

УДК 532.72

О МНОЖЕСТВЕННОСТИ СТАЦИОНАРНЫХ РЕЖИМОВ В ПРОТОЧНОЙ СИСТЕМЕ С ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИЕЙ

БЕРМАН В. С., ВОСТОКОВ В. В., РЯЗАНЦЕВ Ю. С.

Вопросу о существовании и единственности стационарных режимов в проточных системах с химическими реакциями посвящена обширная литература (см., например, [1-3]). В большинстве случаев точные решения соответствующих задач не могут быть получены ввиду нелинейности функций, описывающих кинетику химических реакций, и исследование проводится либо приближенными, либо численными методами. В данной работе получены точные решения модельной нелинейной краевой задачи о стационарном распределении концентрации в одномерном проточном изотермическом химическом реакторе с продольным перемешиванием и в трехмерном пространстве определяющих параметров полностью исследован вопрос о существовании и числе стационарных режимов. В качестве функции, описывающей скорость химической реакции, выбрана функция, приближенно моделирующая зависимость скорости автокаталитической реакции от концентрации исходного реагента.

1. **Постановка задачи и классификация режимов.** В рассматриваемом случае отыскание стационарных режимов работы химического реактора и выяснение вопроса о существовании и числе этих режимов сводится к анализу следующей краевой задачи [4, 5]:

$$\frac{1}{P} \frac{d^2c}{dx^2} - \frac{dc}{dx} = F(c), \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (1.1)$$

$$\frac{1}{P} \frac{dc}{dx} = c-1, \quad x=0; \quad \frac{dc}{dx} = 0, \quad x=1 \quad (1.2)$$

Здесь $c(x)$ — концентрация, отнесенная к ее значению в исходной смеси, $F(c)$ — безразмерная функция, описывающая кинетику химической реакции, $P=UL/D$ — число Пекле (U — скорость потока реагирующей смеси в реакторе, L — длина реактора, D — коэффициент продольной дисперсии).

Будем считать, что

$$F(c) = \begin{cases} k_1c, & 0 \leq c \leq c_* \\ k_2/c, & c_* \leq c < +\infty \end{cases} \quad (1.3)$$

$$c_* = \sqrt{k_2/k_1}$$

Функция $F(c)$ ($k_1, k_2 > 0$ — константы) аппроксимирует характерную для широкого класса автокаталитических реакций [6, 7] зависимость $\varphi(c) = a_1c(1+a_2c)^{-2}$; она учитывает основные особенности поведения реальной кинетической функции $\varphi(c)$, такие, как обращение в нуль при $c=0$, асимптотическое поведение при $c \rightarrow \infty$, наличие максимума.

Задача (1.1)–(1.3) содержит три определяющих параметра k_1, k_2 и P . В зависимости от их значений можно выделить три типа стационарных режимов.

Первый тип — линейный, второй — гиперболический. В первом случае реакция по всей длине реактора протекает по линейному закону, $F(c) = k_1c$, во втором — по гиперболическому, $F(c) = k_2/c$. Необходимыми и достаточными условиями того, что данный стационарный режим является линейным или гиперболическим, будут соответственно условия

$$c(0) \leq c_* \quad (1.4)$$

$$c(1) \geq c_* \quad (1.5)$$

Третий режим — смешанный, когда в некоторой точке x , внутри реактора имеет место равенство $c(x_*) = c_*$.

2. **Исследование линейного и гиперболического режимов.** В случае линейного режима общее решение задачи (1.1)–(1.2) с кинетической функцией $F(c) = k_1c$ имеет вид

$$c(x) = P \frac{\mu \exp(\lambda x) - \exp[(P-\lambda)x]}{\mu(P-\lambda) - \lambda} \quad (2.1)$$

$$\lambda = \sqrt{Pk_1 + P^2/4} + P/2, \quad \mu = (P-\lambda) \exp(P-2\lambda)/\lambda \quad (2.2)$$

Неравенство $\mu(P-\lambda) \neq \lambda$ выполняется при всех значениях k_1 , $P > 0$, следовательно, задача (1.1)–(1.2) с линейной кинетической функцией всегда имеет единственное решение (2.1).

