Azərbaycan Ali Texniki Məktəblərinin Xəbərləri
ISSN 1609-1620
Cild 22, № 4 (2020), 52-55
UOT 66.001.001.57:66.022:621.926/929

İzotermik kimyəvi reaksiyaların qeyri-səlis dayanıqlığının tədqiqi

Kimya və kimya texnologiyası

Cəfərli M.M.
Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti
E-mail: mahsati.jafarli@gmail.com

Məqalədə izotermik kimyəvi reaksiyaların qeyri-səlis dayanıqlığının tədqiqi məsələlərinə baxılmış, birinci tərtib izotermal reaksiyanın qeyri-səlis dayanıqlığının analizi aparılmışdır. Qeyri-səlis diferensial tənliklə ifadə olunan reaksiyanın dayanıqlığını yoxladıqda sürət sabitinin qeyri-səlis model əsasında alınan qiymətlərindən istifadə edilib. Qeyri-səlis diferensial tənliklə ifadə olunan reaksiyanın dayanıqlığını yoxlamaq üçün α-kəsik üsulu və dayanıqlıq şərti tətbiq edilib.
.

Acar sözlər: izotermik kimyəvi reaksiya, Lipsits mənada qeyri-səlis dayanıqlıq, sürət tənlikləri, qeyri-səlis diferensial tənlik, reaksiyanın dayanıqlığı.

Giriş

Kimya elminin yeni bir istiqamətdə inkişafına təkan verəcək problemə- izotermik kimyəvi reaksiyaların sürət sabitinin və dayanıqlığının qeyri-səlis məntiq əsasında qiymətləndirilməsi probleminə baxaq. Bu problemin aktuallığını 2 fakt sübut edir, birincisi qoyulan mövzunun işlənməsi kimyanın yeni sahəsi – "computational chemistry"dən istifadəni, ikincisi "Soft computing" texnologiyasının əsası sayılan qeyri-səlis məntiqdən istifadəni tələb edir.

Burada ikinci fakta əsaslanan yanaşmadan istifadə edəcəyik. Bu işin yerinə yetirilməsində verilənlər elmi ədəbiyyatlardan götürülüb. Məlumdur ki, elmlər sinerji olunduqda daha yüksək keyfiyyətli nəticələr əldə edilir. Məsələn, qeyri-səlis məntiq və neyron şəbəkələrə əsaslanan yanaşma əsasında kimyəvi proseslərin təhlili.

Son illərdə hesablama zəkası, ağıllı sistemlər inkişaf etdirilərək bir çox mürəkkəb problemləri həll etmək üçün istifadə olunur. Qeyri-səlis məntiqin qərar vermə üçün güclü bir vasitə olduğu sübut edildiyindən bəzi kimyəvi proseslərdə artıq istifadə edilmişdir və elmi mənbələrdə var. İlk yanaşmalarda prosesi ifadə edən məlumatlar cədvəllər, qaydalar şəklində səlis verilənlərlə ifadə olunur və nəticə əldə etmək üçün proqramlardan istifadə edilirdi. Bu da çox vaxt özünü doğrultmurdu, çünki insan operator verilənləri dəqiq təsvir etməklə kobud səhvlər edir və alınan nəticə də böyük xəta ilə xarakterizə olunurdu. Son on ildə isə qeyri-səlis məntiqin ağıllı sistemlər üçün faydalı olduğu sübut edildi və biliklərə əsaslanan sistemlərin kimya mühəndisliyi üçün vacib problem olduğu ortaya çıxdı. Digər tərəfdən elmi ədəbiyyatlar sübut edir ki, tədqiqatçılar kimya kibernetikasının metodlarından biri olan riyazi modelləşdirmə və onun reallaşdırılması vasitələrindən istifadə edirlər. Bu vasitələr yeni texnologiyalar inkişaf etdikcə təkmilləşdirilir və onlardan istifadə etmədən kimya texnologiyasının inkişafı mümkün deyil. Elmi ədəbiyyatlardan aydın görünür ki, tədqiqatçılar kimya texnologiyasının əsas problemlərindən olan kimyəvi proseslərdə idarəetmənin optimal rejimlərinin təyini, reaksiyalarda dayanıqlığın tədqiqi, qurğuların optimal konstruksiyalarının müəyyən edilməsi kimi məsələlərə xüsusi diqqət yetiririlər. Lakin hələ də həllini gözləyən problemlər var.

Bu məqalədə izotermik kimyəvi reaksiyaların qeyri-səlis dayanıqlığının tədqiqi məsələsinə baxılır.

