

附赠光盘

# 计算机

The  
Third Edition

第三版

JISUANJIO  
ZAI HUAXUEHUIHUAGONG ZHONG DE YINGYONG

# 在化学化工中的应用

方利国  
编著



化学工业出版社

# 计算机

The  
Third Edition

第三版

JISUANJIO  
ZAIHUAXUEHUAGONG ZHONG DE YINGYONG

# 在化学化工中的应用

方利国 编著



化学工业出版社

· 北京 ·



本书是介绍计算机在化学化工中应用的实用基础教程。全书分为三篇 13 章。上篇 (1~5 章) 介绍了如何利用计算机高速精确的计算功能, 解决化学化工中的实际问题。包括: 如何利用计算机解决实验数据处理、模型参数计算等方法; 如何利用计算机求解无法解析求解的非线性方程; 大型线性方程组在化工中的应用及计算机求解方法; 如何利用计算机求解常微分方程及化工稳态模拟; 偏微分方程在化工中的应用及化工动态模拟。每章均结合化工实例进行讲解, 并配有调试通过的 VB 程序供读者使用。中篇 (6~9 章) 介绍了 Office、Origin、AutoCAD 及 Aspen Plus 四个软件在化学化工中的实际应用, 通过大量的化工应用实例, 使读者快速掌握该四种软件在化工中的具体应用。下篇 (10~13 章) 介绍了利用计算机开发的几个化工应用软件实例并配有调试通过的程序。

本书可作为化学化工类研究生、本科生、专科生的计算机应用教材, 也可以供化学化工应用技术人员参考。

本教材随书附送光盘一个, 该光盘既可作为教师的 CAI 课件, 也可作为学生自学的多媒体课件。光盘不仅将本教材的主要内容做成多媒体课件, 方便读者快速查找各章节的内容; 同时也提供了大量的可执行的应用程序, 这些应用程序不仅加深了读者对书本知识的理解, 而且也为化学化工实验数据处理、设备图绘制、过程模拟及应用程序开发提供一些实用程序。

### 图书在版编目 (CIP) 数据

计算机在化学化工中的应用/方利国编著. —3 版.  
北京: 化学工业出版社, 2010.12  
ISBN 978-7-122-09594-7

I. 计… II. 方… III. ①计算机应用-化学②计算机应用-化学工业 IV. ①O6-39②TQ015.9

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 190447 号

---

责任编辑: 廉 静  
责任校对: 战河红

文字编辑: 徐卿华  
装帧设计: 尹琳琳

---

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 装: 三河市延风印装厂

787mm×1092mm 1/16 印张 21½ 字数 569 千字 2011 年 1 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: 40.00 元 (附光盘)

版权所有 违者必究

# 前 言

承蒙读者厚爱,《计算机在化学化工中的应用》已连印7次。值此第8次印刷之际,作者根据读者建议及软件版本更新的实际情况,对该教材进行了第二次修订。本次修订工作主要涉及原来的第6章、第7章、第8章、第9章、第11章,对这几章的内容进行了调整,同时删掉了原来的第10章。其中第6章增加了Excel 2003/2008数据拟合、单变量求解、规划求解等新内容。第7章采用了Origin 8.0版本,新增加了多图层制作、数据拟合等内容,同时添加了一些化工应用实例。第8章在保持原编写风格的基础上,采用了AutoCAD 2008版本进行了改写,对具体的操作有了更加详细的描述;同时增加了提醒功能,更加有利于读者模仿本教材的操作过程,以达到举一反三之功能。第9章在软件的版本、教材内容、书写格式等方面都有较大的改变。软件采用了目前较常用的11.1版本,增加了大量的化工实用案例,涉及精馏、反应、换热、压缩、灵敏度分析、优化及设计规定等许多内容,大大增强了教材的实用性。第11章增加了AutoLISP语言基础,以便于读者更好地理解本章开发的实例,同时新增了一个三维视图绘制的实例。

本次修订仍附送光盘一张。光盘内容除了PPT文档及VB运行程序外,新增本版第6~9章的实际操作文档。读者可直接打开这些操作文档,并对照书本进行操作,可提高对书本知识的理解,快速掌握软件的应用。至于涉及的应用软件需读者自己安装,否则无法运行第6~9章的操作文件。

在本教材编写过程中,王建昌、李小杜、张梦怡等同学参加了光盘制作及部分文本输入工作。华南理工大学教务处及化学与化工学院对教材的出版给予了大力支持。本书在编写过程中,参考了相关的科技图书及教材,在此特表示感谢。本书虽经编者多年编写及修订,但由于编者水平有限,不足之处在所难免,望同行及读者予以批评指正。

华南理工大学  
方利国  
2010年7月

# 第一版前言

随着现代科学技术的发展和计算机的广泛使用,各学科对计算机的依赖程度越来越高,化学化工领域也不例外。从实验数据的处理及拟合、模型参数的确定、非线性方程的求解到化工过程模拟,均离不开计算机的帮助,对这方面内容计算机主要发挥的是高速的数值计算功能;另一方面,我们还要利用计算机进行化工信息的发布、化工流程图的制作等一系列其他非计算性的工作,同时还需利用计算机进行化工实用软件的开发工作。

