

# 实验六 常微分方程数值解

## 1 实验目的

1. 深入熟悉掌握 MATLAB 的常微分数值解函数 ode45;
2. 学习化工领域典型常微分方程问题的求解过程;

## 2 MATLAB 语法要点

### 常微分方程初值问题求解函数的使用

MATLAB 中求解常微分方程初值问题的函数有很多，主要是根据常微分方程组的刚性大小来选择，但是一般情况下 ode45 函数能够满足刚性和精度要求。并且这些函数的使用方法非常相似，因此要重点掌握 ode45 函数的使用方法，主要使用语法如下：

1.  $[T,Y]=ode45(@fun, TSPAN,Y0)$
  2.  $[T,Y]=ode45(@fun, TSPAN,Y0,options)$
  3.  $[T,Y]=ode45(@fun, TSPAN,Y0,options,P1,P2,...)$
  4.  $[T,Y,TE,YE,IE]=ode45(@fun, TSPAN,Y0,options,P1,P2,...)$
- 输出变量 T 为返回时间列向量；解矩阵 Y 的每一行对应于 T 的一个元素，列数与求解变量数相等
  - @fun 为函数句柄，为根据待求解的 ODE 方程所编写的 ode 文件(odefile)
  - TSPAN=[ T0 Tn ]是微分系统的积分区间
  - Y0 为初始条件
  - options 用于设置一些可选的参数值，缺省时，相当于第一种调用格式。options 中可以设置的参数参见 odeset
  - P1, P2, ...的作用是传递附加参数 P1, P2, ... 到 ode 文件。当 options 缺省时，应在相应位置保留[]，以便正确传递参数

其中 ode 文件的编写是解决不同问题的关键。请参阅讲义熟悉常微分方程、常微分方程组、高阶微分方程的 ode 文件的编写。

## 3 实验内容

### 3.1 管式反应器的计算

在一管式反应器中进行丙酮裂解反应, 反应器中丙酮转化率和温度随反应器体积的变化可以由以下常微分方程组描述:

$$\begin{cases} \frac{dX}{dV} = 9.37e14 * \exp(-34200/T) * \frac{1-X}{q_f(1+X)} * \frac{T_f}{T} \\ \frac{dT}{dV} = \frac{1}{g(X,T)} \left( \frac{dX}{dV} * (-H) + \frac{U * A}{P * q_f} (T_J - T) \right) \end{cases}$$

初始条件:  $X=0$ ;  $T=T_f$

其中:

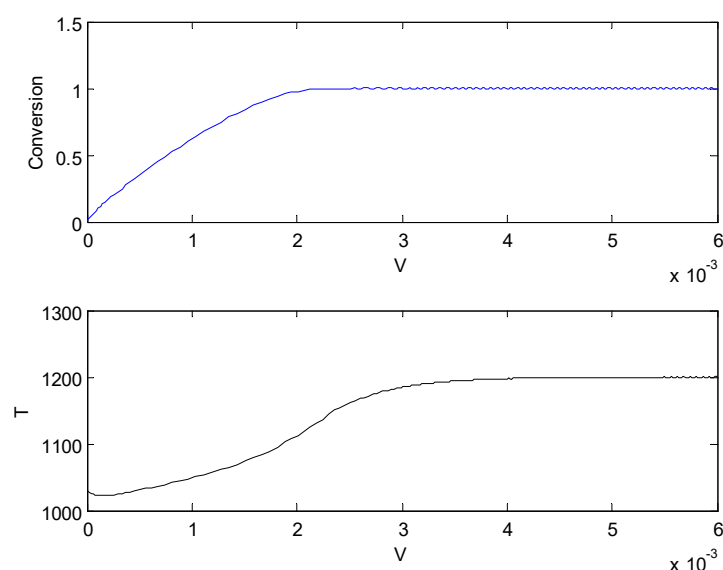
$$g(X,T) = (1-X)(26.65 + 0.364T - 1.3746 * 10^{-4} T^2) + X(33.74 + 0.171T - 0.4983 * 10^{-4} T^2)$$

$$-H = -80700 - 6.7(T - 298) + 5.7 * 10^{-3}(T^2 - 298^2) + 1.27 * 10^{-6}(T^3 - 298^3)$$

方程中各参数的值为:

$$q_f = 0.003, U = 110, A = 160, T_J = 1200, T_f = 1030, R = 82.06 * 10^{-6}, P = 1.58$$

1) 在  $V=0 \sim 0.006$  的范围内求解以上方程, 将结果以多子图的形式输出如下图所示; 并找出反应器温度  $T$  最小时  $V$  和  $X$  的值, 将其在屏幕上显示出来;

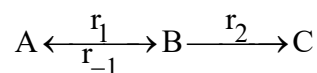


2) 改变  $q_f$  的值分别为 0.006, 0.01 和 0.1, 求解方程组, 将各次计算转化率

x 随 v 变化曲线绘制在一张图上，如下所示。

## 3.2 常微分方程参数拟合问题

在一等温间歇反应器中进行如下反应的动力学实验，



实验获得的数据如下：

$\tau(\text{min})$	$C_A$	$C_B$	$C_C$
0	1.000	0.000	0.000
15	0.695	0.312	0.001
30	0.492	0.430	0.080
45	0.276	0.575	0.151
60	0.225	0.570	0.195
75	0.163	0.575	0.224
90	0.134	0.533	0.330
120	0.064	0.462	0.471
180	0.056	0.362	0.580
240	0.041	0.211	0.747
320	0.031	0.146	0.822
360	0.022	0.080	0.898
380	0.021	0.070	0.909
400	0.019	0.073	0.908

在反应器中各物质浓度随反应时间的变化可由以下常微分方程组描述：

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -r_1 + r_{-1} \\ \frac{dC_B}{dt} = r_1 - r_{-1} - r_2 \\ \frac{dC_C}{dt} = r_2 \end{cases}$$

上述方程组中反应速率与浓度的关系可分别由以下动力学方程描述：

$$r_1 = \frac{k_H K_A C_A}{K_A C_A + C_B + K_C C_C}$$

$$r_{-1} = \frac{k_D K_B C_B}{K_A C_A + C_B + K_C C_C}$$

$$r_2 = \frac{k_2 K_B C_B}{K_A C_A + C_B + K_C C_C}$$

试根据以上动力学实验数据拟合出动力学方程中的各项参数  $k_H$ ,  $k_D$ ,  $k_2$ ,  $K_A$ ,  $K_B$ ,  $K_C$  的值。