教育部高等学校
化学工程与工艺专业
教学指导分委员会推荐教材

HUAGONG
JISUAN
FANGFA

化工计算方法

王煤　余徽　编

含1CD

化学工业出版社

教育部高等学校化学工程与工艺专业
教学指导分委员会推荐教材

化工计算方法

王　煤　余　徽　编

化学工业出版社

·北京·

化工涉及的计算问题大多较繁杂，运用计算机求解已成为化工专业学生和技术人员必不可少的技能。本书包括绪论、非线性方程求根、插值法、曲线拟合、数值微分与积分、常微分方程数值解法、代数方程组数值解法共7章。为方便读者理解和运用书中程序，还以附录形式对MATLAB语言基础作了简单介绍。每章均配有一定数量的包括化工应用在内的习题。本书所附光盘中包括所有例题的程序。此外，本书还配有教学ppt，可供选用本书作为教材的教师免费使用。

本书可供高等院校化工、制药、生物工程、环境、材料及其他相关专业的学生使用。

图书在版编目（CIP）数据

化工计算方法/王煤，余徽编．—北京：化学工业出版社，2008.10

教育部高等学校化学工程与工艺专业教学指导分委员会推荐教材

ISBN 978-7-122-03674-2

Ⅰ．化…　Ⅱ．①王…②余…　Ⅲ．化工计算-高等学校-教材　Ⅳ．TQ015

中国版本图书馆CIP数据核字（2008）第138798号

责任编辑：徐雅妮　　文字编辑：杨欣欣

责任校对：宋　夏　　装帧设计：史利平

出版发行：化学工业出版社（北京市东城区青年湖南街13号　邮政编码100011）

印　　装：北京市彩桥印刷有限责任公司

787mm×1092mm　1/16　印张7½　字数174千字　2008年10月北京第1版第1次印刷

购书咨询：010-64518888（传真：010-64519686）　售后服务：010-64518899

网　　址：http://www.cip.com.cn

凡购买本书，如有缺损质量问题，本社销售中心负责调换。

定　　价：**18.00元**（含1CD）

教育部高等学校化学工程与工艺专业
教学指导分委员会推荐教材

编审委员会

序

在20世纪90年代以前，我国高等教育是“精英教育”，随着高校的扩招，我国高等教育逐步转变为大众化教育。“十一五”时期，我国高等教育的毛入学率将达到25%左右，如果大学的人才培养仍然按照“精英教育”模式进行，其结果：一是有些不擅长于逻辑思维的学生学不到感兴趣的知识而造成教育资源浪费；二是培养了远大于社会需要的众多的研究型人才，导致培养出的人才不能满足社会的需要。要解决这一问题，高等教育模式必须进行改革。社会更需要的是应用型教育，经济建设更需要的是应用型人才。因此，应用型本科教育是高等教育由“精英教育”向“大众化教育”转变的必由之路。

应用型本科教育的特点在于应用，在人才培养过程中传授知识的目的是应用而不是知识本身。这就需要应用型本科教育更加注重实际工作能力的培养，使学生的潜能得到极大发挥，满足职业岗位需要。

在21世纪，作为关系国民经济发展的重要工程学科之一，化学工程与工艺专业的教育观念也急需根据学科的发展和社会对应用型本科人才的需要进行转变：

1. 从狭窄的专业工程教育观念转向“大工程”教育观念，树立“大工程教育观”（大工程观是指以整合的、系统的、再循环的视角看待大规模复杂系统的思想）；

2. 从继承性教育观念转向创新性教育观念，树立“创新性工程教育观”；

3. 从知识传授型教育观念转向素质教育观念，树立“工程素质教育观”；

4. 从注重共性的教育观念转向特色教育观念，树立“多元化工程教育观”；

5. 从本土教育观念转向国际化教育观念，树立“国际化工程教育观”。

教育模式和教育观念的转变和改革，最终都要落实在教学内容的改革上。因此，教育部高等学校化学工程与工艺专业教学指导分委员会和化学工业出版社组织编写和出版了这套适合应用型本科教育、突出工程特色的新型教材。希望本套教材的出版能够为培养理论基础扎实、专业口径宽、工程能力强、综合素质高、创新能力强的化工应用型人才提供教学支持。

