

УДК 66.023:681.5

О.В. Тубольцева, В.Ф. Раков

Донецкий национальный технический университет, г. Донецк
кафедра автоматики и телекоммуникаций
Национальная Академия наук Украины
Научно-технологический центр «РЕАКТИВЭЛЕКТРОН», г. Донецк
E-mail: olga.tuboltseva@mail.ru, donmashinery@meta.ua

АНАЛИЗ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА ПОЛУНЕПРЕРЫВНОГО ДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ УСТОЙЧИВОСТИ

Аннотация

Тубольцева О.В., Раков В.Ф. Анализ математической модели химического реактора полунепрерывного действия для исследования устойчивости. Для нелинейной модели уравнения преобразованы к безразмерному виду, найдено состояние равновесия и показано, что система имеет единственное стационарное состояние, построены фазовые портреты в окрестности этого состояния, определены области устойчивости. Исследована система с физическими параметрами, показана идентичность ее фазового портрета, определенного по методике для безразмерной системы.

Ключевые слова: математическая модель, фазовый портрет, устойчивость реактора, области постоянства, безразмерные переменные, физические параметры.

Введение.

Для создания новых технологий производства нанодисперсных порошков функциональных материалов и технологий специальных химических реактивов необходима разработка математических моделей, адекватно описывающих физико-химические процессы, происходящие на различных стадиях процесса. Эти модели должны включать в себя анализ устойчивости работы технологического оборудования.

Главной задачей расчета устойчивости работы химических реакторов полунепрерывного действия (в которые непрерывно подаются исходные вещества, а продукты реакции удаляются периодически) является обеспечение условий безопасной эксплуатации и предупреждение аварийных ситуаций. Кроме этого, эксплуатация промышленной установки должна быть не только безопасной, но и обеспечивать требуемое качество продукции.

Исследование математических моделей химических реакторов полунепрерывного действия является особо актуальным для создания гибко перенастраиваемых малотоннажных производств нанодисперсных порошков функциональных материалов и специальных химических реактивов.

Постановка задачи.

В качестве математической модели реактора принимается система [1], состоящая из уравнений материального и теплового баланса:

$$\begin{cases} \frac{dC_x}{dt} = -AC_x^n e^{-\frac{E}{RT}} + \frac{q}{V} C_{x_0} \\ \frac{dT}{dt} = \frac{AH}{c_1 \rho_1} C_x^n e^{-\frac{E}{RT}} - \frac{hS}{c_1 \rho_1 V} (T - T_C) - \frac{c_2 \rho_2 q}{c_1 \rho_1 V} (T - T_B) \end{cases}, \quad (1)$$

где время t является независимой переменной, зависимые переменные: C_x – текущая концентрация реагента и T – температура реакционной системы, а остальные величины будем считать параметрами: A – предэкспоненциальный множитель уравнения Аррениуса, n – порядок реакции, E – энергия активации, R – универсальная газовая постоянная, q – объемная скорость подачи реагента, V – объем реакционной системы, S – поверхность теплопередачи, h – коэффициент теплопередачи, H – энтальпия реакции, c_1 – теплоемкость системы, c_2 – теплоемкость раствора подаваемого реагента, ρ_1 – плотность реакционной системы, ρ_2 – плотность раствора подаваемого реагента, T_c – температура внутренней стенки реактора, T_B – температура раствора подаваемого реагента.

Для аналитических исследований требуется преобразовать уравнения (1) к безразмерному виду, чтобы исследовать модельную систему на устойчивость при любом n , определить наличие стационарных состояний и качественное поведение решений системы.

Преобразование уравнений к безразмерному виду.

После перехода к безразмерным переменным множество параметров, входящих в уравнения, сводится к небольшому числу их безразмерных комбинаций.

Принимается, что $c_1 = c_2 = C$ и $\rho_1 = \rho_2 = \rho$. Такое допущение приемлемо, поскольку представленные физические параметры близки по величине, что подтверждено далее в вычислительном эксперименте.

