



**FAKULTETA ZA KEMIJO IN
KEMIJSKO TEHNOLOGIJO**



Majda Krajnc

Procesno računanje II

Naloge za aktivno in sodelovalno delo

delovni zvezek

Maribor, 2010

Copyright 2010

Majda Krajnc, Procesno računanje II, delovni zvezek

Avtorica: doc. dr. Majda Krajnc

Vrsta publikacije: zbrano gradivo

Založnik: FKKT Univerze v Mariboru

Naklada: On-line

Dostopno na naslovu: <http://atom.uni-mb.si/Stud/egradiva.php>

Dostopno tudi na univerzitetnem elektronskem portalu Moodle pri predmetu Procesno računanje II.

Gradiva iz publikacije, brez dovoljenja avtorice, ni dovoljeno kopirati, reproducirati, objavljati ali prevajati v druge jezike.

ISBN 978-961-248-169-8



CIP - Kataložni zapis o publikaciji
Univerzitetna knjižnica Maribor

66.0(075.8)(076.1)

KRAJNC, Majda

Procesno računanje II [Elektronski vir] :
naloge za aktivno in sodelovalno delo : delovni
zvezek / Majda Krajnc. - Maribor : Fakulteta za
kemijo in kemijsko tehnologijo, 2010

ISBN 978-961-248-169-8

COBISS.SI-ID 63363329

VSEBINA

Predgovor

1. Poglavlje: Uvod

- | | |
|---|---|
| 1. Naloga: Kemijski proces | 1 |
| 2. Naloga: Preračunavanje enot temperature I | 1 |
| 3. Naloga: Preračunavanje enot temperature II | 1 |
| 4. Naloga: Enote različnih veličin | 2 |
| 5. Naloga: Pretvarjanje enot I | 2 |
| 6. Naloga: Pretvarjanje enot II | 2 |
| 7. Naloga: Pretvarjanje enot III | 3 |
| 8. Naloga: Pretvarjanje enot v enačbi | 3 |

2. Poglavlje: Masne bilance procesnih enot brez kemijske reakcije **4**

- | | |
|--|---|
| 1. Naloga: Procesne enote | 4 |
| 2. Naloga: Pridobivanje amoniaka | 4 |
| 3. Naloga: Delni ali parcialni kondenzator | 5 |
| 4. Naloga: Destilacija zmesi | 7 |

3. Poglavlje: Masne bilance sistemov procesnih enot brez kemijske reakcije **9**

- | | |
|----------------------------------|---|
| 1. Naloga: Sistem procesnih enot | 9 |
|----------------------------------|---|

4. Poglavlje: Masne bilance za kemijske reaktorje **11**

- | | |
|--|----|
| 1. Naloga: Zgorevanje butena | 11 |
| 2. Naloga: Proizvodnja amoniaka I | 12 |
| 3. Naloga: Pridobivanje amoniaka II | 14 |
| 4. Naloga: Pridobivanje dušikove kisline | 15 |
| 5. Naloga: Proizvodnja akrilonitrila | 17 |

5. Poglavlje: Obdelava podatkov (transformacija koordinat, linearna regresija, interpolacija) **19**

- | | |
|---|----|
| 1. Naloga: Transformacija koordinat nelinearnih funkcij | 19 |
| 2. Naloga: Transformacija koordinat, linearna regresija | 19 |
| 3. Naloga: Linearna interpolacija | 22 |
| 4. Naloga: Linearna in kvadratna interpolacija | 23 |

6. Poglavlje: Osnove numeričnih metod **24**

- | | |
|----------------------------------|----|
| 1. Naloga: Izračun temperature | 24 |
| a) Grafična metoda | 24 |
| b) Metoda zaporedne substitucije | 25 |
| c) Newtonova metoda | 27 |
| d) Metoda polovičnega intervala | 29 |

7. Poglavlje: Reševanje sistemov enačb **31**

- | | |
|-----------------------------------|----|
| 1. Naloga: Sistem linearnih enačb | 31 |
|-----------------------------------|----|

Predgovor

Pri predmetu Procesno računanje, VS programa, je že nekaj let pri predavanjih vpeljan aktivni in sodelovalni način dela. Omenjen način dela bo prisoten tudi pri predmetu Procesno računanje II v prvem letniku bolonjskega VS programa. Za tak način dela je izdelano dodatno gradivo, Delovni zvezek, ki ga obvezno nosite na predavanja, če jih boste redno obiskovali in želeli osvajati znanje sproti. Vsebina Delovnega zvezka se navezuje na vsebino skripte Procesne bilance avtorjev M. Krajnc, S. Oreški in F. Purkeljca.

