

Математическое моделирование физических процессов

Научная статья

УДК 681.5:519.63

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16202>

ЧИСЛЕННАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ В МОДЕЛИ ИДЕАЛЬНОГО ВЫТЕСНЕНИЯ

Х. М. Гамзаев ✉, Н. Х. Гамзаева

Азербайджанский государственный университет нефти и промышленности,
г. Баку, Азербайджан

✉ xan.h@rambler.ru

Аннотация. Рассматривается химико-технологический процесс реакции второго порядка в химическом реакторе идеального вытеснения, описываемый нелинейным дифференциальным уравнением в частных производных первого порядка. В рамках предложенной модели поставлена обратная задача по определению константы скорости химической реакции. При этом задается дополнительное условие относительно концентрации реагента на выходе из реактора. Для решения поставленной обратной задачи строится ее дискретный аналог и предлагается специальное представление для решения полученной системы линейных алгебраических уравнений. В результате получена явная формула для определения приближенного значения константы скорости химической реакции. Возможности предложенного численного метода иллюстрируются численными расчетами на модельных задачах.

Ключевые слова: химический реактор идеального вытеснения, константа скорости химической реакции, задача идентификации, коэффициентная обратная задача

Для цитирования: Гамзаев Х. М., Гамзаева Н. Х. Численная идентификация константы скорости химической реакции в модели идеального вытеснения // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 2. С. 19–26. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16202>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16202>

NUMERICAL IDENTIFICATION OF THE CHEMICAL REACTION RATE CONSTANT IN THE IDEAL DISPLACEMENT MODEL

Kh. M. Gamzaev ✉, N. Kh. Gamzaeva

Azerbaijan State Oil and Industry University, Baku, Azerbaijan

✉ xan.h@rambler.ru

Abstract. A chemical-technological process of a second-order reaction in a chemical reactor of an ideal displacement, described by a nonlinear partial differential equation of the first order has been considered. Within the framework of the proposed model, the inverse problem of determining the rate constant of a chemical reaction was defined. In this case, an additional condition was set regarding the reagent concentration at the outlet from the reactor. To solve the inverse problem, its discrete analogue was constructed and a special representation was

proposed for solving the resulting system of linear algebraic equations. As a result, an explicit formula for determining the approximate value of the rate constant of a chemical reaction was obtained. The possibilities of the proposed numerical method were illustrated by numerical calculations on model problems.

Keywords: chemical reactor of ideal displacement, chemical reaction rate constant, identification problem, coefficient inverse problem

For citation: Gamzaev Kh. M., Gamzaeva N. Kh., Numerical identification of the chemical reaction rate constant in the ideal displacement model, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (2) (2023) 19–26. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16202>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Известно, что главным элементом в любой химико-технологической системе является химический реактор, в котором протекает химический процесс в соответствии с целью получения определенного реагента с заданными свойствами. В химической технологии применяется большое количество различных типов и конструкций химических реакторов [1 – 3]. Однако кинетику процесса, протекающего в реакторе, в основном определяют гидродинамический режим течения реакционной среды и температурный режим в реакторе. В связи с этим в основу классификации химических реакторов положены предельные гидродинамические режимы: идеального вытеснения и идеального смешения в изотермических, адиабатических или политермических условиях.

В настоящее время для исследования работы химических реакторов широко применяются методы математического моделирования [4 – 6]. При моделировании процессов, происходящих в химических реакторах, важным шагом считается снабжение моделей необходимой количественной информацией, т. е. идентификация параметров математических моделей.

Обычно параметры математической модели количественно характеризуют те или иные свойства химико-технологического процесса. Необходимо отметить, что параметры всех математических моделей химико-технологических процессов в основном определяют на основе экспериментальных исследований, что связано с определенными сложностями. В связи с этим возникает необходимость в использовании постановок и методов решения обратных задач [7 – 9] для идентификации параметров математических моделей химико-технологических процессов.

В настоящей работе для идентификации константы скорости химической реакции второго порядка предлагается численный метод, основанный на решении обратной задачи идеального вытеснения в химическом реакторе.

