化工非线性分析

〔美〕B. A. 芬莱逊著

天津大学出版社

化工非线性分析

[美] B. A. 芬莱逊著

李绍芬　张　瑛
廖　晖　张好讲　译

天津大学出版社

1992

内 容 提 要

本书系为非数学专业人员而写的关于非线性问题求解方法的入门著作，以实用为目的，不要求读者有高深的数学基础．内容包括代数方程、常微分方程的初值问题及边值问题、抛物型偏微分方程以及两维空间偏微分方程的数值解法．全书着重于数学方法的介绍及其在化学工程领域中的具体应用，并对不同的解法结合计算机计算作较详细的分析与比较．书中附有进行非线性分析时常用的计算机程序．由于本书所介绍的数学方法，同样地适用于其他科学和工程领域的非线性问题分析，所以，本书不仅对化工领域的科技人员和高等院校师生十分有用，而且对其他领域的有关人员，也很有参考价值．

(津)新登字 012 号

Nonlinear Analysis in Chemical Engineering

Bruce. A. Finlayson (USA)

*

化 工 非 线 性 分 析

[美] B.A. 芬莱逊著

李绍芬 张 瑛 廖 晖 张好讲 译

*

天津大学出版社出版
(天津大学内)
河北省昌黎印刷厂印刷
新华书店天津发行所发行

*

开本:787×1092 毫米 1/16 印张: 17 1/4 字数: 431 千字
1992 年 2 月第一版 1992 年 2 月第一次印刷
印数: 1—2000

ISBN 7－5618－0313－3
TQ・12

定价: 8.60 元

译　　序

数学计算方法是进行化学工程科学研究的重要手段之一，又是进行化工设计所必需。在化学工程学科领域内，经常遇到各种非线性微分方程问题，这类问题的绝大多数只能用数值方法求解。本书正是为此目的而撰写的一本有关数值分析方法的入门书。

本书最显著的特点是针对性强，是为非数学工作者而写的应用数学著作。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。各种数值方法的具体应用都是结合化学工程问题，如流体流动、反应与扩散等，作详细的讨论，密切联系过程的物理实质。另一方面，对同一问题作者用不同方法进行求解，对解的精确度，所需运算次数和计算机时作出详尽的比较，这对使用者选择求解问题的方法很有参考价值。这也是本书的一个特点。书末附有部分行之有效的计算机程序可供使用。

本书为芬莱逊教授在美国华盛顿大学开设的研究生课程所用的教材，我们认为也可用作我国高等院校化工数学课及研究生数学课的教学参考书，当然也可作为化工及其相关领域科技人员的参考书。

全书由李绍芬(第 1、2 章)、张瑛(第 4 章)、张好讲(第 5 章)和廖晖(第 3、6 章)译出，最后由李绍芬校对及整理而成。由于译者水平有限，错误在所难免，欢迎读者批评指正。

译者　　1988.3.1

原 序

本书介绍工程中求解常微分方程和偏微分方程的若干分析方法。许多著作和课程往往着重于线性问题，但工程上出现的却时常是非线性问题。这里对应用于非线性问题的许多方法——有限差分、有限元、正交配置以及摄动法，阐明其应用范围和由各种方法得到的有用结果。用不同的方法求解同样的问题，使读者能在类似的实际情况下评价这些方法。示例均来自作者自已在流体(包括聚合物)流动、传热和化学反应器建模等方面的经验。

本书的程度是入门性的，且在论述上面向非数学专业人员。虽然如此，也向读者介绍最新的最有效的技术。本课程以华盛顿大学一门成功的研究生课程为基础，选这门课的许多化学工程师均是实验工作者。读者如希望对某一特殊方法或应用作进一步深入研究，可以遵循列于各章中书刊介绍的指引。

作者格外感谢试用本书初稿的 1979 级同学，特别是 Dan David 和 Mike Chang，曾辛勤地进行校勘工作。原稿系由 Karen Fincher 和 Sylvia Swimm 熟练地打出。

作者还对他的家人在写作期间在财务和精神上对他的支持表示感谢。写一本书确实是牵涉到全家。特别感谢作者的孩子 Mark，Cady 和 Christine，他们放弃了一些父子相聚的时间，以便本书写成，还要感谢作者的妻子 Pat 的持续支持和鼓励。