Преобразуем 1-е уравнение системы (1). Для этого произведем замену переменных:

$$C_x = \frac{EC\rho}{RH} x, \quad T = \frac{E}{R} y, \quad t = A^{-1} \cdot \left(\frac{EC\rho}{RH} \right)^{1-n} \cdot \tau. \quad (2)$$

Исходя из того, что $x = \frac{RH}{EC\rho} C_x$, найдем и выразим производную по новой независимой переменной:

$$\begin{aligned} \frac{dx}{d\tau} &= \frac{dx}{dt} \cdot \frac{dt}{d\tau}, \quad \frac{dx}{dt} = \frac{RH}{EC\rho} \cdot \frac{dC_x}{dt}, \quad \frac{dt}{d\tau} = A^{-1} \left(\frac{EC\rho}{RH} \right)^{1-n}, \quad \Rightarrow \\ \frac{dx}{d\tau} &= \frac{RH}{EC\rho} \frac{dC_x}{dt} \cdot A^{-1} \left(\frac{EC\rho}{RH} \right)^{1-n} = A^{-1} \left(\frac{EC\rho}{RH} \right)^{-n} \frac{dC_x}{dt}, \quad \Rightarrow \\ \frac{dC_x}{dt} &= A \left(\frac{EC\rho}{RH} \right)^n \frac{dx}{d\tau}. \end{aligned} \quad (3)$$

Подставим (2) и (3) в 1-е уравнение системы (1), получим:

$$\begin{aligned} A \left(\frac{EC\rho}{RH} \right)^n \frac{dx}{d\tau} &= -A \left(\frac{EC\rho}{RH} x \right)^n e^{\frac{ER}{REy}} + \frac{q}{V} C_{x_0}, \\ \frac{dx}{d\tau} &= -x^n \cdot e^{-\frac{1}{y}} + \left(\frac{EC\rho}{RH} \right)^{-n} \frac{q}{AV} C_{x_0}. \end{aligned}$$

Аналогичным образом преобразуем 2-е уравнение системы (1).

$$\begin{aligned} y = \frac{R}{E} T \quad \Rightarrow \quad \frac{dy}{dt} &= \frac{R}{E} \cdot \frac{dT}{dt}. \\ \frac{dy}{d\tau} = \frac{R}{E} \frac{dT}{dt} \cdot A^{-1} \left(\frac{EC\rho}{RH} \right)^{1-n} &= \frac{R}{AE} \left(\frac{EC\rho}{RH} \right)^{1-n} \frac{dT}{dt} \quad \Rightarrow \\ \frac{dT}{dt} &= \frac{AE}{R} \left(\frac{EC\rho}{RH} \right)^{n-1} \frac{dy}{d\tau}. \end{aligned} \quad (4)$$

Подставим (2) и (4) во 2-е уравнение системы (1), получим:

$$\begin{aligned} \frac{AE}{R} \left(\frac{EC\rho}{RH} \right)^{n-1} \frac{dy}{d\tau} &= \frac{AH}{C\rho} \left(\frac{EC\rho}{RH} x \right)^n e^{-\frac{1}{y}} - \frac{hS + C\rho q}{C\rho V} \cdot \frac{E}{R} y + \frac{hST_C + C\rho q T_B}{C\rho V}, \\ \frac{dy}{d\tau} &= x^n e^{-\frac{1}{y}} - \frac{1}{A} \left(\frac{RH}{EC\rho} \right)^{n-1} \cdot \frac{hS + C\rho q}{C\rho V} y + \frac{R}{AE} \left(\frac{RH}{EC\rho} \right)^{n-1} \cdot \frac{hST_C + C\rho q T_B}{C\rho V}, \\ \frac{dy}{d\tau} &= x^n e^{-\frac{1}{y}} - \left(\frac{RH}{E} \right)^{n-1} \cdot \frac{hS + C\rho q}{AV(C\rho)^n} \left(y + \frac{R}{E} \cdot \frac{hST_C + C\rho q T_B}{hS + C\rho q} \right). \end{aligned}$$

