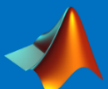


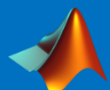
第3章非线性方程(组)求解(2)

- 非线性方程求解函数—fzero
- 多项式求根函数—roots
- 非线性方程组求解函数—fsolve

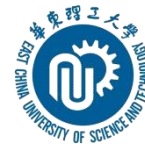


上讲内容

- \的使用（系数矩阵 A 的行数等于方程个数，列数等于未知数个数；右端向量为列向量）
- 合理利用MATLAB矩阵操作函数准确输入大型线性方程组的系数矩阵
 - 通过下标引用按行输入
 - 通过循环语句
 - 利用分块矩阵的思想，通过矩阵相加
- 了解非线性方程数值解法的基本思想和特点



MATLAB求解非线性方程函数



非线性方程

多项式函数

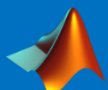
单个非线性方程

非线性方程组

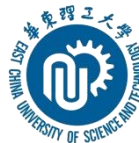
roots

fzero

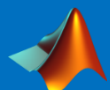
fsolve



学习MATLAB函数的三部曲



1. 函数名称与作用：适用于求解哪类数学问题？
2. 函数要求的输入变量是什么？
3. 函数输出变量的意义是什么？
4. 函数有什么求解参数可以调整？（可选步骤）



函数fzero的使用方法

fzero函数用于求解一般的单个非线性方程

$[x, fval, exitflag, output] = fzero(fun, x0, options, p1, p2, \dots)$

输入参数

- **fun**: 表示待求解方程左侧的 $f(x)$ ，它可以是函数句柄或匿名函数，对于给定的 x 值可以返回 $f(x)$ 的函数值；
- **x0**: 初始值， $x0$ 可以是一个数或是一个区间 $[x1, x2]$ 的形式，使用后后者时方程的值在 $x1$ 和 $x2$ 处异号，所得的解在 $[x1, x2]$ 内；
- **options**: 求解选项
- **p1, p2, ...**: 传递进fun函数的参数；当不改变求解选项，而仅传递参数时，fzero函数的输入参数写法如下：
 $fzero(fun, x0, [], p1, p2, \dots)$



函数fzero的使用方法

```
[x,fval,exitflag,output] = fzero(fun,x0,options, p1, p2, ...)
```

输出参数

- x: 所求解
- fval: 函数fun在解x处的值
- exitflag : 程序结束情况:等于1时, 程序收敛于解; <0时, 程序没有收敛或收敛到一个奇异点;
- output: 是一个结构体, 提供程序运行的信息;
output.iterations, 迭代次数; output.functions, 函数fun的计算次数; output.algorithm, 使用的算法

1. fun函数如何编写?

2. x0如何选取?



函数文件求解

$$x^3 - 2\sin x = 0$$

1. 直接编写函数文件

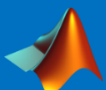
```
function Cha2demo4_4
    x0=1;
    [x,f,flag]=fzero(@fun,x0)
    disp(['The results is ',num2str(x)])
function y=fun(x)
    y=x^3-2*sin(x);
```

2. 将上述文件保存为Cha2demo4_4的m文件

3. 在命令窗口键入

```
>> Cha2demo4_4
```

则得到结果



例题5-匿名函数与命令行求解

1) $x^3 - 2x - 5 = 0$

2) $x^3 - 2\sin x = 0$

3) 求 $\sin x$ 在3附近的零点;

4) 求 $\cos x$ 在 $[1,2]$ 范围内的零点;

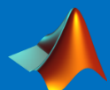
本例较简单，可直接在命令窗口输入命令求解：

1) `>> [x,fval,Flag]=fzero (@ (x) x^3-2*x-5,1);`

2) `>> [x,fval,Flag]=fzero (@ (x) x^3-2*sin (x),1)`

3) `>> [x,fval,Flag]=fzero (@sin,3)`

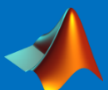
4) `>> [x,fval,Flag]=fzero (@cos,[1,2])`



