

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)

Кафедра системного анализа

В.К. Викторов, И.В. Ананченко

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯЧЕЕЧНОГО РЕАКТОРА

Методические указания

Санкт-Петербург
2015

Викторов В.К., Ананченко И.В. - СПб.: изд. СПбГТИ (ТУ), 2015. - 24 с.

В методических указаниях лабораторной работе рассматриваются методы моделирования ячеечного реактора. Методические указания соответствует содержанию дисциплины «Современные проблемы системного анализа. Методы многокритериальной оптимизации» государственных образовательных стандартов. Позволяют формировать общепрофессиональные компетенции (СПК-2, ОПК-5) по направлению подготовки 09.04.01 Информатика и вычислительная техника и 27.04.03 Системный анализ и управление: владение методами и средствами получения, хранения, переработки и трансляции информации посредством современных компьютерных технологий, в том числе в глобальных компьютерных сетях; способность применять методы и средства анализа данных, математического моделирования и оптимизации, перспективные теоретические и экспериментальные методы исследования при разработке инновационных ИТ-проектов в промышленности..

Методические указания предназначены для магистров, аспирантов высших учебных заведений и могут быть использованы в системах непрерывного профессионального образования по технологиям, связанным с моделированием и оптимизацией химико-технологических систем.

Рис. 2, табл. 1, библиогр. 12 назв. СПК-2, ОПК-5.

Рецензент: И.А. Смирнов заместитель декана факультета Информационных технологий и управления СПбГТИ(ТУ), к.т.н., доцент кафедры систем автоматизированного проектирования и управления (САПриУ)

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	4
Модель потока в реакторе	5
Модель химической реакции	6
Модель реактора.....	8
Решение уравнений модели	10
Пример выполнения лабораторной работы.....	12
Порядок выполнения работы	18
Содержание отчета.....	19
Контрольные вопросы	19
Варианты индивидуальных заданий	20
Программа расчета реактора.....	21
Литература	23

Введение

Химический реактор является центральным элементом любой химико-технологической системы, поэтому моделирование с целью исследования и интенсификации его работы для последующего проектирования имеет большое практическое значение в химической технологии.

Математическая модель реактора в наиболее общем случае представляет собой некоторую систему уравнений математического описания работы реактора, связывающую между собой входные и выходные параметры.

Эта модель должна в синтезированной форме отображать физико-химические и гидродинамические процессы, протекающие в реакторе, а также учитывать экономические принципы его работы.

Понятно, что математическая модель тем точнее, чем глубже знание исследователя о сущности протекающих в реакторе процессов. Однако, во многих случаях оказывается, что для описания качественных и количественных превращений, происходящих в реакторе, можно с успехом использовать упрощенные (идеализированные) модели. Одним из наиболее сложных для моделирования моментов является описание гидродинамики потока реакционной смеси в объеме реактора, поскольку именно на гидродинамическом режиме базируется основная часть модели реактора – система уравнений массо-энерготенереноса. Идеализация модели реактора, главным образом, относится именно к режиму гидродинамики (модель реактора идеального вытеснения – РИВ, реактор идеального смешения – РИС, реактор с неполным продольным перемешиванием – РНПП). Естественно, что принятию той или иной модели гидродинамического режима должно предшествовать подробное исследование моделируемого реактора с последующим обоснованием правомерности принятия данной идеализированной модели.

Целью данной лабораторной работы является ознакомление с общими принципами моделирования химических реакторов, изучение ячеечной модели потока и приобретение практических навыков в реализации этой модели на ЭВМ.

Модель потока в реакторе

В данных методических указаниях рассматривается проточный реактор (реактор непрерывного действия).

Работа химического реактора в целом определяется всей совокупностью протекающих в нем химических, гидродинамических и тепло-массообменных процессов.

Модель реактора состоит из двух частей: модели потока и модели химической реакции. Гидродинамический режим в реакторе определяется его геометрическими размерами, объемной скоростью потока реакционной смеси, а также ее свойствами.

Следует особо подчеркнуть, что при моделировании процессов тепло-массообмена в реакторе определение структуры потоков, в конечном счете, позволяет описать перемещение и распределение тепла и вещества в этих потоках.

Именно поэтому гидродинамические модели потоков для реакторов, преимущественно имеют вид уравнений переноса тепла и вещества, описывающих изменение температуры и концентрации веществ в объеме реактора.

Рассмотрим ячеечную модель потока, в которой эффекты перемешивания моделируются с помощью определенного числа ячеек идеального смешения. Ячейки соединяются последовательно, перемешивание между ними отсутствует. Количество таких идеальных ячеек $N=1$, для реактора идеального вытеснения $N=\infty$, а для реактора неполного продольного перемешивания число ячеек и число Пекле Pe связаны известным простым соотношением:

$$Pe = \frac{w \cdot V}{S^2 D_l} = 2N , \quad (1)$$

где w – объемная скорость потока, $\text{м}^3/\text{с}$; V – объем реактора, м^3 ; S – площадь поперечного сечения реактора, м^2 ; D_l – коэффициент эффективной диффузии, $\text{м}^2/\text{с}$.

