

作业 3

化工过程模拟及软件应用 化工数值计算部分

重庆理工大学 化学化工学院

作业要求及格式：写上学号和姓名，内容包括

(1) 问题描述 (2) 求解思路 (3) Mworks 程序 (4) 结果讨论

1. 非线性方程求解

将条件为 2.03MPa, 477K 的 2.83m³ 的 NH₃ 气体压缩到 0.142m³, 若压缩后温度为 448.6K, 用 R-K 方程计算压力为多少?

提示: 需先求出状态 1 下的摩尔体积 v , 再求出摩尔量, 再求出状态 2 下的摩尔体积, 计算过程中需用 Mworks 的非线性方程求解函数 `fzero` 编程

2. 非线性方程组的求解:

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 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 C_p 。槽内及出口温度为 T , 反应速度为:

$$r_A = kC_A^2, k = k_0 e^{-\frac{E}{RT}}, k_0 C_{A0} = e^{20}, \tau = \frac{V}{Q} = 0.25h, C_{A0}(-\Delta H_r) / \rho C_p = 250K$$

已知数据: $T_0=450K$, $E/R=10000K$, 试求反应物 A 的转化率 x_A 。

提示: 首先建立物料衡算和热量衡算的数学模型, 如下式所示, 并用 mworks 命令 `fsolve` 求解非线性方程组

$$k_0 C_{A0} (1 - x_A)^2 \tau e^{-\frac{E}{RT}} - x_A = 0$$
$$T - T_0 = \frac{C_{A0}(-\Delta H_r)}{\rho C_p} x_A$$

3. 常微分方程组初值问题的求解

原料 A 在一个间歇反应器内发生连串反应, $A \rightarrow B \rightarrow C$, 其中 B 是目标产物。

定义: $A \rightarrow B$ 的反应为一级反应, 速率常数是 k_1 , $B \rightarrow C$ 的反应为一级反应, 速率常数是 k_2 ,

A 的初始浓度为 C_{A0} , B 和 C 的初始浓度为 C_{B0} 和 C_{C0} 。数值如下:

$$k_1 = 1 \text{ min}^{-1}, \quad k_2 = 5 \text{ min}^{-1}, \quad C_{A0} = 1.5 \text{ mol/l}, \quad C_{B0} = C_{C0} = 0 \text{ mol/l}$$

求 C_A 、 C_B 和 C_C 随时间变化的值, 并作图。时间区间可以自己定, 确保最终反应浓度达到稳定。

提示: 对此间歇反应器列出物料衡算方程, 并用 Mworks 的 `ode45` 命令求解物料衡算方程提示如下:

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A$$
$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A - k_2 C_B$$
$$\frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B$$