

УДК 532.72

О СТАЦИОНАРНЫХ РЕЖИМАХ РАБОТЫ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ С ПРОДОЛЬНОМ И ПОПЕРЕЧНЫМ ПЕРЕМЕШИВАНИЕМ

Гупало Ю. П., Острик В. М.

Предлагается и исследуется двумерная модель химического реактора, обобщающая модель идеального вытеснения с интегральным учетом тепловыделения [1] на случай, когда в реакторе существен радиальный градиент температуры. Для предложенной модели доказывается существование по крайней мере одного стационарного решения при любых параметрах системы. Определяются достаточные критерии единственности стационарного режима и области изменения параметров, при которых этот режим единственный. Сравнение с соответствующими результатами для модели [1] показывает, что вне окрестности границы областей параметров с различным числом режимов стационарные решения для предложенной модели являются регулярным возмущением решений [1]. Строится асимптотическое разложение решения при малых числах Пекле и дается приближенное решение при умеренных значениях числа Пекле, основанное на квадратичной аппроксимации радиального профиля температуры. Полученные результаты подтверждаются данными численных расчетов, использующих конечно-разностную аппроксимацию исходных дифференциальных уравнений и метод пристрелки [2] или метод локальных вариаций [3] для решения соответствующей двухточечной краевой задачи.

Для описания процессов тепло- и массопереноса в проточных химических реакторах и реакторах со взвешенным слоем обычно используются одномерные модели, дополненные упрощающими предположениями о процессах переноса (идеальное вытеснение или полное перемешивание). Вопросам существования, единственности и устойчивости стационарных режимов таких реакторов уделялось достаточно много внимания [4—6]. Однако для ряда гетерогенно-каталитических процессов, протекающих с большим тепловыделением, становится существенным поперечный градиент температуры, и в рассмотрение следует ввести механизм поперечной теплопроводности и передачу тепла на стенке теплоносителю.

Областью применения предлагаемой ниже двумерной модели может служить описание высокоэкзотермических процессов в псевдооживленном слое, где движение реагентов близко к режиму идеального вытеснения, а значения эффективных коэффициентов теплопроводности велики вследствие интенсивного движения частиц катализатора. Эта модель может быть использована и для анализа режимов работы реактора с неподвижным слоем катализатора, в котором обычно значение эффективного коэффициента теплопроводности в поперечном направлении намного ниже, чем в продольном [7, 8].

1. Модель реактора. Рассматривается двумерная модель химического реактора идеального вытеснения по веществу (продольный и поперечный коэффициенты диффузии равны нулю) и полного продольного перемешивания по энергии (продольный коэффициент теплопроводности равен бесконечности, а поперечный имеет конечное значение). Для простоты предполагается, что профиль скорости плоский, а химическая реакция имеет первый порядок, хотя основные выводы справедливы для реакции любого порядка.

Стационарные уравнения массотеплопереноса для рассматриваемой модели реактора в безразмерной форме имеют вид

$$(1.1) \quad \frac{\partial \xi}{\partial x} - g \exp\left(-\frac{\beta}{\theta}\right)(1 - \xi) = 0$$

$$(1.2) \quad \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d\theta}{dr} \right) = \text{Pe} \left[\theta - \theta'' - g \exp \left(- \frac{\beta}{\theta} \right) \int_0^1 (1 - \xi) dx \right]$$

$$\xi = \frac{C^\circ - C}{C^\circ}, \quad \theta = \frac{T}{T^*}, \quad \theta'' = \frac{T''}{T^*}, \quad T^* = \frac{hC^\circ}{\rho c}, \quad g = \frac{k_0 l}{u}$$

$$\beta = \frac{E}{R_0 T^*}, \quad \text{Pe} = \frac{\varepsilon_0 \rho c a^2 u}{\lambda l}, \quad x = \frac{X}{l}, \quad r = \frac{R}{a}$$

Здесь C, C° — концентрация ключевого вещества в реакторе и на входе в реактор соответственно, T, T'' — температура в реакторе и температура поступающей смеси, h — теплота реакции, ρ и c — плотность и удельная теплоемкость смеси реагентов и продуктов реакции, E — энергия активации, R_0 — газовая постоянная, k_0 — предэкспонент Аррениуса, u — скорость смеси, l и a — длина и радиус реактора, X и R — продольная ($0 \leq X \leq l$) и поперечная ($0 \leq R \leq a$) координаты, ε_0 — объемная доля смеси реагентов и продуктов реакции в пористом слое катализатора, λ — значение эффективного коэффициента теплопроводности в радиальном направлении, g — параметр, пропорциональный числу Дамкелера.

Уравнения (1.1), (1.2) дополняются граничными условиями

$$(1.3) \quad x = 0, \quad \xi = 0$$

$$(1.4) \quad r = 0, \quad d\theta/dr = 0$$

$$r = 1, \quad d\theta/dr + \text{Vi} (\theta - \theta') = 0$$

$$\theta' = \frac{T'}{T^*}, \quad \text{Vi} = \nu \text{Pe}, \quad \nu = \frac{\alpha l}{\varepsilon_0 \rho c u}$$

Здесь Vi — число Био, T' — температура теплоносителя, α — коэффициент теплопередачи через стенку теплоносителя.

Поскольку эффективные коэффициенты переноса для вещества и тепла в рассматриваемой модели реактора существенно различаются, интересно оценить характерные размеры реактора, при которых приемлема такая модель. Характерное время диффузионных процессов переноса вещества $\tau_D = \min(a^2/D_r, l^2/D_x)$ (здесь D_r, D_x — эффективные коэффициенты диффузии в поперечном и продольном направлении соответственно) значительно больше времени переноса его потоком вдоль реактора $\tau_u = l/u$. Характерное время передачи тепла теплопроводностью в продольном направлении $\tau = l^2/\chi_x$, напротив, намного меньше времени τ_u , а характерное время переноса тепла в поперечном направлении $\tau_r = a^2/\chi_r$ и сравнимо с τ_u (здесь χ_x, χ_r — эффективные коэффициенты температуропроводности в продольном и поперечном направлении соответственно; $\chi = \lambda/(\rho c)$). Тогда размеры реактора должны удовлетворять следующим требованиям:

$$\chi_x/u > l > D_x/u, \quad \sqrt{\chi_r \chi_x}/u > a > \sqrt{D_r D_x}/u$$

Стационарное распределение степени продвижения реакции определяется решением уравнения (1.1) с граничным условием (1.3) и связано с радиальным распределением температуры соотношением

$$(1.5) \quad \xi(x, r) = 1 - \exp(-xg \exp(-\beta/\theta(r)))$$

Подставляя (1.5) в (1.2), получаем для определения стационарного распределения температуры по радиусу реактора уравнение

$$(1.6) \quad \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d\theta}{dr} \right) = \text{Pe} F(\theta); \quad F(\theta) = \theta - \theta'' - 1 + \exp \left(-g \exp \left(-\frac{\beta}{\theta} \right) \right)$$

Число решений двухточечной краевой задачи (1.6), (1.4) и определяет количество стационарных режимов работы реактора. В силу нелинейности функции $F(\theta)$ может быть несколько стационарных режимов.

