

浙江大學

《数值计算方法》第四周作业



姓名与学号 王德茂 (3220105563)

指导教师 徐祖华

年级与专业 机器人 2202

所在学院 控制科学学院

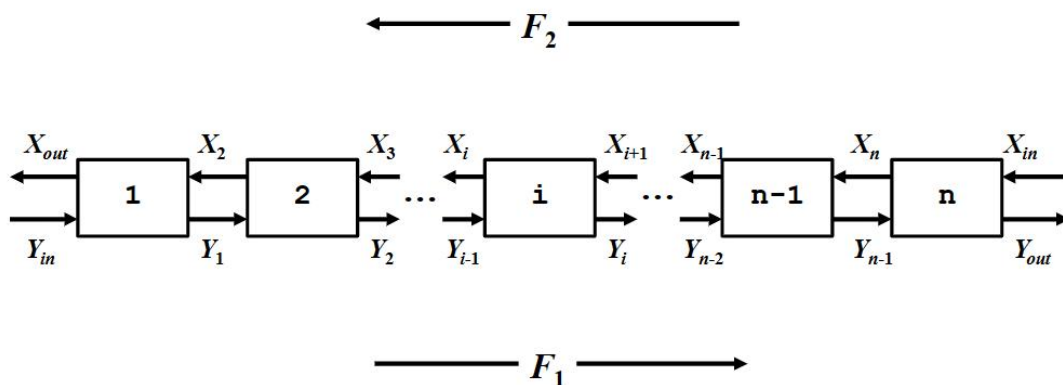
第四周作业

一、问题提出：

图示为一个多级萃取过程（见下页），待萃取物的流率为 F_1 ，待萃取物的组分为 Y_{in} ，萃取剂的流率为 F_2 ，萃取剂的组分为 X_{in} 。第 i 级的质量守恒方程为且每一级均为平衡级，即， $K=4$ 为平衡常数，因此

(1) 设 $F_1=500\text{kg/h}$ 、 $F_2=300\text{kg/h}$ 、 $Y_{in}=0.5$ 、 $X_{in}=0$ ，试对不同级数（ $n=3$ 、 5 、 10 、 20 、 25 、 50 、 100 ）的萃取过程，分别计算 X_{out} 和 Y_{out} ，请用不同方法求解并进行对比（对第一级和最后一级需要修改方程）。

(2) 设 $F_1=500\text{kg/h}$ 、 $F_2=300\text{kg/h}$ 、 $X_{in}=0$ 、级数 $n=20$ ，若 Y_{in} 分别为 0.3 、 0.5 、 0.7 、 0.9 ，计算 X_{out} 和 Y_{out} ，请用不同方法求解并进行对比？



二、解决思路：

本次我们可以按照图示进行分析，建立合适的方程组，并用相关知识解决。

我们使用了高斯消元法、QR 分解法、迭代法来分析。

三、高斯消元法

理论依据：

将线性方程组通过初等行变换化为同解的阶梯型方程组的过程就称之为高斯消元法。易知，利用高斯消元法求解线性方程组就等价于利用初等行变换将线性方程组的增广矩阵化为阶梯型矩阵。

高斯消元法的算法复杂度是 $O(N^3)$ ；这就是说，如果系数矩阵的是 $n \times n$ ，那么高斯消元法所需要的计算量大约与 n^3 成比例。

高斯消元法可用在任何域中。

高斯消元法对于一些矩阵来说是稳定的。对于普遍的矩阵来说，高斯消元法在应用上通常也是稳定的，不过亦有例外。

代码实现：

```
function [X] = Gaussian_elimination(inputArg1,inputArg2,n)
%GAUSS 此处显示有关此函数的摘要
% 此处显示详细说明
C = inputArg1;
b = inputArg2;
A = [C b];
```

```
size = n+1;
last = size+1;
X = zeros(n+1,1);
for k = 2 : size
    for j = k:size
        A(j , :) = A(j, :) - A(k-1, :) * (A(j, k-1) / A(k-1, k-1));

    end
end

X(size) = A(size,last) / A(size,size);
for i = size : -1 : 1
    sum = 0;
    for j = i+1 : size
        sum = sum + A(i,j) * X(j);
    end
    A(i,last) = A(i,last) - sum;
    X(i) = A(i,last) / A(i,i);
end
disp("Y out=");
disp(X(size-1));
disp("X out=");
disp(X(1)*4);
end
```

