



高等学校规划教材

化工数学

第三版

周爱月 李士雨 主编

HUAGONG
SHUXUE

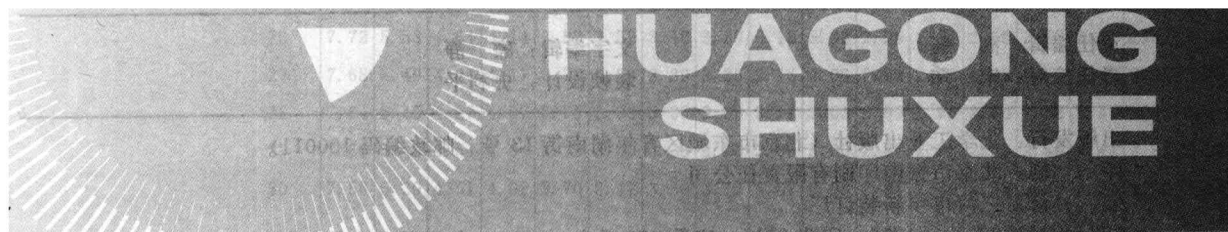


化学工业出版社

化工数学

第三版

周爱月 李士雨 主编



化学工业出版社

· 北京 · 仓 宝

本书是根据全国高校化学工程专业教学指导委员会所确定要求而编写的专业教材之一。“化工数学”课程是在高等数学、算法语言、物理化学、化工原理等课程基础上开设的一门强调与化工相结合的综合型应用数学。书中主要内容介绍化学、化工中常用的数学方法,并引入近代数学新进展在化工中的应用。前九章包括数学模型方法、实验数据处理、三种常用方程(代数方程——线性方程组及非线性方程与方程组;常微分方程;偏微分方程)的求解方法、场论、拉普拉斯变换以及概率论与数理统计。后五章有数据校正技术、图论、人工智能与专家系统、人工神经网络及应用、模糊数学及应用。每章均配有化工应用实例及习题。

为了便于读者使用,第三版尝试建立了教学资源库并陆续对其完善,由 Fortran、Matlab 和 Excel 编写的源程序代码及其使用说明可在此资源库下载,将免费提供给采用本书作为教材的院校使用。如有需要,请发电子邮件至 cipedu@163.com 获取,或登陆 www.cipedu.com.cn 免费下载。

本书为高等学校化学工程类专业用教材,同时适合于化学、石油炼制、冶金、轻工、食品、制药等专业大学教学选用,也可供有关研究、设计和生产单位科研、工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

化工数学/周爱月,李士雨主编.—3版.—北京:化学工业出版社,2011.7

高等学校规划教材

ISBN 978-7-122-11413-6

I. 化… II. ①周…②李… III. 化学工业-应用数学-高等学校-教材 IV. TQ011

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011)第 100549 号

责任编辑:高钰

文字编辑:廉静

责任校对:宋玮

装帧设计:史利平

出版发行:化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印刷:北京市振南印刷有限责任公司

装订:三河市宇新装订厂

787mm×1092mm 1/16 印张 26½ 字数 677 千字 2011 年 9 月北京第 3 版第 1 次印刷

购书咨询:010-64518888(传真:010-64519686) 售后服务:010-64518899

网址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书,如有缺损质量问题,本社销售中心负责调换。

定 价:49.00 元

版权所有 违者必究

第三版前言

Matlab 和 Excel 强大的计算功能和简单易学的特点逐渐使之成为常规科学计算的首选工具，而早期的 Fortran 语言在我国化工高等教育的教学计划中已经基本上见不到踪影，所以，第三版主要更新了第二、三、四章中的数值计算算法程序。

为了便于读者使用，第三版尝试建立了教学资源库并陆续对其完善，由 Fortran、Matlab 和 Excel 编写的源程序代码及其使用说明可在此资源库下载，将免费提供给采用本书作为教材的院校使用。如有需要，请发电子邮件至 cipedu@163.com 获取，或登陆 www.cipedu.com.cn 免费下载。

第三版中还精简了部分章节内容，更正了第二版中的一些错误。

第三版由李士雨策划，周爱月、李士雨主编，齐向娟编写了 Matlab 和 Excel 全部源程序代码，李士雨进行了程序审核。

由于编者水平所限，不足之处恳请读者批评指正。

作者

2011 年 6 月

第二版前言

本书是在 1993 年化学工业出版社出版的《化工数学》的基础上重新修订补充的，为第二版。新版《化工数学》具有以下特点。

(1) 较成熟

1993 年版本教材是在天津大学化工系“化工应用数学讲义”15 年教学实践基础上整理改编的，1993 年版本已有多所高校多年连续使用至今。

(2) 内容更新，知识面广

第二版将 1993 年版本进行扩充和更新，是为了适应面向 21 世纪人才培养和知识更新的需要。新增内容包括数据校正技术、图论、人工智能与专家系统、人工神经网络、模糊数学等。新增第九章概率论与数理统计属经典数学，是为了完善书的内容，扩大知识面。