Модель химической реакции

Данная модель состоит из модели стехиометрии и модели кинетики химической реакции. Рассмотрим подробнее каждую из этих составляющих.

Модель стехиометрии:

Модель стехиометрии основана на стехиометрических уравнениях. Предположим, что протекает m – стадийная реакция, в которой участвуют n компонентов ($m < n$). Стехиометрические уравнения могут быть записаны в следующей матричной форме:

$$\Delta C = A * \delta, \quad (2)$$

где ΔC – вектор изменений концентраций веществ, имеющий размерность $(n \times 1)$; A – матрица стехиометрических коэффициентов, $(n \times m)$; δ – вектор степеней полноты реакции $(m \times 1)$.

Стехиометрические коэффициенты в матрице A для реагентов – отрицательны, а для продуктов – положительны.

Матрица A заполняется по столбцам, и каждый столбец соответствует реакции с тем же порядковым номером. Число ключевых компонентов равно числу линейно независимых реакций (столбцов стехиометрической матрицы A). Предположим, что это число $k \leq m \leq n$.

Выделим в матрице A квадратную матрицу A^K размером $(k \times k)$ и, соответственно, выделим векторы изменения концентраций ключевых веществ ΔC^K и степеней полноты линейно независимых реакций δ^k . Тогда, подобно уравнению (2), можно записать:

$$\Delta C^K = A^K * \delta^k \quad (3)$$

Решая систему линейных уравнений (3) относительно δ^k , получим:

$$\delta^k = (A^K)^{-1} * \Delta C^K, \quad (4)$$

где $(A^K)^{-1}$ – обратная матрица, которая существует, поскольку столбцы матрицы A^K линейно независимы.

Для неключевых веществ имеем уравнения, аналогичные (2) или (3):

$$\Delta C^{HK} = A^{HK} * \delta^k, \quad (5)$$

где вектор ΔC^{HK} имеет размерность $((n-k) \times 1)$, а матрица A^{HK} – размерность $((n-k) \times k)$.

Подставляя выражение (4) для δ^k в уравнение (5), получим соотношение между изменениями концентраций неключевых и ключевых компонентов:

$$\Delta C^{HK} = A^{HK} * (A^K)^{-1} * \Delta C^K \quad (6)$$

Следует отметить, что стехиометрические соотношения (6) справедливы только для стационарного режима работы реактора, в переходных режимах, например, при пуске или остановке реактора эти соотношения не выполняются.

Модель кинетики:

Кинетическая модель реакции основана на законе действующих масс, согласно которому скорость реакции в i -й стадии пропорциональна произведению концентраций реагентов в степенях, равных их стехиометрическим коэффициентам:

$$r_i = K_i \prod_{j=1}^{n_i} c_j^{|a_{ji}|} \quad , \quad (7)$$

где r_i – скорость i -й химической реакции, моль/с; K_i – константа скорости; Π – символ произведения; n_i – число реагентов в i -й стадии; c_j – концентрация j -го реагента, моль/м³; a_{ji} – стехиометрический коэффициент j -го вещества в i -й реакции.

Суммарная (по всем стадиям) скорость сложной реакции по j -му веществу – R_j записывается как:

$$R_j = \sum_{i=1}^m a_{ji} r_i \quad (8)$$

Модель реактора

Предполагаем, что тепловыми эффектами реакций можно пренебрегать и теплообмен с внешней средой отсутствует, т.е. имеет место изотерический режим работы реактора.

Кроме того, считаем, что химическое взаимодействие протекает без изменения объема реакционной смеси и поэтому ее объемный расход w постоянен по длине реактора.

Модель реактора основана на законе сохранения вещества и энергии. Принцип материального баланса по j -му веществу для ячейки идеального смешения можно сформулировать следующим образом: скорость изменения количества j -го вещества равна скорости притока вещества в ячейку с входным потоком, минус скорость оттока вещества с входным потоком, плюс скорость изменения количества вещества в ячейке за счет химического взаимодействия (8). Уравнение материального баланса для ячейки объемом δV имеет вид:

$$\delta V \frac{dc_{ji}}{dt} = wC_{ji-1} - wC_{ji} + \delta V * R_j , \quad (9)$$

с начальными условиями:

$$C_{ji}(0) = C_{ji0} ; C_{j0} = C_{j_{\text{вх}}} , \quad (10)$$

где $i=1,2,\dots,N$ – номер ячейки; $j=1,2,\dots,n$ – номер вещества; C_{ji} – текущая концентрация j -го вещества в i -й ячейке, моль/м³; $C_{j_{\text{вх}}}$ – концентрация j -го вещества во входном потоке; C_{ji0} – концентрация j -го вещества в i -й ячейке в начальный момент времени ($t=0$); w – объемный расход, м³/с; δV – объем отдельной ячейки, $\delta V = V/N$; V – полный объем реактора, м³.

