H·G·Y·L·C·X·S·J

化工原理程序设计

·蔡必楷　徐元源　张仰森　编著

·山西高校联合出版社

化工原理程序设计

蔡必楷　徐元源　张仰森　编著

山西高校联合出版社

(晋)新登字8号

化工原理程序设计

蔡必楷　徐元源　张仰森

*

山西高校联合出版社出版发行

(邮编:030012　太原市南内环街31号)

山西晋财印刷厂印刷

*

开本:850×1168　印张:13　字数:332千字

1994年9月第1版　1994年9月太原第1次印刷

印数:1—2000册

*

ISBN 7-81032-713-5

O·71　定价:9.5元

前　言

随着化工现代化建设事业的发展，利用计算机解算化工单元操作问题的要求日益迫切，为了加强化工原理的计算机教学，本书密切配合国内出版的几本化工原理教材，用FORTRAN77编写各主要单元操作的程序，深入浅出地介绍其计算方法、框图、程序说明和计算结果，并用示例加以说明，以加深读者的理解，从而提高计算机解题的能力。由于程序说明清晰，所以，即使程序很长，读者可以十分方便地按化工过程的计算步骤读下去而不会感到困难。

本书以典型设备计算和实验数据处理为主，由于化工单元操作计算命题很多，这里只提供一些典型例题编程以供参考，以此为基础，读者自己编写计算程序解决其他单元操作问题就不困难了。为了便于计算引用，书中提供化工计算中一些常用算法，但还有很多好的方法没有列入，需要时可参考有关专著。

考虑到化工原理教材中各类命题的计算方法和举例讲解十分详尽，本书认为读者已掌握了化工原理及FORTRAN语言的有关知识，因而对化工原理及FORTRAN语言的基本知识不作论述，同时提供存入全部源程序的软盘以供读者调用。

本书包括化工常用数值方法、流体输送、传热与蒸发、吸收与蒸馏、板式塔的工艺计算、干燥和化工原理实验数据处理等七章。可作为大专院校化工系师生一般化工数据处理，化工原理教学，课程设计和实验数据处理的教学参考书，也可供化工、石油、冶金、轻工、制药、环保等部门的科技人员参考。

本书由太原工业大学蔡必楷主编，中国科学院山西煤炭化学研究所徐元源、张仰森参加编写。在出版过程中，承蒙太原高氏劳瑞油墨化学有限公司的热心赞助 和邓志坚总经理的大力支持，并由华北

工学院陈仁学教授审阅，太原工业大学丁继成教授和中国科学院山西煤炭化学研究所程懋圩研究员对本书提出很多宝贵的意见，编者深表谢意。

由于编者水平有限，不妥和错误之处一定不少，殷切期望读者指正。

编者

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

目　　录

第一章　化工常用数值方法

1.1　概述

化工单元操作在理论上的发展就是在深入探讨过程机理的基础上，建立过程的数学模型，而所提出的数学模型，往往是多变量的，非线性的或计算步骤比较繁琐，很多过去较难解算的问题，借助数值方法用计算机求解，很快迎刃而解。因此，数值方法日益发挥其重要作用，成为现代化学工程学发展的强有力的促进因素。

在编制化工原理计算程序时，往往要用到一些常用的数值方法，本章介绍这方面的主要内容有：方程求根、插值法、线性方程组求解、非线性方程组求解、曲线拟合与回归分析、数值积分与常微分方程初值问题的解法。

应当指出，随着计算数学的发展，求解每类问题都有很多方法，而每种方法都不是万能的。对不同问题，选用不同算法，在收敛速度和收敛是否稳定可靠等方面，可能有不同的效果。但是，一般搞化工的读者，不可能去研究那么多的算法，这里也不可能把各种算法都列出，只是按经验每类问题选择两三种方法，简单介绍这些算法，编写程序的框图，给出子程序并说明这些子程序的使用方法，以便读者直接调用。一般地说，这些方法解算化工中常见的问题基本上是够用的，如不满足需要或效果不佳，可参考有关专著及子程序汇编资料，改用其他方法。

