

**Мы пока работаем только с каскадом из пяти реакторов, но вообще-то их количество изменяется от 1 до 5**

**Шкала ротаметра:**

Может быть, сделать так, чтобы при его передвижении появлялся расход соответствующий положению курсора и существующим данным (30, 40...). Потому что если делать полную шкалу, то будет очень мелко. Либо нужно, чтобы шкала как-то появлялась и потом пропадала.

**Дополнительные данные в таблице:**

Можно, например, выводить абсолютное отклонение электропроводности между соседними экспериментальными точками или с электропроводностью воды (в этом больше смысла), а также концентрацию трасера (см. ниже).

**Дополнительные пункты меню:**

Если из файла не загружать данные, а делать опыт, то можно выбирать тип реактора для того, чтобы открывалась мнемосхема:

Reactor type ->

Continuous stirred tank reactor (CSTR)

Caskade reactor system -> 2 Reaktors

3 Reaktors

4 Reaktors

5 Reaktors

Tubular reactor ->  $L/d < 50$

$L/d < 50$ , packed bed

$L/d > 50$

Analysis ->

Parameter calculation

Model adequacy

## Optimization

Models ->

Cell model

Diffusion model

Laminar flow model

Exercises ->

Exercise 1

Exercise 2

Сейчас на графиках отображается реальное время и реальная концентрация. Может быть, сделать еще одну закладку, на которой график показывался бы для безразмерной концентрации и безразмерного времени. Или же делать это переключение после окончания эксперимента, при обработке данных.

Также было бы интересно строить суммарную функцию отклика  $F(\theta)$ .

### **Расчет концентрации трассера (индикатора):**

Из данных, сначала нужно выделять диапазон данных, т.е. данные с момента времени инициализации трассера в реактор (выключения шунта) ( $t=t_0=0$ ) и до полного его выхода из реактора ( $t=t_{\text{конечное}}$ ). Конечный момент времени характеризуется тем, что значения электропроводности снова возвращаются на начальное значение, т.е. измеряется электропроводности воды.

После этого необходимо пересчитать электропроводность в концентрацию по калибровочной функции.

*Алгоритм расчета:*

1) Рассчитываются концентрации трассера  $C_1$  и  $C_2$  в реакторе в начальный момент времени  $t=0$  и в конечный момент времени  $t=t_{\text{конечное}}$  по калибровочной функции:

$$C_1 = 2,3480623E-18x^5 - 1,3123250E-14x^4 + 2,7014011E-11x^3 - 2,4703301E-08x^2 + 1,7735139E-05x,$$

$$C_2 = 2,3480623E-18x^5 - 1,3123250E-14x^4 + 2,7014011E-11x^3 - 2,4703301E-08x^2 + 1,7735139E-05x$$

где  $\kappa$  – электропроводность в момент времени  $t=0$  (для  $C_1$ ) или  $t=t_{\text{конечное}}$  в конечный момент времени (для  $C_2$ ).

2) Так как измерение происходит раз в секунду, то можно узнать скорость изменения концентрации трассера за данную единицу времени:

$$R = (C_1 - C_2) / t_{\text{конечное}}$$

3) Рассчитывается концентрация трассера для каждого момента времени на основе известного значения электропроводности (при правильном расчете она должна быть равна 0 при  $t=0$  и при  $t=t_{\text{конечное}}$ ):

$$C_{4i} = 2,3480623E-18x_i^5 - 1,3123250E-14x_i^4 + 2,7014011E-11x_i^3 - 2,4703301E-08x_i^2 + 1,7735139E-05x_i - C_1 - t_i * R$$

где  $x_i$  – электропроводность в момент времени  $t_i$ .

### **Три метода расчета по ячеечной модели (комментарии):**

#### **1 метод:**

Расчет количества ячеек из числа Пекле (диффузионная модель). Нам не подходит, потому что у нас количество ячеек для каскада будет около 5 всегда, а этот метод расчета можно использовать при большом значении количества ячеек, т.е. для трубчатого реактора.

