

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

Кафедра систем автоматизированного проектирования и управления

Л.В. Гольцева, А.В. Козлов



КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Методические указания к выполнению контрольных работ
для студентов заочной формы обучения
направления подготовки «Информатика и вычислительная техника»

Санкт-Петербург
2018

УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

- C_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении, кДж/(кг·К);
 $C_j^{(0)}$, C_j – входная и текущая концентрации компонентов, (состав потока), кг/м³;
 D_L – коэффициент продольного перемешивания;
 G – объёмный расход потока, м³/с;
 G^Σ – суммарные интенсивности источников компонентов в смеси;
 g – локальные источники компонентов смеси в потоке;
 ΔH – тепловой эффект элементарного процесса, Вт;
 K – коэффициент теплопередачи, характеризующий интенсивность источников тепла в потоке, Вт/(м²·К);
 L – длина рассматриваемой зоны, м;
 ℓ – координата пространства, м;
 r – число элементарных стадий сложной химической реакции;
 n – число компонентов в многокомпонентной смеси;
 V – объем реактора, м³;
 v – массовый расход потока, кг/с;
 T – температура потока, °С;
 Q^Σ – суммарная интенсивность источников тепла в потоке, Вт;
 Δq – локальная интенсивность источника тепла в потоке, Вт;
 t – координата времени, с;
 α_{ij} – стехиометрический коэффициент j го компонента в i -ой реакции;
 α – коэффициент теплоотдачи, Вт/(м²·К);
 β – коэффициент объемного расширения, К⁻¹;
 λ – коэффициент теплопроводности, Вт/(м·К);
 μ – динамический коэффициент вязкости, Па·с;
 ρ – плотность, кг/м³;
 Δt – разность температур стенки и жидкости (или наоборот), К;
 ω – скорость потока, м/с.
- ИС**- модель идеального смешения;
ИСП- модель идеального смешения с проскоком;
ИСЗ- модель идеального смешения с застойной зоной;
ЯМ- ячеечная модель;
ОДМ- однопараметрическая диффузионная модель.
- Индексы верхние**
(0) – признак поступающего в зону потока;
 R – химическая реакция;
 M – массопередача;
 A – изменение агрегатного состояния;
 P – подпитка от внешнего потока;
 T – теплопередача;
 I – теплоизлучение;
(*) – термодинамическое равновесие;
(~) – зона потока, контактирующая с рассматриваемой.
- Индексы нижние**
 i – стадия химической реакции;
 j – компонент;
(l) – распределенность параметра по длине;
 p – образующийся компонент на элементарной стадии химической реакции.

ВВЕДЕНИЕ

В методических указаниях приведены 2 контрольные работы. Студенту необходимо представить отчёт с контрольными работами, выполненными в соответствии с данными методическими указаниями. Номер варианта формируется согласно вычету по модулю 25. Это означает, что номер варианта равен остатку от деления на 25 того числа, которое образуется из двух последних цифр номера зачётной книжки. Если же это число меньше 25, то номер варианта равен этому числу. В таблице 1 приведены номера вариантов, составленные по этому принципу.

Таблица 1.1 – Номера вариантов для выполнения контрольных работ

Две последние цифры зачётной книжки	Номер варианта	Две последние цифры зачётной книжки	Номер варианта
01, 26, 51, 76	1	13, 38, 63, 88	13
02, 27, 52, 77	2	14, 39, 64, 89	14
03, 28, 53, 78	3	15, 40, 65, 90	15
04, 29, 54, 79	4	16, 41, 66, 91	16
05, 30, 55, 80	5	17, 42, 67, 92	17
06, 31, 56, 81	6	18, 43, 68, 93	18
07, 32, 57, 82	7	19, 44, 69, 94	19
08, 33, 58, 83	8	20, 45, 70, 95	20
09, 34, 59, 84	9	21, 46, 71, 96	21
10, 35, 60, 85	10	22, 47, 72, 97	22
11, 36, 61, 86	11	23, 48, 73, 98	23
12, 37, 62, 87	12	24, 49, 74, 99	24

Если две последние цифры зачётной книжки 00, 25, 50 или 75, то номер варианта – 25.

Отчёт о выполненных контрольных работах должен включать: титульный лист, условие задачи и подробную процедуру решения, аналогично тому, как это представлено в примерах выполнения работ. Во время защиты отчёта студент должен уметь обосновать представленное в отчёте решение. На титульном листе отчёта о выполнении контрольных работ необходимо указать фамилию, имя и отчество студента, номер учебной группы, номер варианта.

1 КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА № 1

ТЕМА: Разработка математических моделей гидродинамики потоков и кинетики химических реакций

Контрольная работа включает два задания:

- разработка модели гидродинамики потоков как основы математической модели химико-технологических процессов;
- разработка математической модели кинетики химических реакций.

Задание 1.1 - Разработка математических моделей гидродинамики

Исследование двух типовых моделей гидродинамики в соответствии с заданным вариантом задания. Приведите уравнения материального баланса и уравнения реакции объекта на типовые возмущения. Проведите вычислительный эксперимент. В среде MathCad получить таблицы и графики характеристик. Для заданной производительности определите рабочий объем аппарата. Исследование модели заключается в получении реакций модели на типовые возмущения (ступенчатое и импульсное) при варьировании параметров модели.

На основании полученных результатов сделайте вывод о влиянии варьируемых параметров на выходные характеристики.

Задания к контрольной работе 1.1 приведены в таблице 1.2, где используются следующие обозначения:

ИС- модель идеального смешения;

ИСП- модель идеального смешения с проскоком;

ИСЗ- модель идеального смешения с застойной зоной;

ИСПЗ- модель идеального смешения с проскоком и с застойной зоной;

ЯМ- ячеечная модель;

ОДМ- однопараметрическая диффузионная модель.

Таблица 1.2- Варианты заданий для исследования ММ гидродинамики

№ варианта	Тип модели	Время исследования, t, мин	Начальная конц-я индикатора С, моль/л	Варьируемый параметр	Диапазон, шаг	Производительность, G л/мин
1	ЯМ Время пребывания: $\tau=50$ мин.	100	40	количество ячеек, n	n=2-11 с шагом dn=3	200
	ИСП Время пребывания: $\tau=45$ мин.	100	20	Доля проскока, dm	m=0-0.3 dm=0.1	200
2	ОДМ Время пребывания: 40 мин.	60	40	критерий Пекле, Pe	Pe от 200 до 600 С шагом 100	250
	ИСП Время пребывания: $\tau=50$ мин.	100	15	Доля проскока, dm	m=0-0.3 dm=0.1	200
3	ИСП Время пребывания: $\tau=40$ мин.	100	20	Доля проскока, dm	m=0-0.3 dm=0.1	180
	ЯМ Время пребывания: $\tau=30$ мин.	120	40	количество ячеек, n	n=2-11 с шагом dn=3	200
4	ИСЗ Время пребывания: $\tau=20$ мин.	80	30	Доля застойной зоны, dz	z=0-0.2 dz=0.1	300
5	ИСЗ Время пребывания: $\tau=45$ мин.	100	20	Доля застойной зоны, dz	z=0-0.4 dz=0.1	300
	ЯМ Время пребывания: $\tau=20$ мин.	80	20	количество ячеек, n	n=2-11 с шагом dn=3	
6	ИСЗ Время пребывания: $\tau=30$ мин.	80	30	Доля застойной зоны, dz	z=0-0.3 dz=0.1	300
		60	40	критерий Пекле, Pe	Pe от 200 до 600 С шагом 100	250

Продолжение таблицы 1.2

№ варианта	Тип модели	Время исследования, t, мин	Начальная конц-я индикатора С, моль/л	Варьиру-емый параметр	Диапазон, шаг	Производительность, G л/мин
7	ИС	100	20	Время пребывания, τ	$\tau=10;30;50$	200
	ЯМ Время пребывания: $\tau=45$ мин.	80	30	количество ячеек, n	n=2-10 с шагом dn=2	
8	ИС	100	20	Время пребывания, τ	$\tau=20;40;70$	250
	ЯМ Время пребывания: $\tau=20$ мин.	80	20	количество ячеек, n	n=2-11 с шагом dn=3	200
9	ИСПЗ Время пребывания: $\tau=30$ мин.	100	30	Доля застойной зоны, z Доля проскока, m	$z=0-0.025$ $dz=0.05$ $m=0-0.3$ $dm=0.1$	300
	ЯМ Время пребывания: $\tau=30$ мин.	120	40	количество ячеек, n	n=2-11 с шагом dn=3	200
10	ИСПЗ Время пребывания: $\tau=30$ мин.	100	30	Доля застойной зоны, z Доля проскока, m	$z=0-0.025$ $dz=0.05$ $m=0-0.3$ $dm=0.1$	300
	ОДМ Время пребывания: 40 мин.	60	40	критерий Пекле, Pe	Pe от 200 до 600 С шагом 100	250

Продолжение таблицы 1.2

№ варианта	Тип модели	Время исследования, t, мин	Начальная конц-я индикатора С, моль/л	Варьиру-емый параметр	Диапазон, шаг	Производительность, G л/мин
11	ИСПЗ Время пребывания: $\tau=30$ мин	100	30	Доля застойной зоны, z Доля проскока, m	$z=0-0.3$ $dz=0.1$ $m=0-0.3$ $dm=0.1$	300
	ОДМ Время пребывания: 40 мин.	60	40	критерий Пекле, Pe	Pe от 200 до 600 С шагом 100	250
12	ИСПЗ Время пребывания: $\tau=30$ мин.	100	30	Доля застойной зоны, z Доля проскока, m	$z=0-0.025$ $dz=0.05$ $m=0-0.3$ $dm=0.1$	300
	ЯМ Время пребывания: $\tau=20$ мин.	80	20	количество ячеек, n	$n=2-11$ с шагом $dn=3$	200
13	ЯМ Время пребывания: $\tau=30$ мин.	120	40	количество ячеек, n	$n=2-11$ с шагом $dn=3$	200
	ИС	100	20	Время пребывания, τ	$\tau=10;30;50$	200
14	ЯМ Время пребывания: $\tau=40$ мин.	120	40	количество ячеек, n	$n=2-11$ с шагом $dn=3$	200
	ИСЗ Время пребывания: $\tau=40$ мин.	90	30	Доля застойной зоны, dz	$z=0-0.2$ $dz=0.1$	300
15	ЯМ Время пребывания: $\tau=50$ мин.	100	40	количество ячеек, n	$n=2-11$ с шагом $dn=3$	200
	ИС	100	40	Время пребывания, τ	$\tau=10;20;60$	350
16	ЯМ Время пребывания: $\tau=45$ мин.	80	30	количество ячеек, n	$n=2-10$ с шагом $dn=2$	300
	ИСП Время пребывания: $\tau=50$ мин.	100	15	Доля проскока, dz	$m=0-0.3$ $dm=0.1$	200