Študentje, ki so že pred vami sodelovali pri predavanjih na tak način, so povedali, da jim takšno delo ustreza iz različnih vzrokov:

- predavanja so bolj zanimiva in hitreje minejo,
- naučijo se sodelovanja s kolegi,
- naučijo se upoštevanja mnenj in kritike kolegov,
- pomagajo drug drugemu,
- sproti rešujejo nastale probleme,
- doma porabijo manj časa za učenje in utrjevanje snovi.

Ker aktivni in sodelovalni način dela prinaša številne prednosti, bomo s takim delom nadaljevali tudi v prihodnje. Če boste v Delovnem zvezku naleteli na pomanjkljivosti in napake, mi sporočite, saj bom lahko le v tem primeru pripravila prihodnjim generacijam kvalitetno gradivo.

Majda Krajnc

V Mariboru, februar 2010.

1. poglavje: UVOD

1. Naloga: Kemijski proces.

Kako si predstavljate kemijski proces?

Kaj so procesne enote?

Bi jim dali kakšno drugo ime?

Naštejte nekaj procesnih enot!

- a)
- b)
- c)
- d)
- e)

Kaj mislite, kaj se v procesnih enotah, ki ste jih našli, dogaja? Na kratko opišite!

- a)
- b)
- c)
- d)
- e)

2. Naloga: Preračunavanje enot temperature I.

Katere podatke potrebujete za reševanje naslednje naloge?

V ZDA smo na termometru odčitali temperaturo 100 °F. Koliko °C je to?

Potrebujem:.....

Rezultat:.....

3. Naloga: Preračunavanje enot temperature II.

Ali bi vam bilo v vodi s temperaturo 500 °R mrzlo, toplo ali vroče?

Potrebujem:.....

Rezultat:.....

4. Naloga: Enote različnih veličin.

Kakšne enote lahko imajo naslednje veličine:

Temperatura:

Dolžina:.....

Prostornina:.....

Množina:.....

Čas:.....

5. Naloga: Pretvarjanje enot I.

Vadimo pretvarjanje:

a) $12 \text{ ft} - 7 \text{ cm} = \dots\dots\dots \text{ cm}$

Potrebujem pretvornik:.....

b) $(3 \text{ s})^2 = \dots\dots\dots$

c) $\frac{55 \text{ km}}{\text{h}} \cdot 3 \text{ h} =$

d) $8 \text{ kg} - 5 \text{ lb} = \dots\dots\dots \text{ kg}$

Potrebujem pretvornik:.....

6. Naloga¹: Pretvarjanje enot II.

Poiščite pretvornike med naslednjimi enotami:

dolžina	1 ft	m	cm
dolžina	1 in	m	cm
toplota	1 Btu	cal	J
masa	1 lb	g	kg
prostornina	1 gal (angl.)	L	ft ³
tlak	1 bar	N/m ²	Pa
tlak	1 MPa	Pa	

¹Himmeblau, D. M., Riggs, J. B. Basic principles and calculations in chemical engineering. 7th edition, Prentice Hall PTR, 2004.

7. Naloga¹: Pretvarjanje enot III.

Pretvorite $6,2 \frac{\text{cm}}{\text{h}^2}$ v $\frac{\text{nm}}{\text{s}^2}$! Uporabite princip krajšanja enot!

8. Naloga¹: Pretvarjanje enot v enačbi.

Molska toplotna kapaciteta žvepla je podana z izrazom:

$$C_p = 15,2 + 2,68 \cdot T$$

kjer je C_p v $\text{J}/(\text{mol K})$ in T v K. Preoblikujte izraz tako, da bo C_p izražena v $\text{cal}/(\text{mol } ^\circ\text{F})$, s temperaturo v $^\circ\text{F}$!

Potrebne pretvornike poiščite v literaturi!

(Rezultat: $C_p = (0,198 t / ^\circ\text{F} + 92,8) \frac{\text{cal}}{(\text{mol } ^\circ\text{F})}$)

¹Himmeblau, D. M., Riggs, J. B. Basic principles and calculations in chemical engineering. 7th edition, Prentice Hall PTR, 2004.

2. Poglavje: Masne bilance procesnih enot brez kemijske reakcije

1. Naloga: Procesne enote.

Naštejte nekaj procesnih enot v katerih ne poteka kemijska reakcija!

2. Naloga: Pridobivanje amoniaka.

Napajalna zmes, ki vteka v reaktor, kjer pridobivajo amonijak, vsebuje $x = 25\%$ N_2 , ostalo je H_2 . Masni pretok zmesi $q_m = 3000$ kg/h. Izračunajte masni pretok N_2 ! (Nasvet: najprej izračunajte povprečno molsko maso zmesi \bar{M}_{zmesi} !)

