

## ПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ РЕАКТОРОВ ИДЕАЛЬНОГО СМЕШЕНИЯ И ВЫТЕСНЕНИЯ

В. И. Быков, С. Б. Цыбенова\*

Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036 Красноярск

\*Красноярский государственный технический университет, 660074 Красноярск

Для базовой модели теории горения с размерными параметрами — динамической модели экзотермической реакции первого порядка в проточном реакторе идеального смешения — реализована процедура параметрического анализа. Построены параметрические зависимости стационарных состояний от размерных параметров, кривые кратности и нейтральности стационарных состояний, параметрические и фазовые портреты системы. Выделены области множественности стационарных состояний и автоколебаний, а также область технологически безопасных режимов. Проведено сопоставление режимов горения в реакторах идеального смешения и вытеснения.

### ВВЕДЕНИЕ

В [1, 2] проведен параметрический анализ моделей с безразмерными параметрами. Его результаты полезны в методическом и теоретическом плане. Однако при моделировании конкретных процессов и реакторов возникает необходимость численного и качественного анализа моделей, содержащих параметры, имеющие вполне определенный физико-химический смысл. Поэтому процедуру параметрического анализа необходимо применять и для конкретных математических моделей, отвечающих заданной геометрии реактора и его теплофизическим характеристикам.

В данной работе технология параметрического анализа проиллюстрирована на размерной модели реактора идеального смешения, в котором протекает единственная экзотермическая реакция первого порядка. Установлена связь между результатами параметрического анализа безразмерных моделей и моделей, содержащих размерные параметры. Кроме того, исследуется связь между динамическими свойствами реактора идеального смешения (сферического) и реактора идеального вытеснения (цилиндрического), которые обладают близкими физико-технологическими характеристиками и в которых осуществляется одна и та же химическая реакция.

### ПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РАЗМЕРНОЙ МОДЕЛИ

Математическая модель сферического реактора идеального смешения (реактор Франк-

Каменецкого) имеет вид

$$V \frac{dX}{dt} = -Vk(T)X + q(X^0 - X) = f(X, T),$$

$$c_p \rho V \frac{dT}{dt} = (-\Delta H)Vk(T)X +$$

$$+ qc_p \rho (T_0 - T) + hS(T_w - T) = g(X, T),$$

где  $V$  — объем реактора, см<sup>3</sup>;  $k(T) = k^0 \exp(-E/RT)$  — константа скорости реакции, с<sup>-1</sup>;  $k^0$  — предэкспоненциальный множитель;  $X, X^0$  — текущая и входная концентрации реагента, моль/см<sup>3</sup>;  $T, T_0$  — текущая и входная температуры смеси, К;  $q$  — объемный расход, см<sup>3</sup>/с;  $\rho$  — плотность смеси, моль/см<sup>3</sup>;  $c_p$  — теплоемкость реакционной смеси, Дж/(моль·К);  $S$  — площадь поверхности теплообмена, см<sup>2</sup>;  $h$  — коэффициент теплопередачи через стенку реактора, Дж/(см<sup>2</sup>·с·К);  $(-\Delta H)$  — тепловой эффект реакции, Дж/моль;  $t$  — астрономическое время, с;  $T_w$  — температура стенок реактора, К.

Параметрический анализ размерной модели (1) проводится по схеме, отработанной на безразмерных моделях [1, 2].

**Стационарные состояния.** Из равенства нулю правых частей системы дифференциальных уравнений (1) имеем систему стационарности:

$$-Vk(T)X + q(X^0 - X) = 0,$$

$$(-\Delta H)Vk(T)X + qc_p \rho (T_0 - T) + hS(T_w - T) = 0.$$

Отсюда

$$X = \frac{qc_p\rho(T_0 - T) + hS(T_w - T)}{q(-\Delta H)} + X^0. \quad (3)$$

Подставив (3) во второе уравнение системы (2), получим уравнение для определения стационарных значений температуры:

$$\begin{aligned} (-\Delta H)V_k(T)X^0 + \frac{V_k(T)}{q} \left( qc_p\rho(T_0 - T) + \right. \\ \left. + hS(T_w - T) \right) + qc_p\rho(T_0 - T) + \\ \left. + hS(T_w - T) = 0. \quad (4) \right. \end{aligned}$$

В качестве базового набора параметров модели (1) взяты величины, отвечающие экспериментальным данным по окислению углеводородов в реакторе идеального смешения [3, 4]. При параметрическом анализе некоторые параметры варьировались в окрестности значений, указанных в таблице. В данной работе в число варьируемых параметров включены входные температура и концентрация, коэффициент теплопередачи.