当然，每种算法都有其适用条件，如能合理使用将迅速解决问题，如使用不当，则可能不收敛。为此，各节都说明使用各种算法时的注意事项，请读者注意。

1.2 方程求根

在化工计算中，经常会遇到求解方程

$$f(x)=0 \tag{1-1}$$

的问题。

当用解析法求解比较困难或甚至不可能时，常常借助于数值法。

求解方程 $f(x)=0$ 的数值方法很多，如二分法、牛顿法、牛顿下山法、弦截法、韦格斯坦法、插值法、优选法等，这些方法一般都可以用来求方程的实根，可视具体方程加以选用。迭代法由于它的适用范围广、计算速度快，在工程计算中被广泛采用。本节给出在化工计算中常用的两种迭代法——牛顿法和弦截法。

1.2.1 牛顿法

1. 计算方法简介

牛顿法求解 $f(x)=0$ 的基本思想是将非线性函数线性化，以线性方程的根作为方程 $f(x)=0$ 的近似根。

从几何上讲，牛顿法就是在所选初值 x_0 处作 $f(x)$ 的切线，以切线与 x 轴的交点 x_1，作为 $f(x)=0$ 的新的近似根，一般地讲，x_1 比 x_0 更接近于 $f(x)=0$ 的根 x，再过 $(x_1, f(x_1))$ 点作 $f(x)$ 的切线，此切线将于 x 轴相交于 x_2，作为 $f(x)=0$ 的更好的近似根，重复这一步骤，直到达到精度要求为止。曲线 $y=f(x)$ 在点 $(x_0, f(x_0))$ 处的切线方程为：

$$y=f(x_0)+f'(x_0)(x-x_0) \tag{1-2}$$

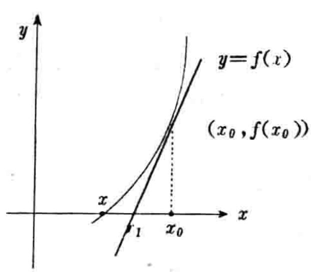

图1－1

该方程与 x 轴的交点 x_1 为

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \tag{1-3}$$

再以 x_1 代替 x_0 以便进行下一次迭代得到新的近似值 x_2，这样牛顿迭代公式的一般形式如下：

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \tag{1-4}$$

2. 子程序框图(图 1－2)

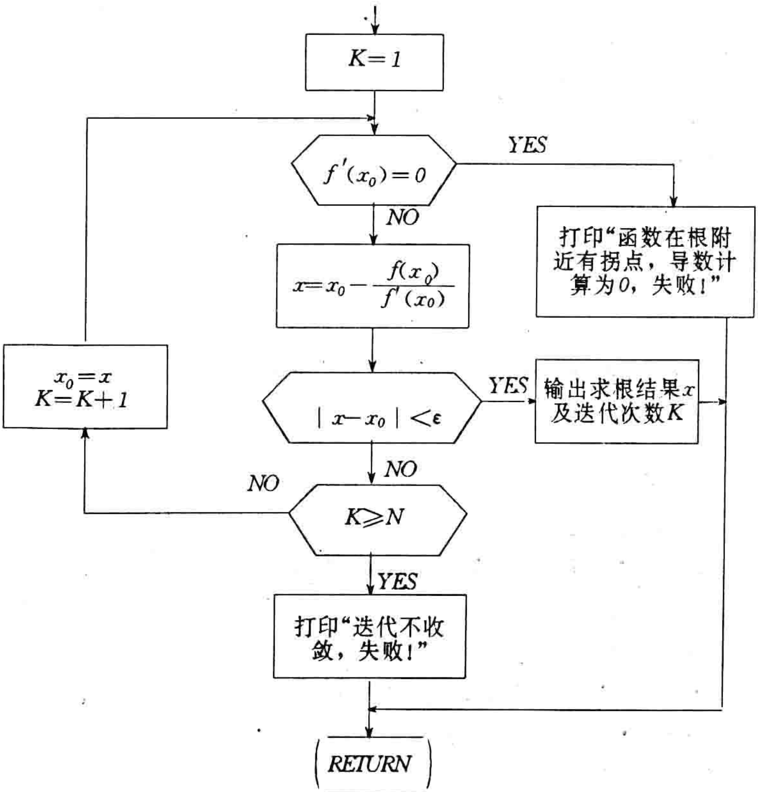

图1－2

3. 子程序

C　牛顿法求解方程 f(x)＝0 的子程序

```
      SUBROUTINE NEWTON(X0,N,EPS,X,K)
C  X0—迭代初值
C  N—允许的最大迭代次数
C  EPS—收敛精度
C  X—所求结果
C  K—实际迭代次数
     K=1
1   IF(FD(X0).EQ.0) GOTO 3
      X=X0-F(X0)/FD(X0)
      IF(ABS(X-X0).LT.EPS) GOTO 4
      IF(K.GE.N) GOTO 2
      K=K+1
      X0=X
      GOTO 1
2    WRITE(*,20)
20   FORMAT(1X,'迭代不收敛,失败!')
      GOTO 4
3    WRITE(*,30)
30   FORMAT(1X,'根附近有拐点,导数计算为零,求解失败!')
4    RETURN
      END
```

