

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ

5.1. Лабораторная работа №8

Моделирование гомогенных химических реакторов

Цель работы

1. Составить математическую модель химического реактора.
2. Разработать алгоритм решения системы дифференциальных уравнений и программу расчёта основных параметров процесса.
3. Рассчитать изменения концентраций реагирующих веществ на выходе из реактора и профиль температур.
4. Исследовать влияние времени контакта на выход продуктов реакций.
5. Сравнить протекание химических реакций в реакторах идеального вытеснения и идеального перемешивания.

Классификация реакторов

Одним из основных элементов любой химико-технологической системы (ХТС) является химический реактор. *Химическим реактором* называется аппарат, в котором осуществляются химические процессы, сочетающие химические реакции с массо- и теплопереносом, с целью получения определённого вещества. *Типичные реакторы* – это контактные аппараты, реакторы с механическим, пневматическим и струйным перемешиванием, промышленные печи и т. д. От правильности выбора реактора и его совершенства зависит эффективность всего технологического процесса.

В химической технологии применяют всевозможные типы реакторов, имеющие существенные различия [4, 9]. Тем не менее реакторы можно классифицировать по некоторым признакам:

1. В зависимости от фазового состояния реагирующих веществ реакторы могут быть гомогенными или гетерогенными.
2. По характеру операций загрузки и выгрузки различают реакторы периодического, непрерывного и полупериодического действия.
3. По режиму движения реакционной среды или по структуре потоков вещества:
 - реакторы идеального перемешивания;
 - реакторы идеального вытеснения;
 - реакторы с продольным перемешиванием;
 - реакторы с продольным и радиальным перемешиванием;

– реакторы с комбинированной структурой потока.

4. По тепловому режиму реакторы разделяются на изотермические, адиабатические и политропические. Изотермические реакторы имеют одну постоянную температуру во всех точках реакционного пространства. Адиабатический реактор не имеет теплообмена с окружающей средой. Это достигается хорошей тепловой изоляцией. В политропическом реакторе происходит теплообмен с окружающей средой.

5. По конструктивным признакам: ёмкостные, трубчатые, комбинированные.

Приведённая классификация свидетельствует о том, что реальные химические реакторы характеризуются большим числом свойств, поэтому при построении математической модели химического реактора необходимо выделить и учесть наиболее важные свойства, так как учесть одновременно все свойства невозможно.

Математическая модель реактора идеального перемешивания

Математическое описание реактора идеального смешения (рис. 5.1) характеризует изменение концентраций в реакционной среде во времени, которое обусловлено движением потока (гидродинамический фактор) и химическим превращением (кинетический фактор). Поэтому модель реактора идеального перемешивания можно построить на основании типовой модели идеального перемешивания с учётом скорости химической реакции [3,4].

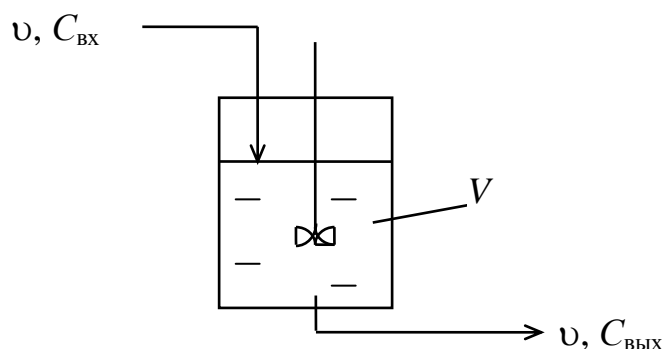


Рис. 5.1. Схема реактора идеального перемешивания

Модель идеального перемешивания представляет идеализированный поток и является теоретической моделью. Согласно этой модели принимается, что поступающий в аппарат поток мгновенно распределяется по всему объёму вследствие полного (идеального) перемешивания

частиц среды. При этом концентрация распределённого вещества во всех точках аппарата и в потоке на выходе из него одинакова:

$$C_{\text{вх}} \rightarrow C = C_{\text{вых}}.$$

Дифференциальное уравнение модели идеального перемешивания будет иметь вид

$$\frac{dc}{dt} = \frac{v}{V} \cdot (C_{\text{вх}} - C), \quad (5.1)$$

где $\tau = \frac{V}{v}$ – время контакта, характеризующее среднее время пребывания частиц в реакторе, с;

V – объём реактора, м³;

v – объёмный расход вещества, м³/ч.

