

张吉瑞 编著

化工数值方法

中国石化出版社

化工数值方法

张吉瑞 编著

中国石化出版社

(京)新登字 048 号

内 容 提 要

全书共分九章,着重介绍化学、化工中常用的数值方法,包括求解数学模型时常用的代数方程及方程组、常微分方程及方程组、偏微分方程及方程组的数值解法,处理实验数据时常用的插值法和曲线拟合法以及数值微分和积分等。

本书内容精练,学以致用,从典型实例入手,逐步深入,便于自学。书中配有大量实用性的计算机程序和应用实例。本书适合化学、化工类专业本科生、研究生、教师及工程技术人员阅读。

图书在版编目(CIP)数据

化工数值方法/张吉瑞编著. —北京:中国石化出版社
1995.12
ISBN 7-80043-602-0

I. 化… I. 张… II. 化工计算-计算方法 N. TQ015

中国版本图书馆 CIP 数据核字(95)第 15434 号

化 工 数 值 方 法

张吉瑞 编著

*

中国石化出版社出版发行

(北京朝阳区太阳宫路甲 1 号 邮政编码:100029)

北京服装学院排版

中国纺织出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所经销

*

787×1092 毫米 16 开本 11 1/8 印张 284 千字 印 1—2000

1995 年 9 月 北京第 1 版 1995 年 9 月北京第一次印刷

ISBN 7-80043-602-0/TQ·372 定价:11.00 元

目 录

第一章 绪 论	1	第六章 插值法	90
§ 1 化工数值方法的意义	1	§ 1 引言	90
§ 2 误差知识	2	§ 2 拉格朗日插值多项式	91
§ 3 泰勒级数	5	§ 3 分段低次插值	96
第二章 非线性方程的数值解法	7	§ 4 三次样条插值	98
§ 1 引言	7	§ 5 利用三次样条插值函数 求导数	104
§ 2 初值估计	8	第七章 数值积分	106
§ 3 简单迭代法	10	§ 1 引言	106
§ 4 牛顿法	12	§ 2 牛顿-柯特斯公式	107
§ 5 牛顿下山法	15	§ 3 牛顿-柯特斯公式的精度	109
§ 6 弦位法	16	§ 4 复化求积公式	110
§ 7 埃特金法	19	§ 5 加速求积公式	114
§ 8 迭代法的收敛阶	20	§ 6 高斯型求积公式	119
§ 9 高次代数方程的解法	21	第八章 常微分方程的数值解法	125
第三章 解线性方程组的直接法	26	§ 1 引言	125
§ 1 引言	26	§ 2 解初值问题的尤拉法	126
§ 2 高斯消去法	28	§ 3 解初值问题的龙格-库塔法	130
§ 3 追赶法	31	§ 4 解初值问题的阿达姆斯法	134
§ 4 主元素消去法	33	§ 5 常微分方程组初值问题的 数值解法	139
§ 5 高斯-约旦消去法	36	§ 6 高阶常微分方程初值问题的 数值解法	144
§ 6 LU 分解法	39	§ 7 解边值问题的打靶法	145
§ 7 LDL ^T 分解法	42	§ 8 解边值问题的差分法	146
第四章 解方程组的迭代法	45	§ 9 解边值问题的正交配置法	148
§ 1 引言	45	第九章 偏微分方程的数值解法	156
§ 2 解线性方程组的迭代法	48	§ 1 引言	156
§ 3 迭代法的收敛条件	52	§ 2 抛物型方程的差分解法	157
§ 4 解线性方程组的 逐次超松弛法	55	§ 3 椭圆型方程的差分解法	166
§ 5 解非线性方程组的迭代法	57	§ 4 双曲型方程的差分解法	168
§ 6 解非线性方程组的 牛顿-拉夫森法	62	§ 5 解偏微分方程的 正交配置法	169
第五章 曲线拟合的最小二乘法	65	参考文献	173
§ 1 引言	65		
§ 2 直线拟合法	66		
§ 3 多项式拟合法	73		
§ 4 线性最小二乘法	77		
§ 5 非线性最小二乘法	82		
§ 6 显著性检验	87		

第一章 绪 论

§ 1 化工数值方法的意义

在现代科学研究和工程计算中,电子计算机是不可缺少的有力工具,计算机常用数值方法已成为现代科学研究人员和工程技术人员必不可少的基础知识。计算机的出现为数值方法的发展奠定了坚实的物质基础,但只有掌握了数值方法,才能合理地选择、使用或编写计算机程序,从而达到利用计算机解决实际工程计算问题的目的。

现代化学及化工发展的一个重要标志是模型化。首先根据过程中化学或物理实际现象及真实过程的物理概念,经过适宜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优化等方面越来越显示出强有力的作用。

建立数学模型是化学科学及化工技术各分支学科的任务,而求解数学模型则是数学各分支的内容。高等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局限的,从而不得不求助数值方法提供各类数学问题的数值解。数值解虽然是近似而离散的,但可用于处理极其广泛的工程数学上的多种问题。

值得指出的是,现代化学及化工提出了相当多的复杂数学模型及数学问题,涉及到许多非线性的代数或微分方程,这些方程常常是大量耦合的。对于这类复杂的数学模型,经典的数学解析法是无能为力的,而必须借助数值方法应用计算机求解。因此,数值方法在化学及化工领域内占有极其重要的地位,是现代化工技术发展的促进因素。

随着数值方法的发展和工程问题的需要,目前已涌现出大量的计算机软件,而且子程序库的存量正在逐年迅速增加,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。但是对于缺乏数值方法知识和应用能力的人而言,绝不可能有效地应用这些子程序解决实际计算问题。因为在使用任何精密而完善的子程序去解决具体工程问题时,很可能遇到种种困难和问题。这些难题可能由如下某些原因所引起:(1)数学模型是否准确地反映了实际化学和物理现象和过程;(2)选用的数值方法是否恰当,方法的误差是否超过工程问题允许的误差;(3)选用子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。这些问题搞不清楚,常常会导致计算失败。实际上,在使用任何子程序时,都需要用户根据实际问题编写某些程序予以补充和修改。至于在众多的子程序中选择适合于解决具体工程问题的最优子程序,则需要更为坚实的数值方法基础。可见,工程技术人员必须掌握数值方法。本书就是为使化学及化工领域的工程技术人员掌握数值方法的基本知识而编写的。其内容主要涉及到代数方程、常微分方程及其方程组的几种重要的数值解法,数据处理中所遇到的重要数值方法,以及数值微分和积分。例举了许多实际工程实例分析,力图达到学以致用目的。

对于工程技术人员来说,学习数值方法的目的在于掌握各种数值计算技巧,合理利用计算机解决实际工程的计算问题。因此,学习的重点应放在各种算法的原理及应用上,而对某些数学问题及其证明仅作一般性了解即可。学习数值方法的关键不仅在于能从原理上理解各种算

