

冶金实用数学

[日]

鞭

巖 佐田 榮三 森山 昭 高津 学 合著
費云亮 译
冶金工业出版社

86.1031
931.1

冶金实用数学

[日] 靛 巖 佐田 栄三 合著
森 山 昭 高津 学
费云亮 译 蔡志鹏 校

zk438/03

冶金工业出版社

内 容 提 要

本书根据日本“科学技术社”1974年出版的《冶金实用数学》一书翻译的。

书中主要介绍了冶金工艺过程分析中常用的或重要的数学方法的原理及其应用,实测数据的处理;贝塞尔函数,拉普拉斯变换,格林函数,代数方程的数值解法,微分方程数值解法和最优化数学方法。附有大量冶金分析计算实例。本书对从事冶金生产、科研人员、数理统计人员及高等院校有关专业师生进一步掌握冶金工艺过程分析中的应用数学方法是有所帮助的。

本书可供冶金专业研究人员、技术人员和教学人员参考。

冶 金 实 用 数 学

[日] 鞭 巖 佐田荣三 合著
森山 昭 高津 学
费云亮 译 蔡志鹏 校

★

冶金工业出版社出版

(北京灯市口74号)

新华书店北京发行所发行

冶金工业出版社印刷厂印刷

★

850×1168 1/32 印张 5 3/4 字数 147 千字

1983年2月第一版 1983年2月第一次印刷

印数00,001~4,000册

统一书号: 15062·3910 定价0.75元

译 者 序

运用数学原理和方法分析冶金过程中各参数的关系，具有重要的理论意义和实际意义。本书在大学基础数学水平上，介绍了冶金过程分析中常用的数学原理和方法，侧重于这些原理的应用方法，例题较多，结合实际，可供冶金专业的研究人员、技术人员和高等院校师生作为应用数学的参考书，也可供其他有关人员参考。

本书在翻译过程中，承东北工学院宋麟范老师的热情关怀，审阅了最初译的部分译稿，并提出了宝贵意见。全部译稿，承中国科学院化工冶金研究所蔡志鹏工程师细致审校，在此，致以衷心谢意！

因译者水平所限，书中难免存在不妥和错误，切望读者批评指正。

译 者

1980年9月

37016

序 言

有句听惯了的话，就是“数学作为一种工具希望像锯和刨那样，运用自如”。与数学原理的讲解相比，本书重点放在原理的应用方法上，尽量给出与冶炼有关的各种例题，通俗地讲解数学实用化的方法。

最近，在钢铁冶炼领域里，旨在培养具有过程分析素养的“过程工程技术人员”的培养工作已开始进展起来。在冶炼过程中存在的有关多变量的复杂过程，要在理论上分析过程中各变量之间关系，需要过程数学表达和数学分析方法的许多知识和经验。但可以认为，即使在面临复杂过程时，如果已充分理解关于简单过程的数学处理，就可能找到适当的过程分析方法。

本书各章选择了在冶炼过程的解析方面过去常用的且在今后的将是重要的数学方法也有意识地收集了与冶炼过程有关的例题，故确信本书作为大学冶金系和大学研究生院的学生，或金属冶炼现场技术人员和研究人员用的实用数学指导书或数学讲义，是合适的。另外，本书作为冶炼领域的数学用书，是最早出版的独一无二的专著，即使是非冶炼领域的技术人员，以及那些感到需要数学并自认为数学水平较差的人，也可读得爽快而深切体察数学，本书可能成为有用的实用数学入门书。

在本书出版之际，仅向理解本书意图而愉快地写稿的各位合著者表示谢意。同时，愿本书颇有助于实现“要把数学变成工具”的读者的迫切愿望。

作者代表 鞆 巖

1974年11月

目 录

第一章 实测数据的处理方法	1
1.1 最小二乘法	1
1.2 多项式近似法	5
1.3 高斯 (Gauss) 数值积分法	9
参考文献	15
第二章 贝塞尔函数	16
2.1 贝塞尔方程及其解	16
2.2 贝塞尔函数的性质	19
2.3 贝塞尔函数的微积分	22
2.4 贝塞尔方程的判别法	24
2.5 贝塞尔函数的应用	26
参考文献	35
第三章 拉普拉斯变换	36
3.1 拉普拉斯变换的定义	36
3.2 拉普拉斯变换的基本性质及其应用	38
3.3 留数定理	41
3.4 拉普拉斯变换的应用	43
参考文献	56
第四章 格林函数	57
4.1 格林函数	57
4.2 格林函数的求法和例题	60
4.3 在热传导(扩散)方程中的应用	66
参考文献	71
第五章 代数方程的数值解法	72
5.1 预先给出根的第一近似值的情况	73
5.1.1 迭代法	73
5.1.2 试位法	76

