

Кафедра информатики и компьютерного проектирования Моделирование химико-технологических процессов

Лекторы:

1. Советин Филипп Сергеевич, кандидат технических наук, доцент;
2. Шумакова Ольга Петровна, кандидат технических наук, доцент;
3. Новикова Дина Константиновна, кандидат химических наук, доцент;
4. Царёва Елена Владимировна, кандидат технических наук, доцент.

Лекция № 8

Построение теоретических физико-химических моделей химико-технологических процессов

Представление ХТП для построения математических моделей



Объект = «черный ящик» или «black box» - эмпирическая модель

Объект $\neq$ «черный ящик» или «black box» - физико-химическая модель

$$\bar{y} = \bar{f}(\bar{x})$$

Принципы построения теоретических физико-химических моделей

Последовательные этапы

- Изучается теория процесса
- Составляется система уравнения математического описания (МО)
- Выбирается алгоритм решения системы уравнений МО, т.н. моделирующий алгоритм (МА)
- МА реализуется на компьютере и получается математическая модель (ММ)
- Проверяется адекватность модели путем сравнения расчетных результатов с экспериментальными
- В случае отсутствия адекватности модели решается задача идентификации

При построении теоретической физико-химической модели ХТП на основании знания механизмов протекающих процессов:

- Составляется система уравнений математического описания (**МО**)
- Разрабатывается или выбирается алгоритм решения системы уравнений математического описания, т.н. моделирующий алгоритм (**МА**)
- Моделирующий алгоритм решения уравнений математического описания реализуется на компьютере в виде расчетного модуля технологического процесса в конкретном аппарате

В результате получается математическая модель ХТП, реализованная на компьютере, которая в случае ее адекватности используется для исследования реального производства.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ХТП

Химико-технологические процессы обычно протекают в движущихся потоках фаз, гидродинамические закономерности перемещения которых оказывают влияние на эффективность химических производств.

Выбор конструкций аппаратов химической технологии во многом связан с необходимостью обеспечения требуемых гидродинамических условий проведения процессов.

Поэтому основу уравнений МО ХТП составляют балансовые уравнения для потоков вещества (массы), теплоты (энтальпии) и импульса (количества движения), записанные с учётом гидродинамических закономерностей их движения.

Применяются так называемые *комбинированные гидродинамические модели* движения потоков. Они представляют собой комбинации описаний зон аппаратов с более простыми гидродинамическими моделями движения потоков, в частности, комбинации моделей *идеального смешения, идеального вытеснения* и *однопараметрической диффузионной модели*.

Основная особенность простых моделей состоит в том, что они содержат минимальное число параметров:

- модель идеального смешения – объём;
- модель идеального вытеснения – объём и длину;
- однопараметрическая диффузионная модель – объём, длину и коэффициент продольного перемешивания.

Общий принцип составления балансовых уравнений для идеальных гидродинамических моделей движущихся потоков

Скорость накопления количества массы, вещества, энтальпии (тепла) или импульса в единице объёма

=

Поток массы, вещества, энтальпии (тепла) или импульса, поступающий в единицу объёма

—

Поток массы, вещества, энтальпии (тепла) или импульса, отводимый из единицы объёма

+

Суммарная интенсивность источников (стоков) массы, вещества, энтальпии (тепла) или импульса за счёт различных физико-химических процессов в рассматриваемой зоне, включая дополнительный подвод (отвод) указанных потоков от (к) внешних источников в единице объёма

В общем случае балансовые уравнения гидродинамики записывают отдельно для

- массы;
- веществ (компонентов) многокомпонентной смеси;
- теплоты (энтальпии);
- импульса

и распространяют на всю движущуюся систему с учётом её полного объёма и длины

Поток массы - это общая масса многокомпонентной смеси, протекающая в единицу времени в рассматриваемой системе.

Поток вещества (компонента) является частным случаем потока массы. Термин относится только к массе выбранного i -го компонента.

Поток теплоты или энтальпии - это поступающее (отводимое) в единицу времени в (от) систему (системы) количество теплоты (энтальпии), отнесённое к стандартному состоянию.

Поток импульса (количества движения) характеризуется значением подводимого (отводимого) в единицу времени к (от) системе импульса. Используется редко.

УРАВНЕНИЯ БАЛАНСОВ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Класс уравнений	Вид модели	С сосредоточ. параметрами	С распределенными параметрами	
		Модель идеального смешения	Модель идеального вытеснения	Однопараметрическая диффузионная модель
Покомпонент. баланса	Динам.	$\frac{d(V^R x_i)}{dt} = v^{(0)} x_i^{(0)} - vx_i + G_i^{\Sigma}$ $i = 1, \dots, n$	$\left(\frac{1}{L}\right) \frac{\partial(V^R x_i)}{\partial t} = -\frac{\partial(vx_i)}{\partial \ell} + G_{i(\ell)}^{\Sigma}$ $i = 1, \dots, n$	$\left(\frac{1}{L}\right) \frac{\partial(V^R x_i)}{\partial t} = \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R x_i)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial(vx_i)}{\partial \ell} + G_{i(\ell)}^{\Sigma}$ $i = 1, \dots, n$
	Статич.	$v^{(0)} x_i^{(0)} - vx_i + G_i^{\Sigma} = 0$ $i = 1, \dots, n$	$\frac{d(vx_i)}{d\ell} = G_{i(\ell)}^{\Sigma}$ $i = 1, \dots, n$	$\frac{D}{L} \frac{d^2(V^R x_i)}{d\ell^2} - \frac{d(vx_i)}{d\ell} + G_{i(\ell)}^{\Sigma} = 0$ $i = 1, \dots, n$
Общего баланса массы	Динам.	$\frac{dV^R}{dt} = v^{(0)} - v + \sum_{i=1}^n G_i^{\Sigma}$	$\left(\frac{1}{L}\right) \frac{\partial V^R}{\partial t} = -\frac{\partial v}{\partial \ell} + \sum_{i=1}^n G_{i(\ell)}^{\Sigma}$	$\left(\frac{1}{L}\right) \frac{\partial V^R}{\partial t} = \frac{D}{L} \frac{\partial^2 V^R}{\partial \ell^2} - \frac{\partial v}{\partial \ell} + \sum_{i=1}^n G_{i(\ell)}^{\Sigma}$
	Статич.	$v^{(0)} - v + \sum_{i=1}^n G_i^{\Sigma} = 0$	$\frac{dv}{d\ell} = \sum_{i=1}^n G_{i(\ell)}^{\Sigma}$	$\frac{D}{L} \frac{d^2 V^R}{d\ell^2} - \frac{dv}{d\ell} + \sum_{i=1}^n G_{i(\ell)}^{\Sigma} = 0$
Теплового баланса	Динам.	$\frac{d(V^R C_p T)}{dt} = v^{(0)} C_p^{(0)} T^{(0)} - v C_p T + \Delta Q^{\Sigma}$	$\left(\frac{1}{L}\right) \frac{\partial(V^R C_p T)}{\partial t} = -\frac{\partial(v C_p T)}{\partial \ell} + \Delta Q_{(\ell)}^{\Sigma}$	$\left(\frac{1}{L}\right) \frac{\partial(V^R C_p T)}{\partial t} = \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R C_p T)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial(v C_p T)}{\partial \ell} + \Delta Q_{(\ell)}^{\Sigma}$
	Статич.	$v^{(0)} C_p^{(0)} T^{(0)} - v C_p T + \Delta Q^{\Sigma} = 0$	$\frac{d(v C_p T)}{d\ell} = \Delta Q_{(\ell)}^{\Sigma}$	$\frac{D}{L} \frac{d^2(V^R C_p T)}{d\ell^2} - \frac{d(v C_p T)}{d\ell} + \Delta Q_{(\ell)}^{\Sigma} = 0$

**ОСНОВНЫЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ИСТОЧНИКОВ
ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПРОЦЕССОВ В ПОТОКАХ**

Источники Элементарные процессы	Тип	Интенсивность в зоне		
		С сосредоточенными параметрами	С распределенными параметрами	Локальная
Суммарные	Композитная	$G_i^{\Sigma} = G_i^R + G_i^M + G_i^A + G_i^H$ $i = 1, \dots, n$	$G_{\kappa(t)}^{\Sigma} = G_{\kappa(t)}^R + G_{\kappa(t)}^M + G_{\kappa(t)}^A + G_{\kappa(t)}^H$ $i = 1, \dots, n$	
	Тепла	$\Delta Q^{\Sigma} = \Delta Q^R + \Delta Q^M + \Delta Q^A + \Delta Q^T + \Delta Q^H + \Delta Q^J$	$\Delta Q_{(t)}^{\Sigma} = \Delta Q_{(t)}^R + \Delta Q_{(t)}^M + \Delta Q_{(t)}^A + \Delta Q_{(t)}^T + \Delta Q_{(t)}^H + \Delta Q_{(t)}^J$	
Химическая реакция в объеме V^R	Композитная	$G_i^R = V^R \cdot g_i^R$ $i = 1, \dots, n$	$G_{\kappa(t)}^R = \frac{V^R}{L} g_i^R$ $i = 1, \dots, n$	$g_i^R = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} r_j$ $i = 1, \dots, n$
	Тепла	$\Delta Q^R = V^R \cdot \Delta q^R$	$\Delta Q_{(t)}^R = \frac{V^R}{L} \Delta q^R$	$\Delta q^R = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} (-\Delta H_{ij}^R) r_j$
Массопередача через поверхность	Композитная	$G_i^M = F^M \cdot g_i^M$ $i = 1, \dots, n$	$G_{\kappa(t)}^M = \frac{F^M}{L} g_i^M$ $i = 1, \dots, n$	$g_i^M = \sum_{j=1}^n K_{ij}^M (x_j^* - x_j)$ $i = 1, \dots, n$