**Параметрические зависимости.** Следуя общей схеме параметрического анализа [2], выпишем из (4) зависимости, обратные искомым зависимостям стационарных значений температуры и концентрации от параметров системы:

$$\begin{aligned} X^0(T) = \frac{1}{(-\Delta H)V_k(T)} \left[ c_p\rho(T - T_0)(q + V_k(T)) + \right. \\ \left. + hS(T - T_w) \left( 1 + \frac{V_k(T)}{q} \right) \right], \quad (5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_0(T) = T - \frac{1}{c_p\rho(q + V_k(T))} \left[ (-\Delta H)V_k(T)X^0 - \right. \\ \left. - hS(T - T_w) \left( 1 + \frac{V_k(T)}{q} \right) \right]. \quad (6) \end{aligned}$$

Аналогично (5), (6) достаточно просто написать зависимости от других параметров:  $V(T)$ ,  $S(T)$ ,  $T_w(T)$ ,  $h(T)$ ,  $\rho(T)$  и др. Примеры построения параметрических зависимостей  $T(X^0)$ ,  $T(T_0)$  в соответствии с формулами (5), (6) даны на рис. 1. Здесь приведены кривые, которые характеризуются наличием участка

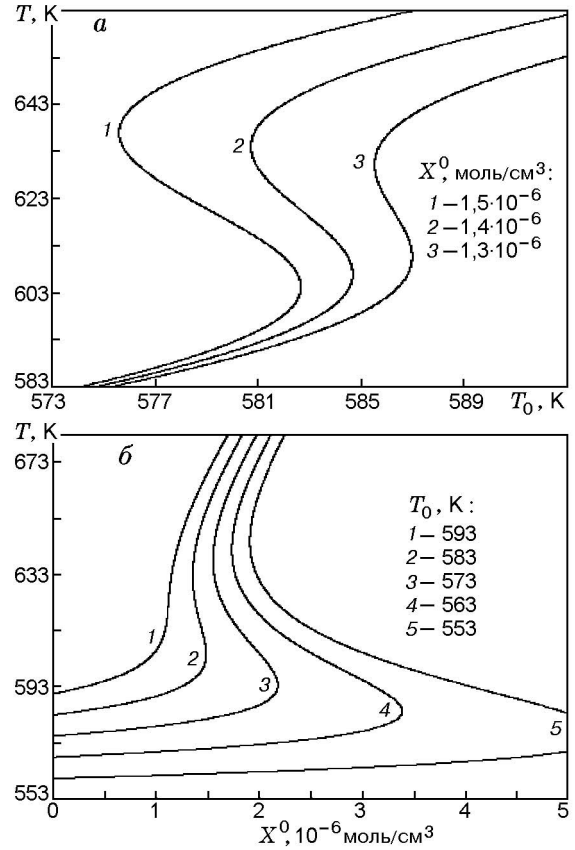


Рис. 1. Параметрические зависимости стационарной температуры для модели (1) от параметров  $T_0$  и  $X^0$

неоднозначной зависимости, что отвечает множественности стационарных состояний (Ст.С). При варьировании второго параметра (кривые 3–5 на рис. 1, б) область множественности Ст.С существенно меняется либо вообще исчезает (кривая 1). Построенные параметрические зависимости позволяют оценить условия существования гистерезисов и критических явлений для рассмотренного типа реактора при изменении различных параметров. Зависимости стационарных значений концентраций  $X$  от параметров строятся на основе соотношения (3), где вместо  $T$  подставляются соответствующие зависимости  $T(X^0)$ ,  $T(T_0)$  и т. п.

Кривая зависимости стационарной температуры от параметра (например, кривая 2 на рис. 1, а) для случая множественности Ст.С имеет три ветви — низких, высоких и средних температур. Переход с одной ветви на другую осуществляется скачкообразно. При переходе через некоторое критическое значение происходит резкое изменение температуры реактора:

Базовый набор параметров модели (1)

