

◎ 高等学校理工科物理类规划教材辅导用书 ◎

计算物理 学习指导

SOLUTION MANUAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS

主 编 刘金远

副主编 段 萍

戴忠玲

代玉杰

陈 龙



大连理工大学出版社

◎ 高等学校理工科物理类规划教材辅导用书 ◎

计算物理 学习指导

SOLUTION MANUAL OF COMPUTATIONAL PHYSICS

主 编 刘金远

副主编 段 萍 戴忠玲 代玉杰 陈 龙



大连理工大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

计算物理学习指导 / 刘金远主编. — 大连 : 大连理工大学出版社, 2016. 11
ISBN 978-7-5685-0577-2

I. ①计… II. ①刘… III. ①计算物理学—高等学校—教学参考资料 IV. ①O411.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 216620 号

大连理工大学出版社出版

地址:大连市软件园路 80 号 邮政编码:116023

发行:0411-84708842 传真:0411-84701466 邮购:0411-84708943

E-mail: dulp@dulp.cn URL: <http://www.dulp.cn>

大连永盛印业有限公司印刷

大连理工大学出版社发行

幅面尺寸:185mm×260mm

印张:22.5

字数:516 千字

2016 年 11 月第 1 版

2016 年 11 月第 1 次印刷

责任编辑:许 蕾

责任校对:馨 悦

封面设计:李小超

ISBN 978-7-5685-0577-2

定 价:45.00 元

前 言

本书是与《计算物理学》（刘金远等编著，科学出版社，2012年出版）相配套的辅导用书。《计算物理学》自2012年6月出版以来，广受好评，被很多院校选用，2014年9月入选国家十二五规划教材。为满足读者的需要，为学生提供自主学习的平台，进一步建设立体化精品教材，作者编写了这本相应的辅导用书。

本书的编写内容为先总结各章或各节的知识点，再辅以例题及补充扩展例题，最后是习题。所选例题具有典型性、普适性和前沿性，大部分例题都辅以程序代码，部分习题也给出参考解答和计算程序。

第6章偏微分方程数值解法和第7章蒙特卡罗方法是本书的重点，其中补充了大量的例题，既增加学生学习的知识点内容，又为计算物理学任课教师提供大量的参考例题，起到了示范作用。

作者自编了书中大部分例题的计算程序，相应示意图也是编程运算而得。

在编写本书过程中，编者参考和学习了大量的国内外优秀参考书及实例，由于积累时间长，有些内容已找不到出处，书中难免会漏掉原作者工作的引用，在此，对于这些优秀教材的编者致以诚挚的谢意，同时，感谢本团队李书翰、高放、郑志佳、薛丹、边兴宇、刘广睿、任政豪等人通力合作对指导书各章的认真修改和校对。

由于作者水平有限，难免有疏漏及错误之处，恳请读者不吝批评指正。您有任何意见或建议，请通过以下方式与大连理工大学出版社联系：

邮箱 jcjf@dlutp.cn

电话 0411-84708947

编 者

2016年11月

目 录

第1章 绪 论	1	2.2.2 弦截法	48
1.1 误差分析	1	2.2.3 固定点迭代法	49
1.1.1 误差的概念及分类	1	2.2.4 牛顿迭代法	53
1.1.2 误差来源	6	2.2.5 非线性方程组的数值解法	56
1.1.3 习 题	7	2.2.6 矛盾方程组的数值方法	63
1.2 数值计算应注意的问题	10	2.2.7 补充例题	65
1.2.1 避免相近两数相减	10	2.2.8 习 题	68
1.2.2 防止大数吃掉小数	11	2.3 补充习题	75
1.2.3 避免小分母溢出	12	第3章 函数近似方法	77
1.2.4 减少运算次数	12	3.1 插值法	77
1.2.5 正负交替级数累和问题	12	3.1.1 线性插值	77
1.2.6 习 题	13	3.1.2 抛物线插值	78
第2章 方程的数值解法	16	3.1.3 拉格朗日插值	80
2.1 线性方程组的数值解法	16	3.1.4 牛顿插值	83
2.1.1 高斯消去法	17	3.1.5 三次样条插值	84
2.1.2 LU 分解法	21	3.1.6 补充例题	87
2.1.3 三对角矩阵追赶法	24	3.2 拟合法	89
2.1.4 迭代法	28	3.2.1 线性拟合	89
2.1.5 补充例题	34	3.2.2 二次函数拟合	91
2.1.6 习 题	38	3.2.3 m 次多项式拟合	92
2.2 非线性方程的数值解法	45	3.2.4 非线性函数线性组合拟合	94
2.2.1 二分法	46		