Обозначим параметры

$$x_0 = \frac{q}{AV} \left(\frac{RH}{EC\rho} \right)^n C_{x_0}, \quad \mu = \frac{C\rho q + hS}{AV(C\rho)^n} \cdot \left(\frac{RH}{E} \right)^{n-1}, \quad y_0 = \frac{R(hST_C + C\rho q T_B)}{E(hS + C\rho q)}. \quad (5)$$

Таким образом, получим модельную систему безразмерного вида:

$$\begin{cases} \frac{dx}{d\tau} = -x^n \cdot e^{-\frac{1}{y}} + x_0 \\ \frac{dy}{d\tau} = x^n \cdot e^{-\frac{1}{y}} + \mu \cdot (y_0 - y) \end{cases}, \quad (6)$$

где x_0 , y_0 и μ – параметры из (5), а переменные связаны с переменными из системы (1) следующим образом

$$x = \frac{RH}{EC\rho} C_x, \quad y = \frac{R}{E} T, \quad \tau = A \cdot \left(\frac{EC\rho}{RH} \right)^{n-1} \cdot t.$$

Исследование на устойчивость и типы фазовых портретов.

Исследуем на устойчивость систему (6) при любом n . Для этого определим наличие стационарных состояний. Стационарные состояния или, как их еще называют, особые точки этой системы найдем как решения следующей системы:

$$\begin{cases} -x^n \cdot e^{-\frac{1}{y}} + x_0 = 0 \\ x^n \cdot e^{-\frac{1}{y}} + \mu \cdot (y_0 - y) = 0 \end{cases},$$

получим координаты стационарного состояния:

$$(x_S, y_S) = \left(\sqrt[n]{x_0 \cdot e^{\frac{\mu}{x_0 + \mu \cdot y_0}}}, \frac{x_0}{\mu} + y_0 \right). \quad (7)$$

Несмотря на нелинейность, система имеет единственное стационарное состояние, т.е. моностационарна. Исследование устойчивости реактора сводится к определению устойчивости его стационарного состояния.

Для определения устойчивости положения равновесия (7) введем новые переменные

$$\xi = x - x_S \text{ и } \eta = y - y_S,$$

имеющие смысл отклонений от координат исследуемого положения равновесия $(x, y) = (x_S, y_S)$. Тогда подставим в систему (6):

$$x = \xi + x_S \text{ и } y = \eta + y_S,$$

в новых координатах ξ, η система (6) примет вид

$$\begin{cases} \frac{d\xi}{d\tau} = -(\xi + x_s)^n \cdot \exp\left(-\frac{1}{\eta + y_s}\right) + x_0 \\ \frac{d\eta}{d\tau} = (\xi + x_s)^n \cdot \exp\left(-\frac{1}{\eta + y_s}\right) + \mu \cdot (y_0 - \eta - y_s) \end{cases}$$

Якобиан системи:

$$J = \begin{pmatrix} -n(\xi + x_s)^{n-1} \exp\left(-\frac{1}{\eta + y_s}\right) & -\frac{(\xi + x_s)^n}{(\eta + y_s)^2} \exp\left(-\frac{1}{\eta + y_s}\right) \\ n(\xi + x_s)^{n-1} \exp\left(-\frac{1}{\eta + y_s}\right) & \frac{(\xi + x_s)^n}{(\eta + y_s)^2} \cdot \exp\left(-\frac{1}{\eta + y_s}\right) - \mu \end{pmatrix}$$

$$J|_{(0,0)} = \begin{pmatrix} -nx_s^{n-1} \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right) & -\frac{x_s^n}{y_s^2} \cdot \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right) \\ nx_s^{n-1} \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right) & \frac{x_s^n}{y_s^2} \cdot \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right) - \mu \end{pmatrix}$$

