

СУЩЕСТВОВАНИЕ И УСТОЙЧИВОСТЬ СТАЦИОНАРНЫХ РЕЖИМОВ ТРУБЧАТЫХ РЕАКТОРОВ С ВНУТРЕННИМ ТЕПЛООБМЕНОМ

Л. М. Письмен
(Москва)

В работе анализируются стационарные режимы трубчатых реакторов с внутренним теплообменом. Известно, что при определенных условиях в таких аппаратах наблюдаются неустойчивость и скачкообразные переходы режимов системы [1—3]. Такого рода явления были впервые обнаружены в связи с вопросами теории горения и взрыва. Выяснилось, что они играют большую роль в других процессах, где осуществляется химическое взаимодействие между компонентами движущейся жидкости или газа, в особенности в процессах химической технологии. Трубчатые реакторы — это системы с распределенными параметрами, анализ которых весьма труден; по этой причине здесь достигнуто мало результатов.

В статье делается попытка ответить на вопросы о существовании стационарных решений, о их числе и устойчивости. Аналитически эти вопросы, как правило, разрешить нельзя; прямое использование численных методов также оказывается неэффективным. Подход, применяемый здесь, основан на мощных методах функционального анализа [4, 5], позволяющих установить ряд важных общих свойств исследуемых систем. Первый вопрос о существовании решений решается на основе самых общих принципов, управляющих ходом химических процессов — законов сохранения вещества и энергии. Основанное на этих принципах доказательство существования стационарных режимов процесса на пористой частице катализатора дано Гаваласом [6]. Ответ на второй и третий вопросы тесно связан с понятием точек ветвления стационарных решений, которое будет объяснено ниже. Будет показано, при каких условиях можно гарантировать существование хотя бы одного устойчивого стационарного режима процесса.

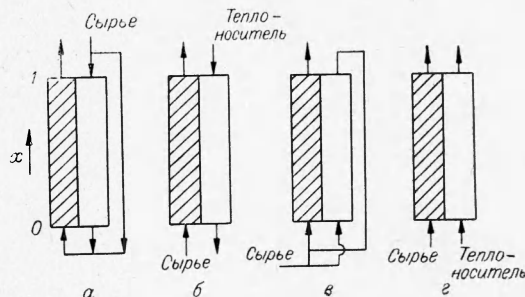


Рис. 1. Схемы реакторов с внутренним теплообменом: противоток (а, б), прямоток (в, г), теплоноситель — исходная смесь (а, в), независимый теплоноситель (б, г).

ПРОТИВОТОЧНЫЙ РЕАКТОР (рис. 1, а, б). СУЩЕСТВОВАНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ

Предположим, что реагирующая смесь и теплоноситель движутся в режиме идеального вытеснения и поперечный перепад температуры пренебрежимо мал. Тогда стационарный режим реактора с внутренним теплообменом описывается системой уравнений:

$$\frac{dC}{dx} = f(C, T), \quad (1)$$

$$\frac{dT}{dx} = h \cdot f(C, T) - \alpha(T - T_1), \quad (2)$$

$$\frac{dT_1}{dx} = -\alpha\beta(T - T_1). \quad (3)$$

Здесь C — вектор состава, компонентами которого являются концентрации C_i ($i=1, 2, \dots, S$) веществ, участвующих в процессе¹; T — температура реагирующей смеси; T_1 — температура теплоносителя. Все эти величины будем считать безразмерными, приняв за масштаб концентрации и температуры некоторые величины C^0 и T^0 . За масштаб безразмерной продольной координаты x принята длина реактора L . Компоненты f_i нелинейной вектор-функции состава и температуры $f(C, T)$ связаны со скоростями образования соответствующих веществ в единице объема зоны реакции r_i соотношениями $f_i = (L/\omega C^0) r_i$, где ω — линейная скорость реагирующей смеси. Компоненты h_i определяются как $h_i = H_i C^0 / \gamma T^0$, где H_i — парциальная молярная энтальпия i -го вещества (или термодинамический коэффициент i -го ключевого вещества) и γ — теплоемкость единицы объема реагирующей смеси. Параметр теплопередачи α равен $k_h L / a \gamma \omega$, где k_h — коэффициент теплопередачи от реагирующей смеси к теплоносителю; a — гидравлический радиус зоны реакции; $\beta = a \gamma \omega / a_1 \gamma_1 \omega_1$, где индекс 1 обозначает соответствующие характеристики теплоносителя.