3.3 习 题	97	5.3 ODE 数值方法的应用软件	174
3.3.1 插 值	97	5.3.1 应用 Matlab 软件	174
3.3.2 拟合法	103	5.3.2 应用 IMSL 程序库	174
第 4 章 数值微分和数值积分	104	5.3.3 补充例题	175
4.1 数值微分	104	5.4 扩展例题	178
4.1.1 数值微分法	104	5.5 补充习题	181
4.1.2 补充例题	106	5.5.1 欧拉法求初值问题	181
4.1.3 习 题	110	5.5.2 龙格库塔法求初值问题	182
4.2 数值积分	113	5.5.3 边值问题	187
4.2.1 牛顿-科茨求积公式	113	第 6 章 偏微分方程数值解法	189
4.2.2 复化求积公式	116	6.1 对流方程	189
4.2.3 变步长求积和龙贝格求积	117	6.1.1 迎风格式 (UW)	189
4.2.4 反常积分的计算	121	6.1.2 蛙跳格式 (FL)	190
4.2.5 快速振荡函数的菲隆积分	123	6.1.3 FTCS 格式	191
4.2.6 补充例题	126	6.1.4 Lax 格式	192
4.2.7 习 题	138	6.1.5 Lax-Wendroff 格式	192
4.3 补充习题	141	6.1.6 两层加权平均格式	193
第 5 章 常微分方程数值解法	148	6.1.7 补充例题	193
5.1 初值问题的数值解法	148	6.2 抛物形方程	195
5.1.1 欧拉法	148	6.2.1 一维抛物形方程	195
5.1.2 龙格-库塔法	151	6.2.2 二维抛物形方程	198
5.1.3 微分方程组与高阶微分方程 ..	153	6.2.3 对流扩散方程	202
5.1.4 刚性微分方程	155	6.2.4 补充例题	204
5.1.5 补充例题	157	6.2.5 习 题	211
5.1.6 习 题	159	6.3 椭圆方程	218
5.2 边值问题的数值解法	164	6.3.1 亥姆霍兹方程	218
5.2.1 边值问题的差分法	164	6.3.2 泊松方程	222
5.2.2 边值问题的打靶法	166	6.3.3 拉普拉斯方程	225
5.2.3 补充例题	169	6.3.4 习 题	228
5.2.4 习 题	171		

6.4 双曲型偏微分方程	231	7.3.3 复合抽样方法	291
6.5 非线性偏微分方程	232	7.3.4 其他抽样方法	297
6.5.1 伯格斯方程	232	7.3.5 补充例题	298
6.5.2 KdV 方程和孤立子方程	234	7.4 蒙特卡罗方法应用	302
6.5.3 涡流问题	236	7.4.1 蒙特卡罗方法的基本思想	302
6.5.4 浅水波方程	238	7.4.2 方程求根	305
6.5.5 气体动力学方程	240	7.4.3 计算定积分	307
6.5.6 二维 Navier-Stokes 方程	243	7.4.4 微分方程的蒙特卡罗方法	316
6.5.7 磁流体方程	245	7.4.5 核链式反应的蒙特卡罗模拟 ..	318
6.5.8 补充例题	250	7.4.6 中子输运的蒙特卡罗模拟	322
6.6 偏微分方程数值解的谱方法	251	7.4.7 放射性辐射的蒙特卡罗模拟 ..	324
6.6.1 离散傅立叶变换	251	7.4.8 随机行走问题	325
6.6.2 FFT 应用	252	7.4.9 放射性衰变模拟	327
6.7 扩展例题	254	7.4.10 随机非线性方程求解	328
6.8 补充习题	260	7.5 其他例子	330
第 7 章 蒙特卡罗方法	262	7.6 计算机模拟	334
7.1 蒙特卡罗方法的原理	262	7.6.1 赌博问题	334
7.1.1 随机变量与分布函数	262	7.6.2 生日问题	335
7.1.2 数学期望与方差	267	7.6.3 蒲丰投针模拟	336
7.1.3 大数定理与中心极限定理	269	7.6.4 利润问题	337
7.2 随机数	270	7.7 习 题	340
7.2.1 均匀分布随机数	270	7.7.1 方程求根	340
7.2.2 随机性统计检验	274	7.7.2 计算积分	341
7.3 随机抽样方法	274	7.7.3 计算机模拟	344
7.3.1 直接抽样方法	274	参考文献	346
7.3.2 舍选抽样方法	283	索 引	347