法,而更重要的在于能合理选择和应用这些算法去解题。衡量自己对某个算法是否真正掌握,要看能否应用这种算法编写适用的计算机程序,并针对实际问题在计算机上做出正确结果。也就是说,学习数值方法不仅要在理论上学懂,而且要在计算机上实践。

§ 2 误差知识

数值方法求得的是数学模型的近似解,因此必须知道其准确程度。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。为此有必要简要地介绍一些误差基本知识。

1. 误差来源 在工程问题的计算中,误差来源主要有四类,即模型误差,观测误差,截断误差和舍入误差。

(1)模型误差: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。这种处理一方面为了使具体问题抽象化,使模型具有普适性;另一方面为了使模型简化,便于进行数学处理。这就造成了模型与实际问题间的误差。这种误差称作模型误差。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,伴有化学反应的吸收塔模型等等都作过种种理想化处理,模型与实际物理化学过程有一定差别。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:任何数学模型中都包含有一些实验测定的参数,而任何精密仪器都只能测得这些参数的近似值,所以在模型参数中存在有实际测定值与真实值之间的误差,这类误差称作观测误差。观测误差也不是数值方法的某种算法造成的,而是模型参数带入的,其大小与实验仪器的精密程度、实验测定次数及参数测定或估计方法有关。

模型误差和观测误差虽然与算法无关,不可能用改善算法的办法来降低这些误差,但工程问题的计算者必须了解这些误差的大小以及它们在计算过程中的传递,以便对最终计算结果进行合理分析。

(3)截断误差:在工程问题计算中,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,在数值方法中常常采用收敛无穷级数的前 n 项代替无穷级数,也就是抛弃了无穷级数的后几项,由此引起的误差称作截断误差。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:在具体工程问题的计算中,往往涉及到无穷小数或位数很多的数,但计算机的位数则是有限的。因此,在计算机的运算过程中必然会发生用有限小数代替无穷小数,或用有限位的数代替位数很多的数。例如,用 3.14159 代替 π ,用 1.41421 代替 $\sqrt{2}$,用 2.03259 代替 $\ln x/\lg x$ 等等。由于计算机位数有限的缘故所引起的误差称作舍入误差。这类误差与计算机有关,也与实际计算时所采用的数学表达式有关。若采用合理的数学表达式及双精度运算可使这类误差减小。但双精度运算较费机时,仅在必要时才采用。

在任何工程问题的计算中,从模型建立到应用计算机获得最终结果的整个过程中,可能会引入种种误差。计算者必须对这些误差作出判断和估计,否则所得结果将是毫无意义的。

2. 误差表示 在数值计算或测量中,常用的表示误差的方法有:绝对误差,相对误差,平均误差,标准误差等等。

(1)绝对误差:若用 x^* 表示准确值 x 的某个近似值,则近似值 x^* 的绝对误差为

$$e^* = x - x^* \quad (1.1)$$

在通常情况下,准确值 x 是不知道的,故常常不可能算出绝对误差 e^* 的真实值,而只能根据实际情况估计其绝对值的范围,也就是估计 $|e^*|$ 的上限,即

$$|e^*| = |x - x^*| \leq \epsilon^* \quad (1.2)$$

ϵ^* 称作近似值 x^* 的绝对误差限。一般可以写作 $x = x^* \pm \epsilon^*$ 。这样, ϵ^* 反映了近似值 x^* 的可信赖程度。

在实际问题中, e^* 虽然难以知道,但 ϵ^* 却常常易于确定。例如,应用具有毫米刻度的米尺测量长度,其测量值的绝对误差限应为 $\epsilon^* = 0.5\text{mm}$

(2) 相对误差: 近似值 x^* 的相对误差为

$$e_r^* = e^*/x^* = (x - x^*)/(x^*) \quad (1.3)$$

相对误差不仅可以表示近似值 x^* 的误差大小,而且可以完善地表示其准确程度,要比绝对误差的概念更为完善。例如,有 $x = 10 \pm 1$ 与 $y = 1000 \pm 5$ 两个数,试问 10 和 1000 那个近似值更能准确地反映其对应的真实值。若用绝对误差表示,那么近似数 $y^* = 1000$ 的误差 $e_y^* = 5$,而近似数 $x^* = 10$ 的误差仅为 $e_x^* = 1$,似乎 x^* 准确些。其实不然,若考虑到近似数本身的大小, e_y^* 仅为 y^* 的 5%,而 e_x^* 则为 x^* 的 100%。显然, y^* 比 x^* 更准确些,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程度。

与绝对误差一样,由于 x 不知道,常常不能确定相对误差 e_r^* 的准确值,而只能估计其绝对值的范围,即上限

$$|e_r^*| = |(x - x^*)/x^*| \leq \epsilon_r^* \quad (1.4)$$

ϵ_r^* 称作 x^* 的相对误差限。

(3) 平均误差: 对于一个物理量来说,其真正值常常是测不到的。故在实验科学中,常常将无限多次测量所得的平均值定义为真值

$$x = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \right) \quad (1.5)$$

但是,任何实际测量都是有限次的,故在工程计算中又常将有限次测量所得平均值定义为最佳值,以此来代替真值。最常用的平均值有算术平均值、均方根平均值、加权平均值、几何平均值、中位值等等。可以证明,当测量是随机的,其误差分布属于正态分布时,算术平均值为最佳。 n 次测量的算术平均值为

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad (1.6)$$

每个测量值 $x_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 与平均值 $\bar{x}$ 的绝对误差(也称作与平均值的偏差)为

$$d_i = \bar{x} - x_i, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

n 次测量的平均误差为

$$\delta = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\bar{x} - x_i) \quad (1.7)$$

由于 d_i 中可能有正或负,在 δ 的计算中这些正负偏差可以相互抵消,因而 δ 不能正确反映各次测量值 $x_i (i = 1, 2, 3, \dots, n)$ 的彼此相符程度。例如,在一组测量中各 x_i 彼此相近,而另一组测量中各 x_i 彼此差异较大,但其偏差有大中小三种,这两组测量的平均误差有可能相同。

(4) 标准误差: 标准误差的定义为

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n d_i^2}, \quad n \text{ 为无限大} \quad (1.8a)$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n d_i^2}, \quad n \text{ 为有限数} \quad (1.8b)$$

标准误差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,客观地反映了误差的实际大小。这种误差也称作均方根误差。

3. 有效数字 当准确值 x 具有多位数时,在计算中常常按四舍五入的原则取其前几位作近似值 x^* 。例如, $x = \pi = 3.1415926\cdots$, 若取 3 位, $x_3^* = 3.14$; 若取 5 位, 则 $x_5^* = 3.1416$ 。近似数 x_3^* 和 x_5^* 的绝对误差限均不超过其末位数字的半个单位, 即

$$\epsilon_3^* = |\pi - 3.14| \leq 0.5 \times 10^{-2}, \quad \epsilon_5^* = |\pi - 3.1416| \leq 0.5 \times 10^{-4}$$