В стационарном (установившемся) режиме все $dC/dt=0$ и модель (9) – (10) принимает вид:

$$\begin{aligned} C_{ji-1} - C_{ji} + \delta\tau * R_j &= 0, \\ C_{j0} &= C_{j_{\text{вх}}} \end{aligned} \quad (11)$$

$$j = 1, 2, \dots, n ; i = 1, 2, \dots, N ,$$

где $\delta\tau = \delta V/w$, – время пребывания в ячейке.

Модель стационарного реактора (11) может быть существенно упрощена за счет уменьшения числа уравнений при использовании стехиометрических соотношений (6). При таком подходе уравнения материального баланса

составляются только для ключевых компонентов. Система таких уравнений, записанная в векторной форме, примет вид:

$$C_{i-1}^K - C_i^K + \delta\tau * R^K = 0 \quad (12)$$

$$i = 1, 2, \dots, N.$$

Концентрация неключевых компонентов после решения системы (12) пересчитываются по найденным значениям концентраций ключевых веществ по простым алгебраическим соотношениям. Эти соотношения, полученные с использованием матричного выражения (6) и также записанные в матричной форме, будут выглядеть как:

$$C_i^{HK} = C_0^{HK} + A^{HK} (A^K)^{-1} * (C_i^K - C_0^K), \quad (13)$$

где C^K, C^{HK} – векторы концентраций ключевых и неключевых компонентов, R^K – вектор суммарных скоростей сложной реакции для ключевых компонентов.

Решение уравнений модели

Поскольку скорости R_j нелинейно зависят от концентраций, то система (11) представляет собой систему нелинейных алгебраических уравнений. Для решения таких систем, в общем случае, необходимо применение численных методов.

После подстановки формул связи (13) между ключевыми и неключевыми компонентами в выражение (8) для скоростей реакции, система (12) примет следующий общий вид:

$$C_{j0} - C_j + \delta\tau * R_j(C_1, C_2, \dots, C_K) = f_j(C_1, C_2, \dots, C_K) = 0, \quad (14)$$

$$j = 1, 2, \dots, k,$$

причем индекс i номера ячейки здесь опущен, поскольку система (14) справедлива для любой ячейки.

Проведем линеаризацию системы (14). Для этого разложим функции f_j левых частей уравнений системы (14) в ряд Тейлора в точке C^l и ограничимся в разложениях главными (линейными) их частями:

$$f_j(C^l) = \sum_{i=1}^K \frac{\partial f_j}{\partial C_i} |l * \Delta C_i^l = 0, \quad (15)$$

$$j = 1, 2, \dots, k,$$

где приращения концентраций ΔC_i^K определяются как:

$$\Delta C_i^l = C_i - C_i^l \quad (16)$$

$$i = 1, 2, \dots, k,$$

где C_i – текущее значение i -го вещества.

Если обозначить $f_j(C^l)$ как f_j^l , а якобиан $\left\{ \frac{\partial f_j}{\partial C_i} |l \right\}$ как J^l , то решение линейной относительно ΔC_i^l системы (15) с помощью обратного якобиана $(J^l)^{-1}$ может быть представлено в следующем виде:

$$\Delta C^l = -(J^l)^{-1} * f^l \quad (17)$$

где $f^l = (f_1^l, f_2^l, \dots, f_K^l)^T$, $\Delta C^l = (\Delta C_1^l, \Delta C_2^l, \dots, \Delta C_K^l)^T$;

индекс «Т» означает операцию транспонирования.

Согласно определению ΔC^l (16), следующее $(l + 1) - e$ приближение для вектора концентрации C определяется как:

$$\Delta C^{i+1} = C^i + \Delta C^l \quad (18)$$

Итерации (17) – (18) продолжают до тех пор, пока не будет выполнено условие окончания счета:

$$\|\Delta C^L\| \leq \varepsilon; l = 0, 1, 2, \dots, L, \quad (19)$$

где ε – заданная точность вычислений.

Выражения (17) – (19) представляют собой формульную запись алгоритма численного метода Ньютона-Рафсона для решения систем нелинейных алгебраических уравнений.

В тех случаях, когда аналитическое вычисление производных $(\partial f_j / \partial C_i)$ затруднительно ввиду сложности f_j или отсутствия аналитического выражения для f_j (функция задана таблицей значений), прибегают к оценке этих производных с помощью конечных разностей:

$$\frac{\partial f_j}{\partial C_i} = \frac{f_j(C_1, C_2, \dots, C_i + \delta C_i, \dots, C_K) - f_j(C_1, C_2, \dots, C_i, \dots, C_K)}{\delta C_i} \quad (20)$$

Однако следует понимать, что только использование точных значений производных гарантирует надежную и быструю сходимость итераций.

Пример выполнения лабораторной работы

Постановка задачи:

Задача расчета стационарного изотерического режима работы реактора для заданной схемы реакций формулируется следующим образом: определить изменение концентраций всех веществ как функций текущего объема реактора v , изменяющегося от 0 до V (полный объем реактора) в режимах идеального смешения (РИС), идеального вытеснения (РИВ) и неполного продольного перемешивания (РНПП) при задании значений числа Pe .

