

**ТЕОРИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ МЕДЛЕННЫХ  
ТЕПЛОВЫХ ВОЛН В СЛОЕ КАТАЛИЗАТОРА  
ПРИ ПРОТЕКАНИИ ОБРАТИМОЙ РЕАКЦИИ**

УДК 66.011+536.46

**А. П. Герасев, Н. А. Чумакова**

**Институт катализа СО РАН, 630090 Новосибирск**

*Проведен качественный и численный анализ простейшей модели медленных тепловых волн, распространяющихся в неподвижном слое катализатора при протекании обратимой реакции первого порядка. Показано, что существует однопараметрическое семейство автоволновых решений, удовлетворяющих граничным условиям задачи. Из континуума решений может быть выбрано единственное физически разумное, представляющее собой медленную тепловую волну. Исследованы условия существования медленных тепловых волн, изучено влияние параметров модели на скорость их распространения.*

В реакторах с неподвижным зернистым слоем катализатора возможно осуществление как стационарных, так и устойчивых динамических режимов, например явление распространения тепловых волн, которые возникают при подаче холодной реакционной смеси в разогретый слой катализатора [1, 2]. Наряду с упомянутыми хорошо известными медленными тепловыми волнами (МТВ) при протекании обратимой реакции в слое катализатора могут распространяться быстрые тепловые волны [1, 3, 4]. О существовании не зависящих от начальных условий автоволновых режимов свидетельствуют результаты многочисленных исследований (см., например, [5–7]).

В данной работе выполнен анализ основных закономерностей распространения МТВ в неподвижном слое катализатора при протекании обратимой реакции первого порядка. Математическим обоснованием существования пространственно-временных структур (бегущих волн) является существование в автомодельной системе специальных траекторий, соединяющих стационарные (особые) точки. Отдельно рассматривается случай, когда особая точка соответствует температуре абсолютного нуля, и строго исследованы вопросы существования и множественности автоволновых решений. Исследовано поведение траекторий при температурах на входе в слой катализатора, отличных от нуля, без введения каких-либо дополнительных предположений о «срезке» скорости реакции при низких температурах.

**МОДЕЛЬ СТАЦИОНАРНОГО РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЕПЛОВЫХ ВОЛН**

Основу теоретического изучения процессов распространения тепловых волн в неподвижном слое катализатора составляет система одномерных уравнений теплового и материального балансов, учитывающая химическое превращение веществ, реакционное тепловыделение, конвективный поток реакционной газовой смеси через слой катализатора и эффективную теплопроводность продуваемого зернистого слоя. Рассматривается течение

газа с пренебрежимо малым градиентом давления. Тогда при протекании в слое катализатора обратимой реакции  $A \rightleftharpoons B$  математическое описание имеет вид

$$\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial l^2} - \rho_g v c_p \frac{\partial T}{\partial l} + q C_0 W(T, C) = (\varepsilon_g \rho_g c_p + \varepsilon_c \rho_c c_c) \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (1)$$

$$-v \frac{\partial C}{\partial l} - W(T, C) = \varepsilon_g \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2)$$

с условиями на границах

$$l = -L/2: \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial l} = \rho_g v c_p (T - T_0), \quad C = C_{A,0}/C_0, \quad (3)$$

$$l = +L/2 : \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial l} = 0, \quad (4)$$

и начальными условиями

$$t = 0: \quad T(0, l) = T_n, \quad C(0, l) = C_n.$$

Уравнение (2) можно получить из закона сохранения полного количества вещества в потоке и уравнения состояния идеального газа. Здесь  $C_A, C_B$  — концентрации реагентов  $A$  и  $B$ ;  $C_{A,0}, C_{B,0}$  — концентрации реагентов на входе в слой катализатора;  $C_0 = C_{A,0} + C_{B,0}$  — общая концентрация реагентов;  $C = C_A/C_0$  — безразмерная концентрация реагента  $A$ ;  $c_p, c_c$  — теплоемкости газа и катализатора;  $T$  — температура;  $T_0$  — температура на входе в слой катализатора;  $t$  — время;  $v$  — скорость потока реагентов на полное сечение слоя катализатора;  $l, L$  — продольная координата и длина слоя катализатора;  $q$  — тепловой эффект реакции;  $\varepsilon, \varepsilon_p$  — пористости слоя и зерна катализатора;  $\varepsilon_g = \varepsilon + (1 - \varepsilon) \varepsilon_p$ ,  $\varepsilon_c = 1 - \varepsilon_g$  — доли газовой и твердой фаз;  $\lambda$  — эффективный коэффициент продольной теплопроводности слоя катализатора;  $\rho_g, \rho_c$  — плотности газа и катализатора;  $W$  — скорость реакции.