Reševanje:

$$\bar{M}_{zmesi} = \dots = \dots \frac{\text{g}}{\text{mol}} = \dots \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$$

Množinski tok:

$$F = \dots = \dots \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Množinski tok N_2 :

$$F(N_2) = \dots = \dots \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Masni pretok N_2 :

$$q_m(N_2) = \dots = \dots \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

(Rezultat: $\bar{M}_{zmesi} = 8,5 \frac{\text{g}}{\text{mol}}$, $F = 353 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$, $F(N_2) = 88,25 \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$, $q_m(N_2) = 2471 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$)

3. Naloga: Delni ali parcialni kondenzator.

Izračunali bi radi masno bilanco parcialnega kondenzatorja. Problem je naslednji: Plinski tok vsebuje $x = 18\%$ heksana, ostalo je N_2 . Zmes vteka v delni (parcialni) kondenzator, kjer se temperatura zniža, pri čemer se nekaj heksana utekočini. Množinski delež heksana v plinskem toku je $x(C_6H_{14}) = 0,05$. Pretok heksana v tekočem iztoku je $q_v = 1,5$ L/min.

Potek reševanja:

a) Kako deluje parcialni kondenzator?

b) Narišite procesno shemo, označite tokove in komponente ter spremenljivke!

c) Zapišite vrelišči heksana in dušika!

$$t_v(C_6H_{14}) = \dots\dots\dots \text{ }^\circ\text{C}$$

$$t_v(N_2) = \dots\dots\dots \text{ }^\circ\text{C}$$

Zakaj se pri danih pogojih ne utekočini dušik?

d) Katere podatke potrebujete za pretvarjanje prostorninskega toka heksana v množinski tok? Poiščite jih!

Izračunajte množinski tok tekočega heksana!

e) Postavite enačbe masne bilance in pogoje za množinske deleže!

Enačbe masne bilance:

heksan:

dušik:

Pogoji za množinske deleže:

tok 1:

tok 2:

tok 3:

Dodatni pogoji:

f) Določite:

$$N_e = \dots\dots\dots$$

$$N_s = \dots\dots\dots$$

$$N_n = \dots\dots\dots$$

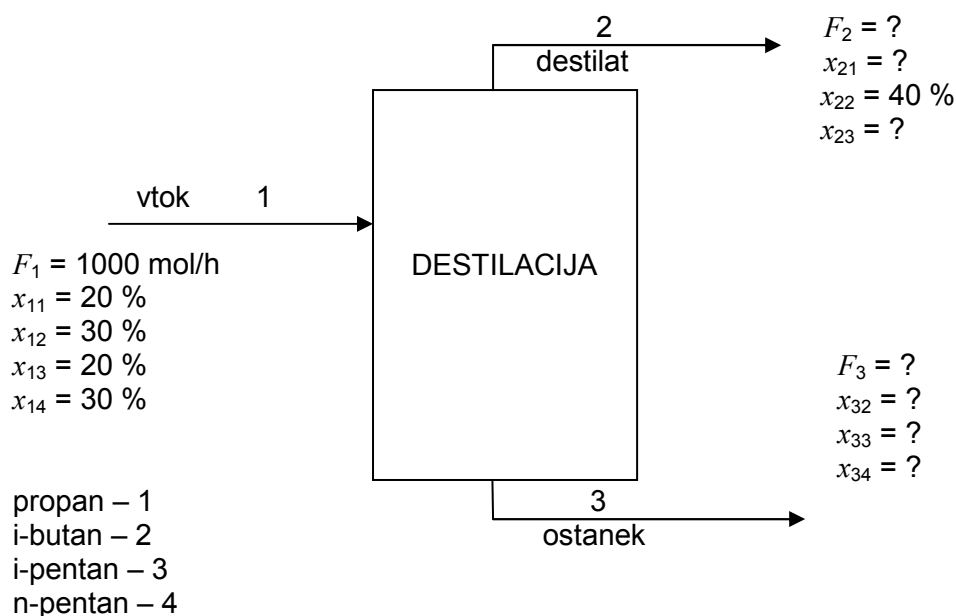
g) Izračunajte vse neznane tokove in sestavo!

(Rezultat: $F_1 = 84,3 \frac{\text{mol}}{\text{min}}$, $F_2 = 72,8 \frac{\text{mol}}{\text{min}}$, $x_{12} = 0,82$, $x_{22} = 0,95$)

4. Naloga²: Destilacija zmesi.

Vtok 4-komponentne zmesi ($F = 1000 \text{ mol/h}$) bomo ločili v dve frakciji: destilat in destilacijski ostanek. V destilatu odločimo ves propan in **80 % izopentana od vtočne množine**, vsebuje pa še $x = 40 \%$ izobutana. V destilacijskem ostanku odločimo ves n-pentan. Ostali podatki so razvidni iz slike.

