BÀI THỰC HÀNH SỐ 2

KHẢO SÁT MỘT HỆ PHẢN ỨNG DẠNG ỐNG LÝ TƯỞNG TRẠNG THÁI DỪNG

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

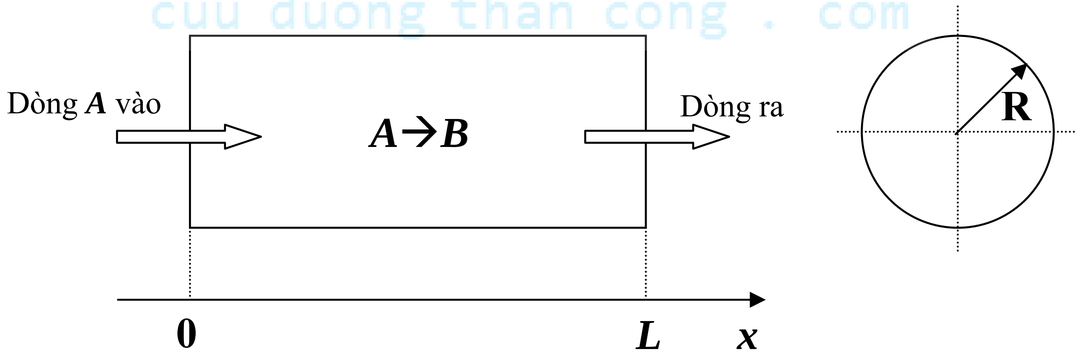
1. Tìm nghiệm số của một hệ thống được mô tả bằng phương trình vi phân đạo hàm riêng dùng phương pháp sai phân hữu hạn.
2. Tính toán xấp xỉ nghiệm dùng phương pháp nội suy Lagrange.
3. So sánh nghiệm xấp xỉ với nghiệm giải tích (nghiệm chính xác).
4. Kết luận về ảnh hưởng của số điểm nút chọn trên các nghiệm số.

Tài liệu tham khảo của bài thực hành:

[1] Martin Ruszkowski *et al.*, *Passivity based control of transport reaction systems,* AIChE Journal, 2005.

1. Mô tả hệ thống phản ứng ống:

Hệ khảo sát trong bài thực hành này là một hệ phản ứng dạng ống (tubular reactor) lý tưởng phân bố, được mô tả như trong hình dưới đây:



Hệ thống trên được giới hạn diễn ra **ở các điều kiện đẳng nhiệt**, *T=const.*, và sự thay đổi của các đại lượng vật lý (nồng độ,…) chỉ theo phương trục *x*, bỏ qua sự thay đổi theo phương bán kính. Hệ xem xét được cung cấp ở lối vào bằng chất phản ứng ***A***. Bên trong ống xảy ra phản ứng bậc 1 dạng ***A→B*** với tốc độ phản ứng :

$$\sigma = -kc \qquad (1)$$

vói *k* là hằng số và *c* là nồng độ (cục bộ) của cấu tử hóa học ***A***.

Câu hỏi 1 (Mô hình hóa động học) : Nghiên cứu cân bằng vật chất của hệ đẳng nhiệt trên, chỉ ra rằng sự biến thiên của nông độ *c* được chi phối bởi phương trình vi phân đạo hàm riêng sau [1]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \upsilon\frac{\partial c}{\partial x} + \sigma \qquad (2)$$

Trong phương trình (2) $t \in [0, +\infty)$, $x \in [0, L]$; υ và D lần lượt là vận tốc dòng đối lưu và hệ số khuếch tán. □

2. Giới hạn của bài thực hành:

Trong bài thực hành này chúng ta chỉ nghiên cứu **<u>các nghiệm dừng</u>**, tức là các nghiệm không phụ thuộc vào thời gian :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = 0 \Leftrightarrow c = c(x) \tag{3}$$

Nghiệm nếu có của phương trình (2) với (3) cần bổ sung điều kiện biên (được gọi là ĐK biên Hulburt) :

$$\begin{cases} c(0) = c_0 \\ \left.\dfrac{\partial c(x)}{\partial x}\right|_{x=L} = 0 \end{cases} \tag{4}$$

Bảng dưới đây cho các dữ liệu các tham số của hệ phản ứng nghiên cứu :

υ *(cm/s)*	
D (cm²/s)	
L (cm)	
k (1/s)	
R (cm)	
$c_0(t)$ *(mol/cm³)*	

(Sinh viên tùy chọn giá trị các tham số sao cho phù hợp. Có điểm ưu tiên cho việc chọn lựa tốt, sáng tạo)

<u>Câu hỏi 2</u> :

a) Chứng minh rằng hệ thống nghiên cứu (2) với điều kiện dừng (3) trở thành :

$$D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \upsilon\frac{\partial c}{\partial x} - kc = 0 \tag{5}$$

có phương trình đặc trưng là :

$$a\lambda^2 + b\lambda + c = 0 \tag{6}$$

với $a = 1$, $b = -\dfrac{\upsilon}{D}$ và $c = -\dfrac{k}{D}$?

b) Chứng minh rằng phương trình (6) luôn có hai nghiệm thực phân biệt λ_1 và λ_2 ?

c) Suy ra nghiệm tường minh chính xác của (5) với điều kiện biên (4) ?

