

梁正熙 魏玉珍 编著

化学化工中的 数值法

科学出版社

化学化工中的数值法

梁正熙 魏玉珍 编著

内 容 简 介

本书介绍化学化工领域中常用的数值计算方法及其计算机程序设计。全书分三部分，共八章。内容包括线性方程组与非线性方程和方程组的解，函数插值、数值微分、数值积分、常微分方程的解以及实验数据处理中常用的线性回归、曲线拟合等。各种算法均附有联系实际的例题和用BASIC语言编写的源程序。每章后面有习题，书末附有答案。

本书可供高等院校化学化工专业的师生及从事化学化工工作的科技人员参考。

化学化工中的数值法

梁正熙 魏玉珍 编著

责任编辑 张英娥

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

北京景山学校印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1989年7月第一版 开本：787×1092 1/32

1989年7月第一次印刷 印张：12 7/8

印数：0001—2,500 字数：292 000

ISBN 7-03-001431-6/TQ·8

定价：9.80元

前 言

电子数字计算机问世已有多多年，从事化学化工工作的科技人员，都希望能掌握这一工具，以便摆脱原有的冗长和繁琐的手工计算。笔者编写本书，旨在介绍数值计算方法在化学化工领域中的应用及如何根据数值计算方法编写计算机程序，提供一种利用电子数字计算机进行快速计算的方法。

为了便于从事化学化工工作的科技人员阅读，本书力求深入浅出，既注意阐明数学原理，又尽量避免过多的推证。笔者特别注意从化学化工方面的实际出发，讨论解决实际问题的常用算法和计算机程序。

全书分三部分。第一部分，概述电子计算机和数值计算方法在化学化工中的应用，程序设计的一般概念和方法，PC-1500计算机的算法语言特点。第二部分，介绍化学化工中常用的数值计算方法，包括线性方程组与非线性方程及方程组的解，函数插值、数值微分、数值积分以及常微分方程的解等。第三部分，介绍化学化工中实验数据的处理方法，包括线性回归和曲线拟合等。各种算法均附有联系实际的例题和用BASIC语言编写的源程序。为了清晰地阐明编写程序的数学原理及思考方法，各源程序前均有详细的程序框图以备对照。每章后面有习题，书末附有答案。

本书在编写过程中，得到了金韵同志的热情鼓励与支持。刘万祺同志进行了初审，莫述诚同志对全部书稿进行了总审核。在此，作者表示深切的谢意。

书中不妥之处，祈请读者不吝赐教。

41128

目 录

前言

第一章 电子数字计算机与数值计算方法	1
1.1 电子数字计算机简介	1
1.1.1 电子计算机的发展过程	1
1.1.2 电子计算机的基本结构和特点	3
1.1.3 电子计算机在化学化工中的应用	4
1.2 数值计算方法	8
1.2.1 什么是数值计算方法	8
1.2.2 为什么要学习数值计算方法	10
1.3 程序设计的一般概念	11
1.3.1 程序和程序设计	11
1.3.2 程序设计语言	11
1.3.3 框图 (流程图)	12
1.3.4 用电子计算机解题的步骤	13
1.4 PC-1500袖珍计算机的BASIC语言特点	15
1.4.1 变量和数组说明语句	17
1.4.2 打印语句	20
1.4.3 提供数据的语句	23
1.4.4 条件语句	27
1.4.5 循环语句	31
1.4.6 取整函数	39
习题	50
第二章 非线性代数方程的数值解	53
2.1 逐步扫描法求根的近似值	54
2.1.1 方法概述	54

2.1.2	程序框图	55
2.1.3	计算实例	57
2.2	求根的精确值	57
2.2.1	二分法	58
2.2.2	迭代法	76
2.2.3	迭代过程的加速	86
2.2.4	牛顿法	90
	习题	102
第三章	线性代数计算方法	104
3.1	线性方程组的精确解法	105
3.1.1	消元法	105
3.1.2	主元素消去法	111
3.2	行列式的计算	122
3.2.1	行列式的定义	122
3.2.2	行列式的展开式	123
3.2.3	行列式的计算	125
3.2.4	用行列式求解线性方程组	135
3.3	矩阵运算	143
3.3.1	矩阵的定义	143
3.3.2	几种特殊型式的矩阵	146
3.3.3	矩阵的加减与数乘	148
3.3.4	矩阵的乘积	151
3.3.5	矩阵的转置	160
3.3.6	矩阵的逆	163
3.3.7	矩阵的秩	180
	习题	191
第四章	插值、微分和积分	194
4.1	插值法	194
4.1.1	线性插值法	196
4.1.2	拉格朗日多项式插值法	200
4.1.3	分段拉格朗日插值法	205