F^M	Тепла	$\Delta Q^M = F^M \Delta q^M$	$\Delta Q_{(t)}^M = \frac{F^M}{L} \Delta q^M$	$\Delta q^M \cong \sum_{i=1}^n (-\Delta H_i^M) g_i^M$
Изменение агрегатного состояния при фазовом равновесии	Компонента	$G_i^A = -\tilde{v} \tilde{x}_i^*$ $i = 1, \dots, n$	$G_{q(t)}^A = -\frac{\tilde{v}}{L} \tilde{x}_i^*$ $i = 1, \dots, n$	$\tilde{x}_i^* = y_i^*$ $i = 1, \dots, n$
	Тепла	$\Delta Q^A = -\tilde{v} \Delta \tilde{H}^A$	$\Delta Q_{(t)}^A = -\frac{\tilde{v}}{L} \Delta \tilde{H}^A$	$\Delta \tilde{H}^A \cong \sum_{i=1}^n (-\Delta H_i^A) y_i^*$
Тепло-передача через поверхность F^T	Тепла	$\Delta Q^T = F^T \Delta q^T$	$\Delta Q_{(t)}^T = \frac{F^T}{L} \Delta q^T$	$\Delta q^T = K^T (\tilde{T} - T)$
Тепло-излучение с поверхности F^H	Тепла	$\Delta Q^H = F^H \Delta q^H$	$\Delta Q_{(t)}^H = \frac{F^H}{L} \Delta q^H$	$\Delta q^H = K^H (\tilde{T}^4 - T^4)$

УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

V^R	- ОБЪЁМ РАССМАТРИВАЕМОЙ ЗОНЫ
v	- РАСХОД ПОТОКА
L	- ДЛИНА РАССМАТРИВАЕМОЙ ЗОНЫ
D	- КОЭФФИЦИЕНТ ПРОДОЛЬНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ
$\bar{x}, T$	- СОСТАВ И ТЕМПЕРАТУРА ПОТОКА
$\bar{y}$	- СОСТАВ КОНТАКТИРУЮЩЕЙ ФАЗЫ ПРИ ИЗМЕНЕНИИ АГРЕГАТНОГО СОСТОЯНИЯ ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ
$\overline{G}^\Sigma$	- СУММАРНАЯ ИНТЕНСИВНОСТЬ ИСТОЧНИКОВ КОМПОНЕНТОВ В ПОТОКЕ
ΔQ^Σ	- СУММАРНАЯ ИНТЕНСИВНОСТЬ ИСТОЧНИКОВ ТЕПЛА В ПОТОКЕ
C_p	- ТЕПЛОЁМКОСТЬ ПРИ ПОСТОЯННОМ ДАВЛЕНИИ
$\bar{g}$	- ЛОКАЛЬНЫЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ИСТОЧНИКОВ КОМПОНЕНТОВ В ПОТОКЕ
Δq	- ЛОКАЛЬНАЯ ИНТЕНСИВНОСТЬ ИСТОЧНИКА ТЕПЛА В ПОТОКЕ
K	- КОЭФФИЦИЕНТ ПЕРЕДАЧИ, ХАРАКТЕРИЗУЮЩИЙ ИНТЕНСИВНОСТЬ ИСТОЧНИКОВ ТЕПЛА В ПОТОКЕ
ΔH	- ТЕПЛОВОЙ ЭФФЕКТ ЭЛЕМЕНТАРНОГО ПРОЦЕССА
$\bar{r}$	- СКОРОСТИ СТАДИЙ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ
$\bar{\alpha}$	- СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ КОМПОНЕНТОВ В РЕАКЦИЯХ
ℓ	- КООРДИНАТА ПРОСТРАНСТВА
t	- КООРДИНАТА ВРЕМЕНИ
n	- ЧИСЛО КОМПОНЕНТОВ В МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СИСТЕМЕ
m	- ЧИСЛО ЭЛЕМЕНТАРНЫХ СТАДИЙ В СЛОЖНОЙ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

ИНДЕКСЫ ВЕРХНИЕ

$^{(0)}$	- ПРИЗНАК ПОСТУПАЮЩЕГО В ЗОНУ ПОТОКА
R	- ПРИЗНАК ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ
M	- ПРИЗНАК МАССОПЕРЕДАЧИ
A	- ПРИЗНАК ИЗМЕНЕНИЯ АГРЕГАТНОГО СОСТОЯНИЯ ПРИ ФАЗОВОМ РАВНОВЕСИИ
Π	- ПРИЗНАК ПОДПИТКИ ОТ «ВНЕШНЕГО» ПОТОКА

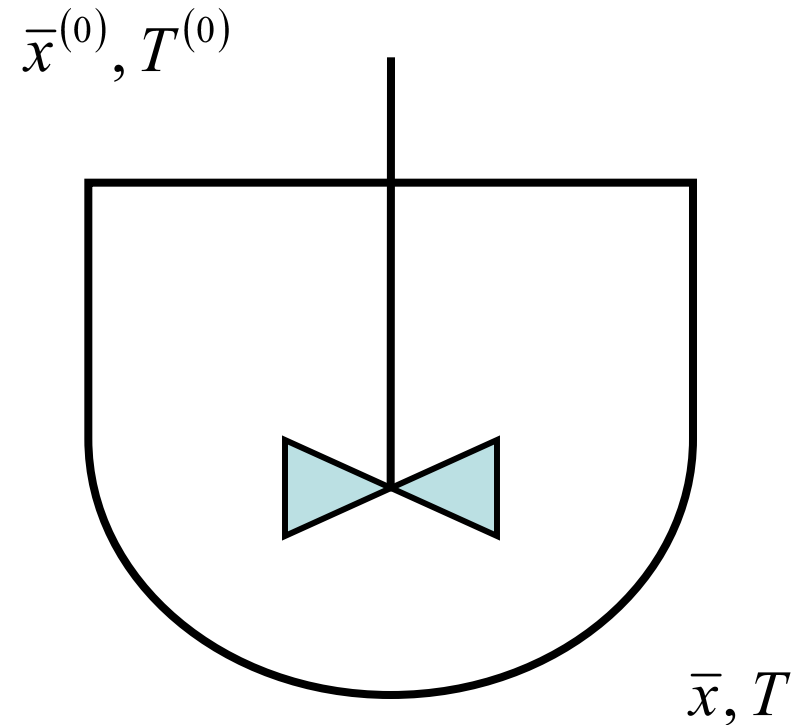
- T - ПРИЗНАК ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ
- Π - ПРИЗНАК ТЕПЛОИЗЛУЧЕНИЯ
- $*$ - ПРИЗНАК ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО РАВНОВЕСИЯ
- $\sim$ - ПРИЗНАК ЗОНЫ ПОТОКА, КОНТАКТИРУЮЩЕЙ С РАССМАТРИВАЕМОЙ

ИНДЕКСЫ НИЖНИЕ

- i - КОМПОНЕНТ
- j - СТАДИЯ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ
- (ℓ) - РАСПРЕДЕЛЁННОСТЬ ПАРАМЕТРА
- p - ОБРАЗУЮЩИЙСЯ КОМПОНЕНТ (ПРОДУКТ) НА ЭЛЕМЕНТАРНОЙ СТАДИИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ.

Математическое описание зоны потока, движение фазы в которой представляется гидродинамической моделью идеального смешения

Объекты, описываемые моделью идеального смешения, относятся к *объектам с сосредоточенными параметрами*.



Динамическая модель

$\overline{1}_{(n)}$) Уравнения покомпонентных балансов

$$\frac{d(V^R x_i)}{dt} = v^{(0)} x_i^{(0)} - vx_i + G_i^\Sigma, \quad i = 1, \dots, n$$

2) Уравнение общего баланса массы

$$\frac{dV^R}{dt} = v^{(0)} - v + \sum_{i=1}^n G_i^\Sigma$$

3) Уравнение теплового баланса

$$\frac{d(V^R C_P T)}{dt} = v^{(0)} C_P^{(0)} T^{(0)} - v C_P T + \Delta Q^\Sigma$$

Система $(n + 2)$ обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ) используется для математического описания нестационарных режимов процессов с сосредоточенными параметрами.

