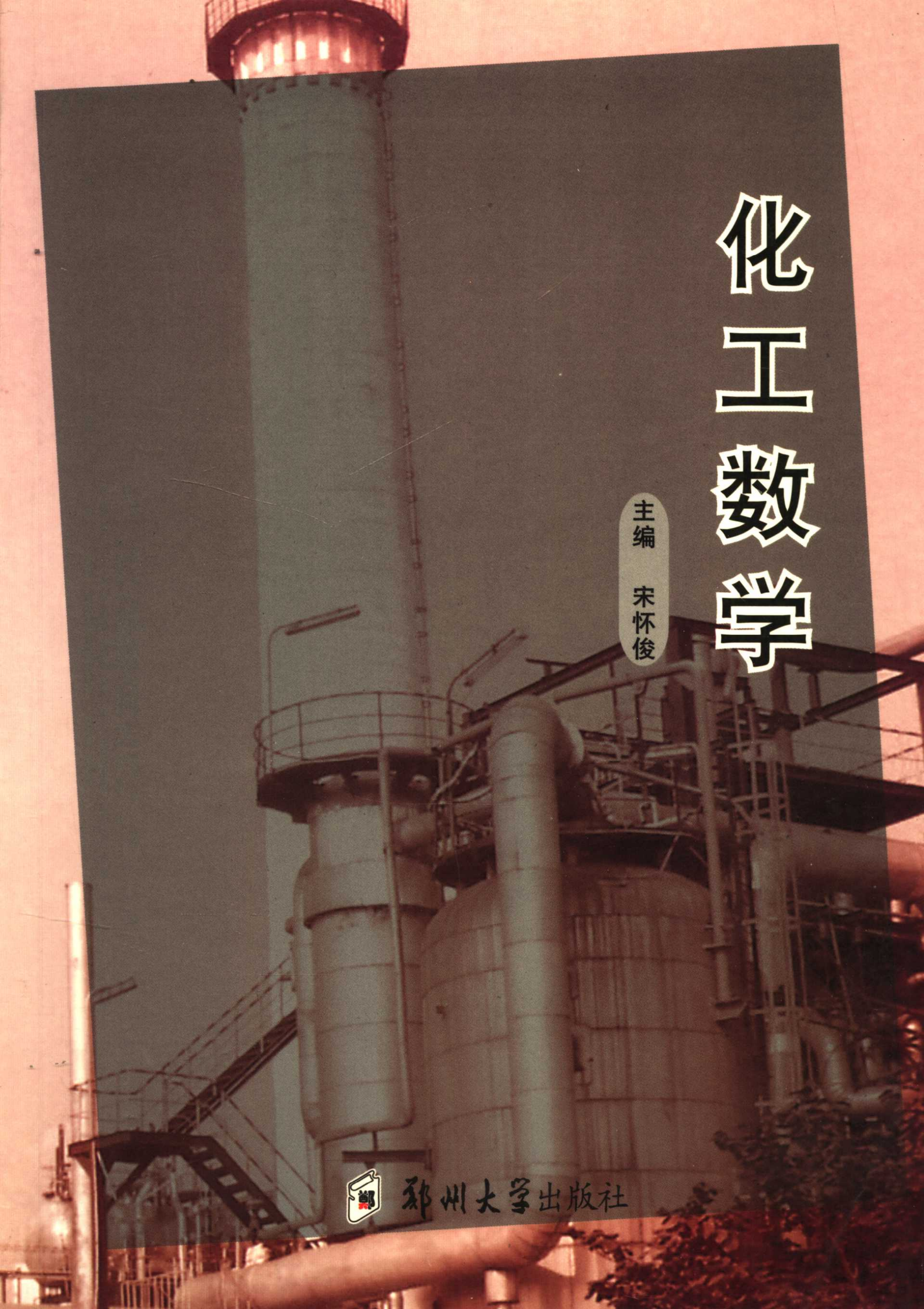


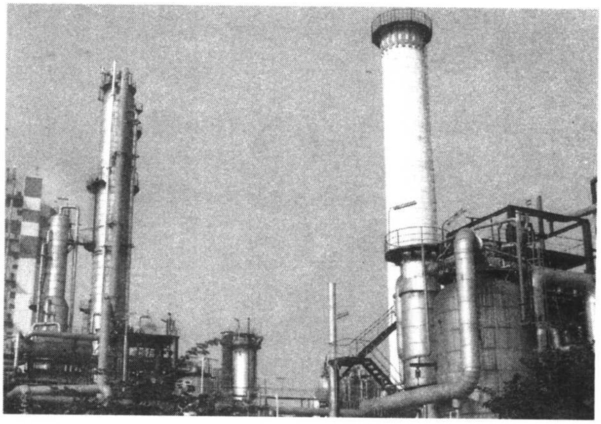
化工数学

主编 宋怀俊

郑州大学出版社

化工数学

主编　宋怀俊



郑州大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

化工数学/宋怀俊编著.—郑州:郑州大学出版社,
2006.7
ISBN 7-81106-328-X

Ⅰ.化…　Ⅱ.宋…　Ⅲ.化学工业-应用数学
Ⅳ.TQ011

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第008997号

郑州大学出版社出版发行
郑州市大学路40号　　邮政编码:450052
出版人:邓世平　　发行部电话:0371-66966070
全国新华书店经销
河南东方制图印刷有限公司
开本:710 mm×1 010 mm　　1/16
印张:13
字数:287千字　　印数:1~4 100
版次:2006年7月第1版　　印次:2006年7月第1次印刷

书号:ISBN 7-81106-328-X/T·18　　定价:26.00元

作者名单

主　编　宋怀俊

编　委　宋怀俊　任保增　韩绿霞　李伟然

内容提要

本书在工科高等数学、计算机基础、物理化学、化工原理等课程的基础上，主要介绍了化工过程中遇到的数学问题。全书共分八章，除第一章绪论外，其他七章均为化工计算中的常用方法，分别为：误差分析、非线性方程的数值解法、线性代数方程组的解法、函数的多项式插值、函数的多项式逼近、数值微分与数值积分、常微分方程的数值解法。

书中内容精练，叙述通俗易懂，便于自学。为加强练习，对所讨论的计算方法，只给出理论根据和计算步骤，省去了相应的计算机程序和框图，并在每章后配有习题。本书适合于化工专业本科生、研究生以及工程技术人员参阅。

前　言