Уравнение (5.1) описывает изменение концентраций вещества в зоне идеального перемешивания за счет движения потока.

Тогда, с учётом кинетического фактора, динамическая модель изотермического реактора идеального перемешивания непрерывного действия будет иметь вид

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{1}{\tau} \cdot (C_{\text{вх}} - C_{\text{вых}}) \pm w_i. \quad (5.2)$$

Такое уравнение записывается по каждому из компонентов, участвующих в реакции. Тогда

C_i – концентрация i -го вещества, кмоль/м³;

w_i – скорость реакций по i -му веществу, кмоль/м³.

Система приведённых уравнений является математической моделью реактора идеального перемешивания с учётом изменения концентрации во времени (динамическая модель).

Например, для реакции $A \xrightarrow{k} B$ уравнение (5.2) можно записать:

$$C_{\text{вх}} = C_{A0}; \quad C_{\text{вых}} = C_A; \quad w_A = -k \cdot C_A;$$

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{\tau_0} \cdot (C_{A0} - C_A) - w_A. \quad (5.3)$$

В установившемся (стационарном) режиме работы реактора $\frac{dC_i}{dt} = 0$, тогда уравнение (5.3) можно записать:

$$\frac{1}{\tau} \cdot (C_{A0} - C_A) = w_A;$$

$$\tau = \frac{C_{A0} - C_A}{w_A}; \quad (5.4)$$

$$x_A = \frac{C_{A0} - C_A}{C_{A0}}.$$

Используя выражения (5.3), (5.4), можно найти основные параметры, характеризующие работу аппарата:

1) τ – время пребывания исходного вещества в реакторе, от величины которого зависит объём аппарата (чем меньше τ , тем меньше V);

2) изменение концентрации реагирующих веществ как функция $f(\tau)$, а, следовательно, рассчитать степень превращения и селективность процесса.

Аналогично уравнению материального баланса реактора идеального перемешивания (5.2) записывается уравнение теплового баланса. Так, для адиабатического реактора получим

$$C_p^{cm} \frac{dT}{dt} = \frac{C_p^{cm}}{\tau} \cdot (T_{вх} - T) + \sum_{j=1}^N (-\Delta H_j) \cdot W_j, \quad (5.5)$$

где W_j – скорость j -й химической реакции, 1/с;

$-\Delta H_j$ – тепловой эффект j -й химической реакции, Дж/моль;

C_p^{cm} – теплоёмкость реакционной смеси, Дж/моль·К;

$T_{вх}$ – температура на входе в реактор, К;

T – текущее значение температуры, К.

Теплоёмкость i -го вещества как функция температуры описывается следующим уравнением:

$$C_{pi} = (a_i + b_i \cdot T + c_i \cdot T^2 + d_i \cdot T^3) \cdot 4,1887. \quad (5.6)$$

Теплоёмкость смеси вычисляется по правилу аддитивности:

$$C_p^{cm} = \sum_{i=1}^N C_{pi} \cdot C_i, \quad (5.7)$$

где C_i – концентрация i -го вещества смеси, мольн. доли.

При этом зависимость константы скорости химической реакции от температуры выражается уравнением Аррениуса

$$k_i = k_{i,0} \cdot e^{E_i/RT}, \quad (5.8)$$

где k_i – константа скорости i -й химической реакции (для реакции первого порядка, с^{-1});

$k_{i,0}$ – предэкспоненциальный множитель, с^{-1} ;

E_i – энергия активации i -й реакции, Дж/моль;

R – универсальная газовая постоянная, $R = 8,314$ Дж/моль·К.

Для того чтобы исследовать динамический режим работы реактора идеального перемешивания, т. е. проследить изменение концентрации реагирующих веществ и температуры во времени на выходе из реактора, необходимо решить систему дифференциальных уравнений материального баланса по каждому из компонентов и уравнение теплового баланса.