Məsələnin qoyuluşu

Tutaq ki, izotermik A→B reaksiyası aşağıdakı diferensial tənliklə ifadə olunur[1-3]:

$$y''(s) = -Ny'(s) + RNy(s) - RN \quad (1)$$

$N = \dfrac{\vartheta L}{E_\alpha}$, $R = \dfrac{kL}{\vartheta}$ şəklində ifadə etmək olar. Burada E_α- effektiv diffuziya əmsalı, *k*- reaksiyanın sürət sabiti, L-reaktorda borunun uzunluğu, ϑ qatışığın reaksiyaya girmə sürətidir.

Bu tənlikdə

$$y = \frac{C_A}{C_{A0}}, \quad z = \frac{x}{L}, \quad N = \frac{\vartheta L}{E_a}, \quad R = \frac{kL}{\vartheta}$$

Başlanğıc şərtlər $y(0)=0$, $y'(0)=0$ kimidir. Əvvəlcə müəyyənlik üçün fərz edirik ki, N = 1 və R = 1. Onda (1) tənliyi

$$y''(s) = -y'(s) + y(s) - 1$$

şəklinə düşər. Məqsəd bu tənliklə ifadə olunan kimyəvi reaksiyanın dayanıqlığının tədqiqidir.

Həll üsulu

Qeyri-səlis diferensial tənlik üçün başlanğıc şərt məsələsi

$$\dot{x} = f(t,x),$$
$$x(t_0) = y_0 \in E^n, t \ge t_0, t_0 \in R_+ \quad (2)$$

ilə ifadə olunur, *f* funksiyası $R_+ \times E^n$ oblastında təyin edilmiş, kəsilməz və kəsilməz diferensiallanan funksiyadır, yəni $f \in C^1[R_+ \times E^n, E^n]$. Burada, E^n R^n -in qeyri-səlis altfəzası, *R* isə həqiqi ədəd oxudur.

Əgər *f* *x*-ə nəzərən $\dfrac{\partial f}{\partial x}$ kəsilməz xüsusi törəməyə malik olarsa, onda Zadə-Əliyev dayanıqlıq meyarını aşağıdakı kimi ifadə etmək olar:

(2) sisteminin $x(t,t_0,y_0)$ həlli o zaman $x(t,t_0,x_0)$ həllinə nəzərən Lipsits mənada qeyri-səlis dayanıqlı olar ki, (1) sisteminin ixtiyari bir $x(t,t_0,x_0)$, $t \ge t_0$ həlli və $M=M(t_0)>0$ üçün

$$\| x(t,t_0,y_0) -_h x(t,t_0,x_0) \|_{fH} \le M(t_0) \| y_0 -_h x_0 \|_{fH} \quad (3)$$

ödənsin.

Burada $-_h$ qeyri-səlis ədədlərin Hukuhara fərqi, $\|\cdot\|_{FH}$ isə E^n fəzasında qeyri-səlis Haustorf normasıdır. $\dfrac{\partial f}{\partial x}$ törəməsi $R_+ \times E^n$ fəzasında kəsilməz olduqda $F(t,t_0,\tilde{x}_0) = \dfrac{\partial x(t,t_0,\tilde{x}_0)}{\partial x_0}$ fundamental həllər matrisi məhdud olur. Bu halda (2) sisteminin $x(t,t_0,y_0)$ həlli (3) şərtini ödəyir.

Fundamental həllər matrisinin α-kəsiyi $F^\alpha = [F_l^\alpha, F_r^\alpha]$ şəklindədir. α=0 olduqda $F^\alpha = [F_l, R_r]$ kimi işarə edilib.

Baxılan sistem üçün $F^\alpha = [F_l, R_r]$ aşağıdakı kimi təyin edilmişdir:

$$Fl=MatrixExp[Al*t]=\{\{\frac{1}{10}(5e^{\frac{1}{2}(-1-\sqrt{5})t} - \sqrt{5}e^{\frac{1}{2}(-1-\sqrt{5})t} + 5e^{\frac{1}{2}(-1+\sqrt{5})t} + \sqrt{5}e^{\frac{1}{2}(-1+\sqrt{5})t}),$$

$$-\frac{e^{\frac{1}{2}(-1-\sqrt{5})t}-e^{\frac{1}{2}(-1+\sqrt{5})t}}{\sqrt{5}}\}, \quad \{-\frac{e^{\frac{1}{2}(-1-\sqrt{5})t}-e^{\frac{1}{2}(-1+\sqrt{5})t}}{\sqrt{5}},$$

$$\frac{1}{10}(5e^{\frac{1}{2}(-1-\sqrt{5})t}+\sqrt{5}e^{\frac{1}{2}(-1-\sqrt{5})t}+5e^{\frac{1}{2}(-1+\sqrt{5})t}-\sqrt{5}e^{\frac{1}{2}(-1+\sqrt{5})t})\}\}$$