第1章 绪论

1.1 误差分析

科学计算中误差是不可避免的. 我们的问题是不仅要知道计算结果的误差是多少, 精确程度如何, 还要知道怎样减少计算误差, 提高精确度.

1.1.1 误差的概念及分类

1. 误差

误差定义为近似值与准确值之差的绝对值, 即

误差定义

$$E = |Z^* - Z| \quad (1.1)$$

式中: E 表示绝对误差, 也称误差; Z^* 表示准确值, 又称精确值或真值; Z 表示近似值.

2. 误差限

在实际问题中, 准确值 Z^* 是未知的, 因此定义(1.1)就失去了实际意义. 通常, 若存在一个小正数 ϵ , 使不等式

误差限

$$E = |Z^* - Z| \leq \epsilon \quad (1.2)$$

成立, 则称 ϵ 为近似值 Z 的绝对误差限, 简称误差限. 有了误差限的概念, 可以得到下面的估计判断:

$$Z - \epsilon \leq Z^* \leq Z + \epsilon, \quad |E| \leq \epsilon, \quad Z^* = Z \pm \epsilon$$

这表示准确值在 $[Z - \epsilon, Z + \epsilon]$ 范围内.

绝对误差限不是唯一的, 但是在实际应用中, 一般按四舍五入的原则对准确值取近似值. 所以按四舍五入方法得到近似数的绝对误差限是其末位的半个单位.

3. 相对误差

绝对误差的大小还不能完全表示出近似值的精确程度, 还必须考虑相对误差的大小.

相对误差定义为

相对误差

$$E_r = \frac{E}{|Z^*|} = \frac{|Z^* - Z|}{|Z^*|} \quad (1.3)$$

通常准确值 Z^* 是无法求得的, 而用其近似值代替: $E_r = E/|Z|$. (试证这种近似的误差与 $(E/Z^*)^2$ 值同一数量级).

相对误差的上界称为相对误差限 ε_r , 定义为:

$$E_r = \frac{E}{|Z^*|} \leq \frac{\varepsilon}{|Z^*|} = \varepsilon_r \approx \frac{\varepsilon}{|Z|}$$

例题1.1.1-1

按四舍五入取 π 的近似值 3.14, 求其相对误差限.

【解】按四舍五入取 π 的近似值 3.14, 其绝对误差限为 $\varepsilon = 0.005$, 按相对误差限定义

$$\varepsilon_r \approx \frac{\varepsilon}{|\pi|} = \frac{0.005}{3.14} = 0.159\%$$

例题1.1.1-2

已知 $x^* = \sqrt{3} = 1.732 \dots$, 求 $x = 1.73$ 的绝对误差限和相对误差限.

【解】根据题意, 绝对误差为

$$|\Delta x| = |1.73 - \sqrt{3}| = 0.002 < 0.005$$

所以绝对误差限为 $\varepsilon = 0.005$.

相对误差限

$$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{1.73} = \frac{0.005}{1.73} = 0.289\%$$

例题1.1.1-3

设 $x > 0$, x 的相对误差为 E_r , 求 $\ln x$ 的误差.