В систему уравнений дополнительно должны быть включены выражения для определения интенсивностей источников всех компонентов

$$G_i^{\Sigma} \quad (i = 1, \dots, n)$$

и теплоты

$$\Delta Q^{\Sigma}$$

Результатом решения системы уравнений должны стать функции, отражающие зависимость от времени концентрации компонентов x_i , реакционного объёма V^R и температуры потока T :

$$x_i^* = x_i^*(t) \quad (i = 1, \dots, n)$$

$$V^{R*} = V^{R*}(t) \qquad T^* = T^*(t)$$

Статическая модель

$\overline{1}_{(n)}$) Уравнения покомпонентных балансов

$$v^{(0)} x_i^{(0)} - vx_i + G_i^{\Sigma} = 0 \quad i = 1, \dots, n$$

2) Уравнение общего баланса массы

$$v^{(0)} - v + \sum_{i=1}^n G_i^{\Sigma} = 0$$

3) Уравнение теплового баланса

$$v^{(0)} C_P^{(0)} T^{(0)} - v C_P T + \Delta Q^{\Sigma} = 0$$

Система $(n + 2)$ конечных уравнений (СКУ) используется для описания стационарных режимов процессов с сосредоточенными параметрами.

В эту систему уравнений также должны быть включены выражения для определения интенсивностей источников всех компонентов и теплоты

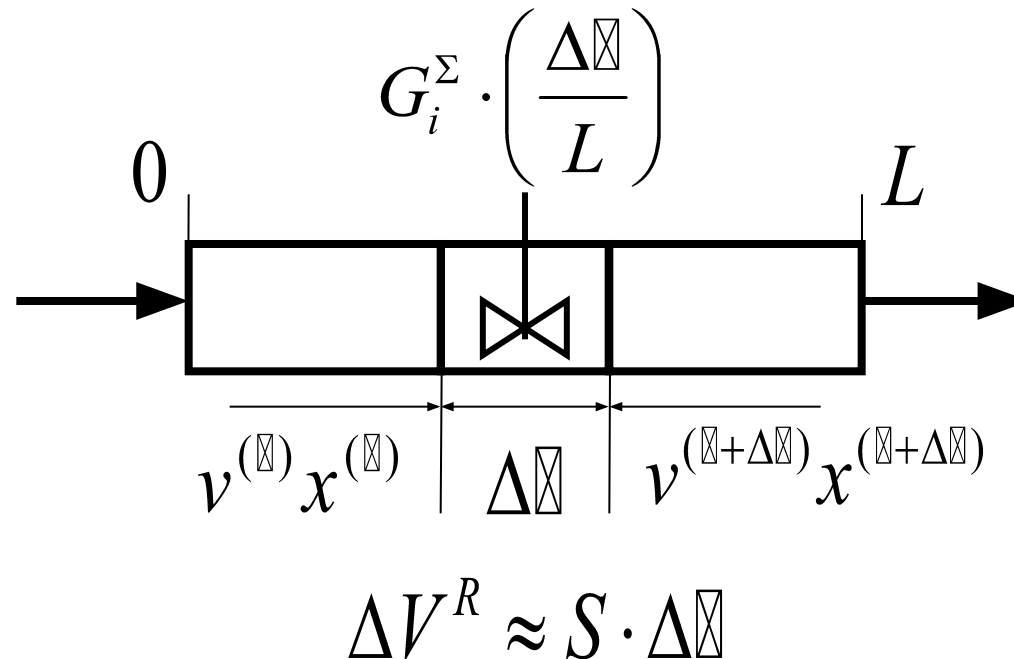
Результатом решения конечной системы уравнений должны стать расчётные значения концентраций, расхода реакционного потока и температуры:

$$\bar{x}^*, \quad \nu^*, \quad T^*$$

Математическое описание зоны потока, движение фазы в которой представляется гидродинамической моделью идеального вытеснения

Объекты, описываемые такими моделями, относятся к объектам с распределёнными параметрами.

Схематическое изображение движения потока, представляемого гидродинамической моделью идеального вытеснения (бесконечным числом ячеек идеального перемешивания):



Вывод формулы для динамической модели

Если предположить, что в одной ячейке идеального смещения

$$\Delta V^R = S \cdot \Delta \varnothing$$

Уравнения математического описания по аналогии с приведёнными выше уравнениями

$$\frac{d(S\Delta \varnothing x_i)}{dt} = v^{(\varnothing)} x_i^{(\varnothing)} - v^{(\varnothing + \Delta \varnothing)} x_i^{(\varnothing + \Delta \varnothing)} + \frac{G_i^{\Sigma} \Delta \varnothing}{L} \quad (i = 1, \dots, n)$$

Площадь поперечного сечения при допущении о цилиндрической форме трубы с постоянным сечением выражается

$$S = \frac{V^R}{L}$$

$$\frac{d(V_R x_i)}{L dt} = - \frac{v^{(\bar{i}+\Delta\bar{i})} x_i^{(\bar{i}+\Delta\bar{i})} - v^{(\bar{i})} x_i^{(\bar{i})}}{\Delta\bar{i}} + \frac{G_i^\Sigma}{L} \quad (i = 1, \dots, n)$$

При стремлении интервала Δl нулю ($\Delta l \rightarrow 0$) получаем уравнения покомпонентных балансов

Динамическая модель

$\overline{1}_{(n)}$) Уравнения покомпонентных балансов

$$\frac{\partial(V^R x_i)}{L \cdot \partial t} = - \frac{\partial(v x_i)}{\partial \Xi} + G_{i(\Xi)}^{\Sigma} \quad (i = 1, \dots, n)$$

где $G_{i(\Xi)}^{\Sigma} = \frac{G_i^{\Sigma}}{L}$

2) Уравнение общего баланса массы

$$\frac{1}{L} \frac{\partial V^R}{\partial t} = - \frac{\partial v}{\partial \Xi} + \sum_{i=1}^n G_{i(\Xi)}^{\Sigma}$$

3) Уравнение теплового баланса

$$\frac{\partial(V^R C_P T)}{L \cdot \partial t} = - \frac{\partial(v C_P T)}{\partial \Xi} + \Delta Q_{23(\Xi)}^{\Sigma}$$

Для описания нестационарных режимов процессов с распределёнными параметрами, движение потока фаз в которых представляется гидродинамической моделью идеального вытеснения (трубчатый аппарат), используется *система дифференциальных уравнений в частных производных (СДУЧП)*

В эту систему уравнений должны быть включены выражения для определения интенсивностей источников всех компонентов и теплоты

Результатом решения системы уравнений должны стать расчётные значения концентраций, расхода реакционного потока и температуры в зависимости от двух независимых координат – времени и длины реактора

$$\begin{aligned}\bar{x}^* &= \bar{x}^*(t, \varpi), \quad i = 1, \dots, n; \\ V_i^{R*} &= V^{R*}(t, \varpi), \quad t^{(0)} \leq t \leq t^{(k)}; \\ T^* &= T^*(t, \varpi), \quad 0 \leq \varpi \leq L;\end{aligned}$$

Статическая модель

$\overline{1}_{(n)}$) Уравнения покомпонентных балансов

$$\frac{d(v \cdot x_i)}{d\tau} = G_{i(\tau)}^{\Sigma} \quad (i = 1, \dots, n)$$

2) Уравнение общего баланса массы

$$\frac{dv}{d\tau} = \sum_{i=1}^n G_{i(\tau)}^{\Sigma}$$

3) Уравнение теплового баланса

$$\frac{d(v C_P T)}{d\tau} = \Delta Q_{(\tau)}^{\Sigma}$$

Для описания стационарных режимов процессов с распределёнными параметрами, движение потока в которых представляется гидродинамической моделью идеального вытеснения, когда изменение переменных происходит вдоль одной пространственной координаты, используется *система обыкновенных дифференциальных уравнений* (СОДУ)

В эту систему уравнений должны быть включены выражения для определения интенсивностей источников всех компонентов и теплоты

