

朱旭容 陈钢 陈鸣德

化工 计算机程序 精选

(BASIC 语言)

江苏科学技术出版社

16
83

化工计算机程序精选

(BASIC 语言)

朱旭容 陈 钢 陈鸣德

江苏科学技术出版社

(苏)新登字第 002 号

江苏科学技术出版社

(语言 BASIC)

江苏省新华书店

化工计算机程序精选

(BASIC 语言)

朱旭容 陈 钢 陈鸣德

出版发行:江苏科学技术出版社

经 销:江苏省新华书店

印 刷:宿迁市印刷厂

开本 787×1092 毫米 1/16 印张 10.25 字数 245,000

1993 年 10 月第 1 版 1993 年 10 月第 1 次印刷

印数 1—4,000 册

ISBN 7-5345-1649-8

O·97 定价:6.00 元

责任编辑 黄元森

我社图书如有印装质量问题,可随时向承印厂调换

前 言

微型计算机在我国日益发展和普及,对化工专业的设计、研究、生产人员和学生来说,已成为重要的计算工具。在所使用的计算机语言中,BASIC 语言受到欢迎,因为它容易掌握,操作简单方便。

我们在多年的教学和工程实践中,深感应有这样一本书:既不赘述 BASIC 语言,又不引用很多数学原理,让化工界的技术人员在掌握基本的 BASIC 语言的基础上,“拿来就用”,使用 BASIC 程序解决有关化学工程计算的实际问题,写这本书就是想做到这一点。

本书的内容依据数学方法分类,前六章每章列出必要的数学公式,免除推导,通过几个化工热力学、化工单元操作、化工反应工程、实验数据处理等方面的典型算例(书上所有例题均经过上机计算),详细说明解题过程,并列出了框图、程序、计算结果。读者在学习掌握这些算例的基础上,不难去解算书末所附的习题(均有答案)和类似的实际问题。第七章介绍了 BASIC 语言的基本要点,供编制程序和上机操作时查阅。

读者在看懂各章例题后,也可转换成其它语言(如 FORTRAN 语言),再上机演算,以加深理解。

本书可供在职化工专业技术人员使用,也可作为大中专院校教材,总学时 60,其中课堂讲授 20 学时,上机操作 40 学时。

使用的机种可以是 IBM PC/XT,AT286、386、486 及兼容机,VAX 机等,但要注意对不同的微机采用相应的输出、输入等语句。

本书在编写过程中得到谈亚珠先生的指导和帮助,在此表示衷心感谢。

编 者

1993 年 3 月于南京化工学院

目 录

第一章 一元非线性方程	(1)
一、直接迭代法	(1)
二、韦格斯坦(Wegstein)迭代法	(3)
三、牛顿(Newton)迭代法	(3)
四、黄金分割法	(4)
例题 1—1 湍流时直管摩擦系数 λ 的计算——迭代法	(6)
例题 1—2 汽液相组成的泡点温度的计算——牛顿法	(10)
例题 1—3 绝热连续搅拌槽式反应器的转化率——黄金分割法	(16)
例题 1—4 泵与管路的工作点——韦格斯坦法	(18)
习题	(26)
第二章 线性方程组	(29)
一、高斯-约当消去法	(29)
二、三对角型方程组追赶法(三对角矩阵法)	(30)
例题 2—1 换热器系统的性能评价(由换热器系统的热量衡算求流体出口 温度)——高斯-约当消去法	(32)
例题 2—2 精馏塔内的组成分布——三对角矩阵法	(38)
习题	(46)
第三章 数值积分	(51)
一、数值积分的一般概念	(51)
二、计算公式	(52)
例题 3—1 固定床吸附塔的转效时间——辛卜生积分法	(52)
例题 3—2 凉水塔高度的计算——韦格斯坦迭代、辛卜生积分法	(57)
习题	(64)
第四章 函数插值	(67)
一、插值的一般概念	(67)
二、一元三次样条插值	(67)
三、二元三次样条插值	(69)
例题 4—1 粘度数据的插值——一元三次样条函数插值	(70)
例题 4—2 吸收塔高度的计算——一元三次样条函数插值、辛卜生法积分	(76)
例题 4—3 摩擦系数的插值——二元三次样条函数插值	(83)
习题	(88)
第五章 一阶常微分方程初值问题数值解法	(90)
一、欧拉法	(90)
二、欧拉-柯西法	(91)
三、龙格-库塔法	(91)

