

化工数学方法

第二版

〔英〕V.G.詹森 G.V.杰弗里斯

化学工业出版社

化工数学方法

第 二 版

[英] V. G. 詹森 G. V. 杰弗里斯

邵德荣等译

化学工业出版社

本书系统地叙述化工数学方法,并辟专章介绍化工用的数值计算方法及一些典型化工过程的计算逻辑框图。全书共13章,内容大体上包括三部分,1~5章、第8章为基础数学,主要有常微分方程、级数解法、偏微分方程,并引入一些基本数学概念;6~7章、第13章为工程数学,有拉普拉斯变换、矢量分析和最优化;9~12章为计算数学,主要讲述化学工程领域中用电子计算机计算时常用的数值方法。书中选编了大量的工程实例和例题,书末附有习题,对读者掌握和运用化工数学方法颇有帮助。

本书除主译者外,胡熙恩译第8章,顾丽珍译第11、12章,清华大学应用数学系李庆扬副教授校阅全书译稿。

本书深入浅出,简明易懂,例题较多,可作为高等院校化工类专业的教学参考书,亦可作为化学化工科学工作者和工程技术人员的参考书。

Mathematical Methods in Chemical Engineering

Second Edition

V. G. Jenson G. V. Jeffreys

Academic Press Inc. (London) Ltd 1977

化 工 数 学 方 法

第 二 版

邵德荣等译

化学工业出版社 出版

(北京和平里七区十六号楼)

化学工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行

开本 $850 \times 1168 \frac{1}{32}$ 印张 $18 \frac{3}{4}$ 字数 534 千字 印数 1—6,800

1982年11月北京第1版 1982年11月北京第1次印刷

统一书号 15063·3423 定价 2.30 元

译 序

本书是应用数学方面的著作,在目前,它是一本比较系统、比较全面地从数学角度讲述化工数学方法的著作之一。

该书比较注重于纯数学的严谨性,但又顾及实际应用,因而写得比较简要,实用性较强。本书涉及的内容广泛,陈述清楚,在基础数学的水平上系统地介绍化学工程中涉及的各种主要数学方法。作者通过化工科学各分支中所遇到的一些实际问题列举了大量适用性的例题,以推理和实例演示相结合的方式阐述基本原理和分析方法。此外,书中引进不少新概念、新方法。例如为应用数字计算机,详细介绍了各种有关的数值计算方法和程序设计框图,并讲述了近代化工系统工程和自动控制领域中日益广泛应用的最优化技术。遗憾的是本书欠缺数理统计方面的内容。尽管如此,它仍不失是一本比较新颖、比较实用的化工数学著作。

随着我国科学技术事业和社会主义四个现代化建设的进展,特别是随着电子计算机的应用日益扩大,广大化学化工科学技术工作者迫切希望学习并试图更多地应用数学方法,以便更有效地探索化工过程的规律性和解决实际工作中的课题。我国目前尚缺少这类书籍,为此翻译本书以供读者系统地学习和实际应用。本书各章具有相对独立性,读者可以根据需要选读有关章节。

本书在翻译过程中得到清华大学化学与化学工程系及核能技术研究所许多同志的关心和帮助,在此谨致谢意。

限于译者的实践经验和业务水平,时间又较仓促,译文的缺点和错误一定不少,热忱希望读者批评指正。

邵 德 荣
1980 年于清华大学

第 二 版 序

本书第一版出版于 1963 年,当时作者在伯明翰大学化学工程系任教,这本书是为系内大学生和研究生写的教程。当时大多数大学工程系开设这门课程多半是以解析法为主,因而只介绍用于台式计算机的简单数值方法。现在,广泛应用大型数字计算机,为求解相当复杂的问题,特别是最优化研究提供了其它一些方法。此外,目前世界各国几乎普遍采用国际单位制(SI)。鉴于这些进展,有必要对第一版作一番修订。

在第二版中,对第 1 章到第 10 章稍微作了压缩,并在第 7 章中引入了边界层理论。第 11 章完全重写,着重于介绍计算机计算方法,但并不局限于一种特定的计算机语言。为此,第 11 章及其以后的各章尽可能地用逻辑框图来说明。我们希望这将有助于读者能够根据自己习用的语言来编写程序。第 12 章作了修改,目的是为读者学习第 13 章最优化方法作准备,第 13 章完全改写。最后增补了供读者练习的习题,并附有解题的参考文献。