Запишем систему линейного приближения в окрестности стационарного состояния $(\xi, \eta) = (0, 0)$:

$$\begin{cases} \frac{d\xi}{d\tau} = j_{11}\xi + j_{12}\eta \\ \frac{d\eta}{d\tau} = j_{21}\xi + j_{22}\eta \end{cases}, \tag{8}$$

где коэффициенты

$$j_{11} = -nx_s^{n-1} \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right) \quad j_{12} = -\frac{x_s^n}{y_s^2} \cdot \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right)$$

$$j_{21} = nx_s^{n-1} \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right) \quad j_{22} = \frac{x_s^n}{y_s^2} \cdot \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right) - \mu$$

Составим характеристическое уравнение для системы (8):

$$k^2 - (j_{11} + j_{22})k + j_{11}j_{22} - j_{12}j_{21} = 0.$$

Обозначим:

$$\sigma = -(j_{11} + j_{22}),$$

$$\Delta = j_{11}j_{22} - j_{12}j_{21}.$$

Характеристическое уравнение запишется так:

$$k^2 + \sigma k + \Delta = 0.$$

Из условий Рауса–Гурвица, а также исходя из свойств квадратного уравнения, положение равновесия устойчиво, если выполняются неравенства

$$\sigma > 0 \text{ и } \Delta > 0.$$

Выразим Δ и σ :

$$\Delta = -nx_s^{n-1} \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right) \cdot \left(\frac{x_s^n}{y_s^2} \cdot \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right) - \mu\right) + nx_s^{n-1} \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right) \cdot \frac{x_s^n}{y_s^2} \cdot \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right),$$

$$\Delta = -nx_s^{n-1} \cdot \frac{x_s^n}{y_s^2} \cdot \exp\left(-\frac{2}{y_s}\right) + nx_s^{n-1} \exp\left(-\frac{1}{y_s}\right) \mu + nx_s^{n-1} \cdot \frac{x_s^n}{y_s^2} \cdot \exp\left(-\frac{2}{y_s}\right),$$

$$\Delta = nx_S^{n-1} \exp\left(-\frac{1}{y_S}\right)\mu \quad \text{и} \quad \sigma = x_S^{n-1} \cdot \left(n - \frac{x_S}{y_S^2}\right) \exp\left(-\frac{1}{y_S}\right) + \mu. \quad (9)$$

Характеристические числа системы

$$k_{1,2} = 1/2 \cdot \left(-\sigma \pm \sqrt{\sigma^2 - 4\Delta}\right).$$

Из (9) следует, что $\Delta > 0$, поскольку $x_0 > 0$ и, следовательно, $x_S > 0$.

Если $\sigma^2 > 4\Delta$, то положение равновесия – узел, если $\sigma^2 < 4\Delta$, то фокус. Его устойчивость зависит от знака σ , когда $\sigma > 0$ имеем устойчивое положение равновесия. Уравнение границы между узлами и фокусами имеет вид: $\sigma^2 = 4\Delta$. При таких значениях параметров характеристические числа кратные: $k_1 = k_2 = -1/2\sigma$. Фазовый портрет представляет собой вырожденный узел.

Если $\sigma = 0$, то $k_{1,2} = \pm i\sqrt{\Delta}$, такое положение равновесия системы линейного приближения называется центр, оно устойчиво не асимптотически, однако необходимо учитывать нелинейные слагаемые, чтобы сделать вывод об устойчивости исходной нелинейной системы.

Примеры фазовых траекторий для безразмерной системы.

Рассмотрим влияние параметров системы (6) на ее поведение. Как показано выше, при изменении параметров (5) система (6) имеет одно состояние равновесия (7), однако реализуются различные типы фазовых портретов. В таблице 1 показаны возможные фазовые портреты, когда $\Delta > 0$, при изменении параметра σ , определенного в (9).