#### **2 метод:**

Общая функция отклика ячеечной модели для  $N$  ячеек:

$$C_{\text{инд},N} = C_{\text{инд},H} \left( \frac{t}{\bar{t}} \right)^{N-1} \frac{1}{(N-1)!} e^{\left( -\frac{t}{\bar{t}} \right)}$$

где  $C_{\text{инд},H}$  – начальная концентрация индикатора, моль/л,

$C_{\text{инд},N}$  – концентрация индикатора на выходе из каскада, моль/л,

$N$  – количество ячеек.

После ввода безразмерной концентрации  $C(\theta) = C_{\text{инд},H} / C_{\text{инд},N}$ , и безразмерного времени:  $\theta = \frac{t}{\bar{t}}$ .

$$C(\theta) = \frac{N^N e^{N-1}}{(N-1)!} e^{-N\theta} \quad (1)$$

Тогда сначала необходимо провести сглаживание экспериментального графика и для определения числа ячеек в модели минимизировать сумму квадрата отклонения расчетных концентраций от экспериментальных.

### 3 метод:

Сначала рассчитывают среднее время пребывания индикатора в потоке:

$$\bar{t} = \frac{\int_0^{\infty} t \cdot C_{\text{инд}}(t) dt}{\int_0^{\infty} C_{\text{инд}}(t) dt}$$

Переход к нормированной С-кривой:

$$C(t) = \frac{C_{\text{инд}}(t)}{\int_0^{\infty} C_{\text{инд}}(t) dt}$$

Начальный размерный момент второго порядка:

$$M_2^t = \int_0^{\infty} t^2 C(t) dt$$

Безразмерная дисперсия С-кривой:

$$\sigma_{\theta}^2 = \frac{M_2^t}{\bar{t}} - 1$$

Тогда количество ячеек:

$$N = \frac{1}{\sigma_{\theta}^2}$$

### Проверка адекватности ячейечной модели:

Мне кажется, для учебных целей целесообразно проводить проверку адекватности. Особенно интересно будет, если будут разные реакторы и разные модели. См. предложенный пункт меню.

- 1) Расчет по формуле 1 с найденным числом ячеек N.
- 2) Расчет среднего значения безразмерной кривой отклика  $C(\theta)$ :

$$\bar{C}(\theta) = \frac{C(\theta)_j}{n}$$

где  $C(\theta)_j$  - каждая экспериментальная точка,  
 $n$  – общее количество экспериментальных точек.

3) Дисперсия относительно среднего:

$$S_{\text{ср}}^2 = \frac{\sum_{j=1}^n (C(\theta)_j - \bar{C}(\theta))^2}{f_{\text{ср}}}$$

$$f_{\text{ср}} = n - 1$$

4) Дисперсия адекватности:

$$S_{\text{ад}}^2 = \frac{\sum_{j=1}^n (C_j - C_{j,\text{модель}})^2}{f_{\text{ад}}}$$

$$f_{\text{ад}} = n - 1$$

5) F-отношение:

$$F = \frac{S_{\text{ср}}^2}{S_{\text{ад}}^2}$$

Если  $F$  больше табличного значения критерия Фишера при  $f_{\text{ср}}$  и  $f_{\text{ад}}$  и выбранной степени значимости  $\alpha$  (можно делать при разных, например при 1% и 5%), значит, дисперсия относительно среднего значительно отличается от дисперсии адекватности и модель адекватна.

#### **Что должна выводить программа**

Тип реактора	KIK
Количество реакторов в каскаде	-
Температура	°C
Объем реактора	л
Объемный расход	л/с
Время пребывания, $\tau$	с
Среднее время пребывания, $\bar{t}$	с
Абсолютное отклонение	с
Относительное отклонение	%

Стандартное отклонение	c
Начальный размерный момент второго порядка, $M_2^t$ (можно в принципе все моменты выводить, хотя мы их не используем)	
Безразмерная дисперсия C-кривой,	$c^2$
Адекватность модели	да/нет
Теоретическое количество ячеек, N	-
$\alpha$	%
$F$	-
$Re^*$	-
$Pe^*$	-
Тип течения*	Ламинатное/турбулентное/переходный режим

\*Не выводится для каскада