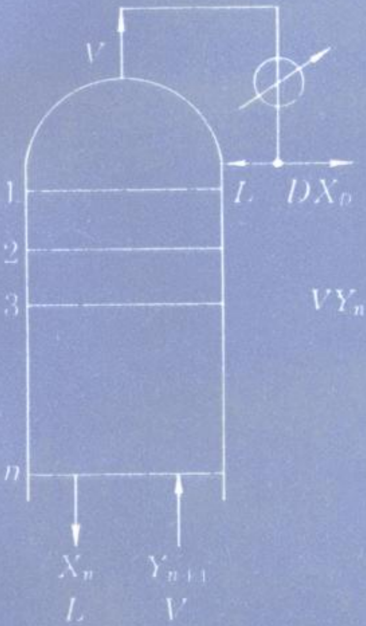
化工应用数学

胡乾定　汪绪安　编



$$VY_{n+1}=LX_n+DX_D$$

上海交通大学出版社

化工应用数学

胡乾定 汪绪安 编

上海交通大学出版社

内 容 提 要

本书是为化学化工专业高年级学生所编写的教材，内容丰富、取材适当、语言力求通俗易懂。未学过工程数学的科技人员，参考附录也便于自学。本书以化学化工中通用的数学方法为前提，着重介绍数值计算、有限差分方程及其应用、矩阵在化学化工中应用等内容。同时结合实例展开讨论，并附有大量例题与习题，对一些典型的通用算法还给出了框图或 BASIC 语言完整程序。这样可使数学、化学化工及计算机三者紧密结合。通过本书的学习可获得对实验数据的处理、数学模型的建立、电子计算机的使用等方面的系统知识。

本书可作为化学化工、冶金、食品、轻工、石油、材料等专业高年级学生教材。也可供化工专业科研人员学习参考。

(沪)新登字 205 号　　**化 工 应 用 数 学**

出版：上海交通大学出版社
(上海市华山路 1954 号·200030)　　字数：269000
发行：新华书店上海发行所　　版次：1993年3月　第1版
印刷：常熟市文化印刷厂　　印次：1993年3月　第1次
开本：850×1168(毫米) 1/32　　印数：1— 2250
印张：10.5　　科目：298—305

ISBN 7-313-01219-5/O·29　　**定　价：3.35 元**

前　言

数学是基础学科，发展较早且发展很快，特别是应用数学，它在促进近代先进科学技术发展中所起的作用尤为显著，正如有人认为的那样："没有数学分析就不会有工程学的研究和发展。"今天，如果说不掌握数学，更无法理解工程学和利用新技术。化学化工的发展也不例外，然而从过去化工专业的教学计划来看，数学基础相对说来是较薄弱的，数学在化学化工上的应用，相对其他学科领域也较落后。这一点无论是化工行业的领导干部还是科技工作者均有同感。还有一些化工专业科技人员不能熟练地用数学方法解决实际问题，有时甚至无从下手，因此，他们迫切要求提高自己数学知识水平，提高运用数学解决问题的能力，化工专业的大学生在毕业前的结业训练中也提出与此类似的问题。

鉴于上述情况，编者根据多年的教学经验，并对化工类各专业教学计划以及国内外同行各类教材的研究和历年来毕业生的调查了解、信息反馈，在本校化工系开设了化工应用数学选修课，同学们学了本课程后，普遍反映本课程学得很实惠，对如何用数学结合工程解决实际问题颇有启发。这对我们是很大的鼓舞，本书就是在数年的教学实践基础上经过反复修改而编写的。

本书共分三章。主要内容为数值方法、有限差分及其方程、矩阵在化学化工中的应用。它是以化学化工中通用的数学方法为主，尽可能结合实例展开讨论的，并有大量的例题及习题，对一些典型的通用算法都给出了框图或BASIC语言完整程序，使数学、化学化工、计算机三者结合起来，既便于阅读又可直接得到实际效果。本书内容一方面可避免像读纯数学书那样乏味，所得只是些抽象的概念而不解决工程实际的问题；另一方面还可帮助工程技术人员学会用计算机算法语言进行科学计算。