【解】由自变量误差与函数值误差之间的关系式

$$df = f'dx, \quad E_r(f) = \frac{df}{f} = \frac{f'dx}{f} = \frac{xf'dx}{f} = \frac{xf'}{f} E_r(x)$$

$\ln x$ 的误差 $E_r(\ln x)$ 为

$$E_r(\ln x) \approx \frac{x}{\ln x} \ln'(x) E_r = \frac{x}{\ln x} \frac{1}{x} E_r = \frac{E_r}{\ln x}$$

例题1.1.1-4

求出下面三种情况下的绝对误差和相对误差. 试分析近似程度.

(1) $x^* = 3.141\ 592$, $x = 3.14$.

(2) $y^* = 1\ 000\ 000$, $y = 999\ 996$.

(3) $z^* = 0.000\ 012$, $z = 0.000\ 009$.

【解】(1) $E_x = |x^* - x| = |3.141\ 592 - 3.14| = 0.001\ 592$, $E_r = 0.005\ 07 = 0.507\ %$.

(2) $E_y = |y^* - y| = |1\ 000\ 000 - 999\ 996| = 4$, $E_r = 0.000\ 004 = 0.000\ 4\ %$.

(3) $E_z = |z^* - z| = |0.000\ 012 - 0.000\ 009| = 0.000\ 003$; $E_r = 0.25 = 25\ %$.

例题1.1.1-4 说明:

情况(1) 误差和相对误差相差不大, 都可以表示 x^* 的精确程度.

情况(2) $y^* = 10^6$, 数量级很大, 误差也很大, 相对误差很小, 说明近似值精度高.

情况(3) $z^* = 10^{-6}$ 数量级很小, 误差也很小, 但相对误差很大, 说明近似值精度低. 所以当 $|x^*|$ 远大于或远小于1时, 用相对误差比用绝对误差能更好地表示近似值的精确程度.

例题1.1.1-5

已知 $x_1 = 6.802\ 1$, $x_2 = 0.011$, $x_3 = 122.6$, $x_4 = 76.210$, 求下列各近似值的误差限.

(1) $x_2 + x_4$, (2) $x_1 x_2$, (3) $\frac{x_1}{x_3}$.

【解】由题意, 可得到 x_1, x_2, x_3 和 x_4 的误差限分别为

$$\varepsilon(x_1) = \frac{1}{2} \times 10^{-4}, \varepsilon(x_2) = \frac{1}{2} \times 10^{-3}, \varepsilon(x_3) = \frac{1}{2} \times 10^{-1}, \varepsilon(x_4) = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$$

$$(1) \varepsilon(x_2 + x_4) = \varepsilon(x_2) + \varepsilon(x_4) = \left(\frac{1}{2} \times 10^{-3}\right) + \left(\frac{1}{2} \times 10^{-3}\right) = 1 \times 10^{-3}.$$

$$(2) \varepsilon(x_1 x_2) = |x_1| \varepsilon(x_2) + |x_2| \varepsilon(x_1) = 6.802\ 1 \times \left(\frac{1}{2} \times 10^{-3}\right) + 0.011 \times \left(\frac{1}{2} \times 10^{-4}\right) = 3.406\ 55 \times 10^{-3}.$$

$$(3) \varepsilon\left(\frac{x_1}{x_3}\right) = \frac{|x_1| \varepsilon(x_3) + |x_3| \varepsilon(x_1)}{|x_1|^2} = \frac{6.802\ 1 \times \left(\frac{1}{2} \times 10^{-1}\right) + 122.6 \times \left(\frac{1}{2} \times 10^{-4}\right)}{|6.802\ 1|^2} = 7.503\ 6 \times 10^{-3}.$$

例题1.1.1-6

设 $x > 0$, 相对误差为 $E_r = 2\%$, 求 $\sqrt{x}$ 和 x^3 的相对误差.

【解】由自变量的误差对函数值引起误差的公式

$$E_r[f(x)] \approx \frac{x}{f(x)} f'(x) E_r$$

$$(1) \text{ 当 } f(x) = \sqrt{x} \text{ 时, } E_r(\sqrt{x}) \approx \frac{x}{\sqrt{x}} (\sqrt{x})' E_r = \frac{1}{2} E_r = \frac{1}{2} \times 2\% = 1\%.$$

$$(2) \text{ 当 } f(x) = x^4 \text{ 时, } E_r(x^3) \approx \frac{x}{x^3} (x^3)' E_r = 3E_r = 3 \times 2\% = 6\%.$$

例题1.1.1-7

计算正方形面积时, 若面积的允许相对误差为 2% , 则边长所允许的相对误差为多少?