教育部高等学校化学工程与工艺专业教学指导分委员会
2008年7月

前 言

对于化工专业的学生，学习计算方法的主要目的在于运用。化工涉及的计算问题大多较繁杂，运用计算机求解已成为化工专业学生和技术人员必不可少的技能。“化工计算方法”是一门偏重于应用的课程，希望本课程的教学能达到“理解原理，重在运用”的目的，为此，本书在编写中注意了以下几点。

1. 对各种计算方法，重点在讲述原理思路以及培养实际应用能力两部分，原理阐述力求思路清晰、通俗易懂，避免烦琐的数学证明和公式推证。

2. 各种算法均给出包括化工实际工程问题在内的大量例题和相应的参考程序，所有程序均有详细注释，便于读者参考和运用。

3. 由于MATLAB已成为当今最流行的科学计算语言，具有功能强大、程序简洁、编程容易等特点，本书中程序全部使用 MATLAB 编写。MATLAB 中有大量数值计算相关函数，直接调用十分简捷方便，但为了兼顾对算法原理的理解，书中仍有少量例题没有调用函数，而是按照算法步骤编程计算。

本书包括绪论、非线性方程求根、插值法、曲线拟合、数值微分与积分、常微分方程数值解法、代数方程组数值解法共 7 章。为方便读者理解和运用书中程序，还以附录形式对 MATLAB 语言基础作了简单介绍。每章均配有一定数量的包括化工应用在内的习题。

本书教学内容可按 32 学时安排，其中课堂教学占 22～24 学时，上机实习 8～10 学时。本书所附光盘中包括所有例题的程序，可供读者参考。此外，本书还配有教学用 ppt，可供选用本书作为教材的教师使用，有需要者请与化学工业出版社教材服务部联系免费索取(cipedu@163. com)。

本书第 1～6 章由王煤编写，第 7 章由余徽编写，研究生罗橙承担了例题程序的改写和编程等工作，在此表示感谢。

由于编者水平所限，书中不妥之处在所难免，恳请读者批评指正。

编者

2008 年 7 月

目　　录

1　绪论 …… 1
1.1　什么是计算方法 …… 1
1.2　误差和有效数字 …… 1
1.2.1　误差来源 …… 2
1.2.2　误差和误差限 …… 2
1.2.3　有效数字 …… 3
1.2.4　防止误差危害 …… 3
习题 …… 4
2　非线性方程求根 …… 5
2.1　二分法 …… 5
2.1.1　求解思路及方法 …… 5
2.1.2　程序及应用举例 …… 6
2.2　直接迭代法 …… 11
2.2.1　求解思路及方法 …… 11
2.2.2　程序及应用举例 …… 12
2.3　牛顿迭代法与弦截法 …… 14
2.3.1　牛顿迭代法的求解思路 …… 14
2.3.2　弦截法的求解思路 …… 15
2.3.3　程序及应用举例 …… 15
习题 …… 19
3　插值法 …… 22
3.1　插值函数 …… 22
3.2　拉格朗日插值 …… 22
3.2.1　线性插值 …… 23
3.2.2　二次插值 …… 23
3.2.3　n 次插值 …… 24
3.2.4　插值余项 …… 25
3.2.5　程序及应用举例 …… 26
3.3　二元插值 …… 32
3.4　样条插值 …… 33
3.4.1　三次样条插值函数 …… 33
3.4.2　三次样条插值函数的构建 …… 33
3.4.3　应用举例 …… 35
习题 …… 36
4　曲线拟合 …… 38
4.1　一元线性拟合 …… 38
4.1.1　最小二乘原理 …… 38

4.1.2 线性相关系数与显著性检验 …… 40
4.1.3 可线性化的非线性方程 …… 41
4.2 多元线性拟合 …… 42
4.3 程序及应用举例 …… 43
习题 …… 48
5 数值微分与积分 …… 51
5.1 数值微分 …… 51
5.1.1 差商代替导数 …… 51
5.1.2 插值型数值求导公式 …… 51
5.2 数值积分基础 …… 54
5.2.1 梯形公式（$n=1$） …… 54
5.2.2 辛普森公式（$n=2$） …… 55
5.2.3 牛顿-科特斯公式（n 等分） …… 55
5.3 复化求积公式 …… 57
5.3.1 复化梯形公式 …… 57
5.3.2 复化辛普森公式 …… 57
5.3.3 变步长辛普森积分 …… 57
5.4 龙贝格求积方法 …… 58
5.5 程序及应用举例 …… 58
习题 …… 61
6 常微分方程数值解法 …… 64
6.1 基本概念及求解思路 …… 64
6.1.1 常微分方程初值问题 …… 64
6.1.2 初值问题求解的基本思路 …… 65
6.2 欧拉法 …… 65
6.2.1 基本思路及方法 …… 65
6.2.2 程序及应用举例 …… 66
6.3 龙格-库塔法 …… 68
6.3.1 基本思路及方法 …… 68
6.3.2 常微分方程组及高阶方程求解 …… 69
6.3.3 程序及应用举例 …… 70
习题 …… 78
7 代数方程组数值解法 …… 80
7.1 直接法解线性方程组 …… 80
7.1.1 高斯消去法 …… 80
7.1.2 列主元高斯消去法 …… 81
7.1.3 追赶法解三对角线方程组 …… 82
7.1.4 程序及应用举例 …… 83
7.2 迭代法解线性方程组 …… 86
7.2.1 雅可比迭代法 …… 86
7.2.2 高斯-塞德尔迭代法 …… 87
7.2.3 解线性方程组的超松弛迭代法 …… 87
7.2.4 程序及应用举例 …… 88
7.3 非线性方程组数值解 …… 90

7.3.1 雅可比迭代法 …… 90
7.3.2 塞德尔迭代法 …… 91
7.3.3 威格斯坦法 …… 91
7.3.4 程序及应用举例 …… 92
习题 …… 95
附录 MATLAB 语言基础 …… 98
1 变量与表达式 …… 98
1.1 数据类型和变量命名规则 …… 98
1.2 MATLAB 的内部变量 …… 98
1.3 MATLAB 的表达式 …… 98
1.4 常用数学函数 …… 99
2 矩阵计算简介 …… 99
2.1 矩阵创建和矩阵元素修改 …… 99
2.2 矩阵行列修改 …… 100
2.3 矩阵运算 …… 100
2.3.1 矩阵的数学运算 …… 100
2.3.2 矩阵的函数运算 …… 101
3 MATLAB 常用语句 …… 102
4 M 函数和 M 文件 …… 104
5 MATLAB 数值计算相关函数简介 …… 104
5.1 一元非线性方程及非线性方程组求解函数 …… 104
5.2 插值函数 …… 105
5.3 最小二乘拟合函数 …… 106
5.4 数值微分与积分函数 …… 106
5.5 常微分方程（组）初值问题数值求解函数 ode …… 107
6 常用绘图命令 …… 107
参考文献 …… 109

1 绪　论

1.1 什么是计算方法

化学工程中，无论是开发设计、过程模拟，还是试验研究的数据分析，计算都必不可少。例如。化工设计时，从最基本的热力学参数、相平衡计算、物料与热量的衡算，到工艺参数的确定和优化、设备选型与设计、技术经济分析等，都需要进行计算。至于流程模拟与分析、流体流动和传热传质的数值模拟等，所涉及的计算就更加复杂。显然，这些计算问题不可能仅仅靠人工计算完成，计算机的运用必不可少。可以说，现在绝大部分的化工计算工作都是由计算机来完成。因此，运用计算机解决化工计算问题已成为化工技术人员和化工专业学生必须具备的能力。