例题 5—1 贮槽内热物料温度随时间的变化——龙格-库塔法	(92)
例题 5—2 催化反应装置内的温度、转化率分布——龙格-库塔-吉尔法	(96)
习题	(101)
第六章 实验数据的回归分析	(105)
一、线性回归模型与残差方程	(105)
二、求回归参数 β_j 的点估计量 b_j 以及置信区间	(107)
例题 6—1 固相催化反应的速率方程式——线性最小二乘法确定参数	(113)
例题 6—2 通气搅拌槽的操作条件对液相容积传质系数的影响——线性回归法 确定参数	(124)
习题	(131)
第七章 计算机和 BASIC 程序概述	(133)
一、计算机的结构和功能	(133)
(1) 计算机的功能	(133)
(2) 计算机的主要结构	(134)
二、BASIC 语言基础	(134)
(1) BASIC 语言的基本词法	(135)
(2) 构成源程序的基本规则	(137)
(3) 常用语句	(137)
(4) 框图及其应用	(137)
三、上机操作	(138)
(1) DOS 介绍	(138)
(2) DOS 的启动	(138)
(3) DOS 命令简介	(138)
(4) 解释型 BASIC 语言的使用方法	(138)
附表	(140)
1. 相关系数检验表	(140)
2. t 分布表	(141)
3. 数值常数的特性	(143)
4. BASIC 保留字	(143)
5. BASIC 变量类型表	(145)
6. BASIC 常用内部函数	(145)
7. BASIC 运算符号表	(146)
8. 输入输出语句	(147)
9. 其它语句	(148)
10. 框图符号	(150)
11. DOS4.0 命令简表	(151)
12. 常用 BASIC 命令表	(153)
13. IBM PC BASIC 常见错误信息表	(155)
参考文献	(157)

第一章 一元非线性方程

非线性方程是指含有变量的乘积、乘方或变量的三角函数、指数函数等的代数方程。
一元非线性方程的一般表达式为：

$$f(x) = 0 \quad (1-1)$$

或

$$x = \phi(x) \quad (1-2)$$

迭代求解,就是寻找一个 x 值,使其满足式(1-1)或(1-2)而编制的某种计算程序。

迭代求解的通用方法是假设变量的一个初值 $x^{(k)}$,将此初值 $x^{(k)}$ 代入式(1-1)得到函数值 $f(x^{(k)})$ 叫作残量,或代入式(1-2)的右端,得到计算值,记作 $x_c^{(k)}$,如果残量 $f(x^{(k)})$ 小于某一规定的微小量 EPS_1 (例如 10^{-3}),或是 $x_c^{(k)}$ 与 x 差的绝对值小于微小量 EPS_2 ,那末 x 就是方程(1-1)或方程(1-2)的近似解。否则,将变量作如下修正后作迭代运算:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta x \quad (1-3)$$

Δx 叫搜索步长,搜索步长 Δx 可以看作是搜索方向 d 和步长因子(阻尼因子) t 的乘积:

$$\Delta x = td \quad (1-4)$$

即

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + td$$

搜索方向和步长因子影响迭代收敛的稳定性和迭代收敛速度。

下面介绍几种常用迭代方法的基本原理。

一、直接迭代法

求函数 $x = \phi(x)$ 的数值解,最简单和直观的方法是直接迭代。直接迭代格式为:

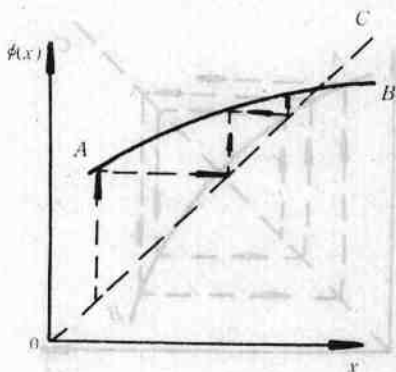


图 1-1 收敛性能良好

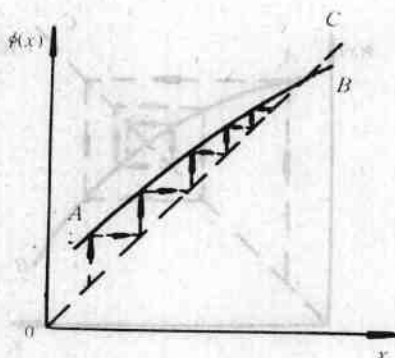


图 1-2 收敛,但速度较慢

$$x^{(k+1)} = \phi(x)^{(k)} \quad (1-5)$$

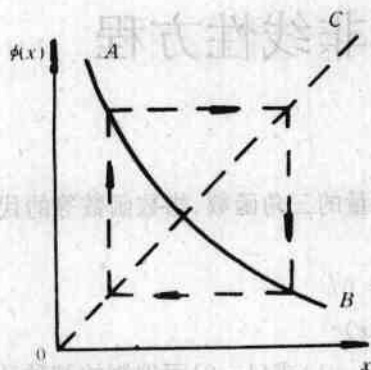


图 1-3 振荡,不收敛不发散

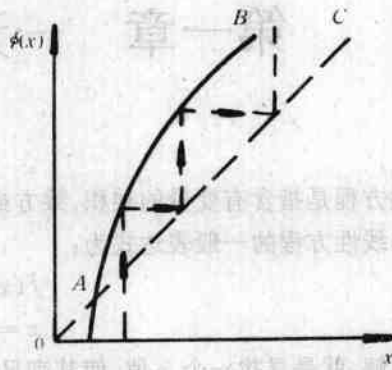


图 1-4 渐次发散

即以初值 $x^{(0)}$ 由式(1-5)算得 $x^{(1)} = \phi(x)^{(0)}$,再以 $x^{(1)}$ 代入式(1-5)得到 $x^{(2)}$,...,如此反复运算直到

$$(1) \left| \frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{x^{(k+1)} + x^{(k)}} \right| \leq EPS \quad \text{或}$$

(2) 迭代次数超过了规定的允许最大迭代次数 K_{max} 。

满足第一种条件时,表明迭代达到允许偏差,若运算因第二种条件而结束,表明在规定的运算次数内迭代达不到规定的允许偏差,此时有三种可能情况:

1. 增加运算次数能满足精度要求。
2. 允许偏差定得过高,即使再增加运算次数也满足不了要求。
3. 迭代发散。

因而相应的改进措施可以是:

- ① 增加迭代次数。
- ② 降低允许偏差。
- ③ 改换初值或换用其它迭代方法。

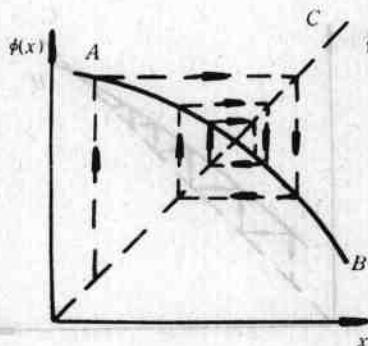


图 1-5 振荡收敛

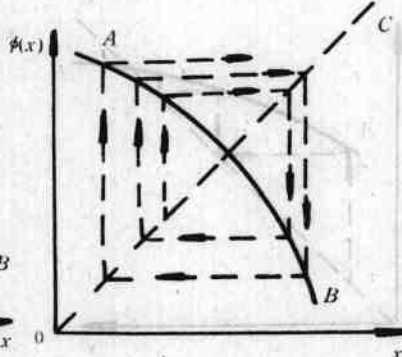


图 1-6 振荡发散

直接迭代的收敛特性由图(1-1)~(1-6)表示。

由于直接迭代的收敛稳定性差,收敛速度慢,所以在化工计算中应用得较少。

直接迭代法应用举例见例题 1-1。

二、韦格斯坦(Wegstein)迭代法

韦格斯坦迭代用于函数 $x=\phi(x)$ 求根,它是直接迭代的一种改进。

如图 1-7 所示,横坐标为迭代变量 x ,纵坐标为函数 $\phi(x)$ 的计算值,记作 y ,

$$y = \phi(x) \quad (1-6)$$

收敛时: $y = x_0$, 它的基本方法是将 $(x^{(1)}, y^{(1)})$, $(x^{(2)}, y^{(2)})$ 的连线与 $y=x$ 直线的交点坐标作为下一次迭代的假设值,再以 $(x^{(2)}, y^{(2)})$, $(x^{(3)}, y^{(3)})$ 的连线与 $y=x$ 的交点坐标作为再下一次迭代的假设值……,如此反复运算直到收敛。直线方程斜率

$$\begin{aligned} S &= \frac{y^{(2)} - y^{(1)}}{x^{(2)} - x^{(1)}} \\ &= \frac{x^{(3)} - y^{(2)}}{x^{(3)} - x^{(2)}} \\ \therefore x^{(3)} &= \frac{y^{(2)} - Sx^{(2)}}{1 - S} \end{aligned}$$

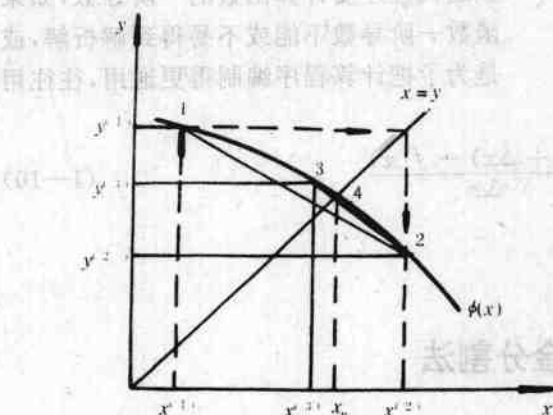


图 1-7 韦格斯坦迭代法

或

$$x^{(3)} = \frac{y^{(2)}x^{(1)} - y^{(1)}x^{(2)}}{y^{(2)} - y^{(1)} + x^{(1)} - x^{(2)}}$$

