

经典化工高等教育译丛

化工计算导论

(第二版)

INTRODUCTION TO CHEMICAL ENGINEERING COMPUTING (SECOND EDITION)

[美] Bruce A. Finlayson 著 朱开宏 译



华东理工大学出版社
EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

经典化工高等教育译丛

化工计算导论

(第二版)

**Introduction to
Chemical Engineering Computing
(Second Edition)**

著者：[美] Bruce A. Finlayson

译者：朱开宏



华东理工大学出版社
EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

· 上海 ·

图书在版编目(CIP)数据

化工计算导论 / (美)芬利森(Finlayson, B. A.)著;朱开宏译. —2版. —上海:华东理工大学出版社,2014.8
书名原文:Introduction to chemical engineering computing
ISBN 978-7-5628-3790-9

I. ①化… II. ①芬…②朱… III. ①化工计算—概论 IV.
①TQ015

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 125052 号

Introduction to chemical engineering computing (2nd. ed.) / Bruce A. Finlayson,
原著 ISBN: 978-0-470-93295-7.

Copyright © 2012 by John Wiley & Sons, Inc.

All Rights Reserved. This translation published under license.

著作权合同登记号:图字 09-2013-915 号。

Copies of this book sold without a Wiley sticker on the cover are unauthorized and illegal.

经典化工高等教育译丛

化工计算导论(第二版)

著 者 / [美]Bruce A. Finlayson

译 者 / 朱开宏

责任编辑 / 周 颖

责任校对 / 金慧娟

封面设计 / 方 雷

出版发行 / 华东理工大学出版社有限公司

地 址:上海市梅陇路 130 号,200237

电 话:(021)64250306(营销部)

(021)64252749(编辑室)

传 真:(021)64252707

网 址:press.ecust.edu.cn

印 刷 / 上海展强印刷有限公司

开 本 / 787 mm×1092 mm 1/16

印 张 / 20.25

字 数 / 496 千字

版 次 / 2006 年 9 月第 1 版 2014 年 8 月第 2 版

印 次 / 2014 年 8 月第 1 次

书 号 / ISBN 978-7-5628-3790-9

定 价 / 68.00 元

联系我们:电子邮箱 press@ecust.edu.cn

官方微博 e.weibo.com/ecustpress

淘宝官网 <http://shop61951206.taobao.com>



译者的话

翻译《化工计算导论(第二版)》的过程中,我仿佛听到了国外同行不断前进的脚步声。与本书第一版相比,最大的不同是以功能更强大、应用更便捷的 COMSOL Multiphysics 代替了 FEMLAB,其他程序也都更新了界面并增强了功能。另外,在实例和习题中作者向学生展示了化学工程知识在新能源(如燃料电池)、生物医学(如生物传感器)等高新技术领域的应用。由本书可明显地感觉到发达国家自 20 世纪 90 年代开始的化学工程教学内容和教学方法的革新仍在继续中。

化学工程师(化学工程及相关专业的学生将是明天的化学工程师)解决化工过程研究、开发、设计、生产中的问题,不外实验和计算两种手段。当然,不论实验还是计算,在进行计划安排和结果分析时,均离不开科学的判断和推理,科学的决策可显著提高工作的效率,水平高低往往取决于此。目前,在解决重大工程问题时要想完全避开实验,对化学工程师而言还是不现实的。但实验往往既费钱,又费时,因此化学工程师总是希望尽可能少做实验,同时充分发挥必不可少的实验的效用。正是在这方面,计算(借助数学模型方法)能够发挥不可或缺的作用。

要进行计算,当然离不开计算工具。“工欲善其事,必先利其器。”掌握的计算工具越先进,就越有可能以较少的精力完成较复杂的计算任务。从计算尺到计算器,再到计算机,化学工程师手中的计算工具已变得越来越强大。

