

Математическая модель химико технологических процессов и их численное решение

Хайруллаев Улугбек

Специальность: Прикладная математика и информационные технологии

(2-курс)

Аннотация

В статье рассматриваются различные математические модели, связанные с химико-технологическим процессом и они решаются численными методами. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными.

Большинство задач химической технологии в математической формулировке представляется системами уравнений, определяющих взаимосвязь многих факторов, от которых зависит течение процесса. Например, математическое описание тарельчатой абсорбера состоит из системы уравнений, определяющей взаимосвязь концентрации и в газе и жидкости на каждой ступени контакта, т.е.

$$hx_{i-1} - hx_i - Vy_i + Vy_{i+1} = 0 \quad (i=0, 1, \dots, N) \quad (1)$$

Система уравнений (1) может быть также записаны в виде

$$\begin{cases} -(h + k_1V)x_1 + k_2Vx_2 = -hx_0 \\ hx_1 - (h + k_2V)x_2 + k_3Vx_3 = 0 \\ \text{-----} \\ hx_{N-1} - (h + k_NV)x_N = -Vy_{N+1} \end{cases} \quad (2)$$

Это система решается методом Гаусса и итерации. Результаты сравниваются и выбирается оптимальный метод с учетом реализации на ЭВМ.

Математический модель тарельчатой колонны ректификации многокомпонентных смесей, записанная относительно определяемых концентраций $\bar{x}_{i,j}$, принимает вид

$$\begin{aligned} - \left(W + V_0 \frac{y_{0,j}}{x_{0,j}} \right) \bar{x}_{0,j} + h\bar{x}_{1,j} + 0 + \dots + 0 &= 0 \\ V_0 \frac{y_{0,j}}{x_{0,j}} \bar{x}_{0,j} - \left(h_1 + V_1 \frac{y_{1,j}}{x_{1,j}} \right) \bar{x}_{1,j} + h_2 \bar{x}_{2,j} + \dots &= 0 \end{aligned}$$

$$0 + V_1 \frac{y_{1,j}}{x_{1,j}} \bar{x}_{1,j} - \left(h_2 + V_2 \frac{y_{2,j}}{x_{2,j}} \right) \bar{x}_{2,j} + \dots = 0 \quad (3)$$

$$V_{j-1} \frac{y_{j-1,j}}{x_{f-1,j}} x_{f-1,j} - \left(h_j + V_j \frac{y_{f,j}}{x_{f,j}} \right) \bar{x}_{f,j} + h_{j+1} \bar{x}_{f+1,j} + \dots = -F x_{F,j}$$

$$V_{N-1} \frac{y_{N-1,j}}{x_{N-1,j}} x_{N-1,j} - \left(h_N + V_N \frac{y_{N,j}}{x_{N,j}} \right) \bar{x}_{N,j} + h_{N+1} \bar{x}_{N+1,j} + \dots = 0$$

$$V_N \frac{y_{N,j}}{x_{N,j}} x_{N,j} + h_{j+1} \bar{x}_{f+1,j} + \dots = 0$$

Для решения системы (2) сначала вводятся исходные данные, характеризующие свойства компонентов разделяемой смеси и режим работы. Колонна, которая решена одним из методов решения систем линейных уравнений, например методом исключения Гаусса.

Системы уравнений вида (2) могут быть записаны для каждого компонента исходной смеси, и их решение дает распределение концентраций по высоте колонны для всех компонентов смеси. Для получения решения исходной нелинейной системы необходимо многократно повторять решение системы (2), каждый раз уточняя значение констант равновесия и проверяя выполнение условий сходимости, в качестве которых используется критерий

$$\left| \sum_{j=1}^N x_{ij} - 1 \right| < \varepsilon \quad (4)$$

Если условие (4) выполняется, то решение заканчивается и сумма концентраций на всех тарелках в пределах заданной точности равна единице.

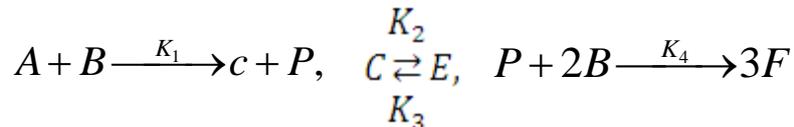
Математическое описание реактора представляется системой дифференциальных уравнений, определяющий изменение концентраций реагентов и температуры в зоне реакции во времени

$$\begin{cases} V_r \frac{dx_i}{dt} = v(x_i^0 - x_i) + V_r W_i \\ V_r C_p \frac{dT}{dt} = v C_p (T^{(0)} - T) + V_r Q_r + K_r Q_r + K_T F (T_x - T) \end{cases} \quad (5)$$

Совместное решение системы уравнений (5) с учетом допущений определяет поведение реактора идеального смешения в нестационарных режимах.

Составлена программа для решение системы уравнений (5) произвольной размерности для изотермического реактора идеального смешения при заданных значениях исходных концентраций

Для реакции



Результаты расчёта приведены в таблице 1.

Концентрации	Реагенты					
	A	B	C	P	E	F
На входе	05	0,5	0	0	0	0
На выходе	0.32521	0,32330	0,055805	0,017956	0,032973	0,002271
Скорость образования	-0,10514	-0,12015	0,092254	0,097636	0,012888	0,002252

Исходные данные: массив A; $V_r = 2$; $V = 1$; $K = 6$; $M = 4$;
 $K_r = (1,0; 2,0; 3,0; 4,0)$; $\varepsilon = 0, \delta = 0,001$.

Литературы

1. А.И.Бояринов, В.В.Кафаров. «Методы оптимизации в химической технологии». М., «Химия», 1969 г.
2. М.И.Исроилов. «Ҳисоблаш методлари». Тошкент «Иқтисод-молия», 2008 й.
3. А.В.Файсман «Программирование на языке турбо паскаль». М., «Наука», 1992 г.

Научный руководитель :

доц. С. Амридинов

Magistrantlarning XIV ilmiy konferensiyasi materiallari-2015