写成通式:

$$x^{(k+1)} = \frac{y^{(k)}x^{(k-1)} - y^{(k-1)}x^{(k)}}{y^{(k)} - y^{(k-1)} + x^{(k-1)} - x^{(k)}} \quad (1-7)$$

(1-7)式为韦格斯坦迭代基本方程式。

应用举例见例题 1-4的问题 1-4-2。

三、牛顿(Newton)迭代法

牛顿法又叫切线法,用于函数 $f(x)=0$ 的求根。

牛顿法将函数 $f(x)$ 作泰勒级数展开,并取级数的线性部分作为它的近似值:

$$f(x^{(k+1)}) \equiv f(x^{(k)} + \Delta x) = f(x^{(k)}) + (x^{(k+1)} - x^{(k)})f'(x^{(k)}) \quad (1-8)$$

目标是在 $x=x^{(k+1)}$ 时 $f(x^{(k+1)})=0$,因而由式(1-8)得到:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})} \quad (1-9)$$

式(1-9)即为牛顿法的迭代方程式,牛顿法以 $-\frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}$ 作为搜索方向,它的步长因子 $t=1$,牛顿法在根的附近收敛很快,但要注意,初值需选在根的附近。牛顿法的几何意义如图 1-8所示。

它以 $x^{(k)}$ 点函数的切线与横坐标的交点坐标作为下一次的迭代变量 $x^{(k+1)}$,牛顿迭代程序要计算函数的一阶导数,如果函数一阶导数不能或不易得到解析解,或是为了把计算程序编制得更通用,往往用

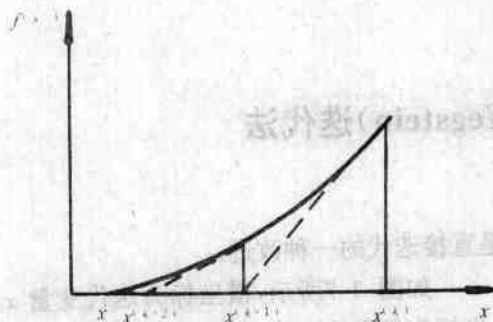


图 1-8 牛顿迭代法

差商代替求导:

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (1-10)$$

应用举例见例题 1-1。

四、黄金分割法

一元非线性方程的求根等价于单变量函数寻优,例如求一元非线性方程 $f(x)=0$ 的根的问题,可以化为求目标函数 $[-f^2(x)]$ 的极大值问题,或者是求目标函数 $f^2(x)$ 的极小值问题。其方法有牛顿法、斐波那契寻优法、黄金分割法、格点寻优法等。下面仅介绍得到广泛应用的黄金分割法。

假定函数 $g(x)$ 是所考虑区间上的单峰函数,即 $g(x)$ 在所考虑的区间 $[a, b]$ 上只有一个极大点,如图 1-9所示,是只有一个极大点的单峰函数。

从图上可以看出,在极大点 x^* 右边的函数是严格下降的;在极大点 x^* 的左边,函数是严格增加的。

假定我们不知道极大点 x^* 的位置,任取两点 $x_1 < x_2$,如果 $g(x_1) = g(x_2)$,则 x^* 必在 x_1, x_2 之间;如果 $g(x_1) > g(x_2)$,则 $x^* < x_2$,即 x^* 在 $[a, x_2]$ 上。根据上述性质,对于包含极大点的区间 $[a, b]$ 一步一步的缩小,从而找