Исходные данные:

Исходные данные для индивидуальных заданий приведены в приложении 1, они включают в себя:

- схему реакции;
- значения начальных концентраций всех веществ C_{j0} ;
- значения констант скорости реакций K_1 и K_2 ;
- заданные объем реактора V и объемную скорость реакционной смеси w ;
- значение числа Pe для расчета РНПП (задается преподавателем);

В качестве примера рассмотрим реакцию:



с исходными данными:

$$C_{10} = 1 \text{ моль/м}^3; C_{20} = 1 \text{ моль/м}^3; C_{30} = C_{40} = 0;$$

$$K_1 = 1,5 \text{ м}^3/\text{с} * \text{ моль} ; K_2 = 0,7 \text{ м}^3/\text{с} * \text{ моль}; V = 1 \text{ м}^3; w = 0,1 \text{ м}^3/\text{с}$$

при расчете РНПП примем $Pe = 10$ и в силу соотношения (1) $N=5$.

Моделирование стехиометрии:

Стехиометрическое матричное уравнение (2) для двухстадийной реакции с участием четырех веществ имеет следующий общий вид:

$$\begin{bmatrix} \Delta C_1 \\ \Delta C_2 \\ \Delta C_3 \\ \Delta C_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \\ a_{41} & a_{42} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \end{bmatrix} \quad (22)$$

Для рассматриваемой схемы реакций стехиометрическая матрица A имеет следующий вид:

$$A = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 0 \\ 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (23)$$

Определим число ключевых компонентов реакции (21). Поскольку стадии этой реакции линейно независимы (ни одна из стадий не может быть выражена через другую в виде некоторой ее линейной комбинации), то число ключевых компонентов $k=2$.

В качестве ключевых компонентов выберем вещества 2 и 4, так как в этом случае стехиометрическая матрица A^K ключевых веществ

$$A^K = \begin{bmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{41} & a_{42} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (24)$$

содержит наибольшее количество нулевых элементов, что существенно облегчает нахождение обратной матрицы $(A^K)^{-1}$. Найдём обратную матрицу для рассматриваемого случая.

По определению обратной матрицы:

$$(A^K)^{-1} * A^K = E, \quad (25)$$

где E – единичная матрица. Поэтому должно выполняться следующее:

$$\begin{bmatrix} a_{11}^* & a_{12}^* \\ a_{21}^* & a_{22}^* \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (26)$$

$(A^K)^{-1} \quad A^K \quad E$

где $a_{11}^*, a_{12}^*, a_{21}^*, a_{22}^*$ – пока еще неизвестные элементы обратной матрицы. Для их определения имеем систему линейных уравнений, полученную путем перемножения матриц в левой части матричного уравнения (26) и приравнивания элементов матрицы – результата – соответствующим элементам единичной матрицы E :

$$\begin{cases} a_{11}^* * (-1) + a_{12}^* * 0 = 1; \\ a_{11}^* * 0 + a_{12}^* * 1 = 0; \\ a_{21}^* * (-1) + a_{22}^* * 0 = 0; \\ a_{21}^* * 0 + a_{22}^* * 1 = 1 \end{cases}, \quad (27)$$

откуда легко находится $a_{11}^* = -1$; $a_{12}^* = 0$; $a_{21}^* = 0$; $a_{22}^* = 1$.

Таким образом, обратная матрица имеет вид:

$$(A^K)^{-1} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (28)$$

По соотношениям (4) теперь легко определяется δ^K :

$$\begin{bmatrix} \delta_1 \\ \delta_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \Delta C_2 \\ \Delta C_4 \end{bmatrix}, \quad (29)$$

откуда получаем:

$$\begin{cases} \delta_1 = (-1) * \Delta C_2 + 0 * \Delta C_4 = -\Delta C_2 \\ \delta_2 = 0 * \Delta C_2 + 1 * \Delta C_4 = \Delta C_4 \end{cases}. \quad (30)$$

Заметим, что применение метода обратных матриц для решения системы (22) относительно неизвестных δ_1 и δ_2 не является единственно возможным способом ее решения. Решение может быть найдено любым другим методом решения систем линейных алгебраических уравнений, например, методом Гаусса.

Теперь по уравнению (5) определим ΔC^{HK} :

$$\begin{bmatrix} \Delta C_1 \\ \Delta C_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} -\Delta C_2 \\ \Delta C_4 \end{bmatrix}, \quad (31)$$

$\Delta C^{HK} \quad A^{HK} \quad \delta^K$

следовательно:

$$\begin{cases} \Delta C_1 = (-1) * (-\Delta C_2) + (-1) * \Delta C_4 = \Delta C_2 - \Delta C_4 \\ \Delta C_3 = 1 * (-\Delta C_2) + (-1) * \Delta C_4 = -\Delta C_2 - \Delta C_4 \end{cases}. \quad (32)$$

Учитывая, что $\Delta C_j = C_j - C_{j0}$, имеем окончательно:

$$\begin{aligned} C_1 &= C_{10} + (C_2 - C_{20}) - (C_4 - C_{40}); \\ C_3 &= C_{30} - (C_2 - C_{20}) - (C_4 - C_{40}). \end{aligned} \quad (33)$$

Формулы (33) связывают текущие концентрации неключевых компонентов с начальными значениями концентраций и с текущими концентрациями ключевых веществ, и поэтому часто называются формулами связи.