Рассмотрим обратимую реакцию первого порядка:

$$W(T, C) = k \exp \left( -\frac{E}{RT} \right) C \left( 1 - \frac{1 - C}{CK_e(T)} \right), \quad K_e(T) = k_e \exp \left( \frac{q}{RT} \right),$$

где  $E$  — энергия активации реакции образования вещества  $B$ ;  $K_e(T)$  — константа равновесия реакции;  $k, k_e$  — предэкспоненциальные множители константы скорости реакции и константы равновесия;  $R$  — универсальная газовая постоянная.

Как известно, стационарное распространение фронта реакции является асимптотической характеристикой динамического процесса, которая, строго говоря, имеет смысл лишь для слоя катализатора бесконечной длины при достаточно больших временах контакта. Если решение в виде бегущей волны существует, то в подвижной системе координат, связанной с движущимся фронтом ( $\xi = l - V_f t, t' = t$ ), оно удовлетворяет следующей стационарной задаче:

$$\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - \rho_g v c_p \left( 1 - \gamma \frac{V_f}{v} \right) \frac{\partial T}{\partial \xi} + q C_0 W(T, C) = 0, \quad (5)$$

$$-v \left( 1 - \varepsilon_g \frac{V_f}{v} \right) \frac{\partial C}{\partial \xi} - W(T, C) = 0, \quad (6)$$

$$\xi \rightarrow -\infty: \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial \xi} - \rho_g v c_p (T - T_0) \rightarrow 0, \quad C \rightarrow C_{A,0}/C_0, \quad (7)$$

$$\xi \rightarrow +\infty: \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial \xi} \rightarrow 0. \quad (8)$$

Здесь  $\gamma = \varepsilon_g + \varepsilon_c \rho_c c_c / \rho_g c_p$ ;  $V_f$  — неизвестный параметр, определяющий скорость движения фронта. Можно показать, что уравнение неразрывности  $\varepsilon_g \partial \rho_g / \partial t + \partial (\rho_g v) / \partial l = 0$  в подвижной системе координат имеет вид  $\partial (\rho_g (v - \varepsilon_g V_f)) / \partial \xi = 0$ , откуда с учетом условия (7) следует, что  $\rho_g (v - \varepsilon_g V_f) = \text{const}$ . Поэтому целесообразно считать, что  $\rho_g$ ,  $v$  и  $C_0$  определены при входных условиях.

## СУЩЕСТВОВАНИЕ МТВ

Исследование вопроса о стационарном распространении МТВ в слое катализатора в рассматриваемом случае сводится к изучению решений задачи (5)–(8). Заметим, что ограниченное решение задачи, если оно существует, сходится при  $\xi \rightarrow \pm\infty$  к особым точкам системы (5), (6) — стационарным точкам, где в силу условий (7), (8) должно быть выполнено равенство  $W(T, C) = 0$ . Это означает, что предельные значения концентраций реагентов находятся в состоянии термодинамического равновесия относительно температуры за фронтом МТВ при  $\xi \rightarrow +\infty$  либо температура стремится к нулю при  $\xi \rightarrow -\infty$ . В противном случае решение не удовлетворяет условиям (7), (8). В реальных условиях исходное вещество находится в неравновесном состоянии, скорость химического превращения  $W(T, C) > 0$ . Именно это обстоятельство приводит к рассуждениям о том, что строго стационарный режим распространения МТВ в слое катализатора так же, как и процесс распространения фронта горения в гомогенной среде, невозможен [7]. Для того чтобы получить приближенное решение задачи о стационарном распространении МТВ, используется понятие температуры «срезки» [1, 2], т. е. такой температуры, ниже которой скорость реакции считается тождественно равной нулю. Однако если расширить область температур до абсолютного нуля, в качестве входных условий взять  $T_0 = 0$  и рассматривать тот же состав реакционной смеси, то задачу о существовании МТВ можно будет изучать без дополнительных ограничений на функцию  $W(T, C)$ . В этом случае скорость химической реакции равняется нулю при входных условиях, а физические ограничения на возможность достижения такой низкой температуры в математической модели отсутствуют. Поэтому проведем анализ автоволновых решений задачи (5)–(8) при  $T_0 = 0$ .

