УДК 004.942.001.57

Молодецька К. В.

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ЕКСТРАКЦІЇ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ АЛГЕБРИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ СПЕКТРІВ

Представлено моделювання процесу одновимірної дифузії методом на основі алгебричних властивостей диференціальних спектрів для нестаціонарних фізичних процесів. Виконано порівняння отриманих результатів із відомими методами і встановлено, що застосування даного методу дозволило зменшити обчислювальну складність та підвищити точність до заданого рівня, що може бути корисним на етапі проектування екстракційних апаратів.

Ключові слова: *екстракція, дифузія, диференціальні перетворення, алгебричні властивості, крайова задача, точність.*

1. Вступ

У сучасних виробництвах для добування одного або декількох компонентів з розчинів або твердих тіл за допомогою вибіркових розчинників використовують екстракцію [1]. У зв'язку із задачами інтенсифікації, оптимізації й автоматизації виробничих процесів виникає гостра необхідність у розробці методів розрахунку екстракційних процесів, встановлення фізичної сутності й основних закономірностей їх протікання. Отже, на перший план висуваються питання точності математичного опису екстракційного процесу. Відомо, що математичні моделі процесу екстракції описуються диференціальними рівняннями із частинними похідними з початковими і граничними умовами [2]. Моделювання виконується із використанням чисельних методів розв'язання, які мають ряд недоліків: погана обумовленість, складність алгоритмізації, відсутність теоретичних оцінок похибки тощо [3]. В даний час застосування аналітичних і чисельно-аналітичних методів розв'язання крайових задач недостатнє і вимагає подальших досліджень [4–8].

2. Аналіз літературних даних і постановка проблеми

Аналіз останніх досліджень і публікацій [4, 5, 8] показав, що аналітичні й чисельно-аналітичні методи моделювання фізичних процесів ґрунтуються на інтегральних та диференціальних перетвореннях (ДП). У випадку лінійних математичних моделей застосовують методи інтегральних перетворень [5]. Аналітичне моделювання нелінійних фізичних процесів може бути виконано на основі використання ДП Г.Є. Пухова [6, 7]. Математична модель в області ДП має вигляд диференціального спектру (ДС), похибка моделювання фізичного процесу в області оригіналів безпосередньо залежить від кількості дискрет ДС [7, 8]. В зв'язку із аналітичною складністю, моделювання фізичних процесів виконують з використанням декількох початкових дискрет, а це обмежує точність в області оригіналів.

Метою проведених досліджень було моделювання нестаціонарних фізичних процесів екстракції із використанням методу на основі алгебричних властивостей ДС, який дозволяє на великому часовому інтервалі досягнути заданого рівня похибки моделювання [8].

Для досягнення поставленої мети необхідно було вирішити наступні задачі: проаналізувати математичні моделі процесів дифузійного перенесення речовини; виконати моделювання процесу екстракції із використанням методу на основі алгебричних властивостей ДС із заданим рівнем похибки; порівняти результати моделювання запропонованим методом із результатами відомих методів та зробити висновки про його ефективність.

3. Результати досліджень

Об'єктом досліджень було обрано моделювання нестаціонарного процесу екстракції в області ДП. Основою класичної фізико-математичної теорії дифузії є диференціальні рівняння Фіка, що описують процеси дифузійного перенесення речовини [1, 2]. Розглянемо одновимірну дифузію, яка задана функцією $c(x,t)$ двох незалежних змінних в області $0 \le |x| \le H_x$, $0 \le t \le H$, де H_x, H — задані додатні сталі.

В межах великого часового інтервалу $[0,H]$ застосуємо n зміщених ДП [9]:

$$C_\nu(x,k) = \frac{h^k}{k!}\left[\frac{\partial^k c(x,t)}{\partial t^k}\right]_{t=t_\nu},$$

$$c(x,t) = \sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{t-t_\nu}{h}\right)^k C_\nu(x,k),\ t_\nu = h(2\nu-1), \tag{1}$$

де $C_\nu(x,k)$ — зміщені диференціальні зображення функції $c(x,t)$; t_ν — фіксовані точки часового аргументу, в яких будується ДС $C_\nu(x,k)$; h — стала величина, яка розраховується з умов досягнення заданого рівня похибки. На величину h накладається умова, яка задається виразом за Лагранжем [10]:

$$h \ge \sqrt[q+1]{\frac{\varepsilon(q+1)!}{\sup\limits_{\substack{0\le x\le H_x\\ 0\le t\le H}} c^{(q+1)}(x,t)}},\quad c^{(q+1)}(x,t) = \frac{\partial^{q+1}c(x,t)}{\partial t^{q+1}}. \tag{2}$$

Розглянемо нестаціонарний процес екстракції на технологічній ділянці довжиною l, який описується наступним диференціальним рівнянням:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2},\quad 0 < x < l,\quad 0 < t \le H, \tag{3}$$