Моделирование кинетики:

Модель кинетики (7) – (8) учитывается в уравнениях материального баланса для ключевых компонентов (12), которые для рассматриваемого примера имеют вид:

$$\begin{cases} f_2(C_2, C_4) = C_{20} - C_2 - K_1 * \delta\tau * C_1 * C_2 = 0; \\ f_4(C_2, C_4) = C_{40} - C_4 + K_2 * \delta\tau * C_1 * C_3 = 0. \end{cases} \quad (34)$$

В уравнения системы (34) необходимо вместо концентраций неключевых веществ C_1 и C_3 подставить зависимости (33), в результате чего получим:

$$\begin{cases} f_2(C_2, C_4) = C_{20} - C_2 - K_1 * [C_{10} + (C_2 - C_{20}) - (C_4 - C_{40})]C_2\delta\tau = 0 \\ f_4(C_2, C_4) = C_{40} - C_4 - K_2 * [C_{10} + (C_2 - C_{20}) - (C_4 - C_{40})] * \\ [C_{30} - (C_2 - C_{20}) - (C_4 - C_{40})]\delta\tau = 0 \end{cases} \quad (35)$$

Моделирование реактора:

Реактор объемом V разбивается по длине на N ячеек идеального смешения. В зависимости от вида гидродинамического режима число таких ячеек будет: $N-1$ – для идеального смешения мы во всем объеме реактора $N=Pe/2$ – для неполного продольного перемешивания, $N = 100$ – для режима идеального вытеснения. Для каждой элементарной ячейки ее математической моделью является система (35) с формулами пересчета (33) и заданными значениями входных концентраций C_{ji-1} при заданном значении объемного расхода w .

Таким образом, математически модель i -й ячейки имеет вид:

$$\begin{cases} f_2(C_{2i}, C_{4i}) = 0 \\ f_4(C_{2i}, C_{4i}) = 0 \\ C_{1i} = C_{1i-1} + (C_{2i} - C_{2i-1}) - (C_{4i} - C_{4i-1}) \\ C_{3i} = C_{3i-1} - (C_{2i} - C_{2i-1}) - (C_{4i} - C_{4i-1}) \\ i = 1, 2, \dots, N \\ \delta\tau = \delta V/w \end{cases} \quad (36)$$

Алгоритм расчета реактора:

При расчете реактора осуществляется следующие операции. Задаются концентрации веществ на входе в реактор, его объем, объемный расход реакционной смеси, число разбиений N , соответствующее рассматриваемому гидродинамическому режиму, константы скоростей

реакций K_1 и K_2 и точность вычислений ε .

Осуществляется последовательный расчет ячеек реактора, причем значения концентраций компонентов на выходной предающей ячейки является входными для следующей.

Для каждой ячейки по алгоритму метода Ньютона-Рафсона с заданной точностью ε находится решение системы (35) – значения концентраций ключевых веществ C_2 и C_4 , после чего выходные концентрации неключевых компонентов C_1 и C_3 пересчитываются по формулам связи (33).

При решении линеаризованной системы (15) элементы якобиана J^i могут быть рассчитаны численным дифференцированием (20). Для рассматриваемого примера произведенные от функций левых частей уравнений системы (35) легко определяются аналитически. Выполняя дифференцирование, получим:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f_2}{\partial C_2} = f_{22} = -1 - K_1 \delta \tau [C_{10} + (C_2 - C_{20}) - (C_4 - C_{40}) + C_2] \\ \frac{\partial f_2}{\partial C_4} = f_{24} = K_1 \delta \tau C_2 \\ \frac{\partial f_4}{\partial C_2} = f_{42} = K_2 \delta \tau [C_{30} - C_{10} - 2(C_2 - C_{20})] \\ \frac{\partial f_4}{\partial C_4} = f_{44} = -1 - K_2 \delta \tau [C_{10} + C_{30} - 2(C_4 - C_{40})] \end{array} \right. \quad (37)$$

Система линеаризованных уравнений (15) для нашего примера имеет вид:

$$\begin{cases} f_{22} \Delta C_2 + f_{24} \Delta C_4 = -f_2 \\ f_{42} \Delta C_2 + f_{44} \Delta C_4 = -f_4 \end{cases} \quad (38)$$

Поскольку неизвестных всего две, система (38) легко решается методом Крамера. Найдем определитель системы (38) d :

$$d = f_{22} * f_{44} - f_{24} * f_{42} \quad (39)$$

Определители при неизвестных ΔC_2 и ΔC_4 обозначим как d_2 и d_4 :

$$d_2 = f_4 * f_{24} - f_2 * f_{44} \quad (40)$$

$$d_4 = f_2 * f_{42} - f_4 * f_{22}$$

Окончательно по формулам Крамера получим:

$$\Delta C_2 = \frac{a_2}{d}; \Delta C_4 = \frac{d_4}{d} \quad (41)$$

Тексты программ, реализующих расчет реактора для рассмотренной схемы реакций на языке БЕЙСИК, приведены в приложениях 2 и 3.