“计算机在化学化工中的应用”是一门旨在提高学生专业计算机应用水平的课程。尽管学生在基础阶段的学习中已经学过了“计算机应用基础”、“VB 编程”等有关计算机的基础课程,但在毕业设计阶段还经常碰到有些学生无法利用计算机进行毕业设计的有关工作:如利用计算机进行网上文献检索,实验模型参数的确定,微分方程的离散化计算,化工论文的编辑,化工信息的多媒体发布,常用化工计算机软件如 CAD、ASPEN、ORIGIN 等的应用以及实用化工程序或软件的开发。产生上述问题的主要原因是基础阶段的学习中讲授的仅是计算机的基本理论和基本知识,没有讲授这些理论和知识在具体专业中的应用。而“计算机在化学化工中的应用”正是结合专业的实际情况讲授计算机的具体应用,是培养学生开发化学化工应用软件的入门课程。本书遵循简明、实用的原则,对化工实验数据处理、化工计算及模拟等需要用到复杂数学知识的内容,以简单实用的形式呈现给读者,并提供了可供应用的程序代码;对一些常用软件及化工软件的介绍采用化工实例应用的形式;对于新开发的化工应用软件,着重于介绍软件开发的环境、方法及思路,力争为读者提供一种化工软件开发的基本思路。

本书分三篇 12 章。上篇(1~5 章)是有关数值计算的内容,这是作为一个 21 世纪的化学化工工作者所必须掌握的基本内容,也为本科学生继续深造或攻读硕士研究生打下基础;中篇(6~9 章)主要介绍了目前应用较广且较为实用的一些软件,站在化学化工工作者的角度,讲解了它们的主要功能及应用技巧;下篇(10~12 章)介绍了计算机在化工中成功应用的几个实例。本书附送光盘一张,光盘不仅将书中的主要内容做成 PowerPoint 演示文档,方便读者快速查找各章节的内容,同时也提供了大量可执行的应用程序,有助于加深读者对书本知识的理解,而且也为化学化工实验数据处理及模拟提供了帮助。

本书由华南理工大学的方利国、陈砺主编,参加编写的还有茂名学院的谢颖。其中第 1~7 章,第 9 章第 1、2 节,第 10~12 章由方利国编写,第 8 章由陈砺编写,第 9 章第 3 节由谢颖编写。全书由方利国统稿。向仲华、朱汉材、李娟娟、孙健等同学参加了本书的文本输入及编排等工作;华南理工大学教务处及化工学院对教材的出版给予了大力支持;华南理工大学化工学院现代化工实验中心计算机房及郑玉秀老师对 Aspen Plus 软件的使用提供了方便。

本书在编写过程中,参考了大量的科技图书及教材,在此特表示感谢。本书虽经编者多年编写,并已以讲义的形式在华南理工大学试用 3 年,但由于作者水平有限,错误在所难免,望同行及读者予以批评指正。

编者

2003 年 4 月于广州

# 第二版前言

随着计算机软硬件的更新速度不断加快，计算机在化学化工中的应用范围及深度也不断发展，由作者编著出版的《计算机在化学化工中的应用》也需要与时俱进，进行修订再版了。本次修订再版的主要修改之处有以下几个方面：

1. 对有些软件进行版本更新，在新版本的基础上进行重新编写；
2. 对第一版中提供的大部分程序进行重新开发完善，以便读者使用，同时会增加第一版没有开发的程序；
3. 对第一版本中某些章节的编写结构进行调整，同时在举例及习题中尽量增加化学化工中的实际例子，以提高读者的学习兴趣及解决实际问题的能力；
4. 将开发篇的内容进行扩充和替换，但仍保持原来简明实用的编写原则；
5. 增加大部分程序的源程序，以便读者二次开发利用。

全书共分 3 篇 14 章。上篇（1~5 章）是有关数值计算的内容，这是作为一个 21 世纪化学化工工作者所必须掌握的基本内容，也为本科学生继续深造或攻读硕士研究生打下基础；中篇（6~9 章）主要介绍了目前应用较广且较为实用的一些软件，站在化学化工工作者的角度，讲解了它们的主要功能及应用技巧；下篇（10~14 章）介绍了计算机在化学化工中成功应用的几个实例。

本书由华南理工大学方利国主编，参加编写的还有华南理工大学陈砺、广东茂名学院的谢颖。其中第 1~7 章，第 9 章 9.1 节、9.2 节，第 10~14 章由方利国编写，第 8 章由陈砺编写，第 9 章 9.3 节由谢颖编写。全书由方利国统稿。王聘、张震宇、甘振华等同学参加了本书的文本输入及编辑等工作。华南理工大学教务处及化工与能源学院对教材的出版给予了大力支持。