Решением данной системы уравнений математического описания должны стать зависимости концентрации, расхода реакционной смеси и температуры от пространственной координаты

$$\bar{X}^* = \bar{X}^*(\xi) \quad (i = 1, \dots, n)$$

$$v^* = v^*(\xi)$$

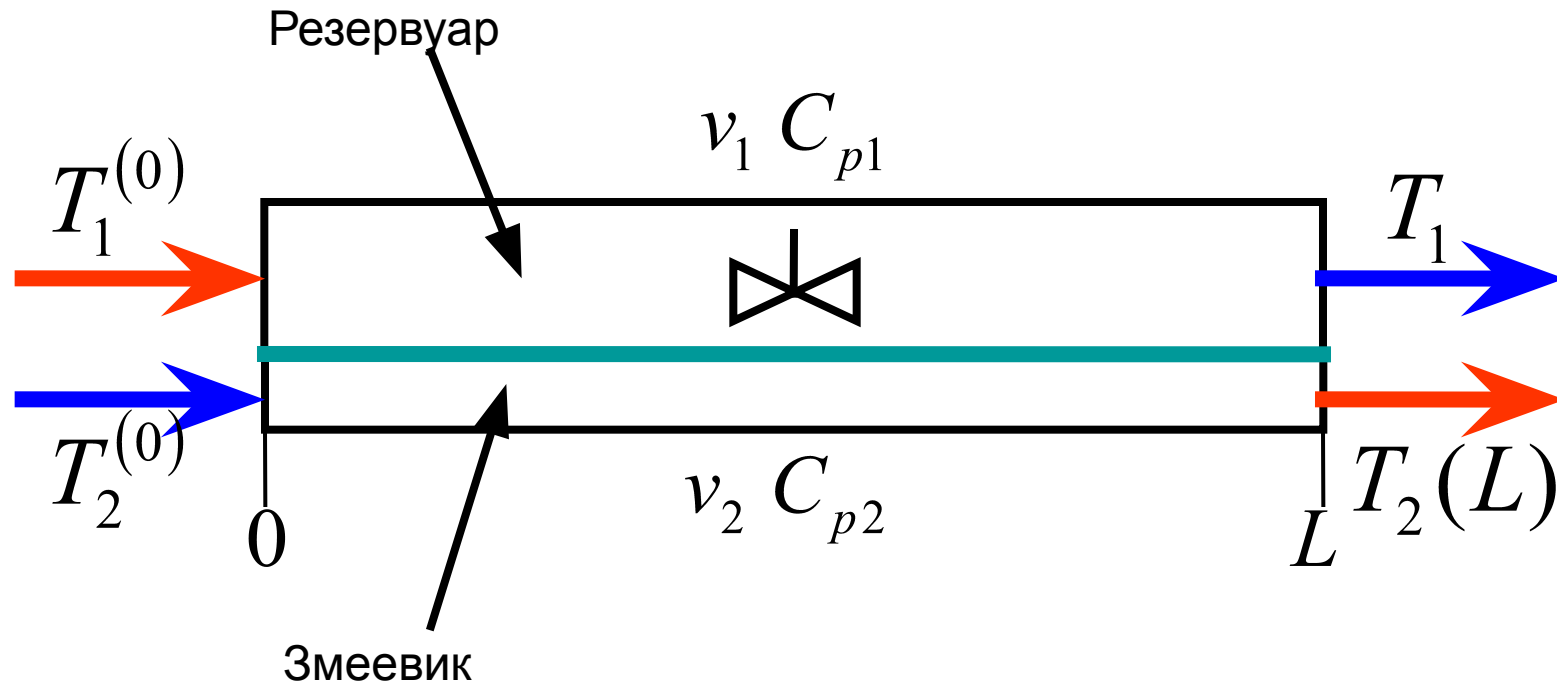
$$T^* = T^*(\xi)$$

Математическая модель стационарного режима процесса в теплообменниках типа «смешение – вытеснение»

Построение компьютерной модели теплообменника включает следующие этапы:

- изучение и/или ознакомление с теорией процесса теплообмена для данного типа теплообменных аппаратов
- построение математического описания (МО) конкретного процесса теплообмена
- выбор и реализация алгоритма (моделирующего алгоритма – МА) решения уравнений МО модели данного теплообменника

Математическая модель стационарного режима процесса в теплообменнике типа «смещение – вытеснение»



Для построения математического описания данной модели примем следующие допущения:

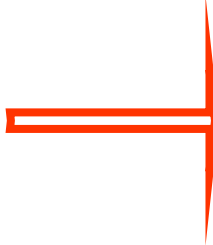
- поток, проходящий через резервуар, описывается гидродинамической моделью идеального смешения
- поток в змеевике описывается гидродинамической моделью идеального вытеснения
- рассматривается стационарный режим работы теплообменника
- коэффициент теплопередачи считается постоянным
- никаких процессов кроме теплопередачи не происходит
- теплоёмкости теплоносителей одинаковы и не меняются с изменением температуры

УРАВНЕНИЯ БАЛАНСОВ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Класс уравнений	Вид модели	С сосредоточ. параметрами	С распределенными параметрами	
		Модель идеального смешения	Модель идеального вытеснения	Однопараметрическая диффузионная модель
Покомпонент. баланс	Динам.	$\frac{d(V^R x_i)}{dt} = v^{(0)} x_i^{(0)} - vx_i + G_i^{\Sigma}$ $i = 1, \dots, n$	$\left(\frac{1}{L}\right) \frac{\partial(V^R x_i)}{\partial t} = -\frac{\partial(vx_i)}{\partial \ell} + G_{i(\ell)}^{\Sigma}$ $i = 1, \dots, n$	$\left(\frac{1}{L}\right) \frac{\partial(V^R x_i)}{\partial t} = \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R x_i)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial(vx_i)}{\partial \ell} + G_{i(\ell)}^{\Sigma}$ $i = 1, \dots, n$
	Статич.	$v^{(0)} x_i^{(0)} - vx_i + G_i^{\Sigma} = 0$ $i = 1, \dots, n$	$\frac{d(vx_i)}{d\ell} = G_{i(\ell)}^{\Sigma}$ $i = 1, \dots, n$	$\frac{D}{L} \frac{d^2(V^R x_i)}{d\ell^2} - \frac{d(vx_i)}{d\ell} + G_{i(\ell)}^{\Sigma} = 0$ $i = 1, \dots, n$
Общего баланса массы	Динам.	$\frac{dV^R}{dt} = v^{(0)} - v + \sum_{i=1}^n G_i^{\Sigma}$	$\left(\frac{1}{L}\right) \frac{\partial V^R}{\partial t} = -\frac{\partial v}{\partial \ell} + \sum_{i=1}^n G_{i(\ell)}^{\Sigma}$	$\left(\frac{1}{L}\right) \frac{\partial V^R}{\partial t} = \frac{D}{L} \frac{\partial^2 V^R}{\partial \ell^2} - \frac{\partial v}{\partial \ell} + \sum_{i=1}^n G_{i(\ell)}^{\Sigma}$
	Статич.	$v^{(0)} - v + \sum_{i=1}^n G_i^{\Sigma} = 0$	$\frac{dv}{d\ell} = \sum_{i=1}^n G_{i(\ell)}^{\Sigma}$	$\frac{D}{L} \frac{d^2 V^R}{d\ell^2} - \frac{dv}{d\ell} + \sum_{i=1}^n G_{i(\ell)}^{\Sigma} = 0$
Теплового баланса	Динам.	$\frac{d(V^R C_p T)}{dt} = v^{(0)} C_p^{(0)} T^{(0)} - v C_p T + \Delta Q^{\Sigma}$	$\left(\frac{1}{L}\right) \frac{\partial(V^R C_p T)}{\partial t} = -\frac{\partial(v C_p T)}{\partial \ell} + \Delta Q_{(\ell)}^{\Sigma}$	$\left(\frac{1}{L}\right) \frac{\partial(V^R C_p T)}{\partial t} = \frac{D}{L} \frac{\partial^2(V^R C_p T)}{\partial \ell^2} - \frac{\partial(v C_p T)}{\partial \ell} + \Delta Q_{(\ell)}^{\Sigma}$
	Статич.	$v^{(0)} C_p^{(0)} T^{(0)} - v C_p T + \Delta Q^{\Sigma} = 0$	$\frac{d(v C_p T)}{d\ell} = \Delta Q_{(\ell)}^{\Sigma}$	$\frac{D}{L} \frac{d^2(V^R C_p T)}{d\ell^2} - \frac{d(v C_p T)}{d\ell} + \Delta Q_{(\ell)}^{\Sigma} = 0$

**ОСНОВНЫЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ИСТОЧНИКОВ
ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПРОЦЕССОВ В ПОТОКАХ**

Источники Элементарные процессы	Тип	Интенсивность в зоне		
		С сосредоточенными параметрами	С распределенными параметрами	Локальная
Суммарные	Компонаента	$G_i^{\Sigma} = G_i^R + G_i^M + G_i^A + G_i^H$ $i = 1, \dots, n$	$G_{\kappa(t)}^{\Sigma} = G_{\kappa(t)}^R + G_{\kappa(t)}^M + G_{\kappa(t)}^A + G_{\kappa(t)}^H$ $i = 1, \dots, n$	
	Тепла	$\Delta Q^{\Sigma} = \Delta Q^R + \Delta Q^M + \Delta Q^A + \Delta Q^T + \Delta Q^H + \Delta Q^H$	$\Delta Q_{(t)}^{\Sigma} = \Delta Q_{(t)}^R + \Delta Q_{(t)}^M + \Delta Q_{(t)}^A + \Delta Q_{(t)}^T + \Delta Q_{(t)}^H + \Delta Q_{(t)}^H$	
Химическая реакция в объеме V^R	Компонаента	$G_i^R = V^R \cdot g_i^R$ $i = 1, \dots, n$	$G_{\kappa(t)}^R = \frac{V^R}{L} g_i^R$ $i = 1, \dots, n$	$g_i^R = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} r_j$ $i = 1, \dots, n$
	Тепла	$\Delta Q^R = V^R \cdot \Delta q^R$	$\Delta Q_{(t)}^R = \frac{V^R}{L} \Delta q^R$	$\Delta q^R = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} (-\Delta H_{ij}^R) r_j$
Массо-передача через поверхность	Компонаента	$G_i^M = F^M \cdot g_i^M$ $i = 1, \dots, n$	$G_{\kappa(t)}^M = \frac{F^M}{L} g_i^M$ $i = 1, \dots, n$	$g_i^M = \sum_{j=1}^n K_{ij}^M (x_j^* - x_j)$ $i = 1, \dots, n$



