

А.А. Акулич, Н.Н. Дорогов

Могилёвский государственный университет продовольствия
г. Могилёв, Республика Беларусь

Рассматривается математическая модель реактора и алгоритм её расчета для экзотермической реакции в соответствии со стехиометрическим уравнением $A+B \rightarrow C$, протекающей в газовой фазе. Подобные процессы встречаются при крекинге бензиновых фракций в нефтехимических производствах.

Реактор представляет собой трубу длиной $L = 60$ метров с охлаждающей рубашкой. Скорость реакции пропорциональна парциальным давлениям газов A и B , а константа скорости подчиняется уравнению Аррениуса. Уравнения модели составлены для стационарного процесса при допущении неизменности теплоёмкости газа c_p . В качестве независимой переменной выступает текущая длина реактора.

I. Уравнение материального баланса:

а) Общее $\frac{dm}{dl} = -R$, где $R = k \cdot P \cdot Y_1 \cdot P \cdot Y_2$;

б) Покомпонентные $\frac{d}{dl}(m \cdot Y_i) = -\frac{R \cdot \pi \cdot D^2}{4}$ где $i = 1, 2, 3$;

II. Уравнение теплового баланса

$$\frac{d}{dl}(m \cdot c_p \cdot T_z) = \frac{R \cdot \pi \cdot D^2}{4} \cdot q_p - \pi \cdot D \cdot K \cdot (T_z - T_{руб});$$

III. Уравнение импульса

$$\frac{dP}{dl} = -\frac{k_{mp} \cdot M \cdot m^2 \cdot (T_z + 273)}{k \cdot P \cdot D^5},$$

где $M = M_1 \cdot Y_1 + M_2 \cdot Y_2 + M_3 \cdot Y_3$ – средняя молекулярная масса;

m – расход газа; Y_i – мольные доли компонентов A , B , C ; R – скорость реакции;

T – температура газовой смеси; q_p – тепловой эффект реакции; P – давление;

$T_{руб}$ – температура охлаждающей жидкости; k – константа скорости реакции;

k_{mp} – коэффициент трения; D – диаметр трубы.

Алгоритм решения:

- 1) для начальных значений Y_{i0} , T_o , P_o , m_o рассчитывается скорость реакции R ;
- 2) задаётся шаг Δl по независимой переменной и определяется $l = l_o + \Delta l$;
- 3) решается система из 6-ти дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутты 4-го порядка, результаты расчетов выводят на печать;
- 4) рассчитываются новые значения скорости реакции R ;
- 5) проверяется условие $l < L$ и производится переход к пункту 3 либо выход из цикла на конец алгоритма.

Для решения этой задачи разработана и отлаживается программа в системе Delphi. Рассмотренная задача является модельной для включения в курс лекций по дисциплине «Математическое моделирование в расчётах на ЭВМ и компьютеризация технологии».