

高等学校教学用书

化工原理

优化设计与解题指南

阮奇 叶长燊 黄诗煌



化学工业出版社
教材出版中心

高等学校教学用书

化工原理优化设计与解题指南

阮奇 叶长桑 黄诗煌

化学工业出版社
教材出版中心
·北京·

(京)新登字 039 号

图书在版编目(CIP)数据

化工原理优化设计与解题指南/阮奇, 叶长桑,
黄诗煌. —北京:化学工业出版社, 2001.9
高等学校教学用书
ISBN 7-5025-3351-6

I . 化… II . ①阮… ②叶… ③黄… III . ①化工
原理-高等学校-课程设计②化工过程-最优设计-高
等学校-教学参考资料③化工原理-高等学校-解题
IV . TQ02

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 048786 号

高等学校教学用书
化工原理优化设计与解题指南

阮 奇 叶长桑 黄诗煌

责任编辑:何 丽

责任校对:顾淑云

封面设计:于 兵

*

化学工业出版社 出版发行
教材出版中心

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

发行电话:(010)64918013

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

北京市彩桥印刷厂印刷

三河市延风装订厂装订

开本 787×1092 毫米 1/16 印张 24 字数 594 千字

2001 年 9 月第 1 版 2001 年 9 月北京第 1 次印刷

印 数:1-4000

ISBN 7-5025-3351-6/G·904

定价:36.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者,本社发行部负责退换

序 言

化工原理是化学工程与工艺及相近专业的一门主干课,在培养学生的素质与能力方面起着举足轻重的作用。本书编者从事化工原理教学多年,积累了丰富的教学经验,取得了较好的教学效果。编者将最优化技术融入化工原理课程设计教学实践中,在教学内容的改革上有所突破,并经多年教学实践证明对培养学生树立工程最优化的观点,提高学生综合应用知识的能力、数学建模的能力及应用计算机的能力,效果显著,这是本书的一大特色。解题指南部分是编者多年化工原理课程教学经验的结晶,计算题与概念题并重,注意题型分析、归纳,强调解题方法的总结、解题思维的训练、解题思路的开拓、解题能力的提高是本书的另一特色。此外,还应用 CAI 课件等现代化教学手段提高化工原理课程教学质量。相信本书的出版能对化工原理课程的教与学起到推动作用,对工程技术人员也有所启发。

谭无思

2001 年 4 月

前 言

最优化技术是一门新兴的应用性很强的技术，它是研究在一定条件下如何用最小的代价获得最佳的效果。近年来，随着计算机技术的迅猛发展与普及，最优化技术在化工领域的应用越来越广泛，越来越多的化学工程设计问题希望通过适当的数学方法处理，经由计算机的计算得到最优设计的效果。因此，如何在教学中培养学生的优化意识，使学生初步掌握最优化技术，让学生在走出校门之后能够应用最优化技术去分析和解决工程设计问题是新世纪高等教育面临的重要问题。为提高人才的培养质量，作者以既传授知识更注重培养和提高学生的科学素质与综合能力的教学思想为指导，从1994年开始引入工程经济观点、工程最优化技术和计算机辅助设计技术，在国内首先进行“化工原理课程优化设计”的教学研究与实践。近四年，作者又运用现代化知识和技术创新设计手段，利用可视化语言 Visual Basic 5.0 和多媒体制作软件 Authorware 5.0，在国内首先开发成功“化工原理课程优化设计多媒体 CAI 课件”，并将课件应用于化工原理课程优化设计教学实践。课程优化设计及 CAI 课件的开发与应用，在教学内容、方法、手段的改革上取得重要突破，经多年的教学实践证明，对培养学生的科学素质与综合能力效果显著。“化工原理课程优化设计的教学研究与实践”教育改革项目获得2001年国家级高等教育教学成果二等奖。作者将该成果的主要内容加以总结、提炼，编写了本书的第一篇——化工原理优化设计。主要内容包括常用工程数值方法、单变量和多变量最优化方法、列管换热器、多效蒸发系统、吸收塔、精馏塔、干燥器的优化设计和优化设计多媒体 CAI 课件简介等九章。第一篇的主要对象是希望用数值方法和最优化方法解决化工单元过程优化设计问题的有关专业高年级学生和工程技术人员，对他们而言掌握这些方法的应用比了解这些方法的数学理论显得更为重要。因此，第一篇对数学方法不作详细的推导论证而侧重其应用，重点讲述这些方法的基本原理、方法本身的介绍、使用这些方法时应该注意的问题，给出了各种方法的 FORTRAN 程序及部分方法的程序框图，突出主要化工单元优化问题的分析、数学模型的建立、优化方法的具体应用。第一篇的内容可作为高等院校化工类及相近专业学生的化工原理课程设计教材。

