

作业 1

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

作业内容要求包括：

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

1. 某公司销售某设备的价格方案如下：如果顾客只买一台设备，则一台的基本价格为\$150。如果顾客购买两台以上设备，则第二台价格为\$120。第三台以后，每台\$110。
用 MWORKS 程序计算出购买 1-10 台设备所需的费用。运行程序，计算出购买 10 台设备的总价格。生成分别购买 1-10 台设备所需价格的图。

提示：需要写一个循环

2. 化工反应工程课本 P52 页 2.1 题的数据，反应物 A 在体积为 4 升的容器中进行水解反应，反应物浓度随时间变化的数据如下表所示

反应时间/h	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$C_A/(\text{mol/L})$	0.9	0.61	0.42	0.28	0.17	0.12	0.08	0.045	0.03

(1) 用线性插值和样条曲线两种方法分别求出时间为 1.5, 2.4, 3.5, 4.6, 5.5, 6.4, 7.5, 8.7 的 A 的浓度。并做出插值前和插值后的散点数据图，并给出结果分析，比较线性插值和样条曲线插值的不同

(2) 分别用 excel 和 mworks 两种软件，求出该反应的动力学方程式。提示：mworks 需要用到曲线拟合函数，可以用 fit，也可以用 lsqcurvefit。反应动力学方程式： $r = \frac{-dC_A}{dt} = kC_A$ ，需要先推导 C_A 和 t 的关系式，再进行曲线拟合，求出关系式中的参数。

3. 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，用普遍化关系式计算其压力为多少？（来源：化工热力学课后题 2-4）

提示：需要用到二维插值函数编写 mworks 程序。不建议用循环，因为需要查表的量太大，建议一步步来试差。

理想气体状态方程： $Pv=RT$ （单位摩尔体积 v ：m³/mol，单位大家去对应化工热力学的课本）
理想气体的假定：分子本身没有体积，分子间的作用力为 0

真实气体： $Pv=ZRT$ ， Z 压缩因子

$Z=Z_0+w*Z_1$

w : 偏心因子，可以查表查到。NH₃ 的偏心因子 $w=0.2526$ （分子是不是对称）

Z_0 和 Z_1 也可以通过查表得到，根据对比压力 P_r 和对比温度 T_r 来查得（二维表格）

对比压力： $P_r=P/P_c$, $T_r=T/T_c$

临界压力 P_c ，临界温度 T_c 都可以通过查表得到（ $P_c=1.128 \times 10^7 \text{Pa}$, $T_c=405.65\text{K}$ ）

临界的压力 P_c ，临界温度 T_c 的物理意义

已知状态 1: $P_1=2.03\text{MPa}$, $T_1=477\text{K}$, $V_1=2.83\text{m}^3$,

已知: $P_c=1.128 \times 10^7 \text{Pa}$, $T_c=405.65\text{K}$, $w=0.2526$

已知: $V_2=0.142\text{m}^3$, $T_2=448.6\text{K}$

待求: P_2

先求状态 1 下面的 Z ，进而把 v_1 求得—— n —— $v_2=V_2/n$ ——试差得到状态 2 下面的 Z —— P_2
 $P_{r1}=P_1/P_c$, $T_{r1}=T_1/T_c$ ，通过 interp2 在表中插值，得到在状态 1 下面的 Z_0 和 Z_1 ——

$Z = Z_0 + w * Z_1$ -- $v_1 = ZRT_1/P_1$ -- $n = V_1/v_1$ -- $v_2 = V_2/n$, T_2 , 求 P_2
 令 $P_2 = RT/v_2$ (或令 $Z = 1$ -- P_2) -- $P_{2r} = P_2/P_c$, $Tr_2 = T_2/T_c$ -- interp2 查表得到 Z_0 和 Z_1 --
 $Z = Z_0 + w * Z_1$ -- $P_2 = ZRT_2/v_2$ 与上一个 P_2 比较 (与上一个 Z 值比较) -- 如果两者差值 《=你要求的精度 -- 》 计算结束;
 如果两者差值 《精度要求, $P_{2r} =$, $Tr_2 =$, --> interp2 查表得到 Z_0 和 Z_1 --
 $Z = Z_0 + w * Z_1$ -- $P_2 = ZRT_2/v_2$ 与上一个 P_2 比较 (与上一个 Z 值比较) 直到满足要求。

4. 化工反应工程课本 P55 页 2.20 题：在铂催化剂上，乙烯深度氧化的动力学方程可表示为

$$r = \frac{k p_A p_B}{(1 + K_B p_B)^2}$$

p_A 、 p_B 分别为乙烯及氧的分压。在 473K 等温下的实验数据如下表

序号	$p_A * 10^3$, MPa	$p_B * 10^3$, MPa	$r * 10^4$, mol/g.min
1	8.99	3.23	0.672
2	14.22	3.00	1.072
3	8.86	4.08	0.598
4	8.32	2.03	0.713
5	4.37	0.89	0.610
6	7.75	1.74	0.834
7	7.75	1.82	0.828
8	6.17	1.73	0.656
9	6.13	1.73	0.694
10	6.98	1.56	0.791
11	2.87	1.06	0.418

用曲线拟合函数 lsqcurvefit 求出动力学方程的 k 和 K_B ，并画出拟合前和拟合后各点速度 r 的散点图

提示： p_A 和 p_B 需要写到一个矩阵里面，作为一个输入数据