全书一般采用国际单位制,但在个别情况下,由于用“秒”表示时间不方便而改用“分”或“小时”表示。我们相信这种灵活是允许的。

V. G. 詹森 G. V. 杰弗里斯

1977 年 6 月于伯明翰

第 一 版 序

在化学工业中,新工艺过程的开发变得越来越复杂,代价也越来越高。但是,如果能够可靠地进行新工艺过程的研究和开发,则最终的设计将更精确,工厂的运行会更经济。在这一设想的各个方面,作为定量语言的数学都起着重要的作用。因此,数学方法的训练对化学工程师来说是极为重要的。本书就是基于这些考虑编写的。应当强调的是。我们的目的是以适合于工程师的形式介绍数学,而不是为数学家讲授工程。对于纯数学家,严格的证明本身就是目的,而对于化学工程师来说,证明只不过是达到目的的一种手段。因此,本书仅仅简要地证明定理的正确性,使读者对自己在解决工程问题中所使用的数学方法确信无疑。此外,作者试图从繁复庞杂的大量数学方法中选出对化学工程有用的方法。

本书的内容基于伯明翰大学化学工程系设置的各种大学生和研究生的课程。许多运算的例题是从系内进行的科学研究工作中选出的,并补充有选自化学工程文献的若干习题。本书的某些章节(特别是第4、5章)几乎完全是讲数学,但也尽可能地说明它们在化学工程上的应用。

这本书是我们在伯明翰大学化学工程系任教期间编写的。作者希望本书将能促进化学工程师们更多地应用数学方法来解决各种化学工程问题。

作者对 J. T. 戴维斯(Davies)教授给予的鼓励, F. H. 加纳(Garner)教授和 S. R. M. 埃利斯(Ellis)教授对编写本书时给予的关心和指导致以衷心的感谢。

V. G. 詹森 G. V. 杰弗里斯

1963年6月于伯明翰

目 录

译序

第二版序

第一版序

第1章 问题的数学描述	1
1.1. 引言	1
1.2. 问题描述	1
1.3. 两级溶剂萃取	3
1.4. N 级溶剂萃取	4
1.5. 预热进料的简单水蒸馏釜	5
1.6. 非稳态操作	8
1.7. 搅拌槽内盐的积累	10
1.8. 管状导体的径向传热	14
1.9. 密闭锅加热	16
1.10. 因变量和自变量、参数	17
1.11. 边界条件	18
1.12. 正负号规则	19
1.13. 列方程方法概要	21
第2章 常微分方程	23
2.1. 引言	23
2.2. 阶和次	23
2.3. 一阶微分方程	24
2.4. 二阶微分方程	33
2.5. 线性微分方程	41
2.6. 联立微分方程	64
2.7. 结论	71
第3章 级数解法	72
3.1. 引言	72
3.2. 无穷级数	72

3.3. 幂级数	77
3.4. 夫罗比尼斯法	82
3.5. 贝塞尔方程	99
3.6. 贝塞尔函数的性质	106
第4章 复代数	112
4.1. 引言	112
4.2. 复数	112
4.3. 阿尔岗图	113
4.4. 主值	114
4.5. 在阿尔岗图上的代数运算	115
4.6. 共轭数	117
4.7. 棣模弗定理	118
4.8. 三角-指数恒等式	119
4.9. 复变量	120
4.10. 复变量的导数	121
4.11. 解析函数	122
4.12. 奇点	124
4.13. 复变函数的积分和柯西定理	128
4.14. 留数理论	133
第5章 函数和定积分	138
5.1. 引言	138
5.2. 误差函数	138
5.3. Γ -函数	140
5.4. 由积分定义的其它列表函数	142
5.5. 定积分计算	146
第6章 拉普拉斯变换	148
6.1. 引言	148
6.2. 拉普拉斯变换	148
6.3. 反变换	151
6.4. 拉普拉斯变换的性质	154
6.5. 阶跃函数	158
6.6. 卷积	162
6.7. 用初等积分求反变换	163