- Določite N_s in N_n .
- Izračunajte neznane tokove.
- Izračunajte neznane sestave (delež) komponent.



Potek reševanja:

Enačbe masne bilance:

propan:

i-butan:

i-pentan:

n-pentan:

² Schnitzer, H. Grundlagen der Stoff und Energie bilanzierung. Braunschwig, Friedr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, 1991.

Pogoji za masne deleže:

tok 1:

tok 2:

tok 3:

Dodatni pogoji:

Število spremenljivk: $N_s =$

Število načrtovalnih spremenljivk: $N_n =$

Načrtovalne spremenljivke so:

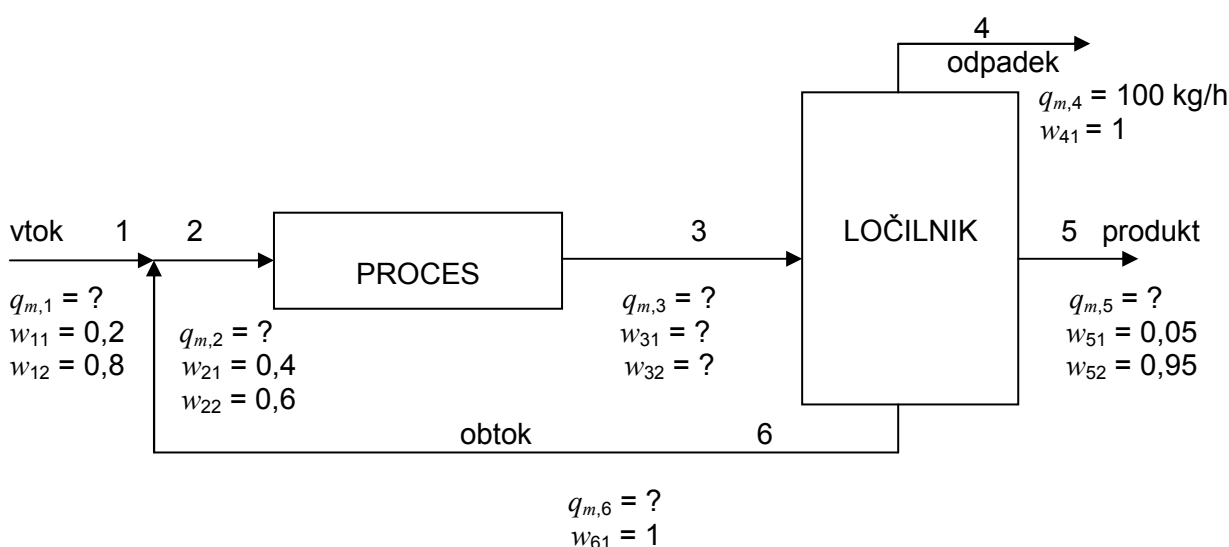
Rešimo enačbe in poiščemo rešitev za vse neznane spremenljivke:

(Rezultat: $F_2 = 600 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$, $F_3 = 400 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$, $x_{21} = 0,333$, $x_{23} = 0,267$, $x_{32} = 0,15$,
 $x_{33} = 0,1$, $x_{34} = 0,75$)

3. Poglavje: Masne bilance sistemov procesnih enot brez kemijske reakcije

1. Naloga³: Sistem procesnih enot.

Za proces na sliki določite neznane tokove in sestave, če je iztok odpadnega materiala (odpadek) 100 kg/h. Ostali podatki so razvidni iz procesne sheme. Iz izračunanih vrednosti določite razmerje med obtokom in vtokom ($\xi = \frac{q_{m,6}}{q_{m,1}}$)! Končni rezultat prikažite v preglednici! Preverite masno bilanco celotnega procesa!



Potek reševanja:

- Koliko procesnih enot je na sliki? Naštejte jih!
- Narišite bilančne meje vsem enotam in celotnemu procesu!
- Kako delujejo posamezne procesne enote, ki so na sliki?

³ Himmeblau, D. M. Supplementary problems for basic principles and calculations in chemical engineering. 6th edition, The University of Texas, 1996.

Enačbe masne bilance:

1. enota:

2. enota:

3. enota:

Pogoji za masne deleže:

tok 1:

.
. .
. .
. .
. .