Физические параметры	Значения параметров
Входная температура, $T_0$	583 К
Входная концентрация вещества, $X^0$	$1,4 \cdot 10^{-6}$ моль/см <sup>3</sup>
Плотность смеси, $\rho$	$3 \cdot 10^{-5}$ моль/см <sup>3</sup>
Теплоемкость смеси, $c_p$	2166,2 Дж/(моль·К)
Объем реактора, $V$	588,75 см <sup>3</sup>
Площадь поверхности реактора, $S$	471 см <sup>2</sup>
Коэффициент теплопередачи, $h$	$8 \cdot 10^{-3}$ Дж/(см <sup>2</sup> ·с·К)
Теплота реакции, $(-\Delta H)$	$4,87 \cdot 10^6$ Дж/моль
Объемный расход, $q$	180 см <sup>3</sup> /с
Температура стенок реактора, $T_w$	583 К
Энергия активации, $E$	$1,89 \cdot 10^5$ Дж/моль
Универсальная газовая постоянная, $R$	8,31 Дж/(моль·К)
Предэкспоненциальный множитель, $k^0$	$2,3 \cdot 10^{15}$ с <sup>-1</sup>

он либо «зажигается», либо «погасает».

**Устойчивость Ст.С** определяется корнями характеристического уравнения

$$\lambda^2 - \sigma\lambda + \Delta = 0, \quad (7)$$

где  $\sigma = a_{11} + a_{22}$ ,  $\Delta = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$ ,  $a_{ij}$  — элементы матрицы Якоби правых частей системы (1), вычисленные в Ст.С:  $a_{11} = \partial f/\partial X$ ,  $a_{12} = \partial f/\partial T$ ,  $a_{21} = \partial g/\partial X$ ,  $a_{22} = \partial g/\partial T$ . Ст.С неустойчиво, если  $\Delta < 0$ . Если  $\Delta > 0$ , то Ст.С устойчиво при  $\sigma < 0$  и неустойчиво при  $\sigma > 0$ . Значит, при  $\Delta = 0$  или  $\sigma = 0$  происходит изменение типа устойчивости Ст.С и их числа, т. е. бифуркация. Поэтому важную информацию о числе и типе Ст.С дают условия равенства нулю значений  $\Delta$  и  $\sigma$ . Эти равенства позволяют совместно с уравнением стационарности (4) построить в различных областях параметров бифуркационные кривые — кратности Ст.С ( $\Delta = 0$ ) и нейтральности Ст.С ( $\sigma = 0$ ).

**Бифуркационные кривые.** Так же, как и для безразмерных моделей [1], для модели (1) выпишем уравнения для построения кривых локальных бифуркаций  $L_\Delta$  ( $\Delta = 0$ ) и  $L_\sigma$  ( $\sigma = 0$ ) в различных плоскостях. Рассматривая, например, уравнение  $\Delta(X^0, V) = 0$  совместно с (4), можно получить зависимость  $X^0(T, V)$ , которая вместе с (5) в плоскости параметров  $(X^0, V)$  задает кривую кратности.

*Кривые кратности:*

$$L_\Delta(X^0, V):$$

$$\left\{ \begin{array}{l} X^0(T, V) = \frac{1}{(-\Delta H)Vk(T)} \left[ c_p \rho (T - T_0) \times \right. \\ \left. \times (q + Vk(T)) + hS(T - T_w) \left( 1 + \frac{Vk(T)}{q} \right) \right], \\ V(T) = \frac{E}{RT^2} \left( \frac{q^2(T - T_0) + qA(T - T_w)}{k(T)(q + A)} \right) - \\ - \frac{q}{k(T)}, \end{array} \right.$$

$$L_\Delta(X^0, T_0): \left\{ \begin{array}{l} X^0 = X^0(T, T_0), \\ T_0 = T - \frac{A}{q}(T - T_w) + \\ + \frac{(q + Vk(T))(q + A)}{Eq^2/RT^2}, \end{array} \right. \quad (8)$$

$$L_\Delta(T_0, \rho):$$

$$\left\{ \begin{array}{l} T_0(T, \rho) = T - \frac{1}{c_p \rho (q + Vk(T))} \left[ (-\Delta H) \times \right. \\ \left. \times Vk(T)X^0 - hS(T - T_w) \left( 1 + \frac{Vk(T)}{q} \right) \right], \\ \rho(T) = \frac{E}{RT^2} \frac{qk(T)(-\Delta H)X^0}{c_p(q + Vk(T))(k(T) + q/V)} - \\ - \frac{hS}{qc_p}, \end{array} \right.$$

где  $A = hS/c_p\rho$ .

