

Praca dyplomowa inżynierska

Analiza narzędzi programu MatLab do modelowania reakcji następczych zachodzących w reaktorach rurowych z dyspersją osiową



Autor: Kamil Karczmarczyk

Nr albumu: 298016

Promotor: dr inż. Artur Poświata

Rok akademicki: 2021/2022

Wprowadzenie

W chemicznych procesach przetwórczych reakcja chemiczna jest najistotniejszym etapem całego procesu. Dzięki rozwojowi dziedziny inżynierii reaktorów chemicznych możliwe jest coraz dokładniejsze opisywanie przebiegu reakcji chemicznej modelami matematycznymi. Modelowanie komputerowe pozwala na badanie przebiegu procesu w warunkach niemożliwych do analizy w skali laboratoryjnej. Dzięki modelowaniu numerycznemu reaktorów chemicznych możliwe jest zbadanie przebiegu procesu w warunkach skrajnych, takich jak izotermiczność oraz adiabatyczność reaktora. Wyniki tej analizy pozwalają zarówno na ustalenie teoretycznie maksymalnych wydajności procesu, a także ocenić bezpieczeństwo procesu.

Cel i zakres pracy

Celem pracy jest opracowanie skryptu programu MATLAB który posłuży do modelowania reakcji następczych zachodzących w reaktorach rurowych z dyspersją osiową. Praca miała charakter obliczeniowy. Zakres pracy obejmuje:

- opracowanie modelu izotermicznego reaktora rurowego z dyspersją osiową
- przeprowadzanie obliczeń symulacyjnych dla reakcji następczych pierwszego rzędu
- zbadanie wpływu wielkości kroku całkowania, dokładności warunków startowych oraz wyboru metody numerycznej na wyniki symulacji numerycznej

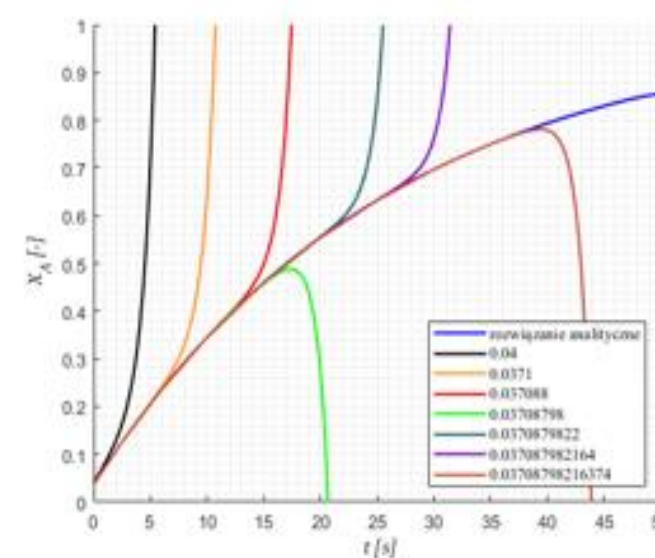
Aparat matematyczny

W pracy transport masy wewnątrz reaktora rurowego opisanego za pomocą modelu dyspersyjnego. Na opisany model matematyczny składa się układ równań różniczkowych uwzględniających dyspersję osiową, reakcję chemiczną oraz konwekcyjny transport masy. Do rozwiązania układu równań różniczkowych wykorzystano warunki brzegowe Danckwerta.

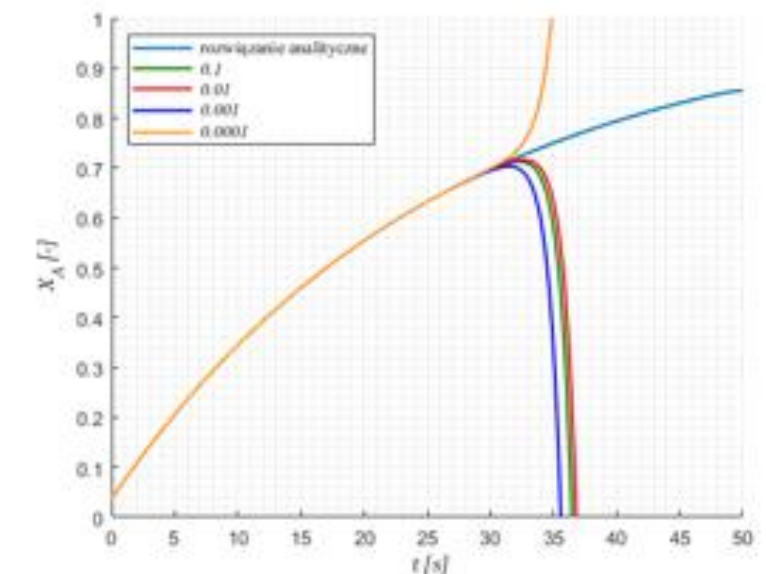
$$\frac{\partial^2 X_i}{\partial t^2} - \kappa \frac{\partial X_i}{\partial t} + \kappa R_i = 0 \quad X_i(0) = \frac{1}{\kappa} \frac{dX_i(0)}{dt} \quad \frac{dX_i(t_k)}{dt} = 0$$

Wyniki

Dokonano obliczeń symulacyjnych za pomocą czterech różnych solverów programu MATLAB: ode23, ode45, ode89, ode113. Wyniki obliczeń numerycznych porównano z rozwiązaniem analitycznym. Obliczenia numeryczne są dokładne dla początkowych wartości lokalnego czasu przebywania. W zależności od wybranej metody obliczeniowej, obliczenia tracą stabilność dla $t = 35 \div 40$ [s]. Obliczenia nie są stabilne dla przyjętego parametru $\kappa \neq 1$.



Rysunek 1 Porównanie rozwiązań numerycznych z rozwiązaniem analitycznym dla różnych dokładności warunków początkowych. $\kappa = 1, t_k = 50$, metoda ode23 krok całkowania: automatyczny



Rysunek 2 Porównanie rozwiązań numerycznych z rozwiązaniem analitycznym dla różnych wartości kroku całkowania $\kappa = 1, t_k = 5$, metoda ode23

Wnioski

Niniejsza praca wykazuje, że możliwe jest numeryczne modelowanie reakcji następczych w reaktorach rurowych z dyspersją osiową w programie MATLAB. Największy wpływ na stabilność i dokładność obliczeń ma dokładność warunków startowych. Zmniejszanie kroku całkowania nie wpływa znacząco na stabilność obliczeń. Niezależnie od przyjętego kroku całkowania oraz dokładności warunków startowych najdłużej zachowywały obliczenia wykonywane przy pomocy ode23.