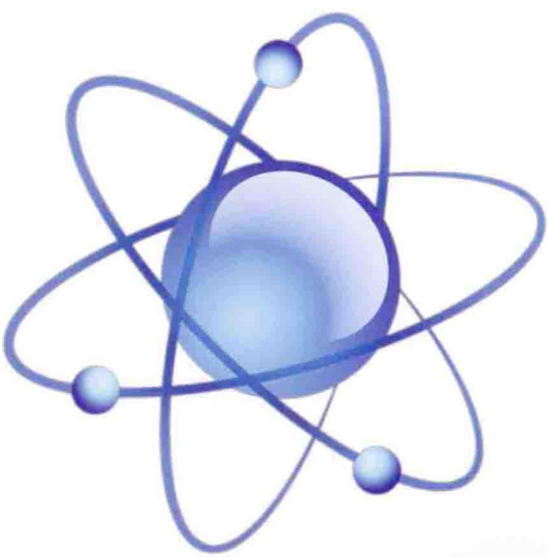
高等学校规划教材·物理学

PLANNING TEXTBOOKS FOR HIGHER EDUCATION

计算物理学基础

张引科 昝会萍 凌亚文 编著



西北工業大學出版社

高等学校规划教材·物理学

计算物理学基础

张引科　昝会萍　凌亚文　编著

西北工业大学出版社

【内容简介】 计算物理学是以计算机为工具、以计算技术为手段、运用计算数学方法解决物理问题的应用学科，它与实验物理学、理论物理学一起被并称为现代物理学的三大支柱。本书内容包括常用的数值计算方法及其在物理学中的初步应用。常用的数值计算方法有函数插值与拟合及快速傅里叶变换、数值积分与微分、线性代数方程组的求解、矩阵特征值和特征向量的计算、非线性方程根的求解、常微分方程的解法、解二阶偏微分方程的差分法及蒙特卡罗方法，应用数值计算方法解决物理问题的典型例子有大角度单摆的周期、用单缝衍射方法测量波长、金属电阻温度系数测量、菲涅尔衍射向夫琅禾费衍射的过渡、均匀带电直线段与均匀带电圆环的电场、载流直线段的磁感应强度、直流单臂电桥分析、简单剪切变形的主应变、平行共轴三线圈形成匀强磁场的条件、单摆运动规律分析、扩散现象研究、平行板电容器内部电势的计算、气体自由膨胀与麦克斯韦速率分布的模拟、塞平斯基三角形与羊齿叶图案的绘制等。

对基本计算方法及其在物理学中的应用进行既相对分离又紧密关联的介绍、给出主要计算方法的MATLAB实现程序、有一定数量的物理计算习题是本书的三个突出特点。本书不仅可以作为本科生的教材，还可用作自学计算物理的入门读物，对于科研人员也是具有启发作用的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

计算物理学基础/张引科，昝会萍，凌亚文编著．—西安：西北工业大学出版社，2014.12
高等学校规划教材·物理学
ISBN 978-7-5612-4217-9

Ⅰ.①计… Ⅱ.①张… ②昝… ③凌… Ⅲ.①物理学—数值计算—计算方法—高等学校—教材 Ⅳ.①O411

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 299043 号

出版发行：西北工业大学出版社
通信地址：西安市友谊西路 127 号　　邮编：710072
电　　话：(029)88493844　88491757
网　　址：www.nwpup.com
印 刷 者：兴平市博闻印务有限公司
开　　本：787 mm×1 092 mm　1/16
印　　张：16.25
字　　数：388 千字
版　　次：2015 年 1 月第 1 版　　2015 年 1 月第 1 次印刷
定　　价：35.00 元

前　　言

物理学是历史最悠久、发展最迅速、应用最广泛、影响最深远的一门基础学科，它对自然科学的其他学科和工程技术的各个领域有着重要的引领作用和巨大的支撑作用。实验研究方法和理论研究方法曾经是物理学普遍采用的两种研究方法，在应用这些方法处理物理问题时，往往会遇到艰深的理论分析、冗长的数据处理或精确的系统控制。在相当多的情况下，这些分析、处理和控制非常艰难或紧迫，人工几乎不可能完成。随着物理系统规模越来越庞大、结构越来越复杂、变化越来越快速或持久，传统的理论研究方法或实验研究方法越来越难以胜任。因此，基于计算机存储量大、运算速度快和控制精度高的优势，研究计算量小、运算速度快、有足够精度的数据处理方法、数值求解方法、数值模拟与仿真方法及实验系统的控制方法就十分必要了，为此计算物理学应运而生。

作为物理学研究的新手段和新方法，计算物理学是对物理学实验研究方法和理论研究方法的补充与拓展。首先，计算物理学可以帮助提高物理实验的自动化程度和实时化水平。计算机的应用使物理实验数据的采集和处理能够同步自动完成，同时还能根据实验中间结果对实验进程进行及时的调整和必要的控制，保证实验向着预定方向进行，提高实验效率。其次，计算物理学能够把物理学家从繁重的公式推导和方程求解中解脱出来。在理论物理学研究中，往往会遇到复杂的公式推演或方程求解，有时甚至不可能取得方程的解析解，影响了对物理规律的探讨和物理本质的认识。利用计算物理学建立的数值计算方法，可以得出物理公式或方程的数值解，并给出相关物理量之间关系的曲线或图像，使物理现象可视化、直观化。再次，计算物理学中的模拟手段和仿真技术使物理学研究更加直观、更加经济。有些物理系统十分复杂，根本无法在实验室重现，有些物理实验耗资巨大，不可能反复进行。对于这些物理过程，人们借助计算物理学方法，模拟和仿真物理系统的变化及物理实验的过程，研究物理系统发展规律或对实验进行优化设计，不仅使不可能的物理研究成为可能，而且能够大幅减少实验成本。

计算物理学成为一门课程开始于20世纪80年代初的美国哈佛大学，80年代中后期我国许多大学的应用物理系开设了这门课程。由于计算物理学是涉及物理学、计算机科学与技术及计算方法的综合性课程，随着计算机的普及、计算机性能的提升及与计算机相关学科的普遍被热捧，加之计算物理学课程对于训练学生思维、培养学生素质、扩展学生应用基础物理知识解决具体实际问题的思路等方面均有裨益，因此计算物理学课程常常能得到学生的欢迎。

在学生对基础学科的兴趣日益淡化但解决技术问题的愿望却逐渐强烈的现实情况下，配合不断强化的素质教育和创新能力培养的新要求，本科学生在掌握了一定的专业基础知识和高等数学知识后，通过学习类似于计算物理学这样的综合应用知识类课程，借助计算机来解决一些单独用理论知识或实验方法都难以解决的问题，能在学习知识的同时享受应用知识的快乐、掌握新方法的快乐及解决新问题的快乐，提升综合素质和创新能力，并由此认识基础知识的重要作用、加深对基础知识的理解。因此，开设计算物理学课程不失为一条素质教育的恰当

途径。

本书的内容主要分为基础物理所涉及的常用数值计算方法和这些方法在具体物理问题中的初步应用两部分。两部分内容既在同一章中分别介绍又相互衔接，使学生在掌握数值计算方法的同时，对其应用有所了解，学习解决问题的思路，以便进一步处理其他问题。另外，计算物理学课程的重要任务之一是编程与上机运行，考虑到计算机的普遍性和编程语言的多样性，本书没有设置编程与上机练习部分，但从两个方面弥补了由此可能带来的不足。一是对主要的计算方法和具体的应用问题都给出了用 MATLAB 软件语言编制的计算程序(可从西北工业大学出版社网站 www.nwpup.com 下载)，程序都已经在计算机上运行成功，主要目的是通过这些程序传递计算方法的编程思路。故此，在给出的计算程序中尽量不直接使用 MATLAB 软件的相关函数，也没有单纯追求程序结构的严谨和程序运行的快速，而是把重点放在程序流程的清晰与简洁方面，程序中的详细注释也有助于读者理解程序。二是在每章的习题部分有一定数量的物理问题供读者应用基本数值计算方法来编程解决。编程解决这些问题，既是具有实战性质的上机训练，也是对读者应用知识能力的检验与强化。因此，笔者认为，对基本计算方法及其在物理学中的应用进行既分离又关联的介绍，给出主要问题的结构清晰且能在计算机上顺利运行的 MATLAB 程序，以及在习题部分有一定数量的物理学应用类问题是本书的三个主要特点。另外，笔者没有刻意追求文字叙述的逻辑严谨和公式推导的数学完美，而是把重点放在了对计算方法思路的阐述和应用例子的典型性方面。作为面向本科生的入门级书籍，不可能涵盖计算物理学的方方面面，因此对诸如物理问题的可视化、计算机仿真、实验数据采集与处理、实验设备控制等方面及有限元方法、边界元方法、泛函方法、变分法等计算方法都没有涉及，也没有对 MATLAB 软件进行专门的介绍。