化学工程师开始应用计算机时,都需用 BASIC、FORTRAN、C++ 等算法语言自己编写解决特定问题的程序。这虽然为解决复杂的化工计算问题提供了可能,但编写、调试程序仍要花费大量时间和精力。近十几年来,随着 MATLAB、MAPLE、STATISTICA 等数值计算语言的出现和逐渐成熟,Aspen Plus、PROII 等流程模拟软件的日益普及,FEMLAB、COMSOL Multiphysics 等仿真软件的不断改进,这种情况已有了很大改变。应用上述各种软件,已能方便地求解许多非常复杂的化工数值计算问题,化学工程师已有能力解决越来越复杂的计算问题。诚如作者所言,本科生在今天研究的工程问题就复杂性而言,与三四十一年前的博士生研究的问题是类似的。我们的学生只有熟练掌握这些先进的计算工具,才能在走上工作岗位后与国外同行竞争。

本书作者 Bruce A. Finlayson 是美国著名的化工应用数学家,曾担任美国化学工程师协会主席,是第七版和第八版培莱氏化学工程师手册(Perry's Chemical Engineers' Hand-

book)和乌尔曼工业化学大全(Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry)数学篇的主要撰稿人。本书第一版是以他在西雅图华盛顿大学为化工系学生开设的“化学工程计算机技能”课程的讲稿为基础编写的,于2006年出版。在2012年修改出版的第二版中,作者用Excel、MATLAB、Aspen Plus和COMSOL Multiphysics四种数值计算或流程模拟软件为工具,阐述了状态方程、气液平衡、化学反应平衡、传质设备模拟、化工流程模拟、化学反应器设计和动量、热量、质量传递过程等化工问题的计算方法,反映了国外化工计算的现状和最新发展。

化学工程的各门专业课程,如化工热力学、传递过程、化学反应工程、化工系统工程、化工设计、化工应用数学,与计算机应用的结合是近年来国内化工教学改革的重要内容之一,许多学校或者将计算机应用渗透到这些课程的教学,或者开设了“计算机在化工中的应用”等课程。译者希望本书的翻译和出版能有助于国内同行了解国外化工计算的发展动向,促进化工教学改革的深化。限于水平和时间,译文肯定存在不少缺点甚至错误,望读者不吝批评指正。

译者

2013年9月于华理苑

序 言

化学工程专业的学生和化学工程师需要去求解复杂性日益增加的问题,这些问题包括炼油厂、燃料电池、微型反应器和制药厂的各种应用问题。多年以前,学生编写自己的程序,最早是用 FORTRAN 编程语言,然后是用 MATLAB 之类的数值计算语言。但是,随着个人计算机的发展,已经为学生编写了求解许多问题的软件,学生只要正确应用这些程序就可以了。于是,教学重点由对编写他们自己的程序感兴趣的少数人转向大批将使用这些程序,但不必亲自编写的学生。我在华盛顿大学 42 年的教学生涯中,曾指导过一些学生小组如何运用数值分析方法解决复杂问题。现在,我则在教所有学生如何聪明地利用计算机。我教的学生中只有少数人对数值分析有兴趣(令我伤心!),但所有学生都知道他们必须能够解决困难的问题,以及他们需要利用计算机完成此任务。

本书的目的是阐明:(a)化学工程师必须解决的问题;(b)用于解决这些问题的计算机程序的类型;(c)工程师如何检查计算结果并确保他们已正确地解决了这些问题。将在当代学生的学习环境里完成下述任务——最低限度的阅读量、非常及时地学习和大量的计算机使用方法。本书演示的程序有 Excel[®]、MATLAB[®]、Aspen Plus[®]和 COMSOL Multiphysics[®]。

编写本书时,我假定读者并不是完全的初学者。低年级和高年级化学工程专业的学生已具有应用如 Excel 之类的电子表格程序的经验,只要向他们提供指导和关键的概念和术语,他们能不费力地在计算机上学习。实际上,许多学生比他们的导师更熟悉计算机。但是,刚开始学习的化学工程学生可能不是非常清楚地了解应用问题,以及对隐藏于工程问题背后的物理现象缺乏深入的理解。而且,他们可能没有解决过非常困难的问题。于是,重要的是对学生为什么需要求解这些问题提供某些解释,以及当这些问题面临数值方法的重压时如何克服困难。我对我自己的经验作了总结,并对本书中的问题给予了透彻的说明。