本书第二篇的内容是化工原理解题指南，包括流体流动、流体输送机械、机械分离、传热、蒸发、吸收、精馏、干燥等八章。每章由两部分组成，一是知识要点复习，二是典型例题分析。知识要点复习部分不是各章节知识点的简单罗列，而是将作者长期积累的教学经验、体会融合其中进行编写，对各章的重点、难点、学习线索进行分类归纳、整理总结，便于读者对各章主要知识点的复习记忆、加深理解，提高运用知识点去分析和解决问题的能力。典型例题分析部分主要围绕课程的重点、难点来选取题材，设计型与操作型题目并重，定量计算为主，兼顾定性分析。典型例题分析部分不是单纯的题目解答，而是在解答过程穿插分析，探索一题多解，引导一题多变，其中许多解题方法体现了作者独特的见解，是作者多年教学经验的结晶。作者力图通过典型例题的解答分析，使读者能够举一反三，触类旁通，达到训练解题思维、开拓解题思路、提高解题能力的目的。第二篇各章都附有一定数量的习题供读者练习，习题后附有参考答案，便于读者自行检测。第二篇的内容可与《化工原理》教材配套使用或作为教学参考书。主要读者对象是高等院校化工类及相关专业本科、专

科学生考研、自学考试、成教专科及专升本考生。

本书由阮奇、叶长燊、黄诗煌编著。第2、4、5、7、10、11、13、14、15、16章由阮奇执笔，并负责全书统稿；第3、8、9、12和17章由叶长燊执笔；第1、6章由黄诗煌执笔。十分感谢：浙江大学博士生导师谭天恩教授为本书作序；福州大学博士生导师张济宇教授和王良恩教授对本书进行的精心审定和指导；福州大学沈斐敏教授、吴燕翔教授、陈建中教授和董声雄教授的热情支持、帮助和指导；福州大学“教学改革基金”和“学校教材出版基金”的资助；福州大学化工原理教研室李徽、李玲、林晓勤、施小芳等老师为书稿的录入与校对所做的大量工作。

鉴于作者的水平及经验有限，书中不足和错误在所难免，欢迎广大读者和同行批评指正。

编 者

2001年6月于福州大学

内 容 提 要

本书共两篇 17 章。

第 1 篇是化工原理优化设计,包括工程数值方法、单变量和多变量最优化方法以及列管换热器、多效蒸发、吸收塔、精馏塔、干燥器的优化设计和优化设计多媒体 CAI 课件简介等 9 章。数值方法和最优化方法部分,在阐述原理的基础上侧重介绍工程应用并配有各种算法的 FORTRAN 程序。优化设计部分则详细介绍各种化工单元过程优化设计目标函数的建立与求解,引入工程最优化技术和计算机技术进行化工原理课程优化设计,在教学内容、方法、手段的改革上取得重要突破,对培养和提高学生的科学素质与综合能力效果显著。

第 2 篇是化工原理解题指南,包括流体流动、流体输送机械、机械分离、传热、蒸发、吸收、精馏、干燥等 8 章。每章由两部分组成,一是知识要点复习,二是典型例题分析。知识要点部分总结了各章的重点、难点、学习线索,并对其进行分类归纳。典型例题分析部分主要围绕课程的重点、难点来选取题材,并进行解答分析。设计型与操作型题目并重,定量计算为主兼顾定性分析,强调解题思路的开拓、解题思维的训练、解题方法的总结、解题能力的提高是本书的鲜明特色。

本书可作为化工、炼油、轻工、食品、制药、环保等专业高等院校、高等专科学校教学用书,也可供考研、自学考试、成教专科及专升本考生选用及相关专业工程技术人员参考。

“化工原理优化设计”获得 2001 年国家级高等教育教学成果二等奖。

目 录

第一篇 化工原理优化设计

第1章 常用工程数值方法	1	3.2 随机试验法	41
1.1 线性方程组的直接解法	1	3.2.1 随机试验法基本思路	41
1.1.1 高斯-约旦消元法	1	3.2.2 随机试验法算法的实现	42
1.1.2 追赶法	3	3.2.3 圆形蒸汽管路最佳保温层厚度的确定	44
1.1.3 LDL ^T 分解法	4	3.3 拉格朗日乘法	46
1.2 非线性方程求根	5	3.3.1 拉格朗日乘法基本思路	46
1.2.1 牛顿迭代法	5	3.3.2 拉格朗日乘法算法的实现	46
1.2.2 弦截法	6	3.3.3 沉降槽最大容积设计	47
1.3 最小二乘法	7	参考文献	48
1.3.1 直线拟合最小二乘法	7	第4章 列管换热器优化设计	49
1.3.2 多项式的最小二乘拟合法	9	4.1 列管式换热器优化设计的目标函数	49
1.3.3 非线性最小二乘法	11	4.1.1 独立变量的选取	50
1.4 三次样条插值法	17	4.1.2 单位传热面积功率损失与对流传热膜系数之间的定量关系	52
1.4.1 方法说明	17	4.2 目标函数的求解	55
1.4.2 三次样条插值法子程序	18	4.2.1 最优对流传热膜系数 α_1 、 α_0 和最优换热介质(冷流体)出口温度 t_2 的计算	55
1.4.3 程序中变量和函数说明	18	4.2.2 最优传热面积 A_{opt} 的计算	56
1.5 数值积分	19	4.2.3 最优的换热介质流率 $W_{u,opt}$ 和最优的年总费用 J_{min}	56
1.5.1 牛顿-柯特斯公式	20	4.2.4 管程最优结构尺寸的确定	56
1.5.2 复化辛普生公式	21	4.2.5 壳程最优结构尺寸的确定	56
1.5.3 变步长辛普生公式	21	4.3 优化设计算例	58
1.5.4 高斯型求积公式	22	参考文献	59
参考文献	24	第5章 并流多效蒸发系统优化设计	60
第2章 单变量函数最优化的直接搜索法	25	5.1 并流多效蒸发系统常规设计的数学模型	60
2.1 搜索区间的确定	25	5.1.1 工艺流程	60
2.2 缩短搜索区间的一种方法	26	5.1.2 系统物料衡算	60
2.2.1 菲波拿契(Fibonacci)法	27	5.1.3 系统热量衡算	61
2.2.2 黄金分割法(0.618法)	27	5.1.4 各效传热面积的计算	63
2.3 源程序	29	5.1.5 汽液相平衡方程	64
2.4 逆流冷却器最佳冷却水出口温度	30	5.1.6 饱和水蒸气焓与汽化潜热的计算	66
参考文献	32		
第3章 多变量约束优化方法	33		
3.1 复合形法	33		
3.1.1 问题的提出	33		
3.1.2 复合形法基本思路	33		
3.1.3 复合形法算法的实现	35		
3.1.4 串联管路的最佳组合	39		