В программе, написанной на языке Visual Basic, переменная P является признаком печати (на печать выводятся результаты расчета ячеек с номерами кратными P). При расчете целесообразно принять для N=1 и N=5 значение P = 1, а при N=100 – положить P = 20.

Графическое изображение результатов:

После выполнения расчета реактора на ЭВМ необходимо построить графики изменения концентраций C_j всех веществ ($j = 1,2,3,4$) как функций текущего объема V , изменяющегося от 0 до V (полный объем реактора). Графики должны быть построены для реакторов, работающих в режимах идеального смешения, идеального вытеснения и неполного продольного пересечения. На рисунке приведены графики изменения концентрации реагентов по объему реактора для рассмотренного выше примера.

Порядок выполнения работы

В соответствии с порученным индивидуальным заданием необходимо выполнить следующее:

- освоить методику расчета реактора на основе ячеечной модели;
- построить модель реактора для заданной схемы реакций;

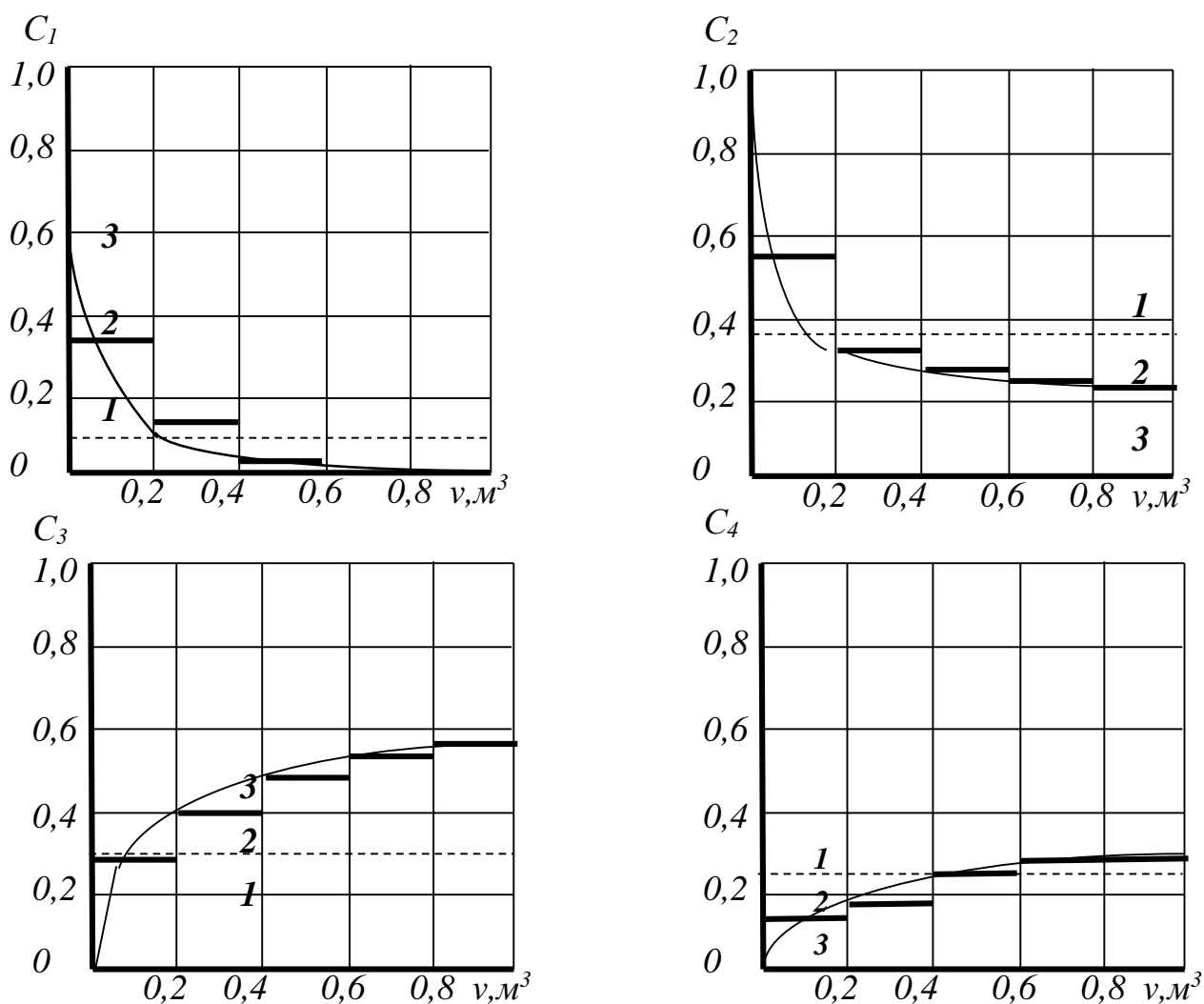


Рисунок 1 – Изменение концентраций веществ C_j , ($j=1,2,3,4$) по объему V для реакции (21); 1 – РИС, 2 – РНПП, 3 – РИВ.