Переходя к безразмерным переменным

$$r = \xi \rho_g v c_p / \lambda, \quad z = (C_{A,0} - C_A) / C_0, \quad (9)$$

запишем задачу (5)–(8) в виде

$$\frac{d^2 T}{dr^2} - (1 - \omega) \frac{dT}{dr} + Q_1 K_1(T) \left[ z_{A,0} - z - \frac{1 - z_{A,0} + z}{K_e(T)} \right] = 0, \quad (10)$$

$$(1 - \sigma \omega) \frac{dz}{dr} = K_1(T) \left[ z_{A,0} - z - \frac{1 - z_{A,0} + z}{K_e(T)} \right], \quad (11)$$

$$r \rightarrow -\infty : \quad \frac{dT}{dr} - (T - T_0) \rightarrow 0, \quad z \rightarrow 0, \quad (12)$$

$$r \rightarrow +\infty : \quad \frac{dT}{dr} \rightarrow 0. \quad (13)$$

Здесь  $Q_1 = q C_0 / \rho_g c_p$ ;  $z_{A,0} = C_{A,0} / C_0$ ;  $\sigma = \varepsilon_g / \gamma$ ;  $K_1(T) = (\lambda / \rho_g c_p v^2) k \exp(-E/RT)$ ;  $\omega = \gamma V_f / v$  — безразмерная скорость распространения тепловой волны. Отметим, что перейти к общепринятой безразмерной температуре в данном случае не представляется возможным.

Подставив выражение для скорости реакции из уравнения (11) в (10), определим первый интеграл системы и понизим порядок уравнения (10). При  $r \rightarrow -\infty$  условие (12) относительно тепловых потоков при  $\omega \neq 0$  расщепляется на два: кондуктивный поток стремится к нулю ( $dT/dr \rightarrow 0$ ) и  $T \rightarrow 0$  [1]. Ограниченнное решение системы уравнений (10), (11), удовлетворяющее условию (13), должно сходиться при  $r \rightarrow +\infty$  к некоторой стационарной точке, которая в данном случае соответствует точке термодинамического равновесия  $(T_i, z_e(T_i))$ . Следовательно, задача (10)–(13) эквивалентна следующей:

$$\frac{dT}{dr} = (1 - \omega)T + Q_1(1 - \sigma\omega)z, \quad (14)$$

$$\frac{dz}{dr} = K_2(T) \frac{z_e(T) - z}{1 - \sigma\omega}, \quad (15)$$

$$r \rightarrow -\infty: \quad T \rightarrow 0, \quad z \rightarrow 0, \quad (16)$$

$$r \rightarrow +\infty: \quad T \rightarrow T_i, \quad z \rightarrow z_e(T_i). \quad (17)$$

Здесь  $K_2(T) = K_1(T)(1+K_e(T))/K_e(T)$ ;  $z_e(T) = z_{A,0} - 1/[1+K_e(T)]$  — равновесная степень превращения, соответствующая температуре  $T$ .

