

СТРУКТУРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРАВЛЯЕМЫХ ПРОЦЕССОВ ДИФФУЗИИ В УСЛОВИЯХ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ МЕЖДУ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИМИ КОМПОНЕНТАМИ*

А.Г. Мандра, Э.Я. Рапопорт

Самарский государственный технический университет
443076, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244
E-mail: amandra@mail.ru

Рассматривается задача структурного моделирования управляемых процессов, описываемых диффузионной моделью вытеснения и моделью идеального вытеснения, в условиях протекания химической реакции между взаимодействующими компонентами. Рассмотрены возможности линеаризации нелинейных моделей.

Ключевые слова: диффузия, химическая реакция, структурная модель объекта управления, распределенная система, застойная зона.

Общие сведения. В общем виде поведение концентраций двух взаимодействующих компонентов по объему химического реактора с учетом стехиометрического уравнения [1, 2]



может быть описано системой уравнений диффузионных потоков в векторной форме в цилиндрических координатах [1, 2]:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_1}{\partial t} - D \nabla^2 C_1 + \nabla(\mathbf{v}_1 \cdot C_1) = -k C_1^{\alpha_1} C_2^{\alpha_2}; \\ \frac{\partial C_2}{\partial t} - D \nabla^2 C_2 + \nabla(\mathbf{v}_2 \cdot C_2) = -k C_1^{\alpha_1} C_2^{\alpha_2}, \end{cases} \quad (2)$$

дополненной соответствующими граничными условиями, где $C_1 = C_1(r, l, \varphi, t)$ – функция концентрации компоненты A_1 в каждой точке среды, $C_2 = C_2(r, l, \varphi, t)$ – концентрация компоненты A_2 , D – скалярный коэффициент диффузии в изотропной среде, k – константа скорости химической реакции, $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_1(r, l, \varphi, t)$ – вектор скорости компоненты A_1 в каждой точке среды, $\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_2(r, l, \varphi, t)$ – вектор скорости компоненты A_2 в каждой точке среды, ∇ – градиент, ∇^2 – оператор Лапласа.

Структурное представление процесса, описываемого диффузионной моделью вытеснения. При описании поведения концентраций исходных компонентов в химическом реакторе, который можно описать одномерной диффузионной моделью вытеснения [2], при условии, что в реакторе протекает химическая реакция второго порядка ($\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 1$), система уравнений (2), описывающая пространственно-

*Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009-2013 годы», проект 2010-1.3.1-230-009/8; АВЦП «Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2010 годы)», проект 2.1.2/4236; гранта РФФИ проект 10-08-00754-а.

Андрей Геннадьевич Мандра – аспирант

Эдгар Яковлевич Рапопорт – д.т.н., профессор.

одномерный процесс изменения концентраций компонент A_1 и A_2 , принимает следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_{a1}(l,t)}{\partial t} + V_a \frac{\partial C_{a1}(l,t)}{\partial l} = D_a \frac{\partial^2 C_{a1}(l,t)}{\partial l^2} - k_a C_{a1}(l,t) C_{a2}(l,t); \\ \frac{\partial C_{a2}(l,t)}{\partial t} + V_a \frac{\partial C_{a2}(l,t)}{\partial l} = D_a \frac{\partial^2 C_{a2}(l,t)}{\partial l^2} - k_a C_{a1}(l,t) C_{a2}(l,t), \end{cases} \quad (3)$$

$$0 \leq l \leq L_a, \quad t > 0, \quad (4)$$

с граничными и начальными условиями:

$$C_{a1}(0,t) = g_1(t), \quad \frac{\partial C_{a1}(L_a,t)}{\partial l} = 0, \quad (5)$$

$$C_{a2}(0,t) = g_2(t), \quad \frac{\partial C_{a2}(L_a,t)}{\partial l} = 0, \quad (6)$$

$$C_{a1}(l,0) = C_{10}, \quad C_{a2}(l,0) = C_{20}, \quad (7)$$

где $C_{a1}(l,t)$, $C_{a2}(l,t)$ – значения концентраций компонентов A_1 и A_2 соответственно; V_a – скорость движения в реакторе; k_a – константа скорости химической реакции; D_a – скалярный коэффициент диффузии; $g_1(t)$ – значение концентрации A_1 на входе в реактор; $g_2(t)$ – значение концентрации A_2 на входе в реактор.