Продолжение таблицы 1.2

№ варианта	Тип модели	Время исследования, t, мин	Начальная конц-я индикатораС, моль/л	Варьиру-емый параметр	Диапазон, шаг	Производительность, G л/мин
17	ИС	100	40	Время пребывания, τ	$\tau=10;20;60$	350
	ОДМ Время пребывания: 40 мин.	60	40	критерий Пекле, Re	Re от 200 до 600 С шагом 100	250
18	ОДМ Время пребывания: 50 мин.	100	20	критерий Пекле, Re	Re от 100 до 500 С шагом 100	150
	ИС	100	20	Время пребывания, τ	$\tau=10;30;50$	200
19	ИСЗ Время пребывания: $\tau=40$ мин.	90	30	Доля застойной зоны, dz	$z=0-0.2$ $dz=0.1$	300
	ОДМ Время пребывания: 40 мин.	60	40	критерий Пекле, Re	Re от 200 до 600 С шагом 100	250
20	ИС	100	20	Время пребывания, τ	$\tau=10;30;50$	200
	ЯМ Время пребывания: $\tau=50$ мин.	120	40	количество ячеек, n	$n=2-11$ с шагом $dn=3$	200
21	ИС	100	40	Время пребывания, τ	$\tau=10;20;60$	350
	ОДМ Время пребывания: 60 мин.	60	40	критерий Пекле, Re	Re от 200 до 600 С шагом 100	250
22	ИСЗ Время пребывания: $\tau=35$ мин.	90	20	Доля застойной зоны, dz	$z=0-0.4$ $dz=0.1$	300
	ЯМ Время пребывания: $\tau=50$ мин.	120	40	количество ячеек, n	$n=2-11$ с шагом $dn=3$	200

Продолжение таблицы 1. 2

№ варианта	Тип модели	Время исследования, t, мин	Начальная конц-я индикатора С, моль/л	Варьиру-емый параметр	Диапазон, шаг	Производительность, G л/мин
23	ИСП Время пребывания: $\tau=50$ мин.	100	15	Доля проскока, dz	$m=0-0.3$ $dm=0.1$	200
	ОДМ Время пребывания: 40 мин.	140	40	критерий Пекле, Pe	Pe от 100 до 500 С шагом 100	250
24	ЯМ Время пребывания: $\tau=50$ мин.	120	60	количество ячеек, n	$n=2-11$ с шагом $dn=3$	250
	ИС	100	40	Время пребывания, τ	$\tau=10;20;60$	350
25	ЯМ Время пребывания: $\tau=30$ мин.	100	40	количество ячеек, n	$n=2-11$ с шагом $dn=3$	300
	ИСПЗ Время пребывания: $\tau=30$ мин.	100	30	Доля застойной зоны, z Доля проскока, m	$z=0-0.025$ $dz=0.05$ $m=0-0.3$ $dm=0.1$	

Пример решения задачи 1.1

Получить с помощью пакета символьной математики MathCad кривые разгона (F-кривые) модели идеального смешения с застойной зоной при времени пребывания 30 мин, изменяя величину застойной зоны от 0 до 0,3 от объема реактора с шагом 0,1.

Для расчета характеристик задать следующие входные данные: начальная концентрация индикатора равна 20 моль/л, время исследования 80 мин.

Получить таблицы и графики характеристик. Для заданной производительности 200 л/мин определить рабочий объем аппарата.

Сделать вы

Решение задачи с помощью MathCad показано на рисунках 1 и 2. Исходными данными являются: время пребывания ($\tau = 20$ мин), доля проскока (значения заданы в соответствии с условием задачи: $z_{\min} = 0$; $z_{\max}=0.3$; $dz = 0,1$), доля застойной зоны ($z = 0$), начальная концентрация индикатора ($c_0 = 30$ моль/л), время исследования меняется от 0 до 80 мин с шагом 1 мин (при необходимости величину шага можно изменить).

На рисунке 1.1 приведена схема модели аппарата ИС с застойной зоной. Застойная зона — это часть реактора с перемешивающим устройством, который может возникнуть при работе реальных аппаратов больших размеров, где наблюдается отсутствие обмена (или слабый обмен) вещества между основным объемом и объемом застойной зоны.

Здесь приняты обозначения:

V_0 - рабочий объем аппарата, м³;

V_z - объем застойной зоны, м³;

G - объемный расход через аппарат, м³/ч.

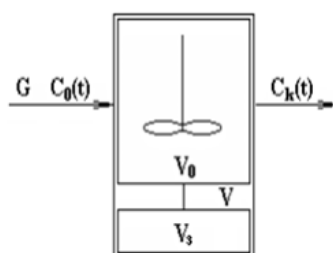


Рисунок 1.1 - Схема аппарата ИС с застойной зоной

1. Уравнение материального баланса для модели ИСЗ.

$$V_0 \frac{dC_k(t)}{dt} = GC_0(t) - GC_k(t)$$

или, с учетом времени пребывания $\bar{\tau}_0 = \frac{V_0}{G}$

$$\bar{\tau}_0 \frac{dC(t)}{dt} = C_0(t) - C(t)$$

$$\frac{dC(t)}{dt} = \frac{1}{\bar{\tau}_0} (C_0(t) - C(t)).$$

Начальные условия:

$$t = 0; C(t) = C_0(t).$$

Модель ИСЗ отличается от ИС значением параметра-времени пребывания.

2. Кривая разгона (F-кривая) модели ИСЗ.

Решение модели ИСЗ при нанесении на вход ступенчатого возмущения имеет вид:

$$F(t) = C(t) = C_0(t) \left(1 - \exp \left(- \frac{t}{\bar{\tau}_0} \right) \right);$$

$$F_H(t) = \frac{C(t)}{C_0(t)} = 1 - \exp \left(- \frac{V}{V_0} \theta \right).$$

Обозначим через z — долю застойной зоны. Выразим параметры модели через z :

$$z = \frac{V_3}{V_A}; V = V_3 + V_0; V_0 = (1-z)V;$$

$$V_3 = zV;$$

$$\bar{\tau}_0 = \frac{V_0}{G} = \frac{(1-z)V}{G} = (1-z)\bar{\tau}.$$

С учетом полученных параметров, кривые разгона ИСЗ имеют вид:

$$F(t) = C_0(t) \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{(1-z)\bar{\tau}}\right) \right)$$

3. Импульсные характеристики (С-кривые) модели ИСЗ:

Решение модели ИСЗ при нанесении на вход импульсного возмущения имеют вид:

$$C(t) = C_k(t) = \frac{C_0(t)}{\bar{\tau}_0} \exp\left(-\frac{t}{\bar{\tau}_0}\right);$$

$$C(t) = C_k(t) = \frac{C_0(t)}{(1-z)\bar{\tau}_{ис}} \exp\left(-\frac{t}{(1-z)\bar{\tau}}\right)$$

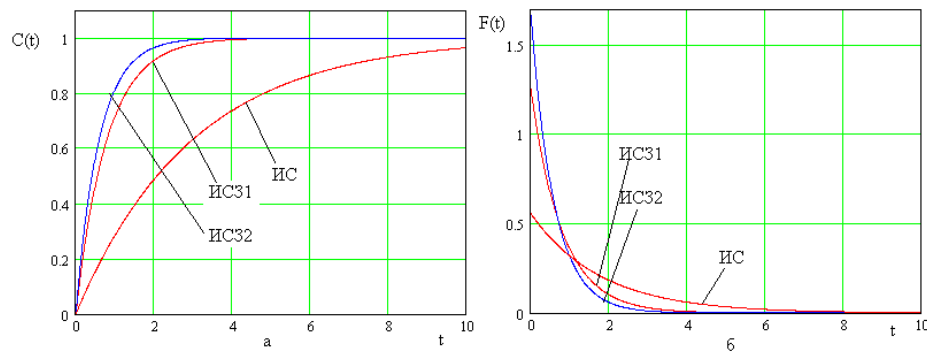


Рисунок 1.2- Характеристики модели ИС с застойной:
а - F-кривые; б - С-кривые;

4. Передаточная функция модели ИСЗ.

$$W_{исз}(p) = \frac{1}{\bar{\tau}_0 p + 1}.$$

С точки зрения динамических характеристик ИСЗ представляет собой инерционное звено первого порядка с меньшей, чем у ИС постоянной времени.

Объем аппарата $V = G * \tau$.

MM ИСЗ

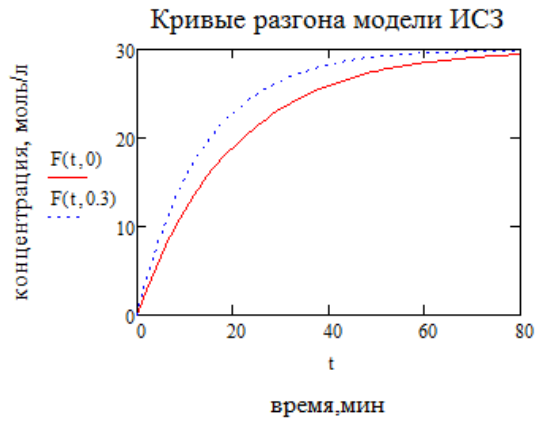
$\tau := 20$ $C_0 := 30$ $t := 0..80$

$z_{\min} := 0$ $z_{\max} := 0.3$ $dz := 0.1$

$z := z_{\min}, z_{\min} + dz..z_{\max}$

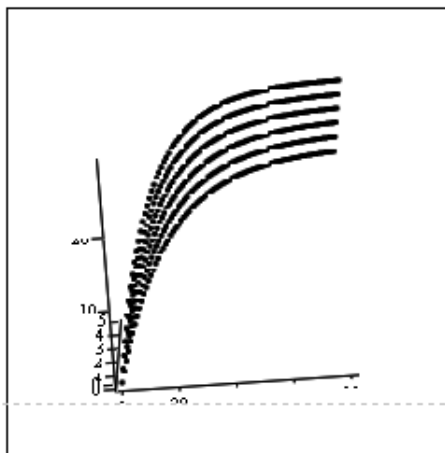
$$F(t, z) := C_0 \left[1 - \exp\left[\frac{-t}{(1-z)\tau}\right] \right]$$

F(t,0) =	F(t,0.3) =
0	0
1.463	2.068
2.855	3.994
4.179	5.786
5.438	7.456
6.636	9.01
7.775	10.457
8.859	11.804
9.89	13.058
10.871	14.226
11.804	15.314
12.692	16.326
13.536	17.269
14.339	18.146
15.102	18.964
...	...



