

INTRODUCTION TO  
CHEMICAL ENGINEERING COMPUTING

# 化工计算导论

原 著

Bruce A. Finlayson [美]

朱开宏 译



华东理工大学出版社

EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

# 化工计算导论

**Introduction to  
Chemical Engineering Computing**

原著：Bruce A. Finlayson [美]

朱开宏 译



华东理工大学出版社

本书为 John Wiley & Sons, Inc. 授权出版的独家简体中文译本, 翻印必究。

**图书在版编目(CIP)数据**

化工计算导论 / (美)Finlayson, B. A. 著; 朱开宏译. —上海:华东理工大学出版社, 2006. 9

书名原文: Introduction to Chemical Engineering Computing

ISBN 7-5628-1938-6

I. 化... II. ①Finlayson... ②朱... III. 计算机应用—化工计算 IV. TQ015.9

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 080790 号

著作权合同登记号:“图字:09—2006—124 号”

All Rights Reserved. Authorized translation from the English language edition published by  
John Wiley & Sons, Inc.

## 化工计算导论

**Introduction to Chemical Engineering Computing** 原著: Bruce A. Finlayson [美] 朱开宏 译

责任编辑 / 钱四海

封面设计 / 赵军

责任校对 / 张波

出版发行 / 华东理工大学出版社

地 址: 上海市梅陇路 130 号, 200237

电 话: (021)64250306(营销部)

传 真: (021)64252707

网 址: www.hdlgpress.com.cn

印 刷 / 常熟华顺印刷有限公司

开 本 / 787×1092 1/16

印 张 / 19

字 数 / 480 千字

版 次 / 2006 年 9 月第 1 版

印 次 / 2006 年 9 月第 1 次

书 号 / ISBN 7-5628-1938-6/TQ·106

定 价 / 48.00 元

(本书如有印装质量问题, 请到出版社营销部调换)

## 内容提要

本书以状态方程、汽液平衡、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计算问题为经，以 Excel、MATLAB、Aspen Plus 和 FEMLAB 四种数值计算或流程模拟软件为纬，阐述了化工计算的最新发展。本书可帮助读者了解国外化工计算的现状，学习应用先进的数值计算和流程模拟软件，以解决各种化工数值计算问题，提高计算能力和分析、解决实际工程问题的能力。本书可作为化学工程及相关专业本科生、研究生“化工数值计算”等课程的教材或参考书，也可供从事化工过程研究、开发、设计和生产的工程技术人员参考。

## 译者的话

翻译一本书的过程也是一个学习过程,学习完了就会有些感触想告诉读者。于是,有了这篇“译者的话”。

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,水平高低往往在乎此。目前,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,化学工程师已有能力解决越来越复杂的计算问题。

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 等流程模拟软件的逐渐普及,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,这使得化学工程师可以将主要精力集中在解决化工问题上。这些软件已成为化学工程师手中的常规工具。

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' Handbook*)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。书中作者用 Excel、MATLAB、Aspen Plus 和 FEMLAB 四种数值计算或流程模拟软件为工具,阐述了状态方程、汽液平衡、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。本书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、化工应用数学等和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中,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。

朱开宏

2006 年 3 月于华理苑

## 序　　言

化学工程专业的学生和化学工程师正面临求解复杂性日益增加的问题的要求,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<sup>®</sup> 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,重点已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 38 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。而现在,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(这使我伤心!),但所有学生都知道他们必须能够解决难题,而他们需要应用计算机来解难题。

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) 工程师如何检查并确保他们已正确地解决了这些问题。这将在当代学生如何学习的情境中做到——最低限度的阅读量、非常及时地学习和大量使用计算机。本书演示的程序有 Excel<sup>®</sup> 、MATLAB<sup>®</sup> 、Aspen Plus<sup>®</sup> 和 FEMLAB<sup>®</sup> 。