说明



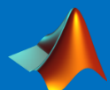
- 1) 第2小题中，如果所给区间两端方程不异号，
则程序出错
- 2) 初值的选择对于解有影响，不同的初值可能
获得不同的解
 - 可以根据感兴趣的解的区间确定初值范围
 - 可以作出函数在一定范围内的曲线，直观的
确定解的大致范围



专业数值计算问题的求解过程

- | | | |
|-------------------|---|-----------------------|
| 1. 待求解问题的关键表达式形式 | → | 选择合适的MATLAB求解函数 |
| 2. 确定关键表达式的各参数值 | → | 程序的输入变量
计算中间变量的值 |
| 3. 求解，采用合适的方式输出结果 | → | 程序的输出
图形和文字输出都经常采用 |
| 4. 观察、检验结果 | → | 运用数学和专业知识确定结果是否合理 |

- 数值计算的过程类似于“实验”，有时需要进行多次尝试才能找到最合适的解；
- 充分利用专业知识才可能更快、更好的找到问题的答案！



例题6

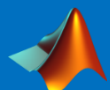
在 $p=945.36\text{kPa}$ (9.33atm)、 $T=300.2\text{K}$ 时，容器中充以 $n=2\text{mol}$ 氮气。已知此状态下氮气的P-V-T关系符合范德华方程，其范德华常数为 $a=4.17\text{atm}\cdot\text{L}/\text{mol}^2$ ， $b=0.0371\text{L}/\text{mol}$ 。试编写一个MATLAB函数求容器体积 V 。

数学模型：范德华方程变形可得

$$f(V) = \left(p + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - nb) - nRT = 0$$

$$pV^3 - (pnb + nRT)V^2 + an^2V - an^3b = 0$$

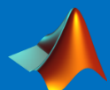
这是关于 V 的三次方程，可以fzero求解



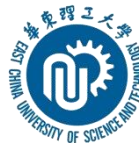
例题6

$$f(V) = \left(p + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - nb) - nRT = 0$$

```
function vanderWaal_1
P = 9.33;
T = 300.2;
n = 2;
a = 4.17;b = 0.0371;
R = 0.08206;
Eq=@(V) (P + a*n^2/V^2) * (V-n*b) - n*R*T;
V0 = n*R*T/P;
[V,fval,Flag]=fzero(Eq,V0);
disp(['The container volume is ', num2str(V), ' m^3'])
```



例题6



$$f(V) = \left(p + \frac{an^2}{V^2}\right)(V - nb) - nRT = 0$$

```
function vanderWaal_2
P = 9.33; T = 300.2; n = 2;
a = 4.17; b = 0.0371;
R = 0.08206;
V0 = n*R*T/P;
[V,fval] = fzero(@PVTeq,V0,[],P,T,n,a,b,R)
% -----
function f=PVTeq(V,P,T,n,a,b,R)
f=(P+a*n^2/V^2)*(V-n*b)-n*R*T;
```



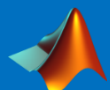
例题：传热问题计算

某气体冷却器总传热面积 A 为 20 m^2 ，用以将流量 q_{m1} 为 1.4 kg/s 的某气体从 $T_1=50^\circ\text{C}$ 冷却到 $T_2=35^\circ\text{C}$ 。使用的冷却水初温 t_1 为 25°C ，与气体作逆流流动。换热器的传热系数 K 约为 $230 \text{ W}/(\text{m}^2\cdot^\circ\text{C})$ ，气体的平均比热容 C_{p1} 为 $1000 \text{ J}/(\text{kg}\cdot^\circ\text{C})$ ，水平均比热容 C_{p2} 为 $4180 \text{ J}/(\text{kg}\cdot^\circ\text{C})$ 。试编写一个MATLAB函数求冷却水用量 q_{m2} 和出口水温 t_2 ，将结果显示在屏幕上。

数学模型：

$$q_{m1}c_{p1}(T_1 - T_2) = q_{m2}c_{p2}(t_2 - t_1)$$

$$q_{m1}c_{p1}(T_1 - T_2) = KA \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \frac{T_1 - t_2}{T_2 - t_1}}$$



