

上机实验答案与提示

实验 1

1. 1) 计算结果为 76127; 2) 可以采用 `sum` 函数求和, 计算时间大大减少。

2. 200 375 425

3. 略

实验 2

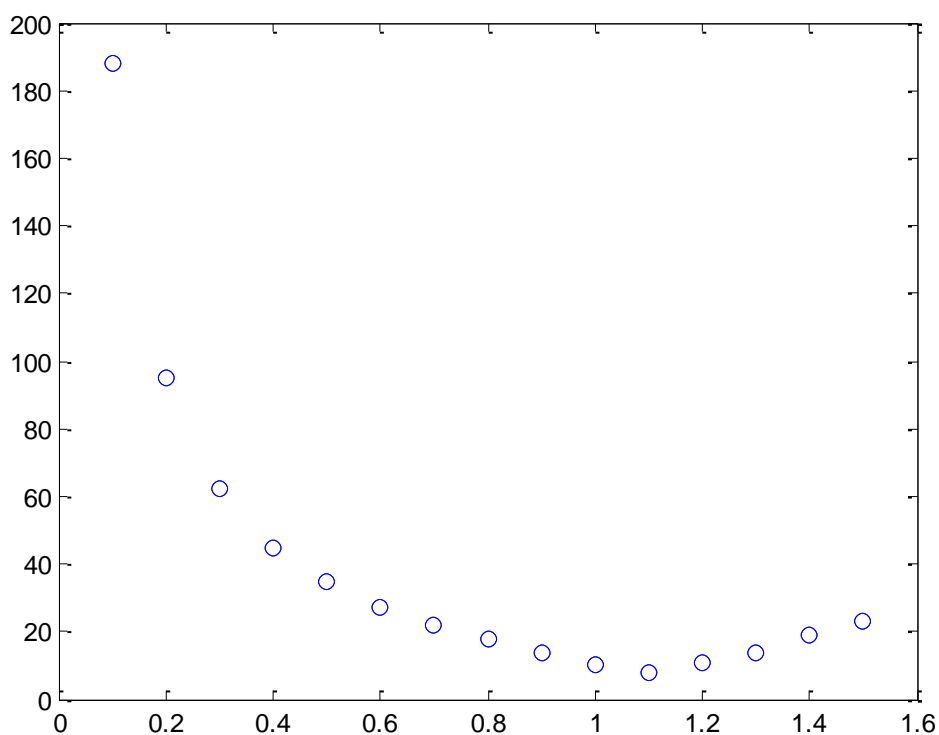
1. $x =$

16.9964	2.9056	24.0280	19.8858	95.7980	3.2148	14.6188
7.2066	10.5600	26.6639	17.3364	343.2571	4.3142	218.6932
164.6998						

2. $CA = 0.9091 \quad 0.6969 \quad 0.6654 \quad 0.5856$

3. $x = 1.3264 \quad -0.5345 \quad 2.0355 \quad 1.3464$

最佳松弛因子为 1.1



4. 1) 化学计量数矩阵为: $A = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 2 \\ -1 & 0 & 1 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$;

$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 2; \end{bmatrix}$

$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 & 1 & -1; \end{bmatrix}$

$\begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 & -1 & 1; \end{bmatrix}$

$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & -1 & 1; \end{bmatrix}$

0 1 0 0 -2];

2) 独立反应数为 3

3) 程序略

实验 3

1. >> Experiment3_1 ([0.6 0.05])

Optimization terminated: first-order optimality is less than options.TolFun.

X =

0.0482 0.0094

fval =

1.0e-018 *

-0.2168 0

flag =

1

即反应平衡时生成 0.0482mol HCl 和 0.0094 mol (CH₃)₂O

2.

y=0.0198, 0.0994, 0.1752, 0.0360, 0.6696 (以上分别为: CH₄, H₂O, CO, CO₂, H₂ 的摩尔分率); 拉格朗日乘子分别为 6.6203e+03, 1.6674e+03, 2.0846e+05;
参考初始值: x0=[0.10, 0.70, 1.2, 0.3, 6, 5000, 1500, 180000]

3.

物系的压力为:101.3 kPa

液相组成为:0.0145 0.3090 0.6765

物系的泡点为:99.8 ??

气相组成为:0.0690 0.3417 0.5893

实验 4

1.

Lambda =

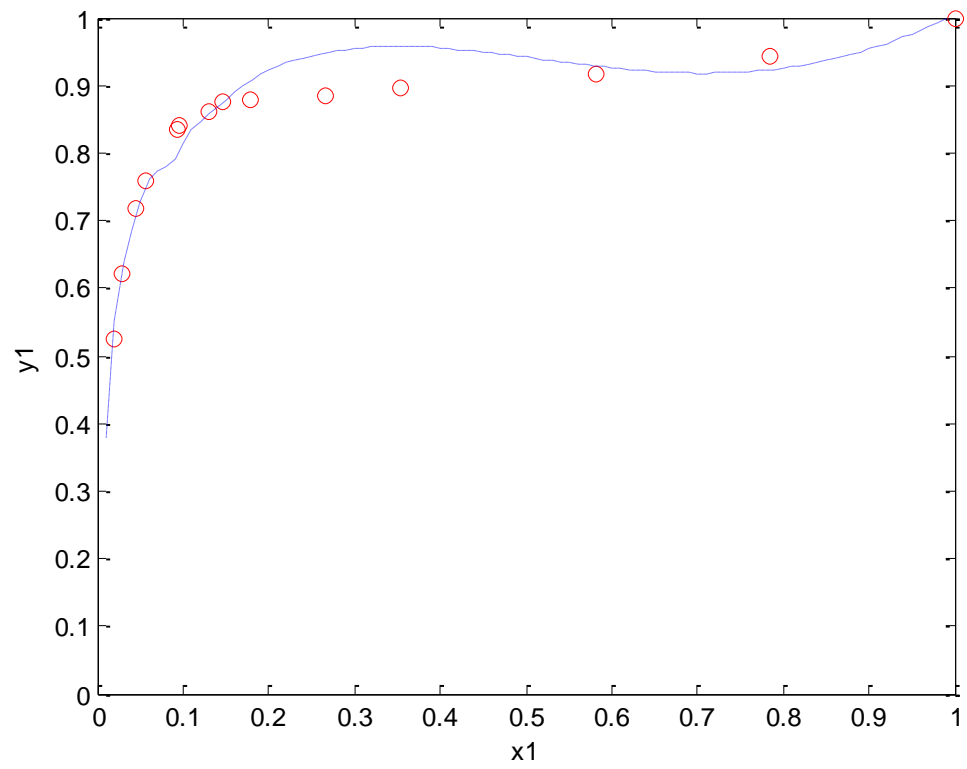
1.1068 0.3633

即甲醇 (1) 和甲乙酮 (2) 体系 Wilson 方程的两个参数分别为:

$\Lambda_{12}=1.1068$, $\Lambda_{21}=0.3633$ 。

3.2.1

1.8778 1.8357



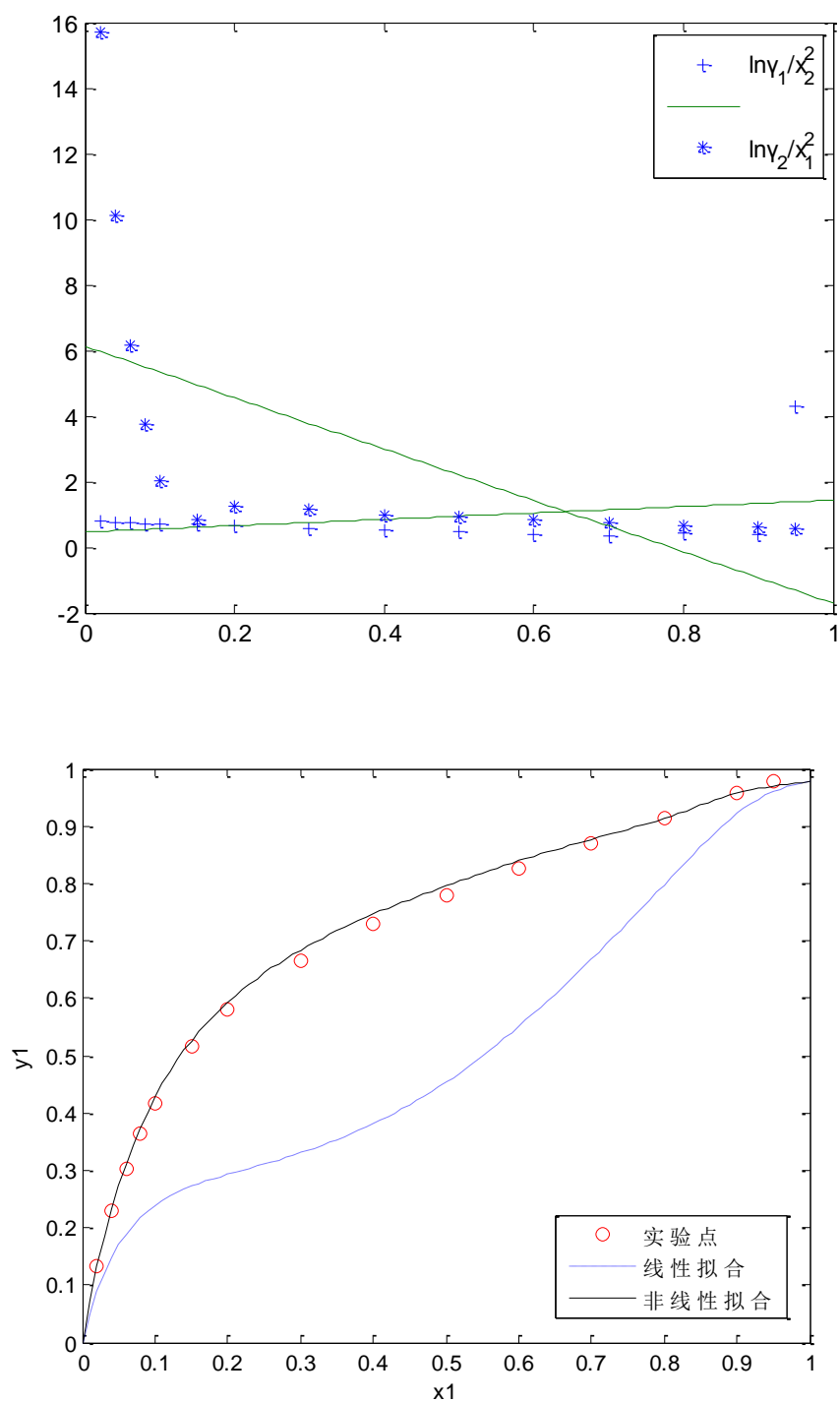
3.2.2

A =

0.4611 -1.7095

Lambda =

0.7956 0.5409



可见线性化的方程拟合效果不理想，改变数据的拟合范围， $\frac{\ln \gamma_1}{x_2^2}$ 拟合时取

x_1 较小部分的数据， $\frac{\ln \gamma_2}{x_1^2}$ 拟合时取 x_1 较大部分的数据。

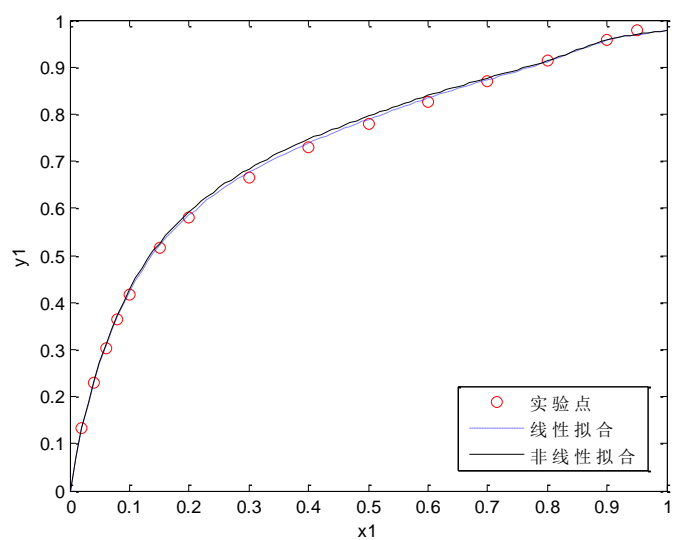
