化工中的数值方法

——计算机在化工中的应用

孙健哲
陆　晖　编著

西北大学出版社

化工中的数值方法

——计算机在化工中的应用

孙健哲　陆　晖　编著

西北大学出版社

新登(陕)字 011 号

内 容 简 介

本书介绍方程求根、线性代数方程组求解、函数插值、数值微分和数值积分、回归分析与曲线拟合、常微分方程数值解法、偏微分方程差分解法及最优化方法等化工中常用的数值方法的基本原理和算法，提供了框图及 BASIC 程序，列举了大量的化工应用实例。取材新颖，内容广泛，通用性强。

可作为大专院校化工类专业的教材，也可供化工科技人员及其他专业人员参考。

化工中的数值方法

——计算机在化工中的应用

孙健哲　陆　晖编著

西北大学出版社出版发行

(西安市太白路)

新华书店经销　陕西广播电视印刷厂印刷

开本 787×1092　1/32　7 印张　157 千字

1992 年 5 月第 1 版　1992 年 5 月第 1 次印刷

印数 1—2000

ISBN 7—5604—0308—5/TQ·5　定价：4.50 元

序

电子计算机的问世极大地增强了人类认识世界和改造世界的能力，正在迅速地推动着科学技术的新发展，并已成为现代化的重要标记之一。

大量的实践证明，要有效地把计算机应用于化工领域，仅仅学习一两种程序设计语言是不够的，还要能把实际问题抽象成数学模型，并掌握一定的数值方法和程序设计技巧。

随着化学工程的发展，广大研究生、大学生以及科研、设计、生产战线上的化工科技人员及管理人员都迫切希望学习和应用计算机，以便有效地探索化工过程的规律性和解决实际工作中的问题。从这个意义上说，本书确系应急之作。作者从大量繁复庞杂的数值方法中选出对化学工程关系较密切的若干种加以阐述，并提供了自己在教学、科研实践中开发或移植的实用程序。书中还列举了不少典型的化工应用实例。深入浅出，别具一格。

本书取材新颖，内容广泛，是一本比较系统、全面地讲述化工中的数值方法及程序设计的著作。我高兴地向广大读者予以推荐，相信它的出版必将对化工类专业的学生和广大化工科技人员有所裨益，并对计算机在化工中的应用起到积极作用。

姜信真

注：姜信真同志为陕西省副省长，西北大学化工系兼职教授。

前　言

电子计算机在教学、科研、设计和生产管理等方面的应用越来越广泛。摆在化工专业人员面前的一项重要而富有意义的工作，是迅速而深入地将计算机技术和化学工程结合起来，有效地解决实际问题。

目前以介绍数值计算基础理论和基本方法为内容的计算方法类书籍已有多种版本，但以化学工程中的各类计算问题为对象的实用性很强的专著尚不多见。本书着重讨论化工计算中常用的基本数值方法，每种方法均附有通用的 BASIC 程序及化学工程问题的计算实例。为了突出实用性，本书力求深入浅出，既注意阐明各种算法所依据的数学原理，又尽量避免过多的推证。

本书虽然是从化工计算的角度编写的，但许多处理方法及程序则是通用的，所以也可以作为其他专业人员的参考书。为便于应用，书中的全部程序均有适用于 IBM－PC 机、APPLE－Ⅱ机及 PC－1500 机的三种版本，并分别存入磁盘、磁带中备索。

在编写过程中，得到了陕西省副省长姜信真教授、西安交通大学化学化工系韩世纲教授、西安石油学院化工系马宝岐教授的热情鼓励与支持。西北大学化工系主任李宝璋教授、西北工业大学数学系赵镇西教授审阅了书稿，并提出了宝贵的意见。在此，作者表示衷心地感谢。书中不妥之处，祈请读者不吝赐教。

作　者　　1991.7

目　录

第一章 绪 论

电子计算机的发展，为各个科学领域提出的各类数学问题求得数值解答提供了有力的工具。数值方法是数学的一个分支，它研究数值（标量、向量、矩阵、高维数组等）及其之间的函数关系或相关关系（曲线、曲面、方程、方程组等），是用计算机进行科学计算全过程的一个重要环节。学习和掌握常用的数值方法，并能应用于化工教学、科研、设计和生产实际，已经成为现代化学工程师必须具备的素质和能力。

通常，运用计算机解决科学问题需要经历以下几个主要步骤：

实际问题的数学描述→选择适当的数值方法→设计程序→上机计算，并检验结果。

本章将对这些主要步骤简要地加以说明。

1.1 化学工程问题的数学描述

众所周知，数学是客观事物数量关系的反映，而客观事物都是质和量的统一。因此，运用数学方法研究自然现象或工程技术问题，就是要在质和量的对立统一中把握研究对象的数量关系及其变化规律，从而获得对其更精确更深入的认识。

在运用数学方法研究实际问题时，首先要把事物的数量关系提炼出来，把所研究的问题表达为数学形式，把有特殊的

质的内容的描述转化为数学上量的描述，这个步骤常称为建立数学模型。

化学工程问题计算结果是否可靠，首先不是取决于程序的设计以及计算的精确程度，而是取决于所采用的数学模型是否真正从本质上描述了这一化工过程。要做到这一点，不仅要有丰富的数学知识和灵活的运用能力，还必须对所研究的化工过程以及有关的实验事实有广博的知识和深刻的理解。建立的数学模型合理，确切地反映了事物的本质联系，又有一定的方法求解，就可以较好地说明和解决实际问题。

由于影响化工过程的因素繁多，将它们不分主次地纳入数学模型中，势必增加计算量，而对所求结果的精度并无明显的好处。因此对于一个化学工程问题进行数学处理时，需要对所研究的体系进行必要的、合理的简化，这一点在传递过程和反应工程中都很重要。

1.2 数值方法及其选择

数学模型建立之后，下一步工作就是求解。化学工程中有些问题可以求出精确的解析解，但在实际工作中，常常会遇到一些无法求解析解的情况。不妨举个例子：

当我们用阶跃输入法测定一个管式反应器的逗留时间分布时，获取了一批时间 t 和分布函数 $F(t)$ 数据，略去分子扩散之后按宏观流动处理的转化率的关联式为

$$\bar{x}_A = \int_0^\infty x_A(t)E(t)dt$$

$$= \int_0^1 x_A(t)dF(t)$$

这就是要建立的数学模型。

式中的 $x_A(t)$ 是用转化率和反应时间表示的微观动力学方程式，$F(t)$ 是实测的逗留时间分布函数，$\bar{x}_A$ 是出口物料中各流体微元的 A 转化率的平均值。

由于自变量 $F(t)$ 与被积函数 x_A 之间没有具体的函数关系式，而只有间接的数值关系，即只有若干对 $F(t)$ 与 t（可用具体的微观动力学方程式求得 x_A）相对应，无法求得解析解，这时只能用数值方法求取积分的近似值（详见第五章例 5.3）。

所谓数值方法，是指对一组已知的数值数据，根据它们之间的关系，按照某种数学方法进行处理，寻求具有一定精度的近似答案的方法。一个本可求得正确答案的问题，由于选择的数值方法不当，可能会得出荒谬的结论。

例如，计算 AgI 在浓度为 $0.1\text{mol} \cdot 1^{-1}$ 的 NaI 溶液中的溶解度 ($K_{sp} = 1.5 \times 10^{-16}$) 时，可建立如下的数学模型：

$$s(s + 0.1) = 1.5 \times 10^{-16}$$

即 $$s^2 + 0.1s - 1.5 \times 10^{-16} = 0$$

乍看起来，如此简单的一元二次方程自然可以按通式求解，即

$$s = \frac{-0.1 + \sqrt{0.1^2 + 4 \times 1.5 \times 10^{-16}}}{2} = 0$$

这个结果显然是错误的，因为二次方程的通式用在这个问题上出现了两个相近的大数相减的情况，这是因为计算方法选择不当所致。

下面换一种算法：

$$q = \frac{-b - \operatorname{sgn}(b)\ \sqrt{b^2 - 4ac}}{2} = -0.1$$

$$s = \frac{c}{q} = \frac{-1.5 \times 10^{-16}}{-0.1} = 1.5 \times 10^{-15}$$

这个例子说明建立了正确的数学模型之后，选择数值方法的重要性。在科学技术突飞猛进的今天，化学科学、传递过程、分离工程和反应工程等研究的问题越来越复杂、越深刻，数值方法作为一种认识手段，应是广大化工工作者和化工科技人员知识武库中不可或缺的重要组成部分。

1.3 程序设计

我们要用计算机求解各种化工问题，诸如方程求根、微分和积分计算、微分方程的求解、实验数据的拟合，最优操作参数或设计参数的确定等等，必须把求解过程归结为按一定的规则进行一系列加、减、乘、除等算术运算和一些逻辑运算。计算机只能机械地执行人们所给定的命令，而不能自动地思维和进行创造性的工作。交给计算机执行的解题方法的每一步骤都必须加以准确的规定，并用计算机所能接受的语言描述出来。描述的结果称为“程序”，编制程序的过程为“程序设计”。编写计算机程序时所采用的一种事先约定来表达信息的语句集合或代码组合形式就叫“程序设计语言”。目前，世界上使用的计算机高级语言有数百种，其中较为常用的有 BASIC、FORTRAN、COBOL、PASCAL、ALGOL、C 语言等。