本书在编写过程中参考了大量的科技图书及教材，在此特表示感谢。本书虽经编者多年编写及修订，但由于水平有限，疏漏与不足之处在所难免，望同行及读者予以批评指正。

编者

2006 年 4 月于广州

# 目 录

## 上篇 化工数据处理及过程模拟

<b>第 1 章 实验数据及模型参数拟合方法</b> .....	1
1.1 问题的提出 .....	1
1.2 拟合标准 .....	2
1.3 单变量拟合和多变量拟合 .....	3
1.3.1 单变量拟合 .....	3
1.3.2 多变量的曲线拟合 .....	8
1.4 解矛盾方程组 .....	11
1.5 梯度法拟合参数 .....	21
1.6 吸附等温曲线回归 .....	25
1.6.1 吸附等温曲线的常见类型 .....	25
1.6.2 几种常用的吸附等温曲线回归方法 .....	26
1.6.3 回归方法的比较 .....	27
习题 .....	27
<b>第 2 章 非线性方程求解</b> .....	29
2.1 问题的提出 .....	29
2.2 实根的对分法 .....	30
2.2.1 使用对分法的条件 .....	30
2.2.2 对分法求根算法 .....	30
2.2.3 对分法 VB 程序清单 .....	30
2.3 直接迭代法 .....	33
2.4 松弛迭代法 .....	34
2.5 牛顿迭代法 .....	36
2.5.1 牛顿迭代法的理论推导 .....	36
2.5.2 牛顿迭代法的几何意义 .....	37
2.6 割线法 .....	38
2.7 非线性方程组的牛顿迭代法 .....	39
2.8 应用实例 .....	41
习题 .....	42
<b>第 3 章 线性方程组的迭代求解</b> .....	44
3.1 问题的提出 .....	44
3.2 简单迭代 .....	45
3.2.1 简单迭代公式 .....	45
3.2.2 简单迭代计算机算法 .....	46
3.2.3 程序清单及实例 .....	47
3.3 紧凑迭代 .....	49
3.3.1 紧凑迭代公式 .....	49
3.3.2 紧凑迭代计算机算法 .....	50
3.3.3 紧凑迭代 VB 程序 .....	51
3.4 松弛迭代 .....	53
3.4.1 松弛迭代公式 .....	53
3.4.2 松弛迭代计算机算法 .....	53
3.4.3 松弛迭代 VB 程序 .....	54
3.4.4 三种迭代方法混合程序示例 .....	54
3.5 高斯消去法 .....	59
3.5.1 高斯消去法原理 .....	59
3.5.2 高斯消去法程序及实例 .....	60
3.5.3 主元最大高斯消去法 .....	61
3.6 三角分解法 .....	62
3.6.1 三角分解法计算公式 .....	62
3.6.2 三角分解法 VB 程序 .....	65
3.7 带状方程组的三角分解法 .....	67
3.7.1 基本原理 .....	67
3.7.2 等带宽方程组的求解 .....	67
3.7.3 带宽为 1 的三对方程组求解 .....	68
3.7.4 追赶法 VB 程序 .....	69
习题 .....	70
<b>第 4 章 常微分方程数值解</b> .....	72
4.1 微分方程在化工中的应用 .....	72
4.2 欧拉公式 .....	73
4.2.1 向前欧拉公式 .....	73
4.2.2 向后欧拉公式 .....	75
4.2.3 中心欧拉公式 .....	75
4.2.4 梯形公式 .....	75
4.2.5 VB 程序源码 .....	76
4.3 龙格-库塔法 .....	77

4.3.1 计算公式 .....	78	4.4.2 高阶常微分方程数值解法 .....	82
4.3.2 步长的选择 .....	79	4.5 程序示例及应用 .....	83
4.4 常微分方程组的数值解法 .....	80	习题 .....	87
4.4.1 一阶常微分方程组的数值解法 .....	80		
<b>第5章 偏微分方程数值解</b> .....	<b>89</b>		
5.1 问题的提出 .....	89	5.4.3 吸附床内吸附剂传热传质模型的 建立 .....	101
5.2 基本离散化公式 .....	89	5.4.4 吸附器壁面温度轴向分布方程 .....	102
5.3 几种常见偏微分方程的离散化 计算 .....	90	5.4.5 吸附器内/外无量纲化方程 .....	102
5.4 吸附床传热传质模型中的偏微分方程 求解实例 .....	100	5.4.6 模型的离散化 .....	102
5.4.1 基本设定及假设 .....	100	5.4.7 模型的数值求解及计算机程序 介绍 .....	104
5.4.2 流体传热模型的建立 .....	100	习题 .....	104

## 中篇 化工常用软件应用

<b>第6章 Office 软件在化工中的应用</b> .....	<b>105</b>		
6.1 Microsoft Word 在化学化工论文及 文献书写中的应用 .....	105	应用 .....	112
6.1.1 应用背景及内容 .....	105	6.2.1 Excel 功能简介 .....	112
6.1.2 公式及分子式的输入 .....	106	6.2.2 基本计算功能 .....	112
6.1.3 三线表的制作 .....	109	6.2.3 Excel 规划求解 .....	116
6.1.4 图的制作及图文混排 .....	111	6.3 Microsoft PowerPoint 在化学化工中的 应用 .....	119
6.2 Microsoft Excel 在化工数据处理中的 应用 .....	121	习题 .....	121
<b>第7章 Origin 在化学化工实验数据处理中的应用</b> .....	<b>123</b>		
7.1 Origin 简介 .....	123	7.3.2 线条及实验点图标 的设置 .....	132
7.2 Origin 的基本操作 .....	123	7.3.3 其他一些实用技巧 .....	133
7.2.1 Origin 的安装 .....	123	7.4 多图层绘制 .....	134
7.2.2 数据输入 .....	124	7.5 数据的拟合 .....	136
7.2.3 图形生成 .....	128	7.6 应用示例 .....	137
7.3 Origin 功能设置 .....	131	习题 .....	139
7.3.1 坐标轴的设置 .....	131		
<b>第8章 AutoCAD 2008 在化工制图中的应用</b> .....	<b>141</b>		
8.1 化工制图概述 .....	141	8.3.5 AutoCAD 2008 绘图过程 .....	167
8.1.1 化工工艺图 .....	141	8.4 化工容器 AutoCAD 2008 绘制 .....	170
8.1.2 设备布置图 .....	142	8.4.1 储槽绘制前的准备工作 .....	170
8.1.3 管道布置图 .....	142	8.4.2 设置图层、比例及图框 .....	171
8.1.4 化工设备图 .....	142	8.4.3 画中心线 .....	173
8.2 AutoCAD 简介 .....	143	8.4.4 画主体结构 .....	175
8.3 AutoCAD 2008 主要功能 .....	144	8.4.5 画局部放大图 .....	187
8.3.1 AutoCAD 2008 的运行环境 .....	144	8.4.6 画剖面线及焊缝线 .....	187
8.3.2 AutoCAD 2008 的安装及工作 界面 .....	144	8.4.7 画指引线 .....	189
8.3.3 AutoCAD 2008 主要功能介绍 .....	144	8.4.8 标注尺寸 .....	190
8.3.4 AutoCAD 2008 文本输入和尺寸 标注 .....	162	8.4.9 写技术说明, 绘管口表、标题栏、 明细栏、技术特性表等 .....	190
		习题 .....	191