$i := 0..80$ $j := 0..5$
 $t_i := 1 \cdot i$ $z_j := 0.05 \cdot j$

$M_{i,j} := F(t_i, z_j)$ Трехмерный график
 F-кривая в зависимости от
 времени и доли застойной зоны



M

$M_{i,j} =$

0
1.463
2.855
4.179
5.438
6.636
7.775
8.859
9.89
10.871
11.804
12.692
13.536
14.339
15.102
...

Рисунок 1.3 – Пример решения задания 1.1

1.2 Задание– Разработка математической модели кинетики

Описание химических реакций – один из основных модулей при моделировании ХТП, включает в себя:

- описание стехиометрии;
- описание кинетики, то есть скорости образования и расходования компонентов реакционной системы в различных условиях проведения процесса
- описание порядка и молекулярности реакций.

В работе осуществляется синтез модели по заданному механизму реакций и решение прямой кинетической задачи для динамического и статического режимов. На основании модели проводится исследование влияния различных параметров на выход целевых и побочных продуктов.

Порядок выполнения работы

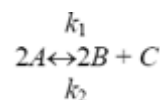
1. В соответствии с заданной схемой реакций разработать динамическую кинетическую модель процесса, проводимую **в закрытом** реакторе. Составить матрицу стехиометрических коэффициентов, уравнения скоростей реакций, уравнения изменения концентраций каждого из компонентов.
2. Разработать алгоритм и программу расчёта сформированной кинетической модели с использованием численного метода Рунге-Кутты в среде MathCad.
3. Получить таблицы и графики изменения концентраций компонентов при изменении температуры, $T=500^{\circ}\text{K}$; $T=600^{\circ}\text{K}$; Изменить входную концентрацию исходного компонента на 25%.
4. На основании полученных результатов сделать вывод о влиянии варьируемых параметров на выходные характеристики.
5. Определить время пребывания $\tau_{\text{опт}}$, обеспечивающее максимально возможный выход целевого продукта для всех вариантов исследования процесса. Рассчитать рабочий объем реактора V для производительности аппарата $G = 200$ л/мин.

$$V = \tau_{\text{опт}} \cdot G$$

6. Сделать выводы по работе.
7. Составить отчет.

Примечание.

Если механизм реакций представлен следующей схемой,



, это значит,

что процесс представлен двумя обратимыми реакциями:

$2A \rightarrow 2B + C$ с константой скорости k_1 и

$2B + C \rightarrow 2A$ с константой скорости k_2 .

Предварительно по уравнению Аррениуса нужно определить предэкспоненциальный множитель каждой из реакций.

Таблица 1. 3- Варианты заданий для разработки ММ кинетики

№ задания	Уравнение химической реакции	Начальные концентрации, моль/л	Значение констант скоростей при $T = 580 \text{ K}$			Значения энергии активации E , Дж/моль		
			k_1	k_2	k_3	E_1	E_2	E_3
1	$2A \xleftrightarrow[k_2]{k_1} 2B + C$	$CA_0 = 0,5$	0,2	0,15	–	$9,305 \cdot 10^4$	$10,1 \cdot 10^4$	–
2	$2A \xrightarrow[k_3]{k_1} B + C$ $D + E \xrightarrow{k_2} B$	$CA_0=0,3;$ $CE_0=0,2;$ $CD_0=0,2$	0,4	0,2	0,3	$11,514 \cdot 10^4$	$9,524 \cdot 10^4$	$7,254 \cdot 10^4$
3	$A \xleftrightarrow[k_3]{k_1} 2B + C$ $B + D \xrightarrow{k_2} C$	$CA_0=0,3;$ $CD_0=0,4$	0,2	0,2	0,1	$12,444 \cdot 10^4$	$14,897 \cdot 10^4$	$14,1 \cdot 10^4$
4	$A + B \xleftrightarrow[k_3]{k_1} 2C$ $C + D \xrightarrow{k_2} E$	$CA_0=0,2;$ $CB_0=0,3;$ $CD_0=0,1$	0,4	0,2	0,15	$14,305 \cdot 10^4$	$12,594 \cdot 10^4$	$13,511 \cdot 10^4$
5	$2A + B \xleftrightarrow[k_2]{k_1} C$	$CA_0=0,2$ $CB_0=0,1$	0,4	0,2	–	$11,514 \cdot 10^4$	$10,386 \cdot 10^4$	–
6	$A + 2C \xleftrightarrow[k_3]{k_1} B$ $B \xrightarrow{k_2} 2D$	$CA_0=0,6;$ $CC_0=0,8$	0,42	0,2	0,25	$11,354 \cdot 10^4$	$9,592 \cdot 10^4$	$9,431 \cdot 10^4$
7	$A \xrightarrow[k_3]{k_1} E + C$ $2C \xleftrightarrow{k_2} D$	$CA_0=0,3$	0,3	0,25	0,18	$14,18 \cdot 10^4$	$13,344 \cdot 10^4$	$13,762 \cdot 10^4$

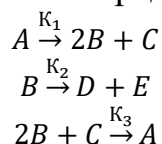
Продолжение таблицы 1. 3

8	$\begin{matrix} k_1 \\ A \leftrightarrow B + C \\ k_2 \\ k_3 \\ 2A \rightarrow D \end{matrix}$	$CA_0=0,4$	0,5	0,2	0,1	$15,852 \cdot 10^4$	$15,016 \cdot 10^4$	$14,389 \cdot 10^4$
9	$\begin{matrix} k_1 \\ A \leftrightarrow B \\ k_2 \end{matrix}$	$CA_0=0,2;$ $CB_0=0,05$	0,37	0,16	–	$12,717 \cdot 10^4$	$13,727 \cdot 10^4$	–
10	$\begin{matrix} k_1 \rightarrow B \\ A \rightarrow C \\ k_2 \end{matrix}$	$CA_0=0,7;$ $CB_0=CC_0=0$	0,4	0,2	–	$10,351 \cdot 10^4$	$9,180 \cdot 10^4$	–
11	$\begin{matrix} k_1 \rightarrow B \\ A \rightarrow C \\ k_2 \\ k_3 \end{matrix}$	$CA_0=0,6;$ $CB_0=CC_0=0$	0,19	0,2	0,12	$11,183 \cdot 10^4$	$12,103 \cdot 10^4$	$10,264 \cdot 10^4$
12	$\begin{matrix} k_1 \quad k_2 \\ A \rightarrow B \leftrightarrow C \\ k_3 \end{matrix}$	$CA_0=0,2;$ $CB_0=0,1;$ $CC_0=0$	0,5	0,2	0,1	$10,0 \cdot 10^4$	$9,8 \cdot 10^4$	$9,5 \cdot 10^4$
13	$\begin{matrix} A \xrightarrow{k_1} 2B \\ B \xrightarrow{k_2} C + D \end{matrix}$	$CA_0=0,2$ $CB_0=0,15$	0,4	0,14	0,21	$9,8 \cdot 10^4$	$9,5 \cdot 10^4$	$8,6 \cdot 10^4$
14	$A \xrightarrow{k_1} 2B \xrightleftharpoons[k_3]{k_2} C$	$CA_0=0,46$	0,38	0,24	0,11	$12,4 \cdot 10^4$	$11 \cdot 10^4$	$9,6 \cdot 10^4$
15	$\begin{matrix} A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} B + C \\ A \xrightarrow{k_3} 2D \end{matrix}$	$CA_0=0,5$	0,5	0,2	0,1	$12,0 \cdot 10^4$	$11 \cdot 10^4$	$9,5 \cdot 10^4$
16	$A + B \xrightleftharpoons[k_3]{k_1} C \xrightleftharpoons[k_2]{k_4} D$	$CA_0=0,44;$ $CB_0=0,22$	0,52	0,34	0,15	$8,5 \cdot 10^4$	$9,6 \cdot 10^4$	$10,5 \cdot 10^4$
17	$A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} 2B \xrightarrow{k_3} C$	$CA_0=0,25$	0,2	0,08	0,28	$9,2 \cdot 10^4$	$9,8 \cdot 10^4$	$11,5 \cdot 10^4$
18	$2A \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} B \xrightarrow{k_3} C$	$CA_0=0,62$	0,44	0,11	0,17	$10,2 \cdot 10^4$	$10,2 \cdot 10^4$	$11,5 \cdot 10^4$
19	$\begin{matrix} k_1 \\ 2A \rightarrow B + C \\ k_2 \\ k_3 \\ D + E \rightarrow B \end{matrix}$	$CA_0=0,3;$ $CE_0=0,2;$ $CD_0=0,2$	0,4	0,2	0,3	$11,514 \cdot 10^4$	$9,524 \cdot 10^4$	$7,254 \cdot 10^4$
20	$\begin{matrix} k_1 \\ A + 2C \leftrightarrow B \\ k_2 \\ k_3 \\ B \rightarrow 2D \end{matrix}$	$CA_0=0,6;$ $CC_0=0,8$	0,42	0,2	0,25	$11,354 \cdot 10^4$	$9,592 \cdot 10^4$	$9,431 \cdot 10^4$
21	$\begin{matrix} k_1 \\ A \rightarrow E + C \\ k_2 \\ 2C \leftrightarrow D \\ k_3 \end{matrix}$	$CA_0=0,5$	0,3	0,25	0,18	$14,18 \cdot 10^4$	$13,3 \cdot 10^4$	$13,762 \cdot 10^4$

№ задания	Уравнение химической реакции	Начальные концентрации, моль/л	Значение констант скоростей при $T = 580 \text{ K}$			Значения энергии активации E , Дж/моль		
			k_1	k_2	k_3	E_1	E_2	E_3
22	k_1 $A \leftrightarrow B + C$ k_2 k_3 $2A \rightarrow D$	$CA_0 = 0.5$	0.5	0.2	0.2	$15,852 \cdot 10^4$	$16 \cdot 10^4$	$14,389 \cdot 10^4$
23	k_1 k_2 $A \rightarrow B \leftrightarrow C$ k_3	$CA_0 = 0,2;$ $CB_0 = 0,1;$ $CC_0 = 0$	0.6	0.2	0.1	$10,0 \cdot 10^4$	$9,3 \cdot 10^4$	$9,5 \cdot 10^4$
24	k_1 $A \leftrightarrow B$ k_2	$CA_0 = 0,2;$ $CB_0 = 0,05$	0.4	0,16	-	$12,8 \cdot 10^4$	$13,2 \cdot 10^4$	-
25	k_1 $A \rightarrow E + C$ k_2 $2C \leftrightarrow D$ k_3	$CA_0 = 0.45$	0.3	0.25	0.2	$14,18 \cdot 10^4$	$13,3 \cdot 10^4$	$14 \cdot 10^4$

1.3 Пример выполнения контрольной работы №1. 2

В реакторе периодического действия протекает процесс получения продукта «В», для которого предложен определенный механизм реакции.