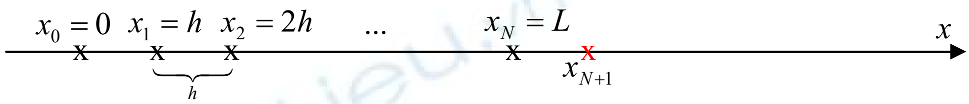
3. Nghiệm số dùng phương pháp sai phân hữu hạn bước trung tâm:

Trước tiên chúng ta xác định biểu diễn đại số của phương trình vi phân (5) mà chúng ta sẽ nhận được bởi rời rạc hóa nó dùng phương pháp sai phân hữu hạn tại từng điểm nút.

Gọi h là bước rời rạc không gian sao cho khoảng $[0,\ L]$ được chia thành N khoảng con có cùng chiều dài h, có nghĩa rằng $h = \dfrac{L}{N}$. Chúng ta ký hiệu x_i là các điểm rời rạc :

$$x_0 = 0, x_1 = h, x_2 = 2h, ..., x_N = L$$

Các điểm này phân bố hình học như sau :



Tiếp theo, để đơn giản cách trình bày chúng ta sẽ kí hiệu $c_0 = c(0), c_1 = c(h), ..., c_N = c(Nh)$. Tại các điểm trung gian $x_1, x_2, ..., x_{N-1}$ chúng ta sử dụng các biểu thức sau để xấp xỉ đạo hàm bậc hai và bậc 1 như sau :

$$\left.\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right|_{x=x_i} \cong \frac{c_{i+1} + c_{i-1} - 2c_i}{h^2},\ i = 1, ..., N-1 \qquad (7)$$

$$\left.\frac{\partial c}{\partial x}\right|_{x=x_i} \cong \frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{2h},\ i = 1, ..., N-1 \qquad (8)$$

Chúng ta đưa vào tập điểm rời rạc trên một điểm ảo x_{N+1} (và ký hiệu $c_{N+1} = c((N+1)h)$, xem sơ đồ phân bố các điểm bên trên) cho mục đích rời rạc hóa tại điểm biên x_N, cụ thể :

$$\left.\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right|_{x=x_N} \cong \frac{c_{N+1} + c_{N-1} - 2c_N}{h^2} \qquad (9)$$

$$\left.\frac{\partial c}{\partial x}\right|_{x=x_N} \cong \frac{c_{N+1} - c_{N-1}}{2h} \qquad (10)$$

Và một điều kiện biên trong (4) được xấp xỉ thành:

$$\left.\frac{\partial c}{\partial x}\right|_{x=x_N} \cong \frac{c_{N+1} - c_{N-1}}{2h} = 0 \Leftrightarrow c_{N+1} = c_{N-1} \qquad (11)$$

Sau cùng, để thuận lợi cho biểu diễn chúng ta ký hiệu :

$$C = \begin{bmatrix} c(h) \\ c(2h) \\ \vdots \\ c(Nh) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix} \qquad (12)$$

<u>Câu hỏi 3</u> :

a) Dùng xấp xỉ (7)→(10), chỉ ra rằng phương trình (5) tại điểm rời rạc *i* trở thành :

$$\left(\frac{1}{h^2}+\frac{\upsilon}{D}\frac{1}{2h}\right)c_{i-1}-\left(\frac{2}{h^2}+\frac{k}{D}\right)c_i+\left(\frac{1}{h^2}-\frac{\upsilon}{D}\frac{1}{2h}\right)c_{i+1}=0,\ i=1,\dots,N \qquad (13)$$

b) Tính đến các điều kiên biên (11), chỉ ra rằng phương trình (9) có thể viết dưới dạng hệ tuyến tính sau :

$$AC=b \qquad (14)$$

với C là vector được cho trong (12). Xác định các ma trận A, b ?

c) Tìm nghiệm của hệ (14) với Matlab :
Bước 1 : Khai báo các ma trận A, b.
Bước 2 : Ma trận A khả nghịch ?
Bước 3 : Tìm nghiệm dùng lệnh đã học trong bài thực hành số 1.

d) Viết biểu thức nghiệm dùng nội suy kiểu đa thức Lagrange. Biểu diễn đồ họa biên dạng phân bố của nồng độ *c* và so sánh với nghiệm giải tích đã có ở câu hỏi 2 (c).

<u>Câu hỏi 4</u> (Câu hỏi mở rộng)

1. Biết rằng biểu thức số mol của ***A*** trong ống phản ứng được cho bởi :

$$N=\pi R^2\int_0^L c(x)dx \qquad (15)$$

Dùng qui tắc hình thang, chứng minh rằng (15) có thể xấp xỉ như sau :

$$N=\pi R^2 h\sum_{i=0}^{N-1}\frac{(c_i+c_{i+1})}{2} \qquad (16)$$

Lập trình tính giá trị số của (16) với giá trị các c_i đã tìm thấy trong (14).

2. Quan sát ảnh hưởng của số điểm nút (tăng/giảm *N*) trên độ chính xác nghiệm số bằng mô phỏng ? Kết luận.