我的教学思想是:工程师今天正在解决的问题通常是解析方法无能为力的,但他们可用今天能获得的功能强大的软件解决。于是,每个工程师将要解决无人知道答案的问题,而保证以书面形式或在计算机上正确表述问题,并正确地求解它们,正是工程师的职责。工科学生必须懂得如何通过检查计算机完成的工作来确定计算机是否正确地解决了问题。如果他们能做到这一点,他们就能令导师或将来的老板相信他们已获得了与解析解一样可靠的答案,虽然并未获得解析解,而且对某些问题也不可能用解析方法求解。事实上,本书中 98% 的问题是是非线性的,它们中只有极少数有解析解。

在教学中如何应用本书

本书来源于我在华盛顿大学开设的课程,第一次开课是在2003年。该课程由讲座和在计算机实验室中亲自实践的计算机作业两部分组成。我通常会提供一些简单的习题,让学生在计算机实验室中求解,并向学生提供帮助,使他们能克服运用不熟悉的程序时所面临的困难。但随后学生必须求解一个能扩展他们的化学工程知识的问题,以证明他们能正确地使用该程序(并陈述他们所做的核查)。因为这些应用涵盖了许多化学工程领域,我对学生开玩笑说:“我在20个小时内就教了你们整个化学工程领域。”虽然,我已在2009年退休,不再教授这门课程,但相同的教学目标依然保持着。

本书也可用于其他一些课程,因为每一章都适合于教学计划中的一门课程。例如,在热力学课程里讲授了化学反应平衡,教师可在计算机实验室练习时间内利用本书有关化学反应平衡的章节教授计算机的应用。热力学模型选择(和比较)方面的材料也能增加对热力学课程的实际认识。其他章节则可用于其他课程。用这种方法,学生将在整个学习过程中一门课接一门课地使用本书:质量和能量衡算,热量、质量和动量传递,反应器设计;而有些课程将把注意力放在各种课题上,例如生物医学工程。当然,希望学生能将注意力集中在化学工程原理上,而将计算机作为工具。

本书讲述了四种程序的特色。你的学校可能不会全部使用这四种程序。虽然屏幕图像可能不同,但基本概念和程序是相同的。当然有些问题可用其他程序求解。在某种工作环境里,工程师们也将使用公司提供的程序。于是,工程师们可能使用功能不太强大的程序,因为他们只能获得这种程序。功能更强大的程序还可能要花费更多钱。于是,在有些章节内采用了不同的程序来求解相同的问题,这可让学生直接了解为了解决复杂问题,比较通用的程序需要显著增加编程工作。按我的经验,提供一组程序后,学生将会采用能使他们尽快地求解他们的问题的程序。程序COMSOL Multiphysics提供了许多模块。几乎本书中的所有问题均可用基本模块求解,虽然也有些案例,化学反应工程模块是有用的。与MATLAB的链接可以用MATLAB的LiveLink™及其他模块实现。只有几个涉及湍流的问题,这些问题需要CFD(计算流体力学)模块。你所能获得的各种组合的完整清单可从COMSOL得到,也可从本书网站获得我的清单(见附录D)。

每章均以教学目标清单开始。此外,本书网站中有从化学工程观点和计算机技术观点出发,可由每个问题学到的原理的清单。我们鼓励采用本书的教授讨论在其他化学工程课程中的可能应用,使得更高深的问题能在他们的课程中求解。在本书网站中还可获得各种索引,因为学生更愿使用互联网,而不愿翻到本书最后查看主题索引;更重要的是他们可利用短语进行搜索和下载。

创新之处

与第一版相比,一个重大的变化是所有四个程序都有了与2005年时不同的界面。更

重要的是,它们都大大增强了功能。我已经缩减了某些解释,而推荐用户利用伴随程序的帮助菜单,因为这些菜单已获改进,它们提供的信息超过了本书所能提供的。但是,我提供了到哪儿去查阅的提示。