5.1.3	牛顿-拉夫森 (Newton-Raphson) 法	78
5.1.4	里奇蒙 (Richmond) 法	82
5.1.5	贝尔斯托 (Bairstow) 法	82
5.2	求根的较好近似值的方法	88
5.2.1	伯努利 (Bernoulli) 法	88
5.2.2	格雷夫 (Graeffe) 法	91
5.2.3	其他方法	94
第六章	微分方程的数值解法	95
6.1	常微分方程的数值解法	95
6.1.1	皮卡德 (Picard) 法	95
6.1.2	用泰勒 (Taylor) 展开的数值积分	97
6.1.3	欧拉 (Euler) 法	98
6.1.4	改进的欧拉 (Modified Euler) 法	99
6.1.5	朗格-库塔 (Runge-Kutta) 法	102
6.1.6	朗格-库塔-吉尔 (Runge-Kutta-Gill) 法	104
6.1.7	亚当斯 (Adams) 法	105
6.1.8	米尔纳 (Milne) 法	108
6.1.9	哈明 (Hamming) 法	109
6.2	偏微分方程(抛物型)的数值解法	110
6.2.1	显式法	110
6.2.2	隐式法	115
第七章	最优化的数学方法	118
7.1	微分法	119
7.2	拉格朗日 (Lagrange) 待定乘数法	122
7.3	探索法	124
7.3.1	一维探索法	124
7.3.2	多维探索法	130
7.4	线性规划法 (LP)	132
7.5	变分法	137
7.5.1	固定变分函数边界的情况	137

7.5.2 变分函数边界在一定的轨道上移动的情况	140
7.5.3 带约束条件的变分问题	141
7.6 动态规划法(DP)	143
7.7 最大原理(MP)	149
参考文献	154

附 录

A 误差函数	155
B 伽马函数	159
C 积分图解法(仿形积分法)	161
D 矩阵	165
D.1 矩阵的定义	165
D.2 矩阵的运算	167
D.3 方程组和矩阵	168
E 差分	168
F 相关	170
参考文献	173

第一章 实测数据的处理方法

当对实验结果进行数值解析时，需要把实测值或实验曲线表示成数学式。这里，介绍当给出一系列实测数据时，作为求最精确经验公式的一个很有力的数学手段最小二乘法，和通过简单运算，用三次或四次式表示任意形式的连续曲线的简便的多项式近似法和远比图解积分法巧妙迅速、准确的高斯（Gauss）数值积分法，而这个方法对求有限区间连续曲线的积分值与平均值是一种敏捷的计算方法。

1.1 最小二乘法

对于表达由因次解析得到的函数关系式，当根据实验决定未知系数或幂指数时，常采用只使2个变量（无因次项）变化，其余变量保持一定，但实际上用这种方法有时实验变得很困难，还需要相当的时间和人力。可是，如果应用最小二乘法，就无需保持变量一定，可用相当简单的计算方法获得偏差很小的结果。

首先，当想使 $f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ 形式近似于变量 x 和 y 之间的未知函数关系 $y = f(x)$ 时，对于一组观测值 (x_i, y_i) 可写出如下一个方程（称为观测方程）

$$y_i = a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 \quad (1-1)$$

而当方程的数目（观测值的组数）比未知数的数量（这里为 a_0, a_1, a_2 ）还多时，用高斯考虑的最小二乘法，能求最优近似[●]的未知系数 a_0, a_1, a_2 。

设观测值 y_i 和近似函数 $f(x_i)$ 之间的误差为 s_i ，则可用

● 这种近似，当然不是指对精确解的近似（因为这是个矛盾方程组——线性方程组的方程式的个数，多于未知数的个数，找不到能同时满足各方程的解，不存在精确解），而是指导求各未知数的一组取值，使方程组中各式近似地相等。——译者注

$$s_i = y_i - (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2) \quad (1-2)$$

表示。对于所得到的所有组（设为 n 组）的实测数据，如果以 S 表示误差 s_i 的平方和，由式1-2可写出

$$S = \sum_{i=1}^n \{y_i - (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2)\}^2 \quad (1-3)$$