编写本书时,我假定读者并不是完全的初学者。化学工程专业的低年级和高年级学生已具有应用如 Excel 之类的电子表格程序的经验,他们能不费力地在计算机上学习,只要向他们提供指导和关键的概念或短语。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专业学生可能不是非常清楚地了解应用方面的问题,对隐藏于工程问题背后的物理现象也缺乏深入的理解。于是,对于为什么需要求解某些问题向学生作一些解释是重要的。我依据自己的经验对本书中的各类问题作了透彻的说明。

我关于教学的基本观点是,工程师今天正在解决的问题用解析方法通常是无能为力的,但它们能用目前现成的功能强大的软件解决。于是,每个工程师将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对计算机所做工作的验证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,虽然没有解析解的形式,而且对某些问题也不可能用解析方法求解。

### 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 年的冬季学期。化工系学生的评价表明,在利用计算机解决化学工程任务时学生期望获得更多的帮助。虽然学生已选修了计算机科学系的编程课程,但他们并未意识到这对他们的工程学习是至关重要的。

我打算为低年级学生开一门选修课,向他们介绍在他们的专业学习中将使用的计算机程序。这门课程称为“化学工程计算机技能”,这是一门讲座/实验课程。注册选修此课程的学生年年增加,到 2005 年已有 70% 的学生选修这门课程。

按照目前的教学方式,我花一节课的时间讲述要求解的问题,并说明如何利用计算机程序求解。然后课堂换到计算机教室,在那里两个学生一组进行练习,并配有学生辅导人员,求解与刚才课堂上演示过的相同类型的问题。最后,让学生用相同的技术单独求解更困难的问题作为要评分的家庭作业。所有家庭作业习题的求解必须正确;如果不正确,提供机会让他们重做。本课程教学分有学分和无学分,只有正确完成 80% 作业的学生才能取得学分。在 10 个星期的学习期间,总共只有 10 次 50 分钟的课和 10 次计算机实验室练习时间。因为应用问题覆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。”

本书也可用于一门较多学时的课程。一旦学生求解了基本的问题,利用上课和导师想要强调的变化使问题变得更复杂是轻而易举的。在本书每章结尾处提供了这类问题的例子;入门的和高级的课程均已提供。使用本书的另一条途径是将各章用于不同课程。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。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。当然,希望学生能将注意力集中在化学工程原理上,而将计算机用作工具。

本书讲述了四种计算机程序的特色。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。在一种工作环境里,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,在几章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的编程工作。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。

## 致谢

在写作本书时,我由衷地感谢我班上的学生。第一年没有书面材料;学生说非常想得到这种材料。第二年提供了书面材料,但显然对 FEMLAB 这种较新的程序应该给予强调。有许多次,学生提出的问题涉及了我也不知道的关于程序的问题,所以我应向华盛顿大学的所有研究生(2004、2005 和 2006 级)表示感谢。尤其应该感谢 Barney Santiago,他教给了我本书的一个诀窍,还有 Franklin Lobb,是在 Aspen 技术公司工作的一位校友,他提供了有关 Aspen Plus 的有价值的建议。我还要感谢 Jennifer Foley,生物工程系的一个研究生,她向我学了 FEMLAB,但反过来她又教了我如何应用 FEMLAB 中的耦合变量。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,本书可能至今尚不能完成。我的女儿 Christine Finlayson 利用复制编辑器大大改善了我的书面文件,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。Comsol 公司的朋友, FEMLAB 的编制人员也提供了许多帮助,因为在过去几年中 FEMLAB 一直在发展;Johan Sundqvist 和 David Kan 是我的主要联系人。和 Wiley 出版公

司的朋友一起工作真是令人愉快,他们美化了本书的外观,并增强了可读性。我尤其感谢我的夫人 Pat,因这一编著计划的需要花费了许多时间。她始终支持我,为使我能完成这本书作出了许多牺牲。