Наложим на решение (2.1) условие (1.4). Получим

$$k_2 \geq \frac{P^2(\mu-1)^2 k_1}{[\mu(P-\lambda) - \lambda]^2} \quad (2.3)$$

Неравенство (2.3) определяет в трехмерном пространстве (k_1, k_2, P) область Ω , в которой существует линейный режим (2.1).

В случае гиперболического режима, когда функция $k_1 c$ в задаче (1.1)–(1.2) заменяется на k_2/c , введем новую переменную и неизвестную функцию

$$s = \frac{1 - \exp(-Px)}{1 - \exp(-P)}, \quad v = \sqrt{P/k_2} \frac{1 - [1 - \exp(-P)]s}{1 - \exp(-P)} c$$

В новых переменных решение задачи выражается в виде квадратуры

$$\int_{v(1)}^{v(*)} \frac{du}{\sqrt{\ln[u/v(1)] + 2\alpha^2 v^2(1)}} = \sqrt{2}(1-s) \quad (2.4)$$

$$0 \leq s \leq 1, \quad \alpha = [\exp(P) - 1]/2$$

Здесь значение $v(1)$ определяется как корень y следующего трансцендентного алгебраического уравнения:

$$I(\gamma_2) - I(y) = \alpha \exp(y^2)/y, \quad I(z) = \int_0^z \exp(u^2) du \quad (2.5)$$

Соотношения (2.4), (2.5) определяют решение задачи (1.1)–(1.2) при $F(c) = k_2/c$. Вопрос о существовании и числе этих решений сводится к исследованию уравнения (2.5).

Учитывая условие (1.5), получим

$$y \geq \gamma_1, \quad \gamma_1 = \sqrt{P/2k_1} \quad (2.6)$$

Отсюда следует, что решение (2.4) существует в той области изменения параметров k_1, k_2, P , где уравнение (2.5) имеет корни, удовлетворяющие условию (2.6). Число режимов совпадает с числом корней.

Для анализа существования и числа корней уравнения (2.5), удовлетворяющих условию (2.6), выделим в пространстве (k_1, k_2, P) две области G_1, G_2 и две поверхности S_1, S_2 , введя обозначение $a^2 = \alpha/(2\alpha+1)$

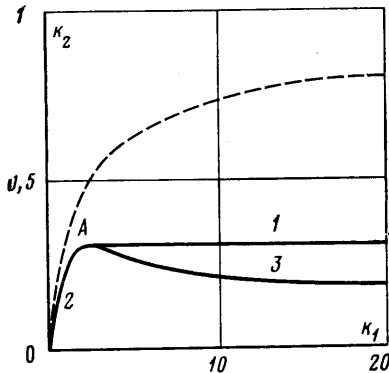
$$G_1 = \begin{cases} k_1 > k_2 \\ I(\gamma_2) - I(a) > \alpha \exp(a^2)/a \\ I(\gamma_2) - I(\gamma_1) \leq \frac{\alpha \exp(\gamma_1^2)}{\gamma_1} \\ \gamma_1 < a \end{cases}, \quad G_2 = \begin{cases} k_1 > k_2 \\ I(\gamma_2) - I(a) > \frac{\alpha \exp(a^2)}{a} \\ I(\gamma_2) - I(\gamma_1) > \frac{\alpha \exp(\gamma_1^2)}{\gamma_1} \end{cases}$$

$$S_1 = \begin{cases} k_1 > k_2 \\ I(\gamma_2) - I(a) = \frac{\alpha \exp(a^2)}{a} \\ \gamma_1 \leq a \end{cases}, \quad S_2 = \begin{cases} k_1 > k_2 \\ I(\gamma_2) - I(a) > \frac{\alpha \exp(a^2)}{a} \\ I(\gamma_2) - I(\gamma_1) = \frac{\alpha \exp(\gamma_1^2)}{\gamma_1} \\ \gamma_1 > a \end{cases}$$