4.2 数值微分法	209
4.3 数值积分法	218
习题	231
第五章 常微分方程与常微分方程组的数值解	234
5.1 常微分方程的数值解	235
5.2 常微分方程初值问题的数值解	236
5.2.1 欧拉法	236
5.2.2 改良欧拉法	239
5.2.3 龙格-库塔法	244
5.3 常微分方程组初值问题的数值解	250
5.4 高阶常微分方程初值问题的数值解	258
5.5 常微分方程边值问题的数值解	262
5.5.1 有限差分法	263
5.5.2 试差法	281
习题	289
第六章 非线性代数方程组的数值解	291
6.1 迭代法	291
6.2 牛顿-拉福森法	296
习题	310
第七章 袖珍计算机绘图法	311
7.1 绘图语句	311
7.1.1 打印方向语句	312
7.1.2 移笔语句	312
7.1.3 画线语句	313
7.1.4 确定坐标原点的语句	313
7.2 坐标的绘制	314
7.3 坐标图中直线的绘制	318
7.4 坐标图中曲线的绘制	321
习题	325
第八章 回归分析和曲线拟合	327

8.1 一元线性回归	328
8.1.1 用最小二乘法求回归直线	329
8.1.2 一元线性回归计算程序	336
8.1.3 一元线性回归计算实例	338
8.2 多元线性回归	342
8.2.1 用最小二乘法作多元线性回归	343
8.2.2 多元线性回归计算程序	347
8.2.3 多元线性回归计算实例	352
8.3 剔除可疑数据及其计算程序	356
8.3.1 剔除可疑数据的方法	356
8.3.2 剔除可疑数据的计算程序	358
8.3.3 具有剔除可疑数据功能的一元线性回归计算 实例	365
8.4 曲线拟合	369
8.4.1 用最小二乘法拟合曲线	369
8.4.2 多项式拟合计算程序	372
8.4.3 曲线拟合计算实例	374
习题	380
参考文献	382
习题答案	384

第一章 电子数字计算机与数值计算方法

1.1 电子数字计算机简介

电子计算机可分为三类:

(1) 电子数字计算机。它是以数字形式的量值在机器内部进行运算的电子计算机。

(2) 电子模拟计算机。它是用连续变化的物理量表示被运算变量的电子计算机。

(3) 电子数字-模拟混合计算机。它是将模拟技术和数字技术有机地结合在一起的电子计算机。

由于电子数字计算机的精度高,使用方便,因此在各行各业它已被广泛采用。本书只介绍电子数字计算机(以下简称电子计算机或计算机)。

1.1.1 电子计算机的发展过程

从1946年第一台电子数字计算机“ENIAC”诞生以来,它已经历了四个发展阶段。

第一阶段:从1946年到1959年。在此期间,计算机所使用的逻辑元件为电子管,故称电子管计算机,也称为第一代计算机。这种计算机,体积庞大,运算速度低。

第二阶段:从1959年到1964年。计算机的逻辑元件采用晶体管,称为晶体管计算机,又称为第二代计算机。它的运算速度约每秒几万次到几十万次,体积开始缩小,稳定性和可靠性有一定的提高。

第三阶段：从1964年美国IBM公司的IBM360系列问世到60年代末，出现了第三代计算机，它的逻辑元件采用集成电路，故称为集成电路计算机。它的运算速度约每秒几十万次到几百万次，甚至达到上亿次，体积进一步缩小，机种多样化、系列化，外部设备不断增加，尤其是终端设备和远程终端设备迅速发展。第三代计算机在存贮器容量、运算速度和可靠性等方面，都比第二代提高了一个数量级。

第四阶段：从70年代以来，由于计算机全面采用大规模集成电路，故称为大规模集成电路计算机，即第四代计算机。它的可靠性和运算速度大为提高，体积更小，成本更低。1975年研制成功的470V/6和M-190计算机，其主存贮器及逻辑元件均采用大规模集成电路，是第四代计算机的代表。我国于1983年自行研究、设计和制造的“银河”亿次计算机，也属于这一代计算机。

当前的发展趋势是：第四代计算机正在全面地取代老一代计算机，并向超大规模集成电路的方向迈进。值得指出的是，1971年出现的微型计算机是发展大规模集成电路的产物。微型计算机的中央处理单元，由一片或几片大规模集成电路组成。这种中央处理单元，称为微处理器或微处理机。微处理机加上其他部件，如时钟脉冲发生器、存贮器、接口电路等，便构成了微型计算机。所以，微型计算机是指由微处理机作为中央处理单元而构成的微型化计算机。

现在，国外微型机的品种有几百种，根据其功能，可分低档、中档和高档三类；其结构则有单片、多片、单板和多板等多种型式。在软件方面，许多微型机已配置了多种高级语言。由于微型机在使用时不要求严格的环境条件，而且价格低廉，因而为计算机的普及提供了极好的条件。

随着半导体技术、光学技术、超导技术和电子仿生技术的

发展,不久的将来,可能会出现光学计算机、超导计算机和人工智能计算机等全新的计算机。可以预料,不用太久,计算机科学将会发展到一个更高的水平。

1.1.2 电子计算机的基本结构和特点

现代电子计算机由硬件和软件两部分组成。硬件包括运算器、存贮器、控制器、输入和输出装置。其中,运算器和控制器总称为中央处理机 (CPU),它们之间的关系如图1.1所示。

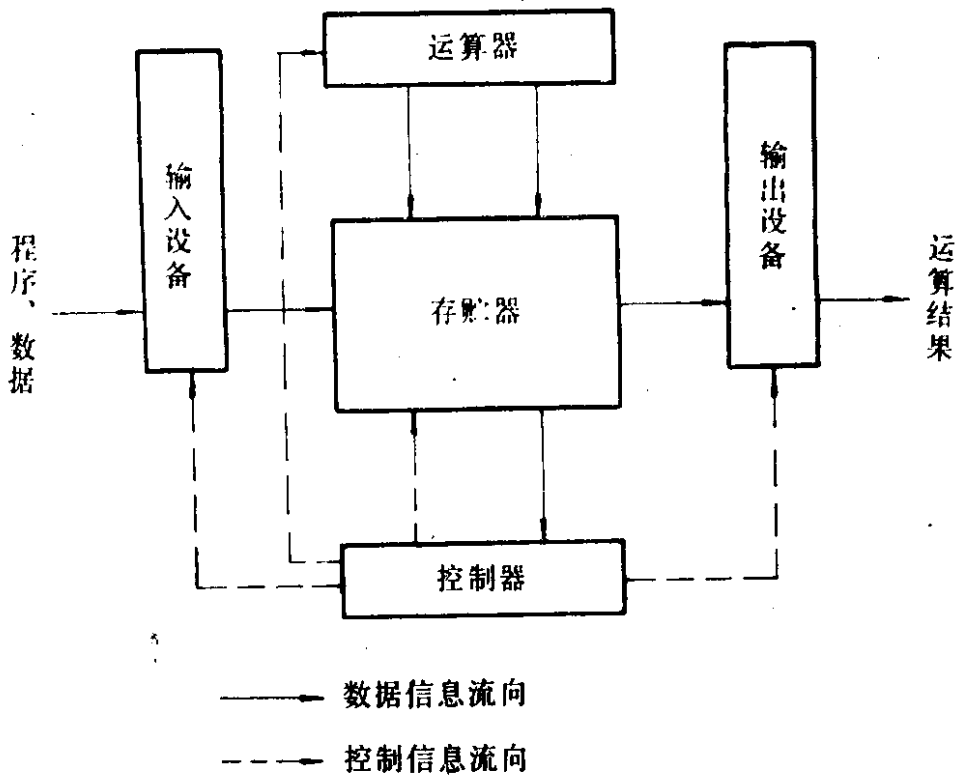


图 1.1 计算机各部分的关系

中央处理机 中央处理机是整个计算机系统的中枢,它指挥和协调整机的运转,执行程序指令。其中运算器执行算术运算和逻辑判断,控制器则指挥协调全机工作。

存贮器 存贮器接受和贮存中央处理机和输入装置的信

息,又向中央处理机和输出装置提供贮存的信息。存贮器中,每个存贮单元都有“地址”,信息既可存入任一地址的存贮单元,也可以从任一存贮单元中取出。

输入输出装置 计算机输入信息的装置有穿孔卡、穿孔带、磁带、磁盘、磁鼓、电传打字机等。许多输入装置也可以用作输出装置,但最常用的输出装置是高速打字机。

电子计算机有以下特点:

运算速度快 第一代电子计算机每秒钟只能运算五千次。第四代计算机,运算速度已经达到每秒几十万、几百万次,甚至达到一亿次或几亿次了。计算机的运算速度是其他计算工具所不能比拟的。

计算精度高 一般说来,电子计算机的计算至少可以精确到四位数字,大型计算机可精确到十多位数字。

按程序执行运算 只要预先编好运算程序,将程序及各种原始数据输入计算机,计算机就能按预定的要求进行运算,直至得出最后结果。

有存贮和记忆的功能 计算机有存贮原始数据和中间结果的功能,在需要时这些数据随时可以调用,同人类大脑的记忆功能十分类似。

1.1.3 电子计算机在化学化工中的应用

目前,电子计算机在化学化工中的应用,主要表现在数据处理、计算机辅助设计、化学化工数据库和物性估算、化工情报信息检索、化工过程控制和化工企业管理等方面。

1. 数据处理

用计算机对实验、研究或生产过程中的各种数据进行记录、整理与计算,加工成人们所需要的结果,称为数据处理。

目前,用计算机处理实验数据已经相当普遍,它包括实验数据的采集、显示和处理等几方面。处理方法可分为离线法和在线法两种。离线法是将人工收集的数据输入计算机进行计算和处理;在线法则是把计算机作为整个实验装置的一部分,通过接口,把仪器、仪表收集的模拟量转换成数字量输入计算机,最后由计算机输出处理的结果。在线法可以提高分析的精度和操作的自动化程度。这种方法已经在色谱、光谱、质谱、X射线晶体衍射等测试仪器中广泛地使用。例如Burke^[1]及Thurman^[2]等人曾介绍一种用计算机控制的气相色谱系统,其最大数据采集速度为60点/s;流量控制范围为20—100ml/min,波动不大于0.4%。此系统在控制多路采集的实验中,具有一定的实时决策能力。

2. 计算机辅助设计

1962年美国麻省理工学院提出了计算机辅助设计(简称CAD)的概念,其主要内容是将工艺过程的数学模型在计算机上进行设计、计算,包括物料衡算,能量衡算,设备计算,施工图设计,公用工程设计以及编制概算、订货、施工计划等。将这种计算机程序系统用于化工过程,称为化工流程模拟系统。化工流程模拟系统的程序结构中,一般包括化工单元程序库,物性估算程序包和计算方法程序库等。化工单元程序库中又包括反应、换热、闪蒸、蒸馏、吸收、气体压缩、物料混合等子程序。物性估算程序包中,包括多种纯物质的物性程序库和用以估算各种纯物质或混合物热力学性质、传递过程性质、气液相平衡数据的子程序。计算方法程序库则包括方程求根、插值、回归、积分以及最优化计算等子程序。

3. 化学化工数据库

数据库是利用计算机对数据、信息实行科学管理的新兴技术。从事化学化工的生产、开发设计或科学研究,要用大量的物性数据,例如分子量、比重、沸点、熔点、临界常数、分子体积、偏心因子等基本物性数据,热容、焓、熵及生成热等热力学性质数据,粘度、扩散系数、导热系数、表面张力等传递过程数据等。在早期的计算机应用中,这些数据以原始数据的方式输入,既不方便,又易出错。随着化学化工学科水平的不断提高,不仅物性数据数量增加,而且精度也不断提高。为了提高数据处理的速度和准确度,遂出现了数据库。例如,物性数据库中,常有估算物性的计算方法程序包。当一种物性存在多种估算方法时,计算机程序能够自动选择计算的最佳路线。日本科学技术研究所开发的JUSEAESOPP,贮存的化合物数达2500种,包括100个物性估算子程序,能估算多组分气液平衡的二元配偶常数400组。

目前,国内已成立了化工数据系统工作联络站,以推动我国化工数据库的工作。

4. 化学化工情报信息检索

化学化工方面的文献资料、技术经济情报和表征物质结构的各种图谱,都可以用计算机文件或数据库的形式进行存贮、管理和检索。

化学,尤其是分析化学,已经积累了大批数据,这些数据包含了丰富的信息,例如从各种光谱、核磁共振谱、衍射谱、电子能谱、色谱、极谱、质谱等数据中,除能获得化合物组成的信息外,还能获得关于原子排列、原子振动、电子能级、分子间作用力、同位素丰度等多方面信息。如果把这些信息的贮存

和加工结合起来,便可构成“专家系统”,以便对某些应用课题提供咨询。所谓“模式识别”,就是一种信息加工方法。它不仅识别图谱,还可以从多因子决定的大批样本中寻找规律,目前,在这方面国内已取得若干成果^[3]。