西雅图　1980　　　　布鲁斯　A. 芬莱逊

Preface to the Chinese Edition of *Nonlinear Analysis in Chemical Engineering*
by Bruce A. Finlayson

My wife and I were pleased to visit China in September–October of 1982. We attended the first Joint Meeting of the Chemical Industry & Engineering Society of China and the American Institute of Chemical Engineers. In addition to the stimulating lectures by our Chinese hosts we enjoyedsightseeing in Beijing, ending with a dinner at the Great Hall. Following the meeting we were able to visit Guilin and Guangzhou.
We visited two Universities in China and I was especially pleased to find English versions of my books in them. This Chinese edition will be even more useful to students in China, and I am pleased that Professor Li Shaofen and his colleagues have translated it into Chinese. Mathematics is a universal language that helps us transcend national boundaries. I sincerely hope the book is as useful to students in China as it has been to students in the United States of America.

Bruce A. Finlayson
Seattle, Washington, USA
Alril 28, 1992.

目　录

第一章　绪　论

本书的目的是使读者接触当代用来求解模拟如扩散、反应、传热及流体流动等物理现象的微分方程的有效计算工具。掌握了本书的材料之后,你就能够应用多种方法—有限差分法、有限元法、配置法和摄动法等,虽然对其中任何一种方法你还不算是内行。面对一个要求解的问题,你将知道哪一种方法合适,和用哪一种方法能够容易地确定出什么样的信息。尽管用某些方法也能解析得到有效的结果,但重点仍放在应用计算机的数值方法上。作者的原则是有现成的计算机程序包就用,因为它们可使读者检查、仔细研究和求解困难问题时费力较少。虽然如此,这些计算机程序中所使用的理论和技巧仍要向读者介绍。

1–1　方程的分类

模拟物理现象的方程有不同的特性,这取决于它们如何模拟时间的发展和边界条件的影响。面对以微分方程的形式表示的模型,分析者必须判断所要求解的方程属什么类型。该特性决定了相适用的方法。

考察一含有浓度给定为 c_1、c_2 和 c_3 的三个化学组分的封闭系统(即与环境无物质交换)。这三个组分能够进行反应(比如说当系统受到一定频率的光照射时),目的是预测各物种浓度与时间的函数关系。已知反应速率为浓度的函数。该反应系统如图 1–1 所示,支配该系统的微分方程为:

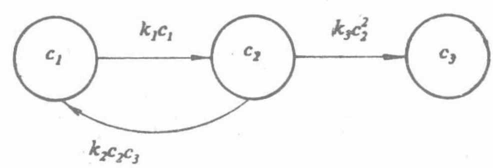

图 1–1 反应系统

$$\begin{aligned} \frac{dc_1}{dt} &= -k_1c_1 + k_2c_2c_3 \\ \frac{dc_2}{dt} &= k_1c_1 - k_2c_2c_3 - k_3c_2^2 \\ \frac{dc_3}{dt} &= k_3c_2^2 \end{aligned} \tag{1-1}$$

开始时,组分 2 和 3 的浓度为零,而组分 1 的初始浓度给定为c_0。于是需要以

$$c_1(0) = c_0 \qquad c_2(0) = c_3(0) = 0 \tag{1-2}$$

为初值条件求解(1–1)式。要注意这些条件仅应用于时间为零时,而不适用于后续时间

t。反应随时间而进行，若知道了从那儿开始，便可以将方程作不定积分。由这种性质产生的方程称为初值问题。在本情况下，(1–1)式为常微分方程，因为只有一个独立变量一—时间 t。于是(1–1)及(1–2)式属于常微分方程组初值问题。在本书中将其缩写为 ODE–IVP。

下面考虑多孔介质中的扩散与反应．现有一多相系统(带孔的固体物料，反应物及反应产物在孔中扩散)，但这里我们用一有效扩散系数将该系统模拟为简单扩散．对一块多孔介质作物料衡算得:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\left(\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}\right) + R(c) \qquad (1-3)$$