若近似数 x^* 的绝对误差限是某位数字的半个单位, 那么该位至 x^* 的第一位非零数共有几位, 则说该近似数 x^* 具有几位有效数字。例如, 取 $x^* = 3.14$ 作 π 的近似数时, 则 x^* 有 3 位有效数字; 若取 $x^* = 3.1416$ 作 π 的近似数时, 则 x^* 便有 5 位有效数字; 同理, 若取 $x^* = 0.082$ 作气体常数 R 的近似数时, 则 x^* 具有 2 位有效数字等等。具有 n 位有效数字的近似数 x^* 可表示为

$$x^* = \pm (x_1 \times 10^{-1} + x_2 \times 10^{-2} + \cdots + x_n \times 10^{-n}) \times 10^m \quad (1.9)$$

其中, x_1 为 1, 2, $\cdots$, 9 九个数字之一; $x_2, x_3, \cdots, x_n$ 为 0, 1, 2, $\cdots$, 9 十个数字之一; n 为正整数; m 为正数。这时, x^* 的绝对误差为

$$|e^*| = |x - x^*| \leq 0.5 \times 10^{m-n} \quad (1.10)$$

$$\text{相对误差为} \quad |e_r^*| = |(x - x^*)/x^*| \leq \frac{1}{2x_1} \times 10^{-(n-1)} \quad (1.11)$$

显然, 在 m 相同的情况下, 绝对误差 $|e^*|$ 随着有效数字 n 的增大而减小。例如, 取 $x^* = 3.14$ 作 π 的近似值, 其 $n = 3, m = 1, |e_3^*| \leq 0.5 \times 10^{(1-3)} = 0.005$; 若取 $x_5^* = 3.1416$ 作 π 的近似值, 其 $n = 5, m = 1, |e_5^*| \leq 0.5 \times 10^{(1-5)} = 0.00005$ 。可见, 由于 x_5^* 比 x_3^* 的有效数字增加了 2 位, 其误差便相应地减小了 2 位。

此外, 由相对误差可以看出, 近似数的相对误差 $|e_r^*|$ 与 m 无关, 而只随着有效数字的增大而减小。例如, 取 $x_1^* = 9.80\text{m/s}^2$ 表示重力加速度 g 的近似值, 其绝对误差 $|e_1^*| \leq 0.5 \times 10^{(1-3)} = 0.005$, 而相对误差 $|e_{r1}^*| \leq \frac{1}{2 \times 9} \cdot 10^{-(3-1)} = \frac{1}{18} \times 10^{-2} < 0.00056$; 若取 $x_2^* = 0.00980\text{km/s}^2$ 表示重力加速度 g 的近似值, 则其绝对误差 $|e_2^*| \leq 0.5 \times 10^{-2-3} = 0.000005$, 相对误差 $|e_{r2}^*| \leq \frac{1}{2 \times 9} \times 10^{-(3-1)} = \frac{1}{18} \times 10^{-2} < 0.00056$, 与前者相同。近似数 x_1^* 与 x_2^* 的 m 虽不同, 但因其 n 相同, 故两者的相对误差便相同。

在应用有效数字表示近似数时, 要严格区分类似于 0.0023 与 0.002300 两个数字的表示法。前者的有效数字为 2 位, 其绝对误差不超过 0.5×10^{-4} ; 而后者的有效数字为 4 位, 其绝对误差不超过 0.5×10^{-6} 。说明两者的准确度是不相同的。

4. 误差的传递 在计算过程中, 有误差的量要把它的误差传递给计算结果, 在设计算法时常常需要采取必要的措施, 减少或控制这种传递。

(1) 误差在和、差计算中的传递: 设 x, y 的近似值为 x^*, y^* , 它们的绝对误差为 $e_x^* = x - x^*, e_y^* = y - y^*$ 。只需考虑和的情况, 设 $z = x + y$, 则

$$e_z^* = (x + y) - (x^* + y^*) = (x - x^*) + (y - y^*) = e_x^* + e_y^*$$

$$\text{得} \quad |e_z^*| \leq |e_x^*| + |e_y^*| \quad (1.12)$$

此式表明,和、差的绝对误差限不超过各项绝对误差限之和。对于相对误差,有

$$e_{zr}^* = \frac{(x+y) - (x^* + y^*)}{x^* + y^*} = \frac{x - x^*}{x^*} \cdot \frac{x^*}{x^* + y^*} + \frac{y - y^*}{y^*} \cdot \frac{y^*}{x^* + y^*}$$

当 x^* 与 y^* 同号时, $|x^*/(x^* + y^*)| \leq 1$, $|y^*/(x^* + y^*)| \leq 1$

从而 $|e_{zr}^*| \leq |e_{xr}^*| + |e_{yr}^*|$ (1.13)

此式表明,和、差的相对误差限不超过各项相对误差限之和。当 $x^* + y^* \approx 0$ 时,可能有

$$|e_{zr}^*| \gg |e_{xr}^*| + |e_{yr}^*| \quad (1.14)$$

$x^* + y^* \approx 0$ 表示绝对值相近而符号相反的两个数相加,或绝对值相近且符号相同的两个数相减。在这种情况下,相对误差可能很大,严重地损失有效数字。因此在计算中要避免绝对值接近的异号数相加,或绝对值相近的同号数相减。

(2)误差在积、商计算中的传递: 设 x, y 均为正数,它们的近似值 x^*, y^* 的绝对误差为

$$dx^* = x - x^*, \quad dy^* = y - y^*$$

相对误差为 $(x - x^*)/x^* = dx^*/x^* = d\ln x^*$, $(y - y^*)/y^* = dy^*/y^* = d\ln y^*$ 那么

乘积的绝对误差为 $d(x^*y^*) = x^*dy^* + y^*dx^*$ (1.15)

相对误差为 $d\ln(x^*y^*) = d(\ln x^* + \ln y^*) = dx^*/x^* + dy^*/y^*$ (1.16)

而商的绝对误差为 $d(x^*/y^*) = (y^*dx^* - x^*dy^*)/y^{*2}$ (1.17)

相对误差为 $d\ln(x^*/y^*) = d(\ln x^* - \ln y^*) = dx^*/x^* - dy^*/y^*$ (1.18)

可以看出,积、商的相对误差限不超过各项相对误差之和。但用绝对值很大的数乘或用绝对值很小的数除,则会使绝对误差变得很大,严重影响精度。在计算中应设法避免这种情形。

上述计算误差的方法是按误差最大情况估计的,因而结果偏大。本节的目的仅在于指出应注意防止误差在计算过程中的严重扩大。关于具体的误差估计,将在以后各章随同各种算法一并介绍。

§3 泰勒级数

在微积分中知道,如果函数 $f(x)$ 在 x_0 的某个邻域内有直到 $n+1$ 阶的导数,则在这个邻域内

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2 + \cdots + \frac{1}{n!}f^{(n)}(x_0)(x - x_0)^n + R_n(x) \quad (1.19)$$