在编写过程中承中国计算数学会理事，安徽省计算数学学会副理事长兼秘书长，安徽省高等数学研究会理事长，合肥工业大学数力系主任朱功勤教授的鼓励与支持，除推荐本书出版外，还为全书作了终审校。合肥工业大学数学教研室老师也给予支持，特别还应提出的是在本书定稿之前，华东化工学院数学系徐纬成教授对本稿提出了宝贵意见。合肥工业大学教材科郑象鹊科长对本教材的出版自始至终给予很大关心与支持。编者为此表示衷心感谢，并对提供参考文献的作者亦表示由衷的谢意。

由于时间仓促及编者水平有限，其内容难免有不妥和错误之处，热烈欢迎读者批评指正。

编　者

于合肥工业大学

1992年8月

目　　录

第一章　数值方法

无论是化学工程或反应工程中提出的应用数学问题还是纯数学问题，往往都不能以有限的形式精确地求解。如今的信息社会，由于电子计算机的广泛应用，数值方法显得更加重要了。二次方程有二个解析形式的根，三次方程和四次方程尽管比较复杂，仍能以解析方法求解。对于五次以上的高次方程，求解析解就不可能了，只能用数值方法求近似解。同样，对复杂的超越方程和非线性方程，解析解也是不可能的，而用计算机通过数值技巧却可求出其近似解。

§1-1　方程的近似解法

1-1-1　概述

通常把方程 $f(x)=0$ 的解叫做方程的根，也称之为函数 $f(x)$ 的零点。若 $f(x)$ 是 n 次多项式，对应的方程为 n 次代数方程，这时方程的根也称之为多项式的根。根有实根和复根之分，我们仅研究实根的求法。可分两步来求方程的根，先找出根的某个粗糙的近似值，又称之为“初始近似值”，进一步再将初始近似值逐步加工成满足精度要求的结果。

对于初始近似值，可用试值法确定：

若 $f(x)$ 在 $(a,\ b)$ 区间内有且仅有一个实的单根 x^*，这时，可从端点 $x=a$ 出发，按预选的步长 h 一步一步地向右跨，每跨一步进行一次根的“扫描”，其目的是检查函数 $f(x_0)$ 和 $f(x_0+h)$ 的值是否同号。若 $f(x_0)\cdot f(x_0+h)\leqslant 0$ 则说明所求根 x^* 必在 x_0 与 x_0+h 之间，这时可取 x_0 或 x_0+h 作为根的初始近似值

［例 1-1-1］　讨论方程

$$f(x)=x^3-x-1=0$$

的有根区间。

解：由于 $f(0)<0$，$f(\infty)>0$，所以 $f(x)$ 至少有一个正的实根。

若从 $x=0$ 出发，取 $h=0.5$ 为步长向右进行根的扫描，察看各个结点上函数的符号变化，并分别记录于下表中：

x	0	0.5	1.0	1.5
$f(x)$ 的符号	−	−	−	+

显然，在区间(1.0, 1.5)内必有实根，这时，可取 $x_0=1.0$ 或 $x_0=1.5$ 作为根的初始近似值。

在采用上述方法时，其关键是步长的选择。显然，只要 h 足够小，用扫描方法就可以得到具有任意精度的近似根。不过 h 愈小，则扫描的步数愈多，计算工作量就愈大。所以精度要求比较高时，仅用这种逐步扫描方法求根是不切实际的。此时，可先用逐步扫描方法求出根的初始近似值 x_0 后，再设法把根精确化，或叫做“细加工”过程，如下面将要介绍的对分法，迭代法、牛顿法等，可逐步求得精确的解。

1-1-2 对分法

求方程 $f(x)=0$ 的解。若函数 $f(x)$ 在 (a, b) 上单调连续，且在区间端点的函数值 $f(a)$ 和 $f(b)$ 异号(这由扫描实现)，那么方程 $f(x)=0$ 在 (a, b) 内的唯一实数根 x^*，可以用下述方法来逐次逼近。

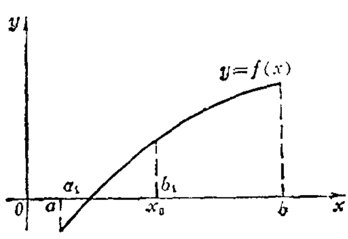


图 1-1-1

取区间 (a, b) 的中点 $x_0=\frac{1}{2}(a+b)$ 把区间 (a, b) 分为两半，然后进行根的扫描，检查 $f(x_0)$ 与 $f(a)$ 是否同号。若系同号，说明所求的根 x^* 在 x_0 的右侧，则令 $a_1=$

x_0, $b_1=b$；否则 x^* 必在 x_0 的左侧，则令 $a_1=a$，$b_1=x_0$。于是，得到新的有根区间(a_1, b_1)，其长度仅为(a, b)的一半(图 1-1-1)。