现代化工过程是一个由不同类型的化工单元组成的庞大而又复杂的工业系统。在化工过程的研制开发、化工工艺设计、先进化工装置的消化以及现行工业生产的技术改造等方面，都不可避免地要涉及数学计算，而与计算机密切相关的数值方法是其主要内容。同时现代化工过程发展的一个重要标志即是模型化。因此，如何运用现代数学计算工具解决化学工业中的实际问题，实现数学在化学工业中的应用和化工过程的数学模型化，完成数学与化工技术的完美结合，应该是未来化工类工程技术人员必备的知识。

本书根据化工类专业以及相关专业的教学内容和工程实际的需要，强调数学在化工过程中的实际应用，主要介绍了化工过程中遇到的数学问题。全书共分八章，除绪论外，均为化工计算中的常用方法，包括误差分析、非线性方程和线性代数方程组的计算方法、函数的多项式插值、函数的多项式逼近、数值微分、数值积分以及常微分方程的数值解法等。

本书第一、六、七、八章由宋怀俊编写；第二章由任保增编写；第三章由李伟然编写；第四、五章由韩绿霞编写。全书由宋怀俊负责统稿、定稿，由雒廷亮主审。本书在编写过程中得到了郑州大学出版社和郑州大学教务处的大力支持，在此向他们表示衷心的感谢！由于编者水平有限，且编写时间仓促，书中错误之处在所难免，还望广大读者不吝批评、指正，以便使之更加完善。

编　者

2005 年 6 月

目　录

第一章 绪 论

一、化工过程的数学表示

化学工程是研究大规模地改变物料的化学组成及物理性质的工程技术学科，它研究的内容，不但包括具有化学变化的过程，而且还包括分离混合物为较纯净的不同组分以及改变物理状态和性质的各种过程。化学工程在20世纪初几乎纯属经验，主题是如何利用实验室实验的结果来设计单元设备的容量，即所谓的单元操作时期。到20世纪50年代中期，随着生产的发展，化学工程逐步向技术科学发展，即要求明了化工过程中质量、能量和动量传递的基本现象，这就需要使用数学方法对这些基本现象进行描述。目前，电子计算机的普遍应用，又推动了化学工程进一步走向数学模型化。

所谓数学模型，从广义上讲，就是所考虑的化工过程中某些变量间关系的总称，这种关系，不管是静态的或是动态的，通常都可用公式、表格或图形来表述，这些公式、表格或图形就称为化工过程的数学模型。然而，由于电子计算机的使用，所有表格或图形均可回归成数学表达式，因此，数学模型通常又是指过程的解析表达式。从狭义上讲，数学模型必须是由数学解析表达式构成。从这方面来说，数学模型是可以描写化工过程特性的方程式或方程组。

