Математическое моделирование кинетической схемы многокомпонентной реакции

МГУ – ППИ в Шэньчжэне

Факультет вычислительной математики и кибернетики

Ван Кайчжэн

Научные руководители:

к.ф-м.н., доцент Семендяева Н.Л.

к.ф-м.н. Арутюнов А.В.

В работе проводится математическое моделирование химических превращений, протекающих в соответствии с кинетической схемой А.Н. Ивановой. Эта кинетическая схема является новой и до сих пор не рассмотрена в литературе.

Задача рассматривается в двух постановках, соответствующих протеканию реакций в замкнутой и открытой системах. Во втором случае рассматривается изотермический реактор идеального смешения непрерывного действия.

Целью работы является построение математических моделей для замкнутой и открытой реакционных систем и исследование их свойств.

Рассмотрим первую постановку. Предполагается, что система, в которой происходят химические превращения, является замкнутой. Дополнительно предположим, что реакция протекает в условиях идеального перемешивания.

При данных предположениях изменение концентраций реагирующих веществ описывается системой трёх обыкновенных дифференциальных уравнений. Эта система дополняется уравнением баланса массы.

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = -\alpha XY + \gamma XZ \\ \frac{dY}{dt} = \alpha XY - \beta YZ \\ \frac{dZ}{dt} = -\gamma XZ + \beta YZ \end{cases}$$

Здесь α, β, γ – безразмерные скорости первой, второй и третьей стадий кинетической схемы А.Н. Ивановой, соответственно.

Для полученной системы дифференциальных уравнений ставится задача Коши с начальными условиями, также удовлетворяющими уравнению баланса массы.

Во второй постановке задачи предполагается, что реакция протекает в изотермическом реакторе идеального смешения непрерывного действия. При данном предположении изменение концентраций реагирующих веществ описывается системой трёх обыкновенных дифференциальных уравнений, в которых появляются дополнительные слагаемые, описывающие подачу реагентов вреактор.

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = -\alpha XY + \gamma XZ + K(x_0 - X) \\ \frac{dY}{dt} = \alpha XY - \beta YZ + K(y_0 - Y) \\ \frac{dZ}{dt} = -\gamma XZ + \beta YZ + K(z_0 - Z) \end{cases}$$

Здесь K – безразмерная скорость подачи реагирующей смеси в реактор; x0,y0, z0 – концентрации реагентов на входе в реактор.

Эта система также дополняется уравнением баланса массы. Для полученной системы дифференциальных уравнений ставится задача Коши с начальными условиями, также удовлетворяющими уравнению баланса массы.