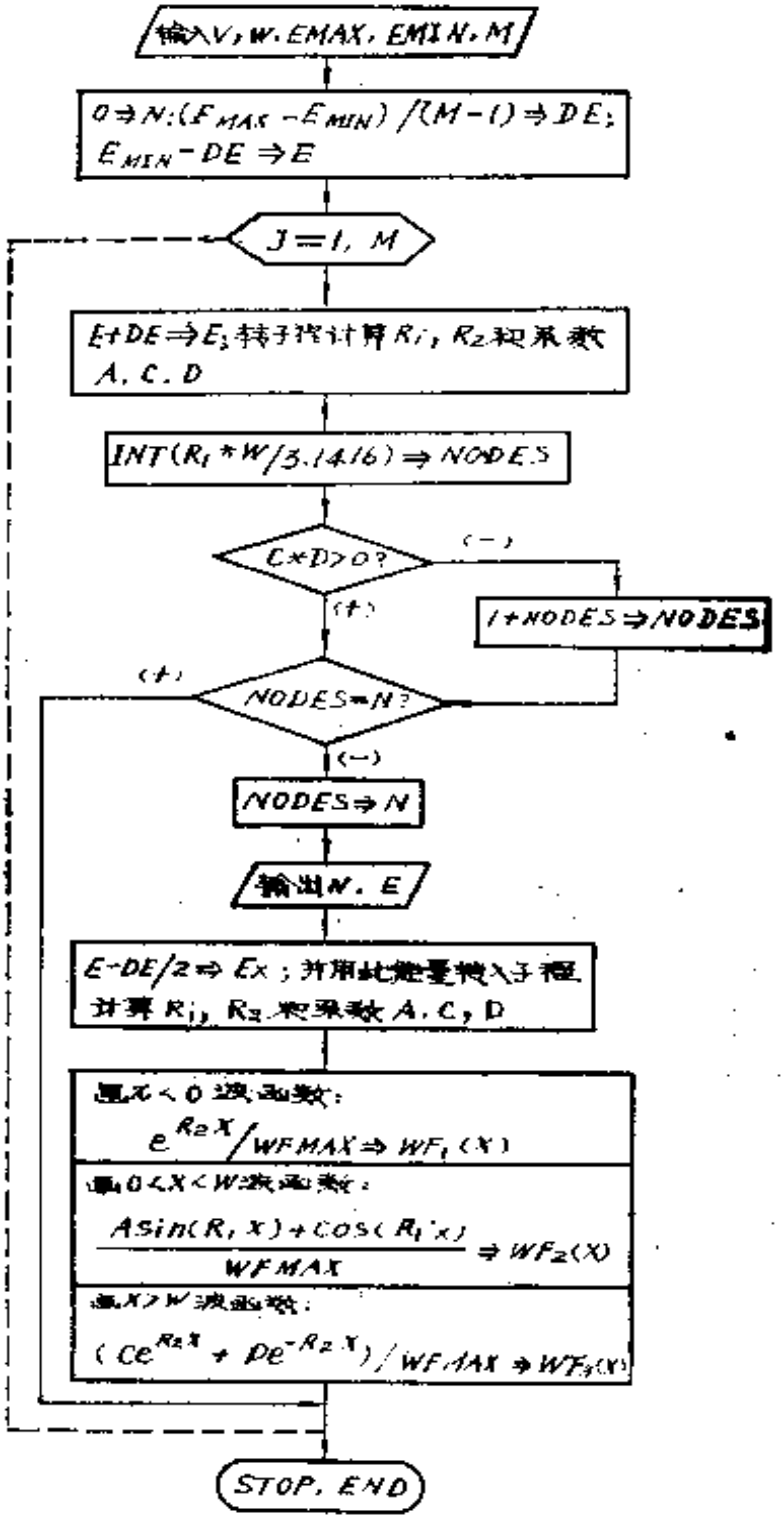
$$\Delta E = (E_{max} - E_{min})/(M-1) \equiv DE$$

第三步，计算与x轴相交结点的数目。

(1) 在方势阱内，用半波长的数目$r_1 w/\pi$求出波函数和x轴相交的结点数N。如果$r_1 w/\pi$小于1，表示没有结点，取值为零；若大于1小于2，有一个结点，取值为1；若大于2小于3，有二个结点，取值为2。如此等等。

(2) 在方势阱右边，波函数与x轴相交，才对结点数有贡献，即$0 = \varphi(x) = C_1 e^{r_1 x} + D_1 e^{-r_1 x}$。可见，只有当$C_1$和$D_1$异号时，才有一个结点，同号时没有结点。

第四步，由结点数计算结果。定出能量本征值E_1，E_2，……。方法是如果相邻的两个能级E_a和E_b分别对应0个和1个结点，则能量本征值E_1必处在E_a和E_b之间，可取$E_1 = (E_a + E_b)/2$；若相邻的两个能级分别对应1和2个结点，则能量本征值E_2必处在这两个能级之间，可取E_2为这两个能量的平均值。如此等等，可求得一系列的能量本征值。由能量本征值，根据前面公式，可求得波函数系数A_1，B_1，C_1和D_1（$C_0 = 1$，$D_0 = 0$），于是就确定了相应的本征波函数。


输入V, W, EMAX, EMIN, M
0⇒N; (EMAX-EMIN)/(M-1)⇒DE; EMIN-DE⇒E
J=1, M
E+DE⇒E; 转子程计算R1, R2和系数A, C, D
INT(R1*W/3.1416)⇒NODES
C*D>0?
(-)
(+)
1+NODES⇒NODES
(+)
NODES=N?
(-)
NODES⇒N
输出N, E
E-DE/2⇒Ex; 并用此能量转入子程计算R1, R2和系数A, C, D
当X<0波函数:
e^(R2X)/WFMAX⇒WF1(X)
当0<X<W波函数:
(Asin(R1X)+cos(R1X))/WFMAX⇒WF2(X)
当X>W波函数:
(Ce^(R2X)+De^(-R2X))/WFMAX⇒WF3(X)
STOP, END

上面给出的是计算的框图。框图中WF_{max}代表波函数最大值。这是为用计算机画波函数的图形时，采用波函数的最大值$WF_{max} = A\sin y + \cos y$归一化。这里的$y = \mathrm{arctg}A$。

```
      SUBROUTINE EFSG(EMAX, EMIN, V, W,M,
NN, EE, WF)
      DIMENSION NN(M), EE(M), WF(M)
      N=0
      DE=(EMAX-EMIN)/FLOAT(M-1)
      E=EMIN-DE
      DO 15 I=1, M
      E=E+DE
      IF(ABS(E-V).LT.1.E-8)  GOTO 5
      CALL WFC(E, V, W, R1, R2, A, C, D)
      NODES=INT(R1*W/3.14159265)
      IF(C*D.LT.0.) NODES=NODES+1
      IF(NODES.EQ.N) GOTO 5
      N=NODES
      EX=E-0.5*DE
      CALL WFC(EX, V, W, R1, R2, A, C, D)
      Y=ATAN(A)
      WFM=A*SIN(Y)+COS(Y)
      DX=3.0*W/FLOAT(M-1)
      X=-W-DX
      DO 25 I=1, M
      X=X+DX
      IF(X.LT.0.0) GOTO 30
```

```
      IF(X.GT.W) GOTO 40
      WF(I) = A*SIN(R1*X) + COS(R1*X)
      GOTO 25
30    WF(I) = EXP(R2*X)
      GOTO 25
40    WF(I) = C*EXP(R2*X) + D*EXP(-R2*X)
25    WF(I) = WF(I)/WFM
 5    NN(J) = N
      EE(J) = E
15    CONTINUE
      RETURN
      END
      SUBROUTINE WFC(E,V,W,R1,R2, A, C, D)
      R1 = SQRT(ABS(E-V))
      R2 = SQRT(ABS(E))
      A = R2/R1
      W1 = W*R1
      FW = A*SIN(W1) + COS(W1)
      FPW = COS(W1) - SIN(W1)/A
      C = 0.5*EXP(-R2*W)*(FW + FPW)
      D = 0.5*EXP(R2*W)*(FW - FPW)
      RETURN
      END
```

程序功能

本程序用来计算一维方势阱的本征值和相应的波函数。

使用说明

1.子程序语句

SUBROUTINE EFSG(EMAX, EMIN, V,W, M, NN, EE, WF)

2.哑元说明

EMAX：输入参数，实变量，猜测的能量本征值的上限。

EMIN：输入参数，实变量，猜测的能量本征值的下限。

V：输入参数，实变量，势阱的深度。

W：输入参数，实变量，势阱的宽度。

M：输入参数，整变量，能量下限和上限之间所分成的能级数目。

NN, EE, WF：M个元素的一维数组，输出参数，分别存放方势阱内波函数与x轴相交的结点数，所分成的能级和相应的波函数值。

3.所调用的过程

SUBROUTINE WFC(E, V, W, R_1, R_2, A, C, D)，是计算R_1，R_2和系数A，C，D的子程序。

例题

在参数 EMAX = 0.0，EMIN = −20.0，V = −20.0，W = 1.0和M = 51的情况下，可得如下结果：

E	N	E	N	E	N
−20.0	0	−13.2	1	−6.4	1
−19.6	0	−12.8	1	−6.0	1
−19.2	0	−12.4	1	−5.6	1
−18.8	0	−12.0	1	−5.2	1

续 表

E	N	E	N	E	N
-18.4	0	-11.6	1	-4.8	1
-18.0	0	-11.2	1	-4.4	1
-17.6	0	-10.8	1	-4.0	1
-17.2	0	-10.4	1	-3.6	2
-16.8	0	-10.0	1	-3.2	2
-16.4	0	-9.6	1	-2.8	2
-16.0	0	-9.2	1	-2.4	2
-15.6	0	-8.8	1	-2.0	2
-15.2	1	-8.4	1	-1.6	2
-14.8	1	-8.0	1	-1.2	2
-14.4	1	-7.6	1	-0.8	2
-14.0	1	-7.2	1	-0.4	2
-13.6	1	-6.8	1	0.0	2

由上表可以看出，波函数的结点数从0到1的变化能量处在$E=-15.6$和$E=-15.2$之间；结点数从1到2变化能量处在$E=-4.0$和$E=-3.6$之间。所以能量本征值E_1处在-15.6和-15.2之间，可取$E_1=-15.4$；E_2处在-4.0和-3.6之间，可取$E_2=-3.8$。

为了得到更精密的本征值，可以取能量上限$E_{max}=-15.2$，能量下限$E_{min}=-15.6$。其它参数不变。可算得结点数从0变为1，它的能量处在-15.416和-15.408之间，于是可取$E_1=-15.412$。

如果还要提高精度，可取$E_{max}=-15.408$，$E_{min}=-15.416$，重新计算，可得结点数从0变为1，它的能量处在-15.410081和-15.409921之间，于是可取$E_1=-15.410001$。此时相应的波函数见图17。

同样，可得第二个能量本征值E_2处在-3.728和-3.720之间，取$E_{max}=-3.720$，$E_{min}=-3.728$，重新计算，可得结点数从1变为2，它的能量处在-3.72576和-3.72560之间，于是可取$E_2=-3.72568$。

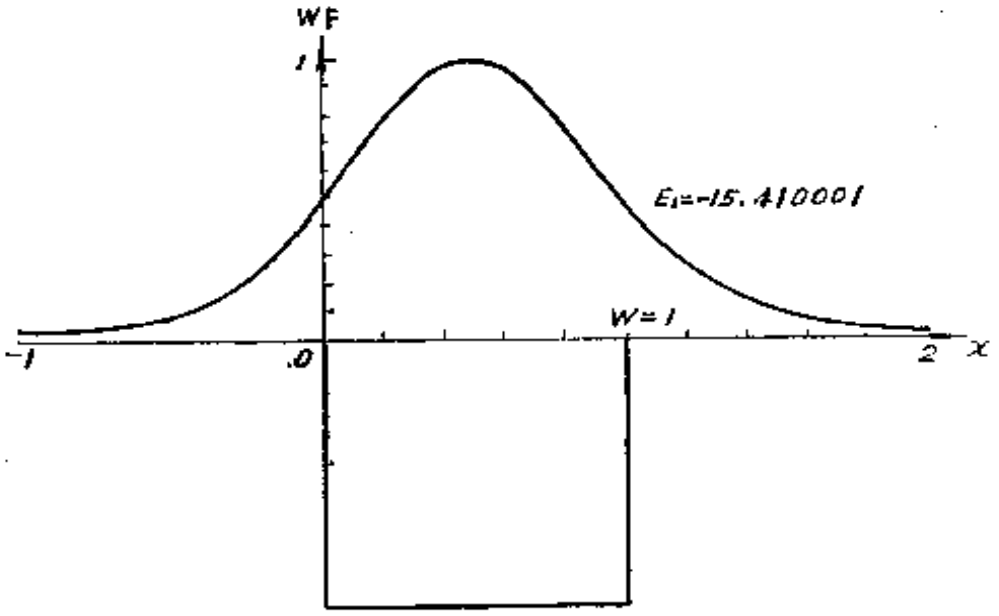


图17　第一个能量本征值和相应波函数

§2. 粒子在辏力场中运动和诺默若夫方法

粒子在辏力场中运动，它的势能是位置r的函数。例如谐振子的势能为

$$U(r)=\frac{1}{2}kr^2 \qquad (2.1)$$

电荷为$-e$的带电粒子，在一个固定的电荷为Ze所产生的电场中运动，粒子的势能为

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} \qquad (2.2)$$

如果考虑原子外层的电子运动，而内层电子作用考虑成电云，它的密度为$\rho(r)$，则势能为

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\rho(r)}{r} \qquad (2.3)$$

式中第一项是核子的贡献，Z为带正电的核子数；第二项为电云的贡献。

上述三种情况均属于辏力场的情况。对辏力场情况，定态薛定谔方程是

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right]\Psi = E\Psi \qquad (2.4)$$

由于势能U仅与r有关，具有球对称性，因此可采用分离变量法求解。为此，拉普拉斯算符Δ取球坐标表示

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

设 $\Psi = \frac{u(r)}{r}Y(\theta, \varphi)$， (2.5)

将Laplace算符和(2.5)式代入(2.4)式，整理得

$$r^2\left[\frac{2m}{\hbar^2}(U(r) - E) - \frac{u''(r)}{u(r)}\right] = \frac{1}{Y(\theta, \varphi)}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}\right] \equiv -\lambda,$$

即
$$\begin{cases}\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}=-\lambda Y, & (2.6)\\ u''(r)-\left[\dfrac{2m}{\hbar^2}(U(r)-E)+\dfrac{\lambda}{r^2}\right]u(r)=0 & (2.7)\end{cases}$$

方程（2.6）式，可借助于第l次的球函数$Y_{lm}(\theta,\varphi)$在条件$\lambda=l(l+1)$下求得解析解（详见数学物理方法）。（2.7）式是径向波动方程，在$U(r)$是通常的形式下，一般得不到解析解。下面给出近似求解方法。将（2.7）式写成如下形式：

$$\begin{cases}u''(r)=f(r)u(r)\ ,\\ u(0)=0,\\ \lim\limits_{r\to\infty}u(r)=0.\end{cases}\qquad(2.8)$$

其中 $f(r)=\dfrac{2m}{\hbar^2}(U(r)-E)+\dfrac{l(l+1)}{r^2}$.

这是二阶方程 $y''+f(x)y=F(x)$， (2.9)

的特殊情形。而（2.9）式的诺默若夫方法的计算公式是：

$$y_{n+1}=-\frac{1}{1+\frac{h^2}{12}f_{n+1}}\left\{-\left(1+\frac{h^2}{12}f_{n-1}\right)y_{n-1}+\left(2-\frac{5h^2}{6}f_n\right)y_n\right.$$

$$\left.+\frac{h^2}{12}\left(F_{n-1}+10F_n+F_{n+1}\right)\right\}+0(h^6)\qquad(2.10)$$

下面用Taylor展式来推导（2.10）式。

由 $$y_{n+1}=y_n+hy_n'+\frac{h^2}{2!}y_n''+\frac{h^3}{3!}y_n^{(3)}+\frac{h^4}{4!}y_n^{(4)}+\frac{h^5}{5!}y_n^{(5)}$$

$$+\frac{h^6}{6!}y_n^{(6)}+\cdots,$$

和 $$y_{n-1}=y_n-hy_n'+\frac{h^2}{2!}y_n''-\frac{h^3}{3!}y_n^{(3)}+\frac{h^4}{4!}y_n^{(4)}-\frac{h^5}{5!}y_n^{(5)}$$
$$+\frac{h^6}{6!}y_n^{(6)}-\cdots,$$

得 $$\frac{1}{2}(y_{n+1}+y_{n-1})=y_n+\frac{h^2}{2!}y_n''+\frac{h^4}{4!}y_n^{(4)}+\frac{h^6}{6!}y_n^{(6)}$$
$$+\cdots \qquad (2.11)$$

对（2.11）式微商二次得

$$\frac{1}{2}(y_{n+1}'+y_{n-1}')=y_n''+\frac{h^2}{2!}y_n^{(4)}+\frac{h^4}{4!}y_n^{(6)}+\frac{h^6}{6!}y_n^{(8)}$$
$$+\cdots \qquad (2.12)$$

（2.11）式与$h^2/12$乘以（2.12）式相减，得

$$\frac{1}{2}(y_{n+1}+y_{n-1})-\frac{1}{2}(y_{n+1}'+y_{n-1}')\frac{h^2}{12}=y_n+\frac{5h^2}{12}y_n''$$
$$-\frac{h^6}{480}y_n^{(6)}+\cdots \qquad (2.13)$$

再将

$$\begin{cases} y_n''=-f_ny_n+F_n, \\ y_{n+1}''=-f_{n+1}y_{n+1}+F_{n+1}, \\ y_{n-1}''=-f_{n-1}y_{n-1}+F_{n-1}, \end{cases}$$

代入（2.13）式，整理得：

$$y_{n+1}=\frac{1}{1+\frac{h^2}{12}f_{n+1}}\left\{-\left(1+\frac{h^2}{12}f_{n-1}\right)y_{n-1}+\left(2-\frac{5}{6}h^2f_n\right)y_n\right.$$
$$\left.+\frac{h^2}{12}(F_{n-1}+10F_n+F_{n+1})\right\}+0(h^6)$$

此即（2.10）式。

可见，使用这个方法时，只要两个初始值y_0和y_1，就可算出y_2，y_3……故诺默若夫方法是比较简便的。

（2.8）式相应的计算公式是

$$u_{n+1}=\frac{1}{1-\frac{h^2}{12}f_{n+1}}\left\{-\left(1-\frac{h^2}{12}f_{n-1}\right)u_{n-1}+\left(2+\frac{5}{6}h^2f_n\right)u_n\right\}+0(h^6) \tag{2.14}$$

该式表明了u_{n-1}，u_n和u_{n+1}三点值之间的关系，由两点值，可求出第三点值。但其中$f(r)$是未知的（E未知），所以实际上是求本征值的问题。

我们取$f=(U(r)-E)+\frac{l(l+1)}{r^2}$，定性地看一看波函数应该具有什么形式。为此，将$r$分成三个区：第一个区域$r$很小，第二个区域$r$中等，第三个区域$r\gg1$。

在第一个区域中知$f(r)\approx\frac{l(l+1)}{r^2}$，于是方程变成$r^2u''(r)=l(l+1)u(r)$，这是欧拉方程，通解$u(r)=c_1r^{l+1}+c_2r^{-l}$由$u(0)$有限，所以$c_2=0$，于是可取$u(r)=r^{l+1}$ (2.15)

在第二个区域中知$f(r)\approx-\frac{B}{r}+\frac{\rho(r)}{r}$，$f<0$。我们设$u=e^{ikr}$，即取$u(r)=\sin(kr)$，于是$u''(r)=-k^2\sin(kr)=-k^2u=fu$

$$\therefore k=|f|^{\frac{1}{2}} \qquad \therefore u=\sin(|f|^{\frac{1}{2}}r) \tag{2.16}$$

在第三个区域知$f(r)\approx-E$。于是方程为$u''(r)=-Eu$，其通解$u(r)=c_1e^{\sqrt{-E}r}+c_2e^{-\sqrt{-E}r}$由$\lim_{r\to\infty}u(r)=0$，于是可取

$$u = e^{-\sqrt{-E}r} = e^{-|l|\frac{1}{2}r} \tag{2.17}$$

这样，可画出$f(r)$和$u(r)$的定性图如下：

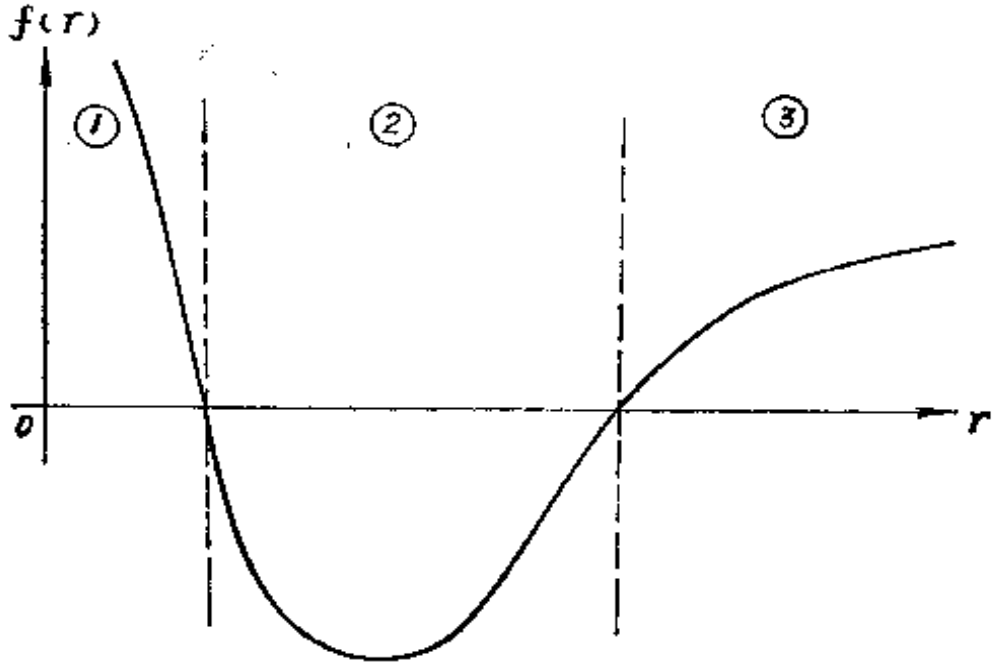


图18 $f(r)$的定性图

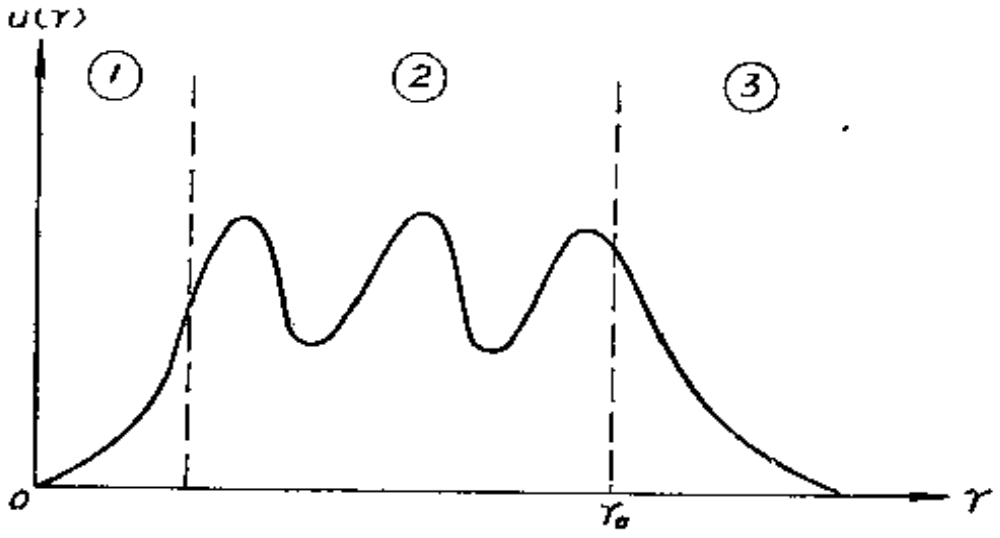


图19 $u(r)$的定性图

从上面的分析，得到了试探波函数（2.15）—(2.17)式。数值计算中选取试探函数常常是很有用的。这种分析也有助于检验计算结果是否符合物理问题的要求等。

对二阶线性常微分方程的两点边值问题，可采用“追赶”法求解。而对非线性两点边值问题，通常采用尝试法（亦称打靶法）。

考虑第一边值问题

$$\begin{cases} y'' = f(x,\ y,\ y'), \\ y(a) = \alpha, \\ y(b) = \beta, \end{cases} \qquad a < x < b \qquad (2.18)$$

打靶法的基本思想是根据对实际问题的分析或经验，先取一斜率m_1，求解初值问题

$$\begin{cases} y'' = f(x,\ y,\ y'), \\ y(a) = \alpha, \\ y'(a) = m_1, \end{cases} \qquad (2.19)$$

可采用四阶龙格—库塔法，求得方程（2.19）的一个解$y_1(x)$。如果$|y_1(b) - \beta| < \in$，则认为$y_1(x)$即为所求。否则，可根据$\beta_1 = y_1(b)$与β的距离，适当修改m_1为m_2，例如可取$m_2 = \beta m_1 / \beta_1$，再解初值问题

$$\begin{cases} y'' = f(x,\ y,\ y'), \\ y(a) = \alpha, \\ y'(a) = m_2, \end{cases} \qquad (2.20)$$

又可求得另一解$y_2(x)$。如果$\beta_2 = y_2(b)$不满足要求，可修改m_2为m_3，……，一般可取$m_{i+1} = m_i\beta/\beta_i$，$i = 1,\ 2\cdots$；或者取$m_{i+2} = m_i + (m_{i+1} - m_i)(\beta - \beta_i)/(\beta_{i+1} - \beta_i)$，$i = 1, 2, \cdots$.以此继续下去，直到找出满足要求的解时为止。

第六章　定谱方程的矩阵解

力学和物理学的许多问题最后往往归结为求本征值问题。这类问题在工程设计、科学研究和计算物理本身等方面都有着重要的意义。例如，求解定态薛定谔方程，实际就是求能量本征值和本征波函数；而求解本征值和本征函数的问题又可归结为求解相应矩阵的特征值和特征向量。

§1. 本征值方程的矩阵表示

定态薛定谔方程

$$H\varphi \equiv -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\varphi = E\varphi \qquad (1.1)$$

也称本征值方程。其一维情形变为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + U(x)\varphi = E\varphi \qquad (1.2)$$

将（1.2）式离散化，用二阶中心差分代替二阶微商，即

$$\left(\frac{d^2\varphi}{dx^2}\right) = (\varphi_{i+1} - 2\varphi_i + \varphi_{i-1})/h^2$$

将其代入（1.2）式，并加上两个端点的边条件，则可写成如下的三对角矩阵形式

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_1 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & a_{n-2} & b_{n-1} & c_{n-1} & \\ & & a_{n-1} & b_n & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_{n-1} \\ \varphi_n \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_{n-1} \\ \varphi_n \end{pmatrix} \qquad (1.3)$$

我们是用三个点的二阶中心差分近似二阶微商，得到的能量算符H矩阵是三对角阵。如果用多一些点来近似二阶微商，例如可以取

$\varphi_i = (\varphi_{i-\frac{1}{2}} + \varphi_{i+\frac{1}{2}})/2$，则相应H矩阵就不是三对角阵的形式了。能量算符$H$用一般矩阵表示为

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ H_{n1} & H_n & \cdots & H_{nn} \end{pmatrix} \equiv (H_{ij}) \qquad (1.4)$$

波函数φ可表成一列矩阵

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix} \qquad (1.5)$$

于是，（1.1）式可写成

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E & & & \\ & E & & \\ & & \ddots & \\ & & & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix}$$

亦即

$$\begin{pmatrix} H_{11}-E & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22}-E & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ H_{n1} & H_{2n} & \cdots & H_{nn}-E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix} = 0 \qquad (1.6)$$

（1.6）式是一个齐次线性代数方程组，它有非零解的充分必要条件是系数行列式为零，即

$$|H-EI| = \begin{vmatrix} H_{11}-E & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22}-E & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn}-E \end{vmatrix} = 0 \qquad (1.7)$$

求解（1.7）式，相当于求矩阵H的特征多项式的根，就可得到一组解$E=(E_1, E_2, \cdots, E_n)$，它们就是矩阵$H$的本征值。这样一来，就把求定态薛定谔方程本征值问题化为求矩阵H的特征多项式的根的问题了。

然而，直接求矩阵的特征值并不容易。所以，通常是作变换，将矩阵化为简单形式，最简单形式是对角线矩阵。

我们知道，相似矩阵具有相同的特征多项式和相同的特征值。这是由于，设矩阵$A\sim B$，则存在可逆矩阵X，使得$B=X^{-1}AX$。于是，A和B的特征矩阵有如下关系：

$$\lambda I - B = \lambda I - X^{-1} AX = X^{-1} (\lambda I - A) X \qquad (1.8)$$

等式两边取行列式，得

$$|\lambda I - B| = |X^{-1}| \, |\lambda I - A| \, |X| = |\lambda I - A|$$

这就证明了相似矩阵具有相同的特征多项式，因此具有相同的特征值。

根据相似矩阵的性质，就可以简化矩阵的运算。对给定的矩阵A，找可逆矩阵X，使得$X^{-1} AX$最简单，最简单是对角线矩阵，即

$$X^{-1} AX = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ \lambda_2, \ \cdots, \ \lambda_n)$$

这时的λ_i即为矩阵A的特征值，X的第i列即为λ_i相应的特征向量。

我们还知道，对一个n阶实对称阵A，存在一个n阶正交阵U，使得$U^{-1} AU$成为对角线矩阵。这可通过两种方法进行，一种是Jacobi方法，另一种是QR方法。以下，讨论对n阶实对称阵，采用Jacobi方法，将其化为对角线矩阵。其基本思想是用平面上的旋转矩阵，选取适当的旋转角，使原矩阵通过旋转矩阵的变换达到非对角线上元素为零，即成为对角线矩阵。

§2. 雅可比方法及其收敛性

Jacobi方法适用于对称矩阵，在非对称的情况下也可以试用，不过没有保证。

一 Jacobi方法

Jacobi方法建立的基础是，对实对称矩阵A，一定存在正交阵U，使得

$$U^{-1} AU = D \equiv \mathrm{diag} \ (\lambda_1, \ \lambda_2, \ \cdots, \ \lambda_n) \qquad (2.1)$$

这时λ_i即为A的特征值，U的第i列即为λ_i相应的特征向量。

Jacobi方法的步骤是，用一系列的简单正交矩阵U_k，逐步地将A化成对角线矩阵。也就是说，选择U_k，令

$$\begin{cases} A_1 = A, \\ A_{k+1} = U_k^{-1} A_k U_k, \qquad k = 1, 2, \cdots \end{cases} \tag{2.2}$$

使得 $\lim\limits_{k\to\infty} A_k = D \equiv \mathrm{diag}\ (\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$。

首先，从最简单的二阶矩阵

$$B = \begin{pmatrix} c_1 & r \\ r & c_2 \end{pmatrix}$$

讨论怎样通过旋转矩阵的变换化成对角线矩阵。为此，选取矩阵

$$V = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

使得$V^{-1}BV = D$。

这里的θ是待定角度。

容易验证$VV' = V'V = I$，故V是正交阵。通过矩阵运算得

$$V^{-1}BV = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}$$

其中
$$\begin{cases} A_{11} = c_1\cos^2\theta + c_2\sin^2\theta + 2r\sin\theta\cos\theta, \\ A_{12} = A_{21} = r(\cos^2\theta - \sin^2\theta) + (c_2 - c_1)\sin\theta\cos\theta, \\ A_{22} = c_1\sin^2\theta + c_2\cos^2\theta - 2r\sin\theta\cos\theta. \end{cases} \tag{2.3}$$

要使非对角线上元素为零，只须$r(\cos^2\theta - \sin^2\theta) + (c_2 - c_1) * \sin\theta\cos\theta = 0$，即 $-\dfrac{2r}{c_1 - c_2} = \mathrm{tg}2\theta$。因此，取$\theta = \dfrac{1}{2}\mathrm{arctg}\dfrac{2r}{c_1 - c_2}$

时，非对角线上元素为零。

然后，我们考虑一般情形。设矩阵A的对角线以外元素中以a_{ij}的绝对值为最大，当然可设$a_{ij}\neq 0$，否则A就已经对角化了。为明确起见，无妨设$j>i$，作旋转变换

$$U_1=\begin{array}{c} \begin{matrix} & & & i & & & j & \end{matrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & \cos\theta & & -\sin\theta & & i \\ & & & & 1 & & & \\ & & & & & \ddots & & \\ & & & & & & 1 & \\ & & & \sin\theta & & \cos\theta & & j \\ & & & & & & & 1 \\ & & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \end{array}$$

容易验证$U_1U_1'=U_1'U_1=I$，所以U_1为正交阵。变换后的矩阵$A_1=U_1'AU_1=(c_{ij})$和变换前的矩阵A的唯一区别是在第i行，第j行，第i列，第j列上的元素起了变化，而其它元素不变。直接计算可得A的元素a_{ij}与A_1的元素c_{ij}之间有如下关系：

$$\begin{cases} c_{ii}=a_{ii}\cos^2\theta+a_{jj}\sin^2\theta+2a_{ij}\sin\theta\cos\theta, \\ c_{jj}=a_{ii}\sin^2\theta+a_{jj}\cos^2\theta-2a_{ij}\sin\theta\cos\theta, \\ c_{ij}=c_{ji}=(a_{jj}-a_{ii})\sin\theta\cos\theta+a_{ij}(\cos^2\theta-\sin^2\theta), \\ c_{ik}=a_{ik}\cos\theta+a_{jk}\sin\theta, \\ c_{jk}=-a_{ik}\sin\theta+a_{jk}\cos\theta, \end{cases} \left.\begin{matrix} \\ \\ \\ \\ \end{matrix}\right\} k\neq i,j$$

$$c_{lk}=a_{lk}\ , \qquad l,\ k\neq i,\ i \qquad (2.4)$$

和先前一样，取

$$\theta = \frac{1}{2}\mathrm{arctg}\left(\frac{2a_{ij}}{a_{ii}-a_{jj}}\right) \qquad (2.5)$$

于是有 $c_{ij} = c_{ji} = 0$

再看组成新的U矩阵的元素的变化关系：

设

$$(u_{ij}) \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & \cos\theta & & -\sin\theta & \\ & & & & 1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & \sin\theta & & \cos\theta & \\ & & & & & & 1 \\ & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & 1 \end{pmatrix} = (u^*_{ij})$$

于是得

$$\begin{cases} u^*_{ki} = u_{ki}\cos\theta + u_{kj}\sin\theta, \\ u^*_{kj} = -u_{ki}\sin\theta + u_{kj}\cos\theta, \\ u^*_{kl} = u_{kl}, \qquad l \neq i,\ j \end{cases} \qquad (2.6)$$

同样，设矩阵A_1的非对角线元素中以$a_{ij}^{(1)}$的绝对值为最大，作旋转变换U_2：$A_2 = U_2' A_1 U_2$，可求得A_2和A_1中元素之间的变换关系（与A_1和A的变换关系类同）。继续这个过程，最后达到将矩阵A对角化。

为减小舍入误差，编制程序中，通常将系数整理成如下形式。

由于在实际计算中，要求$|\theta| \leqq \frac{\pi}{4}$，所以$\cos 2\theta \geqq 0$。

令 $d = [(a_{jj}-a_{ii})^2 + 4a_{ij}^2]^{\frac{1}{2}}$，则有

$$
\begin{cases}
\cos 2\theta = \dfrac{1}{\sqrt{1+\mathrm{tg}^2 2\theta}} = \dfrac{|a_{ii}-a_{jj}|}{d}, \\
\sin 2\theta = \mathrm{tg}2\theta * \cos 2\theta = \dfrac{2a_{ij}\,\mathrm{sign}(a_{ii}-a_{jj})}{d}, \\
c \equiv \cos\theta = \sqrt{\dfrac{1+\cos 2\theta}{2}} = \sqrt{\dfrac{1}{2}\left(1+\dfrac{|a_{ii}-a_{jj}|}{d}\right)}, \\
s \equiv \sin\theta = \dfrac{\sin 2\theta}{2\cos\theta} = \mathrm{sing}[a_{ij} * (a_{ii}-a_{jj})] * \\
\qquad \sqrt{\dfrac{1}{2}\left(1-\dfrac{|a_{ii}-a_{jj}|}{d}\right)},
\end{cases}
\tag{2.7}
$$

利用 (2.7)式,则 (2.4) 式可化为:

$$
\begin{cases}
c_{ii} = \dfrac{a_{ii}+a_{jj}}{2} + \dfrac{d}{2} * \mathrm{sign}(a_{ii}-a_{jj}), \\
c_{jj} = \dfrac{a_{ii}+a_{jj}}{2} - \dfrac{d}{2} * \mathrm{sign}(a_{ii}-a_{jj}), \\
c_{ij} = c_{ji} = 0, \\
\left.\begin{aligned} c_{ik} &= a_{ik} * c + a_{jk} * s \\ c_{jk} &= -a_{ik} * s + a_{jk} * c \end{aligned}\right\} \qquad k \neq i,\ j
\end{cases}
\tag{2.4'}
$$

二 Jacobi方法的收敛性

定义：矩阵A的欧几里德范数(Euclidean Norm)亦称长度，是指$N^2(A) = \sum_{ij} A_{ij}^2$。

例如

$$
A = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}
$$

则$N^2(A) = 2^2 + 2^2 + 2^2 + 2^2 = 16$

引理（范数不变性）：若U是一正交矩阵，则有

$$N^2(UA)=N^2(AU)=N^2(A)$$

证明：由

$$\begin{aligned}N^2(AU)&=\sum_{i,m}(\sum_j A_{ij}U_{jm})^2=\sum_{i,m}[(\sum_j A_{ij}U_{jm})(\sum_l A_{il}U_{lm})]\\&=\sum_{i,m,j,l}A_{ij}A_{il}U_{jm}U_{lm}=\sum_{i,m,j,l}A_{ij}A_{il}U_{jm}(U^{-1})_{ml}\\&=\sum_{i,j,l}A_{ij}A_{il}\sum_m[U_{jm}(U^{-1})_{ml}]=\sum_{i,j,l}A_{ij}A_{il}\delta_{jl}\\&=\sum_{i,j}A_{ij}^2=N^2(A)\end{aligned}$$

同理，可知$N^2(UA)=N^2(A)$，引理证毕。

引入记号：用N^d表示主对角线上元素的平方和。N^0表示主对角线以外元素的平方和。

在主对角线上，矩阵A_1与A只有元素c_{ii}，c与j元素a_{ii}，a与i不同。由（2.4′）式直接计算可得：

$$c_{ii}^2+c_{ij}^2=2\left(\frac{a_{ii}+a_{jj}}{2}\right)^2+2\left(\frac{d}{2}\right)^2=a_{ii}^2+a_{jj}^2+2a_{ij}^2 \qquad (2.8)$$

由此可见，作变换U_1后，矩阵A_1的主对角线上元素平方和N_1^d比A的增加了$2a_{ij}^2$。由引理知，主对角线以外的元素平方和N_1^0比A的减少了$2a_{ij}^2$。如果再对A_1作类似的变换U_2，则$A_2=U_2'A_1U_2$，A_2的主对角线上元素的平方和为$N_2^d=N_1^d+2(a_{ij}^{(1)})^2$，其中$a_{ij}^{(1)}$是矩阵$A_1$中主对角线以外绝对值最大的元素。而$A_2$的主对角线以外元素的平方和为$N_2^0=N_1^0-2(a_{ij}^{(1)})^2$。一般情形有：

$N_k^d=N_{k-1}^d+2(a_{ij}^{(k-1)})^2$和$N_k^0=N_{k-1}^0-2(a_{ij}^{(k-1)})^2$，$k=1,2,\cdots$

定理：设$A_k=U_k'A_{k-1}U_k$，$k=1$，2，$\cdots$，$A_0=A$，而U_k把A_{k-1}的主对角线以外的一个绝对值最大的元素$a_{ij}^{(k-1)}$变为

零。则$\lim_{k\to\infty} A_k = D \equiv \mathrm{diag}\ (\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$。

证明：先将A_k的元素记作$a_{rs}^{(k)}$，A_k的主对角线以外绝对值最大的元素记为$a_{ij}^{(k)}$。

由$N_{k-1}^0 = 2\sum_{\substack{r,s=1\\ r<s}}^{n} (a_{rs}^{(k-1)})^2 \leqq n(n-1)(a_{ij}^{(k-1)})^2$，所以有

$(a_{ij}^{(k-1)})^2 \geqq \dfrac{N_{k-1}^0}{n(n-1)}$。像上面分析一样，可证得：

$N_k^0 = N_{k-1}^0 - 2(a_{ij}^{(k-1)})^2$，于是得$N_k^0 \leqq N_{k-1}^0 - \dfrac{2}{n(n-1)} N_{k-1}^0 =$

$\left[1 - \dfrac{2}{n(n-1)}\right] N_{k-1}^0$。 反复利用这个公式，推得：

$$N_k^0 \leqq \left[1 - \frac{2}{n(n-1)}\right]^k N_0^0,$$

其中N_0^0是矩阵A的主对角线以外元素的平方和，所以有$\lim_{k\to\infty} N_k^0 = 0$，即$\lim_{k\to\infty} A_k = D \equiv \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$，证毕。

三 例：求实对称阵

$$A = (a_{ij}) = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{14} \\ \sqrt{14} & 6 \end{pmatrix}$$

的特征值和相应的特征向量

解：（一）用代数上求齐次方程组的基础解系的办法。由

$$|\lambda I - A| = \begin{vmatrix} \lambda - 1 & -\sqrt{14} \\ -\sqrt{14} & \lambda - 6 \end{vmatrix} = \lambda^2 - 7\lambda - 8 = (\lambda + 1)(\lambda - 8) = 0,$$

解得$\lambda_1 = -1$，$\lambda_2 = 8$。$\lambda_1 = -1$时相应的齐次方程是：

$-2x_1 - \sqrt{14}x_2 = 0$，$\therefore x_1 = -\sqrt{14}x_2/2$，其基础解系是

$\begin{pmatrix} \sqrt{7} \\ -\sqrt{2} \end{pmatrix}$；$\lambda_2 = 8$时相应的齐次方程是：$7x_1 - \sqrt{14}x_2 = 0$，

$\therefore x_1 = \frac{\sqrt{14}x_2}{7}$，其基础解系是$\begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{7} \end{pmatrix}$。因此，属于特征值$\lambda_1 = -1$，$\lambda_2 = 8$的特征向量分别是$k_1\begin{pmatrix} \sqrt{7} \\ -\sqrt{2} \end{pmatrix}$和$k_2\begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{7} \end{pmatrix}$。这里的$k_1$和$k_2$为不等于零的任意常数。

（二）用Jacobi旋转法。由$d = [(1-6)^2 + 4\times 14]^{\frac{1}{2}} = 9$，$\cos 2\theta = |1-6|/9 = 5/9$，$\cos\theta = \sqrt{\frac{1}{2}(1+\cos 2\theta)} = \frac{\sqrt{7}}{3}$，

$\sin\theta = -\sqrt{\frac{1}{2}\left(1-\frac{5}{9}\right)} = -\frac{\sqrt{2}}{3}$，所以$U = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{7}/3 & \sqrt{2}/3 \\ -\sqrt{2}/3 & \sqrt{7}/3 \end{pmatrix}$ 又$c_{11} = (1+6)/2 - 9/2 = -1$，$c_{11} = (1+6)/2 + 9/2 = 8$，$c_{11} = c_{11} = 0$。因此，矩阵$A$的特征值为$-1$和$8$，相应的特征向量分别是$k_1\begin{pmatrix} \sqrt{7}/3 \\ -\sqrt{2}/3 \end{pmatrix}$和$k_2\begin{pmatrix} \sqrt{2}/3 \\ \sqrt{7}/3 \end{pmatrix}$。其中$k_1$，$k_2$是不等于零的任意常数。

可见，两种方法的结果完全一致。

实际计算时，通常是给定误差$\in$，看每个非对角线上的元素绝对值是否小于$\in$？若小于$\in$，就认为非对角线上的元素可当作零处理；也常常用当k充分大时，总和N_k^0小于容许误差限，即能保证非对角线上元素都可忽略不计，从而对角线上元素便可取为特征值的近似值。至于特征向量，则可取这些平面旋转矩阵U_i之积的列作为近似，即$U_1U_2\cdots U_s = U$的各列向量就正好是属于A的各特征值的特征向量。事实上，由

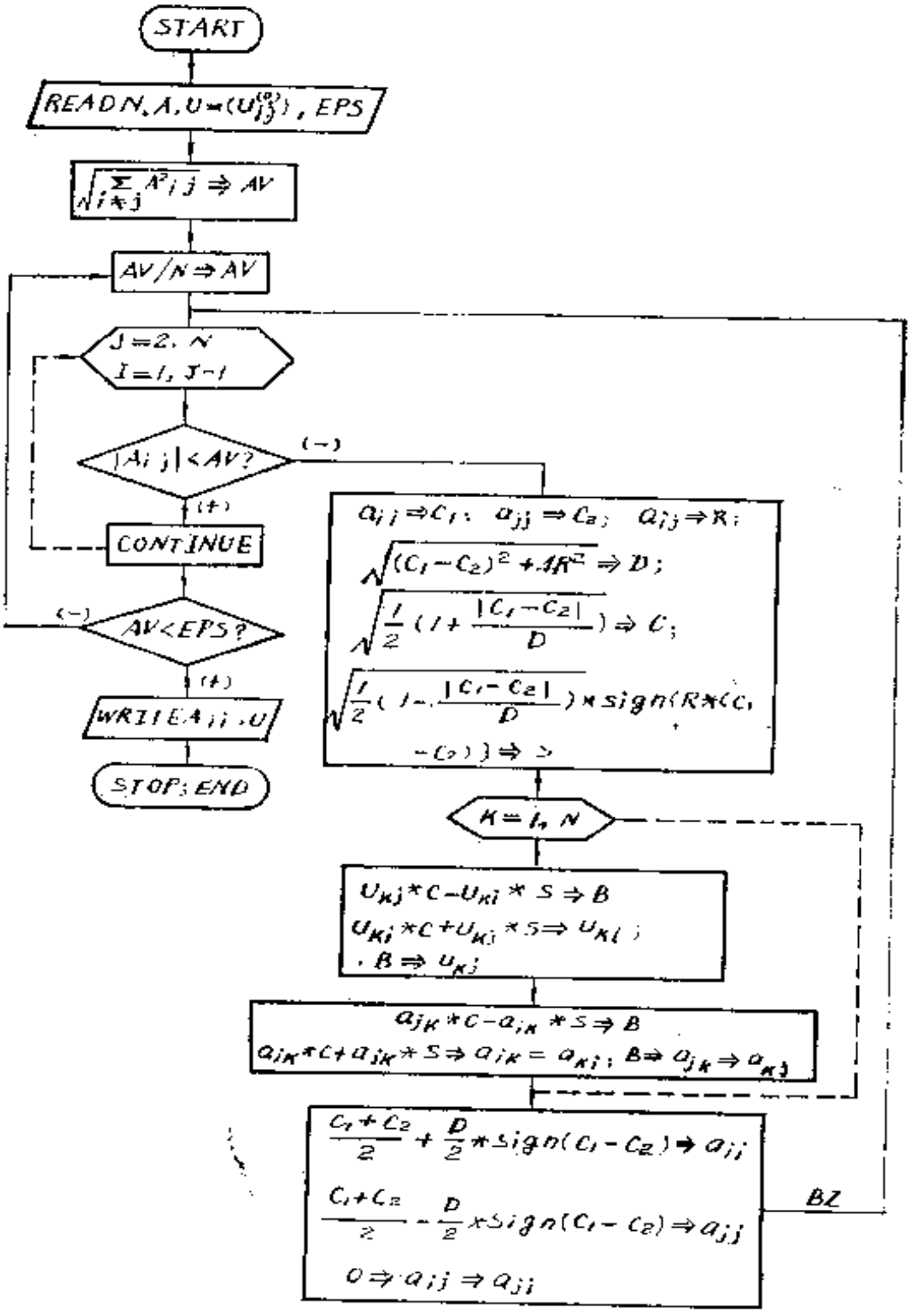
$U'AU = D$或$AU = UD$。因此，如果把U的第l列记为$x^{(l)}$，D的主对角线上第l个元素记为λ_l，则有$AX^{(l)} = \lambda_l X^{(l)}$。

求矩阵特征值问题，还有幂法与反幂法，豪斯浩德尔方法，LR和QR方法等。这里就不作介绍了

下面给出计算实对称阵$A_{N\times N}$的特征值问题的框图和程序。记号$c = \cos\theta$，$s = \sin\theta$，EPS为给定误差，U为变换矩阵，其中 $u_{ij}^{(0)} = \begin{cases} 1 & \text{当} i = j, \\ 0 & \text{当} i \neq j. \end{cases}$

程序

```
      SUBROUTINE JACOBI(N, A, U, EPS)
      DIMENSION A(N, N) , U(N, N)
      DO 20 I = 1, N
      DO 20 J = 1, N
      U(I, J) = 0.0
      IF(I . EQ . J)U(I, J) = 1.0
20    CONTINUE
      AV = 0.0
      DO 30 J = 2, N
      N1 = J - 1
      DO 30 I = 1, N1
30    AV = AV + A(I, J) * A(I, J)
      AV = SQRT(2 . 0 * AV)
 5    AV = AV/FLOAT(N)
10    DO 40 J = 2, N
      N1 = J - 1
      DO 40 I = 1, N1
```


START
READ N, A, U=(U_ij^(0)), EPS
√(Σ_{i≠j} A²_ij) ⇒ AV
AV/N ⇒ AV
J=2, N
I=1, J-1
|Ai j|<AV?
(-)
(+)
CONTINUE
(-)
AV<EPS?
(+)
WRITE A, U
STOP; END
a_ij ⇒ C1; a_jj ⇒ C2; a_ij ⇒ R;
√((C1-C2)²+4R²) ⇒ D;
√(1/2 (1+ |C1-C2| / D)) ⇒ C;
√(1/2 (1- |C1-C2| / D)) * sign(R*(C1 -C2)) ⇒ S
K=1, N
U_kj*C-U_ki*S ⇒ B
U_ki*C+U_kj*S ⇒ U_ki ; B ⇒ U_kj
a_jK*C-a_iK*S ⇒ B
a_iK*C+a_jK*S ⇒ a_iK = a_Ki ; B ⇒ a_jK ⇒ a_Kj
(C1+C2)/2 + D/2 * sign(C1-C2) ⇒ a_ii
(C1+C2)/2 - D/2 * sign(C1-C2) ⇒ a_jj
0 ⇒ a_ij ⇒ a_ji
BZ

```
      IF(ABS(A(I, J)).GT.AV) GOTO 15
40    CONTINUE
      IF(AV.LT.EPS) GOTO 25
      GOTO 5
15    C1 = A(I, I)
      C2 = A(J, J)
      R = A(I, J)
      T = C1 - C2
      D = SQRT(T*T + 4.0*R*R)
      GT1 = ABS(T)/D
      C = SQRT((1.0 + GT1) *0.5)
      S = SQRT((1.0 - GT1)*0.5)*SIGN(1, R*T)
      DO 50 K = 1, N
      B = U(K, J)*C - U(K, I)*S
      U(K, I) = U(K, I)*C + U(K, J)*S
      U(K, J) = B
      B = A(J, K)*C - A(I, K)*S
      A(I, K) = A(J, K)*C + A(J, K)*S
      A(K, I) = A(I, K)
      A(J, K) = B
50    A(K, J) = B
      GT2 = D*0.5*SIGN(1, T)
      GT3 = (C1 + C2)*0.5
      A(I, I) = GT3 + GT2
      A(J, J) = GT3 - GT2
      A(I, J) = 0.0
```

```
      A(J, I) = 0.0
      GOTO 10
25    RETURN
      END
```

程序功能

本程序应用雅可比（Jacobi）方法，求 N×N 实对称矩阵*A*的全部特征值和全部特征向量。

使用说明

1.子程序语句

```
SUBROUTINE JACOBI(N, A, U, EPS)
```

2.哑元说明

N：输入参数，整变量，实对称矩阵*A*的阶。

A：输入参数，N×N 个元素的二维实数组。工作开始存放矩阵 *A* 的元素；工作结束时对角线上存放求得的特征值，但不按大小顺序排列。

U：输出参数，N×N 个元素的二维实数组。工作开始存放单位矩阵；工作结束时按列并按矩阵 *A*对角线上求得特征值的顺序，存放特征向量。

EPS：输入参数，实变量，计算中给定的误差。

例如

1.求矩阵

$$A=\begin{pmatrix} 10 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 9 & -1 & 2 & -3 \\ 2 & -1 & 7 & 3 & -5 \\ 3 & 2 & 3 & 12 & -1 \\ 4 & -3 & -5 & -1 & 15 \end{pmatrix}$$

的特征值和特征向量。

取EPS = 10^{-11}，计算结果

$$\begin{cases} \lambda_1 = 0.6994837830 \times 10^1, \\ \lambda_2 = 0.9365554918 \times 10^1, \\ \lambda_3 = 0.1655266206 \times 10^1, \\ \lambda_4 = 0.1580892074 \times 10^2, \\ \lambda_5 = 0.1917542026 \times 10^2. \end{cases}$$

2.求矩阵

$$A = \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{14} \\ \sqrt{14} & 6 \end{pmatrix}$$

的特征值和特征向量。

取EPS = 10^{-11}，所得计算结果与精确值比较见下表：

特征值λ_1 / 结果	λ_1	λ_2
计算值	−1.000000	8.000000
精确值	−1.000000	8.000000

U_1		U_2	
计算值	精确值	计算值	精确值
0.881917	0.881917	0.471405	0.471405
−0.471405	−0.471405	0.881917	0.881917

U	U_1	U_2	U_3	U_4
0.65408298×10^{0}	-0.52151117×10^{-1}	-0.38729687×10^{0}	0.62370249×10^{1}	0.17450510×10^{1}
0.19968126×10^{0}	0.85996386×10^{0}	0.36622102×10^{1}	0.15910112×10^{1}	-0.24730251×10^{1}
0.25651045×10^{1}	-0.50557507×10^{0}	0.70437726×10^{1}	0.22729749×10^{1}	-0.36164173×10^{1}
-0.66040272×10^{1}	-0.20116663×10^{-3}	-0.11892622×10^{1}	0.69268438×10^{0}	-0.26441085×10^{1}
-0.17427986×10^{1}	0.46219199×10^{-1}	0.45342310×10^{1}	0.23282228×10^{1}	0.84124406×10^{0}

第七章　实验数据处理

本章叙述常用的实验数据处理方法：线性插值，一元函数插值，二元函数插值，三次样条函数插值、微商或积分以及用最小二乘法求数据的曲线拟合。

§1. 插值法

在生产和科学实验中，函数是表达现实空间物质运动规律的数量关系的。实际问题中遇到的函数 $y=f(x)$，虽然从原则上说，它在某个区间〔a，b〕上是存在的，但通常是通过实验观测得到的，所以只知道〔a，b〕区间中一系列离散点上的函数值 $y_i=f(x_i)$，对于 x 的其它值，$y=f(x)$ 的变化情况是不知道的。这对于研究物质变化规律很不方便，更不能用它计算未给出点的函数值。若函数能用一个公式表示，那怕是近似的，也便于我们研究和分析函数的性质，计算函数值。由于代数多项式最简单又便于计算，因此，人们在实践中早就用代数多项式来近似表达复杂的函数以及由离散点给出的函数，这就是插值法的课题。例如，在天文中，观测行星的运动，只能得到某时刻 t_i 所对应的行星位置 S_i（用经度和纬度表示），要想知道任何时刻 t 的行星位置 S，必须采用插值法。再如程序控制铣床加工精密工件时，常常是给出工件外形若干点的坐标，要求加工后的外形是光滑曲线。加

工时走刀方向是直线。要得到光滑曲线，必须计算出外形曲线足够密的点的坐标，用它来控制走刀的方向，以便加工出达到精度要求的工件，这也是插值问题。

插值法在天文学、物理学、力学等领域应用日益增多。特别是近二十年来，由于电子计算机的普遍使用，插值法的应用范围随之扩大，在航空、造船、精密机械加工等部门需要的推动下，近十年来发展起来的“样条”（Spline）插值，在实践中得到广泛应用。

一 一元函数的插值

我们在实验上得到了一元函数在 x_0，x_1，…，x_n 点上的函数值 y_0，y_1，…，y_n。现在需要求某一插值点 x 的函数值 y 是多少？

（一）线性插值

解决上述问题最简单的方法是判断 x 处在 x_i 的什么范围内，然后用线性插值。例如，假设 $x_i \leqslant x \leqslant x_{i+1}$，则线性插值公式是

$$y = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}(x - x) \qquad (1.1)$$

当 $|x_{i+1} - x_i|$ 很小时，线性插值是经常使用的。例如，程序控制铣床加工曲线时，就把曲线分成很多小段，在每一小段上走刀方向是直线，即用弦代替曲线，实际就是线性插值。线性插值程序如下：

```
FUNCTION ALI(N, X, Y, XP)
DIMENSION X(N) Y(N)
NE = N - 1
DO 1 I = 1, NE
```

```
      IF(X(I).LE.XP.AND.XP.LE.X(I+1)) GOTO 2
    1 CONTINUE
    2 ALI = Y(I) + (Y(I+1) - Y(I)) * (XP - X(I))/
      (X(I+1) - X(I))
      RETURN
      END
```

程序功能

对于给定自变量x_i上相应的函数值y_i，$i=1, 2, \cdots, n$。且设x_i是从小到大的次序排列，程序按线性插值公式求出插值点$x_p \in [x_1, x_n]$的函数值y_p：

$$y_p = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i}(x_p - x_i) \quad , \quad x_i \leqslant x_p \leqslant x_{i+1}。$$

使用说明

1.函数语句

```
FUNCTION ALI(N, X, Y, XP)
```

2.哑元说明

N，整变量，输入参数，表示节点个数。

X，Y：N个元素一维实数组，输入参数，分别表示节点值和相应的函数值，要求$x_i < x_{i+1}$，$i=1, 2, \cdots, n-1$。

XP：实变量，输入参数，表示插值点

例题

根据函数表

i	1	2	3	4	5	6
x_i	0.0	0.1	0.195	0.3	0.401	0.5
$y_i = f(x_i)$	0.39894	0.39695	0.39142	0.38138	0.36812	0.35206

利用线性插值程序，计算结果为：$f(0.15)=0.39404$，$f(0.3)=0.38138$，$f(0.45)=0.36017$.