Bruce Finlayson  
2005 年 5 月于西雅图

# 目 录

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 .....	3
1.1.3 微分方程组 .....	3
1.1.4 关于附录 .....	4
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(含一个未知量的单个方程) .....	7
2.2.1 用“单变量求解”求解 .....	7
2.2.2 用【规划求解】求解 .....	8
2.2.3 用“单变量求解”求解化学工程问题的实例 .....	8
2.3 用 MATLAB 求解状态方程(含一个未知量的单个方程) .....	9
2.3.1 用 MATLAB 求解化学工程问题的实例 .....	10
2.3.2 用 MATLAB 求解化学工程问题的另一个实例 .....	11
2.4 用 Aspen Plus 处理状态方程 .....	13
2.4.1 实例 .....	14
2.4.2 混合物的比容 .....	16
2.5 本章小结 .....	19
习题 .....	19
3 汽-液平衡 .....	21
3.1 闪蒸和相分离 .....	21
3.2 等温闪蒸——方程的推导 .....	22
3.2.1 用 Excel 的实例 .....	23
3.3 热力学参数 .....	24
3.3.1 用 MATLAB 的实例 .....	25
3.3.2 用 Aspen Plus 的实例 .....	26
3.4 非理想液体——热力学模型的检验 .....	29
3.5 本章小结 .....	32
习题 .....	32
4 化学反应平衡 .....	36

4.1 化学平衡表示式 .....	36
4.1.1 用于燃料电池的氢的实例 .....	37
4.1.2 用 Excel 求解 .....	38
4.1.3 用 MATLAB 求解 .....	39
4.2 含两个或多个方程的化学平衡 .....	41
4.3 用 MATLAB 求解多个方程, 几个未知量 .....	42
4.3.1 方法 1 用‘fsolve’命令 .....	42
4.3.2 方法 2 用‘fminsearch’函数 .....	43
4.3.3 MATLAB 的变异 .....	44
4.4 用 Aspen Plus 求解化学平衡 .....	45
4.5 本章小结 .....	46
习题 .....	46
 5 含循环物流的质量衡算 .....	48
5.1 数学公式描述 .....	48
5.2 不含循环的实例 .....	50
5.3 含循环的实例; 序贯法和联立求解法的比较 .....	52
5.4 用 Excel 求解简单质量衡算的过程模拟实例 .....	54
5.5 用 Excel 求解包含化学反应平衡的过程模拟实例 .....	55
5.6 用 Excel 求解包含相平衡的过程模拟实例 .....	56
5.6.1 迭代是否收敛? .....	57
5.6.2 扩充 .....	58
5.7 本章小结 .....	58
5.8 课堂练习 .....	58
5.9 课堂讨论 .....	58
习题 .....	59
 6 传质设备模拟 .....	63
6.1 热力学 .....	63
6.2 实例: 采用简捷法的多组分精馏 .....	65
6.2.1 数学推导 .....	66
6.3 采用严格逐板法的多组分精馏 .....	69
6.4 实例: 填料塔吸收 .....	72
6.5 实例: 气体工厂产物分离 .....	74
6.6 本章小结 .....	75
6.7 课堂练习 .....	76
习题(用 Aspen Plus) .....	76
 7 过程模拟 .....	78

