Математическая модель отображает кинетику процесса полимеризации изопрена с учетом побочной реакции олигомеризации.

В модели учитывается тепловыделение и перемешивание среды. На основании данных в аналитическом обзоре, где рассматривается статический режим работы реактора, разработана ММ динамики процесса, проводимого в двух реакторах.

При разработке математической модели приняты следующие допущения:

– принята модель идеального смешения,

– используется два реактора,

– принята средняя температура в реакторе, Тср и средняя концентрация мономера, полимера и димера в аппарате, $m_{\text{ср}}$, $p_{\text{ср}}$ и $d_{\text{ср}}$ соответственно.

Математическая модель программного комплекса отображает кинетику процесса полимеризации изопрена с учетом побочной реакции олигомеризации. В модели учитываются тепловыделение и перемешивание среды.

В модели учитывается, что температура распределена по высоте реактора, а значит и вязкость по Муни и концентрация полимера, зависящие от температуры различны в разных точках реактора. Для того, чтобы воспользоваться моделью идеального смешения, в выражениях для скорости реакции полимеризации ri и величины внешнего теплосъема Qi введены среднеинтегральные значения температуры Tiср, концентрации полимера рср и мономера miср.

Зависимости среднеинтегральных значений T_i^{cp} (1) и m_i^{cp} (2) от расхода реакционной смеси G были найдены с помощью диффузионной модели в виде:

$$T_i^{\text{ср}} = \frac{T_i + A_i T_{i-1}}{1 + A_i} \ , \tag{1}$$

$$m_i^{\text{ср}} = \frac{m_i + A_i m_{i-1}}{1 + A_i} \ , \tag{2}$$

где i – номер аппарата, i=1,2.

Модель включает расчет скоростей реакций полимеризации r_i (3) и образования димеров r_{di} (6), материального баланса по компонентам (7-10), температуры (11) и показателей качества продукта (12-15).

$$r_i = k \cdot n_0 \cdot \sqrt{m_i^{\text{ср}}} exp\left(\frac{-E}{R \cdot T_i^{\text{ср}}}\right) \ , \tag{3}$$

где n_0 – условная концентрация активных центров.

$$n_0 = \begin{cases} \frac{\alpha G_k}{G-\beta} \ , & \frac{\alpha G_k}{G} > \beta \ , \\ 0 \ , & \frac{\alpha G_k}{G} \leq \beta \ . \end{cases} \ , \tag{4}$$

$$k_i = k_i \cdot exp\left\{-\left[k_1 \cdot \left(m_0 - m_i^{\text{ср}}\right)\right]^{k_2}\right\} \ , \tag{5}$$

$$r_{di} = \frac{G_k}{G} \cdot (k_{d1} \cdot h_i + k_{d2}) \cdot m_i^{\text{ср}} \cdot exp\left(-\frac{E_d}{R \cdot T_i^{\text{ср}}}\right), \tag{6}$$

Уравнения материального баланса мономера m_i^{cp} (7), полимера p_i^{cp} (8), димера d_i^{cp} (9), водорода h_i (10):

$$\frac{dm_i^{\text{ср}}}{dt} = \frac{G}{V \cdot \rho} \cdot \left(m_{i-1} - m_i^{\text{ср}}\right) - r_i \ , \tag{7}$$

$$\frac{dp_i^{\text{ср}}}{dt} = \frac{G}{V \cdot \rho} \cdot \left(p_{i-1} - p_i^{\text{ср}}\right) + r_i \ , \tag{8}$$

$$\frac{dd_i^{\text{ср}}}{dt} = \frac{G}{V \cdot \rho} \cdot \left(d_{i-1} - d_i^{\text{ср}}\right) + r_{di} \ , \tag{9}$$

$$\frac{dh_i}{dt} = \frac{G}{V \cdot \rho} \cdot (h_{i-1} - h_i) - k_h \cdot h_i \ , \tag{10}$$

Уравнение теплового баланса:

$$\frac{dT_i^{\text{ср}}}{dt} = \frac{G}{V \cdot \rho} \cdot \left(T_{i-1} - T_i^{\text{ср}}\right) + \frac{q \cdot r_i}{c_p \cdot \rho} - \frac{u \cdot S \cdot \left(T_i^{\text{ср}} - T_{\text{хл}}\right)}{C_p \cdot V} \ , \tag{11}$$

Расчет показателей качества: вязкость по Муни Vm (12-13), пластичность по Карреру Pl (14), потери массы Pm (15).

$$Vm_i = \lambda \cdot \left(m_i^{\text{ср}}\right)^{\gamma} \cdot exp\left(\frac{H}{T_i^{\text{ср}}}\right) \ , \tag{12}$$

где

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{1+k_h \cdot h + k_\psi \cdot \psi_0 + k_g \cdot g_k} \ , \tag{13}$$

$$Pl_i = \frac{P_0}{V \cdot m_i^{\text{ср}}} \cdot exp\left(-\frac{B}{T_i^{\text{ср}}}\right) \ , \tag{14}$$

$$Pm_i = \frac{0.1 \cdot d_i}{m_i^{\text{ср}}} + f \ , \tag{15}$$

Для решения дифференциальных уравнений материального и теплового баланса используется метод Рунге-Кутта, основным достоинством которого является повышенная точность вычислений.

