大气科学专业系列教材

DAQIKEXUEZHUANYEXILIEJIAOCAI

大气科学中的数值方法

葛孝贞　王体健　编著

南京大学出版社

■大气科学专业系列教材

DAQIKEXUEZHUANYEXILIEJIAOCAI

大气科学中的数值方法

葛孝贞 王体健 编著

南京大学出版社

内容简介

本书总计十章，第一至八章介绍常用数值方法，如插值与逼近、数值积分、线性和非线性方程的数值求解、方程求根法、矩阵特征值和特征向量求法、常微分方程初值问题数值解法以及偏微分方程定解问题的差分解法；第九至十章分别介绍了常微分方程组数值解法在大气化学的应用实例和偏微分方程组数值解精度的实例试验，供高年级学生及研究工作者参考. 书中重点讨论了各种算法的构造原理和使用方法，对稳定性、收敛性误差估计和不同算法的特点都作了深入浅出的介绍，为了使读者在学习算法的基础上能掌握借助计算机解决问题的途径和技术，本书中介绍的主要算法都附有计算流程、程序和示例.

本书可作为大专院校大气科学专业及非数学专业高年级学生的教材或教学参考书，亦可供气象台站工作者或研究人员参考，又可作为自学教材.

图书在版编目(CIP)数据

大气科学中的数值方法 / 葛孝贞，王体健编著. —2 版. —南京：南京大学出版社，2013.6
(大气科学专业系列教材)
ISBN 978-7-305-11213-3

Ⅰ. ①大… Ⅱ. ①葛… ②王… Ⅲ. ①大气科学－研究方法 Ⅳ. ①P40

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 048535 号

出版发行 南京大学出版社
社　　址 南京市汉口路 22 号　　邮　编 210093
网　　址 http://www.NjupCo.com
出 版 人 左　健

丛 书 名 大气科学专业系列教材
书　　名 大气科学中的数值方法
编　　著 葛孝贞　王体健
责任编辑 吴　华　　编辑热线 025-83596997

照　　排 江苏南大印刷厂
印　　刷 南京人文印务有限公司
开　　本 787×1092 1/16 印张 18.25 字数 467 千
版　　次 2013 年 6 月第 2 版 2013 年 6 月第 1 次印刷
印　　数 1～3 000
ISBN 978-7-305-11213-3
定　　价 37.00 元

发行热线 025-83594756
电子邮箱 Press@NjupCo.com
Sales@NjupCo.com(市场部)

前　言

随着新技术革命的深入发展，大气科学无论在理论研究，还是在业务实践方面都取得了令人鼓舞的进展，突出表现在科学研究和业务实践都正在由定性向客观定量的方向发展，因此对数学理论和方法的要求也日趋迫切. 随着科学技术的发展，提出了大量的数学计算问题，数值计算方法就是研究怎样利用计算工具，来求出数学问题数值解答的学问.

本书以介绍方法为主，涉及理论并不深，读者只要具有一般高等数学、线性代数、常微分和偏微分方程的知识，就可以学习全书. 在学习本书时，一方面了解有关理论与概念，运用所述方法进行初步的科学计算；另一方面利用提供的参考程序或读者自编程序进行上机实习，可以学以致用，并为更进一步的学习打下基础.

数值计算方法与程序设计语言是借助计算机解决气象问题的必备知识，如何把二者有机地结合起来是十分必要的. 根据气象科学的实际问题需要，将介绍一些常用算法及以计算机为工具实现算法的过程、步骤. 这样可根据实际问题的要求，将设计解决问题的数值计算方案、研制实现计算方案的计算流程和编制程序三者融合成一体，这也是本书的尝试.

《大气科学中的数值方法》改编自由葛孝贞教授编写、南京大学大气科学学院自 1985 年以来一直使用的教材《计算方法与 Fortran77》，第一版于 1994 年出版并作为高年级的教材. 为了更新、充实本书的内容，2013 年编著者新编写了第九章常微分方程组数值解法在大气化学的应用实例和第十章偏微分方程组数值解精度的实例试验. 新增内容从某些侧面介绍了基本数值算法在大气科学研究中的应用及编者的点滴研究结果，试图能给读者提供有益的参考. 本书第九章由王体健教授编写，第一至八章和第十章由葛孝贞教授编写.