由于线性插值只利用两对值 (x_i, y_i) 和 (x_{i+1}, y_{i+1}) 求得 $y=f(x)$ 的近似值，通常误差较大，所以，常常采用拉格朗日插值多项式。

（二）拉格朗日插值多项式

问题提法是，寻求一个多项式$L_n(x)$，使得在$n+1$个互不相同的点 x_0，x_1，…，x_n上依次取值为y_0，y_1，…，y_n。

我们先从一个比较简单的问题解起，寻求一个多项式 $l_0(x)$，使之满足

$$l_0(x)=\begin{cases}1 & \text{当}x=x_0,\\ 0 & \text{其它点处},\end{cases}$$

由后面的条件，一眼看出$l_0(x)$含有因子

$$(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n),$$

再由$l_0(x_0)=1$的条件，就知此n次多项式是

$$l_0(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\cdots(x_0-x_n)} \tag{1.2}$$

同样，知多项式

$$l_1(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_2)\cdots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\cdots(x_1-x_n)} \tag{1.3}$$

是满足条件

$$l_1(x)=\begin{cases}1 & \text{当}x=x_1,\\ 0 & \text{其它点处},\end{cases}$$

的n次多项式。

由 (1.2) 和 (1.3) 式，容易作出满足条件

$$\Phi(x)=\begin{cases} y_0 & \text{当} x=x_0, \\ y_1 & \text{当} x=x_1, \\ 0 & \text{其它点处,} \end{cases}$$

的多项式是

$$\Phi(x)=y_0 l_0(x)+y_1 l_1(x)$$

这样，如果用$l_k(x)$表示满足条件

$$l_k(x)=\begin{cases} 1 & \text{当} x=x_k, \\ 0 & \text{其它点处,} \end{cases}$$

的n次多项式。则

$$l_k(x)=\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)} \tag{1.4}$$

于是，就得到了所求的插值多项式

$$\begin{aligned} L_n(x)&=\sum_{k=0}^{n} y_k l_k(x) \\ &=\sum_{k=0}^{n} y_k \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)} \end{aligned} \tag{1.5}$$

公式（1.5）称为拉格朗日插值多项式。

为便于记忆，把$L_n(x)$改写成更为常用的形式。为此，引入记号

$$\omega(x)=\prod_{k=0}^{n}(x-x_k)=(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\ ,$$

先取对数再微分，得

$$\ln\omega(x)=\sum_{k=0}^{n}\ln(x-x_k)\ .$$

于是

$$\frac{\omega'(x)}{\omega(x)} = \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{x - x_k}$$

$$\omega'(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{x - x_k} \cdot \omega(x)$$

$$= \sum_{k=0}^{n} (x - x_0) \cdots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n) ,$$

$$\omega'(x_k) = (x_k - x_0)(x_k - x_1) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n).$$

利用这些结果，可把 (1.5) 式写成

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} \qquad (1.5')$$

还要说明的是公式 (1.5) 对插值点 x_0, x_1, …, x_n 说来是对称的，即它与插值点编号次序无关；所求的插值多项式的次数最多是 n，并且通过 $n+1$ 个不同点 x_0, x_1, …x_n 取值相同的插值多项式只有一个。下面给出用 (1.5) 式进行插值的程序：

```
      SUBROUTINE LAG(N, X, Y, U, V)
      DIMENSION X(N) , Y(N)
      V = 0.0
      DO 2 J = 1, N
      S = 1.0
      DO 1 I = 1, N
      IF(I.NE.J) S = S * (U - X(I))/(X(J) - X(I))
    1 CONTINUE
    2 V = V + S * Y(J)
```

RETURN

END

程序功能

对于给定一元函数 $y=f(x)$的n个节点值x_i及其对应的函数值 $y_i(i=1, 2, \cdots, n)$，程序按一元n点插值公式求出插值点u的函数值v：

$$v=\sum_{i=1}^{n}\prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n}\left(\frac{u-x_j}{x_i-x_j}\right)y$$

使用说明

1.子程序语句

SUBROUTINE LAG(N, X, Y, U,V)

2.哑元说明

N：输入参数，整变量，表示节点个数。

X，Y：N个元素一维实数组，输入参数，分别表示节点值和相应函数值。

U：输入参数，实变量，表示插值点。

V：输出参数，实变量，表示插值结果。

例题

根据函数表

i	1	2	3	4
x_i	0.1	0.2	0.3	0.4
$y_i=f(x_i)$	0.9950	0.9801	0.9553	0.9211

计算结果

$$f(0.25)=0.9689.$$

（三）三点抛物线插值

用拉格朗日一元n点插值，当n大时，运算量大，又往往不太理想。最常用的是三点情形，通常称为抛物线插值。假设给定n个插值点$x_1<x_2<\cdots<x_n$及其相应的函数值y_1，y_2，$\cdots y_n$。首先判断x值所处的位置：若$x\leqq x_2$时，则取x_1，x_2，x_3三点作抛物线来确定y；若$x\geqq x_{n-1}$时，则取x_{n-2}，x_{n-1}，x_n三点作抛物线来确定y；若$x_s<x\leqq x_{s+1}$时（$s=2$，3，$\cdots$，$n-2$），则需要进一步判断x是靠近那一个值。当靠近x_s时，取x_{s-1}，x_s，x_{s+1}三点，反之则取x_s，x_{s+1}，x_{s+2}三点。用数学式子表示即取

$$i=\begin{cases}1 & \text{当}x\leqq x_2,\\ n-2 & \text{当}x\geqq x_{n-1},\\ s-1 & \text{当}x_s<x\leqq x_{s+1}\quad\text{且}x<\dfrac{x_s+x_{s+1}}{2},\ s=2,3,\cdots,n-2.\\ s & \text{当}x_s<x\leqq x_{s+1}\quad\text{且}x\geqq\dfrac{x_s+x_{s+1}}{2},\ s=2,3,\cdots,n-2.\end{cases}$$

然后，用(1.5)式的拉格朗日三点插值公式，即过x_i，x_{i+1}，x_{i+2}三点的抛物线插值公式：

$$y(x)=\frac{(x-x_{i+1})(x-x_{i+2})}{(x_i-x_{i+1})(x_i-x_{i+2})}y+\frac{(x-x_i)(x-x_{i+2})}{(x_{i+1}-x_i)(x_{i+1}-x_{i+2})}y_{i+1}+\frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i+2}-x_i)(x_{i+2}-x_{i+1})}y_{i+2}$$

$$= \sum_{k=i}^{i+2} \prod_{\substack{j=i \\ j\neq k}}^{i+2} \left(\frac{x - x_j}{x_k - x_j} \right) y_k . \qquad (1.6)$$

于是，一元三点插值程序自然就是：

```
      SUBROUTINE LAG1 (X0, Y0, N, X, Y)
      DIMENSION X0 (N) , Y0(N)
      N3 = N - 3
      DO 10 I = 1, N3
      IF(X.LE.X0(I + 1))GOTO 20
   10 CONTINUE
      I = N - 2
   20 IF(I.NE.1.AND.X.LT.0.5 * (X0(I) +
      X0(I + 1)))I = I - 1
      M = I + 2
      Y = 0.0
      DO 60 J = I, M
      P = 1.0
      DO 50 K = I, M
      IF(J - K) 40, 50, 40
   40 P = P * (X - X0(K))/(X0(J) - X0(K))
   50 CONTINUE
   60 Y = Y + P * Y0(J)
      RETURN
      END
```

程序功能

本过程从给定的 n 个插值结点中选取最靠近插值点 x 的

相邻三个插值结点，用拉格朗日三点插值公式对x进行插值。

使用说明

1.子程序语句

SUBROUTINE LAG1 (X_0, Y_0, N, X, Y)

2.哑元说明

X_0：N个元素的一维实数组，输入参数，存放给定的插值结点，要求$x_0(i)<x_0(i+1)$，$i=1, 2, \cdots, n-1$。

Y_0：N个元素的一维实数组，输入参数，存放结点处的函数值。

N：输入参数，整变量，给定的插值结点个数，$N\geq 3$。

X：输入参数，实变量，插值点。

Y：输出参数，实变量，存放插值结果。

例题

根据前面线性函数插值表，计算结果如下：

$f(0.15)=0.39446$，$f(0.3)=0.38138$，

$f(0.45)=0.36055$。

二　二元函数的插值

在实际问题中，有不少是二元函数。例如是变量t和x的函数，或者是平面上点x和y的函数。如果我们知道了(x_i, y_j)点的函数值$f_{ij}=f(x_i, y_j)$，要求出某一点(x, y)处的函数值$f(x, y)$，这可利用与(x, y)相邻近的九点(x_i, y_j)的f_{ij}值来计算$(i=1, 2, \cdots, n;\ j=1, 2, \cdots m)$，这便是二元三点拉格朗日插值问题。同样，首先必须判断x在x_i序列中的位置和y在y_j序列中的位置，然后与一元情形完全类似。我们直接写出二元三点拉格朗日插值公式：

$$f(x,\ y)=\sum_{r=i}^{i+2}\sum_{s=j}^{j+2}\left(\prod_{\substack{k=i\\k\neq r}}^{i+2}\frac{x-x_k}{x_r-x_k}\right)\left(\prod_{\substack{l=j\\l\neq s}}^{j+2}\frac{y-y_l}{y_s-y_l}\right)f_{rs}\qquad(1.7)$$

这里的i和j的选取方法和一元三点插值时的选取方法完全相同。

二元三点插值程序如下：

```
      SUBROUTINE LAG2 (N,M,U,V,X,Y,Z,W)
      DIMENSION X(N),Y(M),Z(N,M),A(3),B(3)
      N3 = N - 3
      DO 2 I = 1, N3
      IF(U - X(I + 1)) 1, 1, 2
    2 CONTINUE
      I = N - 2
    1 M3 = M - 3
      DO 4 J = 1, M3
      IF(V - Y(J + 1))3, 3, 4
    4 CONTINUE
      J = M - 2
    3 IF(I.NE.1.AND.U.LT.0.5*(X(I) + X(I + 1)))
     ↑I = I - 1
      IF(J.NE.1.AND.V.LT.0.5*  (Y(J) + Y(J + 1)))
     ↑J = J - 1
      X0 = X(I)
      X1 = X(I + 1)
      X2 = X(I + 2)
      Y0 = Y(J)
      Y1 = Y(J + 1)
```

```
      Y2 = Y(J+2)
      A(1) = (U-X1)*(U-X2)/((X0-X1)
     *(X0-X2))
      A(2) = (U-X0)*(U-X2)/((X1-X0)
     *(X1-X2))
      A(3) = (U-X0)*(U-X1)/((X2-X0)
     *(X2-X1))
      B(1) = (V-Y1)*(V-Y2)/((Y0-Y1)
     *(Y0-Y2))
      B(2) = (V-Y0)*(V-Y2)/((Y1-Y0)
     *(Y1-Y2))
      B(3) = (V-Y0)*(V-Y1)/((Y2-Y0)
     *(Y2-Y1))
      W = 0.0
      DO 5 II = 1, 3
      DO 5 JJ = 1, 3
    5 W = W + A(II)*B(JJ)*Z(I+II-1, J+JJ-1)
      BETURN
      END
```

程序功能

本过程从给定的 $n \times m$ 个插值结点中选取最靠近插值点 (u, v) 的相邻九个插值结点，用二元拉格朗日三点插值公式对二元列表函数进行插值。

使用说明

1.子程序语句

```
SUBROUTINE LAG2 (N,M,U,V,X,Y,Z,W)
```

2.哑元说明

N，M：输入参数，整变量，分别表示X方向和Y方向的节点个数。

U，V：输入参数，实变量，分别表示X，Y方向插值点的值。

X，Y：分别为N、M个元素的一维实数组，输入参数，分别表示X，Y方向的节点值。

Z：$N\times M$个元素的二维实数组，输入参数，表示节点上的函数值。

W：输出参数，实变量，存放插值结果。

例题

根据函数表

x_i \ y_i	25	35	45
10	0.43674	0.61193	0.78756
30	0.43973	0.62003	0.80437
50	0.44455	0.63364	0.83431
70	0.44904	0.64707	0.86653

求W(u，v) 在$u=40$，$v=30$处的值。

计算结果

$W(40, 30)=0.53358$

二元n点插值程序是

SUBROUTINE LAG$_3$(N,M,U,V, X, Y, Z, W)

```
      DIMENSION X(N), Y(M) , Z(N, M)
      W = 0.0
      DO 3 I=1, N
      AL=1.0
      DO 1 K=1, N
      IF(K.NE.I)AL = AL*(U-X(K))/(X(I)-X(K))
    1 CONTINUE
      DO 3 J=1, M
      BL = AL
      DO 2 L=1, M
      IF(L.NE.J) BL = BL*(V-Y(L))/(Y(J)-Y(L))
    2 CONTINUE
    3 W = W+BL*Z(I, J)
      RETURN
      END
```

程序使用说明与二元三点插值程序类同。并根据上面函数表，用二元n点插值程序，计算结果是 W(40, 30) = 0.53335.

§2. 样条函数、插值和数值求积

一 引言

随着电子计算机的普遍使用和发展，在航空、造船、精密机械加工等部门的推动下，近十年来，发展起来的样条函数插值和拟合是非常引人注目的方法之一。

“样条” (Spline) 的基本思想是简单的。无非是把多项式分段化，使得整个函数成为“装配式”的，同时保证接

缝处一定的连续性。它既保留了多项式在表达形式上的简便性又克服了它们的不灵活、不稳定的缺点。“样条函数”这个名称来源于三次样条函数有近似于机械样条的特性。机械样条是绘图员用画光滑曲线的一种工具，绘图员为了将一些给定点（称为样点）联结成一条光滑曲线，往往运用样条（木质或钢质的弹性条），用压铁把样条压住在样点上，必要时调整其位置，结果样条自动弯成一条通过样点的光顺曲线。我们对绘图员描出的样条曲线进行数学模拟，得出的函数叫样条函数，它在联接点处具有一阶及二阶导数且连续。

考虑在n个给定的数据点 (x_i, y_i) $(i=1, 2, \cdots, n)$ 之间用函数$g(x)$ 进行插值，要求 $g(x)$ 具有1至K阶连续导数 $(1 \leqq K \leqq n)$，并且在使 $\sigma = \int_a^b \left[g^{(K)}(x)\right]^2 dx$尽可能小的意义下是“最平滑”的，这里，$a = x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$。

当 $K > n$ 时，问题没有唯一解。这是因为此时有无穷多个 $K-1$ 次的多项式精确地拟合数据点，而且对它们当中的任何一个多项式均有 $\sigma = 0$。当 $K = n$时，Lagrange 插值多项式 $(K-1$次$)$ 是其唯一解。当 $K < n$ 时，也有唯一解，它便是在任意区间 $[x_i, x_{i+1}]$ 上用至多 $2K-1$ 次的多项式给出的分段函数。通常，在每个这样的区间上的多项式是不同的。此外，组成函数 g 图形的各个多项式在下述意义下是“平滑地连接”的，即每个x_i左右两边表达函数 g 的两个多项式，在$x = x_i$处有相同的纵座标和相同的1至$2K-2$阶导数值。函数g还有另一性质，即在区间$(-\infty, x_1)$和(x_n, ∞)上它退化为$K-1$（而不是$2K-1$）次多项式。

上述的函数 g 属于熟知的样条函数类。特别是对三次自

然样条函数 $s(x)$，$s'(x)$，$s''(x)$以及 $\int_a^b s(x)dx$ 都已提供了方便的表达式，而且通常给出了满意的结果。

二　公式推导

（一）记号

设 $f(x)$ 表示要用样条函数逼近的函数，它在某些自变量处的值是给定的；$S(x)$表示样条函数；而$s(x)$ 表示自然样条函数；$P_m(x)$和$Q_m(x)$ 表示m次多项式。

定义一、二阶和n阶均差如下：

$$\begin{cases} f(x, x_1) = \dfrac{f(x) - f(x_1)}{x - x_1}, \\ f(x, x_1, x_2) = \dfrac{f(x, x_1) - f(x_1, x_2)}{x - x_2}, \\ f(x, x_1, \cdots, x_n) = \dfrac{f(x, x_1, \cdots, x_{n-1}) - f(x_1, x_2, \cdots, x_n)}{x - x_n} \end{cases} \tag{2.1}$$

从均差定义，可用归纳法证明各阶均差与点的排列次序无关，这种性质称为对称性。

记号

$$Z_+^r = \begin{cases} Z^r & \text{当} Z \geqslant 0, \\ 0 & \text{当} Z < 0. \end{cases} \tag{2.2}$$

（二）m次样条函数的性质

具有节点(或结点)$x_1 < x_2 < \cdots < x_n$的m次样条函数$S(x)$，是用以下两条性质来刻划的：

(a) $S(x)$ 在区间 $[x_i, x_{i+1}]$ $(i = 0, 1, \cdots, n, x_0 = -\infty, x_{n+1} = \infty)$ 上用次数至多为m的某一个多项式给出。

(b) $S(x)$ 及其1至$m-1$阶导数在 $(-\infty, \infty)$ 上连续

（这个要求能保证在节点处作平滑连接）。

次数为奇数的$2K-1$次样条函数$S(x)$称为自然样条函数，如果它还满足条件：

(c) 在区间$(-\infty, x_1)$和(x_n, ∞)的每一个上，$S(x)$退化为$K-1$次多项式（一般，这两个区间上的多项式是不同的）。

用自然样条函数进行插值的好处，主要是基于它的“最优逼近”性质。

能够证明，任何m次样条函数$S(x)$有唯一的表达式：

$$S(x) = P_m(x) + \sum_{i=1}^{n} C_i (x - x_i)_+^m$$

在$2K-1$次的自然样条函数的情形，它取成：

$$s(x) = P_{K-1}(x) + \sum_{i=1}^{n} C_i (x - x_i)_+^{2K-1} \qquad (2.3)$$

对区间$(-\infty, x_1)$，上面的条件(c)立即满足。在区间(x_n, ∞)上，(2.3)式中的下标“+”可以略掉，此式成为x的$2K-1$次多项式。

样条插值和逼近，是以下面两个定理为基础的。

定理1。 对$K \leqq n$和给定的节点$x_1 < x_2 < \cdots < x_n$，存在唯一的$2K-1$次的自然样条函数$s(x)$，它具有节点x_i，并且对给定的（但任意的）y_i，满足方程

$$s(x_i) = y_i \qquad (i = 1, 2, \cdots, n) \qquad (2.4)$$

定理2。 设$f(x)$是在区间$[a, b]$上连续并具有$1, 2, \cdots, K \leqq n$阶连续导数的任一函数，并设方程

$$f(x_i) = y_i \qquad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

成立，其中$x_1<x_2<\cdots<x_n$。如果$s(x)$是在节点x_i满足(2.4)式的唯一自然样条函数，那么

$$\int_c^d [f^{(k)}(x)]^2 dx \geq \int_c^d [s^{(k)}(x)]^2 dx$$

等号只有在$f(x)=s(x)$时成立。

（三）公式的推导

一个$2K-1$次自然样条函数(2.3)式右端第二项，对区间(x_n, ∞)是x的$2K-1$次多项式。由条件(c)知，对x的K和K以上幂次的系数等于零，意味着

$$\sum_{i=1}^{n} c_i x_i^j = 0 \qquad (j=0, 1, \cdots, K-1),$$

于是有

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{n} c_i x_i^j = 0 \qquad (j=0, 1, \cdots, K-1) \quad \cdots\cdots K\text{个方程} \\ s(x) = P_{K-1}(x) + \sum_{i=1}^{n} c_i (x-x_i)_+^{2K-1} \cdots\cdots n\text{个方程} \end{cases}$$

$n+k$个方程，$n+k$个未知数，解应该是存在唯一的，但这个方程是病态的，因此求解之前，有必要做某些变换。在计算实践上，通常样条次数都≤ 3，而最有实际意义和广泛应用的是三次样条函数。三次样条函数已经是“足够”光滑了，因为肉眼很难察觉到二阶以上导数的间断性，并且三次样条可以作许多简化。所以，就研究三次自然样条函数。

在每个区间(x_i, x_{i+1})上，三次自然样条函数$s(x)$是由某个三次多项式给定。所以，在每个区间上，它的二阶导数$s''(x)$是线性的，又由条件(c)知$s''(x_1)=s''(x_n)=0$。我们的目标是通过$s(x_i)=y_i$，$s(x_{i+1})=y_{i+1}$，$s''(x_i)$和$s''(x_{i+1})$

这四个量，找出表示 $s(x)$，$s'(x)$，$s''(x)$以及$\int_a^b s(x)dx$的方便的表达式，而最后指出怎样计算$s''(x_i)$。

由一、二阶均差定义有 $s(x)=s(x_i)+(x-x_i)s(x, x_i)$和$s(x, x_i)=s(x_i, x_{i+1})+(x-x_{i+1})s(x, x_i, x_{i+1})$，所以$s(x)=s(x_i)+(x-x_i)s(x_i, x_{i+1})+(x-x_i)(x-x_{i+1})*s(x, x_i, x_{i+1})$ (2.5)

(2.5) 式右端的前两项表示在 y_i 和 y_{i+1} 之间进行线性插值的结果，第三项可看作是对线性插值所得到的值的修正量。

由二阶导数$s''(x)$在区间 (x_i, x_{i+1}) 上是线性的，即

$$s''(x)=s''(x_i)+(x-x_i)s''(x_i, x_{i+1}) \tag{2.6}$$

所以有

$$s'''(x)=s''(x_i, x_{i+1})=\frac{s''(x_{i+1})-s''(x_i)}{x_{i+1}-x_i} \tag{2.7}$$

又

$$s(x, x_i)=\frac{s(x)-s(x_i)}{x-x}$$

$$=\frac{\left[s(x_i)+\frac{1}{1!}s'(x_i)(x-x_i)+\frac{1}{2!}s''(x_i)(x-x_i)^2+\frac{1}{3!}s'''(x_i)(x-x_i)^3\right]-s(x_i)}{x-x}$$

$$=s'(x_i)+\frac{1}{2}(x-x_i)s''(x_i)+\frac{1}{6}(x-x_i)^2s''(x_i, x_{i+1}) \tag{2.8}$$

于是$s(x, x_i, x_{i+1}) = \dfrac{s(x_i, x_{i+1}) - s(x, x_i)}{x_{i+1} - x}$

$$= \frac{1}{2} s''(x_i) + \frac{1}{6}(x - x_i) s''(x_i, x_{i+1})$$

$$+ \frac{1}{6}(x_{i+1} - x_i) s''(x_i, x_{i+1})$$

$$= \frac{1}{6}[s''(x_i) + s''(x) + s''(x_{i+1})] \qquad (2.9)$$

这就是 (2.5) 式中所需用的表达式。

为求得$s'(x)$的表达式，微分 (2.9) 式得

$$s'(x, x_i, x_{i+1}) = \frac{1}{6} s''(x) = \frac{1}{6} s''(x_i, x_{i+1})$$

微分 (2.5) 式得

$$s'(x) = s(x_i, x_{i+1}) + (x - x_i)(x - x_{i+1}) s'(x, x_i, x_{i+1})$$
$$+ (2x - x_i - x_{i+1}) s(x, x_i, x_{i+1})$$

即

$$s'(x) = s(x_i, x_{i+1}) + (2x - x_i - x_{i+1}) s(x, x_i, x_{i+1})$$

$$+ \frac{1}{6}(x - x_i)(x - x_{i+1}) s''(x_i, x_{i+1}) \qquad (2.10)$$

最后，需要$\int_a^b s(x)dx$（其中$a = x_1$，$b = x_n$）的表达式。由 $s(x)$ 在每个区间 (x_i, x_{i+1}) 上都是三次多项式，所以用辛甫生公式求积是精确的。但是，需要区间中点处的纵坐标值。用ξ_i表示$\frac{1}{2}(x_i + x_{i+1})$，由 (2.6) 式有：

$$s''\left(\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right)=s''(x_i)+\frac{x_{i+1}-x_i}{2}s''(x_i,\ x_{i+1})$$

和 $s''(x_{i+1})=s''(x_i)+(x_{i+1}-x_i)s''(x_i,\ x_{i+1})$

所以 $s''\left(\frac{x_i+x_{i+1}}{2}\right)=\frac{s''(x_i)+s''(x_{i+1})}{2}$

由 (2.9) 式知

$$s(\xi_i,\ x_i,\ x_{i+1})=\frac{1}{6}\left[s''(x_i)+\frac{s''(x_i)+s''(x_{i+1})}{2}+s''(x_{i+1})\right]$$

$$=\frac{1}{4}\left[s''(x_i)+s''(x_{i+1})\right]$$

将这个结果代入 (2.5) 式便有

$$s(\xi_i)=s(x_i)+\frac{x_{i+1}-x_i}{2}s(x_i,\ x_{i+1})+\frac{x_{i+1}-x_i}{2}\cdot\frac{x_i-x_{i+1}}{2}*s(\xi_i,\ x_i,\ x_{i+1})$$

$$=\frac{1}{2}\left[s(x_i)+s(x_{i+1})\right]-\frac{1}{16}(x_{i+1}-x_i)^2\left[s''(x_i)+s''(x_{i+1})\right]$$

用三点辛甫生公式：$\frac{h}{3}(y_0+4y_1+y_2)$，即

$$\frac{x_{i+1}-x_i}{6}\left\{s(x_i)+s(x_{i+1})+4\left[\frac{1}{2}\left(s(x_i)+s(x_{i+1})\right)-\frac{1}{16}(x_{i+1}-x_i)^2\left(s''(x_i)+s''(x_{i+1})\right)\right]\right\}$$

$$= \frac{1}{2}(x_{i+1}-x_i)[s(x_i)+s(x_{i+1})] - \frac{1}{24}(x_{i+1}-x_i)^3$$

$$*[s''(x_i)+s''(x_{i+1})],$$

于是

$$\int_a^b s(x)dx = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-1}(x_{i+1}-x_i)[s(x_i)+s(x_{i+1})]$$

$$-\frac{1}{24}\sum_{i=1}^{n-1}(x_{i+1}-x_i)^3[s''(x_i)+s''(x_{i+1})]$$

(2.11)

可见，(2.11) 式右端第一项相当于在每个区间上利用梯形法则，第二项相当于修正量。

由$s''(x_1)=s''(x_n)=0$，所以剩下的问题是计算$n-2$个量$s''(x_i)$，$i=2, 3, \cdots, n-1$。

由(2.8) 式有

$$s(x_i, x_{i+1}) = s'(x_i) + \frac{1}{2}(x_{i+1}-x_i)s''(x_i) + \frac{1}{6}(x_{i+1}-x_i)^2$$

$$*\frac{s''(x_{i+1})-s''(x_i)}{x_{i+1}-x_i}$$

$$= s'(x_i) + (x_{i+1}-x_i)\left[\frac{1}{3}s''(x_i) + \frac{1}{6}s''(x_{i+1})\right]$$

(2.12)

同样，对 (x_{i-1}, x_i) 中的x有

$$s(x_{i-1}, x_i) = s'(x_i) - (x_i-x_{i-1})\left[\frac{1}{3}s''(x_i) + \frac{1}{6}s''(x_{i-1})\right]$$

(2.13)

(2.12) 式减去 (2.13) 式并乘以6，给出

$$(x_i - x_{i-1})s''(x_{i-1}) + 2(x_{i+1} - x_{i-1})s''(x_i) + (x_{i+1} - x_i) *$$

$$s''(x_{i+1}) = 6[s(x_i, x_{i+1}) - s(x_{i-1}, x_i)] \qquad (2.14)$$

$$i = 2, 3, \cdots, n-1$$

注意 $s''(x_1) = s''(x_n) = 0$，可将 (2.14) 式写成三对角矩阵形式：

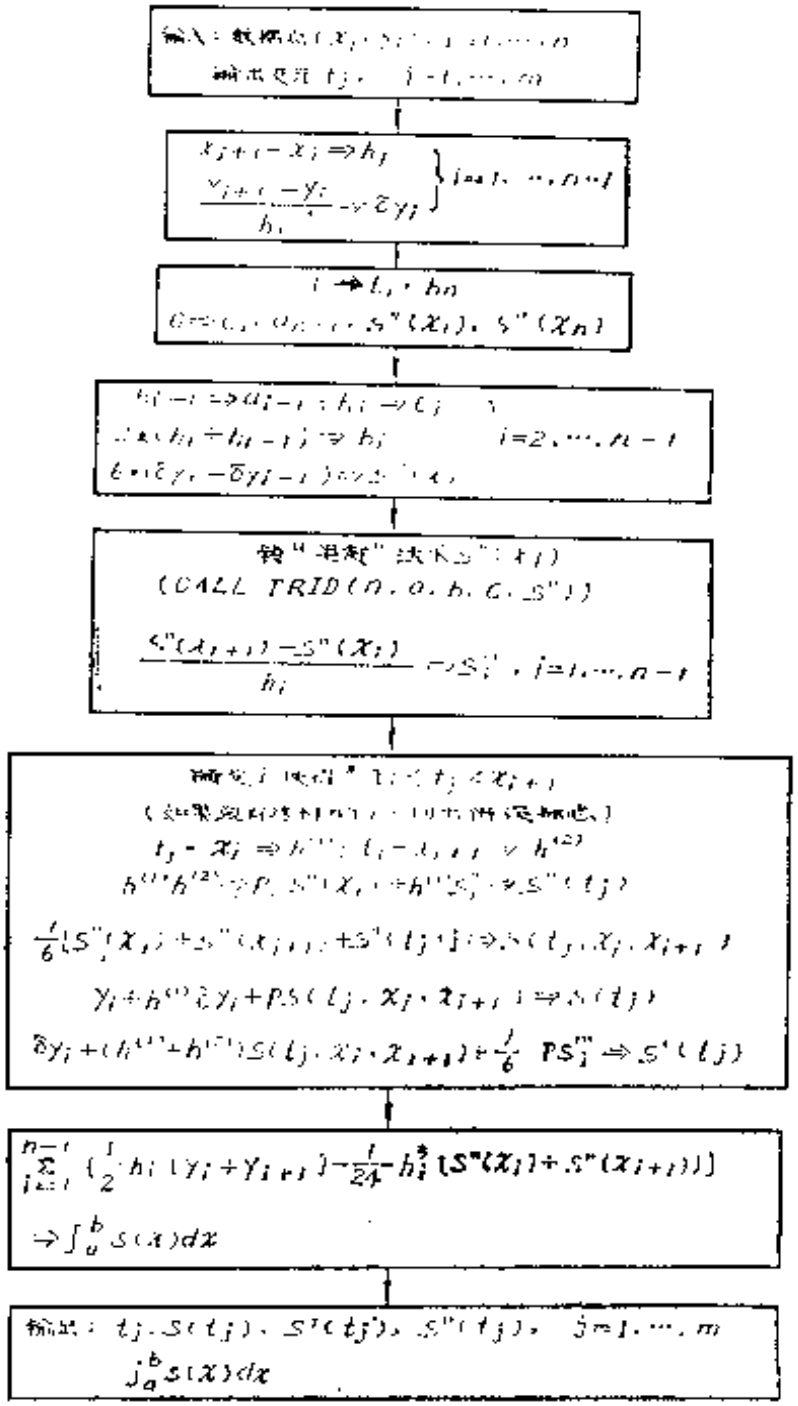
$$\begin{vmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-2} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_{n-1} & b_n \end{vmatrix} \begin{vmatrix} s''(x_1) \\ s''(x_2) \\ \vdots \\ s''(x_{n-1}) \\ s''(x_n) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{vmatrix} \qquad (2.15)$$

其中系数

$$\begin{cases} a_{i-1} = x_i - x_{i-1}, \\ b_i = 2(x_{i+1} - x_{i-1}), \\ c_i = x_{i+1} - x_i, \qquad i = 2, 3, \cdots, n-1 \\ f_i = 6[s(x_i, x_{i+1}) - s(x_{i-1}, x_i)] \end{cases}$$

利用边界条件 $s''(x_1) = s''(x_n) = 0$，可取 $b_1 = b_n = 1$，$c_1 = a_{n-1} = f_1 = f_n = 0$。显然，(2.15) 式相应的系数矩阵是对角占优的，因此可采用“追赶”法求解。

三　计算框图、程序及举例



```
      *对于i=n-1时，允许t,≤x_n。
      SUBROUTINE SPLIN(N, M, X, Y, T, ST,
     SPT, SPPT, GFZ, H, DY, A, B, C, SPP,
     SPPP)
      DIMENSION X(N), Y(N), H(N), DY(N),
     A(N), B(N), C(N), SPP(N), SPPP(N)
      DIMENSION T(M),ST(M),SPT(M),SPPT(M)
      N1 = N - 1
      DO 51 I = 1, N1
      H(I) = X(I + 1) - X(I)
   51 DY(I) = (Y(I + 1) - Y(I))/H(I)
      B(1) = 1.0
      B(N) = 1.0
      C(1) = 0.0
      A(N1) = 0.0
      SPP(1) = 0.0
      SPP(N) = 0.0
      DO 52 I = 2, N1
      A(I - 1) = H(I - 1)
      C(I) = H(I)
      B(I) = 2.0 * (H(I) + H(I - 1))
   52 SPP(I) = 6.0 * (DY(I) - DY(I - 1))
      CALL TRID(N, A, B, C, SPP)
      DO 53 I = 1, N1
   53 SPPP(I) = (SPP(I + 1) - SPP(I))/H(I)
      DO 61 J = 1, M
```

```
      I=1
      IF(T(J)-X(1))58, 17, 55
55    IF(T(J)-X(N))57, 59, 58
56    IF(T(J)-X(I))60, 17, 57
57    I=I+1
      GO TO 56
58    STOP 1111
59    I=N
60    I=I-1
17    HT1=T(J)-X(I)
      HT2=T(J)-X(I+1)
      P=HT1*HT2
      SPPT(J)=SPP(I)+HT1*SPPP(I)
      S=(SPP(I)+SPP(I+1)+SPPT(J))/6.0
      ST(J)=Y(I)+HT1*DY(I)+P*S
      SPT(J)=DY(I)+(HT1+HT2)*S+P*SPPP(I)
     /6.0
61    CONTINUE
      GFZ=0.0
      DO 62 I=1, N1
62    GFZ=GFZ+0.5*H(I)*(Y(I)+Y(I+1))
     -H(I)**3*(SPP(I)+SPP(I+1))/24.0
      RETURN
      END
```

程序功能

本过程用三次自然样条函数对一元函数进行插值、微商

或积分。

使用说明

1.子程序语句

SUBROUTINE SPLIN(N,M,X,Y, T, ST, SPT, SPPT, GFZ, H, DY, A, B, C, SPP, SPPP)

2.哑元说明

N：输入参数，整变量，插值结点个数，N≧3。

M：输入参数，整变量，被插值或求微商的点数。

X：N个元素的一维实数组，存放给定的插值结点，要求 $x(i)<x(i+1)$ ，$i=1, 2, \cdots, n-1$。

Y：N个元素的一维实数组，存放结点处的函数值。

T：M个元素的一维实数组，存放插值点，要求 $x(1)\leqq t(1)\leqq t(2)\leqq\cdots\leqq t(m)\leqq x(n)$ 。

ST：M个元素的一维实数组，存放插值结果$s(t_i)$。

SPT：M个元素的一维实数组，存放一阶导数$s'(t_i)$。

SPPT：M个元素的一维实数组，存放二阶导数$s''(t_i)$。

GFZ：输出参数，实变量，存放积分结果 $\int_{x_1}^{x_n} s(x)dx$。

H,DY,A,B,C,SPP,SPPP：N个元素的一维实数组，所需的七组工作单元。

3.所调用的过程

SUBROUTINE TRID(N, A, B, C, F)，用以求解三对角型方程组，详见第四章§8的说明。

例题

根据函数表

i	1	2	3	4	5
x_i	−3	−1	2	4	7
y_i	3	6	8	2	5

求出 $t=-2.5$，0，2.5，5 处的函数值、一阶和二阶导数值以及积分 $\int_{-3}^{7} y(x)dx$。

计算结果

j	t_j	$y(t_j)$	$y'(t_j)$	$y''(t_j)$	$\int_{-3}^{7} y(x)dx$
1	−2.5	3.69181	1.39914	0.09310	
2	0	7.75223	1.57395	−0.72107	
3	2.5	6.67026	−3.14109	−1.43563	
4	5	1.34355	0.50307	1.98774	49.84962

§3. 实验数据的曲线拟合——最小二乘法

在科学实验或统计研究中，时常需要从一组测定的数据，例如N对 (x_i, y_i) 去求得自变量x和因变量 y 的一个近似的函数关系式$y=f(x)$。从图形上看，就是由给定的N个点 $(x_i,y_i)(i=1,2,\cdots,N)$ 求曲线拟合的问题。这个问题与插值问题相类似，但在插值问题中，要求所求得的函数$y=f(x)$，在插值基点 x_i上，准确满足条件 $y_i=f(x_i)$，即要求所求的曲线通过所有已知点 (x_i, y_i)。可是我们知道，在一般科学实验中所给出的数据值经常带有测试误差，因此，要求所求的曲线通过所有的点 (x_i, y_i)，就会使这曲线保留着一切测

试误差，而这不是我们所希望求得的结果。所以，所谓曲线拟合问题，并不要求曲线必须通过所有的点 (x_i, y_i)，但要求画出一条近似的曲线，反映给定数据的一般趋势，尽量不要出现局部的波动。最小二乘原理和方法就是用来实现这个目标的。例如，我们用m次代数多项式

$$P(x) = P_m(x) = \sum_{i=1}^{m+1} a_i x^{i-1} \quad (m<N) \tag{3.1}$$

去拟合已知的N对实验数据 (x_i, y_i)。虽然，一般说来不可能选择实系数 a_1，a_2，…，a_{m+1}使多项式 (3·1) 准确地满足$P(x_i) = y_i$，$i = 1, 2, \cdots, N$。但是，我们总可以选择 $a_k (k = 1, 2, \cdots, m+1)$，使在$x_i$各点，$P(x)$对$f(x)$的误差平方和

$$Q = \sum_{i=1}^{N} [P(x_i) - y_i]^2 \tag{3.2}$$

达到最小值。这个为法就称为最小二乘法，也称为最小方差拟合。

最小二乘法是曲线拟合普遍使用的有效方法。在数理统计，回归分析和确定经验公式的参数时，在船体和飞机外形设计的曲线拟合中，也常常用到最小二乘法。

一　直线拟合——一元线性回归

假设由实验中测得的一组数据 (x_i, y_i) $i = 1, 2, \cdots N$，在x—y平面上画出的曲线和直线差不多，就可用直线$y = a + bx$ 去拟合。于是，问题变成选择适当的参数a和b，使得误差平方和

$$Q(a, b) = \sum_{i=1}^{N} [y_i - (a + bx_i)]^2 \tag{3.3}$$

达到最小值。根据通常求极小值问题的方法，知道要使 $Q(a, b)$ 为极小的 a，b 必须适合下列方程组：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial Q}{\partial a} = -2\sum_{i=1}^{N}[y_i-(a+bx_i)]=0, \\ \dfrac{\partial Q}{\partial b} = -2\sum_{i=1}^{N}[y_i-(a+bx_i)]x_i=0. \end{cases}$$

解得

$$\begin{cases} a=\dfrac{\bar{y}\sum_{i=1}^{N}x_i^2-\bar{x}\sum_{i=1}^{N}x_iy_i}{\sum_{i=1}^{N}x_i^2-N\bar{x}^2}, \\ b=\dfrac{\sum_{i=1}^{N}x_iy_i-N\bar{x}\bar{y}}{\sum_{i=1}^{N}x_i^2-N\bar{x}^2}. \end{cases} \tag{3.4}$$

其中

$$\begin{cases} \bar{x}=\dfrac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}x_i, \\ \bar{y}=\dfrac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}y_i. \end{cases}$$

二　指数函数 $y=ae^{bx}$ 的拟合

试求一个形如 $y=ae^{bx}$（a，b 为常数）的经验函数的公式，使它能和已知的 N 对数据 (x_i, y_i) 相拟合。

解：无妨设 $a>0$（否则取绝对值，求出结果后再加负号），两边取对数有 $\ln y=\ln a+bx$。令 $y^*=\ln y$，$a^*=\ln a$，$b^*=b$，则 $y^*=a^*+b^*x$，于是变成直线拟合。由 (3.4) 知

$$\begin{cases} a^* = \dfrac{\bar{y}^* \sum\limits_{i=1}^{N} x_i^2 - \bar{x} \sum\limits_{i=1}^{N} x_i y_i^*}{\sum\limits_{i=1}^{N} x_i^2 - N\bar{x}^2} \\ b^* = \dfrac{\sum\limits_{i=1}^{N} x y_i^* - N\overline{xy}^*}{\sum\limits_{i=1}^{N} x_i^2 - N\bar{x}^2}, \end{cases} \tag{3.4'}$$

其中

$$\begin{cases} \bar{x} = \dfrac{1}{N} \sum\limits_{i=1}^{N} x_i, \\ \bar{y}^* = \dfrac{1}{N} \sum\limits_{i=1}^{N} y_i^* = \dfrac{1}{N} \sum\limits_{i=1}^{N} \ln y_i. \end{cases}$$

求出a^*，b^*后，可得

$$\begin{cases} a = e^{a^*}, \\ b = b^*. \end{cases}$$

下面是用指数函数$y = ae^{bx}$拟合已知N对数据点 (x_i, y_i) 的程序。

```
SUBROUTINE FITE (N, X, Y, A, B)
DIMENSION X(N) , Y(N)
AN = FLOAT(N)
XIF = 0.0
XP = 0.0
YCP = 0.0
XYH = 0.0
DO 10 I = 1, N
```

```
      XIF = XIF + X(I) * *2
      XP = XP + X(I)
      YC = ALOG(Y(I))
      YCP = YCP + YC
10    XYH = XYH + X(I) * YC
      XP = XP/AN
      YCP = YCP/AN
      GT = XIF - AN * XP * XP
      AC = (YCP * XIF - XP * XYH)/GT
      B = (XYH - AN * XP * YCP)/GT
      A = EXP(AC)
      RETURN
      END
```

程序功能

本程序用指数曲线$y = ae^{bx}$拟合n个数据点 (x_i, y_i)，$i = 1, 2, \cdots, n$。

使用说明

1.子程序语句

SUBROUTINE FITE(N, X, Y, A, B)

2.哑元说明

N：整变量，输入参数，数据点个数。

X，Y：N 个元素的一维实数组，输入参数，分别存放自变量值$x_1, x_2, \cdots, x_n$和存放函数值$y_1, y_2, \cdots, y_n$。

A，B：实变量，输出参数，指数曲线的系数。

例题

已知列表函数

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	15.3	20.5	27.4	36.6	49.1	65.6	87.8	117.6

用指数曲线

$$f(x) = ae^{bx}$$

拟合。

计算结果

$$\begin{cases} a = 11.44, \\ b = 0.2912. \end{cases}$$

三　m次代数多项式拟合

通常用m次代数多项式

$$P_m(x) = \sum_{i=1}^{m+1} a_i x^{i-1} \qquad (m<N) \qquad (3.5)$$

去拟合N对已知数据点 (x_i, y_i)。于是，问题变成选择适当的系数$a_1, a_2, \cdots, a_{m+1}$使得误差平方和

$$Q(a_1, a_2, \cdots, a_{m+1}) = \sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{j=1}^{m+1} a_j x_i^{j-1} - y_i\right)^2 \qquad (3.6)$$

达到最小值。

同样，知$a_1, a_2, \cdots, a_{m+1}$必须适合下列方程组：

$$\frac{\partial Q}{\partial a_k} = 2\sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{j=1}^{m+1} a_j x_i^{j-1} - y_i\right)x_i^{k-1} = 0$$

或

$$(k = 1, 2, \cdots, m+1) \qquad (3.7)$$

$$\sum_{i=1}^{N} y_i x_i^{k-1} = \sum_{j=1}^{m+1} a_j \sum_{i=1}^{N} x_i^{j+k-2} \qquad (3.7')$$

引入记号

$$\begin{cases} S_k = \sum_{i=1}^{N} x_i^{k-1}, \\ T_k = \sum_{i=1}^{N} y_i x_i^{k-1}, \end{cases} \tag{3.8}$$

则方程（3·7′）变为

$$\sum_{i=1}^{m+1} a_i S_{i+k-1} = T_k \qquad (k = 1, 2, \cdots, m+1) \tag{3.9}$$

（3.9）式称为“正规方程组”。这是含有$m+1$个未知数a_i的$m+1$个方程，求解（3.）式便可确定系数a_i，将它们代入到（3.5）式就得到所要求的多项式曲线。

由（3.8）式，显然有

$$S_{ik} = S_{k,} = S_{(i+1),(k-1)} = S_{i+k-1}.$$

于是，可将（3.9）式写成如下矩阵形式：

$$\begin{pmatrix} S_1 & S_2 & S_3 & \cdots & S_{m+1} \\ S_2 & S_3 & S_4 & \cdots & S_{m+2} \\ S_3 & S_4 & S_5 & \cdots & S_{m+3} \\ S_4 & S_5 & S_6 & \cdots & S_{m+4} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ S_{m+1} & S_{m+2} & S_{m+3} & \cdots & S_{2m+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ \vdots \\ a_{m+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ \vdots \\ T_{m+1} \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

可见，只要计算出S_1，S_2，…S_{2m+1}个元素即可，矩阵的其余元素由这些组成。

归纳一下，求解步骤是：

首先利用 (3.8) 式计算矩阵$S=(S_{ij})$的系数（实际只需算出$2m+1$个元素）和列向量$T=(T_1, T_2, \cdots, T_{m+1})^T$；

然后代入求解$m+1$个未知数的代数方程组的程序（例如高斯列主元消去法），求得系数$a_1, a_2, \cdots, a_{m+1}$，从而得到$m$次的拟合多项式$P_m(x)=\sum_{i=1}^{m+1} a_i x^{i-1}$。

下面给出多项式曲线拟合程序：

```
      SUBROUTINE FITP(N, ME, X, Y, S, T)
      DIMENSION X(N),Y(N), S(ME, ME), T(ME)
      M = ME - 1
      DO 5 I = 1, ME
      T(I) = 0.0
      DO 5 J = 1, ME
    5 S(I, J) = 0.0
      S(1, 1) = N
      DO 6 J = 1, N
    6 T(1) = T(1) + Y(J)
      DO 7 I = 2, ME
      I1 = I - 1
      MI = ME + I - 2
      DO 7 J = 1, N
      S(I, 1) = S(I, 1) + X(J) * * I1
      S(ME, I) = S(ME, I) + X(J) * * MI
    7 T(I) = T(I) + X(J) * * I1 * Y(J)
      DO 8 J = 2, M
```

```
      DO 8 I=J, M
    8 S(I, J)=S(I+1, J-1)
      DO 9 I=1, M
      I1=I+1
      DO 9 J=I1, ME
    9 S(I, J)=S(J, I)
      CALL GSL(ME, S, T, EPS)
      RETURN
      END
```

程序功能

本程序用于求列表函数在最小二乘意义下的拟合多项式。

使用说明

1.子程序语句

SUBROUTINE FITP(N, ME, X, Y, S, T)

2.哑元说明

N：整变量，输入参数，数据点(x_i, y_i)的个数，$i=1, 2, \cdots, N$，其中x_i为自变量，y_i为对应的函数值。

ME：整变量，输入参数，为所要拟合的多项式次数加1，例如用M次多项式拟合，则ME = M + 1。

X，Y：N个元素的一维实数组，输入参数，分别存放自变量$x_1, x_2, \cdots, x_n$及其对应的函数值$y_1, y_2, \cdots, y_n$。