式中 R 为单位体积(固体加上孔的体积)的反应速率，$\mathbf{J}$ 为物料的通量(以单位时间单位面积—–包括固体和孔两者的面积—–的浓度为单位)，J_x 为向量 $\mathbf{J}$ 的 x 分量．应用有效扩散系数可将通量 $\mathbf{J}$ 表示成类似于费克定律的形式。

$$\mathbf{J} = -D_e \nabla c$$

或

$$J_x = -D_e\frac{\partial c}{\partial x} \qquad J_y = -D_e\frac{\partial c}{\partial y} \qquad J_z = -D_e\frac{\partial c}{\partial z} \qquad (1-4)$$

该方程假定等摩尔扩散(扩散进 1mol 反应物，扩散出 1mol 产物)，且将多孔介质的所有微观细节全部归并到扩散系数中去。显然，模拟一特定的物理情况时，扩散系数必须加以测定，或由类似的系统推定。采用这一近似，该方程变为

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(D_e\frac{\partial c}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(D_e\frac{\partial c}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(D_e\frac{\partial c}{\partial z}) + R(c) \qquad (1-5)$$

或

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot D_e \nabla c + R(c)$$

下面假定扩散发生在一多孔薄片中，其两个方向上的延伸度为无限，从而构成扩散沿片厚进行的一张大平板(见图 1–2)。假设忽略 y 和 z 方向上的浓度变化，我们可将(1–5)式简化成一维。同时假定在定态下反应与扩散，因之时间导数为零。

$$\frac{d}{dx}(D_e\frac{dc}{dx}) + R(c) = 0 \qquad (1-6)$$

把(1–5)式变为(1–6)式，亦即把一个偏微分方程(浓度至少与两个独立变量有关)变为一个常微分方程(浓度只与一个独立变量有关)。(1–6)式为二阶，线性二阶常微分方程理论表明，必须确定通解中的两个任意常数。于薄片两侧各规定一个边界条件即可做到。这里我们认为薄片的一侧是不可渗透的(不存在通量)，而在另一侧上浓度保持恒定。这些边界条件是

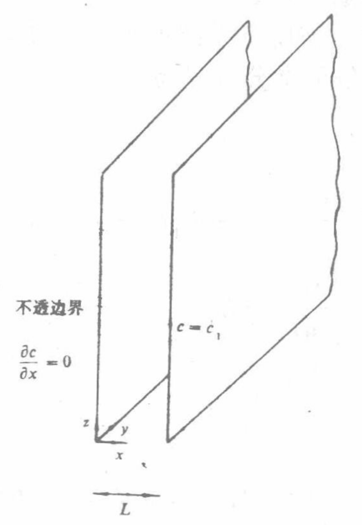

图 1–2　薄片中的扩散

$$x = 0 \qquad -D_e \frac{dc}{dx} = 0 \tag{1-7}$$

$$x = L \qquad c = c_1 \tag{1-8}$$

(1−6)至(1−8)式的问题是一个常微分方程边值问题，记为 ODE−BVP．这也可叫做两点边值问题，因为是在不同的位置 x 处表示这两个条件。如果在同一点上，比如说在 $x=0$ 处规定这两者，则该问题为初值问题．边值问题的这一本性—在区域的各端是有条件的，使求解技术变得复杂，但这是扩散、传热和流体流动问题的特征．

再回到描述三维空间中扩散与反应的(1−5)式，此时我们将该式简化为如前所述的一维空间方程，但包括瞬态现象，因之，

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_e \frac{\partial c}{\partial x}\right) + R(c) \tag{1-9}$$

这是一个偏微分方程，因为解 c 取决于两个独立变量 x 和 t。但是，它与 x 和与 t 的关系有着不同的特征。只存在单一的关于 t 的导数时，与 t 的关系是一种发展现象(evolution phenomenon)。我们需要有各个位置上浓度的初值。

$$c(x,0) = c_0(x) \tag{1-10}$$

与 x 的关系类似于边值问题，需要两个条件。类似于(1−7)及(1−8)式的条件是可行的，但现在浓度 c_1 为时间的函数，与主流浓度的改变相对应。称方程组(1−7)至(1−10)为一维抛物型偏微分方程(1−D PDE)。抛物型这个词指有一个变量在特征上是发展的这个事实。