(3) 实用，便于自学

本书以实用为目的，不追求全面的数学论证，每章在说明数学概念基础上配有大量化工应用实例详解。书末还提供数值方法例题的 FORTRAN 程序清单和计算结果。

全书由周爱月负责统编定稿。参加编写工作的有周爱月（第五章、第六章、第七章、第十章及程序清单），陈裕中（第四章、第八章），赵福龙（第二章），第三章由周爱月、陈裕中合编，李士雨（第一章、第十一章、第十二章），元英进（第十三章、第十四章），王永莉（第九章）。

第二章～第八章原版由戴干策主审，第一章、第九章～第十四章新篇章由王正欧主审。

由于编者水平有限，书中如有不妥之处敬请读者不吝赐教。

编者

2001 年 3 月

目 录

第一章 数学模型概论	1
1.1 模型	2
1.2 数学模型	2
1.3 建立数学模型的一般方法	6
习题	6
第二章 数据处理	7
2.1 插值法	7
2.1.1 概述	7
2.1.2 拉格朗日插值	8
2.1.3 差商与牛顿插值公式	12
2.1.4 差分与等距节点插值公式	15
2.1.5 分段插值法	18
2.1.6 三次样条插值函数	20
2.2 数值微分	24
2.2.1 用差商近似微商	25
2.2.2 用插值函数计算微商	26
2.2.3 用三次样条函数求数值微分	28
2.3 数值积分	31
2.3.1 等距节点求积公式 (Newton-Cotes 公式)	31
2.3.2 求积公式的代数精度	33
2.3.3 复化求积公式	34
2.3.4 变步长求积方法	37
2.3.5 求积公式的误差	38
2.3.6 龙贝格 (Romberg) 积分法	39
2.4 最小二乘曲线拟合	41
2.4.1 关联函数的选择和线性化	42
2.4.2 线性最小二乘法	44
2.4.3 非线性最小二乘法	58
习题	61
第三章 代数方程 (组) 的数值解法	66
3.1 线性方程组的直接解法	66
3.1.1 高斯消去法	66
3.1.2 高斯主元素消去法	69
3.1.3 高斯-约当消去法及矩阵求逆	71
3.1.4 解三对角线方程组和三对角块方程组的追赶法	72
3.1.5 LU 分解	76
3.1.6 平方根法	79
3.1.7 病态方程组和病态矩阵	80
3.2 线性方程组的迭代解法	82
3.2.1 雅可比迭代法	83
3.2.2 高斯-赛德尔迭代法	84
3.2.3 基本迭代法的收敛性分析	84
3.2.4 松弛迭代法 (SOR 迭代法)	87
3.3 非线性方程求根	89
3.3.1 二分法	90
3.3.2 迭代法	92
3.3.3 威格斯坦 (Wegstein) 法	96
3.3.4 牛顿法	97
3.3.5 弦截法	100
3.3.6 抛物线法 (Müller 法)	102
3.4 非线性方程组数值解	103
3.4.1 高斯-雅可比迭代法	103
3.4.2 高斯-赛德尔迭代法	104
3.4.3 松弛迭代法	105
3.4.4 威格斯坦法	106
3.4.5 牛顿-拉夫森法	106
习题	109
第四章 常微分方程数值解	112
4.1 引言	112
4.2 初值问题	113

4.2.1 尤拉法 (Euler Methods)	113	4.2.6 刚性方程组	136
4.2.2 龙格-库塔法 (Runge-Kutta Methods)	121	4.3 边值问题	139
4.2.3 线性多步法	127	4.3.1 打靶法	139
4.2.4 方法的比较	134	4.3.2 有限差分法	143
4.2.5 一阶联立方程组与高阶方程	134	习题	149
第五章 拉普拉斯变换	153		
5.1 定义和性质	153	5.2.3 海维塞德 (Heaviside) 展开式 ..	164
5.1.1 定义	153	5.2.4 卷积定理	167
5.1.2 拉氏变换的存在条件	153	5.3 拉氏变换的应用	168
5.1.3 性质	155	5.3.1 求解常微分方程	168
5.2 拉氏逆变换求解方法	162	5.3.2 求解线性差分方程	174
5.2.1 拉氏逆变换的复反演积分—— 梅林-傅立叶定理	162	5.3.3 求解差分微分方程	176
5.2.2 用部分分式法求拉氏逆变换	163	5.3.4 求解积分方程	178
		习题	179
第六章 场论初步	182		
6.1 数量场和向量场	182	6.4.5 散度定理	194
6.1.1 数量场	182	6.5 向量场的旋度	195
6.1.2 向量场	182	6.5.1 向量场的环量	195
6.2 向量的导数	183	6.5.2 向量场的旋度	196
6.2.1 向量对于一个纯量的导数	183	6.5.3 旋度的运算性质	199
6.2.2 向量的求导公式	184	6.5.4 斯托克斯定理	199
6.2.3 向量的偏导数	184	6.6 梯度、散度、旋度在柱、球坐标系的 表达式	202
6.3 数量场的梯度	186	6.6.1 球坐标系下梯度、散度、旋度及 拉普拉斯算符表达式	202
6.3.1 数量场的等值面	186	6.6.2 柱坐标系下梯度、散度、旋度及 拉普拉斯算符表达式	204
6.3.2 方向导数	186	6.7 场论在化工中的应用	205
6.3.3 数量场的梯度	187	6.7.1 三种常用的向量场	205
6.3.4 梯度的运算性质	188	6.7.2 流体运动方程	210
6.4 向量场的散度	190	6.7.3 热传导方程	211
6.4.1 向量场的通量	190	习题	212
6.4.2 向量场的散度	191		
6.4.3 散度的运算性质	193		
6.4.4 散度的应用——流体的连续性 方程	193		
第七章 偏微分方程与特殊函数	216		
7.1 引言	216	7.4 定解条件和定解问题	225
7.2 二阶偏微分方程分类	217	7.4.1 初始条件	225
7.3 典型方程的建立	218	7.4.2 边界条件	225
7.3.1 波动方程	218	7.4.3 定解问题的提法	228
7.3.2 热传导方程	221	7.5 线性迭加原理	228
7.3.3 稳态方程	224	7.6 分离变量法	229