<b>第 9 章 Aspen Plus 在化工流程模拟计算中的应用</b> .....	194
9.1 Aspen Plus 概述 .....	194
9.2 Aspen Plus 基本操作 .....	198
9.2.1 Aspen Plus 软件安装 .....	198
9.2.2 Aspen Plus 软件运算 .....	198
9.3 Aspen Plus 应用实例 .....	201
9.3.1 物性计算 .....	201
9.3.2 流程模拟 .....	209
9.3.3 灵敏度分析 .....	221
9.3.4 设计规定 .....	224
9.3.5 优化分析 .....	226
习题 .....	228

## 下篇 化工应用软件开发

<b>第 10 章 AutoCAD 二次开发化工制图软件</b> .....	229
10.1 AutoCAD 二次开发概述 .....	229
10.1.1 二次开发的目的及必要性 .....	229
10.1.2 二次开发几种主要语言简介 .....	230
10.1.3 AutoCAD 二次开发的思路及 步骤 .....	232
10.2 AutoLISP 语言基础 .....	233
10.2.1 基本运算 .....	234
10.2.2 基本函数 .....	236
10.2.3 编程中常用的分支及条件判断 函数 .....	239
10.2.4 常用的绘图命令 .....	242
10.2.5 AutoLISP 命令调用过程 .....	247
10.3 Visual LISP 开发基础 .....	248
10.3.1 安装 .....	248
10.3.2 启动 .....	248
10.3.3 编辑 .....	248
10.3.4 调试 .....	248
10.4 DCL 基础 .....	250
10.4.1 定义 .....	250
10.4.2 控件 .....	250
10.4.3 程序编辑 .....	251
10.4.4 软件调试及加载 .....	254
10.5 AutoCAD 实例开发 .....	254
10.5.1 法兰绘制 .....	254
10.5.2 某零件三维视图绘制 .....	262
10.6 读者练习 .....	270
<b>第 11 章 化学化工过程计算机测量与控制系统开发</b> .....	275
11.1 计算机测量与控制基本原理 .....	275
11.1.1 概述 .....	275
11.1.2 测量基本原理 .....	276
11.1.3 控制基本原理 .....	276
11.1.4 两种不同的数据处理系统 .....	277
11.2 串行通信测量系统软件开发 .....	277
11.2.1 软件要求及功能 .....	277
11.2.2 基本原理 .....	277
11.2.3 系统软硬件配置 .....	278
11.2.4 软件窗体设置 .....	278
11.2.5 主要源代码及说明 .....	278
11.3 ISA 总线卡数据采集系统软件 开发 .....	280
11.3.1 软件要求及功能 .....	280
11.3.2 基本原理 .....	281
11.3.3 系统软硬件配置 .....	281
11.3.4 软件窗体设置 .....	282
11.3.5 主要源代码及说明 .....	282
习题 .....	290
<b>第 12 章 化学化工通用题库及机考辅助教学系统软件开发</b> .....	291
12.1 概述 .....	291
12.2 化工物性数据库软件开发方案的 确定 .....	292
12.2.1 软件需求及服务对象分析 .....	293
12.2.2 软件所需资源分析 .....	293
12.2.3 软件开发平台确定 .....	293
12.2.4 软件功能及逻辑结构确定 .....	294
12.3 化工物性数据库软件具体功能代码 编写 .....	294
12.3.1 数据库的建立及连接 .....	294
12.3.2 数据绑定及窗体开发 .....	299
12.3.3 教师系统代码开发 .....	300
12.3.4 学生系统代码开发 .....	304
12.4 软件的维护及进一步改进 .....	310
习题 .....	310
<b>第 13 章 化工仿真软件开发</b> .....	311
13.1 概述 .....	311
13.1.1 仿真(定义、数模) .....	311