作者力图由浅入深，深入浅出，循序渐进，以便于自学. 本书可作为大专院校大气科学专业及非数学专业高年级学生的教材或教学参考书，亦可供气象台站工作者或研究人员参考，又可作为自学教材.

本书承蒙南京大学大气科学学院余志豪教授、数学系王加松教授、计算机科学与技术系郑国梁教授认真审阅并提出许多宝贵的意见，在此谨表感谢. 大气科学学院王召民博士、顾伟博士在使用教材中，提出不少有益意见，深表谢意.

鉴于水平有限，本书不妥和错误之处在所难免，欢迎读者批评指正.

编著者

2013 年春于南京大学大气科学学院

《大气科学中的数值方法》读者信息反馈表

尊敬的读者：

感谢您购买和使用南京大学出版社的图书，我们希望通过这张小小的反馈卡来获得您更多的建议和意见，以改进我们的工作，加强双方的沟通和联系。我们期待着能为更多的读者提供的好书。

请您填妥下表后，寄回或传真给我们，对您的支持我们不胜感激！

1. 您是从何种途径得知本书的：

☐ 书店　　☐ 网上　　☐ 报纸杂志　　☐ 朋友推荐

2. 您为什么购买本书：

☐ 工作需要　　☐ 学习参考　　☐ 对本书主题感兴趣　　☐ 随便翻翻

3. 您对本书内容的评价是：

☐ 很好　　☐ 好　　☐ 一般　　☐ 差　　☐很差

4. 您在阅读本书的过程中有没有发现明显的专业及编校错误，如果有，它们是：______________

____

____

____

5. 您对哪些专业的图书信息比较感兴趣：______________________

____

6. 如果方便，请提供您的个人信息，以便于我们和您联系（您的个人资料我们将严格保密）：

您供职的单位：　　　　　　　　您教授或学习的课程：

您的通信地址：　　　　　　　　您的电子邮箱：

请联系我们：

电话：025－83596997

传真：025－83686347

通讯地址：南京市汉口路22号　210093

南京大学出版社高校教材中心

目　录

第一章　绪　论 …… 1
1.1　气象问题与数值方法简介 …… 1
1.2　离散变量与离散化 …… 1
1.3　逼近的概念 …… 2
1.4　误差及有关概念 …… 2
1.5　习　题 …… 8
第二章　插值与数值逼近 …… 9
2.1　引　言 …… 9
2.2　拉格朗日(Lagrange)插值多项式 …… 9
2.3　埃特肯(Aitken)逐次线性插值 …… 16
2.4　牛顿(Newton)插值 …… 18
2.5　埃尔米特(Hermite)插值 …… 22
2.6　样条函数插值 …… 24
2.7　最佳一致逼近切贝晓夫插值法 …… 30
2.8　计算流程、程序与示例 …… 33
2.9　习　题 …… 44
第三章　线性代数方程组的解法 …… 45
3.1　引　言 …… 45
3.2　矩阵代数 …… 45
3.3　高斯(Gauss)消去法 …… 54
3.4　高斯主元消去法 …… 58
3.5　解三对角形方程组的追赶法 …… 65
3.6　矩阵求逆 …… 67
3.7　解线性代数方程组的迭代法 …… 70
3.8　计算流程、程序与示例 …… 80
3.9　习　题 …… 88
第四章　非线性代数方程的数值解法 …… 90
4.1　引　言 …… 90
4.2　二分法及试点法 …… 90
4.3　定点迭代法 …… 95
4.4　牛顿(Newton)法 …… 98

