BÀI THỰC HÀNH SỐ 1

KHẢO SÁT ĐỘNG HỌC CỦA MỘT BÌNH PHẢN ỨNG LÝ TƯỞNG KHUẤY LIÊN TỤC

Mục đích của bài thực hành này là mô phỏng, giải quyết các bài toán trong CNHH. Cụ thể :

1. Xác định các điểm hoạt động dừng của một hệ thống phản ứng pha lỏng lý tưởng khuấy liên tục.
2. Khảo sát các đặc trưng (ma trận và giá trị riêng kết hợp) của hệ thống được tuyến tính hóa.
3. Khảo sát các đáp ứng thời gian của hệ thống với một số điều kiện ban đầu khác nhau.

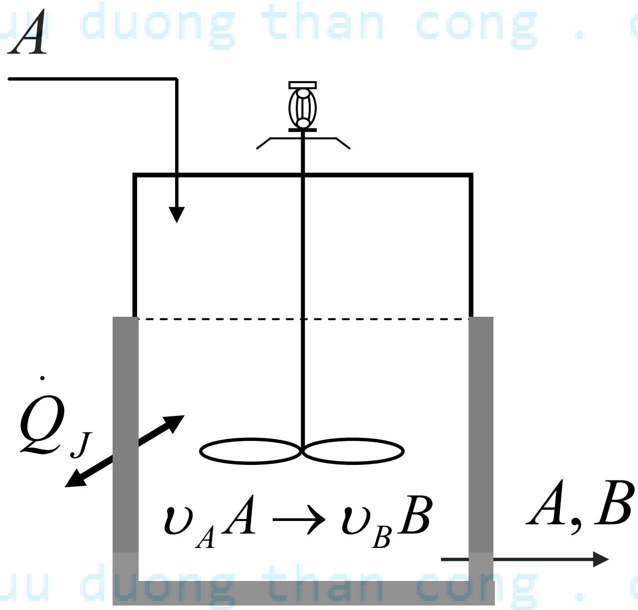
Tài liệu tham khảo :

[1] F. Viel *et al.*, *Global stabilization of Exothermic Chemical Reactors under Input Constraints,* Automatica, 1997. pp. 1437-1448.

1. Mô tả hệ thống phản ứng :

Hệ khảo sát trong bài thí nghiệm này là một hệ phản ứng lý tưởng khuấy liên tục (CSTR), được mô tả như trong hình dưới đây:

cuu duong than cong . com



cuu duong than cong . com

Bình phản ứng được cung cấp bởi chất phản ứng ***A*** ở lối vào và có trao đổi nhiệt với jacket $\dot{Q}_J$ Bên trong bình phản ứng xảy ra phản ứng hóa học phát nhiệt bậc 1 dạng ***A→B*** với tốc độ phản ứng giả sử tuân theo luật tác động khối lượng

$$r_v = k(T)x_A \qquad (1)$$

với x_A là nồng độ của cấu tử ***A*** và $k(T)$ là động học phản ứng, giả sử được mô hình theo luật thực nghiệm Arrhenius :

Copyright © by Hoàng Ngọc Hà

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

$$k(T) = k_0 \exp\left(\frac{-k_1}{T}\right) \quad (2)$$

Với k_0 là hằng số động học phản ứng và k_1 là nhiệt độ hoạt hóa. T là nhiệt độ bên trong bình phản ứng. Ở đầu ra của bình phản ứng, chúng ta thu hồi chất phản ứng ***A*** và sản phẩm ***B***.

Nghiên cứu cân bằng năng lượng và vật chất của hệ phản ứng mở trên, chúng ta nhận được phương trình vi phân thường ODE sau [1] :

$$\begin{cases} \dot{x}_A = -k(T)x_A + d(x_A^{in} - x_A) \\ \dot{x}_B = k(T)x_A - dx_B \\ \dot{T} = bk(T)x_A + d(T^{in} - T) + e(T_w - T) \end{cases} \quad (3)$$

với $t \in [0, +\infty)$. d và e tương ứng là các hằng số (giá trị dương) kết hợp với tỉ số pha loãng và hệ số truyền nhiệt với jacket. b là hằng số dương liên quan đến mức độ phát nhiệt của phản ứng. T^{in} là nhiệt độ dòng vào và T_w là nhiệt độ jacket.

2. Yêu cầu :

<u>*Câu hỏi 1*</u> : Phương trình vi phân (1) là tuyến tính hay phi tuyến ? Tại sao ?

Hệ phương trình ODE (3) có thể được viết lại dưới dạng tương đương :

cuu duong than cong . com

$$\begin{cases} \dot{x}_A = -k(T)x_A + d(x_A^{in} - x_A) \\ \dot{x}_B = k(T)x_A - dx_B \\ \dot{T} = bk(T)x_A - qT + u \end{cases} \quad (4)$$

Trong phương trình (4), $q=d+e$ và $u=d\,T^{in}+e\,T_w$ là đầu vào input (có thể thay đổi được). Bảng dưới đây cho các dữ liệu các tham số của hệ phản ứng nghiên cứu :

b (K.L/mol)	209.2
d (min^{-1})	1.1
q (min^{-1})	1.25
k_0 (min^{-1})	7.2 10^{10}
k_1 (K)	8700
x_A^{in} (mol/l)	1
u (K/min)	355

cuu duong than cong . com

Ký hiệu $X_e = (x_{Ae}, x_{Be}, T_e)$ là điểm hoạt động dừng của hệ thống phản ứng (steadystate) ở các điều kiện đầu vào $u = u_e = 355$ *(K/min)* với các thông số khác giữ cố định.