在包括化工学科在内的科学计算中涉及的复杂问题多为以下几类：①采用数学解析方法无法求解或求解困难的计算；②需要反复多次进行或采用人工计算太复杂烦琐的计算；③大量的数据处理。这些问题通常包括非线性方程求根、微积分、微分方程求解、插值与拟合、方程组求根等。由于计算机作为一种工具，实质上只会依据给定的指令做加、减、乘、除等四则运算和一些逻辑运算。因此，就需要针对上述不同的问题，研究适用于计算机的、计算时间较短、占用资源较少的求解方法，设计出求解的顺序和步骤，然后，将基本运算按一定的顺序和步骤构成完整的求解过程。这种求解方法称为计算方法，简称算法。求解的问题不同，算法也不相同。例如，对于非线性方程的求根、函数插值、函数的积分和微分、常微分方程（组）的求解、代数方程组求解等，都要用到不同的算法。

在算法中常用到以下几种基本方法：

① 离散化方法　通过差商代替导数、差分代替微分等方式，把计算机无法求解的连续性的数学问题转化为离散的问题来处理，例如微分方程的求解就需要用到离散化方法。

② 逼近方法　对求解困难或形式未知的复杂函数 $f(x)$，用容易计算的简单函数 $p(x)$ 的值近似代替 $f(x)$ 的值，$p(x)$ 称为逼近函数，插值、拟合以及数值微分和积分都会用到逼近方法。

③ 迭代法　用一个固定公式反复计算，对较为粗糙的根的近似值进行加工直到满足精度要求，这是求解方程和方程组的主要方法之一。

有些算法和一些具体问题的求解都常常会同时用到多种基本方法。

算法也称为数值计算方法，运用数值计算方法求得的解通常是近似解，称为数值解。与数值求解相关的问题是计算数学研究的内容，如算法的收敛性、求解过程的稳定性、计算结果的误差等。本书只侧重于算法思路的理解及算法在化工中的实际应用。

1.2 误差和有效数字

对实际问题进行数值计算得到的只是近似值而非真值（准确值），二者之差称为误差。

显然，误差可用来衡量数值解对准确解的“近似”程度，对于数值计算，误差不可避免。数值计算中都有哪些误差呢，我们先来看看误差是怎样产生的。

1.2.1 误差来源

① 在计算中，常会遇到需要用无穷过程才能得到结果的情况，但实际计算时，只能进行有限次计算。例如，无穷级数的求和，只能求前面有限项之和作为近似值。这种将无穷过程“截断”，用有限过程代替无限过程所产生的误差，称为**截断误差**。截断误差与所用的计算方法有关，又称为**方法误差**。

例如，指数函数 e^x 可展开成以下幂级数的形式

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

实际计算时，显然不可能对右端无穷多项求和，通常就只截取前面有限项来计算

$$S_n(x)=1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}$$

这种用有限项之和 $S_n(x)$ 代替 e^x 的值所产生的误差就是截断误差。截断误差也是评价一个计算方法优劣的重要指标。

② 计算中有些数据的位数可能很多，也可能是无穷小数，如圆周率 π、1/3 和$\sqrt{2}$等，但计算机的位数是有限的，因此计算时通常要进行四舍五入。这种由于计算机位数有限引起的误差称为**舍入误差**。例如，在计算机上将 1/3 表示为 0.333333 时，产生的误差

$$R=\frac{1}{3}-0.333333=0.00000033\cdots$$

就是舍入误差。

舍入误差与计算机有关，也与所用的数学表达式有关。运算次数较少时舍入误差可以忽略不计，但大量的运算会造成舍入误差的传播和积累，有可能对求解结果造成严重影响。

除截断误差和舍入误差之外，在建立数学模型时，由于对实际问题进行简化造成的数学模型与实际问题的误差称为**模型误差**，用实验方法观测模型参数时的误差称为**观测误差**。模型误差和观测误差都是客观存在的，不在本书讨论范围。数值计算方法所涉及的只有截断误差和舍入误差。