6.8. 用围线积分求拉普拉斯反变换.....	164
6.9. 拉普拉斯变换在自动控制理论上的应用.....	169
第7章 矢量分析	179
7.1. 引言.....	179
7.2. 张量.....	180
7.3. 矢量的加减法.....	183
7.4. 矢量的乘法.....	189
7.5. 矢量微分法.....	196
7.6. 哈密尔顿算子 ∇	198
7.7. 矢量和数量的积分.....	201
7.8. 标准恒等式.....	206
7.9. 曲线坐标系.....	207
7.10. 流体流动方程	210
7.11. 传热、传质和动量传递.....	229
第8章 偏微分和偏微分方程	231
8.1. 引言.....	231
8.2. 偏导数的意义.....	232
8.3. 偏微分方程的建立.....	238
8.4. 边界条件.....	244
8.5. 偏微分方程的特解.....	251
8.6. 正交函数.....	257
8.7. 分离变量法.....	260
8.8. 拉普拉斯变换法.....	277
8.9. 其它变换.....	290
8.10. 结论	293
第9章 有限差分	295
9.1. 引言.....	295
9.2. 差分算子 Δ	295
9.3. 其它差分算子.....	299
9.4. 内插和外推.....	302
9.5. 差分方程.....	306
9.6. 线性差分方程.....	307
9.7. 非线性差分方程.....	316

9.8 微分-差分方程	321
第10章 实验结果处理	333
10.1. 引言	333
10.2. 坐标纸	333
10.3. 理论性质	338
10.4. 等高线	339
10.5. 误差传播	339
10.6. 曲线拟合	344
10.7. 数值积分	352
第11章 数值方法	362
11.1. 引言	362
11.2. 一阶常微分方程	362
11.3. 高阶微分方程(初值型)	368
11.4 高阶微分方程(边值型)	371
11.5 代数方程	380
11.6 计算机的影响	391
11.7. 差分-微分方程	393
11.8. 差分-偏微分方程(初值型)	396
11.9. 联立偏微分方程(初值型)	407
11.10. 偏微分方程(边值型)	417
11.11. 加速收敛法	424
11.12. 三个自变量的偏微分方程	429
第12章 矩阵	431
12.1. 引言	431
12.2. 矩阵	431
12.3. 矩阵代数	433
12.4. 方阵和矩阵乘积的行列式	437
12.5. 矩阵转置	437
12.6. 伴随矩阵	438
12.7. 方阵的逆矩阵	439
12.8. 矩阵的秩和退化	440
12.9 子矩阵	442
12.10. 线性代数方程组的解	443

12.11. 矩阵级数.....	449
12.12. 矩阵的微分和积分.....	451
12.13. λ -矩阵.....	453
12.14. 特征方程.....	454
12.15. 西尔维斯特定理.....	458
12.16. 二次型.....	459
12.17. 应用于解微分方程组.....	462
12.18. 线性微分方程组的解.....	464
12.19. 结论.....	471
第13章 最优化	473
13.1. 引言	473
13.2. 最优化类型	474
13.3. 解析法	474
13.4. 线性规划	482
13.5. 变分法(和庞特里阿金极大值原理)	495
13.6. 爬山最优法	510
13.7. 序贯单纯形法	514
13.8. 模式搜索	515
13.9. 动态规划	526
习题	531
附录	554
主题索引	562

第1章 问题的数学描述

1.1. 引言

几乎所有的应用科学都要进行实验并解释所得到的实验结果。这项工作定量的做法是准确地测定系统的各个变量，然后分析和关联这些变量；定性地做法是根据一个变量对另一个变量的影响来研究系统的一般特性。我们常常希望采用第一种方法。如果要对系统进行定量的研究，最好一开始就引用数学方法，因为数学方法可能要影响到研究的过程。也就是说要找出系统理想化的数学模型。

第二步是收集所有有关的物理数据资料，整理成守恒定律和速度方程。化学工程中应用的守恒定律是物料衡算、热量衡算和它的能量衡算；速度方程是表示流体流动、传热或物质扩散过程的速率和推动力之间的关系。然后将这些方程应用于模型就可以得到描述系统特性的数学方程。