5. 过程控制

早在50年代中期,化工生产过程就已开始使用计算机控制,并从最初的巡回检测、越限报警、自动显示和打印制表逐步发展到直接数字控制、现场操作指导控制、监督控制和分散控制等。70年代以来,由于大规模集成电路技术的发展,诞生了以微处理器为中心的微型计算机,为实现分散型计算机控制系统创造了条件。

用计算机控制生产,能提高产品的产量、质量和劳动生产率,改善劳动条件,节约原料消耗,从而获得更多的经济效益。70年代,我国已在一些工厂生产中利用计算机进行巡回检测 and 数据处理,在某些装置上,实现了计算机直接数字控制,并在年产30万吨乙烯的设备上,成功地安装了计算机监督控制系统。

6. 企业管理

70年代以来,国外的一些大型化工企业,开始用计算机管理企业。大型化工企业中,生产组织、计划管理、资源和能源的综合利用、工艺流程的最优化等各方面之间是相互关联的,企业管理是相当复杂的问题。用计算机进行企业管理,就是用多约束条件的线性规划模型,完成技术经济、生产作业、物质供应、产品销售、财务收支、人事调配等方面的计划和决策,实现管理过程的最优化。

1.2 数值计算方法

1.2.1 什么是数值计算方法

大学数学课程中,一般仅限于求出某些问题的精确的解析解(或称分析解)。然而,在实际工作中,常常会遇到一些无法求得解析解的情况。例如,下面所举的简单蒸馏计算实例,就属于这类问题。

设溶液的起始量为 F ,起始组成为 x_f ,蒸馏结束时的残液组成为 x_w ,拟计算残液量 W 。根据对简单蒸馏过程的分析可知:

$$\ln \frac{F}{w} = \int_{x_w}^{x_f} \frac{dx}{y-x} \quad (1.1)$$

式(1.1)是计算简单蒸馏时著名的雷利公式。其中 y 是与组成为 x 的液相平衡的气相组成(为简单起见,此处仅考虑二组分溶液)。积分式中包含 x, y 两个变量。若相平衡关系式为

$$y = f(x)$$

将具体的函数关系代入式(1.1)积分时,往往因被积函数过于复杂而无法获得解析解。若 y 与 x 之间只有数值关系,即只有一组 $x(x_0, x_1, x_2, \dots, x_n)$ 和 $y(y_0, y_1, y_2, \dots, y_n)$ 相对应,也不可能求得解析解。这时,就只能用数值分析法求取积分的近似值。

化学化工领域的实际问题,涉及的学科比较多,描述这类问题的一般数学模型是代数方程组、常微分方程组和偏微分方程组等。要求得这些方程的解析解,是很不容易的。表1.1列出了用解析法求解这些方程的难易程度。

当然,这些方程都可以用数值法求解。所谓数值计算法,是指根据数据之间的关系,按某种数学方法,通过计算寻找近

表 1.1 解析法求解数学方程的难易程度

类 型 方 程 式	线 性			非 线 性		
	一个	几个	多个	一个	几个	多个
代数方程	极易	易	基本不可能	非常难	非常难	不可能
常微分方程	易	难	基本不可能	非常难	不可能	不可能
偏微分方程	难	基本不可能	不可能	不可能	不可能	不可能

似答案的一种方法,有时也称“数值分析法”。利用电子计算机,使用数值计算法解决自然科学和工程学实际问题时,至少必须注意到两个因素:一是计算量的大小和答案的可靠性;二是待解决的问题是否有精确和完整的数学模型。

1. 计算量

用数值计算法解决问题,往往要进行大量的数字运算,因而手工计算往往无法完成。许多数值计算法的基本思想,在现代数学的萌芽时期就已出现。然而,由于计算量比较大,在数字计算机诞生以前,这些方法的使用受到限制。只是在电子计算机得到实际应用之后,数值计算法才有了迅速发展。

关于计算量,可用下面例子说明。例如计算一个3阶行列式的值:

$$\begin{vmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{vmatrix} = a_1b_2c_3 + a_2b_3c_1 + a_3b_1c_2 - a_3b_2c_1 - a_2b_1c_3 - a_1b_3c_2$$

其展开式共有6项,每项要做2次乘法,共做12次乘法。如果行列式有20阶,则要做 4×10^{18} 次乘法。使用每秒100万次的计算机,大约要算12万年。显然,这样的计算方法是不能接受