

Praca dyplomowa inżynierska

Biblioteka numeryczna do obliczeń w inżynierii reaktorów chemicznych



Autor: Zuzanna Brinkiewicz

Nr albumu: 283129

Promotor: dr inż. Jan Krzysztoforski

Rok akademicki: 2019/2020

Wprowadzenie

Inżynieria reaktorów chemicznych to dział inżynierii chemicznej, zajmujący się analizą procesów zachodzących w reaktorach chemicznych, które w dzisiejszych czasach są jednym z podstawowych aparatów przemysłu chemicznego i stanowią "serce" (najważniejszą część) instalacji przemysłowej. W celu opisu zachodzącego procesu pomocne jest zastosowanie biblioteki numerycznej stworzonej przy użyciu języka Python. Stosując odpowiednie modelowanie reaktorów uzyskuje się wyniki, które pozwalają przewidywać rzeczywisty przebieg procesu w aparatach i w szybki sposób odpowiedzieć jaki typ reaktora jest najbardziej odpowiedni dla danego procesu.

Cel i zakres pracy

Celem pracy jest stworzenie biblioteki numerycznej wykorzystywanej w obliczeniach inżynierii reaktorów chemicznych przy użyciu języka Python. W celu realizacji przeprowadzono symulacje pracy różnych typów reaktorów uwzględniając różne typy procesów. Zakres pracy obejmuje:

- przegląd literatury i zdefiniowanie podstawowych pojęć potrzebnych do opisu procesów zachodzących w reaktorach chemicznych,
- stworzenie biblioteki numerycznej,
- przeprowadzenie symulacji pracy różnych typów reaktorów,
- przedstawienie wyników oraz sformułowanie wniosków.

Pakiet obliczeniowy

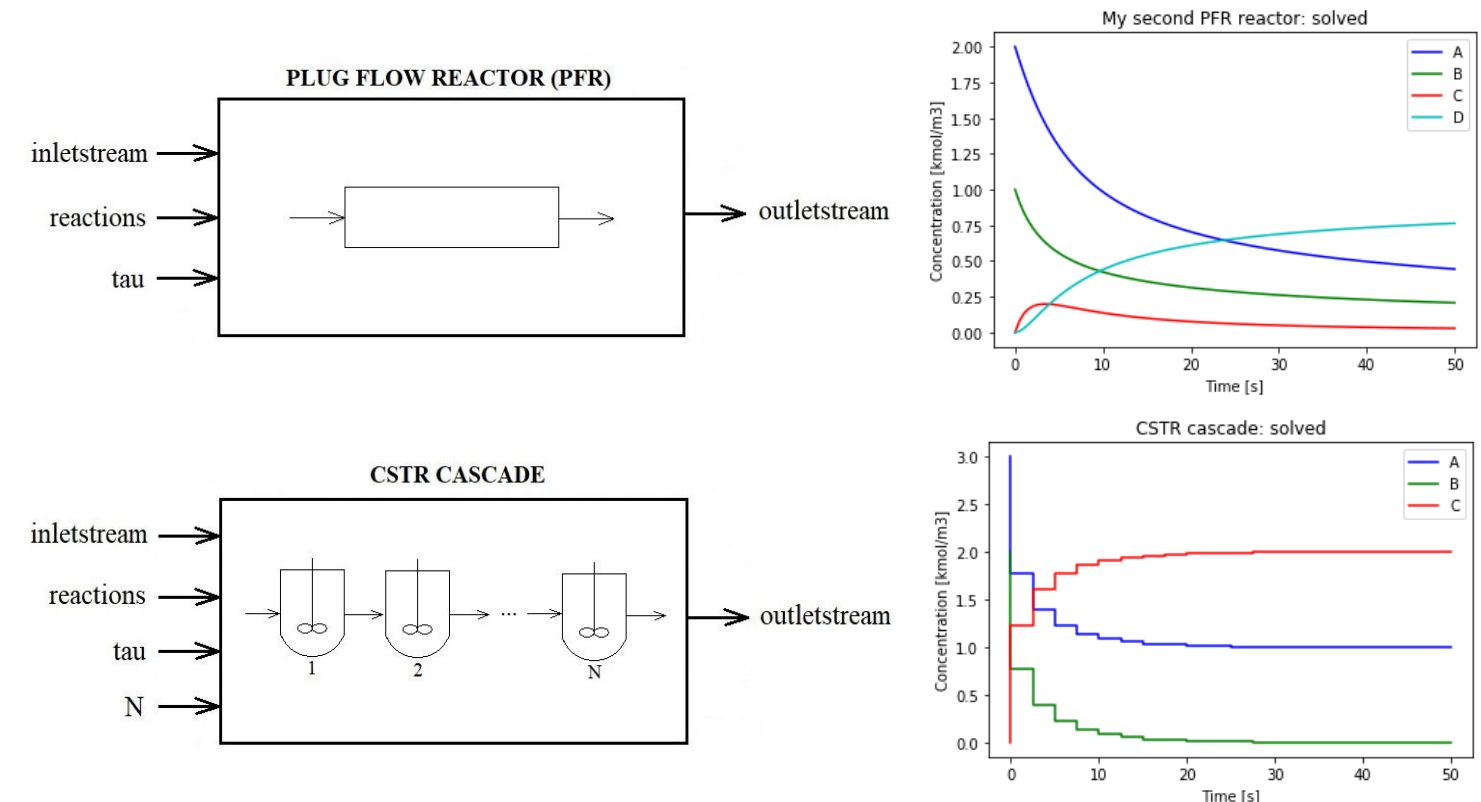
Sposób korzystania z biblioteki zaczyna się od zdefiniowania składników, które biorą udział w reakcji i strumieni będących daną wejściową. Następnie charakteryzujemy zachodzące reakcje, które zawierają informacje o rzędowości, współczynnikach i stałej szybkości oraz aparat (nazwa, reakcje, typ, czas przebywania). Po zdefiniowaniu potrzebnych danych uruchamia się symulację. Wynikiem otrzymywanym z każdej symulacji jest wykres prezentujący rozwiązanie (Rys.1). Najważniejszym elementem biblioteki jest komenda „*solve*”, która zawiera potrzebne równanie bilansowe, dzięki którym rozwiązywany jest dany problem. Moduł „*reactor*” pozwala na modelowanie pracy reaktorów: PFR (rurowy z przepływem tłokowym), CSTR (przepływowy z idealnym wymieszaniem), BATCH (okresowy) oraz CSTR_cascade (kaskada reaktorów CSTR) i układu PFR_recycle (reaktor PFR z recyrkulacją) (Rys.1).