Постановка задачи и метод решения

Предположим, что рассматривается химический реактор идеального вытеснения, представляющий собой трубчатый аппарат с большим отношением длины трубки к ее диаметру. В реактор непрерывно поступают реагенты, и образующийся поток движется в режиме полного вытеснения только в одном направлении по длине реактора. При этом предполагается, что перемешивания реакционной смеси вдоль реактора, а также по его сечению не происходит и значения параметров реакционной смеси по сечению одинаковы. Реактор работает в изотермическом режиме, имеет место реакция второго порядка, и, в соответствии с закономерностями протекания этой реакции, по длине реактора устанавливается определенное распределение концентраций реагентов, участвующих в реакции.

Математическую модель процесса превращения одного из реагентов в результате химической реакции второго порядка, протекающего в данном химическом реакторе идеального вытеснения, представим в виде нелинейного дифференциального уравнения в частных производных первого порядка:

$$\frac{\partial C(x, t)}{\partial t} + v(t) \frac{\partial C(x, t)}{\partial x} + kC^2(x, t) = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 < t \leq T, \quad (1)$$

где $C(x, t)$ – концентрация выбранного реагента; $v(t)$ – скорость потока в реакторе; k – константа скорости химической реакции; l – длина химического реактора; x – координата, вдоль которой движется реакционный поток; t – время.

Предположим, что для уравнения (1) задаются начальное и граничное условия

$$C(x, 0) = \varphi(x), \quad 0 \leq x \leq l, \quad (2)$$

$$C(0, t) = p(t), \quad 0 < t \leq T. \quad (3)$$

Очевидно, что если задать функции $v(t)$, $\varphi(x)$, $p(t)$ и значение константы k , то, решив задачу (1) – (3), можно найти функцию $C(x, t)$, т. е. распределение концентрации реагента по длине реактора.

Теперь предположим, что наряду с функцией $C(x, t)$ неизвестна также константа скорости химической реакции k . Взамен этого задается дополнительное условие относительно концентрации реагента на выходе из реактора:

$$C(l, t) = r(t), \quad 0 < t \leq T. \quad (4)$$

Задача состоит в нахождении функции $C(x, t)$ и параметра k , удовлетворяющих уравнению (1) и условиям (2) – (4).

Поставленная задача (1) – (4) относится к классу коэффициентных обратных задач математической физики [9 – 11]. Следует отметить, что вопросы существования решения и однозначной разрешимости коэффициентных обратных задач для дифференциальных уравнений в частных производных изучены в работах [12, 13].

Предполагая существование решения и однозначную разрешимость коэффициентной обратной задачи (1) – (4), построим ее дискретный аналог методом разностной аппроксимации. Для этого введем в прямоугольной области $\{0 \leq x \leq l, 0 \leq t \leq T\}$ равномерную пространственно-временную разностную сетку

$$\bar{\omega} = \{(x_i, t_j) : x_i = i\Delta x, \quad t_j = j\Delta t, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n, \quad j = 0, 1, 2, \dots, m\},$$

где $\Delta x = l/n$ – шаг разностной сетки по переменной x , $\Delta t = T/m$ – шаг разностной сетки по времени t .

Для того чтобы получить линейную разностную задачу в качестве дискретного аналога задачи (1) – (4), используем явно-неявные аппроксимации по времени. С этой целью конвективный член в уравнении (1) аппроксимируем неявно, а нелинейный член $kC^2(x, t)$, который описывает процесс химической реакции, аппроксимируем явно по времени. В результате будем иметь следующую систему:

$$\frac{C_i^j - C_i^{j-1}}{\Delta t} + v^j \frac{C_i^j - C_{i-1}^j}{\Delta x} + k(C_i^{j-1})^2 = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad (5)$$

$$C_0^j = p^j, \quad (6)$$

$$C_n^j = r^j, \quad (7)$$

$$j = 1, 2, \dots, m,$$

$$C_i^0 = \varphi_i, \quad (8)$$

где $C_i^j \approx C(x_i, t_j)$, $v^j = v(t_j)$, $p^j = p(t_j)$, $\varphi_i = \varphi(x_i)$, $r^j = r(t_j)$.