13.1.2	化学化工仿真 .....	311	13.2.7	考题系统 .....	314
13.1.3	仿真软件开发策略 .....	312	13.3	强化传热过程实验仿真软件开发 .....	315
13.1.4	化工仿真软件基本要求及 功能 .....	312	13.3.1	软件要求及功能 .....	315
13.2	化工仿真软件开发中的几个主要 问题 .....	313	13.3.2	后台数学处理模型 .....	315
13.2.1	过程建模 .....	313	13.3.3	后台逻辑关系设置 .....	316
13.2.2	界面图形 .....	313	13.3.4	软件开发环境设置 .....	317
13.2.3	控制算法 .....	314	13.3.5	软件窗体设置 .....	317
13.2.4	阀门调节 .....	314	13.3.6	主要控件开发 .....	318
13.2.5	动画效果 .....	314	13.3.7	软件导入及仿真实验窗体 源代码及说明 .....	320
13.2.6	帮助系统 .....	314	13.3.8	进一步维护及扩展 .....	330
			习题 .....		330
<b>参考文献</b> .....					331

# 上 篇

## 化工数据处理及过程模拟

### 第 1 章 实验数据及模型参数拟合方法

#### 1.1 问题的提出

在化工设计及化工模拟计算中,需要大量的物性参数及各种设备参数。这些参数有些可以通过计算得到,但大量的参数还是要通过实验测量得到。实验测量得到的常常是一组离散数据序列  $(x_i, y_i)$ 。例如通过实验测量得到某一物质的饱和蒸气压  $p$  和温度  $t$  之间的一组数据序列。当所得数据比较准确时,可构造插值函数  $p(t)$  逼近客观存在的函数  $p = p(t)$ ,构造的原则是要求插值函数通过这些数据点,即  $p(t_i) = p_i, i = 1, 2, \dots, m$ 。此时,序列  $Q = (p(t_1), p(t_2), \dots, p(t_m))^T$  与  $P = (p_1, p_2, \dots, p_m)^T$  是相等的。当需要压力数据时,如果温度刚好等于实验点,则可直接从数据库中获取;如果温度不在实验点上,而在两实验点之间,则可利用插值函数求取。以线性插值函数为例,如所要求压力数据的温度在  $t_2$  和  $t_3$  之间,则压力的计算公式如下

$$p(t) = p_2 + \frac{t - t_2}{t_3 - t_2} (p_3 - p_2) \quad (1-1)$$

如果数据序列  $(x_i, y_i)$  (为一般起见),  $i = 1, 2, \dots, m$ , 含有不可避免的误差 (或称“噪声”, 如图 1-1 所示), 或者无法同时满足某特定的函数 (如图 1-2 所示), 那么, 只能要求所作逼近函数  $\psi(x)$  最优地靠近样点, 即向量  $Q = (\psi(x_1), \psi(x_2), \dots, \psi(x_m))^T$  与  $Y = (y_1, y_2, \dots, y_m)^T$  的误差或距离最小。按  $Q$  与  $Y$  之间误差最小原则作为“最优”标准构

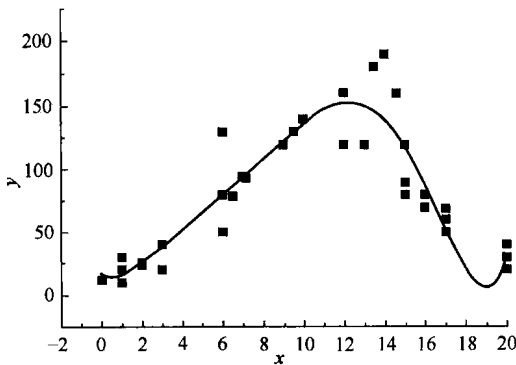


图 1-1 含有“噪声”的数据序列

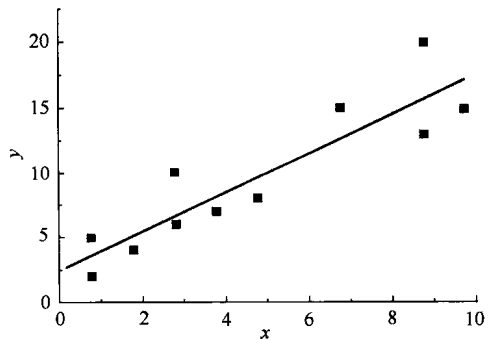


图 1-2 无法同时满足某特定函数的数据序列

造的逼近函数，称为拟合函数。

除了物性数据及设备参数需要利用数据拟合外，在化学化工中，许多模型也要利用数据拟合技术，求出最佳的模型参数。

如在某一反应工程实验中，测得了如表 1-1 所示的实验数据。

表 1-1 反应工程实验数据

序号	温度 $T$	转化率 $y$	序号	温度 $T$	转化率 $y$
1	10	0.1	5	50	0.95
2	20	0.3	6	60	0.68
3	30	0.7	7	70	0.34
4	40	0.94	8	80	0.13

现在要确定在其他条件不变的情况下，转化率  $y$  和温度  $T$  的具体关系，现拟用两种模型去拟合实验数据，两种模型分别是

$$y = a_1 + b_1 T + c_1 T^2 \quad (1-2)$$

$$y = \frac{c_2}{a_2 + b_2 (T - 45)^2} \quad (1-3)$$

如何求取上述模型中的参数，并判断两种模型的优劣是化学化工工作者经常要碰到的问题，这个问题的求解将在本章下面的有关章节中进行详细的讲解。

## 1.2 拟合标准

前面已经提到按  $Q$  与  $Y$  之间误差最小原则作为“最优”标准构造的逼近函数，称为拟合函数，而向量  $Q$  与  $Y$  之间的误差或距离有各种不同的定义方法，一般有以下几种。