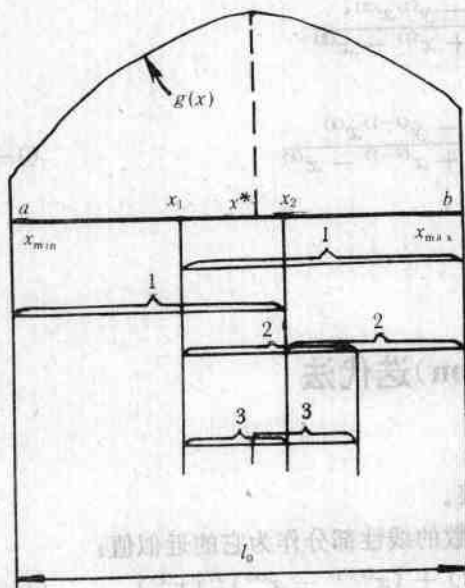


图 1-9 黄金分割法

$$1: l_1 = \lambda l_0 \quad 2: l_2 = \lambda l_1 \quad 3: l_3 = \lambda l_2$$

出 x^* 的近似解。

下面我们讨论 $g(x)$ 在 $[a, b]$ 上只有一个极大点时黄金分割法如何实现。

在 $[a, b]$ 内任取两点 x_1, x'_1 , 满足 $x_1 < x'_1$, 由上面的讨论我们知道, 通过比较 $g(x_1) = g_1, g(x'_1) = g'_1$, 立刻可以断定极大点是在 $[a, x'_1]$ 内还是在 $[x_1, b]$ 内。于是取小区间代替 $[a, b]$, 从而缩小了区间, 把新区间记为 $[a_1, b_1]$, 又可在新的区间取两点 $x_2 < x'_2$, 通过比较函数值得到新的区间 $[a_2, b_2]$, 如此下去, 区间不断缩小, 最后便可确定出近似的极大点。

应该怎样选取 x_i 与 x'_i 呢? 因为每次比较两点的函数值区间得到缩小, 如果缩小区间后保留的一点仍能用, 那末我们除开始的区间需要两点间函数值外, 后面每一步只要计算一个函数值就成了, 这样便在很大程度上节省了运算。假定每次迭代区间的长度按比例 λ 缩小 ($0 < \lambda < 1$), 则经过迭代后的区间或者是 $[a, a + (b-a)\lambda]$, 或是 $[b - (b-a)\lambda, b]$, 由前面的分析我们便知应取

$$x'_1 = a + (\lambda l_0), \quad x_1 = b - (\lambda l_0) \quad \text{其中 } l_0 = b - a$$

如果下一个区间是 $[a, a + (\lambda l_0)]$, 则由上面的讨论应取

$$\begin{aligned} x'_2 &= a + (\lambda l_1) \\ x_2 &= b_1 - (\lambda l_1) \end{aligned} \quad \text{其中 } l_1 = b_1 - a_1$$

由于

$$a_1 = a, \quad b_1 = a + \lambda l_0$$

故

$$x_2 = a + \lambda(1 - \lambda)l_0$$

$$x'_2 = a + \lambda^2 l_0$$

因为我们缩小区间是割去了 $[x'_1, b]$, 所以 x_1 保留在 $[a, x'_1]$ 内。因为计算过 $g(x_1) = g(a + (1 - \lambda)l_0)$, 所以在新的区间 $[a_1, b_1]$ 中我们自然希望 x_2 或 x'_2 重合, 从而可以少计算一个函数值。由于

$$x_1 = a + (1 - \lambda)l_0$$

$$x_2 = a + \lambda(1 - \lambda)l_0$$

$$x'_2 = a + \lambda^2 l_0$$

所以也就是要求 λ , 要末满足 $1 - \lambda = \lambda(1 - \lambda)$ (即 $x_1 = x_2$), 要末满足 $1 - \lambda = \lambda^2$ (即 $x_1 = x'_2$), 前者导致 $\lambda = 1$, 不合理, 所以取 $x_1 = x'_2$ 是行不通的。由 $1 - \lambda = \lambda^2$ 得:

$$\lambda = \frac{-1 \pm \sqrt{5}}{2}$$

因为 λ 是两个区间长度的比值, 大于 0, 故而只能取

$$\lambda = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} = 0.618033988$$

此时有 $x_1 = x'_2$, 类似的推导用于下一个区间不是 $[a, a + \lambda l_0]$, 而是 $[a + (1 - \lambda)l_0, b]$ 的情形, 也将有

$$\lambda = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}$$

此时 x_2 与 x'_1 重合。因此, 不管哪种情形, 我们都得到如下统一的结论: 在区间 $[a_k, b_k]$ 确定之后, 就按下面的式子选取 x_{k+1} 及 x'_{k+1} :

$$x_{k+1} = a_k + (1 - \lambda)(b_k - a_k) = b_k - (\lambda l_k)$$

$$x'_{k+1} = a_k + \lambda(b_k - a_k) = a_k + \lambda l_k$$

其中

$$\lambda = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$$

因为当 λ 只取小数点后三位时,即有

$$\lambda \approx 0.618$$

所以人们称之为 0.618 法。由前面推导可知,得出区间 $[a_k, b_k]$ 时,或有 $x_k = a_k$ 时,一定有 $x'_k = x_{k+1}$,所以只要补上一点 x'_{k+1} 就够了;或有 $x'_k = b_k$ 时,一定有 $x_k = x'_{k+1}$,故只要补上一点 x_{k+1} 即够。此法好处是:每次迭代只要计算一个点的位置及其函数值,工作量大为减少,下面

给出黄金分割法的计算公式。给定 $a, b, \lambda = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$