Разработать математическую модель кинетики процесса и получить решение при следующих условиях:

- интервал времени $\tau = 60$ мин; шаг по времени $\Delta t = 1$ мин;
- начальные концентрации $C_{OA} = 0,800$ моль/л;
- предэкспоненциальные множители:
 $K_{0i} = \{0,2 \cdot 10^{14} \text{ 1/мин}; 9 \cdot 10^{15} \text{ 1/мин}; 0,5 \cdot 10^{14} \text{ л/(моль} \cdot \text{мин)}\}$;
- энергия активации $E_1 = 74$, $E_2 = 89$, $E_3 = 85$ кДж/моль;
- температура $T = -5^\circ\text{C}$.

Оценить влияние на выход целевого компонента:

а) Начальных концентраций компонентов

$$C_{OA} = 0,400 \text{ моль/л};$$

б) Температуры реакции $T = 5^\circ\text{C}$; $T = 10^\circ\text{C}$.

Определить время пребывания $\tau_{\text{опт}}$, обеспечивающее максимально возможный выход целевого продукта для всех вариантов исследования процесса при условии, что на выходные параметры установлено следующее ограничение:

Степень превращения исходного компонента А должна быть более 80% от начальной.

Рассчитать рабочие объемы реактора V для производительности аппарата $G = 200$ л/мин:

$$V = \tau_{\text{опт}} \cdot G$$

Выбрать оптимальное значение рабочего объема V .

Для рассматриваемого примера матрицы стехиометрических коэффициентов и частных порядков будут иметь следующий вид:

$$\alpha = \begin{pmatrix} A & B & C & D & E \\ -1 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad P = \begin{pmatrix} A & B & C & D & E \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Уравнения для скоростей реакций:

$$w_1 = k_1 \cdot C_A;$$

$$w_2 = k_2 \cdot C_B;$$

$$w_3 = k_3 \cdot C_B^2 \cdot C_C.$$

Уравнения для скоростей изменения концентраций компонентов выглядят следующим образом:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -w_1 + w_3 \\ \frac{dC_B}{dt} = 2w_1 - w_2 - 2w_3 \\ \frac{dC_C}{dt} = w_1 - w_3 \\ \frac{dC_D}{dt} = w_2 \end{cases}$$

При записи уравнений в MathCad (рисунок 4) начальные концентрации компонентов А, В, С, D, Е обозначаются вектором-столбцом s_0 , предэкспоненциальные множители – вектор-столбцом k_0 , энергии активации – вектор-столбцом E , R – универсальная газовая постоянная, рассчитанные константы скорости обозначаются вектор-столбцом k . Для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений используется встроенная функция *Rkadapt* (метод Рунге-Кутты с переменным шагом). Аргументами являются вектор-столбец начальных концентраций s_0 , начальное и конечное значение диапазона времени исследования τ (в данном случае от 0 до 50 минут), количество шагов по времени (в данном случае $n = 100$ шагов) и название решаемой системы (в данном случае она называется D).

Результаты расчета представлены на рисунках 1.4 и 1.5. В нулевом столбце таблицы находятся значения текущего времени, $U^{<0>}$; в остальных столбцах выводятся расчетные концентрации компонентов реакционной системы.

Решение задачи в среде MathCad

$$\begin{aligned}
 E1 &:= 74000 & E2 &:= 89000 & E3 &:= 80000 \\
 R_u &:= 8.31 & T_u &:= -3 + 273.15 & n_u &:= 100 \\
 c0 &:= \begin{pmatrix} 0.8 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & k1_u &:= k01 \cdot e^{\frac{-E1}{R \cdot T}} & k2_u &:= k02 \cdot e^{\frac{-E2}{R \cdot T}} & k3_u &:= k03 \cdot e^{\frac{-E3}{R \cdot T}} \\
 k1 &= 0.097 & k2 &= 0.055 & k3 &= 0.017 \\
 D(t, c) &:= \begin{bmatrix} -k1 \cdot c_0 + k3 \cdot (c_1)^2 \cdot c_2 \\ 2k1 \cdot c_0 - k2 \cdot c_1 + -2k3 \cdot (c_1)^2 \cdot c_2 \\ k1 \cdot c_0 + -k3 \cdot (c_1)^2 \cdot c_2 \\ k2 \cdot c_1 \\ k2 \cdot c_1 \end{bmatrix} \\
 u &:= \text{Rkadapt}(c0, 0, 50, n, D)
 \end{aligned}$$

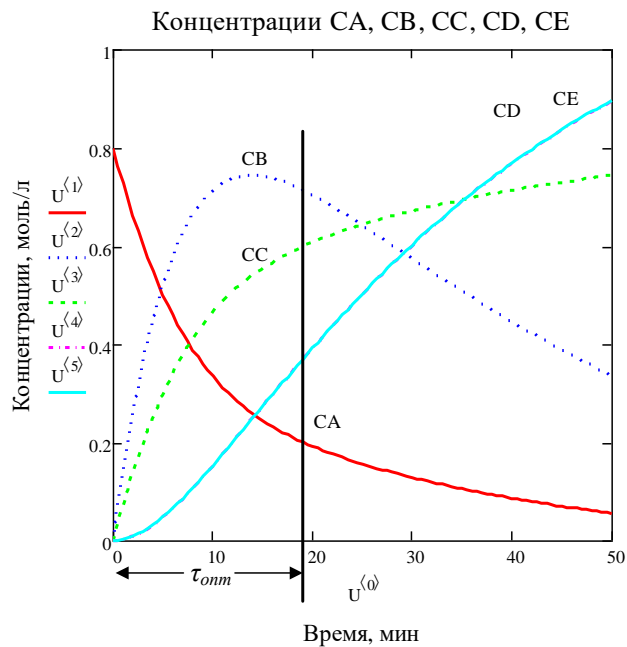


Рисунок 1.4 – решение математической модели в среде MathCad

	0	1	2	3	4	5
0	0	0.8	0	0	0	0
1	0.5	0.763	0.073	0.037	$6.065 \cdot 10^{-4}$	$6.065 \cdot 10^{-4}$
2	1	0.728	0.141	0.072	$2.367 \cdot 10^{-3}$	$2.367 \cdot 10^{-3}$
3	1.5	0.694	0.204	0.106	$5.197 \cdot 10^{-3}$	$5.197 \cdot 10^{-3}$
4	2	0.662	0.262	0.138	$9.015 \cdot 10^{-3}$	$9.015 \cdot 10^{-3}$
5	2.5	0.631	0.315	0.169	0.014	0.014
6	3	0.602	0.364	0.198	0.019	0.019
7	3.5	0.575	0.409	0.225	0.026	0.026
8	4	0.549	0.451	0.251	0.033	0.033
9	4.5	0.525	0.488	0.275	0.04	0.04
10	5	0.501	0.522	0.299	0.049	0.049
11	5.5	0.48	0.553	0.32	0.057	0.057
12	6	0.459	0.581	0.341	0.067	0.067
13	6.5	0.44	0.605	0.36	0.076	0.076
14	7	0.422	0.627	0.378	0.087	0.087
15	7.5	0.405	0.647	0.395	0.097	...

Рисунок 1.5– Расчетные кинетические кривые

Максимум концентрации В достигает через 14 минут, но здесь не выполняется ограничение на содержание компонента А. Степень превращения исходного компонента А достигнет 75% от начального значения примерно через 19 минут. Следовательно, при заданной производительности аппарата $G = 200$ л/мин, объем аппарата $V = \tau \cdot G$ равен 3800 л. Проектировщик должен проделать аналогичные опыты при разных значениях температур, концентраций и т. д. и, исходя из экономических соображений, выбрать оптимальный вариант, например, с минимальным объемом аппарата.

2 КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА №2

Контрольная работа включает два задания:

- исследование процесса теплообмена;
- определение коэффициентов эмпирических уравнений для расчета физико-химических и теплофизических констант либо выходных характеристик процесса в программной среде Curve-Expert.

Задание 2.1 - исследование процессов теплообмена

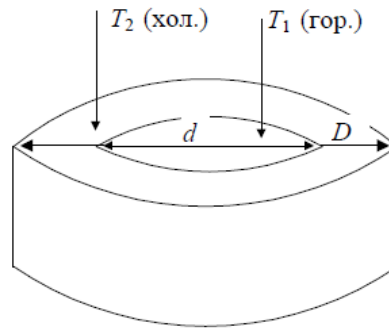
Структура процессов теплообмена как сложной системы. Виды процессов теплообмена и их математическое описание. Статические и динамические модели теплообменных аппаратов. Влияние гидродинамики потоков на структуру математической модели. Исследование процесса теплообмена с использованием математических моделей, разработанных в среде MathCad.

Приведите уравнения теплового баланса для кожухотрубчатого прямоточного теплообменного аппарата и результаты исследования в соответствии с заданием. Сделайте вывод на основании полученных результатов.

В теплообменнике типа «труба в трубе» охлаждается жидкость. Одна из жидкостей движется в теплообменнике внутри прямой трубы, которая омывается другой жидкостью. Хладагент и охлаждаемая жидкость движутся прямотоком. Определить температуру теплоносителей на выходе из аппарата. При моделировании принята модель идеального вытеснения. Построить температурные профили по длине аппарата. Процесс теплообмена происходит в прямоточном кожухотрубчатом теплообменнике, схема потоков приведена на рисунке 2.1. В теплообменнике реализуется режим «вытеснение-вытеснение».

При моделировании приняты следующие допущения:

1. Стационарный режим.
2. Происходит только теплопередача.
3. Коэффициент теплопередачи = const.
4. Равномерное распределение вдоль участка
5. Потери тепла в окружающую среду не учитываются.
6. Количество внутренних труб может варьироваться.



D, d – диаметр наружной и внутренней трубы
 T_1, T_2 – температура горячего и холодного теплоносителей;
 Рисунок 2.1-схема теплообменника «труба в трубе»

Поэтому математическое описание в статическом режиме имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dT_1}{dl} = -\frac{K \cdot \pi \cdot d}{G_1 \cdot \rho_1 \cdot C_{p1}} \cdot (T_1 - T_2); \\ \frac{dT_2}{dl} = \frac{K \cdot \pi \cdot d}{G_2 \cdot \rho_2 \cdot C_{p2}} \cdot (T_1 - T_2), \end{cases}$$

где K – коэффициент теплопередачи, характеризующий интенсивность источников тепла в потоке, Вт/(м²·К);

G_1, G_2 – объемный расход потока, м³/с;

ρ – плотность, кг/м³;

C_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении, кДж/(кг·К).