S：$ME*ME$个元素的二维实数组，工作单元。开始存放利用(3.8)式计算矩阵$S=(S_{ij})$的系数。

T：ME个元素的一维实数组，输出参数。开始存放利用

(3.8) 式计算列向量$T=(T_1, T_2, \cdots, T_{m+1})^T$的元素，最后存放拟合多项式的系数。

3.所调用的过程

SUBROUTINE GSL(N, A, B, EPS)，表示列主元高斯消去法程序，详见第三章§1的说明。

例题

已知e^x在$x=-1, -0.8, -0.6, -0.4, -0.2, 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1$处的值，求拟合$e^x$的五次多项式。

计算结果

i	x^i的系数a_i	i	x^i的系数a_i
1	1.0000384	4	0.16650017
2	1.0000193	5	0.043749424
3	0.49924942	6	0.0086793388

下面，我们再说明二点：

(1) 方程组(3.9)式的系数行列式$\Delta=|(S_{k+i-1})|\neq 0$，$(k, j=1, 2, \cdots, m+1)$。因此，(3.9) 式有唯一解。

(2) (3.9) 式的解$a_j(j=1, 2, \cdots, m+1)$，确实给出$Q(a_1, a_2, \cdots, a_{m+1})$的最小值。

先看 (1)，用反证法。假定$\Delta=0$，则对应于 (3.9) 式的齐次方程组

$$\sum_{j=1}^{m+1} a_j S_{k+j-1}=0 \qquad (k=1, 2, \cdots, m+1),$$

必有非零解。我们将上列方程中第k个方程乘以a_k，然后对k求和，有

$$0 = \sum_{k=1}^{m+1} a_k \sum_{j=1}^{m+1} a_j S_{k+j-1} = \sum_{k=1}^{m+1} a_k \sum_{j=1}^{m+1} a_j \sum_{i=1}^{N} x_i^{k+j-2}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{k=1}^{m+1} a_k x_i^{k-1} \right) \left(\sum_{j=1}^{m+1} a_j x_i^{j-1} \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{k=1}^{m+1} a_k x_i^{k-1} \right)^2 = \sum_{i=1}^{N} P_m^2(x_i)$$

我们知道，如果 $\sum_{i=1}^{N} P_m^2(x_i) = 0$，则必有每个多项式 $P_m(x_i) = 0$ $(i = 1, 2, \cdots, N)$。但由于$N > m$，根据代数学的基本定理：除非所有$a_k = 0$，一个 m 次多项式不能在$N > m$个点值上等于零，即知以上这种情况，不能出现。因此没有非零解，亦即$\Delta \neq 0$。

再看 (2)，

设 $F(x) = \sum_{k=1}^{m+1} b_k x^{k-1}$是任意一个$m$次多项式，则

$$\delta = \sum_{i=1}^{N} [F(x_i) - y_i]^2 - \sum_{i=1}^{N} [P_m(x_i) - y_i]^2$$

$$= \sum_{i=1}^{N} [F(x_i) - P_m(x_i)]^2 + 2 \sum_{i=1}^{N} [F(x_i) - P_m(x_i)][P_m(x_i) - y_i],$$

而 $$\sum_{i=1}^{N} [F(x_i) - P_m(x_i)][P_m(x_i) - y_i]$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{k=1}^{m+1} b_k x_i^{k-1} - \sum_{k=1}^{m+1} a_k x_i^{k-1} \right) \left(\sum_{k=1}^{m+1} a_k x_i^{k-1} - y_i \right)$$

$$= \sum_{k=1}^{m+1} (b_k - a_k) \sum_{i=1}^{N} \left(\sum_{k=1}^{m+1} a_k x_i^{k-1} - y_i \right) x_i^{k-1} = 0,$$

于是

$$\delta = \sum_{i=1}^{N} [F(x_i) - P_m(x_i)]^2 \geqq 0$$

亦即 $\sum_{i=1}^{N} [F(x_i) - y_i]^2 \geqq \sum_{i=1}^{N} [P_m(x_i) - y_i]^2$。这就说明了多项式曲线$P_m(x)$确实使$Q(a_1, a_2, \cdots, a_{m+1})$取得最小值。

虽然从理论上证明了正规方程组的行式Δ不等于零，但在实际计算工作中，当多项式的次数m较大，$m \geqq 7$时，Δ_m的值虽不等于零，但总是很小，致使方程组出现病态的情形。所以，多项式拟合一般取到$m = 4$或5为宜；当$m \geqq 7$时，一般不用多项式拟合，而常常采取正交多项式拟合，切比雪夫曲线拟合，特别是利用“样条”函数拟合，是国际上近十年来非常引人注目的方法之一。

第八章　蒙特卡罗方法

蒙特卡罗（Monte-Carlo，简写为M—C)方法属于计算数学的一个分支，它是在本世纪四十年代中期为了适应当时原子能事业的发展而发展起来的，但它与一般计算方法有很大区别，一般计算方法对于解决多维或因素复杂的问题非常困难，而蒙特卡罗方法对于解决这方面的问题却比较简单。因而蒙特卡罗方法在近十年来发展很快，特别是随着快速电子计算机的发展，蒙特卡罗方法得到了迅速发展与广泛应用。

蒙特卡罗方法也称随机抽样技术（Random Sampling Technique）或统计试验方法（Method of Statistical Test）。

蒙特卡罗是欧洲摩纳哥国的一个重要城市，以赌博著称。蒙特卡罗方法是以概率论与数理统计学为基础的，是通过统计试验达到计算某个量的目的。而赌博时，概率论是一种有力的手段。所以，以蒙特卡罗作为方法的名字，原因大概于此。

由于蒙特卡罗方法是利用一连串的随机数来求解问题的，因此求解随机过程，放射性衰变和布朗运动等问题，它是很有效的。它除了在原子能工业广泛应用外，在物理、化学、地质、石油、线性规划、计算机研制、计算机模拟试验、解决多体问题等领域中都有不同程度上的应用。

本章主要介绍蒙特卡罗方法的基本思想、特点及其局限性，以及它在计算积分和粒子输运等问题中的应用。

§1. 蒙特卡罗方法的基本思想、特点及其局限性

一 蒙特卡罗方法的基本思想

用下述三个例子，说明蒙特卡罗方法的基本思想。

例1.产品合格率的计算

某工厂生产一批产品，其合格率表示是：

$$P(\text{合格率})=\frac{M(\text{产品中合格产品的总数})}{N(\text{产品的总数})}. \qquad (1.1)$$

为了确定合格率，应该检查这批产品的全部，确定其中合格的数目。但是，由于产品数量多，检查全部产品花费的代价大。因此，通常采取抽取部分产品，在这部分产品中确定其合格的数目。然后用这部分产品的合格率

$$\widetilde{P}(\text{部分产品合格率})=\frac{\widetilde{M}(\text{部分产品中的合格总数})}{\widetilde{N}(\text{部分产品的总数})}, \qquad (1.2)$$

来代替所要计算的合格率 P。例如，检查某批产品，当被检查的产品长度介于 13.60cm—13.90cm 内时，则认为是合格的，否则是次品。分别抽取5件，10件，60件，150件，600件，900件，1200件，1800件来检查，其情况如下表和图20所示。

产品抽样统计表

抽取件数N	5	10	60	150	600	900	1200	1800
合格产品数M	5	7	53	131	548	820	1091	1631
合格率P	1	0.7	0.883	0.873	0.913	0.911	0.909	0.906

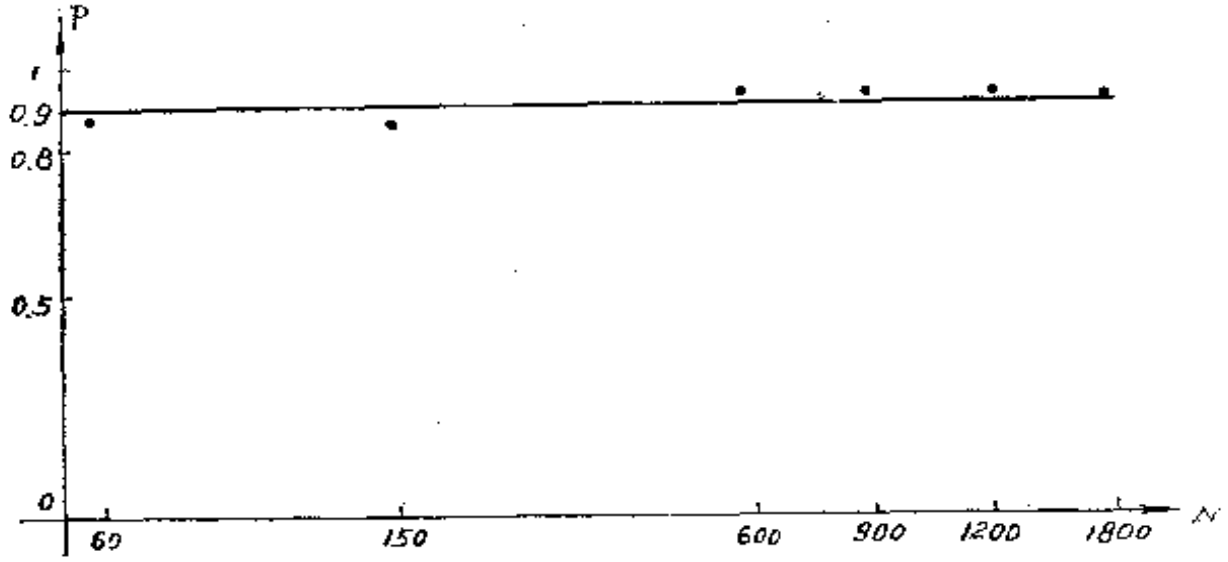


图20　产品抽样统计图

上表可看作八次试验，从结果中看出，随着抽取件数的增多，合格率愈来愈趋于一个稳定值0.9。如果定义随机变量ω_i：

$$\omega_i=\begin{cases}1, & \text{第}i\text{次试验为正品},\\ 0, & \text{第}i\text{次试验为次品}.\end{cases}$$

则做了N次试验后，正品个数共为

$$r=\sum_{i=1}^{N}\omega_i,$$

这样，(1.2) 式可进一步写为

$$P\approx\frac{r}{N}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\omega_i\approx 0.9.$$

人们从经验中还知道，当N数目越大，$\frac{r}{N}$作为正品率的估

计值就越准确的可能性也越大。类似这种把观察正品出现的频率作为近似概率的例子在生产中是很常见的。

例2.射击问题（打靶游戏）

设r表示射击运动员的弹着点到靶心的距离，$g(r)$表示击中r处相应的得分数（环数），分布密度函数$f(r)$表示该运动员的弹着点分布，它反映运动员射击水平。积分

$$<g>=\int_0^\infty g(r)f(r)dr \tag{1.3}$$

表示这个运动员的射击成绩。用概率语言说，$<g>$就是随机变量$g(r)$的数学期望值，即$<g>=Eg(r)$。

现在，假设这个射击运动员射击N次，弹着点依次是r_1，r_2，…，r_N，则自然地认为N次射击得分的平均值

$$\tilde{g}_N=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}g(r_i) \tag{1.4}$$

相当好地代表了这个射击运动员的成绩。换句话说，$\tilde{g}_N$是积分（1.3）式的一个估计值（或近似值）。这个例子通常称为打靶游戏，它直观地说明了蒙特卡罗方法计算定积分的基本思想。为进一步阐明这个思想，我们再举个例子：

计算积分　　$I=\int_0^1 f(x)dx$　　$(0\leqq f(x)\leqq 1)$

直观上，就是在边长为1的正方形里随机投点，当点落在$y=f(x)$曲线下面（见图21），对积分值有“贡献”，否则对积分值无“贡献”。为此，设ξ是〔0，1〕上均匀分布的随机变数，

定义

$$\omega_i=\begin{cases}1, & \text{第}i\text{次试验}\xi_2(i)\leqq f(\xi_1(i))\text{ 时},\\ 0, & \text{否则},\end{cases}$$

则
$$\bar{I}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\omega_i, \qquad (1.5)$$

就是积分I的一个估计值。

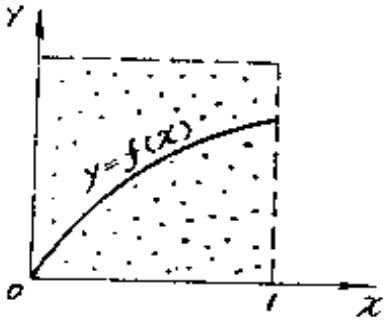


图 21

例3. 求解三维椭圆型偏微分方程的边值问题

考虑三维空间中的一个体积 V 上的Laplace方程：

$$\begin{cases}\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2}+\dfrac{\partial^2 f}{\partial y^2}+\dfrac{\partial^2 f}{\partial z^2}=0,\\ f\mid_S=\Phi(P).\end{cases} \qquad (1.6)$$

其中S为边界，要求f在V中的数值。

用蒙特卡罗方法求解是：将V用等距$\Delta x=\Delta y=\Delta z$的网格剖分，在$V$中任一内点$Q$，要求$f(Q)$之值。用一个骰子投掷，其点数1，2，3，4，5及6设分别表示向x轴正向，负向，y轴正向，负向，z轴正向，负向移动一步。由Q点出发，按投骰子的办法，在 V内进行移动，当此点到达边界时，记下边值之数值；又回头由Q 点按投骰子之点数移动，如此继续下去，……，设得到一系列的边值：

$$\Phi_1,\ \Phi_2,\ \cdots,\ \Phi_n,\ \cdots$$

则$f(Q)$的近似值可取

$$f(Q)\approx\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\Phi_i,$$

或
$$f(Q)=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\Phi_i$$

注意，这种作法的来源是依据两个基本假设，其一为方程（1.6）可以用差分格式

$$f_{i,j,k}=-\frac{1}{6}(f_{i+1,j,k}+f_{i-1,j,k}+f_{i,j+1,k}+f_{i,j-1,k}+f_{i,j,k+1}+f_{i,j,k-1})$$

来近似，其二是假设骰子为均匀的，即出现6个数机会均等。

从上述三个例子可以看到，当所要求解的问题是某种事件出现的概率，或者是某个随机变量的期望值时，它们可以通过某种“试验”的方法，得到这种事件出现的频率，或者这个随机变数的平均值，并用它们作为问题的解。这就是蒙特卡罗方法的基本思想。

由上面例子还可看出，用蒙特卡罗方法求解问题时，首先要建立一个随机模型，然后要制造一系列的随机数用以模拟这个过程，最后要作统计性的处理。关于建立随机模型，因问题而异。下面来研究随机数的产生方法。

二　随机数和伪随机数的产生

1.单位矩形分布

最简单、最重要、最基本的一个概率分布是单位区间（0，1）上均匀分布（或称单位矩形分布），其分布密度函数是：

$$f(x)=\begin{cases}1, & \text{当}0\leqq x\leqq 1,\\ 0, & \text{其它点处.}\end{cases}$$

2.随机数

由具有单位矩形分布的总体中抽取的简单子样：x_1，x_2，…，x_N，简称为随机数序列。其中的每一个体称为随机数。由于它在蒙特卡罗方法中占有极其重要的地位，我们将用专门的符号ξ_1，ξ_2，…，ξ_N来表示。

连续产生随机数的例子如投骰子，有奖储蓄开奖时的摇号码机等。

3.伪随机数及其产生的方法

计算机不会掷骰子，它是利用数论的方法来产生随机数的。由于这种办法属于半经验性质，因此只能近似地具备随机数的性质，所以称为伪随机数。最初冯·诺伊曼（Von Neumann）建议的“平方取中法”如下：

以十进制数为例，平方取中法是把一个$2S$位的十进制数自乘后，去头截尾保留中间$2S$个数字，然后用10^{2S}来除。例如

$x_1 = 6406$，　　$x_1^2 = 41036836$，

$x_2 = 0368$，　　$x_2^2 = 00135424$，

$x_3 = 1354$，　　$x_3^2 = 01833316$，

$x_4 = 8333$，　　$x_4^2 = 69438889$，

$x_5 = 4388$，　　……

……

相应的伪随机数序列便是0.6406,0.0368，0.1354，0.8333，0.4388，……。

平方取中法的一般形式是

$$\begin{cases} x_{i+1} \equiv [10^{-S}x_i^2] (\mathrm{mod}\, 10^{2S}) , \\ \xi_{i+1} = \dfrac{x_{i+1}}{10^{2S}} , \end{cases}$$

其中 "mod" 表示取模运算，x_1为任意给定的初始值，由 2s 位十进制数组成。在电子计算机上采用二进制的数，此时平方取中法如下

$$\begin{cases} x_{i+1} \equiv [2^{-s}x_i^2] (\mathrm{mod} 2^{2s}) , \\ \xi_{i+1} = \dfrac{x_{i+1}}{2^{2s}}, \end{cases}$$

x_1为任意给定的2s位二进制数。

同平方取中法相类似，乘积取中法的一般形式是

$$\begin{cases} x_{i+2} \equiv [2^{-s}x_i x_{i+1}] \ (\mathrm{mod} 2^{2s}) , \\ \xi_{i+2} = \dfrac{x_{i+2}}{2^{2s}}, \end{cases}$$

x_1，x_2为任意两个初始值，由2s位二进制数组成。

乘同余方法的一般形式是

$$\begin{cases} x_{i+1} \equiv ax_i \ (\mathrm{mod} N) , \\ \xi_{i+1} = \dfrac{x_{i+1}}{N}, \end{cases}$$

x_1为任意初值。

乘加同余法的一般形式是

$$\begin{cases} x_{i+1} \equiv (ax_i + c) \ (\mathrm{mod} N) , \\ \xi_{i+1} = \dfrac{x_{i+1}}{N}, \end{cases}$$

其中

$$\begin{cases} x_0 = \text{Seed}, & (0 \leqq \text{Seed} \leqq 199617) \\ c = 99991, \\ a = 24298, \\ N = 199617. \end{cases}$$

关于产生伪随机数的方法，性能以及检查已有很多工作。其实，在大多数计算中，产生均匀分布的伪随机数已作为内部函数或库文件存在计算机内，随时可以调用。

三 蒙特卡罗方法的特点及其局限性

对于多种介质，几何上不规则，维数高等类型的问题，蒙特卡罗方法照样可用，不须修改。因此，在一定意义上说，它是一种很普遍适用的方法。而它的误差是由概率论中的大数定律

$$\lim_{N\to\infty} Pro\left\{\left|\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\xi_i - P\right| < \in\right\} = 1,$$

所控制的，并由中心极限定理

$$Pro\left\{\left|\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\xi_i - P\right| < \frac{x_\alpha\sigma}{\sqrt{N}}\right\} \simeq \frac{2}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{x_\alpha} e^{-\frac{x^2}{2}}dx = 1-\alpha,$$

这表明，不等式

$$\left|\widetilde{P} - P\right| < \frac{x_\alpha\sigma}{\sqrt{N}} \qquad (1.7)$$

以概率$1-\alpha$成立。通常α称为置信度，$1-\alpha$称为置信水平。

如果$\sigma \neq 0$，则由（1.7）式知，蒙特卡罗方法的误差$\in$为

$$\in = \frac{x_\alpha \sigma}{\sqrt{N}} \tag{1.8}$$

α和x_α的关系可从正态分布$N(0,1)$积分表中查到。常用的几组α和x_α如下

α	x_α
0.5	0.6745
0.05	1.96
0.01	3

特别称$\alpha = 0.5$时的误差$0.6745\sigma/\sqrt{N}$为概然误差。再如，取置信水平为95%，则 $x_\alpha = 1.96$，此时表明误差不等式：

$$|\bar{P} - P| < \frac{1.96\sigma}{\sqrt{N}}$$

以95%的可能性具有精确度为 $\in = 1.96\sigma/\sqrt{N}$。所以，M—C方法对于误差的估计具有概率性质。即对于这个方法不能断言误差不超过某值，而只能指出误差以某种（如接近1）的概率不超过某值。还可看出，当给定置信度α后，误差$\in$由σ和$\sqrt{N}$决定。要减小 $\in$，或者是增大 N，或者是减小方差σ^2。在固定σ下，要提高精度一位数字，就要增加 100 倍工作量，因此，单纯增大N，不是一个有效的办法。改进的方法之一是减少方差 σ。这里有许多技巧，如“重要抽样”、“系统抽样”、“相关”、“对偶变数”、“半解析方法”、“统计估计”、“分裂与俄国轮盘赌”等等。

蒙特卡罗方法主要有如下三个特点：

1.收敛速度与问题维数无关

从误差表达式（1.8）中，明显看出，在一定的置信水平下，M—C方法的误差，除了与方差σ^2有关外，只取决于子样容量N，而与子样中的元素所在的集合空间Ω的组成无关。问题的维数变化，除了引起抽样时间及计算估计量的时间有变动外，不影响问题的误差。换言之，要达到同一精度，用M—C方法选取的点数与维数无关；计算时间仅与维数成比例。但一般数值方法，比如在计算多重积分时，达到同样的误差，点数与维数的幂次成比例，即计算量要随维数的幂次方增加。这一特性，决定了M—C方法适宜于多维问题。

例如，计算积分：$P_1=\int_0^1 f(x)dx=\int_0^1 xdx$

用M—C方法是抽取随机数$\xi_{1,0}$和$\xi_{1,1}$，令

$$\omega_1=\begin{cases}1, & \text{当}\xi_{1,0}\leqq f(\xi_{1,1})=\xi_{1,1},\\ 0, & \text{其它}.\end{cases}$$

于是，
$$\tilde{P}_1=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\omega_i, \tag{1.9}$$

就是积分P_1的一个估计值。

由于均方差$\sigma=\frac{1}{2}$，$P_1=\frac{1}{2}$，根据误差不等式，知

$$|\tilde{P}_1-P_1|\leqq\frac{1.96}{2\sqrt{N}},$$

于是相对误差 $|\widetilde{P}_1 - P_1|/P_1 \leq \frac{1.96}{\sqrt{N}}$。 (1.10)

将上述积分推广到S维的情形，取

$$f(x_1, x_2, \cdots, x_s) = (x_1 + x_2 + \cdots + x_s)/S,$$

积分变成

$$P_s = \int_0^1 \cdots \int_0^1 \frac{1}{S} \sum_{i=1}^{s} x_i dx_1 dx_2 \cdots dx_s。 \quad (1.11)$$

此时，M—C方法的估计同样是

$$\widetilde{P}_s = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \omega_i。 \quad (1.12)$$

其中

$$\omega_i = \begin{cases} 1, \text{ 当} \xi_{i,0} \leq f(\xi_{i,1}, \cdots, \xi_{i,s}) = \frac{1}{S} \sum_{j=1}^{s} \xi_{i,j}, \\ 0, \text{ 其它。} \end{cases}$$

由于$P_s = \frac{1}{2}$，因此它的相对误差同样是

$$|\widetilde{P}_s - P_s|/P_s \leq \frac{1.96}{\sqrt{N}}。 \quad (1.13)$$

由此可见，用M—C方法计算单重积分P_1和S重积分P_s，除了确定ω_i值时与问题的维数有关外（前者是$\xi_{i,0} \leq \xi_{i,1}$，后者$\xi_{i,0} \leq \frac{1}{S} \sum_{j=1}^{s} \xi_{i,j}$，仅多产生$S-1$个随机数），其它与维数无关，尤其重要的是误差与维数无关。

2.受问题的条件限制的影响小

比如计算S维中任意一个区域D_S上积分：

$$P_{SD}=\int_{D_S}\cdots\int g(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_s)dx_1dx_2\cdots dx_s \qquad (1.14)$$

无论D_S的形状如何特殊，只要能给出描述D_S特性的几何条件，那么总可以给出类似于（1.4）式的估计如下

$$\bar{P}_{SD}=\frac{D_S}{N}\sum_{1}^{}g(x_1^{(1)},\ x_2^{(1)},\ \cdots,\ x_S^{(1)}). \qquad (1.15)$$

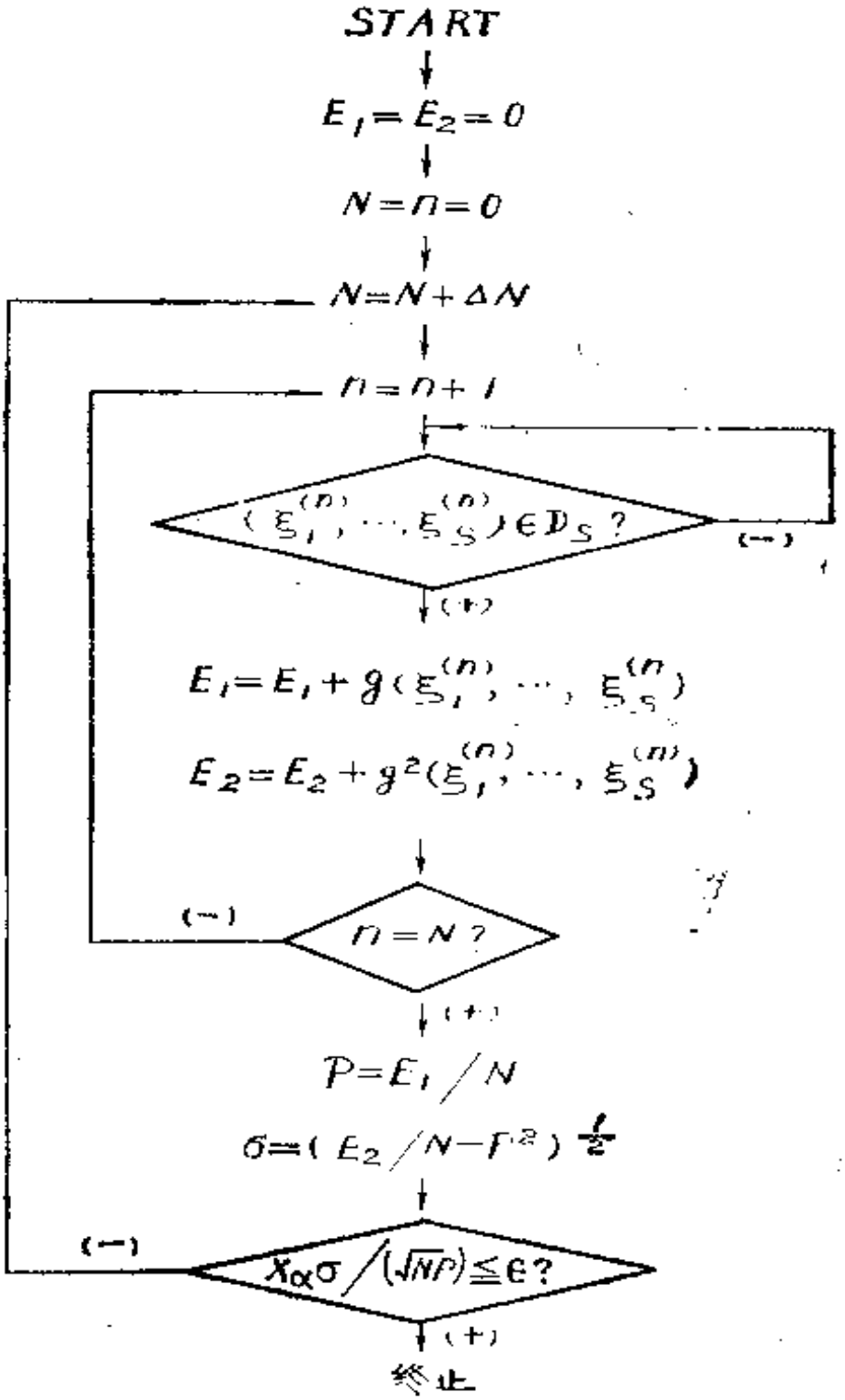
其中$\sum$是对所有满足$(x_1^{(1)},\ x_2^{(1)},\ \cdots,\ x_S^{(1)})\in D_S$的点取的。而其它数值方法受问题的条件限制影响比较大。可见，M—C方法是解决复杂的几何模型的一种有效的方法。

3.程序结构简单，占用内存单元较少

最后，在电子计算机上实现M—C计算时，程序结构清晰简单。例如，用式（1.15）计算积分（1.14）的M—C方法程序结构如下面框图所示。其中假设D_S属于S维单位超立方体，ΔN表示每组抽样的数目，$\xi_1^{(n)},\ \cdots,\ \xi_S^{(n)}$为随机数，$x_0$为常数，根据置信水平要求确定，$\in$表示对计算相对误差的要求。

4.蒙特卡罗方法的局限性

前面已经指出，蒙特卡罗方法的弱点是收敛速度慢，误差的概率性质，误差与点数（抽样数N）的平方根成反比，而其它数值方法的误差是确切的，通常情况下，误差与点数成反比。因此，对于维数不高的问题（一维、二维），数值方法可以给出误差很小的结果，而且计算量小。也就是说，M—C方法计算量相对说来比较大，又给出的是概率误差，


START
$E_1 = E_2 = 0$
$N = n = 0$
$N = N + \Delta N$
$n = n + 1$
$(\xi_1^{(n)}, \cdots, \xi_S^{(n)}) \in D_S$?
(−)
(+)
$E_1 = E_1 + g(\xi_1^{(n)}, \cdots, \xi_S^{(n)})$
$E_2 = E_2 + g^2(\xi_1^{(n)}, \cdots, \xi_S^{(n)})$
(−)
$n = N$?
(+)
$P = E_1 / N$
$\sigma = (E_2/N - P^2)^{\frac{1}{2}}$
(−)
$\chi_\alpha \sigma / (\sqrt{N} P) \leqq \epsilon$?
(+)
終止

通常给出二至三位有效数字。除此之外，经经证明，只有当系统的大小与粒子的平均自由程可以相比较时，一般在10个平均自由程左右，M—C方法算出的结果较为满意。而对于大系统、深穿透问题（一般指系统大小为16—20个平均自由程以上），算出的结果往往偏低。而对于大系统，数值方法往往很适应，能算出较好的结果。因此，现在已有人将数值方法与蒙特卡罗方法联合起来使用，相互取长补短，克服这种局限性，取得了一定的效果。

§2. 蒙特卡罗方法计算积分

计算多重积分是蒙特卡罗方法的重要应用领域之一。因为任一积分，都可看作某个随机变量的数学期望。因此，可以用这个随机变量的算术平均值来近似。

一 蒙特卡罗方法求积分

例如求积分

$$\theta = \int_0^1 f(x)dx \qquad (2.1)$$

选取分布密度函数

$$p(x) = \begin{cases} 1, & \text{当} x \in [0, 1], \\ 0, & \text{其它}. \end{cases}$$

则式（2.1）可写成

$$\theta = \int_0^1 f(x)p(x)dx = E[f(x)] \qquad (2.2)$$

即θ是随机变量$f(x)$的数学期望。现从$p(x)$抽取随机变量x的N个样本：x_i，$i=1, 2, \cdots, N$，则算术平均值

$$\tilde{\theta} = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=1}^{N} f(x_i) \tag{2.3}$$

就是θ的一个近似估计。

对于一般的S重积分

$$\theta = \int_{V_S} G(P)dP \tag{2.4}$$

其中，$P = P(x_1, x_2, \cdots, x_s)$ 表示 S 维空间的点，V_S 表示积分区域。

用M—C方法求解的步骤是：

1．在所求解的区域上构造一个分布密度函数。取V_S上任一概率密度函数$f(P)$，它满足如下条件：

$$f(P) \neq 0, \quad 当 P \in V_S, \ G(P) \neq 0 时.$$

令

$$g(P) = \begin{cases} G(P)/f(P), & 当 f(P) \neq 0, \\ 0, & 其它. \end{cases} \tag{2.5}$$

则式（2·4）可改写为

$$\theta = \int_{V_S} g(P)f(P)dP = E[g(P)] \tag{2.6}$$

即θ是随机变量$g(P)$的数学期望。

2．将 $g(P)$ 的数学期望值用其算术平均值来近似。现从$f(P)$抽取随机向量P的N个样本：P_i，$i = 1, 2, \cdots, N$，则

$$\tilde{g}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} g(P_i) \tag{2.7}$$

就是积分θ的近似估计。

选取$f(P)$的最简单方法是取V_S上的均匀分布：

$$f(P)=\begin{cases}1/V_S, & \text{当}P\in V_S,\\ 0, & \text{其它}.\end{cases} \tag{2.8}$$

这里，V_S也表示积分区域的体积。这时，

$$g(P)=V_S G(P) \tag{2.9}$$

显然，存在一个如何选取$f(P)$的问题。选取最优的估计形式，将是M—C方法要讨论的问题之一。

二　无偏估计

如果随机变量Y，其期望值为θ^*，即

$$E[Y]=\theta^*, \tag{2.10}$$

则称Y是θ^*的一个无偏估计。

不难验证，$g(P)$和$\tilde{g}_N$都是θ的无偏估计。

三　收敛性及误差估计

由上节可得如下结果：

1.当$N\to\infty$时，抽样(算术)平均$\tilde{g}_N$以概率为1收敛到θ，即

$$Pro\left(\lim_{N\to\infty}\tilde{g}_N=\theta\right)=1 \tag{2.11}$$

2.如果有不为零的有限方差σ_g^2存在，即

$$\sigma_g^2=\int_{V_S}[g(P)-\theta]^2 f(P)dP<+\infty \tag{2.12}$$

存在，则在$1-\alpha$置信水平下，成立不等式：

$$|\bar{g}_N - \theta| < X_\alpha \sigma_g / \sqrt{N} \qquad (2.13)$$

也就是说，用M—C方法求积分，其误差的阶为$0(N^{-1/2})$。

最后，给出用 M—C 方法产生均匀分布随机数和计算多重积分的程序。

产生均匀分布随机数的程序：

```
SUBROUTINE RAND(YFL)
IF(YFL.EQ.0.0) YFL=0.31415926
Y=YFL*YFL
1 Y=Y*10.0
IF(Y-1.0) 1, 2, 2
2 YFL=Y-FLOAT(IFIX(Y))
RETURN
END
```

程序功能

本程序用于产生 (0,1) 区间上均匀分布的随机数。

使用说明

1.子程序语句

```
SUBROUTINE RAND(YFL)
```

2.哑元说明

YFL：实变量，输入、输出参数，要求在第一次调用前，对YFL赋值，当YFL=0.0时，程序自带初值：YFL=0.31415926；当使用者自己选定初值时，可将选定的初值赋于YFL。以后每调用一次便在 YFL 中产生一个 (0, 1) 区间上的随机数，同时，YFL又作为产生下一个随机数的初值。

方法简介

本程序采用的计算步骤如下：

1.对于给定的一个 P 位数的初值 r_0（例如取 $r_0=0.3415926$，0.27182818，…），对 r_0 进行平方，得到一个 $2P$ 位数 r_0^2，实际上由于计算机字长有限，尾数长度是有限制的，当 r_0^2 的位数超出计算机尾数长度的时候，机器自动会舍掉多出的尾数，这样截去尾数避免了任意数的平方的末位数只能出现0，1，4，5，6，9而不会出现2，3，7，8的系统偏倚性。

2.判断 r_0^2 是否小于1，如果 $r_0^2<1$ 时，则右移 r_0^2 的小数点直至 $r_0^2\geq 1$ 时为止，然后，截去整数部分，保留小数部分，把保留的小数部分作为（0，1）区间上的均匀分布的随机数 r_1，这样截去首位避免了小于1的数的平方有对小数目偏倚的现象。

3.以 r_1 为初值，重复1，2过程产生 r_2。这一过程一直重复下去，就可产生（0，1）区间上均匀分布的随机数序列 r_1，r_2，…，。

例题

例1.取初值YFL = 0.31415926所产生的2000个（0，1）区间上的均匀随机数进行统计特性检验。

1）参数检验

最大值 $\max\{r_1, r_2, \cdots, r_{2000}\}=0.99907696$，

最小值 $\min\{r_1, r_2, \cdots, r_{2000}\}=0.17911196\times 10^{-3}$，

一阶矩 $\bar{r}_{2000}=0.48966279$，

二阶矩 $\bar{r}^2_{2000}=0.31479022$，

二阶中心矩 $S^2_{2000}=0.084561238$。

2）均匀性检验

将（0，1）区间等分成39个小区间，对2000个随机数进行均匀性检验，由计算得：

$$\chi^2(38)=45.316\quad(45.316<53.33354)\,,$$

在显著水平$\alpha=0.05$下，接受均匀性假设。

例2.取YFL＝0.27182818产生2000个（0，1）区间上均匀分布的随机数。

计算结果

最大值　$\max\{r_1,\ r_2,\ \cdots,\ r_{2000}\}=0.99982858,$

最小值　$\min\{r_1,r_2,\cdots,\ r_{2000}\}=0.57747960\times10^{-3},$

一阶矩　$\bar{r}_{2000}=0.49808762.$

附注

1.设r_i为（0，1）区间上的均匀分布的随机数，则

$$R_i=a+(b-a)r_i,$$

即为（a，b）区间上均匀分布的随机数。

2.本方法程序简单，只要一个存贮单元就够了。但在使用上要注意初值的选取，初值选得好可以产生周期较长、统计特性较好的随机数。

产生均匀分布随机数的方法很多，这里就不一一列举了。下面给出用M—C方法计算多重积分的程序：

```
      SUBROUTINE RJ (N, N1, YFL, RY)
      F = 0.0
      DO 5 I = 1, N1
    5 F = F + FX(N)
```

RY = F/FLOAT(N_1)

RETURN

END

SUBROUTINE RAND(YFL)

… 随机数程序段体部分

END

程序功能

本程序采用蒙特卡罗（M—C）方法，求多重积分

$$I = \int_0^1 \cdots \int_0^1 f(x_1, \cdots, x_n)dx_1 \cdots dx_n,$$

的近似值。

使用说明

1.子程序语句

SUBROUTINE RJ (N, N_1, YFL, RY)

2.哑元说明

N：整变量，输入参数，积分重数。

N_1：整变量，输入参数，一个充分大的正整数。

YFL：同子程序RAND的哑元说明。

RY：实变量，输出参数，存放积分结果。

3.所调用的过程

SUBROUTINE RAND(YFL)，表示产生（0,1）区间上均匀分布的随机数的子程序段。

FUNCTION FX(N)，表示计算被积函数的函数段，由使用者自行编写，其自变量由子程序RAND产生的随机数求得，N为积分重数。

例题

取S = 2，3，…，8计算多重积分

$$I = \int_0^1 \cdots \int_0^1 \sum_{i=1}^{S} x_i^2 dx_1 \cdots dx_S,$$

的结果。

精确结果

S	2	3	4	5	6	7	8
I	0.6	1.0	1.3	1.6	2.0	2.3	2.6

当产生随机数的初值取 YFL = 0.31415926 时，计算结果如下表：

N_1 \ S	2	3	4	5	6	7	8
1000	0.644	0.984	1.274	1.617	1.979	2.313	2.647
2000	0.650	0.963	1.307	1.650	1.989	2.315	2.645
3000	0.650	0.966	1.322	1.653	1.986	2.316	2.646
4000	0.646	0.979	1.324	1.653	1.983	2.317	2.647

可见，计算结果的误差小于10%。

§3. 蒙特卡罗方法在粒子输运等问题中的应用

因为粒子（中子或光子）输运问题本身具有随机性质，很大程度上受概率规律支配。用M—C 方法求解可以归结为简单的跟踪问题。就是直接模拟每个粒子的历史，从它产生到“生命”结束。一个从源发出的粒子，在它的运动方向上，在哪一点碰撞是偶然的，但有一定的概率分布；与原子

核（或原子）发生碰撞，又有各种概率不相同的类型；碰撞后的能量和方向，又遵从一定的概率分布。粒子可能被介质吸收或从系统中逃脱，这时粒子运动过程就告结束，否则，继续下一次类似的运动过程。一个粒子在介质中运动的情况，可由它所经历的碰撞反映出来。这里特别需要指出的是，下一次碰撞位置、碰撞后的能量与方向的决定，只与这次碰撞情况有关，而与粒子以前的碰撞情况无关。显然，粒子的这种随机运动过程，是一种马尔科夫过程。

所以，只要粒子与核碰撞的规律，在物理上清楚，那么粒子运动的这种马尔科夫过程，完全能够用M—C 方法正确地模拟，从而得到所要的解。

用M—C 方法求解问题，可归结为三个主要步骤：构造或描述概率过程；实现从已知概率分布抽样；建立各种估计量。下面我们以最简单的粒子穿透问题（只讨论屏蔽中子问题）为例，进一步说明用M—C 方法解题的具体步骤。

假设屏蔽层是一块厚度为 a 的均匀平板介质，取它的法线方向为 x。在平板左侧有一已知角分布和能量分布的中子源S（见图22）

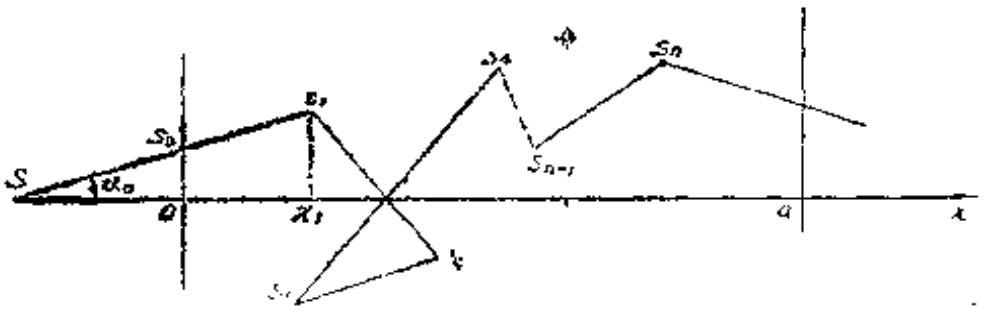


图22　中子穿透屏蔽示意图

我们感兴趣的是中子以多大概率穿透屏蔽层。

用M—C 方法求解这一问题，就是模拟中子在介质中的运动规律（即对游动历史进行跟踪观察），直到中子被吸收、反射或穿透平板而结束。再重新模拟下一个中子。最后得到穿透概率P。具体步骤如下：

（1）确定初始状态S_0

我们知道，描述中子状态只须三个参数：位置坐标x，中子能量E和中子运动方向与x轴方向夹角α。记初态S_0（x_0，E_0，α_0），显然，无妨取$x_0=0$，E_0和α_0按给定中子源的能量分布和角分布中随机抽取。

（2）确定下一个碰撞点

已知状态S_{m-1}要确定S_m，首先要确定下一个碰撞点坐标x_m。从物理上知道，中子相邻两次碰撞点间的关系，满足下面统计规律：

$$h(x_m)=\begin{cases}\dfrac{\Sigma_T(E_{m-1})}{|\cos\alpha_{m-1}|}exp\left\{-\dfrac{\Sigma_T(E_{m-1})}{\cos\alpha_{m-1}}(x_m-x_{m-1})\right\}, & \text{当 } \dfrac{x_m-x_{m-1}}{\cos\alpha_{m-1}}>0,\\ 0, & \text{其它}\end{cases}\tag{3.1}$$

$$(m=1,\ 2,\ \cdots)$$

这里，$\Sigma_T(E_{m-1})$是中子能量为E_{m-1}时，介质的总截面。由这熟知的指数分布（3.1）式，抽得

$$x_m=x_{m-1}-\frac{\ln\xi_1}{\Sigma_T(E_{m-1})}\cos\alpha_{m-1}.\tag{3.2}$$

以后，无进一步申明，ξ均表示(0,1)上均匀分布的随机数。

如果$x_m \geqq a$或$x_m \leqq 0$，中子历史终止。前者表示中子穿透屏蔽，后者表示中子被平板反射回来。

(3) 确定碰撞类型

假定中子与原子核碰撞时，它只可能吸收或被散射，并且假定散射是弹性的。令吸收截面和散射截面分别为Σ_a和Σ_s，则$\Sigma_T = \Sigma_a + \Sigma_s$。产生随机数$\xi_2$，确定

$$\xi_2 \leqq \Sigma_a/\Sigma_T,$$

或

$$\xi_2 > \Sigma_a/\Sigma_T,$$

成立。如果属于前者，则认为中子被吸收，这时中子游动历史结束，再重新从源中抽取另一个中子；如果属于后者，则中子被散射。(这里已假定介质是由一种原子核组成。如果不是这样，在决定碰撞之前，尚须首先断定与其碰撞的原子核的种类。这可根据介质的组成成分和每一种原子核截面的大小来决定)。

(4) 确定碰撞后的能量与方向

如果碰撞为吸收，那么中子历史终止；如果为弹性散射，中子能量E_m由下式计算：

$$E_m = \frac{E_{m-1}}{2}[(1+\bar{\alpha}) + (1-\bar{\alpha})\cos\theta_C], \qquad (3.3)$$

其中

$$\bar{\alpha} = \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2, \qquad (3.4)$$

A是散射核的质量与中子质量之比，θ_C为质心系(用c·m表

示）中中子散射前后方向的夹角，即偏转角。如果散射在质心系中各向同性，则θ_C满足分布

$$P(\theta_C)=\frac{1}{2}\sin\theta_C, \tag{3.5}$$

抽得

$$\cos\theta_C=2\xi_3-1. \tag{3.6}$$

碰撞后，中子运动方向与x轴夹角α_m，用下面球面三角公式确定：

$$\cos\alpha_m=\cos\alpha_{m-1}\cos\theta_L+\sin\alpha_{m-1}\sin\theta_L\cos\chi \tag{3.7}$$

这里，θ_L为实验室系（L系）中，中子散射前后方向的夹角，$\mu_L=\cos\theta_L$与$\mu_C=\cos\theta_c$有如下关系：

$$\mu_L=(1+A\mu_C)/\sqrt{1+A^2+2A\mu_C}\ , \tag{3.8}$$

最后，χ是（0，2π）上均匀分布的方位角，

$$\chi=2\pi\xi_4. \tag{3.9}$$

至此，由S_{m-1}完全可以确定S_m。因此，一旦S_0由源分布确定，就可以得到源中子的游动历史。

$$\left.\begin{array}{llllllll} x_0, & x_1 & \cdots, & x_m & \cdots, & x_{M-1}, & x_M \\ E_0, & E_1 & \cdots, & E_m & \cdots, & E_{M-1}, & E_M \\ \cos\alpha_0, & \cos\alpha_1, & \cdots, & \cos\alpha_m, & \cdots, & \cos\alpha_{M-1}, & \cos\alpha_M \end{array}\right\} \tag{3.10}$$

即就是模拟了一个由源发出的中子的运动过程。

以上模拟过程，可分作两大步：第一步由源分布来确定源中子的状态，即中子初态S_0；第二步由S_{m-1}来确定S_m，这

就是产生了随机游动链。第二步又可分为两大过程：第一，由 x_{m-1} 确定 x_m，称为空间输运过程；第二，由 E_{m-1}，$\cos\alpha_{m-1}$ 确定 E_m，$\cos\alpha_m$，称为碰撞过程。以后就是反复这两种过程，直到中子历史终止。

如果从源共抽取 N 个中子样本进行跟踪，其中有 N_1 个中子穿透了介质，则穿透概率 P 的估计为

$$P \approx \tilde{P}_N^{(1)} = \frac{N_1}{N}. \tag{3.11}$$

为得到穿透中子的能量、角度分布，在蒙特卡罗方法中，常将问题的能量和角度范围各分为若干间隔：

$$\begin{cases} E_0 > E_1 > \cdots > E_I = E_{min}, \\ 0 = \alpha_0 < \alpha_1 < \cdots < \alpha_J = \pi/2. \end{cases} \tag{3.12}$$

其中，E_{min} 表示问题的最低能量。然后，对于穿透中子，根据其能量、方向分类记录。设穿透中子的能量为 E_T，角度为 α_T；E_T 属于第 i 个能量间隔，即

$$E_i \leqslant E_T \leqslant E_{i-1},$$

则在相应能量的计数器中加“1”；α_T 属于第 j 个方向间隔，即

$$\alpha_{j-1} \leqslant \alpha_T \leqslant \alpha_j,$$

则在相应的角度的计数器中加“1”。跟踪 N 个中子后，则

$$\begin{cases} \tilde{P}_{N,i}^{(1)} = N_{1i}/N, & i = 1, 2, \cdots, I; \\ \tilde{P}_{N,j}^{(1)} = N_{2j}/N, & j = 1, 2, \cdots, J. \end{cases} \tag{3.13}$$

就分别是穿透中子的能量和角度分布的估计。其中 $N_{1,i}$ 是相应于第 i 个能量间隔的穿透中子的计数；$N_{2,i}$ 是相应于第 j 个角度间隔的穿透中子的计数。

进一步，归一后的分布是

$$\left.\begin{aligned}\tilde{P}^{(1)}_{\mathrm{N},i} &= \frac{1}{\tilde{P}^{(1)}_{\mathrm{N}}}\tilde{P}^{(1)}_{\mathrm{N},i}\,,\quad i=1,\ 2,\ \cdots,\ I;\\ \tilde{P}^{(2)}_{\mathrm{N},j} &= \frac{1}{\tilde{P}^{(2)}_{\mathrm{N}}}\tilde{P}^{(2)}_{\mathrm{N},j}\,,\quad j=1,\ 2,\ \cdots,\ J.\end{aligned}\right\} \tag{3.14}$$

显然，现在得到的实际上是相应分布的阶梯近似的估计值。

由此可见，M—C 方法就是在电子计算机上完成对随机游动序列的计算，即实现随机过程的模拟。由于这个缘故，M—C 方法也称为随机模拟方法。

上述例子的办法称为直接模拟法，它能清楚地描述物理过程。这种模拟过程，是解任何类型的中子输运问题所共有的，它是M—C 解题的基本手段。但在实际问题中，穿透概率 P 往往是很小的(介质很厚或介质中含有强吸收物质等)。这时需要观察的样本数必须很大。例如，如果要求相对误差小于5%，则当 P 值量级为 10^{-8}—10^{-10} 时，根据 (1.7) 式，所需 N 值量级应该为 10^{9}—10^{13}。需要这样大的 N，甚至是目前最快速的计算机也难以实现。因此，在直接模拟法的基础上提出了一些更为有效地降低方差 σ^2 的方法，从而缩短了计算时间。这些方法有简单加权法（采用强迫碰撞，碰撞过程中加权），统计估计法，指数变换法等等。

从以上例子还可看出，应用M—C 方法所解决的问题大

致可分为两大类：第一类是，所求问题具有严格确定的数学形式，如求定积分值，求微分算子的特征值，求逆矩阵，解线性代数方程组，解积分方程以及解微分方程的某些边值问题等。对这类问题通常要转化为求概率（像§1中例2、例3）或转化为具有其它统计性质的问题，然后用M—C方法求解。第二类是，所要解的问题本身就具有随机性质，例如中子多次散射问题，反应堆临界问题，原子核物理学中的一些问题等等。

M—C方法作为计算数学的一个分支，已被广泛应用于很多领域中，尤其在原子能事业中得到了广泛的应用。这是因为原子能事业中遇到的很多物理问题是关于粒子的输运问题，而M—C方法解这方面问题是非常适宜的。M—C方法能解决两种、两种以上粒子的输运问题，如光子中子的联合输运问题，还可以解决更为复杂的粒子输运问题，例如在等离子体物理中，需要考虑粒子间的相互影响，像这类复杂问题，M—C方法都能解决。毫无疑问，随着电子计算机和现代技术的飞快发展，M—C方法将会得到更广泛地应用和发展。

第九章　谐波分析与快速傅里叶变换

§1. 引言

在科学研究的许多领域中，人们发现傅里叶变换对于问题的简化特别有用。尤其快速傅里叶变换，它基本上克服了时间域与频率域之间互相转换的计算障碍。因此，它成为谐波分析的重要的数学手段。

在有限多个等距离散数据的基础上进行谐波分析的工具是有限傅里叶变换或称离散傅里叶变换，这就是

正变换

$$F_k = \sum_{i=0}^{N-1} f_i W^{ik}, \quad k = 0, \ 1\cdots, \ N-1 \qquad (1.1)$$

逆变换

$$f_i = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} F_k W^{-ik}, \quad i = 0, \ 1, \ \cdots, \ N-1 \qquad (1.2)$$

其中$W = e^{-i2\pi/N}$。

这一对变换，表示了向量$(f_0, f_1, \cdots, f_{N-1})$与$(F_0, F_1, \cdots, F_{N-1})$之间的线性互逆关系。已知$(f_0, f_1, \cdots f_{N-1})$按显式(1.1)可计算未知的$(F_0, F_1, \cdots, F_{N-1})$；或者已知$(F_0, F_1, \cdots, F_{N-1})$按显式(1.2)计算未知的$(f_0, f_1, \cdots, f_{N-1})$。表面上看，这是一个很简单的“算术”问题。从式(1.1)或(1.2)可以看出，直接计算一个

N点离散傅里叶变换的工作量为N^2个复运算（一个复运算指一个复数乘法连同一个复数加法）。对于实际谐波分析中较大的N，特别对于“实时”的计算，这往往成为沉重的负担。于是，一九六五年，库利—图基发表了他们的算法，人们称之为“快速傅里叶变换”（Fast Fourier Transform，缩写为FFT），使得计算一个N点变换的工作量降至$N\log_2 N$个复运算，比传统的直接算法提高工效$N/\log_2 N$倍。当N很大时（实际问题往往是这样），这是数量级上的提高。例如$N=16$时为4倍，$N\approx 10^3$时约为100倍，$N\approx 10^6$时约为五万倍！用傅里叶变换于卫星摄影相卡作强化处理，对于10厘米见方的底片按间距1微米分线时，$M=10^4$，$N=M^2=10^8$（1亿），传统算法工作量为$N^2=10^{16}$（1亿亿），在每秒百万次量级的计算机上需要算三个世纪，而用快速算法工作量降至$N\log_2 N\sim 3\times 10^9$，一小时内可以解决！这种计算速度的提高，使科学分析的许多面貌完全改观，从而为数值谐波分析法在科学技术的许多方面（例如光谱、声谱分析，地震谱分析，晶体结构分析，滤波，数字信号处理，图形信息处理，天线、雷达、声纳、卫星摄影分析，全息图，以及医疗卫生上的心电图，电脑图，X光相片强化，微分方程数值求解等等）的广泛应用开辟了道路。因此，可以说它的重要性在于它使人们可以从一个全然不同的新观点去研究一些传统的领域。这类方法除了有快速的特点外，还有精确度比传统方法高，计算过程稳定，比较简单等特点。

§2. 离散傅里叶变换

设函数$f(x)$在区间$0\leq x\leq 2\pi$上N个等分点$2\pi l/N$，$l=0$

1，…，$N-1$处的值已知，用已知周期为2π的周期函数

$$\exp(ijx)=\cos(jx)+i\sin(jx),\quad j=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1$$

的线性组合

$$\sum_{j=0}^{N-1}F_j\exp(ijx), \tag{2.1}$$

作$f(x)$在这区间上的三角插值函数，其中系数F_j(一般是复数) 要求在点$2\pi l/N$，$l=0$，1，…，$N-1$，上满足

$$f(x)=\sum_{j=0}^{N-1}F_j\exp(ijx)\ ,$$

即

$$f(2\pi l/N)=\sum_{j=0}^{N-1}F_j\exp(ij2\pi l/N),\quad l=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1. \tag{2.2}$$

下面利用正交性确定系数F_j.