程序设计是一种技能，也是一种思维训练手段，进行良好的程序设计，是充分发挥计算机功能的重要途径。

随着计算机软件科学的发展，我国软件市场出现了众多的软件包、程序库和子程序“银行”，为科技工作者减少重复劳动、解决实际问题带来了极大的方便。但是，如果不具备数值方法的基本知识和一定的程序设计能力，即使有现成的程序也未必能加以有效地利用，更谈不上因地制宜地修改、优化或移植了。

同一切产品一样，数值方法和程序设计都有个质量问题，在达到既定计算目标的前提下，计算量尽可能小，所需占用的存储单元数尽可能少，将误差控制在可允许的范围之内，是选择数值方法和编写程序时必须加以考虑的问题。

1.4 计算结果的检验

由于对实际问题所建立的数学模型使用的实验数据、应用的数值方法和编写的程序都可能发生错误或存在误差，从而使计算结果的可靠性差，甚至完全丧失其物理意义。所以把客观事物和实际过程的质与数值解得出的抽象的量统一起来，根据具体事物和变化过程的特点以及实践经验，对于数值解进行分析和验证，作出解释和评价，最后形成适用于具体问题的具体结论，这也是用计算机解决科学计算问题的一个必不可少的重要环节。

第二章 一元非线性方程求根

在化学化工中，有许多问题经常归纳为高次方程或超越方程。对于简单的代数方程可以用代数方法求解，比如二次方程有二个解析形式的根，三次方程和四次方程尽管复杂些，仍能用代数方法求解。而对于一般的五次或五次以上的高次方程，就根本没有代数解法，只能用数值方法求近似解。同样，对许多超越方程，用解析法求解也是不可能的，例如求 1S 氢轨道的数学模型为

$$0.5x^2 + x - 0.1e^x + 1 = 0$$

看上去很简单，但却不易求其准确根。

在科学技术及生产实践中提出的许多方程即使有一求根的解析表达式，但在求根时，由于所用的原始数据本身往往就是近似值，从而使得用精确方法求得的根也只能是近似值。所以，寻找求根的各种有效的近似方法，很有现实意义。本章介绍通过数值技巧求方程根的近似值的常用方法。

2.1 实根的隔离——迈步法

2.1.1 方法介绍

设 $f(x)$ 为定义在某区间上的连续函数，方程 $f(x) = 0$ 存在实根。可分两步来求根：首先求出一个比较粗糙的近似值，

称为初始近似值；然后按某种方法将近似值逐步精确化，直到满足所要求的精确度。确定根的初始近似值时，可先设法寻找一个区间〔a,b〕，使其中恰好只含有方程 $f(x)=0$ 的一个实根，这个步骤叫做“实根的隔离”，这样的区间叫做“隔根区间”。若隔根区间适当小，则该区间内的任一点都可作为根的初始近似值。

一元方程 $f(x)=0$ 在某个区间〔a,b〕内实根的数目可能多于一个（如图 2.1），用上述方法还可将 $f(x)$ 的定义域分成若干个分别只含一个实根的区间。

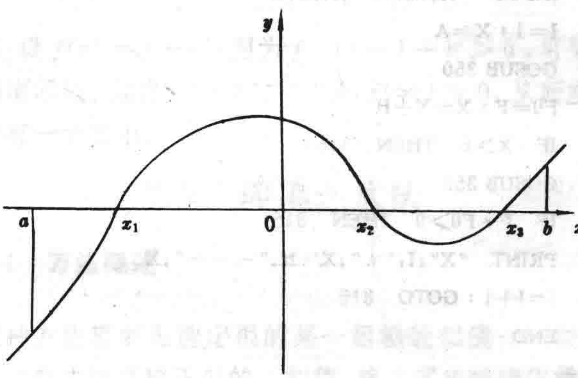

图 2.1　方程的根示意图

用迈步法进行根的隔离的步骤：首先选定一个步长 h，然后分别计算 $x=a, x=a+h, x=a+2h$，…时的函数值 $f(a)$，$f(a+h), f(a+2h)$，…，直至两个相邻函数值异号。不难理解，所求的根必在某相邻的两个 x 之间。这种方法实际上是从区间的左端点 $x=a$ 开始，以步长 h 向前迈步。每迈一步，检查起点 $a+ih$ 和终点 $a+(i+1)h$ 的函数值是否同号，如不同