1.2.2 误差和误差限

误差的大小反映了数值计算的精确度，那么误差是如何表示的呢？

(1) 绝对误差与绝对误差限

如果用 x^* 表示准确值，用 x 表示近似值，则二者之差

$$e=x^*-x \tag{1-1}$$

称为近似值 x 的**绝对误差**。然而，在一般情况下，我们无法知道准确值 x^* 是多少，当然也就不可能求出绝对误差 e 的大小。如果根据计算情况或具体的测量，可以估计出绝对误差 e 的取值范围

$$|e|=|x^*-x|\leqslant\varepsilon \tag{1-2}$$

则 ε 称为近似值 x 的**绝对误差限**。绝对误差限的含义是，近似值 x 与准确值 x^* 之间的误差不超过 ε。也就是说，ε 是误差绝对值的上限。即

$$x-\varepsilon \leqslant x^* \leqslant x+\varepsilon \tag{1-3}$$

通常用

$$x^* = x \pm \varepsilon \tag{1-4}$$

表示近似值 x 的精确度或准确值的范围。

(2) 相对误差与相对误差限

绝对误差限有时不能完全表示出近似值的好坏。例如，绝对误差限分别为 100kg 的装载 60t 货物的集装箱与 0.01g 的 1g 黄金，其近似值就难以直接进行比较。此时，采用相对误差能更好地反映近似值的准确程度。**相对误差**定义为 x^*-x 与 x^* 的比值。实际计算中，由于准确值 x^* 一般情况下无法求得，故常采用以下定义作为近似值 x 的相对误差

$$e_r = \frac{e}{x} = \frac{x^*-x}{x} \tag{1-5}$$

相应的**相对误差限**表示为

$$|e_r| = \left|\frac{x^*-x}{x}\right| \leqslant \varepsilon_r \tag{1-6}$$

1.2.3 有效数字

工程上常用有效数字来表示一个数的精确程度。**有效数字**的定义为：如果近似值 x 的绝对误差限小于其某一位数字的半个单位，从该位到 x 的第一位非零数字共有 n 位，就说近似值 x 有 n 位有效数字。例如 $x^*=\pi=3.1415926\cdots$，当 $x=3.14$ 时，误差为 $\pi-3.14=0.0015926\cdots$，x 有 3 位有效数字；当 $x=3.1416$ 时，误差为 $0.0000074\cdots$，有 5 位有效数字；如果写为 $x=3.1415$，误差为 $0.0000926\cdots$，就仅有 4 位有效数字了。

简单地说，一个近似数 x 四舍五入到哪一位，就说这个近似数精确到哪一位，这时从该位到 x 的第一位非零数字的位数就是近似数 x 的有效数字的位数。4.1508762 取 5 位有效数字是 4.1509，0.0400317 取 3 位有效数字是 0.0400，取 5 位有效数字是 0.040032。因此，用有效数字表示某数时，将其写成 0.064 和 0.06400 在准确程度上是有区别的，前者的有效数字是 2 位，其误差不大于 0.5×10^{-3}；而后者的有效数字是 4 位，误差不大于 0.5×10^{-5}。

【例 1-1】 设 (a) $x^*=6.000025$，取 $x=6.0000$；(b) $x^*=20.3600364$，取 $x=20.36004$，问 x 各有几位有效数字，精确到小数点后几位？

解 (a) $|x-x^*|=|6.0000-6.000025|=0.000025<0.5\times10^{-4}$，有效数字是 5 位，精确到小数点后 4 位；

(b) $|x-x^*|=|20.36004-20.3600364|=0.0000036<0.5\times10^{-5}$，所以有效数字是 7 位，精确到小数点后 5 位。

1.2.4 防止误差危害

计算过程中，误差的存在会对计算结果的精确度造成影响，为了防止误差带来的危害，应注意以下原则：

① 避免两个相近的数相减。数值计算过程中，两个值相近的数相减时，会造成有效数字的严重损失，使相对误差变大，计算结果不准确。为防止这种现象出现，实际计算中应多保留有效数字位数，或者变换计算公式进行运算。