F^M	Тепла	$\Delta Q^M = F^M \Delta q^M$	$\Delta Q_{(t)}^M = \frac{F^M}{L} \Delta q^M$	$\Delta q^M \cong \sum_{i=1}^n (-\Delta H_i^M) g_i^M$
Изменение агрегатного состояния при фазовом равновесии	Компо- нента	$G_i^A = -\tilde{v} \tilde{x}_i^*$ $i = 1, \dots, n$	$G_{(t)}^A = -\frac{\tilde{v}}{L} \tilde{x}_i^*$ $i = 1, \dots, n$	$\tilde{x}_i^* = y_i^*$ $i = 1, \dots, n$
	Тепла	$\Delta Q^A = -\tilde{v} \Delta \tilde{H}^A$	$\Delta Q_{(t)}^A = -\frac{\tilde{v}}{L} \Delta \tilde{H}^A$	$\Delta \tilde{H}^A \cong \sum_{i=1}^n (-\Delta H_i^A) y_i^*$
Тепло- передача через поверхность F^T	Тепла	$\Delta Q^T = F^T \Delta q^T$	$\Delta Q_{(t)}^T = \frac{F^T}{L} \Delta q^T$	$\Delta q^T = K^T (\tilde{T} - T)$
Тепло- излучение с поверхности F^H	Тепла	$\Delta Q^H = F^H \Delta q^H$	$\Delta Q_{(t)}^H = \frac{F^H}{L} \Delta q^H$	$\Delta q^H = K^H (\tilde{T}^4 - T^4)$

1. $v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 + F^T \Delta q_1^T = 0$
2. $\Delta q_1^T = K^T (T_2 - T_1)$
3. $v_2 C_{p2} \frac{dT_2}{d\mathbb{X}} = \frac{F^T}{L} \Delta q_2^T$
4. $\Delta q_2^T = K^T (T_1 - T_2)$

С учетом справедливости равенств:

$$\Delta q^T = \Delta q_1^T = -\Delta q_2^T$$

выведем уравнение общего теплового баланса:

$$v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T + [F^T \Delta q^T]_{\text{cp}} = 0$$

Произведение $[F^T \Delta q^T]_{\text{cp}}$ представляет собой усреднённое по длине змеевика значение.

Чтобы определить скорость теплопередачи в рассматриваемой модели теплообменника, необходимо проинтегрировать функцию $[F^T \Delta q^T]_{\text{cp}}$ по длине змеевика и разделить на длину змеевика

$$[F^T \Delta q^T]_{\text{cp}} = \frac{1}{L} \int_0^L F^T \Delta q^T d\varpi$$

$$[F^T \Delta q^T]_{\text{cp}} = -v_2 C_{p2} \int_0^L \frac{dT_2}{d\varpi} d\varpi = -v_2 C_{p2} [T_2(L) - T_2(0)]$$

Система уравнений МО рассматриваемой модели теплообменника, таким образом, будет состоять из следующих уравнений:

- уравнения общего теплового баланса:

$$1. \quad - \cancel{v_2 C_{p2} [T_2(L) - T_2(0)]} + v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 = 0$$

f_1

- обыкновенного дифференциального уравнения в явном виде для потока теплоносителя в змеевике:

$$2. \quad \frac{dT_2}{d\boxtimes} = \frac{F^T}{Lv_2 C_{p2}} (-\Delta q^T) \equiv f_2$$

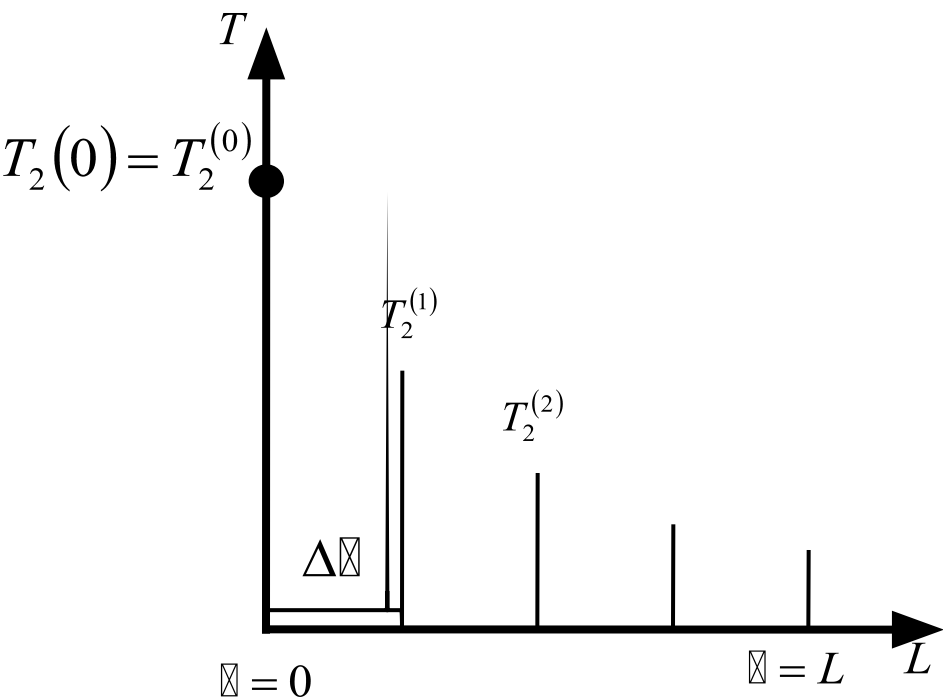
- выражения для локальной скорости теплопередачи:

$$3. \quad \Delta q^T = K^T (T_2 - T_1)$$

Для решения дифференциального уравнения 2 (вычисления частного решения на компьютере), к данной системе уравнений МО необходимо добавить начальное условие:

$$2'. \quad T_2(0) = T_2^{(0)}$$

В данном случае дополнительное условие 2' задаётся при одном значении независимой переменной, то есть решается задача Коши.



Для решения системы уравнений производную в уравнении 2 целесообразно представить в конечно-разностном виде, в результате чего получается система уравнений с начальным условием для дифференциального уравнения:

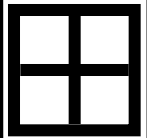
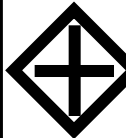
$$1. \quad - \cancel{2 C_{p2} [T_2(L) - T_2(0)]} + v_1^{(0)} C_{p1}^{(0)} T_1^{(0)} - v_1 C_{p1} T_1 = 0$$

$$2^*. \quad \frac{T_2(L) - T_2(0)}{\Delta x} \cong \frac{F^{f_1}}{Lv_2 C_{p2}} (-\Delta q^T) \equiv f_2$$

