МОДЕЛЮВАННЯ ЧУТЛИВОСТІ СКЛАДНИХ СИСТЕМ ПРИ ДОСЛІДЖЕННІ КІНЕТИКИ ХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

Кулик Є. О., Безносик Ю. О.
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Київ, Україна
kulik.zhenya96@gmail.com

Аналіз чутливості – істотна частина програми забезпечення надійності процесів. В останні роки проблема забезпечення надійності хіміко-технологічних систем все більш виходить на перший план. Сьогодні завдання забезпечення надійності розглядається як найважливіший аспект проектування систем. Це обумовлюється, з одного боку, складністю структури подібних систем, що складаються з багатьох елементів, і, тим можливим збитком, який буде завдано в разі відмови такої системи.

У найзагальнішому випадку кінетика хімічного процесу без урахування просторових ефектів (при ідеальному перемішуванні розчину реакційної суміші) описується системою звичайних диференціальних рівнянь:

$$\frac{dc}{dt} = F(c,k), \qquad c(0) = c_0,$$

де c – n-вектор концентрацій реагентів; k - m-вектор параметрів системи (константи швидкостей, температура, тиск).

Рішення системи звичайних диференціальних рівнянь будуть криві залежності концентрацій від часу.

Аналіз чутливості можна класифікувати на основі досліджуваних кінетичних моделей як функцію параметрів. Система, взаємодіючи з зовнішнім середовищем і може бути кількісно оцінена через свої входи і виходи. Входами можуть бути сировина, її кількість, склад, температура. Виходами можуть бути кількість готового продукту, його якість, температура. Якщо система схильна до збурень, то для їх компенсації, тобто для того щоб система працювала в заданому напрямку, використовуються керуючі впливи, які також виражають кількісно. Вплив зміни параметра на рішення можна розкласти в ряд Тейлора:

$$c_i(t, k+\Delta k) = c_i(t,k) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial c_i}{\partial k_j} \Delta k_j + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial^2 c_i}{\partial k_i \, \partial k_j} \Delta k_i \, \Delta k_j + \ldots$$

У цьому рівнянні, частинні похідні $\partial c_i/\partial k_i$ називаються коефіцієнтами локальної концентраційної чутливості першого порядку, а $\partial^2 c_i/(\partial k_i * \partial k_j)$ – коефіцієнтами локальної концентрації другого порядку. Зазвичай, тільки коефіцієнти чутливості першого порядку (або лінійні) розраховуються і вивчаються. Ці коефіцієнти складають матрицю чутливості S, яка представляє залежності лінійної апроксимації рішень від змін параметра. Матриця може бути отримана прямим диференціюванням, якщо аналітичне рішення системи звичайних диференціальних рівнянь відомо. Але в хімічній кінетиці такі прості системи зустрічаються досить рідко і тоді застосовуються чисельні методи розрахунку чутливості.

Найпростішим методом обчислення часткових похідних компонентів рішення системи звичайних диференціальних рівнянь за параметрами є почергова зміна кожного з параметрів на деяку величину (h) і чисельне інтегрування системи звичайних диференціальних рівнянь. За отриманими розрахованими даними кривих залежностей зміни концентрацій компонентів від часу, було проведено аналіз чутливості системи Білоусова-Жаботинського, що каталізується ферроіном, а саме зміну періоду коливань системи при зміні констант швидкості реакції.