Таблица 1 — Типы фазовых портретов

№ области	Тип фазового портрета	Устойчивость	Значения параметра σ
I	Узел	Устойчив асимптотически	$\sigma > 0, \sigma^2 > 4\Delta$
II	Фокус	Устойчив асимптотически	$\sigma > 0, \sigma^2 < 4\Delta$
III	Фокус	Не устойчив	$\sigma < 0, \sigma^2 > 4\Delta$
IV	Узел	Не устойчив	$\sigma < 0, \sigma^2 > 4\Delta$
V	Линейное приближение: центр	Линейное приближение устойчиво асимптотически.	$\sigma = 0$
VI	Вырожденный узел	Устойчив асимптотически	$\sigma^2 = 4\Delta, \sigma > 0$
VII	Вырожденный узел	Не устойчив	$\sigma^2 = 4\Delta, \sigma < 0$

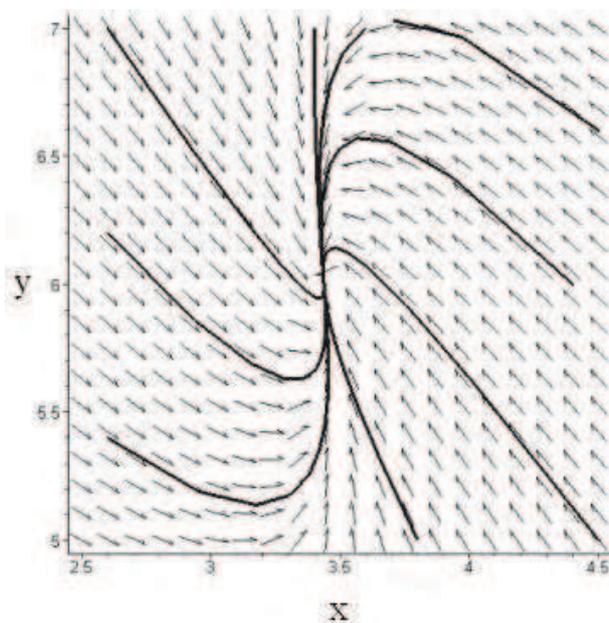
Отметим, что область V (как и области VI и VII) из таблицы 1, соответствующая кривой $\sigma = 0$, это множество меры ноль, ему соответствуют иррациональные значения, попасть в него на практике нереально. Кроме того, оно является границей устойчивости системы, а, следовательно, областью, которую следует избегать.

На рис. 1 показано поведение траекторий системы (6) при $n = 2, \mu = 2$ и некоторых параметрах x_0, y_0 :

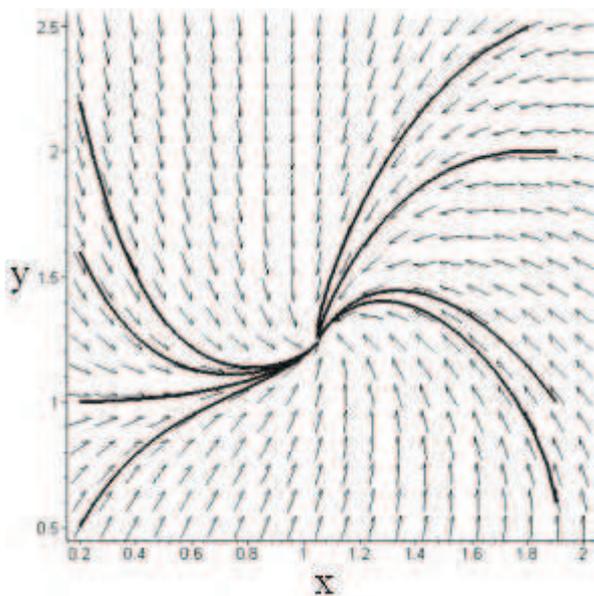
а) $x_0 = 10, y_0 = 1$, тогда из (7), получим $(x_S, y_S) = (10 \cdot e^{1/6}; 6) \approx (3,437092; 6)$, траектории в окрестности данной точки изображены на рис. 1а). Из (9) получим: $\Delta = 11,63774, \sigma = 7,541, \sigma^2 = 56,8681, 4\Delta = 46,55$, т.е. $\sigma^2 > 4\Delta$ – параметры соответствуют I области.