Кривые нейтральности:

$L_\sigma(X^0, T_0)$ :

$$\begin{cases} X^0 = X^0(T, T_0), \\ T_0(T) = T - \frac{A}{q} \left( \frac{1}{B} - (T - T_w) \right) - \\ \qquad \qquad \qquad - \frac{1}{qB} (2q + Vk(T)), \end{cases} \quad (9)$$

$$L_\sigma(X^0, V): \begin{cases} X^0 = X^0(T, V), \\ V = \frac{1}{k(T)} (A(B(T - T_w) - 1) + \\ \qquad \qquad \qquad + q(B(T - T_0) - 2)), \end{cases}$$

$L_\sigma(T_0, \rho)$ :

$$\begin{cases} T_0 = T_0(T, \rho), \\ \rho(T) = \frac{Bq(-\Delta H)k(T)X^0}{c_p(q + Vk(T))(k(T) + 2q/V) - \frac{hS}{c_p(2q + Vk(T))}}, \end{cases}$$

где  $A = hS/c_p\rho$ ,  $B = E/RT^2$ ,  $E$  — энергия активации,  $R$  — универсальная газовая постоянная.

Примеры построения бифуркационных кривых (8), (9) приведены на рис. 2. Серия кривых кратности  $L_\Delta$  в плоскости  $(X^0, V)$  при варьировании третьего параметра ( $T_0$ ) дана на рис. 2,а. Внутри области, ограниченной кривой  $L_\Delta$ , существуют три Ст.С, вне этой области — одно Ст.С. Из рисунка видно, что при прочих равных условиях область множественности Ст.С имеет наибольшие размеры при относительно низких входных температурах. Размеры области, ограниченной кривой нейтральности  $L_\sigma$  (см. рис. 2,б), также существенно зависят от параметра  $T_0$ . При переходе через эту границу Ст.С меняет свой тип устойчивости. Совмещение на одной плоскости параметров кривых  $L_\Delta$  и  $L_\sigma$  образует так называемый параметрический портрет системы. Взаимное расположение кривых  $L_\Delta$  и  $L_\sigma$  (см. рис. 3) определяет разбиение этой плоскости на подобласти с разным числом Ст.С (одно или три) и типом их устойчивости (устойчивое или неустойчивое Ст.С). На рис. 3 интересно выделить область единственного и неустойчивого Ст.С (внутри петли кривой

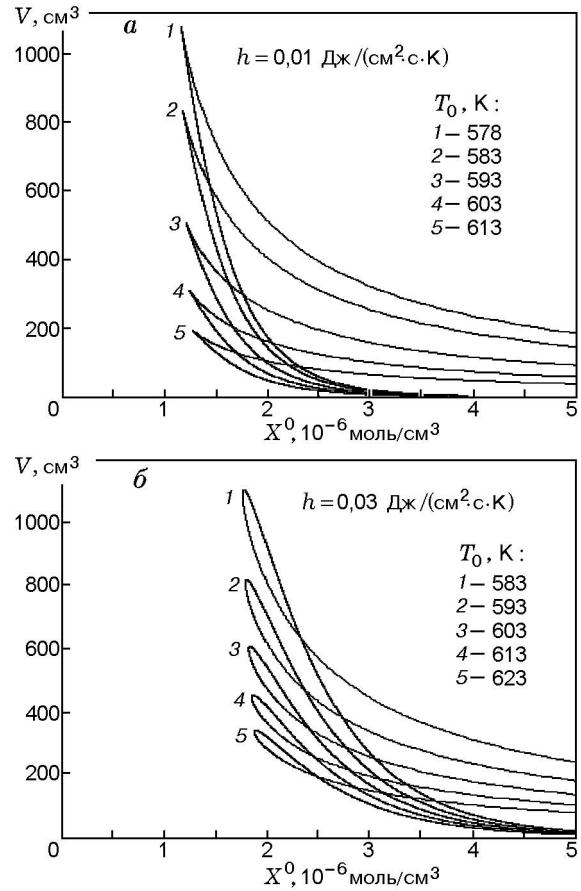


Рис. 2. Бифуркационные кривые кратности  $L_\Delta$  (а) и нейтральности  $L_\sigma$  (б) для модели (1) в плоскости параметров  $(X^0, V)$

нейтральности  $L_\sigma$ ), что определяет существование в системе (1) автоколебательных решений. Вне областей, ограниченных кривыми  $L_\Delta$ ,  $L_\sigma$ , Ст.С единственно и устойчиво.

Каждой из подобластей параметрического портрета системы (1) (см., например, рис. 3) отвечает свой тип фазового портрета, который отражает особенности динамики системы и взаимного расположения ее фазовых траекторий при варьировании начальных данных. На рис. 4 приведен фазовый портрет, отвечающий случаю единственного и неустойчивого Ст.С, что для системы (1) гарантирует существование предельного цикла. При начальных данных, расположенных вне этого цикла, все фазовые траектории «наматываются» на него при  $t \rightarrow \infty$ .