Математическая модель реактора идеального вытеснения

Математические модели химических реакторов строятся на основе блочного принципа с использованием типовых гидродинамических моделей, учитывающих движение потоков вещества.

В соответствии с моделью идеального вытеснения принимается поршневое течение без перемешивания вдоль потока при равномерном распределении концентрации вещества в направлении, перпендикулярном движению (рис. 5.2).

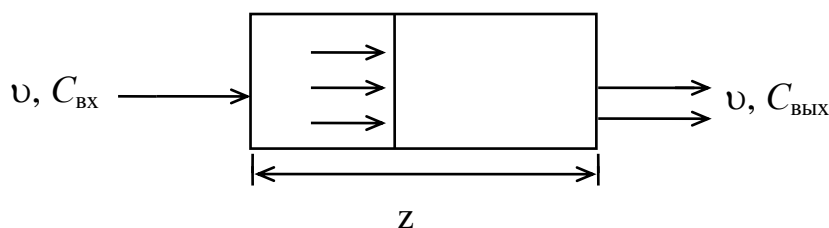


Рис. 5.2. Схема потока идеального вытеснения

Дифференциальное уравнение модели идеального вытеснения имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \cdot \frac{\partial C_i}{\partial l}, \quad (5.9)$$

где C – концентрация вещества, моль/л;

t – время, с;

u – линейная скорость потока, м/с;

l – координата (длина аппарата), м.

Математическая модель идеального вытеснения представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных, так как кон-

центрация изменяется во времени и пространстве. Такая модель называется *моделью с распределёнными параметрами*.

Модели идеального вытеснения в первом приближении соответствуют процессы, происходящие в трубчатых аппаратах, для которых отношение длины трубы к диаметру превышает 20 либо диффузионный критерий Пекле принимает значение ≈ 100 .

Если вместо линейной скорости потока u в уравнение (5.9) подставить значение $u = v/S$, то получим

$$S \frac{dC_i}{dt} = -v \frac{dC_i}{dl}, \quad (5.10)$$

где S – сечение зоны идеального вытеснения, м^2 ;

v – объёмная скорость (расход) вещества, $\text{м}^3/\text{с}$.

Если в математической модели идеального вытеснения учесть источник изменения концентрации за счёт химической реакции W_i , то материальный баланс реактора идеального вытеснения можно записать в виде –

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -u \frac{\partial C_i}{\partial l} \pm W_i, \quad (5.11)$$

где C_i – концентрация соответствующего i -го вещества;

W_i – скорость реакции по i -му веществу.

Уравнение теплового баланса адиабатического реактора идеального вытеснения

$$\rho^{\text{см}} \cdot C_p^{\text{см}} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = -U \cdot \rho^{\text{см}} \cdot C_p^{\text{см}} \cdot \frac{\partial T}{\partial l} + \sum_{j=1}^N \left(\pm \Delta H_j \right) \cdot W_j. \quad (5.12)$$

Следовательно, математическое описание реактора идеального вытеснения характеризует изменение концентрации и температуры в реакционной среде во времени и пространстве, обусловленное движением потока (гидродинамический фактор) и химическим превращением (кинетический фактор).

Уравнение (5.11) записывается по каждому из компонентов, участвующих в реакции. Например, для реакции $A \xrightarrow{k} B$, протекающей в изотермическом реакторе идеального вытеснения, математическая модель (динамический режим) будет иметь вид

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -u \cdot \frac{\partial C_A}{\partial l} - k \cdot C_A; \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = -u \cdot \frac{\partial C_B}{\partial l} + k \cdot C_A.$$

В установившемся (стационарном) режиме работы реактора

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = 0; \quad \frac{\partial C_B}{\partial t} = 0, \quad (5.14)$$

тогда

$$u \frac{dC_A}{dl} = -k \cdot C_A; \quad (5.15)$$

$$u \frac{dC_e}{dl} = k \cdot C_A.$$

Так как $\frac{l}{u} = \tau$, то уравнения (5.15) примут вид

$$\frac{dC_A}{d\tau} = -k \cdot C_A; \quad (5.16)$$

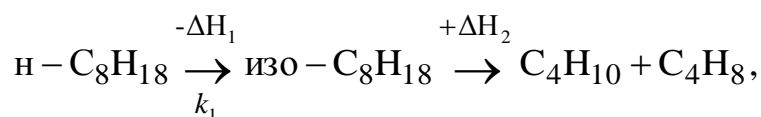
$$\frac{dC_B}{d\tau} = k \cdot C_A,$$

где τ – время пребывания реагентов в зоне реактора (время контакта), с.