7.7 非齐次边界条件的处理	237	7.9.3 贝塞尔函数化工应用实例	255
7.8 非齐次的泛定方程	240	7.9.4 勒让德方程及其解法	260
7.9 特殊函数及其在分离变量法中的 应用	243	7.9.5 勒让德多项式	263
7.9.1 贝塞尔方程及其解法	243	7.9.6 勒让德函数化工应用实例	266
7.9.2 贝塞尔函数	249	7.10 拉普拉斯变换法	269
		习题	272
第八章 偏微分方程数值解	280		
8.1 抛物型方程的差分解法	280	8.2 双曲型方程差分格式	297
8.1.1 显式格式	281	8.3 椭圆型方程的差分解法	298
8.1.2 隐式格式	282	8.3.1 五点差分格式	298
8.1.3 六点格式(Crank-Nicolson 法)	283	8.3.2 边界条件的处理	299
8.1.4 边界条件	287	8.3.3 不规则边界条件	304
8.1.5 联立方程组	288	习题	305
8.1.6 高阶近似法	294		
第九章 概率论与数理统计	308		
9.1 概率论基础	308	9.3.3 中心极限定理	332
9.1.1 随机事件及其概率	308	9.4 参数估计	333
9.1.2 随机变量及分布函数	309	9.4.1 数学期望与方差的点估计	333
9.1.3 随机变量的数字特征	317	9.4.2 估计量的评选标准	335
9.1.4 化工过程应用实例	322	9.4.3 参数的区间估计	336
9.2 统计基础	325	9.5 假设检验	340
9.2.1 总体和样本	326	9.5.1 单尾检验与双尾检验	341
9.2.2 样本的数字特征	326	9.5.2 关于平均值的检验	342
9.2.3 统计量	327	9.5.3 两个平均值差别的检验	344
9.3 大数定律及中心极限定理	330	9.5.4 关于方差 σ^2 的检验	346
9.3.1 切比雪夫不等式	330	9.5.5 比较两个总体的方差	347
9.3.2 大数定律	331	习题	348
第十章 数据校正技术	351		
10.1 绪论	351	10.2 稳态过程的数据校正	358
10.1.1 化工过程数据校正的意义及其应 用范围	351	10.2.1 稳态过程的数学模型	358
10.1.2 数据校正技术的发展与近况	351	10.2.2 线性问题求解	358
10.1.3 预备知识	352	10.2.3 化工过程数据的分类	368
第十一章 图论	372		
11.1 图的基本概念	372	11.4 树	377
11.2 图的矩阵表示	374	11.5 图的运算	380
11.2.1 关联矩阵	375	11.6 有向图	382
11.2.2 邻接矩阵	375	习题	384
11.3 赋权图与赋权图中的最短路径	375		

第十二章 人工智能与专家系统	385
12.1 基本概念	385
12.1.1 人工智能	385
12.1.2 知识	386
12.1.3 专家系统	386
12.2 知识的表示	387
12.2.1 产生式系统的基本结构	387
12.2.2 问题求解过程	388
12.2.3 对产生式系统的应用与评价	391
12.3 知识推理技术	391
12.3.1 深度优先搜索法	392
12.3.2 广度优先搜索法	392
12.3.3 最佳优先搜索	392
附录 1 Γ 函数	394
附录 2 拉普拉斯变换表	397
附录 3 向量和矩阵的范数	400
附录 4 概率函数分布表	403
参考文献	412

第一章 数学模型概论

从定性到定量是认识事物本质、发展科学的一般规律。将实际问题定量化需要数学，而把数学与实际联系起来的纽带是数学模型。

近几十年来，随着科学技术的迅速发展，特别是计算机技术的不断进步，数学的应用已渗透到经济、人口、生态、医学、物理和诸多工程技术领域，已成为发展高科技、提高生产力、实现优化决策、加强系统管理等方面不可缺少的工具。

从化工发展过程不难看出数学对化学工业所起的重要作用。

最初的化学过程（如酿酒、冶炼）都是手工作坊式生产，规模小，技术落后，经验操作，无数学模型。

20 世纪 20~30 年代，提出单元操作概念，建立了简单的定量关系，可以粗略地估算设备的性能。随着生产规模的日渐扩大，提出许多数学问题，但因计算技术落后，无法求解。