При необходимости построения бифуркационных кривых типа (8), (9) в других плоскостях параметров можно воспользоваться пред-

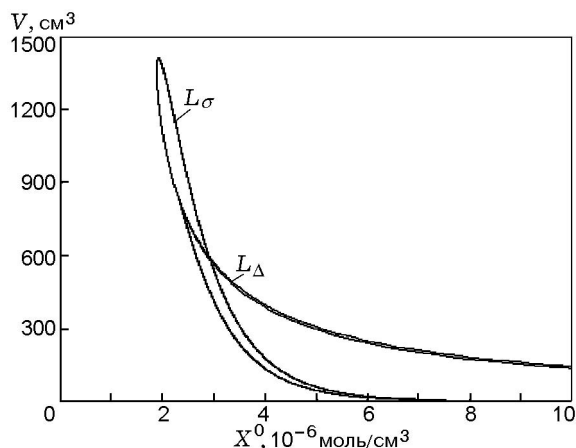


Рис. 3. Параметрический портрет для модели (1) в плоскости  $(X^0, V)$  при  $h = 0,04$  Дж/(см<sup>2</sup> · с · К),  $T_0 = 583$  К

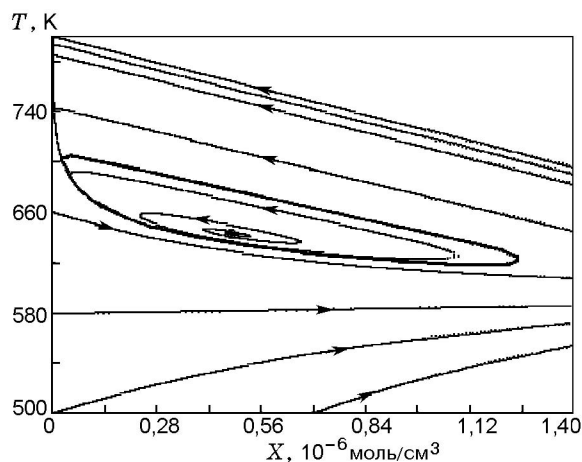


Рис. 4. Фазовый портрет системы (1) для единственного неустойчивого Ст.С при  $V = 1500$  см<sup>3</sup>,  $h = 0,1$  Дж/(см<sup>2</sup> · с · К),  $X^0 = 4,5 \cdot 10^{-6}$  моль/см<sup>3</sup>:

внутри предельного цикла (толстая линия) одно неустойчивое Ст.С, стрелками указано направление движения по фазовым траекториям

ложенной в [1, 2] геометрической процедурой, основанной на знании явных выражений параметрических зависимостей типа (5), (6), либо вычислительным алгоритмом метода продолжения по параметру, модифицированным нами для случая одного уравнения с параметром  $G(x, \alpha) = 0$ .

### СВЯЗЬ МЕЖДУ БЕЗРАЗМЕРНЫМИ И РАЗМЕРНЫМИ МОДЕЛЯМИ

Имея параметрический портрет модели с

безразмерными параметрами, в некоторых случаях можно достаточно просто построить аналогичный портрет в плоскости размерных параметров. Проиллюстрируем это на модели Ариса — Амундсона, популярной в теории химических реакторов [5, 6]:

$$\frac{dx}{dt} = f(y)(1-x) - x, \quad (10)$$

$$\frac{dy}{dt} = \beta f(y)(1-x) - s(y-1),$$

где  $x, y$  — безразмерные концентрация и температура,  $f(y) = \text{Da} \exp(\gamma(1-1/y))$ . Исходя из выражений для безразмерных параметров

$$\gamma = \frac{E}{RT_0}, \quad s = 1 + \frac{hS}{\rho c_p T_0},$$

$$\text{Da} = \frac{V}{q} k(T_0), \quad \beta = \frac{(-\Delta H)X^0}{\rho c_p T_0},$$

можно, например, получить

$$V = \frac{q}{k(T_0)} \text{Da}, \quad X^0 = \frac{\rho c_p T_0}{(-\Delta H)} \beta. \quad (11)$$

Для построения параметрического портрета в плоскости  $(V, X^0)$  по формулам (11) с использованием параметрического портрета в плоскости безразмерных параметров  $(\text{Da}, \beta)$  необходимо задать безразмерные параметры  $\gamma$  и  $s$ , при которых получен последний параметрический портрет. Подставив вычисленные значения  $\text{Da}$  и  $\beta$  в выражение, связывающее безразмерные параметры с размерными (11), получим бифуркационные значения размерных параметров  $V$  и  $X^0$ . Далее по этим значениям  $V$  и  $X^0$  строим параметрический портрет в плоскости  $(V, X^0)$ .