б) $x_0 = 0,5, y_0 = 1$, тогда из (7), получим $(x_S, y_S) = (1,054879; 1,25)$, траектории в окрестности данной точки изображены на рис. 1б). Подсчитаем из (9) значения: $\Delta = 1,895951,$

$\sigma = 2,627976$, тогда $\sigma^2 = 6,9$, $4\Delta = 7,5838$, т.е. $\sigma^2 < 4\Delta$ – параметры соответствуют II области.



а) Поведение траекторий системы для параметров из I области.



б) Поведение траекторий системы для параметров из II области.

Рисунок 1 — Фазовые портреты для параметров из области устойчивости, $\sigma > 0$

Как показано в [2], в зависимости от типа устойчивости реактора выбирается адекватный способ управления. В частности, в окрестности узла требуется жесткое управление, а в случае фокуса – мягкое, с незначительным по величине и непродолжительным по времени изменением параметров системы.

Вычислительный эксперимент.

Проведем исследование системы с физическими параметрами. Один из вариантов значений параметров для системы (1) с физическими параметрами представлен в таблице 2. Такая система соответствует процессу растворения железа в азотной кислоте.

Таблица 2 — Физические параметры реактора и вещества.

Физические параметры	Значения параметров
Предэкспоненциальный множитель уравнения Аррениуса, A	$1000 \text{ м}^3/(\text{кг} \cdot \text{с})$
Порядок реакции, n	1,5
Энергия активации, E	15000 Дж/моль
Универсальная газовая постоянная, R	$8,31 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$
Объемная скорость подачи реагента, q	$0,001 \text{ м}^3/\text{с}$
Объем реакционной системы, V	$0,229074 \text{ м}^3$
Концентрация раствора подаваемого реагента, C_{x_0}	$30 \text{ кг}/\text{м}^3$
Теплоемкость системы, c_1	$4100 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$
Теплоемкость раствора подаваемого реагента, c_2	$4100 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$
Плотность реакционной системы, ρ_1	$1200 \text{ кг}/\text{м}^3$
Плотность раствора подаваемого реагента, ρ_2	$1020 \text{ кг}/\text{м}^3$
Энтальпия системы, H	300000 Дж/моль
Коэффициент теплопередачи, h	$18 \text{ Дж}/(\text{м}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{К})$
Поверхность теплопередачи, S	$1,178097 \text{ м}^2$
Температура внутренней стенки реактора, T_C	300 К
Температура раствора подаваемого реагента, T_B	330 К

Графическое решение, выполненное с помощью пакета Maple, представлено на рис. 2.