习题的数量几乎增加了一倍。更重要的是,增加的习题集中在能源领域:整体煤气化联合循环,包括低温空气分离、用柳枝稷制乙醇和变压吸附为燃料电池汽车制氢。在每个案例中,均在讨论之前先定义问题,使学生能了解其适用性。自2005年以来,微流体力学已获得发展,也有些增加的习题是属于生物医学应用领域的。这导致更多的例题和习题涉及二维和三维空间的流体流动和扩散。一项重大的增添是在 Aspen Plus 7.3 中作出的:现在在程序中已可直接存取美国国家标准及技术研究所(National Institute of Standard and Technology)汇编的纯组分的压力-体积-温度实验数据和二元气-液平衡实验数据。对化学工程师而言,这是非常重要的,因为热力学模型的选择通常必须伴随着与实验数据的比较,而现在这已变得非常容易,容易到不做这种比较将显得不专业。于是,本书的热力学部分包括了工业指南、某些分子水平的考虑和进行比较的实验数据。Aspen Plus 还有能力非常方便地总结某个过程的温室效应。在有些教授的课程里,会有他们所作的关于如何利用 Aspen Tech 公司产品的讨论;请联系: University.Program@aspen-tech.com。Luyben 教授指出的一个事实是物料和能量衡算主要是基于物流的,而安全问题是基于压力(和动态)的。动态选项在本书不作详细讨论,通常它们包含在控制课程内。Aspen Plus 在微软视窗下运行,但作者是在苹果计算机上用 Parallels Desktop for Mac 在视窗下运行的。第二版中还有些例题是添加了简单的用户定义 FORTRAN 程序后运行 Aspen Plus 的。

有些教授喜欢在他们的课程中采用更多数值编程,所以在有些章的结尾增加了一些这类习题。这些习题提供了很好的对比,先用数值编程求解,然后用本书重点讲述的四种程序之一求解,再比较哪种方法更简便。附录 E 提供了数值方法的更多细节。而这些程序使数值分析更易于使用,认识大多数习题涉及由连续变量到离散变量的近似处理也是重要的。本书中有些习题要求学生进行实际的数值分析(并与其他程序比较)。指导老师可能会说,“如果你不尝试对这些方法编程,你不能真正理解这个问题。”我指出如下事实作答:当医生描述核磁共振成像时,你不会说只有当他(她)向你说明机器内磁场如何工作,氢分子如何翻转方向,并描述图像如何形成时,你才会接受成像结果。医生和技术人员知道怎样去说明结果,怎样去检测机器是否在正常工作;工科学生也能做到这些。

习题数量已经加倍,它们被标记为容易的习题(下标 1)和困难的习题(下标 2)及适合作为课题的习题,这类习题可由一个学生或一个小组完成。最后,COMSOL Multiphysics 中有更多技巧做了说明。

在本书的网站上,没有提供用于求解本书中例题的程序编码,因为作者相信你试图去重复本书的步骤时,你就是在进行学习。但是,在本书的网站上包含着求解某些习题所需

的材料,例如用于求解三维流动/扩散问题的几何形状。根据你的计算机的内存,以及能将多少内存分配给 COMSOL Multiphysics,某些三维问题可能无法在你的计算机上求解。本书的网站是<http://www.ChemEComp.com>。

致谢

在写作本书时,我由衷地感谢我班上的学生。有时,学生会教会我怎样使用先进的技术,而他们的又会又会导致最好的程序。在过去 10 年间,有超过 100 个本科研究生与我一起工作,他们的工作结果可在我的网站<http://faculty.washington.edu/finlayso> 和<http://courses.washington.edu/microflo> 上得到。化工系为本书的编写提供了激励津贴,该津贴由校友 Maurice Richford(1926 年学士)的纪念基金提供。没有这笔津贴,本书的第一版无法完成,当然也不可能进行修改。我的女儿 Christine Finlayson 作为第一版的技术编辑大大改善了 my 书面文件,由于她的努力使文本更为清晰;依然存在的混乱之处则是我的责任。我特别感谢特拉华大学的 Stanley Sandler 教授,因为他评阅了热力学方面的修改处理,这次我学到了很多! Comsol 公司和 Aspen Tech 公司的同仁提供了许多帮助,因为在过去几年中 COMSOL Multiphysics 和 Aspen Plus 都做了改进。我尤其感谢我的夫人 Pat,因这一编著比原计划花费了更多时间。她始终支持我,为使我能完成这本书作出了许多牺牲。在我重写此书时,抽出几个星期庆祝我们结婚 50 周年,我做得真是太棒了!