对新区间(a_1, b_1)仍可采用相同的方法，取中点 $x_1=\frac{1}{2}(a_1+b_1)$，将区间(a_1, b_1)再分为两半，再通过根的扫描判定所求的根在 x_1 的哪一侧，又可确定一个新的有根区间(a_2, b_2)，其长度为(a_1, b_1)的一半。

这样不断地对分下去，就可得到一系列的有根区间

$$(a, b),\ (a_1, b_1),\ (a_2, b_2),\ \cdots,\ (a_k, b_k),\ \cdots$$

这些区间的变化是有规律的，即每个区间都是前一个区间的一半，因此，对于任一区间(a_k, b_k)的长度：

$$b_k-a_k=\frac{1}{2^k}(b-a)$$

若将对分过程无限地继续下去，这些区间最终必收缩于一点 x^*，该点 x^* 就是所求的根。

若依次取对分后的有根区间(a_k, b_k)的中点

$$x_k=\frac{1}{2}(a_k+b_k)$$

作为所求根的近似值，则可得一个近似根的序列

$$x_0,\ x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_k,\ \cdots$$

该序列必以根 x^* 为极限。

实际计算时，是无法完成这个无限过程的，且也无必要，因为数值分析的结果允许带有一定的误差。因为绝对误差限：

$$\begin{aligned}|x^*-x_k| &\leqslant \frac{1}{2}(b_k-a_k)=b_{k+1}-a_{k+1}\\ &=\frac{1}{2^{k+1}}(b-a)\end{aligned} \tag{1-1-1}$$

因此，当有根区间(a_{k+1}, b_{k+1})的长度小于 ε 时，那么允许误差 ε 的 x_k 将能“准确”地满足方程 $f(x)=0$，即取 x_k 作为方程 $f(x)=0$ 的根(x^*)。这种求方程根的近似值的方程称为对分法。运算简单是它的优点，收敛速度与以 $\frac{1}{2}$ 为公比的等比级数相同，也不算

太慢。它的局限性在于不能求二重根、四重根等。

[例 1-1-2] 求方程

$$f(x)=x^3-x-1=0$$

在区间(1, 1.5)内的实根。并准确到小数点后的第2位。

解：用对分法。令 $a=1$, $b=1.5$, 且 $f(a)<0$, 若将区间(a, b)对分,则其中点 $x_0=1.25$, 因 $f(x_0)<0$, 故 $f(a)$ 与 $f(x_0)$同号,因此所求的根必在 x_0 的右侧。再令 $a_1=x_0=1.25$, $b_1=b=1.5$, 得到新的有根区间(a_1, b_1)(见表 1-1-1)。

再对区间(a_1, b_1)用中点 $x_1=1.375$ 对分，并进行扫描，如此可反复进行下去。

据误差估计式：

$$|x^*-x_k|\leqslant\frac{1}{2^{k+1}}(b-a)=0.005$$

可知,只要二分6次,即可达到所要的精度

$$|x^*-x_6|\leqslant 0.005$$

将对分法的计算结果列于表 1-1-1。

表 1-1-1 用对分法计算例 1-1-2 的结果

k	a_k	b_k	x_k	$f(x_k)$的符号
0	1	1.5	1.25	−
1	1.25	1.5	1.375	+
2	1.25	1.375	1.3125	−
3	1.3125	1.375	1.3438	+
4	1.3125	1.3438	1.3281	+
5	1.3125	1.3281	1.3203	−
6	1.3203	1.3281	1.3242	−