Для того чтобы исследовать изменение концентрации реагирующих веществ и температуры в химическом реакторе, необходимо решить систему дифференциальных уравнений (5.11, 5.12).

Исследование химического процесса, протекающего в гомогенном реакторе идеального смешения

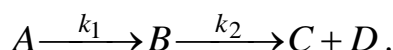
Пусть в реакторе идеального смешения протекает химическая реакция н-октана в и-октан и в продукты крекинга:



где $-\Delta H_1 = -7,03$ Дж/моль при (700 К) – экзотермическая реакция;

$+\Delta H_2 = +85,89$ Дж/моль – эндотермическая реакция

или



Математическая модель процесса, представленного реакциями (5.1), с учетом уравнения (5.2), может быть записана в виде следующей системы уравнений материального и теплового балансов:

$$\begin{aligned}
\frac{dC_A}{dt} &= \frac{1}{\tau} \cdot (C_{A_0} - C_A) - k_1 \cdot C_A; \\
\frac{dC_B}{dt} &= \frac{1}{\tau} (C_{B_0} - C_B) + k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_B; \\
\frac{dC_C}{dt} &= \frac{1}{\tau} (C_{C_0} - C_C) + k_2 \cdot C_B, \quad Q_j = -\Delta H_j; \\
\frac{dC_D}{dt} &= \frac{1}{\tau} (C_{D_0} - C_D) + K_2 \cdot C_B; \\
\frac{dT}{dt} &= \frac{1}{\tau} (T_0 - T) + \frac{(Q_1 \cdot k_1 \cdot C_A + Q_2 \cdot k_2 \cdot C_B) \cdot R' \cdot T / p}{C_p}
\end{aligned} \tag{5.17}$$

с начальными условиями: при $t = 0$ $C_A(0) = C_{A,0}$, $C_B(0) = C_C(0) = C_D(0) = 0$,
где P – давление в реакторе, Мпа;

R' – универсальная газовая постоянная, $R' = 0,00845 \frac{\text{м}^3 \cdot \text{МПа}}{\text{кмоль} \cdot \text{К}}$.

Так как тепловой эффект реакции (Q_i) равен величине энтальпии i -й реакции (ΔH_i) с обратным знаком:

$$Q_i = -\Delta H_i,$$

тогда $Q_1 = 7,03$ Дж/моль, $Q_2 = -85,89$ Дж/моль.

Для решения системы дифференциальных уравнений (5.17) был использован метод Эйлера.

Пример расчёта программ реакторов идеального перемешивания и идеального вытеснения приведён в Приложении Е. Программы использованы для расчёта текущих значений концентраций на выходе из реакторов, а также для исследования влияния времени контакта на выход продуктов реакций.

Данные для расчета тепловых эффектов реакций приведены в табл. 1, Приложение Ж. Расчет тепловых эффектов проводится на основании закона Гесса.

Результаты исследования динамического режима работы реактора идеального перемешивания приведены на рис. 5.3–5.4.

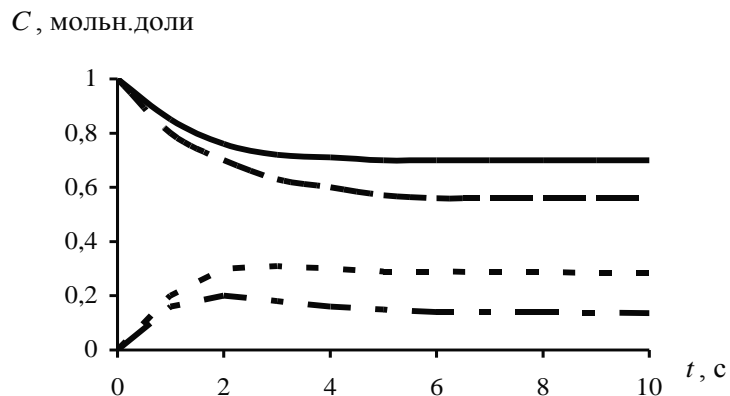


Рис. 5.3. Зависимость концентраций реагирующих веществ от времени:

— н-С8Н18, время контакта 6с. - - - и-С8Н18, время контакта 6с
 — н-С8Н18, время контакта 3с. - - - и-С8Н18, время контакта 3с

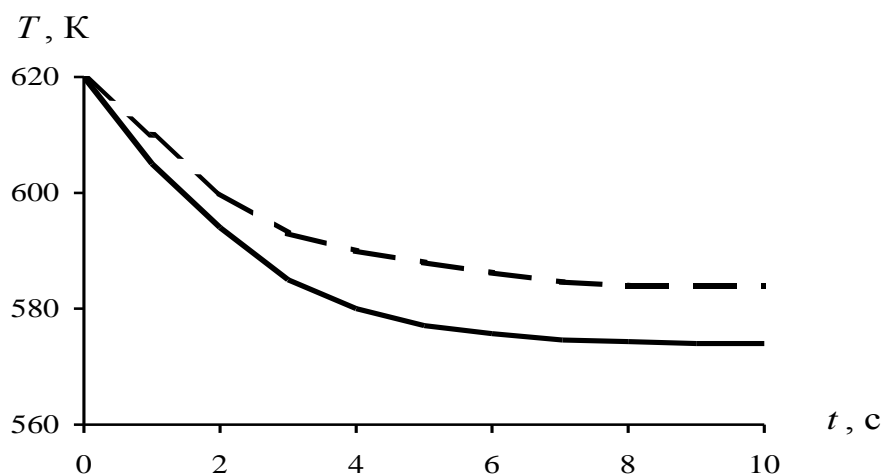


Рис. 5.4. Зависимость изменения температуры от времени:

— время контакта 3с — время контакта 6с

На основании полученных результатов можно судить об изменении концентрации веществ и температуры в реакторе идеального смешения, рассчитать степень превращения компонентов.

Результаты расчётов необходимо представить в графическом виде.

Исследование химического процесса, протекающего в реакторе идеального вытеснения в стационарном режиме

Исследование закономерностей протекания химической реакции в реакторе идеального вытеснения методом математического моделирования заключается в определении концентраций реагирующих веществ на выходе из реактора и температуры потока в зависимости от времени контакта.

Пусть в реакторе идеального вытеснения (РИВ) протекает химическая реакция



Так как в реакторе вытеснения состав реагентов и температура потока изменяются по длине (или времени контакта) аппарата, процесс в нём описывается системой дифференциальных уравнений (5.11, 5.12).

Тогда математическая модель химического процесса может быть записана в виде следующей системы уравнений материального и теплового балансов (режим работы реактора – стационарный):

$$\begin{aligned} \frac{dC_A}{d\tau} &= -k_1 \cdot C_A; \\ \frac{dC_B}{d\tau} &= k_1 \cdot C_A - k_2 \cdot C_B; \\ \frac{dC_C}{d\tau} &= k_2 \cdot C_B; \\ \frac{dC_D}{d\tau} &= k_2 \cdot C_B; \\ \frac{dT}{d\tau} &= \frac{(Q_1 \cdot k_1 \cdot C_A - Q_2 \cdot k_2 \cdot C_B) \cdot R' \cdot T / p}{C_p}, \end{aligned} \quad (5.19)$$

где k_1, k_2 – константы скоростей реакций;

C_A, C_B, C_C, C_D – концентрации компонентов, кмоль/м³.

Значения тепловых эффектов реакций и теплоёмкость смеси рассчитываем с использованием справочных данных [8].

Систему дифференциальных уравнений (5.19) решим с использованием метода Эйлера.