【解】设该正方形的边长为 x , 面积为 $f(x) = x^2$, 设边长的相对误差为 $E_r(x)$, 面积的相对误差为 $E_r[f(x)]$, 则有

$$E_r[f(x)] \approx \frac{x}{f(x)} f'(x) E_r(x) = \frac{x}{x^2} (x^2)' E_r(x) = 2E_r(x) = 2\%$$

由此得, 边长允许的相对误差为

$$E_r(x) = \frac{2\%}{2} = 1\%$$

4. 有效数字

定义1: 如果近似值 Z 的误差限不超过某一位上的半个单位, 该位到 Z 的第一个非零数字共有 n 位, 则称 Z 有 n 位有效数字. 或称 Z 准确到该位.

定义2: 设近似数 Z 表示为

$$Z = 0.x_1x_2 \cdots x_n \times 10^m$$

$x_i (i = 1, 2, \cdots, n)$, 取 $0 \sim 9$ 的任意数字. $x_1 \neq 0$, m 为整数, n 为正整数. 若 $|Z^* - Z| \leq \frac{1}{2} \times 10^{m-n}$, 则称 Z 为 Z^* 具有 n 位有效数字的近似值.

按四舍五入取得的近似数都是有效数字.

定义3: 如果 d 是满足下列不等式的最大正整数, 则称近似值 z 近似准确值 z^* 时具有 d 位有效数字.

$$E_r = \left| \frac{Z^* - Z}{Z^*} \right| < \frac{10^{1-d}}{2}$$

例题1.1.1-8

根据例题：1.1.1-4 的相对误差，确定有效数字位数。

【解】(1) $E_r = 0.005\ 07 < 10^2/2$ ，具有 3 位有效数字；

(2) $E_r = 0.000\ 004 < 10^{-5}/2$ ，具有 6 位有效数字；

(3) $E_r = 0.25 < 10^{-0}/2$ ，只有 1 位有效数字。

例题1.1.1-9

$\pi = 3.141\ 592\ 6\cdots$ ，分别取近似值：3.14, 3.141, 3.142，各有几位有效数字。

【解】(1) 近似值 3.14, $m = 1$,

误差： $|\pi - 3.14| = 0.001\ 59\cdots < 0.005 = 0.5 \times 10^{-2} = 0.5 \times 10^{1-3}, n = 3$ ，是 3 位有效数字。

(2) 近似值 3.141, $m = 1$,

误差： $|\pi - 3.141| = 0.000\ 59\cdots < 0.005 = 0.5 \times 10^{-2} = 0.5 \times 10^{1-3}, n = 3$ ，仍然是 3 位有效数字。

(3) 近似值 3.142, $m = 1$,

误差： $|\pi - 3.142| = 0.000\ 41\cdots < 0.000\ 5 = 0.5 \times 10^{-3} = 0.5 \times 10^{1-4}, n = 4$ ，是 4 位有效数字。

例题1.1.1-10

指出下列各数有几位有效数字，误差限是多少？

2.000 4, 0.002 00, 9 000, 9×10^3 , 2×10^{-3} 。

【解】有效数字分别为：5, 3, 4, 1, 1。

误差限分别为：0.000 05, 0.000 005, 0.5, 500, 0.000 5。

关于有效数字的几点结论

(1) 由测量工具测得的数据，都是有效数字。例如测量桌子的长度为 1 235.6 mm，有效数字 5 位，最后一位是估计数字，前面的 4 位是准确数字；可以判断测量工具的最小刻度毫米。

(2) 由四舍五入取得的从非零数字到最后一位都是有效数字。例如： $\pi = 3.141\ 592\ 6\cdots$ ，取近似值 3.14 和 3.142，是按四舍五入取近似值，则是 3 和 4 位有效数字；近似值 3.141，不是按四舍五入取近似值，仍然是 3 位有效数字；

(3) 由有效数字表示的近似数 300×10^3 与 300 000 是不同的：前者是 3 位有效数字，误差限是 0.5×10^3 ；后者是 6 位有效数字，误差限为 0.5。

1.1.2 误差来源

1. 模型误差(Modeling Error)

对实际物理问题做了某些近似假设后抽象出数学模型带来的误差.