При моделировании использовать справочную информацию, приведенную в таблицах 2.1 и 2.2.

Разработать ММ, используя условные обозначения, приведенные ниже.

Конструктивные характеристики теплообменника	Технологические характеристики теплообменника
Длина L, м	Расход горячего теплоносителя $G_1, \text{м}^3/\text{с}$
Диаметр внешней трубы, D, м	Расход холодного теплоносителя $G_2, \text{м}^3/\text{с}$
Диаметр внутренних труб, d, м	Нач. температура первого теплоносителя T_1 , град С
Количество труб, n	Нач. температура второго теплоносителя, T_2 , град С

Физико-химические константы
Коэффициент теплопередачи, K_T , Вт/(м ² град)
Плотность теплоносителей, ρ_1 , ρ_2 , кг/м ³
Теплоемкости теплоносителей, C_{p1} , C_{p2} Дж/(кг*град)

1. Дать характеристику теплообменнику как объекту моделирования.
2. Написать систему уравнений для расчета распределения температуры потоков по длине аппарата.
3. Представить блок – схему решения задачи.
4. Разработать программу расчета в среде MathCad и провести исследование влияния конструктивных и технологических характеристик на выходные переменные:
 - изменить расход горячего теплоносителя на 20%;
 - изменить количество внутренних труб на 50 %

Плотность жидкостей $\rho(t)$, кг/м³ в диапазоне температур 10 ÷ 90 °С может быть вычислена по формуле:

$$\rho(t) = \rho_0 - A_1 \cdot t - A_2 \cdot t^2,$$

Таблица 2.1- плотности теплоносителей, , кг/м³

Название	ρ_0	A_1	A_2
Ацетон	813	1,03	0,00164
Бензол	900	1,02	0,000536
Вода	1000	0,062	0,00355
1,2 дихлорэтан	1282	1,44	0,000506
Изопропиловый спирт	801	0,796	0,000357
Метиловый спирт	810	0,826	0,00125
Пропиловый спирт	819	0,718	0,00149
Сероуглерод	1292	1,32	0,00354
Толуол	884	0,884	0,00080
Уксусная кислота	1070	0,957	0,00208
Хлороформ	1524	1,65	0,00310
Четыреххлористый углерод	1633	1,90	0,00101
Этанол	808	0,932	0,00101

Теплоемкость $c(t)$ и жидкостей (кроме воды) в диапазоне температур 15 ÷ 90 °С может быть определена по формуле:

$$C_p(t) = (c_0 + A_1 \cdot t,) \cdot 1000 ,$$

где c – удельная теплоемкость, Дж/кг/К; t – температура, °С; c_0 , A_1 , λ_0 , A_2 – коэффициенты, приведенные в таблиц 2.2 .

Таблица 2.2- теплоемкости теплоносителей, Дж/(кг*град)

Название	c_0	A_1
Ацетон	2,11	0,0028
Бензол	1,65	0,0032
1,2 дихлорэтан	1,22	0,0019
Изопропиловый спирт	2,41	0,0140
Метиловый спирт	2,41	0,0026
Пропиловый спирт	2,24	0,0097
Сероуглерод	1,01	0
Толуол	1,62	0,0035
Уксусная кислота	1,97	0,0036
Хлороформ	0,92	0,0016
Четыреххлористый углерод	0,85	0,00037
Этанол	1,92	0,018

Теплоемкость **воды** определяется по формуле:

$$c(t) = (4.215 - 0.001376 \cdot t + 1.339 \cdot 10^{-5} \cdot t^2) \cdot 1000$$

Варианты заданий приведены в таблице 2.3

Таблица 2.3 - Варианты заданий

№ вар	Теплоносители	Начальная температура, °C T_1 и T_2	Объемная скорость потока, м ³ /с G_1, G_2	Коэфф-т теплопередачи, Вт/(м ² ·К) K	Кол-во внутр. труб, n	Диаметр труб d , м	Длина аппарата, м L
1	толуол вода	90 25	от 0.0005 до 0.001 0.0003	400	20	0.01	3
2	этанол вода	88 20	0.0008 0.0003	360	от 10 до 50	0.01	5
3	уксусная кислота вода	84 10	от 0.006 до 0.02 0.003	450	1	0.5	5
4	этанол вода	85 20	0.0006 0.0003	360	от 5 до 30	0.02	4
5	пропиловый спирт вода	80 25	0.001 0.002	От 300 до 500	25	0.02	5
6	ацетон вода	от 50 до 80 10	0.001 0.002	300	10	0.01	5
7	уксусная кислота вода	90 от 10 до 30	0.002 0.003	400	10	0.01	3
8	изопропиловый спирт вода	80 от 10 до 30	0.0025 0.003	400	10	0.01	2
9	ацетон вода	75 15	0.0002 от 0.0002 до 0.001	300	10		4
10	бензол вода	85 от 10 до 40	0.0005 0.0003	300	20	0.02	2
11	уксусная кислота вода	75 от 10 до 40	0.0007 0.0003	420	20	0.01	4
12	четырёххлористый углерод вода	80 от 10 до 40	0.0006 0.0003	400	20	0.01	2
13	бензол вода	70 25	0.001 0.002	От 200 до 500	25	0.01	3
14	толуол вода	60 от 10 до 40	0.001 0.002	400	20	0.02	4
15	ацетон вода	90 25	от 0.0005 до 0.001 0.0003	400	10	0.01	3
16	ацетон вода	80 20	0.0005 0.0003	360	от 5 до 20	0.01	3

Продолжение таблицы 2.3							
№ вар	Теплоносители	Начальная температура, °С T_1 и T_2	Объемная скорость потока, м ³ /с G_1, G_2	Коэфф-т теплопередачи, Вт/(м ² ·К) K	Кол-во внутр. труб, n	Диаметр трубы, м	Длина аппарата, м L
17	этанол вода	70 25	0.002 0.002	430	от 5 до 20	0.02	4
18	толуол вода	75 20	0.005 0.002	300	От 5 до 20	0.05	5
19	этанол вода	80 25	0.002 от 0.002 до 0.01	400	10	0.02	3
20	бензол вода	90 25	От 0.002 до 0.01 0.002	300	от 2 до 10	0.05	2
21	четырёххлористый углерод вода	90 20	0.005 0.002	300	от 2 до 10	0.05	2
22	изопропиловый спирт вода	85 20	0.008 0.002	400	от 2 до 10	0.02	2
23	толуол вода	От 60 до 90 20	0.005 0.002	400	20	0.05	4
24	уксусная кислота вода	85 20	0.005 0.002	380	от 2 до 10	0.02	2
25	бензол вода	от 70 до 90 20	0.002 0.002	300	12	0.01	2

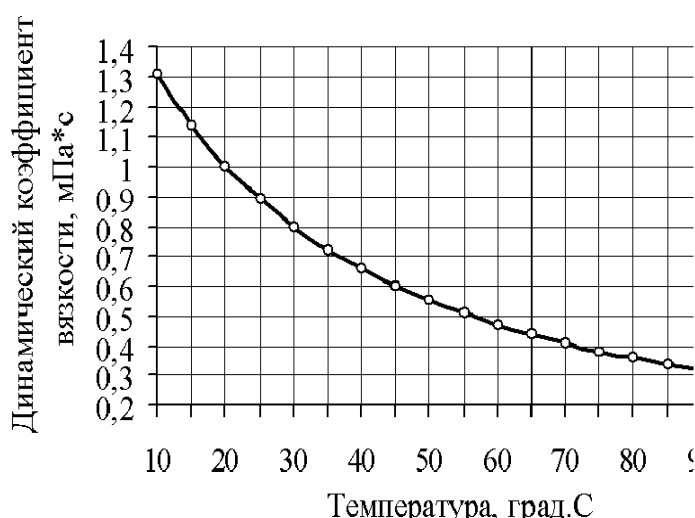
Задание 2.2 - Определение коэффициентов эмпирических уравнений

Определение коэффициентов эмпирических уравнений для расчета физико-химических и теплофизических констант либо выходных характеристик процесса в программной среде Curve-Expert. Дайте оценку полученному эмпирическому уравнению (коэффициент корреляции, средне - квадратичное отклонение).

ВАРИАНТЫ ЗАДАНИЯ 2.2

Вариант 1

Построить эмпирическую математическую модель зависимости динамического коэффициента вязкости воды от температуры. Определить коэффициент вязкости при температуре 72°C.



Вариант 2

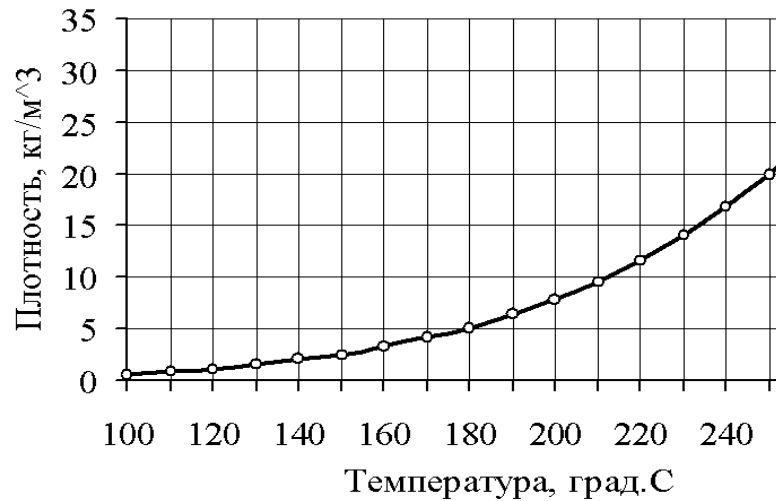
Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности четырехфтористого кремния от температуры при давлении $p=1\text{бар}$ ($1\text{бар}=1\cdot 10^5\text{ Па}$) по данным, приведенным в таблице. Дать оценку полученной модели.

T, К	330	350	370	390	410	430	450	470	490	510	530	550
$\lambda \cdot 1000$, Вт/(м*К)	17.4	18.6	19.7	20.8	22.0	23.1	24.3	25.4	26.5	27.6	28.8	29.9

Определить теплопроводность четырехфтористого кремния при $T=355\text{ К}$.

Вариант 3

Построить эмпирическую математическую модель зависимости плотности насыщенного водяного пара от температуры. Определить плотность пара при температуре 222 град.С.



