

УДК 66.096.5+519.67

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА ВЫТЕСНЕНИЯ
И ЕЕ ДВУМЕРНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

В.В.Вершинин, О.В.Киселев, Л.И.Конonenko, С.А.Тресков

Рассматриваемая модель химического реактора вытеснения с интегральным учетом тепловыделения в безразмерном виде представляет собой следующую систему интегродифференциальных уравнений:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = D \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x}{\partial \xi} + k_1 \exp(\theta/(1+b\theta))(1-x), \quad (1)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = \mu [-\theta + \theta_0 + Qk_1 \exp(\theta/(1+b\theta)) \int_0^1 (1-x) d\xi],$$

с условиями:

$$D \frac{\partial x}{\partial \xi}(0) = x(0); \quad D \frac{\partial x}{\partial \xi}(1) = 0; \quad (2)$$

$$x = x^0(\xi), \quad \theta = \theta^0 \quad \text{при} \quad t = 0,$$

где $x(\xi, t)$ - безразмерная концентрация реагента, $0 \leq x(\xi, t) \leq 1$; ξ - пространственная переменная, $0 \leq \xi \leq 1$; t - время, $\theta(t)$ - температура, $\exp(\theta/(1+b\theta))$ - безразмерный вид закона Аррениуса зависимости скорости реакции от температуры, k_1 - предэкспоненциальный множитель, D - коэффициент диффузии, Q - тепловой эффект реакции, θ_0 - температура хладагента, μ - параметр, зависящий от теплоемкости твердой и газовой фаз и пористости слоя.

Качественное исследование модели (1), (2) проводилось в [1]. Предельными случаями этой модели являются следующие.

1. $D=0$ - диффузия отсутствует, это модель идеального вытеснения по веществу:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -\frac{\partial x}{\partial \xi} + k_1 \exp(\theta/(1+b\theta))(1-x), \quad (3)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = \mu [-\theta + \theta_0 + Qk_1 \exp(\theta/(1+b\theta))] \int_0^1 (1-x) d\xi,$$

с условиями:

$$\begin{aligned} x &= 0 \quad \text{при} \quad \xi = 0; \\ x &= x^0(\xi), \quad \theta = \theta^0 \quad \text{при} \quad t = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

2. $D = \infty$ - модель реактора идеального смешения:

$$\frac{dx}{dt} = -x + k_1 \exp(\theta/(1+b\theta))(1-x),$$

$$\frac{d\theta}{dt} = \mu [-\theta + \theta_0 + Qk_1 \exp(\theta/(1+b\theta))(1-x)], \quad (5)$$

$$x = x^0, \quad \theta = \theta^0 \quad \text{при} \quad t = 0.$$

Система двух обыкновенных дифференциальных уравнений (5) широко исследовалась [2,3]. Особые точки (x_s, θ_s) находятся из условий:

$$x_s = k(\theta_s)/(1+k(\theta_s)), \quad (6)$$

$$-\theta_s + \theta_0 + Qk(\theta_s)/(1+k(\theta_s)) = 0,$$

где $k(\theta) = k_1 \exp(\theta/(1+b\theta))$. Уравнение (6) задает поверхность сборки в пространстве переменных (θ_s, Q, θ_0) . Среднее из трех возможных стационарных решений - седловая точка, а крайние два или единственное - узлы или фокусы. Зону неустойчивости окружает область, вне которой стационарные решения устойчивы, а на самой области решение устойчиво при $0 < \mu < \mu_0$ для некоторого μ_0 и неустойчиво при $\mu > \mu_0$. При $\mu = \mu_0$ происходит бифуркация Андронова-Хопфа [4].

Модель идеального вытеснения (3),(4) изучалась в [5]. Стационарная концентрация имеет вид

$$x_s(\xi) = 1 - \exp(-k(\theta_s)\xi), \quad (7)$$

где стационарная температура θ_s находится из уравнения

$$-\theta_s + \theta_0 + Q[1 - \exp(-k(\theta_s))] = 0. \quad (8)$$

Поверхность, описываемая этим уравнением, есть поверхность сборки

и устройство ее аналогично устройству поверхности (6). Если из уравнений (6) и (8) выразить θ_s как функцию от θ_0 , то получим неравенство $\theta_s^{\infty}(\theta_0) > \theta_0^0(\theta_s)$, где $\theta_s^{\infty}(\theta_0)$ соответствует значению $D = \infty$, а $\theta_0^0(\theta_s)$ - значению $D = 0$.

Стационарные профили концентрации для общей модели (1), (2) имеют вид:

$$x_s(\xi) = 1 - \frac{1}{2\Delta_0} \left[(p_0 + 1) \exp\left(\frac{p_0 - 1}{2D} (1 - \xi)\right) + (p_0 - 1) \exp\left(-\frac{p_0 + 1}{2D} (1 - \xi)\right) \right],$$

где

$$\Delta_0 = \frac{1}{4} \left[(p_0 + 1)^2 \exp\left(\frac{p_0 - 1}{2D}\right) - (p_0 - 1)^2 \exp\left(-\frac{p_0 + 1}{2D}\right) \right],$$

$$p_0 = \sqrt{1 + 4Dk(\theta_s)},$$

а стационарная температура θ_s удовлетворяет уравнению

$$-\theta_s + \theta_0 + Q(1 - p_0(\theta_s)/\Delta_0(\theta_s)) = 0. \quad (9)$$

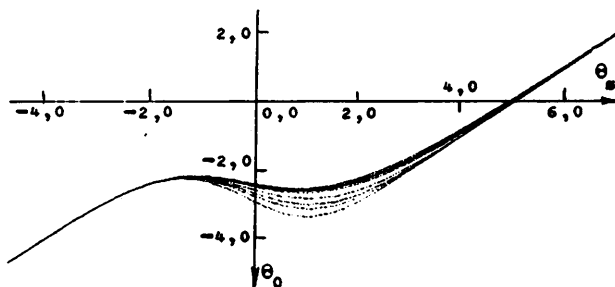


Рис. I

Для этого уравнения ввиду громоздкости выражений проделать анализ, как для уравнений (6) и (8), не удастся. Поэтому характер зависимости θ_0 от θ_s исследовался численно при различных значениях параметров.

На рис. I приведено 10 графиков функции $\theta_0(\theta_s)$ при следующих значениях параметров: $k_1 = 1$; $b = 0.07$; $q = 5$; $D = 0.1, 0.3, 0.5, 1, 3, 5, 7, 9, 50, 100$. Этот пример показывает слабую зависимость графика функции $\theta_0(\theta_s)$ от коэффициента диффузии D . Зависимость же

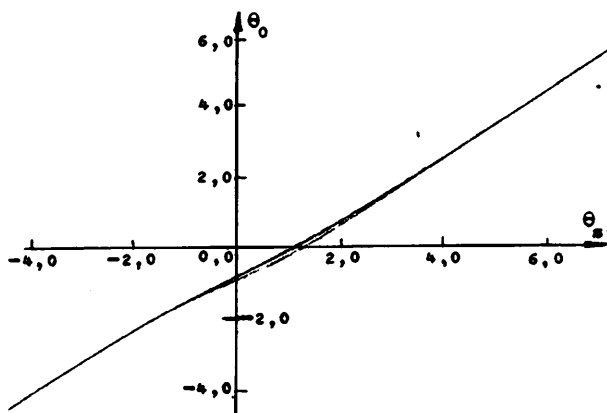


Рис. 2

$\theta_0(\theta_*)$ при тех же значениях k_1 и b , но при $Q=1$, и $D=0, 0.1, 5, 8, 10, \infty$. При этих значениях параметров имеем взаимно-однозначную зависимость θ_0 от θ_* , что означает наличие единственного стационарного решения. Характер зависимости от коэффициента диффузии такой же, как на рис. 1.

такова, что при увеличении коэффициента диффузии D монотонно возрастает значение $\theta_0(\theta_*)$. Причем заметно это только в зоне, окружающей область, где производная $\theta_0'(\theta_*)$ отрицательна.

На рис. 2 приведено 7 графиков функции

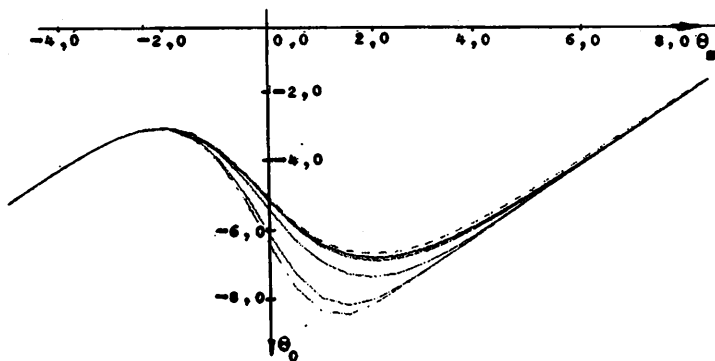


Рис. 3

На рис. 3 приведено 7 графиков функции $\theta_0(\theta_*)$ при тех же значениях параметров k_1, b, D , что и на рис. 2, отличие состоит в том, что $Q=10$. Зависимость от D такая же, как на рис. 1. Нижний график соответствует значению $D=0$, а верхний $D=\infty$.

Эти характерные примеры показывают, что зависимость функции $\theta_0(\theta_*)$ от коэффициента диффузии D носит слабо выраженный характер. По крайней мере, при рассмотренных значениях параметров в системе (1), (2) возможно не более трех стационарных решений.

Для того, чтобы лучше понять некоторые аспекты модели (3), (4), мы предлагаем рассмотреть следующую ее аппроксимацию. Считая, что стационарный профиль концентрации (7) достаточно хорошо приближает близкие профили, рассмотрим функции следующего вида $x(\xi) = 1 - \exp(-a\xi)$, зависящие от параметра a . Более удобным в качестве параметра для нас будет значение $x(1)$. В уравнениях (3) встречаются величины $\frac{\partial x}{\partial \xi}$ и $\int_0^1 (1-x)d\xi$. Вычислим их на нашем классе функций

$$\frac{\partial x}{\partial \xi} = a \exp(-a\xi), \quad \frac{\partial x(1)}{\partial \xi} = (x(1)-1)\ln(1-x(1)),$$

$$\int_0^1 (1-x)d\xi = -x(1)/\ln(1-x(1)).$$

Подставив эти величины в (3), получим систему двух обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= (1-x)(\ln(1-x)+k(\theta)), \\ \frac{d\theta}{dt} &= \mu(-\theta + \theta_0 - Qk(\theta)x/\ln(1-x)), \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

где $x=x(1)$. Для этой системы имеем инвариантное притягивающее множество, определяемое неравенствами

$$1 - \exp(-k(\theta_0)) \leq x \leq 1 - \exp(-k(\theta_0 + Qk_1 \exp(1/b))),$$

$$\theta_0 \leq \theta \leq \theta_0 + Qk_1 \exp(1/b).$$

Это множество вместе с изоклиной вертикальных наклонов изображено на рис.4. Особые точки системы (10) находятся из условий:

$$x_* = 1 - \exp(-k(\theta_*)),$$

$$-\theta_* + \theta_0 + Q[1 - \exp(-k(\theta_*))] = 0, \quad (11)$$

где второе уравнение совпадает с (8). Матрица Якоби в особой точке (x_*, θ_*) имеет вид

$$\begin{pmatrix} -1 & \mu \left[\frac{Q(k'(\theta_s) - H)}{k(\theta_s)} - 1 \right] \\ \frac{\mu Q}{k(\theta_s)} [1 + k(\theta_s) - \exp(k(\theta_s))] & H \end{pmatrix},$$

где $H = k'(\theta_s) \exp(-k(\theta_s))$.

Собственные числа λ_1, λ_2 находятся из уравнения

$$\lambda^2 + \left[1 + \mu \left(1 - \frac{Q(k'(\theta_s) - H)}{k(\theta_s)} \right) \right] \lambda + \mu(1 - QH) = 0.$$

Собственные векторы определяются из условия $x_\lambda = \frac{H e_\lambda}{1 - \lambda}$, где λ - собственное число. В нулевом приближении эти векторы совпадают с собственными векторами основной модели.

Условие $\Delta = \mu(1 - QH) < 0$ означает, что мы находимся в среднем стационарном состоянии [5]. Таким образом, среднее стационарное состояние всегда седло.

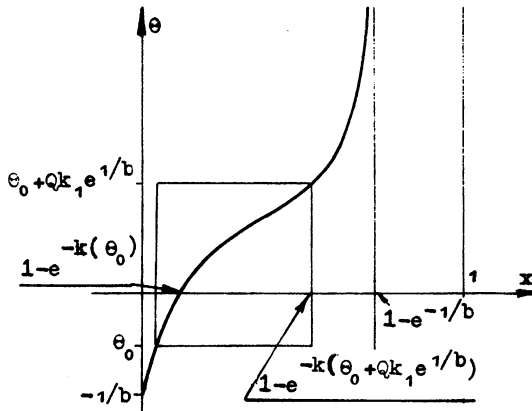


Рис. 4

Система (10) обладает достаточно сложным параметрическим портретом. Рассмотрим некоторые элементы этого портрета, связанные с локальными бифуркациями. Для этого в окрестности особой точки (x_s, θ_s) введем новые координаты $\kappa = x - x_s, \eta = (1 - x)(\ln(1 - x) + k(\theta))$. В этих координатах особой точкой будет начало координат, а систе-

ма будет выглядеть следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \dot{\eta} &= \eta, \\ \dot{\eta} &= a_1 \eta + a_2 \eta^2 + a_3 \eta^3 + b_0 \eta + b_1 \eta \eta + \eta^4 A(\eta) + \eta^2 \eta B(\eta, \eta), \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

где $A(\eta)$ и $B(\eta, \eta)$ — гладкие функции,

$$a_1 = -\Delta, \quad a_2 = (1-w)(\Delta - \mu/2) \exp(k(\theta_s)),$$

$$a_3 = [\mu(w-1)(w-1/2) - \mu(2 - k''(\theta_s)/(k'(\theta_s))^2) - \Delta w(1-2k'(\theta_s) - k''(\theta_s))/2] \exp(2k(\theta_s)),$$

$$b_0 = \mu \left[\frac{Q(k'(\theta_s) - H)}{k(\theta_s)} - 1 \right] - 1,$$

$$b_1 = - \left\{ w\Delta + \frac{\mu Q k'(\theta_s)}{k(\theta_s)} [1 + (1 - \exp(-k(\theta_s))) (k(\theta_s))^{-1} - w - 1] \right\} \exp(k(\theta_s)),$$

$$w = k''(\theta_s)/(k'(\theta_s))^2.$$

Условие $a_1 = 0$ или

$$Q = \frac{\exp(-k(\theta_s))}{k'(\theta_s)} \quad (13)$$

означает, что начало координат есть кратная особая точка системы (12) (и тем самым (x_s, θ_s) — кратная особая точка системы (10)). Равенства (11), (13) определяют в пространстве параметров системы поверхность коразмерности 1 — "поверхность кратности". При переходе в пространстве параметров через эту поверхность число особых точек системы изменяется на 2. Если выполнено (13) и, кроме того, $a_2 = 0$, т.е.

$$k''(\theta_s) = (k'(\theta_s))^2, \quad (14)$$

то особая точка (x_s, θ_s) будет трехкратной. Заметим, что при выполнении (11), (13), (14) имеет место соотношение

$$a_3 = -\mu \frac{\exp(2k(\theta_s))}{12} \left(1 + \frac{1}{k^2(\theta_s)} \right) < 0.$$

Отсюда следует, что трехкратная особая точка у нашей системы всегда не является седлом.

Условия $a_1 < 0$ и $b_0 = 0$, т.е.

$$Q < \exp(k(\theta_0))/k'(\theta_0), \quad (15)$$

$$\mu = \frac{k(\theta_0)}{Q(k'(\theta_0) - H) - k(\theta_0)}, \quad (16)$$

совместно с (II) определяют в пространстве параметров поверхность N коразмерности 1, отвечающую бифуркации Андронова-Хопфа. Переход в пространстве параметров через поверхность N влечет за собой исчезновение или возникновение предельного цикла. Устойчивость возникающего предельного цикла определяется знаком ляпуновской величины соответствующего сложного фокуса. Выражение для ляпуновской величины получается громоздким и малоинформативным. Однако в некоторых случаях вопрос решается сравнительно просто. Рассмотрим поверхность R коразмерности 2, определяемую равенствами (II), (12), (15). Точки этой поверхности (R - край поверхности N) отвечают бифуркации коразмерности 2 - "двукратные нейтральные равновесия", полностью изученной в [6] (см. также [7]). Для нас существенно, что для точек поверхности N из некоторой окрестности поверхности R знак ляпуновской величины соответствующего сложного фокуса совпадает со знаком произведения $a_2 b_1$. Таким образом, если вектор параметров p_1 принадлежит R и

$$[k''(\theta_0) - (k'(\theta_0))^2] \{1 + [1 - \exp(-k(\theta_0))] [(k(\theta_0))^{-1} - 1 - w]\} > 0,$$

то в параметрической окрестности p_1 есть точки, для которых система (10) обладает устойчивым предельным циклом. Еще отметим, что в окрестности точек, где $a_2 b_1 = 0$, обязательно имеются точки, лежащие на N , для которых ляпуновская величина соответствующей особой точки равна нулю. Тем самым параметрический портрет системы (10) содержит бифуркационную поверхность L коразмерности 2, отвечающую обращению в нуль первой ляпуновской величины. Край поверхности L состоит из объединения поверхностей коразмерности 3: W и T . Поверхность W , определяемая условиями (II), (12), (15) и $b_1 = 0$, отвечает бифуркации "двукратное нейтральное равновесие с дополнительным вырождением". Эта бифуркация изучена в [8]. Поверхность T задается равенствами (II), (12), (14), (15). Точки этой поверхности отвечают бифуркации "трехкратное нейтральное равнове-

сие". Анализ особой точки показывает, что она может быть как сложным фокусом, так и особой точкой с эллиптической областью в зависимости от того меньше или больше нуля выражение

$$6b^2[1-k(\theta_0)-\exp(-k(\theta_0))]^2 - (1+k^2(\theta_0))(1-k(\theta_0))^2.$$

Варианты подобных бифуркаций рассмотрены в [7,9].

На рис.5 изображена кривая, являющаяся срезом поверхности N при фиксированных k_1, b, Q ($k_1 = 1, b = 0.07, Q = 2$). Буквой L_0 отмечена точка, лежащая на поверхности L . На участке CL_0 первая ляпуновская величина отрицательна, а на участке L_0B - положительна. Таким образом, при пересечении участка CL_0 "снизу вверх" у системы возникает устойчивый предельный цикл. В таблице для этого среза, кроме значений параметров, приведены координаты соответствующей особой точки, мнимая часть собственного числа и ляпуновская величина. На рис.6 изображен устойчивый предельный цикл при следующих значениях параметров: $\theta_0 = -1, \mu = 2$ (точка p на рис.б). При численных расчетах нами были использованы программы для качественного исследования систем дифференциальных уравнений, созданные в НИВЦ АН СССР г.Пушкино [10].

Т а б л и ц а

μ	θ_0	x_0	e_0	$\text{Im}\lambda$	L_1
1.616	-.6608	.958	1.255	1.12	-.478
1.614	-.694	.953	1.212	1.1	-.451
1.615	-.730	.947	1.164	1.09	-.425
2.102	-1.128	.784	.440	.89	-.182
2.517	-.191	.724	.257	.89	0
3.524	-1.255	.645	.035	.97	.583
5.126	-1.296	.588	-.121	1.15	1.64
6.927	-.318	.556	-.206	1.34	2.94

Значения параметров (μ, θ_0) , при которых происходит бифуркация Андронова-Хопфа, $k_1 = 1, b = 0.07, Q = 2$, (x_0, θ_0) - координаты особой точки, $\text{Im}\lambda$ - мнимая часть собственного числа, L_1 - значение первой ляпуновской величины в (x_0, θ_0) .

Возвращаясь к системе (3), (4), мы можем с большей степенью вероятности заключить, что характерные черты поведения системы

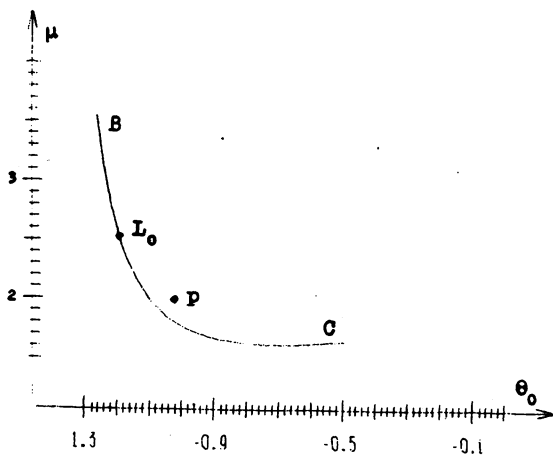


Рис. 5. Срез поверхности \mathcal{N} при $k_1 = 1$, $b = 0,07$, $Q = 2$.

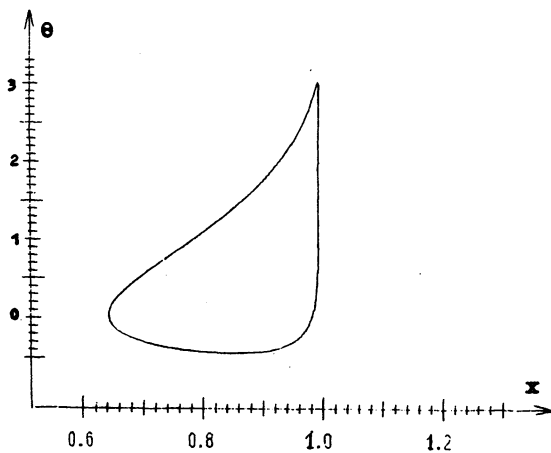


Рис. 6. Устойчивый предельный цикл при $\theta_0 = -1$, $\mu = 2$.

(3), сохраняются и для модели (3), (4). Действительно, в этой системе две крайние особые точки либо устойчивы, либо локально существует в окрестности каждой двумерное центральное притягивающее многообразие, на котором происходит бифуркация Андронова-Хопфа. Следовательно, анализ двумерной аппроксимации может достаточно емко характеризовать поведение основной модели. Это относится, в частности, к рождению устойчивых предельных циклов в системе (3), (4) при определенных значениях параметров.

Л и т е р а т у р а

1. ВЕРШНИН В.В., КИСЕЛЕВ О.В., КРЕНДЕЛЕВ С.Ф. Устойчивость стационарных решений уравнений, описывающих процессы в химическом реакторе вытеснения с учетом диффузии. - В кн.: Качественный анализ решений дифференциальных уравнений. Новосибирск, 1985, с.37-50.

2. ВОЛЬТЕР В.В., САЛЫНИКОВ И.Е. Устойчивость режимов работы химических реакторов. - М.: Химия, 1972. - 198 с.

3. ВАГАНОВ Д.А., АБРАМОВ В.Т., САМОИЛЕНКО Н.Г. Определение областей существования колебательных процессов в реакторах идеального смешения. - Докл. АН СССР, 1977, т.234, с. 640-643.

4. МАРСДЕН Дж., МАК-КРАКЕН М. Бифуркация рождения цикла и ее приложения. - М.: Мир, 1980. - 368 с.

5. ВЕРШНИН В.В., КИСЕЛЕВ О.В. Математическая модель реактора вытеснения с интегральным учетом тепловыделения (стационарные состояния, устойчивость). - Новосибирск, Б.и. 1983. - 26 с. (Препринт/ИМ СО АН СССР, № 41).

6. БОГДАНОВ В.И. Версальная деформация особой точки векторного поля на плоскости в случае двух нулевых собственных чисел. - В кн.: Труды семинара им.И.Г. Петровского. Вып. 2. М., 1976, с.37-65.

7. БАЗЫКИН А.Д., КУЗНЕЦОВ Ю.А., ХИБНИК А.И. Бифуркационные диаграммы динамических систем на плоскости. - Пушкино, 1985. - 56 с. - (Информационный материал).

8. БЕРЕЗОВСКАЯ Ф.С., ХИБНИК А.И. Бифуркация динамической системы 2-го порядка с двумя нулевыми собственными числами и дополнительным вырождением. - В кн.: Методы качественной теории дифференциальных уравнений. Горький, 1985, с.128-138.

9. ВОЛОКИТИН Е.П., ТРЕСКОВ С.А. Математическая модель реакции каталитического окисления (трехпараметрический анализ). - Новосибирск. Б.и. 1986. - 24 с. (Препринт/ИМ СО АН СССР, № 4).

10. ХИБНИК А.И., ШНОЛЬ Э.Э. Программы для качественного исследования дифференциальных уравнений. - Пушкино, 1982. - 16 с. - (Информационный материал).

Поступила в ред.-изд.отд.

10 июня 1986 года