4.5 非线性方程组的数值解法 …… 102
4.6 计算流程、程序与示例 …… 105
4.7 习 题 …… 108
第五章 数值积分 …… 111
5.1 等距节点求积公式 …… 111
5.2 牛顿-柯特斯求积公式的精度 …… 116
5.3 龙贝格(Romberg)逐次分半加速法 …… 122
5.4 高斯型求积公式 …… 127
5.5 计算流程、程序与示例 …… 133
5.6 习 题 …… 140
第六章 差分方法总论 …… 142
6.1 有限差分离散化方法 …… 142
6.2 离散近似 …… 146
6.3 初值问题差分格式的有效性 …… 150
6.4 习 题 …… 158
第七章 常微分方程初值问题的数值解法 …… 159
7.1 引 言 …… 159
7.2 Euler 方法和改进的 Euler 方法 …… 160
7.3 龙格-库塔(Runge-Kutta)方法 …… 165
7.4 阿当姆斯(Adamas)方法 …… 169
7.5 哈明(Hamming)方法 …… 174
7.6 稳定性分析 …… 177
7.7 初值问题几种实用时间积分格式及其稳定性分析 …… 179
7.8 一阶常微分方程组的数值解法 …… 189
7.9 计算流程、程序与示例 …… 191
7.10 习 题 …… 196
第八章 偏微分方程的差分解法 …… 198
8.1 偏微分方程的一些性质 …… 198
8.2 偏微分方程的分类 …… 201
8.3 偏微分方程差分格式的稳定性 …… 206
8.4 抛物型方程的差分解法 …… 209
8.5 双曲型方程的差分解法 …… 213
8.6 椭圆型方程的差分解法 …… 222
8.7 示 例 …… 233
8.8 习 题 …… 236
第九章 常微分方程组数值解法在大气化学的应用实例 …… 238
9.1 大气化学动力学方程特征 …… 238
9.2 大气化学动力学方程常用解法 …… 239

9.3 大气化学动力学方程数值解法精度试验 …… 242
9.4 结语与讨论 …… 251
9.5 习 题 …… 251

第十章 偏微分方程组数值解精度实例试验 …… 253
10.1 引 言 …… 253
10.2 平流(输送)方案及误差特征 …… 254
10.3 区域数值预报模式(MM5)精度实例试验 …… 258
10.4 高分辨区域输送模式(EM3)精度实例试验 …… 266
10.5 结语与讨论 …… 270
10.6 思考题 …… 272

附 录 …… 273

参考文献 …… 280

第一章

绪　论

1.1　气象问题与数值方法简介

在近几十年中，大气科学无论是在理论研究，还是在业务实践方面，都取得了令人鼓舞的进展，突出表现在科学研究和业务实践都正在由定性向客观定量的方向发展，因此对数学理论和方法的要求也日趋迫切．随着科学技术的飞速发展，提出了大量的数学计算问题，数值计算方法就是研究怎样利用计算工具，来求出数学问题数值解答的学问．数值计算方法简称计算方法，或称计算数学、数值数学．

当代以流体力学、热力学为基础，以数值计算方法为手段，以计算机为主要计算工具的有关气象问题的数值模拟、数值预报是大气科学理论研究工作及业务预报工作的重要分支及发展方向．数值天气预报已成为天气预报技术的主流．

有关全球气候变化、大气环流和天气过程演变、空气污染问题以及大气动力学、热力学过程的数值试验和数值模拟等研究领域通常都必须包括物理模式的设计，大气诸多非绝热物理过程和动力学过程的描述及实现、资料的获得及处理都需要借助数学理论及方法．以这样一些气象计算问题来说，一般是对一组非线性偏微分方程的初值问题和边值问题进行数值求解，要求探讨能得到客观、定量结果的数值计算方法．有限差分法、谱方法和有限元法等是目前常被采用的数值求解方法，其中以有限差分法应用最为广泛．本书介绍利用有限差分法求微分方程初值问题和边值问题，此外本书对插值与逼近、数值积分及代数方程组求解也将从应用出发，在不同章节中进行介绍．关于谱方法、有限元法等数值解法在许多专著中都有较系统的论述．

目前计算机的应用正逐渐普及到大气科学的各个研究和业务工作领域，并已成为大气科学业务工作自动化的主要手段．例如，在通讯、填图、分析、预报、资料整编、传输、复制、微缩保存、检索、雷达卫星资料等的自动处理中，计算机是实现各个环节自动化的重要工具．

数值计算方法与程序设计语言是借助计算机解决气象问题的必备知识，如何把两者有机地结合起来是十分必要的．根据气象科学的实际问题需要，本书将介绍一些常用算法及以计算机为工具实现算法的过程、步骤．这样根据实际问题把设计解决问题的数值计算方案、研制实现计算方案的计算流程和编制程序三者融合成一体是本书的尝试．

1.2　离散变量与离散化

计算方法的主要内容是怎样把数学问题的求解运算都归结为对有限数位的数的四则运算，这就是将求连续变量的问题转化为求离散变量的问题，称为离散化．

离散变量及离散化可以认为是数值计算方法中最基本的概念与方法之一．大多数气象要

素都是对自变量的离散值给出的.但是,如 $y=e^x$ 或 $\sin x$ 之类的函数,其本身与自变量 x 都是连续变化的,若给出某段函数值的函数表如下：

x	1.412 5	1.413 0	1.413 5	1.414 0	1.414 5
e^x	4.106 2	4.108 2	4.110 3	4.112 3	4.114 4

这里 x 不再视为连续变量,而是每隔 $h=0.000\,5$ 跳跃取另一值的离散变量.其函数值仅为表中对应 x 点上的函数值,即相当于把 $y=e^x$ 离散化.