向量 $(1,\ \exp(ij2\pi/N),\ \cdots,\ \exp(ij2\pi(N-1)/N))$，$=0$，1，…，$N-1$，具有下面所说的正交性，即

$$\begin{cases}\sum_{l=0}^{N-1}e^{ij2\pi l/N}e^{-ik2\pi l/N}=0,\quad k\neq j, & (2.3)\\ \sum_{l=0}^{N-1}e^{ij2\pi l/N}e^{-ij2\pi l/N}=N, & (2.4)\end{cases}$$

$$k,\ j=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1.$$

(2.4) 式左边每一项都等于1，所以显然成立。为证 (2.3) 式，我们记

$$A=\sum_{l=0}^{N-1}e^{i(j-k)2\pi l/N}\ ,$$

这是首项为1，公比为 $e^{i(j-k)2\pi/N}\neq 1$ $(j\neq k,\ 0<|j-k|<N)$

的等比级数，则

$$A=\frac{1-\left[e^{i(j-k)2\pi/N}\right]^N}{1-e^{i(j-k)2\pi/N}}=0,$$

于是（2.3）式得证。

有了（2.3）和(2.4）式，就可求出F_j，为此，用$e^{-ik2\pi l/N}$、$0\leqq k\leqq N-1$，乘（2.2）式两端，并对l求和，即

$$\begin{aligned}&\sum_{l=0}^{N-1}f(2\pi l/N)e^{-ik2\pi l/N}\\&=\sum_{l=0}^{N-1}\sum_{j=0}^{N-1}F_j e^{ij2\pi l/N}e^{-ik2\pi l/N}\\&=\sum_{j=0}^{N-1}F_j\left[\sum_{l=0}^{N-1}e^{i(j-k)2\pi l/N}\right]=NF_k,\end{aligned}$$

于是得

$$F_k=\frac{1}{N}\sum_{l=0}^{N-1}f(2\pi l/N)e^{-ik2\pi l/N},\quad k=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1\quad(2.5)$$

由（2.5）式求F_k，叫做求$f(x)$的离散傅里叶变换。

快速算法的思想是，注意F_k的表达式中e^{-ikx}的周期性，就会发现这N个F_k中表面上有N^2个不同的项$e^{-ik2\pi l/N}$，而实际上只有N个是不同的，即1，$e^{-i2\pi/N}$，$\cdots$，$e^{-i2\pi(N-1)/N}$是互不相等的。把F_k各项先按$e^{-ik2\pi/N}$归类，合并同类项，即把同类项中的$f(2\pi l/N)$先加起来再同$e^{-ik2\pi l/N}$相乘，就可减少许多操作，特别当$N=2^k$时，操作次数可减少到$N\log_2 N$，这就大大节省了计算离散傅里叶变换的时间。

§3. 快速傅里叶变换

以下设$N=2^k$，k是正整数，令$W=e^{-i2\pi/N}$，则$W^N=1$，记

$$f_l = \frac{1}{N} f(2\pi l/N),$$

于是 (2.5) 式可简写成

$$F_j = \sum_{l=0}^{N-1} f_l W^{jl}, \quad j=0, 1, \cdots, N-1 \qquad (2.5')$$

下面在F_j中合并同类项，对 j 是偶数和奇数情形分别讨论。

一　对于j是偶数：　$j = 2j_1$

$$F_{2j_1} = \sum_{l=0}^{\frac{1}{2}N-1} f_l W^{2j_1 l} + \sum_{l=\frac{N}{2}}^{N-1} f_l W^{2j_1 l} = \sum_{l=0}^{\frac{1}{2}N-1} f_l W^{2j_1 l}$$

$$+ \sum_{l'=0}^{\frac{1}{2}N-1} f_{l'+\frac{N}{2}} (W^2)^{j_1(l'+\frac{N}{2})} = \sum_{l=0}^{\frac{1}{2}N-1} \left(f_l + f_{l+\frac{N}{2}}\right) (W^2)^{j_1 l},$$

$$j_1 = 0, 1, \cdots, \frac{N}{2}-1 \qquad (3.1)$$

和 (2.5′) 式比较，由于$W^2 = e^{-i2\pi/(N/2)}$，就知道这组偶数编号的F_j即F_0，F_2，…，F_{N-2}正好是$\left(f_l + f_{l+\frac{N}{2}}\right)$，$l=0,1,\cdots,\frac{N}{2}-1$，这$N/2$个数据的离散傅里叶变换。

二　对于j是奇数：$j = 2j_1 + 1$，

同样有

$$F_{2j_1+1} = \sum_{l=0}^{\frac{N}{2}-1} f_l W^{2j_1 l + l} + \sum_{l=\frac{N}{2}}^{N-1} f_l W^{2j_1 l + l}$$

$$= \sum_{l=0}^{\frac{N}{2}-1} \left[f_l W^l (W^2)^{j_1 l} + f_{l+\frac{N}{2}} W^{j_1 N} W^{\frac{N}{2}} W^l (W^2)^{j_1 l} \right]$$

$$= \sum_{l=0}^{\frac{N}{2}-1} W^l (f_l - f_{l+\frac{N}{2}}) (W^2)^{j_1 l},$$

$$j_1 = 0,\ 1,\ \cdots,\ \frac{N}{2} - 1 \qquad (3.2)$$

可见奇数编号的F_j，即F_1，F_3，…，F_{N-1}也正好是$\frac{N}{2}$个数据$W^l(f_l - f_{l+N})$，$l=0$，1，…，$\frac{N}{2}-1$的离散傅里叶变换。

这样，N个数据的傅里叶变换（2.5′）可以分成两个$\frac{N}{2}$个数据的傅里叶变换（3.1）和（3.2）。用（2.5′）式求F_0，F_1，…，F_{N-1}需要N^2个操作；用（3.1）和（3.2）式同样求F_0，F_1，…，F_{N-1}却只要$2\left(\frac{N}{2}\right)^2 = \frac{1}{2}N^2$个操作，一下子工作量就减少了一半，当然还须加上形成$(f_l + f_{l+\frac{N}{2}})$及$W^l(f_l - f_{l+\frac{N}{2}})$的操作，但这也不过是$N$。可见，这样分成奇偶求$F_j$确有好处。只要$N=2^k$，就可以对（3.1）和（3.2）式各再分一次奇偶，工作量又可减少一半。如此下去，一直最后做到第k次，每个F_j的表达式中都只有一项，至此离散傅里叶变换就完成了。所以，这个算法实现的关键就是下标的组织。

现在来计算工作量。假定 P_k是$2^k = N$个数据的傅里叶变换所需要的操作数，由上面分析得知

$$P_k \leqq 2P_{k-1} + 2^k,$$

显然 $P_0 = 0$，由归纳法递推

$$P_k \leqq 2(2P_{k-2} + 2^{k-1}) + 2^k = 2^2 P_{k-2} + 2 \cdot 2^k \leqq 2^3 P_{k-3} + 3 \cdot 2^k \leqq \cdots \leqq 2^k P_0 + k2^k = k2^k = N\log_2 N,$$

这就是说，用这种快速算法，其工作量不大于 $N\log_2 N$ 个操作。

§4. 快速傅里叶变换计算步骤举例

下面以$N = 2^k = 8$为例，说明计算步骤。先把f_0，f_1，…f_7依次存放。

第一步：把（3.1）中的$(f_l + f_{l+\frac{N}{2}})$，$l = 0$，1，2，3 放到前四个单元内，并另给这些单元一套号码是$j = 0$，2，4，6；同样把（3.2）中的 $W^l(f_l - f_{l+\frac{N}{2}})$ 放到后四个单元内，并另给这些单元一套号码是$j = 1$，3，5，7。

第二步：把这样得出的前四个单元作为 4 个数据的傅里叶变换再处理一次，即又把按（3.1）式得出的（此时$N = 4$）放在0，1两个单元，按（3.2）式得出的放在2,3两个单元，这四个单元号都重记为0，4，2，6；同样对后四个单元作一次。注意此时由于$N = 4$，（3.1）和（3.2）式中的 W 已为 $W^2 = e^{-i2\pi/4}$所代替。

第三步：即第 k 步把这样得出的四组，每组两个数据又

按（3.1）和（3.2）式再作一次，就得到所需要的F_i了。但顺序是 F_0，F_4，F_2，F_6；F_1，F_5，F_3，F_7。

最后要把F_i调成自然顺序，其原则是偶数号向前调，奇数号往后调。这也有三步：

第一步：把0，2，4，6号单元中的调到0，1，2，3号单元去；原在1，3，5，7号中的调到第4，5，6，7号单元中去。

第二步：分两段即0，1，2，3号一段；4，5，6，7号一段。在每段中再把偶数号单元内容调到前面两个单元，把奇数号单元内容往后两单元调。

第三步：把 $N=8$ 个单元分成四段，对每段再同样调一次。

这些计算和调动，都列在后表中，表示整个快速算法的过程。

为进一步说明算法思想，将下标 j，$k=0$，1，…，7 表为二进制形式：

$$j=(j_2,\ j_1,\ j_0)=j_2 2^2+j_1 2^1+j_0 2^0,\ j_0,\ j_1,\ j_2=0,\ 1;$$

$$k=(k_2,\ k_1,\ k_0)=k_2 2^2+k_1 2^1+k_0 2^0,\ k_0,\ k_1,\ k_2=0,1.$$

由
$$\begin{aligned} jk &= j_2(k_2 2^4+k_1 2^3+k_0 2^2)+j_1(k_2 2^3+k_1 2^2+k_0 2)\\ &\quad +j_0(k_2 2^2+k_1 2+k_0)\\ &\equiv j_2(k_0 2^2)+j_1(k_1 2^2+k_0 2^1)+j_0(k_2 2^2+k_1 2+k_0),\\ &\qquad\qquad (\mathrm{mod}\,2^3)\ . \end{aligned}$$

所以　　$W^{jk}=W^{j_2(k_1,0,0)}W^{j_1(k_2,k_0,0)}W^{j_0(k_2,k_1,k_0)}$。

记　　$F_k=F(k_2,\ k_1,\ k_0)$ 和 $f_j=f(j_2,\ j_1,\ j_0)$，

于是 $F(k_2,\ k_1,\ k_0)=\sum_{j=0}^{2^3-1} f_j W^{jk}=\sum_{j_0=0}^{1}\Big(\sum_{j_1=0}^{1}\Big(\sum_{j_2=0}^{1} f(j_2,\ j_1,\ j_0)$

$W^{j_2(k_2,0,0)}W^{j_1(k_1,k_2,0)}W^{j_0(k_2,k_1,k_0)}$,

这样就导出了递推过程

$$f^{(0)}(j_2,\ j_1,\ j_0)=f(j_2,\ j_1,\ j_0),$$

$$f^{(1)}(k_0,\ j_1,\ j_0)=\sum_{j_2=0}^{1}f^{(0)}(j_2,\ j_1,\ j_0)W^{j_2(k_2,0,0)}$$

$$=f^{(0)}(0,\ j_1,\ j_0)+f^{(0)}(1,\ j_1,\ j_0)W^{(k_2,0,0)},$$

$$f^{(2)}(k_0,\ k_1,\ j_0)=\sum_{j_1=0}^{1}f^{(1)}(k_0,\ j_1,\ j_0)W^{j_1(k_1,k_2,0)}$$

$$=f^{(1)}(k_0,\ 0,\ j_0)+f^{(1)}(k_0,\ 1,\ j_0)W^{(k_1,k_2,0)},$$

$$f^{(3)}(k_0,\ k_1,\ k_2)=\sum_{j_0=0}^{1}f^{(2)}(k_0,\ k_1,\ j_0)W^{j_0(k_2,k_1,k_0)}$$

$$=f^{(2)}(k_0,\ k_1,\ 0)+f^{(2)}(k_0,\ k_1,\ 1)W^{(k_2,k_1,k_0)},$$

$$F(k_2,\ k_1,\ k_0)=f^{(3)}(k_0,\ k_1,\ k_2).$$

把下标改写即得：

开　始：$f^{(0)}(k_2,\ k_1,\ k_0)=f(k_2,\ k_1,\ k_0)$,

第一步：$f^{(1)}(k_2,\ k_1,\ k_0)=f^{(0)}(0,\ k_1,\ k_0)+f^{(0)}(1,\ k_1,\ k_0)W^{(k_2,0,0)}$,

第二步：$f^{(2)}(k_2,\ k_1,\ k_0)=f^{(1)}(k_2,\ 0,\ k_0)+f^{(1)}(k_2,\ 1,\ k_0)W^{(k_1,k_2,0)}$,

第三步：$f^{(3)}(k_2,\ k_1,\ k_0)=f^{(2)}(k_2,\ k_1,\ 0)+f^{(2)}(k_2,\ k_1,\ 1)W^{(k_0,k_1,k_2)}$

结　束：$F(k_2,\ k_1,\ k_0)=f^{(3)}(k_0,\ k_1,\ k_2)$.

注意这个算法实现的关键在于下标的组织，在结束步要作下标的按位反转 $(k_2,\ k_1,\ k_0)\rightarrow(k_0,\ k_1,\ k_2)$，即

$$k=(k_2,\ k_1,\ k_0)\rightarrow(k_0,\ k_1,\ k_2)=k'$$

$0=(0,\ 0,\ 0)\rightarrow(0,\ 0,\ 0)=0$

$1=(0,\ 0,\ 1)\rightarrow(1,\ 0,\ 0)=4$

$2=(0,\ 1,\ 0)\rightarrow(0,\ 1,\ 0)=2$

$3=(0,\ 1,\ 1)\rightarrow(1,\ 1,\ 0)=6$

$4=(1,\ 0,\ 0)\rightarrow(0,\ 0,\ 1)=1$

$5=(1,\ 0,\ 1)\rightarrow(1,\ 0,\ 1)=5$

$6=(1,\ 1,\ 0)\rightarrow(0,\ 1,\ 1)=3$

$7=(1,\ 1,\ 1)\rightarrow(1,\ 1,\ 1)=7$

此外，每一步 W 的幂次码 $(k_2,\ 0,\ 0)$，$(k_1,\ k_2,\ 0)$，$(k_0,\ k_1,\ k_2)$ 也需要由 $(k_2,\ k_1,\ k_0)$ 作按位反转再分别左移2位、1位、0位得到。

$$(k_2,\ k_1,\ k_0)\rightarrow(k_0,\ k_1,\ k_2)\begin{cases}\text{左移2位}\ (k_2,\ 0,\ 0),\\ \text{左移1位}\ (k_1,\ k_2,\ 0),\\ \text{左移0位}\ (k_0,\ k_1,\ k_2).\end{cases}$$

因此，一个方便的办法是在开始步作反转，则以后就无须再作反转，即算法改为：

开　始：$f^{(0)}(k_2,\ k_1,\ k_0)=f(k_0,\ k_1,\ k_2)$，

第一步：$f^{(1)}(k_2,\ k_1,\ k_0)=f^{(0)}(k_2,\ k_1,\ 0)+f^{(0)}(k_2,\ k_1,\ 1)W^{(k_0,0,0)}$，

第二步：$f^{(2)}(k_2,\ k_1,\ k_0)=f^{(1)}(k_2,\ 0,\ k_0)+f^{(1)}(k_2,\ 1,\ k_0)W^{(k_1,k_0,0)}$，

第三步：$f^{(3)}(k_2,\ k_1,\ k_0)=f^{(2)}(0,\ k_1,\ k_0)+f^{(2)}(1,\ k_1,\ k_0)W^{(k_2,k_1,k_0)}$，

结　束：$F(k_2, k_1, k_0) = f^{(3)}(k_2, k_1, k_0)$。

这里，每一步W的幂次码 $(k_0, 0, 0)$，$(k_1, k_0, 0)$ (k_2, k_1, k_0) 直接由 (k_2, k_1, k_0) 左移2位、1位和0位得到。

显然，这一算法可推广到一般 $N = 2^m$的情况。为此，将$0 \leqq k \leqq N-1$的任意k表为二进制形式：

$$k = (k_{m-1}, \cdots, k_1, k_0) = k_{m-1}2^{m-1} + \cdots + k_1 2 + k_0 2^0, \quad k_0, k_1, \cdots, k_{m-1} = 0, 1.$$

于是有

$$f^{(0)}(k_{m-1}, \cdots, k_1, k_0) = f(k_0, k_1, \cdots, k_{m-1}),$$

$$f^{(s)}(k_{m-1}, \cdots, k_1, k_0) = f^{(s-1)}(k_{m-1}, \cdots, k_s, 0, k_{s-2}, \cdots, k_0) + f^{(s-1)}(k_{m-1}, \cdots, k_s, 1, k_{s-2}, \cdots, k_0) * W^{(k_{s-1}\cdots k_0, 0, \cdots 0)}, \quad s = 1, 2, \cdots, m$$

$$F(k_{m-1}, \cdots, k_1, k_0) = f^{(m)}(k_{m-1}, \cdots, k_1, k_0).$$

这里，每步每个分量需要一个复乘和一个复加，即一个所谓“复运算”，N个分量则要 N 个复运算，共有 $m = \log_2 N$步，总共$N \cdot m = N\log_2 N$个复运算。

这是一个简单而高效的算法。实践表明，即使对于很大的 N，计算过程也是稳定的。

编制程序时常采用矩阵法，下面给出快速傅里叶变换的矩阵法的程序：

```
SUBROUTINE FFTR(IPA,X1,X2, N, Y1, Y2,
SIGN, NUM, IG, L, K1, K2)
DIMENSION X1(N, 2) , X2(N, 2) , IG(IPA),
Y1(N), Y2(N) , L(N, 2)
```

```
      AG=2.0*3.1415926/FLOAT(N)
      IF(NUM.EQ.0) GOTO 4
      DO 5 I=1, N
      Y1(I)=X1(I, 2)
    5 Y2(I)=X2(I, 2)
    4 MM=NUM
    6 ME=0
      K1=1
      K2=2
      DO 7 K=1, IPA
      IG(K)=N/2**K
      IGK=IG(K)
      IAS=IGK
      M2=(2**K)-1
      IP=2**(K-1)
      LA=-IP
      DO 8 I=1, IAS
      LA=LA+IP
      MX=-IGK*2
      DO 8 M=ME, M2, 2
      MX=MX+IGK*2
      IPX=I+MX
      IPM=IPX+IGK
      AGP=LA*AG
      BB1=COS(AGP)
      BB2=SIGN*SIN(AGP)
```

```
      X1(IPX, K2) = X1(IPX, K1) + X1(IPM, K1)
      X2(IPX, K2) = X2(IPX, K1) + X2(IPM, K1)
      AA1 = X1(IPX, K1) - X1(IPM, K1)
      AA2 = X2(IPX, K1) - X2(IPM, K1)
      X1(IPM, K2) = BB1 * AA1 - BB2 * AA2
      X2(IPM, K2) = BB2 * AA1 + BB1 * AA2
    8 CONTINUE
      K3 = K2
      K2 = K1
      K1 = K3
    7 CONTINUE
      NP = 2
      NG = IPA
      DO 9 I = 1, N
    9 L(I, 1) = I - 1
      N1 = 1
      N2 = 2
      LEN = N * NP
      NGM = NG - 1
      DO 10 M1 = 1, NGM
      N3 = N2
      N2 = N1
      N1 = N3
      LEN = LEN/NP
      J1 = LEN/NP
      I = 0
```

```
      IX = NP * * (M1 - 1)
      DO 11 I1 = 1, IX
      DO 11 J = 1, NP
      DO 11 K = 1, J1
      I = I + 1
      KK = (I1 - 1) * LEN + J + (K - 1) * NP
   11 L(I, N1) = L(KK, N2)
   10 CONTINUE
      IF(MM.EQ.0) GOTO 12
      DO 13 I = 1, N
      J = L(I, N1) + 1
      X1(I, K2) = Y1(I)
      X2(I, K2) = Y2(I)
      Y1(I) = X1(J, K1)
      Y2(I) = X2(J, K1)
      X1(I, 1) = X1(I, K2)
   13 X2(I, 1) = X2(I, K2)
      MM = 0
      GOTO 6
   12 DO 14 I = 1, N
      J = L(I, N1) + 1
      X1(J, K2) = X1(J, K1)
   14 X2(I, K2) = X2(J, K1)
      IF(SIGN.LT.0.0) RETURN
      XN = FLOAT(N)
      DO 15 I = 1, N
```

```
      Y1(I) = Y1(I)/XN
      Y2(I) = Y2(I)/XN
      X1(I, K2) = X1(I, K2)/XN
15    X2(I, K2) = X2(I, K2)/XN
      RETURN
      END
```

程序功能

本程序用浮点实数运算（即将复数分成实部和虚部分别进行运算）可以对一个或者两个复数序列（若虚部为零，则为实数序列）同时进行有限的、离散的正的或逆的快速傅里叶变换。

使用说明

1。子程序语句

SUBROUTINE FFTR(IPA, X_1, X_2, N, Y_1, Y_2, SIGN, NUM, IG, L, K_1, K_2)

2。哑元说明

N：整变量，输入参数，为变换的采样点数。

IPA：整变量，输入参数，变换的采样点数 $N = 2^{IPA}$ 的指数值。

K_1，K_2：整变量，输出参数，控制信息。

X_1：$N \times 2$ 个元素的二维实数组，输入参数。正变换时，$X_1(I, 1)$，$I = 1, 2, \cdots, N$ 存放需要变换的第一个复数序列 $X^{(1)}(i)$，$i = 1, 2, \cdots, n$ 的实部值。若仅对一个复数序列进行变换时，实部值也是存于 $X_1(I, 1)$ 中，$i = 1, 2, \cdots N$。$X_1(I, 2)$，$I = 1, 2, \cdots, N$，存放需要变换的第二个复数序列 $X^{(2)}(i)$，$i = 1, 2, \cdots,$

n的实部值。同样，逆变换时，相应地存放序列 $F^{(1)}(j)$ 和 $F^{(2)}(j)$，$j=1, 2, \cdots n$的实部值。也是输出参数，当仅变换一个复数序列时，$X_1(I, K_2)$，$I=1, 2, \cdots N$，$K_2=1$（或2）存放变换结果的实部值。若同时对两个复数序列$X^{(1)}(i)$，$X^{(2)}(i)$，$i=1, 2, \cdots, n$进行变换时，则$X_1(I, K_2)$，$I=1, 2, \cdots, N$，$K_2=1$（或2）存放第二个复数序列的变换结果的实部值。

X_2：$N\times 2$ 个元素的二维实数组，输入参数。正变换时，$X_2(I, 1)$，$I=1, 2, \cdots, N$ 存放需要变换的第一个复数序列$X^{(1)}(i)$，$i=1, 2, \cdots, n$的虚部值。若仅对一个复数序列进行变换时，虚部值也是存于该数组中。$X_2(I, 2)$，$I=1, 2, \cdots, N$，存放需要变换的第二个复数序列$X^{(2)}(i)$，$i=1, 2, \cdots, n$ 的虚部值。同样，逆变换时，相应地存放序列$F^{(1)}(j)$和$F^{(2)}(j)$，$j=1, 2, \cdots, n$ 的虚部值。也是输出参数，当仅变换一个复数序列时，$X_2(I, K_2)$，$I=1, 2, \cdots, N$，$K_2=1$（或2）存放变换结果的虚部值。若同时对两个复数序列 $X^{(1)}(i)$，$X^{(2)}(i)$，$i=1, 2, \cdots, n$ 进行变换时，则$X_2(I, K_2)$ $I=1, 2, \cdots, N$，$K_2=1$(或2) 存放第二个复数序列的结果变换的虚部值。

Y_1，Y_2：N 个元素的一维实数组，输出参数，当同时对两个复数序列进行变换时，$Y_1(I)$ 和$Y_2(I)$，$I=1$ 2，$\cdots$，N，分别存放第一个复数序列变换结果的实部值和虚部值。若只变换一个复数序列时，则Y_1和Y_2就不存放结果值。

SIGN：实变量，输入参数，控制信息。作正变换时，SIGN

置－1.0，作逆变换时，置1.0。

NUM：整变量，输入参数，控制信息。当仅对一个复数序列作变换时，NUM置0，当同时对两个复数序列作变换时，置1。

IG：IPA个元素的一维整数组，工作单元。调用前无需赋值，只作说明即可。

L：$N\times 2$ 个元素的二维整数组，工作单元，调用前无需赋值，只作说明即可。

方法简介

快速傅里叶变换，是快速计算离散傅里叶变换的一种计算方法。简单地说，就是用大量节省直接算法中乘—加运算的算法来实现如下有限的、离散的傅里叶变换公式：

$$F(i)=\sum_{k=0}^{N-1}X(k)e^{-2\pi ki/N},\quad i=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1 \qquad (1)$$

式中$j=\sqrt{-1}$。此式称为正的傅里叶变换。

$$X(k)=\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}F(i)e^{j2\pi ik/N},\quad k=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1 \qquad (2)$$

此式称为逆傅里叶变换。

由式（1）、（2）可见，傅里叶正逆变换除仅差一常数因子N^{-1}外，只有e指数项的指数符号相反。所以，只需对其中一个说明即可。

下面，仅就正变换情况予以说明。公式（1）中$X(k)$，$k=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1$，是信号（或函数）的采样值；$F(i)$，$i=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1$，是傅里叶变换的采样值。$N=2^P$（P为正整数）为采样点数。如果$X(k)$是一个时间序列，则$F(i)$具

有信号频谱的意义，$F(i)$ 的模值平方，通常称为信号的功率谱，即

$$S(n) = |F(n)|^2,$$

我们记$W_N = e^{-2\pi/N}$，则式（1）可写成

$$F(i) = \sum_{k=0}^{N-1} X(k) W_N^{ik}, \quad i = 0, 1, \cdots, N-1 \tag{3}$$

如用矩阵表示法表示，可写成为：

$$\begin{bmatrix} F(0) \\ F(1) \\ \vdots \\ F(N-1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} W^{00} & W^{01} & \cdots W^{0(N-1)} \\ W^{10} & W^{11} & \cdots W^{1(N-1)} \\ & \cdots & \\ W^{(N-1)0} & W^{(N-1)1} & \cdots W^{(N-1)(N-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(0) \\ x(1) \\ \vdots \\ x(N-1) \end{bmatrix} \tag{4}$$

从（4）式出发，简单介绍一下矩阵法的过程。它是按照一定原则采取重排元素位置并给系数矩阵适当分解的一种算法。例如，取$N = 2^2 = 4$进行分析。将（4）式改写为

$$\begin{bmatrix} F(0) \\ F(1) \\ F(2) \\ F(3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} W^{00} & W^{01} & W^{02} & W^{03} \\ W^{10} & W^{11} & W^{12} & W^{13} \\ W^{20} & W^{21} & W^{22} & W^{23} \\ W^{30} & W^{31} & W^{32} & W^{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(0) \\ x(1) \\ x(2) \\ x(3) \end{bmatrix} \tag{5}$$

对(5)式按下表原则，改变矩阵元素的位置：

序号		反转号	
十进制数	二进制数	二进制	十进制
0	00	00	0
1	01	10	2
2	10	01	1
3	11	11	3

得到

$$\begin{bmatrix} F(0) \\ F(2) \\ F(1) \\ F(3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & W^2 & W^4 & W^6 \\ 1 & W^1 & W^2 & W^3 \\ 1 & W^3 & W^6 & W^9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(0) \\ x(1) \\ x(2) \\ x(3) \end{bmatrix} \tag{6}$$

当$N=4$，$W_N^{N/2}=-1$，于是（6）式系数矩阵可进一步分解为

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & W_4^2 & 1 & W_4^2 \\ 1 & W_4^1 & W_4^2 & W_4^3 \\ 1 & W_4^3 & W_4^2 & W_4^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & W_4^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & W_4^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & W_4 & 0 & -W_4 \end{bmatrix}$$

因此，

$$\begin{bmatrix} F(0) \\ F(2) \\ F(1) \\ F(3) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & W_4^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & W_4^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & W_4 & 0 & -W \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x(0) \\ x(1) \\ x(2) \\ x(3) \end{bmatrix}$$

令

$$\begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_1(1) \\ x_1(2) \\ x_1(3) \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & W_4 & 0 & -W_4 \end{vmatrix} \begin{pmatrix} x(0) \\ x(1) \\ x(2) \\ x(3) \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} x(0)+x(2) \\ x(1)+x(3) \\ x(0)-x(2) \\ [x(1)-x(3)]W_4 \end{vmatrix}$$

得到

$$\begin{vmatrix} F(0) \\ F(2) \\ F(1) \\ F(3) \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} x_1(0)+x_1(1) \\ x_1(0)-x_1(1) \\ x_1(2)+x_1(3) \\ x_1(2)-x_1(3) \end{vmatrix}$$

由此可见，经这样重排后分解，完成变换只需8个加法，一个乘法。而原直接法需要12个加法，16个乘法。

对于$N=2^3=8$的情形，按上述类同的作法，完成变换只需24个加法，5个乘法。而直接法需要56个加法，64个乘法。因此，大大地减少了计算量。当 $N=8$ 时，$W_N=W_8^4=-1$，$W_8^2=W_4=-j$。实际上，由$x(i)$求出 $x_1(i)$ 之后，可通过两个计算$N=4$的结果来实现。

当 $N=2^P$ (P是正整数) 时，可类似计算。不过，$x_1(i)$被分成两段，每段按 $N=2^{P-1}$ 的情形进行，然后 $x_2(i)$被分成四段，每段按照 $N=2^{P-2}$ 的情形进行，如此等等。在P步之后，得到如下表示式：

$$\begin{pmatrix} x_P(0) \\ x_P(1) \\ x_P(2) \\ \vdots \\ x_P(N-2) \\ x_P(N-1) \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} x_{P-1}(0)+x_{P-1}(1) \\ x_{P-1}(0)-x_{P-1}(1) \\ x_{P-1}(2)+x_{P-1}(3) \\ \vdots \\ x_{P-1}(N-2)+x_{P-1}(N-1) \\ x_{P-1}(N-2)-x_{P-1}(N-1) \end{vmatrix}$$

最后，将$x_P(i)$ 适当重排得$F(j)$，$j=i_{P-1}i_{P-2}\cdots i_1 i_0$其中$i_l$是二进制数 ($l=P-1,\ P-2,\ \cdots,\ 0$) 0 或 1。这样，$F(i_{P-1}i_{P-2}\cdots i_1 i_0)=x_P(i_0 i_1\cdots i_{P-2}i_{P-1})$，这就是快速傅里叶变换矩阵法的过程。这种算法，当$N$越大时，效果越显著。

例题

对半正弦函数

$$x(t)=\begin{cases} A\sin\pi ft & 0\leqq t\leqq T, \\ 0 & 0>t>T, \end{cases}$$

进行傅里叶变换，并求其精确解析值。在取采样点$N=512$的情况下，使$A=1$，$T=5.12$，$\Delta t=0.01$，和$\Delta f=1/5.12$，得计算结果如下：

其正傅里叶变换为（值以模式表示）

$$F(f)=\int_{-\infty}^{\infty}x(t)e^{-i2\pi ft}dt,$$

精确解析式为（模式）

$$|G(f)|=\frac{2AT}{\pi}\left|\frac{\cos\pi fT}{1-4f^2T^2}\right|.$$

计算结果与精确结果（前12个）见下表。

两点说明

1.实函数的傅里叶变换算法

在实际应用中，多数情况下原函数是实数（它的傅氏变换一般还是复的），当然可以直接套用复函数的傅氏变换的标准算法，但很不经济。设有实数列$u_j(j=0,1,\cdots,N-1)$，由于

$$u=u_j^*,\ j=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1$$

	|F (k) |(计算结果)		|G (t) |(精确值)
|F(1)|	0.32594832 E 01	|G(1)|	0.32594933 E 01
|F(2)|	0.10865079 E 01	|G(2)|	0.10864978 E 01
|F(3)|	0.21730977 E 00	|G(3)|	0.21729955 E 00
|F(4)|	0.93138578 E－01	|G(4)|	0.93128373 E－01
|F(5)|	0.51748214 E－01	|G(5)|	0.51737989 E－01
|F(6)|	0.32934390 E－01	|G(6)|	0.32924175 E－01
|F(7)|	0.22803883 E－01	|G(7)|	0.22793659 E－01
|F(8)|	0.16725557 E－01	|G(8)|	0.16715359 E－01
|F(9)|	0.12792559 E－01	|G(9)|	0.12782327 E－01
|F(10)|	0.10101538 E－01	|G(10)|	0.10091310 E－01
|F(11)|	0.81793886 E－02	|G(11)|	0.81691561 E－02
|F(12)|	0.67586598 E－02	|G(12)|	0.67484333 E－02

其傅氏变换U_1必须满足关系式

$$U_1 = U^*_{N-K}, \qquad k = 0,\ 1,\ \cdots,\ N-1$$

因此有节约的潜力。下面举两种处理方法，都是间接套用标准算法，但工作量可以节省一半。

(1) 用一个N点复变换来计算两个N点实变换$a_j \sim A_k$，$b_j \sim B_k$。

作复向量

$$c_j = a_j + ib_j,\quad j=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1$$

套用标准算法 $c_j \sim C_k$，$k=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1$。由线性迭加原理$C_k = A_k + iB_k$，所以$C^*_{N-K} = (A_{N-K} + iB_{N-K})^* = A^*_{N-K} \quad iB^*_{N-K}$，另一方面，因为$A_K = A^*_{N-K}$，$B_K = B^*_{N-K}$，因此有

$$C^*_{N-K} = A_K - iB_K,$$

于是有

$$\left.\begin{aligned} A_k &= \frac{1}{2}\left(C_K + C^*_{N-K}\right) \\ B_k &= \frac{1}{2i}\left(C_K - C^*_{N-K}\right) \end{aligned}\right\} \quad k=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1$$

(2) 用一个N点复变换来计算一个$2N$点实变换$u_j \sim U_k$。

作复向量

$$c_j = a_j + ib_j,$$

式中 $\quad a_j = u_{2j},\ b_j = u_{2j+1},\ j=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1$

套用标准算法$c_j \sim C_k = A_k + iB_k$，$j$，$k=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1$

此处A_k，B_k用上面 (1) 中公式计算。又由于

$$U_k = \sum_{j=0}^{2N-1} u_j W_{2N}^{-jk} = \sum_{j=0}^{N-1}\left(u_{2j} W_{2N}^{-2jk} + u_{2j+1} W_{2N}^{-(2j+1)k}\right)$$

$$= \sum_{j=0}^{N-1}\left(a_j W_N^{-jk} + b_j W_N^{-jk} \cdot W_{2N}^{-k}\right) = A_k + B_k W_{2N}^{-k},$$

$$k=0,\ 1,\ \cdots,\ 2N-1$$

和 $A_{N+k}=A_k$，$B_{N+k}=B_k$，$W_{2N}^{-(N+k)}=W_{2N}^{-K}W_{2N}^{-N}=-W_{2N}^{-K}$，

因此有

$$\left.\begin{aligned}U_K&=A_K+B_KW_{2N}^{-K}\\U_{N+K}&=A_K-B_KW_{2N}^{-K}\end{aligned}\right\}\quad k=0,\ 1,\ \cdots,\ N-1$$

2.W_N^l的计算，$l=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ \frac{N}{2}-1$。

由 $W_N^l=e^{-i2\pi l/N}=\cos(2\pi l/N)-i\sin(2\pi l/N)$，

把正弦、余弦简记为

$$C_l=\cos(2\pi l/N)\ ,\quad S_l=\sin(2\pi l/N)\ ,$$

求C_l和S_l时不必每个都用标准子程序求，可以只用子程序求$C_1=\cos(2\pi/N)$，$S_1=\sin(2\pi/N)$，其余的则可利用三角公式：

$$\begin{cases}\cos(l+1)x=\cos x\cos lx-\sin x\sin lx,\\\sin(l+1)x=\cos x\sin lx+\sin x\cos lx,\end{cases}$$

这样能减少操作。总之，用下列公式算$W_N^l=C_l-iS_l$

$$\begin{cases}C_0=1,\ S_0=0,\\C_1=\cos(2\pi/N),\ S_1=\sin(2\pi/N),\\C_{l+1}=C_1C_l-S_1S_l,\ S_{l+1}=S_1C_l+C_1S_l.\end{cases}$$

$$l=1,\ 2,\ \cdots,\frac{N}{2}-2.$$

$N=8$，$K=3$，表中 a_i 以 i 代表，$a_i \equiv f_i$，$C_j \equiv F_j$

单元号码		0	1	2	3	4	5	6	7
初始状态：a_i 按自然顺序存放		0	1	2	3	4	5	6	7
第一步	W					1	W^1	W^2	W^3
	临时编号 j	0	2	4	6	1	3	5	7
	内容	$0+4$	$1+5$	$2+6$	$3+7$	$0-4$	$W(1-5)$	$W^2(2-6)$	$W^3(3-7)$
第二步	W^2			1	W^2			1	W^2
	j	0	4	2	6	1	5	3	7
	内容	$0+4$ $+2+6$	$1+5$ $+3+7$	$0+4$ $-(2+6)$	$W^2[1+5$ $-(3+7)]$	$0-4$ $+W^2(2-6)$	$W(1-5)$ $+W^3(3-7)$	$0-4$ $-W^2(2-6)$	$W^2[W(1-5)$ $-W^3(3-7)]$
第 $K=3$ 步			1		1		1		1
	j	0	4	2	6	1	5	3	7
	内容	$0+4$ $+2+6$ $+1+5$ $+3+7$	$0+4$ $+2+6$ $-(1+5$ $+3+7)$	$0+4$ $-(2+6)$ $+W^2[1+5$ $-(3+7)]$	$0+4$ $-(2+6)$ $-W^2[1+5$ $-(3+7)]$	$0-4$ $+W^2(2-6)$ $+W(1-5)$ $+W^3(3-7)$	$0-4$ $+W^2(2-6)$ $-[W(1-5)$ $+W^3(3-7)]$	$0-4$ $-W^2(2-6)$ $+W^2[W(1$ $-5)-W^3$ $(3-7)]$	$0-4$ $-W^2(2-6)$ $-W^2[W(1$ $-5)-W^3$ $(3-7)]$
未按自然顺序的 C_j		C_0	C_4	C_2	C_6	C_1	C_5	C_3	C_7
恢复的顺序 C_j	第一步	C_0	C_2	C_1	C_3	C_4	C_6	C_5	C_7
	第二步	C_0	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	C_7
	第三步	C_0	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	C_7

第十章　加速求积法在计算环形电流的势和场中的应用

§1. 引言

在数学和物理的应用中，时常会碰到第一类反常积分的近似计算问题。例如，在有铁芯变压器的托卡马克装置上，估算铁芯和圆线电流圈的势和场以及给出初级绕组和偏磁绕组在等离子体区域产生的杂散场等，就需要计算下述类型的积分：

$$A_r=\int_0^{\infty}\frac{K_1(ka)}{1+(\mu-1)D}I_1(kr)\cos kz\,dk, \tag{1.1}$$

$$H_r=\int_0^{\infty}\frac{kK_1(ka)}{1+(\mu-1)D}I_1(kr)\sin kz\,dk, \tag{1.2}$$

$$H_z=\int_0^{\infty}\frac{kK_1(ka)}{1+(\mu-1)D}I_0(kr)\cos kz\,dk, \tag{1.3}$$

众所周知，用通常的机械求积（例如高斯——拉盖尔积分公式）不能解决上述问题。我们采用了加速求积法（亦称G或A变换法），获得了满意的结果。当z相当大时（例如$z=100$，200等），由于$\cos kz$，$\sin kz$急剧地在-1和$+1$之间变化，所以上面各式是激烈振荡函数的积分，通常采用Filon求积法[1,2]，我们建议同时使用加速求积和Filon求积法（即对加速求积法中的积分，用Filon求积法处理）。这

样，既发挥了加速求积提高积分收敛速率的作用，又发挥了Filon求积解决激烈振荡函数积分的功能。

通过工作实践，认为对于相当广泛的第一类反常积分，例如，当被积函数是常见的也是应用上很重要的一些类型：有理分式、指数函数、对数函数、三角函数、贝塞尔函数以及它们相互组合的函数等，采用加速求积法，是行之有效的。因此，加速求积法在应用方面具有一定的广泛性。

§2. 公式推导

考虑无限长均匀磁化（磁化率μ到处均匀）的铁芯及一线电流圈产生的势和场。设b，a分别表示铁芯及电流圈的半径，取圆柱坐标系（r，φ，z）（见图23）。因为具有轴对称性，所以是二维势和场的计算。

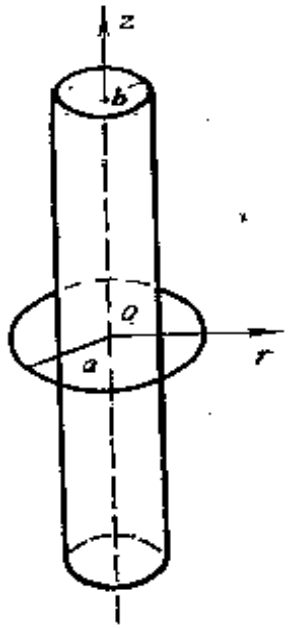


图 23

（一）矢势和场

根据麦克斯韦方程

$$\nabla \times \vec{H} = 4\pi \vec{j}, \qquad (2.1)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H}, \qquad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0. \qquad (2.3)$$

由假定μ均匀，所以有$\nabla \cdot \vec{H} = 0$，于是（2.1）的解为$\vec{H} = \nabla \times \vec{A}$，并将其代入（2.1）得

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{A}) = 4\pi \vec{j} \qquad (2.4)$$

在只有φ方向电流的情况下，矢势只有一个分量A_φ，在电流不

存在的区域$j_\varphi=0$，A_φ满足下述方程[3]：

$$\frac{\partial^2 A_\varphi}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial A_\varphi}{\partial r}-\frac{A_\varphi}{r^2}+\frac{\partial^2 A_\varphi}{\partial z^2}=0 \quad (2.5)$$

这是修正的贝塞尔方程，其通解

$$A_\varphi=\int_0^\infty [c_1(k)I_1(kr)+c_2(k)K_1(kr)][c_3(k)\cos kz + c_4(k)\sin kz]dk \quad (2.6)$$

利用对称性：$A_\varphi(r, z)=A_\varphi(r, -z)$，知$c_4(k)=0$，于是(2.6)式可写为：

$$A_\varphi=\int_0^\infty [c_1(k)I_1(kr)+c_2(k)K_1(kr)]\cos kz\,dk \quad (2.7)$$

把通解用于不同区域，并注意物理量的单值连续有限的要求，得到各区域的矢势是：

$$A_\varphi^{(1)}=\int_0^\infty c_1^1(k)I_1(kr)\cos kz\,dk \qquad (r<b), \quad (2.8)$$

$$A_\varphi^{(2)}=\int_0^\infty [c_1^2(k)I_1(kr)+c_2^2(k)K_1(kr)]\cos kz\,dk \qquad (b<r<a), \quad (2.9)$$

$$A_\varphi^{(3)}=\int_0^\infty c_2^3(k)K_1(kr)\cos kz\,dk \qquad (r>a) \quad (2.10)$$

由$H_r=-\frac{\partial A\varphi}{\partial z}$，$H_z=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rA_\varphi)$，可求出各区域场的表示式。

利用$r=b$和$r=a$处的边界条件，经过一系列演算，可定出上述系数如下：

$$c_1 = \frac{4aiK_1(ka)}{1+(\mu-1)D}, \qquad c_1^0 = 4aiK_1(ka),$$

$$c_2^0 = 4aiI_1(kb)(\mu-1)\frac{K_1(ka)}{K_1(kb)} \quad \frac{1-D}{1+(\mu-1)D},$$

$$c_2^s = 4aiI_1(kb)\left[\frac{K_1(ka)}{K_1(kb)} \quad \frac{(\mu-1)(1-D)}{1+(\mu-1)D} + \frac{I_1(ka)}{I_1(kb)}\right], \tag{2.11}$$

式中$D = D(k) = kbI_1(kb)K_0(kb)$，$I_1$，$K_0$，$K_1$等为虚宗量贝塞尔函数。

于是各区域的矢势和场是：在$r<b$区域

$$\left.\begin{aligned} A_\varphi &= 4ai\int_0^\infty \frac{K_1(ka)}{1+(\mu-1)D} I_1(kr)\cos kz\,dk, \\ H_r &= 4ai\int_0^\infty \frac{kK_1(ka)}{1+(\mu-1)D} I_1(kr)\sin kz\,dk. \\ H_z &= 4ai\int_0^\infty \frac{kK_1(ka)}{1+(\mu-1)D} I_0(kr)\cos kz\,dk. \end{aligned}\right\} \tag{2.12}$$

在$b<r<a$区域

$$\left.\begin{aligned} A_\varphi^0 &= 4ai\int_0^\infty \left[K_1(ka)I_1(kr) + I_1(kb)K_1(kr)\times \right. \\ &\qquad \left.\frac{K_1(ka)(\mu-1)(1-D)}{K_1(kb)[1+(\mu-1)D]}\right]\cos kz\,dk, \\ H_r^0 &= 4ai\int_0^\infty k\left[K_1(ka)I_1(kr) + I_1(kb)K_1(kr)\times \right. \\ &\qquad \left.\frac{K_1(ka)(\mu-1)(1-D)}{K_1(kb)[1+(\mu-1)D]}\right]\sin kz\,dk, \end{aligned}\right\} \tag{2.13}$$

$$H_z^0 = 4ai\int_0^\infty k\Big[K_1(ka)I_0(kr) - I_1(kb)K_0(kr)\times \frac{K_1(ka)(\mu-1)(1-D)}{K_1(kb)[1+(\mu-1)D]}\Big]\cos kzdk.$$

在$r>a$区域

$$A_\varphi^0 = 4ai\int_0^\infty I_1(kb)\Big[\frac{K_1(ka)(\mu-1)(1-D)}{K_1(kb)[1+(\mu-1)D]} + \frac{I_1(ka)}{I_1(kb)}\Big]\times K_1(kr)\cos kzdk,$$

$$H_r^e = 4ai\int_0^\infty kI_1(kb)\Big[\frac{K_1(ka)(\mu-1)(1-D)}{K_1(kb)[1+(\mu-1)D]} + \frac{I_1(ka)}{I_1(kb)}\Big]\times K_1(kr)\sin kzdk,$$

$$H_z^e = -4ai\int_0^\infty kI_1(kb)\Big[\frac{K_1(ka)(\mu-1)(1-D)}{K_1(kb)[1+(\mu-1)D]} + \frac{I_1(ka)}{I_1(kb)}\Big]\times K_0(kr)\cos kzdk.$$

(2.14)

（二）标势和场

由μ均匀，在无电流区，磁感应强度可用标势表示：

$$\vec{B} = \nabla\varphi,\quad B_r = \frac{\partial\varphi}{\partial r},\quad B_z = \frac{\partial\varphi}{\partial z},$$

此时φ满足拉普拉斯方程。同样，利用$r=b$和$r=a$处的边界条件，可得各区域的标势是：

$$\varphi_i = 4ai\int_0^\infty \frac{\mu K_1(ka)}{1+(\mu-1)D}I_0(kr)\sin kzdk \qquad (r<b),$$

(2.15)

$$\varphi_s = 4ai\int_0^\infty \left[I_0(kr)K_1(ka) + \frac{K_1(ka)}{K_1(kb)} \frac{(\mu-1)(1-D)}{1+(\mu-1)D} \times I_1(kb)K_0(kr) \right] \sin kz\,dk \qquad (b<r<a)\ ,$$

(2.16)

$$\varphi_e = -4ai\int_0^\infty \left[\frac{K_1(ka)}{K_1(Kb)} \frac{(\mu-1)(1-D)}{1+(\mu-1)D} + \frac{I_1(ka)}{I_1(kb)} \right] \times I_1(kb)K_0(kr)\sin kz\,dk \qquad (r>a)\ ,$$

(2.17)

对（2.15）—（2.17）式求导，可得各区域的磁场强度，与磁感应强度向量，其结果与矢势完全相同。当$\mu=1$时，其势和场过渡到真空中圆电流所产生的势和场。

§3. 加速求积法及其应用

假设

$$F(t)=\int_a f(x)\,dx \to S \quad (t\to\infty)\ ,$$

并且对某个$k>0$，令$R(t;\ k)=f(t+k)/f(t)$，$(f(t)\neq 0)$对充分大的t有$R(t;\ k)\neq 1$和$\lim\limits_{t\to\infty} R\ (t;\ k)=R(k)$。于是，对$t\geq a$有求积公式[4]：

$$G[F;\ t,\ k]=\frac{F(t+k)-R(t;\ k)F(t)}{1-R(t;\ k)}\ ,\ (1-R(t;\ k)\neq 0)$$

(3.1)

和

$$A[F;t,k]=\frac{F(t+k)-R(k)F(t)}{1-R(k)}\ .(1-R(k)\neq 0) \quad (3.2)$$

式中的$G[F; t, k]$、$A[F; t, k]$分别称为G变换和A变换（A变换亦称极限变换）。用G或A变换求积，我们称为加速求积法。文献[4]还证明了如下定理：

定理：如果存在某个$k>0$，使得

$$\lim_{t\to\infty} R(t; k) = R(k) \neq 1,$$

那末，当$t\to\infty$时，$G[F; t, k]$或$A[F; t, k]$比$F(t)$更快地收敛到S。

$$\left(\text{即}\lim_{t\to\infty}\frac{S-G[F; t, k]}{S-F(t)}=0,\ \lim_{t\to\infty}\frac{S-A[F; t, k]}{S-F(t)}=0\right)$$

当被积函数是常见的，也是应用上很重要的一些类型：有理分式、指数函数、对数函数、三角函数、贝塞尔函数以及它们互相组合的函数如

(一) $Q_n(x)\exp(-\alpha x)$，　($\alpha>0$，下同)

(二) $Q_n(x)\exp(-\alpha x)T(x)$，

(三) $Q_n(x)\ln(\alpha x)T(x)$，

(四) $Q_n(x)\exp(-\alpha x)BS_n(x)$，

容易验证此时积分

$$\int_a^\infty f(x)dx,$$

满足定理条件。因此，可用G或A变换，以加速求积。

其中$Q_n(x)$表示有理分式，$T(x)$表示三角函数，$BS_n(x)$表示n阶贝塞尔函数。容易看出，§ 2 中的全部积分，均可采用加速求积法。

§4. 数值例子

〔例1〕以 (1.2) 式为例，说明加速求积法的应用。为

讨论简便起见，取$\mu=1$。

不失一般性，假定$z>0$，将（1.2）式写为

$$H_r=\frac{1}{z^2}\int_0^{\infty}tK_1\left(\frac{a}{z}t\right)I_1\left(\frac{r}{z}t\right)\sin t\,dt,$$

由

$$R(t;\ \pi)=\frac{f(t+\pi)}{f(t)}$$

$$=\frac{(t+\pi)K_1\left[\frac{a}{z}(t+\pi)\right]I_1\left[\frac{r}{z}(t+\pi)\right]\sin(t+\pi)}{tK_1\left(\frac{a}{z}t\right)I_1\left(\frac{r}{z}t\right)\sin t}\to$$

$$-e^{\frac{t-a}{z}\pi}\approx 1,$$

所以（1.2）式可用（3.2）式求积，其积分值是：

$$S\simeq A[F;\ t,\ \pi]=\frac{1}{1+\exp\left[\left(\frac{r-a}{z}\right)\pi\right]}\{F(t+\pi)+F(t)\times$$

$$\exp\left(\left(\frac{r-a}{z}\right)\pi\right)\right] \qquad (4.1)$$

这里可取$t=N\pi$（N为正整数）

当$a=30$，$r=23$时，在保证三位有效数字的条件下，用（4.1）式计算了（1.2）、（1.3）式的积分，其中部分结果见表1：

表　　1

公式类别	(1,2)		(1,3)	
z	0.5	20	0.5	20
计算结果 (10^{-8})	0.1801	0.5644	3.485	0.6889

〔例2〕杂散场的积分：

$$B_z=\int_0^{\infty}4\alpha\left(\frac{\sin(kl_1)\cos(kd_1)}{l_1}-\alpha\frac{\sin(kl_2)\cos(kd_2)}{l_2}\cdots\right)\times$$

$$\left[\frac{I_1(k\alpha)}{I_1(k)}+\frac{(\mu-1)(1-D)}{1+(\mu-1)D}\frac{K_1(k\alpha)}{K_1(k)}\right]I_1(k)K_1(kr)\times$$

$$\sin kz\,dk \tag{4.2}$$

同例1，当$\mu=1$时，其积分值是：

$$S\simeq\sum_{i=1}^{8}A[F_i,\ t,\ \pi]=\sum_{i=1}^{8}\frac{1}{1+\exp\left[\left(\frac{a-r}{p_i}\right)\pi\right]}\Big[F_1(t+\pi)+$$

$$F_1(t)\exp\left(\left(\frac{a-r}{p}\right)_{\pi}\right)\Big] \tag{4.3}$$

其中

$$F_1(t)=b_i\int_0^t I_1\left(\frac{ax}{p}\right)K_1\left(\frac{rx}{p_i}\right)\cos x\,dx,$$

$$b_i=\begin{cases}(-1)^{i+1}\dfrac{a}{l_1p_i}, & i=1,\ 2,\ 3,\ 4\\ (-1)^{i}\dfrac{a\alpha}{l_2p_i}, & i=5,\ 6,\ 7,\ 8\end{cases}$$

$p_1=|l_1+d_1-z|$，$p_2=|l_1+d_1+z|$，$p_3=|l_1-d_1-z|$，$p_4=|l_1-d_1+z|$，$p_5=|l_2+d_2-z|$，$p_6=|l_2+d_2+z|$，$p_7=|l_2-d_2-z|$，$p_8=|l_2-d_2+z|$。

下面是$a=1.24762$，$\alpha=0.1418$，$l_1=0.55238$，$l_2=0.06071$，$d_1=3.40952$，$d_2=4.33214$，$r=1.5$时，保证三位有效数字用（4.3）式计算（4.2）式的部分结果。

表　2

z	0.25	0.50	0.75	1.00
Br值	-0.01904	-0.03965	-0.06358	-0.09304

〔例3〕 积分

$$\int_0^\infty e^{-\beta x}\sin mx\,dx \text{ 和} \int_0^\infty e^{-\beta x}\cos mx\,dx \qquad (4.4)$$

在$\beta=1$和$m=100$，200，…时，同时使用加速求积和Filon求积法，计算了（4.4）式，其部分结果如下：

表　3

积分		计算结果（$\times10^4$）		（真值$\times10^4$）
$\int_0^\infty e^{-x}\sin mx\,dx$	m	100	99.989999	99.990001
		200	49.998757	49.998750
$\int_0^\infty e^{-x}\cos mx\,dx$	m	100	0.99967111	0.99990001
		200	0.24991778	0.24999375

可见，计算结果与真值符合的相当好，分点数目相同，只用Filon求积法，仅符合二至三位有效数字。

参 考 文 献

〔1〕 *Chase, S. M. and Fosdick, L. D., Filon Quadrature, CACM*, 12 (1969), 453; 13 (1970), 263.