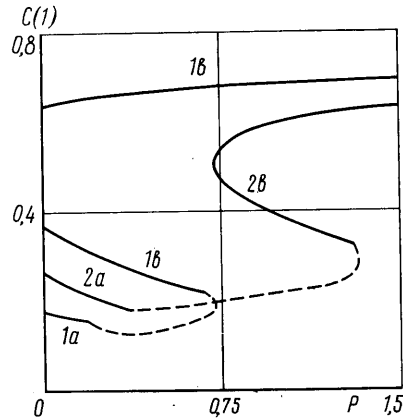
На поверхности S_1 существует единственный корень $y=a$, на поверхности S_2 — единственный корень $y=\gamma_1$. В области G_1 существуют два корня $\gamma_1 \leq y_1 < y_2 < \gamma_2$,

причем в случае равенства в третьем из выражений для G_1 меньший корень равен $y_1 = \gamma_1$. В области G_2 существует единственный корень $\gamma_1 \leq y < \gamma_2$. При этом все корни удовлетворяют условию (2.6). Если точка (k_1, k_2, P) лежит вне областей G_1, G_2 и поверхностей S_1, S_2 , то в этой точке уравнение (2.5) не имеет корней, удовлетворяющих заданному условию.

Представление об областях Ω, G_1, G_2 и поверхностях S_1, S_2 можно получить, построив их сечения плоскостями $P = \text{const}$. На фиг. 1 представлены такие сечения при $P=1$. Численное решение соответствующих уравнений проводилось разложением интеграла $I(z)$ по полиномам Чебышева [8]. Плоская область над штриховой кривой (вместе с этой кривой) представляет собой сечение трехмерной области Ω , здесь существует единственный линейный режим (соответственно в плоской области под



Фиг. 1



Фиг. 2

штриховой кривой линейных режимов не существует). Сплошные кривые 1, 2, 3 при любом P сходятся в некоторой точке A . Плоская область между кривыми 1 и 3 (вместе с кривой 3) есть сечение трехмерной области G_1 , здесь существуют два гиперболических режима. Плоская область под соединяющимися в точке A кривыми 2 и 3 представляет сечение трехмерной области G_2 , где существует один гиперболический режим. Кривая 1, представляющая собой при любом P полупрямую $k_2 = \text{const}$, есть сечение поверхности S_1 (один гиперболический режим со значением $y = a$), а кривая 2 – сечение поверхности S_2 (один гиперболический режим со значением $y = \gamma_1$). В плоской области над соединяющимися в точке A кривыми 1 и 2 гиперболических режимов не существует.

Как показывает асимптотический анализ, при $P \rightarrow 0$, координаты точки A стремятся к значениям $(1, 1/4)$, кривая 1 – к прямой $k_2 = 1/4, 1 \leq k_1 < +\infty$, кривые 2 и 3 составляют вместе кривую $k_2 = k_1 / (1 + k_1)^2, 0 \leq k_1 < +\infty$, которая совпадает со штриховой кривой.

В случае $P \rightarrow \infty$ точка A уходит на бесконечность и сохраняется только кривая 2, превращающаяся в кривую $k_2 = k_1 / (1 + 2k_1), 0 \leq k_1 < +\infty$. Штриховая кривая вырождается в полупрямую $k_2 = k_1$.

3. Исследование смешанного режима. В случае смешанного режима решение задачи (1.1)–(1.3) ищем в виде

$$c(x) = \begin{cases} f(x), & 0 \leq x \leq x_* \\ g(x), & x_* \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (3.1)$$

Здесь функции $f(x)$ и $g(x)$ должны удовлетворять условиям

$$f(x_*) = g(x_*) = c_*, \quad \frac{df}{dx}(x_*) = \frac{dg}{dx}(x_*) \quad (3.2)$$

С учетом (3.2) можно получить следующие выражения для функций $f(x)$ (в виде квадратуры) и $g(x)$ (в явном виде):

$$\int_{\varphi_0}^{\varphi(x)} \frac{d\varphi}{\sqrt{\ln(\varphi/\varphi_0) + \gamma^2}} = -\sqrt{2} \frac{1 - \exp(-Px)}{1 - \exp(-P)}, \quad 0 \leq x \leq x_*$$

$$\varphi(x) = \sqrt{2} \gamma_2 \frac{\exp(-Px)}{1 - \exp(-P)} f(x), \quad \varphi_0 = \sqrt{2} \gamma_1 \frac{\exp(\gamma_2^2 - Px_* - t^2)}{1 - \exp(-P)}$$

$$g(x) = \frac{\mu \exp(\lambda x) - \exp[(P - \lambda)x]}{\sqrt{k_2/k_1} [\mu \exp(\lambda x_*) - \exp[(P - \lambda)x_*]]}, \quad x_* \leq x \leq 1$$