5.2 常规设计模型求解	66	第7章 精馏塔优化设计	97
5.2.1 系统物料衡算和热量衡算方 程组	66	7.1 精馏塔优化设计的目标函数	97
5.2.2 系统物料衡算和热量衡算方程组 的矩阵形式	67	7.1.1 J_1 的数学模型	97
5.2.3 迭代法结合矩阵法简介	68	7.1.2 J_2 的数学模型	100
5.2.4 新算法的收敛性	69	7.1.3 J_3 的数学模型	101
5.2.5 计算实例	70	7.2 目标函数的求解	103
5.2.6 求解常规设计模型的一种计算机 辅助算法	70	7.2.1 间接蒸汽加热时目标函数的 求解	103
5.3 并流多效蒸发系统优化设计的目标 函数	72	7.2.2 直接蒸汽加热时目标函数的 求解	109
5.3.1 年生蒸汽费用 J_1	73	7.3 精馏塔优化设计算例	110
5.3.2 蒸发器年折旧维修费用 J_2	73	附录一 精馏塔优化设计任务书	112
5.3.3 冷凝水闪蒸器年折旧维修费用 J_3	73	附录二 汽液相平衡数据	112
5.3.4 真空系统费用 J_4	74	参考文献	113
5.4 目标函数的求解	74	第8章 干燥器优化设计	114
5.4.1 优化设计新算法	74	8.1 干燥器优化设计数学模型	114
5.4.2 优化设计算例	76	8.1.1 干燥器年总费用 J	114
5.4.3 优化设计结果讨论	77	8.1.2 干燥设备年投资折旧费用 G_D	115
附录 多效蒸发系统优化设计任务书	77	8.1.3 空气年预热费用 G_{Heat}	115
参考文献	78	8.1.4 风机年运转费用 G_P	116
第6章 吸收塔优化设计	79	8.1.5 干燥器年散热损失费用 G_L	116
6.1 模型建立	79	8.2 干燥器优化设计工艺分析	116
6.1.1 吸收塔塔体和平台扶梯年折旧及 维修费用 J_1	79	8.2.1 逆流回转圆筒干燥器工艺分析	116
6.1.2 吸收塔填料年折旧费用 J_2	80	8.2.2 并流回转圆筒干燥器工艺分析	120
6.1.3 离心泵年折旧和维修费用及操作 费用 J_3	80	8.2.3 并流喷雾干燥器工艺分析	121
6.1.4 风机年折旧和维修费及操作 费用 J_4	82	8.3 干燥器优化设计算例	125
6.1.5 吸收剂费用 J_5	83	8.3.1 逆流回转圆筒干燥器优化设计 算例	125
6.2 吸收塔优化设计工艺参数计算	83	8.3.2 并流回转圆筒干燥器优化设计 算例	125
6.2.1 低浓度吸收塔工艺参数计算	84	8.3.3 并流喷雾干燥器优化设计算例	125
6.2.2 高浓度吸收塔工艺参数计算	91	8.3.4 干燥系统辅助设备设计	126
6.3 目标函数求解	92	附录一 回转干燥器优化设计任务书	129
6.3.1 决策变量分析	92	附录二 并流喷雾干燥器优化设计任 务书	129
6.3.2 费用参数选取	93	参考文献	130
6.4 辅助设备选型	93	第9章 化工原理课程优化设计多媒体 CAI 系列课件	131
6.4.1 塔内件	93	9.1 课件主要功能简介	131
6.4.2 离心泵和风机选型	93	9.2 课件安装与卸载	132
6.5 吸收塔优化设计算例	94	9.2.1 化工原理课程优化设计 CAI 系列 课件的安装要求	132
附录 填料吸收塔优化设计任务书	95	9.2.2 安装	132
参考文献	95	9.2.3 卸载	133