〔2〕 周蘊时，激烈振荡函数的近似积分，吉林大学自然科学学报，2 (1963)，147.

〔3〕 *Wolfgang K. H. Panofsky, Classical Electricity and Magnetism, Addison—Wesley Publishing Company, Inc. Printed in the United States of America, Second Printing August.* (1956), 138—139.

〔4〕 *Gray, H. L. et al., Nonlinear Transformation Related to the Evaluation of Improper Integrals, SIAM Journal on Numerical Analysis March.*, 3 (1967), 363—371.

第十一章　多重积分的数论网格法

§1. 引言

在工程计算中，经常要碰到大量的多重积分，如解决线圈的磁场、波纹度、电动力、电感和互感等，都归结为计算三至六重积分的问题。这些积分，其被积函数可以并不处处光滑，在保持一定精度的条件下，采用数论网格法比较有效。

我们知道，蒙特卡罗方法是计算多重积分的常用方法。这个方法的基本思想是对被积函数进行一系列的随机抽样，然后取平均值，用它来作为积分的估计值。这种方法的优点是编制程序简单，占用计算机内存单元较少；缺点是收敛速度慢，特别是所得到的只能是概率误差，而不是真正的误差。

近年来，数论方法[1-3]用于多重积分的数值计算及其应用方面，有了较大的进展。这个方法处理多重积分的近似计算的理论基础在于数论中的一致分布理论，即按照事先选定的最佳分布点列上的函数值所构成的单和来逼近多重积分，得到的不仅是真正的误差，而且这些肯定的误差竟比概率误差还要精密，并且业已证明，对于某些函数族来说，这种逼近的误差主阶已经臻于至善了。

对于积分区域异于单位超立方体的情形，根据数论网格

法的思想，导出了一般多重积分的求积公式，并相应给出了能同时计算积分限相同，被积函数（包括不处处光滑的函数）相异的$m \geqq 1$个$S \geqq 2$重积分的框图和程序。A.И.沙尔特科夫曾给出了$3 \leqq S \leqq 10$的一批最优系数表[4]，我们则在附录中补充了$S=2$的一些最优系数。

§2. 求积公式

我们知道，用M—C方法计算积分时，对固定的N来说，影响结果好坏的，主要是伪随机数的均匀性。为此，有人设计了高度均匀化的序列，代替伪随机数序列，这种序列称为拟随机数序列。例如，哈顿序列、极值系数最佳分布以及华罗庚—王元实分圆域序列等。H.M.柯洛波夫给出的数论网格法，就采用了极值系数最佳分布序列，其求积公式是：

$$\int_0^1\int_0^1\cdots\int_0^1 f(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_s)\,dx_1dx_2\cdots dx_s$$

$$=\frac{1}{N}\sum_{K=1}^{N} f\left(\left\{\frac{ka_1}{N}\right\},\ \left\{\frac{ka_2}{N}\right\},\ \cdots,\ \left\{\frac{ka_s}{N}\right\}\right)+E, \tag{2.1}$$

其中花括号{}表示取小数部分。（下同）

并且，柯洛波夫证明了[2]：对于任何素数$N>2$，存在整数$a_i=a_i(N)$ $(i=1,\ 2,\ \cdots,\ s)$，使得对于任何$f\in E_s^{\alpha}(c)$，公式（2.1）有误差估计式：

$$E=0\left(\frac{\ln^{\alpha(s-1)}N}{N^{\alpha}}\right). \tag{2.2}$$

具有上述性质的整数a_1，a_2，…，a_s称为按模N的最优

系数，而点集合

$$M=\left(\left\{\frac{ka_1}{N}\right\},\ \left\{\frac{ka_2}{N}\right\},\ \cdots,\ \left\{\frac{ka_s}{N}\right\}\right), \qquad (2.3)$$

称为单位超立方体网格。

所谓函数f属于族E_s^α（记为$f\in E_s^\alpha\ (c)$），是指周期函数$f(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_s)$（其中每个变量$x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_s$的周期等于1）的傅里叶系数$c(m_1,\ m_2,\ \cdots,\ m_s)$满足关系式：

$$|c(m_1,\ m_2,\cdots,\ m_s)|\leqq\frac{c}{(\overline{m_1}\cdot\overline{m_2}\cdots\overline{m_s})^\alpha}, \qquad (2.4)$$

其中$\overline{m_v}=max(1,\ |m_v|)\ (v=1,\ 2,\ \cdots,\ s)$，$\alpha$是大于1的实数，$c$是与$m_1,\ m_2,\ \cdots,\ m_s$无关的常量，

$$c(m_1,\ m_2,\ \cdots,\ m_s)=\int_0^1\int_0^1\cdots\int_0^1 f(x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_s)\times$$

$$e^{-2i\pi\sum_{j=1}^{s}m_jx_j}dx_1dx_2\cdots dx_s, \qquad (2.5)$$

可见，按上述方法直接判断一个周期函数是否属于族E_s^α，一般说来不是容易的。但是，在α为整数时，具有连续偏导数

$$\frac{\partial^{\alpha s}f}{\partial x_1^\alpha\partial x_2^\alpha\cdots\partial x_s^\alpha},$$

的周期函数属于族E_s^α。

下面，只叙述四个定理（不加证明），其中定理1是最优系数存在定理，定理2和定理3是最优系数的计算方法，定理4是将非周期函数化成周期函数。

定理1：设P是大于2的质数，$a_1,\ a_2,\ \cdots,\ a_s$是任意的非P倍的整数，并且它们满足估计式$H(a_1,\ a_2,\ \cdots,\ a_s)=$

$\ln^s(P)/P$。这时，对于属于族$E^s(c)$中的函数$f(x_1, x_2, \cdots, x_s)$求积公式：

$$\int_0^1\int_0^1\cdots\int_0^1 f(x_1, x_2, \cdots, x_s)dx_1dx_2\cdots dx_s$$

$$=\frac{1}{P}\sum_{k=1}^{P} f\left(\left\{\frac{ka_1}{P}\right\}, \left\{\frac{ka_2}{P}\right\}, \cdots, \left\{\frac{ka_s}{P}\right\}\right)+0\left(\frac{\ln^{as}(P)}{P^a}\right), \tag{2.6}$$

成立。

定理2：设对任意的整 Z，用等式

$$H(Z)=\frac{3^s}{P}\sum_{k=1}^{P}\left(1-2\left\{\frac{k}{P}\right\}\right)^2\left(1-2\left\{\frac{kZ}{P}\right\}\right)^2$$

$$\cdots\left(1-2\left\{\frac{kZ^{s-1}}{P}\right\}\right)^2 \tag{2.7}$$

定义函数$H(Z)$，这里P是大于S的质数。如果在$Z=a$时，使函数$H(Z)$在区间$1\leqq Z\leqq P-1$上达到极小，则整数$1, a, a^2, \cdots a^{s-1}$是按模$P$的最优系数。

考虑$(1-2\{x\})^2$是一偶函数，故$H(Z)$可表示成

$$H(Z)=\frac{3^s}{P}\left[1+2\sum_{k=1}^{\frac{P-1}{2}}\prod_{r=0}^{S-1}\left(1-2\left\{\frac{kZ^r}{P}\right\}\right)^2\right], \tag{2.7'}$$

$$1\leqq Z\leqq\frac{P-1}{2}.$$

用这种方法计算最优系数，需要作$O(P^2)$次基本运算。当P比较大时，采用下述方法可以减少工作量。

设$P=P_1P_2$，其中P_1，P_2是大于S的质数，同时P_2有阶$\sqrt{P_1}$，像定理2中一样，用P_1代替P，确定a，其次令

$$\widetilde{H}(Z)=\frac{3^s}{P}\left[1+2\sum_{K=1}^{\frac{P-1}{2}}\prod_{i=0}^{s-1}\left(1-2\left\{k\,\frac{P_1Z^i+P_2a^i}{P}\right\}\right)^2\right],\tag{2.8}$$

Z为任意整数。

定理3：如果在$Z=b$时，使函数$\widetilde{H}(Z)$在区间$1\leqq Z\leqq(P_2-1)/2$上达到极小，则整数p_1+p_2，p_1b+p_2a，…，$p_1b^{s-1}+p_2a^{s-1}$是按模p的最优系数。

上述定理皆适用周期函数。对于非周期函数f的积分，可将其周期化，即使$f\in H_s^\alpha$周期化。考虑充分光滑的非周期函数，假定α是大于1的整数，如果在一个单位超立方体内，函数$f(x_1,x_2,\cdots,x_s)$具有连续偏导数$\frac{\partial^{\alpha s}f}{\partial x_1^\alpha\cdots\partial x_s^\alpha}$，则称函数$f\in H_s^\alpha$。

把求一个满足下述两个条件的函数$\varphi\in H_s^\alpha$的过程，称为使函数$f\in H_s^\alpha$周期化。这两个条件是：

(1) $\varphi(x_1,\cdots,x_{v-1},0,x_{v+1},\cdots,x_s)=\varphi(x_1,\cdots,x_{v-1},1,x_{v+1},\cdots,x_s)$，$v=1,2,\cdots,s$。

(2) $$\int_0^1\int_0^1\cdots\int_0^1 f(x_1,x_2,\cdots,x_s)dx_1dx_2\cdots dx$$
$$=\int_0^1\int_0^1\cdots\int_0^1\varphi(x_1,x_2,\cdots,x_s)dx_1dx_2\cdots dx_s。$$

定理4：设$a_1,a_2,\cdots,a_s$是按模p的最优系数，如果$f\in H_s^\alpha$，并且φ是通过函数$f(x_1,x_2,\cdots,x_s)$周期化的方法得到的，则

$$\int_0^1\int_0^1\cdots\int_0^1 f(x_1,x_2,\cdots,x_s)dx_1dx_2\cdots dx$$

$$= \frac{1}{P}\sum_{k=1}^{P}\varphi\left(\left\{\frac{ka_1}{P}\right\}, \cdots\left\{\frac{ka_s}{P}\right\}\right)+O\left(\frac{\ln^{\alpha(s-1)}(P)}{P^2}\right) \tag{2.9}$$

下面提供两种函数周期化的方法：

第一种周期化方法：作

$$\varphi_1(x_1, \cdots, x_s)=\frac{1}{2}[f(x_1, x_2, \cdots, x_s)+f(1-x_1, x_2, \cdots, x_s)],$$

$$\varphi_2(x_1, \cdots, x_s)=\frac{1}{2}[\varphi_1(x_1, \cdots, x_s)+\varphi_1(x_1, 1-x_2, \cdots, x_s)], \quad \cdots$$

$$\varphi_s(x_1, \cdots, x_s)=\frac{1}{2}[\varphi_{s-1}(x_1, \cdots, x_{s-1}, x_s)+\varphi_{s-1}(x_1, \cdots, x_{s-1}, 1-x_s)], \tag{2.10}$$

取$\varphi(x_1, \cdots, x_s)=\varphi_s(x_1, \cdots, x_s)$。

第二种周期化方法：对所有变量作变量变换

$$x=\tau(z)=3z^2-2z^3 \tag{2.11}$$

得 $\varphi(x_1, x_2, \cdots, x_s)=f[\tau(x_1), \tau(x_2), \cdots, \tau(x_s)]\times\tau'(x_1)\tau'(x_2)\cdots\tau'(x_s)$。

可以证明，上两种周期化得到的φ满足条件（1）、(2)，且有$\varphi\in E_s^2(c)$，故其误差估计式：

$$E=0\left(\frac{\ln^{2(s-1)}P}{P^2}\right). \tag{2.9'}$$

Л.И.沙尔特科夫造出了用最优系数法计算多重积分的

表。表中，S代表积分重数；$N=P$代表求积公式的节点数；a_i $(i=1, 2, \cdots, s)$ 代表最优系数，并且对所有情况$a_1\equiv 1$；$H(a)-1$ (或 $\widetilde{H}(b)-1$) 代表误差标志数。对于$f\in E_s^a(c)$，积分公式有误差估计式

$$|E|\leq c\left(\frac{\pi^2}{6}\right)^{\frac{as}{2}}[H(a)-1]^{-\frac{a}{2}}.$$

下面，介绍怎样利用造出来的表，计算多重积分：

第一步：首先判断被积函数$f(x_1, x_2, \cdots, x_s)$是否属于族E_s^a，并把函数f周期化。

如果函数f在一个单位超立方体内具有连续偏导数，则$f\in E_s^a$。编程序常用的周期化方法是令$\tau(z)=3z^2-2z^3$，取

$$\varphi(x_1, \cdots, x_s)=f[\tau(x_1), \cdots, \tau(x_s)]\tau'(x_1)\cdots\tau'(x_s).$$

第二步：根据误差要求，查表$H(a)-1$ (或者 $\widetilde{H}(b)-1$)，找出相应的$N=P$(或$N=pq$)和$a_2, a_3, \cdots, a_s$ $(a_1\equiv 1)$，再利用求积公式 (2.1) 即可。其具体作法是

一 对积分限是定限的情形

$$I=\int_{c_s}^{d_s}\int_{c_{s-1}}^{d_{s-1}}\cdots\int_{c_1}^{d_1}f(z_1, z_2, \cdots, z_s)dz_1dz_2\cdots dz_s \tag{2.12}$$

为用数论网格法求积，先令$z_i=c_i+r_it_i$，其中$r_i=d_i-c_i$ $(i=1, 2, \cdots, s)$，将函数$f(z_1, z_2, \cdots, z_s)$变换到单位超立方体内；再令$t_j=(3-2x_j)x_j^2$，$j=1, 2, \cdots, s$，将函数$f(c_1+r_1t_1, c_2+r_2t_2, \cdots, c_s+r_st_s)$周期化；最后利用 (2.1) 式便得到了积分 (2.12) 的求积公式

$$I=6^s\prod_{i=1}^{s}r_i\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\varphi\left(\left\{\frac{ka_1}{N}\right\}, \cdots, \left\{\frac{ka_s}{N}\right\}\right)+E \tag{2.13}$$

式中

$$\varphi(x_1, x_2, \cdots, x_s) = \prod_{i=1}^{s} x_i(1-x_i) f[c_1 + r_1(3-2x_1)x_1, \cdots,$$
$$c_s + r_s(3-2x_s)x_s^2].$$

二　对积分限是变限情形

设c_s, d_s是有界常数，$c_i(z_{i+1}, \cdots, z_s)$，$d_i(z_{i+1}, \cdots, z_s)$ $(i=1, 2, \cdots, s-1)$ 是关于变量$z_{i+1}, \cdots, z_s$的有界单值连续函数，$f(z_1, \cdots, z_s)$ 在积分区域内连续有界，则$S\geqslant 2$重积分

$$I^* = \int_{c_s}^{d_s} \int_{c_{s-1}(z_s)}^{d_{s-1}(z_s)} \int_{c_{s-2}(z_{s-1}, z_s)}^{d_{s-2}(z_{s-1}, z_s)} \cdots \int_{c_1(z_2, \cdots z_s)}^{d_1(z_2, \cdots z_s)}$$
$$f(z_1, z_2, \cdots, z_s)\, dz_1 dz_2 \cdots dz_s, \qquad (2.14)$$

用数论网格法求积同上，令$z_i = c_i(z_{i+1}, \cdots, z_s) + r_i(z_{i+1}, \cdots, z_s)t_i$, $z_s = c_s + r_s t_s$, 其中$r_i(z_{i+1}, \cdots, z_s) = d_i(z_{i+1}, \cdots, z_s) - c_i(z_{i+1}, \cdots, z_s)$, $i=1, 2, \cdots, s-1$。将函数 $f(z_1, \cdots, z_s)$ 变换到单位超立方体内；再令$t_i = (3-2x_i)x_i^2$, $i=1, 2, \cdots, s$，将函数$f[c_1(z_2, \cdots, z_s) + r_1(z_2, \cdots, z_s)t_1, c_2(z_3, \cdots z_s) + r_2(z_3, \cdots, z_s)t_2, \cdots, c_s + r_s t_s]$ 周期化；最后利用 (2.1) 式就得到积分 (2.14) 的求积公式

$$I^* = 6^s \frac{r_s}{N} \sum_{K=1}^{N} \varphi\left(\left\{\frac{ka_1}{N}\right\}, \cdots, \left\{\frac{ka_s}{N}\right\}\right) + E \qquad (2.15)$$

其中

$$\varphi(x_1, \cdots, x_s) = \prod_{i=1}^{s-1} r_i(u_{i+1}, \cdots, u_s) \prod_{i=1}^{s} x_i(1-x_i) \times$$
$$f(u_1, u_2, \cdots, u_s, \cdots, u_{s-1}, u_s, u_s),$$

$$u_i, \cdots, {}_s = c_i(u_{i+1}, \cdots, {}_s) + r_i(u_{i+1}, \cdots, {}_s)(3-2x_i)(x_i^2),$$
$$i = 1, 2, \cdots, s-1$$
$$r_i(u_{i+1}, \cdots, {}_s) = d_i(u_{i+1}, \cdots, {}_s) - c_i(u_{i+1}, \cdots, {}_s),$$
$$i = 1, 2, \cdots, s-1$$
$$u_s = c_s + r_s(3-2x_s)x_s^2,$$
$$r_s = d_s - c_s.$$

显然，若$c_i(z_{i+1}, \cdots, z_s)$与$d_i(z_{i+1}, \cdots, z_s)$ $(i=1, 2, \cdots, s-1)$均为有界常数，则变为上述定限积分的情形。

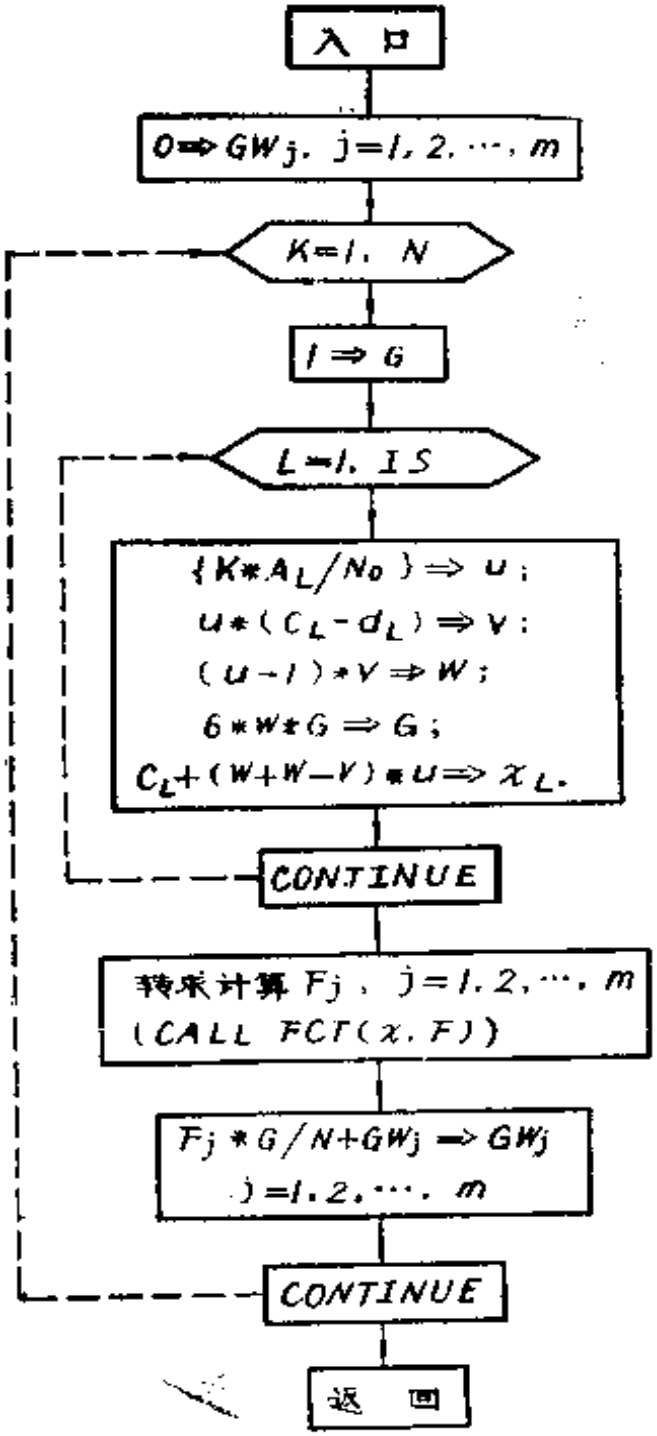
当积分中的被积函数不是处处光滑时，更合理的是将求积公式中的$\left\{\frac{ka_1}{N}\right\}$改为[4]：

$$\left\{\frac{ka_{i+1}}{N_0}\right\}, \qquad i = 1, 2, \cdots, s$$

这里的N_0，a_2，$\cdots$，a_{s+1}表示取高一维积分的表列值，且$N << N_0$，即N_0取尽可能大的值。实践表明，取$N_0 \simeq 10N$为宜。

§3. 框图和程序

```
      SUBROUTINE SLF(M, I, N, N0, A, C,
     D, X, F, GW)
      DIMENSION A(I), C(I),D(I), X(I),F(M),
     GW(M)
      DO 1 J = 1, M
    1 GW(J) = 0.0
      DO 2 K = 1, N
```


入 口
0⇒GWj. j=1, 2, ···, m
K=1, N
1⇒G
L=1, IS
{K*AL/N0}⇒U;
U*(CL-dL)⇒V;
(U-1)*V⇒W;
6*W*G⇒G;
CL+(W+W-V)*U⇒χL.
CONTINUE
转求计算 Fj, j=1, 2, ···, m
(CALL FCT(χ, F))
Fj*G/N+GWj⇒GWj
j=1, 2, ···, m
CONTINUE
返 回

```
      G = 1.0
      DO 3 L = 1, I
      U0 = FLOAT(K) * A(L)/FLOAT(N0)
      U = U0 - IFIX(U0)
      V = (C(L) - D(L)) * U
      W = (U - 1.0) * V
      G = 6.0 * W * G
3     X(L) = (W + W - V) * U + C(L)
      CALL FCT(X, F)
      DO 2 J = 1, M
2     GW(J) = G * F(J)/FLOAT(N) + GW(J)
      RETURN
      END
```

程序功能

本程序采用数论网格法，能同时计算积分限相同，被积函数（包括不处处光滑的函数）相异的$m \geqq 1$个$S \geqq 2$重积分。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE SLF(M, I, N, N_0, A, C, D, X, F, GW)

2. 哑元说明

M：整变量，输入参数，积分限相同，被积函数相异的积分个数。

I：整变量，输入参数，积分重数S。

N：整变量，输入参数，求积公式的节点数。

N_0：整变量，输入参数，一般取$N_0=N$。当函数不处处光滑时，N_0取$S+1$重积分的节点数，且$N_0>>N$。

A：I个元素的一维实数组，输入参数，存放最优系数 a_1，a_2，…，a_s。当函数不处处光滑时，A取$I+1$重积分的最优系数a_2，a_3，…，a_{s+1}。

C：I个元素的一维实数组，输入参数，存放积分下限值。

D：I个元素的一维实数组，输入参数，存放积分上限值。

X：I个元素的一维实数组，存放被积函数的自变量。

F：M个元素的一维实数组，存放被积函数值。

GW：M个元素的一维实数组，输出参数，存放积分结果。

3．所调用的过程

SUBROUTINE FCT(X, F)，表示计算被积函数的子程序段，其中X是I个元素的一维实数组，存放被积函数的自变量；F是M个元素的一维实数组，存放被积函数值。

根据（2.15）式，不难编出变限积分的程序。

§4. 应用实例

〔例1〕命

$$I_1=\int_0^1\int_{x_3}^{2x_3}\int_{x_2x_3}^{x_2x_3^2}x_1(x_2x_3)^3dx_1dx_2dx_3,$$

$$I_2=\int_0^1\int_0^1\int_0^1\int_0^1\int_0^1 32x_1x_2x_3x_4x_6dx_1dx_2dx_3dx_4dx_5,$$

$$I_3=\int_0^1\int_0^1\int_0^1\int_0^1\theta[u(u^2-7)\sin u-(6u^2-1)\cos u]\,dx_1dx_2dx_3dx_4,$$

其中 $n=6x_1x_2x_3x_4$，$\theta=\frac{\pi}{2}$，$\frac{\pi}{3}$，$\frac{\pi}{6}$。易知$I_3(\theta)=\sin\theta$。

利用文献〔4〕的表列值，计算结果如下：

积　分	$N=N_0$	计　算　结　果	真　值
I_1	701	−0.062497935	−0.062500000
I_2	2129	1.0004690	1.0000000
$I_3\ (\frac{\pi}{2})$	2129	1.00000440	1.00000000
$I_3\ (\frac{\pi}{3})$	2129	0.86599954	0.86602541
$I_3\ (\frac{\pi}{6})$	2129	0.49997141	0.50000000

〔例2〕计算$HL-1$装置中16组线圈的总电感

$$L=M\sum_{K=0}^{15}\sum_{i=1}^{4}\sum_{l=1}^{4}\int_{k\Delta\varphi_0+\varphi_i}^{k\Delta\varphi_0+\varphi_i+\Delta\varphi}d\tilde{\varphi}_2\int_{\varphi_l}^{\varphi_l+\Delta\varphi}d\tilde{\varphi}_1\int_0^{2\pi}d\theta_2\int_0^{2\pi}d\theta_1$$
$$\times\int_{r_a}^{r_b}dr_2\int_{r_a}^{r_b}dr_1\,\tilde{f}(r_1,\ r_2,\ \theta_1,\ \theta_2,\ \tilde{\varphi}_1,\ \tilde{\varphi}_2),\qquad(4.1)$$

其中

$$M=\frac{4\mu_0}{\pi}\left[\frac{n}{(r_b-r_a)\Delta\varphi}\right]^2,$$

$$\tilde{f}=\frac{r_1r_2\{\cos(\theta_2-\theta_1)-\sin\theta_1\sin\theta_2[1-\cos(\tilde{\varphi}_2-\tilde{\varphi}_1)]\}}{\{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos(\theta_2-\theta_1)+2(R+r_2\cos\theta_2)(R+r_1\cos\theta_1)[1-\cos(\tilde{\varphi}_2-\tilde{\varphi}_1)]\}^{\frac{1}{2}}}.$$

其参数选取如下：

R	r_a	r_b	n	μ_0	$\Delta\varphi_0$	$\Delta\varphi$	$\Delta\varphi'$
102	38.8	54.2	18	$4\pi\times10^{-6}$	22.5°	3.64375°	0.685°

$i,\ j$	1	2	3	4
$\varphi_i,\ \varphi_j$	0	$\Delta\varphi+\Delta\varphi'$	$2\Delta\varphi+\Delta\varphi'$	$3\Delta\varphi+2\Delta\varphi'$

在（4.1）式中，先对r_2积分，再命

$$\widetilde{\varphi_1}=\varphi_1+\varphi_i,\quad \widetilde{\varphi_2}=\varphi_2+k\Delta\varphi_0+\varphi_j,$$

于是（4.1）式化为

$$L=M\int_0^{\Delta\varphi}d\varphi_2\int_0^{\Delta\varphi}d\varphi_1\int_0^{2\pi}d\theta_2\int_0^{2\pi}d\theta_1\int_{r_a}^{r_b}dr_1$$
$$f(r_1,\ \theta_1,\ \theta_2,\ \varphi_1,\ \varphi_2)\ , \qquad (4.2)$$

式中

$$f=\sum_{K=0}^{17}\sum_{i=1}^{4}\sum_{j=1}^{4}c\left\{\sqrt{a+br_b+r_b^2}-\sqrt{a+br_a+r_a^2}\right.$$
$$\left.-\frac{b}{2}\ln\left(\frac{\frac{b}{2}+r_b+\sqrt{a+br_b+r_b^2}}{\frac{b}{2}+r_a+\sqrt{a+br_a+r_a^2}}\right)\right\},$$

$$a=r_1^2+2R(R+r_1\cos\theta_1)(1-\cos\varphi*)\ ,$$
$$b=2\{(R+r_1\cos\theta_1)(1-\cos\varphi*)\cos\theta_2-r_1\cos(\theta_2-\theta_1)\},$$
$$c=r_1(\cos\theta_1\cos\theta_2+\sin\theta_1\sin\theta_2\cos\varphi*)\ ,$$
$$\varphi*=k\Delta\varphi_0+\varphi_i-\varphi_1+\varphi_2-\varphi_1.$$

显然，函数$\widetilde{f}$和f在积分区域内不是处处光滑的。为了确保计算结果有四位有效数字，取六重积分的节点和最优系数，对（4.2）式进行计算，则得下表：

N	N_0	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	L
15019	100063	43307	15440	39114	43534	39955	0.17177

〔例3〕计算$HL-1$装置的主磁场

$$H_r=\sum_{m=1}^{16}\sum_{i=1}^{4}\int_0^{2\pi}d\theta\int_{m\Delta\varphi_0+\varphi_i}^{m\Delta\varphi_0+\varphi_i+\Delta\varphi}d\widetilde{\varphi}\int_{r_1}^{r_2}dr$$

$$\frac{Hr}{d^3}(r_0\sin\theta_0\sin\theta-R\cos\theta-r)\sin(\widetilde{\varphi}-\varphi_0),$$

$$H_\theta=\sum_{m=1}^{16}\sum_{i=1}^{4}\int_0^{2\pi}d\theta\int_{m\Delta\varphi_0+\varphi_i}^{m\Delta\varphi_0+\varphi_i+\Delta\varphi}d\widetilde{\varphi}\int_{r_1}^{r_2}dr$$

$$\frac{-Hr}{d^3}(R+r_0\cos\theta_0)\sin\theta\sin(\widetilde{\varphi}-\varphi_0),\quad(4.3)$$

$$H_\varphi=\sum_{m=1}^{16}\sum_{i=1}^{4}\int_0^{2\pi}d\theta\int_{m\Delta\varphi_0+\varphi_i}^{m\Delta\varphi_0+\varphi_i+\Delta\varphi}d\widetilde{\varphi}\int_{r_1}^{r_2}dr\frac{Hr}{d^3}\{r\cos(\widetilde{\varphi}-\varphi_0)-r_0\cos(\theta-\theta_0)+(r_0\sin\theta_0\sin\theta-R\cos\theta)[1-\cos(\widetilde{\varphi}-\varphi_0)]\}.$$

其中

$$H=\frac{nI}{(r_2-r_1)\Delta\varphi},$$

$$d^3=\{r_0^2+r^2-2r_0r\cos(\theta-\theta_0)+2(R+r_0\cos\theta_0)(R+r\cos\theta)[1-\cos(\widetilde{\varphi}-\varphi_0)]\}^{\frac{3}{2}}.$$

参数：$\varphi_0 = 0^0$，11.25^0；$\theta_0 = a\delta\theta_0$，$\delta\theta_0 = 20^0$，$a = 0$，1，…9。

R	r_1	r_2	n	l	r_0	$\Delta\varphi_0$	$\Delta\varphi$	$\Delta\varphi'$	$\Delta\varphi''$
102	38.8	54.2	18	2213.5	20	22.5^0	3.64375^0	6.555^0	0.685^0

i	1	2	3	4
φ_1	$-2\Delta\varphi - \Delta\varphi'$	$-\Delta\varphi$	0	$\Delta\varphi + \Delta\varphi''$

命

$$\tilde{\varphi} = m\Delta\varphi_0 + \varphi_1 + \varphi, \qquad \varphi_1^* = \tilde{\varphi} - \varphi_0,$$

则上述积分化为

$$\left.\begin{aligned}
H_r &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\Delta\varphi} d\varphi \int_{r_1}^{r_2} dr \sum_{m=1}^{16} \sum_{i=1}^{4} \frac{Hr}{d^3}(r_0\sin\theta_0\sin\theta - \\
&\qquad R\cos\theta - r)\sin\varphi_1^*, \\
H_\theta &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\Delta\varphi} d\varphi \int_{r_1}^{r_2} dr \sum_{m=1}^{16} \sum_{i=1}^{4} \frac{-Hr}{d^3}(R + r_0\cos\theta_0)\sin\varphi_1^*, \\
H_\varphi &= \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\Delta\varphi} d\varphi \int_{r_1}^{r_2} dr \sum_{m=1}^{16} \sum_{i=1}^{4} \frac{Hr}{d^3}\{r\cos\varphi_1^* - r_0\cos(\theta - \\
&\qquad \theta_0) + (r_0\sin\theta_0\sin\theta - R\cos\theta)(1 - \cos\varphi_1^*)\}.
\end{aligned}\right\} \qquad (4.4)$$

其中

$$d^3 = \{r_0^2 + r^2 - 2r_0 r\cos(\theta - \theta_0) + 2\ (R + r_0\cos\theta_0)\ (R + r\cos\theta)\ (1 - \cos\varphi_1^*)\}^{\frac{3}{2}}.$$

根据所给的参数，需计算H_r、H_θ、H_φ的各20个积分。注意到这些积分有积分限相同，被积函数相异，且有不少相

同或类似的部分的特点，适宜用该方法同时进行计算，一次就得到全部结果。这比起单个计算，可节省大量机器时间。为了确保结果有四位有效数字，取$N = N_0 = 2129$，$a_1 = 1$，$a_2 = 937$，$a_3 = 821$，计算结果列表如下：

φ_0 / H 高斯 / a	0°			11.25°		
	H_r	H_θ	H_φ	H_r	H_θ	H_φ
0	0.0065876	0.0015769	42867	−0.0030796	−0.0014409	40672
1	0.0077417	0.0040219	43257	−0.0039105	−0.0034628	41121
2	0.0080039	0.0064755	44425	−0.0066331	−.00054336	42463
3	0.0074072	0.0082185	46364	−0.0047135	−0.0060021	44670
4	0.0073965	0.0085526	49022	−0.0059205	−0.0081305	47658
5	0.0039473	−0.0025607	52264	−0.0033853	0.0075221	55243
6	0.0036770	0.0012709	55789	0.0030503	0.0098291	56071
7	0.0014766	−0.0047160	59080	−0.0021175	0.0026090	58589
8	0.0013733	0.0068613	61468	−0.0021482	0.0014205	61110
9	−0.0013524	−0.0032925	62346	0.0048082	0.0035789	62032

附录　S = 2的最优系数表

$N=P$	a_2	$H(a)-1$	$N=P$	a_2	$H(a)-1$
13	8	0.185 $E00$	701	271	0.145 $E-3$
19	8	0.995 $E-1$	907	261	0.920 $E-4$
71	21	0.972 $E-2$	1103	462	0.612 $E-4$
89	55	0.612 $E-2$	1201	493	0.558 $E-4$
113	35	0.473 $E-2$	1301	498	0.442 $E-4$
233	144	0.105 $E-2$	1597	987	0.291 $E-4$
251	70	0.985 $E-3$	1801	746	0.261 $E-4$
367	99	0.497 $E-3$	2003	765	0.196 $E-4$
503	186	0.261 $E-3$	2503	672	0.137 $E-4$
601	223	0.199 $E-3$	3001	1140	0.934 $E-5$

参 考 文 献

〔1〕华罗庚、王元，数值积分及其应用，科学出版社，1963.

〔2〕Н.М.Коробов, О приближенном вычисление кратных интегралов, ДАН СССР, 124(6), (1959), 1207—1210.

〔3〕Н.М.Коробов, Свойства и вычисление оптимальных коэффициентов, ДАН СССР, 132(5), (1960), 1009—1012.

〔4〕А.И.Салтыков, Таблицы для вычисления кратных интегралов методом оптимальных коэффициентов, ЖУР. Выч. МатИ Мат. ФИЗ, 3(1), (1963), 181—186.

第十二章　福克—普朗克方程的数值解

在受控核聚变的研究中，需要对高能中性注入磁镜装置中等离子体的行为有个初步了解，特别是要知道等离子体建立期间电子和离子的速度分布函数。而对这种分布函数的最合适的数学描述，就是由 Rosenbluth，Macdonald 和 Judd[1]导出的福克—普朗克（Fokker—Planck）方程。因此，需要对F—P方程进行数值求解。

§1. 基本方程和定解条件

在方磁阱近似[2]，各向同性位近似以及最低模近似[3]下，参看文〔3〕，可导出简化的F—P方程：

$$\frac{\partial f_a(v,\ t)}{\partial t} = \Gamma_a\left\{-\frac{1}{v^2}\frac{\partial}{\partial v}\left[f_a(v,\ t)\left(v^2\frac{\partial \widetilde{H}_a}{\partial v}+\frac{\partial \widetilde{F}}{\partial v}\right)\right]\right.$$

$$+\frac{1}{2v^2}\frac{\partial^2}{\partial v^2}\left[f_a(v,\ t)\,v^2\frac{\partial^2 \widetilde{F}}{\partial v^2}\right]$$

$$\left.-\frac{\lambda_a}{2v^3}f_a(v,\ t)\frac{\partial \widetilde{F}}{\partial v}\right\}+S_a(v,\ t)\ . \tag{1.1}$$

式中Rosenbluth位[4]：

$$\widetilde{H}_a(v,\ t) = 4\pi\sum_b \frac{m_a+m_b}{m_b}\left[\int_0^v f_b(v',\ t)\frac{v'^2}{v}dv' + \int_v^\infty f_b(v',\ t)v'dv'\right],$$

$$\widetilde{F}(v,\ t) = 4\pi\sum_b\left[\int_0^v f_b(v',\ t)v\left(1+\frac{1}{3}\frac{v'^2}{v^2}\right)v'^2dv' + \int_v^\infty f_b(v',\ t)\left(1+\frac{1}{3}\frac{v^2}{v'^2}\right)v'^3dv'\right],$$

$$\lambda_a = \frac{1}{\log_{10}(R_{eff})},\qquad R_{eff} = \frac{R}{1+\frac{e_a\phi}{E}},$$

f_a是a粒子的分布函数，S_a是源分布函数，

$$\Gamma_a = \frac{4\pi e_a^4}{m_a^2}\ln D,$$

lnD是库仑对数，e_a、m_a分别是粒子的电荷和质量。

再引入无量纲变元$x=\frac{v}{v_0}$，这里v_0是特征速度为常量，和$\tau=\left(\frac{1}{2}\Gamma_e K_e/v_0^3\right)t$等，则相应（1.1）式的电子和离子分布函数的方程变为：

$$\frac{\partial f}{\partial\tau} = A\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + B\frac{\partial f}{\partial x} + Cf + D, \qquad (1.2)$$

$$\frac{\partial g}{\partial\tau} = F\frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + G\frac{\partial g}{\partial x} + Hg + L. \qquad (1.3)$$

其初始条件为：

$$\begin{cases} f(x,\ 0) = 2.46\exp(-1.5x^2), \\ g(x,\ 0) = S_1(x) = \exp[-100(x-1)^2], \end{cases} \tag{1.4}$$

边界条件为：

$$\begin{cases} \lim\limits_{x\to\infty} f(x,\ \tau) = \lim\limits_{x\to\infty} g(x,\ \tau) = 0, \\ \dfrac{\partial f}{\partial x}\Big|_{x=0} = \dfrac{\partial g}{\partial x}\Big|_{x=0} = 0, \end{cases} \tag{1.5}$$

其中

$$\begin{aligned} &A = \frac{2}{3}[\delta(f) + K\delta(g)], \\ &B = \frac{4}{3x}\left\{\wedge(f) + K\left[\mu\frac{3}{2x}N(g) + \omega(g)\right]\right\}, \\ &C = 2(f + K\mu g) - P_0(x) - \frac{8}{3x^2}[\wedge(f) + K\wedge(g)], \\ &D = S_0(x)[l_0 + l_1 n_1(\tau)], \\ &F = \mu^2 A, \\ &G = \frac{4}{3x}\mu^2\left\{\left[-\frac{1}{\mu} - \frac{3}{2x}N(f) + \omega(f)\right] + K\wedge(g)\right\}, \\ &H = 2\mu(f + K\mu g) - H_1(x,\ \tau) - \mu^2 P_1(x) - \frac{8}{3x^2}[\wedge(f) \\ &\qquad + K\wedge(g)], \\ &L = S_1(x)[p_0 + p_1 n_1(\tau)]. \end{aligned} \tag{1.6}$$

这里$D(x,\ \tau)$ 是描述与电子源时间有关的项，$L(x,\ \tau)$ 是

描述与离子源时间有关的项，Hg是交换损失项。

$$\delta(f)=\frac{1}{x^3}E(f)+M(f),\qquad \omega(f)=M(f)-\frac{1}{2x^3}E(f),$$

$$\Lambda(f)=\frac{3}{2x}N(f)+\omega(f),\qquad M(f)=\int_x^\infty f(y,\ \tau)ydy,$$

$$N(f)=\int_0^x f(y,\ \tau)y^2dy,\qquad E(f)=\int_0^x f(y,\ \tau)y^4dy,$$

$H_1(x,\ \tau)=2.71\times10^{10}n_0x\sigma_{cx}(x)$，$\sigma_{cx}$是交换损失截面，

$$\mu=\frac{m_e}{m_i},\qquad K=-\frac{K_i}{K_e},$$

$$n_i(0)=K_i\int_0^\infty g(x,\ 0)x^2dx,\qquad n_e(0)=K_e\int_0^\infty f(x,0)x^2dx,$$

$$I_0=\frac{2v_0^3}{\Gamma_eK_e}\frac{1}{K_eN(S_e)}\frac{If^*}{V},$$

$$I_1=\frac{2v_0^3}{\Gamma_eK_e}\frac{1}{K_eN(S_e)}\left[\frac{IL}{V}\left(\frac{\overline{\sigma_t^iv_r}}{v_0}+\frac{\overline{\sigma_t^ev_r}}{v_0}\right)+n_0v(\sigma_i+\sigma_i^e)\right],$$

$$p_0=\frac{2v_0^3}{\Gamma_eK_e}\frac{1}{K_iN(S_i)}\frac{If^*}{V},$$

$$p_1=\frac{2v_0^3}{\Gamma_eK_e}\frac{1}{K_iN(S_i)}\left[\frac{IL}{V}\left(\frac{\overline{\sigma_t^iv_r}}{v_0}+\frac{\overline{\sigma_t^ev_r}}{v_0}\right)\right],$$

$$N(S_e)=\int_0^\infty S_e(x)x^2dx,\qquad N(S_i)=\int_0^\infty S_i(x)x^2dx,$$

逃脱几率P_i和P_e取为：

$$\begin{cases} P_i(x) = \dfrac{1}{4\log_{10}(R_{eff})_i}, \\ P_e(x) = \dfrac{1}{4\log_{10}(R_{eff})_e}. \end{cases} \tag{1.7}$$

计算中选用的参数如下：

初始等离子体密度$n_i(0) = n_e(0) = 10^6$个/cm^3；中性注入束的平均能量100千电子伏；单位体积的源强$I/V = 2.5$毫安/升；磁电离捕获效率$f^* = 2.76 \times 10^{-4}$；靶电离捕获长度$L = 12$cm；镜比$R = 1.82$；本底气体分子密度$n_0 = 1 \times 10^7$个/cm^3；中性原子靶电离截面平均值$1 \times 10^{-16}$cm^2；本底气体分子电离率的平均值$2 \times 10^{-16} v$cm^3/s；离子源分布$S_i(x) = \exp[-100(x-1)^2]$；电子源分布$S_e(x) = \exp[-10(x-1)^2]$；$v_0 = 4.38 \times 10^8$cm/s；电荷交换截面$\sigma_{cx}(x)$由下表的实验截面给出。

表　试验截面值和拟合值

x	0.2000	0.2449	0.2828	0.3162	0.3464	0.3742	0.4472	0.5000	0.5477
σ_{cx} ($10^{-17}cm^2$)	76.7	79.1	81.6	80.0	77.5	66.5	57.7	50.5	40.0
拟合值	76.7	79.1	81.6	76.4	71.8	68.5	56.4	48.2	40.8
x	0.5196	0.6708	0.7071	0.8366	0.8944	0.9486	1.0000	1.2247	1.4142
σ_{cx}	31.8	21.2	15.12	7.58	4.99	3.45	2.43	0.535	0.167
拟合值	34.1	21.9	16.3	6.9	4.7	3.31	2.31	0.555	0.164

所求诸量

1. 电子和离子的分布函数$f(x, \tau)$和$g(x, \tau)$；

2. 等离子体电位$e\phi = \frac{1}{2}m_e v_{cr}^2 = 54.6x_{cr}^2$ (ev)；

3. 粒子密度及平均能量：

$$\left.\begin{aligned} &n_e(\tau) = K_e I_2^-(\tau) \approx 1.69 \times 10^5 I_2^-(\tau), \\ &n_i(\tau) = K_i I_2^+(\tau) \approx 5.62 \times 10^6 I_2^+(\tau), \\ &E_e(\tau) = E_{e0}\frac{I_4^-}{I_2^-} \approx 54.6\frac{I_4^-}{I_2^-}, \\ &E_i(\tau) = E_{i0}\frac{I_4^+}{I_2^+} = 10^6\frac{I_4^+}{I_2^+}. \end{aligned}\right.$$

其中I_2^-，I_2^+；I_4^-，I_4^+分别是电子和离子分布函数的二阶和四阶矩。

4. 端损失流强：

$$\left.\begin{aligned} &\frac{d\overline{n_i}}{dt} = \left(\frac{d\overline{n_i}}{dt}\right)_{i-i} + \left(\frac{d\overline{n_i}}{dt}\right)_{i-e}, \\ &\frac{d\overline{n_e}}{dt} = \left(\frac{d\overline{n_e}}{dt}\right)_{e-i} + \left(\frac{d\overline{n_e}}{dt}\right)_{e-e}. \end{aligned}\right.$$

端损失累计数：

$$\left.\begin{aligned} &\overline{n_i}(\tau) = \int_0^\tau \frac{d\overline{n_i}}{dt}\left(\frac{t}{\tau}\right)d\tau, \\ &\overline{n_e}(\tau) = \int_0^\tau \frac{d\overline{n_e}}{dt}\left(\frac{t}{\tau}\right)d\tau. \end{aligned}\right.$$

其中

$$\left(\frac{d\overline{n_i}}{dt}\right)_{i-i}=-\frac{2K_i^2\Gamma_i}{v_0^3}\times\frac{2}{3}\int_0^\infty g(x,\ \tau)P_i(x)\wedge(g)dx,$$

$$\left(\frac{d\overline{n_i}}{dt}\right)_{i-e}=-\frac{2K_iK_e\Gamma_i}{v_0^3}\times\frac{2}{3}\int_0^\infty g(x,\ \tau)P_i(x)\wedge(f)dx,$$

$$\left(\frac{d\overline{n_e}}{dt}\right)_{e-i}=-\frac{2K_eK_i\Gamma_e}{v_0^3}\times\frac{2}{3}\int_0^\infty f(x,\ \tau)P_e(x)\wedge(g)dx,$$

$$\left(\frac{d\overline{n_e}}{dt}\right)_{e-e}=-\frac{2K_e^2\Gamma_e}{v_0^3}\times\frac{2}{3}\int_0^\infty f(x,\ \tau)P_e(x)\wedge(f)dx.$$

§2. 数值解法

我们要在$0\leqq x<\infty$，$\tau\geqq 0$的范围内，对方程（1.2）和（1.3）进行求解。所谓$x\to\infty$，意味着选取一个足够大的X_J，以致于包括电子分布的高能尾巴部分，当电子温度增加时，分布函数展宽。计算实践表明，取$X_J\approx 10$就可以了。计算中，取$X_J=12.5$，分点数$J=501$。

在$0\leqq x\leqq X_J$，$\tau\geqq 0$内，考虑有限差分网格。定义$x_j=j\Delta x$，$j=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ J$；$\tau^n=n\Delta\tau$，$n=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$，令$f_j^n=f(x_j,\ \tau^n)$；$A_j^n=A(f_j^n,\ g_j^n,\ x_j,\ \tau^n)$以及$B_j^n=B(f_j^n,\ g_j^n,\ x_j,\ \tau^n)$等。并且定义一、二阶差分：

$$\begin{cases}(\delta f)_j^n=\dfrac{f_{j+1}^n-f_{j-1}^n}{2\Delta x},\\[2ex](\delta^2 f)_j^n=\dfrac{f_{j+1}^n-2f_j^n+f_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}.\end{cases}$$

方程（1.2）和（1.3）用下面的差分方程代替：

$$\begin{cases} \dfrac{f_j^{n+1}-f_j^n}{\Delta\tau}=\rho\left[A_j^{n+1}(\delta^2 f)_j^{n+1}+B_j^{n+1}(\delta f)_j^{n+1}+C_j^{n+1}f_j^{n+1}\right. \\ \qquad\left.+D_j^{n+1}\right]+(1-\rho)\left[A_j^n(\delta^2 f)_j^n+B_j^n(\delta f)_j^n\right. \\ \qquad\left.+C_j^n f_j^n+D_j^n\right], \qquad (2.1) \\ \dfrac{g_j^{n+1}-g_j^n}{\Delta\tau}=\rho\left[F_j^{n+1}(\delta^2 g)_j^{n+1}+G_j^{n+1}(\delta g)^{n+1}+H^{n+1}g_j^{n+1}\right. \\ \qquad\left.+L_j^{n+1}\right]+(1-\rho)\left[F_j^n(\delta^2 g)_j^n+G_j^n(\delta g)_j^n\right. \\ \qquad\left.+H_j^n g_j^n+L_j^n\right]. \qquad (2.2) \end{cases}$$

其中 $\frac{1}{2}\leqq\rho\leqq 1$

再将（2.1）和（2.2）式写成联立的代数方程组，

$$\begin{cases} \alpha_{j-1}^{n+1}f_{j-1}^{n+1}+\beta_j^{n+1}f_j^{n+1}+\gamma_j^{n+1}f_{j+1}^{n+1}=\phi_j^n, \qquad (2.3) \\ \xi_{j-1}^{n+1}g_{j-1}^{n+1}+\eta_j^{n+1}g_j^{n+1}+\theta_j^{n+1}g^{jn+1}=\varphi_j^n. \quad j=1,\ 2,\ \cdots,\ J-1 \\ \qquad (2.4) \end{cases}$$