方程的类型(代数方程、微分方程、差分方程等)取决于所研究的系统以及系统模型的详尽程度。对于一个特定的系统，如果模型是简单的，则可能是初等方程；反之，如果模型很精细，方程的形式将很复杂。然后用适当的数学方法解这些方程而求得结果。为了使数学结果有一定的物理意义，必须用原先的模型来解释它。

在这一章中仅仅叙述最简单的问题和介绍简单的模型概念。求解复杂的模型方程需要用到特殊的数学方法，所以较复杂的数学模型将在本书以后的章节中介绍。

1.2. 问题描述

首先给出应用这些概念的简单例子。图 1.1 所示的设备，用于从甲苯中连续萃取苯甲酸，采用的萃取剂为水。两种物料流入 A 槽进行

强烈的搅拌,然后将混合液送入B槽内澄清分层,分别取出上部的甲苯层和下部的水层,要求的是苯甲酸进入溶剂相的萃取率。

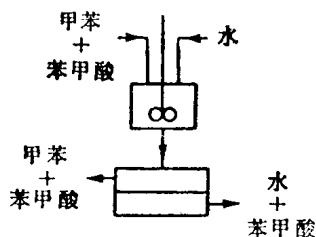


图 1.1 单级混合澄清槽

在图 1.2 中,为了使问题理想化,将混合槽和澄清槽合并为一个单级。分别注出各个液流并进行两种物料衡算:(a)甲苯的衡算,(b)水的衡算。为了简化分析,流量以无溶质的基准表示。每一液流中苯甲酸的浓度也予以注出,这样就完善了数学模型。

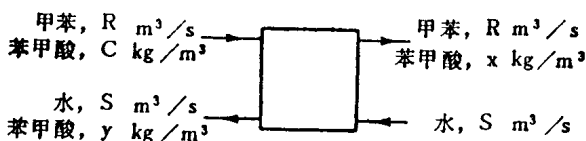


图 1.2 理想化的单级溶剂萃取

以上假定所有的流量是稳定的,甲苯和水不互溶。现在进一步假定进料液浓度 c 为常数;混合槽的混合效果很好;流出的两相液流总是彼此平衡。可用下式表示平衡关系

$$y = mx \quad (1.1)$$

式中 m 为分配系数。

根据苯甲酸的物料衡算,就可以从上述模型推导出方程。

$$\text{苯甲酸输入量} = Rc \text{ kg/s}$$

$$\text{苯甲酸输出量} = Rx + Sy \text{ kg/s}$$

由于苯甲酸的输入量必须等于输出量,所以

$$Rc = Rx + Sy \quad (1.2)$$

方程组(1.1)和(1.2)包含有四个已知量(R 、 S 、 c 、 m)和两个未知量(x 、 y),因此可由下式求出 x 、 y 。

$$Rc = Rx + mSx$$

$$\therefore x = \frac{Rc}{R + mS}, \quad y = \frac{mRc}{R + mS} \quad (1.3)$$

因此,苯甲酸的萃取率为

$$\frac{Sy}{Rc} = \frac{mS}{R + mS} \quad (1.4)$$

如果取 $S = 12R$, $m = 1/8$, $c = 1.0$; 则 $x = 0.4$, $y = 0.05$, 苯甲酸的萃取率为 60%。

在单级中,即使从这个简单的问题也可以看出,通过研究十分自然地得到了描述对象特性的两个无因次数群,即

$$\alpha = R/mS \quad (1.5)$$

和 $E = Sy/Rc$, 代入方程(1.4), 得

$$E = 1/(\alpha + 1) \quad (1.6)$$

也就是说,萃取率只受无因次数群 α 值的控制。

1.3. 两级溶剂萃取

现在再考虑上面的例子,但改用两级萃取苯甲酸。每一级仍然包括两个槽(混合槽和澄清槽),通过两级为逆流流动。理想化的流程表示在图 1.3,图中符号的意义和前面的例子相同,两相浓度分别用下标表示。