Przeprowadzone testy

Wykonane symulacje przedstawiają pracę poszczególnych typów reaktorów, w zależności od zachodzącego procesu (reakcja pojedyncza lub złożona) (Tab.1).

Tab.1. Rozpatrywane reakcje chemiczne

Nr reakcji	Równanie stechiometryczne	Równanie kinetyczne	Stała szybkości reakcji
1	$2A + B \rightarrow C$	$2kC_A C_B$	$k = 0,2$
2	$A + 2B \rightarrow C$ $A + C \rightarrow D$	$2k_1 C_A C_B$ $k_2 C_A C_C$	$k_1 = 0,1$ $k_2 = 0,2$



Rys.1. Przykładowe schematy modelowanych układów i otrzymane wyniki

Wnioski

W ramach pracy opracowano moduł biblioteki numerycznej IchiPy pozwalający na modelowanie procesów podstawowych inżynierii reaktorów chemicznych. Biblioteka została stworzona na potrzeby reaktorów idealnych. Rozpatrywane i testowane zostały przypadki procesów izotermicznych, w których substancje występowały w postaci stężeń molowych. Wykazano użyteczność pakietu IchiPy z modułem „*reactor*” do obliczeń inżynierii reaktorów chemicznych (możliwe zastosowania to m.in. dydaktyka, nauka, inżynieria). Udowodniono, że stosując odpowiednie modelowanie można przewidzieć rzeczywisty przebieg procesu w reaktorze. Pozwala to na analizę procesu pod względem sprawności i wydajności. Napisany kod nie jest zamknięty. W praktyce oznacza to dalszą możliwość rozwijania na przyszłość. Kontynuowanie pracy nad pakietem obliczeniowym IchiPy pozwoli modelować pracę reaktorów nieidealnych bądź pracujących w warunkach nieizotermicznych.