Bruce Finlayson

2011 年 10 月于西雅图

目 录

译者的话
序言

1 绪论	1
1.1 本书结构	2
1.1.1 代数方程组	2
1.1.2 过程模拟	2
1.1.3 微分方程组	3
1.1.4 附录	3
2 状态方程	5
2.1 状态方程——数学公式描述	5
2.2 用 Excel 求解状态方程(含一个未知数的单个方程)	8
2.2.1 用“单变量求解”求解	8
2.2.2 用“规划求解”求解	9
2.2.3 用“单变量求解”求解化学工程问题的实例	9
2.3 用 MATLAB 求解状态方程(含一个未知数的单个方程)	11
2.3.1 用 MATLAB 求解化学工程问题的实例	12
2.3.2 用 MATLAB 求解化学工程问题的另一个实例	13
2.4 用 Aspen Plus 处理状态方程	15
2.4.1 应用 Aspen Plus 的实例	15
2.4.2 混合物的摩尔体积	17
2.5 本章小结	20
2.6 习题	20
3 气-液平衡	23
3.1 闪蒸和相分离	23
3.2 等温闪蒸——方程的推导	24
3.2.1 应用 Excel 的实例	25
3.3 热力学参数	26
3.3.1 应用 MATLAB 的实例	26
3.3.2 用 Aspen Plus 的实例	27
3.4 非理想液体—热力学模型的检验	31
3.5 Aspen Plus 中的 NIST 热力学数据引擎	33

3.6	本章小结	35
3.7	习题	35
4	化学反应平衡	39
4.1	化学平衡表达式	39
4.1.1	用于燃料电池的氢的实例	40
4.1.2	用 Excel 求解	41
4.1.3	用 MATLAB 求解	42
4.2	含两个或多个方程的化学反应平衡	45
4.2.1	用 MATLAB 求解多个方程,几个未知数	45
4.2.2	用 Aspen Plus 求解化学反应平衡	48
4.3	本章小结	49
4.4	习题	49
5	含循环物流的物料衡算	52
5.1	数学公式描述	52
5.2	不含循环的实例	54
5.3	含循环的实例:序贯求解法和联立求解法的比较	56
5.4	用 Excel 求解简单物料衡算的过程模拟实例	57
5.5	用 Aspen Plus 求解简单物料衡算的过程模拟实例	58
5.6	用 Excel 求解包含化学反应平衡的过程模拟实例	58
5.6.1	迭代是否收敛?	60
5.6.2	扩充	60
5.7	本章小结	60
5.8	课堂练习	60
5.9	课堂讨论(先浏览本书网站上的习题 5-10)	60
5.10	习题	61
6	热力学和传质设备模拟	67
6.1	热力学	67
6.1.1	选择的指导原则	70
6.1.2	物性方法选择助手	70
6.1.3	热力学模型	71
6.2	实例:采用简捷法的多组分精馏	71
6.3	采用严格逐板法的多组分精馏	74
6.4	实例:填料塔吸收	76
6.5	实例:气体工厂产物分离	78
6.6	实例:附带灵敏度模块和设计规定模块的水煤气变换平衡反应器	80
6.7	本章小结	83
6.8	课堂练习	84

6.9 习题(用 Aspen Plus)	84
7 过程模拟	86
7.1 模型库	86
7.2 实例:合成氨过程	88
7.2.1 模型开发	88
7.2.2 模型求解	91
7.2.3 结果考察	92
7.2.4 检验热力学模型	93
7.2.5 公用工程费用	93
7.2.6 温室气体排放	94
7.3 收敛提示	95
7.4 优化	97
7.5 整体煤气化联合循环	99
7.6 纤维素制乙醇	100
7.7 本章小结	101
7.8 课堂练习	102
7.9 习题	102
8 化学反应器	109
8.1 反应器问题的数学公式描述	110
8.1.1 实例:活塞流反应器和间歇反应器	110
8.1.2 实例:连续搅拌釜式反应器	111
8.2 用 MATLAB 求解常微分方程组	111
8.2.1 简单例子	111
8.2.2 “Global”命令的应用	113
8.2.3 参数传递	114
8.2.4 实例:等温活塞流反应器	114
8.2.5 实例:非等温活塞流反应器	117
8.3 用 COMSOL Multiphysics 求解常微分方程组	119
8.3.1 简单例子	119
8.3.2 实例:等温活塞流反应器	120
8.3.3 实例:非等温活塞流反应器	121
8.4 有物质的量变化和可变密度的反应器问题	122
8.5 有传质限制的化学反应器	124
8.6 Aspen Plus 中的活塞流反应器	127
8.7 连续搅拌釜式反应器(CSTR)	130
8.7.1 用 Excel 求解	130
8.7.2 用 MATLAB 求解	130
8.7.3 CSTR 的多解	131