2. О существовании решения. Двухточечная краевая задача (1.4), (1.6) имеет в точке $r = 0$ несуммируемую особенность. Но в силу ограниченности функции $F(\theta)$ удается решить вопрос о существовании ее решения. В этом случае можно воспользоваться теоремой [9], согласно которой решение двухточечной краевой задачи с несуммируемой особенностью существует, если только существуют верхняя $(\alpha'(r))$ и нижняя $(\alpha(r))$ функции задачи, удовлетворяющие определенным условиям, и $\alpha'(r) \geq \alpha(r)$. При этом решение заключено между верхней и нижней функциями

$$(2.1) \quad \alpha(r) \leq \theta(r) \leq \alpha'(r)$$

Такие функции для задачи (1.4), (1.6) удается построить

$$(2.2) \quad \begin{aligned} \alpha'(r) &= \theta'' + 1 + I(\text{Pe}) (\theta' - \theta'' - 1) I_0(r\sqrt{\text{Pe}}) \\ \alpha(r) &= \theta'' + I(\text{Pe}) (\theta' - \theta'') I_0(r\sqrt{\text{Pe}}) \\ I(\text{Pe}) &= \text{Bi} [I_1(\sqrt{\text{Pe}})\sqrt{\text{Pe}} + \text{Bi} I_0(\sqrt{\text{Pe}})]^{-1} > 0 \end{aligned}$$

Здесь I_0 и I_1 — модифицированные функции Бесселя нулевого и первого порядка.

Можно показать, что оценка (2.1), (2.2) остается справедливой для всех решений задачи (1.4), (1.6), когда их несколько. Условие (2.1) в предельном случае $\text{Pe} = 0$ (тепло распространяется по радиусу значительно быстрее, чем сносится потоком вдоль реактора) сводится к следующему:

$$\frac{\text{Pe} \theta'' + 2 \text{Bi} \theta'}{\text{Pe} + 2 \text{Bi}} \leq \theta \leq \frac{\text{Pe} (1 + \theta'') + 2 \text{Bi} \theta'}{\text{Pe} + 2 \text{Bi}}$$

а в противоположном случае ($\text{Pe} \rightarrow \infty$)

$$\begin{aligned} \theta'' + (\theta' - \theta'') \exp(-\sqrt{\text{Pe}}(1-r))/\sqrt{r} &\leq \theta(r) \leq \\ &\leq \theta'' + 1 + (\theta' - \theta'' - 1) \exp(-\sqrt{\text{Pe}}(1-r))/\sqrt{r} \end{aligned}$$

3. Достаточные условия единственности. Для более простых моделей, рассмотренных ранее, была обоснована возможность существования нескольких стационарных режимов работы химических реакторов. Поэтому следует ожидать, что и в рассматриваемом здесь случае решение будет, вообще говоря, не единственным.

Для определения достаточного условия единственности решения задачи (1.4), (1.6) рассмотрим разность двух решений $\Delta\theta(r) = \theta_2(r) - \theta_1(r)$, удовлетворяющую уравнениям

$$(3.1) \quad \begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d\Delta\theta}{dr} \right) &= \text{Pe} [F(\theta_2) - F(\theta_1)] \\ r = 0, \quad d\theta/dr &= 0; \quad r = 1, \quad d\theta/dr + \text{Bi} (\theta - \theta') = 0 \end{aligned}$$

С помощью функции Грина

$$G(r, t; \text{Bi}) = \begin{cases} 1/\text{Bi} - \ln(r), & t \leq r \\ 1/\text{Bi} - \ln(t), & t > r \end{cases}$$

задача (3.1) сводится к интегральному уравнению

$$(3.2) \quad \Delta\theta = - \text{Pe} \int_0^1 G(r, t; \text{Bi}) [F(\theta_2) - F(\theta_1)] t dt$$

В силу ограниченности функции $F(\theta)$, она удовлетворяет условию Липшица с константой M

$$(3.3) \quad M \leq 1 + g^*/\beta, \quad g^* = (\ln g + 2/\ln g)^2/e$$

Тогда из (3.2) имеем

$$\left[1 - \text{Pe} \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{2\text{Bi}} \right) M \right] \max_r |\Delta\theta| \leq 0$$

Отсюда следует, что решение единственно ($\Delta\theta \equiv 0$), если

$$(3.4) \quad \text{Pe} \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{2\text{Bi}} \right) M < 1$$

С увеличением числа Пекле область, в которой решение заведомо единственно, сужается. Удастся определить еще один критерий единственности, который дает более слабую при больших числах Пекле оценку области единственности. Для этого выделим в правой части уравнения (1.6) компоненту, пропорциональную $\Delta\theta$, и запишем задачу (3.1) в виде

$$(3.5) \quad \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d\Delta\theta}{dr} \right) - \text{Pe} \Delta\theta = \text{Pe} [\varphi(\theta_2) - \varphi(\theta_1)]$$

$$\varphi(\theta) = \exp \left(-g \exp \left(-\frac{\beta}{\theta} \right) \right)$$

$$r = 0, \quad d\Delta\theta/dr = 0; \quad r = 1, \quad d\Delta\theta/dr + \text{Bi}\Delta\theta = 0$$

Для этой задачи достаточным условием единственности, аналогичным (3.4), будет

$$(3.6) \quad \text{Pe} \max_r \left| \int_0^1 G^*(r, t; \text{Bi}) t dt \right| m < 1$$