Dodatni pogoji:

Število spremenljivk: $N_s =$

Število načrtovalnih spremenljivk: $N_n =$

Načrtovalne spremenljivke so (naštejte jih):

Rešimo enačbe in poiščemo rešitev:

(Rezultat: $q_{m,1} = 633 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$, $q_{m,2} = 844 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$, $q_{m,3} = 844 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$, $q_{m,5} = 533 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$, $q_{m,6} = 211 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$,
 $w_{31} = 0,4$, $w_{32} = 0,6$, $\xi = 0,333$)

4. Poglavje: Masne bilance za kemijske reaktorje

1. Naloga⁴: Zgorevanje butena.

Buten zgoreva po naslednji reakciji: $C_4H_8 + 6 O_2 \rightarrow 4 CO_2 + 4 H_2O$. V reaktor vteka 100 mol/h C_4H_8 , zreagira ga samo 50 %. Izračunajte masno bilanco reaktorja na osnovi prisotnih kemijskih komponent. Postopek je naslednji:

a) Označite komponente:

b) Narišite procesno shemo:

c) Kaj pomeni podatek »zreagira ga samo 50 %«? Napišite ustrezno enačbo za ta podatek!

d) Zapišite enačbe **masne bilance komponent!**

komp. 1:

komp. 2:

komp. 3:

komp. 4:

e) Kakšna je hitrost nastajanja vode?

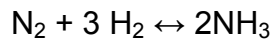
⁴ Krajnc, M. Oreški, S. Purkeljc, F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

f) Koliko CO₂ in H₂O najdemo v iztoku iz reaktorja?

(Rezultat: Hitrost nastajanja vode je $200 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$, iztok iz reaktorja sestavljata $200 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$ vode in prav toliko CO₂.)

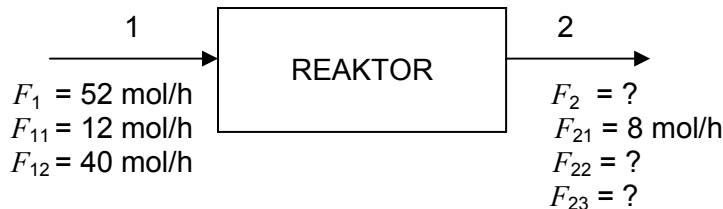
2. Naloga⁴: Proizvodnja amoniaka I.

Izračunati želimo masno bilanco reaktorja v katerem proizvajajo amoniak. Predpostavimo, da vteka v reaktor naslednja množina komponent: 12 mol/h N₂, 40 mol/h H₂. Reakcija je naslednja:



Ugotovljeno je, da pri stacionarnem obratovanju nastaja v produktu 8 mol/h N₂.

Slika prikazuje poenostavljeno procesno shemo:



Oznaka komponent:

- 1 – N₂
- 2 – H₂
- 3 – NH₃

Potek reševanja:

Enačbe, ki jih potrebujem za zapis masne bilance komponent in stopnje presnove, so:

.....

⁴ Krajnc, M. Oreški, S. Purkeljc, F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

a) Kolikšna je hitrost porabe N_2 in H_2 in kolikšna hitrost nastanka NH_3 ?

b) Enačbe masne bilance in izračun neznanih tokov:

c) Preverite masno bilanco! (**Namig:** Najprej izračunajte množinske deleže komponent v vtoku in iztoku, nato izračunajte \bar{M} vtoka in iztoka, ter nato masni vtok in iztok.)

d) Izračunajte stopnjo presnove H_2 in N_2 !

$$X(H_2) =$$

$$X(N_2) =$$

(Rezultat: $\frac{dn_1}{dt} = -4 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$, $\frac{dn_2}{dt} = -12 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$, $\frac{dn_3}{dt} = 8 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$, $q_{m,1} = 416,3 \frac{\text{g}}{\text{h}}$, $q_{m,2} = 416,3 \frac{\text{g}}{\text{h}}$,
 $X(N_2) = 33,3 \%$, $X(H_2) = 30 \%$)

3. Naloga⁴: Pridobivanje amoniaka II.

Za primer iz prejšnje naloge izvedite masno bilanco na osnovi **posameznih elementov!**

Kemijska reakcija je:

Procesna shema in oznaka komponent:

1. Enačbe in pogoji:

a) Enačbe masne bilance:

- za elemente, ki reagirajo:

N:

H:

- za inertne elemente:

b) Pogoji za množinske deleže:

tok 1:

tok 2:

c) Pogoji za procesno enoto:

2. Število spremenljivk: $N_s =$

3. Načrtovalne spremenljivke: $N_n =$

Načrtovalne spremenljivke so (naštejte jih in zapišite njihove vrednosti):

⁴ Krajnc, M. Oreški, S. Purkeljc, F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

4. Rešitev sistema enačb:

Ali lahko enačbe poenostavite? Če jih lahko, potem jih poenostavite.