1-1-3 迭代法

已知方程 $f(x)=0$ 的一个近似根后，可用某个固定公式进行迭代,使这个近似根逐步精确化,直到精确度达到要求为止。

若把给定方程 $f(x)=0$ 改写成等价形式：

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

并在有根区间 $(a,\ b)$ 上任取一点初值 x_1，代入 $g(x)$ 得 $x_2=g(x_1)$。一般说来 $x_2 \neq x_1$，把 x_2 再代入 $g(x)$ 得 $x_3=g(x_2)$，…，故有迭代式 $x_{n+1}=g(x_n)$。依此做下去便可得到一个近似根的序列：

$$x_1,\ x_2,\ \cdots,\ x_n,\ \cdots$$

该迭代序列 $\{x_n\}$ 是否一定收敛，是否收敛于 $x=g(x)$ 的根？这可由迭代过程的几何解释得知：求 $x=g(x)$ 的根，可归结为找直线 $y=x$ 与曲线 $y=g(x)$ 的交点 A 的横坐标 x^*（见图 1-1-2）。设初次近似 x_1 是曲线 $y=g(x)$ 上点 A_1 的横坐标，$g(x_1)$ 就是点 A_1 的纵坐标。

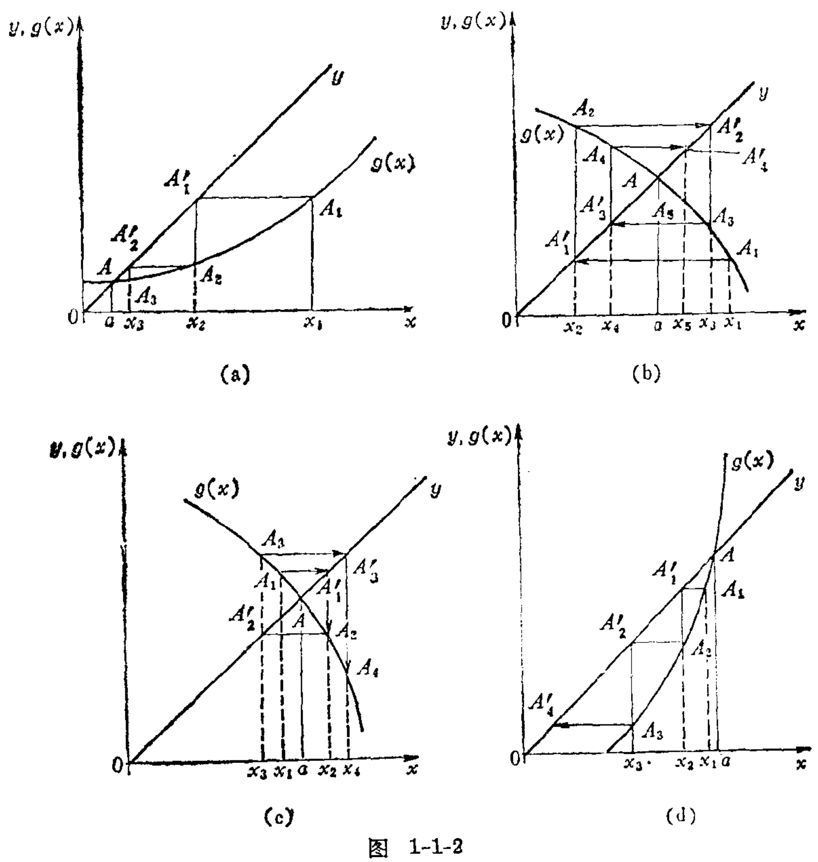


图 1-1-2

而水平直线 $y=g(x_1)$ 与直线 $y=x$ 相交于点 A_1'，其横坐标等于 $x_2=g(x_1)$。由 $g(x_2)$ 可得到曲线 $y=g(x)$ 上的点 $A_2(x_2,\ g(x_2))$，如此继续下去，可得点列 $A_1,\ A_2,\ A_3,\ \cdots$。从图(1-1-2)可见，点列 $A_1,\ A_2,\ A_3,\ \cdots$ 可能逐步逼近于 A，也可能不逼近于 A，说明迭代过程可能收敛，如图(1-1-2 a, b)。也可能发散，如图(1-1-2 c, d)所示。