例题：传热问题计算

```
function HeatTransferII
%第二类换热操作型命题求解
A=20; K=230;%换热器参数
qm1=1.4; cp1=1000; T1=50; T2=35;%热流体参数
t1=25; cp2=4180;%冷却水参数
HF=@(t) qm1*cp1*(T1-T2)-K*A*((T1-t)-(T2-t1))/log((T1-t)/(T2-t1));
[t2,fval,Flag]=fzero(HF,45); %冷却水出口温度
qm2=qm1*cp1*(T1-T2)/(cp2*(t2-t1)); %冷却水流量
fprintf('The outlet T for water is %.2f degrees\n',t2)
fprintf('The flow rate of water is %.4f kg/s\n',qm2)
```

当初始值取50时，计算结果如何？ $4.57 = (40 - t_2) / \ln \frac{50 - t_2}{10}$



多项式求根函数roots

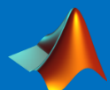
- 在MATLAB中表示多项式首先将多项式降幂排列

$$P(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \cdots + a_{n-1} x + a_n$$

- 将多项式的系数赋值给变量P

$$P = [a_0, a_1, \cdots, a_{n-1}, a_n]$$

- 向量的长度等于多项式的最高次数n+1
- 当P输入给多项式函数时会被识别为多项式。
- MATLAB提供的多项式函数包括：多项式求根函数roots，求多项式的值，polyval；多项式乘法，conv；多项式除法，deconv；多项式微分，polyder；多项式拟合，polyfit



函数roots

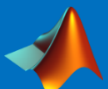
- $r = \text{roots}(c)$, 用于求解多项式的根
 - 输入变量 c 为多项式的行向量
 - 如果 c 中含有 $n+1$ 个元素, 则多项式为 n 次
- roots 可以获得多项式的所有根
- roots 采用的算法为计算友矩阵的特征值

求方程 $x^3 = x^2 + 1$ 的根

```
>>c = [1 -1 0 -1];  
>>r = roots(c)
```

```
r =  
    1.4656  
   -0.2328 + 0.7926i  
   -0.2328 - 0.7926i
```

```
>> polyval(c, r(1))  
ans =  
-2.5535e-015
```



例题：立方型状态方程计算混合物体积

已知一个三元体系的组成和临界性质如下表所示：

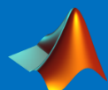
组分	气相组成 y_i	临界温度 T_c (K)	临界压力 P_c (Pa)
乙炔	0.202	308.32	6.1391e6
乙烯	0.538	282.36	5.0318e6
乙烷	0.260	305.42	4.8801e6

体系的温度 $T=235.9$ K，压力 $P=1381.4$ kPa，编写一个函数采用PR方程求体系的气相压缩因子 Z 。用于混合物计算时，系数 A 和 B 应按以下混合规则计算：

$$A^{0.5} = \sum A_i^{0.5} y_i \quad A_i = \frac{aP}{R^2 T^{2.5}} = \frac{0.42748 P_r}{T_r^{2.5}} \quad \begin{matrix} Pr=P/P_c \\ Tr=T/T_c \end{matrix}$$

$$B = \sum B_i y_i \quad B_i = \frac{bP}{RT} = \frac{0.08664 P_r}{T_r}$$

$$Z^3 - Z^2 - (B^2 + B - A)Z - AB = 0$$



例题：立方型状态方程计算混合物体积

```
function Cha3Demo7
y=[0.202 0.538 0.260];
Tc=[308.32 282.36 305.42];
Pc=[6.1391 5.0318 4.8801]*1e6;
T=235.9;P=1.3814e6;
Tr=T./Tc;Pr=P./Pc;
A=0.42748*Pr./Tr.^2.5;
B=0.08664*Pr./Tr;
AT=(sum(A.^0.5.*y))^2;
BT=sum(B.*y);
p=[1 -1 -(BT^2+BT-AT) -AT*BT];
Zcal=roots(p);
Zgas=max(Zcal);
fprintf('The Z of gas phase is %.4f\n',Zgas)
```