(Rezultat: $F_2 = 44 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$, $F_{22} = 28 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$, $F_{23} = 8 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$)

4. Naloga⁴: Pridobivanje dušikove kisline.

Moderen proces pridobivanja dušikove kisline temelji na oksidaciji amoniaka, ki ga sintetizirajo po Haberjevi reakciji. Prva stopnja oksidacijskega postopka je reakcija med NH_3 in O_2 , iz katerih v prisotnosti katalizatorja proizvedejo dušikov oksid, NO. Reakcija je naslednja:



Pri določenih pogojih je presnova $X(\text{NH}_3) = 90\%$. Vtok v reaktor je 40 mol/h NH_3 in 60 mol/h O_2 . Izračunajte iztočno sestavo in pretok ter presnovo O_2 ! Enačbe masne bilance postavite na **osnovi prisotnih kemijskih komponent**.

a) Označite komponente:

b) Narišite procesno shemo, označite tokove in vpišite znane podatke ter ostale spremenljivke, ki so potrebne za določitev masne bilance!

⁴ Krajnc, M. Oreški, S. Purkeljc, F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

c) Enačbe masne bilance:

komp. 1:

komp. 2:

komp. 3:

komp. 4:

Potek reševanja:

Izračun neznanih tokov:

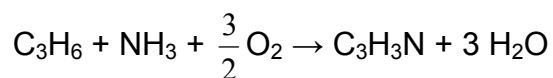
Izračun iztočne sestave:

Izračun stopnje presnove kisika:

(Rezultat: Iztočna sestava: $x(\text{NH}_3)=0,0367$, $x(\text{O}_2)=0,1376$, $x(\text{NO})=0,3303$,
 $x(\text{H}_2\text{O})=0,4954$, pretok $F_2=109 \frac{\text{mol}}{\text{h}}$, $X_{\text{O}_2}=75\%$)

5. Naloga⁴: Proizvodnja akrilonitrila.

Akrilonitril proizvodimo po naslednji reakciji:



Sestava vtoka je naslednja:

$$x(\text{C}_3\text{H}_6) = 10 \%$$

$$x(\text{NH}_3) = 12 \% \text{ in}$$

$$x(\text{zrak}) = 78 \% \text{ (sestava zraka je } x(\text{O}_2) = 21 \%, x(\text{N}_2) = 79 \%)!$$

Presnova ključnega reaktanta je 30 %. Osnova je 100 kmol/h vtočne mešanice. Izračunajte sestavo iztoka iz reaktorja na osnovi proizvedenih množin komponent! Enačbe masne bilance postavite **na poenostavljen način**.

Potek reševanja:

a) Narišite procesno shemo, označite tokove in vpišite znane podatke ter ostale spremenljivke, ki so potrebne za določitev masne bilance!

b) Izračunajte množinski tok kisika in dušika na vtoku:

c) Kateri reaktant je v prebitku in kateri je ključni reaktant?

d) Kakšna je proizvodnja akrilonitrila?

⁴ Krajnc, M. Oreški, S. Purkeljc, F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

e) Izračunajte pretoke ostalih komponent v produktu!

f) Izračunajte sestavo (množinske deleže) iz reaktorja!

(Rezultat: Končna sestava: $x(\text{C}_3\text{H}_6) = 0,0689$, $x(\text{NH}_3) = 0,0887$, $x(\text{O}_2) = 0,117$,
 $x(\text{C}_3\text{H}_3\text{N}) = 0,0296$, $x(\text{H}_2\text{O}) = 0,0887$, $x(\text{N}_2) = 0,607$.

5. Poglavje: Obdelava podatkov (transformacija koordinat, linearna regresija, interpolacija)

1. Naloga: Transformacija koordinat nelinearnih funkcij.

Kako bi transformirali koordinate naslednjim funkcijam? Pri tem upoštevajte, da bo nova funkcija linearna, tj. premica, ki jo zapišemo: $Y = A \cdot X + B$.

a) $y^2 = a \cdot e^{\frac{-b}{x}}$

$Y = \dots\dots\dots X = \dots\dots\dots A = \dots\dots\dots B = \dots\dots\dots$

b) $\sin y = a (\cos x)^2 + b$

$Y = \dots\dots\dots X = \dots\dots\dots A = \dots\dots\dots B = \dots\dots\dots$

c) $y^3 = a \cdot \ln x + \ln b$

$Y = \dots\dots\dots X = \dots\dots\dots A = \dots\dots\dots B = \dots\dots\dots$

d) $E = \frac{1}{2} m \cdot u^2$ E – odvisna spremenljivka, u – neodvisna spremenljivka