基于以上考虑，本书共分 10 章。内容安排如下：

绪论中介绍了计算物理学的诞生与发展，理论物理学、实验物理学、计算物理学的关系，计算物理学在物理学研究中的作用；

第 1 章介绍了误差的概念及误差的分类，重点论述了舍入误差、有效数字及误差危害的防止措施；

第 2 章的内容有拉格朗日插值法、牛顿插值法和分段低次插值法这三种函数插值方法，函数拟合的最小二乘法及快速傅里叶变换，给出了大角度振动单摆的周期、用单缝衍射方法测量波长、金属电阻温度系数的测量和菲涅尔衍射向夫琅禾费衍射的过渡等四个物理学中的应用问题；

第 3 章介绍了插值型求积公式和差商型数值微分公式、理查森外推法、插值型数值微分公式等三种数值微分方法，这些方法在物理学中应用的例子有两个，一是均匀带电直线段与均匀带电圆环电场的计算，二是载流直线段磁场磁感应强度的计算；

第 4 章包括解线性方程组的直接法、迭代法及范数与方程组的状态，最后对单臂电桥的平衡特性进行了分析；

第 5 章简单叙述了矩阵特征值和特征向量的概念及计算矩阵特征值和特征向量的乘幂法、反幂法及雅可比方法，并分析了简单剪切变形的主应变；

第 6 章讨论了求解非线性方程根的对分法、迭代法、牛顿迭代法和弦截法，以及解非线性方程组的迭代法，讨论了平行共轴三线圈形成匀强磁场的条件；

第 7 章的常微分方程数值解法有欧拉方法、龙格-库塔方法,同时讨论了方法收敛性与稳定性,还有常微分方程组与高阶常微分方程的求解方法,并分三种情况分析了单摆的运动规律;

第 8 章内容有二阶偏微分方程的分类和解的特性、解偏微分方程的差分法,最后分析了扩散现象及平行板电容器内的电势;

第 9 章蒙特卡罗方法的内容主要有随机变量、概率密度与分布函数,随机数的产生,用蒙特卡罗方法计算定积分和求一元方程的实根,蒙特卡罗方法模拟气体的自由膨胀过程和麦克斯韦速率分布规律的建立过程,还对迭代函数系统进行了简单介绍。

在本书的编撰和出版过程中,参阅了大量的书籍和刊物论文,笔者的同事和家人给予了大力的支持与帮助,出版社和本书编辑付出了辛勤劳动,笔者所在单位西安建筑科技大学也提供了大力支持,在此一并向他们表示衷心的谢意。

计算物理学涉及的物理学领域和数值计算方法十分广泛,并且计算物理学的发展也非常迅速,笔者的知识面和能力有限,在本书内容的选择、结构的编排和叙述的方式上还存在不足,敬请各位读者谅解与指正。

编　者

2014 年 7 月

目　录

绪　论

计算物理学(Computational Physics)是以计算机为工具、以计算技术为手段、运用计算数学方法解决物理问题的应用学科,也是利用计算机进行数据采集、数据分析、测量控制和数字仿真来研究物理现象、发现物理规律的交叉学科。计算物理学为研究复杂物理系统的运动规律和结构特性提供了重要手段,对物理学的发展有着巨大的推动作用。近代物理学理论与物理实验技术所取得的重大进展和成果,几乎都是物理学与先进计算机科技密切结合的产物。

1. 计算物理学的诞生与发展

19 世纪中叶以前,物理学以实验研究为主,是一门实验科学。1864 年,麦克斯韦在对电磁学实验规律总结的基础上,建立了麦克斯韦方程组,创立了电磁理论,随后预言了电磁波的存在并且断言光波就是电磁波,显示了理论研究的巨大潜力。从此理论物理开始成为一个相对独立的物理学分支。20 世纪初,量子力学和相对论的诞生,使理论物理学成为较为完整的学科。传统意义上的物理学便有了理论物理学和实验物理学(包括应用物理学)两大支柱,物理学也成为实验和理论密切结合的科学。