其中 $R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}$ (1.20)

这里 ξ 是 x_0 与 x 之间的某个值。式(1.19)称作函数 $f(x)$ 在 x_0 处的泰勒公式, $R_n(x)$ 是余项。

当 $\lim_{n \rightarrow \infty} R_n(x) = 0$ 时,函数 $f(x)$ 可表示成幂级数的形式

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2 + \cdots + \frac{1}{n!}f^{(n)}(x_0)(x - x_0)^n \quad (1.21)$$

称式(1.21)为函数 $f(x)$ 在 x_0 处的泰勒级数。

如果在给定的区间内, $f^{(n+1)}(x)$ 有界,即 $|f^{(n+1)}(x)| \leq M$, 则

$$|R_n(x)| \leq \frac{M}{(n+1)!} |(x - x_0)^{n+1}| = O(h^{n+1}) \quad (1.22)$$

这里 $h = x - x_0$ 。

今后经常要用式(1.19)或式(1.21)中的前 n 项逼近函数 $f(x)$ 。例如,只取第一项,有

$$f(x) \approx f(x_0)$$

即用常数 $f(x_0)$ 逼近函数 $f(x)$;取前两项,则

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

即用直线(线性函数)逼近函数 $f(x)$;取前三项,便有

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2$$

即用抛物线(二次函数)逼近函数 $f(x)$ 。它们的截断误差分别是 $O(h), O(h^2), O(h^3)$ 。

对于二元函数 $f(x, y)$, 令 $h = x - x_0, k = y - y_0$, 在 (x_0, y_0) 处的泰勒公式为

$$\begin{aligned} f(x_0 + h, y_0 + k) &= f(x_0, y_0) + (h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})f(x_0, y_0) + \frac{1}{2!}(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})^2 f(x_0, y_0) \\ &+ \cdots + \frac{1}{n!}(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})^n f(x_0, y_0) + R_n \end{aligned} \quad (1.23)$$

$$\text{其中 } R_n = \frac{1}{(n+1)!} (h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})^{n+1} f(x_0 + \theta h, y_0 + \theta k), \quad 0 < \theta < 1 \quad (1.24)$$

这里

$$\begin{aligned} (h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})f(x_0, y_0) &= h \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial x} + k \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial y} \\ (h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y})^2 f(x_0, y_0) &= h^2 \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x^2} + 2hk \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x \partial y} + k^2 \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial y^2} \end{aligned}$$

余类推。

假设 $f(x, y)$ 的各 $n+1$ 阶偏导数的绝对值在给定区域内都不超过 M , 则有下列误差估计式:

$$\begin{aligned} |R_n| &\leq \frac{M}{(n+1)!} (|h| + |k|)^{n+1} = \frac{M}{(n+1)!} \rho^{n+1} (|\cos \alpha| + |\sin \alpha|)^{n+1} \\ &\leq \frac{(\sqrt{2})^{n+1}}{(n+1)!} M \rho^{n+1} = O(\rho^{n+1}) \end{aligned} \quad (1.25)$$

其中, $\rho = \sqrt{h^2 + k^2}$ 是点 $(x_0 + h, y_0 + k)$ 到 (x_0, y_0) 的距离。

当 x 与 y 相关, 即有函数关系 $y(x)$, 且有 $dy/dx = f(x, y)$ 时, 则函数 $y(x)$ 在 x_0 处的泰勒展开式为

$$\begin{aligned} y(x) &= y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{1}{2}h^2 y''(x_0) + \frac{1}{6}h^3 y'''(x_0) + O(h^4) \\ &= y(x_0) + hf + \frac{1}{2}h^2 f' + \frac{1}{6}h^3 y'''(x_0) + O(h^4) \\ &= y(x_0) + hf + \frac{1}{2}h^2 (\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f) + \frac{1}{6}h^3 (\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} f)' + O(h^4) \\ &= y(x_0) + hf + \frac{1}{2}h^2 (f_x + f f_y) + \frac{1}{6}h^3 (f_{xx} + 2f f_{xy} + f^2 f_{yy} + f_x f_y + f f_y^2) + O(h^4) \end{aligned} \quad (1.26)$$

这里

$$\begin{aligned} f &= f(x_0, y_0), & f_x &= \partial f(x_0, y_0) / \partial x \\ f_{xx} &= \partial^2 f(x_0, y_0) / \partial x^2, & f_{xy} &= \partial^2 f(x_0, y_0) / \partial x \partial y \\ f_y &= \partial f(x_0, y_0) / \partial y, & f_{yy} &= \partial^2 f(x_0, y_0) / \partial y^2 \end{aligned}$$

第二章 非线性方程的数值解法

§1 引言

求解非线性方程 $f(x) = 0$ 是工程技术上经常遇到的重要数学问题。在绝大多数情况下,由于函数 $f(x)$ 的复杂性,往往得不到解 x^* 的解析表达式,只能求得满足精度要求的近似数值解。

当函数 $f(x)$ 可以多项式表示时, $f(x) = 0$ 称为代数方程,否则称为超越方程。在许多实际问题中,函数 $f(x)$ 表示为一系列的递推公式,这种情况下,方程 $f(x) = 0$ 就显得更为复杂。

例 2-1 求算给定温度 T 和压力 P 下实际纯气体的压缩因子 $Z = PV/RT$ 。

表示实际纯气体 P - V - T 关系的状态方程有一百多个,在此应用 R-K 方程,其压缩因子的表达式为

$$f(Z) = Z^3 - Z^2 + BP\left(\frac{A}{B} - BP - 1\right)Z - \frac{A}{B}(BP)^2 = 0 \quad (2.1)$$

其中常数 $A = a/R^2T^{2.5}$ 和 $B = b/RT$ 均取决于气体的性质。式(2.1)是关于 Z 的三次方程。三次方程有求根公式。式(2.1)可用解析法或数值法求解。

例 2-2 求算给定压力 P 和液相组成 $x_i (i = 1, 2, \dots, m)$ 下理想溶液的泡点 T 。

按照相律,当汽液两相达平衡时,给定压力和液相组成所对应的平衡温度 T 和汽相组成 $y_i (i = 1, 2, \dots, m)$ 便唯一被确定了。平衡汽相组成为

$$y_i = \frac{p_i^0 x_i}{p} = \frac{x_i}{p} \exp[A_i - B_i/(C_i + T)], \quad i = 1, 2, \dots, m$$

其中, p_i^0 为第 i 个组分的饱和蒸气压; A_i 、 B_i 和 C_i 为第 i 个组分的 Antoine 常数。由于 $\sum_{i=1}^m y_i = 1$ 故有

$$f(T) = \sum_{i=1}^m \frac{x_i}{P} \exp[A_i - B_i/(C_i + T)] - 1 = 0 \quad (2.2)$$