如果在二维或三维空间求解(1−5)式，也可得到一个 t 变量是发展的而 x、y 及 z 变量则是边值型的抛物型偏微分方程。二维时有

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_e \frac{\partial c}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D_E \frac{\partial c}{\partial y}\right) + R(c) \tag{1-11}$$

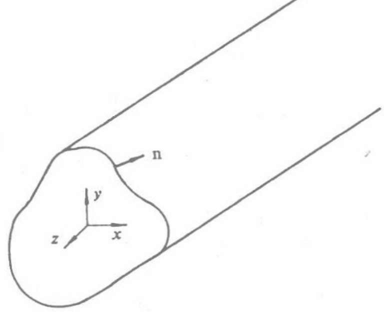

图 1−3　在长的催化剂颗粒中的扩散

如果包含两个空间维，但处于定态情况下，则该方程化为

$$\frac{\partial}{\partial x}(D_e\frac{\partial c}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}(D_e\frac{\partial c}{\partial y})+R(c)=0 \tag{1-12}$$

这个方程可模拟 z 方向非常长以致 z 变化可略去的催化剂颗粒内的扩散与反应(见图1–3)。可用的边界条件类型为狄利克雷(Dirichlet)型亦称第一类边界条件:

$$c=c_B \tag{1-13}$$

诺伊曼(Neumann)型或第二类边界条件:

$$-D_e\frac{\partial c}{\partial n}=-D_e\mathbf{n}\cdot\nabla c=f_B \tag{1-14}$$

和罗宾(Robin)型或第三类边界条件或混合条件:

$$-D_e\frac{\partial c}{\partial n}=k_m(c-c_B) \tag{1-15}$$

式中 $\mathbf{n}$ 为外法线方向，f_B 为给定的质量通量，c_B 为多孔介质外的浓度。传质系数为 k_m。类似的边界条件用于传热时，其中 D_e 以导热率 k 代替，f_B 为规定的热通量，k_m 以传热系数 h 代替，c_B 则变为外部温度。这些边界条件为:

$$T=T_B$$

$$-k\frac{\partial T}{\partial n}=f_B \tag{1-16}$$

$$-k\frac{\partial T}{\partial n}=h(T-T_B)$$

(1–12)式为椭圆型偏微分方程，独立变量为边值型。

一般扩散问题在性质上为椭圆型，若为非定态或发展问题，附加的累积项使其变为抛物型。对于下列的线性二阶方程一般式，可推引出如下分类:

$$A\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}+B\frac{\partial^2 c}{\partial x\partial y}+C\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}=0 \tag{1-17}$$

方程的类型由下列判别式判定:

$$\begin{aligned} &D=B^2-4AC \\ &D<0 \quad \text{椭圆型} \\ &D=0 \quad \text{抛物型} \\ &D>0 \quad \text{双曲型} \end{aligned} \tag{1-18}$$

例如，传热方程

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{k}{\rho C_p}\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{1-19}$$

有 $A>0$, $C=0$, $B=0$,①从而 $D=0$，所以为抛物型。定态方程

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}=0 \tag{1-20}$$

①y 与 t等同

有 $A=C=1, B=0$, 从而 D 为负。所以该方程为椭圆型, 而

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\frac{k}{\rho C_p}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right) \tag{1-21}$$

必须对各变量作检验。时间变量为抛物型, 而空间维数 x 和 y 在特征上则为椭圆型。

下面将从特定应用的角度来介绍其他的微分方程。数学问题写成无因次形最容易求解, 这里我们阐明把模型方程变换为无因次形的步骤。把(1–6)至(1–8)式用于 $R=-kc_2$ 的场合, 且 D_e 为常数。定义 $c'=c/c'$及 $x'=x/L$, 并将这些新变量引入微分方程中, 注意到 c_1 和 L 为常数, 则可将其移至导数之外。

