

Praca dyplomowa inżynierska

Wykorzystanie programu MathCad w modelowaniu reaktorów rurowych z dyspersją osiową.



Autor: Justyna Wolanin

Nr albumu: 244585

Promotor: dr inż. Artur Poświata

Rok akademicki: 2014/2015

Wprowadzenie

W pracy stworzono matematyczny model dla izotermicznego reaktora rurowego z dyspersją osiową. Rozwiązano go dla różnych warunków procesowych przy pomocy odpowiednich narzędzi oferowanych przez program Mathcad. Dokonano porównania otrzymanych wyników za pomocą różnych narzędzi i parametrów obliczeń numerycznych. Wyniki symulacji numerycznych porównano z rozwiązaniami analitycznymi.

Cel i zakres pracy

Celem pracy było pokazanie możliwości oferowanych przez program Mathcad w modelowaniu reaktorów chemicznych. W pracy został przedstawiony model matematyczny, dla przypadku izotermicznego reaktora rurowego z dyspersją osiową. Obliczenia wykonano za pomocą metody numerycznej oraz analitycznej.

Zakres pracy obejmuję:

- przegląd literatury na temat reaktorów chemicznych ze szczególnym zwróceniem uwagi na reaktory rurowego oraz na temat wykorzystania narzędzi programu Mathcad do rozwiązań równań różniczkowych
- przedstawienie i porównanie wyników obliczeń wykonanych metodą numeryczną oraz analityczną

Model dla reakcji odwracalnej pierwszego rzędu

Rozwiązanie numeryczne Rungego - Kutty

Bilans masy:

$$\frac{d^2\alpha_A}{dt^2} - \kappa \frac{d\alpha_A}{dt} - \kappa[k_1(1 - \alpha_A) - k_2(\gamma_B + \alpha_A)] = 0$$

zastąpienie równania drugiego rzędu układem równań pierwszego rzędu.:

$$\frac{d\alpha_A(t)}{dt} = y(t)$$

$$\frac{dy(t)}{dt} = \kappa \left[y(t) + [-k_1(T)(1 - \alpha_A(t)) - k_2(T)\alpha_A(t)] \right]$$

Warunki początkowe zapisane w postaci macierzy:

$$Y := \begin{bmatrix} \alpha_A(0) \\ \kappa\alpha_A(0) \end{bmatrix}$$

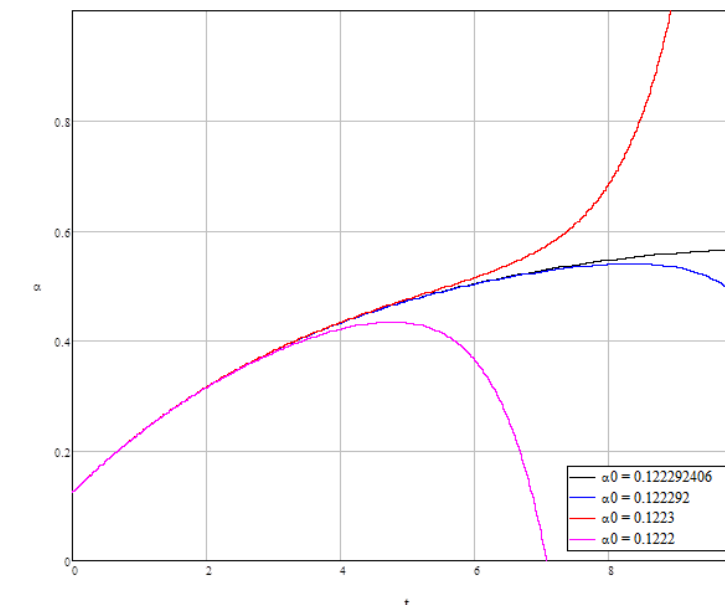
Zdefiniowanie pochodnej:

$$D(t, Y) := \begin{bmatrix} Y_1 \\ \kappa Y_1 + \kappa[-k_1(T)(1 - Y_0) - k_2(T)Y_0] \end{bmatrix}$$

Wywołanie integratora:

$$R := Rkadapt(Y, t_0, t_k, N, D)$$

Obliczenia wykonano dla kilku różnych wartości liczby $\alpha_A(0)$. Otrzymane wyniki przedstawiono na rysunku 1.



Rys.1. Wykres przedstawiający zależność $\alpha = f(t)$ dla kilku różnych wartości $\kappa = 1$. Reakcja prowadzona w $T=350$ K.

Wartości zaznaczone na rysunku 1 kolorem czarnym odpowiadają początkowej wartości stopnia przemiany wyznaczonej na podstawie metody analitycznej. Innymi kolorami (niebieskim, czerwonym i różowym) zaznaczono wyniki otrzymane przy wartościach $\alpha(0)$ o mniejszej dokładności. Zauważono, że metoda jest bardzo wrażliwa na punkt startowy. Nawet niewielka zmiana dokładności wartości tego punktu powoduje spore odchylenia od prawidłowego przebiegu linii co skutkuje błędnymi wynikami obliczeń.

Wnioski

W pracy zostały przedstawione możliwości jakie daje program Mathcad w modelowaniu reaktorów chemicznych, a konkretnie dla reaktora rurowego z dyspersją osiową.

Stwierdzono, że metoda Rungego – Kutty jest bardzo wrażliwa na początkową wartość punktu startowego nawet niewielka zmiana dokładności powoduje spore odchylenia od przebiegu linii odpowiadającej metodzie analitycznej.

Obliczenia można wykonywać zarówno za pomocą metody analitycznej jak i metod numerycznych. Zauważono, że metody numeryczne nie są metodami praktycznymi ze względu na trudność uzyskania odpowiedniej wartości punktu startowego $\alpha(0)$.