где m — константа Липшица функции $\varphi(\theta)$ ($m = M - 1$), G^* — функция Грина задачи (3.5). Из определения функции Грина следует

$$\int_0^1 G^*(r, t; \text{Bi}) t dt = \Delta\theta |_{\text{Pe}(\varphi_2 - \varphi_1) = -1}$$

Решение задачи (3.5) с правой частью $\text{Pe}(\varphi_2 - \varphi_1) = -1$ известно

$$\Delta\theta |_{\text{Pe}(\varphi_2 - \varphi_1) = -1} = \frac{1}{\text{Pe}} [1 - I(\text{Pe}) I_0(r\sqrt{\text{Pe}})]$$

(функция $I(\text{Pe})$ определена ранее в (2.2)). Тогда имеем

$$\max_r \left| \int_0^1 G^*(r, t; \text{Bi}) t dt \right| = \frac{1}{\text{Pe}} [1 - I(\text{Pe})]$$

и достаточное условие единственности (3.6) примет вид

$$(3.7) \quad [1 - I(\text{Pe})] m < 1$$

Заметим, что условие (3.7) является обобщением известного условия единственности Ван-Хирдена [6] для рассматриваемой задачи. В предельном случае $\text{Pe} \rightarrow 0$ (реактор полного смешения по температуре) оно сводится к

$$(3.8) \quad m < 1 + 2\nu, \quad \nu = \text{Bi}/\text{Pe}$$

и имеет простой физический смысл: максимальный наклон кривой тепловыделения меньше наклона кривой теплоотдачи.

Более слабый, но более простой критерий единственности можно получить из (3.7) с использованием оценки сверху константы Липшица m . Согласно (3.3), $m = M - 1 < g^*/\beta$. Тогда (3.7) сводится к условию

$$(3.9) \quad \beta > g^* [1 - I(\text{Pe})]$$

и в предельном случае $\text{Pe} \rightarrow 0$ принимает особенно простой вид

$$(3.10) \quad \beta (1 + 2\nu) > g^*$$

Отметим, что еще одно, более слабое, но равномерное по Pe условие единственности следует из (3.9), если учесть, что $I(Pe)$ всегда больше нуля

$$(3.11) \quad \beta > g^*$$

Условия (3.9) — (3.11) определяют область изменения параметра β , при котором стационарный режим единственный.

Удается найти аналогичное условие для температуры теплоносителя θ' и температуры на входе θ'' , используя оценку решения (2.1) с помощью верхней и нижней функции. Поскольку

$$m = \max_z \left| \frac{1}{\beta} g z \exp(-gz) \ln z \right|, \quad z = \exp\left(-\frac{\beta}{\theta}\right)$$

и $gz \exp(-gz) < e$, то достаточное условие единственности (3.7) сводится к следующему:

$$\min_r \theta > [\beta (1 - I(Pe))/e]^{1/2}$$

Оно преобразуется к виду (с помощью оценки (2.1))

$$(3.12) \quad \theta'' + (\theta' - \theta'') I(Pe) \eta(\sqrt{Pe}) > [\beta (1 - I(Pe))/e]^{1/2}$$

$$\eta(\sqrt{Pe}) = \begin{cases} I_0(\sqrt{Pe}), & \theta'' \geq \theta' \\ 1, & \theta'' < \theta' \end{cases}$$

и в предельных случаях имеет простой вид

$$(3.13) \quad \theta'' + 2\nu\theta' > [\beta (1 + 2\nu)/e]^{1/2}, \quad Pe \rightarrow 0$$

$$\min_r (\theta'', \theta') > \beta/e^{1/2} (1 + \nu^{-1}/\sqrt{Pe}), \quad Pe \rightarrow \infty$$

4. Асимптотическое разложение решения при малом значении числа Пекле. Решение задачи (1.2), (1.4) удастся найти методом малого параметра при $Pe \ll 1$, что соответствует случаю, когда тепло распространяется по радиусу значительно быстрее, чем сносится потоком вдоль реактора.

Будем искать распределение температуры в реакторе в виде

$$(4.1) \quad \theta = \theta_0 + Pe\theta_1 + Pe^2\theta_2 + \dots$$

Подставляя разложение (4.1) в уравнение (1.2) и в граничные условия (1.4), получаем последовательность линейных задач для определения функций θ_i ($i = 0, 1, 2, \dots$)

$$(4.2) \quad L\theta_0 = 0; \quad r = 0, \quad d\theta_0/dr = 0; \quad r = 1, \quad d\theta_0/dr = 0$$

$$L\theta_1 = F(\theta_0); \quad r = 0, \quad d\theta_1/dr = 0; \quad r = 1, \quad d\theta_1/dr + \nu(\theta_0 - \theta') = 0$$

$$L\theta_2 = F^*(\theta_0)\theta_1; \quad r = 0, \quad d\theta_2/dr = 0; \quad r = 1, \quad d\theta_2/dr + \nu\theta_1 = 0$$

$$L = \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} \right), \quad \nu = \frac{Bi}{Pe}, \quad F^*(\theta_0) = 1 - \frac{\beta g}{\theta_0^2} \times$$

$$\times \exp\left(-g \exp\left(-\frac{\beta}{\theta_0}\right)\right) \exp\left(-\frac{\beta}{\theta_0}\right)$$

Система уравнений (4.2) обладает тем свойством, что константы предыдущего приближения определяются в процессе нахождения следующего приближения.

Решение имеет вид

$$(4.3) \quad \theta_0 = \theta' - F(\theta_0)/2\nu$$

$$\theta_1 = F(\theta_0)(a_1 r^2 - a_2)$$

$$\theta_2 = F^*(\theta_0)F(\theta_0)(a_3 r^4 - a_4 r^2 - a_5), \quad \dots$$

$$a_1 = \frac{1}{4}, \quad a_2 = \frac{F^* + 4\nu}{8(F^* + 2\nu)}, \quad a_3 = \frac{1}{64}$$

$$a_4 = \frac{a_2}{2}, \quad a_5 = a_2^2 + \frac{F^* + 6\nu}{192(F^* + 2\nu)}$$

Значения θ_0 определяются из алгебраического уравнения (4.3), представляющего собой равенство тепловыделения и теплоотвода в модели полного перемешивания, и совпадают со стационарными значениями температуры, полученными в [1]. Коэффициенты разложения a_2, a_4, a_5 имеют особенность, когда

$$(4.4) \quad F^*(\theta_0) + 2\nu = 0$$

Последнее уравнение означает равенство наклона кривой тепловыделения и теплоотвода для модели полного перемешивания по температуре. Следовательно, полученное разложение справедливо во всей области параметров, кроме их значений в окрестности кривой, определяемой системой уравнений (4.3), (4.4). Эта кривая является одновременно границей, разделяющей области параметров модели полного перемешивания с различным числом стационарных режимов, т. е. представляет собой линию ветвления.