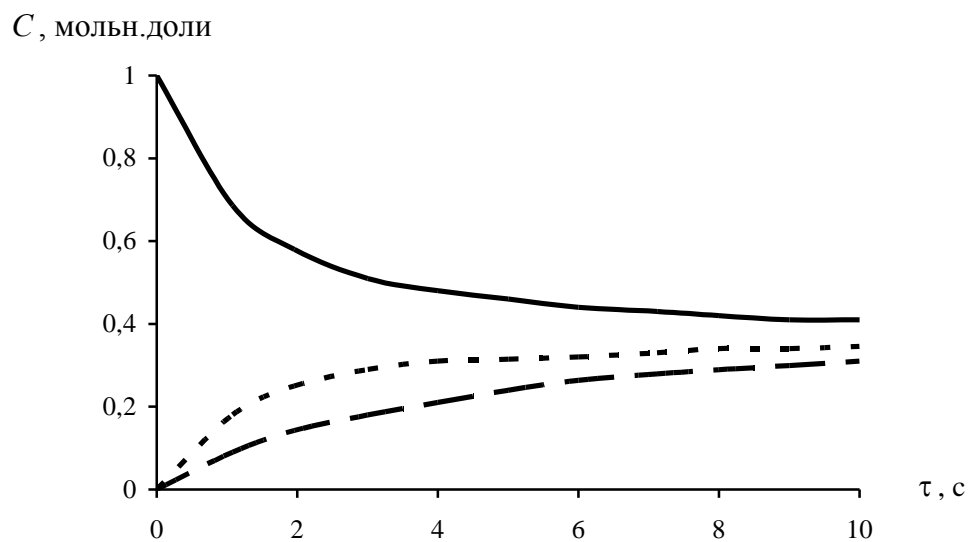


Рис. 5.5. Изменение концентрации компонентов в реакторе идеального вытеснения от времени контакта:

--- $i\text{-C}_8\text{H}_{18}$ — $n\text{-C}_8\text{H}_{18}$ - · - $\text{C}_4\text{H}_{10}, \text{C}_4\text{H}_8$



Рис. 5.6. Зависимость изменения температуры в реакторе идеального вытеснения от времени контакта