若把这个 S 值达到最小时的未知系数看成是最优近似系数，当用各系数对式1-3求偏微分时，使 $\partial S / \partial a_0$, $\partial S / \partial a_1$, $\partial S / \partial a_2$ 都为0， S 为最小。即

$$\begin{aligned} \partial S / \partial a_0 &= 2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2) (-1) \\ &= -2(\sum y_i - \sum a_0 - a_1 \sum x_i - a_2 \sum x_i^2) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (1-4)$$

这里，为简单计，用符号 $[]$ 代替 Σ 来表示，则由式 1-4 可得

$$[1]a_0 + [x]a_1 + [x^2]a_2 = [y] \quad (1-5)$$

$$\text{而 } [x] = \sum_{i=1}^n x_i, [1] = n$$

同样，由 $\partial S / \partial a_1 = 0$ 可得式 1-6，由 $\partial S / \partial a_2 = 0$ 可得式 1-7：

$$[x]a_0 + [x^2]a_1 + [x^3]a_2 = [xy] \quad (1-6)$$

$$[x^2]a_0 + [x^3]a_1 + [x^4]a_2 = [x^2y] \quad (1-7)$$

式1-5~1-7称作正规方程^①。

由式1-5~1-7求出 a_0 , a_1 , a_2 即可。

例题[1.1] 获得某种气体的温度和定压比热 C_p 间的 6 组实验数据，如表1-1所示。

根据这些数据，用最小二乘法求 $C_p = a_0 + a_1 t + a_2 t^2$ 形式的经验公式。

① 如果矛盾方程组的各未知数的一组取值，使误差（近似解代入方程组只能使各方程式两端近似相等，各方程式两端之差称为误差）的平方和达到最小，则称这组值是矛盾方程组的最优近似解。显然，正规方程组的解，是其对应的矛盾方程组的最优近似解。——译者注

表 1-1 比热的温度变化

$t, ^\circ\text{C}$	0	100	200	300	400	500
$C_p, \text{卡/克}\cdot^\circ\text{C}$	0.07	0.12	0.16	0.19	0.21	0.22

〔解〕 通过计算可得 $[1]=6, [x]=1.5\times 10^3, [y]=0.97, [x^2]=5.5\times 10^5, [x^3]=2.25\times 10^8, [x^4]=9.79\times 10^{10}, [xy]=295, [x^2y]=11.33\times 10^4$ 。因而, 正规方程为

$$6a_0 + 1.5\times 10^3a_1 + 5.5\times 10^5a_2 = 0.97$$

$$1.5\times 10^3a_0 + 5.5\times 10^5a_1 + 2.25\times 10^8a_2 = 295$$

$$5.5\times 10^5a_0 + 2.25\times 10^8a_1 + 9.79\times 10^{10}a_2 = 11.33\times 10^4$$

由这三个方程求 a_0, a_1, a_2 , 则

$$a_0 = 0.070, a_1 = 5.50\times 10^{-4}, a_2 = -0.50\times 10^{-6}$$

$$\therefore C_p = 0.070 + 5.50\times 10^{-4}t - 0.50\times 10^{-6}t^2$$

✓ 通过因次分析, 就能在无因次项(X_1, X_2, X_3, Y)之间得到下述关系:

$$Y = b(X_1)^{b_1}(X_2)^{b_2}(X_3)^{b_3} \quad (1-8)$$

式1-8两边取对数, 则有

$$\log Y = \log b + b_1 \log X_1 + b_2 \log X_2 + b_3 \log X_3 \quad (1-9)$$

这里, 设 $\log Y \equiv y, \log b \equiv b_0, \log X_i \equiv x_i$, 则式1-9可表示成式1-10。

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 \quad (1-10)$$

式1-10的正规方程为

$$[1]b_0 + [x_1]b_1 + [x_2]b_2 + [x_3]b_3 = [y]$$

$$[x_1]b_0 + [x_1^2]b_1 + [x_1x_2]b_2 + [x_1x_3]b_3 = [x_1y]$$

$$[x_2]b_0 + [x_1x_2]b_1 + [x_2^2]b_2 + [x_2x_3]b_3 = [x_2y]$$

$$[x_3]b_0 + [x_1x_3]b_1 + [x_2x_3]b_2 + [x_3^2]b_3 = [x_3y]$$

解这个方程组, 可求得 b_0, b_1, b_2, b_3 , 结果由式1-8能求得可靠的经验公式。(参看文献[1])