物理学与计算机技术及计算方法的结合始于 20 世纪 40 年代,计算物理学也诞生于这一时期。在第二次世界大战期间,美国研制核武器时,需要快速准确地处理与热核爆炸有关的大量数据,解决瞬间发生的复杂物理过程的数值计算问题,传统计算方法难以胜任,计算机的应用就成为非常自然的事。之后,随着计算机科学与技术的飞速发展,计算机越来越多地进入物理学研究的各个方面,由此形成了一门独特而丰富的交叉学科——计算物理学。

2. 理论物理学、实验物理学、计算物理学的关系

理论物理学从基本物理原理出发,建立物理问题的方程;用纯数学方法求出方程的解;通过对解所得结论与实验观测结果的对比分析,解释已知现象或发现未知规律,并能为物理实验的设计提供指导。

实验物理学以实验和观测为基本手段来发现新的物理规律、验证物理理论或检验理论研究结论,为理论物理研究的进一步深入奠定基础。

计算物理学是计算机科学与技术、计算方法及物理学三者相互融合的交叉学科,它研究物理学中与数学求解及数据处理等相关的基本计算问题,就是如何以计算机为辅助工具解决物理学问题。

理论物理学、实验物理学、计算物理学之间的关系主要表现在:

(1)实验物理学是理论物理学的基础,也为计算物理学提供所需要的基本数据,同时还能检验理论物理学、计算物理学的研究结果。

(2)理论物理学既可以指导物理实验的设计和实施,又可以为计算物理学提供物理基础。

(3)计算物理学一方面提升了物理学实验的手段,提供了虚拟实验方法,另一方面也为理论物理学研究提供了有力支持。

总之,在对某一复杂物理现象的研究过程中,实验物理学、理论物理学和计算物理学三者

常常相互结合、相互促进。实验物理、理论物理和计算物理是现代物理学的三种主要研究方法。

计算物理学是物理学与计算机技术及数值方法交叉融合的结果。首先,计算物理学以解决物理问题为唯一目的。计算物理学与数值分析不同,它以物理问题为出发点,以揭示物理系统发展规律和变化结果为目标。在用计算物理学处理问题时,只要保持系统的基本物理本质和物理条件不变,就可以利用物理学研究方法直接建立更加简便实用的计算方法,而不必拘泥于严格数值分析理论的限制。其次,计算机技术和数学计算方法的发展,推动了计算物理学的不断进步。计算机存储能力的快速提升和运算速度的持续提高,使物理大系统复杂过程的数值处理成为可能,新的数值计算理论的不断涌现,进一步改善了数值计算的效率和精度,保证了计算物理学研究能力的稳步提升。再次,物理学的进步也为计算机科学与技术的发展构建了坚实的基础。物理学的进展及由此带来的新技术与新材料为计算机科学与技术的突飞猛进提供了理论与物质支撑,物理学研究对计算方法和仿真技术的迫切需求也促进了计算机科学与技术的进步。

3. 计算机在物理学研究中的应用

自 20 世纪 40 年代诞生以来,计算物理学就迅速地向物理学各领域和其他学科渗透。在 20 世纪 60 年代以前,计算机主要用在物理问题的数据计算和简单模拟方面。60 年代以后,计算机进一步用于实验数据的采集与处理、实验过程的控制、理论问题的解析运算、物理过程的计算机模拟与仿真等方面。目前,在物理学研究中,计算机的应用已经是无处不在了。计算机在物理学研究中的应用主要有四个方面:

(1)数值计算与分析。一是在建立描述物理过程的数学公式或方程后,进行数值计算和分析,得出规律性结论,或与实验结果进行对照,或作为下一步实验的基础;二是对实验获得的数据进行分析处理。

(2)解析计算。利用计算机的符号处理系统进行解析计算(包括公式推导和方程求解等)和高精度数值计算,这在理论物理研究中作用重大。

(3)物理过程的模拟与仿真。计算机强大的数值计算功能,为物理学提供了“计算机模拟实验”这种新的研究手段。只要建立了理论模型,就可以进行计算机模拟实验,基本上不受实验条件、时间和空间的限制。

(4)实验过程控制。利用计算机的高速数据采集和处理能力,对物理实验过程进行实时控制。主要包括数据采集、数据分析、设备监控、实验控制等。

物理学是应用计算机较早的学科之一,由此产生的计算物理学及研究方法已经广泛应用到自然科学的其他领域,甚至扩展到包括思维科学、决策科学和管理科学等在内的社会科学领域。