20 世纪 40~50 年代，尤其是 1946 年 Eckert 和 Mauohly 研制成第一台电子计算机以来，计算技术及程序设计语言得到迅速发展，许多化工中的计算问题得以解决。20 世纪 50 年代一些先进的西方企业中，化学工程师首先在老式的计算机（穿孔或卡片）上完成了闪蒸和精馏的计算机辅助计算，随后又应用 FORTRAN 语言进行不同单元操作的计算。1958 年 M W Kellogg 开发出第一个过程模拟软件，即 Flexible Flow Sheet，同期一些大公司如 Union Carbide Corp. 和 Standard Oil Co. 也推出了序贯连续法的过程模拟程序。化工技术逐渐由定性走向定量，有了很大发展。

20 世纪 60~70 年代，提出化工系统工程和化学反应工程概念，化工过程的定量化又上了一个新的台阶。化工系统工程的含义是将化工过程作为一个整体分析，寻求最优方案，化工过程模型化以及化工模型的求解技术得到了迅速发展，计算机辅助化工设计应用软件的开发和应用也以极高的速度发展，新的软件公司不断涌现，如 FLOWTRAN、CONCEPT、PROCESS、ASPEN 等。这些化工流程模拟软件的出现，使得对化工过程设计与分析的时间缩短，准确性提高，数学模型在化工界得到了普遍重视。

20 世纪 80~90 年代，由于计算机和数学方法的普遍应用，化工过程开发出现了三个可喜的趋势：即开发周期缩短、中试规模缩小和放大倍数增大，加快了化学工业的发展。现今一些大型的流程模拟软件，如 ASPEN PLUS、PRO II，已在许多大型石油化工企业、化工设计部门以及高等院校中投入使用。

可见，数学对化学工业发展所起的作用是巨大的，没有数学，就没有今天的化学工业。

数学应用的第一步是数学建模，即通过调查，收集数据、资料，观察和研究其固有的特征和内在规律，抓住问题的主要矛盾，提出假设，经过抽象和简化，建立反映实际问题的数量关系，也就是数学模型；然后，再运用数学的方法和技巧去分析和解决实际问题。这时，对数学模型的研究就相当于对实际系统的研究，改变各种参数进行计算，就相当于在实际系统中进行各种试验。这种方法被称为数学模拟，由于模拟计算需在计算机上进行，因而，也叫计算机模拟，或计算机仿真。由于这种方法较常规实验研究方法有着无法比拟的优点（易

于实现、容易操作、速度快、成本低、安全、可做灵敏度分析等),因而,受到广泛重视,并已在化工过程开发、过程设计、过程优化、过程控制等许多方面发挥重要作用。

本章概要介绍数学模型与建模的有关基本概念。

1.1 模型

一切客观存在的事物及其运动状态统称为实体或对象,对实体特征及变化规律的近似描述或抽象就是模型,用模型描述实体的过程称为建模或模型化。

按模型的表达形式,一般可粗略地分为实体模型和符号模型两大类。

实体模型包括:实物模型(如城市模型、工厂模型、建筑模型、作战沙盘、各类模型实验、化工实验等)和模拟模型。模拟模型是指用其他现象或过程来描述所研究的现象或过程,用模型性质来模拟原来的性质。例如,可用电流模拟热流和流体的流动。模拟模型可再分为直接模拟和间接模拟。直接模拟是指模拟模型的变量与原现象的变量之间存在一一对应的关系,例如用电网络模拟热传导系统,静电容量、电阻、电压、电流分别与热容量、热阻、温度差(温压)、热流量相对应。由于电系统的参数容易测量和改变,经常用电系统来模拟热学现象和过程。对间接模拟,模型的变量与原现象之间不能建立一一对应的关系。例如将某范围的地图画在均匀的图版上,再沿边界切开,可用称量地图板重量的办法,按比例计算该范围的面积。

符号模型:符号模型也称语言模型,包括数学模型、仿真模型(如分子结构图、化工流程图、地图、电路图等)及诸如音乐、美术等学科的符号模型,也包括用自然语言表达的直观描述式模型(如“水在常压下的沸点是 100°C ”)。

1.2 数学模型

数学模型是系统的某种特征的本质的数学表达式,即用数学式子(如函数式、代数方程、微分方程、微积分方程、差分方程等)来描述(表达、模拟)所研究的客观对象或系统在某一方面的存在规律。

数学模型有很多种,若按系统本身的性质可分为以下几类。

(1) 确定性数学模型和随机性数学模型

确定性模型中自变量与因变量具有确定的对应关系,随机模型则包含有随机变量,对于一个确定的输入,其输出(响应)不是一个确定的量值,而是一个概率分布。例如旋风分离器操作,流体粒子呈布朗运动,雷诺数 Re 很大时为湍流状态,管道内流动错综复杂,正向、返混、横向流线变化是随机的,流体粒子的运动特性只能用统计规律进行描述。