$$\frac{D_e c_1}{L^2}\frac{d^2c'}{dx'^2}-kc_1^2(c')^2=0 \tag{1-22}$$

$$x'L=0\text{时}, \qquad -\frac{D_e c_1}{L}\frac{dc'}{dx'}=0 \tag{1-23}$$

$$x'L=L\text{时}, \qquad c_1c'=c_1 \tag{1-24}$$

将(1–22)至(1–24)式乘以 $L^2/(D_ec_1)$, 并简化方程为

$$\frac{d^2c'}{dx'^2}-\frac{kc_1L^2}{D_e}(c')^2=0 \tag{1-25}$$

$$x'=0\text{时}, \qquad \frac{dc'}{dx'}=0 \tag{1-26}$$

$$x'=1\text{时}, \qquad c'=1 \tag{1-27}$$

则(1–25)至(1–27)式即为要作数学求解的问题的无因次形。在此情况下, 参数 $\varphi^2=kc_1L^2/D_e$ 有特定的意义(反应与扩散现象之比)和名称(梯尔(Thiele)模数平方)。对该方程无因次形的深入理解将留到处理问题的合适章节中。若本身提不出特征参数(如上面的 c_1 及 L), 那么可指定一标准的 c_S 来着手。这种情况实际上更富有启发性。其本质将在 5–1 节中探讨。

本书其余部分的安排是按照问题的类型, 即 ODF–IVP、ODE–BVP、1–D PDE、2–D PDE、椭圆型及抛物型。然而在求解各类问题时, 非线性代数方程组是必须考虑的。下一章将评述为此而用的方法。

第二章　代数方程

需要求解非线性代数方程组，这里介绍两种有用的方法——逐次代换法和 Newton–Raphson 法。研究第一种方法是因为它简单，且有时非常有用；至于第二种则因为它是一个极好的方法，尽管不是极为简单。在本书的其他章节中，还研究一些较为专门的技术——见第 4–8 节矩阵的三角分解，这对于方程数目多时是重要的。

2–1　逐次代换法

研究非线性代数方程组

$$
\begin{aligned}
&F_1(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0\\
&F_2(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0\\
&\vdots\\
&F_n(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0
\end{aligned}
\tag{2-1}
$$

我们可将其写成简洁的形式：

$$F_i(x_j)=0,\qquad i,j=1,\ 2,\ \cdots,n$$

或

$$F_i(\mathbf{x})=0,\qquad i=1,\ 2,\ \cdots,\ n \tag{2-2}$$

或

$$\mathbf{F}(\mathbf{x})=0$$

我们想要求出满足方程(2–1)的一组 x_i。记号 $\mathbf{x}$ 表示一组 x_i，$\{x_i \mid i=1,n\}$。第 i 个方程加上 x_i，再列方程得：

$$x_i+F_i(\mathbf{x})=x_i \tag{2-3}$$

由(2–3)式定义迭代格式为

$$x_i^{k+1}=x_i^k+F_i(\mathbf{x}^k) \tag{2-4}$$

其中上角标 k 表示迭代次数。我们只需猜想 x^0，应用(2–4)式以求 x^1，再算之，以求 x^2 等等。该格式使用简单，应用快速。对于小问题可使用可编程序计算器。让我们把这个方法用于一个简单的例子。

求满足方程

$$F(x)=x^2-2=0 \tag{2-5}$$

的x值。表示成下式应用逐次代换法：

$$x=x^2-2+x$$

或

$$x^{k+1}=x^k(x^k+1)-2 \tag{2-6}$$

从 $x^0=1$ 开始，逐次得到 x^k 的值为 0, –2, 0, –2, 0, …。该法不收敛。如果我们试用

$x^0=1.4$, 得到逐次迭代值 1.36, 1.21, 0.67, −0.88, ···, 这个方法仍不收敛。甚至将精确答案输入手按计算器，此法还是发散。显然，对于这个例子，逐次代换法的收敛是个问题。

其后将该方程写成如下的形式

$$F(x)=\frac{1}{x}-\frac{x}{2}=0 \tag{2-7}$$

来应用逐次代换法。现按

$$x^{k+1}=\frac{1}{2}x^{k}+\frac{1}{x^{k}} \tag{2-8}$$

进行逐次代换计算，从 $x^0=1.6$ 开始，我们得到 $x^k=1.425$，1.41425，1.414213563，1.414213562，···，或者说只用四次迭代，便可得到精确答案的前 10 位数字。从 $x^0=1.2$ 开始也给出类似的结果。显然，(2−8)式比之(2−4)式是一个较好的迭代格式，并且我们希望能预先知道这点。下面证明的收敛定理将给予所需的知识。