[例 1-1-3]　已知方程 $10^x-x-2=0$，试用迭代法求解？

解：将原方程改写为

$$x=10^x-2$$

并令初值 $x_1=1$。用迭代法求解，则得

$$x_2=8,\ x_3=10^8-2,\ \cdots$$

显然，当 n 增大时，x_n 随之增大而不趋于任何极限，故无解。

若将原方程 $x=10^x-2$ 写成 $x=\lg(x+2)$ 并作迭代：

$$x_{n+1}=\lg(x_n+2)$$

则迭代过程收敛。仅经过 3 次迭代就能得到 $x=0.38$。

上例说明，只有在一定的条件下迭代过程才能收敛。可证明：若函数 $g(x)$ 对于一切 x 满足 $|g'(x)|\leqslant q<1$，则上述迭代序列 $\{x_n\}$ 收敛，且其极限就是方程 $x=g(x)$ 的根。

要证明序列 $\{x_n\}$ 有极限，只需证明级数

$$x_1+(x_2-x_1)+(x_3-x_2)+\cdots+(x_{n+1}-x_n)+\cdots \quad (1\text{-}1\text{-}3)$$

收敛。为此，由微分中值定理得：

$$|x_3-x_2|=|g(x_2)-g(x_1)|=|g'(\xi_1)|\,|x_2-x_1|\leqslant q|x_2-x_1|$$

(ξ_1 为 x_1 与 x_2 之间的某一点)

$$|x_4-x_3|=|g(x_3)-g(x_2)|=|g'(\xi_1)|\,|x_3-x_2|\leqslant q^2|x_2-x_1|$$

(ξ_2 为 x_2 与 x_3 之间的某一点)

$$\vdots$$

$$|x_{n+1}-x_n|\leqslant q^{n-1}|x_2-x_1|$$

$$\vdots$$

上列各式右端相加，可得一个以 $q<1$ 为公比的等比级数，无疑此

级数收敛。由此说明(1-1-3)也收敛，即 $\lim\limits_{n\to\infty} x_n = x^*$ 存在。由于 $g(x)$ 连续，所以，从式 $x_{n+1} = g(x_n)$ 两式取极限可得：

$$x^* = g(x^*)$$

即 x^* 为方程 $x = g(x)$ 的根。

对于第 n 次近似值 x_n 的误差可用类似上面的方法求得：

$$|x^* - x_n| \leqslant q^{n-1} |x^* - x_1|$$

而且每一次近似值都比前一次要准确些。

对迭代次数应如何控制，这可使用上述收敛条件式：

$$|x_{n+1} - x_n| \leqslant q |x_n - x_{n-1}|$$

进行递推，例如，对于任意的正整数 r 有

$$|x_{n+r} - x_{n+r-1}| \leqslant q^r |x_n - x_{n-1}|$$

那么，对于任意正整数 r，则有

$$\begin{aligned} |x_{n+r} - x_n| &\leqslant |x_{n+r} - x_{n+r-1}| + |x_{n+r-1} - x_{n+r-2}| \\ &\quad + \cdots + |x_{n+1} - x_n| \\ &\leqslant (q^r + q^{r-1} + \cdots + q) |x_n - x_{n-1}| \\ &\leqslant \frac{q(1-q^r)}{1-q} |x_n - x_{n-1}| \end{aligned}$$

若令 $r \to \infty$，则由上式可得：

$$|x^* - x_n| \leqslant \frac{q}{1-q} |x_n - x_{n-1}|$$

以上说明，只要先后两次迭代值的偏差 $|x_n - x_{n-1}|$ 充分地小，就可以保证迭代误差 $|x^* - x_n|$ 足够小，故常采用下式

$$|x_n - x_{n-1}| < \varepsilon \tag{1-1-3}$$

作为迭代过程结束的控制条件。

[例 1-1-4] 用迭代法求方程 $x = e^{-x}$ 在 $x = 0.5$ 附近的一个根，并要求精度达 $\varepsilon = 10^{-3}$。

解：过 $x = 0.5$ 取步长 $h = 0.1$ 进行扫描，便可发现，所求的根在区间 (0.5, 0.6) 内。且在根的附近，$|(e^{-x})'| \doteq 0.6$，此值小于 1，故迭代格式 $x_{k+1} = e^{-x_k}$ 收敛。

将其迭代的结果列表于 1-1-2，其中最后一个值 x_{10} 能满足

表 1-1-2　例 1-1-4 的迭代结果

k	x_k	$x_k - x_{k-1}$	k	x_k	$x_k - x_{k-1}$
0	0.5		6	0.56486	−0.00631
1	0.60653	0.10653	7	0.56844	0.00358
2	0.54524	−0.06129	8	0.56641	−0.00203
3	0.57970	0.03446	9	0.56756	0.00115
4	0.56006	−0.01964	10	0.56691	−0.00065
5	0.57117	0.01111			