四、QR 分解法

理论依据：

QR 分解是将一个矩阵分解为一个正交矩阵 Q 和一个上三角矩阵 R 的乘积，即 $A=QR$ 。利用 QR 分解求解线性方程组的方法类似于 LU 分解，首先将 A 分解为 QR ，然后将原方程组转化为 $Rx=Q^Tb$ 的形式，令 $y=Q^Tb$ ，得到 $Rx=y$ ，接着先解 $Rx=y$ 得到 y ，再求解 $x=Qy$ 即可。

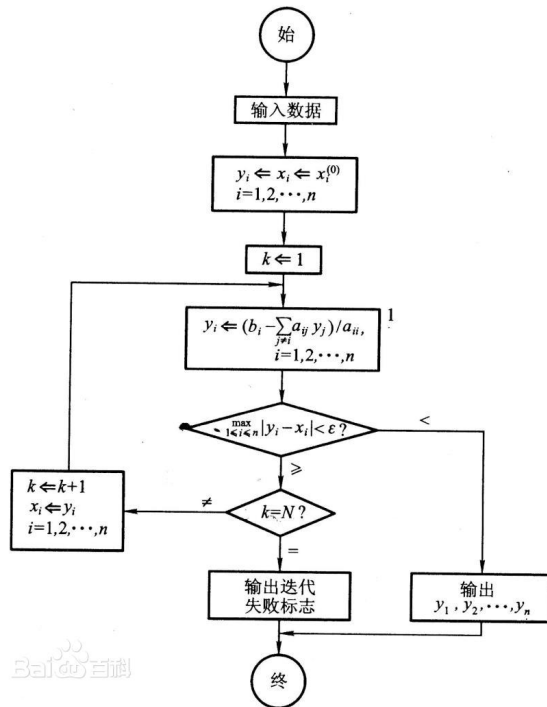
代码实现：

```
function [x] = QR_method(A,b,n)
%LU_METHOD 此处显示有关此函数的摘要
% 此处显示详细说明
[Q, R] = qr(A);
y = Q' * b;
x = R \ y;
% disp(x)
disp("Y out=");
disp(x(n));
disp("X out=");
disp(x(1)*4);
end
```

五、迭代法：

理论依据：

考虑线性方程组 $Ax = b$ 时，一般当 A 为低阶稠密矩阵时，用主元消去法解此方程组是有效方法。但是，对于由工程技术中产生的大型稀疏矩阵方程组（ A 的阶数很高，但零元素较多，例如求某些偏微分方程数值解所产生的线性方程组），利用迭代法求解此方程组就是合适的，在计算机内存和运算两方面，迭代法通常都可利用 A 中有大量零元素的特点。雅可比迭代法就是众多迭代法中比较早且较简单的一种，其命名也是为纪念普鲁士著名数学家雅可比。



雅可比迭代法的优点明显，计算公式简单，每迭代一次只需计算一次矩阵和向量的乘法，且计算过程中原始矩阵 A 始终不变，比较容易并行计算。然而这种迭代方式收敛速度较慢，而且占据的存储空间较大，所以工程中一般不直接用雅可比迭代法，而用其改进方法。

代码实现：

```

function [x] = Jacobi(A , b ,n)
%GAUSS_SEIDEL 此处显示有关此函数的摘要
% 此处显示详细说明
count = 0;
x0 = zeros(n+1,1);
D = diag(diag(A));
L = -tril(A,-1);
U = -triu(A,1);
G = (D-L)\U;
f = (D-L)\b;
x = G*x0+f;
eps = 1e-8;
while norm(x-x0) > eps &&count <200