定理 2−1 设 α 为 $\alpha_i=f_i(\alpha)$的解。假设给定 $h>0$, 存在一个数 $0<\mu<1$, 以使

$$\sum_{j=1}^{n}\left|\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right|\leqslant\mu,\qquad \text{对于}\ \left|x_i-\alpha^i\right|<h,\quad i=1,\cdots,n \tag{2-9}$$

$$x_i^k=f_i(\mathbf{x}^{k+1})$$

则当 k 增加时, x_i^k 收敛至 α_i。

证: 将 Taylor 级数及中值定理用于方程

$$x^k-\alpha_i=f_i(x^{k-1})-f_i(\alpha)$$

$$=f_i(\alpha)+\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\bigg|_{x_i=\alpha_i+\zeta_i(x_i^{k-1}-\alpha_i)}(x_j^{k-1}-\alpha_j)-f_i(\alpha) \tag{2-10}$$

对于某些 $0<\zeta_i<1$ 值, 上式严格地成立。

如果使求和式中各项为正, 其结果将大于式中若干项为负而抵销了正项时的结果, 因此,

$$\left|x_i^k-\alpha_i\right|\leqslant\sum_{j=1}^{n}\left|\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right|\left|x_j^{k-1}-\alpha_j\right| \tag{2-11}$$

最大范数的定义为

$$\|\mathbf{x}\|_\infty\equiv\max_{1<i<n}\left|x_i\right| \tag{2-12}$$

则

$$\|\mathbf{x}^k-\alpha\|_\infty\leqslant\|\sum_{j=1}^{n}\left|\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right|\left|x_j^{k-1}-\alpha_j\right|\|_\infty \tag{2-13}$$

若右边的$\left|x_j^{k-1}-\alpha_j\right|$以 $\|\mathbf{x}^{k-1}-\alpha\|_\infty$ 代替, 得

$$\|\mathbf{x}^k-\alpha\|_\infty\leqslant\|\Sigma\left|\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right|\|_\infty\|\mathbf{x}^{k-1}-\alpha\| \tag{2-14}$$

$$\leqslant \mu \| \mathbf{x}^{k-1} - \alpha \|_{\infty} \tag{2-15}$$

将此式用于 $k = 1, 2, \cdots$

$$\| \mathbf{x}^{1} - \alpha \|_{\infty} \leqslant \mu \| \mathbf{x}^{0} - \alpha \|_{\infty} < \mu h \tag{2-16}$$

$$\| \mathbf{x}^{2} - \alpha \|_{\infty} \leqslant \mu \| \mathbf{x}^{1} - \alpha \|_{\infty} < \mu^{2} h \tag{2-17}$$

合并这些结果得

$$\| x_i^k - \alpha_i \|_{\infty} \leqslant \mu^k h \qquad i = 1,2,\cdots,n \tag{2-18}$$

若 $\mu < 1$, 如所假设, 当 k 增加时, 右边将趋于零, 从而证明了定理。

关于这个定理, 我们要注意两点。第一, 它给出迭代收敛的条件, 但若不符合定理的条件, 它没有说出将发生什么。在那种情况下, 迭代可能收敛或者发散, 从而该定理不能应用。它可能是收敛的, 因为该定理的条件限制太大, 且仅是为了证明定理的需要, 而不是为保证收敛的需要。第二点是应用该定理时, 必须保证满足(2–9)式。这就限制了对 x^0 可容许的选择, 而求出 x^0 的范围可能就不是一个无关紧要的任务了。但是我们能够从这个定理学到一些有趣的事情。假设所要求解的问题是

$$x = \beta f(x) \tag{2-19}$$

式中 β 为一参数。应用逐次代换

$$x^{k+1} = \beta f(x^k) \tag{2-20}$$

需要考虑一下 $\beta df/dx$。β 大时, 明显地不符合该定理的条件, 因为 $\beta df/dx > 1$, 收敛是不保证的; 然而如果 β 小, $\beta df/dx < 1$, 则迭代格式收敛。对于要求的解, 事先知道这些以及知道 β 的范围, 是能影响迭代策略的。