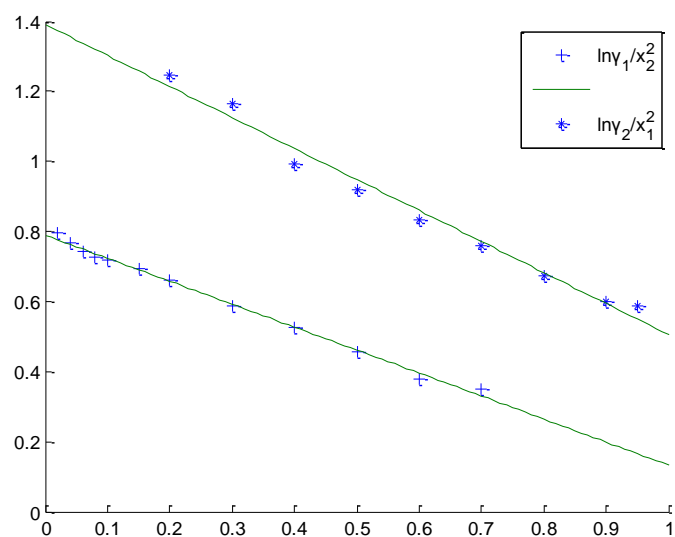
运行结果：

A =

0.7890 0.5058

Lambda =

0.7956 0.5409



实验 5

1.

$X_c = 0.1830$

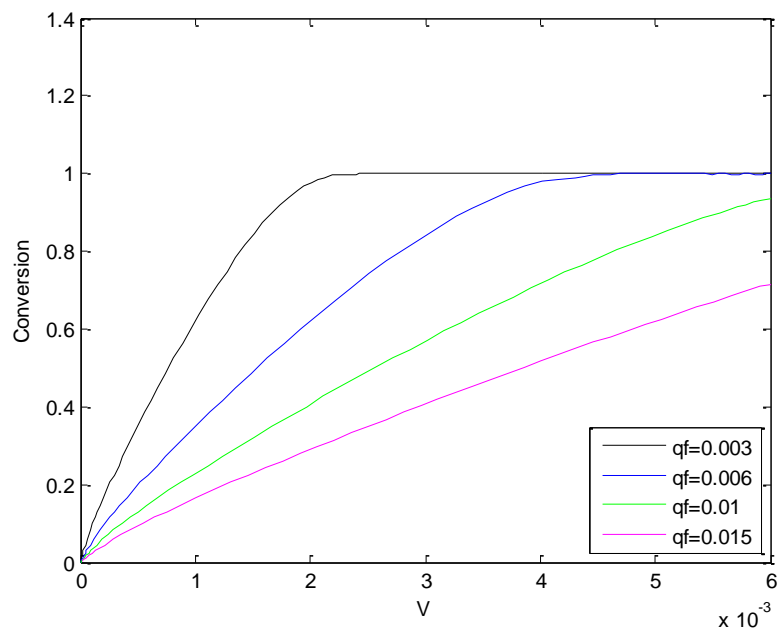
2.

quad 方法计算结果: 168.1917

Simpson 方法计算结果: 168.6633

实验 6

1.



2.

kH, kD, k2, KA, KB, KC 的值依次为:

0.0251 0.0035 0.0093 1.2701 0.9371 1.2407