2. 观测误差(Measurement Error)

实验测量得到测量值带来的误差.

3. 截断误差(Truncation Error)

近似求解的方法误差. 例如, 在计算机计算函数值时, 通常按泰勒展开式进行计算. 实际计算时, 只能取有限项计算, 后面各项被截去了, 产生截断误差.

4. 舍入误差(Roundoff Error)

计算时由于机器字长有限, 对其小数指定位进行四舍五入而引起的误差.

例题1.1.2-1

已知函数 $y = e^x$, 且 $|x| \leq 1$, 若要求截断误差限为 0.005, 那么需要计算到多少项才能满足精度要求?

【解】 由于 $|x| \leq 1$

$$e^x \approx 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + R_n(x)$$

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

可以估计, $e^{\theta x} < e < 3$, $|R_n(x)| \leq \frac{3}{(n+1)!} \leq 0.005$, 解得 $n \geq 5$, 取: $n = 5$, 当 $x = 1$, 计算得近似值 $e \approx 2.716\ 667$, 误差为: $E = 2.718\ 28 - 2.716\ 667 = 0.001\ 614\ 8 < 0.005$, 有 3 位有效数字.

例题1.1.2-2 已知积分:

$$p^* = \int_0^{1/2} e^{x^2} dx = 0.544\ 987\ 104\ 184$$

当用截断泰勒级数,

$$P_8(x) = 1 + x^2 + \frac{x^4}{2!} + \frac{x^6}{3!} + \frac{x^8}{4!}$$

近似被积函数 $f(x) = e^{x^2}$, 确定积分近似值的精度.

【解】

$$\begin{aligned}
 p &= \int_0^{1/2} \left(1 + x^2 + \frac{x^4}{2!} + \frac{x^6}{3!} + \frac{x^8}{4!} \right) dx \\
 &= \left(x + \frac{1}{3}x^3 + \frac{1}{5} \frac{x^5}{2!} + \frac{1}{7} \frac{x^7}{3!} + \frac{1}{9} \frac{x^9}{4!} \right) \bigg|_{x=0}^{x=1/2} \\
 &= \frac{2\,109\,491}{3\,870\,720} = 0.544\,986\,720\,817
 \end{aligned}$$

相对误差: $10^{-5}/2 > E_r = 7.034\,42 \times 10^{-7} > 10^{-6}/2$, 有 6 位有效数字. 可见用近似函数代替不可积的被积函数也可以得到希望精度的积分结果.

一个实际计算的物理问题往往会涉及多种近似. 例如计算地球的表面积采用的公式:

$$s = 4\pi r^2$$

其中涉及, 模型误差: 近似认为地球是球形的; 测量误差: 近似认为地球半径 $r \approx 6\,370\text{ km}$; 舍入误差: 近似取 π 的近似值.

计算物理中主要关心的是截断误差和舍入误差.

1.1.3 习 题

【习题1.1.3-1】

已知 $\sqrt{5} \approx 2.236$ 是经过四舍五入得到的近似值, 求其绝对误差限和相对误差限.

【解】 根据题意, 绝对误差限 $\varepsilon = \frac{1}{2} \times 10^{-3}$, 相对误差限 $\varepsilon_r = \frac{0.5 \times 10^{-3}}{2.236} \approx 0.022\,36\%$.

【习题1.1.3-2】

求近似值 25.0 的误差限.

【解】 $25.0 = 0.250 \times 10^2$, 为具有 3 位有效数字的近似数. 其误差限为

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \times 10^{-3} \times 10^2 = \frac{1}{2} \times 10^{-1}$$

根据定义 2, 所以近似值 25.0 的误差限为 0.05.

【习题1.1.3-3】

设 x 的相对误差为 2%, 求 x^n 的相对误差.