В случае противотока реагирующей смеси и теплоносителя граничные условия для системы (1) — (3) имеют вид:

$$C(0) = C_0, \quad (4)$$

$$T_1(1) = T_0, \quad (5)$$

$$T(0) = \kappa T_1(0), \quad (6)$$

где C_0 — состав исходной смеси; T_0 — исходная температура теплоносителя; температура исходной смеси принята за начало отсчета температуры. Коэффициент κ равен нулю в процессе с независимым теплоносителем. Если же теплоносителем служит сама исходная смесь, то $T_0 = 0$, $\beta = \kappa$ и коэффициент κ равен доле исходной смеси, используемой для охлаждения зоны реакции; при этом всегда $0 < \kappa \leq 1$, а в отсутствие байпаса исходной смеси $\beta = \kappa = 1$.

Для исследования вопроса о существовании решений полезно свести систему (1) — (3) к эквивалентной системе интегральных уравнений типа Гаммерштейна

$$C(x) = \int_0^1 \theta(x - \xi) f(C(\xi), T(\xi)) d\xi + C_0, \quad (7)$$

$$T(x) = \int_0^1 G(x, \xi) h \cdot f(C(\xi), T(\xi)) d\xi + F(x) T_0, \quad (8)$$

где $\theta(x - \xi)$ — ступенчатая функция, принимающая значения $\theta \equiv 1$ при $\xi < x$, $\theta \equiv 0$ при $\xi > x$ и

$$G(x, \xi) = \frac{\beta}{\beta - 1} \left\{ \left[1 - \frac{1}{\beta} e^{\alpha(\beta - 1)(x - \xi)} \right] \theta(x - \xi) + \right.$$

¹ При исследовании стационарных режимов достаточно рассматривать только уравнения для ключевых веществ.

$$+ F(x) [e^{\alpha(\beta-1)(1-\xi)} - 1] \}, \quad (9)$$

$$F(x) = \frac{\beta x - 1 + (1-x)e^{\alpha(\beta-1)x}}{\beta x - 1 + \beta(1-x)e^{\alpha(\beta-1)x}}.$$

В частном случае процесса с теплоносителем — исходной смесью без байпаса $G(x, \xi) = \theta(x-\xi)[1-\alpha(x-\xi)] + \alpha(1-\xi)$.

Введя вектор состояния u с компонентами C, T , вектор-функцию $f(u)$ с компонентами $f_i = f_i$ ($i=1, 2, \dots, s$), $f_0 = h \cdot f$ и диагональные матрицы $\mathbf{G}(x, \xi)$ с элементами $g_i = \theta(x-\xi)$, $\mathbf{G}_0 = \mathbf{G}(x, \xi)$ и $F(x)$ с элементами $F_i(x) = 1$ ($i=1, 2, \dots, s$) $F_0 = F(x)$, мы можем записать систему (7), (8) в матричной форме

$$u(x) = \int_0^1 G(x, \xi) f(u(\xi)) d\xi + F(x) u^0 \equiv A u(\xi). \quad (10)$$

Доказательство существования решений уравнения (10), эквивалентного исходной задаче (1)–(6), устанавливается с помощью топологических методов теории нелинейных интегральных уравнений [4, 5]. С этой целью найдем априорные оценки возможных решений уравнения (10), которые определяются, аналогично [6], законами сохранения вещества и энергии. Пусть молекула i -го вещества содержит ε_{ij} атомов j -го элемента. Исходное количество каждого элемента $E_j = \sum_{k=1}^s \varepsilon_{kj} C_{k0}$ остается, очевидно, неизменным в ходе процесса. Поэтому концентрация любого i -го вещества в реагирующей смеси не может превосходить величины

$$C_i^{\max} = \min_{\varepsilon_{ij}} \frac{1}{\varepsilon_{ij}} \sum_{k=1}^s \varepsilon_{kj} C_{k0}. \quad (11)$$