$Y = \dots\dots\dots X = \dots\dots\dots A = \dots\dots\dots B = \dots\dots\dots$

2. Naloga⁵: Transformacija koordinat, linearna regresija.

Masni pretok q_m v g/s je merjen kot funkcija temperature v °C. Podatki so naslednji:

$t/^\circ\text{C}$	$q_m/(\text{g/s})$
10	14,76
20	20,14
40	27,73
80	38,47

Ugotovljeno je, da se masni tok spreminja s temperaturo po naslednji zvezi:

$$q_m = a \cdot t^{1/2} + b.$$

⁵ Felder, R. M., Rousseau, R. W. Elementary principles of chemical processes. New York, John Wiley & Sons, 2000.

a) Za dane podatke narišite funkcijo $q_m = f(t)$!

b) Kako bi transformirali koordinate, da bi dobili premico?

c) Izračunajte nove koordinate!

d) Narišite funkcijo s transformiranimi koordinatami! Ali ste dobili premico?

e) Določite formulo funkcije na poenostavljen način iz grafa! Izbrani točki sta:

$$T_1(\quad , \quad) \text{ in } T_2(\quad , \quad).$$

Velja: $Y = A \cdot X + B$

$$A = \frac{Y_2 - Y_1}{X_2 - X_1} = \frac{\quad}{\quad} = \dots\dots\dots \quad B = \dots\dots\dots$$

Enačba premice z izračunanima A in B:

$$Y = A \cdot X + B = \dots\dots\dots$$

Končna formula:

f) določite formulo z metodo najmanjših kvadratov!

m	X	Y	X^2	$X \cdot Y$
1				
2				
3				
4				
	Σ	Σ	Σ	Σ

$$A =$$

$$B =$$

Enačba premice z izračunanima A in B:

$$Y = A \cdot X + B = \dots\dots\dots$$

Končna formula:

(Približni rezultat: $q_m = 4,1 \cdot t^{1/2} + 1,8$)

3. Naloga⁴: Linearna interpolacija.

Prikažite izpeljavo koeficientov a_0 in a_1 pri polinomu 1. stopnje do končne formule, ki jo uporabljamo pri linearni interpolaciji!

Izbrani točki sta: (x_i, y_i) in (x_{i+1}, y_{i+1})

Enačbi polinoma 1. stopnje za izbrani točki sta:

Izpeljava koeficientov a_0 in a_1 :

Končna enačba za linearno interpolacijo je:

⁴ Krajnc, M. Oreški, S. Purkeljc, F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

4. Naloga⁵: Linearna in kvadratna interpolacija

Na voljo so eksperimentalni podatki za parni tlak 1-klorotetradekana v odvisnosti od temperature:

i	$t/^\circ\text{C}$	$p^{\text{nas}}/\text{mmHg}$
1	98,5	1
2	131,8	5
3	148,2	10
4	166,2	20
5	199,8	60
6	215,5	100

Narišite graf funkcije nato pa izračunajte vrednost parnega tlaka pri $t = 185^\circ\text{C}$. Za izračun uporabite:

- linearno in
- kvadratno interpolacijo.

Rezultat primerjajte z eksperimentalno vrednostjo, ki znaša $p^{\text{nas}} = 41$ mmHg in podajte komentar!

Potek reševanja:

Odvisno in neodvisno spremenljivko predstavljata:

$$x = \qquad \qquad \qquad y =$$

$$\text{a) Izberemo točki: } \dots\dots\dots i = \qquad \qquad \qquad i + 1 =$$

$$\text{b) Izberemo točke: } \dots\dots\dots i = \qquad \qquad i+1= \qquad \qquad i + 2 =$$

(Rezultat: a) $y \approx 42,38$ mmHg, b) $y \approx 34,72$ mmHg)

⁵ Felder, R. M., Rousseau, R. W. Elementary principles of chemical processes. New York, John Wiley & Sons, 2000.

6. Poglavje: Osnove numeričnih metod

1. Naloga⁴: Izračun temperature.

Molska toplotna kapaciteta kloroetena je pri nizkih tlakih funkcija absolutne temperature:

$$C_p = 10,05 + 0,1787 \cdot T - 1,151 \times 10^{-4} \cdot T^2 + 2,844 \times 10^{-8} \cdot T^3 \quad / \text{ (J/(mol}\cdot\text{K))}$$

Pri kateri temperaturi T / K je $C_p = 118,4 \text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$?

Za izračun uporabite:

- grafično metodo,
- metodo zaporedne substitucije (preuredite enačbo v obliko, ki bo zagotovila konvergenco),
- Newtonovo metodo in
- metodo polovičnega intervala.