Решение системы уравнений из первого уравнения (4.3) и (4.4) можно представить в параметрическом виде, вводя параметр

$$y = 1 - \theta(1 + 2\nu) + \theta'' + 2\nu\theta'$$

Имеем

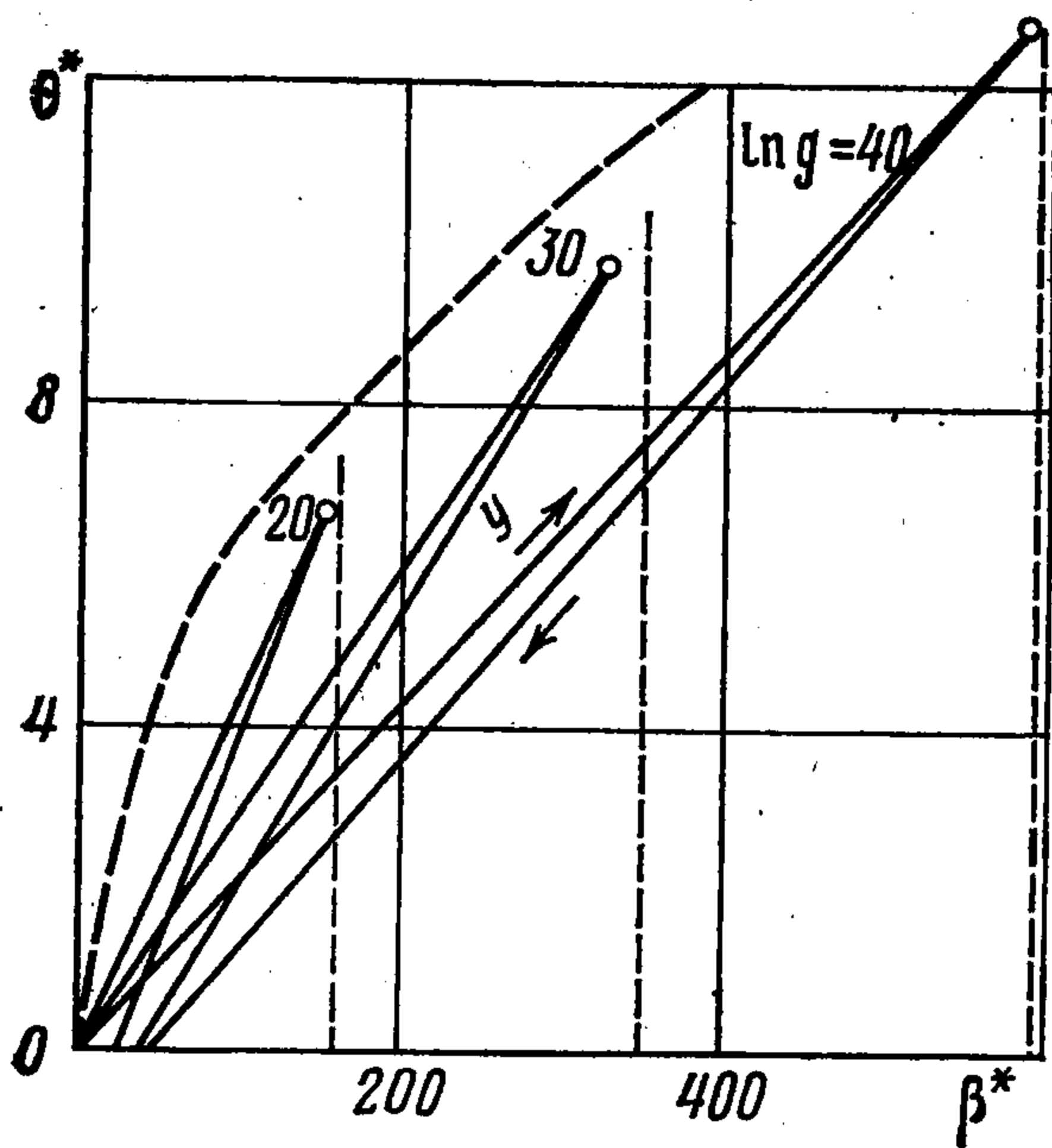
$$(4.5) \quad \begin{aligned} \beta^* &= -y \ln y [\ln g - \ln(-\ln y)]^2 \\ \theta^* &= -y \ln y [\ln g - \ln(-\ln y)] + y - 1 \\ (\beta^* &= (1 + 2\nu)\beta, \theta^* = \theta'' + 2\nu\theta', y \in (0,1)) \end{aligned}$$

Аналогичные кривые можно построить и для реакции любого порядка n , тогда $\theta^* = \theta^*(\beta^*, g, n)$.