Знак минимума в (11) указывает, что максимально возможная концентрация вещества определяется количеством элемента, имеющегося в относительном недостатке. Максимальная возможная температура реагирующей смеси в экзотермическом процессе равна

$$T^{\max} = \max_C [h \cdot (C - C_0)] + \max [0, T_0], \quad (12)$$

где первый максимум достигается варьированием вектора состава C в области возможных концентраций $0 \leq C_i \leq C_i^{\max}$. В силу оценки (11) величина T^{\max} конечна. Нижней границей для T является наименьшая из величин $0, T_0$. Аналогичная оценка температуры может быть написана для эндотермического процесса.

Рассмотрим банахово пространство непрерывных вектор-функций $u(x)$ с нормой

$$\|u\| = \sum_{i=0}^s \max u_i(x). \quad (13)$$

Согласно оценкам (11), (12), возможные решения уравнения (10) лежат в шаре

$$\|u\| \leq T^{\max} + \sum_{i=1}^s C_i^{\max} = u^{\max}. \quad (14)$$

Шар (14) в банаховом пространстве является выпуклым замкнутым множеством. Интегральный оператор A определен повсюду на шаре¹ (14) и является вполне непрерывным [4].

Существование решений уравнения (11) может быть теперь доказано методом Лере-Шаудера [4]. Чтобы пояснить его, введем некоторые топологические понятия. Любая непрерывная функция изображается точкой в банаховом пространстве или, что то же самое, вектором, проведенным в эту точку из начала координат (аналогично тому, как изображается векторная величина в обычном конечномерном евклидовом пространстве). Оператор A преобразует вектор u в другой вектор Au или, говоря другими словами, сопоставляет каждой точке u вектор Au , т. е. определяет векторное поле в банаховом пространстве. Точки, в которых удовлетворяется равенство $u=Au$, называются неподвижными точками оператора A . Очевидно, соответствующие функции $u(x)$ являются решениями операторного уравнения (10). Неподвижная точка называется изолированной, если в ее окрестности нет других неподвижных точек оператора A . Каждой изолированной неподвижной точке может быть сопоставлено некоторое целое число, называемое индексом неподвижной точки. Понятие об этой величине можно составить на примере оператора, действующего в двухмерном пространстве. При этом вектор u изображается точкой на плоскости, и изолированную неподвижную точку u_0 можно окружить замкнутым контуром Γ . Тогда индекс неподвижной точки определяется как число оборотов, совершаемых вектором Au при движении по контуру Γ против часовой стрелки. Вращение векторного поля $Au-u$ на любой замкнутой поверхности, внутри которой лежит несколько неподвижных точек оператора A , равно алгебраической сумме индексов этих неподвижных точек. Поэтому если удастся доказать, что вращение векторного поля $Au-u$ на замкнутой поверхности отлично от нуля, это означает, что в области, ограниченной этой поверхностью, существует, по крайней мере, одна неподвижная точка оператора A . Вращение векторного поля на замкнутой поверхности Γ можно установить исходя из свойств векторного поля другого, более простого, оператора, гомотопного оператору A . Два оператора A и A_0 называются гомотопными на Γ , если существует такой вполне непрерывный оператор $A_k(x, k)$, зависящий от параметра k , что

$$A_k(x, 0) = A_0 x; \quad A_k(x, 1) = A(x) \quad (x \in \Gamma);$$

$$A_k(x, k) \neq x \quad (x \in \Gamma, \quad 0 \leq k \leq 1).$$
(15)

В топологической теории нелинейных операторных уравнений доказывается, что вращения векторных полей, соответствующих гомотопным вполне непрерывным операторам, одинаковы.

Исследуемый оператор A (10) оказывается гомотопным на границе шара (14) нулевому оператору $A_0 u = 0 \cdot u$. Действительно, оператор A_k определяется в этом случае как

$$A_k(u, k) = k \int_0^1 G(x, \xi) f(u(\xi)) d\xi + k F(x) u^0.$$
(16)

Этот оператор вполне непрерывен и не имеет неподвижных точек на границе шара (14), поскольку возможные решения уравнения $A_k(u, k) = u$ лежат, согласно априорным оценкам (11), (12), в шаре $\|u\| \leq ku^{\max}$.