相反,可以通过插值、最小二乘法、样条函数,把离散变量函数构造成连续变量的函数,近似求出不在已知点上的函数的值.

微分方程或积分方程的解本来是连续变量,我们常常只算它在某些点处的值,这些值当然是离散的,即把求连续变量的问题转化为求离散变量的问题.离散化后得到的代数方程组,往往可选用递推关系或迭代法求解.

用离散化方法处理连续变量的问题一般不太困难,但是,如果进一步考虑细节问题就比较复杂.如将函数 $f(x)$ 的自变量 x 离散化为 $f(x_i)$, $x_i(i=1,2,\cdots,n)$ 或将微商用差商代替,其近似程度如何,何种形式近似程度最好,精确程度如何?经大量递推计算后,结果近似程度如何?这些都是本书将要讨论的问题.

1.3 逼近的概念

科学研究中为了便于计算和分析,常常用简单的函数 $P(x)$ 近似地代替给定的函数 $f(x)$,这也是计算方法中最基本的概念和办法之一.例如,假设在区间$[a,b]$上,温度 T 的值仅在一些离散的站点$\{x_i\}$上为已知,需要对区间内的任一位置点 x_j 计算 $T(x_j)$ 的值,或需要计算 T 在$[a,b]$上的定积分.对这两种情况,一般采用的步骤是先确定一个简单函数 $P(x)$,使 $P(x_i)=T(x_i)$,从而用 $P(x)$ 作为 $T(x)$ 的近似.

函数的近似替代称为函数逼近,$f(x)$ 通常称为被逼近(或被近似)函数,而 $P(x)$ 称为逼近(或近似)函数,两者之差

$$R(x)=f(x)-P(x)$$

就称为逼近的误差或余差.被逼近函数一般比较复杂,或已知在若干点处的值,难以计算和分析,逼近函数则比较简单.简单函数主要是指可以用四则运算进行计算的函数,根据应用问题的不同,可选择多项式、有理函数、三角函数、分段(片)多项式等.逼近的要求通常是逼近函数与被逼近函数,在给定某些点处的函数值及若干阶导数值相同,这种逼近称为插值;或在某区域上的最大误差取极小,这种逼近称为最优一致逼近;或在给定某点处的误差平方和(或在某区域误差平方的积分)取极小,这种逼近称为最优平方逼近.关于这些概念的部分内容将在第二章介绍.

1.4 误差及有关概念

一、误差来源

实际问题中某一物理量的真实值和我们算出的值往往存在差异,它们之差称为误差.引起

误差的原因是多方面的，主要表示为下列四种形式.

1. 模型误差

从实际问题提出的数学模型往往忽略了一些次要因素，加上条件限制，即便数学问题能精确求解，也与实际问题的真值有所不同，由此而引起的误差称为模型误差. 例如，用以描述地球上某一质点自由下落时的规律的方程为

$$S=\frac{1}{2}gt^2, \tag{1.1}$$

这就是一个数学模型. 在建立数学模型时，忽略了空气阻力等因素. 如果用 $f=f(t)$ 表示真正的运动规律，那么 $f(t)-\frac{1}{2}gt^2$ 就是数学模型(1.1)的模型误差.

2. 参数误差

数学模型包括若干参数，它们的值往往通过实验或观测得到，它们和真值之间也有误差，这种误差称为观测误差或参数误差. 例如，自由落体运动方程(1.1)中若取重力加速度 g 为 $9.8\ \mathrm{m/s^2}$，$g-9.8$ 就是参数误差.

3. 截断误差

数学问题往往难以求解，需要考虑选用某种数值方法进行计算，许多数值方法都是近似方法，也就是说，即使运算过程中所进行的计算都是绝对准确的，计算的最终结果与数学模型的真解之间还可能有误差，由此而产生的误差称为截断误差.