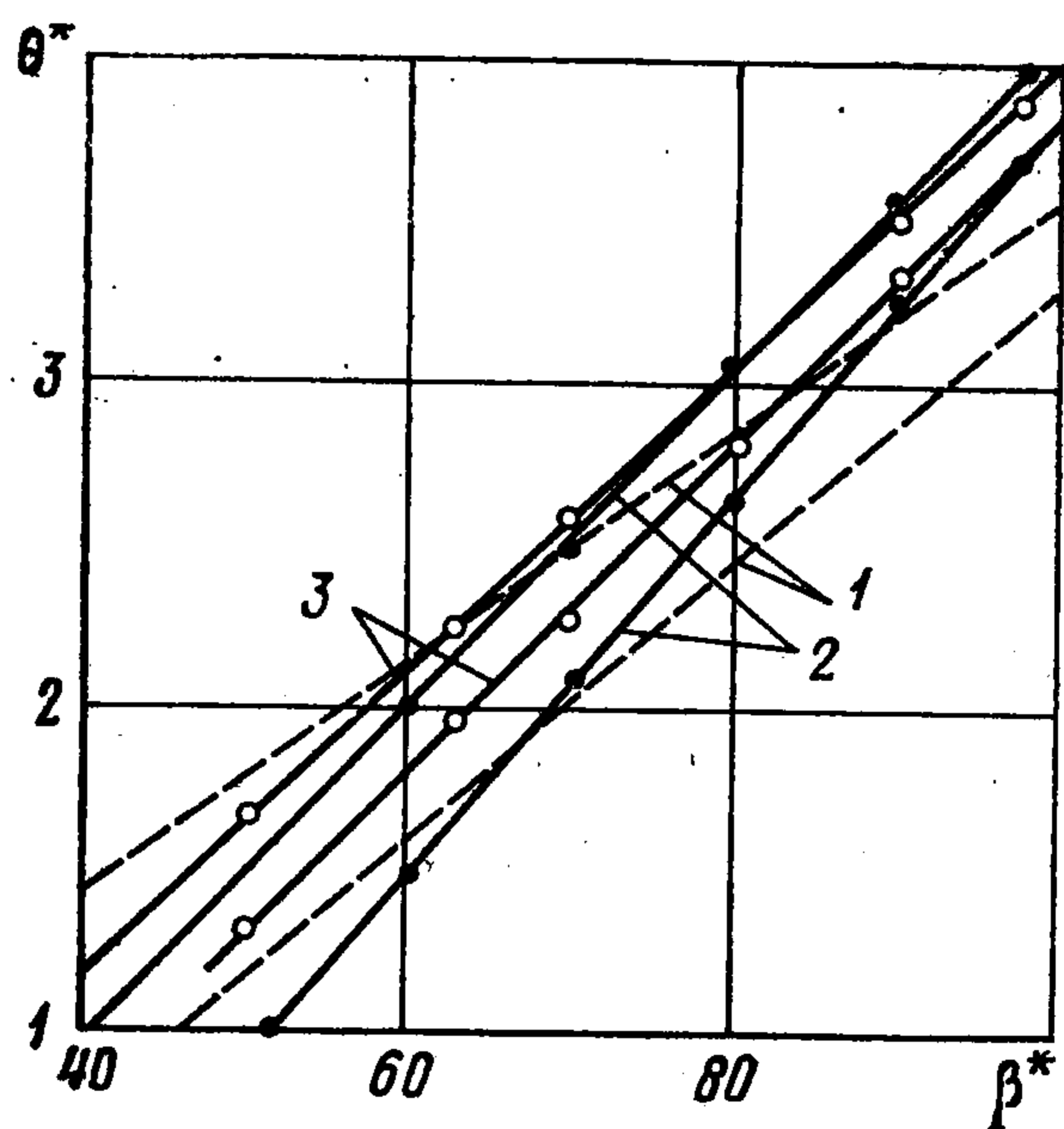
Из параметрического представления (4.5) линии ветвления следует, что число стационарных режимов для модели реактора полного перемешивания по температуре зависит от трех параметров β^*, θ^* и g . На фиг. 1 показано семейство кривых (4.5) при разных значениях g . Три стационарных режима будут существовать для параметров β^* и θ^* из области, ограниченной кривой (4.5), два решения — на самой кривой, при других значениях параметров стационарное решение будет единственным. Штриховые линии на фиг. 1 соответствуют достаточным оценкам единственности решения (3.10) для β^* и (3.13) для θ^* . Стрелки указывают направление возрастания параметра y вдоль кривой ветвления.

Анализ асимптотического разложения (4.3) показывает, что построенные области единственности применимы и для определения числа стационарных режимов при $Pe \neq 0, Pe \ll 1$, когда параметры θ^* и β^* находятся достаточно далеко от кривой ветвления. Следовательно, для модели реактора полного продольного перемешивания не возникает новых границ неединственности решения, а лишь деформируется линия ветвления (4.5), если только $Pe \ll 1$. Причем степень этой деформации незначительна, так как в первом приближении уравнение линии ветвления не зависит от Pe .