¹ В случае, если оператор определен не на всем шаре, его область определения может быть формально расширена [6].

Вращение векторного поля нулевого оператора A_0 на любой сфере $\|u\| = \text{const}$ равно единице; следовательно, ту же величину имеет вращение векторного поля оператора A . Отсюда следует существование неподвижной точки оператора A в шаре (14). Таким образом, уравнение (10) имеет, по крайней мере, одно решение, удовлетворяющее априорным оценкам (12), (13), что и требовалось доказать.

ТОЧКИ ВЕТВЛЕНИЯ И УСТОЙЧИВОСТЬ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ

Доказанная выше теорема устанавливает существование стационарных решений, но ничего не говорит об их числе. В этой теореме не доказывается, имеются ли физически реализуемые устойчивые решения. Для исследования этих вопросов полезно ввести понятие точки ветвления решений уравнения (10). Будем записывать это уравнение со скалярным параметром¹ k :

$$u = k \int_0^1 G(x, \xi) f(u(\xi)) d\xi + F(x) u^0 \equiv k A u. \quad (17)$$

Число $k = k_0$ называется точкой ветвления уравнения (17), если при переходе через эту точку количество решений уравнения меняется, оставаясь конечным. С помощью топологических методов можно установить [5], что количество решений всегда меняется на четное число. Так как при $k = 0$ решение единственно, рассматриваемое уравнение всегда имеет нечетное число решений. Поскольку оператор A зависит от нескольких параметров, мы могли бы говорить о поверхности ветвления в пространстве параметров, однако всегда можно считать значение всех параметров, кроме k , фиксированными и исследовать изменение числа решений в зависимости от этого единственного параметра.

Для того чтобы k_0 было точкой ветвления уравнения (17), необходимо (хотя, вообще говоря, недостаточно) чтобы линейное уравнение

$$v_0 = k_0 \int_0^1 G(x, \xi) f_1(u_0(\xi)) v_0(\xi) d\xi \equiv k_0 B v_0 \quad (18)$$

имело нетривиальное решение. Здесь $f_1(u_0(\xi)) = (\partial f / \partial u)_{u=u_0}$ — матрица Якоби вектор-функции $f(u)$, вычисленная в точке $u = u_0$, соответствующей значению параметра $k = k_0$. Положим $k = k_0(1 + \varepsilon)$, где ε — малый параметр. Тогда при значениях k , близких к k_0 , должно существовать два или больше решений уравнения (17), близких к решению в точке ветвления u_0 . Будем искать эти решения, аналогично работе [7], в виде

$$u = u_0 + \sqrt{\varepsilon} u_1 + \varepsilon u_0 + \dots \quad (19)$$

Из уравнения первого приближения $u_1 = k_0 B u_1$ следует:

$$u_1 = a v_0, \quad (20)$$

где v_0 — нормированная собственная функция линейного уравнения (18), соответствующая собственному числу k_0 , а a — скалярный параметр, который определяется из уравнения второго приближения

¹ В качестве параметра k может быть использована, например, безразмерная константа скорости основной реакции.

$$u_2 = k_0 \int_0^1 G(x, \xi) f_1(u_0(\xi)) u_2(\xi) d\xi + k_0 a^2 \int_0^1 G(x, \xi) \times \\ \times f_2(u_0(\xi)) v_0^2(\xi) d\xi + k_0 \int_0^1 G(x, \xi) f(u_0(\xi)) d\xi, \quad (21)$$

где

$f_2(u_0(\xi))$ — матрица третьего ранга с элементами $\frac{1}{2} (\partial^2 f / \partial u_j \partial u_k)_{u=u_0}$.

Уравнение (21) разрешимо при

$$a = \pm \sqrt{\frac{\int_0^1 \int_0^1 v_0(x) G(x, \xi) f(u_0(\xi)) d\xi dx}{\int_0^1 \int_0^1 v_0(x) G(x, \xi) f_2(u_0(\xi)) v_0^2(\xi) d\xi dx}} \equiv \pm \sqrt{-\frac{I_1}{I_3}}. \quad (22)$$

В случае $I_1/I_3 > 0$ вещественные решения существуют при $\varepsilon < 0$ (точка ветвления I рода — рис. 2), а в случае $I_1/I_3 < 0$ при $\varepsilon > 0$ (точка ветвления II рода)¹.