(1) 用各点误差绝对值的和表示

$$R_1 = \sum_{i=1}^m |\psi(x_i) - y_i| \quad (1-4)$$

(2) 用各点误差按绝对值的最大值表示

$$R_\infty = \max_{1 \leq i \leq m} |\psi(x_i) - y_i| \quad (1-5)$$

(3) 用各点误差的平方和表示

$$R = R_2 = \sum_{i=1}^m [\psi(x_i) - y_i]^2 \quad \text{或} \quad R = \|Q(x) - Y\|_2^2 \quad (1-6)$$

式中， $R$  称为均方误差。由于计算均方误差的最小值的原则容易实现而被广泛采用。按均方误差达到极小构造拟合曲线的方法称为最小二乘法。同时还有许多种其他的方法构造拟合曲线，感兴趣的读者可参阅有关教材。本章主要讲述如何用最小二乘法构造拟合曲线。

在实际问题中，怎样由实验测得的数据设计和确定“最贴近”的拟合曲线，其关键在于选择适当的拟合曲线类型或模型类型，有时根据专业知识和工作经验即可确定拟合曲线类型；在对拟合曲线一无所知的情况下，不妨先绘制数据的粗略图形，或许可从中观测出拟合曲线的类型；更一般地，对数据进行多种曲线类型的拟合，并计算均方误差，用数学实验的方法找出在最小二乘法意义下的误差最小的拟合函数。

例如，实验测得二甲醇（DME）的饱和蒸气压和温度的关系，见表 1-2。

表 1-2 DME 饱和蒸气压和温度的关系

序号	温度/°C	蒸气压/MPa	序号	温度/°C	蒸气压/MPa
1	-23.7	0.101	5	20	0.495
2	-10	0.174	6	30	0.662
3	0	0.254	7	40	0.880
4	10	0.359			

由表 1-2 的数据观测可得, DME 的饱和蒸气压和温度有正相关关系, 如果以函数  $p = a + bt$  来拟合, 则拟合函数是一条直线。通过计算均方误差  $Q(a, b)$  最小值而确定直线方程 (见图 1-3)。

$$Q(a, b) = \sum_{i=1}^m [p(t_i) - p_i]^2 = \sum_{i=1}^m (a + bt_i - p_i)^2 \quad (1-7)$$

拟合得到直线方程为

$$p = 0.30324 + 0.0121t \quad (1-8)$$

相关系数  $R$  为 0.97296, 平均绝对偏差  $SD$  为 0.05065。

如果采用二次拟合, 通过计算下述均方误差

$$Q(a_0, a_1, a_2) = \sum_{i=1}^m [p(t_i) - p_i]^2 = \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1 t_i + a_2 t_i^2 - p_i)^2 \quad (1-9)$$

拟合得二次方程为

$$p = 0.24845 + 0.00957t + 0.00015t^2 \quad (1-10)$$

相关系数  $R$  为 0.99972, 平均绝对偏差  $SD$  为 0.0056, 具体拟合曲线见图 1-4。

比较图 1-3 和图 1-4 以及各自的相关系数和平均绝对偏差可知, 对于 DME 饱和蒸气压和温度之间的关系, 在实验温度范围内用二次拟合曲线优于线性拟合。但二次拟合曲线具有局限性, 由图 1-4 观察可知, 当温度低于  $-30^\circ\text{C}$  时, 饱和压力有升高的趋势, 但在拟合的温度范围内, 二次拟合的平均绝对偏差又小于一次拟合, 故对物性数据进行拟合时, 不仅要看在拟合条件下的拟合效果, 还必须根据物性的具体性质, 判断在拟合条件之外的物性变化趋势, 以便使拟合公式在已做实验点数据之外应用。具体的计算方法及编程在下一节里介绍。

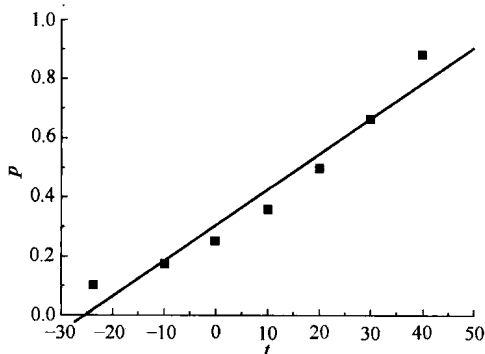


图 1-3 DME 饱和蒸气压和温度之间的线性拟合

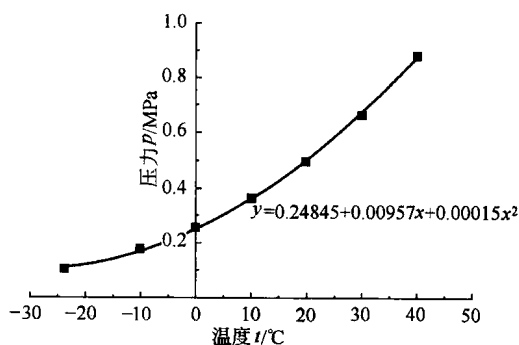


图 1-4 DME 饱和蒸气压和温度之间的二次拟合

## 1.3 单变量拟合和多变量拟合

### 1.3.1 单变量拟合

#### (1) 线性拟合

给定一组数据  $(x_i, y_i)$ ,  $i=1, 2, \dots, m$ , 作拟合直线  $p(x) = a + bx$ , 均方误差为

$$Q(a,b) = \sum_{i=1}^m [p(x_i) - y_i]^2 = \sum_{i=1}^m (a + bx_i - y_i)^2 \quad (1-11)$$