其中系数

$$\begin{cases} \alpha_{j-1}^n=\rho\dfrac{\Delta\tau}{\Delta x}\left(\dfrac{A_j^n}{\Delta x}-\dfrac{B_j^n}{2}\right), \\ \beta_j^n=-1-\rho\Delta\tau\left[\dfrac{2A_j^n}{(\Delta x)^2}-C_j^n\right], \\ \gamma_j^n=\rho\dfrac{\Delta\tau}{\Delta x}\left(\dfrac{A_j^n}{\Delta x}+\dfrac{B_j^n}{2}\right), \\ \phi_j^n=-\dfrac{1-\rho}{\rho}\gamma_j^n f_{j+1}^n-\left[1+\dfrac{1-\rho}{\rho}(1+\beta_j^n)\right]f_j^n \\ \qquad -\dfrac{1-\rho}{\rho}\alpha_{j-1}^n f_{j-1}^n-\rho\Delta\tau D_j^{n+1}-(1-\rho)\Delta\tau D_j^n, \quad (2.5) \end{cases}$$

$$
\begin{cases}
\xi_{j-1}^n = \rho\dfrac{\Delta\tau}{\Delta x}\left(\dfrac{F_j^n}{\Delta x} - \dfrac{G_j^n}{2}\right),\\[2ex]
\eta_j^n = -1 - \rho\Delta\tau\left[\dfrac{2F_j^n}{(\Delta x)^2} - H_j^n\right],\\[2ex]
\theta_j^n = \rho\dfrac{\Delta\tau}{\Delta x}\left(\dfrac{F_j^n}{\Delta x} + \dfrac{G_j^n}{2}\right),\\[2ex]
\varphi_j^n = -\dfrac{1-\rho}{\rho}\theta_j^n g_{j+1}^n - \left[1 + \dfrac{1-\rho}{\rho}(1+\eta_j^n)\right]g^n\\[2ex]
\qquad - \dfrac{1-\rho}{\rho}\xi_{j-1}^n g_{j-1}^n - \rho\Delta\tau L_j^{n+1} - (1-\rho)\Delta\tau L_j^n.
\end{cases}
$$

如果方程组（2.3）和（2.4）中的系数已知，则可用下述的“追赶”法求解。

为书写简便，略去上角标n，$n+1$，将（2.3）式（（2.4）式类同，故从略）写成三对角矩阵形式：

$$
\begin{pmatrix}
\beta_0 & \gamma_0 & & & \\
\alpha_0 & \beta_1 & \gamma_1 & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & \alpha_{j-2} & \beta_{j-1} & \gamma_{j-1}\\
 & & & \alpha_{j-1} & \beta_j
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} f_0\\ f_1\\ \vdots\\ f_{j-1}\\ f \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} \phi_0\\ \phi_1\\ \vdots\\ \phi_{j-1}\\ \phi_j \end{pmatrix}
\qquad (2.6)
$$

利用边界条件（1.5）式：$\left.\dfrac{\partial f}{\partial x}\right|_{x=0} = 0$，即$f_0 \approx f_1$和$f_j = 0$，可取$\beta_0 = -1$，$\gamma_0 = \beta_j = 1$，$\alpha_{j-1} = \phi_0 = \phi_j = 0$。又知（2.6）式相应的系数矩阵对角占优，所以可采用“追赶”法求解。关于“追赶”法的稳定性见文〔5〕。计算直到等离子体密

度，电位等达到稳态时为止。

下面简要介绍具体计算中的有关细节：

1． 外推求系数法

显然，方程组（2.3）和（2.4）的系数是非线性的。求解方程（2.3）和（2.4）通常的办法是对非线性系数进行线性化处理。线性化处理的方法很多[6]，我们则采用外推求系数法，外推出α_i^{n+1}，β_i^{n+1}等。即用它们在前一时刻τ^n和τ^{n-1}时的值作线性外推。这样，（2.3）和（2.4）式对未知量f_i^{n+1}和g_i^{n+1}变成线性代数方程组，可用上述的“追赶”法求解。然后，用求得新的值f_i^{n+1}，g_i^{n+1}通过（2.5）式再计算系数α_i^{n+1}，β_i^{n+1}等。如果不满足精度要求，则进行迭代，即再求解方程组（2.3）和（2.4）式，再用新的值f_i^{n+1}，g_i^{n+1}通过（2.5）式计算系数α_i^{n+1}，β_i^{n+1}等。直到满足精度要求时为止。外推求系数法是有效的。因为系数随时间的变化曲线是非常光滑的。计算实践表明，通过外推求系数后，只需一两次迭代就能得到满足精度要求的系数α_i^{n+1}，β_i^{n+1}等。因此，可避免较多次数的迭代，大大节省了计算工作的时间，这是外推求系数法的优点。线性外推的公式是：

$$\alpha^{(n+1)}=\alpha^{(n)}+[\alpha^{(n)}-\alpha^{(n-1)}]\times\frac{\Delta\tau^*}{\Delta\tau},$$

显然，当$\Delta\tau^*=\Delta\tau$时（见图24），有$\alpha^{(n+1)}=2\alpha^{(n)}-\alpha^{(n-1)}$。

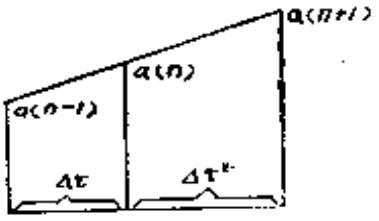


图 24

2． 逃脱几率的计算

（1）$n_i>n_e$的情形

由 $1-\frac{x_{cr}^2}{x^2}\leqq 0$，

即$x \leqq x_{cr}$，此时取$P_e(x)=0$，计算中，采用多加$\Delta x/2$的办法，即

$$P_e(x)=\begin{cases}0, & \text{当 } x \leqq x_{cr}+\Delta x/2,\\ \dfrac{1}{4\log_{10}\left(\dfrac{R}{1-\dfrac{x_{cr}^2}{x^2}}\right)}, & \text{当 } x>x_{cr}+\Delta x/2.\end{cases}$$

由 $\dfrac{R}{1+\mu\dfrac{x_{cr}^2}{x^2}} \leqq 1$,

即 $x \leqq \sqrt{\dfrac{\mu}{R-1}}\,x_{cr}$，取

$$(R_{eff})_i=\begin{cases}\dfrac{R}{1+\mu\dfrac{x_{cr}^2}{s^2}}, & \text{当 } x \leqq \sqrt{\dfrac{\mu}{R-1}}\,x_{cr}+\Delta x/2,\\ \dfrac{R}{1+\mu\dfrac{x_{cr}^2}{x^2}}, & \text{当 } x>\sqrt{\dfrac{\mu}{R-1}}\,x_{cr}+\Delta x/2.\end{cases}$$

其中 $s=m_1\Delta x$（m_1是某一正整数），且满足：

$$\sqrt{\frac{\mu}{R-1}}\,x_{cr}+\frac{3\Delta x}{2}>s \geqq \sqrt{\frac{\mu}{R-1}}\,x_{cr}+\frac{\Delta x}{2}.$$

（2）$n_1<n_e$的情形

由$1-\mu\dfrac{x_{cr}^2}{x^2} \leqq 0$,

即

$x \leqq \sqrt{\mu}\,x_{cr}$，取

$$P_1(x)=\begin{cases}0, & \text{当 } x\leqslant\sqrt{\mu}\,x_{cr}+\Delta x/2,\\ \dfrac{1}{4\log_{10}\left(\dfrac{R}{1-\mu\dfrac{x_{cr}^2}{x^2}}\right)}, & \text{当 } x>\sqrt{\mu}\,x_{cr}+\Delta x/2.\end{cases}$$

由 $\dfrac{R}{1+\dfrac{x_{cr}^2}{x^2}}\leqslant 1$,

即 $x\leqslant\sqrt{\dfrac{1}{R-1}}\,x_{cr}$，取

$$(R_{eff})_e=\begin{cases}\dfrac{R}{1+\dfrac{x_{cr}^2}{s^{*2}}}, & \text{当 } x\leqslant\sqrt{\dfrac{1}{R-1}}\,x_{cr}+\Delta x/2,\\ \dfrac{R}{1+\dfrac{x_{cr}^2}{x^2}}, & \text{当 } x>\sqrt{\dfrac{1}{R-1}}\,x_{cr}+\Delta x/2.\end{cases}$$

其中$s^*=m_2\Delta x$（m_2是某一正整数），且满足：

$$\sqrt{\frac{1}{R-1}}\,x_{cr}+\frac{3\Delta x}{2}>s^*\geqslant\sqrt{\frac{1}{R-1}}\,x_{cr}+\frac{\Delta x}{2}.$$

3. 平衡电位的计算

求解每一时刻τ的方程时，先选定一个初始试探值x_{cr}（首次试探值x_{cr}在0到1之间），从解出的$n_i(\tau)-n_e(\tau)$来调整x_{cr}，要求$|[n_i(\tau)-n_e(\tau)]/n_i(\tau)|<\in$，即满足电中性。由物理意义知：$x_{cr}$太大，则有$n_i(\tau)-n_e(\tau)<0$；$x_{cr}$太小，则有$n_i(\tau)-n_e(\tau)>0$。故需要调整$x_{cr}$，使之满足上述要求。可采用比例求根法来确定出这样的x_{cr}，于是$e\phi=54.6x_{cr}^2$即为该时

刻的电位。由于电位随时间递增，所以在求后一时刻电位时，可选用前一时刻的电位作为试探的初始值。

4. 电荷交换截面$\sigma_{cx}(x)$的拟合曲线

根据实验截面值，选用如下拟合公式：

$$10^{17}\sigma_{cx}(x)=\begin{cases}150.99x^2-13.72x+73.405, & \text{当}x\leqslant 0.2828,\\ -153.7054x+125.0679, & \\ & \text{当}0.2828<x\leqslant 0.7071,\\ 1500\exp(-6.45x), & \text{当}x>0.7071.\end{cases}$$

其中$x>0.7071$时，是选用最小二乘法进行曲线拟合的。从表中看出，拟合值与实验值的相对误差均不超过9%。

另外，计算中还采用了下述近似式：

$$\begin{cases}M_1(f^n)=(\Delta x)^2\left(\frac{1}{2}f_1^n\cdot j+\sum_{i=j+1}^{I}f_1^n\cdot i\right),\\ N_1(f^n)=(\Delta x)^3\left(\frac{1}{2}f^n\cdot j^2+\sum_{i=1}^{i-1}f_1^n\cdot i^2\right),\\ E_1(f^n)=(\Delta x)^5\left(\frac{1}{2}f^n\cdot j^4+\sum_{i=1}^{i-1}f_1^n\cdot i^4\right),\end{cases}$$

$$\int_0^\infty e^{-a(x-1)^2}x^2dx\overset{a\geqslant 10}{\approx}\frac{1}{2a}e^{-a}+\left(\frac{1}{2a}+1\right)\sqrt{\frac{\pi}{a}}.$$

于是

$$\begin{cases}N(S_e)=\int_0^\infty e^{-10(x-1)^2}x^2dx\approx 0.5885,\\ N(S_i)=\int_0^\infty e^{-100(x-1)^2}x^2dx\approx 0.1781.\end{cases}$$

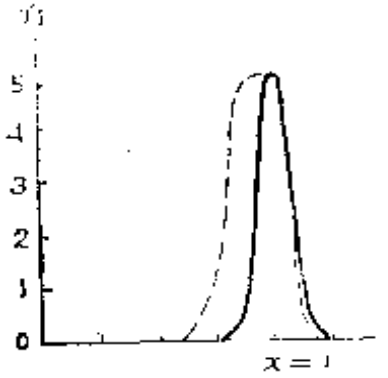
我们发现，当$\rho=1$时，得到了很好的结果。

5. 计算正确性的检验

由物理性质知，在$P_1=P_e=\sigma_{cx}=l_0=l_1=p_0=p_1=0$的情况下，方程满足粒子数守恒即$n_i(\tau)=n_e(\tau)=n_i(0)$。计算实践表明，在八位有效数字相同的意义下，有$n_i(\tau)=n_e(\tau)=n_i(0)$。

§3. 计算结果及讨论

在上述参数下，部分计算结果画在图25到图27上。图25和图26是离子和电子的分布函数随时间的变化曲线。图25中，实线是0.592×10^{-4}秒，3.54×10^{5}个/厘米^3，100千电子伏的情形；虚线是15.4秒，2.64×10^{10}个/厘米^3，88千电子伏的情形。



—·—0.592×10^{-4}秒，3.54×10^{5}个/厘米^3，100千电子伏；

……15.4秒，2.64×10^{10}个/厘米^3，88千电子伏。

图25 离子分布函数
(f_i—$x=v/v_0$)

可见，离子的分布函数变化不大。这是因为在高能中性注入装置上，注入能量高，仓库散射弱，所以源分布不易展宽。

由图26看出，电子分布函数在3.5×10^{-2}秒之前还可明显看出注入源分布的影响，在此之后就迅速趋于麦克斯韦分

布了。这与电子热化弛豫时间的估计是一致的。图26右下角用实线和虚线画出了平衡时电子分布与麦克斯韦分布。可见其高能尾巴部分比麦克斯韦分布略高，这是由于在这里电子与高能离子共存的缘故。

图27是等离子体密度，电位和电子平均能量随时间的变化曲线。由图可见，在$n \geqq 10^8$个/厘米^{3}之后，电位和电子平均能量的曲线几乎平行地增长。这种行为可作如下解释。

假定等离子体中的电子分布为麦克斯韦分布，则电子损失率可由

$$\frac{1}{n_e}\left(\frac{dn_e}{dt}\right)_{\text{损失}} = n_e<\sigma_s v>\exp(-e\phi/KT_e),$$

估计。这里n_e为电子密度，$<\sigma_s v>$为电子散射到逸出锥的速率的平均值，$\exp(-e\phi/KT_e)$为麦克斯韦分布中电子能量超出$e\phi$的份额。随着时间的增加，n_e和KT_e都增加。KT_e的增加导致$<\sigma_s v>$下降。而$n_e<\sigma_s v>$比起指数因子来是随时间慢变化的因子，由电中性要求，要保持电子损失率基本不变，这样就要求$e\phi/KT_e$变化不大，亦即$e\phi/KT_e \approx$ Const，这恰好说明了电位曲线与电子平均能量曲线应该平行地增长，最后平衡时达到的电位值大约是2.76千电子伏。

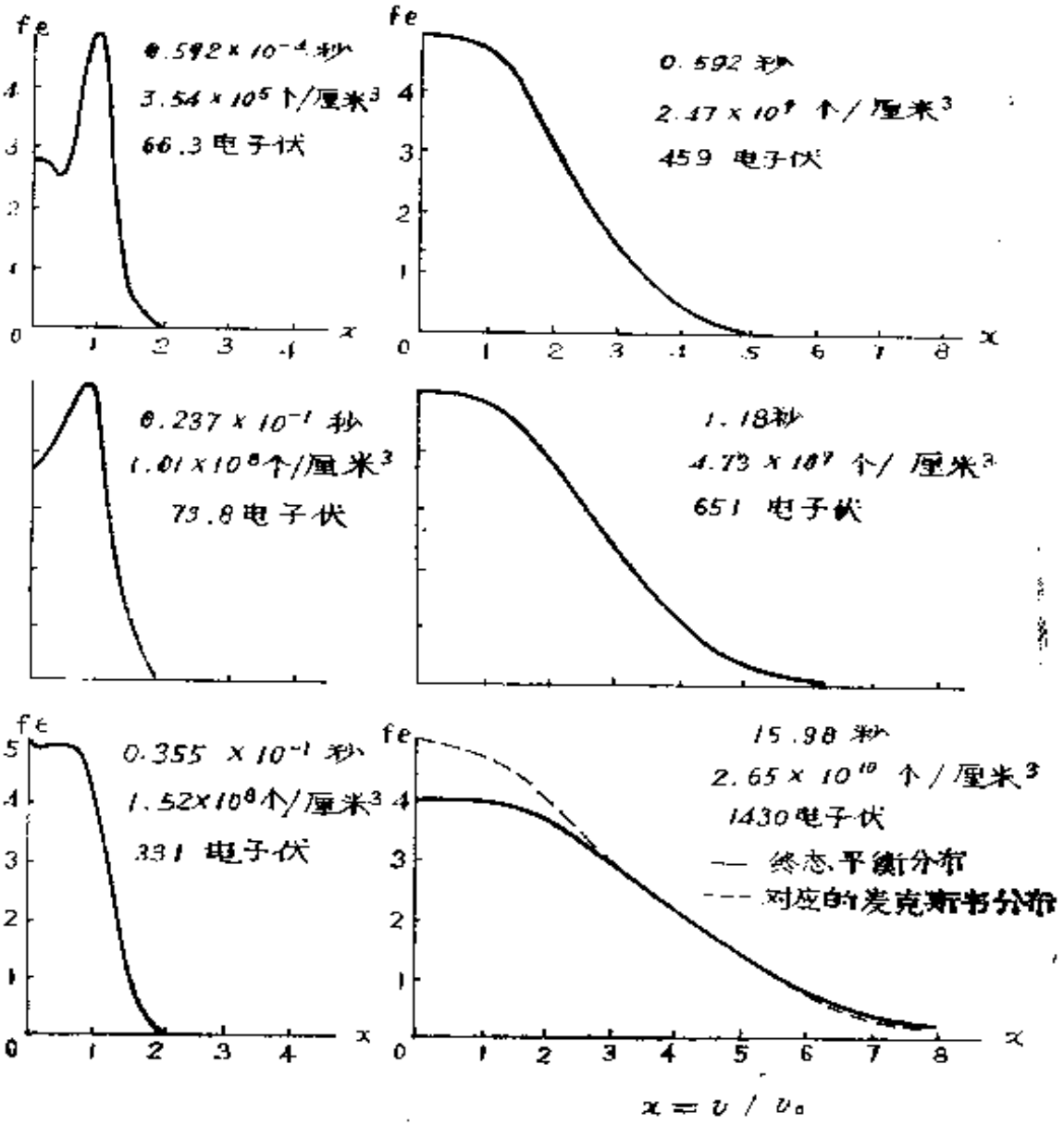


图26　　电子分布函数（f_e—$x=v/v_0$）

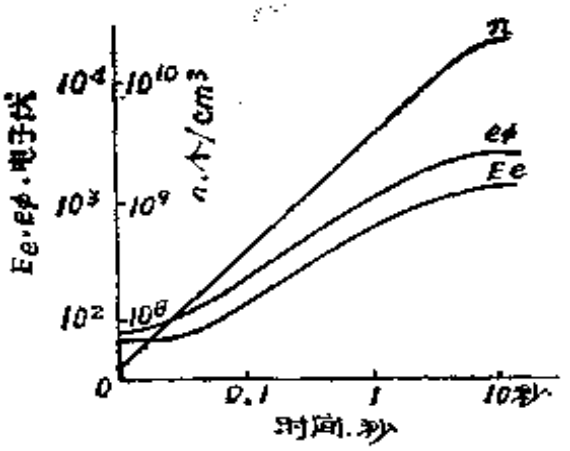


图27　等离子体密度、电位、电子平均能量与时间关系

参 考 文 献

〔1〕 *J.B.Gerardo et.al., J. APPL.Phys.*, 36(1965), 2146.

〔2〕 *D.J.Bendaniel et.al., Plasma Phys.*, 4(1962), 31.

〔3〕 *A.H.Futch et.al., Plasma Phys.*, 14(1972), 211.

〔4〕 *M.N.Rosenbluth et.al., Ph ys.Rev.*, 107(1957), 1.

〔5〕 张关泉，关于“追赶”法的稳定性，计算数学，3 (1982) , 296.

〔6〕 *DaleU.Von Rosenberg, Methods for the Numerical Solution of P.D.Es., New York,* (1969) , 56—66.

第十三章　轴对称自由边界磁流体平衡

为了提高环电流极限值和极向β值，近年来新提出几种托卡马克型装置：双流器、泪滴形、带状箍缩、ATC、戒指环、多极形Tokamak。

为了设计这种非圆截面的托卡马克或分析这种装置的实验，首先要解决的问题是等离子体平衡位形的计算。下面介绍三种求解方法：隐式交替方向加三段迭代法、积分法和直接法。

§1. 隐式交替方向加三段迭代法

由于等离子体界面预先是未知的，需要在解求出后才能确定，故是一个自由边界问题，相应的方程总是非线性的，并且方程本身又是一个二区问题（真空区和等离子体区）。当引入一个跳跃函数$S(\psi)$，可将二区问题合并成一个一区问题。这样做的好处是，在一个统一区域里求解流函数ψ，求出的ψ在区域内处处连续，且ψ的法向导数也连续，这就避免了在两个区域分开求解时，需要处理交界面处ψ和$\frac{\partial\psi}{\partial n}$连续的问题。

一　基本方程和边界条件

压强为P，磁场为$\vec{B}$的等离子体的静力学平衡，通常用

下述“磁静力学方程组”来描述：

$$\nabla P = \vec{J} \times \vec{B}, \tag{1.1}$$

$$\nabla \times \vec{B} = \vec{J}, \tag{1.2}$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0. \tag{1.3}$$

采用高斯单位制，引进磁面流函数ϕ。由（1.3）式知ϕ与极向磁场的两个分量的关系为

$$B_R = \frac{1}{2\pi R} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial Z}, \tag{1.4}$$

$$B_Z = -\frac{1}{2\pi R} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial R}. \tag{1.5}$$

在轴对称情况下，采用柱坐标系(R, Z, φ)，由（1.4）和（1.5）式可导出：

$$\vec{B} = \frac{2I}{CR}\vec{e}_\varphi + \frac{1}{2\pi R}\nabla\phi \times \vec{e}_\varphi, \tag{1.6}$$

其中 $$I = \frac{C}{2}(RB_\varphi). \tag{1.7}$$

又由（1.2）式可导出：

$$\vec{J} = j_\varphi \vec{e}_\varphi + \frac{1}{2\pi R}\nabla I \times \vec{e}_\varphi, \tag{1.8}$$

进而，由（1.1）式可导出：

$$j_\varphi = 2\pi RC\frac{dP}{d\phi} + \frac{1}{RC}\frac{dI^2}{d\phi}. \tag{1.9}$$

将（1.9）式代入（1.2）式，得到ϕ所满足的方程：

$$L\phi = -\frac{8\pi^2}{C}\left(2\pi CR^2\frac{dP}{d\phi} + \frac{1}{C}\frac{dI^2}{d\phi}\right) = -\frac{8\pi^2}{C}Rj_\varphi, \tag{1.10}$$

显然，在真空区域

$$L\phi = 0, \tag{1.11}$$

式中的算符$L = R\frac{\partial}{\partial R}\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2}$。

设在等离子体边界上$P = \phi = 0$，并把$P(\phi)$和$I^2(\phi)$表为：

$$P(\phi) = \frac{\lambda^2}{32\pi^3}\phi^2,$$

$$I^2(\phi) = I_S^2 + \frac{C^2}{16\pi^2}\mu\phi^2.$$

（这相当于假设在等离子体边界上P和ϕ，P'和j_ϕ均为0）。

这样一来，（1.10）和（1.11）式变为：

$$\begin{cases} L\phi = -(\lambda^2 R^2 + \mu)\phi, & \text{在等离子体内部,} \\ L\phi = 0, & \text{在等离子体外部.} \end{cases}$$

假定在等离子体内 $\phi \geqq 0$，在真空区 $\phi < 0$，并引入跳跃函数$S(\phi)$：

$$S(\phi) = \begin{cases} 1, & \text{当}\phi \geqq 0, \\ 0, & \text{当}\phi < 0. \end{cases} \tag{1.12}$$

令 $f(R) = \lambda^2 R^2 + \mu$，于是（1.10）和(1·11)式可合并写为：

$$L\phi + S(\phi)f(R)\phi = 0 \tag{1.13}$$

在导体壳上的边界条件为

$$\phi|_\Gamma = A, \qquad (A\text{为负常数}) \tag{1.14}$$

在导体壳外加有线圈情况下，边界条件为

$$\phi|_\Gamma = A + \phi_e, \tag{1.15}$$

式中 $\phi_e = \sum_i J_i\phi_0(R, Z; R', Z')$，

为外加线圈的电流所产生的流函数。$\phi_0(R, Z; R', Z')$为在(R', Z')地方有单位电流环在(R, Z)处所产生的

流函数：

$$\phi_0(R,Z;R',Z') = \frac{8\pi}{C}\frac{\sqrt{RR'}}{k}\left[\left(1-\frac{k^2}{2}\right)K(k)-E(k)\right],$$

其中$K(k)$和$E(k)$为第一、二类完全椭圆积分（下同），

$$k^2 = \frac{4RR'}{(R+R')^2+(Z-Z')^2}.$$

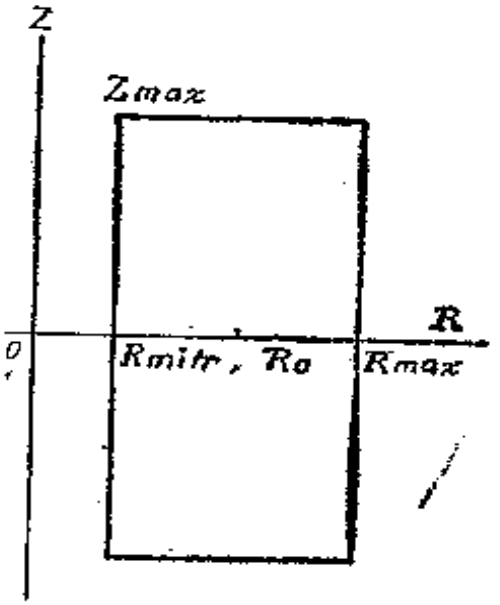


图28　矩形区域示意图

二　数值方法

采用文〔1〕提供的方法，在矩形区域里（见图28）求解上述方程。采用下述迭代格式：

$$\begin{cases} [-L_R - f(R)S(\phi^n)+\rho]^{n+\frac{1}{2}} \\ = (L_Z+\rho)\phi^n, \qquad (A-1) \\ [-L_Z - f(R)S(\phi^{n+\frac{1}{2}})+\rho]\phi^{n+1} \\ = (L_R+\rho)\phi^{n+\frac{1}{2}}, \qquad (A-2) \end{cases}$$

这里算符 $L_R = R\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial R}\right)$，$L_Z = \frac{\partial^2}{\partial Z^2}$；$\rho$是待选取的参数。

利用本征函数和正交性能够证明[1]：当ρ满足一定条件，上述迭代格式是收敛的。为使收敛界限落在单位圆内，应用Marder和Weitzner方法，把 $(A-1)$ 和 $(A-2)$ 迭代步骤的循环表示成：

$$L\phi_{m+\frac{1}{3}} + S(\phi_m) f(R) \phi_m = 0,$$

考虑如下迭代：

$$\begin{cases} L\phi_{m+\frac{1}{3}} + S(\phi_m) f(R) \phi_m = 0, \\ L\phi_{m+\frac{2}{3}} + S(\phi_{m+\frac{1}{3}}) f(R) \phi_{m+\frac{1}{3}} = 0, \\ \phi_{m+1} = (1-G)\phi_m + 2G\phi_{m+\frac{1}{3}} - G\phi_{m+\frac{2}{3}}. \end{cases}$$

这就是先用 $(A-1)$ 和 $(A-2)$ 作一次迭代得到$\phi_{m+\frac{1}{3}}$，再用 $(A-1)$ 和 $(A-2)$ 作一次迭代得到$\phi_{m+\frac{2}{3}}$，然后再对 ϕ_m，$\phi_{m+\frac{1}{3}}$和$\phi_{m+\frac{2}{3}}$作加权平均就得到ϕ_{m+1}。我们将这三个步骤称为“三段迭代”法。

其中$0 < G < \frac{1}{2}$。

对于矩形截面导体壳，选取矩形网格。将R方向分成I份，将Z方向分成K份，并令$h = (R_{max} - R_{min})/I$，$l = (Z_{max} - Z_{min})/K$，则有

$$\begin{cases} R_i = R_{min} + (i-1)h, & i = 1, 2, \cdots, I+1 \\ Z_k = Z_{min} + (k-1)l, & k = 1, 2, \cdots, K+1 \end{cases}$$

定义差分：

$$\begin{cases}\left(\dfrac{\partial}{\partial R}\dfrac{1}{R}\dfrac{\partial\phi}{\partial R}\right)_{i,k}=\dfrac{1}{h^2}\left[\dfrac{1}{R_{i+\frac{1}{2}}}\left(\phi_{i+1,k}-\phi_{i,k}\right)\right.\\ \qquad\qquad\left.-\dfrac{1}{R_{i-\frac{1}{2}}}\left(\phi_{i,k}-\phi_{i-1,k}\right)\right],\\ \left(\dfrac{\partial^2\phi}{\partial Z^2}\right)_{i,k}=\dfrac{1}{l^2}\left(\phi_{i,k+1}-2\phi_{i,k}+\phi_{i,k-1}\right).\end{cases}\tag{1.16}$$

将（1.16）式代入（$A-1$），整理得

$$a_{i,k}^{n}\phi_{i-1,k}^{n+\frac{1}{2}}+b_{i,k}^{n}\phi_{i,k}^{n+\frac{1}{2}}+c_{i,k}^{n}\phi_{i+1,k}^{n+\frac{1}{2}}=d_{i,k}^{n},$$

$$\begin{aligned}&i=2,\ 3,\ \cdots,\ I;\\&k=2,\ 3,\ \cdots,\ K.\end{aligned}\tag{1.17}$$

其中系数

$$\begin{cases}a_{i,k}^{n}=-\dfrac{R_i}{h^2R_{i-\frac{1}{2}}},\\ b_{i,k}^{n}=\dfrac{R_i}{h^2R_{i+\frac{1}{2}}}+\dfrac{R_i}{h^2R_{i-\frac{1}{2}}}-f(R_i)S(\phi_{i,k}^{n})+\rho,\\ c_{i,k}^{n}=-\dfrac{R_i}{h^2R_{i+\frac{1}{2}}},\\ d_{i,k}^{n}=\dfrac{1}{l^2}\phi_{i,k+1}^{n}+\left(\rho-\dfrac{2}{l^2}\right)\phi_{i,k}^{n}+\dfrac{1}{l^2}\phi_{i,k-1}^{n}.\end{cases}$$

略去足码k和上角标n，$n+\dfrac{1}{2}$，将(1.17)式写成三对角矩阵形式

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a_{I+1} & b_{I+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_I \\ \phi_{I+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_I \\ d_{I+1} \end{pmatrix}$$

由边界条件$\phi_{1,k}^{n+\frac{1}{2}} = \phi_{I+1,k}^{n+\frac{1}{2}} = A$，可取$b_1 = b_{I+1} = 1$，$c_1 = a_{I+1} = 0$，和$d_1 = d_{I+1} = A$。

同样，把（1.16）式代入（$A-2$），整理得

$$A_{i,k}^{n+\frac{1}{2}} \phi_{i,k-1}^{n+1} + B_{i,k}^{n+\frac{1}{2}} \phi_{i,k}^{n+1} + C_{i,k}^{n+\frac{1}{2}} \phi_{i,k+1}^{n+1} = D_{i,k}^{n+\frac{1}{2}},$$

$$i = 2,\ 3,\ \cdots,\ I,$$
$$k = 2,\ 3,\ \cdots,\ K. \qquad (1.18)$$

其中系数

$$A_{i,k}^{n+\frac{1}{2}} = C_{i,k}^{n+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{l^2},$$

$$B_{i,k}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{2}{l^2} - f(R_i) S(\phi_{i,k}^{n+\frac{1}{2}}) + \rho,$$

$$D_{i,k}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{R_i}{h^2 R_{i+\frac{1}{2}}} \phi_{i+1,k}^{n+\frac{1}{2}} + \left(\rho - \frac{R_i}{h^2 R_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{R_i}{h^2 R_{i-\frac{1}{2}}}\right) \phi_{i,k}^{n+\frac{1}{2}} + \frac{R_i}{h^2 R_{i-\frac{1}{2}}} \phi_{i-1,k}^{n+\frac{1}{2}}.$$

略去足码i和上角标$n+\frac{1}{2}$，$n+1$，将（1.18）式写成三对角矩阵形式

$$\begin{pmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & A_K & B_K & C_K \\ & & & A_{K+1} & B_{K+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_K \\ \phi_{K+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ \vdots \\ D_K \\ D_{K+1} \end{pmatrix} \tag{1.19}$$

由边界条件 $\phi_{1}^{n+1} = \phi_{K+1}^{n+1} = A$，可取 $B_1 = B_{K+1} = 1$，$C_1 = A_{K+1} = 0$，和 $D_1 = D_{K+1} = A$。

显然，只要选取适当的 ρ 值，就可保证上述矩阵是对角占优的。因此，可采用“追赶”法求解。关于“追赶”法的稳定性见文献〔2〕。

三　计算结果和几点讨论

采用上述方法求解了等离子体自由边界的平衡问题。对导体壳及导体壳外加线圈的情形，进行了数十种方案的数值计算，均得到了收敛解。对导体壳情形，得到了椭圆、双流器、三叠环等；对导体壳外放有几对控制线圈的情形，得到了 8 字形、D 型以及在真空室内发生真空磁面分裂的位形。计算结果表明和文献〔1〕完全一致。其中部分计算结果见图29—34。

为了保证解快速收敛和节省计算机工作量和存贮量，采取了如下措施：

1. 注意 ϕ 关于 r 轴对称，即 $\phi(r, z) = \phi(r, -z)$，所以只要计算上半平面（$Z \geqq 0$）就足够了，这样可节省一半的计算量和存贮量。事实上，由于可认为 $\left.\frac{\partial \phi}{\partial z}\right|_{z=0} = 0$，即 $\phi_{i,1} = \phi_{i,2}$，于是（1.19）式对应的矩阵系数中，只要取 $C_1 = -1$，$D_1 = 0$，其余同前，就变成只计算上半平面了。

2. G和隐参数ρ的选取。计算实践表明，取$G=0.45$为好，原则上ρ值取的越大，一定收敛。但ρ值取的太大，会影响收敛速度。

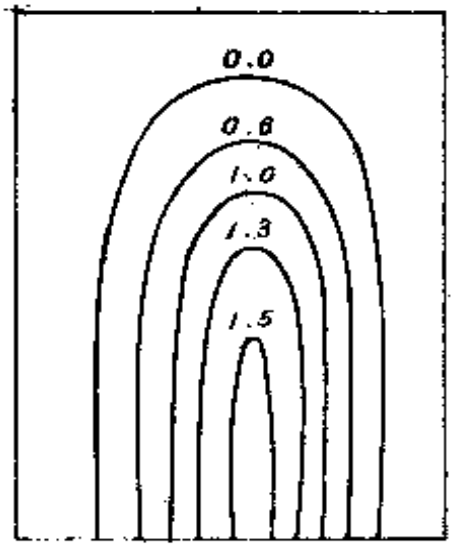


图29 椭圆

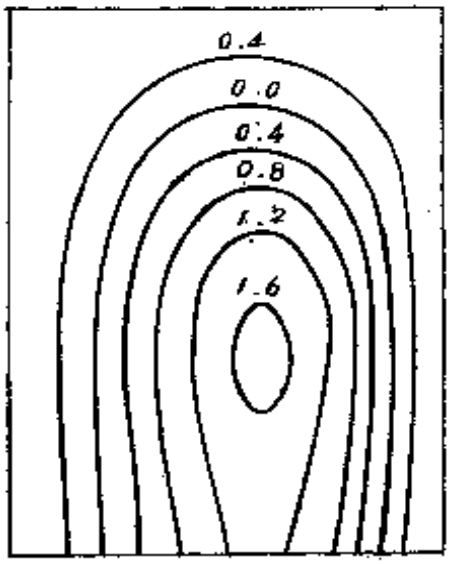


图30 双流器

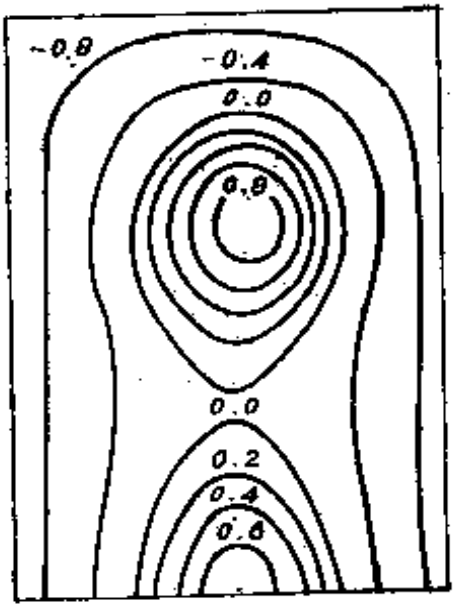


图31 三叠环

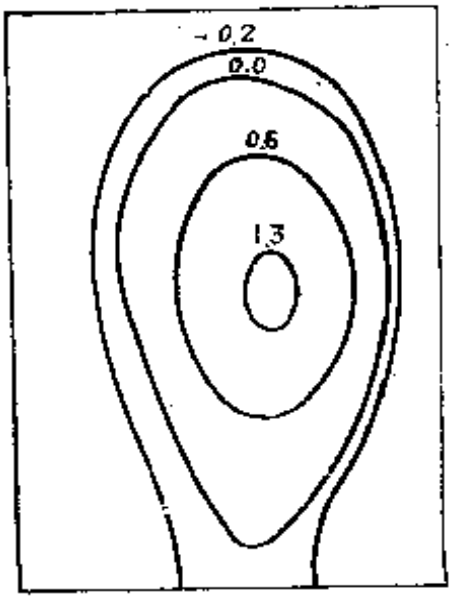


图32 滴形

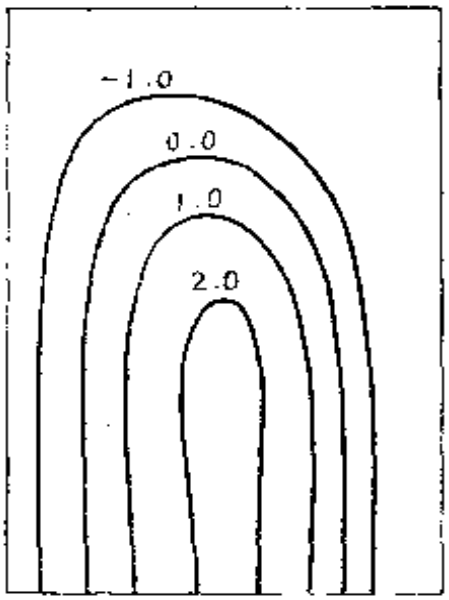


图33 D形

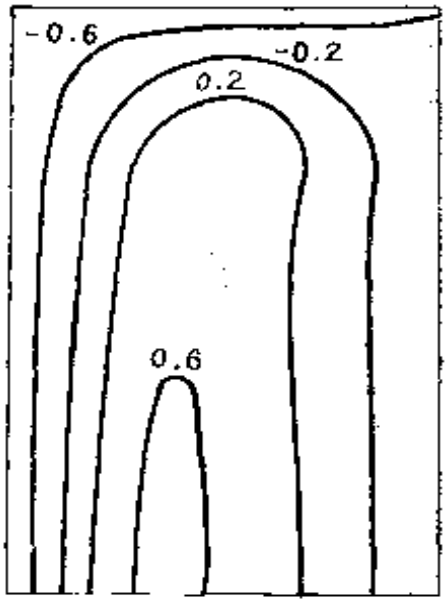


图34 真空磁面有分裂的位形

文〔1〕建议取$\rho=3—4f(R_{max})$。我们的经验是，一般情况下取$\rho=5—6f(R_{max})$为宜。ρ对收敛速度影响较大，例如当$\lambda^2=1.0\times10^{-6}$，$\mu=10^{-3}$，误差$\in=5\times10^{-3}$时，取$\rho=10f(R_{max})$，需迭代40次；取$\rho=7f(R_{max})$，需迭代65次；取$\rho=6f(R_{max})$，需迭代75次。但对$\lambda^2$,$\mu$的另外一些参数，就不是取$\rho=10f(R_{max})$为最好。$\rho$的最佳值，要靠实践去尝试。另一个经验公式是取$\rho=\rho_0/h^2$，这里$h$是正方形网格的步长，通常取$\rho_0\approx1$。事实上，当$\lambda^2=3.0\times10^{-5}$，$R_{max}=60$，$\mu=10^{-3}$时，有$\rho=10f(R_{max})\approx1$；它与经验公式中，这时通常取$h=1$，有$\rho=\rho_0/h^2\approx1$是一致的。

3. 迭代初始位形选为椭圆收敛速度最快。例如，初始位形取为

$$\psi_0(i,\ k)=1-\frac{(R_i-R_0)^2}{\left(\frac{R_{max}-R_{min}}{2}-h\right)^2}-\frac{Z_k^2}{\left(\frac{Z_{max}-Z_{min}}{2}-l\right)^2},$$

误差$\in = 6\times10^{-3}$时，一般只需迭代 30 次左右；而初始位形取$\psi_0 = 4$时，迭代次数竟达150次左右。

§2. 积分法

用积分法计算轴对称自由边界 MHD 平衡问题。其优点是占用内存少，可在小型计算机上进行数值求解。

一 基本方程

在圆柱坐标系（r, θ, z）中，在给定相应参数后，轴对称 MHD 平衡问题归结为求解满足下述方程[8]的流函数$\psi(r, z)$：

$$\begin{cases} L\psi \equiv \dfrac{\partial^2\psi}{\partial r^2} - \dfrac{1}{r}\dfrac{\partial\psi}{\partial r} + \dfrac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \\ \quad = -\dfrac{8\pi^2}{c} r j(r, \psi), & \text{在等离子体内;} \\ L\psi = 0, & \text{在等离子体外.} \end{cases} \tag{2.1}$$

$$B_\tau(S)_B = 0. \tag{2.2}$$

这里B表示导体壁位置（见图35），$B_\tau(S)_B = 0$表明在导体壁B的外侧，总磁场的切向分量为零。$j(r, \psi)$一般取成ψ的线性函数[6]

$$j(r, \psi) = j_0\left[\frac{\gamma}{R_0}\beta_0 + \frac{R_0}{r}(1-\beta_0)\right]\left[1 + (\gamma-1)\frac{\psi-\psi_L}{\psi_M-\psi_L}\right] \tag{2.3}$$

式中β_0表示等离子体压强与极向磁场压强比。γ是电流集中程度的参数，当$\gamma >> 1$时，电流集中于等离子体中心（$\psi = \psi_M$处）；当$\gamma = 1$时，表示j与ψ无关，称准均匀电流分布。

二 积分法求解

因为等离子体边界$\psi = \psi_L$预先不知，所以方程 (2.1)

总是非线性的。通常采用隐式交替方向法[4]、松弛法以及Seidel迭代法[6]求解。这些方法，由于每次迭代中需要保留每个点上的ψ值，因此要求计算机有较大的内存。我们采用的积分法，在电流取准均匀分布的情况下，问题变得相当简单，可以在小型计算机上进行数值求解。

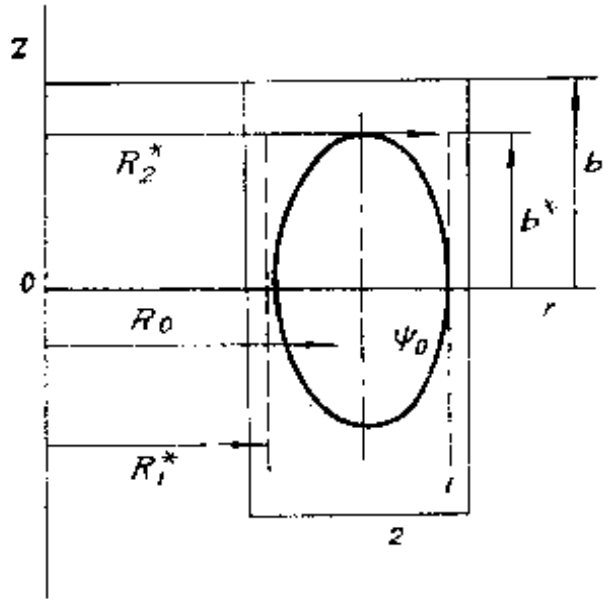


图35　矩形截面导体壁和限制器示意图，初始位形取为椭圆
1—限制器；　2—导体壁。

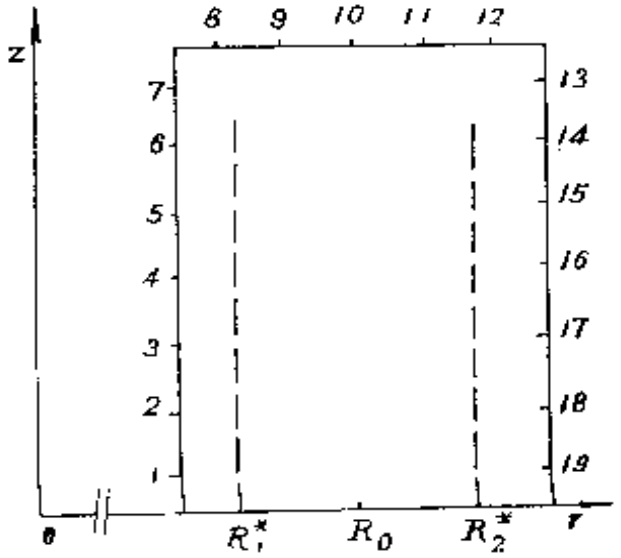


图36　边界B上节点取法

对方程（2.1）采用如下迭代格式：

$$\begin{cases} L\phi_{n+1} = -\dfrac{8\pi^2}{c} rj(r,\ \phi_n)\ , & \text{当}\phi_n \geqq \phi_{nL}, \\ L\phi_{n+1} = 0, & \text{当}\phi_n < \phi_{nL}. \end{cases} \tag{2.4}$$

式中 ϕ_{nL} 表示第 n 步求解的边界。假定 ϕ_{nL} 满足物理上某些附加条件，这里的附加条件是要求界面与限制器内切[6]，或

$$\phi_{nL} = MAX\phi_n(L) \tag{2.5}$$

式中 $\phi_n(L)$ 表示限制器 L 上的 ϕ_n 值，每次迭代中它是待定的。取整个空间中 $\phi \geqq 0$，且等离子体区域 ϕ 值大于外部区域。在存在封闭导体壁 B 时，B 上及 B 以外区域中 $\phi = 0$。

方程（2.4）的解可用点电流圈的源函数表示，令

$$G(r,\ z;\ r',\ z') = \frac{8\pi}{c}\sqrt{\frac{\overline{rr'}}{k^2}}\left[\left(1 - \frac{k^2}{2}\right)K(k) - E(k)\right],$$

$$k^2 = 4rr'/[(r+r')^2 + (z-z')^2],$$

则

$$\phi_{n+1}\ (r,\ z) = \iint_{\psi_n \geqq \psi_{nL}} G(r,\ z;\ r',\ z')j(r',\ \phi_n(r',\ z'))dr'\,dz' + \oint_B G(r,\ z;\ s')i_{n+1}\ (s')ds', \tag{2.6}$$

式中 $G(r,\ z;\ s')$ 表示 $(r',\ z')$ 取在封闭边界 B 上 s' 点的情况，$i(s')$ 是 B 上象电流。当解表成上述积分形式时，在等离子体边界上 ϕ 和 $\dfrac{\partial\phi}{\partial n}$ 自动连续，这也是积分法的优点。

由边条件（2.2），有

$$\oint_B b_r(s,\ s')i_{n+1}\ (s')ds' + \frac{2\pi}{c}i_{n+1}\ (s)$$

$$= -\int_{\psi_{n_1}}^{\psi_{n_2}}\int b_r(s;\ r',\ z')j(r',\ \phi_n(r',\ z'))dr'dz'. \quad (2.7)$$

(2.7) 式中积分核 $b_r(s,\ s')$ 在 $s=s'$ 点有奇异性，利用变换可消除奇异性。由

$$\oint_B i(s)b_r(s',\ s)ds' = \frac{2\pi}{c}i(s),$$

(2.7) 式可改写成：

$$\oint_B [i_{n+1}(s')b_r(s,\ s') - i_{n+1}(s)b_r(s',\ s)]ds' + \frac{4\pi}{c}i_{n+1}(s)$$
$$= -B^p_{nr}(s), \quad (2.8)$$

式中 $-B^p_{nr}(s)$ 为 (2.7) 式的右端项，b_r 表示单位电流在 B 上的切向场，它可分解成 b_r 和 b_z：

$$b_r(r,\ z;\ r',\ z') = \frac{2}{cr}\frac{z-z'}{\sqrt{(r+r')^2+(z-z')^2}}\left[-K(k) + \right.$$
$$\left. + \frac{r^2+r'^2+(z-z')^2}{(r-r')^2+(z-z')^2}E(k)\right],$$

$$b_z(r,\ z;\ r',\ z') = \frac{2}{c}\frac{1}{\sqrt{(r+r')^2+(z-z')^2}}\left[K(k) + \right.$$
$$\left. + \frac{r'^2-r^2-(z-z')^2}{(r-r')^2+(z-z')^2}E(k)\right]. \quad (2.9)$$

积分法求解是对 (2.8) 式用矩形公式化成线性代数方程组 (边界 B 上节点取法见图36)：

$$\sum_{n=1}^{38}[i(n)b_r(m,\ n) - i(m)b_r(n,\ m)]h + \frac{4\pi}{c}i(m) = -B^p_r(m)$$

(2.10)

引入记号：

$$s = h\sum_{n=1}^{19}[b_r(n,\ m) + b_r(39-n,\ m)],$$

$$s' = h[b_r(m,\ n) + b_r(m,\ 39-n)],$$

$$a_{mn} = \begin{cases} s' - s + \dfrac{4\pi}{c}, & \text{当} m = n \text{时}, \\ s', & \text{当} m \neq n \text{时}. \end{cases}$$

并利用对称性 $i(r,\ z) = i(r,\ -z)$，则 (2.10) 式可写成：

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{1,\ 19} \\ a_{21} & a_{22} & a_{2,\ 19} \\ & \cdots\cdots\cdots & \\ a_{19,\ 1} & a_{19,\ 2} \cdots & a_{19,\ 19} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i(1) \\ i(2) \\ \vdots \\ i(19) \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} B_r^p(1) \\ B_r^p(2) \\ \vdots \\ B_r^p(19) \end{pmatrix} \tag{2.11}$$

因为 (a_{ij}) 是常数矩阵，故每次只须计算 $B_r^p(m)$，就可算出 $i(m)$，直到相邻两次电流 $i_n(m)$ 和 $i_{n+1}(m)$ 满足精度要求时为止。

另外，计算中还采用了如下近似式：

$$\begin{aligned} B_r^p(m) &= j_0\int_{-Z^*}^{Z^*} dz' \int_{a(Z')}^{b(Z')} dr'\, b_r(m;\ r',\ z')\, j(r',\ \phi_n(r',\ z')) \\ &= j_0\int_0^{Z^*} dz'\,(b-a)\int_0^1 dr'\,[f(m;\ a+(b-a)r',\ z') \\ &\qquad + f(m;\ a+(b-a)r',\ -z')] \\ &\simeq j_0 h^{**}\sum_{i=0}^{8} A_i F_m(a_i,\ b_i;\ z'_i) \end{aligned} \tag{2.12}$$

$$\iint_{\psi n \geqq \psi n_L} dr'\,dz'\,G(m;\ r',\ z')\,j(r',\ \phi_n(r',\ z'))$$

$$\simeq j_0 h^{**} \sum_{i=0}^{8} A_i G(z'_i) = \Omega_1 \tag{2.13}$$

$$\phi_B G(m;\ s')\,i(s')\,ds' \simeq h \sum_{n=1}^{19} i\ (n)\ [G(m;\ n) + G(m; 39-n)]$$

$$= \Omega_2 \tag{2.14}$$

这里对〔0，z^*〕8等分，$h^{**} = z^*/8$，$z'_i = jh^{**}$，A_i是Simpson求积公式的系数。

矩形截面导体壁情况下的计算结果和讨论见文献〔3〕，下面仅简要说明求解的具体步骤：

（一）利用（2.12）式算出$B_r^n(m)$，接着用（2.11）式计算$i_n(m)$，零次$\phi_0 = \text{const}$取为椭圆（见图35）。

（二）确定新的z^*，a_i和b_i（$i = 0,\ 1, \cdots, 8$），因为在椭圆边界上$\phi = \phi_{L大}$，所以先在限制器L上找出$\phi_{L大} = \text{MAX}\phi(L)$。

于是，联合求解$\phi(r,\ z^*) = \phi_{L大}$和$\dfrac{\partial \phi(r,\ z^*)}{\partial r} = 0$，可定出$z^*$。通过求解$\Omega_1 + \Omega_2 - \phi_{L大} = 0$，得到相应的两个根$a_i$和$b_i$（可采用比例求根等方法）。

（三）由（2.12）式算出$B_r^{n+1}(m)$，再用（2.11）式算出$i_{n+1}(m)$。

（四）比较$i_n(m)$和$i_{n+1}(m)$（或$\phi_{L大}^{(n)}$和$\phi_{L大}^{(n+1)}$，或$B_r^n(m)$和$B_r^{n+1}(m)$），直到满足精度要求时为止，否则重复过程（二），（三），（四）。

