

# 第三次作业

学号: 12115990136

姓名: 刘抗非

课程: 化工过程模拟及软件应用

## 1 T1.jl

### 1.1 问题描述

将条件为 2.03 MPa, 477 K 的  $2.83 \text{ m}^3 \text{ NH}_3$  气体压缩到  $0.142 \text{ m}^3$ , 若压缩后温度为 448.6 K, 求压缩后的压力。采用 Redlich-Kwong 方程进行计算。

### 1.2 求解思路

1. 使用已知条件通过 R-K 方程求解初始状态下的摩尔体积和摩尔量。
2. 在压缩状态下, 应用 R-K 方程得出摩尔体积后求解压力。
3. 使用非线性方程求解函数 `fzero` 计算压缩后的压力。

### 1.3 Mworks 程序

```
1 using TyBase
2 using TyMath
3 using TyOptimization
4
5 const R = 8.314 # 气体常数 J/(mol·K)
6
7 # NH3 的临界参数
8 Tc = 405.5 # 临界温度, K
9 Pc = 11.3e6 # 临界压力, Pa
10 a = 0.42748 * R^2 * Tc^2.5 / Pc
11 b = 0.08664 * R * Tc / Pc
12
13 # 修改 R-K 方程
14 function RK_equation(P, V_m, T)
15     return P - R * T / (V_m - b) + a / (T^0.5 * V_m * (V_m + b))
16 end
17
18 # 初始状态参数
19 P1 = 2.03e6 # 初始压力, Pa
20 T1 = 477.0 # 初始温度, K
21 V1 = 2.83 # 初始体积, m^3
22
23 # 求解初始状态下的摩尔体积 V_m1
24 # 初始猜测摩尔体积, 假设为理想气体
25 initial_guess_Vm1 = R * T1 / P1
26 V_m1, _ = fzero(V_m -> RK_equation(P1, V_m, T1), initial_guess_Vm1)
27 println("初始状态摩尔体积 V_m1 = $(V_m1) m^3/mol")
28
29 # 计算初始状态下的摩尔数 n
30 n = V1 / V_m1
```

```

31 println("总摩尔数 n = $(n) mol")
32
33 # 压缩后的状态参数
34 T2 = 448.6 # 压缩后的温度, K
35 V2 = 0.142 # 压缩后的体积, m^3
36
37 # 计算压缩后状态下的摩尔体积 V_m2
38 V_m2 = V2 / n
39 println("压缩后摩尔体积 V_m2 = $(V_m2) m^3/mol")
40
41 # 使用理想气体方程估算初始猜测压力
42 initial_guess_P2 = n * R * T2 / V2
43 println("初始猜测压力 P2 = $(initial_guess_P2) Pa")
44
45 # 使用 R-K 方程求解压缩后的压力 P2
46 P2, _ = fzero(P -> RK_equation(P, V_m2, T2), initial_guess_P2)
47
48 println("压缩后的压力为 $(P2) Pa")

```

## 1.4 结果讨论

通过以上程序可以得到压缩后的压力，并观察气体状态参数对压力的影响。验证了 Redlich-Kwong 方程在非理想气体条件下的适用性。

## 2 T2.jl

### 2.1 问题描述

预热到  $T_0$  的含有反应物的溶液以流量  $Q$  进入容积为  $V$  的反应器中，进行绝热反应。要求计算反应物 A 的转化率  $x_A$ 。

### 2.2 求解思路

1. 通过物料衡算和热量衡算建立非线性方程组。
2. 使用 `fsolve` 函数求解反应物 A 的转化率和温度。

### 2.3 Mworks 程序

```

1 using TyBase
2 using TyMath
3 using TyOptimization
4
5 function reaction_equations(v)
6     x_A, T = v[1], v[2]
7
8     T0 = 450.0 # 初始温度, K
9     CA0 = 1.0 # 初始浓度, 单位为 mol/L
10    ΔHr_pCp = 250.0 # 反应热相关参数, 单位为 K
11    k0 = exp(20)
12    E_R = 10000.0 # 活化能与气体常数比值, K
13    τ = 0.25 # 停留时间, h
14
15    # 非线性方程组
16    f1 = k0 * CA0 * (1 - x_A)^2 * τ * exp(-E_R / T) - x_A
17    f2 = T - T0 - ΔHr_pCp * x_A

```

```

18
19     return [f1, f2]
20 end
21
22 # 使用fsolve求解
23 initial_guess = [0.5, 450.0] # 初始猜测值 [x_A, T]
24 result, _ = fsolve(reaction_equations, initial_guess)
25 println("反应物 A 的转化率 x_A 为 $(result[1])")
26 println("反应物 A 的反应温度 T 为 $(result[2]) K")

```

## 2.4 结果讨论

程序得出反应物 A 的转化率和反应温度值，通过热量和物料衡算确保结果的合理性。所得结果与绝热反应的物理过程相符。

## 3 T3.jl

### 3.1 问题描述

反应器中  $A \rightarrow B \rightarrow C$  发生连串反应，目标是求得各物质浓度随时间的变化情况。

### 3.2 求解思路

1. 建立反应速率方程，通过 A、B、C 的浓度随时间变化的微分方程组描述反应过程。
2. 使用 `ode45` 求解该常微分方程组，并绘制浓度随时间变化的图表。

### 3.3 Mworks 程序

```

1 using TyBase
2 using TyMath
3 using TyPlot
4
5 # 定义反应速率方程
6 function reaction_odes(t, C)
7     k1 = 1.0 # min^-1
8     k2 = 5.0 # min^-1
9     CA, CB, CC = C[1], C[2], C[3]
10
11     dCA_dt = -k1 * CA
12     dCB_dt = k1 * CA - k2 * CB
13     dCC_dt = k2 * CB
14
15     return [dCA_dt, dCB_dt, dCC_dt]
16 end
17
18 # 初始条件和时间区间
19 C0 = [1.5, 0.0, 0.0] # 初始浓度 CA0, CB0, CC0
20 tspan = [0.0, 10.0] # 时间区间，单位为分钟
21
22 # 使用ode45求解
23 t, C = ode45(reaction_odes, tspan, C0)
24
25 # 绘制浓度随时间变化的图
26 figure()
27 hold("on")

```

```
28 plot(t, C[:,1], label="C_A")
29 plot(t, C[:,2], label="C_B")
30 plot(t, C[:,3], label="C_C")
31
32 # 设置坐标轴标签和标题
33 xlabel("Time (min)")
34 ylabel("Concentration")
35 title("Concentration vs. Time")
36
37 # 显示图例
38 legend();
```

### 3.4 结果讨论

通过数值解法绘制出各物质浓度随时间的变化图，得出 B 为目标产物。由图表可见，随着时间推移，B 的浓度达到峰值后逐渐被转化为 C，符合连串反应的动力学特征。