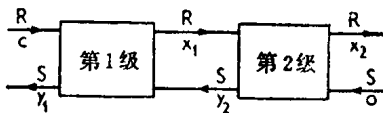


图 1.3 理想化的两级萃取

按照化学工程的习惯,下标表示的是物料流出的这一级的编号。根据 1.2 节中所作的假定,则方程(1.1)分别对于每一级仍然是成立的,即

$$y_1 = mx_1, \quad y_2 = mx_2 \quad (1.7)$$

对每一级作苯甲酸的物料衡算,

	第 1 级	第 2 级
输入酸量(kg/s)	$Rc + Sy_2$	Rx_1
输出酸量(kg/s)	$Rx_1 + Sy_1$	$Rx_2 + Sy_2$

由于每一级苯甲酸的输入量必须等于输出量,于是得到两个方程

$$Rc + Sy_2 = Rx_1 + Sy_1$$

$$Rx_1 = Rx_2 + Sy_2$$

应用方程(1.7)消去 x_1 和 y_2 (级间浓度), 得

$$Rc + mSx_2 = (Ry_1/m) + Sy_1 \quad (1.8)$$

和

$$Ry_1/m = Rx_2 + mSx_2 \quad (1.9)$$

消去方程(1.8)和(1.9)中的 y_1 ,

$$R(Rc + mSx_2) = (R + mS)(Rx_2 + mSx_2)$$

$$\therefore R^2c = x_2(R^2 + mRS + m^2S^2)$$

$$\therefore x_2 = \frac{R^2c}{R^2 + mRS + m^2S^2} \quad (1.10)$$

$$\therefore y_1 = \frac{mRc(R + mS)}{R^2 + mRS + m^2S^2} \quad (1.11)$$

则苯甲酸的萃取率为

$$\frac{Sy_1}{Rc} = \frac{mS(R + mS)}{R^2 + mRS + m^2S^2} \quad (1.12)$$

将方程(1.5)中的无因次数群 E 和 α 代入,则方程(1.12)变为

$$E = \frac{\alpha + 1}{\alpha^2 + \alpha + 1} = \frac{\alpha^2 - 1}{\alpha^3 - 1} \quad (1.13)$$

仍取上述的数值,亦即 $S = 12R$, $m = 1/8$, $c = 1.0$ 时;则 $x_2 = 0.21$, $y_1 = 0.066$, 萃取率为 79%。

由此可见,同样的条件下,与单级萃取比较,两级萃取可以得到更大的萃取率。

1.4. N 级溶剂萃取

为了提高萃取率,考虑采用两级以上的萃取系统。对于单级萃取,仅仅需要解含有两个未知数的两个方程,所用的代数方程是十分简单的。应用两级萃取,则需要解含有四个未知数的四个方程。以此类推,对于 N 级萃取,则需要解 $2N$ 个方程。逐级解出每一级的平衡浓度是相当麻烦的。为了简化运算,显然需要高等数学方法,如第 12 章中介绍的矩阵代数法或第 9 章中介绍的有限差分法。这里先采用有限差分法。

N 级萃取的原理流程如图 1.4, 两相液流的流量仍然用 R 和 S 表示, 苯甲酸在两相中的浓度分别用 x 和 y 表示。其它符号规定与上节相同。这样,对第 n 级作苯甲酸的物料衡算,

$$\text{输入酸量 (kg/s)} = Rx_{n-1} + Sy_{n+1}$$

$$\text{输出酸量 (kg/s)} = Rx_n + Sy_n$$

由于进入量必须等于流出量,则

$$Rx_{n-1} + Sy_{n+1} = Rx_n + Sy_n \quad (1.14)$$

对任一级 n , 分配系数关系式(1.1)仍然是成立的,

$$\therefore y_n = mx_n$$

方程(1.14)变为

$$Rx_{n-1} + mSx_{n+1} = (R + mS)x_n$$

将方程(1.5)的 α 值代入得

$$\alpha x_{n-1} + x_{n+1} = (\alpha + 1)x_n$$

或写成标准形式

$$x_{n+1} - (\alpha + 1)x_n + \alpha x_{n-1} = 0 \quad (1.15)$$

这是一个二阶线性差分方程, 它的解法将在第 9 章中讨论。为完整起见, 这里给出这个方程的解, 即

$$y_n = mx_n = mc(\alpha^{N+1} - \alpha^n) / (\alpha^{N+1} - 1) \quad (1.16)$$

这可代入方程(1.15)进行检验。萃取率由下式给出:

$$E = \frac{Sy_i}{Rc} = \frac{\alpha^N - 1}{\alpha^{N+1} - 1} \quad (1.17)$$

对于 $N = 2$, 可得出方程(1.13)。

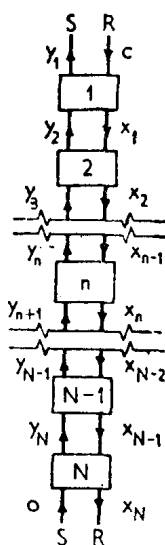


图 1.4 理想化的 N 级萃取

表 1.1 N 级的萃取率 ($S = 12R, m = 1/8$)