§3. 直接法

一 引言

在用差分法求解椭圆型偏微分方程边值问题时，得到的差分方程多数是含有稀疏矩阵的大型代数方程组。对于这类方程组的求解，通常采用迭代法，可能是由于直接法需要大的内存使得一般的计算机无法满足，以及担心差分方程的系数矩阵病态，计算过程中舍入误差大量积累而严重影响解的精确度。但是，我们注意到，差分方程的系数矩阵多半都具有对称正定、对角元素占优和大量零元素等性质，直接法的舍入误差影响也处在允许范围内，而且内存问题经过一些处理也是可以解决的。近年来随着电子计算机的发展和迭代法收敛较慢的弱点变得突出（收敛较快的松弛迭代法，选取最佳松弛因子和迭代初值也是较困难的），因此采用直接法求解含大型稀疏矩阵的大型代数方程组的工作日益增多[7, 8]，但用于等离子体平衡问题的文献还不多。

作为方法的探讨，我们分别将直接法和迭代法应用到求解模型问题[9]的差分方程中。计算结果表明，直接法无论在解的精度和收敛速度上都优于迭代法。

二 基本方程

在研究成形线圈电阻效应对位形的影响时，求解如下的流函数 Ψ 的自由边界平衡方程为

$$r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+r\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right)=\begin{cases}-0.8\pi^2 rJ_\phi(r,\Psi), & \text{在}\Sigma_p\text{内},\\ 0, & \text{在}\Sigma_p\text{外}.\end{cases}\tag{3.1}$$

其中 Σ_p是待定的等离子体区域，要在求解过程中定出。r、z 是轴对称坐标。线圈的几何位置见图37，等离子体电流为

$$J_p(r,\ \Psi)=\begin{cases} J_0\left[\beta_0\frac{r}{R_0}+(1-\beta_p)\frac{R_p}{r}\right]\left[1+(\gamma-1)\frac{\Psi-\Psi_L}{\Psi_M-\Psi_L}\right], & \text{当}\Psi\geqq\Psi_L, \\ 0, & \text{当}\Psi<\Psi_L. \end{cases} \tag{3.2}$$

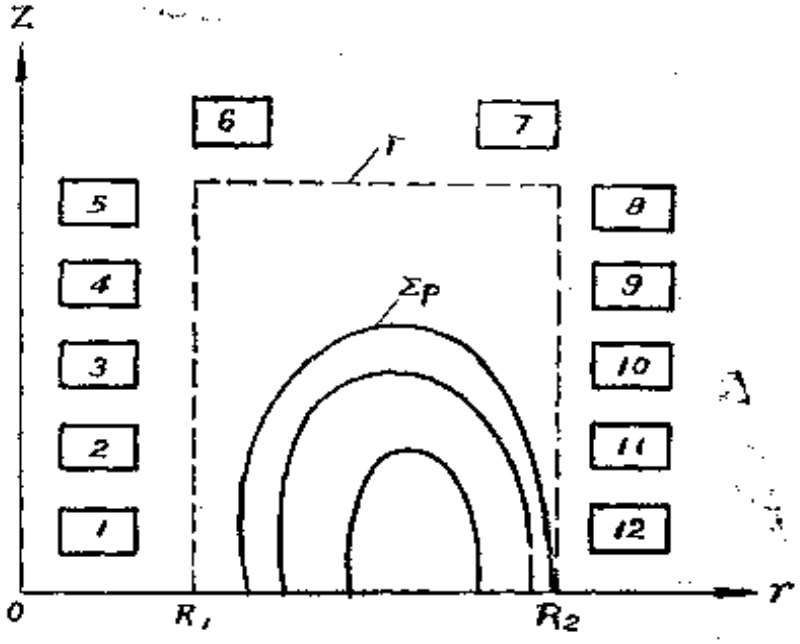


图37　成形线圈、限制器及初始位形示意图

式中 γ为表征电流分布情况的参数，Ψ_M 为待求区域中Ψ的最大值，Ψ_L为限制器Γ上Ψ的最大值（Σ_p 与Γ相切于 R_2）。限制器Γ 是一个矩形框架，称为方程（3.1）的虚边界，其上边值则由积分方法确定。

$$\Psi_\Gamma=0.8\pi\left[\iint_{\Sigma_p}G(r,\ z,\ r',\ z')J_p(r',\ \Psi(r',\ z'))\,dr'\,dz'\right.$$

$$\left.+\sum_{i=1}^{L_0}\frac{I_i}{S_i}\iint_{S_i}G(r,\ z,\ r_i,\ z_i)\ dr_i dz_i\right], \tag{3.3}$$

其中L_n为线圈个数，Σ_j表示第j个线圈的积分区域，S_j表示第j个线圈的几何面积，$G(r, z, r', z')$的定义是

$$G(r, z, r', z') = \sqrt{\frac{rr'}{k'^2}}[(1-k'^2/2)K(k') - E(k')], \tag{3.4}$$

$$k'^2 = 4rr'/[(r+r')^2 + (z-z')^2], \tag{3.5}$$

J_0值由

$$I_p = J_0 \iint_{\Sigma_p} [\beta_p \frac{r}{R_p} + (1-\beta_p)\frac{R_p}{r}] dr dz \tag{3.6}$$

确定，这里I_p取固定常数1，而β_p、R_p为给定参数。R_1和R_2也是给定参数。

感应电流I_i需解回路方程

$$\sum_{j=1}^{L_n} M_{ij}\frac{dI_j}{dt} = -\frac{d}{dt}(M_{pi}I_p) + R_iI_i \tag{3.7}$$

$$(i = 1, 2, \cdots, L_n)$$

才能确定。式中R_i为线圈i的电阻，M_{ij}为线圈i和线圈j间的互感系数，且$M_{ij} = M_{ji}$（已知），而线圈i与等离子体的互感M_{pi}由以下积分决定：

$$M_{pi} = \frac{8\pi}{I_pS} \times 10^3 \iint_{\Sigma_i} dr_i dz_i \iint_{\Sigma_p} dr dz J_p(r, \Psi) G(r, z, r_i, z_i). \tag{3.8}$$

我们假定$t = 0$时刻位形为已知，然后用 Euler 法解方程（3.7），近似地有

$$\sum_{j=1}^{L_n} M_{ij}I_j(\tau) = -M_{pi}I_p + \sum_{j=1}^{L_n} M_{ij}I_j(o) + M_{pi}(o)I_p(o) + R_iI_i(o)\tau, \tag{3.9}$$

τ为时间步长，设$\tau << L_i/R_{io}$

三　数值方法

对给定的τ值，我们应用方程（3.1）的边界条件(3.3)来进行数值计算。一般先给定等离子体区域Σ_p及流函数Ψ作为零级近似，于是可按图38的框图进行迭代求解（此称外部迭代），直到满足精度要求为止。而每次迭代又可归结为求虚边界Γ上流函数$\Psi_\Gamma(r, z)$值和在Γ内解如下的椭圆型偏微分方程

$$r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+r\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right)=\begin{cases}-0.8\pi^2 r J_p(r, \Psi), & \text{在}\Sigma_p\text{内}, \\ 0, & \text{在}\Sigma_p\text{外}.\end{cases} \quad (3.10)$$

$$\Psi_\Gamma(r, z) = \text{已知}$$

的问题。

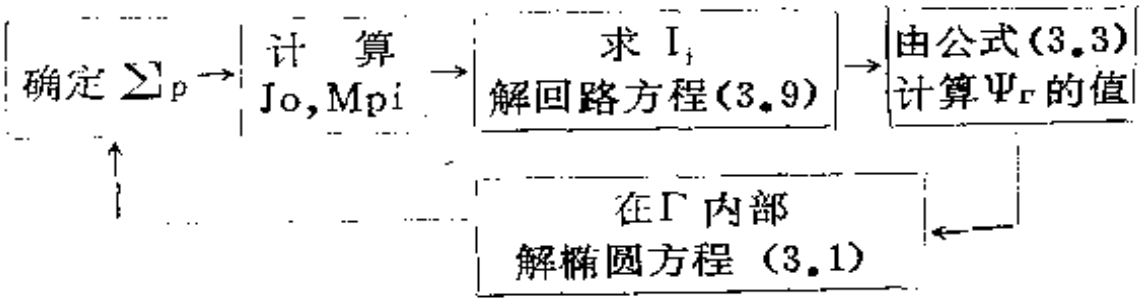


图38　外迭代框图

1. 计算虚边界上Ψ_Γ的值

假定由第m次外迭代已求出描述等离子体位形的流函数$\psi^{(m)}(r, z)$，用下降法在Γ内部可求得满足方程组

$$\begin{cases}\Psi(r_c, z_c)-\Psi_L=0 \\ \dfrac{\partial\Psi(r_c, z_c)}{\partial r}=0\end{cases} \quad (3.11)$$

的位形高度$C(r_c, z_c)$。同时由$\Psi(r, z) = \Psi_L$确定等离子体边界Σ_p，计算积分（3.6）和（3.8）算出J_p、M_{pl}值，再解回路方程（3.9）。最后由（3.3）式得到$(m+1)$次迭代所需的虚边界Γ上流函数值。

2. 差分方程的直接解法

在虚边界Γ区域内，按等距划分网格，可写出（3.10）的差分方程

$$\frac{1}{r_i}\Psi_{i,j+1} + \frac{1}{r_i}\Psi_{i,j-1} + \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}}\Psi_{i+1,j} + \frac{1}{r_{i-\frac{1}{2}}}\Psi_{i-1,j}$$

$$-\left(\frac{2}{r_i} + \frac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{1}{r_{i-\frac{1}{2}}}\right)\Psi_{i,j} = -f_{i,j} \tag{3.12}$$

其中

$$\begin{cases} f_{i,j} = 0.8\pi^2 h^2 J_p(r_i, \Psi_{i,j}), \\ h = \Delta r = \Delta z = (R_2 - R_1)/(m-1) \end{cases} \tag{3.13}$$

$i = 2, 3, \cdots, m-1$; $j = 2, 3, \cdots, n-1$.

m、n为r、z方向格点数。

若令$X_l = \Psi_{i,j}$，其中$l = (j-2) * (m-2) + (i-1)$，则上述方程是关于$X_l$的$L$阶大型代数方程组

$$AX = B. \tag{3.14}$$

系数矩阵A的元素和列向量B分别是

$$A_{\substack{kl \\ K\leq l}} = \begin{cases} \dfrac{2}{r_i} + \dfrac{1}{r_{i+\frac{1}{2}}} + \dfrac{1}{r_{i-\frac{1}{2}}} & \text{当} k = l \\ -\dfrac{1}{r_{i-\frac{1}{2}}} & \text{当} k = l-1, \quad (i \neq 2), \\ -\dfrac{1}{r_i} & \text{当} k = l-(m-2), (j \neq 2), \\ 0 & \text{当} k < l \text{的其余元素}, \end{cases}$$

$$k=1,\ 2,\ \cdots,\ l. \qquad (3.15)$$

对上三角元素有 $A_{kl}=A_{lk}$。此外，标号 i 代表 $(l,\ k)$ 中较大的标号。

$$B_l=\begin{cases} f_{lk}+\dfrac{1}{r_{3/2}}\Psi_1, & \text{当 } i=2,\\ f_{lk}+\dfrac{1}{r_{m-\frac{1}{2}}}\Psi_m, & \text{当 } i=m-1,\\ f_{lk}+\dfrac{1}{r_i}\Psi_i, & \text{当 } j=2,\\ f_{lk}+\dfrac{1}{r_i}\Psi_i, & \text{当 } j=n-1,\\ f_{lk} & \text{其余元素} \end{cases} \qquad (3.16)$$

$$l,\ k=1,\ 2,\ \cdots,\ L.$$

L为大型方程组的阶数且$L=(m-2)*(n-2)$。

不难证明，方程组（3.14）的系数矩阵 A为对称正定矩阵，因此方程组有唯一解。倘若格点数较大，例如其数量级为10^2—10^3，方程组的阶数将会很高，用直接法求解，最关心的是积累误差的影响和系数的存储问题。我们看到，系数矩阵A具有如下一些特征：

（1）A中大量元素是零，且非零元素都集中在主对角线附近较窄的区域内，见图39。

（2）A的对角元素绝对占优，且每行非对角元素绝对值之和总小于或等于主对角元素的绝对值，就是说

$$\sum_{\substack{i=1\\(\neq l)}}^{L}|A_{li}|\leq|A_{ll}|, \qquad (3.17)$$

式中至少有一个i值取不等号。

$$i = 1,\ 2,\ \cdots,\ L。$$

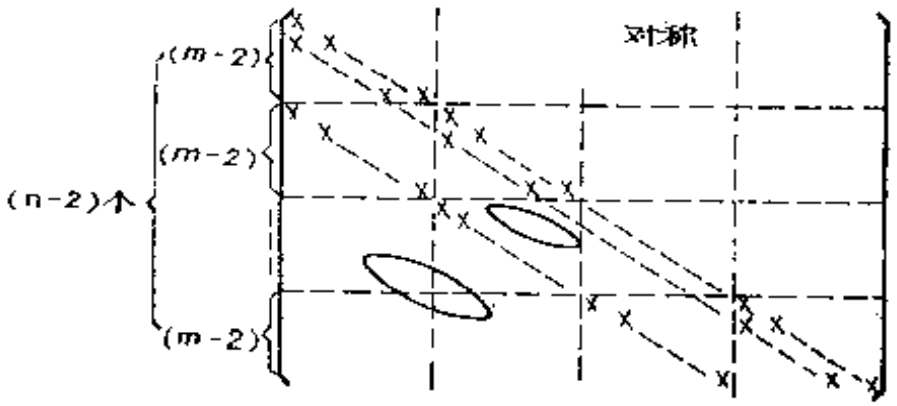


图39　A中非零元素的位置

（3）A具有对称性。

因此，A是对称正定的大型、带状稀疏矩阵。

在结构力学计算中，常常碰到需要求解含有大量未知数的线性代数方程组

$$[K][X]=[F] \tag{3.18}$$

这里，

$$[K]=(k_{ij}) \qquad (i,\ j=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$$

是系数矩阵，

$$[X]=(x_i) \qquad (i=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$$

是待求的未知量，

$$[F]=(f_i) \qquad (i=1,\ 2,\ \cdots,\ n)$$

是已知的右端向量。

在许多实用情况下，系数矩阵〔K〕也是对称、正定的带状稀疏矩阵。

我们可采用改进平方根法求解线性代数方程组（3.18）的解，其相应系数矩阵按最大半带宽存贮。

已知平方根法是将系数矩阵分解为两个三角形矩阵的乘积。经过一个前代和一个回代来求解。只要系数矩阵〔K〕满足正定、对称，则一定可分解为两个三角形矩阵的乘积。

改进平方根法是把系数矩阵分解得到的三角形矩阵再进行分解的算法，即是将〔K〕按如下形式分解

$$〔K〕=〔L〕〔D〕〔L〕^{T}$$

其中

$$〔K〕=\begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & \cdots & K_{1n} \\ K_{21} & K_{22} & \cdots & K_{2n} \\ & \cdots\cdots\cdots & & \\ K_{n1} & K_{n2} & \cdots & K_{nn} \end{pmatrix}, \quad K_{ij}=K_{ji}.$$

$$〔L〕=\begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ l_{21} & 1 & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \\ & \cdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

$$〔D〕=\begin{pmatrix} d_{11} & & & 0 \\ & d_{22} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & d_{nn} \end{pmatrix}.$$

于是，方程（3.18）可改写为

$$〔L〕〔D〕〔L〕^{T}〔X〕=〔F〕. \tag{3.19}$$

这里，将右端项〔F〕同时进行分解，即

$$〔F〕=〔L〕〔D〕〔\tilde{F}〕.$$

于是，式（3.19）可写成为

$$[L][D][L]^{\mathrm{T}}[X]=[L][D][\widetilde{F}],$$

亦即

$$[L]^{\mathrm{T}}[X]=[\widetilde{F}]. \tag{3.20}$$

式中$[L]^{\mathrm{T}}$为上三角形单位矩阵。可见只需一个回代过程即可求解。问题要事先确定$[L]$和$[\widetilde{F}]$，这是容易办到的。由

$$[K]=[L][D][L]^{\mathrm{T}},$$

有

$$d_{ii}=k_{ii}-\sum_{k=1}^{i-1}l_{ik}^{2}d_{kk}, \qquad i=1,\ 2,\ \cdots,\ N$$

$$l_{ij}=(k_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{kj}d_{kk})/d_{jj}, \qquad i>j$$

同理，由

$$[F]=[L][D][\widetilde{F}],$$

有

$$\widetilde{F}_{i}=(F_{i}-\sum_{k=1}^{i-1}l_{ik}d_{kk}\widetilde{F}_{k})/d_{ii}.$$

于是，$[L]$和$[\widetilde{F}]$就唯一地确定了。经回代公式

$$X_{i}=\widetilde{F}_{i}-\sum_{k=i+1}^{n}l_{ki}x_{k}, \qquad i=N,\ N-1,\ \cdots,\ 1$$

即得到方程组的解。

附带指出，在整个求解过程中，不论代数方程组（3.18）的右端是一个集合或是外迭代求出的多个向量，对矩阵$[K]$的分解只需进行一次，其后每次求解只作回代过程，这样就节省了相当多的机时。

四　数值结果与方法比较

采用如前所述的方法，取$m=21$，$n=31$，我们在DJS—6

机上进行了数值计算，结果与解析结果完全一致，详见文〔9〕。

作为方法的比较，我们曾采用松弛迭代法求解了差分方程（3.12），取与前完全相同的格点及外迭代精度，取松弛因子$\omega=0.7$，1.75等，内迭代的相对误差取10^{-3}，内迭代次数约为12—34次，用机时间1—3分钟。采用直接法用机时间为48秒，而外迭代中松弛迭代法也比直接法迭代次数多。可以看出直接法比松弛迭代法精度高且节省机时，缺点是占用内存多一些。

参 考 文 献

〔1〕 Y.Suzuki, Nucl.Fusion, 14, 3 (1974), 345.

〔2〕 张关泉，关于“追赶”法的稳定性，计算数学，3 (1982)，298.

〔3〕 石秉仁、宫野，轴对称自由边界磁流体平衡问题的积分解法，1976，未发表。

〔4〕 蒋尔雄等译，矩阵迭代分析，上海科学技术出版社，(1966)，195.

〔5〕 北京大学等编，计算方法，人民教育出版社，(1961)，375.

〔6〕 M.S.Chu et al., Phys.Fluids, 17 (1974), 1183.

〔7〕 李大潜等，有限元法续讲，科学出版社，(1979)。

〔8〕 计算机应用与应用数学，4 (1976)，1—3。

〔9〕 石秉仁、龙永兴，核聚变与等离子体物理，1 (1981)，87—91.

最后给出用上半带存贮改进平方根法编制的程序：

```
SUBROUTINE PG2B(N, NF, SK, RF)
DIMENSION SK(N, NF), RF(N)
DO 1  I=1, N
II=I-1
IJ=I+NF-1
```

```
      IF(I+NF.GT.N)  JJ=N
      DO  2  J=I, JJ
      D=0.0
      SA=0.0
      SB=SK(I, 1)
      IF(I.EQ.J)  SB=1
      IF(I.EQ.1)  GOTO 5
      DO  3  K=1, II
      IF(I-K.GE.NF)  GOTO  3
      IF(J-K.GE.NF)  GOTO  3
      IA=I-K+1
      JA=J-K+1
      SA=SK(K, IA)*SK(K, JA)*SK(K, 1)+SA
    3 CONTINUE
    5 JB=J+1-I
    2 SK(I, JB)=(SK(I, JB)-SA)/SB
      IF(I.EQ.1)  GOTO  1
      DO  4  K=1, II
      IF(I-K.GE.NF)  GOTO  4
      IB=I-K+1
      D=SK(K, IB)*SK(K, 1)*RF(K)+D
    4 CONTINUE
    1 RF(I)=(RF(I)-D)/SK(I, 1)
      NK=N-1
      DO  7  I=1, NK
      L=N-I
```

```
      M = L
      DO  7  K = 2, NF
      L = L + 1
    7 RF(M) = RF(M) - SK(M, K) * RF(L)
      RETURN
      END
```

程序功能

本程序采用改进平方根法求解线性方程组的解。系数矩阵按最大半带宽(上半带)存贮并要求其满足正定、对称条件。

使用说明

1. 子程序语句

SUBROUTINE PG$_2$B(N, NF, SK, RF)

2. 哑元说明

N：整变量，输入参数，矩阵的阶数。

NF：整变量，输入参数，最大半带宽（包括对角元）的值。

SK，*N* * *NF* 个元素的二维实数组，输入参数，按上半带存贮系数矩阵。

RF：*N* 个元素的一维实数组，输入参数，为右端列向量。也是输出参数，存放方程组的解。

例题

例1. 解方程组

$$\begin{pmatrix} 4.5 & 0.2 & -1.3 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ & 5.3 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ & & 10.2 & 5.1 & 0.0 & -1.7 \\ & & & 8.4 & 0.0 & 0.0 \\ & & & & 0.6 & 0.0 \\ \text{对称部分} & & & & & 3.1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \\ X_5 \\ X_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.0 \\ 10.8 \\ 39.5 \\ 48.9 \\ 3.0 \\ 13.5 \end{pmatrix}$$

这里$N=6$，$NF=4$，将其系数压缩存贮为

$$SK=\begin{vmatrix} 4.5 & 0.2 & -1.3 & 0.0 \\ 5.3 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 10.2 & 5.1 & 0.0 & -1.7 \\ 8.4 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.6 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \\ 3.1 & 0.0 & 0.0 & 0.0 \end{vmatrix}$$

计算结果为：

$$X_1=0.99999997\times10^{0}$$
$$X_2=0.20000000\times10^{1}$$
$$X_3=0.29999999\times10^{1}$$
$$X_4=0.40000000\times10^{1}$$
$$X_5=0.50000000\times10^{1}$$
$$X_6=0.59999999\times10^{1}$$

例2. 解方程组

$$\begin{pmatrix} 5 & 7 & 6 & 5 \\ & 10 & 8 & 7 \\ & & 10 & 9 \\ & \text{对称部分} & & 10 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 23 \\ 32 \\ 33 \\ 31 \end{pmatrix}$$

这里$N=4$，$NF=4$，将其系数压缩存贮为

$$SK=\begin{vmatrix} 5 & 7 & 6 & 5 \\ 10 & 8 & 7 & 0 \\ 10 & 9 & 0 & 0 \\ 10 & 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

计算结果为

$$X_1 = 0.10000007 \times 10^1$$

$$X_2 = 0.99999958 \times 10^0$$

$$X_3 = 0.99999994 \times 10^0$$

$$X_4 = 0.10000000 \times 10^1$$

方程组真解为

$$X_1 = X_2 = X_3 = X_4 = 1.$$

第十四章　一类常微分方程边值问题的数值解法

§1. 基本方程和边界条件

为了分析电流分布对破裂的影响，找出能抑制破裂不稳定性的有利的电流分布，文献[1]需要对下述方程进行数值求解：

$$\frac{d}{dx}\left(x^3\frac{dB(x)}{dx}\right)-\left\{(m^2-1)x+\frac{mx^4f'(x)}{[m-nq(x)]F(x)}\right\}B(x)=0 \tag{1.1}$$

和边界条件（$m\geqq 2$）：

$$\left.\begin{aligned}B(o)&=0\\B(b)&=0\end{aligned}\right\} \tag{1.2}$$

并由此计算Δ量[2, 3]：

$$\Delta=\left(\frac{dB_{\mathrm{II}}}{dx}-\frac{dB_{\mathrm{I}}}{dx}\right)\Big|_{x_s}/B(x_s) \tag{1.3}$$

式中的$f(x)$是选取的电流分布：

$$f(x)=\begin{cases}2(1+(1.5x)^4)^{-5/4}, & 0\leqq x\leqq 0.7\\ 1.1824851[1-\exp(-10.920015(1-x)^2)], & 0.7\leqq x\leqq 1\\ 0. & 1\leqq x\leqq b\end{cases} \tag{1.4}$$

$$F(x)=\int_0^x f(t)\,t\,dt,\qquad q(x)=\frac{1}{2}q_A x^2/F(x),$$

一撇表示求导数，b是导体壳的小半径，q_A是代表安全因子的常数，B_{I}、B_{II}分别表示区域$0<x<x_s$和$x_s<x<b$上方程（1.1）的解，x_s为共振点，满足共振条件：

$$m-nq(x_s)=0.$$

§2. 数值解法

显然（1.1）和（1.2）式，是带有两个奇点的二阶常微分方程的两点边值问题，将其化为初值和边值问题拟合求解。为克服奇点带来的计算困难，在奇点$x=0$和$x=x_s$附近，采用局部近似，将方程简化，从而得到解析解。在奇点x_s附近，除给出解的解析表达式外，还证明了计算Δ的一个等价公式。

（一）在$x=0$附近，由

$$\lim_{x\to 0}\frac{mx^4f'(x)}{(m^2-1)x[m-nq(x)]F(x)}$$

$$=\frac{m}{m^2-1}\lim_{x\to 0}\frac{x[xf''(x)+3f'(x)]}{mf(x)-nq_A}=0.$$

于是，在$x=0$附近，（1·1）式可简化成

$$x^3\frac{d^2B(x)}{dx^2}+3x^2\frac{dB(x)}{dx}-(m^2-1)xB(x)=0 \qquad (2.1)$$

通解$B(x)=C_1x^{m-1}+C_2x^{-m-1}$，利用条件（1.2）中$B(0)=0$，知$C_2=0$，无妨取$C_1=1$，于是得$B(x)=x^{m-1}$。

（二）正如在下面将看到的，导数B_{I}'和B_{II}'在x_s处都有

对数奇异性。因此，直接用（1.3）式计算Δ是有困难的。这里采用计算Δ的一个等价公式：

$$\Delta = \frac{A_2 - A_1}{x_s B(x_s)} \qquad (1.3')$$

式中的A_1、A_2是常数，它们通过在计算机上算出x_s附近的值B_{I}和B_{II}，拟合后面将提到的解析表达式(2.3)和（2.4）来确定。

在$x = x_s$附近，（1.1）式的近似方程为：

$$\frac{d^2B(y)}{dy^2} - \frac{K(x_s)}{y}B(y) = 0 \qquad (2.2)$$

式中

$$y = \frac{x - x_s}{x_s},\quad K(x_s) = -\frac{mx_s^2 f'(x_s)}{nq'(x_s)F(x_s)}.$$

式（2·2）在$y = 0$的邻域$0 < |y| < R$内有两个正则解[4]：

$$B_1(y) = y^{\rho_1}\sum_{n=0}^{\infty} c_n y^n \qquad (c_0 \neq 0)$$

$$B_2(y) = gB_1(y)\ln|y| + y^{\rho_2}\sum_{n=0}^{\infty} d_n y^n \qquad (d_0 \neq 0)$$

这里的c_n、d_n和g是待定系数，ρ_1和ρ_2是指标方程$\rho(\rho-1) + a_0\rho + b_0 = 0$的两个根。又因此时有关系式：

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k = 0 \text{ 和} \sum_{k=0}^{\infty} b_k y^k = -Ky$$

所以有$a_0 = b_0 = 0$，由指标方程得$\rho_1 = 1$和$\rho_2 = 0$，于是，式（2.2）的两个特解是：

$$B_n(y) = y\sum_{n=0}^{\infty} c_n y^n \qquad (c_0 \neq 0)$$

$$B_s(y) = gB_n(y)\ln|y| + \sum_{n=0}^{\infty} d_n y^n \qquad (d_0 \neq 0)$$

将它们代入（2.2）式，比较系数得：

$$B_n(y) = y + \frac{1}{2}Ky^2 + \frac{1}{12}K^2y^3 + \frac{1}{144}K^3y^4 + \frac{1}{2880}K^4y^5 + \cdots$$

$$B_s(y) = KB_n(y)\ln|y| + 1 - \frac{3}{4}K^2y^2 - \frac{14}{72}K^3y^3 - \frac{35}{1728}K^4y^4 - \frac{202}{172800}K^5y^5 - \cdots$$

因此，式（2.2）的解可写成：

$$B_{\mathrm{I}} = B(x_s)B_s(y) + A_1B_n(y) \qquad (2.3)$$

$$B_{\mathrm{II}} = B(x_s)B_s(y) + A_2B_n(y) \qquad (2.4)$$

由（2.3）和（2.4）式得：

$$A_2 - A_1 = \lim_{r\to 0}\frac{B_{\mathrm{II}} - B_{\mathrm{I}}}{B_n},$$

所以，

$$\frac{A_2 - A_1}{x_sB(x_s)} = \frac{1}{x_sB(x_s)}\lim_{x\to x_s}\frac{B_{\mathrm{II}}' - B_{\mathrm{I}}'}{B_n'} = \left(\frac{dB_{\mathrm{II}}}{dx} - \frac{dB_{\mathrm{I}}}{dx}\right)\Big|_{x_s}/B(x_s)$$

$= \Delta$。此即（1.3′）式。

综上所述，整个求解步骤是：

在x_s左边，在区域$[0, \in_0]$中，取$B(x) = x^{m-1}$，在区域$[\in_0, x_s - \in]$中，求解带有初值条件$B(\in_0) = \in_0^{m-1}$和$B'(\in_0) = (m-1)\in_0^{m-2}$的方程（1.1），再利用（2.3）式，就可确定值$B(x_s)$和$A_1$。

在x_s右边，在区域$[x_s, b]$中，求解带有边值条件：$B(x_s)$已知和$B(b) = 0$的方程（1.1），这是二阶线性常微分

方程的两点边值问题，可采用差分法，算出$B(x_s+\in)$，利用（2.4）式可确定A_2，再利用（1.3′）式就可确定值Δ

下面是$m/n=2/1, b=1.2, q_A=2.1$，$\in_0=\in=10^{-3}$时，Δ的部分计算结果：

表 1

Δ 方案 \ $\in$	10^{-2}	1.1×10^{-2}	10^{-3}	1.1×10^{-3}	10^{-4}	1.1×10^{-4}	10^{-5}	1.1×10^{-5}
I	8.75	8.79	8.89	8.82	18.58	17.69	103.07	94.58
II	-1.95	-1.93	-2.07	-2.08	-0.944	-1.045	8.55	7.59
III	18.77	18.86	18.68	18.57	27.65	26.86	103.21	95.62

从表1看出，$\in$在10^{-3}到10^{-2}的范围里取值时，得到稳定解Δ。

表1中的方案1相应电流分布为（1.4）的情形，II和III是相应图40的电流分布的情形。

II和III分别对应的结果$\Delta=-2.07<0$和$\Delta=18.68>0$，与文献[1]定性分析所得到的结论一致。

为了进一步检验方法的可靠性，我们与解析解作比较。

电流分布取成图41形状，此时方程（1.1）变为：

$$\frac{d}{dx}\left(x^3\frac{dB(x)}{dx}\right)-(m^2-1)xB(x)=0 \qquad (2.5)$$

边界条件

$$\left.\begin{aligned} &B(x\approx 0)\approx x^{m-1}\\ &B(x=b,\ \text{或}x\to\infty)=0\end{aligned}\right\} \qquad (2.6)$$

各个区域之间解的对接条件是

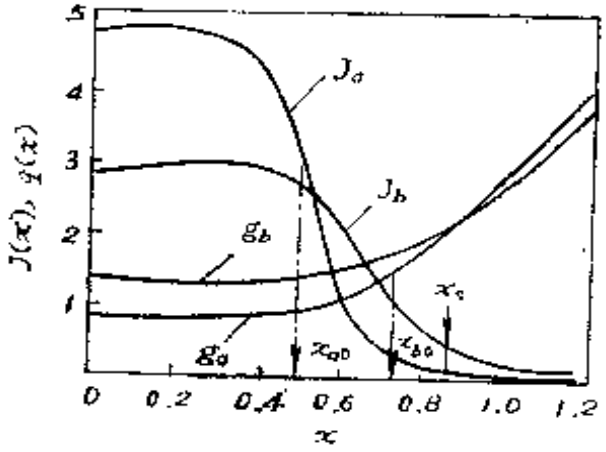


图40　电流密度的径向分布

图注　$J=J_0[1+(x/x_0)^8]^{-5/4}$，

$x_s=0.84$（$q\approx2$的奇异面位置），

$x_{a_0}=0.54$（j_a电流通道宽度），

$x_{b_0}=0.72$（j_0电流通道宽度）

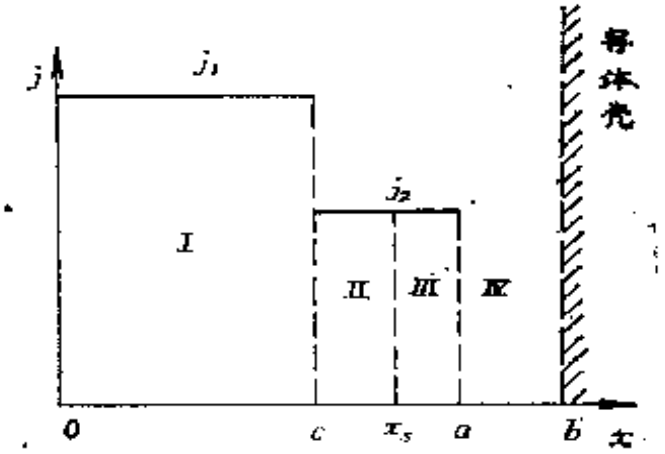


图41　电流的阶梯式分布

$$B^{\mathrm{I}}(c)=B^{\mathrm{II}}(c);\left[\left(\frac{dB}{dx}\right)_c^{\mathrm{II}}-\left(\frac{dB}{dx}\right)_c^{\mathrm{I}}\right]/B(c)=-\frac{2m(1-p)}{c(m-nq_c)},$$

$$B^{\mathrm{II}}(x_s)=B^{\mathrm{III}}(x_s);\left[\left(\frac{dB}{dx}\right)_{x_s}^{\mathrm{III}}-\left(\frac{dB}{dx}\right)_{x_s}^{\mathrm{II}}\right]/B(x_s)=\Delta,$$

$$B^{\mathrm{III}}(a)=B^{\mathrm{IV}}(a);\left[\left(\frac{dB}{dx}\right)_a^{\mathrm{IV}}-\left(\frac{dB}{dx}\right)_a^{\mathrm{III}}\right]/B(a)=-\frac{2mpq_a}{aq_c(m-nq_a)}$$

(2.7)

经过演算，容易得到无导体壳（即$b\to\infty$）时，Δ的解析表达式：

$$-a\Delta=\left\{1-\frac{1-p}{m-nq_c}-\frac{q_ap}{q_c(m-nq_a)}\right\}\left\{1-\frac{1-p}{m-nq_c}\left[1-\left(\frac{c}{a}\right)^{2m}\right]\right\}/$$

$$\left\{\frac{1}{2m}\ \frac{r_s}{a}\left\{1-\frac{1-p}{m-nq_c}\left[1-\left(\frac{c}{x_s}\right)^{2m}\right]\right\}\left[1-\left(\frac{x_s}{a}\right)^{2m}\right]\right.$$

$$\left.\left[\frac{1}{1-\left(\frac{x_s}{a}\right)^{2m}}-\frac{q_ap}{q_c(m-nq_a)}\right]\right\} \qquad (2.8)$$

其中 $p=i_2/j_1$，$\left(\frac{x_s}{a}\right)^2=\left(\frac{q_c}{q_a}-p\right)/\left(\frac{n}{m}q_c-p\right)$，

$$\left(\frac{c}{x_s}\right)^2=\left(\frac{n}{m}\ q_c-p\right)/(1-p)$$

在 $m/n=2/1$，$q_c=1.05$，$q_a=2.1$，$p=0.3$，$a=1$ 时，(2.8) 式的解析解与该方法计算结果的比较如下：

表 2

方　　法		Δ　的　值
解　析　法		-12.1932811
该方法	$\varepsilon=10^{-6}$	-12.1930225
	$\varepsilon=10^{-4}$	-12.1907360
	$\varepsilon=10^{-3}$	-12.1678471

当解在 x_s 处没有对数奇异性时，从表2看出挖去的 $\in$ 越小越逼近真解。但当解在 x_s 处有对数奇异性时，挖去的 $\in$ 受到限制。因为这时挖去的 $\in$ 和选取的电流分布位形以及耗散

层宽度等因素有关，挖去的$\in$越小，对数奇异性越强（对数奇异性还取决于计算机的字长），给数值计算带来的困难越大。另一方面，从物理问题本身看，近似方程（2.2）的解是耗散层外边的解，所以挖去$\in$应与耗散层的宽度的量级大体相当。在我们的情况，耗散层宽度大约是10^{-3}的量级，因此挖去的$\in$为10^{-3}—10^{-2}就得到了稳定解。

参 考 文 献

〔1〕马腾才、宫野，电流分布对破裂不稳定性的影响，核聚变，1（1981），1—8。

〔2〕Furth, H.P.et al., Phys.Fluids, 6 (1963), 459.

〔3〕Furth, H.P.et al., Phys.Fluids, 16 (1973), 1054.

〔4〕王竹溪、郭敦仁，特殊函数概论，科学出版社（1965），57—68。

第十五章　线性非线性撕裂模演化的数值研究

§1. 线性双撕裂模演化的数值方法

一　引言

近年来，人们研究托卡马克上电流非单调径向分布时电阻流体运动的兴趣有所增加。其原因，一方面是由于MHD的约束理论指出非单调电流分布可能达到较高的 β 值[1]；另一方面是由于实验上观察到放电初期的MHD活动严重地损坏了放电稳态阶段的等离子体稳定性，从而引起人们对放电初期MHD活动的关注。在放电初期，当整个电流迅速上升时，由于趋肤效应，电流在等离子体边缘附近是非单调的。在这个阶段，实验上观察到具有明显螺旋形空间结构的MHD活动[2]。在电流非单调径向分布的情况下，会有两个与螺旋扰动（$\exp(im\theta+in\varphi)$）相共振的有理面 $r=r_s$，（$q(r_s)=m/n$）存在，实验上看到的MHD螺旋振荡自然地同等离子体在两个共振面附近的运动有关。此外，目前引起研究电流非单调分布时电阻流体运动兴趣的一个更重要的原因，是在大托卡马克的稳态放电阶段观察到了电流的非单调径向分布[3,4]。

在直柱近似下，文献〔5〕利用常“α”近似对电流非单调分布时撕裂模不稳定性已做了初步研究。但是，该文没有

触及到在电流非单调分布下电阻流体运动的特征及其扰动增长率。对这方面物理上的认识与了解是很重要的，它们对电阻流体运动的进一步发展有决定性的作用。此外，文献[5]使用常"ϕ"近似处理具有两个共振面的撕裂模不稳定性也是欠合理的。因为，当最外侧的共振面在等离子体边缘时，那里的电阻率与另一个共振面上的电阻率相比要高得多（文献[5]的假设条件）。这样一来，包含外共振面的耗散层厚度是比较宽的，取常"ϕ"近似不太合理。

我们基于电阻的磁流体方程组，在强纵向磁场的近似下，用数值方法研究了位形存在两个共振面时电阻流体活动的特性。计算是在不同电流分布和不同电导率的情况下，对$m=2$的扰动做的。结果表明：电阻MHD活动的特征及其增长率不仅依赖于电导率的大小和电流径向剖面峰化的程度，而且依赖于两个共振面之间磁垒的高低。当两个共振面被很高的磁垒分隔开时，电阻流体的运动基本上局限于两个共振面的邻域里，难以离开共振面而汇合在一起，扰动必然增长得慢。然而，当隔开两个共振面的磁垒比较低时，流体的动能就可能克服磁垒对运动的阻碍，于是流体就从共振面邻域扩展出来，而汇合在一起，这不仅导致增长率变大，而且这种汇合流动还会导致等离子体温度和电流径向剖面的加宽。这可能是放电初期阶段电流径向剖面迅速加宽的基本原因，因为在这个阶段上，每对共振面之间的磁垒都是比较低的。

二　基本方程和定解条件

在强纵向磁场的情况下，可用一组简化的电阻MHD方程[6]描述等离子体的螺旋运动。我们使用一组完全与文献[6]等价的、以场势ψ、速度势ϕ和涡旋$\omega=\mathrm{rot}_z\vec{V}$表示出的方

程组：

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla)\omega = (\vec{B}_* \cdot \nabla) j_z, \tag{1.1}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla)\phi = S^{-1}(\Delta\phi - 2q_0) - E_0, \tag{1.2}$$

$$\Delta\phi = -\omega \tag{1.3}$$

包含在上述方程中的矢量$\vec{B}_*$，$\vec{V}$和电流密度的z向分量j_z可由势函数给出如下：

$$\vec{B}_* = \nabla\phi \times \vec{e}_z, \quad \vec{V} = \nabla\phi \times \vec{e}_z, \quad j_z = -(\Delta\phi - 2q_0), \tag{1.4}$$

其中 $q_0 = nq_a/m$，q_a是等离子体柱边界 $r = a$ 处的安全因子的值；$S = \tau_R/\tau_A$，$\tau_R = 4\pi a^2/c^2\eta$，$\tau_A = a/V_A$，$V_A = B_\perp(a)/\sqrt{4\pi\rho}$，上述各方程中的物理量已用 a，τ_A和V_A做距离、时间和速度的单位无量纲化了。

方程组（1.1）——（1.3）的解应满足边界条件

$$\phi|_{r=1} = \phi|_{r=1} = 0.$$

在螺旋扰动的假设下，可从方程（1.1）——（1.3）得到需要进行数值求解的下述线性化方程组：

$$\frac{\partial \omega_1}{\partial t} = \frac{m}{r}\left[\phi_1\left(\Delta_\perp\phi_0' + \frac{m^2-1}{r^2}\phi_0'\right) - \phi_0'\Delta_\perp\phi_1\right], \tag{1.5}$$

$$\phi_1 = -\Delta_\perp^{-1}\omega_1, \tag{1.6}$$

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} = -\frac{m}{r}\phi_1\phi_0' + S^{-1}\Delta_\perp\phi_1. \tag{1.7}$$

初始条件：

$$\omega_1(r, 0) = 0, \tag{1.8}$$

$$\phi_1(r,\ 0)=\begin{cases}\text{const} & \text{当 } r_s-\in\leq r\leq r_s+\in,\\ 0 & \text{其它}\end{cases}\qquad(1.9)$$

边界条件：

$$\phi_1(0,\ t)=\phi_1(1,\ t)=0,\qquad(1.10)$$

$$\phi_1(0,\ t)=\phi_1(1,\ t)=0.\qquad(1.11)$$

上式中的下角标“0”表示未扰动量，下角标“1”表示扰动量，上角标“′”表示对r求导数，扰动磁场$\vec{B}_1=\nabla\phi_1\times\vec{e}_z$，算符

$$\Delta_1=\frac{1}{r}\cdot\frac{d}{dr}r\cdot\frac{d}{dr}-\frac{m^2}{r^2}.$$

这里我们将使用如下的电流密度分布：

$$j_z=j_0[r(1-r)]^{2p}.\qquad(1.12)$$

当$p=1$，2时，电流密度的径向剖面由图42给出。图上虚线给出是PLT上的等离子体电流分布（$j_z\sim T_e^{3/2}$）[8]。与电流分布（1.12）式相对应的$q(r)$值由

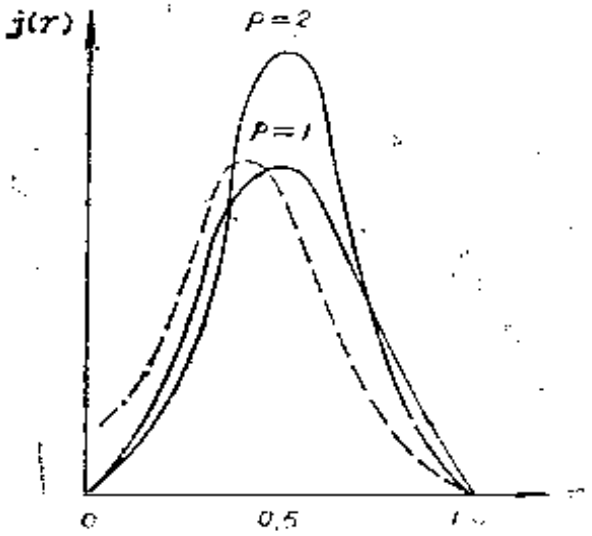


图42　电流密度的径向剖面

$$q(r)=Q_0\frac{r^2}{2}\left[\int_0^r(1-x)^{2p}x^{2p+1}dx\right]^{-1}$$

给出。这里Q_0是一个由q_a决定的常数。平衡磁场的通量函数ϕ_0为

$$\phi_0(r)=q_a\int_r^1\left[\frac{1}{q(x)}-\frac{n}{m}\right]xdx.$$

扰动增长率由磁场扰动幅值的指数增长率决定

$$\nu=\frac{1}{\phi_1}\cdot\frac{\partial\phi_1}{\partial t}.$$

共振面$r=r_s$由方程$\phi_0'(r_s)=0$即$q(r_s)=m/n$确定，它有两个共振面r_{s_1}和r_{s_2}。

三　数值解法

我们采用两步隐式有限差分法求解上述方程。为书写方便，将（1.5）——（1.11）式中的下角标“1”皆略去。根据物理量的性质（在奇异面附近$\phi\approx const$），和方程对ϕ的齐次性，在共振面r_{s_1}和r_{s_2}附近，可分别构造一个$\tilde{\delta}$函数。例如，把〔0，1〕区间分成J份（即$J+1$个分点）令

$$\tilde{\delta}(r_i)=\begin{cases}\exp[-L*(NS_1-2-i)] & \text{当 } i=2,3,\cdots,NS_1-3;\\ \exp[-L*(i-NS_1-2)] & \text{当 } i=NS_1+3,NS_1+4,\cdots,NS-1;\\ \exp[-L*(NS_2-2-i)] & \text{当 } i=NS+1,NS+2,\cdots,NS_2-3;\end{cases}$$

$$\widetilde{\delta}(r_i)=\begin{cases}\exp[-L*(i-NS_2-2)] & \text{当 } i=NS_2+3,\\ & NS_2+4,\ \cdots,\ J;\\ 1 & \text{当 } i=NS_1-2,\ NS_1-1,\\ & \cdots,\ NS_1+2;\\ & NS_2-2,\ NS_2-1,\\ & \cdots,\ NS_2+2.\\ 0 & \text{当 } i=1,\ NS,\ J+1.\end{cases}$$

于是，数值计算中可用 $\phi(r_i,\ 0)=\widetilde{\delta}(r_i)$ (1.9′) 代替（1.9）式。式中的 $NS_1=\mathrm{ent}\ (r_{s_1}*J)+1$，$NS_2=\mathrm{ent}(r_{s_2}*J)+1$，$NS=\mathrm{ent}\ ((NS_1+NS_2+1)/2)$，"ent" 表示取整数部分，$L$是待选取的某个正整数。

我们采用的对时间步长的两步隐式差分格式[7]如下：

对时间步长的前半步为

$$\omega^{t+\frac{1}{2}}=\omega^t+\frac{\Delta t}{2}(SM)^t, \tag{1.13}$$

$$\phi^{t+\frac{1}{2}}=-\Delta_1^{-1}\omega^{t+\frac{1}{2}}, \tag{1.14}$$

$$\phi^{t+\frac{1}{2}}=\phi^t+\frac{\Delta t}{2}(KM)^{t+\frac{1}{2}}. \tag{1.15}$$

对时间步长的后半步为

$$\begin{cases} \omega^{t+1} = \omega^t + \Delta t\,(SM)^{t+\frac{1}{2}}, & (1.16) \\ \phi^{t+1} = -\Delta_1^{-1}\omega^{t+1}, & (1.17) \\ \psi^{t+1} = \psi^t + \Delta t\,(KM)^{t+1}. & (1.18) \end{cases}$$

上式中的SM，KM分别表示（1.5）和（1.7）式的右端项。

旋度ω用显式格式，螺旋磁通量ψ和速度流函数ϕ用反演三对角矩阵求得。其具体步骤是：

将（1.14）和（1.17）式写成三对角矩阵形式

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_1 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{J-1} & b_J & c_J \\ & & & a_J & b_{J+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_J \\ \phi_{J+1} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \vdots \\ \omega_J \\ \omega_{J+1} \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

其中

$$\begin{cases} a_{i-1} = \dfrac{1}{h^2} - \dfrac{1}{2hr_i}, & b_i = -\dfrac{2}{h^2} - \dfrac{m^2}{r_i^2}, \\ c_i = \dfrac{1}{h^2} + \dfrac{1}{2hr_i}, & i = 2,\ 3,\ \cdots,\ J. \end{cases}$$

由边界条件（1.11）式，可取 $b_1 = b_{J+1} = 1$，$c_1 = a_1 = 0$，$\omega_1 = \omega_{J+1} = 0$。

同样，将（1.15）和（1.18）式写成三对角矩阵形式

$$\begin{pmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ A_1 & B_2 & C_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & A_{J-1} & B_J & C_J \\ & & & A_J & B_{J+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_J \\ \phi_{J+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_J \\ f_{J+1} \end{pmatrix} \tag{1.20}$$

其中

$$\left\{\begin{aligned} A_{i-1} &= D_t\left(\frac{1}{h^2} - \frac{1}{2hr_i}\right) S, \\ B_i &= -D_t\left(\frac{2}{h^2} + \frac{m^2}{r_i^2}\right) S - 1, \\ C_i &= D_t\left(\frac{1}{h^2} + \frac{1}{2hr_i}\right) S, \\ f_i &= \frac{m}{r_i} D_t \phi_i \psi_0'(i) - \phi_i, \qquad i = 2, 3, \cdots, J. \\ \boldsymbol{D_t} &= \begin{cases} \Delta t/2, & \text{对时间步长的前半步,} \\ \Delta t, & \text{对时间步长的后半步,} \end{cases} \end{aligned}\right.$$

由边界条件（1.10）式，可取 $B_1 = B_{J+1} = 1$， $C_1 = A_J = 0$，$f_1 = f_{J+1} = 0$

显然，上述矩阵皆是对角占优的。因此，可采用“追赶”法求解。关于“追赶”法的稳定性见文献[9]。

方程（1.7）的本征模的出现，是由计算r方向的有限差分网格的每个点处的增长率

$$\gamma = \frac{1}{\phi} \frac{\partial \phi}{t}$$

确定。当这个量在时间和空间上(除掉r方向上的两个端点)都变成常量时（例如，可由令

$$MD=\max_{2\le i\le I}\frac{1}{\phi}\cdot\frac{\partial\phi_i}{\partial t},\qquad MC=\min_{2\le i\le I}\frac{1}{\phi}\cdot\frac{\partial\phi_i}{\partial t},$$

当 $|(MD-MC)/MD|<\in_0$ 时判定，有效数字四位），就认为指数增长模已经发展起来，就将这个常量看作增长率γ值。

考虑到速度流函数 Φ 在共振面 $r=r_s$ 附近是奇函数，跳跃度较大。因此，数值求解时，可在奇异层附近把分点取得密一些，在离奇异层远的区域取的稀一些。这样做，既可保证得到物理上满意的结果，又可节省计算机存贮量和计算时间。

为检验计算编码的可靠性，按文献〔8〕给出的单调电流分布，计算了 $m=2$ 撕裂模的增长率和本征函数。其中 $m/n=2/1$，$p=2$，$\eta_s=1/S$ 时的部分结果见图43和表1。

对照文献〔8〕，图43与文献〔8〕中的图3完全一致；表1的数据与文献〔8〕中图2相应的数据完全符合。

注意到在线性近似下，磁场增长率恰好等于扰动磁能增长率 γ_w 的一半，即 $\gamma=\gamma_w/2$。

这里磁能增长率由

$$\gamma_w=\frac{1}{W}\frac{\partial W}{\partial t}$$

而定，其中

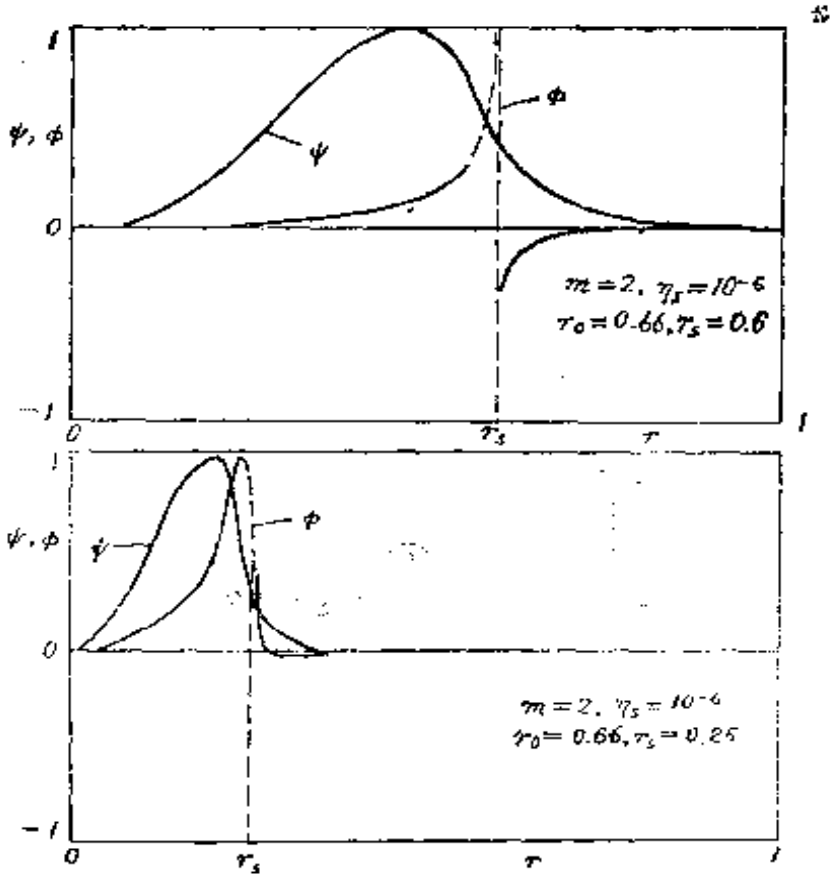


图43　本征函数ψ和Φ随r的变化曲线

表 1　($r_0 \approx r_s = 0.66$)