用数学模型从本质上描述某一化工过程，这不仅需要广泛的数学知识，还必须具有足够的化工专业知识以及对化工过程系统的全面了解。首先要根据过程中化学或物理实际现象及真实过程的物理概念，经过适当的假设和简化建立过程的物理模型；然后再经过必要的归纳和数学推导建立数学模型；最后应用数学方法求解这些数学模型，再应用这些数学解来定量地说明实际过程，从而达到定量分析和预测实际过程的目的。这种模型化的研究方法在化工过程的开发、设备设计及操作条件的优化和过程机理的研究等方面越来越显示出强有力的作用。

二、化工数值方法的意义

在用数学方法解决化工问题的时候，数学模型的建立是化学工程学科的任务，而数学模型的求解则是数学的内容。数学分析及代数学提供了各类数学问题的解析解法，但能够给出精确的解析解的数学问题是很有限的。这样就不得不求助于数值方法来提供各类数学问题的数值解。数值解虽然是近似而且离散的，但它可用于处理极其广泛的工程数学上的多种问题。

由于化工领域涉及面广、过程复杂，它提出了相当多的复杂数学模型及数学问题，涉及到许多数学分支知识，包括线性和非线性代数方程、微分方程、数值微分和数值积分等。对于这类复杂的数学模型，经典的数学解析法已无能为力，必须借助于数值方法，应用计算机求解。因此，数值方法在化工领域内占有极其重要的位置，是化学工程专业技术人员不可缺少的基础知识，也是现代化工技术发展的促进因素。

随着计算机技术的发展和工程问题的需要，目前已涌现出大量功能强、精度高的计算机软件，这为工程技术人员解决实际工程问题提供了相当方便的条件。但只有掌握了数值方法，才能合理地选择和有效地应用这些软件解决实际计算问题。因为在使用这些软件去解决具体的工程问题时，通常会遇到如下几个问题：

(1)数学模型是否准确地反映了实际化学和物理过程。

(2)选用的数值方法是否合适，方法的误差是否超过工程问题允许的误差。

(3)选用的软件提供的程序的实际使用条件是否恰当，在解决具体工程问题时应作哪些修改或调整等等。

工程计算中，这些问题必须搞清楚，否则就可能发生偏差，甚至导致计算失败。

本书是本着为化学工程专业技术人员提供必要的数值方法的基础知识而编写的。全书在论述上着重于各种数值方法的介绍和应用，尽量避免过多的数学证明与推导，使读者能较快地掌握和应用这些方法。对于某些数学方法的讨论，为便于读者理解，仅简要地证明了定理的正确性。

第二章　误差分析

在数值计算中，一般来说，求得的数学模型的解和参加运算的数值都是近似的，也就是说，它们带有一定的误差。例如用观测实验的方法得到的参加运算的数据，它们必然带有误差；也有一些数据，如 π、e、$\sqrt{2}$、$\sqrt{3}$等这些无理数，只能用有理数近似地表示，也会产生误差。这些原始数据所带的误差随着计算过程的演变，往往会产生积累与扩散，给计算的结果造成严重的影响。在许多工程计算中，虽然不必追求真解，但却要求了解近似解的误差范围。

因此，研究误差产生的原因、误差在计算过程中的积累与传播情况，以及如何尽可能地减少误差以保证运算结果的可靠性，是每一个从事数值计算的工作者应当首先考虑的问题。本章的目的就是对这些问题进行概括的说明。

第一节　误差对计算结果的影响及其分类

一、误差对计算结果的影响

现通过一个例子来说明近似数的误差，以及在计算过程中误差的积累与传播对计算结果的影响。

例 2-1　设一半径为 r 的球与两个相互垂直的平面相切，另有一底面半径为 R 的圆柱与球及两平面都相切，如图 2-1 所示，试求这个球的体积。（R 已知）

用初等几何的方法可得

$$r = R\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)$$

从而球的体积为

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^3$$

下面只就括号部分的立方进行计算。

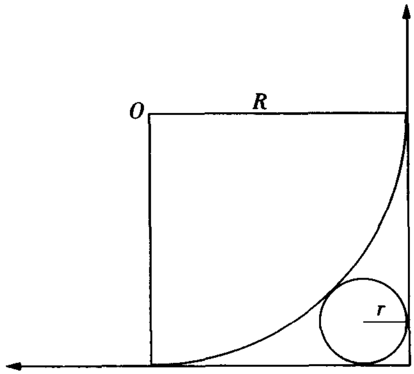


图 2－1

设

$$X=\left(\frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{2}+1}\right)^3$$

