

66.02
Р65

А. С. Савенков, Л. В. Соловей,
Д. М. Дейнека, І. М. Рищенко

РОЗРАХУНОК ХІМІЧНИХ РЕАКТОРІВ ЧИСЛОВІ МЕТОДИ НА МОВІ С#

Навчальний посібник



Харків 2019

Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет
«Харківський політехнічний інститут»

А. С. Савенков, Л. В. Соловей, Д. М. Дейнека, І. М. Рищенко

РОЗРАХУНОК ХІМІЧНИХ РЕАКТОРІВ
ЧИСЛОВІ МЕТОДИ НА МОВІ C#

Навчальний посібник
для студентів хімічних спеціальностей

Рекомендовано Вченою радою
Національного технічного університету «ХПІ»

Харків
НТУ «ХПІ»
2019

УДК 66.011(075)

P65

Рецензенти:

І. М. Астрелін, д-р техн. наук, проф., заслужений діяч науки і техніки України, Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Сікорського»

О. В. Суворіц, д-р техн. наук, проф., завідувач кафедри хімічної інженерії та екології, Східноукраїнський національний університет ім. В. Даля

Рекомендовано вченою радою

Національного технічного університету «ХПІ»

як навчальний посібник для студентів хімічних спеціальностей,
протокол № 6 від 24.05.2019 р.

P65 Розрахунок хімічних реакторів. Числові методи на мові C# : навч. посіб. / А. С. Савенков, Л. В. Соловей, Д. М. Дейнека, І. М. Рищенко. Харків : ФОП Панов А.М., 2019. 308 с.

ISBN 978-617-7771-34-9

У навчальному посібнику наведено числові методи для розв'язання різних задач, пов'язаних з розрахунком реакторів хімічних технологій. Розрахунок технологічних параметрів реакцій, швидкості, перебігу взаємодії реагентів у часі проведено на мові програмування високого рівня C#. На великому обсязі задач і прикладів розглянуто методи практичного розрахунку хімічних реакторів. Навчальний посібник призначено для студентів хімічних спеціальностей

Іл. 62 Табл. 36 Бібліогр : 13 назв.

УДК 66.011(075)

ISBN 978-617-7771-34-9

© А. С. Савенков, Л. В. Соловей.

Д. М. Дейнека, І. М. Рищенко, 2019

ЗМІСТ

Вступ.....	6
1. Розв'язання параметричних задач хімічної технології.....	8
1.1. Розрахунок матеріального балансу хімічних реакцій.....	8
1.1.1. Теорія методу.....	8
1.1.2. Приклади розв'язання задач.....	11
1.1.3. Завдання для самостійної роботи.....	46
1.2. Розрахунок параметрів процесів у хімічній технології.....	53
1.2.1. Приклади розв'язання задач.....	53
1.2.2. Завдання для самостійної роботи.....	55
1.3. Розрахунок стехіометричних коефіцієнтів хімічної реакції.....	64
1.3.1. Теорія методу.....	64
1.3.2. Приклади розв'язання задач.....	65
1.3.3. Завдання для самостійної роботи.....	76
2. Розв'язання нелінійних рівнянь.....	78
2.1. Метод половинного ділення.....	78
2.1.1. Теорія методу половинного ділення.....	78
2.1.2. Приклади розв'язання задач.....	79
2.1.3. Завдання для самостійної роботи.....	89
2.2. Метод Ньютона (метод дотичних).....	101
2.2.1. Алгоритм методу.....	101
2.2.2. Приклади розв'язання задач.....	102
2.3. Розв'язання систем нелінійних рівнянь.....	106
2.3.1. Алгоритм методу.....	106
2.3.2. Приклади розв'язання задач.....	107
2.4. Завдання для самостійної роботи.....	112
3. Числові методи лінійної алгебри.....	120
3.1. Метод Гаусса-Жордана.....	120
3.1.1. Алгоритм методу.....	120
3.1.2. Приклади розв'язання задач.....	121
3.2. Метод простих ітерацій.....	124
3.2.1. Алгоритм методу.....	124

3.2.2. Приклади розв'язання задач.....	126
3.3. Правило Крамера.....	129
3.3.1. Алгоритм методу.....	129
3.3.2. Приклади розв'язання задач.....	130
3.4. Завдання для самостійної роботи.....	132
4. Наближення функцій багаточленів. Метод найменших квадратів.....	139
4.1. Теорія методу найменших квадратів.....	139
4.2. Приклади розв'язання задач.....	141
4.3. Завдання для самостійної роботи.....	153
5. Числове диференціювання та інтегрування.....	165
5.1. Формули числового диференціювання.....	165
5.1.1. Приклади розв'язання задач.....	165
5.1.2. Завдання для самостійної роботи.....	170
5.2. Числове інтегрування. Формули прямокутників, трапецій, поліномів.....	174
5.2.1. Теорія методу.....	174
5.2.2. Приклади розв'язання задач.....	180
5.2.3. Завдання для самостійної роботи.....	189
6. Числове інтегрування звичайних диференціальних рівнянь. Метод Рунге-Кутта.....	197
6.1. Теорія методу.....	197
6.2. Приклади розв'язання задач.....	199
6.3. Завдання для самостійної роботи.....	218
7. Методи оптимізації.....	228
7.1. Багатовимірна оптимізація. Модифікований метод Хука-Дживса.....	228
7.1.1. Теорія методу.....	228
7.1.2. Приклади розв'язання задач.....	228
7.1.3. Завдання для самостійної роботи.....	234
8. Прикладні розрахунки.....	244
8.1. Приклад виконання курсової роботи «Розрахунок реактора окиснення азоту (II) оксиду».....	244
8.1.1. Розрахунок матеріального балансу реакції окиснення	

аміаку та реакції окиснення азоту (II) оксиду.....	244
8.1.2. Аналіз кінетичних та математичних моделей.....	255
8.1.3. Вибір оптимального часу реакції та розрахунок реакційного об'єму.....	266
8.2. Приклад виконання курсової роботи «Розрахунок реактора конверсії вуглецю (II) оксиду».....	268
8.2.1. Розрахунок матеріального балансу.....	269
8.2.2. Розрахунок часу реакції.....	274
8.2.3. Розрахунок реакційного об'єму.....	281
8.3. Визначення приземної концентрації шкідливих речовин в атмосфері.....	283
8.4. Визначення похибки результатів вимірювань.....	293
Додаток 1. Теми курсових робіт з дисципліни «Математичне моделювання хіміко-технологічних процесів».....	305
Список літератури.....	307