例题[1.2] 得到了如表 1-2 中给出的 6 组实验数据, 试在双

对数坐标纸上用这些数据画出曲线，就如图 1-1 那样，大致成直线关系。因此，决定用 $y = bx^n$ 形式表示经验公式，求可靠的 b 和 n 值。

表 1-2 x 和 y 的关系

x	2.20	3.00	3.85	7.40	20.0	47.0
y	0.012	0.013	0.010	0.0055	0.0035	0.0016

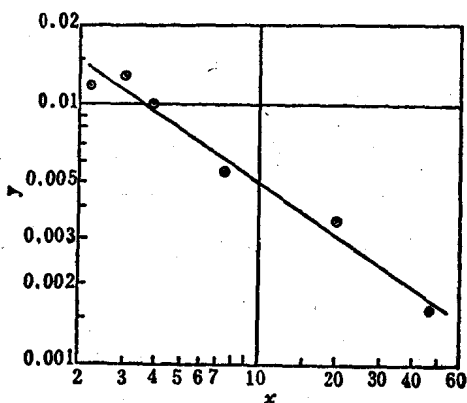


图 1-1 x 和 y 的关系

〔解〕 把 $y = bx^n$ 的两边取对数，则有

$$\log y = \log b + n \log x$$

因此，正规方程为

$$[1] \log b + [\log x] n = [\log y]$$

$$[\log x] \log b + [(\log x)^2] n = [\log x \log y]$$

在此方程组中， $[1] = 6$ ， $[\log x] = 5.247$ ， $[(\log x)^2] = 5.932$ ， $[\log y] = -13.318$ ， $[\log x \log y] = -12.563$