这个式子可以用以下 6 种形式来表示：

$$X=(\sqrt{2}-1)^6=(3-2\sqrt{2})^3=99-70\sqrt{2}$$

$$X=\left(\frac{1}{\sqrt{2}+1}\right)^6=\left(\frac{1}{3+2\sqrt{2}}\right)^3=\frac{1}{99+70\sqrt{2}}$$

由于$\sqrt{2}$的真值是 1.414 213…，若取$\sqrt{2}$的两个近似值为：$\sqrt{2}=1.4$ 和$\sqrt{2}=1.41$，分别按以上 6 个公式计算，结果如表 2－1 所示。

表 2－1

$\sqrt{2}$	1.4	1.41
$(\sqrt{2}-1)^6$	0.004 096	0.004 750
$(3-2\sqrt{2})^3$	0.008 000	0.005 832
$99-70\sqrt{2}$	1.000 000	0.300 000
$\left(\frac{1}{2\sqrt{2}+1}\right)^6$	0.005 233	0.005 104
$\left(\frac{1}{3+2\sqrt{2}}\right)^3$	0.005 125	0.005 073
$\frac{1}{90+70\sqrt{2}}$	0.005 076	0.005 058

从计算的结果可以看出，按不同公式，取不同的近似值进行计算，所得结果是不一样的，有的相差甚远，究竟取哪一个接近于真值？这就是我们要研究的问题。

二、误差的分类

由例2－1可见，原始数据与计算结果之间通常或多或少地存在一定的误差，这些误差的来源大体上可分为以下5个方面。

1. 模型误差

模型误差指的是数学方法的描述与实际物理现象之间的误差。根据实际工程问题建立数学模型时，必须经过某种程度的简化和归纳，即所谓“理想化”处理。这种处理一方面是为了使具体问题抽象化，使模型具有普遍的适应性；另一方面也是为了使模型简化，以便于进行数学处理。这就造成了模型与实际问题之间的误差。例如固定床反应器的拟均相模型、多元精馏塔的平衡级模型、伴随有化学反应的吸收塔模型等等，都作过种种理想化处理。但应明确，这类误差不是数值方法的某种算法所造成的，而是算法所采用的模型本身带来的。

2. 观测误差

在数值计算中，相当多数量的原始数据是用观测、试验的方法得到的。在得到这些数据的过程中，由于受到工作人员的生理条件、实验手段以及技术水平的限制，所得数据不可能是完全精确的，这种实验观测结果与真值之间的误差称为试验观测误差。

3. 截断误差

在工程问题计算中，并不是所有的问题都能通过对数学模型的直接计算而取得结果的。常常会遇到超越运算，这就要求用极限和无穷过程来表示。但在实际计算时，只能进行有限次运算，因而只能求得其近似值。例如，在数值方法中，常采用收敛级数的前 n 项代替无穷级数，也就是舍去了 n 项以后的项。由此引起的误差称为截断误差。这类误差与数值方法中的算法有关，在算法选择和进行具体运算时，应注意对这类误差的分析。实际上，常用截断误差限或截断误差的阶来判定某种算法的优劣。

4. 舍入误差

实际计算中，无论是由观测得来的数据或是由计算得来的数据，其位数总应该是有限位。因此就需要对数据进行舍入，得到一定位数的近似值。这样产生的误差称为舍入误差。数据舍入的方法有多种，最常用的即熟知的四舍五入法则。

5. 过失误差

这种误差的产生是由于计算人员的粗枝大叶或疏忽大意所造成的，其结果是难以预料的，原因往往不易找到。如听错、读错、写错以及建立的模型和选择的数值方法不合实际或不科学等等。应指出的是，过失误差对于一种严肃的科学计算来说是不允许的。这就要求计算工作者始终保持严谨的工作态度，以利于消除过失误差。

以上概述了误差的各种来源。在数值计算乃至程序设计中，主要关心与研究的是截断误差与舍入误差对计算结果的影响。

第二节　误差的表示和有效数字

在数值计算中，无论是原始数据，还是计算结果，一般说来都是近似值，也即它们与真值之间存在有一定的误差。衡量近似值与真值的接近程度无疑是人们所关心的问题。通常把近似值与真值的接近程度称为近似值的准确度。为了有效地衡量一个近似值的准确度高低，现引入误差的表示形式和近似值有效数字的概念。