习　　题

1. 什么是计算物理学?
2. 简述实验物理、理论物理和计算物理之间的关系。
3. 简述计算机在物理学研究中应用的几个方面。

第 1 章 误差及其危害的防止

在计算物理学中，计算机的主要用途就是数值计算工具，研究计算机能够实现的高效数值计算方法是计算物理学的重要任务之一。

人类的计算能力是由计算工具的性能与计算方法的效率共同决定的。从某种意义上来说，采用好的计算方法比提高计算工具的运算速度对改善计算效率更为重要、更为有效、更为经济。据统计，在 1955 年至 1975 年的 20 年中，计算机的运算速度仅提高了几千倍，而解决一定规模椭圆型偏微分方程计算方法的效率竟然提高了 100 万倍。

数值计算方法是近代数学的一个重要分支，它研究各种数学问题的数值解法（包括数值解法的构造和求解过程的理论分析）以及与此相关的理论（包括计算方法的收敛性、稳定性及误差分析）。数值计算方法又称为计算方法或数值分析，是一门与计算机应用密切结合的、实用性很强的数学课程。

数值计算方法的基本任务是，用计算机能够执行的基本运算，对给定问题的输入数据和计算结果之间的关系给出实际上可行的、理论上可靠的、计算复杂性良好的明确描述。

有的数值计算方法虽然在理论上不够严谨，但通过大量实际计算、对比分析等表明是行之有效的，也可以采用。

数值计算方法给出的解大多是对问题准确解的一种近似，因此误差是数值计算时的一个必须特别重视的问题。若不控制数值计算过程中的误差传递和积累，则计算结果与准确解之间可能会有很大偏差，甚至计算结果完全偏离准确解，使计算失去意义。

本章介绍了误差、相对误差等概念，分析了有效数字与误差的关系，给出了防止误差危害的措施。

1.1 误差及其分类

定义(1.1) 在一定的条件下，物理量必有一个确定的值 x^*（称为客观值或真实值），但这个真实值往往事先并不知道。通常人们采用测量或计算的方法来寻找这个真实值，由于受到测量环境、测量或计算工具及方法等方面多种因素的影响，所找到的值 x 与真实值 x^* 之间总是有一定的差异，这种差异就是误差。即误差是

$$\Delta x = x^* - x \tag{1.1}$$

误差分析包括对误差来源和误差传递规律的分析，并且要对计算或测量结果的误差给出合理估计。

误差的来源是多方面的。根据误差来源的不同，通常把误差分为以下几类：

1. 模型误差

用科学方法解决实际问题时，首先要分析问题、建立模型。模型是对被研究对象的抽象和简化，模型与实际对象之间总是存在一定的差异，不可避免地要带来误差。把应用所选模型进

行研究所得到的准确值与真实值之间的误差称为模型误差。

物理学中的理想模型很多,在这些模型的建立过程中或多或少地进行了简化处理,如忽略了物体的大小后提出了质点模型,不计弹簧质量和物块大小后建立了谐振子模型,不考虑物体变形才有了刚体模型。若以这些理想模型作为基础进行研究,所得到的物理量的准确值必然与该物理量的真实值之间有偏差。这个偏差就是模型误差。

2. 测量误差

对物理量进行测量时,由于测量设备与测量方法的不完善、测量环境的影响、测量人员能力的限制等原因,测量值与真实值之间不可避免地出现误差。这就是测量误差,也称为观测误差。

3. 舍入误差

由于受计算工具(如计算机等)字长或有效数字位数的限制,参与计算的数据只能保留固定位数,多余位则按一定的规则(如"四舍五入")舍掉。这种由于舍掉多余位数字而产生的误差称为舍入误差。

如分别用 3.141,1.141,1.732 作为 $\pi,\sqrt{2},\sqrt{3}$ 的近似值时就会带来舍入误差。少量运算次数的舍入误差一般是微不足道的,不会对结果产生明显影响。但是在成千上万次运算过程中,舍入误差可能会被传递并逐渐积累,从而对结果产生显著影响,使计算结果偏离准确值,因此在数值计算时必须对舍入误差给予充分重视。

4. 截断误差

在很多情况下,要得到研究对象数学模型的准确解也是困难的,所以常常用数值方法来求近似解,例如把数学上的无限次计算用有限次计算来近似。这种数学模型的准确解和数值方法的近似解之间的误差称为截断误差。由于截断误差是数值计算方法所固有的,因此又称为方法误差。