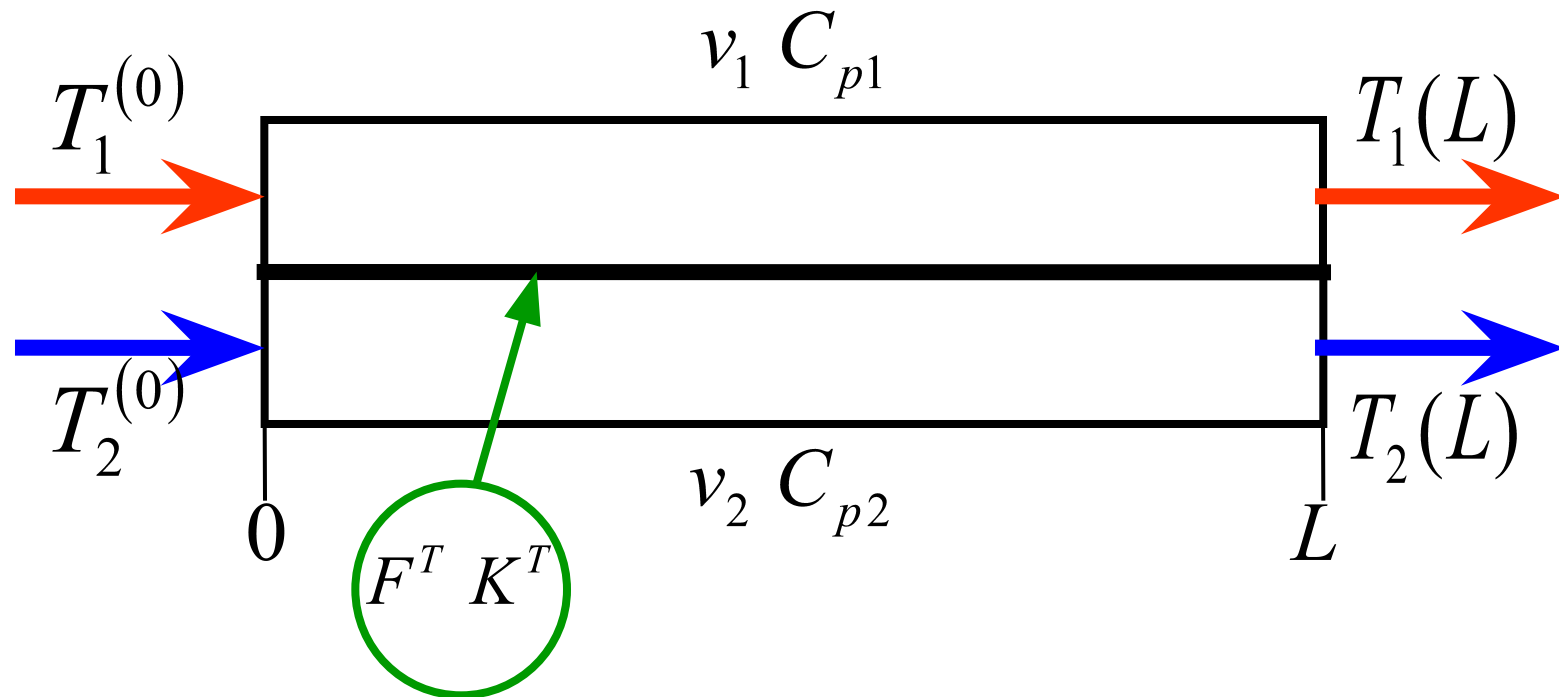
$$3. \quad \Delta q^T = K^T (T_2 - T_1)$$

$$2'. \quad T_2(0) = T_2^{(0)}$$

Информационная матрица системы уравнений математического описания
стационарного режима процесса в теплообменнике типа «смешение –
вытеснение»

$\begin{matrix} p \\ n \end{matrix}$	T_1	$T_2(0)$	$T_2(L)$	Δq^T	N^o
1. Кор.ур.					4
2. Диф. ур.					3
3.					2
2'.					1

Математическая модель стационарного режима процесса в прямоточном теплообменнике типа «труба в трубе» (решение задачи Коши)



Для построения системы уравнений математического описания процесса в прямоточном теплообменнике типа «труба в трубе» принимаются следующие допущения:

- рассматривается стационарный режим процесса теплопередачи
- кроме процесса теплопередачи не происходит никаких других процессов
- коэффициент теплопередачи постоянен и известен (решение прямой задачи)
- теплоёмкость потоков теплоносителей постоянна
- поверхность теплообмена равномерно распределена вдоль участка длины теплообменника
- движение первого и второго потоков теплоносителей описывается гидродинамической моделью идеального вытеснения

$$\begin{aligned}
1. \quad & v_1 C_{p1} \frac{dT_1}{d\Delta} = \frac{F^T}{L} \Delta q_1^T \\
2. \quad & \Delta q_1^T = K^T (T_2 - T_1) \\
3. \quad & v_2 C_{p2} \frac{dT_2}{d\Delta} = \frac{F^T}{L} \Delta q_2^T \\
4. \quad & \Delta q_2^T = K^T (T_1 - T_2)
\end{aligned}$$

С учетом справедливости равенств:

$$\Delta q^T = \Delta q_1^T = -\Delta q_2^T$$

Система уравнений МО модели прямоточного теплообменника типа «труба в трубе» записывается как СОДУ в конечно-разностном представлении с начальными условиями, заданными при $\Delta x = 0$:

$$1^*. \quad \frac{T_1(L) - T_1(0)}{\Delta x} \cong \frac{F^T}{Lv_1 C_{p1}} (\Delta q^T) \equiv f_1$$

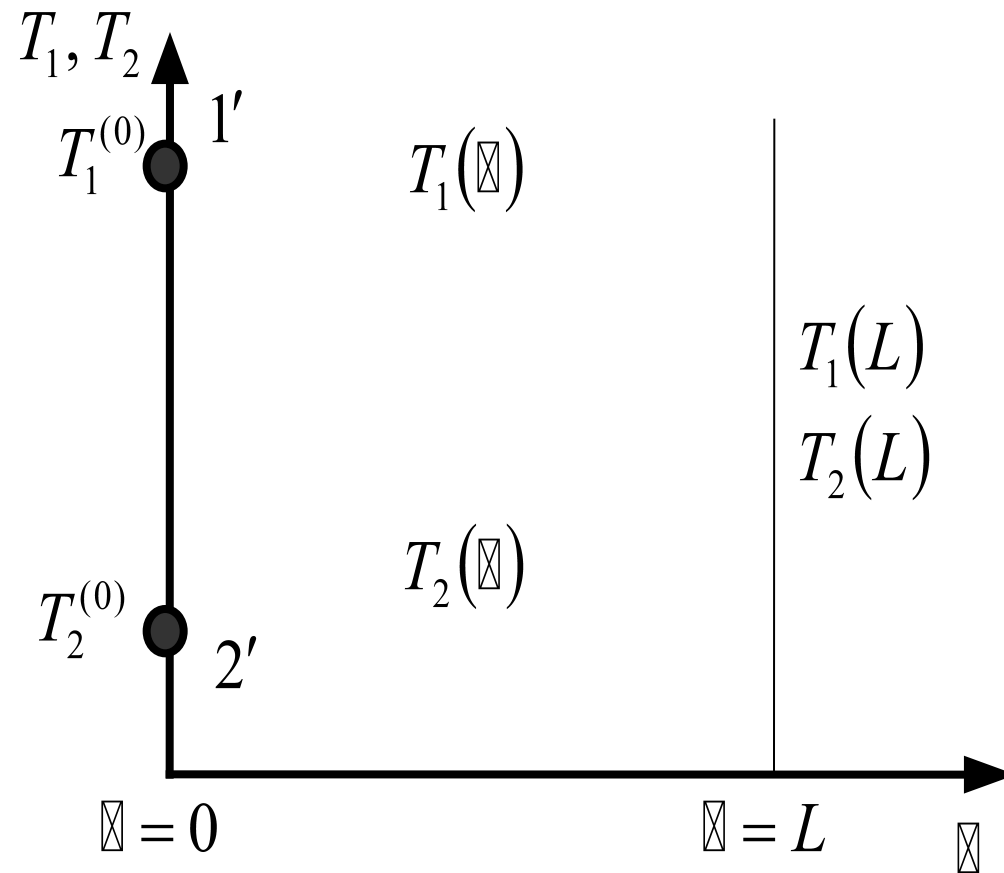
$$2^*. \quad \frac{T_2(L) - T_2(0)}{\Delta x} \cong \frac{F^T}{Lv_2 C_{p2}} (-\Delta q^T) \equiv f_2$$

$$3. \quad \Delta q^T = K^T (T_2 - T_1)$$

$$\left. \begin{array}{l} 1' \quad T_1(0) = T_1^{(0)} \\ 2' \quad T_2(0) = T_2^{(0)} \end{array} \right\} \Delta x = 0$$

Поскольку начальные условия задаются при одном и том же значении независимой переменной, в данном случае решается задача Коши.