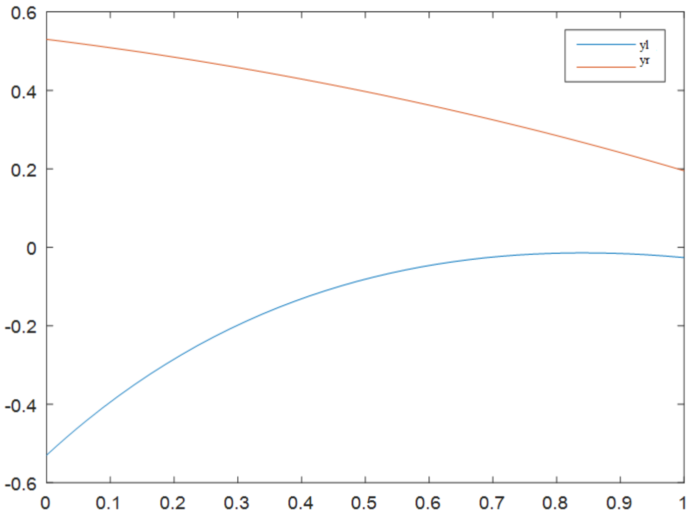
Fr=MatrixExp[Ar*t]=

$$\{\{\frac{1}{10}(5e^{\frac{1}{2}(-1-\sqrt{5})t}-\sqrt{5}e^{\frac{1}{2}(-1-\sqrt{5})t}+5e^{\frac{1}{2}(-1+\sqrt{5})t}+\sqrt{5}e^{\frac{1}{2}(-1+\sqrt{5})t}),$$

$$-\frac{e^{\frac{1}{2}(-1-\sqrt{5})t}-e^{\frac{1}{2}(-1+\sqrt{5})t}}{\sqrt{5}}\}, \quad \{-\frac{e^{\frac{1}{2}(-1-\sqrt{5})t}-e^{\frac{1}{2}(-1+\sqrt{5})t}}{\sqrt{5}},$$

$$\frac{1}{10}(5e^{\frac{1}{2}(-1-\sqrt{5})t}+\sqrt{5}e^{\frac{1}{2}(-1-\sqrt{5})t}+5e^{\frac{1}{2}(-1+\sqrt{5})t}-\sqrt{5}e^{\frac{1}{2}(-1+\sqrt{5})t})\}\}$$

$S^{\alpha}=[S_l,S_r]$ qeyri-səlis bağlanğıc şərt məsələsinin həllinin α-kəsik vasitəsilə təsviridir. Onda həllin qrafiki təsviri şəkil 1-dəki kimi olar.



Şəkil 1. Qeyri-səlis diferensial tənliklə yazılan reaksiyanın dinamikası

Bu halda həll Lipşits mənada dayanıqlıdır.

Misal. Dayanıqsız hal. (3) tənliyində N və R parametrlərini aşağıdakı kimi dəyişək, R_l= 0.5, R_r=1.5, N_l= 0.5, N_r =1.5.

$$Al=\begin{pmatrix}0 & 1\\ Rl*Nl & -Nl\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0.25 & -0.5\end{pmatrix}, \quad X_l=\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\end{pmatrix}, \quad \dot{X}_l=\begin{pmatrix}\dot{x}_1\\ \dot{x}_2\end{pmatrix}, \quad Ul=\begin{pmatrix}0\\ -Rl*Nl\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ -0.25\end{pmatrix},$$

$\dot{X}_l=A_l*X_l+U_l \quad X0l=\begin{pmatrix}-0.53\\ 1.5\end{pmatrix}$ olar. $Ar=\begin{pmatrix}0 & 1\\ Rr*Nr & -Nr\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 2.25 & -1.5\end{pmatrix}, \quad X_r=\begin{pmatrix}x_3\\ x_4\end{pmatrix},$

$\dot{X}_r=\begin{pmatrix}\dot{x}_3\\ \dot{x}_4\end{pmatrix}, \quad Ur=\begin{pmatrix}0\\ -Rr*Nr\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\ -2.25\end{pmatrix}, \quad \dot{X}_r=A_r*X_r+U_r, \quad X0r=\begin{pmatrix}0.53\\ -0.2\end{pmatrix}$ alarıq.