如用函数

$$P(x)=x-\frac{1}{3!}x^3$$

来近似函数 $f(x)=\sin x$ 时,就带来截断误差

$$R(x)=f(x)-P(x)=\frac{\cos\xi}{5!}x^5 \quad (\xi\in(0,x))$$

在一般情况下,设函数 $f(x)$ 在点 x_0 的泰勒(Taylor)级数展开公式是

$$f(x)=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0)+\frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2+\cdots+\frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n+\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1} \tag{1.2}$$

式中,ξ 在 x 与 x_0 之间。记

$$S_n(x)=\sum_{k=0}^{n}\frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k \tag{1.3}$$

$$R_n(x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1} \tag{1.4}$$

则有

$$f(x)=S_n(x)+R_n(x) \tag{1.5}$$

若把 $S_n(x)$ 作为 $f(x)$ 的近似值，即取

$$f(x) \approx S_n(x) \tag{1.6}$$

则 $f(x)$ 与 $S_n(x)$ 之间的差值 $R_n(x)$ 就是截断误差。即用函数 $f(x)$ 泰勒级数展开的部分和 $S_n(x)$ 来近似函数 $f(x)$ 时，余项 $R_n(x)$ 就是截断误差。

在计算方法中，通常只研究舍入误差和截断误差及其影响。重视误差分析和控制误差的传递与扩散是十分重要的，没有误差分析的数值计算结果是不可信的。

1.2　绝对误差与相对误差

定义(1.2)　设某物理量的准确值为 x^*，若 x 为 x^* 的近似值(如测量结果或数值计算结果)，则称

$$\Delta x = x^* - x \tag{1.7}$$

为近似值 x 的绝对误差，简称误差。

例如 e 取近似值 2.718 2 时，绝对误差为 $\Delta x = \mathrm{e} - 2.718\,2 = 0.000\,081\,8\cdots$。

$|\Delta x|$ 的大小反映了近似值 x 的准确程度。在同一量的几个不同的近似值中，$|\Delta x|$ 越小，近似值 x 的准确度越高。

定义(1.3)　对于实际问题，准确值 x^* 通常是无法确切知道的，从而也无法用式(1.7)计算出近似值的绝对误差，但可以根据问题的背景或计算情况给出误差 Δx 大小的范围。即给出一个正数 ε，使得

$$|\Delta x| = |x^* - x| \leqslant \varepsilon \tag{1.8}$$

成立，则 ε 叫作近似值 x 的绝对误差限，简称误差限，或称为精度。

有了误差限 ε，就能知道准确值 x^* 所在的范围是

$$x - \varepsilon \leqslant x^* \leqslant x + \varepsilon \tag{1.9}$$

这个范围有时也表示成

$$x^* = x \pm \varepsilon \tag{1.10}$$

绝对误差的大小不能恰当地刻画一个近似值的准确程度。如测量 100m 和 1m 两个长度时，若绝对误差都是 1cm，显然前者的测量更为准确。由此可见，要描述一个量近似值的准确程度，除了要考虑近似值绝对误差的大小外，还要考虑该量自身的大小，为此引入相对误差的概念。

定义(1.4)　设 x 为准确值 x^* 的一个近似值，则称

$$e_x = \frac{\Delta x}{x^*} = \frac{x^* - x}{x^*} \tag{1.11}$$

为近似值 x 的相对误差。

一般来说，在同一量或不同量的几个近似值中，相对误差 e_x 的绝对值较小的近似值的精确度较高。由此可见，相对误差比绝对误差更能反映误差的严重程度，因此在误差分析中相对误差比绝对误差更重要。

在实际计算过程中，准确值 x^* 并不知道，但当相对误差 e_x 的绝对值较小时，e_x 表达式(1.11)分母中的准确值 x^* 可以用近似值 x 代替，这种代替产生的影响是 e_x 的高阶无穷小，可以忽略不计。这样就可以用下式计算相对误差：