- адаптировать текст программы приложения 2 к расчету всего варианта;
- осуществить расчет реактора на ЭВМ;
- провести анализ полученных результатов;
- оформить отчет о проделанной работе.

Содержание отчета

Отчет по лабораторной работе должен содержать:

- постановку задачи;
- результаты освоения методики расчета реактора с использованием ячеечной модели применительно к конкретному варианту задания;
- результаты расчета реактора на ЭБМ;
- графические иллюстрации результатов;
- анализ результата расчета;
- выводы.

Контрольные вопросы

1. Что определяет выбор той или иной модели реактора?
2. Из чего складывается модель реактора?
3. Каким образом в модели ректора учитывается гидродинамический режим?
4. Какова связь между гидродинамикой потока и числом ячеек ячеистой модели?
5. Что такое ключевые компоненты?
6. Как определяется число ключевых компонентов и осуществляется их выбор?
7. Как формируется модель кинетики?
8. Что включает в себя модель реактора?
9. Как осуществляется расчет ректора?

Варианты индивидуальных заданий

Таблица 1 – Варианты индивидуальных заданий

№ задания	Схема реакций	Значения начальных концентраций C_{j0} , моль/м	Значения констант скоростей реакций K_j	Объем реактора V , м ³	Объемный расход смеси реагентов w , м ³ /с	Значение числа Re при расчете РНПП
1	$A_1 + 2A_2 \rightarrow 2A_3$ $2A_1 + A_3 \rightarrow A_4$	$C_{10}=2,0$ $C_{20}=0,6$ $C_{30}=0$ $C_{40}=0$	$K_1=0,3$ $K_2=0,6$	1	0,8	10
2	$2A_1 + A_2 \rightarrow A_3$ $2A_3 \rightarrow A_4$	$C_{10}=0,9$ $C_{20}=0,5$ $C_{30}=0$ $C_{40}=0$	$K_1=0,3$ $K_2=0,6$	1	0,4	20
3	$A_1 \rightarrow 2A_2$ $A_2 + 2A_3 \rightarrow A_4$	$C_{10}=0,8$ $C_{20}=0$ $C_{30}=2,0$ $C_{40}=0$	$K_1=0,8$ $K_2=0,2$	1	0,2	20
4	$2A_1 \rightarrow A_2$ $A_2 + A_3 \rightarrow A_4$	$C_{10}=0,8$ $C_{20}=0$ $C_{30}=0,3$ $C_{40}=0$	$K_1=0,6$ $K_2=0,1$	1	0,2	10
5	$A_1 + A_2 \rightarrow A_3$ $A_1 + A_3 \rightarrow A_4$	$C_{10}=2,0$ $C_{20}=1,0$ $C_{30}=0$ $C_{40}=0$	$K_1=1,5$ $K_2=0,7$	1	0,5	20
6	$A_1 + A_2 \rightarrow 2A_3$ $A_1 + A_3 \rightarrow 2A_4$	$C_{10}=0,6$ $C_{20}=0,2$ $C_{30}=0$ $C_{40}=0$	$K_1=0,6$ $K_2=0,3$	1	0,2	10
7	$2A_1 + A_2 \rightarrow A_3$ $A_3 \rightarrow 2A_4$	$C_{10}=0,8$ $C_{20}=0,5$ $C_{30}=0$ $C_{40}=0$	$K_1=0,8$ $K_2=0,3$	1	0,3	10