При рассмотрении поведения процесса при малых отклонениях от стационарного состояния система уравнений (3)–(6) в линейном приближении [3] примет следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial \Delta C_{a1}(l,t)}{\partial t} + V_a \frac{\partial \Delta C_{a1}(l,t)}{\partial l} = D_a \frac{\partial^2 \Delta C_{a1}(l,t)}{\partial l^2} - k_a [C_{a1}^0 C_{a2}^0 + C_{a2}^0 \Delta C_{a1}(l,t) + C_{a1}^0 \Delta C_{a2}(l,t)]; \\ \frac{\partial \Delta C_{a2}(l,t)}{\partial t} + V_a \frac{\partial \Delta C_{a2}(l,t)}{\partial l} = D_a \frac{\partial^2 \Delta C_{a2}(l,t)}{\partial l^2} - k_a [C_{a1}^0 C_{a2}^0 + C_{a2}^0 \Delta C_{a1}(l,t) + C_{a1}^0 \Delta C_{a2}(l,t)], \end{cases} \quad (8)$$

$$\Delta C_{a1}(0,t) = \Delta g_1(t), \quad \frac{\partial \Delta C_{a1}(L_a,t)}{\partial l} = 0, \quad (9)$$

$$\Delta C_{a2}(0,t) = \Delta g_2(t), \quad \frac{\partial \Delta C_{a2}(L_a,t)}{\partial l} = 0, \quad (10)$$

где C_{a1}^0 , C_{a2}^0 – значение концентраций в стационарном состоянии.

На основе уравнений (8)–(10) можно составить структурную схему процесса взаимодействия компонентов в терминах структурной теории систем с распределенными параметрами [4] (рис. 1).

Здесь передаточная функция $W_a(l, \eta, p)$ получена методом конечных интегральных преобразований [4]:

$$W_a(l, \eta, p) = \exp\left(\frac{V_a}{2D_a}(l-\eta)\right) \sum_{n=1}^{\infty} E_n^2 \frac{\sin\left(\frac{\lambda_n}{L_a}\eta\right) \sin\left(\frac{\lambda_n}{L_a}l\right)}{p + \mu_n^2}, \quad (11)$$

где $E_n^2 = \frac{4\lambda_n}{2\lambda_n L_a - L_a \sin(2\lambda_n)}$; $\mu_n^2 = D_a \left(\frac{\lambda_n}{L_a} \right)^2 + \frac{V_a^2}{4D_a}$ – собственные числа, где λ_n , $n = 1, 2, \dots$, – бесконечно возрастающая последовательность корней уравнения:

$$\operatorname{tg}(\lambda) + \frac{2D_a \lambda}{V_a L_a} = 0. \quad (12)$$

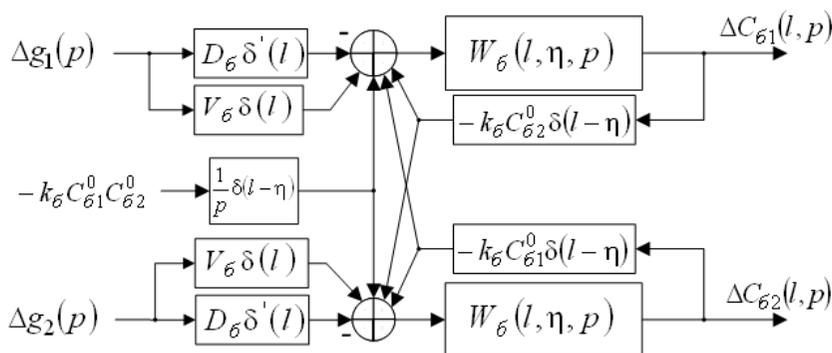


Рис. 1. Структурная схема процесса, описываемого диффузионной моделью вытеснения

Переходные блоки описываются пространственными дельта-функциями $\delta(l)$, $\delta(l-\eta)$ и их производными $\delta'(l)$, $\delta'(l-\eta)$.

Из общей структурной схемы (рис. 1) с распределенными воздействиями и распределенными переходными блоками можно получить на основании (11), используя известные правила структурных преобразований и свойства дельта-функций, структурную схему распределенного процесса диффузии в реакторе с сосредоточенными воздействиями и сосредоточенными управляемыми величинами $\Delta C_{a1}(L_a, t)$, $\Delta C_{a2}(L_a, t)$ (рис. 2).