Copyright © by Hoàng Ngọc Hà

Câu hỏi 2 : Viết phương trình toán học mô tả các điểm hoạt động dừng? Đơn giản các phương trình này, chỉ ra rằng ta nhận được phương trình sau:

$$0 = \frac{bk(T_e)dx_A^{in}}{k(T_e)+d} - qT_e + 355 \tag{5}$$

Phương trình (5) là tuyến tính hay phi tuyến ? Vì sao ?

Câu hỏi 3 : Đặt $F(T_e) = \frac{bk(T_e)dx_A^{in}}{k(T_e)+d} - qT_e + 355$. Dùng Matlab với lệnh *plot*, hãy biểu diễn quan hệ $(T_e, F(T_e))$ và nhận xét đường cong $F(T_e)$ có mấy giao điểm với trục hoành. Kết luận về số nghiệm của $F(T_e) = 0$?

Câu hỏi 4 : Tính giá trị số các điểm hoạt động dừng này dùng Matlab với lệnh *fsolve* ? Ghi lại kết quả nhận được trong một bảng theo cấu trúc sau để tiện theo dõi.

Điểm dừng	Giá trị
x_{Ae}	
x_{Be}	
T_e	

Câu hỏi 5 : Phương trình (4) có thể được viết dưới dạng biểu diễn sau :

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \dot{x}_A \\ \dot{x}_B \\ \dot{T} \end{pmatrix}}_{\dot{X}} = \underbrace{\begin{pmatrix} f_1(X,u) \\ f_2(X,u) \\ f_3(X,u) \end{pmatrix}}_{f(X,u)} = \underbrace{\begin{pmatrix} -k(T)x_A + d(x_A^{in} - x_A) \\ k(T)x_A - dx_B \\ bk(T)x_A - qT + u \end{pmatrix}}_{f(X,u)} \tag{6}$$

Tuyến tính hóa phương trình (6) dùng chuỗi Taylor (bỏ qua các thành phần bậc hai và cao hơn) theo công thức sau :

$$\overbrace{X - X_e}^{\bullet} = A(X - X_e) + B(u - u_e) \tag{7}$$

với $A = \left.\frac{\partial f}{\partial X}\right|_{X=X_e, u=u_e}$ và $B = \left.\frac{\partial f}{\partial u}\right|_{X=X_e, u=u_e}$.

Hãy xác định giá trị số của ma trận *A* và các giá trị riêng kết hợp với nó tại các điểm dừng đã có trong câu hỏi 4 dùng các lệnh Matlab *diff* và *eig*. Nhận xét về dấu của các giá trị riêng này ?

Câu hỏi 6 : Gọi mặt phẳng tạo bởi (T, x_a) là mặt phẳng pha (phase plane). Biểu diễn các điểm hoạt động dừng đã tính được trong câu hỏi 4 trên mặt phẳng pha này dùng lệnh *plot* và kí hiệu trên figure nhận được các điểm này là P_i ?

Copyright © by Hoàng Ngọc Hà

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

Câu hỏi 7 : Quay lại phương trình (4), dùng lệnh *ode* của Matlab, tính nghiệm của nó với các điều kiện ban đầu tùy chọn khác nhau (tối thiểu 5 điều kiện ban đầu) ? Với mỗi nghiệm tìm thấy, hãy biểu diễn chúng trên mặt phẳng pha của câu hỏi 6 ? (chú ý vẽ chúng trên cùng một figure dùng lệnh *hold*).

Câu hỏi 8 : Kết luận về động học của hệ thống : chúng có luôn hội tụ về các nghiệm dừng P_i ? Nhận xét (không cần giải thích) dấu của các giá trị riêng trong câu hỏi 5 và việc hội tụ/không hội tụ này ?

Câu hỏi 9 : (Câu hỏi mở rộng) Quan sát phương trình ODE (4), hãy chỉ ra rằng ở các điều kiện đẳng nhiệt $(T = const)$ động học của các biến còn lại (x_A, x_B) luôn hội tụ tới các giá trị tương ứng ?

Câu hỏi 10 : (Câu hỏi mở rộng) Dựa vào tính chất đã biết ở câu hỏi 9, hãy đề xuất một biểu thức toán học đơn giản cho đầu vào u để toàn hệ thống hội tụ về một điểm hoạt động mong muốn $X_d = (x_{Ad}, x_{Bd}, T_d)$ biết rằng động học của nhiệt độ (**được áp đặt**) dưới dạng sau

$$\dot{T} = K(T_d - T) \tag{8}$$

với $K = const > 0$, luôn hội tụ về T_d. Xác nhận kết quả dùng Matlab với biểu thức toán học của u tìm được.

cuu duong than cong . com

cuu duong than cong . com

Copyright © by Hoàng Ngọc Hà

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt