

УДК 532.72:541.12

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИМАЛЬНОГО РЕЖИМА ПРОДОЛЬНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ В ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ПРОТОЧНОЙ СИСТЕМЕ С ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИЕЙ

БЕРМАН В. С., ЕРОХИН Л. Ю., РЯЗАНЦЕВ Ю. С.

Определение оптимального режима перемешивания, при котором достигается максимальная степень превращения реагента, — один из фундаментальных вопросов теории химических реакторов, обсуждению которого посвящено значительное количество работ [1–10]. С математической точки зрения исследование этого вопроса сводится к анализу решения нелинейной двухточечной краевой задачи, которая обычно не имеет точного аналитического решения. При теоретическом исследовании этого вопроса использовались как численные, так и приближенные аналитические методы.

Привлечение приближенных асимптотических методов позволяет получить информацию о поведении решения в окрестности предельных значений параметров задачи: для случаев больших и малых чисел Пекле [3–8], малых значений константы скорости реакции [9–10]. Анализ полученных зависимостей указывает на возможность существования оптимального режима перемешивания при промежуточных значениях числа Пекле ($0 < Pe < \infty$) в ограниченной области допустимых значений параметров задачи, на повышение степени превращения с увеличением константы скорости реакции. Однако справедливость полученных выводов ограничена предположениями, положенными в основу используемых методов, оставляя неисследованной область промежуточных значений числа Пекле при конечных значениях константы скорости реакции.

Исследование этой области параметров численными методами в том виде, в котором они применялись в [1–2], сопряжено с большими затратами вычислительного времени [11], поскольку определение оптимального режима требует перебора решений для всех допустимых значений параметров. Представляют интерес численные методы, в которых решение задачи ищется только для значений параметров, удовлетворяющих дополнительным условиям, например условию достижения оптимальной степени превращения.

К таким методам относится метод продолжения по параметру [11]. Однако реализация этого метода требует дополнительной информации: выделения областей параметров, где наложенные на них дополнительные условия имеют смысл; определение начальных значений параметров, необходимых для проведения численной процедуры.

В данной работе рассматривается одномерный изотермический проточный реактор с продольным перемешиванием. Анализируются известные асимптотические результаты и на их основе формулируются условия и начальные значения параметров для численного исследования с помощью метода продолжения по параметру.

Предметом исследования является построение точных границ областей изменения характерных параметров, в которых максимальная степень превращения достигается в одном из предельных ($Pe=0$ и $Pe=\infty$) либо промежуточном ($0 < Pe < \infty$) случаях перемешивания. Исследуется также зависимость степени превращения от числа Пекле в этих областях, определяется ее приращение по отношению к предельным режимам для области промежуточного оптимального значения числа Пекле. Приводятся результаты расчетов для реактора с автокаталитической реакцией, скорость которой зависит от концентрации по закону $F(C) = C(1-C)$.

1. Рассмотрим одномерную модель проточного изотермического химического реактора с продольным перемешиванием. В безразмерных переменных уравнение и граничные условия для концентрации реагента имеют вид

$$\frac{1}{Pe} \frac{d^2 y}{dx^2} - \frac{dy}{dx} - kf(y) = 0 \quad (1.1)$$

$$-\frac{1}{\text{Pe}} \frac{dy}{dx} + y = 1, \quad x=0; \quad \frac{dy}{dx} = 0, \quad x=1 \quad (1.2)$$

$$y = \frac{C}{C_f}, \quad x = \frac{X}{L}, \quad \text{Pe} = \frac{UL}{D}, \quad k = \frac{KL}{U}, \quad f(y) = \frac{F(yC_f)}{C_f}$$

Здесь X — пространственная координата ($0 \leq X \leq L$), L — длина реактора, C — концентрация реагента, C_f — концентрация реагента на входе в реактор, U — линейная скорость подачи реагента, D — эффективный коэффициент диффузии, K — константа скорости химической реакции, Pe — число Пекле, $F(C)$ — зависимость скорости химической реакции от концентрации реагента.