② 避免用绝对值很小的数作分母。用绝对值很小的数作除数，舍入误差会增大，尤其是被除数的绝对值远远大于除数时。

③ 两个数量级相差很大的数进行运算时，注意防止大数“吃掉”小数。

④ 简化计算步骤，减少运算次数。对同一问题，减少运算次数，除可节省计算时间外，还可减少舍入误差。

【例 1-2】 计算 $x=\sqrt{a+1}-\sqrt{a}$，式中 $a=1000$，取 4 位数字。

解 可按以下两种计算公式计算，每次计算都取 4 位有效数字。

(a) 直接按上式计算

$$x=\sqrt{a+1}-\sqrt{a}=\sqrt{1000+1}-\sqrt{1000}=31.64-31.62=0.02$$

(b) 变换计算公式后计算

$$x=\sqrt{a+1}-\sqrt{a}=\frac{1}{\sqrt{a+1}+\sqrt{a}}=\frac{1}{31.64+31.62}=0.01581$$

用第一个公式的计算结果有 2 位有效数字，第二个公式有 4 位有效数字。可见计算公式的形式也可能对计算结果的误差产生很大影响。

习题

1-1 误差为什么不可避免，用什么标准衡量近似值的准确程度？

1-2 例 1-2 中计算式 (a) 求得的 x 的误差是属于哪一类误差？

1-3 如 $x^*=0.023609915$，当写为 $x=0.023$ 和 $x=0.0236$ 时各有几位有效数字？取 4 位和 5 位有效数字时应怎样写？

1-4 某地的化肥产量是 256 万吨，可表示为 256 万吨 $=256\times10^4$ 吨，其绝对误差是 1/2 万吨，或 $1/2\times10^4$ 吨。问 256 万吨可否表示为 2560000 吨？为什么？

1-5 如果 $x\ll1$，采用以下哪个计算公式更准确？

(a) $y=\dfrac{1}{1+2x}-\dfrac{1-x}{1+x}$ (b) $y=\dfrac{2x^2}{(1+2x)(1+x)}$

2 非线性方程求根

化工计算中最常见的问题之一是方程求根，例如范德华方程、R-K 方程、维里方程，以及泡点方程、露点方程、化学反应计算等。求解这些方程实质上都可归结为非线性方程求根。

非线性方程的形式可以表示为

$$f(x)=0 \tag{2-1}$$

例如，R-K 方程

$$p=\frac{RT}{V-b}-\frac{a}{T^{1/2}V(V+b)}$$

在已知温度 T 和压力 p 下求体积 V，便是如下非线性方程的求根问题

$$f(V)=\frac{RT}{V-b}-\frac{a}{T^{1/2}V(V+b)}-p=0$$

函数 $f(x)$ 可用多项式表示时，$f(x)=0$ 是代数方程，如果 $f(x)$ 是含有指数、对数等超越函数，$f(x)=0$ 就是超越方程。如果 x^* 满足方程，使 $f(x^*)=0$，x^* 就称为方程的解或方程的根。方程求根就是要找到这样的 x^*。

尽管我们的目的是找到方程的根 x^*，但在实际计算中，并不一定需要得到根的准确值，通常只需要求得满足一定精度要求的近似根就可以了。

根据计算求解的不同思路，方程求根的方法大致可以分成两类：

一类是**搜索法**。求解思路是在一定的范围内逐步缩小有根区间，直到找到近似根。二分法就属于此类。

另一类是**迭代法**。求解思路是逐次逼近。方法是先设定一个比较粗糙的根的近似值，称为**初值**，然后用一个固定的迭代公式进行计算，反复校正，直到求得满足精度要求的近似根。根据迭代格式的不同，此类方法包括直接迭代法、牛顿法（切线法）、弦截法（割线法）等。

2.1 二分法

2.1.1 求解思路及方法

二分法是一种简单而直观的搜索求根方法，求解思路是：确定方程 $f(x)=0$ 在区间 $[a,b]$ 内有单实根，将有根区间 $[a,b]$ 对分成两半，方程的根必落在其中一半或对分点上，确定有根区间并将有根的这一半区间再次对分。如此反复进行，有根区间逐步缩小，每次缩小为原区间长度的一半，直到缩小到给定的精度要求为止。这种求解方法要求 $f(x)$ 在区间内连续，且每个有根区间只有一个实根。