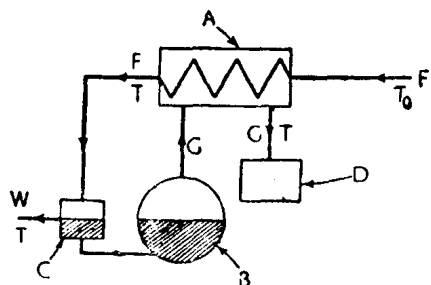
N	1	2	3	5	10
$E(\%)$	60.0	78.9	87.7	95.2	99.4

对于上述萃取系统, 表 1.1 给出了几个不同的 N 值相对应的 E 值。结果表明萃取率随着级数的增加而增加, 但是当级数大于 10 时, 可能是不经济的, 而单级萃取率又很低。我们将在第 13 章中继续研究这一类型的问题, 并按照财政上所考虑的因素确定最经济的萃取级数。

× 1.5. 预热进料的简单水蒸馏釜

图 1.5 为一套蒸馏设备, 包括蒸馏釜 B 和恒液位槽 C , 并用冷凝器的冷却水供料。蒸汽在冷凝器 A 中冷凝, 并收集在贮槽 D 内。一部分蒸发潜热通过预热给水又返回到蒸馏釜。冷凝器的给水量为 $F \text{ kg/s}$,

给水温度为 $T_0^\circ\text{C}$, 出口水温为 $T^\circ\text{C}$, 恒液位槽 C 的水溢流量为 $W\text{ kg/s}$, 蒸馏量为 $G\text{ kg/s}$, 现在可以研究设备的性能。



流进蒸馏釜的水量(kg/s) = F

流出蒸馏釜的水量(kg/s) = W

蒸馏釜产生的蒸汽量(kg/s) = G

$$\therefore F = W + G \quad (1.18)$$

如果供给蒸馏釜的热量为 H

J/s , 水的蒸发潜热为 $L\text{ J/s}$, 热容为 $c_v\text{ J/kg}\cdot^\circ\text{C}$, 取 0°C 作为基准温度, 对蒸馏釜作热量衡算,

$$\text{输入热量}(\text{J/s}) = H + (F - W)c_vT$$

$$\text{输出热量}(\text{J/s}) = 100c_vG + LG$$

$$\therefore H + Gc_vT = (100c_v + L)G \quad (1.19)$$

式中用方程(1.18)消去了 W 。方程(1.19)包含两个未知量(G 和 T), 为了完整地描述过程, 还需要一个方程。这可以从冷凝器的热量衡算得到。

$$\text{冷却水吸收的热量}(\text{J/s}) = Fc_v(T - T_0)$$

$$\text{蒸汽冷凝放出的热量}(\text{J/s}) = G(L + 100c_v - c_vT)$$

$$\therefore Fc_v(T - T_0) = G(L + 100c_v - c_vT) \quad (1.20)$$

在推导方程(1.20)时, 假定馏出液冷却到冷却水的出口温度。

消去方程(1.19)和(1.20)中的 G ,

$$Fc_v(T - T_0) = H$$

$$\therefore T = T_0 + H/c_vF \quad (1.21)$$

由(1.19)和(1.20)得

$$H = G(100c_v + L - c_vT_0 - H/F)$$

$$\therefore G = \frac{FH}{F(100c_v + L - c_vT_0) - H} \quad (1.22)$$

该方程根据供热量、冷却水的温度和流量得出蒸馏量。

对于恒定的供热量和给料温度, 分析方程(1.22)可以看出, G 随 F 减小而增加。当 $F = H/(100c_v + L - c_vT_0)$ 时, G 是无穷大, 实际上这