精度要求。

迭代法的优点是：只要在有根区间$[a, b]$内无论用哪一点x_1作为第一次近似值都可得到相同的结果，若在计算过程中有错误，也不影响其结果的正确性。一般情况下，其计算程序也比较简单。迭代法的程序框图，如图 1-1-3 所示。在此说明，今后的框图中，一律使用两种形状的框，一种是矩形框▭，称为叙述框或运算框；一种是菱形框◇，称为条件框或检查框，它有两个出口，由框内条件满足与否来决定选择哪个出口。此外，框图中用箭头"→"表示各框执行的顺序。在图 1-1-3 中，x_m为控制发散常数，ε为给定的允许误差。

1-1-4　迭代过程的加速

在迭代过程收敛的情况下，只要迭代足够多次，就可达到任意精度的结果，但是有时因迭代过程收敛缓慢，计算量变得很大，这就引起人们重视对迭代过程如何加速的研究。

当深入研究迭代的误差，就有可能得到更有效的算法。

若用$\bar{x}_{k+1}$表示近似值x_k经过一次迭代得到的结果，即

$$\bar{x}_{k+1} = g(x_k)$$

据微分中值定理可得：

$$x^* - \bar{x}_{k+1} = g'(\xi)(x^* - x_k) \tag{1-1-4}$$

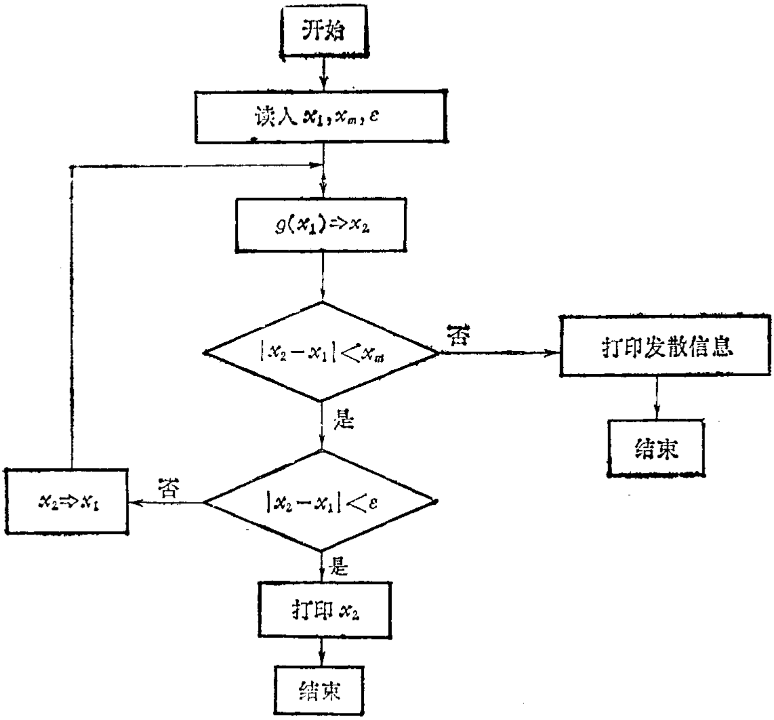


图 1-1-3

式中 ξ 是 x^* 和 x_k 之间的某个点。

若 $g'(x)$ 在求根区间内改变不大，据收敛条件近似取某个定值 q，且 $q<1$。这时式(1-1-4)给出近似公式：

$$x^* - \bar{x}_{k+1} \doteq q(x^* - x_k)$$

解此式得：

$$x^* = \frac{1}{1-q}\bar{x}_{k+1} - \frac{q}{1-q}x_k$$

进一步整理该式可得：

$$x^* - \bar{x}_{k+1} = \frac{q}{1-q}(\bar{x}_{k+1} - x_k)$$

该式说明，迭代值 $\bar{x}_{k+1}$ 的误差可由迭代初值 x_k 和迭代终值 $\bar{x}_{k+1}$ 大致地估计出来。若用该误差值 $\frac{q}{1-q}(\bar{x}_{k+1} - x_k)$ 作为计算结果