Таким образом, математическая модель МТВ представляет собой краевую задачу (14)–(17) для системы двух обыкновенных дифференциальных уравнений с параметрами  $\omega$  и  $T_i$ . Ее решение соответствует на фазовой плоскости  $(T, z)$  траектории, соединяющей две особые точки  $(T_s, z_s)$  системы уравнений (14), (15). Первая из них определяется входными условиями на минус бесконечности, матрица линеаризованной в ее окрестности системы имеет нулевое и положительное собственные числа; вторая — условиями на плюс бесконечности, эта точка является седловой, она находится на пересечении двух изоклин, одна из которых кривая термодинамического равновесия реакции  $z = z_e(T)$ , другая — изоклина теплового баланса  $z = (1 - \omega)T/(1 - \sigma\omega)Q_1$ . Решением задачи в данном случае может быть только сепаратриса седла. Следует отметить, что система уравнений (14), (15) не имеет периодических решений, так как выполнен критерий Бендиクсона [8]. Особые точки рассматриваемой системы определяются нулями  $T_s$  функции

$$f(T) = \frac{(1 - \omega)T}{(1 - \sigma\omega)Q_1} - z_e(T). \quad (18)$$

Чтобы, согласно второму из условий (17), траектория при  $r \rightarrow +\infty$  приходила в стационарную точку, параметры  $\omega$  и  $T_i$  должны быть связаны соотношением

$$\omega = \frac{T_i - Q_1 z_e(T_i)}{T_i - \sigma Q_1 z_e(T_i)}. \quad (19)$$

Следовательно, задача (14)–(17) содержит только один параметр и, вообще говоря, может иметь однопараметрическое семейство решений (с параметром  $T_i$  или  $\omega$ ). Из расположения изоклин на фазовой плоскости следует, что  $\omega < 1$ , а это означает, что скорость распространения МТВ меньше асимптотического значения скорости, с которой распространяется (одновременно размыаясь) инертная тепловая метка. Поэтому такие волны были названы медленными [1, 3, 4]. При  $\omega \rightarrow 1$  из (19) следует оценка

$$T_{\max} = \frac{q}{R \ln[(1 - z_{A,0})/z_{A,0} k_e]}.$$

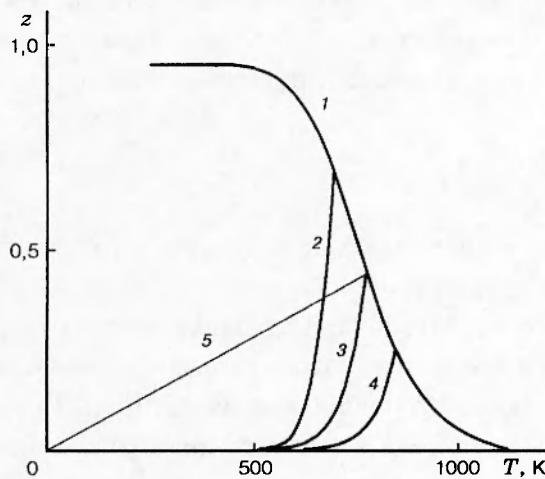


Рис. 3. Траектории МТВ на фазовой плоскости для различных значений константы скорости реакции:  
 $k = 0,5862 \cdot 10^{-11}$  (2);  $0,42645 \cdot 10^{-10}$  (3),  
 $0,369 \cdot 10^{-9} \text{ с}^{-1}$  (4); 1 — кривая термодинамического равновесия; 5 — изоклина теплового баланса

вырождается, зона реакции (фронт МТВ) расширяется до бесконечности, что означает потерю физического смысла. Из однопараметрического семейства решений может быть выбрано единственное физически разумное, которое представляет собой образ МТВ. Для этого решения характерно то, что концентрации реагентов практически достигают входных значений при ненулевой температуре.

Отметим, что в соотношение (19) не входит константа скорости химической реакции. Оказывается, варьируя  $k$ , можно так изменить фазовый портрет, чтобы траектория — образ МТВ — соответствовала заранее выбранной температуре  $T_i < T_{\max}$ . Когда  $T_i$  равна температуре адиабатического разогрева реакционной смеси  $T_{ad}$ , естественно ожидать, что  $\omega = 0$ . И действительно, из (19) следует, что решением задачи (14)–(17) будет стоячая тепловая волна. Для  $T_i < T_{ad}$  из (19) получим  $\omega < 0$  и решением задачи (14)–(17) будет тепловая волна, бегущая навстречу фильтрующемуся потоку газа. Для  $T_i > T_{ad}$  из (19) получим  $0 < \omega < 1$  и спутное движение МТВ. Примеры соответствующих фазовых