9.3 课件的使用	133
9.3.1 精馏塔优化设计 CAI 课件的 使用	133

9.3.2 化工原理课程优化设计多媒体学 习课件的使用	134
--------------------------------------	-----

第二篇 化工原理解题指南

第 10 章 流体流动	136
10.1 流体流动知识要点	136
10.1.1 流体静力学基本方程式	136
10.1.2 压力的单位与基准	136
10.1.3 压力测量	137
10.1.4 流体的速度、体积流量、质量 流量及质量流速之间关系	139
10.1.5 稳定流动时的连续性方程	140
10.1.6 实际流体的柏努利方程	140
10.1.7 流体流过直管的摩擦阻力	140
10.1.8 摩擦系数	141
10.1.9 流体通过非圆形管的摩擦 阻力	141
10.1.10 流体通过管件及阀门的摩擦 阻力(局部摩擦阻力)	142
10.1.11 流体输送机械消耗的功率	142
10.1.12 简单管路计算	142
10.1.13 复杂管路计算	144
10.1.14 流量测量	146
10.2 流体流动典型例题分析	147
10.2.1 流体静力学	147
10.2.2 流体流动基本问题分析	149
10.2.3 简单管路计算	153
10.2.4 复杂管路计算	161
10.2.5 典型综合例题分析	166
10.2.6 不稳定流动	168
习题	170
第 11 章 流体输送机械	174
11.1 流体输送机械知识要点	174
11.1.1 离心泵的主要性能参数	174
11.1.2 离心泵的特性曲线	175
11.1.3 影响离心泵特性的因素分析	175
11.1.4 离心泵的工作点与流量调节	176
11.1.5 离心泵的组合操作	179
11.1.6 离心泵的安装高度	180
11.1.7 离心泵的选择	182
11.1.8 往复泵的性能参数、特性曲线 与流量调节	182
11.1.9 离心通风机的性能参数、特性	

曲线与风机选择	184
11.2 流体输送机械典型例题分析	185
习题	194
第 12 章 机械分离	196
12.1 机械分离知识要点	196
12.1.1 球形颗粒重力沉降	196
12.1.2 球形颗粒离心沉降	198
12.1.3 过滤	199
12.2 机械分离典型例题分析	203
12.2.1 重力沉降	203
12.2.2 离心沉降	205
12.2.3 过滤	206
12.2.4 沉降与过滤操作型问题分析	209
习题	212
第 13 章 传热	214
13.1 传热知识要点	214
13.1.1 热传导知识要点	214
13.1.2 对流传热知识要点	215
13.1.3 辐射传热知识要点	217
13.1.4 总传热速率方程	218
13.1.5 传热效率与传热单元数	221
13.1.6 传热单元长度与传热单元数	222
13.2 热传导典型例题分析	225
13.3 辐射传热典型例题分析	227
13.4 换热器的设计型计算	229
13.4.1 设计型计算的命题方式	230
13.4.2 设计型问题的计算方法	230
13.4.3 设计型计算中参数的选择	230
13.4.4 设计型计算典型例题分析	230
13.5 换热器的操作型计算	236
13.5.1 操作型计算的命题方式	236
13.5.2 操作型问题的计算方法	237
13.5.3 传热过程的调节	237
13.5.4 操作型计算典型例题分析	237
13.6 换热器操作型问题定性分析法	250
13.6.1 对数平均推动力法	250
13.6.2 传热单元长度与传热单元数法 (H-NTU 法)	250
13.7 不稳定传热(间歇传热)典型例题	

分析	252	16.1.2 物料衡算关系与操作线方程	308
习题	255	16.1.3 q 线方程 (进料方程) 及进料热	
第 14 章 单效蒸发	258	状况对 q 线和操作线的影响	310
14.1 单效蒸发知识要点	258	16.1.4 回流比的影响及选择	312
14.1.1 单效蒸发物料衡算	258	16.1.5 提馏段操作线方程的一种简便	
14.1.2 单效蒸发热量衡算	258	求法	315
14.1.3 蒸发器总传热速率方程	259	16.1.6 理论塔板数的求法	316
14.1.4 蒸发汽液相平衡关系 (汽液温		16.1.7 理论板的增浓度及液汽比对理	
度关系)	259	论板分离能力的影响	318
14.2 单效蒸发典型例题分析	261	16.1.8 全塔效率与单板效率	318
习题	264	16.1.9 直接蒸汽加热	319
第 15 章 吸收	266	16.1.10 复杂精馏塔	320
15.1 吸收知识要点	266	16.2 精馏计算典型例题分析	322
15.1.1 亨利定律	266	习题	345
15.1.2 传质速率方程	267	第 17 章 干燥	347
15.1.3 吸收塔计算基本公式	268	17.1 干燥知识要点	347
15.1.4 吸收计算若干问题讨论	271	17.1.1 湿空气性质	347
15.1.5 解吸塔计算	275	17.1.2 湿度图	348
15.2 吸收与解吸设计型问题分析	277	17.1.3 干燥物料衡算	351
15.2.1 吸收与解吸设计型计算命题	277	17.1.4 干燥热量衡算	352
15.2.2 吸收与解吸塔设计型计算典型		17.1.5 湿空气出口状态的确定	353
例题分析	278	17.1.6 物料中水分性质	355
15.3 吸收与解吸操作型问题分析	292	17.1.7 恒定干燥条件下的干燥速率与	
15.3.1 吸收与解吸操作型计算命题	292	干燥时间	355
15.3.2 吸收与解吸操作型问题定性分		17.1.8 干燥器热效率	357
析方法与典型例题	292	17.2 干燥计算典型例题分析	358
15.3.3 吸收与解吸操作型计算典型例		17.2.1 湿空气性质	358
题分析	297	17.2.2 干燥过程在湿度图上的表示	360
习题	305	17.2.3 干燥物料衡算与热量衡算	361
第 16 章 精馏	308	17.2.4 干燥速率与干燥时间	367
16.1 精馏知识要点	308	习题	370
16.1.1 二元理想溶液汽液相平衡方		第二篇的参考文献	371
程式	308		