Так как при всех значениях параметра k должно существовать нечетное число решений, точки ветвления I и II рода должны появляться попарно. Положение точек ветвления, а следовательно, и количество стационарных решений можно определить, как правило, только путем численного расчета. Однако даже не зная их положения, можно установить общую связь между точками ветвления и устойчивостью стационарных решений исследуемой системы.

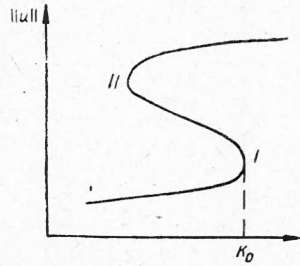


Рис. 2. Точки ветвления.

Для исследования устойчивости стационарных решений рассмотрим соответствующую (1)–(3) систему нестационарных уравнений:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial x} = f(C, T), \quad (23)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial T}{\partial x} = h, f(C, T) - \alpha(T - T_1), \quad (24)$$

$$\omega \frac{\partial T_1}{\partial t} - \frac{\partial T_1}{\partial x} = \alpha \beta (T - T_1), \quad (25)$$

где $\omega = \omega/\omega_1$ и t — безразмерное (с масштабom $t^0 = L/\omega$) время. Стационарный режим устойчив, если достаточно малые возмущения этого режима затухают со временем. Так как возмущения предполагаются малыми, систему уравнений (23)–(25) можно линеаризовать в окрестности стационарного режима $u = u_s(x)$. Вводя вектор отклонений $y(t, x)$ с компонентами $y_i = C_i - C_{is}$ ($i=1, 2, \dots, s$), $y_0 = T - T_s$ и выделяя параметр k , записываем линеаризованную систему уравнений в виде:

$$\frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial y}{\partial x} = k f_1(u_s) y - J \alpha (y - y'), \quad (26)$$

$$\omega \frac{\partial y'}{\partial t} - \frac{\partial y'}{\partial x} = J \alpha \beta (y - y'), \quad (27)$$

¹ В особых случаях $I_1=0$ или $I_3=0$ можно показать, что $k=k_0$ не является точкой ветвления уравнения (17).

где $y' = T_1 - T_{1s}$ и J — диагональная матрица с элементами $J_k = 0$ ($k=1, 2, \dots, s$), $J_0=1$. Ищем частные решения системы уравнений (26), (27) в виде $y(x, t) = v(x) e^{\mu t}$, $y'(x, t) = v'(x) e^{\mu t}$, где собственные функции $v(x)$, $v'(x)$ и собственные значения μ определяются решением задачи

$$\mu v + \frac{dv}{dx} = k f_1(u_s) v - J \alpha (v - v'), \quad (28)$$

$$\omega \mu v' - \frac{dv'}{dx} = J \alpha \beta (v - v') \quad (29)$$

с однородными граничными условиями $v(0) = J \alpha v'(0)$, $v'(1) = 0$. Система (28), (29) может быть сведена к интегральному уравнению относительно вектор-функции v

$$v(x) = k \int_0^1 K(x, \xi; \mu) f_1(u_s(\xi)) v(\xi) d\xi. \quad (30)$$

Здесь ядро $K(x, \xi, \mu)$ — диагональная матрица с элементами

$$K_i(x, \xi; \mu) = \theta(x - \xi) e^{-\mu(x-\xi)}, \quad i = 1, 2, \dots, s; \quad (31)$$

$$K_0(x, \xi; \mu) = \frac{\alpha \beta}{\lambda_2 - \lambda_1} \frac{[\alpha(\lambda_2 + \alpha + \mu) - \alpha] e^{\lambda_1 x} - [\alpha(\lambda_1 + \alpha + \mu) - \alpha] e^{\lambda_2 x}}{[\lambda_1 + \alpha + \mu - \alpha \beta] e^{\lambda_1} - [\lambda_2 + \alpha + \mu - \alpha \beta] e^{\lambda_2}} \times \\ \times [e^{\lambda_1(1-\xi)} - e^{\lambda_2(1-\xi)}] + \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1} \theta(x - \xi) [(\lambda_2 + \alpha + \mu) e^{\lambda_1(x-\xi)} - \\ - (\lambda_1 + \alpha + \mu) e^{\lambda_2(x-\xi)}]; \quad (32)$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} [\alpha(\beta - 1) + \mu(\omega - 1) \pm \sqrt{[\alpha(\beta + 1) + \mu(\omega + 1)]^2 - 4\alpha^2 \beta}]. \quad (33)$$

