

## BÀI THỰC HÀNH SỐ 3

### KHẢO SÁT ĐỘNG HỌC MỘT HỆ PHẢN ỨNG DẠNG ỐNG LÝ TƯỞNG

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

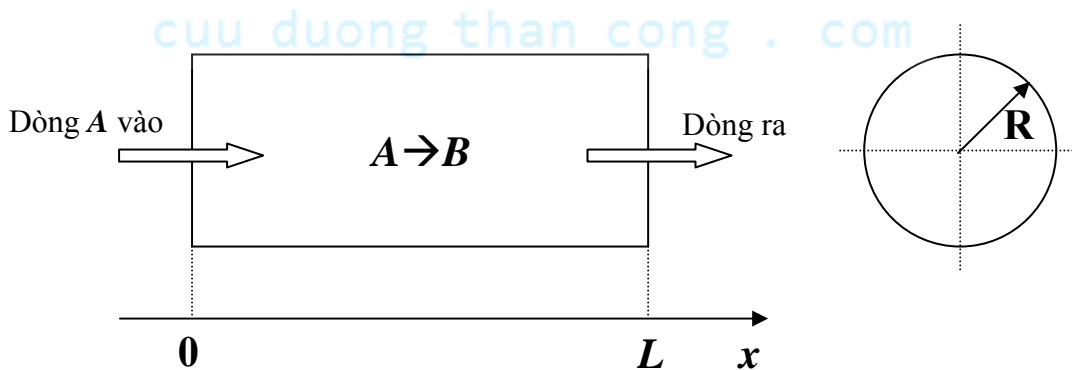
1. Rời rạc hóa một hệ thống phản ứng được mô tả bằng phương trình vi phân đạo hàm riêng PDE dùng phương pháp sai phân hữu hạn để nhận được một hệ ODE.
2. Tìm nghiệm số của hệ ODE này.
3. Xấp xỉ nghiệm của bài toán dùng phương pháp nội suy Lagrange.
4. Kết luận về ảnh hưởng của số điểm nút chọn trên các nghiệm số.

Tài liệu tham khảo của bài thực hành:

[1] Martin Ruzskowski *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  $A \rightarrow B$  với tốc độ phản ứng :

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

với  $k$  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 nồng độ  $c$  được chi phối bởi phương trình vi phân đạo hàm riêng sau [1]:

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

## Bài thực hành môn học **Mô hình hóa, mô phỏng và tối ưu hóa các quá trình hóa học**

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

Nghiệm nếu có của phương trình (2) cần bổ sung các điều kiện ban đầu và điều kiện biên:

- Với điều kiện ban đầu :

$$c(x,0) = c^0(x) \quad (3)$$

- Với điều kiện biên Hulburt (ĐK biên Dirichlet + ĐK biên Neumann):

$$\begin{cases} c(0,t) = c_0(t) \\ \left. \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} \right|_{x=L} = 0 \end{cases} \quad (4)$$

### **Phương trình (2) với (3) và (4) miêu tả đầy đủ hệ thống.**

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

$v$ (cm/s)	
$D$ (cm <sup>2</sup> /s)	
$L$ (cm)	
$k$ (1/s)	
$R$ (cm)	
$c_0(t)$ (mol/cm <sup>3</sup> )	
$c^0(t)$ (mol/cm <sup>3</sup> )	

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

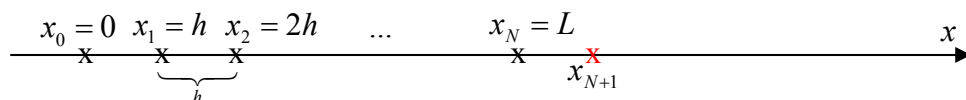
## **2. Nghiệm số dùng phương pháp sai phân hữu hạn bước trung tâm:**

Trước tiên chúng ta xác định biểu diễn đại số của phương trình vi phân (2) 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  $h = \frac{L}{N}$ . Chúng ta ký hiệu  $x_i$  là các điểm rời rạc :

$$x_0 = 0, x_1 = h, x_2 = 2h, \dots, x_N = L$$

Các điểm này phân bố hình học như sau :



## Bài thực hành môn học **Mô hình hóa, mô phỏng và tối ưu hóa các quá trình hóa học**

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

$$\left. \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right|_{x=x_i} \cong \frac{c_{i+1} + c_{i-1} - 2c_i}{h^2}, \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (5)$$

$$\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=x_i} \cong \frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{2h}, \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (6)$$

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 :

$$\left. \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \right|_{x=x_N} \cong \frac{c_{N+1} + c_{N-1} - 2c_N}{h^2} \quad (7)$$

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

Dùng quan hệ thứ nhất trong (4), (8) được xấp xỉ thành:

$$\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=x_N} \cong \frac{c_{N+1} - c_{N-1}}{2h} = 0 \Leftrightarrow c_{N+1} = c_{N-1} \quad (9)$$

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

$$C(t) = \begin{bmatrix} c(h, t) \\ c(2h, t) \\ \vdots \\ c(Nh, t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{1t} \\ c_{2t} \\ \vdots \\ c_{Nt} \end{bmatrix} \quad (10)$$

### 3. Yêu cầu :

Chọn số điểm nút ( $N > 2$ )  $N = ?$

Câu hỏi 2 :

a) Dùng xấp xỉ (5)  $\rightarrow$  (6), chỉ ra rằng phương trình (4) tại điểm rời rạc  $i$  trở thành :

$$\frac{dc_{it}}{dt} = \left( \frac{D}{h^2} + \frac{v}{2h} \right) c_{(i-1)t} - \left( \frac{2D}{h^2} + k \right) c_{it} + \left( \frac{D}{h^2} - \frac{v}{2h} \right) c_{(i+1)t}, \quad i = 1, \dots, N \quad (11)$$

## Bài thực hành môn học **Mô hình hóa, mô phỏng và tối ưu hóa các quá trình hóa học**

- b) Tính đến các điều kiện biên (4) và (9), chỉ ra rằng phương trình (11) có thể viết dưới dạng hệ phương trình vi phân thường sau :

$$\frac{dC}{dt} = AC + b \quad (12)$$

với  $C(t)$  là vector được cho trong (10) và giá trị ban đầu  $C(t=0)$  có được dùng (3). Xác định các ma trận  $A, b$  ?

- c) Tìm nghiệm của (12) với Matlab dùng lệnh *ode*. Biểu diễn biên dạng (profile) của nồng độ nhận được tại các điểm rời rạc.
- d) Viết biểu thức nghiệm  $c(x,t)$  dùng nội suy kiểu đa thức Lagrange từ các nút  $c_{it}$  (12) đã có. Biểu diễn sự thay đổi của nồng độ với Matlab.

### Câu hỏi 3 (Câu hỏi mở rộng)

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

$$N(t) = \pi R^2 \int_0^L c(x,t) dx \quad (13)$$

Dùng qui tắc hình thang, chứng minh rằng (13) có thể xấp xỉ như sau :

$$N(t) = \pi R^2 h \sum_{i=0}^{N-1} \frac{(c_{it} + c_{(i+1)t})}{2} \quad (14)$$

Lập trình tính giá trị số của (14) với giá trị các  $c_{it}$  đã tìm thấy trong (12).

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