因 $f(T)$ 中含有 T 的指数函数,故式(2.2)为超越方程,需用数值法求解。

例 2-3 设计 CSTR 反应器。

CSTR 反应器是由若干个搅拌槽构成的反应器系统,物料连续流动。假定该反应器用于液相反应,并已知关键组分的消耗速率 $(-r_A) = kC_A^a$, $\text{kmol}/(\text{h} \cdot \text{m}^3)$; 反应物流量 V , m^3/h ; 进料摩尔浓度 C_{A0} , kmol/m^3 。对任意的第 i 个反应槽作关键组分 A 的衡算有

$$VC_{A_{i-1}} - VC_{A_i} - k_i C_{A_i}^a V_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

其中, V_i 为第 i 个槽的反应体积, m^3 ; N 为反应槽的总数。若以空间时间 $\tau_i = V_i/V$ 表示 A 的衡算式,则有

$$C_{A_i}^a + \frac{1}{k_i \tau_i} C_{A_i} - \frac{C_{A_{i-1}}}{k_i \tau_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2.3)$$

该式为 CSTR 反应器的设计方程,它是由 N 个方程构成的代数方程组。利用该方程组可计算如下两类问题:

第一,已知反应槽总数 N 求算关键组分 A 的浓度分布 $C_{A_i} (i = 1, 2, \dots, N)$, 即求算每个

反应槽的进出口浓度。当 α 为 1 或 2 时,可解析求解,否则用数值法求解。

第二,规定最后一个反应槽出口处 A 的残留浓度 C_{AN}^* , 求算所需的反应槽总数 N 。为此列出计算方程

$$f(N) = C_{AN}^* - C_{AN} = 0 \quad (2.4)$$

其中 C_{AN} 通过设计方程(2.3)递推求算,即

$$\begin{aligned} C_{A1}^0 + C_{A1}/k_1\tau_1 - C_{A0}/k_1\tau_1 &= 0 \\ C_{Ai}^0 + C_{Ai}/k_i\tau_i - C_{Ai-1}/k_i\tau_i &= 0, \quad i = 2, 3, \dots, N \end{aligned}$$

方程(2.4)需用数值法求解。

这三个实例表明,许多化工计算可归结为求解非线性方程 $f(x) = 0$ 的问题。在求解这类数学问题时规定,若 x^* 使 $f(x^*) = 0$, 则称 x^* 为方程 $f(x) = 0$ 的根或解,或称 x^* 为函数 $f(x)$ 的零点;若 $f(x)$ 可分解为

$$f(x) = (x - x^*)^m g(x) \quad (2.5)$$

其中, $0 < |g(x^*)| < \infty$, m 为正整数,则称 x^* 为方程 $f(x) = 0$ 的 m 重根或函数 $f(x)$ 的 m 重零点。当 $m = 1$ 时,称 x^* 为方程 $f(x) = 0$ 的单根。 x^* 可为实数或复数。本章讨论求超越方程实根及代数方程实根和复根的数值法。

求解方程 $f(x) = 0$ 的数值法的基本思想是从某个初始近似值 x_0 出发,按照某种数值过程模式进行重复,从而逐次改进前次的结果,直到达到规定的精度,便停止这种重复,并将最后所得结果 x_n 作为方程 $f(x) = 0$ 的数值解。显然数值解是满足了精度要求的近似解。根据这种基本思想,数值法解方程必须做三件事:首先在函数 $f(x)$ 的定义域内寻找初值 x_0 ;其次建立逐次逼近的数值过程模式;第三则是规定最终近似解的精度。关于解的精度取决于工程计算的实际要求而与算法无关。各种算法的实质是由数值过程的模式确定的,不同的模式具有不同的计算效果和速度。初值 x_0 则影响计算过程的速度甚至成败。因此下面几节将分别讨论初值的估计以及几种适用的数值过程模式。

§ 2 初值估计

求方程 $f(x) = 0$ 在区间内的根。当方程 $f(x) = 0$ 在 $[a, b]$ 内有多个根时,必须进行根的隔离,寻找单根区间 $[a_i, b_i]$ ($i = 1, 2, \dots, N$)。单调连续函数 $f(x)$ 在区间 $[a_i, b_i]$ 内有根存在的特征是 $f(a_i) \cdot f(b_i) \leq 0$, 并称 $[a_i, b_i]$ 为方程 $f(x) = 0$ 的有根区间。在某个区间 $[a_i, b_i]$ 内有 m 个重根时,需对算法作某种处理后再求解,否则将会降低算法的收敛阶。常用的初值估计或根隔离的方法有三种。

1. 物理法 数学方程 $f(x) = 0$ 来源于实际工程或科学计算问题,因此可根据工程或科学问题中的物理概念确定初值 x_0 。例如,在计算实际气体的压缩因子时,可将理想气体的压缩因子作为初值,即 $Z_0 = PV/RT = 1$;再如,计算理想溶液的泡点时,可将轻、重组分的沸点 T_1 和 T_m 作为有根区间端点的值。按照 Antoine 方程

$$\begin{aligned} T_1 &= B_1/(A_1 - \ln P) - C_1 \\ T_m &= B_m/(A_m - \ln P) - C_m \end{aligned}$$

由于泡点方程 $f(T) = 0$ 在区间 $[T_1, T_m]$ 内单调而连续,则必有 $T_0 \in [T_1, T_m]$ 。

物理法估计初值简便而确切,并具有明确的物理概念。但在实际应用上有一定的局限性。例如式(2.1)具有 3 个根,其中最大者 $Z_{\max}$ 为气体压缩因子;最小者 $Z_{\min}$ 为液体压缩因子;中等者 Z_{mid} 无意义。给定初值 $Z_0 = PV/RT = 1$ 只能求得 $Z_{\max}$,而求不出 $Z_{\min}$ 。因此,物理法不能解决所有初值的估计问题。有许多问题的初值估计尚须借助数学法。

2. 数学法 数学上实现根隔离的手段有两种,其一是画图法,其二是列表法。

所谓画图法就是在定义域 $[a, b]$ 内画出函数 $f(x)$ 对 x 的略图,由图估计方程 $f(x) = 0$ 的根的大致位置。例如,求方程 $f(x) = (x/2)^2 - \sin x = 0$ 的正根的略图估计值。由于要求的是正根,故应在区间 $[0, \infty)$ 内画图。由图 2.1 可见,根 x^* 可能存在于区间 $[\pi/2, 2]$ 内,可取 $x_0 = 1.9$ 。

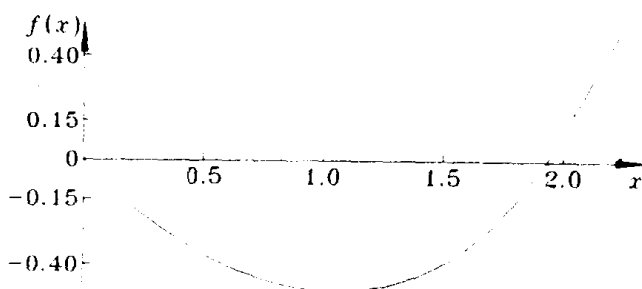


图 2.1 $f(x) = (x/2)^2 - \sin x$ 的函数略图

列表法以下述定理为依据:

定理 2.1 若函数 $f(x)$ 为多项式或可以区间 $[a, b]$ 上任一点为中心展成泰勒级数,且 $f(a) \neq 0, f(b) \neq 0$ 。令 V_x 表示序列 $f(x), f'(x), f''(x), \dots, f^{(n)}(x)$ 的符号改变次数,则方程 $f(x) = 0$ 在区间 $[a, b]$ 内实根个数 N 可由下式计算:

$$N = V_a - V_b - M \quad (2.6)$$

其中 M 为正偶数或零。当有 m 重根时,要当做 m 个根看待。

利用这一定理可将给定区间 $[a, b]$ 分为若干个小区间 $[a_i, b_i] (i = 1, 2, \dots, n)$,将这些小区间端值 a_i 和 b_i 代入函数及各阶导数表达式,观察它们的符号变化次数 V_x ,从而便可求得每个小区间内根的个数。若某个小区间内仍有多个根,则应将其再分割,直至每个小区间内最多只有一个根为止。例如,确定方程 $f(x) = x^3 + 2x^2 - x - 1 = 0$ 在区间 $(-\infty, 1]$ 内有几个实根及其所在区间。首先,求取 $f(x)$ 的各阶导数

$$f'(x) = 3x^2 + 4x - 1, \quad f''(x) = 6x + 4, \quad f'''(x) = 6$$

其次,将区间 $(-\infty, 1]$ 分为 $(-\infty, -3], [-3, -2], [-2, -1], [-1, 0]$ 及 $[0, 1]$ 5 个小区间。将各分点值代入函数及有关各导数表达式,并算出各 V_x 。其结果列成表 2.1。

表 2.1 $f(x) = x^3 + 2x^2 - x - 1 = 0$ 隔根区间

x	$-\infty$	-3	-2	-1	0	1
$f(x)$	$-\infty$	-7	$+1$	$+1$	-1	$+1$
$f'(x)$	$+\infty$	$+14$	$+3$	-2	-1	$+6$
$f''(x)$	$-\infty$	-14	-8	-2	$+4$	$+10$
$f'''(x)$	$+6$	$+6$	$+6$	$+6$	$+6$	$+6$
V_x	3	3	2	2	1	0

由表 2.1 可以看出,在 $(-\infty, 1]$ 内, $V_{-\infty} - V_1 = 3 - 0 = 3$ 共有 3 个实根。这 3 个实根分别分布在 $[-3, -2], [-1, 0]$ 和 $[0, 1]$ 3 个区间内。

3. 计算机法 如果函数 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 内单调连续,且 $f(a) \cdot f(b) < 0$,那么方程 $f(x) = 0$ 在 $[a, b]$ 内至少有 1 个实根。为了实现根隔离,可根据实际情况设定步长 h ,由 a 点出发,逐步寻找各根存在的小区间。其具体做法是:首先求取 $f(a)$ 和 $f(a+h)$,若 $f(a) \cdot f(a+h) < 0$,则在小区间 $[a_1 = a, b_1 = a+h]$ 内必有一根,否则无根,然后再令 $a \leftarrow a+h$,并求新的 $f(a)$ 和 $f(a+h)$,检验 $f(a) \cdot f(a+h) \leq 0$? 这样一直搜索到 $b = a+h$ 为止,便可

找到 $[a, b]$ 内的全部有根区间。在应用这种方法时,应合理选择步长 h 。 h 过大会将根漏掉; h 过小则计算步骤过多。实现根隔离的计算机程序段如下:

```

100 K=1: INPUT A,B,H
110 X=A: GOSUB 1000: FA=F
120 IF X=B THEN 170
130 X=X+H: GOSUB 1000
140 IF FA * F > 0 THEN 120
150 LPRINT "K="; K, "A="; X-H, "B="; X
160 K=K+1: FA=F: GOTO 120
170 END

```

其中,SUB 1000 为函数 $f(x)$ 的子程序,函数值由 F 表示。

如果在区间 $[a, b]$ 内有唯一实根,则可用对分法求取足够准确的初值 x_0 。对分法的基本思想是将区间 $[a, b]$ 等分,检验乘积 $f(a) \cdot f((a+b)/2) < 0$? 若乘积小于零,则根在 $[a, (a+b)/2]$ 区间内,令 $b \leftarrow (a+b)/2$,对新区间 $[a, b]$ 分半,重复以上步骤;否则根在 $[(a+b)/2, b]$ 区间内,令 $a \leftarrow (a+b)/2$,构成新的有根区间 $[a, b]$,继续施行对分法。初值 x_0 的准确度由预先规定的精度 ϵ 来控制。 ϵ 越小,将区间 $[a, b]$ 逐次分半的次数就越多,分半次数 K 的计算式为

$$K = [\ln(b-a) - \ln\epsilon] / \ln 2 \quad (2.7)$$

对分法求初值 x 的计算机程序段如下:

```

100 INPUT A,B,E
110 X=A: GOSUB 1000: FA=F
120 IF ABS(B-A)/2 < E THEN 160
130 X=(A+B)/2: GOSUB 1000
140 IF F=0 THEN 170
150 IF FA * F > 0 THEN A=X ELSE B=X: GOTO 130
160 LPRINT "x0="; X: END
170 LPRINT "x*="; X: END

```

与前一个程序段一样,SUB 1000 为函数 $f(x)$ 的子程序,且以 F 表示函数值。当 $f(x) = 0$ 时,则求得真解 x^* ;当 $|(b-a)/2| < \epsilon$ 时,则求出初值 x_0 。

求得初值或找到单根区间后,便可按照规定的数值过程模式实现逐次逼近,使解逐步精确化。解方程的数值过程模式很多,下面几节将介绍常见而又重要的几种。

§3 简单迭代法

迭代法是求解方程 $f(x) = 0$ 的最基本的数值方法。先将方程 $f(x) = 0$ 改写成等价形式

$$x = \varphi(x) \quad (2.8)$$

然后将初值 x_0 代入式(2.8)的右端求得 $x_1 = \varphi(x_0)$,再由 x_1 又可求得 $x_2 = \varphi(x_1)$ 。如此继续下去便可构造出近似解序列

$$x_k = \varphi(x_{k-1}), \quad k = 1, 2, \dots \quad (2.9)$$

直到满足条件 $|x_n - x_{n-1}| < \epsilon$ 时, x_n 便为所求方程 $f(x) = 0$ 的近似解。

这种求根的方法称作简单迭代法,式(2.9)称作迭代格式,函数 $\varphi(x)$ 称作迭代函数。显然选择不同的迭代函数将会产生不同的近似解序列 $\{x_k\}$ 。并不是所有近似解序列都是收敛的,