```

```

        x0 = x;
        x = G* x0 + f ;
        count = count+1;
    end
    disp("迭代次数: ")
    disp(count);
    disp("Y out=");
    disp(x(n));
    disp("X out=");
    disp(x(1)*4);
end

```

六、不同方法的对比:

(1) 对不同级数 ($n=3, 5, 10, 20, 25, 50, 100$) 的萃取过程:

N:	3	5	10
Gaussian_elimination:	$Y=0.0072/x=0.7604$	$Y=0.0012/x=0.8213$	$Y=1.4722e-5/x=0.8332$
QR_method:	$Y=0.0072/x=0.7604$	$Y=0.0012/x=0.8213$	$Y=1.4722e-5/x=0.8332$
Jacobi:	$Y=0.0072/x=0.7604$	$Y=0.0012/x=0.8213$	$Y=1.4722e-5/x=0.8332$
N:	20	25	50
Gaussian_elimination:	$Y=2.3217e-9/x=0.8333$	$Y=2.9158e-11/x=0.8333$	$Y=9.1091e-21/x=0.8333$
QR_method:	$Y=2.3217e-9/x=0.8333$	$Y=2.9158e-11/x=0.8333$	$Y=9.1091e-21/x=0.8333$
Jacobi:	$Y=2.3215e-9/x=0.8333$	$Y=2.9143e-11/x=0.8333$	$Y=8.6844e-21/x=0.8333$
N:	100		
Gaussian_elimination:	$Y=8.8902e-40/x=0.8333$		
QR_method:	$Y=8.8902e-40/x=0.8333$		
Jacobi:	$Y=1.8005e-40/x=0.8333$		

我们分析可以得到, 当级数较小时, 三种方法的结果差异不大。但是当 n 较大时, 可以看到, 产生了明显的不同。这是由于我们设计 Jacobi 法时, 要求精度为 $1e-7$, 而在 n 较大时, Y 过小, 而 x 变化不大。其中, Jacobi 法的收敛速度较快。

(2) 若 Y_{in} 分别为 0.3、0.5、0.7、0.9, 计算 X_{out} 和 Y_{out} :

Y:	0.3	0.5	0.7
Gaussian_elimination:	$Y=1.393e-9/x=0.5$	$Y=2.3217e-9/x=0.8333$	$Y=3.2504e-9/x=1.667$
QR_method:	$Y=1.393e-9/x=0.5$	$Y=2.3217e-9/x=0.8333$	$Y=3.2504e-9/x=1.667$

Jacobi:	$Y=1.3928e-9/x=0.5$	$Y=2.3215e-9/x=0.8333$	$Y=3.2502e-9/x=1.667$
Y:	0.9		
Gaussian_elimination:	$Y=4.1791e-9/x=1.5$		
QR_method:	$Y=4.1791e-9/x=1.5$		
Jacobi:	$Y=4.1789e-9/x=1.5$		

从中我们可以看到，三种方法的结果都是比较好的。

七、小结：

在本次报告中，我们探讨了数值计算方法中解方程组的问题。具体来说，我们研究了一个多级萃取过程的数学模型，并提出了两个问题：一是对不同级数的萃取过程计算 X_{out} 和 Y_{out} ，二是对不同待萃取物组分情况下计算 X_{out} 和 Y_{out} 。为解决这些问题，我们采用了高斯消元法、QR 分解法和迭代法等数值计算方法进行求解，并对不同方法得到的结果进行了对比分析。

在对不同级数的萃取过程进行计算时，我们发现在级数较小时，三种方法的结果较为接近，但在级数较大时，结果会出现明显差异。而在对不同待萃取物组分情况下的计算中，我们也观察到了类似的现象。通过这些研究，我们更深入地了解了数值计算方法在解决方程组问题中的应用，以及不同方法之间的优劣势和适用范围。

总的来说，本次报告为我们提供了关于数值计算方法解方程组的实际案例，帮助我们更好地理解 and 掌握相关知识。通过对不同方法的对比分析，我们能够更准确地选择合适的数值计算方法来解决实际工程问题，为工程实践提供了有益的参考和指导。