例如，指数函数的幂级数展开式为

$$\mathrm{e}^x=1+x/1!+x^2/2!+x^3/3!+\cdots+x^n/n!+\cdots.$$

在实际计算中我们只能截取有限项求出

$$e_n(x)=1+x/1!+x^2/2!+x^3/3!+\cdots+x^{n-1}/(n-1)!.$$

用前 n 项和 $e_n(x)$ 代替 e^x 的误差就是截断误差，由泰勒公式知该误差为

$$R_n(x)=\frac{\mathrm{e}^{\theta x}x^n}{n!}(0<\theta<1).$$

4. 舍入误差

在计算机中数的位数是有规定的，使用计算机进行数值计算时，每个数据只能用有限位的数字表示，但实际计算中遇到的数据、位数可能很多，甚至是无限小数，例如，e，π 等. 把一个数表示成具有一定位数的近似也可能引起误差，这种误差称为舍入误差.

计算机进行算术运算时，数的存储及运算形式一般采用规格化浮点数的形式.

$$X=+(0.b_1\cdots b_t)\times\beta^m.$$

这里 $\beta\geqslant 2$ 是一个整数，每个 b_i 都是整数，且 $0<b_i<\beta-1$，m 是整数，称为阶码，$+(0.b_1\cdots b_t)$ 称为尾数. 一般计算机上，$\beta=2,8$ 或 16，称为二进制、八进制或十六进制表示. 为简单起见，我们采用十进制的形式，即 $\beta=10$，例如在六位数字长的计算机上，数 $X=123.432\,1$ 应表示为

$$X\approx 0.123\,432\times 10^3,$$

此时的舍入误差为

$$123.432\,1-0.123\,432\times 10^3=0.000\,1.$$

综上所述，若采用下列记号：

S——实际问题的真解(即为准确值)；

S_1——数学模型的真解，具有模型误差；

S_2——具有参数误差的数学模型的准确解；

S_3——数学模型确定后，在运算过程中未引入任何计算误差的条件下得到的数值解；

S_4——实际计算所得到的数值解.

实际问题的真解与所得的数值解之间的误差可表示为

$$S-S_4=(S-S_1)+(S_1-S_2)+(S_2-S_3)+(S_3-S_4),$$

其中 $S-S_1$ 是模型误差，S_1-S_2 是参数误差，S_2-S_3 是截断误差，S_3-S_4 是舍入误差. 如果我们得到每种误差的估计

$$|S-S_1|\leqslant\varepsilon_1,\quad |S_1-S_2|\leqslant\varepsilon_2,\quad |S_2-S_3|\leqslant\varepsilon_3,\quad |S_3-S_4|\leqslant\varepsilon_4,$$

那么就有

$$|S-S_4|\leqslant|S-S_1|+|S_1-S_2|+|S_2-S_3|+|S_3-S_4|\leqslant\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3+\varepsilon_4.$$

二、绝对误差、相对误差、有效数字

若 A 是准确值，$\widetilde{A}$ 是近似值，则称

$$\widetilde{\varepsilon}=A-\widetilde{A}$$

为近似值 $\widetilde{A}$ 的绝对误差或简称误差.

例如，$A=0.123\times10^{-9}$，$\widetilde{A}=0.987\times10^{-8}$，$B=0.123\times10^{8}$，$\widetilde{B}=0.123\,4\times10^{8}$，则 $\widetilde{A}$，$\widetilde{B}$ 的绝对误差是：

$$A-\widetilde{A}=-0.974\,7\times10^{-9},\quad B-\widetilde{B}=-0.4\times10^{5}.$$

一般来说，无法知道准确值，因而绝对误差也就无法求出，所以常找出 $\widetilde{\varepsilon}$ 的上界 ε，即

$$|A-\widetilde{A}|\leqslant\varepsilon.$$

数 ε 称为 $\widetilde{A}$ 的绝对误差限，简称误差限，有了误差限 ε，就可知道真正值 A 的范围

$$\widetilde{A}-\varepsilon\leqslant A\leqslant\widetilde{A}+\varepsilon.$$

例如，π 的近似值 3.141 6 的绝对误差为

$$\pi-3.141\,6=3.141\,592\,65\cdots-3.141\,6=-0.000\,007\,34,$$

这里 3.141 6 作为 π 的近似值时，绝对误差限可取为 10^{-5}.