Очевидно, $k(x, \xi; 0) \equiv G(x, \xi)$. Будем искать собственные значения μ и собственные функции $v(x)$ уравнения (30) при $k = k_0 + \varepsilon$ в виде

$$\mu = \mu_0 + \sqrt{\varepsilon} \mu_1 + \dots; \quad v = v_0 + \sqrt{\varepsilon} v_1 + \dots \quad (34)$$

В нулевом приближении получаем уравнение (18). Так как при $k = k_0$ это уравнение имеет нетривиальное решение, спектр уравнения (30) содержит в точке ветвления $k = k_0$ собственное число $\mu = 0$. В первом приближении, используя (20), получаем уравнение

$$v_1(x) = k_0 \int_0^1 G(x, \xi) f_1(u_0(\xi)) v_1(\xi) d\xi + 2\alpha k_0 \int_0^1 G(x, \xi) \times \\ \times f_2(u_0(\xi)) v_0^2(\xi) d\xi + \mu_1 k_0 \int_0^1 \left(\frac{\partial K}{\partial \mu} \right)_{\mu=0} f_1(u_0(\xi)) v_0(\xi) d\xi. \quad (35)$$

Уравнение (35) разрешимо при

$$\mu_1 = -2\alpha \frac{\int_0^1 \int_0^1 v_0(x) G(x, \xi) f_2(u_0(\xi)) v_0^2(\xi) d\xi dx}{\int_0^1 \int_0^1 \left(\frac{\partial K}{\partial \mu} \right)_{\mu=0} v_0(x) f_1(u_0(\xi)) v_0(\xi) d\xi dx} \equiv -2\alpha I_3 / I_2. \quad (36)$$

Из (36) видно, что знак μ различен для двух непрерывных ветвей решений, выходящих из точки ветвления и отличающихся знаком α .

Поэтому устойчивыми могут быть только решения, принадлежащие к одной из этих ветвей. Решения могут быть неустойчивыми на обеих ветвях, если в точке ветвления имеются собственные решения с положительной действительной частью.

Исследуем возможные изменения устойчивости решений при увеличении параметра k от $k=0$ до $k=k_0$, которому соответствует движение по непрерывной ветви решений (см. рис. 2) от начала координат до точки ветвления I рода. При $k=0$ решение единственно и заведомо устойчиво. Решение может быть неустойчивым, если при увеличении параметра k одно из собственных значений уравнения (30) перейдет в правую полуплоскость. Переход действительного собственного значения через нуль, однако, невозможен ни при каком $k=k_1 < k_0$, так как в этом случае уравнение (18) имело бы нетривиальное решение и данное значение параметра было бы точкой ветвления¹. Решение может стать в некоторой точке непрерывной ветви решений неустойчивым только в результате перехода комплексного собственного значения через мнимую ось. Если бы удалось доказать, что собственное значение с наибольшей действительной частью всегда действительно, это означало бы, что устойчивость может меняться только в точке ветвления. Условия такого поведения рассматриваемой системы будет выведено ниже.