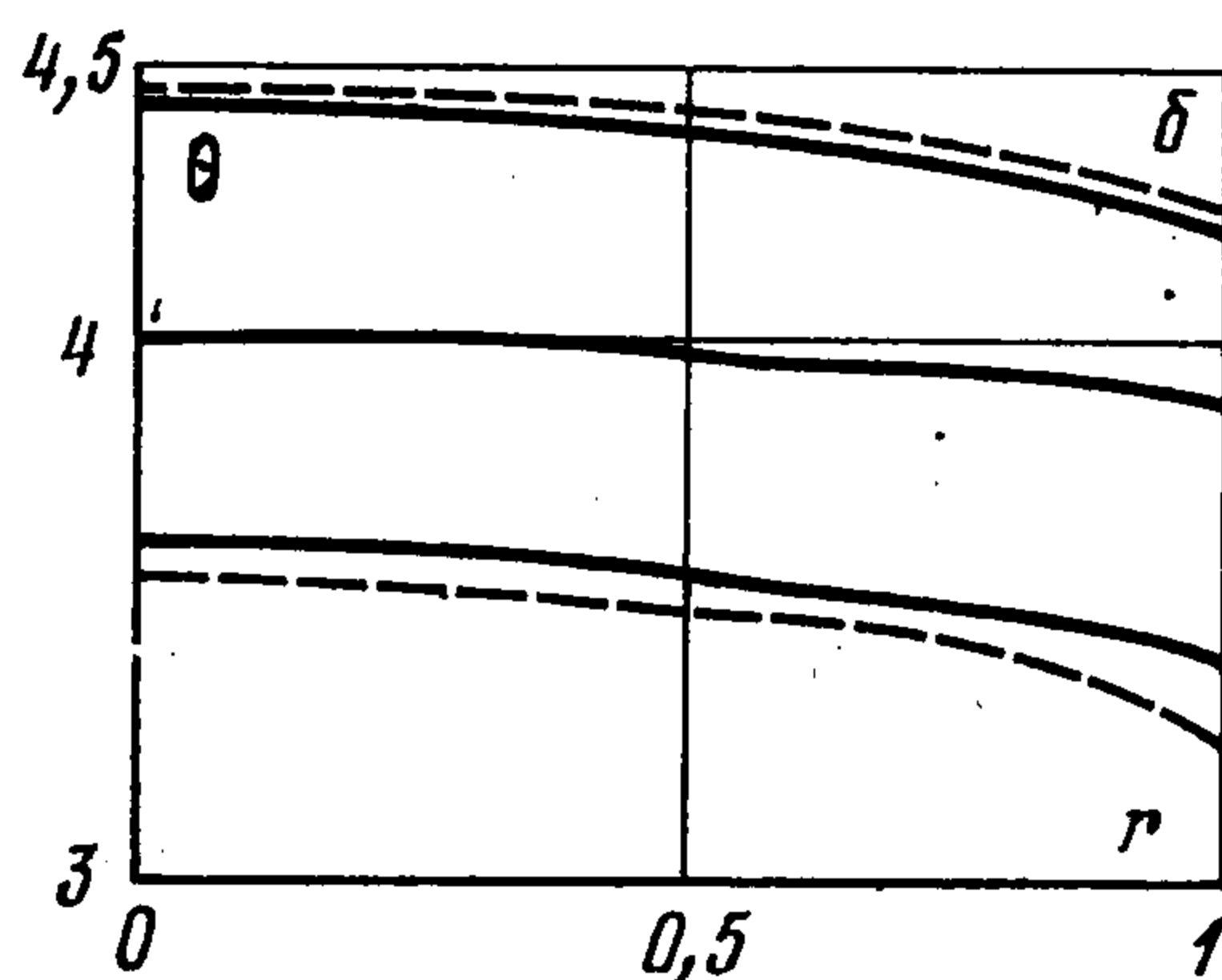
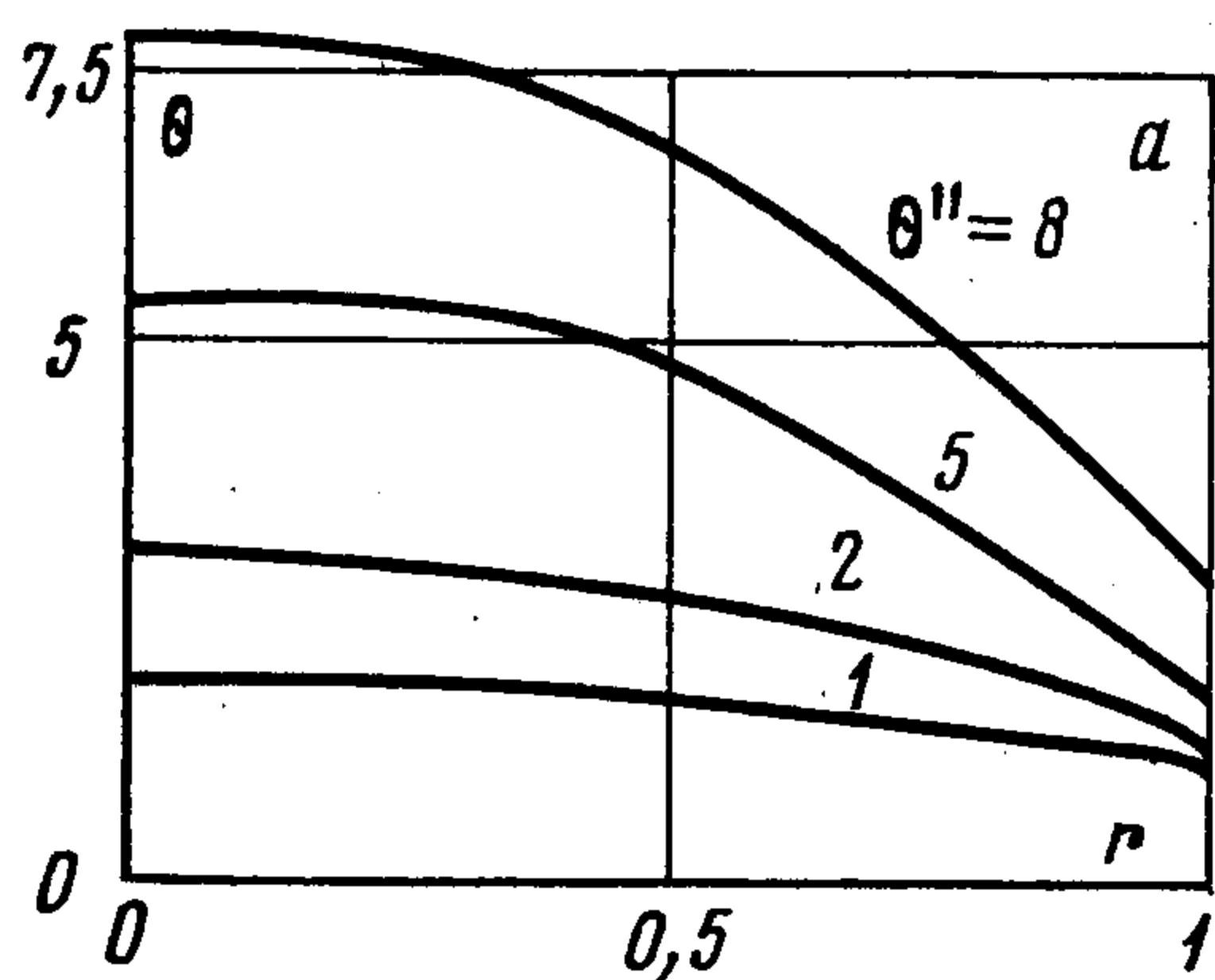
На фиг. 2 показаны критические параметры воспламенения и потухания (линий ветвления решения) при $Pe = 0,1; \ln g = 25$, полученные в результате численных расчетов, использующих конечно-разностную аппроксимацию уравнений (1.2), (1.4) и метод пристрелки. Линии 1, 2, 3 соответствуют значениям $Bi = 0; 0,02; 0,04$.



Фиг. 1



Фиг. 2



Фиг. 3

5. Приближенное решение при умеренных значениях числа Пекле. Для конечных значений числа Пекле задачу (1.2), (1.4) аналитически решить не удастся.

Результаты численных расчетов приведены на фиг. 3 для параметров $\theta' = 1$; $g = \exp 25$. Для значений параметров $\beta = 25$; $Pe = 10$; $\nu = 1$ при разных значениях θ'' (случай *a*) решение оказалось единственным. В случае *b*, когда $\beta = 100$; $Pe = 1$; $\nu = 0,1$; решений три. Они хорошо аппроксимируются аналитической оценкой (2.1), показанной штриховой линией.

Приведенные данные показывают, что стационарное распределение температуры в реакторе хорошо описывается параболой, которая становится круче с увеличением чисел Pe и Bi .