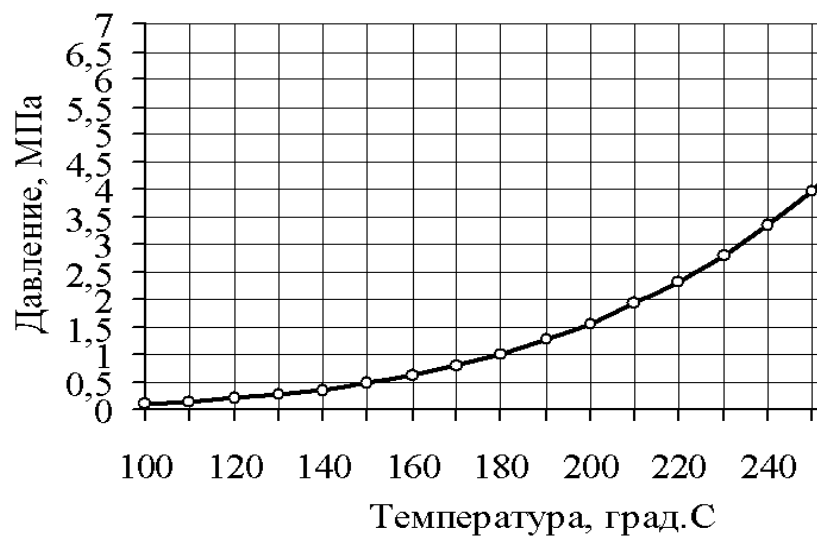
Вариант 4

Построить эмпирическую математическую модель зависимости удельной теплоёмкости ацетилена от температуры по данным, приведенным в таблице. Определить удельную теплоёмкость ацетилена при $T=222^{\circ}\text{C}$.

Т,градС	0	100	200	300	400	500	600	700	800
С, КДж/(Кг*град)	1.63	1.88	2.07	2.21	2.74	2.42	2.92	2.54	2.65

Вариант 5

Построить эмпирическую математическую модель зависимости давления насыщенного водяного пара от температуры. Определить давление насыщенного водяного пара при температуре 183°C .



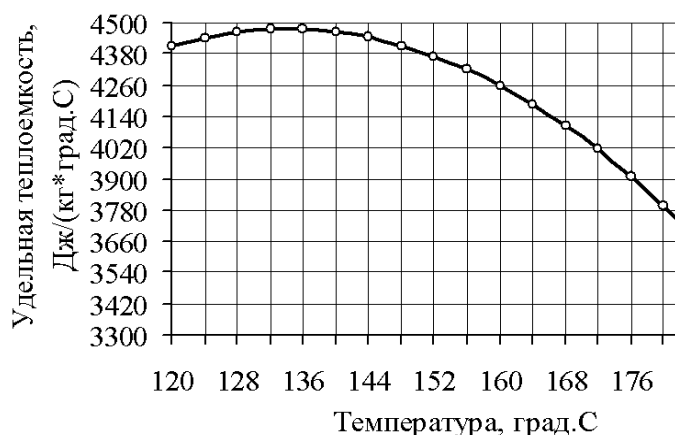
Вариант 6

Построить эмпирическую ММ зависимости теплопроводности ацетилена от температуры по данным, приведенным в таблице. Определить теплопроводность ацетилена при температуре 615 °С.

T,градС	0	100	200	300	400	500	600	700	800
λ , Вт/(м*град)	0.02	0.03	0.034	0.041	0.053	0.058	0.065	0.072	0.076

Вариант 7

Построить эмпирическую математическую модель зависимости изобарной удельной теплоёмкости расплава полиэтилена высокой плотности от температуры. Определить удельную теплоёмкость при температуре 144.5°С.



Вариант 8

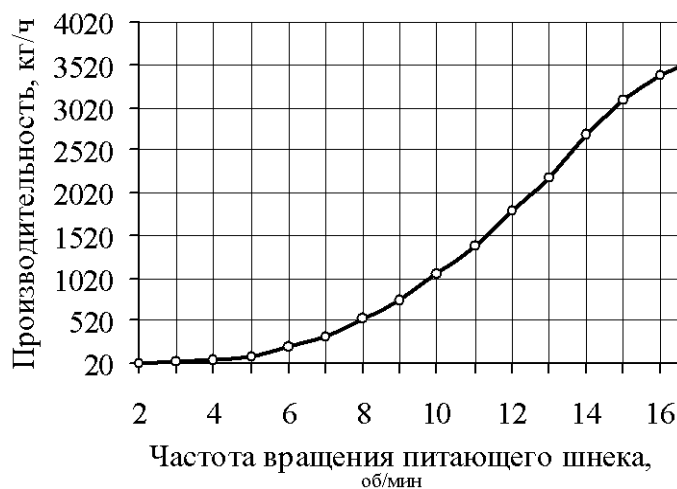
Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности (Вт/(м*К)) трехфтористого бора от температуры. Определить теплопроводность трехфтористого бора при температуре 445 К.

T, К	$\lambda \cdot 10^3$	T, К	$\lambda \cdot 10^3$	T, К	$\lambda \cdot 10^3$	T, К	$\lambda \cdot 10^3$	T, К	$\lambda \cdot 10^3$
320	18,2	400	23,9	480	29,2	560	34,8	620	39,0
340	19,6	420	25,0	500	30,6	580	36,2	640	40,4
360	21,0	440	26,4	520	32,0	600	37,6		
380	22,4	460	27,8	540	33,4				

Вариант 9

Построить эмпирическую ММ зависимости производительности загрузочной воронки промышленного экструдера от частоты вращения

питающего шнека. Дать оценку полученной модели. Определить производительность воронки при частоте вращения питающего шнека 11 об/мин.



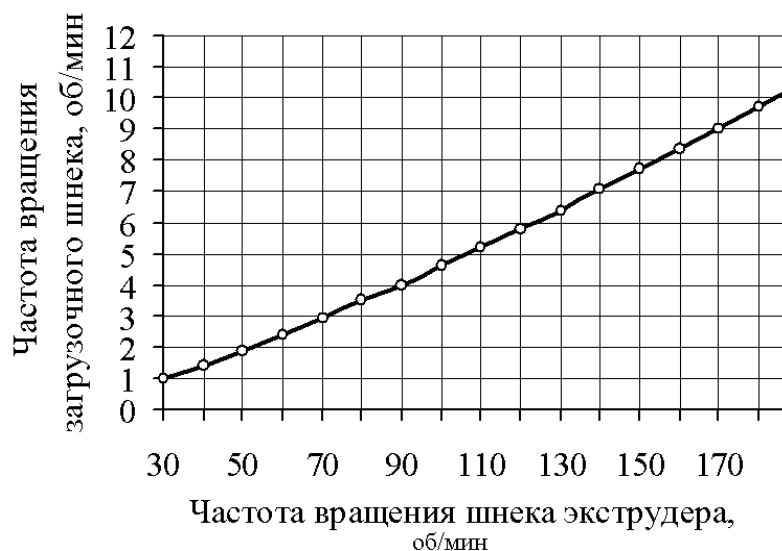
Вариант 10

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности (Вт/(м*К)) паров сероуглерода от температуры. Определить теплопроводность паров сероуглерода при температуре 472 К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
340	9,81	400	13,5	460	16,1
360	11,2	420	14,5	480	16,7
380	12,4	440	15,3	500	17,1

Вариант 11

Построить эмпирическую математическую модель зависимости частоты вращения загрузочного шнека экструдера от частоты вращения основного шнека. Дать оценку полученной модели. Определить частоты вращения загрузочного шнека при частоте вращения основного шнека 125 об/мин.



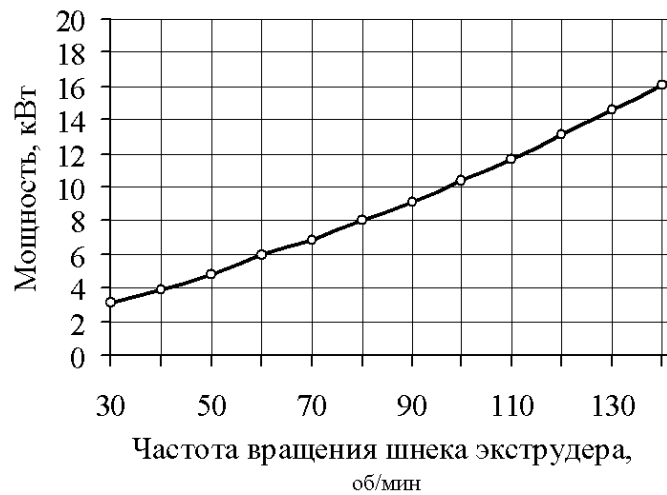
Вариант 12

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности ($\text{Вт}/(\text{м}\cdot\text{К})$) аммиака от температуры. Определить теплопроводность аммиака при температуре 528 К.

$T, \text{К}$	$\lambda \cdot 10^3$	$T, \text{К}$	$\lambda \cdot 10^3$	$T, \text{К}$	$\lambda \cdot 10^3$	$T, \text{К}$	$\lambda \cdot 10^3$
200	13,25	360	32,01	520	54,6	680	79,4
220	15,33	380	34,65	540	57,6	700	82,6
240	17,50	400	37,35	560	60,6	720	85,8
260	19,74	420	40,1	580	63,7	740	89,0
280	22,05	440	42,9	600	66,8	760	92,2
300	24,44	460	45,8	620	69,9	780	95,3
320	26,90	480	48,7	640	73,1	800	98,5
340	29,42	500	51,6				

Вариант 13

Построить эмпирическую математическую модель зависимости мощности, потребляемой осциллирующим экструдером от частоты вращения шнека экструдера. Дать оценку полученной модели. Определить мощность при частоте вращения шнека экструдера 77 об/мин.