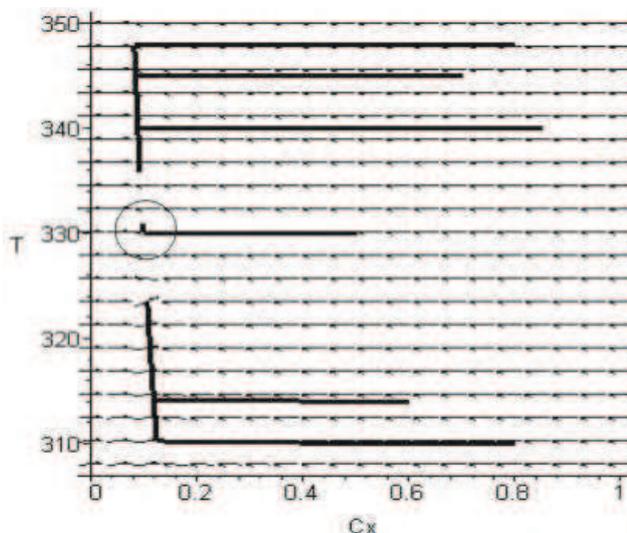


Рисунок 2 — Поведение семейства траекторий системы (1) в плоскости Cx, T

Видно, что в фазовой плоскости концентрация-температура реализуется одно стационарное состояние $(C_{x_{ст}}; T_{ст}) \approx (0,1 \text{ л}/\text{м}^3; 330 \text{ К})$, в окрестности которого фазовые траектории имеют вид устойчивого узла. Стрелками указано поле направлений в фазовой плоскости Cx, T .

Для проверки типа фазового портрета определим его по методике для безразмерной системы. Принимая $\rho = \rho_1$, воспользуемся формулами (5) и (7), чтобы получить значения модельной (безразмерной) системы, соответствующие исследуемой системе с физическими параметрами:

$$x_0 = 2,57124 \cdot 10^{-11}, \quad y_0 = 182,0361203, \quad \mu = 2,54814 \cdot 10^{-8}, \\ x_s = 8,74352 \cdot 10^{-8}, \quad y_s = 182,0371294.$$

Из (9) получим

$$\Delta = 1,12402 \cdot 10^{-11}, \quad \sigma = 0,000441137.$$

Поскольку $\sigma^2 > 4\Delta$ ($1,94602 \cdot 10^{-7} > 4,49607 \cdot 10^{-11}$), значит, фазовый портрет такой системы соответствует I области, которая содержит асимптотически устойчивый узел, как это показано в табл.1. Следовательно, качественное поведение безразмерной системы и системы с физическими параметрами совпадает.

Выводы.

1. В результате проведенного анализа нелинейной модели химического реактора полунепрерывного действия найдено стационарное состояние системы и показано, что оно является единственным.
2. Определены области устойчивости пространства параметров.
3. Численные исследования системы с физическими параметрами подтвердили, что преобразование модели к безразмерному виду позволяет исследовать систему на устойчивость при любом порядке реакции.

Надійшла до редакції:
24.01.2011

Рекомендовано до друку:
д-р техн. наук, проф. Ткаченко В.М.

Литература

1. Вольтер Б. В. Устойчивость режимов работы химических реакторов / Б. В. Вольтер, И.Е. Сальников. – М.: Химия, 1981. – 198с.
2. Дайчман Е.Е. Модель циклически обостряемого реактора / Е.Е. Дайчман, Е.Н. Кондратьев // Вісник Одеськ. держ. ун-ту. - 2001. - Т. 6. - Вип. 3. - С. 134 – 140.

Abstract

Tuboltseva O.V., Rakov V.F. The research of mathematical model of semicontinuous action editor for the stability analysis. The nonlinear model equations are rearranged to the dimensionless form. The stability condition is obtained and the uniqueness of stability state for the system is shown. The phase portraits in the neighbourhood of this state are built; the regions of stability are specified. The system with physical parameters was investigated and it was shown the identity of the system phase portrait defined by model dimensionless system method.

Keywords: mathematical model, phase portrait, editor stability, stability regions, dimensionless variables, physical parameters.

Анотація

Тубольцева О.В., Раков В.Ф. Аналіз математичної моделі хімічного реактору напівбезперервної дії для дослідження стійкості. Для нелінійної моделі рівняння перетворені до безрозмірного виду, знайдений стан рівноваги й показано, що система має єдиний стаціонарний стан, побудовані фазові портрети в околиці цього стану, визначені області стійкості. Досліджено систему з фізичними параметрами, показано ідентичність її фазового портрета, визначеного за методикою для безрозмірної системи.

Ключові слова: математична модель, фазовий портрет, стійкість реактору, області постійності, безрозмірні змінні, фізичні параметри.

© Тубольцева О.В., Раков В.Ф., 2011