第一篇 化工原理优化设计

第 1 章 常用工程数值方法

传统的化工原理课程设计是一种经验的设计方法,其不仅设计手段落后,而且已不符合现代工业生产中工程经济的观点。而我们近年来实行化工原理课程优化设计,对其各单元操作系统都提出了新的数学模型,这些数学模型都要用到计算机连续迭代优化求解,显然,传统的化工原理课程设计中的图解积分、手工查图等方法已不适用于计算机连续计算,因此有必要用数值积分、拟合的多项式代替旧的图解积分、手工查图法,才能保证计算机计算过程的连续性,因此化工原理课程优化设计自然离不开常用的一些工程数值方法。

化工原理课程优化设计中常用到的工程数值方法有线性方程组的求解、非线性方程的求根、最小二乘法、插值法以及数值积分,本章主要介绍以上五种工程数值方法。

1.1 线性方程组的直接解法

1.1.1 高斯-约旦消元法

1.1.1.1 方法说明

对于 n 阶线性方程组

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (1-1)$$

令 $a_{in+1} = b_i, i = 1, 2, 3 \cdots n$, 写成矩阵形式

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{1n+1} \\ a_{2n+1} \\ \vdots \\ a_{nn+1} \end{bmatrix} \quad (1-2)$$

高斯-约旦消元法是逐次消去一个未知数。由于原方程在运算后便失去作用,因此这里用所求得的新元素代替原方程组元素,可以节省计算机内存,消元结果使得原方程式(1-2)最终变换为一个等价的方程组,即

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{1n+1} \\ a_{2n+1} \\ \vdots \\ a_{nn+1} \end{bmatrix} \quad (1-3)$$

故 n 阶线性方程组的最终解为 $X = [a_{1n+1}, a_{2n+1}, \cdots, a_{nn+1}]$ 。现以四阶方程组为例,说明其求解过程。将四阶方程组写成增广矩阵形式

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & \cdots & a_{15} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & \cdots & a_{25} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & \cdots & a_{35} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & \cdots & a_{55} \end{bmatrix} \quad (1-4)$$

如果 $a_{11} \neq 0$ (若 $a_{11} = 0$, 可以通过方程次序互换, 使得 $a_{11} \neq 0$), 将第一行元素除以 a_{11} , 再乘以 $-a_{i1}$ ($i=2, 3, 4$) 与第 i 行各元素相加, 把新得到的值作为第 i 行的元素值, 可得

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12} & a_{13} & a_{14} & \cdots & a_{15} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & a_{24} & \cdots & a_{25} \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & \cdots & a_{35} \\ 0 & a_{42} & a_{43} & a_{44} & \cdots & a_{55} \end{bmatrix} \quad (1-5)$$

若 $a_{ii} \neq 0$ ($i=2, 3, 4$), 则同样按以上方法可以消去对角线的下三角元素, 可得增广矩阵为

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12} & a_{13} & a_{14} & \cdots & a_{15} \\ 0 & 1 & a_{23} & a_{24} & \cdots & a_{25} \\ 0 & 0 & 1 & a_{34} & \cdots & a_{35} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & a_{55} \end{bmatrix} \quad (1-6)$$

式 (1-4) 转化为式 (1-6) 实际上是高斯消元法。接下来对式 (1-6) 进行处理, 先以 $a_{22} = 1$ 为主元, 将第二行元素乘以 $-a_{12}$ 后加到第一行去, 则 a_{12} 也消为零元素, 再以 $a_{33} = 1$ 为主元, 该行元素乘以 $-a_{13}$ 后加到第一行使得 $a_{13} = 0$, 最后以 $a_{44} = 1$ 为主元, 该行乘以 $-a_{14}$ 加到第一行, 可使 $a_{14} = 0$; 用类似方法可以消去对角线元素的上三角元素, 最终可得到式 (1-3) 的矩阵形式。