де задана стала $H = 2$, при початковій умові $c(x,0) = \sin\frac{\pi x}{2l}$ і граничній умові $c(x,0) = \frac{\partial c(l,t)}{\partial x} = 0$. Нехай $l = \frac{\pi}{2}$, а верхня межа похибки моделювання рівна $\varepsilon = 0{,}02$. Моделювання виконаємо із використанням двох дискрет зміщених ДС. З виразу (2) при $\varepsilon = 0{,}02$; $q = 1$ і $\sup c^{(q+1)}(x,t) = 1$ маємо $h \ge 0{,}2$. Переведемо диференціальне рівняння (3) в область зображень на основі зміщених ДП [9]:

$$C_\nu(x,k+1) = \frac{h}{k+1}\frac{d^2C(x,k)}{dx^2},\quad \nu = \overline{1,n}. \tag{4}$$

На заданому часовому інтервалі $H = 2$ маємо 5 зміщених точок $t_\nu = h(2\nu-1)$ при $h = 0{,}2$, тобто $n = 5$. Невідомі початкові дискрети зміщених ДС задаємо у символьному вигляді при $n = 5$. Перші дискрети зміщених ДС визначимо із виразу (4) при $k = 0$:

$$C_\nu(x,1) = h\ddot{\varphi}_\nu(x),\quad \ddot{\varphi}_\nu(x) = \frac{d^2\varphi_\nu(x)}{dx^2},\quad \nu = 1, 2, ..., 5. \tag{5}$$

Система зміщених ДС (4), (5) має вигляд $C_\nu(x,0) = \varphi_\nu(x)$, $C_\nu(x,1) = h\ddot{\varphi}_\nu(x)$, $\nu = 1, 2, ..., 5$. При $\nu = 1$ виконуємо обернений перехід з області зображень в область оригіналів при $t = 0$, $t_\nu = h$ і $q = 1$:

$$C(x,0) = \varphi_1(x) - h\ddot{\varphi}_1(x). \tag{6}$$

З виразів зміщених ДС (6) ммаємо звичайне диференціальне рівняння відносно невідомої функції $\varphi_1(x)$:

$$\ddot{\varphi}_1(x) - \frac{1}{h}\varphi_1(x) = -\frac{1}{h}\sin x. \tag{7}$$

Загальний розв'язок диференціального рівняння (7) має вигляд:

$$\varphi_1(x) = B_1 sh\sqrt{\frac{1}{h}}x + B_2 ch\sqrt{\frac{1}{h}}x + \frac{1}{1+h}\sin x,$$

де B_1, B_2 — сталі інтегрування. (8)

Вираз (8) при $x = 0$ і заданих граничних умовах дозволяють знайти B_2 як $c(0,t) = \varphi_1(0) = B_2 = 0$. Підстановка виразу (8) у граничну умову при $x = l = \frac{\pi}{2}$ і $B_2 = 0$ дає рівняння, із якого визначаємо $B_1 = 0$. З виразу (8) при $B_1 = B_2 = 0$ отримаємо невідому функцію у точці $t_1 = h$:

$$\varphi_1(x)=\frac{1}{1+h}\sin x. \tag{9}$$

Всі функції $\varphi_\nu(x)$, $\nu=1,2,...,5$ отримаємо після підстановки зміщених ДС:

$$\begin{aligned}
&\varphi_1(x)-h\ddot{\varphi}_1(x)=\sin x;\\
&\varphi_1(x)+h\ddot{\varphi}_1(x)=\varphi_2(x)-h\ddot{\varphi}_2(x);\\
&\varphi_2(x)+h\ddot{\varphi}_2(x)=\varphi_3(x)-h\ddot{\varphi}_3(x);\\
&\varphi_3(x)+h\ddot{\varphi}_3(x)=\varphi_4(x)-h\ddot{\varphi}_4(x);\\
&\varphi_4(x)+h\ddot{\varphi}_4(x)=\varphi_5(x)-h\ddot{\varphi}_5(x);\\
&\varphi_5(x)+h\ddot{\varphi}_5(x)=C(x,H).
\end{aligned} \tag{10}$$

Підстановка (9) у друге рівняння системи (10) дає звичайне диференціальне рівняння для визначення невідомої функції $\varphi_2(x)$. Його розв'язок має вигляд:

$$\ddot{\varphi}_2-\frac{1}{h}\varphi_2(x)=-\frac{1-h}{h(1+h)}\sin x,$$

$$\varphi_2(x)=\frac{1-h}{(1+h)^2}\sin x. \tag{11}$$

Аналогічним чином із системи (10) отримаємо інші невідомі функції:

$$\varphi_\nu=\frac{(1-h)^{\nu-1}}{(1+h)^\nu}\sin x, \quad \nu=1,2,...,5. \tag{12}$$