4.子程序使用说明

(1)子程序语句

SUBROUTINE NEWTON(X0,N,EPS,X,K)

(2) 元说明

X0——实型输入变量,迭代初值

N——整型输入变量,允许的最大迭代次数

EPS——实型输入变量,根之精度

X——实型输出变量,所求方程之根

K——整型输出变量,实际迭代次数

(3)函数过程 F(X)和 FD(X)由使用者自编。

5.举例

(1)实验测得甲苯胺的饱和蒸汽压 P(mmHg)与温度 T(K)的经验关系式如下：

$$lgP = 23.8296 - 3480.3/T - 5.081 lgT \qquad (1-5)$$

试求 P=760mmHg 时的沸点 T

(2)为了应用牛顿法求解，首先将式(1-5)变成：

$$f(T) = 23.8296 - lgP - 3480.3/T - 5.081 lgT \qquad (1-6)$$

相应地有：

$$f'(T) = 3480.3/T^2 - 2.207/T \qquad (1-7)$$

分别编制 f(T)和 f′(T)的函数计算程序，主程序如下：

```
   FUNCTION F(X)
   F=23.8296-LOG10(760.0)-3480.3/X-5.081*LOG10(X)
   RETURN
   END

   FUNCTION FD(X)
   FD=3480.3/X**2-2.207/X
   RETURN
   END

   PROGRAM MAIN
   WRITE(*,12)
12 FORMAT(1X,'请输入初值 X0')
   READ(*,*) X0
   CALL NEWTON(X0,10,1.E-6,X,K)
   WRITE(5,50)K,X
50 FORMAT(5X,'迭代次数 K=',I5/5X,'所求根 X=',E15.8)
   STOP
   END
```

(3)计算结果

迭代次数 K=4

所求根 X=473.0102078

应当指出，应用牛顿法时，初值的选取很重要，如本例中若选初值为 X0＝500，则迭代 4 次，即可得 X＝473.0102078，若选 X0＝10000，则迭代 5 次，得 X＝11583.276，此根无物理意义。由此可见，在进行工程计算时，事先必须进行根的分离，找出根的区间，以选择合适的初值；事后必须对结果进行分析，确定结果的合理性，以找出合乎实际的答案。有时初值选择不当，还会造成迭代不收敛。

1.2.2 弦截法

1. 计算方法简介

前面介绍的牛顿法的突出优点是收敛速度快，但它有个明显的缺点是要计算函数的导数 $f'(x)$，如果函数比较复杂，不易求出导数，利用牛顿法就不太方便；另外，如果函数在其根附近存在一个拐点，牛顿法甚至不会收敛。

为了避开牛顿法的这些弱点，我们可以用差商 $\dfrac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k-x_{k-1}}$ 来代替牛顿迭代公式（1－4）中的导数，得到下列离散化的形式：

$$x_{k+1}=x_k-\frac{f(x_k)}{f(x_k)-f(x_{k-1})}(x_k-x_{k-1}) \qquad (1-8)$$

这就是弦截法的迭代公式。

弦截法的特点是收敛速度快，不用对函数求导，但它在计算 x_{k+1} 时，要用到前两步的信息 x_k，x_{k-1}，这种迭代称作两步法，使用这种方法，在计算开始前必须先提供两个开始值 x_0，x_1。

为了求方程 $f(x)=0$ 在区间 (a,b) 内的全部单重实根，我们把 (a,b) 区间分为很多小区间 (x_{k-1},x_k)，若这个小区间的两个端点的函数值异号，则说明在这个小区间内必有一根，利用式（1－8），反复迭代，直到求出一根，然后再在下一个小区间上求根，直到求出 (a,b) 区间内的全部根。