В этих выражениях значения t и x_* определяются как решение системы трансцендентных алгебраических уравнений

$$I(\gamma_2) - I(t) = \exp(t^2) [\exp(Px_*) - 1] / 2\gamma_1 \quad (3.3)$$

$$\frac{\mu \lambda - (P - \lambda) \exp[(P - 2\lambda)x_*]}{\mu - \exp[(P - 2\lambda)x_*]} = P - t\sqrt{2Pk_1}$$

$$0 \leq t, \quad 0 < x_* < 1 \quad (3.4)$$

Смешанный режим (3.1) реализуется в случае, когда существует решение (t, x_*) задачи (3.3), (3.4). Число режимов совпадает с числом этих решений. Можно показать, что задача (3.3), (3.4) эквивалентна следующей:

$$I(\gamma_2) - I(t) = \exp(t^2) \{ [A(t)]^\nu - 1 \} / 2\gamma_1 \quad (3.5)$$

$$A(t) = \frac{\lambda - t\sqrt{2Pk_1}}{\mu(P - \lambda - t\sqrt{2Pk_1})}, \quad \nu = \frac{P}{2\lambda - P}$$

$$\gamma_1 < t < \frac{\lambda - \mu(P - \lambda)}{\sqrt{2Pk_1}(1 - \mu)} \quad (3.6)$$

$$x_* = \nu \ln [A(t)] / P$$

Таким образом, вопрос о существовании и числе смешанных режимов сводится к вопросу о существовании и числе корней t трансцендентного алгебраического уравнения (3.5), удовлетворяющих условию (3.6).

Полученные соотношения были использованы для определения зависимости величины $c(1)$ — концентрации на выходе реактора — от числа Пекле при различных значениях k_1 и k_2 . Результаты представлены на фиг. 2.

Кривая 1 отвечает значениям $k_1=5$, $k_2=0,23$, кривая 2 — значениям $k_1=5$, $k_2=0,27$. Штриховые участки кривых соответствуют смешанному режиму, участки 1а и 2а — линейному, участки 1б и 2б — гиперболическому. Изломы кривых в точках перехода с одного режима на другой связаны с тем, что функция (1.3) имеет излом в точке $s=c_*$. Видно, что в зависимости от значений числа Пекле существует либо один, либо два, либо три различных стационарных режима.

Анализ показывает также, что возможна ситуация, когда во всем диапазоне чисел Пекле существует только один стационарный режим: либо линейный ($k_1=1$, $k_2=1,2$), либо гиперболический ($k_1=1$, $k_2=0,2$). В линейном случае кривая зависимости $c(1)$ от P монотонно убывает, а в гиперболическом — монотонно возрастает с ростом P .

Можно предположить, что если вместо модельной функции (1.3) в задаче (1.1) — (1.2) использовать характерную для автокаталитической реакции функцию $\varphi(c)$, то кривые зависимости $c(1)$ от P на фиг. 2 сгладятся в точках излома, а качественный характер поведения этих кривых останется неизменным. Это означает, что и в реальной проточной системе с автокаталитической реакцией в зависимости от значения кинетических констант и относительной роли конвекции и диффузии в реакторе возможны либо один, либо два, либо три различных стационарных режима.

ЛИТЕРАТУРА

1. Доронин В. П., Слинько М. Г., Шепелев В. С. Множественность стационарных режимов при протекании экзотермической реакции в псевдооживленном слое. — Теорет. основы хим. технологии, 1978, т. 12, № 4, с. 613—614.
2. Hlaváček V., Hofmann H. Modeling of chemical reactors — XVI. Steady state axial heat and mass transfer in tubular reactors. An analysis of the uniqueness of solutions. — Chem. Eng. Sci., 1970, v. 25, № 1, p. 173—185.