思考：当roots求解获得复数根如何处理？



函数fsolve

fsolve函数可求解非线性方程组的解。其算法采用的是最小二乘法（特殊的迭代算法）

fsolve调用格式：

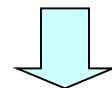
`[x,fval,exitflag,output,jacobian] = fsolve(fun,x0,options, p1, p2, ...)`

- 输入变量fun为定义待求解方程的函数句柄；
- fun的返回值为一个向量，各元素为方程组的各个表达式在x处的值；
- 输入变量x0与fun函数返回向量元素个数相同；
- 输出变量：x为方程组的解；fval各表达式在x处的值，成功求解时应接近0；exitflag退出标识，=1时收敛到解，<0时求解出现错误



例题10

$$\begin{cases} \sin x + y^2 + \ln z = 7 \\ 3x + 2^y - z^3 + 1 = 0 \\ x + y + z = 5 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} y(1) = \sin x(1) + x(2)^2 + \ln x(3) - 7 = 0 \\ y(2) = 3x(1) + 2^{x(2)} - x(3)^3 + 1 = 0 \\ y(3) = x(1) + x(2) + x(3) - 5 = 0 \end{cases}$$



```
function Cha3demo7
```

```
x0=[1 1 1];
```

```
[x,f,flag]=fsolve(@fun,x0)
```

```
function y=fun(x)
```

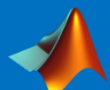
```
y(1)=sin(x(1))+x(2)^2+log(x(3))-7;
```

```
y(2)=3*x(1)+2^x(2)-x(3)^3+1;
```

```
y(3)=x(1)+x(2)+x(3)-5;
```

```
x = 0.5991 2.3959 2.0050
```

试一试采用不同的初始值会得到什么结果？



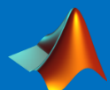
optimset

- 当fsolve输出exitflag值为0, 2, 3, 4时, 或对解的精度不满意时, 可以尝试调节fsolve函数的设置, fsolve第3个输入变量options的值;
- 调整fsolve函数的求解参数可用optimset函数; 例如下列命令:

```
opt=optimset('TolX',1e-10,'TolFun',1e-8)
```

- 在使用fsolve令时将options更改为新定义的结构体, 如

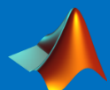
```
x = fsolve(fun,x0,opt)
```



常见fsolve求解选项

选项名称	含义	默认值
MaxFunEvals	函数值计算最大次数	100*变量个数
MaxIter	最大迭代次数	400
TolFun	函数值允许的最小变化值	1.0000e-006
TolX	自变量允许的最小变化值	1.0000e-006

fzero的求解选项也可以采用optimset函数更改

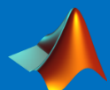


例题11

使用fsolve函数求解方程组，初始值为[1 1]。

$$\begin{cases} 10x + 3y^2 = 3 \\ x^2 - \exp(y) = 2 \end{cases}$$

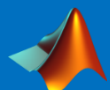
- 1) 使用fsolve函数默认参数求解，残差为多少？
- 2) 更改求解参数中的TolFun域值为1e-10，残差变为多少？



例题11

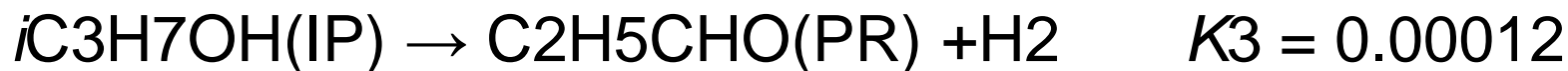
```
function FsolveOpt
opt=optimset('TolFun',1e-10);
x0=[1 1];
[x1,err1,flag1]=fsolve(@Eq8,x0)
[x2,err2,flag2]=fsolve(@Eq8,x0,opt)
function f=Eq8(x)
f1=10*x(1)+3*x(2)^2-3;
f2=x(1)^2-exp(x(2))-2;
f=[f1;f2];
```

```
err1 =1.0e-010 *
      0.6573
      0.2087
err2 =1.0e-014 *
      0.1776
      0
```