【解】 由题意知, $E_r(x) = 2\%$, 设 $f(x) = x^n$, 由自变量的误差对函数值引起误差的公式

$$E_r[f(x)] \approx \frac{x}{f(x)} f'(x) E_r$$

得 $E_r(x^n) \approx (x/x^n)(x^n)'E_r(x) = 2n\%$.

【习题1.1.3-4】

计算球体积时, 要使相对误差为 3% , 问度量半径 R 时允许的相对误差是多少?

【解】 球体体积为 $V = \frac{4}{3}\pi R^3$, 设半径的相对误差为 $E_r(R)$, 体积的相对误差为 $E_r(V)$, 根据公式 $E_r[f(x)] \approx x f'(x) E_r(x) / f(x)$ 有

$$E_r(V) \approx \frac{R}{4\pi R^3/3} \left(\frac{4}{3}\pi R^3 \right)' E_r(R) = 3E_r(R) = 3\%$$

由上述方程得, 半径允许的相对误差为

$$E_r(R) = \frac{3\%}{3} = 1\%$$

【习题1.1.3-5】

用消元法求解线性代数方程组, 假定使用十进制三位浮点数计算, 结果是否可靠?

$$\begin{cases} x_1 + 10^{10}x_2 = 10^{10} \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$

【解】 根据题意, 将两个方程相减, 消掉 x_1 得

$$(10^{10} - 1)x_2 = 10^{10} - 2$$

解得

$$x_2 = \frac{10^{10} - 2}{10^{10} - 1} \approx 1.000$$

把 $x_2 = 1.000$ 的值代入到第一个方程中得 $x_1 = 0.000$, 代入到第二个方程中得 $x_1 = 1.000$. 由此可见, 此方法求得的结果不可靠. 所以需取更多的有效数位, 或改变计算方法.

【习题1.1.3-6】

设 $Y_0 = 16$, 按递推公式 $Y_n = Y_{n-1} - \sqrt{255}/100$, ($n = 1, 2, \dots, n$), 计算到 Y_{50} . 若取 $\sqrt{255} \approx 15.969$ (5位有效数字), 试问计算 Y_{50} 将有多大误差?

【解】 因为 $Y_n = Y_{n-1} - \sqrt{255}/100$, 所以 $Y_{50} = Y_{49} - \sqrt{255}/100$, $Y_{49} = Y_{48} - \sqrt{255}/100$, $Y_{48} = Y_{47} - \sqrt{255}/100, \dots, Y_1 = Y_0 - \sqrt{255}/100$, 将 Y_1 代入到 Y_2 中, 将 Y_2 代入到 Y_3 中, $\dots$

依次代入得

$$Y_{50} = Y_0 - 50 \times \frac{1}{100} \sqrt{255} = Y_0 - 7.9845$$

所以 $\varepsilon(Y_{50}) = \varepsilon(Y_0) + \varepsilon(7.9845) = \frac{1}{2} \times 10^{-4}$.

【习题1.1.3-7】

按有效数字的定义,从两个方面说出 1.0, 1.00, 1.000 的不同含义.

【解】 从 1.0, 1.00, 1.000 的有效数字的位数看: 分别是两位, 三位和四位有效数字; 从绝对误差限上看: 分别是 0.05, 0.005 和 0.000 5, 对应的精度是不同的.

【习题1.1.3-8】

设准确值为 $x^* = 3.786\ 94$, $y^* = 10$, 取它们的近似值分别为 $x_1 = 3.786\ 9$, $x_2 = 3.780$ 及 $y_1 = 9.999\ 9$, $y_2 = 10.1$, 试分析分别给出 x_1, x_2, y_1, y_2 各具有几位有效数字?

【解】 $x^* - x_1 = 0.000\ 04 < 0.000\ 05$, x_1 有 5 位有效数字;

$x^* - x_2 = 0.006\ 94 > 0.005$, x_2 有 2 位有效数字;

$y^* - y_1 = 0.000\ 01 < 0.000\ 5$, y_1 有 4 位有效数字;

$|y^* - y_2| = 0.1 < 0.5$, y_2 有 2 位有效数字.

【习题1.1.3-9】

(1) 设 π 的近似值取 4 位有效数字, 求其相对误差限.