Асимптотические разложения позволяют выписать приближенные выражения для концентрации реагента на выходе из реактора ($x=1$) для больших [3, 5–8] и малых [4–5, 7, 8] чисел Пекле, а также малых значений константы скорости реакции [9]

$\text{Pe} \gg 1$:

$$y_\infty = y_{\infty 0} + \frac{1}{\text{Pe}} y_{\infty 1} + \frac{1}{\text{Pe}^2} y_{\infty 2} + o\left(\frac{1}{\text{Pe}^2}\right) \quad (1.3)$$

$$y_{\infty 1} = k f_\infty(1) \ln \frac{f_\infty(0)}{f_\infty(1)}$$

$$y_{\infty 2} = \frac{1}{2} k^2 f_\infty(1) \left(-f_\infty'(0) - f_\infty'(1) + f_\infty'(1) \ln^2 \frac{f_\infty(0)}{f_\infty(1)} - 2f_\infty'(1) \ln \frac{f_\infty(0)}{f_\infty(1)} + 2F \right)$$

$$F = \int_1^{y_{\infty(1)}} \frac{(f')^2}{f} dy$$

$\text{Pe} \ll 1$:

$$y_0 = y_{00} + \text{Pe} y_{01} + \text{Pe}^2 y_{02} + o(\text{Pe}^2) \quad (1.4)$$

$$y_{01} = -\frac{k f_0 f_0'}{6(f_0' + 1/k)}$$

$$y_{02} = -\frac{k^2 f_0}{360(f_0' + 1/k)^2} \left(f_0' \left(7f_0'^2 + \frac{12f_0'}{k} + \frac{15}{k^2} \right) - \frac{f_0'' f_0'}{(f_0' + 1/k)} \left(4f_0'^2 + \frac{f_0'}{k} + \frac{9}{k^2} \right) \right)$$

$k \ll 1$:

$$y_k = 1 + k y_{k1} + k^2 y_{k2} + k^3 y_{k3} + o(k^3) \quad (1.5)$$

$$y_{k1} = -f_k, \quad y_{k2} = -f_k f_k' W(\text{Pe})$$

$$y_{k3} = -f_k (f_k')^2 W_1(\text{Pe}) + \frac{1}{2} f_k'' f_k'^2 W_2(\text{Pe})$$

$$W = \frac{\exp(-\text{Pe}) - 1}{\text{Pe}^2} + \frac{1}{\text{Pe}} + \frac{1}{2}$$

$$W_1 = \frac{4 \exp(-\text{Pe}) - 1}{\text{Pe}^3} + \frac{3 \exp(-\text{Pe}) + 1}{\text{Pe}^2} + \frac{1}{\text{Pe}} + \frac{1}{6}$$

$$W_2 = \frac{1 - \exp(-2\text{Pe})}{2\text{Pe}^3} - \frac{1}{\text{Pe}^2} + \frac{1}{\text{Pe}} + \frac{1}{3}$$

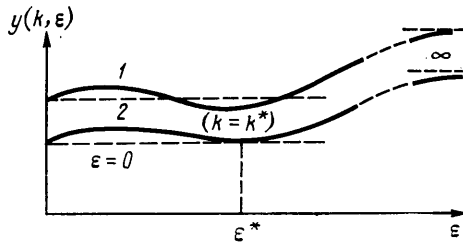
Здесь $y_{\infty 0}$, y_{00} — решения, отвечающие режимам идеального вытеснения ($\text{Pe} = \infty$) и идеального перемешивания ($\text{Pe} = 0$) в точке $x=1$; $f_\infty^{(n)}(x) = f^{(n)}(y_{\infty 0}(x))$, $f_0^{(n)} = f^{(n)}(y_{00})$ — значения скорости химической реакции

($n=0$) и ее производных ($n \neq 0$) для режима идеального вытеснения и идеального перемешивания; $f_k^{(n)} = f^{(n)}(1)$ — для случая малых констант скорости реакции.

Как видно из (1.3) и (1.4), изменение производительности реактора за счет выбора режима, отличного от двух предельных случаев $Re = \infty$ и $Re = 0$, определяется знаками вторых членов разложений. Неравенства

$$y_{\infty 1} < 0, y_{01} < 0 \quad (1.6)$$

неявно задают область в параметрической плоскости (k, C_f), в которой промежуточный уровень перемешивания ($0 < Re < \infty$) отвечает более глубокому превращению реагента, чем в случае $Re = \infty$ или $Re = 0$. Однако вблизи границ $y_{\infty 1} = 0, y_{01} = 0$ третий член соответствующих разложений становится



Фиг. 1

ся сопоставим со вторым членом. В этом случае пренебречь влиянием третьего члена нельзя.

Рассмотрим более подробно этот случай. Пусть $C_f = \text{const}$, $k = k_0$ — значение, при котором $y_1 = 0$ в разложении вида

$$y(\varepsilon, k) = y_0(k) + \varepsilon y_1(k) + \varepsilon^2 y_2(k) + o(\varepsilon^2) \quad (1.7)$$

Положим $k = k_0 + \varepsilon k_1$, $k_1 = O(1)$ и разложим (1.7) в окрестности k_0 . С учетом $y_1(k_0) = 0$ имеем

$$y(\varepsilon, k) = y_0(k) + \varepsilon^2 (k_1 y_{1k}'(k_0) + y_2(k_0)) + o(\varepsilon^2) \quad (1.8)$$

Здесь y_k' означает дифференцирование по k . Не уменьшая общности, рассмотрим случай, когда $y_1 < 0$ при $k < k_0$, $y_{1k}'(k_0) \neq 0$. Тогда $y_{1k}'(k_0) > 0$, и, если $y_2(k_0) < 0$ при $k_1 < k_1^*$, где $k_1^* = -y_2(k_0) (y_{1k}'(k_0))^{-1}$, следует $y(k) - y_0(k) < 0$.

Таким образом, вблизи границы области $k \leq k_0$, но вне ее, при некотором ε возможно существование режима более выгодного, чем предельный режим $y_0(k)$. Следовательно, в случае $y_2(k_0) < 0$ область оптимального промежуточного перемешивания шире области $k \leq k_0$ и включает ее в себя. Зависимость $y(k)$ для этого случая качественно имеет вид кривой 1, изображенной на фиг. 1. С увеличением $k - k_0$ и значениях $\varepsilon \sim O(1)$ справедливость сделанных выводов теряется из-за асимптотического характера рассмотренных формул. Однако из соображений непрерывности следует ожидать, что предельному значению $k = k^*$, отвечающему границе области оптимальности, соответствует случай, представленный кривой 2 на фиг. 1, что позволяет выписать для этого случая формальные условия

$$y(k^*, \varepsilon^*) - y(k^*, \varepsilon = 0) = 0, \quad \frac{\partial y(k^*, \varepsilon^*)}{\partial \varepsilon} = 0 \quad (1.9)$$

2. Построим процедуру отыскания оптимального режима перемешивания методом продолжения по параметру. Рассмотренные выше асимптотические разложения будут использованы при определении начальных условий для этой процедуры.

Уравнения и граничные условия перепишем в виде

$$y''(z) = p_2(-y' + p_1 f(y)) \quad (2.1)$$

$$F_0 = 0, F_1 = 0 \quad (2.2)$$

$$F_0 \equiv y', z=0; F_1 \equiv y' - p_2(1-y), z=1 \\ z=1-x, p_0=y(0), p_1=k_1, p_2=Pe, p_3=C_f$$

Неизвестный параметр p_0 и условие $F_0=0$ определяют задачу Коши для уравнения (2.1), а следовательно, $y(1)$ и $y'(1)$. Тогда решение двухточечной задачи (2.1), (2.2) сводится к нахождению корней уравнения $F_1(p_0, p_1, p_2, p_3) = 0$.

Зафиксировав параметры $p_1=k, p_3=C_f$, получим зависимость p_0 от p_2 в дифференциальной форме

$$\frac{dp_0}{dp_2} = - \frac{\partial F_1 / \partial p_2}{\partial F_1 / \partial p_0} \quad (2.3)$$

Начальные значения параметров p_0 и p_2 , значение производной dp_0/dp_2 в точке $p_2=0$ легко получить, используя асимптотическое разложение (1.4)

$$p_0 = y_{00}, p_1 = k, p_2 = 0, p_3 = C_f, dp_0/dp_2 = y_{\infty 0}. \quad (2.4)$$

Зависимость $p_0 = p_0(p_2)$ может быть разрешена численно с помощью метода продолжения по параметру [11], начиная со стартового значения $p_2=0$. Отметим, что явный вид выражения для производной dp_0/dp_2 в (2.4) позволяет обойти трудности численной реализации метода, связанные с вырождением уравнения (2.1) в точке $Pe=0$ ($p_2=0$) в одномерное уравнение реактора идеального перемешивания.

Перейдем к построению процедуры отыскания оптимального режима перемешивания методом продолжения по параметру.

Необходимыми условиями достижения максимальной по параметру Pe степени превращения ξ при $p_1 = \text{const}, p_3 = \text{const}$ являются условия (2.5)

$$\xi = (C_f - C(1)) / C_f = 1 - p_0 \\ \frac{dp_0}{dp_2} = 0, \quad \frac{d^2 p_0}{dp_2^2} > 0 \quad (2.5)$$

При $\partial F / \partial p_0 \neq 0$ условия для первой и второй производной с учетом (2.3) примут вид

$$F_2 \equiv \frac{\partial F_1}{\partial p_2} = 0, \quad \frac{d^2 p_0}{dp_2^2} = - \frac{\partial^2 F_1}{\partial p_2^2} \left(\frac{\partial F_1}{\partial p_0} \right)^{-1} > 0$$

Применительно к условиям $F_1=0, F_2=0$ рассмотрены два варианта двухпараметрического продолжения по параметру. В первом случае в качестве независимого параметра выберем параметр p_1 , параметр $p_2 = Pe^*$ зафиксируем. Будем искать отображение

$$p_0 = p_0(p_1), p_3 = p_3(p_1) \quad (2.6)$$

удовлетворяющее условиям $F_1=0, F_2=0$. Анализ выражения, описывающего концентрацию на выходе из реактора при малых k (1.5), позволяет указать начальные значения параметров p_0, p_1, p_2, p_3 и выписать выражение для их производных в этой точке

$$p_0 = 1, p_1 = 0, p_2 = Pe^*, p_3 = C_f^* \quad (2.7) \\ \frac{dp_0}{dp_1} = -f_k; \quad \frac{dp_3}{dp_1} = 0,5 C_f^* \alpha f_k, \quad \alpha = \frac{dW_2}{dPe} / \frac{dW}{dPe}$$

Здесь C_f^* — значение C_f , при котором достигается максимум функции $f(df/dy=0)$. Отметим, что так же, как и в однопараметрическом случае, численная реализация метода продолжения по параметру осложнена вы-

рождением матрицы Γ правых частей системы дифференциальных уравнений [11] в точке $p_1=0$. Явный вид выражений для производных (2.7), полученных независимо, позволяет обойти эту трудность.

Для другого варианта двухпараметрического продолжения метода продолжения по параметру выберем в качестве независимого параметра параметр p_2 , параметр $p_3=C_f$ зафиксируем. Будем искать отображение

$$p_0=p_0(p_2), \quad p_1=p_1(p_2) \quad (2.8)$$

также удовлетворяющее условиям $F_1=0, F_2=0$. Используя (1.4), выпишем начальные значения параметров p_0, p_1, p_2, p_3 и их производных

$$p_0=y_{00}, \quad p_1=k_0, \quad p_2=0, \quad p_3=C_{f_0}$$

$$\frac{dp_0}{dp_2} = y_{01} - 2y_{02} \frac{\partial y_{00}}{\partial k} \left(\frac{\partial y_{01}}{\partial k} \right)^{-1}, \quad \frac{dp_1}{dp_2} = -2y_{02} \left(\frac{\partial y_{01}}{\partial k} \right)^{-1} \quad (2.9)$$

Здесь k_0, C_{f_0} такие, что $y_{01}(k_0, C_{f_0})=0$.

Рассмотрим применение метода продолжения по параметру для трехпараметрического случая. Будем искать границу, разделяющую области для оптимального значения числа Пекле, равного бесконечности, и промежуточного значения ($0 < \text{Pe} < \infty$). В качестве третьего соотношения, необходимого для трехпараметрического продолжения, возьмем первое из условий (1.9), где в качестве $y(k^*, \varepsilon=0)$ возьмем $y_{\infty 0}$ из (1.3)

$$F_3 = p_0 - y_{\infty 0} = 0 \quad (2.10)$$

За независимый параметр примем p_1 и будем искать отображение

$$p_0=p_0(p_1), \quad p_2=p_2(p_1), \quad p_3=p_3(p_1) \quad (2.11)$$

удовлетворяющее соотношениям $F_1=0, F_2=0, F_3=0$. Анализ выражений (1.4), (1.5) позволяет выписать начальные значения параметров p_0, p_1, p_2, p_3 и их производных

$$p_0=1, \quad p_1=0, \quad p_2=\infty, \quad p_3=C_f^*$$

$$\frac{dp_0}{dp_1} = -f_k, \quad \frac{dp_2}{dp_1} = 0, \quad \frac{dp_3}{dp_1} = 0,5C_f^* \alpha f_k \quad (2.12)$$

Значения C_f^* и α такие же, как в (2.7). Численная реализация нахождения отображения (2.11) затруднена из-за условия $p_2=\infty$. Поэтому видоизменим дифференциальные соотношения F_1, F_2, F_3 так, чтобы они удовлетворяли следующим условиям:

$$\frac{\partial F_i'}{\partial p_j} = p^* \frac{\partial F_i}{\partial p_j}, \quad \frac{\partial F_i'}{\partial p_2} = p \frac{\partial F_i}{\partial p_2}; \quad i=1, 2; \quad j=0, 1, 3$$

$$\frac{\partial F_3'}{\partial p_j} = p \frac{\partial F_3}{\partial p_j}; \quad \frac{\partial F_3'}{\partial p_2} = (p^* - p) + p \frac{\partial F_3}{\partial p_2}$$

$$p = p_1, \quad p_1 < p^*; \quad p = p^*, \quad p_1 \geq p^*$$

В начальной точке, соответствующей значению $p_1=0$, преобразованная указанным образом система определяющих дифференциальных соотношений, эквивалентна рассмотренному выше отображению (2.6). С увеличением параметра p_1 она непрерывно переходит к системе дифференциальных соотношений, удовлетворяющей искомому отображению (2.11). Это позволяет использовать начальные условия (2.7) в точке $p_1=0$. Значение параметра $p_2(\text{Pe}^*)$ в этой точке становится независимым и устанавливается экспериментальным путем из условия выхода отображения (2.11) при $p_1 > p^*$ к конечным неотрицательным значениям.

Аналогичным образом можно решить проблему определения начальных условий для трехпараметрического отображения по параметру p_1 в

виде (2.11), задаваемого соотношениями F_1, F_2 и

$$F_3 \equiv y_{00} - y_{\infty} = 0 \quad (2.13)$$

Начальные значения параметров в этом случае будут иметь вид

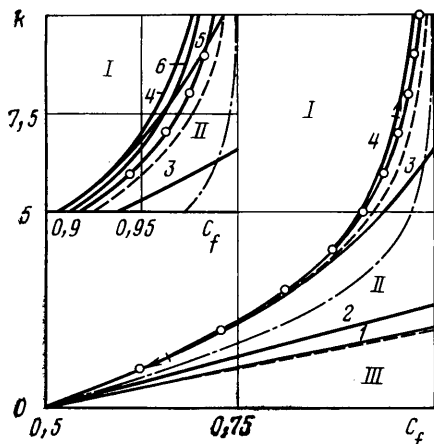
$$p_0=1, p_1=0, p_2=Pe^*, p_3=C_f^*$$

Начальные значения производных имеют вид (2.12). Значение параметра C_f^* — такое же, как в (2.7). Параметр Pe^* и соответственно α выбирается из условия выхода отображения (2.11) из начальной точки $p_1=0$ на кривую, задаваемую соотношением $F_3(k, C_f)=0$. Из условия (2.7) для значения производной dp_2/dp_1 в точке $p_1=0$ и условия (2.13) получаем уравнение относительно стартового значения параметра Pe^*

$$\alpha(Pe^*) + \frac{2}{C_f^* f_k} \frac{\partial F_3 / \partial k}{\partial F_3 / \partial C_f} = 0$$

корень которого достаточно просто найти численно для конкретной функции f .

Введенное таким образом отображение позволяет оценить выигрыш в превращении реагента за счет оптимального перемешивания в тех



Фиг. 2

точках параметрической плоскости (k, C_f) , где два других предельных режима $Pe=0$ и $Pe=\infty$ дают одинаковый результат.

3. Описанные выше варианты параметрического продолжения использовались при исследовании влияния продольного перемешивания на степень превращения реагента в реакторе с автокаталитической реакцией, скорость которой зависит от концентрации по закону $F(C) = C(1-C)$.

На фиг. 2 штрихпунктирной кривой в параметрической плоскости (k, C_f) представлена зависимость между k и C_f , полученная из соотношения

$$S(k, C_f) = 0, \quad S \equiv y_{\infty} - y_{00}$$

Здесь y_{∞} и y_{00} — решения, отвечающие режимам идеального вытеснения ($Pe=\infty$) и идеального перемешивания ($Pe=0$):

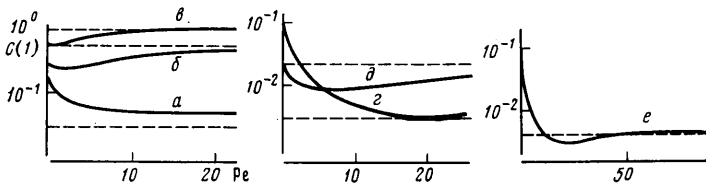
$$y_{\infty} = (1 - C_f) \exp k + C_f, \quad y_{00} = (k + 1 + \sqrt{(1+k)^2 - 4kC_f}) / 2kC_f$$

Ниже кривой $S=0, S>0$ — режим идеального перемешивания выгоднее режима идеального вытеснения, выше этой кривой $S<0$ — наоборот. Ниже и выше этой кривой плоскость (k, C_f) делят на три области I, II, III штриховые кривые, представленные уравнениями

$$C_f = \exp(k/2) / (\exp(k/2) + 1) \quad (3.1)$$

$$C_f = 0,25k + 0,5 \quad (3.2)$$

полученные при подстановке в формулы (1.6) членов $y_{\infty 1}, y_{01}$ разложений (1.3), (1.4) и при замене знака неравенства в этих формулах на знак равенства. В области I $y_{\infty 1} > 0$, в области III $y_{01} > 0$. Внутри области II выполняются условия (1.6), и, следовательно, оптимальным по степени превращения является режим при промежуточном ($0 < Pe < \infty$) значении числа Пекле, поскольку малое отклонение от предельных режимов приводит к уменьшению концентрации на выходе из реактора и соответственно к увеличению степени превращения. Этот вывод следует из асимптотических разложений (1.3), (1.4). Поскольку эти разложения справедливы при малых значениях Pe и Pe^{-1} , воспользуемся методом продолжения по параметру в виде (2.3) для выяснения характера зависимости концентрации на выходе из реактора от значения числа Пекле для характерных точек, принадлежащих областям I, II, III. Графики этих зависимостей представлены на фиг. 3 кривыми а, б, в соответственно для значений k и C_f : 5, 0,8; 3, 0,95; 1,9, 0,975. Штриховыми линиями на этих гра-



Фиг. 3

фиках отмечены предельные уровни концентрации для $Re = \infty$; для удобства значения концентрации представлены в размерном виде.

На фиг. 2 в параметрической плоскости (k, C_f) представлены кривые для различных значений числа Пекле Re^* , полученные при вычислении отображения (2.6). В каждой точке этих кривых обращается в ноль значение производной $dy(1)/dPe$ при значениях параметра $Pe = Re^*$. При $Pe \rightarrow 0, Pe \rightarrow \infty$ кривые приближаются к граничным кривым (3.1), (3.2) в соответствии с асимптотическими разложениями (1.3), (1.4). Вторая производная (2.5) на этих кривых может принимать как положительное, так и отрицательное значение. Положительное значение соответствует локальному минимуму, т. е. максимальной степени превращения в окрестности значения $Pe = Re^*$.

В представленном на графиках диапазоне значений k, C_f вторая производная положительна на кривых $Re^* = 0, 1; 9; 20$, помеченных номерами 1, 2, 3, 5 на графиках. Значение второй производной для кривых $Re^* = 30; 50$ (кривые 4, 6) положительно в окрестности выхода этих кривых из точки $k=0, C_f=0,5$, а затем меняет знак. На кривой $Re^* = 30$ вторая производная меняет знак дважды — расположение точек, где вторая производная принимает значение ноль и направление ее увеличения показано на графике стрелками. В точках пересечения кривых для различных значений Re^* (например, для $Re^* = 20$ и $Re^* = 50$) зависимость концентрации на выходе из реактора от значения числа Пекле имеет вид \sim -образной кривой, локальные экстремумы которой (минимум и максимум) достигаются при $Re^* = 20$ и 50 соответственно.

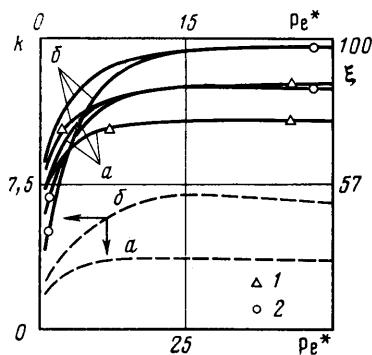
Среди кривых, имеющих положительное значение второй производной, есть такие, которые расположены в области I, вне области II, в то время как проходящих в области III таких кривых нет. Эта ситуация является иллюстрацией разобранного выше случая влияния третьего члена асимптотических разложений на поведение решения. Анализ показывает, что для разложений (1.3) и (1.4) на кривых (3.1) и (3.2) соответственно выполняются следующие условия:

$$\frac{\partial y_{\infty 1}}{\partial k} > 0, \quad y_{\infty 2} < 0 \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial y_{01}}{\partial k} < 0, \quad y_{02} > 0 \quad (3.4)$$

За счет условий (3.3) возможно формирование отрицательного знака для члена порядка ε^2 в формуле (1.8) при $k_1 > 0$ (область I, k_0 соответствует границе (3.1)), условия (3.4) дают положительное назначение этого члена при $k_1 < 0$ (область III, k_0 соответствует границе (3.2)). Таким образом, в области I, в малой окрестности границы ее с областью II, характер зависимости концентрации реагента на выходе из реактора может принимать вид, представленный на фиг. 1 кривой I. Вычисления методом продолжения по параметру в виде (2.3) для точки $k=10, C_f=0,988$ подтверждают этот вывод (кривая e, фиг. 3).

На фиг. 4 пунктирными линиями показаны зависимости k от Re^* для значений $C_f 0,85$ и $0,95$ (кривые a и б), полученные в результате вычисления отображения (2.8). Ось Re^* — нижняя для этих графиков. На этих кривых обращается в ноль значение производной $dy(1)/dPe$ при значениях числа Пекле $Re = Re^*$. Для каждого значения k , лежащего на этих кривых и соответствующего C_f , были вычислены значения степени превращения ξ для $Re=0, Re=\infty$ и $Re = Re^*$. Поскольку вычисленное k зависит от Re^* , полученные зависимости представлены в виде графиков $\xi = \xi(Re^*)$ в верхней части фиг. 4 сплошными линиями. Кривые для случаев $Re=0$ и $Re=\infty$ помечены цифрами 1 и 2, ось Re^* расположена сверху графиков.



Фиг. 4

Приращение степени превращения $\Delta\xi = \min\{\xi(\text{Re}=0), \xi(\text{Re}=\infty)\}$ за счет выбора оптимального значения числа Пекле Re^* может достигать 10% по сравнению с предельными случаями. Характер представленных зависимостей указывает на то, что максимальное приращение степени превращения $\Delta\xi$ за счет выбора оптимального режима перемешивания по отношению к предельным режимам достигается в тех точках параметрической плоскости k, C_f , где $\xi(\text{Re}=0) = \xi(\text{Re}=\infty)$, т. е. в точках кривой $S=0$. Зависимость $y(1)$ для точек, принадлежащих этой кривой, имеет вид, представленный кривой θ на фиг. 3 ($k=5, C_f=0,973$).

Исходя из этого, был проведен расчет отображения (2.11) заданного соотношениями $F_1=0, F_2=0, F_3=0$ (2.13). Результаты показывают, что с продвижением по кривой $S=0$ в сторону увеличения параметра k от значения $k=0$ растет значение оптимального числа Пекле и происходит увеличение величины приращения степени превращения $\Delta\xi$ относительно двух предельных режимов, которое достигает своего максимального значения $\Delta\xi=11,72\%$ в точке $k=6,4$ при $\text{Re}^*=9,54$. Дальнейшее продвижение по кривой (3.1) в сторону увеличения параметра k ведет к дальнейшему росту оптимального значения числа Пекле Re^* , но и уменьшает величину приращения степени превращения. При $k=12,8, \text{Re}^*=27,78 - \Delta\xi=7,76\%$.

На графиках фиг. 4 также прослеживается влияние отрицательного знака третьего члена асимптотического разложения (условия (3.3)). Зависимость k от Re^* имеет локальный максимум при $k=k^*$ и стремится при $\text{Re} \rightarrow \infty$ к значению k_0 ($k_0 < k^*$), лежащему на границе области I и II — кривой (3.1). Левее точки k^* вторая производная (2.5) принимает положительное значение, правее — отрицательное, в точке k^* — ноль. Таким образом, в точках $k_0 < k < k^*$, расположенных левее k^* , при соответствующем C_f достигается локальный максимум степени превращения по параметру Re . Следовательно, граница области, в которой максимальное превращение достигается при промежуточном значении числа Пекле, не совпадает с границей (3.1), требуя отдельного вычисления.

Воспользуемся для этого процедурой трехпараметрического продолжения по параметру в виде (2.11) для соотношений $F_1=0, F_2=0, F_3=0$ (2.10). Результаты вычисления этой границы показаны на фиг. 2. На этой предельной кривой отмечены точки, соответствующие значениям $k=1, 2, \dots, 10$. Предельные значения Re^* в этих точках равны соответственно 26,18; 15,61; 13,78; 13,77; 14,57; 15,86; 17,49; 19,37; 21,45; 23,70. Графики зависимости концентрации на выходе из реактора от значения числа Пекле для точек на этой кривой имеют вид, аналогичный кривой 2 фиг. 1 (кривая 2 фиг. 3, $k=10, C_f=0,984$).

Взаимное расположение предельной кривой и кривых, отвечающих различным значениям Re^* (фиг. 2), указывает на то, что при положительном значении второй производной (2.5) в точках, лежащих на кривых левее предельной кривой, достигаемый локальный минимум значения концентрации на выходе из реактора при $\text{Re}=\text{Re}^*$ больше, чем для предельного случая $\text{Re}=\infty$, т. е. уровень превращения, соответствующий случаю $\text{Re}=\infty$, выше. Однако тот факт, что локальное увеличение степени превращения за счет выбора оптимального числа Пекле Re^* может достигаться вне параметрической области максимального превращения (область между предельной кривой и кривой (3.2)) при промежуточном значении числа Пекле, может представлять самостоятельный интерес.

4. Применение метода продолжения по параметру при определении оптимального режима перемешивания позволяет последовательно искать в параметрическом пространстве задачи точки, отвечающие оптимальному режиму, не прибегая к перебору решений для всех допустимых значений параметров, что существенно уменьшает затраты вычислительного времени. Использование асимптотических результатов позволяет правильно поставить задачу численного исследования, получить необходимую для применения метода дополнительную информацию.

Полученные результаты подтверждают вывод, сделанный в [9] в предположении малых значений константы скорости химической реакции, о возможности существования оптимального режима перемешивания при конечном значении числа Пекле и для конечных значений константы скорости.

Анализ асимптотических результатов, полученных в [3–6], выявляет нетривиальный характер зависимости степени превращения от степени продольного перемешивания, указывает на необходимость учета членов разложений высокого порядка при построении границ параметрических областей, отвечающих различным режимам оптимального перемешивания. Предложенная в [6] процедура определения границ этих областей по первым двум членам соответствующих асимптотических разложений может приводить к существенным погрешностям, что подтверждается чис-

ленными расчетами, проведенными при помощи метода продолжения по параметру.

Оптимальный режим перемешивания, отвечающий промежуточному значению числа Пекле Pe^* , может иметь как локальный, так и глобальный характер. При локальном характере максимум степени превращения, достигаемый при $Pe=Pe^*$, не превышает уровня предельного случая $Pe=0$ или $Pe=\infty$. При глобальном характере максимум степени превращения носит абсолютный характер на всей области изменения параметра Пекле ($0 \leq Pe \leq \infty$). Таким образом, повышение степени превращения может достигаться выведением процесса на различные уровни перемешивания, конкретный выбор которых может определяться, например, технологическими требованиями.

Проведенные расчеты показывают, что максимальное увеличение степени превращения по отношению к уровням режимов идеального перемешивания и вытеснения достигается в малой окрестности и на самой кривой (3.4) в параметрической плоскости (k, C_f) , получение которой не требует сложных вычислений. Увеличение степени превращения на этой кривой для рассмотренной кинетики достигает величины 11,72%.

Предложенная процедура исследования оптимальных режимов работы изотермического реактора очевидным образом может быть применена для изучения адиабатического реактора при наличии подобия полей концентрации и температуры.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Fan L., Baillie R.* Axial diffusion in isothermal tubular flow reactors // *Chem. Engng Sci.* 1960. V. 13. P. 63–69.
2. *Hlavacek V., Marek M.* Axial stoff-und warmetransport in adiabatischen rohreactor // *Chem. Engng Sci.* 1966. V. 21. P. 493–514.
3. *Horn F. J. M., Parish T. D.* The influence of mixing on tubular reactor performance // *Chem. Engng Sci.* 1967. V. 22. P. 1549–1560.
4. *Wissler E. H.* On the asymptotic behavior of a tubular reactor in the limit of small axial diffusivity // *Chem. Engng Sci.* 1969. V. 24. P. 829–832.
5. *Burghardt A., Zaleski T.* Longitudinal dispersion at small and large Peclet numbers in chemical flow reactors // *Chem. Engng Sci.* 1968. V. 23. P. 575–591.
6. *Ray W. H., Marek M., Elnachaie S.* The effect of heat and mass dispersion on tubular reactor performance // *Chem. Engng Sci.* 1972. V. 27. P. 1527–1536.
7. *Rahman M.* Some aspects of perturbation solutions arising in non-isothermal tubular chemical flow reactors // *Chem. Engng. Sci.* 1974. V. 29. P. 2169–2176.
8. *Turian R. M.* Solutions of problems in chemical flow reactors by perturbation methods // *Chem. Engng Sci.* 1973. V. 28. P. 2024–2031.
9. *Гупало Ю. П., Новиков В. А., Рязанцев Ю. С.* О влиянии продольного перемешивания на степень превращения реагента в проточной системе // *Изв. АН СССР. МЖГ.* 1981. № 2. С. 84–90.
10. *Гупало Ю. П., Новиков В. А., Рязанцев Ю. С.* О влиянии процессов переноса на стационарные режимы проточной системы с последовательно-параллельной реакцией // *Изв. АН СССР. МЖГ.* 1982. № 6. С. 106–113.
11. *Kubicek B., Hlavacek V.* Solution of nonlinear boundary value problem // *Chem. Engng Sci.* 1972. V. 27. P. 743–750.

Москва

Поступила в редакцию
7.XII.1987