由数学知识可知,  $Q(a,b)$  的极小值需满足

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q(a,b)}{\partial a} &= 2 \sum_{i=1}^m (a + bx_i - y_i) = 0 \\ \frac{\partial Q(a,b)}{\partial b} &= 2 \sum_{i=1}^m (a + bx_i - y_i)x_i = 0 \end{aligned}$$

整理得到拟合曲线满足的方程

$$\begin{cases} ma + \left(\sum_{i=1}^m x_i\right)b = \sum_{i=1}^m y_i \\ \left(\sum_{i=1}^m x_i\right)a + \left(\sum_{i=1}^m x_i^2\right)b = \sum_{i=1}^m x_i y_i \end{cases} \quad (1-12)$$

或

$$\begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_i \\ \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i y_i \end{pmatrix}$$

式(1-12)称为拟合曲线的法方程。可用消元法或克莱姆方法解得

$$\begin{aligned} a &= \frac{\begin{vmatrix} \sum_{i=1}^m y_i & \sum_{i=1}^m x_i \\ \sum_{i=1}^m x_i y_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_i \\ \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 \end{vmatrix}} \\ &= \frac{\left(\sum_{i=1}^m y_i \sum_{i=1}^m x_i^2 - \sum_{i=1}^m x_i \sum_{i=1}^m x_i y_i\right)}{\left[m \sum_{i=1}^m x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^m x_i\right)^2\right]} \\ b &= \frac{\left(m \sum_{i=1}^m x_i y_i - \sum_{i=1}^m x_i \sum_{i=1}^m y_i\right)}{\left[m \sum_{i=1}^m x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^m x_i\right)^2\right]} \end{aligned}$$

**【例 1-1】** 下表为实验测得的某一物性和温度之间的关系数据, 表中  $x$  为温度数据,  $y$  为物性数据。请用线性函数拟合温度和物性之间的关系。

序号	$x$	$y$	序号	$x$	$y$	序号	$x$	$y$
1	7	9	8	21	30	15	35	51
2	9	12	9	23	33	16	37	54
3	11	15	10	25	36	17	39	57
4	13	18	11	27	39	18	41	60
5	15	21	12	29	42	19	43	63
6	17	24	13	31	45	20	45	66
7	19	27	14	33	48	21	47	69

解: 设拟合直线  $p(x) = a + bx$ , 并计算得下表。

序号	$x$	$y$	$xy$	$x^2$
1	7	9	63	49
2	9	12	108	81
3	11	15	165	121
4	13	18	234	169
5	15	21	315	225
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
21	47	69	3243	2209
$\Sigma$	567	819	26733	18389

将数据代入法方程组 (1-12) 中, 得到

$$\begin{pmatrix} 21 & 567 \\ 567 & 18389 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 819 \\ 26733 \end{pmatrix}$$

解方程得  $a = -1.5$ ,  $b = 1.5$

故拟合直线为  $p(x) = -1.5 + 1.5x$

线性拟合的 VB 界面 (见图 1-5) 及程序清单如下。

```
Private Sub Command1_Click()
Dim x(5), y(5), c, d, m, p, a, b, eer
Const n=5
For i=1 To 5
    x(i)=InputBox("x(i)=")
    y(i)=InputBox("y(i)=") '数据输入
    Print "x(i)="; x(i)
    Print "y(i)="; y(i)
Next i
c=0
d=0
m=0
p=0
For i=1 To 5
    c=c+x(i)
    d=d+x(i)^2
    m=m+y(i)
    p=p+x(i)*y(i)
Next i
a=(m*d-c*p)/(n*d-c^2)
b=(n*p-c*m)/(n*d-c^2) '参数计算
a=Int(a*1000+0.5)/1000
b=Int(b*1000+0.5)/1000
Text1.Text=Str(a)
Text2.Text=Str(b) '参数输出
For i=1 To 5
    eer=eer+(a+b*x(i)-y(i))^2 '误差计算
    eer=Int(eer*100000+0.5)/100000
Next i
    eer=eer/5
Text3.Text=Str(eer)
End Sub
```

程序中数据的输入输出用到的是 InputBox() 和 Text.Text 函数, 为了更加优化数据的输入输出界面, 详细内容可参考其他 VB 教科书, 本教材只对计算方法进行介绍, 并把这些

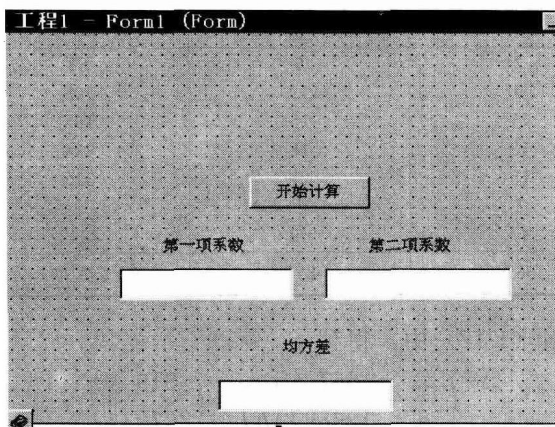


图 1-5 线性拟合的 VB 界面

方法变成具体可以实现的计算机程序，至于程序中涉及有关 VB 的详细内容，不作具体展开，但会对程序的功能提出要求。比如用户在输入数据时，要求计算机能提醒现在输入的是第几组数据，是  $x$  还是  $y$ ，这就要对 `InputBox()` 函数括号中的内容进行修改；同时也可更改程序的界面，直接在界面上输入实验数据。如果对上述程序中的有关输入数据  $x$  和  $y$  稍加修改，就可以对一些其他非线性的曲线进行拟合。例如要拟合  $y = a + \frac{b}{x^2}$ ，只需在数据输入后增加一句 `x(i)=1/x(i)^2`，而在程序后面的误差 `eer` 计算中则不需要修改。因为在误差计算公式中的 `x(i)` 其实就是  $1/x(i)^2$ ，如进行修改反而弄巧成拙。