(2) 微观数学模型和宏观数学模型

微观数学模型描述系统在局部空间或瞬时存在的规律,模型方程通常为微分方程或差分方程。

宏观数学模型描述系统在整个空间或一段时间变化量的总和与其他量之间的关系,模型方程通常为积分式子、积分方程、联立方程组。

【例 1-1】 微观模型:溶液混合问题。

如图 1-1 所示, 设有一容器装有某种浓度的溶液, 现以流量 v_1 注入浓度为 C_1 的同样溶液, 假定溶液立即被搅匀, 并以 v_2 的流量流出这种混合后的溶液, 试建立容器中浓度与时间关系的数学模型。

解: 设容器中溶液溶质的浓度为 $C=C(t)$, 初始浓度为 C_0 , 初始体积为 V_0 。则在 t 时刻有如下关系 $CV - C_0V_0 = (v_1C_1 - v_2C_2)t$

$$\text{则} \quad \frac{d(CV)}{dt} = v_1C_1 - v_2C_2$$

这就是混合溶液的数学模型。

【例 1-2】 宏观模型: 精馏塔物料衡算。

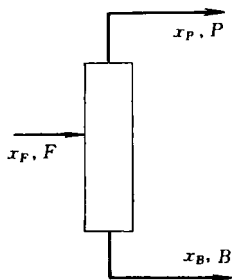


图 1-2 二元精馏塔示意图

图 1-2 为一二元精馏塔示意图, 进料流量为 F , 组成为 x_F , 塔顶出料流量为 P , 组成为 x_P , 塔釜出料流量为 B , 组成为 x_B , 对全塔做宏观物料衡算得

$$Fx_F = Px_P + Bx_B$$

$$F(1-x_F) = P(1-x_P) + B(1-x_B)$$

(3) 连续模型和离散模型

连续模型: 系统输入和输出是连续时间的函数 (只要求自变量连续, 不要求函数一定连续), 模型方程为微分方程。例 1-1 给出的模型就是一个连续性模型, 再如化工中著名的流体连续性方程也是一个连续模型。

离散模型: 系统输入和输出只是离散的瞬时取值, 或者说输入、输出函数是整标函数 (数列)。模型方程为差分方程。

【例 1-3】 离散模型: 溶液的逐步混合问题。

针对例 1.1 图 1-1 给出的情况, 现将连续输入、输出改为逐次输入、输出。即在每次混合时, 把 $u(k)$ ($k=1, 2, 3, \dots$) 升 A 种物质和 $100-u(k)$ 升 B 种物质加入到 900 升的这两种物质原有的混合物中, 搅拌均匀后, 再从中倒出 100 升新的混合物, 如此反复进行下去。试求每次混合后 A 种物质在整个混合物中的百分浓度。

解: 设第 k 次混合均匀后, A 物质在混合物中的浓度为 $y(k)$ 。显然, 第 k 次混合后 A 物质的总量等于第 $k-1$ 次混合后 900 升混合物中 A 的量与第 k 次新添加的量的和。即有

$$1000y(k) = 900y(k-1) + u(k)$$

$$\text{即} \quad y(k) = 0.9y(k-1) + 0.001u(k) \quad (k=1, 2, \dots)$$

【例 1-4】 离散模型: 常微分方程离散化。

$$\text{设有常微分方程} \quad \begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(0) = \eta \end{cases}$$

为求其数值解, 需将其离散化。令 $y' = \frac{y^{(k+1)} - y^{(k)}}{h}$, h 为步长, 则

$$\begin{cases} y^{(k+1)} = y^{(k)} + hf(x^{(k)}, y^{(k)}) \\ y^{(0)} = \eta \end{cases}$$

这个方程就是一个离散模型。

(4) 线性模型和非线性模型

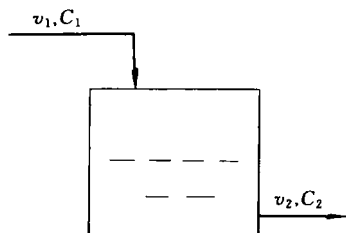


图 1-1 理想混合槽

如果系统的输入与输出呈线性关系,也就是说满足均匀性和叠加性,即如果 $x_1(t)$ 、 $x_2(t)$ 为系统的输入, $y_1(t)$ 、 $y_2(t)$ 为系统的输出,且

$$x_1(t) \rightarrow y_1(t) \quad x_2(t) \rightarrow y_2(t)$$

则

$$\alpha x_1(t) + \beta x_2(t) \rightarrow \alpha y_1(t) + \beta y_2(t)$$

该系统称为线性系统,模型称为线性模型。线性模型包括线性代数方程组、线性常微分方程、线性偏微分方程等。

【例 1-5】 线性模型 (线性代数方程组)。

用固定床反应器的拟均相二维模型求解乙苯脱氢反应器中沿径向反应物浓度分布时,得到一组有关沿反应器内径向六个点处乙苯转化率 x 的方程组

$$\left\{ \begin{array}{ll} x_1 - 0.333x_2 & = 0.0296 \\ 0.05x_1 - x_2 + 0.15x_3 & = -0.0356 \\ 0.075x_2 - x_3 + 0.125x_4 & = -0.0356 \\ 0.0833x_3 - x_4 + 0.1167x_5 & = -0.0356 \\ 0.0875x_4 - x_5 + 0.1125x_6 & = -0.0356 \\ 0.2x_5 - x_6 & = -0.0472 \end{array} \right.$$