Построим приближенное решение задачи. Пусть распределение температуры по радиусу имеет вид

$$(5.1) \quad \theta(r) = B - Ar^2$$

Подставляя это распределение в уравнения (1.2), (1.4), сведем их решение с помощью функции Грина (3.2) к интегральному уравнению

$$(5.2) \quad \theta = \theta' + Pe \left\{ - \int_0^1 G(r, t; Bi) [\varphi(\theta) + \theta] t dt + \right. \\ \left. + \frac{\theta'' + 1}{2} \left(\frac{1}{Bi} + \frac{1}{2} - \frac{r^2}{2} \right) \right\}$$

Вводя среднюю по радиусу температуру $\langle \theta \rangle$ согласно соотношению

$$(5.3) \quad \langle \theta \rangle = 2 \int_0^1 \theta(r) r dr$$

и усредняя уравнение (5.1) по радиусу, получаем

$$(5.4) \quad (1 + 2\nu) \langle \theta \rangle + (\theta'' + 2\nu\theta') = 1 - 2 \int_0^1 \varphi t dt + \\ + \text{Bi} \left\{ \int_0^1 (\varphi + \langle \theta \rangle) (t^2 - 1) t dt + \frac{\theta'' + 1}{4} \right\}$$

Входящие в правую часть (5.4) интегралы вычисляются в предположении, что распределение температуры по радиусу аппроксимируется соотношением (5.1), в котором значения коэффициентов A и B определяются из граничного условия (1.4) в $r = 1$ и уравнения (5.3)

$$(5.5) \quad A = \frac{2 \text{Bi} (\langle \theta \rangle - \theta')}{\text{Bi} + 4}, \quad B = \frac{2 (\text{Bi} + 2) \langle \theta \rangle - \text{Bi} \theta'}{\text{Bi} + 4}$$

Отметим, что граничное условие (1.4) в $r = 0$ выполняется для распределения (5.1) при любых значениях коэффициентов A и B .

Подставляя распределение (5.1) с коэффициентами (5.5) в правую часть соотношения (5.4), получаем уравнение для определения средней температуры в реакторе

$$(5.6) \quad \theta^* = \beta^* \theta^{**} - 1 + \int_0^1 \varphi^* (A^* t + B^* - A^*) dt + \\ + \text{Bi} \left\{ \frac{1}{2} \int_0^1 \varphi^* (A^* t + B^* - A) t dt - \frac{1}{4} \right\}$$

Здесь

$$\varphi^*(x) = \exp(-\exp(\ln g - 1/x)), \quad \theta^{**} = \langle \theta \rangle / \beta \\ \beta^* = \left[1 + 2\nu + \frac{\text{Bi} (\text{Bi} + 3)}{3 (\text{Bi} + 4)} \right] \beta \\ \theta^* = \theta'' \left(1 + \frac{\text{Bi}}{4} \right) + \left[2\nu + \frac{\text{Bi}^2}{12 (\text{Bi} + 4)} \right] \theta' \\ \theta^{*'} = \beta / \theta', \quad A^* = \frac{2 \text{Bi} (\theta^{**} - \theta^{*'})}{\text{Bi} + 4}, \quad B^* = \frac{2 (\text{Bi} + 2) \theta^{**} - \text{Bi} \theta^{*'}}{\text{Bi} + 4}$$

Переменные β^* и θ^* определены таким образом, чтобы при $\text{Bi} = 0$ они совпадали с ранее введенными параметрами в (4.5).

Поскольку численные расчеты показывают, что различным решениям задачи (1.2), (1.4) соответствуют неравные средние температуры, можно предположить, что число стационарных режимов работы реактора с учетом радиального градиента температуры определяется количеством решений уравнения (5.6).

Для определения кривой, разделяющей области параметров с различным числом решений, продифференцируем уравнение (5.6) по θ^{**} . После преобразований получаем

$$(5.7) \quad \beta^* = \frac{\text{Bi}}{A^*} \left\{ \int_0^1 \varphi^* (A^* t + B^* - A^*) dt - \varphi^*(B^*) \right\} + \\ + \frac{4}{(\text{Bi} + 4) A^*} \{ \varphi^*(B^* - A^*) - \varphi^*(B^*) \} + \frac{\text{Bi}}{\theta^{**} - \theta^{*'}} \left\{ \int_0^1 \varphi^* t dt - \frac{1}{2} \int_0^1 \varphi^* dt \right\}$$

Уравнения (5.6) и (5.7) описывают параметрически заданную кривую $\beta^* = \beta^*(\theta^{**}, g)$ и $\theta^* = \theta^*(\theta^{**}, g)$, на которой возможна смена числа режимов. Решение исходной задачи (1.2), (1.4) зависит от шести безразмерных величин: Pe , Bi , θ' , θ'' , g и β . Однако число решений, согласно (5.6), (5.7), определяется лишь пятью параметрами: Bi , $\theta^{*'}$, θ^* , g , β^* .

При $Bi = 0$ число решений зависит лишь от трех параметров: θ^* , β^* и g , а уравнения (5.6) и (5.7) принимают вид:

$$(5.8) \quad \begin{aligned} \beta^* &= z^2 \exp(\ln g - z) \exp(-\exp(\ln g - z)) \\ \theta^* &= \beta^* z - 1 + \exp(-\exp(\ln g - z)) \end{aligned}$$

Кривая ветвления решения (5.8) представляет собой ту же кривую (4.5), но с другой параметризацией, поскольку при $Bi = 0$ полученное решение совпадает с точным.