ЗНАКОПОСТОЯНСТВО НЕСТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ

Полезно исследовать еще одно интегральное уравнение, эквивалентное линеаризованной системе нестационарных уравнений (26), (27). Определим матрицу $Y(x)$ как решение обыкновенного дифференциального уравнения

$$\frac{dY(x)}{dx} = k f_1(u_s(x)) Y(x) - J \alpha Y(x) \quad (37)$$

с начальным условием $Y(0) = I$ (I — единичная матрица). Тогда система уравнений (26), (27) сводится к интегральному уравнению относительно отклонения температуры реагирующей смеси от стационарного значения $y_0(t, x) = T - T_s$:

$$y_0(t, x) = \int_0^x d\xi \int_0^1 d\eta L(x, \xi, \eta) y_0(t - x + \xi - \omega(\eta - \xi), \eta) \quad (38)$$

с ядром

$$L(x, \xi, \eta) = J \alpha \beta e^{-\alpha \beta (\eta - \xi)} Y(x) Y^{-1}(\xi) [x \delta(\xi) + \alpha \theta(\eta - \xi)], \quad (39)$$

где $\delta(\xi)$ — дельта-функция Дирака. Уравнение (38) позволяет вычислить отклонение температуры $y_0(t_0, x)$ в любой момент времени t_0 , если известны значения $y_0(t, x)$ в интервале $t_0 - 1 - \omega < t < t_0$. Предположим, что ядро $L(x, \xi, \eta)$ неотрицательно при любом x, ξ, η из интервала $(0, 1)$. Выполнение этого условия связано со свойствами матрицы $Y(x)$, а через нее с кинетическими характеристиками процесса; $L(x, \xi, \eta) \geq 0$, если температурный элемент функции Грина $JY(x)Y^{-1}(\xi)$ неотрицателен. Тогда при любом знакопостоянном исходном возмущении $y_0(0, x)$

¹ Если одновременно $I_3=0$ или $I_1=0$, то $k=k_1$ не будет точкой ветвления. Можно, однако, показать, что при $I_3=0$ знак μ одинаков по обе стороны от точки $k=k_1$ при $I_1=0$, устойчивые решения также существуют по обе стороны от $k=k_1$, причем ветвь устойчивых решений имеет излом.

решение, очевидно, будет иметь тот же знак в любой момент времени t . Этот факт позволяет сделать некоторые выводы о спектре системы (28), (29) или эквивалентного ей интегрального уравнения (30). Действительно, на достаточно больших временах нестационарное решение имеет вид

$$y = b v_0(x) e^{\mu_0 t}, \quad (40)$$

где μ_0 — собственное число уравнения (30), имеющее наибольшую действительную часть; $v_0(x)$ — соответствующая μ_0 собственная функция; b — константа, зависящая от начального возмущения. Очевидно, функция (40) знакопостоянна только в том случае, если собственное число μ_0 действительно и собственная функция $v_0(x)$ знакопостоянна. Таким образом, из $L(x, \xi, \eta) \geq 0$ следует, что собственное число уравнения (30) с наибольшей действительной частью действительно и соответствующая ему собственная функция знакопостоянна.

Так как при $L(x, \xi, \eta) \geq 0$ μ_0 действительно, потеря устойчивости может в этом случае произойти только в точке ветвления стационарного уравнения (17). Если решение при каком-либо значении параметра k устойчиво, то устойчивы и все другие решения из той же непрерывной ветви, вплоть до точки ветвления $k = k_0$. Из этого, в частности, следует, что в случае, когда точек ветвления нет, имеющийся единственный стационарный режим всегда устойчив.

Исследуем условие неотрицательности ядра $L(x, \xi, \eta)$ для случая, когда в аппарате протекает только одна реакция. При этом можно показать, что элемент $JY(x)Y^{-1}(\xi)$, а следовательно, и ядро (39) положительно, если решение интегро-дифференциального уравнения

$$\frac{dy}{dx} = \alpha f_c(x) \int_{\xi}^x y(\eta) d\eta + [h f_T(x) + f_c(x) - \alpha] y; \quad y(\xi) = 1 \quad (41)$$

положительно на интервале $0 \leq \xi \leq x \leq 1$.

Здесь $f_c = \partial f / \partial C$, $f_T = \partial f / \partial T$ (обе производные вычисляются в условиях стационарного режима). Решение уравнения (41) повсюду положительно при $f_c \geq 0$, что соответствует случаю реакции нулевого порядка или реакции автокаталитического типа. В случае $f_c < 0$, решение может, вообще говоря, стать отрицательным; однако при достаточно большом $h f_T$, т. е. для реакции с большим тепловым эффектом и значительной энергией активации, решение будет положительным на интервале (0,1). В перечисленных случаях справедливы приведенные выше утверждения о сохранении устойчивости на всей непрерывной ветви решений уравнения (17).