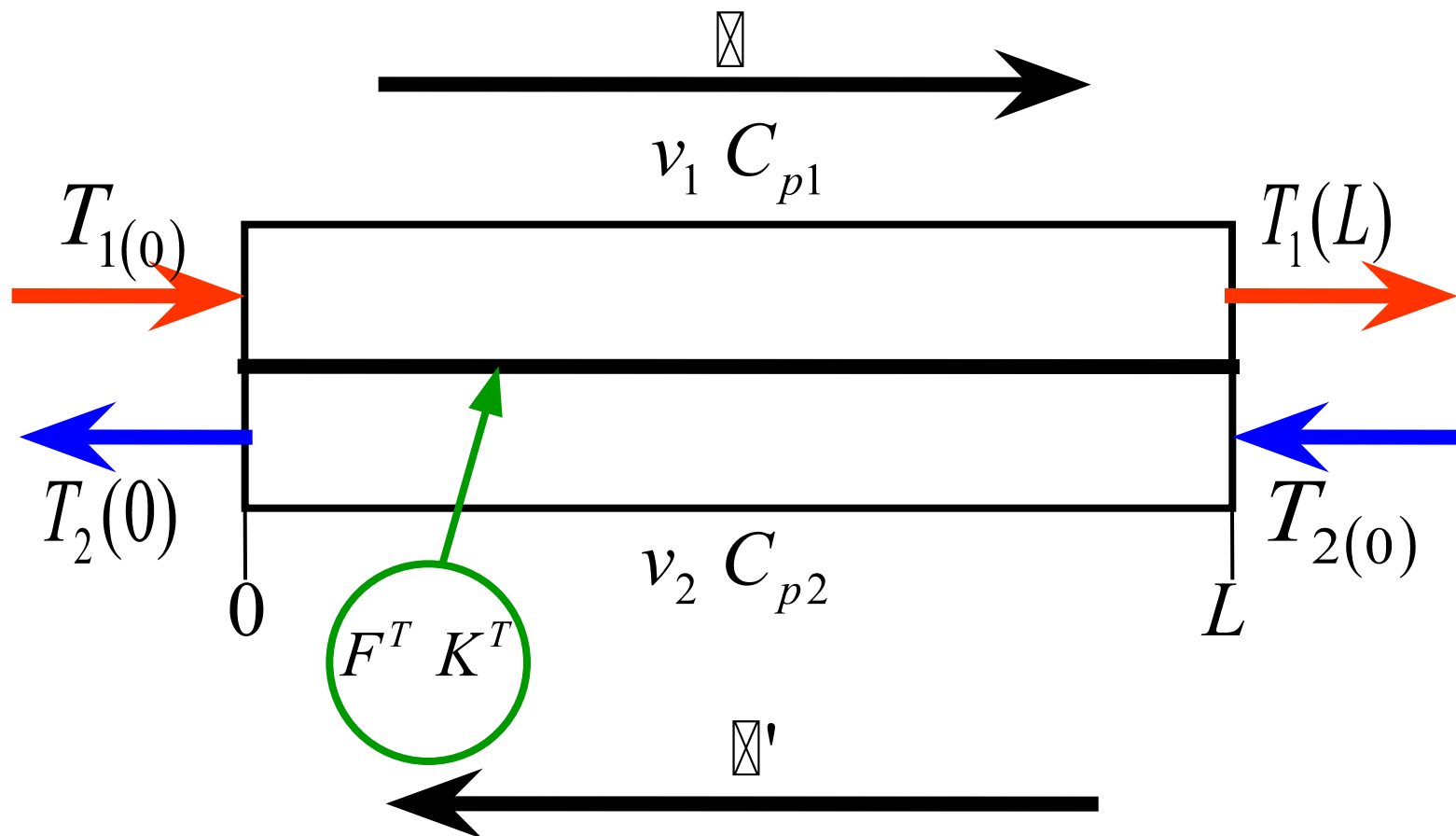
Задание начальных условий и изменение температур теплоносителей по длине теплообменника типа «труба в трубе»:



Информационная матрица системы уравнений математического описания стационарного режима процесса в прямоточном теплообменнике типа «труба в трубе»

$n \backslash p$	$T_1(0)$	$T_1(L)$	$T_2(0)$	$T_2(L)$	Δq^T	N^o
1 Диф. ур.						4
2 Диф. ур.						5
3						3
1'						1
2'						2

Математическая модель стационарного режима процесса в
противоточном теплообменнике типа «труба в трубе» (решение
краевой задачи)



$$1. \quad \frac{dT_1}{d\mathbb{X}} = \frac{F^T}{Lv_1 C_{p1}} \Delta q_1^T$$

$$2. \quad \Delta q_1^T = K^T (T_2 - T_1)$$

$$3. \quad \frac{dT_2}{d\mathbb{X}'} = \frac{F^T}{Lv_2 C_{p2}} \Delta q_2^T$$

$$4. \quad \Delta q_2^T = K^T (T_1 - T_2)$$

$$\mathbb{X}' = L - \mathbb{X}$$

$$d\mathbb{X}' = -d\mathbb{X}$$

С учетом справедливости равенств:

$$\Delta q^T = \Delta q_1^T = -\Delta q_2^T$$

Система уравнений МО теплообменника типа «труба в трубе» записывается как СОДУ в конечно-разностном представлении с *краевыми условиями*, заданными при разных значениях пространственной координаты

$$1^*. \quad \frac{T_1(L) - T_1(0)}{\Delta x} \cong \frac{F^T}{Lv_1 C_{p1}} \Delta q^T \equiv f_1$$

$$2^*. \quad \frac{T_2(L) - T_2(0)}{\Delta x} \cong \frac{F^T}{Lv_2 C_{p2}} \Delta q^T \equiv f_2$$

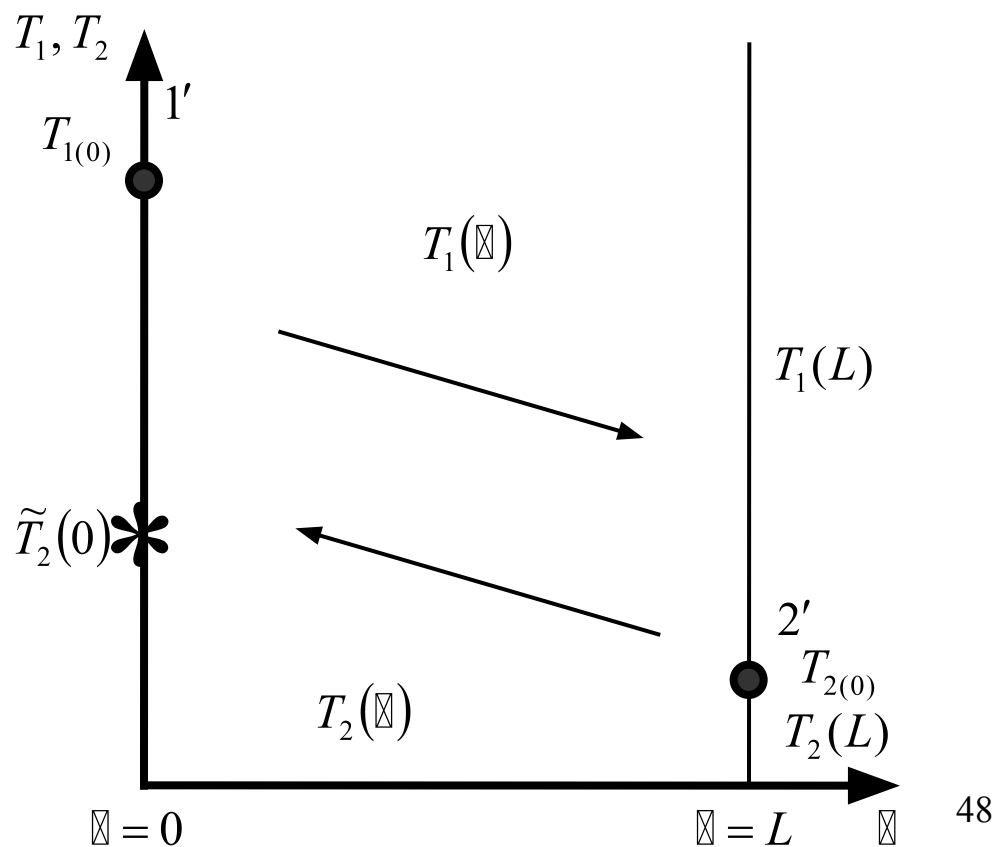
$$3. \quad \Delta q^T = K^T (T_2 - T_1)$$

$$1'. \quad T_1(0) = T_{1(0)}$$

$$2'. \quad T_2(L) = T_{2(0)}$$

Задача получения частного решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений, если дополнительные условия заданы при разных значениях пространственной координаты, называется *краевой задачей*.

Задание краевых условий и изменение температур теплоносителей по длине теплообменника «труба в трубе» (противоток):



Процедура решения краевой задачи

1. Задается приближение для температуры $\tilde{T}_2(0)$ при $x = 0$, отсутствующее в исходной постановке задачи
2. Решается система двух дифференциальных уравнений (1) и (2) с учетом дополнительных условий $T_1(0)$ и $\tilde{T}_2(0)$, в результате чего при $x = L$ получаются приближенные значения:

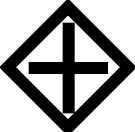
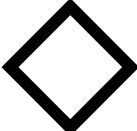
$$\begin{matrix} T_1(L) \{ \tilde{T}_2(0) \} \\ T_2(L) \{ \tilde{T}_2(0) \} \end{matrix}$$

3. В том случае, когда краевое условие 2' не превращается в равенство, оно используется для коррекции приближения $\tilde{T}_2(0)$ до тех пор, пока не будет получено решение получаемого уравнения 2' следующего вида:

$$T_2(L) \{ \tilde{T}_2(0) \} - T_{2(0)} = 0$$

Решение последнего уравнения во внешнем цикле с учетом получаемых зависимостей $T_1(x)$ и $T_2(x)$ ($0 \leq x \leq L$) при финальном значении приближения $\tilde{T}_2(0) = T_2^*(0)$ означает решение краевой задачи

Информационная матрица системы уравнений математического описания стационарного режима процесса в противоточном теплообменнике типа «труба в трубе»

$\begin{matrix} p \\ n \end{matrix}$	$T_1(0)$	$T_1(L)$	$T_2(0)$	$T_2(L)$	Δq^T	$\mathcal{N}_0$
$\begin{matrix} 1^* \\ \text{Диф. ур.} \end{matrix}$						3
$\begin{matrix} 2^* \\ \text{Диф. ур.} \end{matrix}$						4
3						2
$1'$						1
$\begin{matrix} 2' \\ \text{Кор. ур.} \end{matrix}$						5