fsolve函数的应用

在铜管内在1 atm下将异丙醇加热到400°C。可能生成丙酮、丙醛和正丙醇。三种产物的生成可用如下三个独立反应表示：

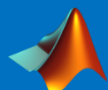


后续加工步骤需要正丙醇，可含丙酮，但丙醛含量不能超过5(mol)%。在上述反应条件下，是否存在违反这种规定的可能性？

数学模型：设 $x_1 \sim x_3$ 分别化学平衡时正丙醇、丙酮和丙醛的摩尔数。

$$\frac{x_1}{1 - x_1 - x_2 - x_3} = 0.064 \quad \frac{x_2(x_2 + x_3)}{(1 - x_1 - x_2 - x_3)(1 + x_2 + x_3)} = 0.076$$

$$\frac{x_3(x_2 + x_3)}{(1 - x_1 - x_2 - x_3)(1 + x_2 + x_3)} = 0.00012$$



fsolve函数的应用

```
function Cha2demo7
x0 = [0.05 0.2 0.01];
x = fsolve(@EquiC3,x0);
CAC=x(3)/sum(x)
if CAC<0.05
```

```
    disp('The AC concentration could not be over 0.05%')
```

```
else
```

```
    disp('The AC concentration could be over 0.05%')
```

```
end
```

```
function f = EquiC3(x)
```

```
f1 = x(1)-0.064*(1-x(1)-x(2)-x(3));
```

```
f2 = x(2)*(x(2)+x(3))-0.076*(1-x(1)-x(2)-x(3))*(1+x(2)+x(3));
```

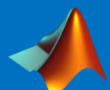
```
f3 = x(3)*(x(2)+x(3))-0.00012*(1-x(1)-x(2)-x(3))*(1+x(2)+x(3));
```

```
f = [f1 f2 f3];
```

$$\frac{x_1}{1-x_1-x_2-x_3} = 0.064$$

$$\frac{x_2(x_2+x_3)}{(1-x_1-x_2-x_3)(1+x_2+x_3)} = 0.076$$

$$\frac{x_3(x_2+x_3)}{(1-x_1-x_2-x_3)(1+x_2+x_3)} = 0.00012$$



例题13 平衡级式分离设备的严格计算

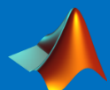
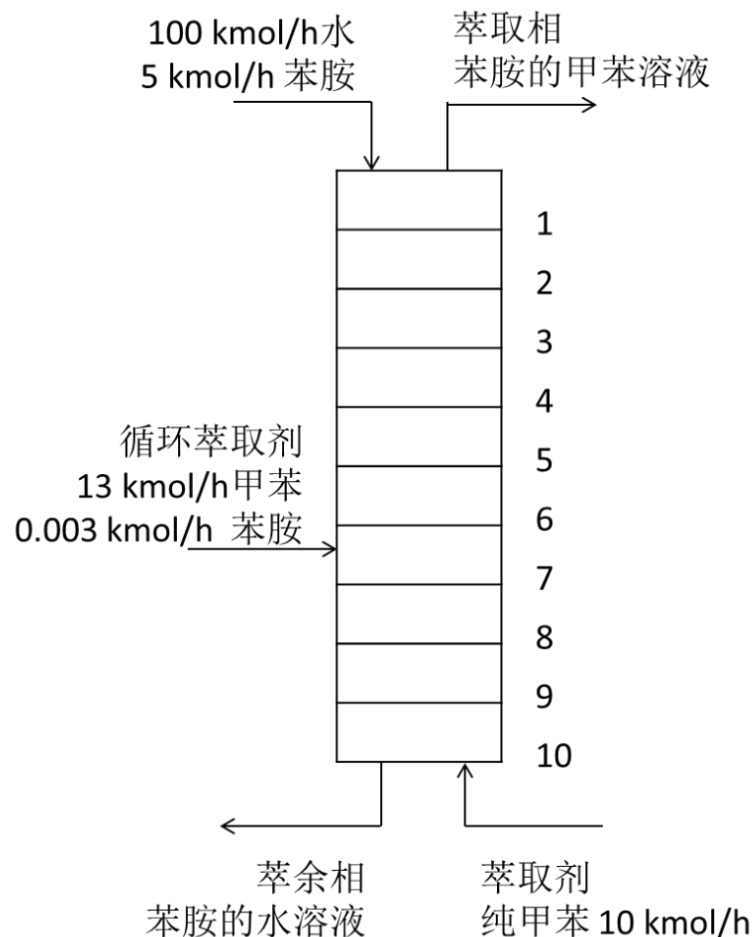
采用逆流萃取的方法用甲苯去除水中的苯胺，过程在一个有10个理论级的塔中进行。示意图如右图。