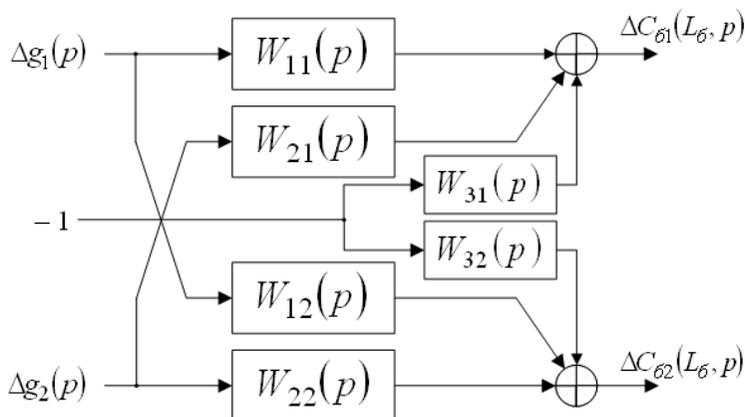


Рис. 2. Структурная схема процесса, описываемого диффузионной моделью вытеснения с сосредоточенными управляющими величинами

Передаточные функции на рис. 2 в соответствии с (11) и структурной схемой на рис. 1 имеют следующий вид:

$$W_{11}(p) = \frac{1}{L_{\dot{a}}} \exp\left(\frac{V_{\dot{a}} L_{\dot{a}}}{2D_{\dot{a}}}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n^2 \lambda_n \sin(\lambda_n) (p + \mu_{2n}^2)}{(p + \mu_{1n}^2)(p + \mu_{2n}^2) - k_{\dot{a}}^2 C_{\dot{a}1}^0 C_{\dot{a}2}^0}, \quad (13)$$

$$W_{21}(p) = -\frac{1}{L_{\dot{a}}} \exp\left(\frac{V_{\dot{a}} L_{\dot{a}}}{2D_{\dot{a}}}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n^2 \lambda_n \sin(\lambda_n) k_{\dot{a}} C_{\dot{a}1}^0}{(p + \mu_{2n}^2)(p + \mu_{1n}^2) - k_{\dot{a}}^2 C_{\dot{a}1}^0 C_{\dot{a}2}^0}, \quad (14)$$

$$W_{31}(p) = \exp\left(\frac{V_{\dot{a}} L_{\dot{a}}}{2D_{\dot{a}}}\right) \frac{k_{\dot{a}} C_{\dot{a}1}^0 C_{\dot{a}2}^0}{D_{\dot{a}} p} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n^2 T_n \sin(\lambda_n) (p + \mu_{2n}^2 - k_{\dot{a}} C_{\dot{a}1}^0)}{(p + \mu_{1n}^2)(p + \mu_{2n}^2) - k_{\dot{a}}^2 C_{\dot{a}1}^0 C_{\dot{a}2}^0}, \quad (15)$$

$$W_{12}(p) = -\frac{1}{L_{\dot{a}}} \exp\left(\frac{V_{\dot{a}} L_{\dot{a}}}{2D_{\dot{a}}}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n^2 \lambda_n \sin(\lambda_n) k_{\dot{a}} C_{\dot{a}2}^0}{(p + \mu_{1n}^2)(p + \mu_{2n}^2) - k_{\dot{a}}^2 C_{\dot{a}1}^0 C_{\dot{a}2}^0}, \quad (16)$$

$$W_{22}(p) = \frac{1}{L_{\dot{a}}} \exp\left(\frac{V_{\dot{a}} L_{\dot{a}}}{2D_{\dot{a}}}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n^2 \lambda_n \sin(\lambda_n) (p + \mu_{1n}^2)}{(p + \mu_{2n}^2)(p + \mu_{1n}^2) - k_{\dot{a}}^2 C_{\dot{a}1}^0 C_{\dot{a}2}^0}, \quad (17)$$

$$W_{32}(l, p) = \exp\left(\frac{V_{\dot{a}} L_{\dot{a}}}{2D_{\dot{a}}}\right) \frac{k_{\dot{a}} C_{\dot{a}1}^0 C_{\dot{a}2}^0}{D_{\dot{a}} p} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{E_n^2 T_n \sin(\lambda_n) (p + \mu_{1n}^2 - k_{\dot{a}} C_{\dot{a}2}^0)}{(p + \mu_{2n}^2)(p + \mu_{1n}^2) - k_{\dot{a}}^2 C_{\dot{a}1}^0 C_{\dot{a}2}^0}, \quad (18)$$