- (1) 求 $y = b - \lambda(b-a), z = a + \lambda(b-a), g(y) = g, g(z) = f$ 。
- (2) 若 $|b-a| \leq \epsilon$, 求出近似最优解 $x^* = \frac{a+b}{2}$, 若 $|b-a| > \epsilon$ 则继续(3)。
- (3) 若 $f < g$, 则 $a \Rightarrow a, z \Rightarrow b, y \Rightarrow z, g \Rightarrow f$, 转(4); 若 $f > g$, 则 $y \Rightarrow a, b \Rightarrow b, z \Rightarrow y, f \Rightarrow g$, 转(5); 若 $g = f$, 则 $y \Rightarrow a, z \Rightarrow b$, 转(1)。
- (4) 求 $y = b - \lambda(b-a), g(y) \Rightarrow g$, 转(2)。
- (5) 求 $z = a + \lambda(b-a), g(z) \Rightarrow f$, 转(2)。

框图见图 1-13 例题 1-3 的框图, 应用举例见例题 1-3。

例题 1-1 湍流时直管摩擦系数 λ 的计算——迭代法

问题

计算当 $Re = 10^5, d = 0.1\text{m}, \epsilon = 0.2\text{mm}$ 时的摩擦系数 λ 。湍流时的摩擦系数用下式计算:

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = 1.14 - 0.8685 \ln \left[\frac{\epsilon}{d} + \frac{9.34}{Re \sqrt{\lambda}} \right] \quad (1-1-1)$$

式中: λ ——摩擦系数

ϵ ——绝对粗糙度, mm

d ——圆管直径, mm

Re ——雷诺数。

1. 直接迭代求解

解说

将式(1-1-1)整理成便于直接迭代求解的形式:

$$\lambda = 1.0 / \left[1.14 - 0.8685 \ln \left(\frac{\epsilon}{d} + \frac{9.34}{Re \sqrt{\lambda}} \right) \right]^2 \quad (1-1-2)$$

框图

框图见图 1-10。

标识符

D——管径 d E—— ϵ RE—— Re

EPS——允许偏差 IT——迭代次数

IMAX—— $I_{\max}$ 为允许最大迭代次数

N——选择开关 X—— λ

XI——起始, 存放 λ 的初值; 终了, 存放一元非线性方程的解

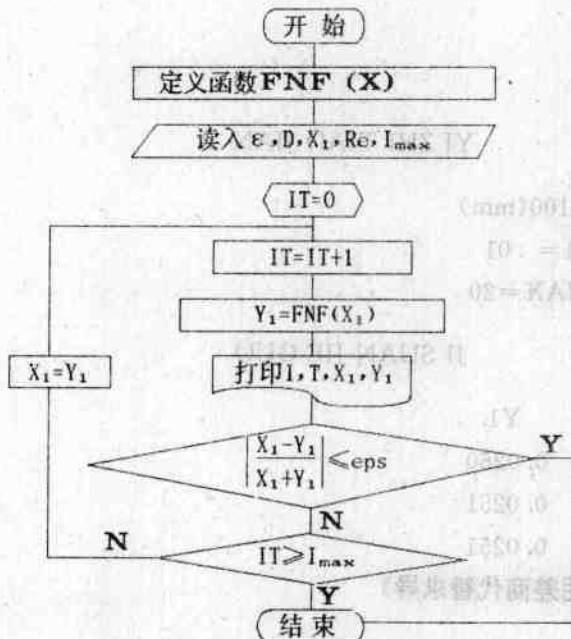


图 1-10 例题 1-1框图(A)

程序和运行结果

```
10 REM "LI 1-1A----TUAN LIU SHI ZHI GUAN MO CA XI SHU DE JI SUAN(ZHI
JIE DIE DAI FA)"
```

```
20 DEF FNF(X)=1! / (1.14-.8685 * LOG(E/D+9.34/SQR(X)/RE)) ^ 2
```

```
30 INPUT "E,D,RE=";E,D,RE
```

```
40 INPUT "X1,EPS,IMAX=";X1,EPS,IMAX
```

```
50 LPRINT "
```

```
YI ZHI TIAO JIAN":LPRINT
```

```
60 LPRINT "
```

```
E=";E;"(mm)"; " "; "D=";D;"(mm)"
```

```
70 LPRINT "
```

```
RE=";RE; " "; "X1=";X1
```

```
80 LPRINT "
```

```
EPS=";EPS; " "; "IMAX=";IMAX
```

```
90 LPRINT:LPRINT
```

```
100 LPRINT "
```

```
JI SUAN JIE GUO":LPRINT
```

```
110 LPRINT "
```

```
IT X1 Y1"
```

```
120 IT=0
```

```
130 IT=IT+1
```

```
140 Y1=FNF(X1)
```

```
150 LPRINT USING "
```

```
##";IT;
```

```
160 LPRINT USING " . . . ##";X1;
```

```
170 LPRINT USING " . . . ##";Y1
```

```
180 XY=ABS((X1-Y1)/(X1+Y1))
```

```

190 IF XY<=EPS THEN 230
200 IF IT>=IMAX THEN 230
210 X1=Y1
220 GOTO 130
230 END