3. Гупало Ю. П., Рязанцев Ю. С. О стационарных режимах работы проточного адиабатического химического реактора.— ПМТФ, 1967, № 5, с. 37–44.
4. Арис Р. Анализ процессов в химических реакторах. М.: Химия, 1967. 328 с.
5. Перлмуттер Д. Устойчивость химических реакторов. Л.: Химия, 1976. 256 с.
6. Эмануэль Н. М., Кнорре Д. Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа, 1974. 400 с.
7. Matsuura T., Kato M. Concentration stability of the isothermal reactor.— Chem. Eng. Sci., 1967, v. 22, № 2, p. 171–183.
8. Люк Ю. Специальные математические функции и их аппроксимации. М.: Мир, 1980. 608 с.

Москва

Поступила в редакцию
2.II.1982

УДК 533.6.011.5

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛЕЙ ТЕЧЕНИЙ В ОБЛАСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЕРХЗВУКОВОЙ НЕДОРАСШИРЕННОЙ СТРУИ С ПРЕГРАДАМИ

ГОЛОМАЗОВ М. М., ДАВЫДОВ Ю. М., ЕЖКОВ В. В.,
ШМАТОВ С. И.

При натекании сверхзвуковой нерасчетной струи на преграду в областях, прилегающих к преграде, формируется поток сложной структуры с разветвленной системой скачков уплотнения, содержащий области местного дозвукового течения, контактные разрывы и области с большими градиентами параметров. Это обстоятельство сильно затрудняет как экспериментальное исследование таких течений, так и численные расчеты с предварительным выделением разрывов. В связи с этим особое значение приобретают здесь численные методы сквозного счета, позволяющие проводить расчеты без априорной информации о структуре потока и получать достаточно подробную информацию об особенностях течения. В [1] приведены предварительные результаты численных экспериментов, моделирующих истечение струи идеального газа в область сложной геометрической формы.

В данной работе приводятся постановка и результаты численного решения задачи о взаимодействии сверхзвуковой недорасширенной струи с преградами, установленными перпендикулярно оси струи. Выявлено влияние определяющих параметров, таких, как геометрия преграды, расстояние преграды от среза сопла и т. д., на характер течения вблизи преграды. Расчеты проводились по методу крупных частиц Белоцерковского — Давыдова [2]. В этом методе используется идея расщепления по физическим факторам [3, 4], позволяющая построить сравнительно простой и экономичный алгоритм. С помощью метода крупных частиц можно получать характеристики нестационарных течений, а также в результате установления их стационарные значения. Свойство аппроксимационной вязкости, присущее разностной схеме метода, позволяет проводить расчет по единому алгоритму как в области гладких течений, так и на разрывах.

Перейдем к описанию постановки задачи. Картина течения при взаимодействии определяется числом Ma , нерасчетностью струи $n = p_a / p_H$, углом полураствора сопла θ_a , относительным радиусом преграды r_w / r_a и относительным расстоянием преграды от среза сопла $x_w' = x_w / r_a$ (индексом a отмечены величины, относящиеся к срезу сопла, индексом w — к преграде, индекс H соответствует параметрам окружающей среды). В качестве начальных условий в момент времени $t=0$ используются параметры невозмущенного потока, т. е. ρ_H, E_H, u_H, v_H (E — удельная полная энергия, $E = \epsilon + \frac{1}{2}|V|^2$).

Рассматривая задачу как осесимметричную, будем полагать, что преграда не нарушает осевой симметрии течения. Поэтому на оси AO ставятся обычные условия симметрии (фиг. 1). На преграде OED ставятся условия непротекания. На срезе конического сопла AK параметры потока ρ_a, E_a, u_a, v_a считаются равными параметрам потока от соответствующего конического сверхзвукового источника и в течение всего процесса решения поддерживаются постоянными. Поскольку струя втекает в затопленное пространство, постановка граничных условий на участке $FBCD$ должна быть выполнена так, чтобы, во-первых, течение все время «чувствовало» наличие окружающей газовой среды и, во-вторых, чтобы на определенных участках внешней