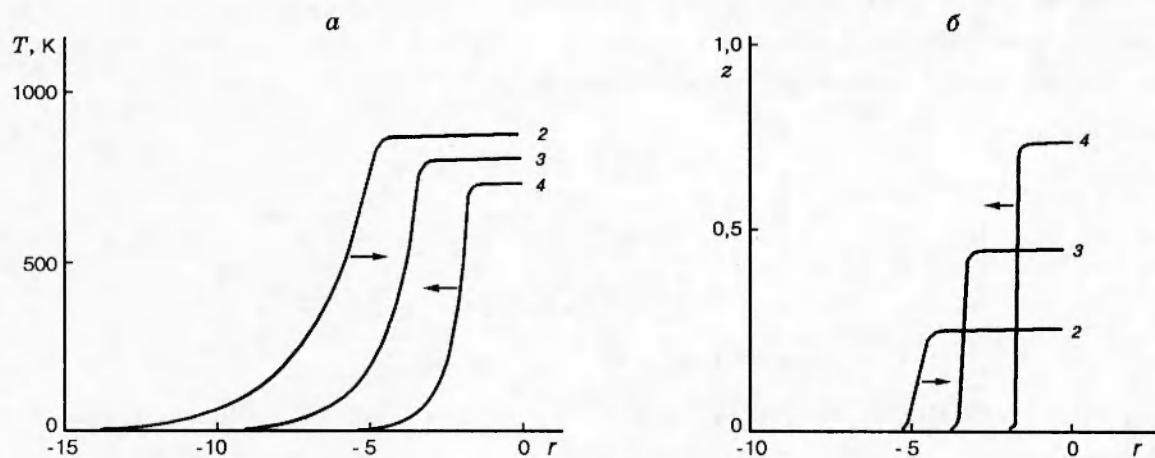


Рис. 4. Профили температуры (а) и степени превращения реагента (б) по длине слоя катализатора для различных МТВ:  
номера кривых соответствуют рис. 3; стрелками указано направление движения МТВ

траекторий и профили температуры по длине слоя катализатора приведены на рис. 3, 4. Как видно из рис. 4, тепловые волны, бегущие навстречу потоку газа, имеют большие градиенты температуры во фронте, чем бегущие в направлении фильтрации газа.

### СЛУЧАЙ $T_0 \neq 0$

Рассмотрим случай, когда температура на входе в слой катализатора  $T_0$  отлична от нуля. Тогда точка при  $r \rightarrow -\infty$  не является стационарной и, строго говоря, постановка задачи кажется недостаточно корректной без использования предположения о «срезке» скорости реакции. Однако оказалось возможным построить автоволновые решения задачи, траектории которых проходят вблизи точки, заданной условиями на входе. Если  $T_0 \neq 0$  при понижении порядка уравнения (10), появляется ненулевая константа интегрирования. Поэтому мы предпочли ввести условие нормировки — дополнить безразмерные переменные (9) безразмерной температурой:  $\theta = (T - T_0)/\beta T_0$ . Тогда задачу (10)–(13) можно записать в виде

$$\frac{d^2\theta}{dr^2} - (1 - \omega) \frac{d\theta}{dr} + Q K(\theta) \left[ z_{A,0} - z - \frac{1 - z_{A,0} + z}{K_e(\theta)} \right] = 0, \quad (20)$$

$$(1 - \sigma\omega) \frac{dz}{dr} = K(\theta) \left[ z_{A,0} - z - \frac{1 - z_{A,0} + z}{K_e(\theta)} \right], \quad (21)$$

$$r \rightarrow -\infty: \quad \frac{d\theta}{dr} - \theta \rightarrow 0, \quad z \rightarrow 0, \quad (22)$$

$$r \rightarrow +\infty: \quad \frac{d\theta}{dr} \rightarrow 0. \quad (23)$$

Здесь  $\beta = RT_0/E$ ;  $Q = qC_0/\rho_g c_p \beta T_0$ ;  $\nu = (E + q)/E$ ;  $K(\theta) = (\lambda/\rho_g c_p v^2)k \exp(-1/\beta) \exp(\theta/(1 + \beta\theta))$ ;  $K_e(\theta) = k_e \exp((\nu - 1)/\beta) \exp(-(\nu - 1)\theta/(1 + \beta\theta))$ ;  $\theta > 0$ .