Можно видеть, что дискретный аналог задачи (1) – (4) представляет собой систему линейных алгебраических уравнений, в которой в качестве неизвестных выступают

константа скорости химической реакции k и C_i^j , $i = 1, 2, \dots, n - 1, j = 1, 2, \dots, m$, т. е. приближенные значения искомой функции $C(x, t)$ в узлах разностной сетки $\bar{\omega}$.

Для решения полученной системы уравнений (5) – (8) используем идею расщепления данной системы на взаимно независимые подсистемы, каждая из которых может решаться независимо от другой подсистемы самостоятельно [9, 12]. Тогда решение системы уравнений (5) – (8) при каждом фиксированном значении $j = 1, 2, \dots, m$ можно представить в виде

$$C_i^j = U_i^j + kW_i^j, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n, \quad (9)$$

где U_i^j, W_i^j и k – неизвестные переменные.

Подставив соотношение (9) в уравнение (5), будем иметь:

$$\frac{U_i^j + kW_i^j - C_i^{j-1}}{\Delta t} + v^j \frac{U_i^j + kW_i^j - U_{i-1}^j - kW_{i-1}^j}{\Delta x} + k(C_i^{j-1})^2 = 0,$$

или

$$\left[\frac{U_i^j - C_i^{j-1}}{\Delta t} + v^j \frac{U_i^j - U_{i-1}^j}{\Delta x} \right] + k \left[\frac{W_i^j}{\Delta t} + v^j \frac{W_i^j - W_{i-1}^j}{\Delta x} + (C_i^{j-1})^2 \right] = 0.$$

Соотношение (9) также подставим в формулу (6) и получим

$$U_0^j + kW_0^j = p^j.$$

Учитывая произвольность переменных U_i^j, W_i^j , из двух последних соотношений получим следующие независимые системы линейных алгебраических уравнений относительно переменных U_i^j, W_i^j :

$$\frac{U_i^j - C_i^{j-1}}{\Delta t} + v^j \frac{U_i^j - U_{i-1}^j}{\Delta x} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (10)$$

$$U_0^j = p^j. \quad (11)$$

$$\frac{W_i^j}{\Delta t} + v^j \frac{W_i^j - W_{i-1}^j}{\Delta x} + (C_i^{j-1})^2 = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (12)$$

$$W_0^j = 0, \quad (13)$$

$$j = 1, 2, \dots, m.$$

Очевидно, что решения системы линейных уравнений (10), (11) и (12), (13) можно

найти по рекуррентным формулам $U_i^j = \frac{C_i^{j-1} + U_{i-1}^j v^j \Delta t / \Delta x}{1 + v^j \Delta t / \Delta x}$, $i = 1, 2, \dots, n$.

$$U_0^j = p^j. \quad (14)$$

$$W_i^j = \frac{W_{i-1}^j v^j \Delta t / \Delta x - (C_i^{j-1})^2 \Delta t}{1 + v^j \Delta t / \Delta x}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad W_0^j = 0. \quad (15)$$

$$j = 1, 2, \dots, m.$$

А подстановка соотношения (9) в дополнительное условие (7) дает следующее равенство:

$$U_n^j + kW_n^j = r^j.$$

Отсюда получим расчетную формулу для определения значения параметра k при каждом фиксированном значении $j = 1, 2, \dots, m$:

$$k = \frac{r^j - U_n^j}{W_n^j}. \quad (16)$$

Таким образом, для определения переменных k и C_i^j ($i = 1, 2, \dots, n - 1; j = 1, 2, \dots, m$) из системы линейных алгебраических уравнений (5) – (8), конструируется следующий вычислительный алгоритм.

Шаг 1. Для фиксированного значения временного слоя j определяются решения системы линейных алгебраических уравнений (10), (11) и (12), (13) по рекуррентным формулам (14) и (15).