где $T_n = L_{\dot{a}} \frac{\lambda_n \exp\left(-\frac{V_{\dot{a}} L_{\dot{a}}}{2D_{\dot{a}}}\right) \cos(\lambda_n) - \lambda_n + \frac{V_{\dot{a}} L_{\dot{a}}}{2D_{\dot{a}}} \exp\left(-\frac{V_{\dot{a}} L_{\dot{a}}}{2D_{\dot{a}}}\right) \sin(\lambda_n)}{L_{\dot{a}}^2 \left(\frac{V_{\dot{a}}}{2D_{\dot{a}}}\right)^2 + \lambda_n^2}$.

Структурное представление процесса, описываемого идеальной моделью вытеснения. При описании поведения концентраций исходных реагентов в химическом реакторе, которое можно описать одномерной моделью идеального вытеснения [2], при условии, что в реакторе протекает химическая реакция второго порядка ($\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 1$), система уравнений (2), описывающая пространственно-одномерный процесс изменения концентраций компонентов A_1 и A_2 , принимает следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_{\delta 1}(l, t)}{\partial t} + V_{\delta} \frac{\partial C_{\delta 1}(l, t)}{\partial l} = -k_{\delta} C_{\delta 1}(l, t) C_{\delta 2}(l, t); \\ \frac{\partial C_{\delta 2}(l, t)}{\partial t} + V_{\delta} \frac{\partial C_{\delta 2}(l, t)}{\partial l} = -k_{\delta} C_{\delta 1}(l, t) C_{\delta 2}(l, t), \end{cases} \quad (19)$$

$$0 \leq l \leq L_{\delta}, \quad t > 0, \quad (20)$$

с граничными и начальными условиями:

$$C_{\delta 1}(0, t) = g_1(t), \quad \frac{\partial C_{\delta 1}(L_{\delta}, t)}{\partial l} = 0, \quad (21)$$

$$C_{\delta 2}(0, t) = g_2(t), \quad \frac{\partial C_{\delta 2}(L_{\delta}, t)}{\partial l} = 0, \quad (22)$$

$$C_{\delta 1}(l, 0) = C_{10}, \quad C_{\delta 2}(l, 0) = C_{20}, \quad (23)$$

где $C_{\delta 1}(l, t)$, $C_{\delta 2}(l, t)$ – значения концентраций компонентов A_1 и A_2 соответственно; V_{δ} – скорость движения в реакторе; k_{δ} – константа скорости химической реакции; $g_1(t)$ – значение концентрации компонента A_1 на входе в реактор; $g_2(t)$ – значение концентрации компонента A_2 на входе в реактор.

При рассмотрении поведения процесса при малых отклонениях система уравнений (19)–(23) в линейном приближении [3] будем иметь вместо (19):

$$\begin{cases} \frac{\partial C_{\delta 1}(l,t)}{\partial t} + V_{\delta} \frac{\partial C_{\delta 1}(l,t)}{\partial l} = -k_{\delta} C_{\delta 1}^0 C_{\delta 2}^0 - k_{\delta} C_{\delta 2}^0 \Delta C_{\delta 1}(l,t) - k_{\delta} C_{\delta 1}^0 \Delta C_{\delta 2}(l,t); \\ \frac{\partial C_{\delta 2}(l,t)}{\partial t} + V_{\delta} \frac{\partial C_{\delta 2}(l,t)}{\partial l} = -k_{\delta} C_{\delta 1}^0 C_{\delta 2}^0 - k_{\delta} C_{\delta 2}^0 \Delta C_{\delta 1}(l,t) - k_{\delta} C_{\delta 1}^0 \Delta C_{\delta 2}(l,t), \end{cases} \quad (24)$$

$$0 \leq l \leq L_{\delta}, \quad t > 0, \quad (25)$$

с граничными и начальными условиями:

$$\Delta C_{\delta 1}(0,t) = \Delta g_1(t), \quad \frac{\partial \Delta C_{\delta 1}(L_{\delta},t)}{\partial l} = 0, \quad (26)$$

$$\Delta C_{\delta 2}(0,t) = \Delta g_2(t), \quad \frac{\partial \Delta C_{\delta 2}(L_{\delta},t)}{\partial l} = 0; \quad (27)$$

$C_{\delta 1}^0, C_{\delta 2}^0$ – значение концентраций в стационарном состоянии.

