Work07

1. 填空

1) 写出采用 roots 函数求解方程$x^4-3x^2+4x-8=0$的命令：<u>x=roots([1 0 -3 4 -8])</u>；

2) fsolve 函数采用的算法是：<u>最小二乘法</u>。

3）调用 fzero 函数时，第三个输入变量的值为空阵时，表示：<u>保持该变量的默认设置不变</u>。

2. 以下关于 fsolve 函数说法正确的是（BCD ）

A. 当 fsolve 执行后，其输出变量的第 3 个分量的值为 1 时，说明所得解对于不同的初始值都是最优的；

B. 当 fsolve 执行后，其输出变量的第 3 个分量的值为 0 时，通常需要调节 fsolve 的求解选项默认值再次进行计算；

C. 当 fsolve 求解成功时，输出变量的第 2 个分量值一定小于 options 中的 TolFun 选项值；

D. 采用不同的初始值试算，是检验 fsolve 计算结果是否合理的一种方法。

3. 预热到 T_0 的含有反应物的溶液原料，以一定的流量 Q，加入到容积为 V_R 的搅拌槽反应器中进行绝热反应。反应混合物连续排出。A 的进、出口浓度分别为 C_{A0} 和 C_A。反应溶液的密度为 ρ，比热容为 Cp。槽内及出口温度为 T，反应速度为：

$-r=kC_A^2$，式中 $k=k_0\exp(-\frac{E}{RT})$。已知数据：T_0=450K，$C_{A0}(-H_r)/\rho C_p$ =250K，E/R=10000K，$k_0C_{A0}=e^{20}$，$\tau=V_R/Q=0.25h$，试

模型：由物料衡算和热量衡算可以获得模型方程如下

$$k_0C_{A0}(1-x)^2\tau\exp(-\frac{E}{RT})-x=0 \quad \text{（物料衡算式）}$$

$$T-T_0=\frac{(-\Delta H)C_{A0}x}{\rho C_p} \quad \text{（热量衡算式）}$$

将热量衡算式代入物料衡算式即可得到关于转化率 x 的单变量非线性方程

1） 编写一个 MATLAB 函数求该反应器中的转化率 x，采用 disp 函数将结果显示在屏幕上；

2）编写一个 MATLAB 函数计算当 $C_{A0}(-H_r)/\rho C_p$ =50，100，150，200，250，300 K 时的转化率（其它参数不变），将计算结果以图形的方式输出（注意给图形加上必要的注释）。

解：

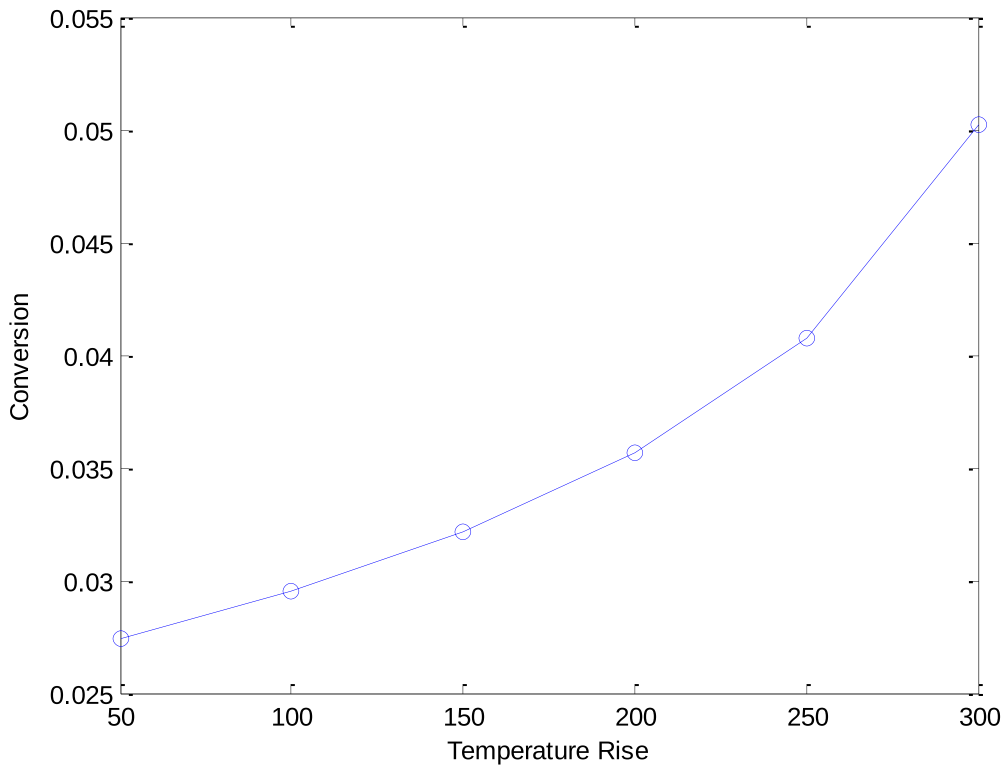
1） function Chap3xiti11
```
x0 = 0;
x = fzero(@fun, x0)
disp(['The conversion is ', num2str(x)])
function y = fun(x)
T0 = 450;
A = 250;
B = 10000;
C = exp(20);
tau = 0.25;
T = T0 + A*x;
y = C*(1-x)^2*tau*exp(-B/T) - x;
```

```
>> chap3xiti11

x =

    0.0408
```