Шаг 2. По формуле (16) определяется приближенное значение искомого параметра k .

Шаг 3. Вычисляются значения переменных C_i^j , $i = 1, 2, \dots, n$, по формуле (9).

Шаг 4. При переходе на следующий временной слой описанная процедура вычислений снова повторяется.

Результаты численных расчетов

Для демонстрации практической применимости предложенного численного метода он был апробирован на различных модельных задачах. Численные эксперименты проводили по следующей схеме.

I. Для заданных значений переменных k, v^j, p^j, φ_i определяется решение системы линейных алгебраических уравнений (5) – (8):

$$C_i^j = \frac{C_i^{j-1} + C_{i-1}^j v^j \Delta t / \Delta x - k(C_i^{j-1})^2 \Delta t}{1 + v^j \Delta t / \Delta x}, \quad i = 1, 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, m,$$

$$C_i^0 = \varphi_i, C_0^j = p^j.$$

II. Значения переменной r^j , определяемые как $r^j = C_n^j$, принимаются в качестве входных данных для восстановления значения параметра k по предложенному вычислительному алгоритму.

Численные эксперименты проводились на пространственно-временной разностной сетке с шагами $\Delta t = 1$ с, $\Delta t = 5$ с, $\Delta x = 0,04$ м для следующих точных значений константы скорости химической реакции: $k = 0,25, 0,55$ м³/(кг·с).

Для остальных параметров модели (1) – (4) были использованы следующие данные:

$$\varphi(x) = 0,1 \text{ кг/м}^3, p(t) = 0,8 \text{ кг/м}^3, v = 0,4 \text{ м/с}, l = 2 \text{ м}.$$

При проведении численных экспериментов, наряду с невозмущенными входными данными, были также использованы возмущенные входные данные.

Таблица

Результаты численного поиска значения константы химической реакции k при варьировании входных данных

$t, \text{ с}$	Вычисленное значение k , м ³ /(кг·с), при разных входных данных					
	При невозмущенных		При возмущенных			
	$k_e = 0,25$ м ³ /(кг·с)	$k_e = 0,55$ м ³ /(кг·с)	$k_e = 0,25$ м ³ /(кг·с)		$k_e = 0,55$ м ³ /(кг·с)	
			$\Delta t = 1$ с	$\Delta t = 5$ с	$\Delta t = 1$ с	$\Delta t = 5$ с
5	0,250	0,550	0,235	0,250	0,532	0,545
10			0,245	0,250	0,543	0,544
15			0,276	0,242	0,584	0,545
20			0,261	0,247	0,563	0,542
25			0,249	0,247	0,548	0,546
30			0,266	0,244	0,570	0,542
35			0,226	0,246	0,515	0,540
40			0,263	0,248	0,579	0,544
45			0,225	0,246	0,515	0,544
50			0,246	0,246	0,542	0,538

Заданные параметры: k_e – точное значение константы k , t – время, Δt – шаг на пространственно-временной разностной сетке.

Для возмущения входных данных r^j использовалось соотношение

$$\tilde{r}^j = r^j + \delta \xi^j r^j,$$

где ξ^j – случайная величина, моделируемая с помощью датчика случайных чисел; δ – уровень погрешности входных данных (использовалось $\delta = 0,002$).

Результаты численных экспериментов, проведенных с невозмущенными и возмущенными входными данными, представлены в таблице.

Анализ представленных результатов показывает, что при использовании невозмущенных входных данных, независимо от шага разностной сетки по времени Δt , значение искомой константы скорости химической реакции восстанавливается точно (второй и третий столбцы таблицы). Однако использование возмущенных входных данных, в которых погрешность носит случайный характер, влияет на точность восстановления значения искомой константы (остальные столбцы таблицы). При этом погрешность восстановления значения искомой константы зависит от шага разностной сетки по времени Δt . Из данных таблицы следует, что при использовании шага по времени $\Delta t = 1$ с относительные погрешности восстановления значений $k_e = 0,25$ и $0,55$ м³/(кг·с) превышают 10,0 и 6,5 %, соответственно. Однако при использовании шага $\Delta t = 5$ с максимальные относительные погрешности восстановления значений $k_e = 0,25$ и $0,55$ м³/(кг·с) не превышают 3,5 и 2,2 %, соответственно.