Пример построения параметрического портрета для модели (1) в выделенной плоскости  $(V, X^0)$  на основе анализа соответствующей безразмерной модели (10) в плоскости  $(\text{Da}, \beta)$  дан на рис. 5. В отличие от рис. 3 параметрический портрет на рис. 5 построен для несколько отличающихся значений параметров. В данном случае область автоколебательных режимов (внутри петли кривой  $L_\sigma$ ) имеет большие размеры; кривые  $L_\Delta, L_\sigma$  построены на основе параметрического портрета системы (10), приведенного в [7, 8]. Построение параметрического портрета в других плоскостях размерных параметров можно

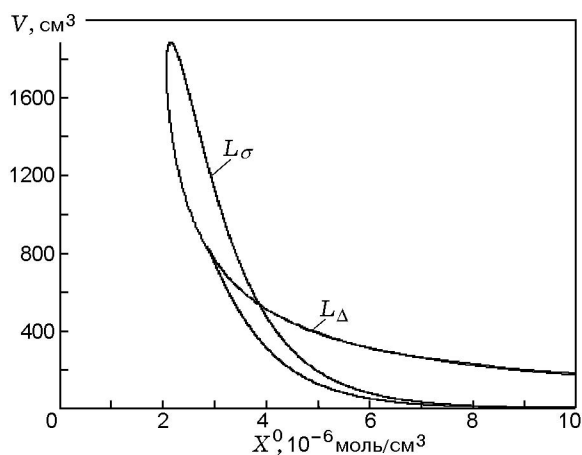


Рис. 5. Параметрический портрет в плоскости  $(X^0, V)$  для модели (1), построенный на основе параметрического портрета для модели (10) при  $h = 0,055$  Дж/(см<sup>2</sup> · с · К):  
бифуркационные кривые  $L_\Delta, L_\sigma$  аналогичны кривым на рис. 3

проводить по аналогичной схеме, исходя из результатов параметрического анализа безразмерной модели, однако в некоторых случаях могут возникнуть технические трудности из-за того, что один и тот же размерный параметр может фигурировать в нескольких безразмерных параметрах. Тогда необходим прямой параметрический анализ размерной модели (1).

### ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГРАНИЦ ЗАЖИГАНИЯ

Одной из задач определения границ технологической безопасности химико-технологических процессов является определение пределов существования низко- и высокотемпературных режимов. Исследование временных зависимостей и соответствующих фазовых портретов показывает, что Ст.С может устанавливаться с достаточно большим динамическим «забросом». Даже если существует низкотемпературное Ст.С, все равно имеется обширная область начальных данных, при которых переход системы в Ст.С происходит с большим разогревом в ходе реакции. Поэтому в данном параграфе на примере размерных и безразмерных моделей на одной из плоскостей параметров находится область технологически безопасных режимов, которая характеризуется монотонным установлением Ст.С.

Рассмотрим модель Зельдовича — Семёнова для реакции первого порядка [1, 2]. Соот-

ветствующий параметрический портрет представлен на рис. 6 работы [1]. Анализ фазового портрета динамической системы, имеющей низкотемпературное Ст.С, показывает, что существует область начальных данных, для которых процесс установления решений к Ст.С является монотонным. Вне этой области переход системы от начальных данных к Ст.С осуществляется с заметным разогревом системы. Вполне возможно, что резкий разогрев системы в какой-то момент времени может оказаться нежелательным с точки зрения пожаровзрывобезопасности. Поэтому границу, разделяющую на плоскости параметров режимы с низко- и высокотемпературным Ст.С, можно назвать границей технологической или пожарной безопасности.

Конкретные иллюстрационные расчеты были проведены нами и для размерной модели (1) реактора идеального смешения, в котором протекает единственная экзотермическая реакция. В качестве режимных параметров выбрана плоскость  $(V, X^0)$ . Соответствующий параметрический портрет представлен на рис. 5. Граница технологической безопасности в выделенной плоскости параметров располагается аналогично рис. 6 работы [1]. Она отвечает относительно низким значениям входной концентрации  $X^0$  и объема  $V$ , т. е. лежит ниже и левее кривых  $L_\Delta, L_\sigma$ . Возможность построения бифуркационных кривых по явным формулам типа (8), (9) позволяет исследовать влияние различных характеристик реактора на расположение названной границы.

