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
2. 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

1. 非线性方程组的求解：

预热到T0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CA0 和CA。反应溶液的密度为ρ，比热容为Cp。槽内及出口温度为T，反应速度为：



已知数据：T0=450K， E/R=10000K，试求反应物A的转化率xA。

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



1. 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→B→C，其中B是目标产物。

定义：A🡪B的反应为一级反应，速率常数是k1，B🡪C的反应为一级反应，速率常数是k2，A的初始浓度为CA0，B和C的初始浓度为CB0和CC0。数值如下：

k1=1 min-1， k2=5 min-1，CA0=1.5 mol/l， CB0=CC0=0 mol/l

求CA、CB和Cc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：