相平衡关系如下：

$$y_i / x_i = 9 + 20x_i$$

其中 y_i 为萃取相中苯胺的摩尔分率； x_i 为萃余相中苯胺的摩尔分率。

假定甲苯和水完全不互溶。试编写一个MATLAB函数求解并以图形方式输出各理论级上萃取和萃余相中苯胺的摩尔流率。



例题13 平衡级式分离设备的严格计算

物料衡算方程 (M方程)

$$L_{n-1}x_{i,n-1} + V_{n+1}y_{i,n+1} + F_n z_i = (L_n + U_n)x_{i,n} + (V_n + W_n)y_{i,n}$$

相平衡方程 (E方程)

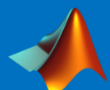
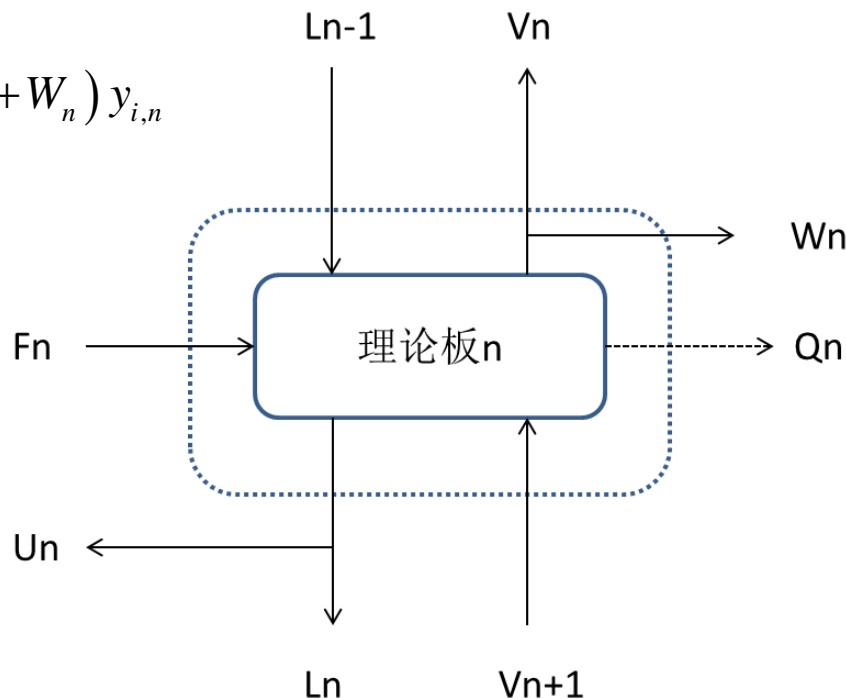
$$y_{i,n} = K_{i,n}x_{i,n}$$

归一化方程 (S方程)

$$\sum_i x_{i,n} = 1, \quad \sum_i y_{i,n} = 1$$

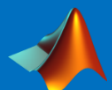
热量衡算方程 (H方程)

$$L_{n-1}H_{L,n-1} + V_{n+1}H_{V,n+1} + F_n H_{F,n} = (L_n + U_n)H_{L,n} + (V_n + W_n)H_{V,n} + Q_n$$