一、误差表示

在数值计算或测量中，常用的误差表示方法有绝对误差、相对误差、标准误差等等。

1. 绝对误差

设真值 x 的近似值为 x^*，则称 $x-x^*$ 为 x 的绝对误差，记为：

$$e=x-x^*$$

在一般情况下，真值是不能得到的，因此，也就无法得到绝对误差。但可根据近似值本身的性质以及取舍法则来估算出这个绝对误差的范围，即找到一个尽可能小的正数 ε，使得绝对误差的绝对值不超过这个正数，其中，ε 称为绝对误差界。即

$$|e|=|x-x^*|\leqslant\varepsilon$$

在工程技术上，绝对误差界常以正负偏差的形式出现。真值、近似值及绝对误差界之间的关系表示为：

$$x=x^*\pm\varepsilon$$

例如，$G=200\ \text{kg}\pm0.1\ \text{kg}$，表示近似值 $G=200\ \text{kg}$，其绝对误差界是 0.1 kg。从绝对误差与绝对误差界的意义可以知道它们是有单位的。

2. 相对误差

近似值 x^* 的相对误差为：

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

相对误差不仅可以表示近似值 x^* 的误差大小，还可以完善地表示其准确程度，比绝对误差的概念更为完善。例如，假设称量 1 000 kg 与 100 kg 的两种物体时，所得绝对误差均为 1 kg，那么，应当认为对 1 000 kg 物体的称量准确度比对 100 kg 物体的称量准确度要高。故相对误差比绝对误差更能准确地表示一个近似值的准确度。

与绝对误差一样，相对误差也摆脱不了真值 x 的影响。通常是找一个尽可能小的正数 ε_r，使得相对误差的绝对值最大时也不超过它，即

$$|e_r|=\left|\frac{e}{x^*}\right|=\left|\frac{x-x^*}{x^*}\right|\leqslant\varepsilon_r=\left|\frac{\varepsilon}{x^*}\right|$$

称这个 ε_r 为近似值 x^* 的相对误差界。

真值、近似值及相对误差界之间的关系可表示为：

$$x = x^*(1 \pm \varepsilon_r)$$

相对误差与相对误差界为无名数,常用百分数来表示。

3. 标准误差

标准误差(σ)的定义式为:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} \quad (n\ 为无限大,即测定次数\ n\ 为无穷多)$$

或

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2} \quad (n\ 为有限次测定)$$

其中,$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$。

标准误差也称为均方根误差,它是工程计算中常用的表示误差的方法。这种误差的表示方法虽不直观,但它消除了正负偏差相互抵消的可能性,它不但与一组测定值中每个数据有关,而且对其中较大误差或较小误差的敏感性很强,能较明显地反映出较大的个别误差。实验愈精确,其标准误差愈小。

二、有效数字

1. 有效数字的定义与一般形式

(1)定义:若近似值 x^* 的绝对误差不超过某位数字的半个单位,那么从该位数字到 x^* 最左边的那个非零数字(设共有 n 位)都称为 x^* 的有效数字。

例如,$|e - 2.718| < 0.0005 = \frac{1}{2} \times 0.001$,则 e 的近似值 2.718 有 4 位有效数字。

再如,若近似值 123.45 与 876.000 是用四舍五入法则得来的,那么前者有 5 位有效数字,后者有 6 位有效数字。

(2)一般形式:任何一个具有 n 位有效数字的近似值 x^* 总可以表示成下列一般形式

$$\begin{aligned} x^* &= \pm 10^m [a_1 + a_2 \times 10^{-1} + \cdots + a_n \times 10^{-(n-1)}] \\ &= \pm 10^{m+1}(a_1 \times 10^{-1} + a_2 \times 10^{-2} + \cdots + a_n \times 10^{-n}) \end{aligned}$$

其中,n 为有效数字位数;m 为任何整数;a_i 为 0 ~ 9 中的整数,且 $a_1 \neq 0$。

同时,显然有

$$|x - x^*| \leq \frac{1}{2} \times 10^m \times 10^{-(n-1)} = \frac{1}{2} \times 10^{m-n+1}$$