误差或误差限的大小不能完全刻画一个数的近似值的精确程度，上例中，虽然误差 $|A-\widetilde{A}|$ 小于 $|B-\widetilde{B}|$，但是，很显然 $\widetilde{B}$ 近似于 B 的程度比 $\widetilde{A}$ 近似于 A 的程度更高. 为了较好地反映近似值的精确程度，必须考虑误差与准确值的比值，即相对误差.

确切地说，若 A 是准确值，$\widetilde{A}$ 是近似值，则称

$$\widetilde{\varepsilon}_r=\frac{\widetilde{\varepsilon}}{A}=\frac{A-\widetilde{A}}{A}$$

为近似值 $\widetilde{A}$ 的相对误差.

例如，$\widetilde{A}$，$\widetilde{B}$的相对误差为

$$\frac{A-\widetilde{A}}{A}\approx -7.9,\quad \frac{B-\widetilde{B}}{B}\approx -0.003.$$

由于准确值一般不能算出，相对误差也无法求出，常找出其上界，若有

$$\frac{A-\widetilde{A}}{A}\leqslant \varepsilon_r,$$

则称 ε_r 为 A 的相对误差限.

在实际计算中，常常按照“四舍五入”原则取前几位数字作为准确值 A 的近似值$\widetilde{A}$，这样得到的近似值的绝对误差不会超过末位数的半个单位. 例如，$A=\pi=3.141\,592\,65\cdots$取前六位数字得

$$\widetilde{A}=3.141\,59.$$

其误差为 $0.000\,002\,65\cdots$，误差限为 $0.000\,005=1/2\times 10^{-5}$，此时$\widetilde{A}$ 准确到小数后第五位，并称由此算起的前六位数字 314 159 为$\widetilde{A}$ 的有效数字.

有效数字的确切意义可定义为：设$\widetilde{A}$ 为准确值 A 的一个近似值，并且$\widetilde{A}$ 的左边第一个非零数字到末位数字共有 n 位数时，称为 A 的 n 位有效数字或称$\widetilde{A}$ 具有 n 位有效数字，$\widetilde{A}$ 可表示为

$$\widetilde{A}=\pm 10^m(a_1+a_2\times 10^{-1}+a_3\times 10^{-2}+\cdots+a_n\times 10^{-(n-1)}),$$

其中 m 为某个整数，a_1 为介于 1 到 9 之间某个整数，$a_2,\cdots,a_n$ 都是介于 0 到 9 之间的整数. $\widetilde{A}$ 的绝对误差限不超过某末位的半个单位，即

$$|A-\widetilde{A}|\leqslant \frac{1}{2}\times 10^{m-(n-1)},$$

$\widetilde{A}$ 的相对误差满足

$$\frac{\frac{1}{2}\times 10^{m-(n-1)}}{10^m\times a_1.a_2\cdots a_n}\leqslant \frac{1}{2a_1}\times 10^{-(n-1)},$$

相对误差限可取为

$$\frac{1}{2}\times 10^{-(n-1)}.$$

这些结论表明，近似值准确到小数点后的位数与有效数字的位数，可以用来直接表示绝对误差限与相对误差限的大小.

三、数值计算中需要注意的问题

1. *避免相近两数相减*

进行减法运算时，要尽量避免两个相近的数相减，因为这样将会严重损失有效数字，因而导致很大的相对误差.

进行除法运算时，分母不要太小.

例如：

$$\frac{1}{(10-\sqrt{99})^3},$$

其中$\sqrt{99}=9.949\,874\,37\cdots$，若取$\sqrt{99}=9.95$，则直接计算得

$$\frac{1}{(10-\sqrt{99})^3}=8\,000.$$

若取$\sqrt{99}=9.949\,9$，则直接计算得

$$\frac{1}{(10-\sqrt{99})^3}=7\,952.191,$$

但实际真值(保留小数点后四位)是

$$\frac{1}{(10-\sqrt{99})^3}=\frac{(10+\sqrt{99})^3}{(10-\sqrt{99})^3(10+\sqrt{99})^3}=(10+\sqrt{99})^3=7\,939.999\,9.$$

因此，对实型数的减法、除法应该注意，发生这样的错误一般是难查找其原因的.

2. 防止大数“吃掉”小数

当两个绝对值相差很大的数进行加法或减法运算时，绝对值小的数有被“吃掉”的可能，从而导致计算结果严重失真.

