实验二 线性方程组的求解

1 实验目的

1. 深入熟悉掌握 MATLAB 的线性方程组求解函数：\
2. 学习化工领域典型线性方程组的求解；
3. 练习 MATLAB 语言编程。

2 知识要点

2.1 \的使用

无论是洽定、超定和欠定线性方程组，MATLAB 的\运算符都可以给出解。使用\运算符求解线性方程组时，方程组必须标示成矩阵的形式：

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{vmatrix}$$

简写为：Ax=b，则可以采用左除命令进行求解。例如求解以下线性方程组：

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 2 \\ 2x_1 + 3x_2 + 4x_3 = 3 \\ 3x_1 + 4x_2 + 4x_3 = 3 \end{cases}$$

在命令窗口输入：

```
>> A=[1 2 3;2 3 4;3 4 4];
>> b=[2;3;3];
>> x=A\b
```

则可获得正确结果 x=[1, -1, 1]。注意如果 b 矩阵为一个列向量，如果输入：

```
>> b=[2 3 3];
```

则将返回如下矩阵维数不匹配的错误信息：

```
??? Error using ==> mldivide
Matrix dimensions must agree.
```

2.2 线性方程组的迭代求解方法

MATLAB 的\运算符虽然功能很强大，但在求解超大型线性方程组时，仍然存在计算量和存储空间大的缺陷，此时可采用迭代方法进行求解。对于线性方程组 Ax=b，如果系数矩阵 A 分裂成 A=D-L-U，其中 D＝diag(a_{11},a_{22},…，a_{nn})为对角阵，-L 为严格下三角阵（不包括主对角线元素），-U 为严格上三角阵。则可以推导出以下迭代求解格式：

雅可比迭代：$x^{(k+1)} = D^{-1}(L+U)x^{(k)} + D^{-1}b$

高斯-赛德尔迭代：$x^{(k+1)} = (D-L)^{-1}Ux^{(k)} + (D-L)^{-1}b$

SOR 迭代：$x^{(k+1)} = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D+\omega U]x^{(k)} + \omega(D-\omega L)^{-1}b$

3 实验内容

3.1 稳态过程模拟中的线性方程组求解

物料衡算是化工过程设计的基础，在一些简单情况下，物料衡算方程是一个线性方程组。例如：一个化工厂有 3 个蒸汽来源和 14 个蒸汽使用单元，对其进行物料衡算可得如下方程组：

$x_1 + x_2 + x_3 = 43.93$

$1.17x_1 - x_4 = 0$

$x_5 = 95.798$

$x_3 + x_5 - x_6 - x_7 - x_8 + x_{13} = 99.1$

$x_6 + x_7 + x_8 + x_9 - x_{10} - x_{11} = -8.4$

$x_4 + x_{13} = 24.2$

$$x_1 - x_4 - x_{10} + x_{14} = 189.14$$

$$4.954x_{10} + 0.11x_{14} = 146.55$$

$$x_9 = 10.56$$

$$x_2 = 2.0956$$

$$x_6 - 0.0147x_{14} = 0$$

$$x_3 - 0.07x_{12} = 0$$

$$x_7 = 14.6188$$

$$x_{10} - x_{12} + x_{14} = -97.9$$

试求解以上线性方程组。

3.2 稳态连续搅拌釜式反应器的计算

采用 4 个连续釜式搅拌器生产某产品，反应器中发生一级不可逆反应，如下：

$$A \xrightarrow{k_i} B$$

各釜的体积以及反应的速率常数如下：

反应器	体积,Vi	速率常数,ki	反应器	体积,Vi	速率常数,ki
1	1000	0.1	3	100	0.4
2	1500	0.2	4	500	0.3

假定各反应器处于稳定态操作（即反应浓度不随时间变化），反应器物料为液态，其密度和体积均维持不变，反应物 A 的消失速率可表示为：$R=V_ik_iC_A$。现求当 A 的进料浓度为 1mol/L，进料流量为 1000 L/h 时，4 个反应器的出口 A 的浓度。

模型：对各个反应器进行物料衡算，稳定状态下物料衡算的通式为：

进反应器质量=出反应器质量+反应消耗量

据此可以写出以上反应体系的物料衡算式：

反应器 1：$1000=1000C_{A1}+V_1k_1C_{A1}$;

反应器 2：$1000C_{A1}+100C_{A3}=1100C_{A2}+ V_2k_2C_{A2}$;

反应器 3：$1100C_{A2}+100C_{A4}=1200C_{A3}+V_3k_3C_{A3}$;

反应器 4：$1100C_{A3}=1100C_{A4}+V_4k_4C_{A4}$;

代入表中各反应器的体积和速率常数数据，联立求解以上方程即可得各反应器出口 A 的浓度。

3.3 线性方程组的迭代解法

1）编写一个 MATLAB 函数，利用 SOR 迭代以指定精度求解线性方程组 Ax=b。

2）分别选择松弛因子 ω=0.1：0.1：1.5 利用以上函数求解线性方程组：

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 5.84 \\ -5.5 \\ 7.33 \\ 3.35 \end{bmatrix}$$

计算的初始值取：[0 0 0 0]，要求精度取 1e-6。做出松弛因子与迭代次数的关系图，找到最佳松弛因子使计算过程迭代次数最少.

解：超松弛迭迭代见子程序。最佳松弛因子为 1.1

3.4 化学计量数矩阵与独立反应数

有 6 个物种发生如下化学反应：

$$\begin{aligned} A_4 + A_5 &\rightleftharpoons A_6 + A_2 \\ A_4 + A_1 &\rightleftharpoons A_2 + A_3 \\ A_3 + A_5 &\rightleftharpoons A_6 + A_1 \end{aligned}$$

可以将以上化学反应方程式写成如下等价形式：

$$\begin{aligned} -A_4 - A_5 + A_6 + A_2 &= 0 \\ -A_4 - A_1 + A_2 + A_3 &= 0 \\ -A_3 - A_5 + A_6 + A_1 &= 0 \end{aligned}$$

上式可以表示为矩阵相乘的形式如下：

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \\ A_5 \\ A_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

上式简写为：$\nu A = 0$。矩阵 υ 称为化学计量数矩阵。

对于一些复杂反应体系，其中某些反应可以由其他反应线性组合形成，此时一个反应体系中独立反应（反应无法由其他反应线性组合形成）数等于化学计量数矩阵的秩。

对于以下反应体系：

$$\begin{aligned} & H_2 + Br_2 \rightleftharpoons 2HBr \\ & Br_2 \rightleftharpoons 2Br \\ & Br + H_2 \rightleftharpoons HBr + H \\ & H + Br_2 \rightleftharpoons HBr + Br \\ & H + HBr \rightleftharpoons H_2 + Br \\ & 2Br \rightleftharpoons Br_2 \end{aligned}$$

1） 写出该反应体系的化学计量数矩阵；

2） 该求出反应体系的独立反应数；

3） 编写一个 MATLAB 函数找出一组该反应体系的独立反应。