```

YI ZHI TIAO JIAN

```

E=.2(mm) D=100(mm)
RE=100000 X1=.01
EPS=.001 IMAX=20

```

JI SUAN JIE GUO

IT	X1	Y1
1	0.0100	0.0260
2	0.0260	0.0251
3	0.0251	0.0251

2. 牛顿迭代法求解(用差商代替求导)

解说

将式(1-1-1)整理成便于牛顿迭代求解的形式:

$$f(\lambda) = 1.14 - 0.8685 \ln\left(\frac{E}{D} + \frac{9.34}{Re \sqrt{\lambda}}\right) - \frac{1}{\sqrt{\lambda}} = 0 \quad (1-1-3)$$

$$f'(\lambda) = \frac{f(\lambda + \Delta\lambda) - f(\lambda)}{\Delta\lambda} \quad (1-1-4)$$

$$\lambda^{(k+1)} = \lambda^{(k)} - \frac{f(\lambda)}{f'(\lambda)} \quad (1-1-5)$$

框图

框图见图 1-11。

标识符

X——初始存放初值,终了存放方程解

EPS——允许偏差

Y—— $\lambda = f(x)$ 方程残量, $N=1$: 迭代收敛, $N=2$: 用牛顿法修正 λ , $N=3$: 计算

$f(\lambda + \Delta\lambda)$

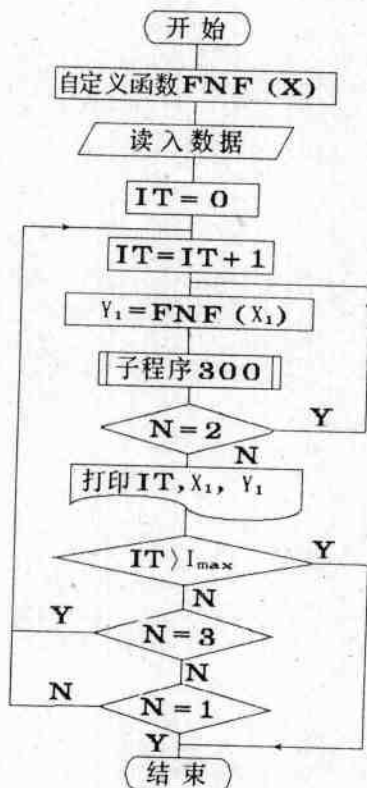
程序和运行结果

```

10 REM "LI 1-1B---TUAN LIU SHI ZHI GUAN MO CA XI SHU DE JI SUAN
(NIU DUN DIE DAI FA)"
20 DEF FNF(X)=1.14-.8685*LOG(E/D+9.34/SQR(X)/RE)-1!/SQR(X)
30 INPUT "E,D,RE=";E,D,RE
40 INPUT "X1,EPS,IMAX=";X1,EPS,IMAX
50 LPRINT"
YI ZHI TIAO JIAN":LPRINT
60 LPRINT"
E=";E;"(mm)";" "; "D=";D;"(mm)"

```

主程序



子程序 300

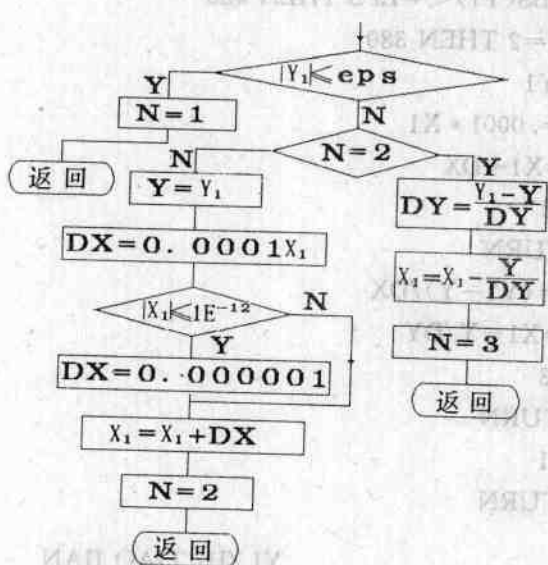


图 1-11 例题 1-1框图(B)

```

70 LPRINT "      RE=";RE;" ";X1=";X1
80 LPRINT "      EPS=";EPS;" ";IMAX=";IMAX
90 LPRINT :LPRINT "
LPRINT
100 LPRINT "      IT      X1      Y1"
110 IT=0
120 IT=IT+1
130 Y1=FNF(X1)
140 GOSUB 300
150 IF N=2 THEN 130
160 LPRINT USING "      ##";IT;
170 LPRINT USING "      #####";X1;
180 LPRINT USING "      #####";Y1
190 IF IT>=IMAX THEN 230
200 IF N=3 THEN 120
210 IF N=1 THEN 230
220 GOTO 120