Таким образом, анализ параметрических и фазовых портретов соответствующей математической модели позволяет определить области технологически безопасных режимов осуществления процессов.

### РЕАКТОР ИДЕАЛЬНОГО ВЫТЕСНЕНИЯ

Кроме модели реактора идеального смешения, рассмотренной выше, в практике математического моделирования процессов горения широко распространена модель реактора идеального вытеснения, описывающая процессы в трубчатых реакторах. Естественно поставить вопрос о связи динамических характеристик реакторов идеального смешения и вытеснения, в которых протекает одна и та же реакция, а теплофизические и геометрические характеристики близки. В качестве примера исследуем

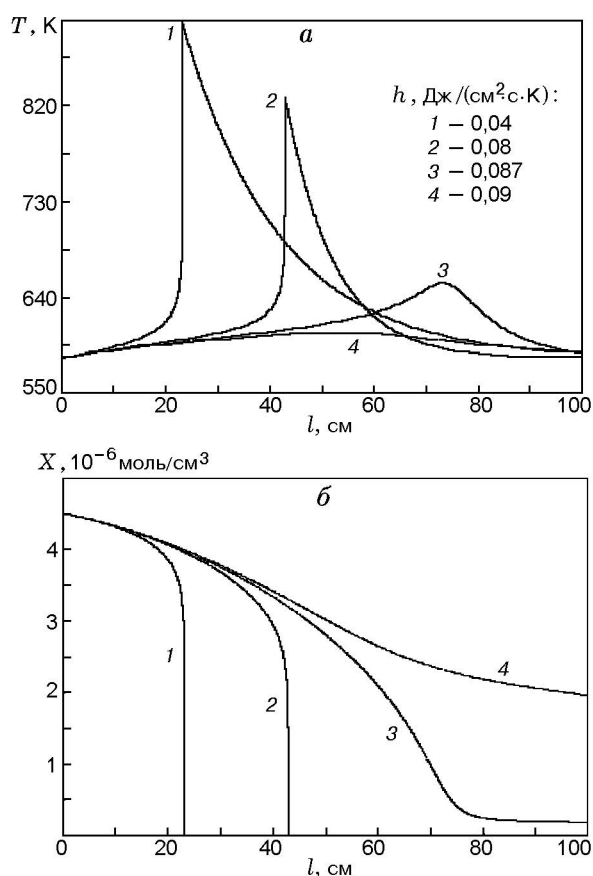


Рис. 6. Профили температуры (а) и концентрации (б) по длине реактора (модель (12)) при  $u = 9,171975$  см/с,  $T_0 = 583$  К,  $X^0 = 4,5 \cdot 10^{-6}$  моль/см<sup>3</sup>

математические модели для реакции первого порядка и установим связь между характеристиками динамических режимов реактора идеального смешения и профилями концентрации и температуры в стационарном реакторе идеального вытеснения.

Математическая модель реактора идеального вытеснения, в котором осуществляется единственная экзотермическая реакция, в стационарном случае имеет вид

$$u \frac{dX}{dl} = -k(T)X, \quad (12)$$

$$c_p \rho u \frac{dT}{dl} = (-\Delta H)k(T)X + \frac{4h}{d}(T_w - T),$$

где  $l$  — текущая длина реактора;  $u$  — скорость подачи реакционной смеси,  $d$  — диаметр реактора.

В модели (12) текущая длина реактора меняется в пределах  $0 \leq l \leq L$ , где  $L$  — общая длина трубчатого реактора. Условия на входе в реактор имеют вид

$$X(0) = X^0, \quad T(0) = T_0.$$

Объемный расход связан со скоростью смеси формулой  $u = 4q/\pi d^2$ . Значения теплофизических параметров и пределов их изменения взяты из модели реактора идеального смешения (см. таблицу).