7.1 模型库 .....	78
7.2 实例:合成氨过程 .....	79
7.2.1 公用工程费用 .....	88
7.3 收敛提示 .....	90
7.4 优化 .....	92
7.5 本章小结 .....	95
7.6 课堂练习 .....	95
习题 .....	96
 8 化学反应器 .....	97
8.1 反应器问题的数学公式描述 .....	97
8.1.1 实例:活塞流反应器和间歇反应器 .....	98
8.1.2 实例:连续搅拌釜式反应器 .....	99
8.2 用 MATLAB 求解常微分方程组 .....	99
8.2.1 简单例子 .....	99
8.2.2 ‘Global’命令的应用 .....	101
8.2.3 参数传递 .....	102
8.2.4 实例:等温活塞流反应器 .....	103
8.2.5 实例:非等温活塞流反应器 .....	105
8.3 用 FEMLAB 求解常微分方程组 .....	107
8.3.1 简单例子 .....	108
8.3.2 实例:等温活塞流反应器 .....	109
8.3.3 实例:非等温活塞流反应器 .....	111
8.4 有摩尔数变化和密度变化的反应器问题 .....	113
8.5 有传质限制的化学反应器 .....	114
8.6 连续搅拌釜式反应器 .....	117
8.6.1 用 Excel 求解 .....	118
8.6.2 用 MATLAB 求解 .....	118
8.6.3 CSTR 的多解 .....	119
8.6.4 用 MATLAB 求解多个方程 .....	119
8.7 瞬态连续搅拌釜式反应器 .....	120
8.8 本章小结 .....	124
习题 .....	124
 9 一维传递过程 .....	128
9.1 化学工程中的应用——数学公式描述 .....	128
9.1.1 传热 .....	129
9.1.2 扩散和反应 .....	129
9.1.3 流体流动 .....	130

---

9.1.4 不稳定传热 .....	131
9.2 实例:厚板中的传热 .....	132
9.3 实例:反应和扩散 .....	134
9.3.1 参数解 .....	135
9.4 实例:管内牛顿流体流动 .....	137
9.5 实例:管内非牛顿流体流动 .....	138
9.6 实例:瞬态传热 .....	141
9.7 实例:线性吸附 .....	142
9.8 实例:色谱 .....	145
9.9 本章小结 .....	146
习题 .....	147
 10 二维和三维流体流动 .....	150
10.1 流体流动的数学基础 .....	151
10.1.1 奈维-斯托克斯方程 .....	151
10.1.2 非牛顿流体 .....	152
10.2 实例:管内进口流 .....	153
10.3 实例:非牛顿流体的进口流 .....	158
10.4 实例:微射流装置中的流动 .....	159
10.5 实例:管内湍流 .....	162
10.6 实例:管内启动流 .....	164
10.7 实例:通过孔板的流动 .....	166
10.8 实例:蛇管混合器内的流动 .....	170
10.9 边界条件 .....	171
10.10 无因次化 .....	172
10.11 本章小结 .....	173
习题 .....	174
 11 二维和三维对流扩散方程 .....	175
11.1 对流扩散方程 .....	176
11.2 无因次方程 .....	176
11.3 边界条件 .....	177
11.4 实例:二维传热 .....	178
11.5 实例:有中孔的热传导 .....	180
11.6 实例:微射流装置中的分散 .....	181
11.6.1 Peclet 数的影响 .....	182
11.7 实例:与浓度相关的黏度 .....	185
11.8 实例:黏性耗散 .....	186
11.9 实例:化学反应器 .....	187

---

11.10 实例:壁面反应 .....	188
11.11 实例:蛇管混合器内的混合 .....	188
11.12 本章小结 .....	189
习题 .....	190
<b>附录 A 应用 Excel 的提示 .....</b>	<b>194</b>
A. 1 单元格的构成 .....	194
A. 2 单元格的内容 .....	194
A. 3 格式 .....	195
A. 4 注释 .....	195
A. 5 图片、方程、网络链接 .....	195
A. 6 选择用于图表、回归和打印的列 .....	196
A. 7 跨越和下拉电子表格复制公式 .....	196
A. 8 插入行和列 .....	196
A. 9 拆分/冻结 .....	196
A. 10 迭代,容差 .....	198
A. 11 粘贴 .....	198
A. 12 标绘——xy 散点、编辑、多条曲线、表面标绘 .....	199
A. 13 排列电子表格 .....	201
A. 14 输入和输出文本文件,一次一列 .....	201
A. 15 输入和输出文本文件,多列 .....	202
A. 16 输出文本文件 .....	202
A. 17 工具 .....	202
A. 18 函数 .....	203
A. 19 矩阵 .....	203
A. 20 Excel 的帮助 .....	204
A. 21 Excel 的应用 .....	204
<b>附录 B 应用 MATLAB 的提示 .....</b>	<b>205</b>
B. 1 一般特色 .....	205
B. 1. 1 启动程序 .....	205
B. 1. 2 屏幕格式 .....	205
B. 1. 3 停止/关闭程序 .....	206
B. 1. 4 m 文件 .....	206
B. 1. 5 工作空间和信息传递 .....	207
B. 1. 6 ‘Global’命令 .....	207
B. 1. 7 显示工具 .....	208
B. 1. 8 查找 MATLAB 的错误 .....	208
B. 1. 9 调试程序;即查找你的错误 .....	209