这是一个线性模型。

不满足均匀性和叠加性的模型称为非线性模型。

【例 1-6】 非线性模型: 范德华方程。

$$\left(P + \frac{an^2}{V^2} \right) (V - nb) = nRT$$

(5) 集中参数模型和分布参数模型

集中参数模型是指因变量不随空间坐标变化,如理想混合反应器,物料在各点的状态相同,或者物料进入反应器后可迅速混合均匀,模型方程中自变量仅为时间。分布参数模型则指因变量不仅与时间有关,而且还与空间有关。集中参数模型为常微分方程,分布参数模型为偏微分方程。

(6) 定常数学模型和时变数学模型

若系统在初始条件给定的情况下,输出的形状取决于输入的形状,而与输入的时刻无关。设 $x(t)$ 为输入, $y(t)$ 为输出,即 $x(t) \rightarrow y(t)$,若输入滞后时间 T ,则输出亦滞后时间 T 。

$$x(t+T) \rightarrow y(t+T)$$

具有这种特性的系统为定常系统或时不变系统。显然系统的全部参数与时间无关,即参数为常数的系统为定常系统。反之,若参数为时间 t 的函数时,系统为时变系统。

定常数学模型用常系数(微分或差分)方程来表示,时变数学模型用变系数(微分或差分)方程来表示。

(7) 存储系统和非存储系统

如果系统任意瞬时 t 的输出仅与该瞬时的输入有关,具有这样性质的系统称为非存储(或无记忆)系统,相反,若系统在瞬时 t 的输出依赖于某个区间 $(t-T, t)$ 的输入,则系统称为存储系统(或有记忆)。 T 为存储长度。

由于非存储系统中在任意时刻 t 的输出只与 t 时刻的输入有关,与过去的状态无关。因而一般来说输入、输出之间是代数关系,常用代数方程来表示。反之,存储模型常用非代数方程表示。

上述分类小结于表 1-1。

表 1-1 数学模型分类

数 学 模 型	特 征	方 程 式
随机模型	系统有确定的输入时, 得到的输出是不确定的	随机方程
确定模型	系统有确定的输入时, 得到的输出是确定的	非随机方程
微观模型	系统在局部或瞬时范围内存在的规律	微分方程、差分方程
宏观模型	系统在全局或一段时间内存在的规律	联立方程、积分方程
线性模型	系统的输入输出满足均匀性和叠加性	各种线性方程
非线性模型	系统的输入输出不满足均匀性和叠加性	非线性方程
连续模型	系统的输入输出是连续时间的函数	微分方程等连续方程
离散模型	系统的输入输出是时间的整标函数	差分方程
集中参数模型	系统的输入能立刻到达系统内各点	常微分方程
分布参数模型	系统的输入要经一段时间才达到系统内各点	偏微分方程
定常模型	输出的形状取决于输入的形状, 和输入时间无关	各种常系数方程
时变模型	输出的形状与输入的形状和输入时间有关	各种变系数方程
非存储系统	输出仅与同时刻的输入有关	代数方程
存储系统	某时刻的输出依赖于到该时刻为止的某一区间上的输入	非代数方程

按建模方法不同, 可将数学模型分为机理模型、经验模型和半经验模型。

机理模型是指根据物理、化学原理推导得出的数学模型, 经验模型则是指由实验观测数据归纳而得到的模型, 介于二者之间的模型为半机理模型, 或半经验模型, 或混合模型。

机理模型反映过程本质, 因而适用范围较广。经验模型由于模型参数是在一定范围内实验数据归纳得出的, 因而不宜大幅度外推。在条件许可的情况下, 应尽可能建立机理模型。

按系统与时间的关系可分为动态模型和静态模型。静态模型也叫稳态模型, 模型中不包含时间变量; 动态模型也叫非稳态模型, 它考察过程随时间的动态变化规律。

根据模型的定量程度, 可将模型分为数值模型、数量级模型、定性模型和布尔模型四种。

数值模型: 即众所周知的严格定量的数学模型, 如代数方程、微分方程等。

数量级模型: 这类模型比数值模型低一级, 它并不关心参数实际的、精确的值, 只须知道其值在某一数量级范围内就足够了。

定性模型: 这类模型注重变量之间的关系, 只能从定量的意义上指出变化的方向, 不能给出变化的大小。如“提高泵的转速可提高流率”, 建立了转速与流率之间的定性关系, 但转速提高了, 流率提高多少并不知道。这类模型的例子还可举出许多。这种模型用于过程的识别与控制是有效的。

布尔模型: 即简单的“是一否”模型。它们能指出某一关系是否存在, 但不能给出关系的实质, 没有关于变量符号或大小的信息。布尔模型的一个例子就是关联矩阵。如图 1-3 所述化工过程, 可用关联矩阵表示过程流股与设备之间的连接关系。