(2) 用 $22/7$ 和 $355/113$ 分别作为 $\pi = 3.141\ 592\ 65\cdots$ 的近似值, 问它们各有几位有效数字?

【解】 (1) π 的具有 4 位有效数字的近似值为 3.142, 其绝对误差限是 0.000 5, 则相对误差限为 $E_r = 0.000\ 5/3.142 = 0.015\ 91\ \%$.

(2) $22/7 = 3.142\ 857\cdots$, 有 3 位有效数字; $355/113 = 3.141\ 592\ 92\cdots$, 有 7 位有效数字.

【习题1.1.3-10】

测量一木条长为 542 cm, 若其绝对误差不超过 0.5 cm, 问测量的相对误差是多少?

【解】 相对误差为 $E_r = 0.5/542 = 0.09\ \%$

【习题1.1.3-11】

已知 $e = 2.718\ 28\cdots$, 试问其近似值 $x_1 = 2.7$, $x_2 = 2.71$, $x_3 = 2.718$ 各有几位有效数字? 并给出它们的相对误差限.

【解】 $x_1 = 2.7$ 有两位有效数字; $x_2 = 2.71$, 其误差 0.008 28 超过第二小数位半个单位, 仍然是两位有效数字; $x_3 = 2.718$, 其误差 0.000 28 小于第 4 小数位半个单位, 有 4 位有效数字.

【习题1.1.3-12】

设 $x_1 = -2.72$, $x_2 = 2.718$, $x_3 = 0.171\ 8$ 设均为经过四舍五入得出的近似值, 试指明它们的绝对误差限与相对误差限.

【解】 $x_1 = -2.72$, 的绝对误差限为 0.005, 相对误差限为 0.18 %;

$x_2 = 2.718$ 的绝对误差限为 0.000 5, 相对误差限为 0.018 4 %;

$x_3 = 0.171 8$ 的绝对误差限为 0.000 05, 相对误差限为 0.029 1%.

【习题1.1.3-13】

已知近似值 $x_1 = 1.42$, $x_2 = -0.018$, $x_3 = 184 \times 10^{-4}$ 的绝对误差限均为 0.5×10^{-2} , 问它们各有几位有效数字?

【解】 $x_1 = 1.42$ 有 3 位有效数字; $x_2 = -0.018$ 有 1 位有效数字; $x_3 = 184 \times 10^{-4}$ 有 2 位有效数字.

1.2 数值计算应注意的问题

1.2.1 避免相近两数相减

两个相近数的前几位有效数字是相同的, 相减后有效数字位会大大减少. 为了避免两个相近的近似值相减, 可改变计算方式, 如因式分解, 分母有理化, 三角公式变换, 泰勒展开等.

$\sqrt{1001} = 31.64$, $\sqrt{1000} = 31.62$, 求 $\sqrt{1001} - \sqrt{1000}$ 的值. 可以看到, 直接相减结果为 0.02, 只有 1 位有效数字. 计算中损失了 3 位有效数字.

$$\begin{aligned}\sqrt{1001} - \sqrt{1000} &= \frac{\sqrt{1000}(\sqrt{1001} + \sqrt{1000})}{\sqrt{1001} + \sqrt{1000}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1001} + \sqrt{1000}} = \frac{1}{31.64 + 31.62} \approx 0.01581\end{aligned}$$

当 x_1 与 x_2 接近时, 计算

$$\lg x_1 - \lg x_2 = \lg \frac{x_1}{x_2}$$

当 $f(x_1)$ 与 $f(x_2)$ 接近时, 可采用泰勒展开计算

$$f(x_2) - f(x_1) = f'(x_1)(x_2 - x_1) + \frac{1}{2}f''(x_1)(x_2 - x_1)^2 + \cdots$$

例题1.2.1-1

求 $\sqrt{3.01} - \sqrt{3}$ 的值, 保留 4 位有效数字.

【解】 $\sqrt{3.01} = 1.735$, $\sqrt{3} = 1.732$, 所以 $\sqrt{3.01} - \sqrt{3} = 0.003$, 这种方法损失了有效数字.