有关一次拟合的变型问题，在后面的具体例子中还会作介绍。灵活地运用一次拟合的方法，能够帮助人们解决不少问题。

## (2) 二次拟合函数

给定数据序列  $(x_i, y_i), i=1, 2, \dots, m$ ，用二次多项式函数拟合这组数据。

设  $p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ ，作出拟合函数与数据序列的均方误差表达式

$$Q(a_0, a_1, a_2) = \sum_{i=1}^m [p(x_i) - y_i]^2 = \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 - y_i)^2 \quad (1-13)$$

由数学知识可知， $Q(a_0, a_1, a_2)$  的极小值满足

$$\begin{cases} \frac{\partial Q}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 - y_i) = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 - y_i)x_i = 0 \\ \frac{\partial Q}{\partial a_2} = 2 \sum_{i=1}^m (a_0 + a_1x_i + a_2x_i^2 - y_i)x_i^2 = 0 \end{cases}$$

整理上式得二次多项式函数拟合需满足的条件方程

$$\begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 \\ \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 & \sum_{i=1}^m x_i^3 \\ \sum_{i=1}^m x_i^2 & \sum_{i=1}^m x_i^3 & \sum_{i=1}^m x_i^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i^2 y_i \end{pmatrix} \quad (1-14)$$



解此方程得到在均方误差最小意义下的拟合函数  $p(x)$ 。式(1-14)称为多项式拟合的法方程,法方程的系数矩阵是对称的。当拟合多项式  $n > 5$  时,法方程的系数矩阵是病态的,在用通常的迭代方法求解线性方程时会发散,在计算中要采用一些特殊算法以保护解的准确性。关于线性方程的求解方法,将在第3章中介绍。

上面是二次拟合基本类型的求解方法,和一次拟合一样,二次拟合也可以有多种变型,例如  $p(x) = a_0 + a_1 x^3 + a_2 x^5$ , 套用上面的公式,可以得到关于求解此拟合函数的法方程式(1-15)。值得注意的是在此法方程的构建过程中,进行了变量的代换。首先是拟合函数中变量的代换:  $x^3 \rightarrow x$ ,  $x^5 \rightarrow x^2$ 。其次是法方程的代换:将相应拟合函数中的代换引入法方程中。同时应引起注意的是法方程中  $x$  的4次幂是由两个原始两次幂相乘得到,  $x$  的3次幂是由一个原始两次幂和一个原始一次幂相乘得到,在这里原始一次幂就是  $x^3$ , 原始二次幂就是  $x^5$ , 而法方程中的二次幂分为两种情况,在式(1-14)等式左边的法方程系数矩阵中,第1列第3行和第3行第1列以及式(1-14)等式右边第3行中的二次幂用原始二次幂代替即  $x^5$ , 而式(1-14)等式左边的法方程系数矩阵中第2行第2列中的二次幂是两个一次幂的乘积,即  $x^6$ , 更为清晰的理解可参见后面介绍的多变量函数拟合。这个代换概念至关重要,在以后的二次拟合的各类变型中,均需利用这个概念,千万不要用常规的思路去进行代入计算。

$$\begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_i^3 & \sum_{i=1}^m x_i^5 \\ \sum_{i=1}^m x_i^3 & \sum_{i=1}^m x_i^6 & \sum_{i=1}^m x_i^8 \\ \sum_{i=1}^m x_i^5 & \sum_{i=1}^m x_i^8 & \sum_{i=1}^m x_i^{10} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i^3 y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i^5 y_i \end{pmatrix} \quad (1-15)$$

如果需要求解是下面的拟合函数

$$\ln y = a_0 + \frac{a_1}{x+273} + b_1 \times (x+273)^{1.5}$$

参照上面的方法,很容易得到求解该拟合函数的法方程

$$\begin{pmatrix} m & \sum_{i=1}^m \frac{1}{x_i+273} & \sum_{i=1}^m (x_i+273)^{1.5} \\ \sum_{i=1}^m \frac{1}{x_i+273} & \sum_{i=1}^m \frac{1}{(x_i+273)^2} & \sum_{i=1}^m (x_i+273)^{0.5} \\ \sum_{i=1}^m (x_i+273)^{1.5} & \sum_{i=1}^m (x_i+273)^{0.5} & \sum_{i=1}^m (x_i+273)^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^m \ln y_i \\ \sum_{i=1}^m \frac{\ln y_i}{x_i+273} \\ \sum_{i=1}^m [(x_i+273)^{1.5} \ln y_i] \end{pmatrix}$$

**【例 1-2】** 请用二次多项式函数拟合下面这组数据。

序号	$x$	$y$	序号	$x$	$y$
1	-3	4	5	1	-1
2	-2	2	6	2	-2
3	-1	3	7	3	-3
4	0	0			