例如，在字长为八位的计算机上算 10^8+1. 按照规格化浮点数的表示法(若为十进制)，10^8 和 1 可分别表示为

$$10^8=0.100\,000\,00\times10^9,$$
$$1=0.100\,000\,00\times10^1.$$

为计算 10^8 与 1 之和，先要对阶，即把较小的阶码提高到较大阶码，再进行相加，具体为

$10^8=0.100\,000\,00\times10^9$，

$1=0.000\,000\,00\times10^9$(原来 0.1 的数字 1 已移出数字位)，

$10^8+1=0.100\,000\,00\times10^9$.

10^8+1 的结果为 10^8，即“加 1”的运算实际上并不起作用.

现在我们求解一元二次方程

$$x^2-(10^8+1)x+10^8=0,$$

用因式分解求得 $x_1=10^8$，$x_2=1$，如果用求根公式

$$x_1=\frac{-b+\sqrt{b^2-4ac}}{2a},\quad x_2=\frac{-b-\sqrt{b^2-4ac}}{2a},$$

在只有八位的计算机中计算时

$$-b=10^8+1\approx10^8,$$
$$b^2-4ac\approx(10^8)^2-4\times10^8\approx10^{16}\approx b^2,$$
$$\sqrt{b^2-4ac}\approx|b|\approx10^8,$$

于是两个根分别为

$$x_1\approx\frac{10^8+10^8}{2}=10^8,\quad x_2\approx\frac{10^8-10^8}{2}=0,$$

第二个根显然是错误的. 当 $b^2\gg4ac$ 时，利用根与系数的关系，x_2 的计算公式应改为

$$x_2=\frac{c}{ax_1}=\frac{10^8}{10^8}=1,$$

就得到正确的结果.

3. 选择优良的算法

虽然计算机的运算速度越来越快，存储的容量越来越大，但无论多快多大，毕竟有一定限度. 所以对于可用有限次运算求解的问题，还应考虑选择优良的算法，最快算出结果，使占用的

内存最省,并使误差的积累最小.

(1) 例如计算多项式

$$p(x)=a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0,$$

如果先算各项然后相加,因计算 a_kx^k 这一项就需要进行 k 次乘法,要求算出 $p(x)$ 总共需

$$\sum_{k=1}^{n}k=\frac{1}{2}n(n+1)$$

次乘法.

如果计算多项式的值采用秦九韶算法,即把公式变形为

$$p(x)=(\cdots((a_nx+a_{n-1})x+a_{n-2})x+\cdots+a_1)x+a_0,$$

则仅需进行 n 次乘法. 秦九韶算法可为如下计算公式

$$\begin{aligned}&b_n=a_n,\\&b_{k-1}=b_k\cdot x+a_{k-1},\quad k=n,n-1,\cdots,1,\\&p(x)=b_0.\end{aligned}$$

(2) 例如计算表达式

$$E=\sum_{s=0}^{10}\frac{1}{s!(n+s)!}\cdot\left(\frac{x}{2}\right)^{2s+n}.$$

这一表达式是表示整阶 $n(\geqslant 0)$ 的变形 Bessel 函数的幂级数展开式的前 11 项,对于 $x=n=0$ 时表达式值为 1. 如果先算各项然后相加,将进行相当多次的乘法. 比较聪明的算法,计算每一项时是通过把其前一项乘上下面的因子

$$\frac{1}{(s+1)\cdot(s+n+1)}\cdot\left(\frac{x}{2}\right)^2.$$

现在可改写如下的公式

$$\begin{aligned}&E=T=\frac{1}{n!}\cdot\left(\frac{x}{2}\right)^n\quad(S=0\text{ 时的表达式的值}),\\&T=T\cdot\frac{1}{(s+1)\cdot(s+n+1)}\cdot\left(\frac{x}{2}\right)^2\quad(S=0,1,\cdots,9),\\&E=E+T.\end{aligned}$$

我们分别采用这两种方法,在计算机上试验时,速度明显提高一个数量级.