На основе уравнений (25)–(28) можно составить следующую структурную схему процесса взаимодействия компонентов в терминах структурной теории систем с распределенными параметрами [4] (рис. 3).

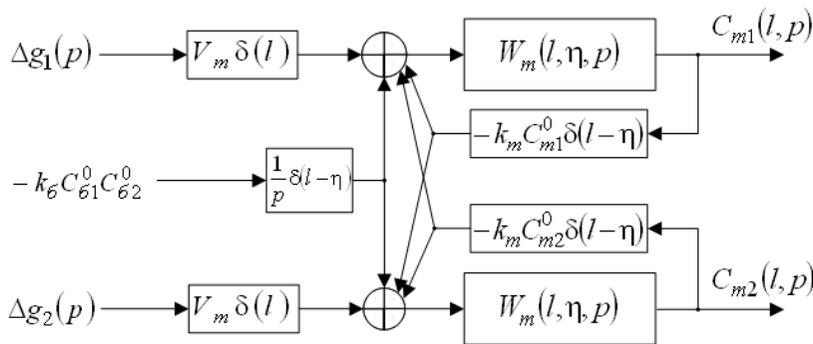


Рис. 3. Структурная схема процесса, описываемого моделью идеального вытеснения

Здесь передаточная функция $W_{\delta}(l, \eta, p)$ описывается известным выражением [5]:

$$W_{\delta}(l, \eta, p) = \mathbf{1}(l - \eta) \frac{1}{V_{\delta}} \exp\left[-\frac{l - \eta}{V_{\delta}} p\right]. \quad (28)$$

Структурная схема распределенного процесса идеального вытеснения с сосредоточенными выходными величинами имеет вид диффузионной модели (см. рис. 2), но аналогичные передаточные функции описываются следующими соотношениями:

$$W_{11}(p) = \frac{C_{\delta 1}^0 + C_{\delta 2}^0 \exp\left(-k_m (C_{\delta 1}^0 + C_{\delta 2}^0) \frac{L_{\delta}}{V_{\delta}}\right)}{C_{\delta 1}^0 + C_{\delta 2}^0} \exp\left(-\frac{L_{\delta}}{V_{\delta}} p\right), \quad (29)$$

$$W_{21}(p) = -C_{\delta 1}^0 \frac{1 - \exp\left(-k_m \left(C_{\delta 1}^0 + C_{\delta 2}^0\right) \frac{L_{\delta}}{V_{\delta}}\right)}{C_{\delta 1}^0 + C_{\delta 2}^0} \exp\left(-\frac{L_{\delta}}{V_{\delta}} p\right), \quad (30)$$

$$W_{31}(l, p) = W_{32}(l, p) = \frac{k_m C_{\delta 1}^0 C_{\delta 2}^0 \left(1 - \exp\left(-k_m \left(C_{\delta 1}^0 + C_{\delta 2}^0\right) \frac{L_{\delta}}{V_{\delta}}\right) \exp\left(-\frac{L_{\delta}}{V_{\delta}} p\right)\right)}{p \left(p + k_m \left(C_{\delta 1}^0 + C_{\delta 2}^0\right)\right)}, \quad (31)$$

$$W_{22}(l, p) = \frac{C_{\delta 1}^0 \exp\left(-k_m \left(C_{\delta 1}^0 + C_{\delta 2}^0\right) \frac{L_{\delta}}{V_{\delta}}\right) + C_{\delta 2}^0}{C_{\delta 1}^0 + C_{\delta 2}^0} \exp\left(-\frac{L_{\delta}}{V_{\delta}} p\right), \quad (32)$$

$$W_{12}(l, p) = -C_{\delta 2}^0 \frac{1 - \exp\left(-k_m \left(C_{\delta 1}^0 + C_{\delta 2}^0\right) \frac{L_{\delta}}{V_{\delta}}\right)}{C_{\delta 1}^0 + C_{\delta 2}^0} \exp\left(-\frac{L_{\delta}}{V_{\delta}} p\right). \quad (33)$$

Структурная модель процесса нейтрализации. В более общем случае химический реактор как объект управления имеет более сложную структуру [2]. Рассмотрим химический реактор с застойной зоной, который оснащен трубопроводом рециркуляции.