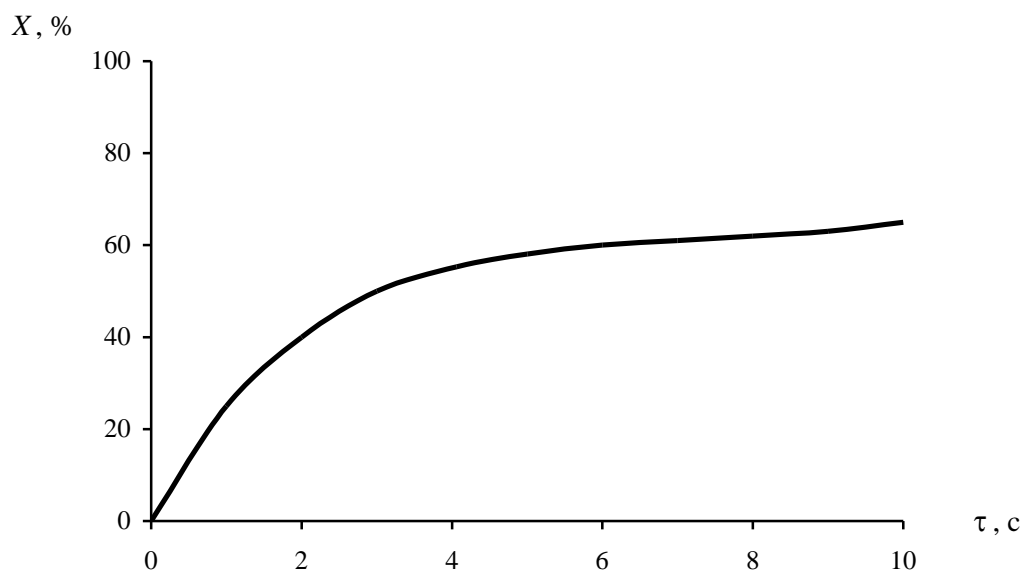


Рис. 5.7. Зависимость степени превращения от времени контакта

Варианты заданий

Таблица 5.1

№ п/п	Тип реакции	Исходная концентрация, кмоль/м ³	Константы скорости	Энергии активации, кДж/моль	Температура, К
1	$\begin{array}{c} C_8H_{18} \xrightarrow{k_1} i-C_8H_{18} \xrightarrow{k_2} \\ \xrightarrow{k_2} C_4H_{10} + C_4H_8 \end{array}$	$C_{C_8H_{18}} = 0,0388$	$k_1=0,12;$ $k_2=0,80$	$E_1=94,2;$ $E_2=81,2$	610
2	$\begin{array}{c} n-C_7H_{16} \xrightarrow{k_1} C_3H_6 + C_4H_{10} \\ \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \downarrow k_2 \\ \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad i-C_4H_{10} \end{array}$	$C_{n-C_7H_{16}} = 0,0343$	$k_1=0,18;$ $k_2=0,29$	$E_1=95,11;$ $E_2=122,76$	690
3	$\begin{array}{c} 2C_2H_4 \xrightarrow{k_1} C_4H_8 \\ \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \downarrow \uparrow k_2 \quad k_3 \\ \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad \qquad i-C_4H_8 \end{array}$	$C_{C_2H_4} = 0,0296$	$k_1=0,38;$ $k_2=0,14;$ $k_3=0,11$	$E_1=59,48;$ $E_2=162,57;$ $E_3=157,12$	800
4	$C_2H_6 + C_4H_{10} \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} 2C_3H_8$	$C_{C_2H_6} = 0,0175;$ $C_{C_4H_{10}} = 0,0117$	$k_1=0,54;$ $k_2=0,12$	$E_1=96,14;$ $E_2=83,60$	810

Продолжение табл. 5.1

5	$\begin{array}{c} \text{C}_5\text{H}_{10} + \text{H}_2 \xrightarrow{k_1} \text{C}_5\text{H}_{12} \\ \downarrow k_2 \\ \text{i-C}_5\text{H}_{12} \end{array}$	$\text{C}_{\text{C}_5\text{H}_{10}}=0,0166;$ $\text{C}_{\text{H}_2}=0,0166$	$k_1=0,5;$ $k_2=0,2$	$E_1=101,21;$ $E_2=115,05$	710
6	$\begin{array}{c} \text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_1} \text{2-метилпентан} \\ \downarrow k_2 \\ \text{2,3-диметилбутан} \end{array}$	$\text{C}_{\text{C}_6\text{H}_{14}}=0,0338$	$k_1=0,4;$ $k_2=0,2$	$E_1=75,13;$ $E_2=94,18$	700
7	$\begin{array}{c} \text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_1} \text{2-метилпентан} \\ \searrow k_2 \\ \text{2,3-диметилбутан} \end{array}$	$\text{C}_{\text{C}_6\text{H}_{14}}=0,0394$	$k_1=0,2;$ $k_2=0,4$	$E_1=95,31;$ $E_2=76,17$	600
8	$\begin{array}{c} \text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_1} \text{2-метилпентан} \\ \downarrow k_2 \uparrow k_3 \\ \text{2,3-диметилбутан} \end{array}$	$\text{C}_{\text{C}_6\text{H}_{14}}=0,0328$	$k_1=0,3;$ $k_2=0,2;$ $k_3=0,1$	$E_1=79,64;$ $E_2=83,23;$ $E_3=107,11$	720
9	$\begin{array}{c} \text{C}_6\text{H}_{14} \xrightleftharpoons[k_3]{k_1} \text{2-метилпентан} \\ \searrow k_2 \\ \text{2,3-диметилбутан} \end{array}$	$\text{C}_{\text{C}_6\text{H}_{14}}=0,0358$	$k_1=0,25;$ $k_2=0,10;$ $k_3=0,25$	$E_1=87,23;$ $E_2=104,75;$ $E_3=78,61$	660
10	$\begin{array}{c} \text{C}_8\text{H}_{18} \xrightarrow{k_1} \text{i-C}_8\text{H}_{18} \xrightarrow{k_2} \\ \downarrow k_2 \\ \text{C}_4\text{H}_{10} + \text{C}_4\text{H}_8 \end{array}$	$\text{C}_{\text{C}_8\text{H}_{18}} = 0,036$	$k_1=0,12;$ $k_2=0,80$	$E_1=94,2;$ $E_2=81,2$	620
11	$\begin{array}{c} \text{H-C}_7\text{H}_{16} \xrightarrow{k_1} \text{C}_3\text{H}_6 + \text{C}_4\text{H}_{10} \\ \downarrow k_2 \\ \text{i-C}_4\text{H}_{10} \end{array}$	$\text{C}_{\text{C}_7\text{H}_{16}}=0,028$	$k_1=0,18;$ $k_2=0,29$	$E_1=95,11;$ $E_2=122,76$	650
12	$\begin{array}{c} 2\text{C}_2\text{H}_4 \xrightarrow{k_1} \text{C}_4\text{H}_8 \\ \downarrow k_2 \uparrow k_3 \\ \text{i-C}_4\text{H}_8 \end{array}$	$\text{C}_{\text{C}_2\text{H}_4} = 0,0316$	$k_1=0,38;$ $k_2=0,14;$ $k_3=0,11$	$E_1=59,48;$ $E_2=162,57;$ $E_3=157,12$	760
13	$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{C}_4\text{H}_{10} \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} 2\text{C}_3\text{H}_8$	$\text{C}_{\text{C}_2\text{H}_6}=0,016;$ $\text{C}_{\text{C}_4\text{H}_{10}}=0,016$	$k_1=0,54;$ $k_2=0,12$	$E_1=96,14;$ $E_2=83,60$	790