现将此定理用于(2–4)式曾处理过的例子。这里

$$\frac{df}{dx} = 2x + 1 \tag{2-21}$$

而对于

$$|x - 1.414\cdots| < \varepsilon \tag{2-22}$$

需要

$$\left| \frac{df}{dx} \right| \leqslant 1 + 2(1.414 \pm \varepsilon) \tag{2-23}$$

显然, 找不到一个 $\mu < 1$, 从而此定理不能应用。我们也通过举例发现了该法发散。转换为(2–6)式时, 需要考察一下 $f(x) = x/2 + 1/x$, 且得到

$$\frac{df}{dx} = \frac{1}{2} - \frac{1}{x^2} \tag{2-24}$$

对于 $1.2 < x < 1.6$, $|f'| < 0.20$。因此, 对于 $1.2 < x < 1.6$, 此定理表明迭代向解收敛, 实际上也如此。

现在这个关于逐次代换的定理能用来将一个发散格式转变为收敛格式。我们用

$$x^{k+1} = x^k + \beta F(x^k) = f(x^k) \tag{2-25}$$

代替(2–4)式, 并使 β 充分的小, 则

$$\frac{df}{dx} = 1 + \beta 2x < 1 \tag{2-26}$$

选 $\beta = -0.25$, 且应用迭代格式

$$x^{k+1} = x^k + \beta[(x^k)^2 - 2] \tag{2-27}$$

从 $x^0 = 0$ 开始, 10 次迭代得逐次值 0.5, 0.9375, 1.22, 1.35, …, 1.41416。这个迭代格式收敛, 虽然需要多次迭代。

2-2 Newton-Raphson 法

应用 Newton-Raphson 法时, 在 x^k 迭代处将(2-1)式展开成 Taylor 级数。首先对单一方程进行:

$$F(x^{k+1}) = F(x^k) + \left.\frac{dF}{dx}\right|_{x=x^k}(x^{k+1} - x^k) + \left.\frac{d^2F}{dx^2}\right|_{x=x^k}\frac{(x^{k+1} - x^k)^2}{2!} + \cdots \tag{2-28}$$

略去二阶及高阶导数, 并令 $F(x^{k+1}) = 0$, 由于要选择 x^{k+1}, 所以这是正确的。结果经整理后给出

$$x^{k+1} = x^k - \frac{F(x^k)}{dF/dx(x^k)} \tag{2-29}$$

我们又再选定 x^0, 并逐次应用(2-29)式。这就是牛顿法。

若有数个方程, 例如(2-1)式, 可作同样处理:

$$F_i(\mathbf{x}_{k+1}) = F_i(\mathbf{x}^k) + \Sigma \left.\frac{\partial F_i}{\partial x_j}\right|_{\mathbf{x}^k}(x_j^{k+1} - x_j^k) + \cdots \tag{2-30}$$

定义 Jacobi 矩阵

$$A_{ij}^k = \left.\frac{\partial F_i}{\partial x_j}\right|_{\mathbf{x}^k} \tag{2-31}$$

并令 $F_i(\mathbf{x}^{k+1}) = 0$, 可将 Newton-Raphson 法写成另外的形式。

$$\sum_{j=1}^{n} A_{ij}^k(x_j^{k+1} - x_j^k) = -F_i(\mathbf{x}^k) \tag{2-32}$$

$$x_j^{k+1} = x_j^k - \sum_{j=1}^{n}(A_{ij}^k)^{-1}F_i(\mathbf{x}^k) \tag{2-33}$$

$$\sum_{j=1}^{n} A_{ij}^k x_j^{k+1} = \sum_{j=1}^{n} A_{ij}^k x_j^{k+1} - F_i(\mathbf{x}^k) \tag{2-34}$$

将这个方法用于一个方程组时, 必须一次又一次地求解上述方程, 不是对矩阵 A_{ij}^k 求逆, 就是将其分解。这里假定读者能够做到这些, 因为所有计算中心都有现成的矩阵求逆程序可用。习题 2-4 是一道有用的复习题, 可应用子程序 INVERT。

在某些情况下, 可以证明 Newton-Raphson 法收敛(见 Isaacson 及 Keller, p.115)。

定理 2-2 假定x^0, 使