$$e_x = \frac{\Delta x}{x} = \frac{x^* - x}{x} \tag{1.12}$$

定义(1.5) 由于准确值 x^* 不能事先知道，所以如同绝对误差一样，相对误差也不能准确计算，但可以估计出它的大小范围。即给出一个正数 δ，使得

$$|e_x|=\left|\frac{x^*-x}{x^*}\right|\leqslant\delta \tag{1.13}$$

称 δ 为近似值 x 的相对误差限。

根据式(1.8) 和式(1.13)，相对误差限 δ 和绝对误差限 ε 的关系是

$$\delta=\frac{\varepsilon}{|x^*|} \tag{1.14}$$

当相对误差 e_x 的绝对值较小时，相对误差限 δ 满足公式

$$|e_x|=\left|\frac{x^*-x}{x}\right|\leqslant\delta \tag{1.15}$$

绝对误差和绝对误差限有量纲，而相对误差和相对误差限没有量纲，通常用百分数表示。

例 1.1 用千分尺测量一长度所得结果是 $l_0=26.267\text{mm}$，又用最小刻度为 mm 的直尺测得该长度的值是 $l=26.3\text{mm}$，试确定直尺测量结果的绝对误差、绝对误差限、相对误差和相对误差限。

解 千分尺比直尺精度高很多，在计算直尺测量结果的误差时，可以把千分尺的测量结果看作长度的真实值。因此，直尺测量结果的绝对误差是

$$\Delta l=l_0-l=26.267-26.3=-0.033\text{mm}$$

直尺的最小刻度为 mm，考虑到测量时的对准与读数时的估计，可以把测量的误差限确定为半个最小刻度，即绝对误差限为

$$\varepsilon=0.5\text{mm}$$

测量结果的相对误差和相对误差限分别是

$$e_l\approx\frac{l_0-l}{l}=\frac{26.267-26.3}{26.3}\times100\%=-0.13\%$$

$$\delta\approx\frac{\varepsilon}{l}=\frac{0.5}{26.3}\times100\%=1.9\%$$

1.3 有效数字与误差

为了确定用“四舍五入”规则所得近似值的绝对误差限，先看下面的例 1.2。

例 1.2 用“四舍五入”方法分别给出准确值 1.730…，1.731…，1.732…，…，1.739… 保留前三位数字的近似值，并讨论近似值的绝对误差和绝对误差限。

解 各准确值 x_i^*、近似值 x_i、绝对误差 Δx_i 和绝对误差限 ε_i 见表 1.1。

结果表明，用“四舍五入”规则从准确值 1.73… 所确定的近似值为 1.73 或 1.74，它们的共同绝对误差限是 0.005，等于近似值 1.73 或 1.74 的末位数(3 或 4) 所在位(小数点后第二位)的单位 0.01 的一半。

可见，凡是由准确值根据“四舍五入”规则得到的近似值，其绝对误差限等于该近似值末位数字所在位单位的一半。

表　1.1

准确值 x_i^*	近似值 x_i	绝对误差 $\Delta x_i = x_i^* - x_i$	绝对误差限 ε_i	绝对误差限统一确定为
1.730…	1.73	0.000…	0.001	$\varepsilon = 0.005 = \frac{1}{2} \times 0.01$
1.731…		0.001…	0.002	
1.732…		0.002…	0.003	
1.733…		0.003…	0.004	
1.734…		0.004…	0.005	
1.735…	1.74	$-0.004\ \underline{\cdots}$[注]	0.005	
1.736…		$-0.003\ \underline{\cdots}$	0.004	
1.737…		$-0.002\ \underline{\cdots}$	0.003	
1.738…		$-0.001\ \underline{\cdots}$	0.002	
1.739…		$-0.000\ \underline{\cdots}$	0.001	

注：$\underline{\cdots} + \cdots = 0.001$。

为了使近似值数字位数的多少能够反映其准确程度，引入有效数字的概念。按照“四舍五入”规则减少数字位数所得近似值的有效数字定义如下：

定义(1.6)　如果按照“四舍五入”规则减少数字位数所得近似值 x 的绝对误差限是某位单位的一半，就称该近似值准确到这一位，并且把从这一位到近似值左边第一位非零数字的全部数字称为这个近似值的有效数字。

例 1.3　设 $a=-2.18$ 和 $b=2.1200$ 分别是由准确值经过“四舍五入”得到的近似值，问绝对误差限 ε_a 和 ε_b、相对误差限 δ_a 和 δ_b 各是多少？

解　由准确值经“四舍五入”得到的近似值的绝对误差限等于该近似值末位所在位单位的一半，于是两个近似值的绝对误差限分别是

$$\varepsilon_a = \frac{1}{2} \times 0.01 = 0.005, \quad \varepsilon_b = \frac{1}{2} \times 0.0001 = 0.00005$$

相对误差限分别是

$$\delta_a = \frac{0.005}{2.18} \approx 0.23\%, \quad \delta_b = \frac{0.00005}{2.1200} \approx 0.0024\%$$