现在来看看二分法求根的具体步骤。

① 确定有根区间 $[a,b]$ 的中点 $x_0=\frac{a+b}{2}$，目的是将有根区间对分为两部分。

② 计算有根区间中点 x_0 的函数值 $f(x_0)$，判断 $f(x_0)$ 与 $f(a)$ 是否异号，即是否有 $f(x_0)f(a)<0$，目的是检查有根区间在哪一侧。如果 $f(x_0)f(a)<0$，说明 $f(x_0)$ 与 $f(a)$ 异号，有根区间在 x_0 的左侧，这时令 $a_1=a$，$b_1=x_0$，有根区间缩小为原来的一半。相反，如果 $f(x_0)f(a)>0$，说明有根区间在 x_0 的右侧，此时令 $a_1=x_0$，$b_1=b$。不管哪种情况，新的有根区间 $[a_1,b_1]$ 的长度均为原区间 $[a,b]$ 的一半（见图 2-1）。

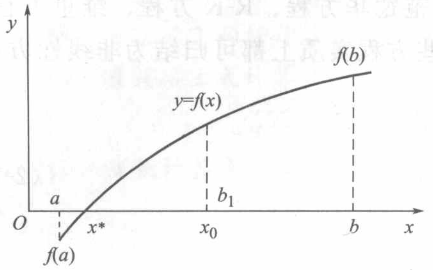

图 2-1　二分法

③ 对新的缩小了的有根区间 $[a_1,b_1]$ 重复以上步骤，又可得到新的有根区间 $[a_2,b_2]$，长度是 $[a_1,b_1]$ 的一半。

如此反复进行，可使有根区间不断缩小，这个过程进行到什么时候为止呢？可以预先设定一个允许的误差 ε，如果第 k 次二分后得到的有根区间 $[a_k,\ b_k]$ 的长度小于允许的误差 ε

$$|b_k-a_k|<\varepsilon \tag{2-2}$$

就可判定不论将区间的哪一点作为近似根 x，它与真根 x^* 的误差都小于或等于 ε

$$|x^*-x|\leqslant\varepsilon \tag{2-3}$$

可以看出允许误差 ε 也就是真根 x^* 的绝对误差限，ε 通常称为**计算精度**。达到计算精度即终止计算。

有时在计算区间内方程的根不止一个，也就是计算区间 $[a,b]$ 内存在多个实根，此时需要先将区间 $[a,b]$ 划分成若干个小区间，然后再依次对各个小区间按上述求单根的方法实施二分求根。具体作法是，将区间 $[a,b]$ 分割成若干个长度为 h 的小区间，保证每一小区间最多只有一个实根，然后从区间一端开始依次对各个小区间进行根的搜索。搜索时，先检查小区间的两个端点的函数值 $f(x)$ 是否同号，若同号，可知该区间内无根，如异号，则表明此小区间必有实根，依照求单根的方法求得根后，再对下一区间进行检查。重复上述步骤，直至求出 $[a,b]$ 中的全部近似根（见图 2-2）。