Вариант 14

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности (Вт/(м*К)) паров шестифтористой серы от температуры. Определить теплопроводность паров шестифтористой серы при температуре 724 К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
200	4,53	400	20,3	600	32,7	800	43,2
250	9,1	450	23,8	650	35,4	850	46,3
300	13,2	500	26,7	700	38,1	900	48,8
350	16,8	550	29,8	750	40,6	1000	54,0

Вариант 15

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности (Вт/(м*К)) жидкого лития от температуры. Определить теплопроводность лития при температуре 1018 К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
453,7	42,8	700	49,7	1000	57,6	1300	64,3
500	44,0	800	52,4	1100	60,1	1400	66,0
600	46,8	900	55,1	1200	62,2	1500	68,0

Вариант 16

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности (Вт/(м*К)) жидкого натрия от температуры. Определить теплопроводность натрия при температуре К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
371	88,6	550	77,2	800	64,7	1200	48,0
400	86,2	600	74,6	900	60,0	1300	44,7
450	82,8	650	72,0	1000	55,5	1400	41,6
500	79,9	700	69,6	1100	51,2	1500	38,6

Вариант 17

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности ($Вт/(м^*К)$) жидкого калия от температуры. Определить теплопроводность калия при температуре 988 К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
350	54,4	550	46,4	800	37,6	1200	25,5
400	52,2	600	44,5	900	34,2	1300	23,0
450	50,2	650	42,6	1000	31,2	1400	20,5
500	48,3	700	40,9	1100	28,3	1500	18,0

Вариант 18

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности ($Вт/(м^*К)$) жидкого рубидия от температуры. Определить теплопроводность рубидия при температуре 531 К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
312,5	33,0	550	29,0	900	22,5	1400	14,0
350	34,5	600	28,0	1000	20,8	1500	12,5
400	31,8	650	27,2	1100	19,0	–	–
450	30,9	700	26,2	1200	17,4	–	–
500	30,2	800	24,4	1300	15,7	–	–

Вариант 19

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности ($Вт/(м^*К)$) жидкого цезия от температуры. Определить теплопроводность цезия при температуре 1215 К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
301,7	18,1	550	18,5	900	16,5	1400	9,5
350	18,2	600	18,5	1000	15,3	1500	8,0
400	18,2	650	18,2	1100	14,2	–	–
450	18,5	700	18,0	1200	12,8	–	–
500	18,5	800	17,3	1300	11,2	–	–

Вариант 20

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности (Вт/(м*К)) дифтордибромметана от температуры. Определить теплопроводность дифтордибромметана при температуре 365 К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
270	5,47	320	6,98	380	9,00
280	5,76	330	7,30	390	9,35
290	6,06	340	7,63	400	9,72
300	6,36	350	7,97	410	10,1
310	6,67	360	8,30		
		370	8,65		

Вариант 21

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности (Вт/(м*К)) бромформа от температуры. Определить теплопроводность бромформа при температуре 495 К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
270	6,09	350	10,8	420	15,0	540	22,1
280	6,69	360	11,4	440	16,2	560	23,3
290	7,28	370	12,0	460	17,4	580	24,5
300	7,87	380	12,6	480	18,6	600	25,7
320	9,06	400	13,8	500	19,8	620	26,9
340	10,2			520	21,0	640	28,1

Вариант 22

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности (Вт/(м*К)) паров хлороформа от температуры. Определить теплопроводность хлороформа при температуре 452 К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
300	7,78	370	9,96	430	12,8
310	7,93	380	10,4	440	13,2
320	8,15	390	10,9	450	13,6
340	8,76	400	11,4	460	13,9
350	9,12	410	11,8	470	14,3
360	9,53	420	12,3	480	14,6

Вариант 23

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности ($Вт/(м^*К)$) паров хлористого метила от температуры. Определить теплопроводность хлористого метила при температуре 423 К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
270	8,97	400	17,8	520	27,4
280	9,60	420	19,3	540	29,1
300	10,9	440	20,8	560	30,8
320	12,2	460	22,4	580	32,6
340	13,5	480	24,0	600	34,5
360	14,9	500	25,7	620	36,3
380	16,4				

Вариант 24

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности ($Вт/(м^*К)$) паров нитрометана от температуры. Определить теплопроводность нитрометана при температуре 377 К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
290	8,76	340	11,4	390	14,8
300	9,24	350	12,0	400	15,5
310	9,75	360	12,7	410	16,3
320	10,3	370	13,4	420	17,1
330	10,8	380	14,1		

Вариант 25

Построить эмпирическую математическую модель зависимости теплопроводности ($Вт/(м^*К)$) метилового спирта от температуры. Определить теплопроводность метилового спирта при температуре 365 К.

T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$	T, K	$\lambda \cdot 10^3$
180	243	260	215	340	191	420	172
200	236	280	208	360	186	440	168
220	229	300	202	380	180	460	165
240	222	320	196	400	176	480	162

Пример выполнения задания 2.2 с помощью программы CurveExpert

Построить эмпирическую ММ зависимости плотности серной кислоты от температуры на основании экспериментальных данных, приведенных в таблице 2.4. Дать оценку полученной модели. Определить плотность при концентрации 7%.

Таблица 2.4- Зависимость плотности серной кислоты от концентрации

Концентрация H ₂ SO ₄ , %	1	5	10	14	20	26	30	35	40
Плотность ρ , Кг/м ³	1005	1032	1066	1095	1139	1186	1219	1260	1303
Концентрация H ₂ SO ₄ , %	45	50	55	60	65	70	75	80	85
Плотность ρ , Кг/м ³	1348	1395	1443	1498	1553	1611	1669	1727	1779

Исходные экспериментальные данные в Curve-Expert приведены на рисунке 2.2. Результаты приведены на рисунках 2.3, 2.4.

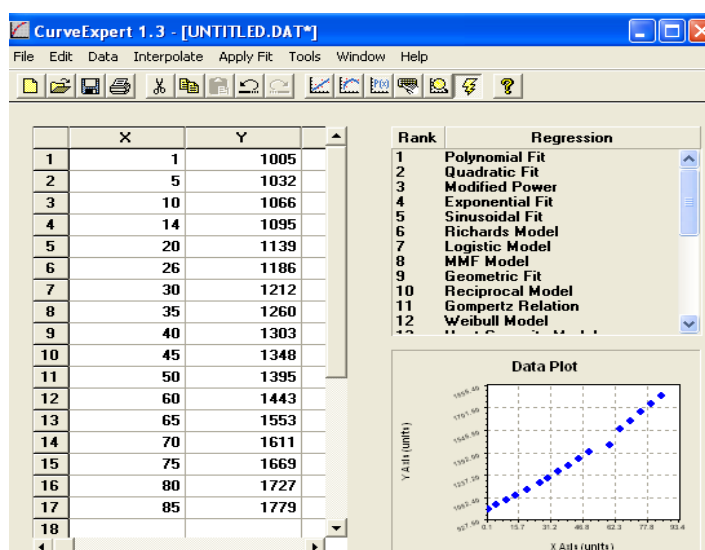


Рисунок 2.2- Ввод исходных данных

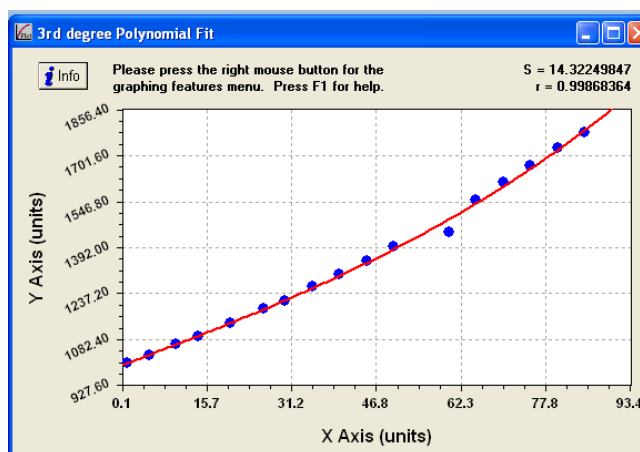


Рисунок 2.3–Расчетные данные

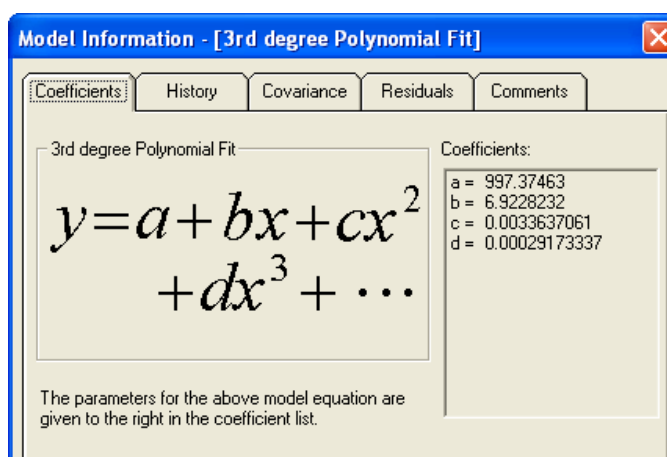


Рисунок 2.4-Коэффициенты уравнения

Коэффициент корреляции $r=0.998$, средне-квадратическое отклонение $S=14.32$. Таким образом, зависимость плотности серной кислоты от концентрации выражается уравнением:

$$\rho = 997.37 + 6.92 \cdot C + 0.0033 \cdot C^2 + 0.00029 \cdot C^3$$

Например, плотность при температуре $C=7\%$ равна:

$$\rho = 997.37 + 6.92 \cdot 7 + 0.0033 \cdot 7^2 + 0.00029 \cdot 7^3 = 1045.7$$

3 КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА №3

Тема: Разработка математической модели выпарного аппарата

В выпарном аппарате происходят следующие физические процессы: конденсация пара в греющей камере, передача тепла от пара через стенку поверхности нагрева к кипящей жидкости, в результате чего выделяются пары растворителя и увеличивается концентрация раствора (рисунок 3.1).

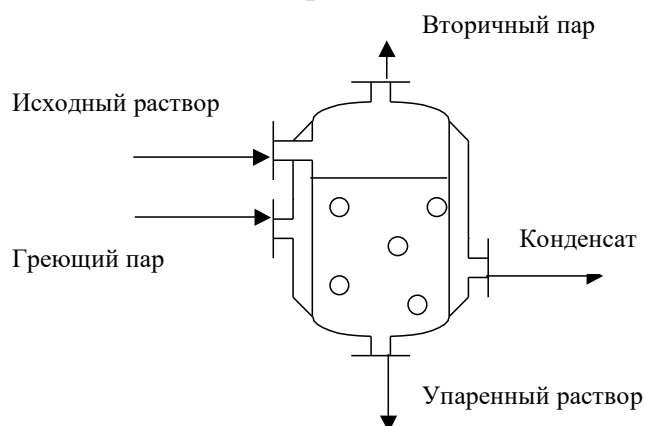


Рисунок 3.1– Схема выпарного аппарата

Выпарные аппараты, как правило, представляют собой емкость с выпариваемым раствором, обогреваемую перегретым паром. Вторичный пар, образующийся при кипении раствора, отсасывается из верхней части аппарата вакуум-насосом; упаренный раствор отводится из нижней части аппарата. Необходимый для обеспечения теплопередачи от греющего пара к выпариваемому раствору перепад температуры получается вследствие того, что давление греющего пара выше, чем давление над кипящим раствором.

Входными переменными выпарного аппарата являются расход $m_{\text{вх}}$ и концентрация $C_{\text{вх}}$ раствора, подаваемого на вход; расход тепла q , поступающего со свежим греющим паром (расход тепла для насыщенного пара однозначно определяется его температурой $T_{\text{п}}$).