$$\therefore n = -0.681, \log b = -1.623 \quad \therefore b = 0.0238$$

$$\therefore y = 0.0238x^{-0.681}.$$

例題〔1-3〕 取得了一系列实验数据，如表 1-3 所示。试在单

对数坐标纸上用这些数据画曲线，就像图 1-2 那样，推测可能得到的直线。因此，试用最小二乘法建立 $x = me^{ny}$ 形的经验公式。

表 1-3 x 和 y 的关系

x	3	6	10	30	60	300
y	11.8	12.9	14.2	16.8	19.3	23.2

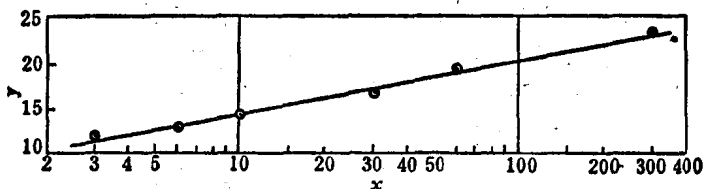


图 1-2 x 和 y 的关系

【解】 对 $x = me^{ny}$ 的两边取对数，则

$$y = (1/n) \ln x - (1/n) \ln m$$

$$= (2.303/n) \log x + C, \quad C \equiv -(2.303/n) \log m$$

正规方程为：

$$[1]C + [\log x](2.303/n) = [y]$$

$$[\log x]C + [(\log x)^2](2.303/n) = [y \log x]$$

在这里， $[\log x] = 7.988$ ， $[(\log x)^2] = 13.31$ ， $[y \log x] = 146.5$ 。

所以，如果解正规方程，则有 $1/n = 2.55$ ， $C = 8.53$ 。

$\therefore n = 0.392$ ， $m = 0.0352$ ，可得下式：

$$x = 0.0352e^{0.392y}$$

1.2 多项式近似法

根据过程变量的变化实测结果，通过电子计算机计算某些信息的这类场合，需要预先把变化过程表示成数学式。

对图 1-3 所示的曲线 $y = f(x)$ ，在 (x_0, x_1) 区间，欲用三次多项式来近似 y ，则

$$y = a + bx + cx^2 + dx^3 \quad (1-11)$$

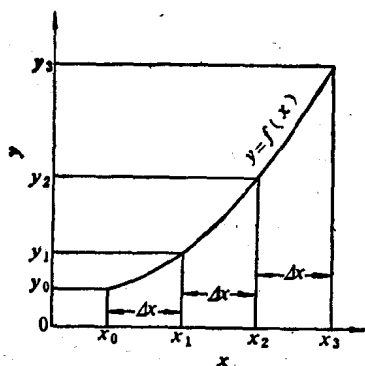


图 1-3 多项式近似法

把区间三等分，设 $\Delta x = (x_3 - x_0)/3$ ，并规定 $x_1 = x_0 + \Delta x$ ， $x_2 = x_1 + \Delta x$ 。接着由曲线 $y = f(x)$ 读取对应于各 x_i ($i=0, 1, 2, 3$) 的 y_i 值，把数值代入式1-12右边的 Δx 、 x_0 、和 $A \sim D$ 各系数中，经整理就可像式1-11那样用数学式表示曲线。(参看文献[2])

$$y = A + B\left(\frac{x - x_0}{\Delta x}\right) + C\left(\frac{x - x_0}{\Delta x}\right)^2 + D\left(\frac{x - x_0}{\Delta x}\right)^3 \quad (1-12)$$

而 $A \sim D$ 各系数可由下面各式求得。

$$D = (y_3 - 3y_2 + 3y_1 - y_0)/6$$

$$C = (4y_2 - 5y_1 + 2y_0 - y_3)/2$$

$$B = y_1 - y_0 - D - C$$

$$A = y_0$$

下面先概括介绍这个计算方法的根据。例如用

$$y_x = A + Bx + Cx^2 + Dx^3 \quad (1-13)$$

来近似曲线 $y = f(x)$ 时，等于说只要确定出 $A \sim D$ 4 个未知系数即可，现试设 $x=0, 1, 2, 3$ ，则 $y_0 = A$ ， $y_1 = A + B + C + D$ ， $y_2 = A + 2B + 4C + 8D$ ， $y_3 = A + 3B + 9C + 27D$ 。解这个方程组

则可得式1-12中的各个系数。这里，将式1-12表示成

$$y_i = A + B\left(\frac{x_i - x_0}{\Delta x}\right) + C\left(\frac{x_i - x_0}{\Delta x}\right)^2 + D\left(\frac{x_i - x_0}{\Delta x}\right)^3 \quad (1-14)$$

设 $i=0, 1, 2, 3$ 所得的结果，与式1-13中设 $x=0, 1, 2, 3$ 所得的结果一致。

例题[1.4] 随 LD 转炉吹炼时间 θ 延长而熔池温度 T 的变化，我们得到如图1-4的实测结果，在 $\theta=0\sim 18$ 分钟范围内，用下

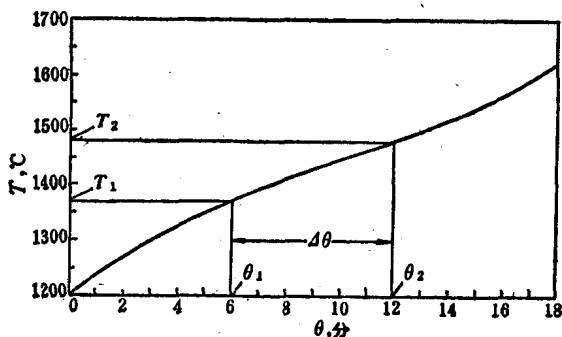


图 1-4 熔池温度的变化

式表示这条曲线。

$$T = a + b\theta + c\theta^2 + d\theta^3$$

〔解〕 据题意， $\theta_0=0$ ， $\theta_3=18$ ， $\therefore \Delta\theta=18/3=6$ ，

$\therefore \theta_1=\theta_0+\Delta\theta=6$ ， $\theta_2=\theta_1+\Delta\theta=12$ 由图1-4 可知， $T_0=1200$ ， $T_1=1370$ ， $T_2=1480$ ， $T_3=1620$ 。所以，