Диаметр и длину реактора выбирали исходя из требования, чтобы объем реактора идеального вытеснения соответствовал объему реактора идеального смешения. Пример сопоставления автоколебательного режима в реакторе идеального смешения и соответствующих профилей температуры и концентрации в реакторе идеального вытеснения дан на рис. 6. Автоколебания в реакторе идеального смешения характеризуются существенным периодическим возрастанием и падением температуры, а соответствующий профиль температуры в реакторе вытеснения также имеет ярко выраженную горячую точку. Расчеты показывают, что положение горячей точки примерно соответствует величине  $l_* = ut_*$ , где  $t_*$  — период автоколебаний в реакторе смешения. Таким образом, исследование динамических характеристик реактора смешения позволяет оценить положение горячей точки в реакторе вытеснения. Конечно, это сопоставление достаточно условно, оно зависит от типа реактора и кинетических особенностей процесса. Однако наши расчеты показывают, что в качестве первого приближения для оценки положения горячей точки можно использовать величину  $l_*$ .

Интересно отметить эффект высокой чувствительности температуры горячей точки при варьировании параметров [5]. Существует своего рода бифуркационное значение параметров, при котором достаточно плавный профиль температуры переходит в профиль с резким подъемом температуры, что можно характеризовать как тепловой взрыв в трубе. Примеры такого перехода от плавных к резким профилям температуры даны на рис. 6, где в качестве варьируемого параметра выступал коэффициент теплопередачи через стенку реактора. Аналогичный эффект наблюдался и при варьировании входной концентрации реагирующего вещества.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При математическом моделировании конкретных физико-химических процессов соответствующие математические модели содержат размерные переменные и параметры, отвечающие заданной геометрии реактора и вполне определенным теплофизическим и кинетическим характеристикам реакции. В этом случае процедура параметрического анализа размерной модели может быть реализована как напрямую для различных комбинаций размерных параметров, так и на основе использования результатов параметрического анализа безразмерных моделей. Например, одной из базовых моделей теории горения (1), отвечающей одной экзотермической реакции в проточном реакторе идеального смешения, соответствуют по крайней мере три безразмерных модели: Зельдовича — Семенова [1, 2], Ариса — Амундсона [5, 6] и Вольтера — Сальникова [9]. Использование результатов анализа бифуркаций этих моделей может быть полезно и для оценки критических условий в исходной размерной модели (1). Кроме того, наш опыт показывает, что знание динамики процесса, осуществляемого в режиме идеального смешения, позволяет оценить температурные профили и условия критичности для режима идеального вытеснения. Положение горячей точки и величины разогрева в трубчатом реакторе хорошо коррелирует с амплитудой и периодом колебаний температуры в соответствующем сферическом реакторе идеального смешения. Это позволяет использовать лабораторные данные по динамике процессов горения, часто получаемые в реакторе идеального смешения Франк-Каменецкого, для

приближенной оценки характеристик того же процесса, реализуемого в трубчатом реакторе.

## ЛИТЕРАТУРА

1. **Быков В. И., Цыбенова С. Б.** Параметрический анализ простейшей модели теории теплового взрыва — модель Зельдовича — Семенова // Физика горения и взрыва. 2001. Т. 37, № 5. С. 36–48.
2. **Цыбенова С. Б.** Параметрический анализ базовых моделей теории химических реакторов и теории горения: Автореф. дис. ... канд. техн. наук. Красноярск: КГТУ, 1999.
3. **Быков В. И., Пушкарева Т. П., Степанский Я. Ю.** Моделирование автоколебаний в процессе холоднотемпературного горения смеси *n*-гептан — изооктан в реакторе идеального смешения // Физика горения и взрыва. 1987. Т. 25, № 2. С. 21–27.
4. **Быков В. И., Пушкарева Т. П.** Моделирование горения смеси *n*-гептана и изооктана в цилиндрическом реакторе // Физика горения и взрыва. 1989. Т. 26, № 2. С. 34–37.
5. **Арис Р.** Анализ процессов в химических реакторах. Л.: Химия, 1967.
6. **Холоднюк М., Клич А., Кубичек М., Марек М.** Методы анализа нелинейных динамических моделей. М.: Мир, 1991.
7. **Быков В. И., Цыбенова С. Б.** Параметрический анализ некоторых базовых моделей теории горения // Химическая физика процессов горения: Сб. тр., посвященный 70-летию акад. РАТН Г. И. Ксандопуло. Алматы, 1999. С. 133–135.
8. **Цыбенова С. Б.** Математическая модель Ариса — Амундсона и ее параметрический анализ // Вестн. КГТУ: Сб. науч. тр. Красноярск: КГТУ, 1999. С. 137–139.
9. **Вольтер Б. В., Сальников И. Е.** Устойчивость режимов работы химических реакторов. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Химия, 1981.

*Поступила в редакцию 15/VIII 2000 г.*