```

JI SUAN JIE GUO":

```

230 END
300 REM "SUB300--NIU DUN DIE DAI FA"
310 IF ABS(Y1)<=EPS THEN 420
320 IF N=2 THEN 380
330 Y=Y1
340 DX=.0001 * X1
350 X1=X1+DX
360 N=2
370 RETURN
380 DY=(Y1-Y)/DX
390 X1=X1-Y/DY
400 N=3
410 RETURN
420 N=1
430 RETURN

```

YI ZHI TIAO JIAN

$E = .2(\text{mm})$ $D = 100(\text{mm})$
 $RE = 100000$ $X1 = .01$
 $EPS = .001$ $IMAX = 20$

JI SUAN JIE GUO

IT	X1	Y1
1	0.0174	-3.7949
2	0.0232	-1.3068
3	0.0250	-0.2564
4	0.0251	-0.0136
5	0.0251	0.0003

例题 1-2 汽液相组成和泡点温度的计算——牛顿法

问题 1-2-1

已知: 甲醇(1)-水(2) 二元体系, $p = 0.1013\text{MPa}$, 液相组成 $x_1 = 0.3333$, 饱和蒸汽压可用 Antoine 方程计算:

$$\lg p_i^s(\text{MPa}) = A_i - \frac{B_i}{C_i + t(^{\circ}\text{C})} \quad (1-2-1)$$

	A_i	B_i	C_i
(1)	4.00343	1473.11000	230.00000
(2)	4.09361	1668.21000	228.00000

活度系数方程可用 Wilson 方程计算, Wilson 参数为

$$\Lambda_{11}=1.00000 \quad \Lambda_{12}=1.48422$$

$$\Lambda_{21}=0.15135 \quad \Lambda_{22}=1.00000$$

求泡点温度及汽相组成。

问题 1-2-2

已知正己烷(1)-苯(2)-正戊烷(3)三元体系, $p=0.1013\text{MPa}$, 液相组成 $x_1=0.1186, x_2=0.3814$

Antoine 方程常数为

A_i	B_i	C_i
(1) 3.00256	1171.530	224.366
(2) 3.03045	1211.033	220.790
(3) 3.02720	1268.115	216.900

Wilson 参数为

$\Lambda_{11}=1.00000$	$\Lambda_{12}=0.53015$	$\Lambda_{13}=0.22886$
$\Lambda_{21}=1.07005$	$\Lambda_{22}=1.00000$	$\Lambda_{23}=1.46895$
$\Lambda_{31}=2.36137$	$\Lambda_{32}=0.35781$	$\Lambda_{33}=1.00000$

求泡点温度及汽相组成。

解说

本例题所涉及的体系, 压力均不高, 属于部分理想体系, 其汽液平衡方程为:

$$y_i = \frac{\gamma_i p_i^0}{p} x_i \quad (i = 1 \sim m) \quad (1-2-2)$$

假设一个温度 t , 即可由式(1-2-1)求出 p_i^0 , 再将已知的 p 和 x_i 代入(1-2-2), 就可以求出 γ_i , 但这样求出的 γ_i 必须满足下式:

$$\sum y_i = 1 \quad (1-2-3)$$

既满足(1-2-2)又满足(1-2-3)的 t 和 y_i 才是所要求的泡点温度和汽相组成, 否则 y_i 就没有物理意义。

因此本例题可用牛顿迭代法解下列方程:

$$F(t) = \sum y_i - 1 = 0 \quad (1-2-4)$$

将式(1-2-1)、(1-2-2)以及下列 Wilson 方程代入(1-2-4), 即可求得某个温度 t 的 $F(t)$ 。

$$\ln \gamma_k = -\ln \left[\sum_j X_j \Lambda_{kj} \right] + 1 - \sum_j \frac{X_j \Lambda_{kj}}{\sum_j X_j \Lambda_{kj}} \quad (i, j, k = 1 \sim m) \quad (1-2-5)$$

$$F'(t) = 2.3026 \sum_{i=1}^m [(B_i y_i / (t + c_i))^2] \quad (1-2-6)$$

式中 A_i, B_i, C_i 为 Antoine 方程参数

$$t^{(k+1)} = t^{(k)} - \frac{F(t)}{F'(t)} \quad (1-2-7)$$

框图

主程序框图见图 1-12。

标识符

$A(J), B(J), C(J)$ ——Antoine 常数 $A\$ (J)$ ——物质名 $GAM(K)$ —— γ_k