$$D = \{(1620) - 3(1480) + 3(1370) - (1200)\} / 6 = 15$$

$$C = \{4(1480) - 5(1370) + 2(1200) - (1620)\} / 2 = -75$$

$$B = (1370) - (1200) - (15) + (75) = 230$$

$$A = T_0 = 1200$$

所以，由式1-12

$$T = 1200 + 230(\theta/6) - 75(\theta/6)^2 + 15(\theta/6)^3$$

$$\therefore T = 1200 + 38.3\theta - 2.08\theta^2 + 0.069\theta^3$$

这个例题，曲线形式是单调的，若用三次方程，精确度更高。但在曲线形状变化复杂时，需要进一步提高多项式的次数。

对某曲线，在 (x_0, x_4) 区间，欲用四次多项式近似 y ，如式1-15那样，这时，

$$y = a + bx + cx^2 + dx^3 + ex^4 \quad (1-15)$$

把 (x_0, x_4) 区间四等分，设 $\Delta x = (x_4 - x_0)/4$ ，规定 $x_1 = x_0 + \Delta x$ ， $x_2 = x_1 + \Delta x$ ， $x_3 = x_2 + \Delta x$ 。接着，从曲线读取对应于各 x_i ($i = 0, 1, 2, 3, 4$)的 y_i 值，代入式1-16右边的 Δx ， x_0 ，以及 $A \sim E$ 各系数中，整理即可。

$$y = A + B\left(\frac{x - x_0}{\Delta x}\right) + C\left(\frac{x - x_0}{\Delta x}\right)^2 + D\left(\frac{x - x_0}{\Delta x}\right)^3 + E\left(\frac{x - x_0}{\Delta x}\right)^4 \quad (1-16)$$

而 $A \sim E$ 各系数可由下式计算：

$$E = (y_4 - 4y_3 + 6y_2 - 4y_1 + y_0)/24$$

$$D = (y_3 - 3y_2 + 3y_1 - y_0)/6 - 6E$$

$$C = (6y_2 - 9y_1 + 4y_0 - y_3)/6 - 2D - E$$

$$B = y_1 - y_0 - C - D - E$$

$$A = y_0$$

例题[1.5] 据文献[3]介绍，实测伴随LD转炉吹炼过程的钢液中Mn含量的变化，其结果如图1-5所示。试用四次多项式表示16分钟吹炼时间内的这条曲线。

〔解〕 设吹炼时间为 θ ，Mn含量为 y 。 $\theta_0 = 0$ ， $\theta_4 = 16$ ， $\therefore \Delta\theta = 4$ 。所以， $\theta_1 = 4$ ， $\theta_2 = 8$ ， $\theta_3 = 12$ ，由曲线可得 $y_0 = 1.50$ ， $y_1 = 0.57$ ， $y_2 = 0.45$ ， $y_3 = 0.30$ ， $y_4 = 0.40$ 。求各系数，

则 $A = 1.50$

$$E = \{(0.40) - 4(0.30) + 6(0.45) - 4(0.57) + (1.50)\} / 24 = 0.0467$$

$$D = \{(0.30) - 3(0.45) + 3(0.57) - (1.50)\} / 6 - 6(0.0467) = -0.420$$

$$C = \{6(0.45) - 9(0.57) + 4(1.50) - (0.30)\} / 6 \\ + 2(0.420) - (0.467) = 1.338$$

$$B = (0.57) - (1.50) - (1.338) + (0.420) - (0.0467) \\ = -1.895$$

$$\therefore y = 1.50 - 1.895(\theta/4) + 1.338(\theta/4)^2 - 0.420(\theta/4)^3 \\ + 0.0467(\theta/4)^4$$

$$\therefore y = 1.50 - 0.474\theta + 0.0836\theta^2 - 0.00656\theta^3 \\ + 0.000182\theta^4$$

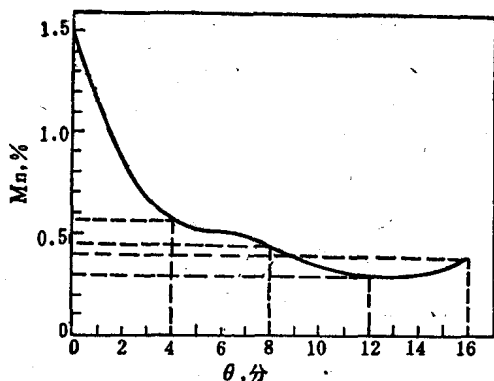


图 1-5 锰浓度的变化

1.3 高斯(Gauss)数值积分法

过去常用的图解积分法, 计算相当麻烦, 也易产生因个人计算误差而导致错误, 因此, 用高斯数值积分法代替图解积分法是聪明合理的。文献[4]也介绍过应用高斯数值积分法, 根据 3 次实测值求日平均气温的例子。

当变量 x 在 (a, b) 区间变化时, 通过

$$x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}u \quad (1-17)$$

之一次变换, 把 $a \leq x \leq b$ 这一变化域移至 $-1 \leq u \leq 1$ 这一变化域。