

华东理工大学化工学院

《计算机化工应用》课程练习题答案

一、填空（共 15 分，每空 1 分）

1. 计算机内可以表示的最大实数是 1.8×10^{308} (1.796×10^{308})。
2. 以下 MATLAB 表达式的运算结果为: $\tan(45)=$ 1, $\text{mod}(5,2)=$ 1。
3. 已知变量 $A=[3 \ 9 \ 5; 4 \ 7 \ 6; 2 \ 10 \ 1]$, 则下列表达式的运算结果为: $\text{diag}(A,1)=$ $[9;6]$, $A(\text{end}-1,3)=$ 6, $\text{sort}(A,2)=$ $[3 \ 5 \ 9; 4 \ 6 \ 7; 1 \ 2 \ 10]$ 。
4. 定义变量 $\text{Con.A}=0.03$, 则该变量的数据类型是 结构体, 变量名为 Con。
5. 以下一段程序中, $B=B+A$ 语句被执行了 4 次, 程序运行后 B 等于 22。

```
B=0;
for A=1:3:10
    B=B+A;
end
```
6. 已知变量 $X=[1,3;5,2]$, $Y=[1 \ 5;0 \ 4]$, 则 $X|Y=$ $[1 \ 1;1 \ 1]$, $X(X \geq 3)=$ $[5;3]$ 。
7. 最常用的插值函数形式是 代数多项式。
8. $X=[0.1 \ 1.3 \ 1.8 \ 2.1]$, 则 $\text{diff}(X)=$ $[1.2 \ 0.5 \ 0.3]$ 。
9. $A=\text{reshape}(1:4,2,2)$, 则 $\text{fprintf}(\text{'%.2f}\backslash\text{n'},A)$ 的屏幕显示为: 1.00;2.00; 3.00; 4.00。

二、判断题(共 10 分，每小题 1 分)

1. 浮点数运算规则与一般实数不同, 例如加法和乘法交换律不再适用 (×)
2. 如果近似值 x 的误差限是它的某一位的半个单位, 我们就说它“准确”到这一位, 并且从这一位起到前面第一个非零数字为止的所有数字均称为有效数字。 (√)
3. MATLAB 中的子函数仅能由主函数调用, 不能由主函数中的其它子函数调用。 (×)
4. 矩阵不是方阵时, MATLAB 的 rank 命令也可求它的秩。 (√)
5. MATLAB 的变量定义时, 是区分字母大小写的。 (√)
6. 执行语句 $A=3+4i$, 则 A 为一个表示复数的数值型变量。 (×)
7. 如果没有括号调整执行顺序, 那么高优先级的运算符将先被执行。 (√)
8. 在执行 while 循环时, 如果测试条件表达式的值为假, 则将直接执行与该 while

对应的 end 后的语句。 (√)

9. 已知 $A = \text{linspace}(5, 10, 10)$, 则 $A(2)$ 为 5.5。 (×)

10. 龙格-库塔法是一种常用的多步法求常微分初值问题数值解的方法。 (×)

三、选择题 (共 15 分) 以下各题有多个选项, 可能有 1-4 项正确选项。请选择正确选项填入空格中, 不选、多选或错选不得分; 少选可得 1 分。

1. 对一个实际问题进行近似和数值求解过程中产生的误差可以分为: (CD)

- A. 绝对误差;
- B. 近似误差;
- C. 模型误差;
- D. 舍入误差。

2. 以下关于 MATLAB 运算符和标点符号说法正确的是: (ABD)

- A. 一行语句以省略号结尾, 则该行语句和下行属于同一语句;
- B. 数学运算符的优先级高于关系运算符;
- C. 逻辑运算符的优先级高于关系运算符;
- D. 以 % 开头的语句不会被执行。

3. 以下关于 MATLAB 矩阵说法正确的是: (B)

- A. $A(:, \text{end}-1) = []$ 将会把 A 中倒数第 2 行删除;
- B. 矩阵在使用时可以不预先定义其大小;
- C. 通过语句 $A(4) = 15$ 定义的矩阵只有一个元素;
- D. A 是一个 3 行 4 列的矩阵, 则 $\text{diag}(A)$ 的运算结果为一个 1 行 3 列的矩阵。

4. 以下关于 MATLAB 流程控制语句说法正确的是: (BCD)