Последовательность вычислений по методу Рунге-Кутта:

1) Разбиваем временной интервал [0, t] на n равных частей точками

$$t_i = t_0 + ih \ (i = 1,2..n) \ ,$$

где $h = \frac{t}{n}$;

$t_0 = 0$;

$t_n = t$.

2) Находим для каждого i $(i = 1,2..n)$ значения:

$$k_1^{(i)} = hf(t_i, y_i) \ ,$$

$$k_2^{(i)} = hf\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_1^{(i)}}{2}\right) \ ,$$

$$k_3^{(i)} = hf\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_2^{(i)}}{2}\right) \ ,$$

$$k_4^{(i)} = hf\left(t_i + h, y_i + k_3^{(i)}\right) \ .$$

3) Вычисляем:

$$\Delta y_i = \frac{1}{6}\left(k_1^{(i)} + 2k_2^{(i)} + 2k_3^{(i)} + k_4^{(i)}\right)$$

Определяем последовательные значения y_i $(i = 1,2..n)$ искомой функции $y = y(x)$:

$$y_{i+1} = y_i + \Delta y_i$$

Блок-схема алгоритма решения математической модели представлена на рисунке 1.

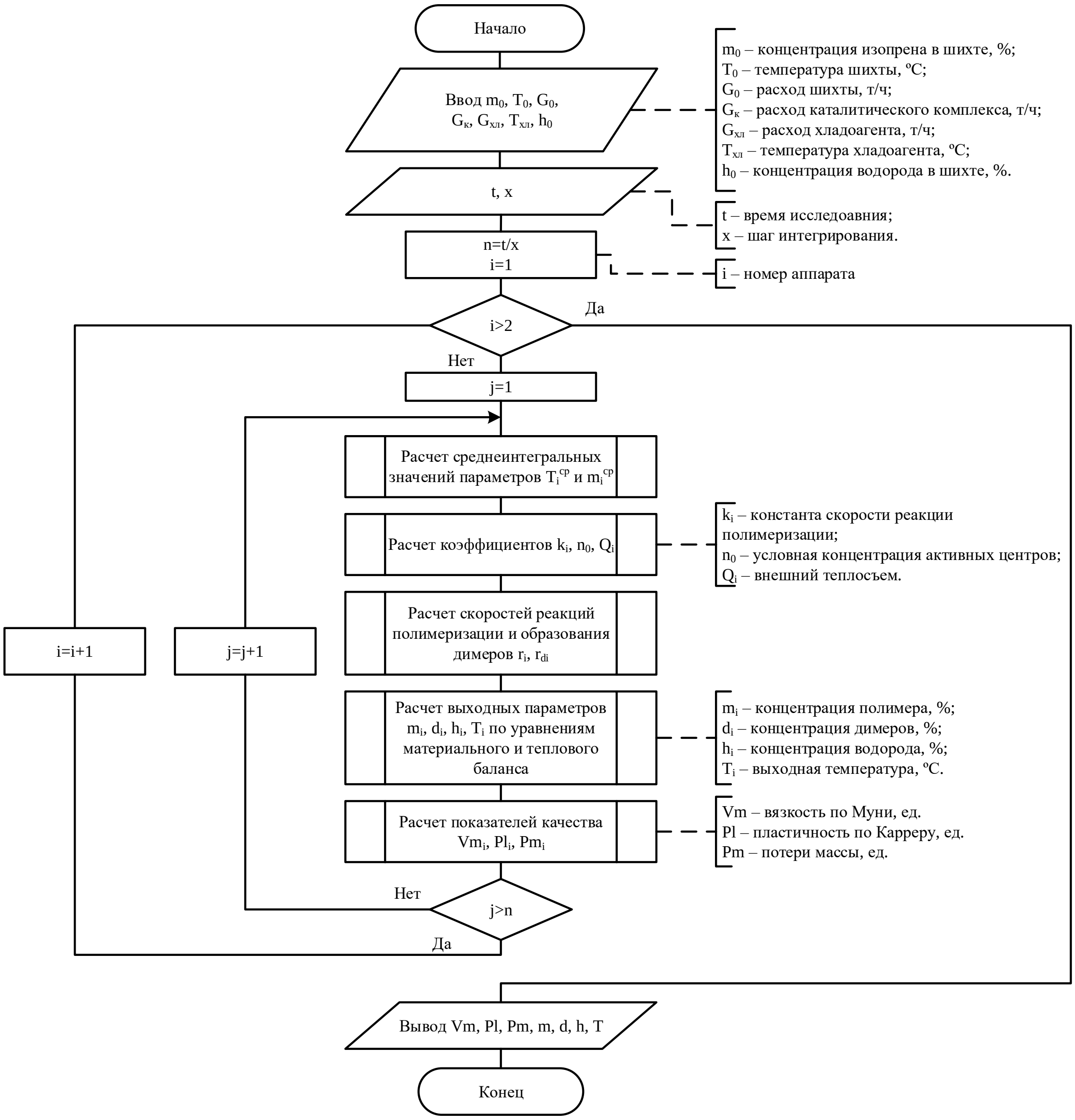

Рисунок 1 – Блок-схема алгоритма решения математической модели