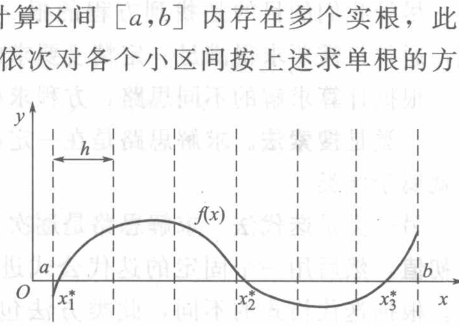

图 2-2　二分法求多个实根

2.1.2　程序及应用举例

【例 2-1】　求方程 $f(x)=x^3-x-1=0$ 在区间 $[1,1.5]$ 内的实根，要求精度为 10^{-5}。

解　本题在给定区间内只有一个实根，用二分法求解。求解步骤为：

(1) 输入求根区间 a 和 b，确定精度 ε 的值，计算函数值 $f(a)$ 和 $f(b)$；

(2) 取 $[a,b]$ 的中点 $c=(a+b)/2$，计算 $f(c)$；

(3) 判断是否有 $|f(c)|<\varepsilon$，如果是，则以 c 作为近似根，输出结果，中止计算，否则进行下一步；

(4) 判断 $f(c)$ 和 $f(a)$ 是否同号，如果是，则令 $a=c$，否则令 $b=c$，回到步骤 (2)。

编程时分为两步进行，首先定义函数 $f(x)$，然后再在主程序中计算。

参考程序如下：

第一步，定义函数

```
function y=eff(x)
y=x^3-x-1;  %函数 f(x) 的表达式
```

第二步，主程序

```
m=0;  %二分次数计数
a=input('a=');b=input('b=');  %输入求根区间
fa=eff(a);   %计算 f(a) 的值
fb=eff(b);   %计算 f(b) 的值
c=(a+b)/2;   %计算区间二分中点
fc=eff(c);   %计算区间中点f(c)的值
while abs(fc)>=10^-5;  %判断f(c)是否为零点
    if (fa*fc)>=0;   %判断左侧区间是否有根
        fa=fc;
        a=c;
    else fb=fc;
        b=c;
    end
    c=(a+b)/2;
    fc=eff(c);
    m=m+1;
end
fprintf(' \n%s%.4f \t%s%d ',' x=',c,'m=',m)   %计算结果输出
```

计算结果显示为

x=1.3247   m=16

【例 2-2】 在 298K 下，化学反应 $2OF_2 \rightleftharpoons O_2+2F_2$ 的平衡常数为 0.410atm[1]，如在 298K 下将 OF_2 通入容器，当 $t=0$ 时为 1atm，问最后总压是多少？取计算精度为 10^{-4}。

解 假设是理想气体，由反应的化学计量式可知

$$2OF_2 \rightleftharpoons O_2+2F_2$$

设氧的平衡分压为 p，相应有 $\quad 1-2p \qquad p \qquad 2p$

$$\frac{4p^3}{(1-2p)^2}=0.410$$

整理得 $$4p^3-1.640p^2+1.64p-0.410=0$$

故函数形式为 $$f(p)=4p^3-1.640p^2+1.64p-0.410=0$$

由计算知 $f(0.2)=-0.1156$，$f(0.3)=0.0424$，可设有根区间为 [0.2,0.3]。

---

[1] 1atm＝101325Pa。

本题只需对例 2-1 的程序作如下两点修改：

① 在定义函数时按本题的 $f(x)$ 的形式定义；

② 区间端点 a、b 值按本题输入。

程序其余部分完全相同，故程序从略。

求解结果为：氧的分压为 $p=0.274902\text{atm}$，总压 $p_{总}=1.274902\text{atm}$。

【例 2-3】 求非线性方程 $\sin(x)=0$ 在区间 $[-4,7]$ 内的全部实根，要求精度为 10^{-5}。

解 很明显本题有 4 个根，属于求多个实根的情况。计算时先将区间 $[a,b]$ 划分成若干个小区间，取小区间步长 $h=0.2$，依次对每个小区间进行根的搜索，要求精度为 0.00001。

参考程序如下：

```
x=-4:0.2:7;      %输入区间左端点、步长和右端点
y=sin(x);        %函数f(x)的表达式
n=0;     %根的个数计数
for i=1:(length(x)-1);
    if y(i)*y(i+1)<0     %判断小区间[xi, xi+1]内是否有根，有根则进行二分计算
        a=x(i); b=x(i+1);    %确定有根小区间端点
        fa=sin(a);fb=sin(b);     %计算区间端点值
        c=(a+b)/2;
        fc=sin(c);
        while abs(fc)>10^(-5)    %判断是否零点
            if fa*fc>0
                fa=fc;
                a=c;
            else
                fb=fc;
                b=c;
            end
            c=(a+b)/2;
            fc=sin(c);
        end
        c;
        fprintf('\n%s%.6f','x=',c)     %输出找到的根
        n=n+1;
    end
    if y(i)==0      %判断区间端点是否零点
        m=x(i);    %区间端点为零点时直接作为根
        fprintf('\n%s%d','x=',m)      %输出区间端点为根
        n=n+1;
```