B. 1.10	输入/输出	209
B. 1.11	循环语句	210
B. 1.12	条件语句	210
B. 1.13	计时信息	211
B. 1.14	矩阵	211
B. 1.15	矩阵乘法	212
B. 1.16	元素对元素的计算	213
B. 2	矩阵的本征值	213
B. 3	计算积分	213
B. 4	用‘fsolve’求解代数方程	214
B. 5	用‘fzero’或‘fminsearch’求解代数方程(二者均包含在标准的 MATLAB 中)	214
B. 6	积分常微分方程初值问题	214
B. 6.1	用于‘ode45’和其他积分软件包的校核表	216
B. 7	样条插值	216
B. 8	数据内插, 计算多项式和标绘结果	217
B. 9	标绘	217
B. 9.1	标绘用线上法获得的偏微分方程的积分结果	217
B. 9.2	简单标绘	218
B. 9.3	向现有标绘添加数据	219
B. 9.4	美化你的标绘	219
B. 9.5	多个标绘	219
B. 9.6	三维标绘	220
B. 9.7	更复杂的标绘	220
B. 9.8	在文本中使用希腊字母和符号	221
B. 10	MATLAB 帮助	221
B. 11	MATLAB 的应用	221
附录 C	应用 Aspen Plus 的提示	223
C. 1	快速浏览	223
C. 1.1	启动	223
C. 1.2	设定	224
C. 1.3	模型库	225
C. 1.4	在流程中放置单元设备	225
C. 1.5	用物流联接单元设备	225
C. 1.6	数据输入	226
C. 1.7	规定组分	226
C. 1.8	规定物性	226
C. 1.9	规定输入物流	226

---

C. 1.10 规定模块参数 .....	227
C. 1.11 运行问题 .....	228
C. 1.12 仔细检查物流表 .....	228
C. 1.13 检查你的结果 .....	228
C. 1.14 将流程和物料、能量衡算传递到文字处理程序 .....	229
C. 1.15 改变条件 .....	229
C. 1.16 编制你的报告 .....	230
C. 1.17 储存你的结果 .....	230
C. 1.18 获得帮助 .....	231
C. 2 Aspen Plus 的应用 .....	231
 附录 D 应用 FEMLAB 的提示 .....	232
D. 1 基本的 FEMLAB 技术 .....	232
D. 1.1 打开屏幕 .....	232
D. 1.2 方程 .....	234
D. 1.3 绘图 .....	235
D. 1.4 网格 .....	236
D. 1.5 子定义域设定 .....	237
D. 1.6 边界设定 .....	237
D. 1.7 求解 .....	239
D. 2 后处理 .....	240
D. 2.1 表面标绘 .....	240
D. 2.2 等值线标绘 .....	242
D. 2.3 横截面标绘 .....	242
D. 2.4 边界标绘 .....	244
D. 2.5 积分 .....	245
D. 3 高级特色 .....	246
D. 3.1 模型导航器 .....	246
D. 3.2 内部边界 .....	247
D. 3.3 表达式 .....	249
D. 3.4 变量耦合和附加几何图形 .....	249
D. 4 FEMLAB 的应用 .....	252
 附录 E 参数估计 .....	253
E. 1 数学公式描述 .....	253
E. 2 直线 .....	254
E. 2.1 用 Excel 进行直线曲线拟合 .....	254
E. 2.2 标绘趋势线 .....	254
E. 2.3 用 MATLAB 进行直线拟合 .....	255

