

УДК 66.023:519.86

І. Лучейко

(Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя)

ЗБУРЕННЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ РЕАГЕНТУ В СИСТЕМІ “РЕАКЦІЯ $A_1 \rightleftharpoons \alpha_{i+1} A_{i+1}$ + ПРОТОЧНИЙ РЕАКТОР ЗМІШУВАННЯ”: ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Математична модель – задача Коші для системи рівнянь балансу концентрацій інгредієнтів A_j паралельної оборотної реакції $A_1 \xrightleftharpoons[m_i, k_{(i+1)}]{n_i, k_{(i+1)}} \alpha_{i+1} A_{i+1}$ в ізотермічному режимі функціонування реактора з єдиним змінним параметром $c_1^{\text{вх}}(\bar{\tau})$ концентрації реагенту A_1 на вході

$$\begin{cases} dc_1/d\bar{\tau} = c_1^{\text{вх}} - c_1 - \sum_1^N \bar{w}_{1(i+1)}^{\text{витр}} + \sum_1^N \bar{w}_{(i+1)1}^{\text{накоп}} \\ dc_{i+1}/d\bar{\tau} = -c_{i+1} + \bar{w}_{1(i+1)}^{\text{накоп}} - \bar{w}_{(i+1)1}^{\text{витр}} \\ \bar{\tau} = 0, c_j = c_{0j}, \end{cases} \quad (1)$$

де $\bar{w}_{1(i+1)}^{\text{витр}}(A_1)$, $\bar{w}_{(i+1)1}^{\text{витр}}(A_{i+1})$ – швидкості витрачання A_j внаслідок реакції; $\bar{w}_{(i+1)1}^{\text{накоп}}(A_1)$, $\bar{w}_{1(i+1)}^{\text{накоп}}(A_{i+1})$ – швидкості накопичення A_j ; $i = \overline{1, N}$ – номери стадій; $j = \overline{1, N+1}$ – номери A_j ($N \geq 1$ – кількість паралельних стадій, рівна кількості продуктів, $N+1$ – кількість інгредієнтів).

Із врахуванням стехіометрії реакції $\bar{w}_{(i+1)1}^{\text{накоп}} = (1/\alpha_{i+1})\bar{w}_{(i+1)1}^{\text{витр}}$, $\bar{w}_{1(i+1)}^{\text{накоп}} = \alpha_{i+1}\bar{w}_{1(i+1)}^{\text{витр}}$, і тоді

$$\begin{cases} dc_1/d\bar{\tau} = c_1^{\text{вх}} - c_1 - \sum_1^N \bar{w}_{1(i+1)}^{\text{витр}} + \sum_1^N \alpha_{i+1}^{-1} \bar{w}_{(i+1)1}^{\text{витр}} \\ d\tilde{c}_{i+1}/d\bar{\tau} = -\tilde{c}_{i+1} + \bar{w}_{1(i+1)}^{\text{витр}} - \alpha_{i+1}^{-1} \bar{w}_{(i+1)1}^{\text{витр}} \\ \bar{\tau} = 0, \tilde{c}_j = \tilde{c}_{0j}, \sum_1^{N+1} \tilde{c}_{0j} = 1, \end{cases} \quad (2)$$

де величини $\tilde{c}_j(\bar{\tau}) = c_j(\bar{\tau})/\alpha_j$ – миттєві зведені концентрації всіх A_j , зокрема, $\tilde{c}_1 \equiv c_1$.

У випадку степеневі моделі кінетики отримаємо нелінійну систему $N+1$ рівнянь

$$\begin{cases} dc_1/d\bar{\tau} = c_1^{\text{вх}}(\bar{\tau}) - c_1 - \sum_1^N \bar{k}_{1(i+1)} c_1^{n_i} + \sum_1^N \alpha_{i+1}^{m_i-1} \bar{k}_{(i+1)1} \tilde{c}_{i+1}^{m_i} \\ d\tilde{c}_{i+1}/d\bar{\tau} = -\tilde{c}_{i+1} + \bar{k}_{1(i+1)} c_1^{n_i} - \alpha_{i+1}^{m_i-1} \bar{k}_{(i+1)1} \tilde{c}_{i+1}^{m_i} \\ \bar{\tau} = 0, \tilde{c}_i = \tilde{c}_{0i}, \tilde{c}_{0(N+1)} = 1 - \sum_1^N \tilde{c}_{0i} = x_0 - \sum_2^N \tilde{c}_{0i}, \end{cases} \quad (3)$$

де $x_0 = 1 - c_0$ – ступінь перетворення A_1 . При числових розв’язках на ЕОМ обмеження очевидні: $\alpha_{i+1} > 0$, $-\infty < \{n_i, m_i\} < \infty$, $\bar{k}_{1(i+1)} > 0$, $\bar{k}_{(i+1)1} \geq 0$, $0 < \tilde{c}_{0j} < 1$, $\bar{\tau} \geq 0$. Для будь-яких концентраційних збурень стаціонарного режиму $c_1^{\text{вх}}(\bar{\tau} = 0) = 1$, $c_1^{\text{вх}}(\bar{\tau} > 0) \geq 0$.