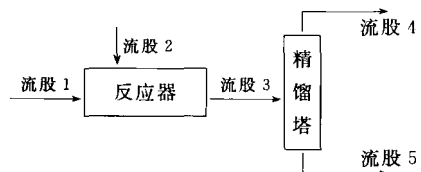


图 1-3 化工流程

现用关联矩阵表示过程流股与设备之间的连接关系

$$\begin{array}{c}
 \text{反应器} \quad \text{精馏塔} \\
 \begin{array}{l}
 \text{流股 1} \\
 \text{流股 2} \\
 \text{流股 3} \\
 \text{流股 4}
 \end{array}
 \begin{bmatrix}
 1 & 0 \\
 1 & 0 \\
 1 & 1 \\
 0 & 1
 \end{bmatrix}
 \end{array}$$

其中：“1”表示过程流股与设备连接，“0”表示不连接。

化学工程中绝大多数的建模和模拟工作是数值的，然而，随着人工智能的出现，工程师已开始认识到了定性方法的价值，并已开始应用，如数量级模型和定性模型。

定性模型与数值模型在建模与数学处理上有很大差异，在本书中，除特别说明外，数学模型是指数值模型。

1.3 建立数学模型的一般方法

一个理想的数学模型须是既能反映系统的全部主要特征，同时在数学上又易于处理。即它满足以下两点。

① 可靠性：在允许的误差范围内，它能反映出该系统的有关特性的内在联系。

② 适用性：它须易于数学处理和计算。复杂模型的求解是困难的，同时，复杂模型有时会因简化不当而将一些非本质的东西带入模型，使得模型不能真正反映系统的本质。因此，模型既要精确，又要求它简单。

建立模型的方法大致有两种：实验归纳法和理论分析法。本书中第二章介绍的最小二乘法就是典型的实验归纳法，第六章及第七章介绍的就是理论分析法。

由理论分析建立数学模型的步骤有三步。

① 通过对系统的仔细观察分析，根据问题的性质和精度的要求，作出合理性假设、简化，抽象出系统的物理模型。

② 在此基础上确定输入、输出变量和模型参数，建立数学模型。一般来说，在不降低精度的条件下，模型变量的数目越少越好。通常可以这样处理来减少变量的数量：将相似变量归结为一个变量；将对输出影响小的变量视为常数。

③ 检验和修正所得模型。检验模型的手段是将模型计算结果与实验结果做对比，修正模型时，可从以下几个方面考虑模型的缺陷：模型含有无关或关系不大的变量；模型遗漏了重要的有关变量；模型参数不准确；数学模型的结构形式有错；模型反映系统的精确度不够。

习 题

1. 何谓数学模型？它在化工中的作用有哪些？
2. 解释下列概念，说出对应的数学模型形式：随机模型、确定模型、微观模型、宏观模型、线性模型、非线性模型、连续模型、离散模型、集中参数模型、分布参数模型、定常模型、时变模型、存储系统、非存储系统。
3. 动态模型与静态模型的区别是什么？
4. 理想的数学模型是怎样的？
5. 如何对所建立的模型进行修正？

第二章 数据处理

数据处理涉及面很广，本章只介绍处理数据常用的数值方法——插值、数值微分、数值积分以及如何应用最小二乘法由实验数据建立经验或半经验的数学模型。

简单的线性插值是大家熟知且广为应用的。例如查物性手册某熔盐混合物性质如表 2-1 所示。这样的数据表称为列表函数。意思是密度、导热系数和黏度是随温度变化的函数，但又不知道其间的确切的函数关系式。由分析数据可知，密度和导热系数基本上是温度的线性函数，但黏度与温度就不是线性关系了。譬如想要知道 450K 时的黏度，可以用 443K 和 453K 两温度下的黏度值作线性内插值得 $110.10\text{Pa} \cdot \text{s}$ 。这个数值不大准确，因为我们把 443K 和 453K 之间黏度作为线性变化处理了。为了较精确地求取任意温度（非列表节点值）下的黏度，可以利用列表函数中较多点的已知函数值，建立一个近似的黏度与温度的函数关系式。利用这个函数关系式来求取任意温度下的黏度，就可能提高精确度。这就是插值要讨论的问题，但是插值方法的应用价值并不局限于此。例如造船中放大样，汽车、飞机外型设计中，给定一批离散样点，要求作出一条光滑曲线或光滑曲面，使其通过或尽可能靠近这些样点，以满足设计要求，并据此进行切割或机械加工。这里用到的数学方法称为样条插值。此外在计算机上处理连续变量问题时，往往需要将变量进行离散化处理。例如数值积分、数值微分、差分法解微分方程都是以插值方法为基础的。本章最后一部分讨论经验、半经验模型建模最常用的方法——最小二乘法。其中重点是线性最小二乘法作曲线拟合和参数估值，非线性最小二乘法在化工应用中也具有重要意义，这里只作初步介绍并附有实例。各主要数值方法应用例题均给出 Fortran 及 Matlab 和 Excel 程序及运行结果见数学资源库。

表 2-1 熔盐混合物性质

温度 /K	密度 /(kg/m^3)	导热系数 /[$\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$]	黏度 /($\text{Pa} \cdot \text{s}$)	温度 /K	密度 /(kg/m^3)	导热系数 /[$\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$]	黏度 /($\text{Pa} \cdot \text{s}$)
423	1976	0.4427	177.58	453	1951	0.4392	104.66
433	1967	0.4415	146.51	463	1943	0.4380	90.26
443	1959	0.4403	122.79	473	1934	0.4368	78.79

2.1 插值法

2.1.1 概述

化工物性数据或数学手册附录中各种函数表，如三角函数表、对数表、特殊函数表等，将自变量与函数关系通过表格形式给出。这些列表函数的特点是：① 自变量与函数值一一对应（不允许多值）；② 函数值具有相当可靠的精确度；③ 自变量与函数间的解析表达式

可能不清楚,如由实验测定的物性数据,或者函数关系的解析表达式非常复杂不便于计算,如贝塞尔函数是一无穷级数, Γ 函数是一广义积分式。插值问题是通过列表函数中若干点数据构造一个比较简单的函数来近似表达原来的函数。所以插值法就是寻求函数近似表达式的一种方法。近似函数的类型可以有多种不同选法,但最常用的是代数多项式。因为它形式简单,也便于求导和积分。这样的插值法称为代数插值法,本章只讨论代数插值法。

代数插值问题可以这样描述:给定函数 $y=f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上 $n+1$ 个互异点, $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$ 上的函数值 $y_i=f(x_i) (i=0,1,2,\cdots,n)$, 建立一个次数不超过 n 的代数多项式

$$P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n \quad (2-1)$$

使满足

$$P_n(x_i) = y_i \quad (i=0,1,\cdots,n) \quad (2-2)$$

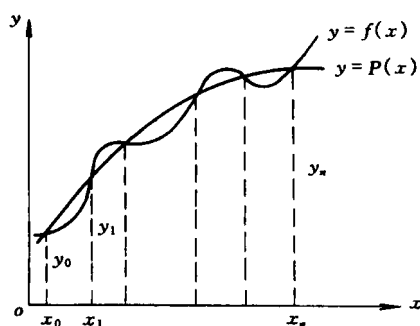


图 2-1 多项式插值

其中 a_i 为实数,称 $P_n(x)$ 为函数 $f(x)$ 的插值多项式, $x_0, \cdots, x_n$ 为插值节点, $[a,b]$ 为插值区间。

插值法的几何意义是:在给定节点函数值的 $n+1$ 个已知点上,建立一条多项式函数曲线 $P_n(x)$,使它严格通过这些已知函数点,以此多项式曲线来近似原函数曲线 $f(x)$ 。如图 2-1 所示。

显然在节点上,有 $P_n(x_i) = f(x_i)$, $(i=0,1,\cdots,n)$,但在区间 $[a,b]$ 内其他位置,一般都有误差。令

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) \quad (2-3)$$

$R_n(x)$ 称为插值多项式的余项。

容易证明插值问题的解是唯一的。假如有两个 n 次多项式 $y_1=P_n(x)$ 与 $y_2=q_n(x)$ 均满足条件式(2-2),那么对于 $r(x)=P_n(x)-q_n(x)$,有

$$r(x_i) = 0 \quad i=0,1,2,\cdots,n$$

即不超过 n 次的多项式 $r(x)$ 将有 $n+1$ 个零点,由此可以断定 $r(x) \equiv 0$,唯一性得证,即:满足式(2-2)的插值多项式(2-1)是唯一存在的。

2.1.2 拉格朗日插值

2.1.2.1 线性插值

所谓“线性插值”就是以直线方程作为插值多项式,即式(2-1)中 $n=1$ 的情况。

假定已知区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 的端点处的函数值 $y_k=f(x_k)$, $y_{k+1}=f(x_{k+1})$,要求线性插值多项式 $L_1(x)$,使它满足

$$L_1(x_k) = y_k$$

$$L_1(x_{k+1}) = y_{k+1}$$

$y=L_1(x)$ 的几何意义就是通过两点 (x_k, y_k) 与 (x_{k+1}, y_{k+1}) 的直线近似表示 $y=f(x)$ 。如图 2-2 所示, $L_1(x)$ 的表达式可直接用两点公式给出

$$L_1(x) = \frac{x_{k+1}-x}{x_{k+1}-x_k} y_k + \frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k} y_{k+1} \quad (2-4)$$

由两点式看出, $L_1(x)$ 是由两个线性函数

$$l_k(x) = \frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}, l_{k+1}(x) = \frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k} \quad (2-5)$$

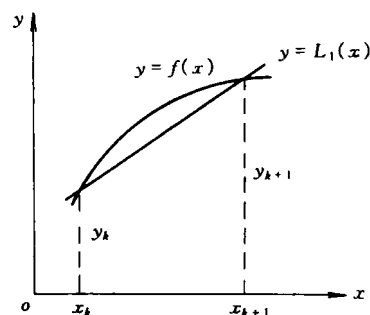


图 2-2 线性插值法的几何意义