这就说明了有效数字与绝对误差之间的关系。

例如重力加速度 g,若四舍五入到小数点后两位,通常得 $g = 9.80\ \mathrm{m/s^2}$。即

$$|g - 9.80| \leq \frac{1}{2} \times 10^{-2}$$

因为

$$9.80=10^{0}(9+8\times10^{-1}+0\times10^{-2})$$

于是

$$-(n-1)=-2$$
$$n=3$$

即 9.80 具有 3 位有效数字。

现把 g 的单位改为 km/s^2,则 $g=0.009\ 80\ km/s^2$。

由于

$$0.009\ 80=10^{-3}(9+8\times10^{-1}+0\times10^{-2})$$

同样

$$-(n-1)=-2$$
$$n=3$$

这说明 g 仍为 3 位有效数字,事实上这是和有效数字的规定相符合的。

2. 有效数字与相对误差的关系

从上段的分析可以看出,近似值 x^* 的有效位数越多,绝对误差界就越小,反之亦然。那么有效数字与相对误差的关系如何呢?它们之间的关系可以用以下两条定理来说明。

定理 1 若近似值 x^* 具有 n 位有效数字,那么它的相对误差满足

$$|e_r|\leqslant\frac{1}{2a_1}\times10^{-(n-1)}$$

证明 从具有 n 位有效数字的近似值 x^* 的一般表达式得知

$$|x^*|\geqslant a_1\times10^{m}$$

$$|e_r|=\left|\frac{e}{x^*}\right|\leqslant\frac{1}{a_1\times10^{m}}\times\frac{1}{2}\times10^{m-(n-1)}=\frac{1}{2a_1}\times10^{-(n-1)}$$

由定理 1 可知,有效位数越多,相对误差越小。

定理 2 若近似值 x^* 的相对误差 e_r 满足

$$|e_r|\leqslant\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{-(n-1)}$$

则 x^* 至少有 n 位有效数字。

证明 由于

$$e=x^*e_r$$

$$|x^*|=|\pm10^{m}[a_1+a_2\times10^{-1}+\cdots+a_n\times10^{-(n-1)}]|\leqslant(a_1+1)\times10^{m}$$

则

$$|e|=|x^*|\cdot|e_r|\leqslant(a_1+1)\times10^{m}\times\frac{1}{2(a_1+1)}\times10^{-(n-1)}$$

即

$$|e|\leqslant\frac{1}{2}\times10^{m-(n-1)}$$

故 x^* 至少有 n 位有效数字。

从以上两个定理可以看出，有效数字是近似值精度的重要标志。

例 2-2 要使 $\sqrt{30}$ 的近似值的相对误差不超过 0.1%，应取几位有效数字？

解 由定理 1 可知

$$|e_r| \leqslant \frac{1}{2a_1} \times 10^{-(n-1)}$$

因为 $a_1 = 5$，令

$$\frac{1}{2 \times 5} \times 10^{-(n-1)} \leqslant 0.1\%$$

则 $n \geqslant 3$，即应取 3 位有效数字。

按定理 2 应有

$$\frac{1}{2(a_1+1)} \times 10^{-(n-1)} \leqslant 0.1\%$$

$$\frac{1}{2(5+1)} \times 10^{-(n-1)} \leqslant 0.1\%$$

同样取 $n=3$ 即可满足要求。

第三节　算术运算中的误差积累与传播

一、一般函数的误差计算

从微分学知道，函数的微分是函数增量的线性主部，它们之间相差一个高阶的无穷小量。因而用函数的微分来代替函数的增量不仅是可能的，而且往往可以简化计算。这里所说的增量，指的就是函数的绝对误差。

设多元函数 $F=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$，自变量 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 的近似值分别为 $x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*$，函数 F 的近似值为 $F^*=f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*)$，则函数近似值的绝对误差为（各自变量的绝对误差分别记为 $e_1,e_2,\cdots,e_n$）

$$\begin{aligned} e(F^*) = F - F^* &= f(x_1,x_2,\cdots,x_n) - f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*) \\ &= f(x_1^*+e_1,x_2^*+e_2,\cdots,x_n^*+e_n) - f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*) \end{aligned}$$

由微分与增量的关系可知

$$e(F^*) = \mathrm{d}f(x_1^*,x_2^*,\cdots,x_n^*) + \delta$$

即

$$e(F^*) = \frac{\partial f}{\partial x_1^*}e_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2^*}e_2 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_n^*}e_n + \delta$$

当略去高阶无穷小量 δ 时可得

$$e(F^*) = \frac{\partial f}{\partial x_1^*}e_1 + \frac{\partial f}{\partial x_2^*}e_2 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_n^*}e_n$$