在区间 (a,b) 上，各小区间的具体分法如下；假设 h 为步长，取 $x_{k1}=x=a$，$x_k=x+h$ 作小区间 $[x_{k1},x_k]$，判断小区间两个端点的函数值 $f(x_{k1})$、$f(x_k)$ 是否反号。若同号，说明 $[x_{k1},x_k]$ 小区间内无根，令 x_{k1}

$=x+h \quad x_k=x+2h$，直到 $x_k>b$ 为止。若反号，则按公式(1－8)求出 x_{k2} 点，再根据在 x_{k2} 点的函数值 $f(x_{k2})$ 与 $f(x_k)$ 反号与否来确定新的小区间 $[x_{k1},x_k]$，反复用式(1－8)，直到求出满足要求的根，若一个根求出后再重复上述过程。求根的原则是自变量满足精度要求或函数值满足精度要求后，即认为求出了方程的根。

2. 子程序框图(图 1－3)

3. 子程序

```
C  弦截法求解 f(x)=0 在区间(a,b)内的全部单重实根的子程序
      SUBROUTINE CHORD(A,B,H,N,N1,EPS1,EPS2,RT)
      DIMENSION RT(N)
      AC=0.0
      I=0
      X=A
      F0=F(X)
40    X=X+H
      K=0
      F1=F(X)
      IF(ABS(F0).LT.EPS1) GOTO 100
      IF(ABS(F1).LT.EPS1) GOTO 110
      IF(F0*F1.GT.0.0) GOTO 110
      FXK1=F0
      FXK=F1
      XK1=X-H
      XK=X
1     XK2=XK-(XK1-XK)*FXK/(FXK1-FXK)
      K=K+1
      IF(AC.NE.0) GOTO 50
      AC=1
      GOTO 60
50    IF(ABS(XK21-XK2).LT.EPS2) GOTO 30
60    XK21=XK2
```

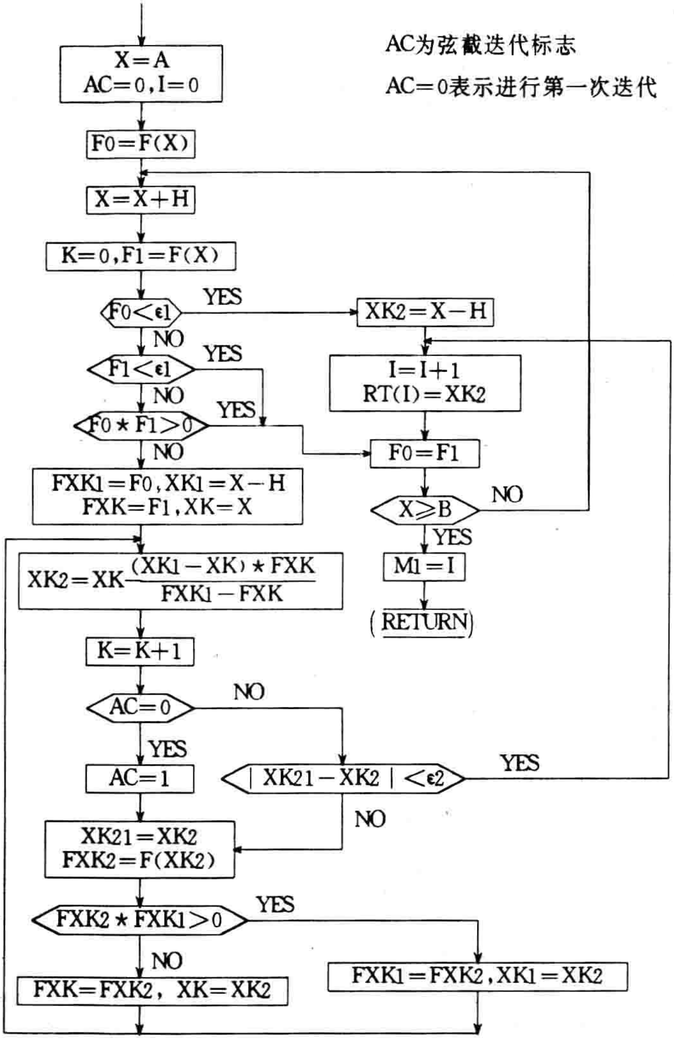

图1－3

```
FXK2=F(XK2)
IF(FXK2*FXK1.GT.0.0) GOTO 2
FXK=FXK2
```


此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com