例题13 平衡级式分离设备的严格计算

```
function Cha3Demo11
x0=zeros(1,20);x0(1)=4;
opt=optimset('MaxFunEvals',1e4,'MaxIter',1e3);
[x,fval,exit]=fsolve(@Staged,x0,opt)
plot(1:10,x(1:10),'o',1:10,x(11:20),'s')
legend('Raffinate','Extract')
ylabel('Anilin flow rate [kmol/h]')
xlabel('Stage number')
function y=Staged(x)
y=zeros(20,1);LinA=5;LinW=100;VinT=10;
L=[LinA,x(1:10)];V=[x(11:20),0];
FV=ones(10,1)*VinT;FV(7)=FV(7)+13;F=zeros(10,1);F(7)=0.003;
for i=2:11
    y(i-1)=L(i-1)+V(i)+F(i-1)-L(i)-V(i-1);
    Xi=L(i)/(L(i)+LinW);
    Yi=V(i-1)/(FV(i-1)+V(i-1)+F(i-1));
    y(i-1+10)=Yi-Xi*(9+20*Xi);
end
```



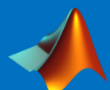
关于数值计算的几点提醒

使用roots, fzero, fsolve得到运算结果后, 结果一定正确吗?

NO!

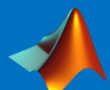
使用roots, fzero, fsolve运算结果错误的原因有哪些?

- ❑ 输入错误!
- ❑ 初始值选取错误!
- ❑ 程序没有收敛!



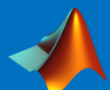
关于数值计算的几点提醒

- 仔细检查程序！
- 注意观察求解的返回结果！ 误差是否足够小？
求解是否收敛？
- 采用不同的初始值近多次试算！
- 利用专业知识检查结果是否合理！



化工数值计算中的迭代与试差

- 在较早的专业书籍中，对于化工过程非线性方程的手算求解一般采用迭代或试差方法
- 很多需要采用迭代或试差求解的问题都可以直接采用本章介绍的MATLAB函数进行求解。
- 但对于复杂的、具有高度非线性问题求解，如多组分精馏的严格求解、复杂流程的物料衡算等，往往仍需要使用特定的迭代算法进行求解。



例题：理想物系泡点及平衡组成计算

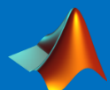
某蒸馏釜的操作压强 p 为106.7 kPa，其中溶液含苯摩尔分数为0.2，甲苯摩尔分数为0.8，求此溶液的泡点及平衡的气相组成。苯-甲苯溶液可作为理想溶液。各纯组分的蒸汽压为：

$$\text{苯: } \log p_A^0 = 6.031 - \frac{1211}{t + 220.8} \quad \text{甲苯: } \log p_B^0 = 6.080 - \frac{1345}{t + 219.5}$$

式中的 p^0 为物质的蒸气压，单位为kPa；温度 t 的单位为 $^{\circ}\text{C}$ 。

理想物系的液相符合拉乌尔定律，气相为理想气体符合理想气体定律。假定苯组分的液相摩尔组成为 x ，则有：

$$p_A^0 x + p_B^0 (1 - x) = p$$



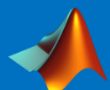
例题：理想物系泡点及平衡组成计算

$$p_A^0 x + p_B^0 (1-x) = p$$

将饱和蒸气压计算式代入上式，即成为一个关于 t 的非线性方程，求解此方程即可知体系的泡点。

联立道尔顿分压定律和拉乌尔定律可得气相组成：

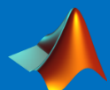
$$y_A = \frac{p_A}{p} = \frac{x_A p_A^0}{p}$$



例题：理想物系泡点及平衡组成计算

方法一：采用逐步扫描法求解。程序如下：

```
function Cha3Demo12A
xA=0.2;xB=0.8;P=106.7;%已知数据
AntA=@(t) 10^(6.031-1211/(t+220.8));%定义安托因方程
AntB=@(t) 10^(6.080-1345/(t+219.5));
for t=80:0.01:150
    PA=AntA(t); PB=AntB(t);%求各组分饱和蒸气压
    Pcal=PA*xA+PB*xB;%计算总压
    if abs(P-Pcal)<1e-2%判断计算总压与规定压力是否相符
        disp(['The bubbling point is ',num2str(t),' degrees'])
        yA=PA*xA/P;%计算气相组成
        y=[yA,1-yA];%yB=1-yA
        disp(['The gas phase molar ratio of A and B are ', num2str(y)])
        break
    end
end
end
```