Программа расчета реактора

для схемы реакции (21) на языке Visual Basic

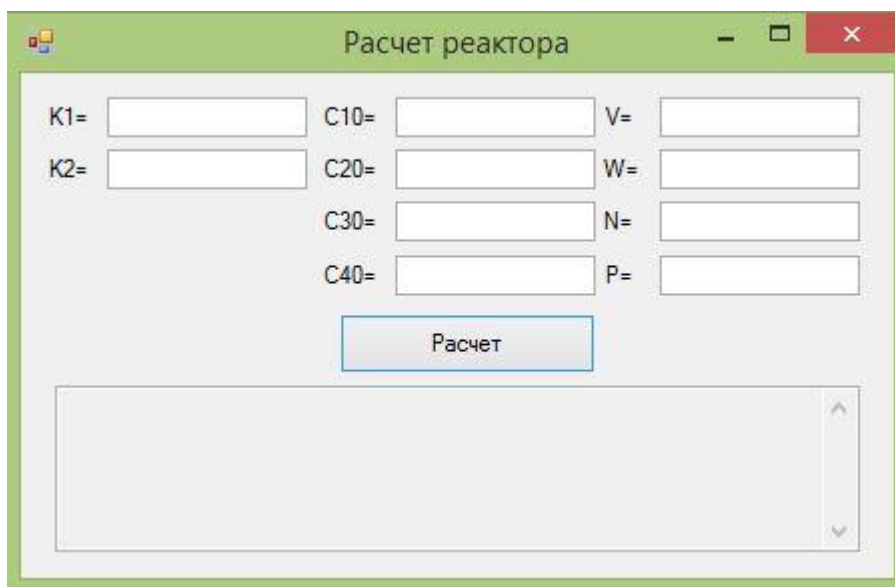


Рисунок 2 – Интерфейс программы расчета реактора

Код программы:

```

Dim k1, k2, c10, c20, c30, c40 As Single
Dim w, v, p, c1, c2, c3, c4, vi, dt, f2, f4, g, f22, f24, f42,
f44, d, d2, d4, dc2, dc4 As Single
Dim n, i, j As Integer
Dim count As String
k1 = Val(TextBox1.Text)
k2 = Val(TextBox2.Text)
c10 = Val(TextBox3.Text)
c20 = Val(TextBox4.Text)
c30 = Val(TextBox5.Text)
c40 = Val(TextBox6.Text)
v = Val(TextBox7.Text)
w = Val(TextBox8.Text)
n = Val(TextBox9.Text)
p = Val(TextBox10.Text)
g = 0.000001
j = 0
dt = v / (w * n)
count = ""
For i = 1 To n
    c2 = c20
    c4 = c40
Cycle:
    c1 = c10 + c2 - c20 - c4 + c40
    c3 = c30 - c2 + c20 - c4 + c40
    f2 = c20 - c2 - k1 * c1 * c2 * dt
    f4 = c40 - c4 + k2 * c1 * c3 * dt
    f22 = -1 - k1 * (c2 + c1) * dt
    f24 = k1 * c2 * dt
    f42 = k2 * (c3 - c1) * dt

```

```

f44 = -1 - k2 * (c1 + c3) * dt
d = f22 * f44 - f24 * f42
d2 = f4 * f24 - f2 * f44
d4 = f2 * f42 - f4 * f22
dc2 = d2 / d
dc4 = d4 / d
If Math.Abs(dc2) < g And Math.Abs(dc4) < g Then
    j = j + 1
Else
    c2 = c2 + dc2
    c4 = c4 + dc4
    GoTo Cycle
End If
If j < p Then
    c10 = c1
    c20 = c2
    c30 = c3
    c40 = c4
Else
    vi = v * i / n
    j = 0
count = count + "Vi=" + Str(vi) + " C1=" + Str(c1) + " C2=" + Str(c2) +
" C3=" + Str(c3) + " C4=" + Str(c4) + vbCrLf
End If
Next
TextBox11.Text = count

```

Литература

а) основная литература:

1. Лисицын, Н. В. Химико-технологические системы: Оптимизация и ресурсосбережение: учебное пособие для втузов / Н. В. Лисицын, В. К. Викторов, Н. В. Кузичкин, В.И. Федоров. - СПб. : Менделеев, 2013. - 392 с.

б) дополнительная литература:

1. Пантелеев, А. В. Методы оптимизации в примерах и задачах : учеб. пособие для втузов / А. В. Пантелеев, Т. А. Летова. – 3-е изд., стер. – М. : Высш. шк., 2008. – 544 с.
2. Системный анализ и принятие решений. Компьютерные технологии моделирования химико-технологических систем. Учебное пособие. / В.А. Холоднов. - СПб: СПб ГТИ(ТУ), ИК «Синтез», 2007 г., 9 п.л.
3. Системный анализ и принятие решений. Математическое моделирование и оптимизация объектов химической технологии. Учебное пособие. / В.А. Холоднов. - СПб: СПб ГТИ(ТУ), ИК «Синтез», 2007 г., 14 п.л.
4. Крамерс Х., Вестертерп К. Химические реакторы. Расчет и управление ими. М.: Химия, 1967. 264 с.
5. Арис Р. Анализ процессов в химических реакторах Л.: Химия, 1967. 395 с.
6. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: 1976. 464 с.
7. Исследование на ЭВМ кинетических закономерностей химических реакций: Метод. указания к лабораторным работам/ С.Н.Саутин и др.; ЛТИ им. Ленсовета, 1988. 28 с.
8. Численные методы решения систем нелинейных уравнений: Метод. указания к лабораторным работам / З.Н. Чепикова и др.; ЛТИ им. Ленсовета, 1988. 32 с.

в) вспомогательная литература:

1. Волкова, В.Н. Основы теории систем и системного анализа./В.Н.Волкова, А.А.Денисов. - СПб, изд.СПбГПУ, 2003 г.,518с.
2. Моисеев, Н.Н. Математические задачи системного анализа./Н.Н.Моисеев. - М: Наука, 1982 г.
3. Губанов, В.А. Введение в системный анализ. Учебное пособие./В.А.Губанов, В.В.Захаров, А.Н.Коваленко. - Л: Изд. Ленинградского университета, 1988 г., 227 с.

Кафедра системного анализа

Методические указания к выполнению контрольных работ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯЧЕЕЧНОГО РЕАКТОРА

Валерий Кирович Викторов

Игорь Викторович Ананченко

Компьютерный набор и верстка

И.С. Горшкова, Я.А. Петрякова, Д.О. Хлестков

Отпечатано с оригинал-макета. Формат 60×90 ¹/₁₆.

Печ. л. 2,0 Тираж 100 экз.

Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)

190013, Санкт-Петербург, Московский пр., 26

Типография издательства СПбГТИ(ТУ), 49-49-365