Определим первый интеграл системы после подстановки (21) в (20) и понизим порядок уравнения (20). При  $r \rightarrow -\infty$  условие относительно  $\theta$  при  $\omega \neq 0$  расщепляется на два:  $\theta \rightarrow 0$  и  $d\theta/dr \rightarrow 0$  [1]. Ограниченнное решение системы уравнений (20), (21), удовлетворяющее условию (23), сходится при  $r \rightarrow +\infty$  к некоторой стационарной точке  $(\theta_i, z_e(\theta_i))$ . Итак, задача (20)–(23) эквивалентна следующей:

$$\frac{d\theta}{dr} = (1 - \omega)\theta - (1 - \sigma\omega)Qz, \quad (24)$$

$$\frac{dz}{dr} = K^0(\theta) \frac{z_e(\theta) - z}{1 - \sigma\omega}, \quad (25)$$

$$r \rightarrow -\infty: \quad \theta \rightarrow 0, \quad z \rightarrow 0, \quad (26)$$

$$r \rightarrow +\infty: \quad \theta \rightarrow \theta_i, \quad z \rightarrow z_e(\theta_i). \quad (27)$$

Здесь  $K^0(\theta) = K(\theta)(1 + K_e(\theta))/K_e(\theta)$ ;  $z_e(\theta) = z_{A,0} - 1/(1 + K_e(\theta))$  — равновесная степень превращения, соответствующая температуре  $\theta$ .

Одна из изоклин системы уравнений (24), (25) является кривой термодинамического равновесия  $z = z_e(\theta)$ , а другая — изоклина теплового баланса  $z = (1 - \omega)\theta/(1 - \sigma\omega)Q$ . Особая точка уравнений (24), (25) на плюс бесконечности (точка пересечения двух изоклин) является седловой. Условия (26) на входе в слой катализатора при  $T_0 \neq 0$  не соответ-

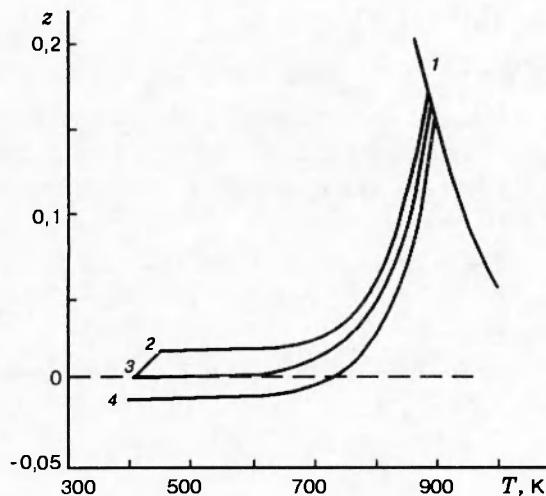


Рис. 5. Траектории системы (24), (25) на фазовой плоскости при  $T_0 = 400$  К и различных значениях температуры на плюс бесконечности: 890 (2), 895,8 (3), 900 К (4) (1 — кривая термодинамического равновесия)

ствуют стационарной точке, поскольку скорость реакции не равна нулю. Именно из-за этого обстоятельства задача (24)–(27) не имеет автоволнового решения. Однако было бы неправильным сделать вывод, что распространение МТВ при низкой, но отличной от нуля входной температуре невозможно с физической точки зрения. Аналогичная проблема имеет место в теории горения [7, 9]. Широко известны два способа модификации задачи о стационарной волне горения, один из которых предложен Я. Б. Зельдовичем [9], а второй — Дж. О. Гиршфельдером и Ч. Ф. Кертиссом [10]. Первый заключается в искусственном «обрезании» скорости реакции в области низких входных температур, а второй — в замене граничных условий при  $r \rightarrow -\infty$  граничными условиями при  $r = 0$ , т. е. на плоскости, через которую осуществляется подача горючего вещества (такой способ получил условное название «пламедержателя» или «холодной пробки»).