当 $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*$ 时, 我们称迭代过程收敛。

迭代过程的几何意义如下:

在几何上, 可将求式(2.8)的根归结为寻找直线 $y = x$ 与曲线 $y = \varphi(x)$ 交点 A 的横坐标 x^* 。如图 2.2a 所示, 设定初值 x_0 , 在曲线 $y = \varphi(x)$ 上可找到点 $A_0(x_0, \varphi(x_0))$ 。从 A_0 出发, 沿水平方向前进在 45° 线上可求得 A'_1 , 其横坐标 $x_1 = \varphi(x_0)$; 再由 x_1 可在曲线 $y = \varphi(x)$ 上求出点 $A_1(x_1, \varphi(x_1))$ 。如此继续下去便可逐步逼近点 $A^*(x^*, \varphi(x^*))$, 且有 $|x_k - x_{k-1}| < |x_{k-1} - x_{k-2}|$ ($k = 1, 2, \dots$), 即 $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*$ 。说明在此情形下迭代过程是收敛的。但在另一种情形(图 2.2b), 迭代过程则是发散的。

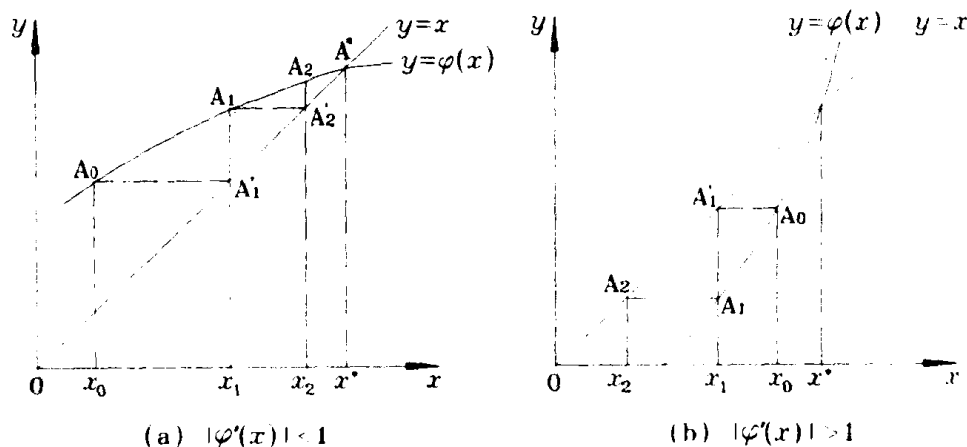


图 2.2 迭代法的几何意义

由上述讨论可知, 迭代过程的收敛性与曲线 $y = \varphi(x)$ 的形状有关。例如, 对方程 $f(x) = 10^x - x - 2 = 0$ 可改写作如下两种形式: (a) $x = \lg(x + 2) = \varphi_1(x)$; (b) $x = 10^x - 2 = \varphi_2(x)$ 。当取初值 $x_0 = 1$ 进行迭代计算时, 迭代格式(b)不收敛, 而(a)迭代 8 次可得 $x_8 = 0.37581221$ 。这进一步说明迭代过程的收敛是有条件的。

定理 2.2 如果(1)迭代函数 $\varphi(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续, 且当 $x \in [a, b]$ 时, $\varphi(x) \in [a, b]$; (2) 迭代函数的导数 $\varphi'(x)$ 存在, 且当 $x \in [a, b]$ 时, 有 $\max_{a \leq x \leq b} |\varphi'(x)| \leq m < 1$, 则

- 1° $x = \varphi(x)$ 在 $[a, b]$ 内有唯一解 x^* ;
- 2° 对任意初值 $x_0 \in [a, b]$, 迭代序列 $x_k = \varphi(x_{k-1})$ ($k = 1, 2, \dots$) 收敛于 x^* , 且 $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*$;

$$3^\circ \quad |x^* - x_n| \leq \frac{m}{(1-m)} |x_n - x_{n-1}| \leq \frac{m^n}{1-m} |x_1 - x_0|。$$

证明:

1° 令 $f(x) = x - \varphi(x)$ 。由条件(1), $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上连续, 且 $f(a) = a - \varphi(a) \leq 0$, $f(b) = b - \varphi(b) \geq 0$, 必存在 $x^* \in [a, b]$, 使 $f(x^*) = 0$, $x^* = \varphi(x^*)$, 即方程 $x = \varphi(x)$ 在 $[a, b]$ 内有解。

2° 按微分中值定理

$$x^* - x_k = \varphi(x^*) - \varphi(x_{k-1}) = \varphi'(\xi)(x^* - x_{k-1}), \quad \xi \in [x^*, x_{k-1}]$$

由条件(2), $|\varphi'(\xi)| \leq m$, 有 $|x^* - x_k| \leq m |x^* - x_{k-1}|$, 从而由归纳法可得

$$|x^* - x_k| \leq m |x^* - x_{k-1}| \leq m^2 |x^* - x_{k-2}| \leq \dots \leq m^k |x^* - x_0|$$

由于 $0 < m < 1$, 故 $\lim_{k \rightarrow \infty} |x^* - x_k| \leq \lim_{k \rightarrow \infty} m^k |x^* - x_0| = 0$, 因而得证

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*$$

$$\begin{aligned} 3^\circ \quad |x_{k+1} - x_k| &= |x^* - x_k - (x^* - x_{k+1})| \geq |x^* - x_k| - |x^* - x_{k+1}| \\ &\geq |x^* - x_k| - m|x^* - x_k| \geq (1-m)|x^* - x_k| \end{aligned}$$

因有 $|x^* - x_k| \leq \frac{1}{(1-m)} |x_{k+1} - x_k|$, 于是有

$$|x^* - x_n| \leq m|x^* - x_{n-1}| \leq \frac{m}{(1-m)} |x_n - x_{n-1}|$$

和 $|x^* - x_n| \leq m^n |x^* - x_0| \leq \frac{m^n}{(1-m)} |x_1 - x_0|$

所以可用 $m|x_n - x_{n-1}|/(1-m)$ 估计近似解 x_n 的误差, 甚至可用 $|x_n - x_{n-1}|$ 来控制迭代。如果规定了迭代误差 $\epsilon \geq |x^* - x_n|$, 则可求出达到要求精度所需的迭代次数

$$n \geq [\lg \epsilon - \lg |x_1 - x_0| / (1-m)] / \lg m$$

还可以证明, 如果当 $x \in [a, b]$ 时, $|\phi(x)| \geq \lambda > 1$, 则迭代格式 $x = \phi(x)$ 发散。

例 2-4 考虑方程 $f(x) = 10^x - x - 2 = 0$ 在 $[0, \infty)$ 内的根, 证明迭代格式 $x = \phi_1(x) = \lg(x+2)$ 收敛, 而 $x = \phi_2(x) = 10^x - 2$ 发散。