Окончание табл. 5.1

14	$\begin{array}{c} \text{C}_5\text{H}_{10} + \text{H}_2 \xrightarrow{k_1} \text{C}_5\text{H}_{12} \\ \quad \quad \quad \downarrow k_2 \\ \quad \quad \quad \text{i- C}_5\text{H}_{12} \end{array}$	$\text{C}_{\text{C}_5\text{H}_{10}}=0,017;$ $\text{C}_{\text{H}_2}=0,014$	$k_1=0,5;$ $k_2=0,2$	$E_1=101,21;$ $E_2=115,05$	710
15	$\begin{array}{c} \text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_1} \text{2-метилпентан} \\ \quad \quad \quad \downarrow k_2 \\ \quad \quad \quad \text{2,3-диметилбутан} \end{array}$	$\text{C}_{\text{C}_6\text{H}_{14}}=0,0286$	$k_1=0,4;$ $k_2=0,2$	$E_1=75,13;$ $E_2=94,18$	680
16	$\begin{array}{c} \text{C}_6\text{H}_{14} \xrightarrow{k_1} \text{2-метилпентан} \\ \quad \quad \quad \searrow k_2 \\ \quad \quad \quad \text{2,3-диметилбутан} \end{array}$	$\text{C}_{\text{C}_6\text{H}_{14}}=0,0283$	$k_1=0,2;$ $k_2=0,4$	$E_1=95,31;$ $E_2=76,17$	580

Коэффициенты a_i , b_i , c_i , d_i для расчета теплоемкостей компонентов и термодинамические функции индивидуальных углеводородов приведены в табл. 4, Приложение Ж.

Порядок выполнения работы

1. В соответствии с заданием составить математическое описание химического реактора.
2. Разработать алгоритм и программу расчёта.
3. Провести расчёты изменения концентраций веществ, температуры, степени превращения от времени и времени контакта.
4. Полученные результаты оформить в виде таблиц и графиков.
5. Составить отчёт о проделанной работе.

Содержание отчета

1. Представить математическую модель реактора со всеми параметрами, алгоритм и описание программы.
2. Обосновать выбор численного метода решения математической модели.
3. Представить таблицы и графики, обсуждение результатов, сделать выводы по проделанной работе.

Контрольные вопросы и задания

1. Какие основные типы химических реакторов вы знаете?
2. Поясните причины многообразия классификаций химических реакторов.

3. Какие математические модели химических реакторов вы можете назвать?
4. Какие составляющие входят в математическую модель гомогенного химического реактора?
5. В чем отличие уравнений теплового баланса адиабатического и политропического реакторов?
6. Дайте определение времени контакта и напишите расчетную формулу.
7. Что такое стационарный и динамический режимы работы химического реактора?
8. Какие параметры влияют на продолжительность выхода реактора на стационарный режим?
9. Какие численные методы можно применить, если математическая модель химического реактора представляет собой систему дифференциальных уравнений первого порядка?
10. Приведите примеры гомогенных химических промышленных процессов.