Химические реакторы. Моделирование химических реакторов

Математические модели стационарных и нестационарных режимов химических реакторов

Микрокинетика сложной химической реакции

Для построения математических моделей процессов в гомогенных химических реакторах с участием n компонентов в m стадийной химической реакции на микрокинетическом уровне необходимо решить две задачи:

1. Определить локальную скорость химической реакции по каждому компоненту – вектор скоростей химической реакции по каждому компоненту

$$g_i^R = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} r_j \quad (i = 1, \dots, n)$$

2. Определить локальную скорость выделения или поглощения теплоты в химической реакции

$$\Delta q^R = \sum_{j=1}^m |\alpha_{pj}| \left(-\Delta H_{pj}^R \right) \cdot r_j$$

**ОСНОВНЫЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ИСТОЧНИКОВ
ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПРОЦЕССОВ В ПОТОКАХ**

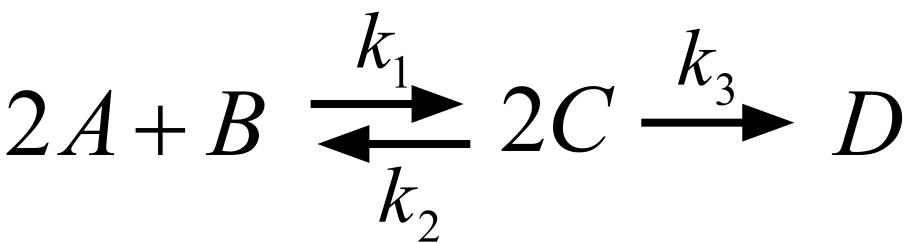
Источники Элементарные процессы	Тип	Интенсивность в зоне		
		С сосредоточенными параметрами	С распределенными параметрами	Локальная
Суммарные	Компонаента	$G_i^{\Sigma} = G_i^R + G_i^M + G_i^A + G_i^H$ $i = 1, \dots, n$	$G_{\kappa(t)}^{\Sigma} = G_{\kappa(t)}^R + G_{\kappa(t)}^M + G_{\kappa(t)}^A + G_{\kappa(t)}^H$ $i = 1, \dots, n$	
	Тепла	$\Delta Q^{\Sigma} = \Delta Q^R + \Delta Q^M + \Delta Q^A + \Delta Q^T + \Delta Q^H + \Delta Q^H$	$\Delta Q_{(t)}^{\Sigma} = \Delta Q_{(t)}^R + \Delta Q_{(t)}^M + Q_{(t)}^A + \Delta Q_{(t)}^T + \Delta Q_{(t)}^H + Q_{(t)}^H$	
Химическая реакция в объеме V^R	Компонаента	$G_i^R = V^R \cdot g_i^R$ $i = 1, \dots, n$	$G_{\kappa(t)}^R = \frac{V^R}{L} g_i^R$ $i = 1, \dots, n$	$g_i^R = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} r_j$ $i = 1, \dots, n$
	Тепла	$\Delta Q^R = V^R \cdot \Delta q^R$	$\Delta Q_{(t)}^R = \frac{V^R}{L} \Delta q^R$	$\Delta q^R = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} (-\Delta H_{ij}^R) r_j$
Массо-передача через поверхность	Компонаента	$G_i^M = F^M \cdot g_i^M$ $i = 1, \dots, n$	$G_{\kappa(t)}^M = \frac{F^M}{L} g_i^M$ $i = 1, \dots, n$	$g_i^M = \sum_{j=1}^n K_{ij}^M (x_j^* - x_j)$ $i = 1, \dots, n$

В матричном виде выражение для скорости химической реакции по компоненту записывается следующим образом:

$$\overline{g}^R = \overline{\overline{\alpha}} \cdot \overline{r}$$

$$\begin{bmatrix} g_1^R \\ \vdots \\ g_n^R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \vdots & \alpha_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{n1} & \vdots & \alpha_{nm} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_m \end{bmatrix}$$

Рассмотрим следующую схему химических превращений:



Скорость j -й элементарной стадии химической реакции в жидкой фазе определяется по закону действующих масс:

$$r_j = k_j \prod_{i=1}^n x_{ij}^{\chi_{ij}} \quad j = 1, \dots, m$$

Для рассматриваемого уравнения реакции выражения для скоростей стадий записываются следующим образом:

$$r_1 = k_1 x_A^2 x_B^1 x_C^0 x_D^0 = k_1 x_A^2 x_B;$$

$$r_2 = k_2 x_A^0 x_B^0 x_C^2 x_D^0 = k_2 x_C^2;$$

$$r_3 = k_3 x_A^0 x_B^0 x_C^2 x_D^0 = k_3 x_C^2.$$

$$\begin{bmatrix} g_A^R \\ g_B^R \\ g_C^R \\ g_D^R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & 2 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{bmatrix}$$

$$g_A^R = -2r_1 + 2r_2;$$

$$g_B^R = -r_1 + r_2;$$

$$g_C^R = 2r_1 - 2r_2 - 2r_3;$$

$$g_D^R = r_3.$$

Для рассматриваемого уравнения реакции, с учётом приведённых выкладок для скоростей стадий реакции, выражение для локальной скорости выделения (поглощения) тепла за счет химической реакции записывается следующим образом:

$$\Delta q^R = 2(-\Delta H_{C1}^R)r_1 + 1(-\Delta H_{B2}^R)r_2 + 1(-\Delta H_{D3}^R)r_3$$

Константы скоростей стадий реакции в соответствии с законом Аррениуса выражаются следующим уравнением:

$$k_j = A_j \cdot \exp(-E_j/RT); \quad j = 1, \dots, 3$$

Выбор ключевых компонентов химической реакции

Ключевые компоненты – это компоненты, задание которых однозначно характеризует состояние процесса, сопровождаемого химической реакцией, в любой момент времени.

Уравнения математического описания с учётом гидродинамических условий и микрокинетических закономерностей записываются только для ключевых компонентов, в то время как расчёт остальных (не ключевых) компонентов производится по стехиометрическим соотношениям.

Число ключевых компонентов химической реакции равно рангу матрицы стехиометрических коэффициентов.

Рангом матрицы называется максимальный порядок её минора, отличного от нуля.

Матрица стехиометрических коэффициентов для рассматриваемого уравнения:

$$\overline{\overline{\alpha}} = \begin{bmatrix} -2 & 2 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Все миноры матриц 3X3 матрицы стехиометрических коэффициентов равны 0:

$$1) \begin{vmatrix} -2 & 2 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & -2 & -2 \end{vmatrix}; \quad 2) \begin{vmatrix} -2 & 2 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}; \quad 3) \begin{vmatrix} -2 & 2 & 0 \\ 2 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}; \quad 4) \begin{vmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 2 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

Для матриц 2X2 есть миноры не равные 0, т.е. наивысший (максимальный) порядок минора матрицы стехиометрических коэффициентов равен 2.

Ранг матрицы стехиометрических коэффициентов равен 2, и число ключевых компонентов трёхстадийной реакции с четырьмя компонентами A , B , C и D равно 2.

Исходя из микрокинетических соотношений, запишем выражения для скоростей химической реакции по компонентам:

$$g_B^R = \frac{1}{2} g_A^R$$
$$g_C^R = -g_A^R - 2g_D^R$$
$$g_D^R = -\frac{1}{2} (g_A^R + g_C^R)$$

Для рассматриваемой реакции в качестве ключевых выбираем компоненты A и C .

Скорости химической реакции по компонентам B и D выражаются через стехиометрические соотношения следующим образом:

$$g_B^R = \frac{dx_B}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dx_A}{dt} \quad \Longrightarrow \quad x_B - x_B^{(0)} = \frac{1}{2} (x_A - x_A^{(0)})$$

$$g_D^R = \frac{dx_D}{dt} = -\frac{1}{2} \left(\frac{dx_A}{dt} + \frac{dx_C}{dt} \right) \quad \Downarrow$$

$$x_D - x_D^{(0)} = -\frac{1}{2} \left[(x_A - x_A^{(0)}) + (x_C - x_C^{(0)}) \right]$$

Окончательный вид системы уравнений для описания скоростей химической реакции по компонентам включает два микрокинетических уравнения (вместо первоначальных четырёх) для двух ключевых компонентов A и C и два стехиометрических соотношения для определения концентраций компонентов B и D

$$\mathbf{1} \quad g_A^R = -2k_1 x_A^2 x_B + 2k_2 x_C^2;$$

$$\mathbf{2} \quad x_B = x_B^{(0)} + \frac{1}{2} (x_A - x_A^{(0)});$$

$$\mathbf{3} \quad g_C^R = 2k_1 x_A^2 x_B - 2k_2 x_C^2 - 2k_3 x_C^3;$$

$$\mathbf{4} \quad x_D = x_D^{(0)} - \frac{1}{2} [(x_A - x_A^{(0)}) + (x_C - x_C^{(0)})].$$