

УДК 517.955.8

Исследование устойчивости динамики концентраций веществ в диффузионной модели зерна катализатора*

Язовцева О.С.¹, Губайдуллин И.М.², Иншакова А.С.³, Родькина Д.А.³

Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук¹,
Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН²,
Национальный исследовательский Мордовский государственный университет³

Аннотация: В статье предложена методика исследования динамической устойчивости решений системы параболических уравнений, описывающей математическую модель гомогенной реакции в зерне катализатора. Нелинейная модель построена с использованием диффузионного подхода – учитывается диффузия компонент по радиусу гранулы, их расход и образование за счет химических реакций. Исследование динамической устойчивости предполагает разложение решений в ряд методом Галеркина с использованием непрерывных базисных функций. Из условия ортогональности невязки построена нелинейная система обыкновенных дифференциальных уравнений относительно весовых функций, для которой найдены положения равновесия. В окрестности каждого из положений равновесия система обыкновенных дифференциальных уравнений линеаризована. На основании знаков собственных значений линейного приближения сделан вывод об устойчивости решений. Далее вывод распространен на решения первоначальной системы – концентрации веществ в модели зерна катализатора.

Ключевые слова: параболические уравнения, метод Галёркина, линеаризация, динамическая устойчивость, зерно катализатора

В химических производствах наиболее распространенные процессы – каталитические. Обилие разновидностей катализаторов дает возможность выбрать подходящие условия протекания для весьма большого количества реакций. Учитывая, что процедура натуральных экспериментов достаточно трудоёмка, длительна по времени и требует немалых материальных затрат, рационально и в то же время удобно использовать математическую модель реального процесса, которая позволяет в сравнительно короткие сроки исследовать множество характеристик описываемых объектов при различных условиях [1].

Одной из основ математического моделирования промышленных каталитических процессов является математическое описание отдельного зерна катализатора [3, 4].

По причине многофакторности химико-технологических процессов непосредственно возникают задачи анализа влияния различных условий на течение процесса. Многочисленные промышленные задачи предполагают существенный объем вычислений, которые в некоторых случаях обеспечивают, тем не менее, довольно невысокую точность [5].

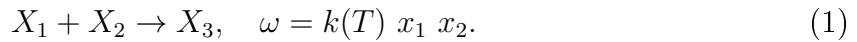
Динамической устойчивостью решения нестационарной системы уравнений математической физики можно назвать малое отклонение решения от первоначального положения при внесении возмущений в начальные данные [6–8]. Для обеспечения динамической устойчивости химического процесса необходимо контролировать ряд

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-71-30012.

параметров, таких как температура, скорость подачи реакционной смеси, концентрации веществ и т. п. Отсутствие динамической устойчивости процесса может привести к снижению эффективности, увеличению расходов на энергию и сырье, а также повышению риска аварийных ситуаций. На практике обеспечение условий, отвечающих динамической устойчивости, является важной задачей для производства.

Целью настоящей работы является анализ динамической устойчивости решений математической модели гомогенной химической реакции в сферическом зерне катализатора.

Рассмотрим одностадийную реакцию и определим ее скорость ω :



Здесь X_1 и X_2 – реагенты, X_3 – продукт реакции, x_i – концентрации X_i , $i = \overline{1, 3}$, $k(T)$ – константа скорости химической реакции, T – температура.

В работе будем рассматривать реакцию, протекающую при постоянной температуре: изотермическую или с постоянным подводом и отводом энергии. В этом случае $k(T) \equiv k$.

Математическая модель гомогенной реакции в сферическом зерне катализатора в этом случае имеет вид:

$$\varepsilon \frac{\partial x_i}{\partial t} = D \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial x_i}{\partial r} \right) + \nu_i \omega, \quad \sum_{i=1}^3 x_i = const. \quad (2)$$

Здесь t – время, r – координата по радиусу зерна катализатора, D – коэффициент диффузии реакционной смеси в поры зерна, ν_i – стехиометрический коэффициент из схемы (1), домноженный на некоторый постоянный множитель, зависящий от размерности x_i .

В качестве начально-краевых условий в центре зерна как в точке симметрии приняты условия отражения, а на внешней границе зерна – условия втекания:

$$\left. \frac{\partial x_i}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad x_i|_{r=R} = x_i^0, \quad x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1, 3}, \quad (3)$$

где R – радиус зерна катализатора.

У системы (2) существует первый интеграл, в силу чего можно рассматривать только два первых уравнения. Вывод относительно поведения компоненты x_3 будет сделан на основе поведения x_1 и x_2 .

Разложение решения по методу Галеркина, соответствующее граничным условиям (3), будет иметь следующий вид:

$$\hat{x}_i = v_i(t) \cos\left(\frac{\pi r}{R}\right) + u_i(t) \cos\left(\frac{2\pi r}{R}\right). \quad (4)$$

При подстановке решения (4) в систему (2) получим невязку $N(t, r)$. Условие ортогональности примет следующий вид:

$$\int_0^R N(t, r) \cos\left(\frac{k\pi}{R}\right) dr = 0, \quad k = 1, 2. \quad (5)$$

При интегрировании получим нелинейную систему вида:

$$\begin{cases} \dot{v}_1 = f_1(v_1, v_2, u_1, u_2), \\ \dot{u}_1 = g_1(v_1, v_2, u_1, u_2), \\ \dot{v}_2 = f_2(v_1, v_2, u_1, u_2), \\ \dot{u}_2 = g_2(v_1, v_2, u_1, u_2). \end{cases} \quad (6)$$

У системы (6) существует три положения равновесия: два ненулевых и одно нулевое. Построив матрицу Якоби для системы (6), найдем собственные значения этой матрицы в окрестностях каждого из положений равновесия:

$$\begin{aligned} & \left(\alpha_1 \frac{D}{k}, -\alpha_2 \frac{D}{k}, -\alpha_3 \frac{D}{k}, -\alpha_4 \frac{D}{k} \right), \quad \left(\beta_1 \frac{D}{k}, -\beta_2 \frac{D}{k}, -\beta_3 \frac{D}{k}, -\beta_4 \frac{D}{k} \right), \\ & \left(-\gamma_1 \frac{D}{k}, -\gamma_2 \frac{D}{k}, -\gamma_1 \frac{D}{k}, -\gamma_2 \frac{D}{k} \right), \end{aligned} \quad (7)$$

где $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ – положительные вещественные числа.