Результаты численных экспериментов свидетельствуют, что шаг разностной сетки по времени Δt выступает в качестве параметра регуляризации (саморегуляризация) [8, 9], причем с ростом значения Δt увеличивается точность восстановления искомой константы.

Анализ полученных результатов подтверждает, что с помощью саморегуляризации можно уменьшать влияние погрешности входных данных на точность восстановления значения искомой константы и тем самым обеспечивать устойчивость предложенного вычислительного алгоритма к погрешностям входных данных.

Заключение

Рассмотрена задача идентификации константы скорости химической реакции второго порядка, происходящей в реакторе идеального вытеснения. Для решения задачи предложен численный метод, основанный на дискретизации задачи и использовании специальной декомпозиции для решения полученной системы линейных алгебраических уравнений. Данный метод позволяет определять значение константы скорости химической реакции с достаточно высокой точностью. Предложенный численный метод также можно применять для идентификации гидродинамической характеристики потока в химическом реакторе идеального вытеснения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Комиссаров Ю. А., Гордеев Л. С., Вент Д. П. Процессы и аппараты химической технологии. М.: Химия, 2011. 1230 с.
2. Кутепов А. М., Бондарева Т. Н., Беренгартен М. Б. Общая химическая технология. М.: Академкнига, 2007. 528 с.
3. Закгейм А. Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов. М.: Логос, 2009. 304 с.
4. Кафаров В. В., Глебов М. Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. М.: Высшая школа, 1991. 400 с.
5. Ушева Н. В., Мойзес О. Е., Митянина О. Е., Кузьменко Е. А. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2014. 140 с.
6. Гумеров А. М. Математическое моделирование химико-технологических процессов. М.: Изд-во «Лань», 2014. 176 с.
7. Кабанихин С. И. Обратные и некорректные задачи. 2-е изд., перераб. Новосибирск: Сибирское научное изд-во, 2009. 457 с.

8. Алифанов О. М. Обратные задачи теплообмена. М.: Машиностроение, 1988. 280 с.
9. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Численные методы решения обратных задач математической физики. 3-е изд. М.: Изд-во ЛКИ, 2009. 480 с.
10. Вабищевич П. Н., Клибанов М. В. Вычислительная идентификация старшего коэффициента параболического уравнения // Дифференциальные уравнения. 2016. Т. 52. № 7. С. 896–903.
11. Гамзаев Х. М. Численный метод решения коэффициентной обратной задачи для уравнения диффузии – конвекции – реакции // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2017. № 50. С. 67–78.
12. Прилепко А. И., Волков Н. П. Обратные задачи определения параметров нестационарного кинетического уравнения переноса по дополнительной информации о следах искомой функции // Дифференциальные уравнения. 1988. Т. 24. № 1. С. 136–146.
13. Prilepko A. I., Orlovsky D. G., Vasin I. A. Methods for solving inverse problems in mathematical physics (Monographs and textbooks in pure and applied mathematics. Vol. 231). New York: Marcel Dekker, Inc., 2000. 744 p.
14. Gamzaev Kh. M., Huseynzade S. O., Gasimov G. G. A numerical method for solving identification problem for the lower coefficient and the source in the equation convection – reaction // Cybernetics and Systems Analysis. 2018. Vol. 54. No. 6. Pp. 971–976.