Будем исследовать фазовые траектории системы уравнений (24), (25) численно, путем интегрирования «в обратном времени», не прибегая к модификации задачи. Скорость распространения  $\omega$  и максимальная температура  $\theta_i$ , аналогично задаче (14)–(17) связаны уравнением энергетического баланса

$$\omega = \frac{\theta_i - Qz_e(\theta_i)}{\theta_i - \sigma Qz_e(\theta_i)}.$$

Расчеты выполнялись для достаточно широкого диапазона значений температуры слоя катализатора на плюс бесконечности. На рис. 5 приведены примеры траекторий системы (24), (25) на фазовой плоскости  $(T, z)$ . Характер фазового портрета системы аналогичен случаю  $T_0 = 0$ . Часть траекторий покидает физическую область фазового пространства, пересекая ось температур при  $T > T_0$ . Другие траектории при уменьшении  $r$  приближаются к изоклине теплового баланса, далее расположены в ее окрестности и выходят в область  $z < 0$  вблизи точки  $(0, T_0)$ . Для них характерны протяженные участки с малыми градиентами температуры и концентраций по длине  $r$ , чего не наблюдается в экспериментах. При этом из континуума траекторий может быть выбрана проходящая вблизи начала координат, для которой концентрации реагентов достигают своих входных значений при более высокой температуре, чем на входе в слой катализатора (см. рис. 5, кривая 3). Именно эта траектория является образом МТВ. Итак, расположение траекторий на фазовой плоско-

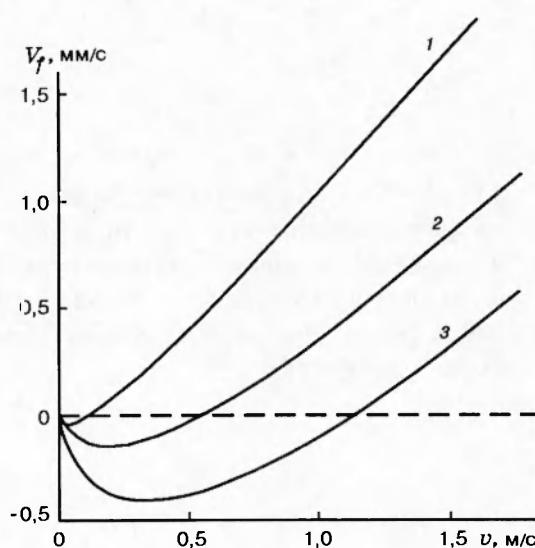


Рис. 6. Зависимость скорости распространения МТВ от скорости фильтрации газа для различных значений параметров модели:

1 —  $k_e = 5,737 \cdot 10^{-5}$  при  $r \rightarrow -\infty, T_0 \rightarrow 0$ ;  
2 —  $k_e = 10^{-3}$  при  $r \rightarrow -\infty, T_0 \rightarrow 0$ ; 3 —  $k_e = 10^{-3}$  при  $r \rightarrow -\infty, T_0 \rightarrow 300 \text{ К}$

сти показывает, что задача (24)–(27) может быть модифицирована любым из отмеченных выше способов: либо введением процедуры «срезки» скорости реакции при низких температурах, что искусственно превращает точку при  $r \rightarrow -\infty$  в стационарную точку системы (24), (25), либо постановкой граничных условий при  $r = 0$ . Причем способ модификации не влияет на метод решения задачи.

Безразмерная скорость распространения приведенной на рис. 5 МТВ (кривая 3) равна 0,4322, что соответствует  $V_f = 0,617 \cdot 10^{-3} \text{ м/с}$ . Характер полученных решений отражает тот факт, что скорость фильтрации газа на несколько порядков больше скорости распространения тепловой волны вследствие большого различия объемных теплоемкостей твердой и газовой фаз, и конвективный поток газа как бы «вымывает» возможные изменения концентраций веществ за счет протекания химической реакции при низких температурах. Таким образом, в некотором интервале значений входных температур, который определяется параметрами задачи, полученные решения можно считать достаточно точными.