Fundamental həllər matrisinin fraqmenti aşağıdakı kimi olur:

*Fl = MatrixExp[Al*t] =*

{{–0.777437524821136(0.–0.3555182164812668$e^{-0.8090169943749475t}$) + 0.9554225632202383(0.+0.757368369074649$e^{0.30901699437494745t}$), –0.777437524821136(0.+1.1504811157728663$e^{-0.8090169943749475t}$) + 0.9554225563220238 3(0.+0.9361587484235894$e^{0.30901699437494745t}$)}, {0.628960169645094(0.–0.3555182164812668$e^{-0.8090169943749475t}$) + 0.29524180884432627(0.+0.7573683369074649$e^{0.30901699437494745t}$),

$0.628960169645094(0.+1.1504811157728663e^{-0.8090169943749475t}) +$
$0.29524180884432627(0.+0.9361587484235894e^{0.30901699437494745t})\}\}$
$Fr = MatrixExp[Ar*t] = \{\{-0.38095372233513364(0.-0.7255296012224595e^{-2.4270509831248424t}) +$
$0.7333492283402898(0.+0.986715155325983e^{0.9270509831248424t}),$
$-0.38095372233513364(0.+0.782621036414731e^{-2.4270509831248424t}) +$
$0.7333492283402898(0.+0.40654900213739287e^{0.9270509831248424t})\},$
$\{0.9245941063185542(0.-0.7255296012224595e^{-2.4270509831248424t}) +$
$0.6798521231067103(0.+0.986715155325983e^{0.9270509831248424t}),$
$0.924594106385542(0.+0.782621036414731e^{-2.4270509831248424t}) +$
$0.6798521231067103(0.+0.40654900213739287e^{0.9270509831248424t})\}\}$

Bu da sistemin vəziyyətinin dayanıqsız olduğunu göstərir. k-nın müxtəlif qiymətlərində həssaslıq təhlili yoxlanılmışdır.

Nəticə

Məqalədə qeyri-səlis diferensial tənliklə yazılan reaksiyanın dinamikası tədqiq edilmişdir. Bu məqsədlə differensial tənliyin həllü üçün alfa kəsik üsulu istifadə olunmuşdur. R_l= 0.5, R_r=1.5, N_l= 0.5, N_r =1.5 olduqda tənliyin həllinin dayanıqsız olduğu aşkar edilmişdir.

Ədəbiyyat

1. Can, E. A New Method for Solution of Fuzzy Reaction Equation / E. Can, M. A. Bayrak. Communications in Mathematical and in Computer Chemistry, 2015, vol. 73, - p. 649-661

2. Scholz, G. First-order differential equations in chemistry / G. Scholz, F. Scholz. – ChemTexts, - 2014, 1(1), - 12 p.

3. Shawagfeh, N.T. Analytical approximate solutions for nonlinear fractional differential equations / N.T. Shawagfeh. - Applied Mathematics and Computation, - 2002, 131(2-3), - p. 517–529

Резюме

Джафарлы М.М.

Анализ нечеткой усточивости изотермических химических реакций

В статье рассматривается изучение нечеткой устойчивости изотермических химических реакций, анализ нечеткой устойчивости изотермической реакции первого порядка. При проверке устойчивости реакции, выраженной нечетким дифференциальным уравнением, используются значения константы скорости, полученные на основе нечеткой модели. Для проверки устойчивости реакции, выраженной нечетким дифференциальным уравнением применены метод α-сечения и условие устойчивости.

.

Ключевые слова: изотермическая химическая реакция, нечеткая устойчивость по Липсицу, уравнения скоростей, нечеткое дифференциальное уравнение, устойчивость реакции.

Summary

Jafarli M.M.

Fuzzy stability analysis of isothermal chemical reactions

The paper deals with the study of the fuzzy stability of isothermal chemical reactions, the analysis of the fuzzy stability of an isothermal reaction of the first order. When checking the stability of a reaction expressed by a fuzzy differential equation, the values of the rate constant obtained on the basis of a fuzzy model are used. To test the stability of the reaction expressed by a fuzzy differential equation, the α-cut method and the stability condition were applied.

.

Keywords: isothermal chemical reaction, fuzzy Lipsitz stability, rate equations, fuzzy differential equation, reaction stability.