REFERENCES

1. Komissarov Yu. A., Gordeyev L. S, Vent D. P., Protsessy i apparaty khimicheskoy tekhnologii [Processes and units of equipment of chemical technology], Khimiya Publishing, Moscow, 2011 (in Russian).
2. Kutepov A. M., Bondareva T. N., Berengarten M. B., Obshchaya khimicheskaya tekhnologiya [General chemical technology], Akademkniga, Moscow (in Russian).
3. Zakgeim A. Yu., Obshchaya khimicheskaya tekhnologiya: vvedeniye v modelirovaniye khimiko-tekhnologicheskikh protsessov [General chemical technology: Introduction to modeling of chemical processes], Logos, Moscow, 2009 (in Russian).
4. Kafarov V. V., Glebov M. B., Matematicheskoye modelirovaniye osnovnykh protsessov khimicheskikh proizvodstv [Mathematical modeling of the main processes of chemical production]. Higher School Publisher, Moscow, 1991 (in Russian).
5. Usheva N. V., Moyzes O. E., Mityanina O. E., Kuzmenko E. A., Matematicheskoye modelirovaniye khimiko-tekhnologicheskikh protsessov [Mathematical modeling of chemical technological processes], Tomsk Polytechnical University Publishing, Tomsk, 2014 (in Russian).
6. Gumerov A. M., Matematicheskoye modelirovaniye khimiko-tekhnologicheskikh protsessov [Simulation of chemical technological processes], Lan Publishing, Moscow, 2014 (in Russian).
7. Kabanikhin S. I., Inverse and ill-posed problems, Walter de Gruyter, Berlin, 2011.
8. Alifanov O. M., Inverse heat transfer problems, Springer-Verlag, Berlin, 2011.
9. Samarskii A. A., Vabishchevich P. N., Numerical methods for solving inverse problems of mathematical physics, Walter de Gruyter, Berlin, 2008.
10. Vabishchevich P. N., Klibanov M. V., Numerical identification of the leading coefficient of a parabolic equation, Differ. Equ. 52 (7) (2016) 855–862.
11. Gamzayev Kh. M., A numerical method for solving the coefficient inverse problem for diffusion-convection-reaction equation, Tomsk State Univ. J. Math. Mech. (50) (2017) 67–78 (in Russian).
12. Prilepko A. I., Volkov N. P., Inverse problems for determining the parameters of a nonstationary kinetic transport equation from additional information on the traces of the unknown function, Differ. Uravn. 24 (1) (1988) 136–146 (in Russian).
13. Prilepko A. I., Orlovsky D. G., Vasin I. A., Methods for solving inverse problems in mathematical physics (Monographs and textbooks in pure and applied mathematics. Vol. 231), Marcel Dekker, Inc., New York, 2000.
14. Gamzaev Kh. M., Huseynzade S. O., Gasimov G. G., A numerical method for solving identification problem for the lower coefficient and the source in the equation convection – reaction, Cybernetics and Systems Analysis. 54 (6) (2018) 971–976.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГАМЗАЕВ Ханлар Мехвали оглу — доктор технических наук, профессор кафедры общей и прикладной математики Азербайджанского государственного университета нефти и промышленности, г. Баку, Азербайджан.

AZ 1010, Азербайджан, г. Баку, пр. Азадлыг, 20

xan.h@rambler.ru

ORCID: 0000-0002-1228-7892

ГАМЗАЕВА Нушаба Ханлар — преподаватель кафедры нефтехимической технологии и промышленной экологии Азербайджанского государственного университета нефти и промышленности, г. Баку, Азербайджан.

AZ 1010, Азербайджан, г. Баку, пр. Азадлыг, 20

hemzeyevanusaba90@mail.ru

ORCID: 0000-0002-4618-6643

THE AUTHORS

GAMZAEV Khanlar M. O.

Azerbaijan State Oil and Industry University

20 Azadlig Ave., Baku, AZ1010, Azerbaijan

xan.h@rambler.ru

ORCID: 0000-0002-1228-7892

GAMZAEVA Nusaba Kh.

Azerbaijan State Oil and Industry University

20 Azadlig Ave., Baku, AZ1010, Azerbaijan

hemzeyevanusaba90@mail.ru

ORCID: 0000-0002-4618-6643

Статья поступила в редакцию 16.02.2023. Одобрена после рецензирования 02.04.2023. Принята 02.04.2023.

Received 16.02.2023. Approved after reviewing 02.04.2023. Accepted 02.04.2023.