1.1.1.2 高斯-约旦消元法子程序

```

SUBROUTINE GAUSSYUEDAN(A,N)          10 CONTINUE
REAL A(N,N+1)                        A(N,N+1) = A(N,N+1)/A(N,N)
DO 10 K=1,N-1                        DO 50 I=1,N
DO 20 J=K+1,N+1                      50 A(I,I) = 1
A(K,J) = A(K,J)/A(K,K)               DO 60 I=1,N-1
20 CONTINUE                          DO 70 J=I+1,N
DO 30 I=K+1,N                        A(I,N+1) = A(I,N+1) - A(I,J)*A(J,N+1)
DO 40 J=K+1,N+1                      70 CONTINUE
A(I,J) = A(I,J) - A(I,K)*A(K,J)     60 CONTINUE
40 CONTINUE                          RETURN
30 CONTINUE                          END

```

1.1.1.3 程序中变量说明

N ——整型变量, 输入参数, 为线性方程组的阶数;

A ——实型 $N \times (N+1)$ 二维数组, 输入参数, 存放矩阵的系数和常数列的值, 方程最终的解存放于数组 A 的第 $N+1$ 列。

例 1-1 三效并流蒸发系统优化设计中, 将 $x_0 = 0.106$ (质量分数, 下同) 的 NaOH 水溶液蒸发至 $x_3 = 0.3$ 。已知液面高度 $l = 1.5\text{m}$, 进料量 $F_0 = 24000\text{kg/h}$, 进料温度 $t_0 = 80^\circ\text{C}$, 料

液比热容 $c_0 = 3.77 \text{ kJ}/(\text{kg} \cdot ^\circ\text{C})$, 各效传热系数分别为 $K_1 = 1.5 \text{ kW}/(\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ 、 $K_2 = 1 \text{ kW}/(\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$ 、 $K_3 = 0.56 \text{ kW}/(\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$, 系统每年运行 7200h, 其他设计参数见文献 4。当生蒸汽温度 $T_0 = 151^\circ\text{C}$, 冷凝器中二次蒸汽温度 $T_K = 59.6^\circ\text{C}$, 不考虑冷凝水闪蒸, 按常规等面积原则, 求出生蒸汽用量 D_1 及各效蒸发水分量 W_1 、 W_2 、 W_3 (单位: kg/h)。

解: 文献 4 经过推导可得到 D_1 、及 W_1 、 W_2 、 W_3 满足下面的线性方程组关系 (方程组各系数为最后一次迭代值)

$$\begin{aligned} 0.948 D_1 - W_1 &= 2352.82 \\ 0.901 W_1 - W_2 &= -758.97 \\ 0.058 W_1 + 0.834 W_2 - W_3 &= -1257.41 \\ W_1 + W_2 + W_3 &= 15520 \end{aligned}$$

用高斯-约旦消元法可解得上述线性方程组未知数的值, 求得: $D_1 = 7720.21 \text{ kg}/\text{h}$, $W_1 = 4963.13 \text{ kg}/\text{h}$, $W_2 = 5228.76 \text{ kg}/\text{h}$, $W_3 = 5328.10 \text{ kg}/\text{h}$ 。

1.1.2 追赶法

在精馏塔优化设计中, 计算理论板数时要用到物质的相平衡关系, 虽然化工热力学中有许多计算汽液平衡的方程 (如 NRTL 方程), 但比较复杂。此时可以根据实验数据用三次样条插值法求出相平衡曲线上未知实验点的数值, 用三次样条插值法时会遇到解三对角线性方程组的问题, 可以用追赶法来求解三对角线性方程组。

1.1.2.1 方法说明

三对角线性方程组形式如下

$$\begin{cases} b_1 x_1 + c_1 x_2 = d_1 \\ a_k x_{k-1} + b_k x_k + c_k x_{k+1} = d_k, \quad k = 2, 3, \dots, n-1 \\ a_n x_{n-1} + b_n x_n = d_n \end{cases} \quad (1-7)$$

由式 (1-7) 可知, 系数矩阵 A 中有 $a_{ii} = b_i$, $a_{i,i+1} = c_i$, $a_{i,i-1} = a_i$, ($i = 1, 2, 3 \dots n$), 其中, $a_{nn+1} = c_n = 0$, $a_{10} = a_1 = 0$ 。这样矩阵 A 中有大量零元素使得消元计算变得相当简单, 按照上述高斯消元法的消元原则对式 (1-7) 消元可得

$$\begin{aligned} c_1 &\leftarrow c_1/b_1, \quad d_1 \leftarrow d_1/b_1 \\ s &= b_k - a_k c_{k-1} \\ c_k &\leftarrow c_k/s, \quad d_k \leftarrow (d_k - a_k d_{k-1})/s, \quad k = 2, 3, \dots, n-1 \end{aligned}$$

这样, 原方程组可化为等价方程组

$$\begin{cases} x_1 + c_1 x_2 = d_1 \\ x_k + c_k x_{k+1} = d_k, \quad k = 2, 3, \dots, n-1 \\ (b_n - a_n c_{n-1}) x_n = (d_n - a_n d_{n-1}) \end{cases} \quad (1-8)$$

由式 (1-8) 从后向前进行回代, 并将解存放到列向量 D 中, 则

$$\begin{aligned} d_n &\leftarrow \frac{d_n - a_n d_{n-1}}{b_n - a_n c_{n-1}} \\ d_k &\leftarrow d_k - c_k d_{k+1}, \quad k = n-1, n-2, \dots, 1 \end{aligned}$$

1.1.2.2 追赶法子程序

```
SUBROUTINE ZGF(N,A,B,C,D)          C(1) = C(1)/B(1)
REAL A(N),B(N),C(N),D(N)          D(1) = D(1)/B(1)
```

```

DO 10 K=2,N-1                                (B(N)-A(N)*C(N-1))
S=B(K)-C(K-1)*A(K)                            DO 20 K=N-1,1,-1
C(K)=C(K)/S                                    D(K)=D(K)-C(K)*D(K+1)
D(K)=(D(K)-D(K-1)*A(K))/S                    20 CONTINUE
10 CONTINUE                                    RETURN
D(N)=(D(N)-A(N)*D(N-1))/                     END

```

1.1.2.3 程序中变量说明

- N——整型变量，输入参数，存放已知节点数；
A——实型一维数组，输入参数，存放三对角矩阵系数 a_{ii-1} ；
B——实型一维数组，输入参数，存放三对角矩阵系数 a_{ii} ；
C——实型一维数组，输入参数，存放三对角矩阵系数 a_{ii+1} ；
D——实型一维数组，输入输出参数，存放三对角矩阵常数列和方程组的解。

1.1.3 LDL^T分解法

1.1.3.1 方法说明

LDL^T分解法是一种简化的LU分解法，其系数矩阵满足 $A = A^T$ 。该方法实质将系数矩阵 A 分解得到 $A = LDL^T$ 的形式，写成矩阵形式为

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & d_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & l_{21} & \cdots & l_{n1} \\ & 1 & \cdots & l_{n2} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & 1 \end{bmatrix} \quad (1-9)$$

式中矩阵 D 和 L 的元素分别为

$$d_1 = a_{11} \quad (1-9a)$$

$$l_{i1} = a_{i1}/d_1, \quad i = 2, 3, \cdots, n \quad (1-9b)$$

当 $j = 2, 3, \cdots, n$ 时有

$$d_j = a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 d_k \quad (1-9c)$$

$$l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_k l_{jk}) / d_j, \quad i = j+1, \cdots, n, j \neq n \quad (1-9d)$$

将式 (1-9) 用于解对称的线性方程组 $AX = B$ ，有

$$y_1 = b_1 \quad (1-10a)$$

$$y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k, \quad i = 2, 3, \cdots, n \quad (1-10b)$$

$$x_n = y_n / d_n \quad (1-11a)$$

$$x_i = \frac{y_i}{d_i} - \sum_{k=i+1}^n l_{ki} x_k, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1 \quad (1-11b)$$

由式 (1-9)、式 (1-10) 和式 (1-11) 的计算方法可得到 LDL^T分解法的子程序。

1.1.3.2 LDL^T分解法的子程序

```

SUBROUTINE LDLT(A,N,C)                        L(1,1)=A(1,1)
REAL A(N,N+1),C(N)                            DO 10 I=2,N
REAL D(N),L(N,N),Y(N)                        L(I,1)=A(I,1)/D(1)
D(1)=A(1,1)                                  10 CONTINUE

```

```

DO 20 J=2,N
SUMD=0.0
DO 30 K=1,J-1
SUMD=SUMD+L(J,K)**2*D(K)
30 CONTINUE
D(J)=A(J,J)-SUMD
IF(J.EQ.N)GOTO 20
DO 40 I=J+1,N
SUML=0.0
DO 50 K=1,J-1
SUML=SUML+L(I,K)*D(K)*L(J,K)
50 CONTINUE
L(I,J)=(A(I,J)-SUML)/D(J)
40 CONTINUE
20 ONTINUE
DO 60 I=1,N
Y(I)=A(I,N+1)
60 CONTINUE

DO 65 I=2,N
SUMY=0.0
DO 80 K=1,I-1
SUMY=SUMY+L(I,K)*Y(K)
80 CONTINUE
Y(I)=Y(I)-SUMY
65 CONTINUE
C(N)=Y(N)/D(N)
DO 90 I=N-1,1,-1
SUMX=0.0
DO 110 K=I+1,N
SUMX=SUMX+L(K,I)*C(K)
110 CONTINUE
C(I)=Y(I)/D(I)-SUMX
90 CONTINUE
RETURN
END

```

1.1.3.3 程序中变量说明

- A——实型 $N \times (N+1)$ 的二维数组，输入参数，存放矩阵的系数和常数列的值；
N——整型变量，输入参数，为对称矩阵的阶数；
C——实型一维数组，输出参数，存放对称线性方程组的解；
D——实型一维数组，计算中间参数，存放矩阵 D 对角线元素的值；
L——实型 $N \times N$ 的二维数组，计算中间参数，存放矩阵 L 元素的值。

1.2 非线性方程求根

1.2.1 牛顿迭代法

1.2.1.1 方法说明

牛顿迭代法是解非线性方程 $f(x) = 0$ 常用方法之一。如图 1-1 所示，假设方程 $f(x) = 0$ 有一个实根 x^* 。取一个初值 x_0 ，过 x_0 作 x 轴垂线交于曲线 $f(x)$ 于 P 点，过 P 点作曲线 $f(x)$ 的切线并与 x 轴相交，其坐标为 x_1 ，如果 $|x_1 - x_0| < \epsilon$ ，则方程根 $x^* = x_1$ ，否则按类似方法再过 x_1 作 x 轴垂线交于曲线 $f(x)$ 于 P_1 点，过 P_1 点作曲线 $f(x)$ 的切线并交 x 轴于 x_2 ，这样一直到相邻的两次 $|x_{k+1} - x_k| < \epsilon$ 为止，方程的根 $x^* = x_{k+1}$ 。牛顿迭代法的格式为

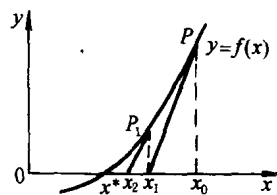


图 1-1 牛顿迭代法示意图

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k)/f'(x_k), k=0,1,2,\dots \quad (1-12)$$

式中 x_k, x_{k+1} ——第 $k, k+1$ 次求得的方程近似根。

只要导数 $f'(x)$ 易得，初值适当，就可以很快地用牛顿迭代法求出非线性方程 $f(x) = 0$ 的根。

1.2.1.2 牛顿迭代法子程序

```

SUBROUTINE NEWTON(X0, EPS, LMAX)          GOTO 10
L = 1                                     20 X0 = X
10 X = X0 - F(X0)/PDF(X0)                RETURN
IF (ABS(X - X0) .LE. EPS) GOTO 20        END
X0 = X                                    FUNCTION F(X)
L = L + 1                                 F = f(x)
IF (L .GE. LMAX) THEN                    END
WRITE(*, *) 'CANNOT GET RESULT'          FUNCTION PDF(X)
GOTO 20                                    PDF = f'(x)
ENDIF                                      END

```

1.2.1.3 程序中变量和函数说明

X0——实型变量，输入参数，调用时存放迭代初值，返回方程实根的近似值；

EPS——实型变量，输入参数，控制精度要求；

LMAX——整型变量，输入参数，最多迭代次数，若返回'CANNOT GET RESULT'，则无解；

F——子程序名，求函数 $f(x)$ 的值，由用户自编；

PDF——子程序名，求函数 $f(x)$ 的导数值，由用户自编。

1.2.2 弦截法

1.2.2.1 方法说明

当函数 $f(x)$ 的导数不易求得，可以用弦截法来解非线性方程 $f(x) = 0$ 的根。如图 1-2 所示，取两个初值点 $[x_0, f(x_0)]$ 、 $[x_1, f(x_1)]$ ，过两点的连线可以与 x 轴交于一点 x_2 ，若 $f(x_2) = 0$ ，则方程解为 $x^* = x_2$ ；若 $f(x_2) \cdot f(x_1) > 0$ ，则用 x_2 代替 x_1 ， $f(x_2)$ 代替 $f(x_1)$ ；若 $f(x_2) \cdot f(x_1) < 0$ ，则用 x_2 代替 x_0 ， $f(x_2)$ 代替 $f(x_0)$ ；再对新得到的两个点用以上方法继续迭代，直到相邻两次值满足 $|x_{k+1} - x_k| < \epsilon$ 为止，弦截法的迭代格式为

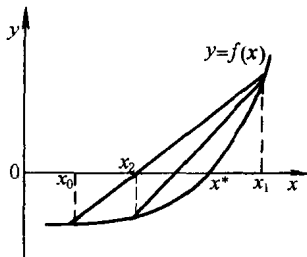


图 1-2 弦截法示意图

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})} f(x_k), k = 1, 2, 3 \dots \quad (1-13)$$

式中 x_{k-1}, x_k, x_{k+1} ——第 $k-1, k, k+1$ 次求得的方程近似根。

弦截法收敛速度比牛顿迭代法慢，但在每次迭代中只需计算一次函数值，又不要对函数 $f(x)$ 求导，对初值 x_0 和 x_1 要求不高，是工程计算中非线性方程求根常用的方法。

1.2.2.2 弦截法子程序

```

SUBROUTINE XJF(X0, X1, EPS, DLTA)        FF = F(X)
10 F0 = F(X0)                            IF (FF .EQ. 0) GOTO 30
F1 = F(X1)                                IF ((FF * F1) .LT. 0) THEN
IF ((F0 * F1) .GT. 0) THEN                X0 = X1
X0 = X0 - DLTA                            F0 = F1
X1 = X1 + DLTA                            X1 = X
GOTO 10                                    F1 = FF
ENDIF                                      GOTO 20
20 X = X1 - F1 * (X1 - X0) / (F1 - F0)    ELSE
IF (ABS(X - X1) .LE. EPS) GOTO 30        X1 = X

```