8.8	动态连续搅拌釜式反应器	132
8.9	本章小结	135
8.10	习题	135
9	一维传递过程	141
9.1	化学工程中的应用——数学公式描述	142
9.1.1	传热	142
9.1.2	扩散和反应	142
9.1.3	流体流动	143
9.1.4	非定态传热	144
9.2	COMSOL Multiphysics 介绍	145
9.3	实例:平板中的传热	145
9.3.1	用 COMSOL Multiphysics 求解	145
9.3.2	用 MATLAB 求解	148
9.4	实例:反应和扩散	149
9.4.1	参数解	150
9.5	实例:管内牛顿流体流动	151
9.6	实例:管内非牛顿流体流动	153
9.7	实例:动态传热	155
9.7.1	用 COMSOL Multiphysics 求解	155
9.7.2	用 MATLAB 求解	157
9.8	实例:线性吸附	159
9.9	实例:色谱	161
9.10	变压吸附	163
9.11	本章小结	164
9.12	习题	164
10	二维和三维流体流动	172
10.1	流体流动的数学基础	173
10.1.1	奈维-斯托克斯方程	173
10.1.2	非牛顿流体	174
10.2	无量纲化	175
10.2.1	选项一:缓慢流动	175
10.2.2	选项二:高速流动	176
10.3	实例:管内进口流	177
10.4	实例:非牛顿流体进口流	180
10.5	实例:微流体设施中的流动	181
10.6	实例:管内湍流	183
10.7	实例:管内启动流	186
10.8	实例:通过孔板的流动	187

10.9	实例:蛇管混合器内的流动	189
10.10	微观流体力学	190
10.10.1	层流的机械能衡算	193
10.10.2	收缩和扩张的压降	194
10.11	用于三维模拟的二维进口速度分布的产生	195
10.12	本章小结	197
10.13	习题	197
11	二维和三维传热和传质	204
11.1	对流扩散方程	205
11.2	无量纲方程	205
11.3	实例:二维传热	206
11.4	实例:有中孔的热传导	207
11.5	实例:微流体设施中的对流扩散	208
11.6	实例:与浓度相关的黏度	211
11.7	实例:黏性耗散	211
11.8	实例:化学反应	213
11.9	实例:壁面反应	213
11.10	实例:蛇管混合器内的混合	214
11.11	微流体力学	216
11.11.1	混合的特征	217
11.11.2	沿光程的平均浓度	217
11.11.3	Peclet 数	217
11.12	实例:三维 T 形传感器中的对流和扩散	218
11.13	本章小结	220
11.14	习题	220
附录 A	应用 Excel 的提示	227
A.1	引言	227
A.2	计算	228
A.3	标绘	229
A.4	输入和输出	229
A.5	报告	230
附录 B	应用 MATLAB 的提示	232
B.1	一般功能	232
B.1.1	屏幕格式	232
B.1.2	停止/关闭程序	233
B.1.3	m 文件和脚本	234
B.1.4	工作空间和信息传递	234