Začetno, ocenjeno temperaturo določite tako, da zanemarite nelinearne člene enačbe. Pri točkah b) in c) izvedite tri iteracije. Ali dosežete konvergenčni pogoj, če je $\varepsilon = 0,001$? Pri metodi polovičnega intervala sami določite začetni in končni interval, izračunajte potrebno število iteracij, ter izvedite 3 iteracije.

Potek reševanja:

a) grafična metoda:

Funkcijo pripravimo v obliko:

Izračun točk:

⁴ Krajnc, M. Oreški, S. Purkeljc, F. Procesne bilance. Maribor, FKKT Univerze v Mariboru, 2012.

Narišite graf funkcije:

Rešitev je: ocenite iz grafa!

b) metoda zaporedne substitucije

Funkcijo pripravimo v obliko:

Ocenjena vrednost temperature T je:

Torej je $T^{(1)} =$

Ali bo izbrana oblika funkcije dala rešitev? Dokažite!

(Opomba: Če dokažete, da z izpeljano obliko funkcije ne boste dosegli rešitve, izpeljite novo obliko in ponovite prejšnji postopek.)

Tvorite iteracijsko zaporedje s »pravo« obliko funkcije!

Izračun iteracij:

1. iteracija: $k = 1$

Konvergenčni pogoj:

2. iteracija: $k =$

Konvergenčni pogoj:

3. iteracija: $k =$

Konvergenčni pogoj:

Ali ste po 3. iteraciji dosegli rešitev?

Sedaj zapišite rezultate v preglednico:

k	$T^{(k)}/K$	$f(T^{(k)}) = T^{(k+1)}/K$	$\left \frac{T^{(k+1)} - T^{(k)}}{T^{(k)}} \right $
1			
2			
3			
4			

c) Newtonova metoda:

Funkcijo pripravimo v obliko:

Ocenjena vrednost $T^{(1)} =$

Analitično odvajanje funkcije in vrednost odvoda pri $T^{(1)}$:

Numerični izraz odvoda in vrednost pri $T^{(1)}$:

$\delta =$

Primerjava vrednosti »analitičnega« in »numeričnega odvoda« pri $T^{(1)}$:

Izračun iteracij:

1. iteracija: $k = 1$

Numerična vrednost odvoda:

Konvergenčni kriterij:

2. iteracija: $k =$

Numerična vrednost odvoda:

Konvergenčni kriterij:

3. iteracija: $k =$

Numerična vrednost odvoda:

Konvergenčni kriterij:

Ali ste po 3. iteraciji dosegli rešitev?

Sedaj zapišite rezultate v preglednico:

k	$T^{(k)}/K$	$T^{(k+1)}/K$	$\left \frac{T^{(k+1)} - T^{(k)}}{T^{(k)}} \right $
1			
2			
3			
4			

Ali ste bližje rešitvi kot pri prejšnjih dveh metodah?

d) metoda polovičnega intervala:

Funkcijo pripravimo v obliko:

Izbrani leva in desna meja začetnega intervala:

Velikost začetnega intervala: $I_1 =$

Velikost končnega intervala: $I_2 =$

$$\frac{1}{\beta} = \frac{\quad}{\quad} =$$

$\beta =$

Število iteracij: $N =$

Izračun iteracij:

1. iteracija: $k = 1$

2. iteracija: $k =$

3. iteracija: $k =$

Ali ste po tretji iteraciji dosegli rešitev?

Sedaj zapišite rezultate v preglednico:

k	$T_1^{(k)}/K$	$T_d^{(k)}/K$	$f(T_1^{(k)})$	$f(T_d^{(k)})$
1				
2				
3				

(Rezultat: $T \approx 1620,4$ K)

7. Poglavje: Reševanje sistemov enačb

1. Naloga³: Sistem linearnih enačb.

Preverite, ali ima sistem linearnih enačb rešitev:

$$4 x_1 + 2 x_2 + x_3 = 15$$

$$20 x_1 + 5 x_2 - 7 x_3 = 0$$

$$8 x_1 - 3 x_2 + 5 x_3 = 24$$

Če je sistem rešljiv, poiščite njegovo rešitev z Gauss-Jordanovo metodo.

Reševanje:

Preverimo, če je matrika regularna (determinanta matrike $\neq 0$)
Izračun determinante s Sarrusovim pravilom:

Kaj pomeni dobljen rezultat?

Reševanje sistema enačb po Gauss-Jordanu:

(Rešitev: $x_1 = 1, x_2 = 3, x_3 = 5$)

³ Himmeblau, D. M. Supplementary problems for basic principles and calculations in chemical engineering. 6th edition, The University of Texas, 1996.