2）
```
function Chap3xiti11
A = 50:50:350;
for i=1:length(A)
    x0 = 0;
    x(i)= fzero(@fun, x0,[],A(i));
end
plot(A,x,'bo-')
xlabel('Temperature Rise')
ylabel('Conversion')
function y = fun(x,A)
T0 = 450;
B = 10000;
C = exp(20);
tau = 0.25;
T = T0 + A*x;
y = C*(1-x)^2*tau*exp(-B/T) - x;
```



method 2

```
function Exchange2
k=50:50:300;
x=fsolve(@fun2,ones(1,6)*0.1,[],k);
plot(k,x,'b-o')
function y=fun2(x,k)
y=exp(20).*(1-x).^2.*0.25.*exp(-10000./(450+k.*x))-x;
```

采用 fsolve 求解时，对初值有一定的要求，有时会得到错误解。

4．试编写一个 MATLAB 函数采用 roots 函数求满足流动方程：

$$8820D^5 - 2.31D - 0.6465 = 0$$

的管径 D，并判断 roots 函数获得实数解的个数；如果实数解的个数为 1，则采用 fprintf 函数输出此解；如果实数解的个数不是 1 个，则返回警告信息，采用 disp 函数显示所有解，并终止程序运行。

```
function exce07_4
p=[8820 0 0 0 -2.31 -0.6465];
D=roots(p);
if sum(D==real(D))==1
    fprintf('The optimum diameter is %.4f\n',D(D==real(D))
else
```

```
    warning('The number of real solution is more than one')
    disp(D)
    return
end
```

5．在对串联换热器的优化设计时得到如下方程组：

$$\begin{cases} T_2 = 400 - 0.0075(300 - T_1)^2 \\ T_1 = 400 - 0.02(400 - T_2)^2 \end{cases}$$

其中 T_1 和 T_2 分别为两个换热器的出口温度。试编写一个 MATLAB 函数求解 T_1 和 T_2。当初始值取[100 100]和[300 300]时的计算结果分别为多少？你觉得哪个结果更信？

求解程序：

```
function Work5_6
x0=[100 100];
[T,fval,exit]=fsolve(@Exchange,x0)
function y=Exchange(T)
y(1)=T(2)-400+0.0075*(300-T(1))^2;
y(2)=T(1)-400+0.02*(400-T(2))^2;
```

结果：

当 x0=[100 100]时

T = 182.0176   295.6011

fval =1.0e-07 *[0.3749   0.3417]

exit = 1

当 x0=[300 300]时

T =   371.1574   362.0246

fval =1.0e-13 *[-0.0711   0.2842]

exit = 1

本题没有提供具体模型的来源，因此判断结果合理性有一定的困难。但初始值为100 时的解可能更加合理，虽然它的残差比初始值为 300 时更大。原因在于初始值为 300 时的换热器出口温度相差太小，一般实际情况下不会发生。