- A. 当 break 语句被执行时, 其所在的程序将被终止运行;
- B. 不管是循环结构和选择结构, 都以 end 语句结束;
- C. MATLAB 的循环可以由 for 和 while 结构实现;
- D. 当程序需要多重分支时, 采用 switch 结构可能更加方便。

5. 以下数值计算方法可用于非线性方程求解的是: (BC)

- A. 高斯消元法;
- B. 逆二次插值法;
- C. 二分法;
- D. 样条法。

四、(10 分) 已知甲苯胺的饱和蒸气压计算公式为:

$$\ln p = 23.8296 - 3480.3/T - 5.081 \lg T$$

其中 p 为压力, kPa; T 为温度, K。试编写一个 MATLAB 函数完成以下计算任务:

- 1) 绘制温度在 300~1000 K 范围内饱和蒸汽压与温度的关系图，给图形加上坐标轴名；
- 2) 求甲苯胺的正常沸点，即饱和蒸气压等于 101.325 kPa 时的温度，采用 fprintf 函数将结果（保留两位小数）输出在屏幕上。

参考程序：

```
function Test20142C04
P=@(T) exp(23.8296-3480.3./T-5.0811*log10(T));
Tcal=100:500;
Pcal=P(Tcal);
plot(Tcal,Pcal,'k-')
xlabel('Temperature')
ylabel('Pressure')
TP=@(T) 101.325-exp(23.8296-3480.3./T-5.0811*log10(T));
tp=fzero(TP,[700 900]);
fprintf('The boiling T is %.2f\n',tp)
```

五、（15 分）某悬浮液在 25℃恒压 $1.12 \times 10^5 \text{Pa}$ 下进行过滤实验，得到实验数据如下：

$q \text{ (m}^3/\text{m}^2\text{)}$	0.01	0.02	0.03	0.04	0.05	0.06
$\tau \text{ (s)}$	17.5	40.1	69.2	103.7	144.2	186.3

已知等压过滤方程为：

$$\frac{\tau}{q} = \frac{q}{K} + \frac{2q_e}{K}$$

式中 q 为单位面积累积滤液量， m^3/m^2 ； τ 为过滤时间，s； K 和 q_e 为过滤常数，试编写一个 MATLAB 函数完成以下计算：

- 1) 采用线性回归获得过滤常数 K 和 q_e 的值；
- 2) 绘制图形表示拟合效果，给图形加上必要的注释。

参考程序：

```
function Test20142C05
q=0.01:0.01:0.06;
tao=[17.5 40.1 69.2 103.7 144.2 186.3];
y=tao./q;
x=[ones(6,1),q'];
beta=regress(y',x);
K=1/beta(2)
```

```

qe=beta(1)*K/2
plot(q,y,'bo')
hold on
tcal=0.01:0.001:0.06;
ycal=beta(1)+beta(2)*tcal;
plot(tcal,ycal,'k-')
xlabel('tao [s]')
ylabel('tao/q')
legend('Experiment','Simulation')

```

六、（15 分） 实验测得不同温度下两种物质 A 和 B 的粘度如下表所示：

T (K)	313	323	333	343	353	363
μ_A (PaS)	653	549.2	469.7	406.0	355.0	314.8
μ_B (PaS)	393.0	365.4	339.6	315.3	292.4	270.9

一个混合由 45% 的 A 和 55% 的 B 组成，混合物粘度 μ 可按下式计算：

$$\mu^{1/3} = x_A \mu_A^{1/3} + x_B \mu_B^{1/3}$$

试编写一个 MATLAB 函数计算该混合物在指定温度下的粘度，要求：

- 1) 温度作为该函数的输入变量；
- 2) 当输入的温度值不在 313~363 K 的范围内时，退出计算，并显示警告信息：
The input temperature is not in the range, the results may not be right;
- 3) 采用 disp 命令将计算结果输出在屏幕上。

