

Praca dyplomowa inżynierska

Modelowanie reakcji następczych w reaktorach rurowych z dyspersją osiową



Autor: Hubert Stefański

Nr albumu: 244566

Promotor: dr inż. Artur Poświata

Rok akademicki: 2018/2019

Wprowadzenie

Głównym celem tej pracy jest przedstawienie możliwości, które oferuje arkusz kalkulacyjny MathCad. W pracy stworzono model matematyczny reaktora rurowego izotermicznego z dyspersją osiową, w którym będą reakcje następcze. Przedstawiony model rozwiązano dla różnych parametrów procesowych. Wyniki obliczeń numerycznych porównano z wynikami analitycznymi.

Cel i zakres pracy

Celem pracy było modelowanie reakcji następczych zachodzących w reaktorach rurowych z dyspersją osiową. Obliczenia zostały przeprowadzone dla metody numerycznej, przy użyciu programu MathCad, oraz metody analitycznej dla przypadku izotermicznego reaktora z dyspersją osiową. W zakres pracy wchodzi:

- Przedstawienie możliwości programu Mathcad w rozwiązywaniu równań i układów równań różniczkowych
- Zaprezentowanie i porównanie rezultatów dla metody analitycznej i numerycznej

Analiza metody numerycznej Rungego – Kuty

W metodzie numerycznej Rungego-Kuty wyznaczono przebiegi zmienności dla różnych wartości punktów startowych składników A oraz P. Zbadano również wrażliwość metody na liczbę kroków całkowania. Poniższy układ równań przekształcono do postaci standardowej Mathcada, z odpowiednimi warunkami początkowymi oraz notacją.

$$\begin{cases} \frac{d^2\alpha_A}{dt^2} - \kappa \frac{d\alpha_A}{dt} + \kappa \cdot k_1(1 - \alpha_A) = 0 \\ \frac{d^2\alpha_P}{dt^2} - \kappa \frac{d\alpha_P}{dt} + \kappa \cdot (k_1(1 - \alpha_A) - k_2(\alpha_P + \gamma_P)) = 0 \end{cases}$$

- Zapisuję się wektor wartości początkowych w postaci:

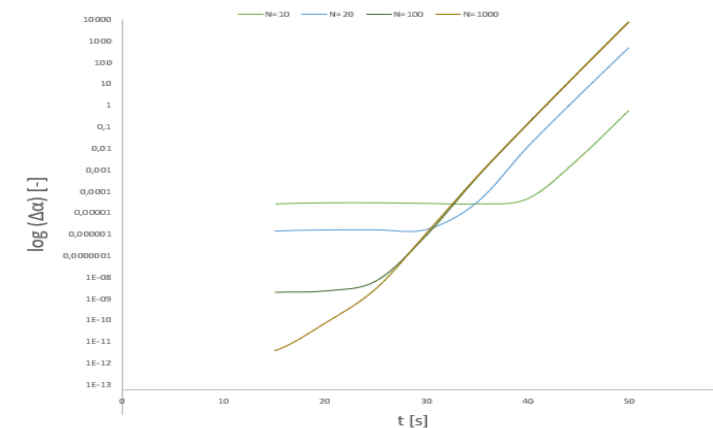
$$y := \begin{bmatrix} \alpha_A(0) \\ \kappa\alpha_A(0) \\ \alpha_P(0) \\ \kappa\alpha_P(0) \end{bmatrix}$$

- Definiuje się wektor pochodnych w postaci macierzy:

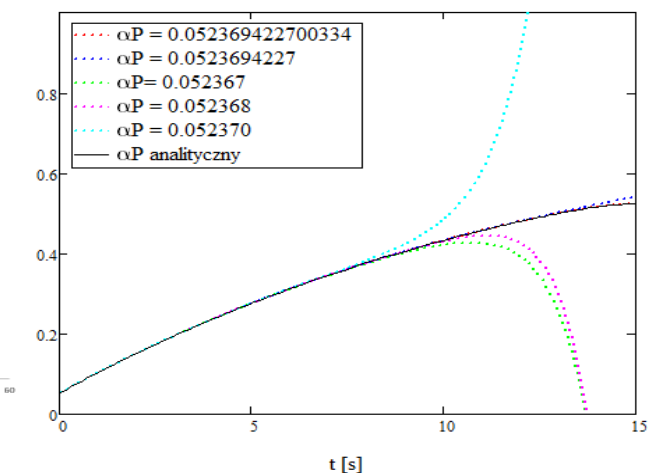
$$P(t, y) := \begin{bmatrix} y_1 \\ \kappa y_1(t) - \kappa \cdot k_1(1 - \alpha_A) \\ y_2 \\ \kappa y_2(t) - \kappa \cdot (k_1(1 - \alpha_A) - k_2(\alpha_P + \gamma_P)) \end{bmatrix}$$

•Wywołanie integratora:

$$P := Rkfixed(y, t_0, t_k, N, P)$$



Rysunek 1. Wykres różnicy wartości stężenia bezwymiarowego składnika P obliczonego numerycznie od stężenia bezwymiarowego składnika P obliczanego analitycznie w czasie od różnych liczb kroków całkowania, $t_k=50$ $\kappa=1$



Rysunek 2 Wykres zależności stężenia bezwymiarowego dla składnika P od czasu dla różnych wartości startowych składnika P, $\kappa=1$, $N=1000$

Wnioski

Metoda numeryczna jest wrażliwa na liczbę kroków całkowania. Największe odchylenia obserwujemy się dla dużych czasów przebywania ($t_k=50$). W tym przypadku wraz ze zwiększaniem liczby kroków całkowania rośnie dokładność tylko dla czasów początkowych. Gdy t zbliża się wartości maksymalnej obserwujemy się bardzo duże rozbieżności, większe nawet o kilka rzędów wielkości. Przy małych czasach metoda numeryczna wykazuje się mniejszą wrażliwością na liczbę kroków całkowania. Wykazano, że w metodzie bardzo silny wpływ na poprawność obliczeń ma dokładne określenie punktu startowego, nawet małe jego zmiany powodują ogromne odchylenia od przebiegów uzyskanych metodą analityczną