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
2. 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

1. 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 |
| CA/(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

1. 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 = −dCA = kC ，

A

dt

需要先推导 CA 和 t 的关系式，再进行曲线拟合，求出关系式中的参数。

1. 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=Z0+w\*Z1

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）

Z0 和 Z1 也可以通过查表得到，根据对比压力 Pr 和对比温度 Tr 来查得（二维表格） 对比压力：Pr=P/Pc,Tr=T/Tc

临界压力 Pc，临界温度 Tc 都可以通过查表得到（Pc=1.128\*10^7Pa,Tc=405.65K） 临界的压力 Pc，临界温度Tc 的物理意义

已知状态 1：P1=2.03MPa，T1=477K，V1=2.83m3， 已知：Pc=1.128\*10^7Pa,Tc=405.65K，w=0.2526 已知：V2=0.142m3，T2=448.6K

待求：P2

先求状态 1 下面的 Z，进而把 v1 求得--》n--》v2=V2/n-->试差得到状态 2 下面的 Z--》P2 Pr1=P1/Pc,Tr1=T1/Tc,通过 interp2 在表中插值， 得到在状态 1 下面的 Z0 和 Z1-- 》

Z=Z0+w\*Z1--》v1=ZRT1/P1-->n=V1/v1-->v2=V2/n,T2,求 P2

令 P2=RT/v2（或令 Z=1--》P2）--》P2r=P2/Pc,Tr2=T2/Tc--interp2 查表得到 Z0 和 Z1--》Z=Z0+w\*Z1--》P2=ZRT2/v2 与上一个P2 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，P2r=,Tr2=,-->interp2 查表得到 Z0 和 Z1--》Z=Z0+w\*Z1--》P2=ZRT2/v2 与上一个 P2 比较（与上一个 Z 值比较)直到满足要求。

1. 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

k pApB

r =

1 + K p 2

B B

pA、pB 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 | pA \*103, MPa | pB\*103 MPa  , | r \*104, 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 KB ，并画出拟合前和拟合后各点速度 r

的散点图

提示：pA 和 pB 需要写到一个矩阵里面，作为一个输入数据