证明: $\phi_1'(x) = 0.434294/(x+2)$

$$\max_{0 \leq x \leq \infty} |\phi_1'(x)| = 0.434294/|0+2| = 0.21715 < 1$$

所以迭代格式 $x = \phi_1(x) = \lg(x+2)$ 收敛。当规定 $\epsilon \leq 10^{-6}$ 时, 需要迭代次数 $n \geq 9$, 取 $x_0 = 1$, 计算可得 $x_9 = 0.3758091$ 。而 $\phi_2(x) = 2.302585 \times 10^x > 1$ ($x \geq 0$), 故迭代格式 $x = \phi_2(x) = 10^x - 2$ 发散。甚至取初值 $x_0 = 0.3758$, 迭代过程也不收敛。

例 2-5 应用简单迭代法求解 Van der Waals 方程。计算 N_2 在 $T = 173K$ 和 $P = 50\text{atm}$ ($1\text{atm} = 1.0133 \times 10^5\text{Pa}$, 下同) 下的比容 v 。

$$\text{Van der Waals 状态方程为 } (P + \frac{a}{v^2})(v - b) = RT$$

对于 N_2 , $a = 1.3506 \times 10^6$, $b = 38.6417$ 。应用简单迭代法时, 可将其写成如下两种形式:

$$v = \phi_1(v) = RT/[P + (a/v^2)] + b$$

$$v = \phi_2(v) = \{a(v-b)/[RT - P(v-b)]\}^{0.5}$$

当取理想气体的比容 $v_0 = RT/P = 82.06 \times 173/50 = 283.93$ 为初值时, 由于

$$|\phi_1'(v)| = |2aRT/v^3(P + a/v^2)| \leq |\phi_1'(283.93)| \leq 0.38 < 1$$

$$|\phi_2'(v)| = |aRT/2\{a(v-b)[RT - P(v-b)]^3\}^{1/2}| \leq |\phi_2'(283.93)| \geq 6.2 > 1$$

故前者收敛, 而后者发散。当要求 $\epsilon = 10^{-6}$ 时, 迭代 22 次, 可得 $v = \phi_1(v) = 222.5215$ 。对于格式 $v = \phi_2(v)$, 甚至取 $v_0 = 222$ 也发散。

§4 牛顿法

牛顿法是解非线性方程 $f(x) = 0$ 的有效方法之一, 尤其在单根附近具有较高的收敛速度。当导数 $f'(x)$ 易得且初值 x_0 估计较准时, 一般选用牛顿法。

对函数 $f(x)$ 在 x_0 处作泰勒展开

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots$$

若只取前两项, 则可将 $f(x)$ 近似地表示为线性函数, 那么非线性方程 $f(x) = 0$ 可近似地由线性方程代替, 即 $0 = f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$, 解得

$$x = x_0 - f(x_0)/f'(x_0)$$

从而构成迭代格式

$$x_k = x_{k-1} - f(x_{k-1})/f'(x_{k-1}), \quad k = 1, 2, \dots \quad (2.10)$$

牛顿法的几何意义是过点 $A_0(x_0, f(x_0))$ 作曲线 $y = f(x)$ 的切线, 并以切线 $y = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$ 代替曲线方程 $y = f(x)$, 求得切线与 x 轴交点的横坐标, 便可构成牛顿迭代格式(2.10)。其情形如图 2.3 所示。

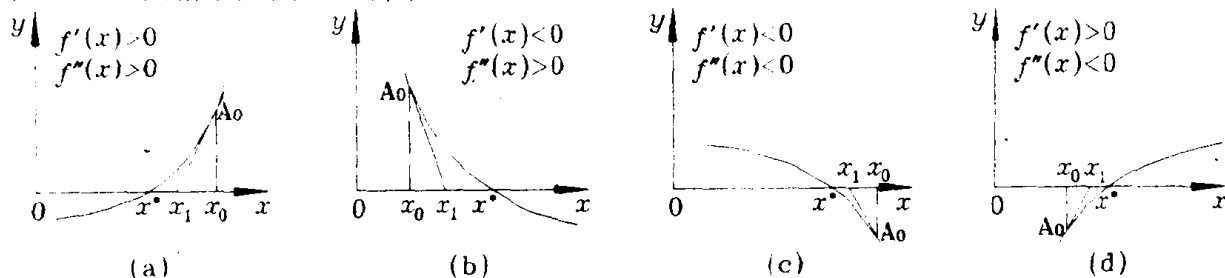


图 2.3 牛顿法的几何意义及收敛性

关于牛顿法的收敛性有下述定理:

设 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上二阶导数存在, 且满足条件: (1) $f(a) \cdot f(b) < 0$; (2) $f'(x) \neq 0 (a \leq x \leq b)$; (3) $f''(x)$ 在 $[a, b]$ 上不变号, (4) 初值 $x_0 \in [a, b]$ 使 $f''(x_0) \cdot f(x_0) > 0$, 则由式(2.10)给出的牛顿迭代序列 $\{x_k\}$ 收敛于方程 $f(x) = 0$ 在 $[a, b]$ 上的唯一解。

条件(1)保证方程 $f(x) = 0$ 在 $[a, b]$ 上有根; 条件(2)说明函数 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 上是单调的, 从而方程的根是唯一的; 条件(3)表示曲线 $y = f(x)$ 在 $[a, b]$ 上的凹凸性不变, 并和条件(4)联合在一起保证所有 $x_k \in [a, b]$, 如图 2.3 所示。

例如, 求方程 $f(x) = x^3 - 2x^2 - 4x - 7 = 0$ 在 $[3, 4]$ 内的实根。

解: $f(x) = x^3 - 2x^2 - 4x - 7, \quad f(3) = -10, \quad f(4) = 9$
 $f'(x) = 3x^2 - 4x - 4 > 0, \quad 3 \leq x \leq 4$
 $f''(x) = 6x - 4 > 0, \quad 3 \leq x \leq 4$

根据上述定理, 方程 $f(x) = x^3 - 2x^2 - 4x - 7 = 0$ 在 $[3, 4]$ 上有唯一解。采用牛顿法取初值 $x_0 = 4$, 迭代 5 次得 $x = 3.63198$ 。

牛顿法计算步骤及子程序如下:

- 1° 给定 x_0, ϵ, k_m ;
- 2° $k = 1, x = x_0$;
- 3° 调子程序计算 $f(x), f'(x)$;
- 4° $x = x_0 - f(x)/f'(x)$;
- 5° 如果 $f(x) = 0$ 或 $|(x - x_0)/x| \leq \epsilon$, 输出解 x ;
- 6° 如果 $k \geq k_m$, 迭代失败;
- 7° $k = k + 1, x_0 = x$, 转去 3°。

```
2000 REM SUB NEWTON
2010 K=1 : X=X0
2020 GOSUB 1000
2030 IF F=0 THEN 2110
2040 GOSUB 1500
2050 IF DF=0 THEN PRINT"###":STOP
```