参考程序：

```

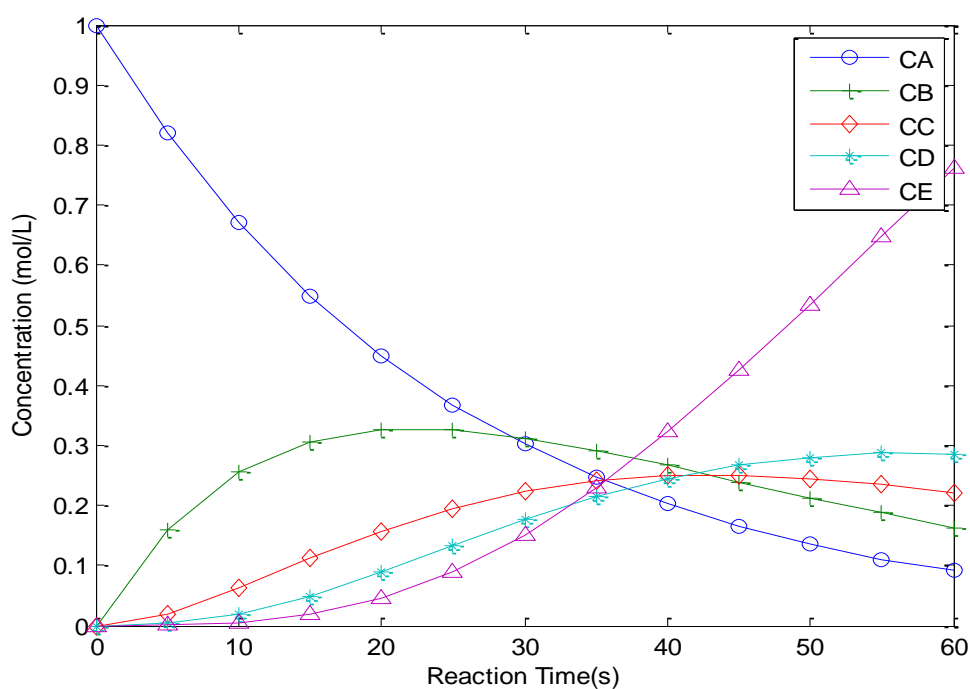
function Miu=CalM(T)
if T<313|T>363
    warning('The input temperature is not in the range, the results may not be right')
    return
end
xA=0.45;xB=0.55;
tx=313:10:363;
ma=[653 549.2 469.7 406.0 355.0 314.8];
mb=[393.0 365.4 339.6 315.3 292.4 270.9];
m1=pchip(tx,ma,T);
m2=pchip(tx,mb,T);
Miu=(m1^(1/3)*xA+m2^(1/3)*xB)^3;
disp(['The calculated viscosity is ',num2str(Miu)])

```

七、(20 分)某串联反应 $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C \xrightarrow{k_3} D \xrightarrow{k_4} E$ 在间歇搅拌釜中进行，各物质的浓度 C_A , C_B , C_C , C_D 和 C_E 与反应时间 t 的关系如下：

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A \\ \frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B \\ \frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B - k_3 C_C \\ \frac{dC_D}{dt} = k_3 C_C - k_4 C_D \\ \frac{dC_E}{dt} = k_4 C_D \end{cases}$$

已知 $k_1 = 0.04s^{-1}$, $k_2 = 0.05s^{-1}$, $k_3 = 0.10s^{-1}$, $k_4 = 0.08s^{-1}$, 反应开始时只有 A 存在，其浓度为 $1mol/L$ ，试编写一个 MATLAB 函数求前 60s 中每隔 5s 时各物质的浓度，将计算结果以下图的形式输出（注意图中各线上数据点表示方法，给图形加上坐标轴名和图例）。



参考程序：

```
function Test22014C07
T=0:5:60;
C0=[1 0 0 0 0];
[T,C]=ode45(@MemEq,T,C0);
```

```

plot(T,C(:,1),'-o',T,C(:,2),'-+',T,C(:,3),'-d',T,C(:,4),'-*',T,C(:,5)
,'-^')
xlabel('Reaction Time(s)')
ylabel('Concentration (mol/L)')
legend('CA','CB','CC','CD','CE')
function dC=MemEq(t,C)
k1=0.04;
k2=0.05;
k3=0.1;
k4=0.08;
dC=zeros(5,1);
dC(1)=-k1*C(1);
dC(2)= k1*C(1)- k2*C(2);
dC(3)= k2*C(2) - k2*C(3);
dC(4)= k3*C(3)- k4*C(4);
dC(5)= k4*C(4);

```