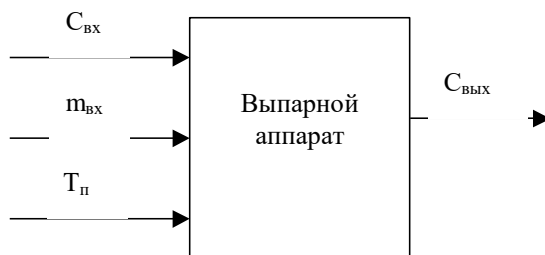


Рисунок 3.2 – Структурная схема выпарного аппарата

Выходные переменные – расход вторичного пара $m_{\text{вт}}$, расход $m_{\text{вых}}$

раствора на выходе и концентрация $C_{\text{вых}}$ раствора на выходе. Наиболее важной выходной координатой для выпарных аппаратов является концентрация раствора на выходе. Формализованное описание приведено на рисунке 3.2.

Примем следующую систему допущений:

1. Гидродинамический режим – идеальное смешение.
2. Тепловые потери в окружающую среду отсутствуют.
3. В выпарной аппарат подается раствор, нагретый до температуры кипения.
4. Выпарной аппарат является стационарным объектом.
5. Теплоемкость раствора и теплота парообразования не зависят от температуры и концентрации раствора.

Целью построения ММ является получение уравнений, связывающих выходную координату $C_{\text{вых}}$ с входными: $C_{\text{вх}}, m_{\text{вх}}, T_{\text{п}}$.

ММ статики выпарного аппарата состоит из следующих уравнений:

- материального баланса:

$$m_{\text{вх}} = m_{\text{вых}} + m_{\text{вт}}; \quad (1)$$

- материального баланса по сухому веществу:

$$m_{\text{вх}} C_{\text{вх}} = m_{\text{вых}} C_{\text{вых}}; \quad (2)$$

- теплового баланса (с учетом допущения 2):

$$q_{\text{вх}} + q_{\text{т}} - q_{\text{вых}} - q_{\text{вт}} = 0, \quad (3)$$

где $q_{\text{т}}$ – поток тепла через поверхность теплообмена от греющего пара к кипящему раствору, Дж/с; $q_{\text{вх}}$ – поток тепла, вносимого в аппарат с раствором, Дж/с; $q_{\text{вых}}$ – поток тепла, уходящего из аппарата с раствором, Дж/с; $q_{\text{вт}}$ – поток тепла, уходящего из аппарата со вторичным паром, Дж/с.

Потоки тепла выражаются следующими зависимостями:

$$q_{\text{т}} = k_{\text{т}} F (T_{\text{п}} - T_{\text{р}}), \quad (4)$$

где $k_{\text{т}}$ – коэффициент теплопередачи, Вт/м²·град; $T_{\text{р}}$ – температура кипения раствора, °С; $T_{\text{п}}$ – температура греющего пара, °С; F – площадь теплообмена, м²;

$$q_{\text{вх}} = m_{\text{вх}} c_{\text{т}} T_{\text{вх}}, \quad (5)$$

где $c_{\text{т}}$ – теплоемкость раствора, Дж/кг·град; $T_{\text{вх}}$ – температура раствора на входе, °С;

$$q_{\text{ВЫХ}} = m_{\text{ВЫХ}} c_t T_p; \quad (6)$$

$$q_{\text{ВТ}} = m_{\text{ВТ}} r, \quad (7)$$

где r – теплота парообразования вторичного пара, Дж/кг.

Учитывая допущение 3, уравнение (5) может быть записано в следующем виде:

$$q_{\text{ВХ}} = m_{\text{ВХ}} c_t T_p. \quad (8)$$

Подставив в уравнение (3) выражения (4), (6) – (8), получим:

$$k_T F (T_{\text{П}} - T_p) + c_t T_p (m_{\text{ВХ}} - m_{\text{ВЫХ}}) - m_{\text{ВТ}} r = 0. \quad (9)$$

Из уравнений (1), (2), (9) получить зависимость:

$$C_{\text{ВЫХ}} = f(C_{\text{ВХ}}, m_{\text{ВХ}}, T_{\text{П}}).$$

Эту зависимость предлагается найти самостоятельно.

Подготовить программу для вычислительной машины на любом языке программирования или в среде MathCad.

В работе требуется получить статические характеристики по каналам:

а) $C_{\text{ВХ}} \rightarrow C_{\text{ВЫХ}}$. Концентрация $C_{\text{ВХ}}$ изменяется от C_0 до C_1 с шагом $\Delta C = 0,4\%$. При этом $m_{\text{ВХ}} = \text{const}$, $T_{\text{П}} = \text{const}$.

б) $m_{\text{ВХ}} \rightarrow C_{\text{ВЫХ}}$. Расход на входе изменяется от m_0 до m_1 с шагом $\Delta m = 0,2$ кг/с. При этом $C_{\text{ВХ}} = \text{const}$, $T_{\text{П}} = \text{const}$.

в) $T_{\text{П}} \rightarrow C_{\text{ВЫХ}}$. Температура греющего пара изменяется от T_0 до T_1 с шагом $\Delta T = 0,5^\circ\text{C}$. При этом $C_{\text{ВХ}} = \text{const}$, $m_{\text{ВХ}} = \text{const}$.

Содержание отчета о работе – графики зависимостей $C_{\text{ВЫХ}}(C_{\text{ВХ}})$, $C_{\text{ВЫХ}}(m_{\text{ВХ}})$, $C_{\text{ВЫХ}}(T_{\text{П}})$.

Номер варианта соответствует двум последним цифрам номера зачетной книжки, то есть цифры 01 соответствуют номеру варианта 1, 02 – номеру варианта 2 и т.д. Если две последние цифры номера зачетной книжки – 51, то им соответствует также номер варианта 1, 52 – номер варианта 2 и т.д., вплоть до 99 – номер варианта 49, 00 – номер варианта 50 (таблица 1).

Исходные данные, необходимые для расчета, приведены в табл. 2, используемые константы – в табл. 3.

Таблица 3.1 – Задания

№ варианта	$C_0, \%$	$C_1, \%$	$C_{\text{ВХ}}, \%$	$m_0, \text{кг/с}$	$m_1, \text{кг/с}$	$m_{\text{ВХ}}, \text{кг/с}$	$T_0, ^\circ\text{C}$	$T_1, ^\circ\text{C}$	$T_{\text{П}}, ^\circ\text{C}$
1	14	18	15	4	6	5	120	135	130
2	6	10	8	4	6	4	122	140	130
3	8	12	10	4,5	6,8	5	125	140	135
4	9	14	12	4,2	6,5	4,5	123	138	132
5	12	16	14	4,2	6,4	4,6	130	150	140
6	7	12	10	3,9	5,4	4	125	145	138
7	10	14	12	4,5	7	5	130	155	150
8	11	15	13	4,8	7	6	132	160	153
9	20	25	20	6	8	7	120	140	130
10	13	18	16	5	7	6	124	142	135
11	6	12	9	3,8	5,4	4,2	120	140	130
12	15	20	16	4,4	6,9	4,8	132	158	146
13	8	14	12	5	7	6	128	145	140
14	18	23	21	7	8,4	7	150	160	155
15	17	21	18	4	6	5	130	140	136
16	7,5	12	8	3,8	5,5	4	125	140	140
17	19	24	22	6,3	8,8	6,5	140	152	150
18	14	20	15	7	8,5	7	142	158	152
19	7	10	8	3,9	5,7	4,8	133	145	142
20	10	15	12	4,6	7	5	135	150	145
21	14	20	19	4,8	6,6	4,9	120	140	135
22	5	9	6	4,8	7,5	5,2	130	150	140
23	12	17	14	4,1	6,9	4,2	128	144	142
24	13	19	16	5,2	7,7	5,5	141	156	148
25	11	15	13	4	6	4,5	132	146	140

Таблица 3.2 – Теплофизические константы

Обозначение	Значение	Единица измерения
r	$2.26 \cdot 10^6$	Дж/кг
κ_t	5000	Вт/м ² ·град
F	10	м ²
T_p	90	°C
c_t	4187	Дж/кг·град

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

основные

- 1 Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов : учеб. пособие для вузов / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – М. : Академкнига, 2006. – 416 с.
- 2 Касаткин, А. Г. Основные процессы и аппараты химической технологии / А. Г. Касаткин. – М. : Альянс, 2005. – 750с.
- 3 Романков П.Г., Фролов В.Ф., Флисюк О.М. Методы расчета процессов и аппаратов химической технологии (примеры и задачи): Учеб. пособие для вузов. □ 2-е изд., испр. □ СПб.:Химиздат, 2009. □ 544 с.
- 4 Чистякова, Т. Б. Математическое моделирование химико-технологических объектов с распределенными параметрами : учеб. пособие для вузов / Т. Б. Чистякова, А. Н. Полосин, Л. В. Гольцева. – СПб. : ЦОП «Профессия», 2010. – 240 с.

вспомогательные

- 4 Ахназарова, С. Л. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии : учеб. пособие для вузов / С. Л. Ахназарова, В. В. Кафаров. – 2-е изд., перераб. и доп. – М. : Высш. шк., 1985. – 327 с.
- 5 Брановицкая, С. В. Вычислительная математика в химии и химической технологии : учеб. для вузов / С. В. Брановицкая, Р. Б. Медведев, Ю. Я. Фиалков. – К.: Вища шк., 1986. – 216 с.
- 6 Кафаров, В. В. Анализ и синтез химико-технологических систем / В. В. Кафаров, В. П. Мешалкин. – М. : Химия, 1991. – 432 с.
- 7 Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств : учеб. пособие для вузов / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. – М. : Высш. шк., 1991. – 400 с.
- 8 Самарский, А. А. Математическое моделирование. Идеи. Методы. Примеры / А. А. Самарский, А. П. Михайлов. – 2-е изд., испр. – М. : Наука, 2002. – 320 с.
- 9 Синтез и анализ математических моделей кинетики химических реакций : учеб. пособие / Т. Б. Чистякова [и др.]. – СПбГТИ(ТУ), 2002. – 70 с.
- 10 Тарасик, В. П. Математическое моделирование технических систем / В. П. Тарасик. – 2-е изд., испр. и доп. – Мн. : ДизайнПРО, 2004. – 640 с.
- 11 Химико-технологические процессы. Теория и эксперимент : учеб. для вузов / Ю. А. Комиссаров [и др.]. – М. : Химия, 1998. – 360 с.
- 12 Холоднов, В. А. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов : практ. рук. / В. А. Холоднов, В. П. Дьяконов, Е. Н. Иванова. – СПб. : Проффессионал, 2003. – 480 с.
- 13 Чистякова, Т. Б. Структурно-параметрический синтез математических моделей гидродинамики : учеб. пособие / Т. Б. Чистякова, Л. В. Гольцева. – СПб. : СПбГТИ(ТУ), 2002. – 48 с.