定义(1.7)　设 x 为准确值 x^* 的近似值，将 x 写成

$$x = \pm(x_1 \times 10^{-1} + x_2 \times 10^{-2} + \cdots + x_n \times 10^{-n}) \times 10^m = \pm 0.x_1 x_2 \cdots x_n \times 10^m \tag{1.16}$$

式中，x_1 是 1,2,…,9 中的数字；$x_2,\cdots,x_n$ 是 0,1,2,…,9 中的数字；n 为正整数；m 是整数。并且近似值 x 的绝对误差满足不等式

$$|x^* - x| \leqslant \frac{1}{2} \times 10^{m-n} \tag{1.17}$$

则称近似值 x 具有 n 位有效数字。

例 1.4　(1) 按“四舍五入”规则写出下列各数据具有五位有效数字的近似值：

$$187.9325, \quad 0.03785551, \quad 8.000033$$

(2) 确定下列各近似值的有效数字位数及绝对误差限：

$$2.000\,4,\quad -0.002\,00,\quad 900\,0$$

解 (1) 对于每一个数,从左边第一个非零数字起向右保留五位数,第六位按"四舍五入"规则舍去或进位,便可得到有五位有效数字的近似值。它们分别是

$$187.93,\quad 0.037\,856,\quad 8.000\,0$$

(2) 近似值从左边第一位非零数字到右边最后一位数字的总位数就是这个近似值的有效数字位数。这几个近似值的有效数字位数分别是 5,3,4。近似值的绝对误差限等于末位的半个单位。它们分别是

$$\frac{1}{2}\times 0.000\,1=0.000\,05,\quad \frac{1}{2}\times 0.000\,01=0.000\,005,\quad \frac{1}{2}\times 1=0.5$$

对于表示为式(1.16)形式的近似值,在 m 相同的情况下,n 越大,有效数字的位数越多,10^{m-n} 越小,绝对误差限$10^{m-n}/2$ 就越小,相对误差限也越小。因此,在进行数值计算时,应尽量避免参加运算的数的有效数字位数损失,以免影响计算精度。另外,准确值的有效数字位数可以看作无限多位。

有效数字与误差的关系由以下两个定理给出:

定理(1.1) 若近似值 x 具有式(1.16)的形式,则其相对误差限为

$$\delta_x=\frac{1}{2x_1}\times 10^{-n+1} \tag{1.18}$$

证明 显然

$$x_1\times 10^{m-1}\leqslant |x|\leqslant (x_1+1)\times 10^{m-1}$$

由相对误差的定义式(1.12),得

$$e_x=\left|\frac{x^*-x}{x}\right|\leqslant\frac{10^{m-n}/2}{x_1\times 10^{m-1}}=\frac{1}{2x_1}\times 10^{-n+1}$$

则相对误差限为$(1/2x_1)\times 10^{-n+1}$。

由此可见,只要知道了近似值 x 的有效数字位数n 和第一位非零数字 x_1,就能估算出它的相对误差限。反之,还可以从近似值的相对误差限来估算其有效数字位数。

定理(1.2) 若近似值 $x=\pm(x_1\times 10^{-1}+x_2\times 10^{-2}+\cdots+x_n\times 10^{-n})\times 10^m$ 的相对误差限为

$$\delta_x=\frac{1}{2(x_1+1)}\times 10^{-n+1} \tag{1.19}$$

则 x 至少具有 n 位有效数字。

证明 由于

$$|\Delta x|=|x^*-x|=|x|\cdot\frac{|x^*-x|}{|x|}=|x|\cdot|e_x|\leqslant|x|\cdot\delta_x=$$

$$[(x_1\times 10^{-1}+x_2\times 10^{-2}+\cdots+x_n\times 10^{-n})\times 10^m]\times\frac{1}{2(x_1+1)}\times 10^{-n+1}<$$

$$\frac{(x_1+1)\times 10^{m-1}}{2(x_1+1)}\times 10^{-n+1}=\frac{1}{2}\times 10^{m-n}$$

可见,近似值 x 的绝对误差限为$10^{m-n}/2$,故 x 至少具有 n 位有效数字。

从以上两个定理可知,有效数字位数可以刻画近似值的准确程度,绝对误差限与近似值有效数字的末位有关,相对误差限与近似值的有效数字位数有关。

例 1.5 用 3.141 6 来表示 π 的近似值时,它的相对误差限是多少?