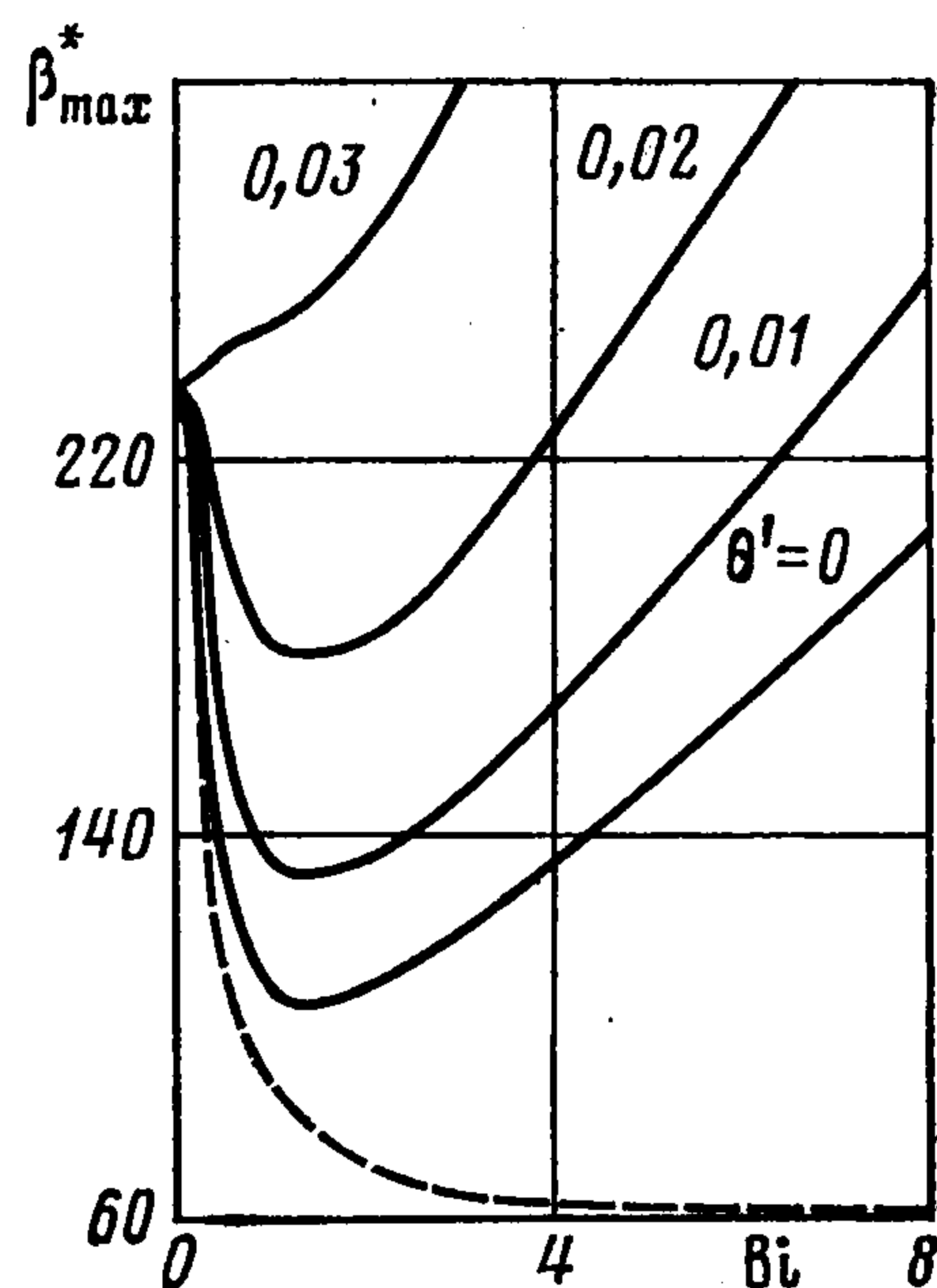
Входящие в уравнения (5.6), (5.7) интегралы можно выразить через две функции $F_1(z)$ и $F_2(z)$, зависящие лишь от одного параметра g

$$\begin{aligned} \int_0^1 \varphi^*(A^*t + B^* - A^*) dt &= \frac{1}{A^*} [F_1(B^*) - F_1(B^* - A^*)] \\ \int_0^1 \varphi^*(A^*t + B^* - A^*) t dt &= \frac{1}{A^{*2}} [F_2(B^*) - F_2(B^* - A^*)] + \\ + \frac{A^* - B^*}{A^{*2}} [F_1(B^*) - F_1(B^* - A^*)]; \quad F_1(z) &= \int_0^z \varphi^*(x) dx, \quad F_2(z) = \int_0^z \varphi^*(x) x dx \end{aligned}$$

Протабулировав функции $F_1(z)$ и $F_2(z)$ при разных значениях g с помощью численного интегрирования, можно построить на плоскости β^* , θ^* области с различным числом решений задачи (1.2), (1.4). По своему виду они аналогичны областям, представленным на фиг. 1 для $Pe = 0$.

На фиг. 4 показана зависимость максимального значения β^* на кривой ветвления (абсцисса точки бифуркации на фиг. 1) от параметра Bi , найденная по формулам (5.6), (5.7). Штриховой линией показаны критические значения параметра модели β , выше которых явления воспламенения и потухания становятся невозможными. Здесь $\ln g = 25$.

Проведенные численные решения задачи (1.2), (1.4) методом пристрелки и методом локальных вариаций (при больших числах Pe) для различных значений параметров показывают, что уравнения (5.6), (5.7) хорошо описывают кривую ветвления решения при умеренных значениях числа Пекле ($\nu Pe \leq 2$) и могут быть использованы для определения числа стационарных режимов работы реактора идеального вытеснения по веществу и полного продольного перемешивания по энергии.



Фиг. 4

ЛИТЕРАТУРА

1. Гупало Ю. П., Рязанцев Ю. С. О режимах работы химического реактора идеального вытеснения с интегральным учетом тепловыделения. — ПМТФ, 1969, № 1 с. 82—89.
2. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. Т. 2. М.: Физматгиз, 1962. 639 с.
3. Черноушко Ф. Л. Метод локальных вариаций для численного решения вариационных задач. — Ж. вычисл. мат. и мат. физики, 1965, т. 5, № 4, с. 749—754.
4. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. Изд. 2. М.: Наука, 1967. 491 с.
5. Арис Р. Анализ процессов в химических реакторах. Л.: Химия, 1967. 328 с.
6. Перлмуттер Д. Устойчивость химических реакторов. Л.: Химия, 1976. 256 с.
7. Иоффе И. И., Письмен Л. М. Инженерная химия гетерогенного катализа. М.: Химия, 1965. 456 с.
8. Крамерс Х., Вестертерп К. Химические реакторы, расчет и управление ими. М.: Химия, 1967. 264 с.
9. Васильев Н. И., Клоков Ю. А. Основы теории краевых задач обыкновенных дифференциальных уравнений. Рига: Зинатне, 1978. 183 с.

Москва

Поступила в редакцию
3.V.1982