S	10^3	5×10^3	10^4	10^5	10^6	10^7
γ	0.049	0.067	0.061	0.026	0.010	0.0025

$$W = \int_0^1 r\left[\left(\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)^2 + \frac{m^2}{r^2}\phi^2\right] dr,$$

是磁能。于是，还可用计算出的$\gamma_w/2$是否等于γ来检验结果的正确性。计算结果表明，当γ定出时，它与同时算出的$\gamma_w/2$至少能符合三位有效数字。

计算实践表明，取 $L=6$为宜（我们取 $L=5$，6，7 发现对最终结果几乎没有影响）。另外，对节点加倍，时间步长减半，分别重新计算，其相应的增长率γ、本征函数ψ和ϕ都至少能符合三位有效数字。

四　计算结果及讨论

在计算中假定电阻率为常数，参量 S在10^4—10^6 范围取值，平衡态时的 ψ_0 由图44给出。在 I 的情况下（$q_0=2.5$ 和

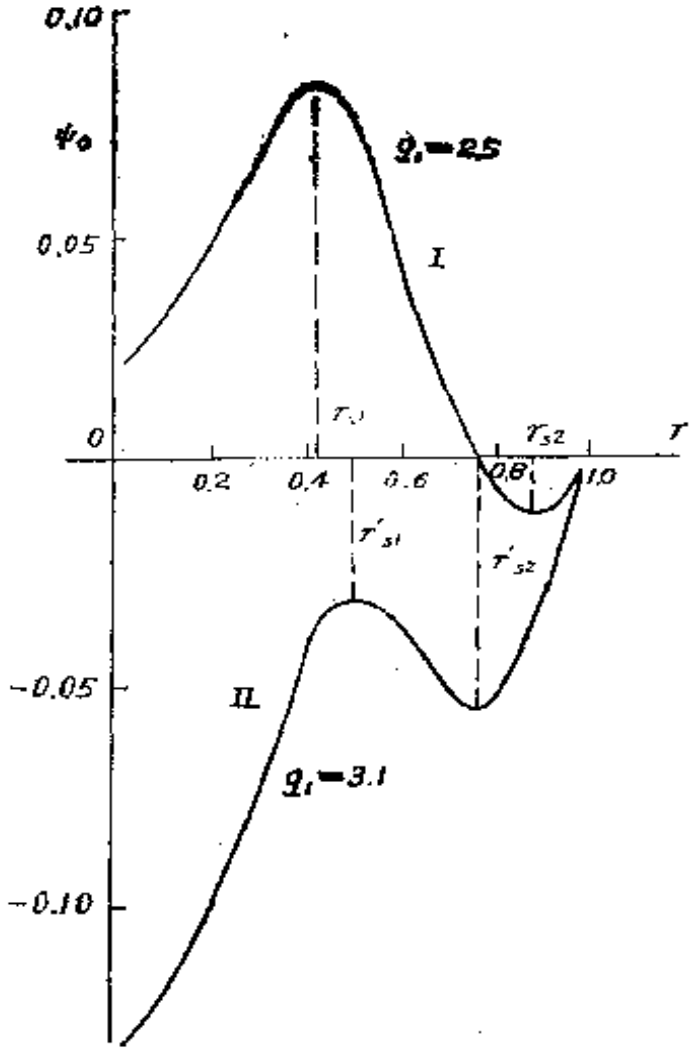


图44　磁通量函数 ψ_0 的径向分布

$p=2$）两个共振面（$r_{s_1}=0.441$，$r_{s_2}=0.893$）相距较远，分隔开它们的磁垒

$$\delta_h = |\phi_0(r_{s_2}) - \phi_0(r_{s_1})| \approx 0.1$$

比较高。这时磁垒基本上把等离子体的涡旋流动限制在共振面附近（见图45）。在II的情况下（$q_a=3.1$，$p=2$，$r_{s_1}=0.511$，$r_{s_2}=0.786$）共振面之间距离较近，分隔两个共振面的磁垒

$$\delta_h = |\phi_0(r_{s_2}) - \phi_0(r_{s_1})| \approx 0.02$$

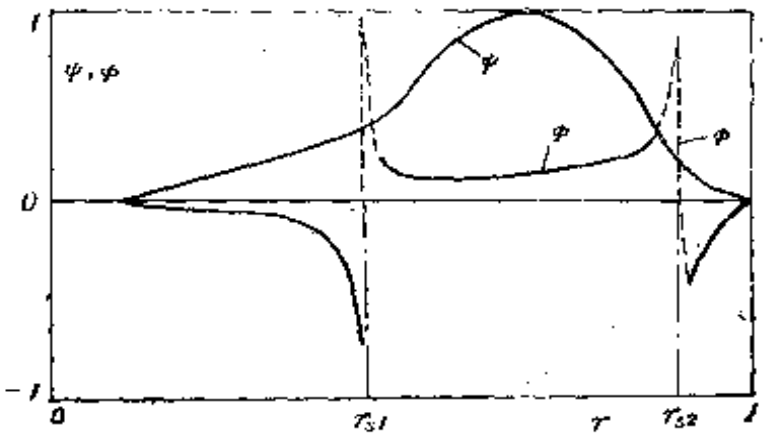


图45　对于$p=2$，$q_a=2.5$时本征函数ψ和φ的径向分布

很低，这时等离子体在共振面附近运动的动能可以克服磁垒的阻碍，扩展到两个共振面中间区域里（见图46）。这时扰动增长率明显地比情况I时的大（见图47）。它们之间的差随着S值的增加而增大。从物理上看，这一点是容易理解的，因为随着电导率的增大，等离子体的冻结效应得到加强，从而助长了磁垒对等离子体运动的阻碍作用。图48给出$p=1$，2两种电流分布的扰动增长率与S的函数关系。显然，

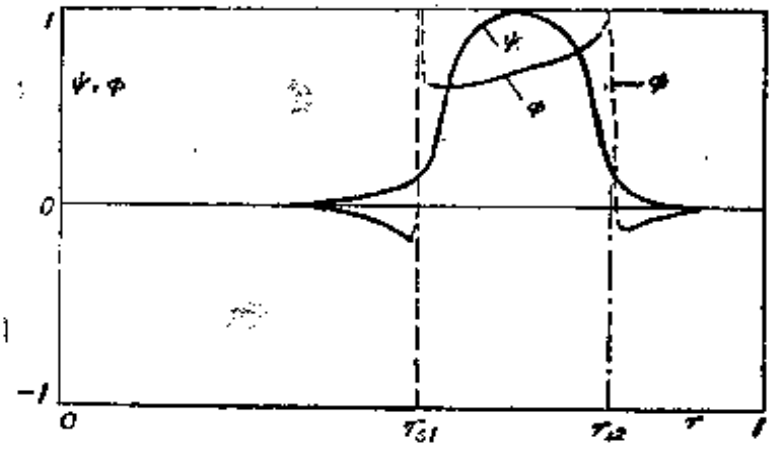


图46　对于$p=2$，$q_0=3.1$时本征函数ψ和ϕ的径向分布

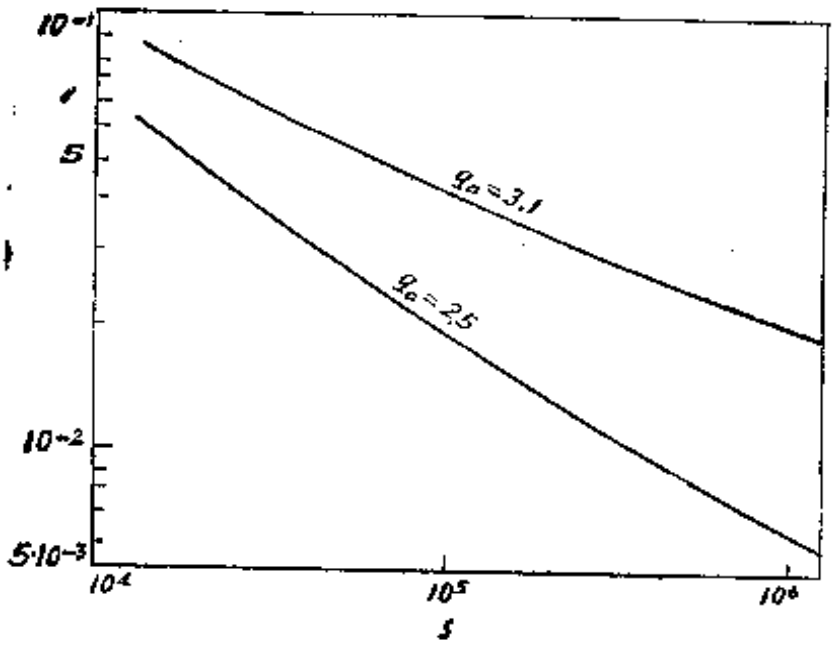


图47　$p=2$，$q_0=2.5$和3.1时增长率与S的函数关系

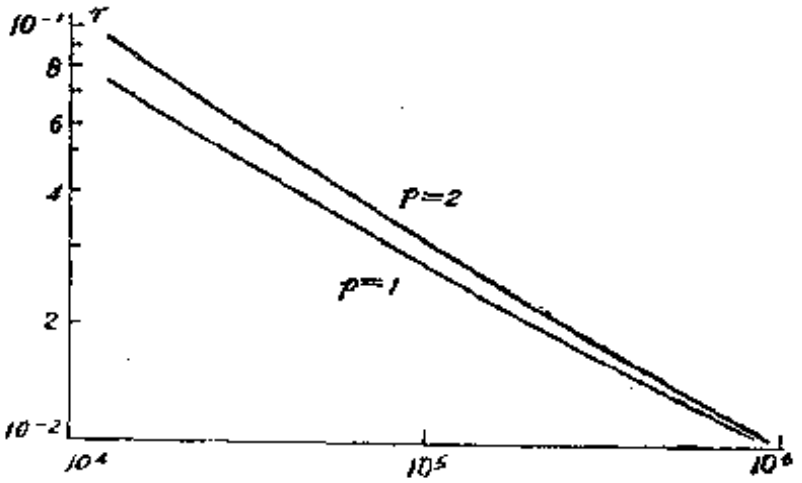


图48 在不同电流分布下（$p=1,2$；$q_0=2.7$），增长率与S的函数关系

电流趋肤的程度越强，即电流径向分布的剖面越窄、越尖，稳定性就越差，增长率越大。随着电导率的增大，电流分布对增长率的影响变小（见图48）。

五 结束语

通过以上的数值分析，可以看出：对于非单调径向分布的等离子体电流，电阻流体在共振面附近的运动具有明显的特点。当隔开共振面的磁垒很大时，流体只局限在共振面的邻域里做涡旋运动。然而，当隔开共振面的磁垒比较低时，原来局限在共振面邻域的涡旋流动可以延伸到共振面的中间区域，彼此混合起来。这种混合流动有助于等离子体温度和电流密度的径向剖面加宽，削弱趋肤效应，加速电流向中心集中，从而可以改善等离子体的稳定性。

§2. 撕裂模非线性演化的数值解法

近年来，国外有些文章[10,11]中粗略地提到了撕裂模非

线性演化的数值方法，例如提出采用两步算法，初始扰动项采用 Fourier 级数展开式。对初始条件，边界条件如何选取，对称条件如何使用，以及保证得到稳定解选取何种差分格式等等，都没有具体地说明，特别是很少提到有关双撕裂模非线性演化的计算。我们则详细地介绍了研究撕裂模非线性演化的数值方法。为易于求解本征函数 ϕ 和 ψ，采用了隐式交替方向法；为用“追赶”法时，使相应系数矩阵对角占优，根据不同情况，分别选用向前或向后差分公式。初始扰动项直接选用线性 code 的计算结果。另外，该方法对计算双撕裂模非线性演化特别方便，只须将某些初始值稍加改动一下即可。

一 基本方程和定解条件

为了研究撕裂模非线性演化，特别是考察磁岛随时间的演化，需要对下述方程组进行数值求解：

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)\omega = \vec{e}_z \cdot [\nabla\phi \times \nabla(\Delta\psi)] \qquad (2.1)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla)\psi = s^{-1}(\Delta\psi - 2q_0) + E_0 \qquad (2.2)$$

式中算符：

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial_r} + \frac{\vec{e}_\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}, \qquad \Delta = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}.$$

$\omega = -\Delta\phi$，$\vec{v} = \nabla\phi \times \vec{e}_z$，安全因子的径向分布 $q(r) = q_0\left[1 + \left(\frac{r}{r_0}\right)^{2p}\right]^{\frac{1}{p}}$（相应电流密度分布为

$$j_z(r)=j_0\left[1+\left(\frac{r}{r_0}\right)^{2p}\right]^{-\frac{p+1}{p}},\quad q_0=nq(1)/m.$$

$$E_0=s^{-1}(1)\left[2-\frac{q'(1)}{q(1)}\right],\quad s^{-1}(r)=\left[1+\left(\frac{r}{r_0}\right)^{2p}\right]^{\frac{p+1}{p}}/s_0,$$

r_0是电流通道宽度，s_0，p等为已知参数。

将方程（2.1）、（2.2）展开，得

$$\frac{\partial\omega}{\partial t}+V_r\frac{\partial\omega}{\partial r}+\frac{V_\theta}{r}\frac{\partial\omega}{\partial\theta}=$$

$$-\frac{1}{r}\left(\frac{\partial\phi}{\partial r}\frac{\partial j_z}{\partial\theta}-\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\frac{\partial j_z}{\partial r}\right),\qquad(2.1')$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+V_r\frac{\partial\phi}{\partial r}+\frac{V_\theta}{r}\frac{\partial\phi}{\partial\theta}=$$

$$s^{-1}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial\phi}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2}-2q_0\right)+E^0\qquad(2.2')$$

其中

$$\omega=-\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial\phi}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2}\right),$$

$$j_z=-(\Delta\phi-2q_0),$$

$$V_r=\frac{1}{r}\frac{\partial\phi}{\partial\theta},\qquad V_\theta=-\frac{\partial\phi}{\partial r}.$$

（2.1′）和（2.2′）就是要求解的方程，其初始条件是：

$$\begin{cases}\omega|_{t=0}=-\Delta\phi|_{t=0} & (2.3)\\ \phi|_{t=0}=\phi_0(r)+\in_0 b^{(1)}(r)\cos 2\theta & (2.4)\end{cases}$$

边界条件是：

$$\begin{cases}\phi|_{r=0}=0, \quad \phi|_{r=1}=0 & (2.5)\\ \dfrac{\partial\phi}{\partial r}\Big|_{r=0}=0, \quad \phi|_{r=1}=0 & (2.6)\end{cases}$$

这里

$$\phi|_{t=0}=\int rV_r d\theta=\frac{A}{2}u(r)r\sin 2\theta,$$

$$V_r|_{t=0}=Au(r)\cos 2\theta,$$

$$V_\theta|_{t=0}=-\frac{A}{2}\frac{d(ru)}{dr}\sin 2\theta,$$

$$j_r|_{t=0}=-(\Delta\phi-2q_0)|_{r=0},$$

$$\phi_0(r)=q_{(1)}\int_r^1\left[\frac{1}{q(x)}-\frac{n}{m}\right]xdx,$$

$$u(r)=r^2[r_s^2-(r_s^2+1)r^2+r^4]/r_s^2,$$

$\phi^{(1)}(r)$ 和后面的 $\phi^{(1)}(r)$ 是线性 code 得到的结果，其算法见文献[12]。r_s为共振面，它由方程 $\phi_0'(r_s)=0$确定。$\in_0$ 和后面的 $\in_1$ 是在初始扰动量很小时，为缩短计算时间而选取的倍增系数。当然，最终收敛解与 $\in_0$ 和 $\in_1$ 的选取无关。A 为已知参数。

二　数值解法

我们知道 $m=2$ 时扰动的本征函数 ϕ，ψ 具有对 称 性，因此只要在第一象限即半径为 1 的四分之一圆的区域里进行求解就够了。为此，选取极坐标系 (r, θ)，并划分扇形网格。径向r等步长分成$I-1$份，极向θ等弧长分成$J-1$份（见图49）。令

$$\Delta r = \frac{1}{I-1}, \qquad \Delta\theta = \frac{\pi}{2(J-1)},$$

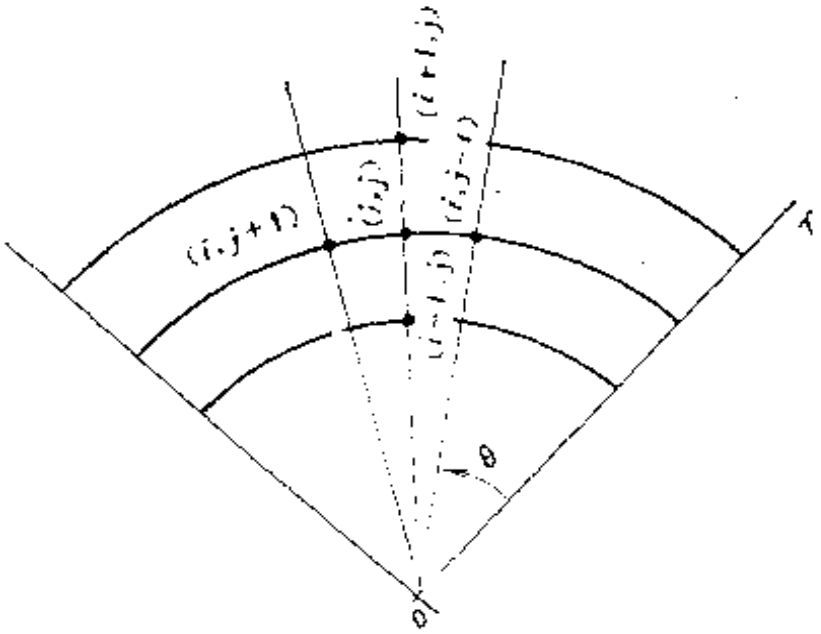


图49　扇形网格示意图

定义一、二阶差商：

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial r^2}\right)_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta r^2},$$

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2}\right)_{i,j} = \frac{\phi_{i,j+1} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i,j-1}}{\Delta\theta^2},$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)_{i,j} = \begin{cases} \dfrac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta r}, & \text{（向前差商）} \\ \dfrac{\phi_{i,j} - \phi_{i-1,j}}{\Delta r}, & \text{（向后差商）} \\ \dfrac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta r}, & \text{（中心差商）} \end{cases}$$

(2.1′) 和 (2.2′) 是抛物型偏微分方程组。显然，通常不采用全显式格式进行数值求解。如果采用全隐式格式，则时间步长可以比部分隐式格式要大，大约是 3—4 倍。然而，为使迭代迅速收敛，我们期望全隐式格式的时间步长必须减小到大约 2 倍。另一方面，从格式上可以看出，全隐式迭代每一步是部分隐式迭代时间的 2 倍。所以，与部分隐式格式进行比较，全隐式格式大概几乎没有什么优点。因此，通过工作实践，选用下述对时间步长的两步部分隐式差分格式：

步 1：

$$\omega^{l+\frac{1}{2}} = \omega^{l} + \frac{\Delta t}{2}\left[\frac{1}{r}\left(\frac{\partial \phi}{\partial \theta}\frac{\partial j_z}{\partial r} - \frac{\partial j_z}{\partial \theta}\frac{\partial \phi}{\partial r}\right) - V_r\frac{\partial \omega}{\partial r} - \frac{V_\theta}{r}\frac{\partial \omega}{\partial \theta}\right], \tag{2.7}$$

$$\Delta\phi^{l+\frac{1}{2}} = -\omega^{l+\frac{1}{2}}, \tag{2.8}$$

$$\left.\begin{aligned} V_r^{l+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{r}\left(\frac{\partial \phi}{\partial \theta}\right)^{l+\frac{1}{2}} \\ V_\theta^{l+\frac{1}{2}} &= -\left(\frac{\partial \phi}{\partial r}\right)^{l+\frac{1}{2}} \end{aligned}\right\}, \tag{2.9}$$

$$\phi^{l+\frac{1}{2}} = \phi^{l} + \frac{\Delta t}{2}\left[-V_r\frac{\partial \phi}{\partial r} + s^{-1}\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial \phi}{\partial r} - 2q_0\right) + E_0\right]^{l+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2}\left(-\frac{V_\theta}{r}\frac{\partial \phi}{\partial \theta} + \frac{s^{-1}}{r^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2}\right)^{l}, \tag{2.10}$$

$$j_z^{l+\frac{1}{2}} = -(\Delta\phi - 2q_0)^{l+\frac{1}{2}}. \tag{2.11}$$

步 2：

$$\omega^{t+1}=\omega^{t}+\Delta t\left[\frac{1}{r}\left(\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\cdot\frac{\partial j_z}{\partial r}-\frac{\partial j_z}{\partial\theta}\cdot\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)\right.$$

$$\left.-V_r\frac{\partial\omega}{\partial r}-\frac{V_\theta}{r}\cdot\frac{\partial\omega}{\partial\theta}\right]^{t+\frac{1}{2}} \tag{2.7'}$$

$$\Delta\phi^{t+1}=-\omega^{t+1}, \tag{2.8'}$$

$$\left.\begin{aligned}V_r^{t+1}&=\frac{1}{r}\left(\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\right)^{t+1}\\ V_\theta^{t+1}&=-\left(\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)^{t+1}\end{aligned}\right\}, \tag{2.9'}$$

$$\phi^{t+1}=\phi^{t+\frac{1}{2}}+\frac{\Delta t}{2}\left[-V_r\frac{\partial\phi}{\partial r}+s^{-1}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial\phi}{\partial r}-2q_a\right)\right.$$

$$\left.+E_a\right]^{t+\frac{1}{2}}+\frac{\Delta t}{2}\left(-\frac{V_\theta}{r}\cdot\frac{\partial\phi}{\partial\theta}+\frac{s^{-1}}{r^2}\cdot\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2}\right)^{t+1}, \tag{2.10'}$$

$$j_z^{t+1}=-(\Delta\phi-2q_a)^{t+1}. \tag{2.11'}$$

旋度$\omega^{t+\frac{1}{2}}$，ω^{t+1}用显式格式；速度流函数$\phi^{t+\frac{1}{2}}$，ϕ^{t+1}用隐式交替方向法，其中第一个半步，径向r是隐式格式，第二个半步，极向θ是隐式格式；螺旋磁通量$\phi^{t+\frac{1}{2}}$，ϕ^{t+1}用反演三对角矩阵求得。为保证相应系数矩阵对角占优，对$\frac{\partial\phi}{\partial r}$，$\frac{\partial\phi}{\partial\theta}$根据情况，选取向前或向后差商公式。具体作法是：将方程（2.8）和（2.8′）写成

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2}+\omega=0, \tag{2.12}$$

并引入记号：

$$L_R = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}, \qquad L_\theta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2},$$

对（2.12）式使用如下的隐式交替方向法的格式：

$$\begin{cases} -L_R\phi^{n+\frac{1}{2}} = L_\theta\phi^n + \omega, & (A\text{—}1) \\ -L_\theta\phi^{n+1} = L_R\phi^{n+\frac{1}{2}} + \omega. & (A\text{—}2) \end{cases}$$

于是就可对（A—1）和（A—2）式用“追赶”法求解。为此，把（A—1）式写成：

$$\begin{aligned} & a_{i-1}\phi_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}} + b_i\phi_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + c_i\phi_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} \\ & = \frac{\phi_{i,j+1}^n - 2\phi_{i,j}^n + \phi_{i,j-1}^n}{r_i^2\Delta\theta^2} + \omega_{i,j} \equiv f_{i,j} \end{aligned} \qquad (2.13)$$

这里系数

$$\begin{cases} a_{i-1} = \dfrac{1}{2\Delta r r} - \dfrac{1}{\Delta r^2}, \\ b_i = \dfrac{2}{\Delta r^2}, \qquad i = 2,\ 3,\ \cdots,\ I-1. \\ c_i = -\dfrac{1}{2\Delta r r_i} - \dfrac{1}{\Delta r^2}. \end{cases}$$

略去足码j，将（2.13）式写成三对角矩阵形式：

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_1 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{I-2} & b_{I-1} & c_{I-1} \\ & & & a_{I-1} & b_I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{I-1} \\ \phi_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{I-1} \\ f_I \end{pmatrix}$$

利用条件：$\phi_{1,j} = \phi_{I,j} = 0$，可取 $b_1 = b_I = 1$，$a_{I-1} = c_1 = f_1 = f_I = 0$。

同样，把（A—2）式写成：

$$A_{i-1}\phi_{i,j-1}^{n+1} + B_i\phi_{i,j}^{n+1} + C_i\phi_{i,j+1}^{n+1}$$

$$= \left[\left(\frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta r^2} + \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta r r_i}\right)^{n+\frac{1}{2}} + \omega_{i,j}\right] \times r_i^2 \Delta\theta^2 = F_{i,j} \qquad (2.14)$$

这里系数

$$\begin{cases} A_{i-1} = -1, \\ B_i = 2, \qquad i = 2, 3, \cdots, I-1. \\ C_i = -1. \end{cases}$$

略去足码 i，将（2.14）式写成三对角矩阵形式：

$$\begin{pmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ A_1 & B_2 & C_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & A_{J-2} & B_{J-1} & C_{J-1} \\ & & & A_{J-1} & B_J \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{J-1} \\ \phi_J \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ \vdots \\ F_{J-1} \\ F_J \end{pmatrix}$$

因为可认为：$\phi_{1,1}^{n+1}=\phi_{1,1}^{n+\frac{1}{2}}$和$\phi_{1,J}^{n+1}=\phi_{1,J}^{n+\frac{1}{2}}$，于是可取$B_1=B_1=1$，$C_1=A_{I-1}=0$，$F_1=\phi_{1,1}^{n+\frac{1}{2}}$，$F_J=\phi_{1,J}^{n+\frac{1}{2}}$。

(2.10) 式相应的差分方程是：

$$\alpha_{I-1}\phi_{I-1,i}^{i+\frac{1}{2}}+\beta_I\phi_{I,i}^{i+\frac{1}{2}}+\gamma_I\phi_{I+1,i}^{i+\frac{1}{2}}$$

$$=\left[\phi_{I,i}+\frac{\Delta t}{2}\left(-\frac{V_{I,i}^{\theta}}{r_I}\frac{\phi_{I,j+1}-\phi_{I,j}}{\Delta\theta}\right.\right.$$

$$\left.\left.+\frac{s^{-1}}{r_I^2}\frac{\phi_{I,j+1}-2\phi_{I,j}+\phi_{I,j-1}}{\Delta\theta^2}\right)\right]^t+\frac{\Delta t}{2}(E_3-2q_0s^{-1})$$

$$\equiv G_{I,i}. \qquad (2.15)$$

为使（2.15）式相应的系数矩阵对角占优，取

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)_{I,i}=\begin{cases}\dfrac{\phi_{I,j}-\phi_{I-1,j}}{\Delta r}, & \text{当}V_{I,j}^r>0\text{时}\\[2ex] \dfrac{\phi_{I+1,j}-\phi_{I,j}}{\Delta r}, & \text{其它,}\end{cases}$$

$$\alpha_{I-1}=\begin{cases}-\Delta_1-\Delta_2, & \text{当}V_{I,j}^r>0\\ -\Delta_1, & \text{其它,}\end{cases};$$

$$\beta_I=\begin{cases}1+\Delta_2+2\Delta_1, & \text{当}V_{I,j}^r>0\\ 1-\Delta_2+2\Delta_1, & \text{其它,}\end{cases};$$

$$\gamma_I=\begin{cases}-\Delta_1, & \text{当}V_{I,j}^r>0\\ \Delta_2-\Delta_1, & \text{其它。}\end{cases}$$

其中

$$\Delta_1 = \frac{\Delta t s^{-1}}{2\Delta r^2}, \quad \Delta_2 = \left(V_{i,j}^r - \frac{s^{-1}}{r} \right) \frac{\Delta t}{2\Delta r}.$$

利用条件：$\phi_{1,j} = \phi_{2,j}$（即 $\left.\frac{\partial \phi}{\partial r}\right|_{r=0} = 0$）和 $\phi_{I,j} = 0$，可取

$\beta_1 = \beta_I = 1$，$\gamma_1 = -1$，$\alpha_{I-1} = 0$ 和 $G_{1,j} = G_{I,j} = 0$。

（2.10′）式相应的差分方程是：

$$\alpha_{i-1}^* \phi_{i,j-1}^{t+1} + \beta_i^* \phi_{i,j}^{t+1} + \gamma^* \phi_{i,j+1}^{t+1}$$

$$= \left\{ \phi_{i,j} + \frac{\Delta t}{2} \left[-V_{i,j}^r \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{\Delta r} \right.\right.$$

$$\left.\left. + s^{-1} \left(\frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{\Delta r^2} + \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i,j}}{r_i \Delta r} \right) \right] \right\}^{t+\frac{1}{2}}$$

$$+ \frac{\Delta t}{2} (E_0 - 2q_0 s^{-1}) \equiv G_{i,j}^*. \qquad (2.16)$$

为使（2.16）式相应的系数矩阵对角占优，取

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial \theta} \right)_{i,j} = \begin{cases} -\dfrac{\phi_{i,j} - \phi_{i,j-1}}{\Delta \theta}, & \text{当 } V_{i,j}^\theta > 0 \\ \dfrac{\phi_{i,j+1} - \phi_{i,j}}{\Delta \theta}, & \text{其它,} \end{cases}$$

$$\alpha_{i-1}^* = \begin{cases} -\Delta_1^* - \Delta_2^*, & \text{当 } V_{i,j}^\theta > 0 \\ -\Delta_1^*, & \text{其它,} \end{cases};$$

$$\beta_i^* = \begin{cases} 1 + \Delta_2^* + 2\Delta_1^*, & \text{当 } V_{i,j}^\theta > 0 \\ 1 - \Delta_2^* + 2\Delta_1^*, & \text{其它,} \end{cases}$$

$$\gamma_i^* = \begin{cases} -\Delta_1^*, & \text{当} V_{i,j}^0 > 0 \\ \Delta_2^* - \Delta_1^*, & \text{其它.} \end{cases}$$

其中

$$\Delta_1^* = \frac{\Delta t s^{-1}}{2r_i^2 \Delta\theta^2}, \quad \Delta_2^* = \frac{\Delta t V_{i,j}^0}{2r_i \Delta\theta}.$$

由于可认为$\phi_{i,1}^{t+1} = \phi_{i,1}^{t+\frac{1}{2}}$, $\phi_{i,j}^{t+1} = \phi_{i,j}^{t+\frac{1}{2}}$, 因此可取

$$\beta_1^* = \beta_j^* = 1, \quad \gamma_1^* = \alpha_{j+1}^* = 0, \quad G_{i,1}^* = \phi_{i,1}^{t+\frac{1}{2}}, \quad G_{i,j}^* = \phi_{i,j}^{t+\frac{1}{2}}.$$

这样,(2.13) —— (2.16) 式相应的系数矩阵都是对角占优的, 可采用"追赶"法求解。

对双撕裂模的非线性演化, 只须做如下改动:

取

$$\phi|_{t=0} = \in_1 \phi^{(1)}(r)\sin 2\theta,$$

和安全因子的径向分布:

$$q(r) = Q_0 \frac{r^2}{2}\left[\int_0 (1-x)^{2p} x^{2\alpha+1} dx\right]^{-1}$$

(相应的 $j_z(r) = j_0[r(1-r)]^{2p}$) 。

三 计算结果及简单讨论

为检验方法的可靠性, 按照文〔8〕给出的单调电流分布, 计算了 $m/n = 2/1$ 的线性撕裂模的增长率和本征函数, 计算结果与文〔8〕的完全一致。

在参数$m/n = 2/1$, $s_0 = 2 \times 10^5$, $r_0 = 0.66$, $r_s = 0.76$; $p = 2$, 4; $A = 1$, 1.5, 2的情况下, 计算了单撕裂模的非线性演化。其中部分结果见图50—52。

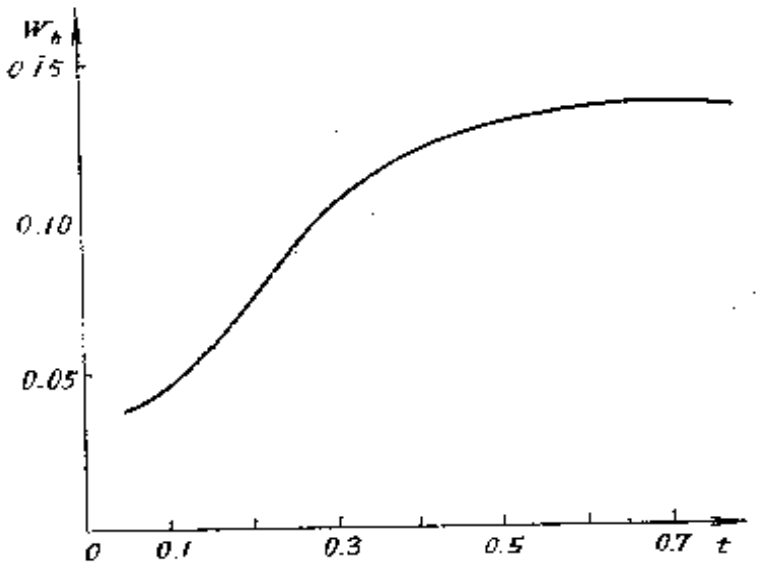


图50　$\rho=2$，$A=1.5$ 时磁岛宽度 W_h 随时间 t 的演化

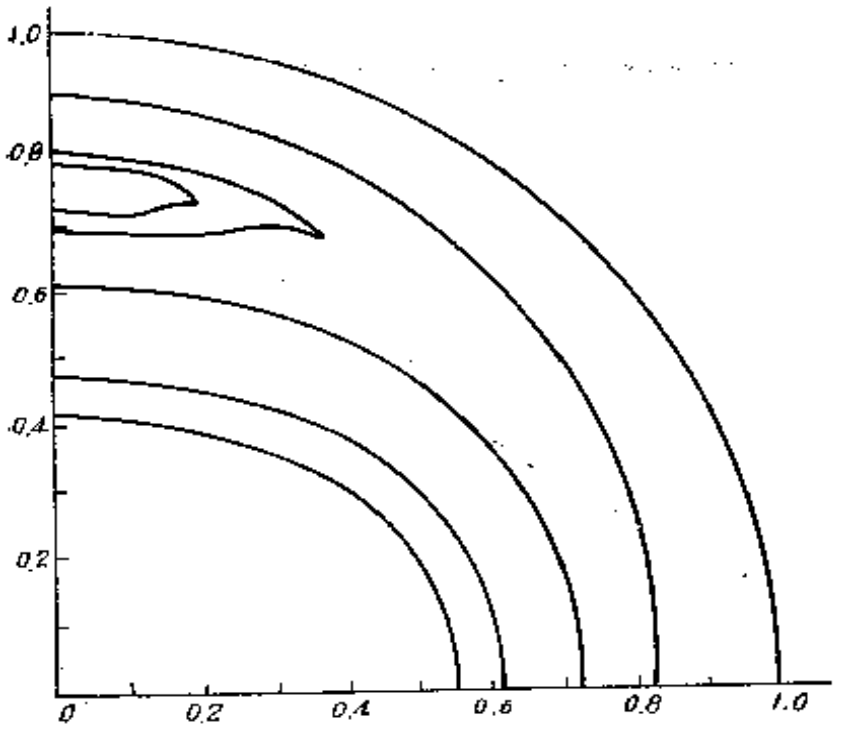


图51　$\rho=2$，$A=1.5$，$t=0.4$ 时的磁岛结构

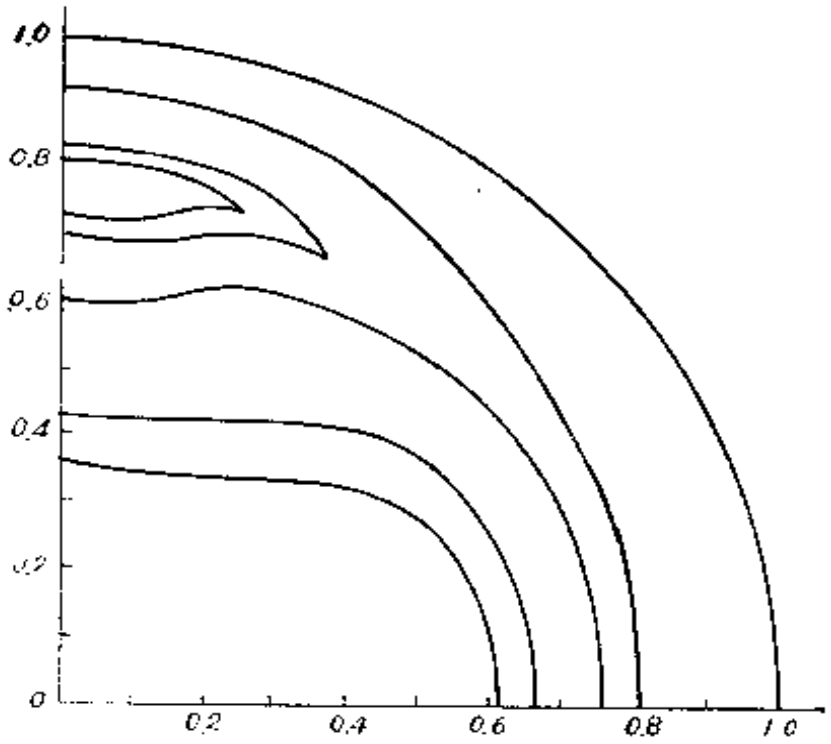


图52 $p=2$，$A=1.5$，$t=0.75$时的饱和磁岛结构

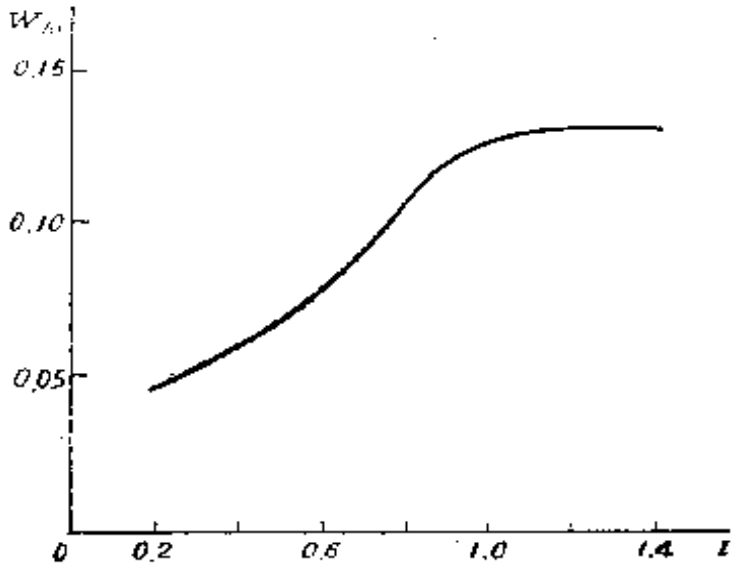


图53 $p=2$，$q_1=2.5$ 时，磁岛宽度 W_{h1} 随时间 t 的演化

在参数 $m/n=2/1$，$s^{-1}(r)=1/s_0$，$s_0=2\times10^5$，$p=2$，$q_1=2.5$（相应的两个共振面：$rs_1=0.441$，$rs_2=0.893$），和$q_1=3.1$（相应的两个共振面：$rs_1=0.511$，$rs_2=0.786$）的情况下，计算了双撕裂模的非线性演化。其中部分结果见图53—55。

从图 50—52 看出，$t=0.4$ 时，磁岛宽度 $Wh\approx0.115$，随时间演化到$t=0.75$时，饱和磁岛宽度$Wh\approx0.137$.

从图 53—55 看出，$t=0.4$ 时，磁岛宽度 $Wh_1\approx0.06$，$Wh_2\approx0.18$，随时间演化到 $t=1.3$时，饱和磁岛宽度分别为 $Wh_1\approx0.125$，$Wh_2\approx0.21$。这时有两个磁岛。

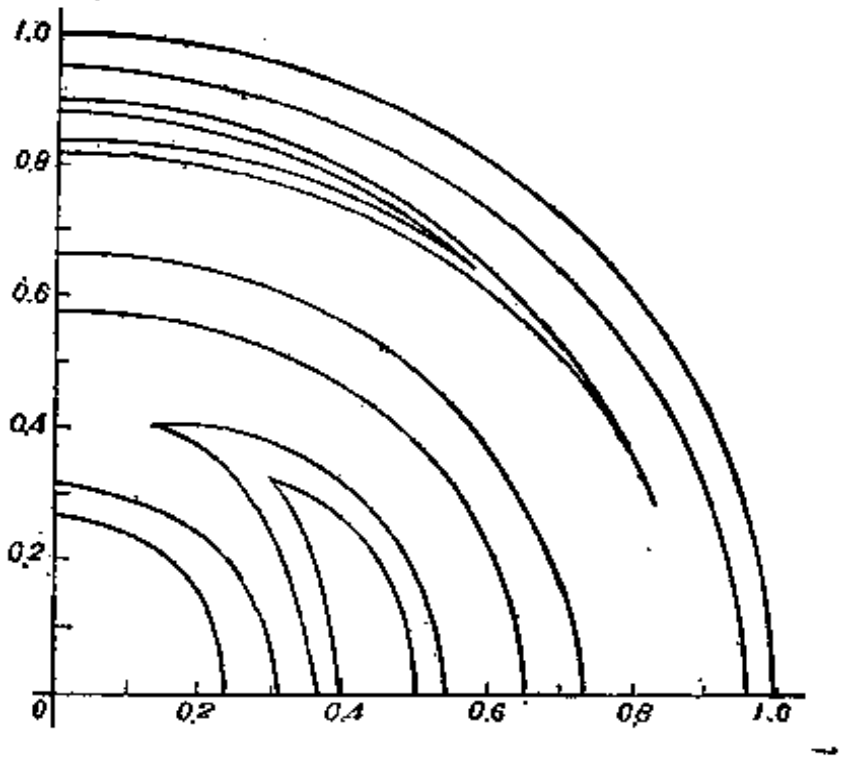


图54 $p=2$，$q_1=2.5$，$t=0.4$ 时的磁岛结构（双撕裂模）

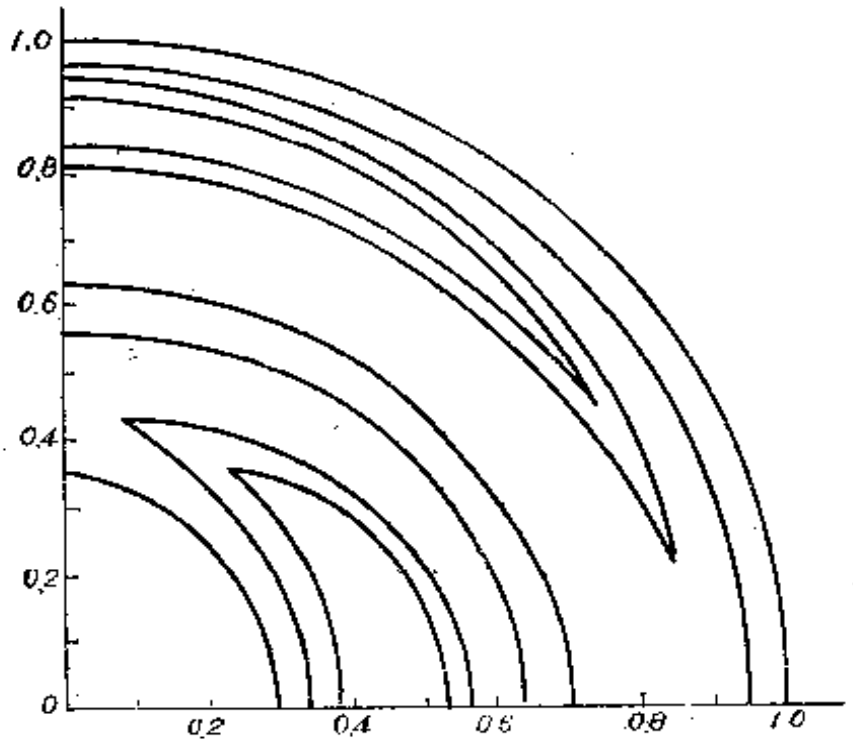


图55 $p=2$，$q_s=2.5$，$t=1.3$ 时的饱和磁岛结构（双撕裂模）

从图50和图53还可看出，当 t 很小时，磁岛宽度都略高了一些。这是由于我们在初始扰动项中，选取的因子 $\in_0$ 和 $\in_1$ 略大了一点的缘故。然而，如果选取 $\in_0$ 和 $\in_1$ 非常小，则达到饱和磁岛的时间就特别长。因此，我们将 $\in_0$ 和 $\in_1$ 选的略大一点，是为了大大节省计算时间。

参 考 文 献

〔1〕石秉仁，科学通报，23 (1982)，1425.

〔2〕С.В.МИРНОВ, Физика Плазмы, 4 (1978), 50.

〔3〕N.Bretz et al., Status of Ohmic Heating in PLT, Symposium, Princeton, Sept., 2.1, (1977).

〔4〕Г.А.Бобровский Изр., Физика плазмы, 5 (1982), 1027.

〔5〕H.P.Furth, et al., Phys. Fluids, 16 (1973), 1054.
〔6〕В.В.Кадомцев, ЖЭТФ, 65 (1973), 575.
〔7〕B.V.Waddell, et al., Phys.Fluids, 22 (1979), 860.
〔8〕D.Biskamp, IAEA—CN—35/B_2—2.
〔9〕张关泉，计算数学，3 (1982)，298.
〔10〕Hicks H.R., et al., J.Comp.Phys.44, 1 (1981), 46—69.
〔11〕Kerner W., et al., Comput. Phys. Comm.24, 3—4(1981), 407—411.
〔12〕马腾才、宫野，电流非单调分布时的电阻流体不稳定性，物理学报，8 (1984)，1112.

上机实习题

1. 试用二等分法编 $f(x)=0$ 在区间 $[a, b]$ 中求实根的程序。（示例：取 $f(x)=\sin x$, $[a, b]=[-2, 7]$, 答案 $x_1=0$, $x_2=\pi$, $x_3=2\pi$）。

2. 试编制计算 n 次多项式值的程序。

3. 试用泰勒展开式编计算高精度 $\exp(x)$ 值的程序。（示例：$\exp(-2)=0.1353353$, $\exp(2)=7.3890561$）。

4. 试用高斯消去法和列主元消去法编求解 n 个线性代数方程组的程序。（示例：

$$\begin{pmatrix} 2 & 6 & -1 \\ 5 & -1 & 2 \\ -3 & -4 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -12 \\ 29 \\ 5 \end{pmatrix}$$

答案 $x_1=3$, $x_2=-2$, $x_3=6$）。

5. 试用牛顿迭代法和下降法编制求解非线性方程组的程序。（示例：求解非线性方程组

$$\begin{cases} f_1 = x_1 - 5x_2^2 + 7x_3^2 + 12 = 0, \\ f_2 = 3x_1x_2 + x_1x_3 - 11x_1 = 0, \\ f_3 = 2x_2x_3 + 40x_1 = 0, \end{cases}$$

在初始值 $(x_1^0,\ x_2^0,\ x_3^0) = (1.5,\ 7.5,\ -6)$附近的一组解。答案 $x_1 = 1,\ x_2 = 5,\ x_3 = -4$）。

6. 试用辛甫生公式和龙贝格法编计算定积分$\int_a^b f(x)dx$的程序。

（示例：$\int_0^1 \frac{1}{1+x}dx = ln2,\ \int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx = \pi$）。

7. 试用菲隆法编计算积分$\int_a^b f(x)\begin{matrix}\sin(kx)\\ \cos(kx)\end{matrix}dx$的程序。

（示例：$\int_0^{20} e^{-x}\sin(100x)dx \approx 0.99990000 \times 10^{-2}$，

$\int_0^{20} e^{-x}\cos(100x)dx \approx 0.99931852 \times 10^{-4}$）。

8. 试用龙格——库塔法编求解微分方程

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x,\ y), \\ y_0 = y(x_0), \end{cases}$$

的程序。（示例：$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = y - \frac{2x}{y}, \\ y_0 = 1, \end{cases}$

在区间[0, 1.6]内以步长0.2求解。答案$y(1) = 1.7321419$，$y(1.6) = 2.0496601$）。

9. 试编解三对角型方程组的“追赶”法程序。

（示例：
$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 8 \\ 15 \\ 24 \\ 29 \end{pmatrix}$$

答案$x_1=1$，$x_2=2$，$x_3=3$，$x_4=4$，$x_5=5$）。

10. 试用雅可比方法编求实对称矩阵特征值和特征向量的程序。（示例：求矩阵

$$A=\begin{vmatrix} 10 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 9 & -1 & 2 & -3 \\ 2 & -1 & 7 & 3 & -5 \\ 3 & 2 & 3 & 12 & -1 \\ 4 & -3 & -5 & -1 & 15 \end{vmatrix}$$

的特征值和特征向量。）

答案$\lambda_1=-0.69948378\times10^1$，$\lambda_2=0.93655549\times10^1$，

$\lambda_3=0.16552662\times10^1$，$\lambda_4=0.15808921\times10^2$，

$\lambda_5=0.19175420\times10^2$。

u_1	u_2	u_3
0.65408298	-0.38729687	0.17450511
0.19968127	0.36622102	-0.24730252
0.25651046	0.70437727	-0.36164174
-0.66040272	-0.11892622	-0.26441085
-0.17427986	0.45342311	0.84124407

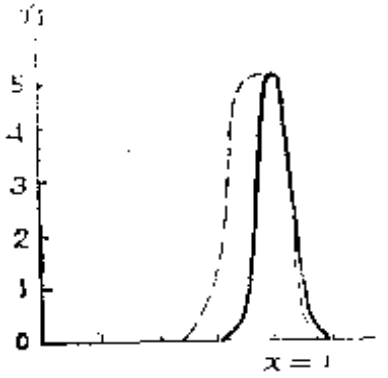
我们发现，当$\rho=1$时，得到了很好的结果。

5. 计算正确性的检验

由物理性质知，在$P_1=P_e=\sigma_{cx}=l_0=l_1=p_0=p_1=0$的情况下，方程满足粒子数守恒即$n_i(\tau)=n_e(\tau)=n_i(0)$。计算实践表明，在八位有效数字相同的意义下，有$n_i(\tau)=n_e(\tau)=n_i(0)$。

§3. 计算结果及讨论

在上述参数下，部分计算结果画在图25到图27上。图25和图26是离子和电子的分布函数随时间的变化曲线。图25中，实线是0.592×10^{-4}秒，3.54×10^{5}个/厘米^3，100千电子伏的情形；虚线是15.4秒，2.64×10^{10}个/厘米^3，88千电子伏的情形。



—·—0.592×10^{-4}秒，3.54×10^{5}个/厘米^3，100千电子伏；

……15.4秒，2.64×10^{10}个/厘米^3，88千电子伏。

图25 离子分布函数
(f_i—$x=v/v_0$)

可见，离子的分布函数变化不大。这是因为在高能中性注入装置上，注入能量高，仓库散射弱，所以源分布不易展宽。

由图26看出，电子分布函数在3.5×10^{-2}秒之前还可明显看出注入源分布的影响，在此之后就迅速趋于麦克斯韦分

布了。这与电子热化弛豫时间的估计是一致的。图26右下角用实线和虚线画出了平衡时电子分布与麦克斯韦分布。可见其高能尾巴部分比麦克斯韦分布略高，这是由于在这里电子与高能离子共存的缘故。

图27是等离子体密度，电位和电子平均能量随时间的变化曲线。由图可见，在$n \geqq 10^8$个/厘米^{3}之后，电位和电子平均能量的曲线几乎平行地增长。这种行为可作如下解释。

假定等离子体中的电子分布为麦克斯韦分布，则电子损失率可由

$$\frac{1}{n_e}\left(\frac{dn_e}{dt}\right)_{\text{损失}} = n_e<\sigma_s v>\exp(-e\phi/KT_e),$$

估计。这里n_e为电子密度，$<\sigma_s v>$为电子散射到逸出锥的速率的平均值，$\exp(-e\phi/KT_e)$为麦克斯韦分布中电子能量超出$e\phi$的份额。随着时间的增加，n_e和KT_e都增加。KT_e的增加导致$<\sigma_s v>$下降。而$n_e<\sigma_s v>$比起指数因子来是随时间慢变化的因子，由电中性要求，要保持电子损失率基本不变，这样就要求$e\phi/KT_e$变化不大，亦即$e\phi/KT_e \approx$ Const，这恰好说明了电位曲线与电子平均能量曲线应该平行地增长，最后平衡时达到的电位值大约是2.76千电子伏。