E. 3 多项式回归 .....	256
E. 3.1 用 Excel 进行多项式回归 .....	257
E. 3.1 用 MATLAB 进行多项式回归 .....	257
E. 4 用 Excel 进行多重回归 .....	258
E. 5 非线性回归 .....	262
E. 5.1 用 Excel 进行非线性回归 .....	262
E. 5.2 用 MATLAB 进行非线性回归 .....	264
 附录 F 数学方法 .....	266
F. 1 代数方程 .....	266
F. 1.1 连续替代法 .....	266
F. 1.2 Newton-Raphson 法 .....	267
F. 2 常微分方程初值问题 .....	268
F. 2.1 Euler 法 .....	268
F. 2.2 Runge-Kutta 法 .....	269
F. 3 常微分方程边值问题 .....	270
F. 3.1 有限差分法 .....	270
F. 3.2 有限元法 .....	271
F. 3.3 初值法 .....	274
F. 3.4 Excel 中的有限差分法 .....	274
F. 4 时间和一维空间的偏微分方程 .....	274
F. 5 二维空间的偏微分方程 .....	276
F. 6 椭圆型方程的有限差分法 .....	277
F. 7 小结 .....	278
 参考文献 .....	279
 主题索引 .....	282

# 1 緒論

不论是设计生产聚乙烯的大型装置,还是检测生物试剂的微型反应器,计算机都使化学工程师设计和分析过程的方法发生了革命性的变化。实际上,你们中许多人作为本科生在今天将研究的工程问题就复杂性而言与三四十年前的博士生研究的问题是类似的。现在计算机程序能以过去所花时间的很小的百分数求解困难的问题。今天,不再必须为有效地利用计算机而自己编写软件程序。计算机程序能为你进行数值计算,但你仍需要理解如何将这些程序用于特定的工程挑战问题。

本书的目的是帮助你更好地完成化学工程实践。计算机已成为使化学工程发生具有深远影响的发展的重要工具。遗憾的是,计算机不像激光唱机这样简单,对激光唱机,你插入一张唱片,按一下按钮,每次都会产生相同的结果。对于计算机程序,有时你向它们提供的参数并不能使它们正确地工作。因此,你必须仔细、明智地应用它们。

本书还将:

- (1) 用实例说明你作为化学工程师可能需要解决的问题;
- (2) 对你可能使用的计算机程序的类型进行比较,并说明对特定的应用问题哪种程序是最好的;
- (3) 详述如何检查你的运算,以确保你已经正确地解决了问题。

本书演示了四类计算机程序:Excel<sup>®</sup>、MATLAB<sup>®</sup>、Aspen Plus<sup>®</sup> 和 FEMLAB<sup>®</sup>。你可能使用过别的公司开发的其他程序。虽然具体的细节可能不同,但是你采用的步骤将是类似的。

计算机技巧的价值是无法衡量的,但作为一个工程师,你也需要理解物理现象。每个阐述化学工程应用的章节都由以通用的术语描述物理问题开始。然后,将这些术语翻译成数学语言,以便由计算机进行描述。接着,该章节将提供几道求解这类问题的例题,并一步一步地给出说明,使你能在自己的计算机上循序渐进地求解。有时同一问题可用不同的程序求解,使你能了解每种程序的优点。最后,各章节将提供一些比较复杂的问题,可由教师布置作为家庭作业。

本书中的所有例题都示范了如何验证你的工作及如何理解计算机向你提供的答案。在使用计算机时,了解计算机是否获得了正确的答案常常是至关重要的。如果你遵循这种策略:

- (1) 求解问题;
- (2) 验证你的计算;
- (3) 清楚理解你的答案是如何获得的。

你将会毫无困难地使你的指导教师或上司相信你的答案,对无法解析求解的问题,你将获得