В первых двух наборах собственных значений присутствуют положительные числа, что означает неустойчивость двух ненулевых положений равновесия. Последний набор свидетельствует об асимптотической устойчивости тривиального положения равновесия. Поскольку решения системы (6) – это весовые функции в разложении (4), неустойчивость положения равновесия системы (6) означает отсутствие динамической устойчивости решений (2), а асимптотическая устойчивость – наличие динамической устойчивости.

Это означает, что для наличия динамической устойчивости решений системы (2) необходимо выбирать начально-краевые условия (3) так, чтобы они приводили к тривиальному положению равновесия.

Таким образом, безопасное течение процесса изотермической гомогенной химической реакции возможно обеспечить подбором начальных концентраций веществ.

Перспективным направлением видится расширение предложенного алгоритма на систему с учетом теплового баланса зерна катализатора, а также на процессы с гетерогенной кинетикой.

Литература

1. Марчук Г.И. Моделирование химических реакторов. Новосибирск: Наука, 1984. 164 с.
2. Малиновская О.А., Бесков В.С., Слинко М.Г. Моделирование каталитических процессов на пористых зернах. Новосибирск: Наука, СО РАН, 1975. 268 с.
3. Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Sukharev L.A., Zagoruiko A.N. Computer Simulation of Coke Sediments Burning from the Whole Cylindrical Catalyst Grain // Mathematics. 2023. Vol.11, No.3. 669 p. DOI: 10.3390/math11030669.
4. Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Zagoruiko A.N. Numerical Simulation of Oxidative Regeneration of a Spherical Catalyst Grain // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. V.15. P. 485–495. DOI: 10.1134/S2070048223030079.

5. Слинько М.Г. Некоторые итоги развития и применения математического моделирования химических реакторов // Управляемые системы. 1968. № 1. С. 74-82.
6. Анкилов А.В., Вельмисов П.А. Динамика и устойчивость упругих пластин при аэрогидродинамическом воздействии. Ульяновск: УлГТУ, 2009. 220 с.
7. Анкилов А.В., Вельмисов П.А. Математическое моделирование динамики и устойчивости деформируемых элементов конструкций при аэрогидродинамическом воздействии. Ульяновск: УлГТУ, 2011.
8. Болотин В.В. Динамическая устойчивость упругих систем. Москва: Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1956. 600 с.

MSC 34K20

Investigation of the stability for substances' concentrations' dynamics in the catalyst grain's diffusion model

O.S. Yazovtseva¹, I.M. Gubaydullin², A.S. Inshakova³, D.A. Rodkina³

Steklov Mathematical Institute of Russian Academy of Sciences¹,
Institute of Petrochemistry and Catalysis of RAS²,
National Research Mordovia State University³

Abstract: The article proposes a method for studying the solutions' dynamic stability of parabolic system describing a mathematical model of a homogeneous reaction in a catalyst grain. The nonlinear model is constructed using a diffusion approach – the diffusion of components along the granule's radius, their consumption and formation due to chemical reactions are taken into account. The study of dynamic stability involves the decomposition of solutions into a series by the Galerkin method using continuous basis functions. A nonlinear system of ordinary differential equations with respect to the weight functions is constructed from the orthogonality condition of the residual. Its equilibrium positions are found. The system of ordinary differential equations is linearized at the neighbourhood of each equilibrium. A conclusion is made about the solutions' stability based on the signs of the eigenvalues of the linear approximation. Further, the conclusion is extended to the solutions of the initial system – the concentration of substances in the catalyst grain model.

Keywords: parabolic equations, Galerkin method, linearization, dynamic stability, catalyst grain.

References

1. Marchuk G.I. Modeling of chemical reactors. Novosibirsk: Nauka, 1984. 164 p..
2. Malinovskaya O.A., Beskov V.S., Slinko M.G. Modeling of catalytic processes on porous grains. Novosibirsk: Nauka, SB RAS, 1975. 268 p.
3. Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Sukharev L.A., Zagoruiko A.N. Computer Simulation of Coke Sediments Burning from the Whole Cylindrical Catalyst Grain // Mathematics. 2023. Vol.11. No.3. 669 p. DOI: 10.3390/math11030669.
4. Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Zagoruiko A.N. Numerical Simulation of Oxidative Regeneration of a Spherical Catalyst Grain // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. V.15. P. 485–495. DOI: 10.1134/S2070048223030079.
5. Slinko M.G. Some results of the development and application of mathematical modeling of chemical reactors // Controlled systems. 1968. No.1. P. 74-82.
6. Ankilov A.V., Velmisov P.A. Dynamics and stability of elastic plates under aerohydrodynamic action. Ulyanovsk: UISTU, 2009. 220 p.

7. Ankilov A.V., Velmisov P.A. Mathematical modeling of dynamics and stability of deformable structural elements under aerohydrodynamic influence. Ulyanovsk: UISTU, 2011.
8. Bolotin V.V. Dynamic stability of elastic systems. Moscow: State Publishing House of Technical and Theoretical Literature, 1956. 600 p.