B. 1. 5	“Global”命令	234
B. 1. 6	显示工具	235
B. 1. 7	数据类别	236
B. 2	编程选项:输入/输出、循环语句、条件语句、计时和矩阵	236
B. 2. 1	输入/输出	236
B. 2. 2	循环语句	237
B. 2. 3	条件语句	237
B. 2. 4	计时信息	238
B. 2. 5	矩阵	238
B. 2. 6	矩阵乘法运算	238
B. 2. 7	元素对元素的计算	239
B. 2. 8	更多信息	239
B. 3	查找和修复错误	239
B. 4	矩阵的本征值	241
B. 5	计算积分	241
B. 6	样条插值	241
B. 6. 1	数据内插、计算多项式和标绘结果	242
B. 7	求解代数方程	242
B. 7. 1	用“fsolve”	242
B. 7. 2	用“fzero”或“fminsearch”求解代数方程(两者均包含在标准的 MATLAB 中)	243
B. 8	积分常微分方程初值问题	243
B. 8. 1	微分-代数方程	244
B. 8. 2	应用“ode45”和其他积分软件包的校核表	244
B. 9	标绘	245
B. 9. 1	简单标绘	245
B. 9. 2	向已有标绘添加数据	245
B. 9. 3	美化你的标绘	245
B. 9. 4	多个标绘	246
B. 9. 5	三维标绘	246
B. 9. 6	更复杂的标绘	246
B. 9. 7	在文本中使用希腊字母和符号	247
B. 9. 8	黑体、斜体和下标	247
B. 10	其他应用	247
B. 10. 1	用直线法标绘偏微分方程积分的结果	248
B. 11	输入/输出数据	248
B. 11. 1	与 COMSOL Multiphysics 间的输入/输出	251
B. 12	编写图形用户界面程序	251
B. 13	MATLAB 帮助	251
B. 14	MATLAB 的应用	252

附录 C 应用 Aspen Plus 的提示	253
C.1 引言	253
C.2 流程	254
C.2.1 模型库	254
C.2.2 在流程中放置单元设备	254
C.2.3 用物流连接单元设备	255
C.2.4 数据	255
C.2.5 设置	255
C.2.6 数据输入	255
C.2.7 规定组分	256
C.2.8 规定物性	256
C.2.9 规定输入物流	257
C.2.10 规定模块参数	257
C.3 运行问题	258
C.3.1 检查物流表	258
C.3.2 检查你的结果	258
C.3.3 改变条件	259
C.4 报告	259
C.4.1 将流程和物料、能量衡算传递到文字处理程序	259
C.4.2 编制你的报告	259
C.4.3 储存你的结果	260
C.4.4 获得帮助	260
C.5 先进的功能	260
C.5.1 流程分段	260
C.5.2 只进行物料衡算模拟和包含固体	261
C.5.3 Excel 和 Aspen 间的传递	261
C.5.4 模块摘要	261
C.5.5 计算器模块	261
C.5.6 Aspen 实例	262
C.6 分子图	263
C.7 Aspen Plus 的应用	263
附录 D 应用 COMSOL Multiphysics 的提示	264
D.1 基本 COMSOL Multiphysics 技术	264
D.1.1 打开屏幕	265
D.1.2 方程	265
D.2 规定问题和参数	267
D.2.1 物理	267
D.2.2 定义	267
D.2.3 几何体	267

D. 2. 4	物料	268
D. 2. 5	离散化	268
D. 2. 6	边界条件	269
D. 2. 7	网格	269
D. 3	求解和检查解	270
D. 3. 1	求解	270
D. 3. 2	标绘	270
D. 3. 3	发表高质量的图	271
D. 3. 4	结果	271
D. 3. 5	探针	271
D. 3. 6	数据集	271
D. 4	先进的功能	272
D. 4. 1	网格	272
D. 4. 2	传递到 Excel	274
D. 4. 3	与 MATLAB 动态链接	274
D. 4. 4	变量	274
D. 4. 5	动画	275
D. 4. 6	研究	275
D. 4. 7	帮助收敛	275
D. 4. 8	帮助动态问题	276
D. 4. 9	阶跃不连续性	276
D. 4. 10	帮助	277
D. 5	COMSOL Multiphysics 的应用	277
附录 E	数学方法	278
E. 1	代数方程组	278
E. 1. 1	连续替代法	278
E. 1. 2	Newton-Raphson 法	278
E. 2	常微分方程初值问题	280
E. 2. 1	Euler 法	280
E. 2. 2	Runge-Kutta 法	281
E. 2. 3	MATLAB 与 ode45 和 ode15s	281
E. 3	常微分方程边值问题	282
E. 3. 1	有限差分法	282
E. 3. 2	Excel 中的有限差分法	284
E. 3. 3	一维空间中的有限元法	284
E. 3. 4	初值法	286
E. 4	时间和一维空间的偏微分方程	287
E. 4. 1	有强对流的问题	288
E. 5	二维空间的偏微分方程	289