Підстановка зміщених ДС та невідомих функцій (12) у вираз для зворотного переходу в область оригіналів дає розв'язок крайової задачі (3) для значень часового аргументу $t_i=2hi$ у вигляді:

$$c(x,t_i=2hi)=\left(\frac{1-h}{1+h}\right)^i\sin x, \quad i=1,2,...,5. \tag{13}$$

Встановлено, що похибка моделювання крайової задачі у точці $x=1$, $t=H=2$ на основі двовимірних ДП [6] у двадцять разів більша ніж похибка моделювання запропонованим методом при $i=5$, $h=0,2$ на основі виразу (13), яка дорівнює $\varepsilon=0,003$ у порівнянні з точним розв'язком задачі.

4. Висновки

Застосування методу на основі алгебричних властивостей диференціального спектру для моделювання одновимірної дифузії дозволяє підвищити ефективність моделювання процесу екстракції з метою оптимізації та інтенсифікації. Використання методу моделювання нестаціонарних процесів на основі алгебричних властивостей диференціальних спектрів може бути корисним на етапі проектування екстракційних апаратів.

Література

1. Иванова, Л. А. Технология лекарственных форм [Текст] : учебник в 2-х томах / Л. А. Иванова. — М.: Медицина, 1991. — Т. 2. — 544 с.
2. Колпакова, Н. А. Кинетика диффузионно-контролируемых химических реакцій [Текст] / Н. А. Колпакова; Томский политехнический университет. — Томск: Изд-во ТПУ, 2010. — 98 с.
3. Поршнев, С. В. Вычислительная математика [Текст] / С. В. Поршнев. — Санкт-Петербург : БХВ Петербург, 2004. — 320 с.
4. Баранов, В. Л. Зміщені системоаналогові диференціальні перетворення для розв'язку крайових задач [Текст] / В. Л. Баранов, С. В. Водоп'ян, Р. М. Костюченко // Вісник ЖДТУ. — Житомир : ЖДТУ, 2005. — 2005.— № 4(35). — С. 42—48.
5. Рвачев, В. Л. Алгебра логики и интегральные преобразования в краевых задачах [Текст] / В. Л. Рвачев, А. П. Слесаренко. — Киев : Наукова думка, 1976. — 288 с.
6. Пухов, Г. Е. Дифференциальные преобразования и математическое моделирование физических процессов [Текст] / Г. Е. Пухов. — Киев : Наук. думка, 1986. — 158 с.
7. Пухов, Г. Е. Дифференциальные спектры и модели [Текст] / Г. Е. Пухов. — Киев : Наук. думка, 1990. — 184 с.
8. Баранов, В. Л. Метод моделювання фізичних полів і процесів на основі прямих і зворотних диференціальних спектрів [Текст] / В. Л. Баранов, Р. М. Костюченко, К. В. Молодецька // Вісник ЖДТУ. — Житомир : ЖДТУ, 2009. — № 2(49). — С. 59—68.
9. Баранов, В. Л. Методика моделювання фізичних полів і процесів в областях великого розміру [Текст] / В. Л. Баранов, Р. М. Костюченко, К. В. Молодецька // Проблеми створення, випробовування, застосування та експлуатації складних інформаційних систем. — Вип. 2. — Житомир : ЖВІ НАУ, 2009. — С. 118—125.
10. Баранов, В. Л. Оцінка похибки моделювання фізичних полів і процесів системою прямих і зворотних диференціальних спектрів [Текст] / В. Л. Баранов, Р. М. Костюченко, К. В. Молодецька // Вісник ЖДТУ. — Житомир : ЖДТУ, 2009. — № 3(50). — С. 71—77.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЭКСТРАКЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ СПЕКТРОВ

Представлено моделирование процесса одномерной диффузии методом на основе алгебраических свойств дифференциальных спектров для нестационарных физических процессов. Выполнено сравнение полученных результатов с известными методами и установлено, что применение данного метода позволило уменьшить вычислительную сложность и повысить точность до заданного уровня, что может быть полезным на этапе проектирования экстракционных аппаратов.

Ключевые слова: экстракция, диффузия, дифференциальные преобразования, алгебраические свойства, краевая задача, точность.

***Молодецька Катерина Валеріївна**, кандидат технічних наук, доцент, кафедра комп'ютерних технологій і моделювання систем, Житомирський національний агроекологічний університет, Україна, **e-mail: kmolodetska@gmail.com**.*

***Молодецкая Катерина Валерьевна**, кандидат технических наук, доцент, кафедра компьютерных технологий и моделирования систем, Житомирский национальный агроэкологический университет, Украина.*

Molodetska Katerina**, Zhytomyr National Agroecological University, Ukraine, **e-mail: kmolodetska@gmail.com