Скорость распространения МТВ является одной из важнейших характеристик, представляющей технологический интерес. Отметим, что получение аналитических оценок этой величины в случае обратимых реакций крайне затруднено из-за зависимости концентрации реагентов от максимальной температуры. Исследование зависимости скоростей распространений МТВ от параметров модели проводилось численно. На рис. 6 приведены зависимости  $V_f(v)$  для различных значений входной температуры и константы равновесия реакции. Как видно из рис. 6, для низких скоростей фильтрации газа характерно наличие встречного движения тепловой волны, причем зависимость носит экстремальный характер. Имеется единственное значение скорости фильтрации газа, для которого реализуется режим стоячей тепловой волны. При дальнейшем увеличении скорости газа наблюдается примерно пропорциональный рост скорости МТВ. Повышение температуры на входе в слой катализатора и константы равновесия реакции приводит к увеличению диапазона скоростей фильтрации газа, при которых реализуется режим встречного движения тепловой волны. В целом наблюдается снижение скорости  $V_f$  при увеличении указанных параметров.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен качественный и численный анализ одной из простейших моделей тепловых волн в неподвижном слое катализатора (квазигомогенной модели) при протекании обратимой реакции. Показано существование однопараметрического семейства автоволновых решений, из которого можно выбрать единственное физически разумное, представляющее собой образ МТВ. Исследованы условия существования и закономерности распространения МТВ.

Квазигомогенная модель неподвижного слоя катализатора идентична однотемпературной модели процессов гомогенного фильтрационного горения, когда различием температур газа и твердой фазы можно пренебречь. Следовательно, все основные результаты, полученные в настоящей работе, будут верны и для других физических систем, имеющих аналогичное математическое описание.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проект 94-03-08205).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Киселев О. В. Теоретическое исследование явления распространения тепловых волн в слое катализатора. Новосибирск: ТОО «Параллель», 1993.
2. Киселев О. В., Матрос Ю. Ш., Чумакова Н. А. Явление распространения теплового фронта в слое катализатора // Распространение тепловых волн в гетерогенных средах. Новосибирск: Наука, 1988. С. 145–202.
3. Киселев О. В., Матрос Ю. Ш. Распространение быстрых тепловых волн по слою катализатора // Докл. АН СССР. 1989. Т. 308, № 3. С. 667–671.
4. Герасев А. П., Чумакова Н. А., Матрос Ю. Ш., Киселев О. В. Закономерности распространения быстрых тепловых волн в слое катализатора // Теор. основы хим. технологий. 1993. Т. 27, № 2. С. 165–172.
5. Киселев О. В., Матрос Ю. Ш., Бунимович Г. А. и др. Осуществление катализитических процессов в режиме формирования и распространения теплового фронта в неподвижном слое катализатора // Распространение тепловых волн в гетерогенных средах. Новосибирск: Наука, 1988. С. 203–232.
6. Rhee H., Lewis R. P., Amundson N. R. Creeping profiles in catalytic fixed bed reactors. Continuous models // Ind. Eng. Chem. Fundam. 1974. V. 3, N 4. P. 317–323.
7. Мержанов А. Г., Хайкин Б. И. Теория волн горения в гомогенных средах. Черноголовка: ОИХФ АН СССР, 1992.
8. Качественная теория динамических систем второго порядка / А. А. Андронов, Е. А. Леонович, И. И. Гордон, А. Г. Майер. М.: Наука, 1976.
9. Зельдович Я. Б. К теории распространения пламени // Журн. физ. химии. 1948. Т. 22, № 1. С. 27–48.
10. Hirschfelder J. O., Curtiss G. F. The theory of flame propagation // J. Chem. Phys. 1949. V. 17. P. 1076–1081.

Поступила в редакцию 28/II 1996 г.,  
в окончательном варианте — 28/IV 1997 г.