Использование серной кислоты при подготовке химически очищенной воды на ТЭЦ ВАЗа обуславливает проведение дополнительных технологических операций – нейтрализации сточных вод. Сброс воды в бак нейтрализации (БН) ведется с разных участков технологической цепи подготовки воды, при этом состав сточных вод остается постоянным – раствор серной кислоты, сульфаты кальция и магния. Нейтрализация осуществляется путем подачи известковой воды на вход рециркуляционного насоса (РН, см. рис. 1). Смесь раствора из бака нейтрализации и известковой воды (ИВ) возвращается в бак, где и происходит нейтрализация. Контроль значения водородного показателя (рН) осуществляется на выходе рециркуляционного насоса, рН-метр состоит из импульсной трубки и блока измерения.

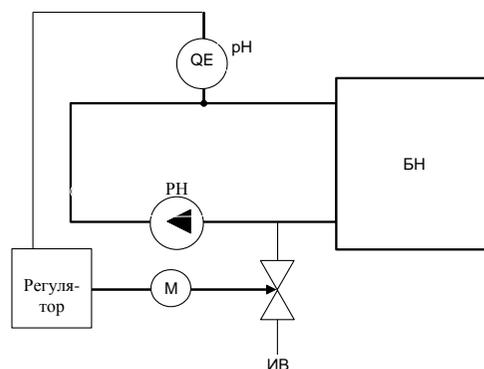
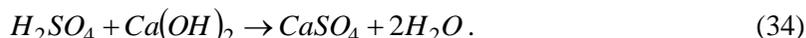


Рис. 4. Схема объекта структурного моделирования

Процесс химической нейтрализации серной кислоты известковой водой описывается стехиометрическим уравнением (концентрациями солей кальция и магния можно пренебречь):



Предполагая, что внутри бака нейтрализации в процессе рециркуляции формируется устойчивый контур движения жидкости, выделим две зоны внутри бака: зону с «активной» фазой реакции и застойную зону [2]. Для учета застойной зоны необходимо в первом уравнении в системе (3) дополнить функцию источников слагаемым $C_{cc}(l, t)$, значение которого уменьшается по мере добавления щелочи:

$$C_{\zeta\zeta}(l, t) = C_{20} - \frac{Q_a}{Q_{\zeta\zeta}} R(l, t), \quad (35)$$

где $R(l, t)$ – концентрация $CaSO_4$ (продукт реакции) в баке; Q_a , $Q_{\zeta\zeta}$ – объем бака с «активной» фазой реакции и объем бака с застойной зоной соответственно.