(3) 求解一个 n 阶的线性代数方程组

$$\begin{aligned}&a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n=b_1,\\&a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n=b_2,\\&\qquad\vdots\\&a_{n1}x_1+a_{n2}x_2+\cdots+a_{nn}x_n=b_n.\end{aligned}$$

假如要按克莱姆法则求解,即按下面公式计算

$$x_k=D_k/D,k=1,2,\cdots,n,$$

其中 D 为系数行列式,D_k 为把 D 中 k 列换为方程右侧列向量后得到的行列式. 那么,要计算 $n+1$个行列式并做 n 次除法,每个行列式包含 $n!$ 个乘积,计算每个乘积需做 $n-1$ 次乘法,这样共需做 $A_n=(n-1)(n+1)\cdot n!$ 次乘除法. 当 $n=20$ 时,$A_{20}\approx 9.7\times10^{20}$. 在每秒做一亿次乘除法的计算机上,也需 30 多万年之久,可见理论上很“漂亮”的克莱姆法则在计算机上并不适用. 而改用高斯消去法求解 20 阶线性方程组,在计算机上将很快求出所有的解.

1.5 习 题

1. 求 $A=3\pi-2e$ 的绝对误差限、相对误差限，A 有几位有效数字？（假设 π 和 e 都取五位有效数字）.
2. 求下列各数的具有三位、四位有效数字的近似值，并指出其绝对误差限和相对误差限：
$$A_1=\frac{1}{27},\qquad A_2=\sqrt{101}.$$
3. 对准确值进行四舍五入得到下列的各近似数，它们各有几位有效数字？绝对误差限和相对误差限可分别取为多少？
$$12.345,\qquad 0.007\,89,\qquad 4.500.$$
4. 给出双曲正弦函数 sh$x$ $\dfrac{e^x-e^{-x}}{2}$ 的幂级数展开式，取 n 项为其近似值，求其截断误差.
5. 求 $x^2-18x+1=0$ 的两个根，使它们至少具有四位有效数字. 已知 $\sqrt{80}\approx 8.944$.
6. 怎样计算才能使得结果比较精确？
$\int_N^{N+1}\ln x\mathrm{d}x$，其中 N 为某个很大的正整数.
7. 用秦九韶法计算
$$P(x)=0.062\,5x^4+0.425x^3+1.221\,5x^2+1.912x+2.196$$
在 $x=2$ 处的值.

第二章

插值与数值逼近

2.1 引　言

在生产和科学实践中，函数常用来表达客观世界运动规律的数量关系. 实践问题中，所遇到的函数 $y=f(x)$，虽然原则上知道它在区间 $[a,b]$ 上存在，但从实验观测，往往只能得到在区间 $[a,b]$ 上一系列点 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 处的函数值 $y_0,y_1,\cdots,y_n$. 例如对应一些气象测点 x_j（上海、苏州、无锡、常州、南京……），在规定观测时间，可以得到各气象要素的观测值 $y_j=f(x_j)$（y_j 可以表示为温度 T、露点 T_d 等气象要素在不同测站上的观测值），而对除测站 x_j 以外，其他任意位置上的气象要素值，以及其要素变化情况我们是不知道的；又如在数值模拟或数值天气预报中，模式的垂直分层大多并不与标准等压面（如 850，700，500，300 hpa 等）相重合. 因此在进行模式计算中，需要首先用标准等压面上的各要素初值，求出模式各层上的初值，诸如此类，在研究气象问题中所遇到的这类问题，应属插值问题. 构造一个函数 $P(x)$ 作为函数 $y=f(x)$ 的近似表达式，使

$$y=f(x)\approx P(x),$$

并使其满足

$$P(x_j)=f(x_j)\quad (j=0,1,\cdots,n), \tag{2.1}$$

此类问题称为插值问题. $f(x)$ 称为被插值函数，$P(x)$ 称为插值函数；x_j（$x_0,x_1,\cdots,x_n$）称为插值节点；(2.1) 式称为插值条件.

从研究气象问题实际应用出发，本章把代数插值作为插值方法的基础，进行比较详细的介绍.

另外，因为插值公式不仅能用于计算插值节点以外的函数值，而且插值理论还是数值微分、积分、常微分方程初值问题数值解和非线性方程求根的理论基础. 我们将在第四、五、七章看到插值理论所起的作用.

2.2 拉格朗日（Lagrange）插值多项式

插值函数的类型很多，可以是代数多项式、三角多项式，也可以是有理多项式等. 由于代数多项式求值方便，并且具有各阶导数，所以代数多项式是最常采用的插值函数形式，其一般形式为

$$P_n(x)=a_nx^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0, \tag{2.2}$$

这时的插值问题 (2.1) 称为代数插值问题. 插值问题变为求 n 次多项式 $P_n(x)$，用 $P_n(x)$ 作为近似逼近函数 $f(x)$ 的多项式，要求多项式 $P_n(x)$ 满足条件