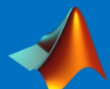
例题：理想物系泡点及平衡组成计算

方法2：采用迭代法求解。

$$p_A^0 x + p_B^0 (1-x) = p \quad \longrightarrow \quad f(t) = \sum_{i=1}^2 \frac{x_i p_i^0}{p} - 1$$
$$\downarrow \quad t^{(k+1)} = t^{(k)} - \frac{f(t)}{f'(t)}$$
$$f'(t) = \sum_{i=1}^2 \frac{x_i p_i^0}{p} \frac{\ln 10 \cdot B_i}{(C_i + t)^2}$$

迭代初值 t_0 可以选取系统压力下沸点的摩尔分数加权平均值，即：

$$t_0 = t_A x_A + t_B x_B$$



例题：理想物系泡点及平衡组成计算

function Cha3Demo12B

%采用牛顿迭代法求泡点温度

xA=0.2;**xB**=0.8;**P**=106.7;%已知数据

AntA=@(t) 10^(6.031-1211/(t+220.8));%定义安托因方程

AntB=@(t) 10^(6.080-1345/(t+219.5));

BT_A=1211/(6.031-log10(P))-220.8;%求A的沸点

BT_B=1345/(6.080-log10(P))-219.5;%求B的沸点

t0=[**xA** **xB**]*[**BT_A**;**BT_B**];%以A和B沸点的摩尔分数加权平均值为初值

ft= @(t) (AntA(t)***xA**+AntB(t)***xB**)/**P**-1;

df t= @(t)

(AntA(t)***xA***1211/(220.8+t)^2+AntB(t)***xB***1345/(219.5+t)^2)
*log(10)/**P**;



例题：理想物系泡点及平衡组成计算

```
t1=t0-ft(t0)/dft(t0);  
while abs(t1-t0)>1e-2  
    t0=t1;  
    t1=t0-ft(t0)/dft(t0);  
end  
disp(['The bubbling point is ',num2str(t1),' degrees'])  
yA=AntA(t1)*xA/P;%计算气相组成  
y=[yA,1-yA];%yB=1-yA  
disp(['The gas phase molar ratio of A and B are ',  
num2str(y)])
```



例题：理想物系泡点及平衡组成计算

方法三：采用fzero函数

$$f(t) = \sum_{i=1}^2 \frac{x_i P_i^0}{P} - 1 = 0$$

```
function Cha3Demo12C
```

```
%采用fzero求泡点温度
```

```
xA=0.2;xB=0.8;P=106.7;%已知数据
```

```
AntA=@(t) 10^(6.031-1211/(t+220.8));%定义安托因方程
```

```
AntB=@(t) 10^(6.080-1345/(t+219.5));
```

```
BT_A=1211/(6.031-log10(P))-220.8;%求A的沸点
```

```
BT_B=1345/(6.080-log10(P))-219.5;%求B的沸点
```

```
t0=[xA xB]*[BT_A;BT_B];%以A和B沸点的摩尔分数加权平均值为初值
```

```
ft=@(t) (AntA(t)*xA+AntB(t)*xB)/P-1;
```

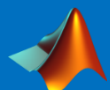
```
bt=fzero(ft,t0);
```

```
disp(['The bubbling point is ',num2str(bt),' degrees'])
```

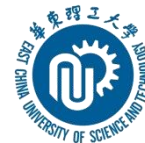
```
yA=AntA(bt)*xA/P;%计算气相组成
```

```
y=[yA,1-yA];%yB=1-yA
```

```
disp(['The gas phase molar ratio of A and B are ', num2str(y)])
```



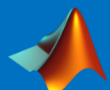
课堂练习



试编写一个MATLAB函数求解：

$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 = e^{-x_1} \\ -x_1 + 2x_2 = e^{-x_2} \end{cases}$$

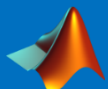
初始值(-5,-5)



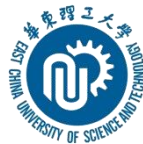
本讲小结

fzero, roots和fsolve函数的使用

- 要求的输入是什么？
- 返回的输出是什么？
- 计算是否正确？



作业



公共邮箱下载文档：work07.pdf，直接打印
、完成后上交