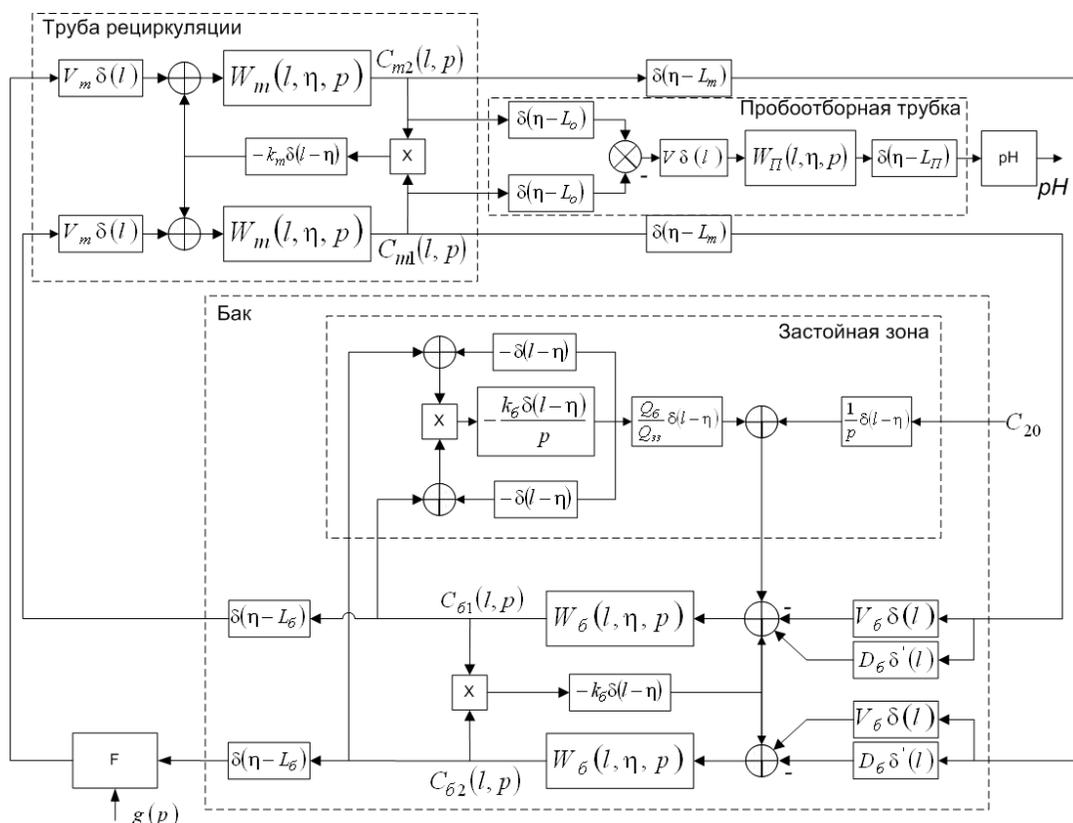


Рис. 5. Структурная схема распределенного процесса диффузии

Концентрация продукта реакции определяется из уравнения кинетики химической реакции [1, 2]:

$$\frac{dR(l, t)}{dt} = -k_a [C_{a1}(l, t) - R(l, t)] \cdot [C_{a2}(l, t) - R(l, t)]. \quad (36)$$

В качестве модели пробоотборной трубки можно принять уравнение:

$$\frac{\partial C(l, t)}{\partial t} + V_l \frac{\partial C(l, t)}{\partial l} = 0, \quad 0 \leq l \leq L_l, \quad t > 0, \quad (37)$$

с граничными и начальными условиями:

$$C(0, t) = C_{\delta 1}(L_l, t) - C_{\delta 2}(L_l, t), \quad C(l, 0) = -C_{20}, \quad (38)$$

где L_o – координата точки отбора жидкости в pH-метр; V_l – скорость движения жидкости в пробоотборной трубке.

На основании уравнения (3)–(7), (19)–(23), (35)–(38) можно составить структурную схему процесса нейтрализации в терминах структурной теории систем с распределенными параметрами [4] (рис. 4). Входным воздействием является объем по-

даваемой щелочи, возмущающим воздействием – начальная концентрация кислоты, контролируемой величиной является значение рН.

Здесь распределенные передаточные функции $W_o(l, \eta, t)$, $W_a(l, \eta, t)$ определяются выражениями (11), (28) соответственно.

В данном случае нельзя рассматривать процесс химической нейтрализации в малых отклонениях за счет наличия застойной зоны и следует для построения системы управления данным объектом использовать показанную на рис. 5 нелинейную модель управляемого процесса.

Заключение. Получены структурные модели процессов диффузии, рассматриваемых в качестве объектов управления в условиях протекания химической реакции второго порядка между взаимодействующими компонентами.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Воробьев А.Х.* Диффузионные задачи в химической кинетике: Учеб. пособие. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 2003. – 98 с.
2. *Кафаров В.В.* Методы кибернетики в химии и химической технологии. – М: Химия, 1971. – 496 с.
3. *Бесекерский В.А., Попов Е.П.* Теория систем автоматического регулирования. – Изд. 3-е, испр. – М.: Наука, главная редакция физико-математической литературы, 1975. – 768 с.
4. *Рапопорт Э.Я.* Структурное моделирование объектов и систем управления с распределенными параметрами. – М.: Высш. шк., 2003. – 299 с.
5. *Бутковский А.Г.* Характеристики систем с распределенными параметрами: Справ. пособие. – М.: Наука, главная редакция физико-математической литературы, 1979. – 224 с.

Статья поступила в редакцию 1 июля 2010 г.

UDC 517.977.56

STRUCTURAL MODELLING OF CONTROLLED DIFFUSION PROCESSES WITH CHEMICAL REACTIONS BETWEEN INTERACTING COMPONENTS

A.G. Mandra, E.Ya. Rapoport

Samara State Technical University
244, Molodgvardeyskaya st., Samara, 443076

The problem of structural modeling processes described by the diffusion model of repression and a model of ideal displacement, in a chemical reaction between the interacting components is described. The possibilities of linearization of nonlinear models is described.

Keywords: *diffusion, chemical reaction, structural model, distributed system, stagnation.*