Если ядро $L(x, \xi, \eta)$ знакопеременно, то в принципе возможна ситуация, когда по мере движения по непрерывной ветви решений при некотором значении параметра k два комплексно-сопряженных собственных числа переходят в правую полуплоскость через мнимую ось. При этом может случиться, что реактор вовсе не будет иметь устойчивых стационарных режимов и будет работать в режиме нелинейных колебаний, выходя с течением времени на устойчивый предельный цикл. Задача исследования предельных циклов для системы с распределенными параметрами чрезвычайно сложна, и до сих пор не удавалось сделать никаких выводов о возможности их осуществления в пространственно распределенных химических процессах, хотя имеются экспериментальные указания на то, что подобные явления встречаются на практике [8].

ПРЯМОТОЧНЫЙ РЕАКТОР

Приведенная схема исследования может быть применена без существенных изменений к анализу существования и устойчивости стационарных режимов самых разнообразных схем реакторов с теплообменниками. Рассмотрим, например, прямоточный реактор с внутренним теплообменом (см. рис. 1, в, з). Уравнения, описывающие его стационарный режим, совпадают с (1)–(3), с той лишь разницей, что параметр β теперь отрицателен. Граничные условия имеют вид

$$C(0) = C_0; \quad T_1(0) = T_0; \quad T(0) = \kappa T_1(1). \quad (42)$$

Эта задача сводится к векторному интегральному уравнению типа (10), решение которого удовлетворяет тем же, что выше, априорным оценкам (11), (12). Отсюда устанавливается существование, по крайней мере, одного стационарного решения. При записи нестационарных уравнений параметр ω , как и β , следует считать отрицательным. Ядро $L(x, \xi, \eta)$ интегрального уравнения (38) имеет в рассматриваемом случае вид

$$L(x, \xi, \eta) = J \alpha |\beta| Y(x) e^{-\alpha |\beta| (\xi - \eta)} [\kappa \delta(1 - \xi) + \alpha \theta(\xi - \eta) Y^{-1}(\xi)]. \quad (43)$$

Условие положительности этого ядра, обеспечивающее сохранение устойчивости на непрерывной ветви решений, то же, что и для противоточного реактора.

Особым является случай прямоточного реактора с независимым теплоносителем ($\kappa=0$). При этом уравнение (1)–(3) с граничными условиями (42) представляют собой задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений и, следовательно, стационарное решение всегда единственно. В соответствии с этим ядро $G(x, \xi)$ в данном случае отлично от нуля только при $\xi < x$ и линейное интегральное уравнение (18) является уравнением типа Вольтерра. Такое уравнение не имеет собственных значений, так что уравнение (17), эквивалентное исходной системе, не имеет точек ветвления. Уравнение (18) принимает вид

$$y_0(t, x) = \alpha^2 |\beta| J \int_0^x \int_0^\xi Y(x) Y^{-1}(\xi) e^{-\alpha |\beta| (\xi - \eta)} y_0[t - x + \xi |\omega| (\xi - \eta), \eta]. \quad (44)$$

При произвольном возмущении в момент $t=0$ уравнению (44) удовлетворяет функция $y_0(t, x) \equiv 0$ при $t > x \cdot \max(1, |\omega|)$. Это соответствует тому физически очевидному факту, что возмущение вымывается из любого сечения реактора за время x или $|\omega|x$ в зависимости от соотношения между величинами 1 и $|\omega|$.

Аналогичные результаты получаются и для других схем реакторов с внутренним теплообменом. В частности, для случая постоянной температуры теплоносителя получаются результаты, выведенные другим способом в работе [9]. Отметим, что изложенные методы не чувствительны к модели реактора и те же выводы могут быть получены для реакторов с более сложным математическим описанием (например, с температурой, меняющейся по сечению реактора).

Поступила в редакцию
26/VI 1968

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. Арис. Анализ процессов в химических реакторах. «Химия», 1967.
2. Т. И. Зеленьяк. Дифференциальные уравнения, 1966, 2, 205.
3. В. И. Мукосей, Л. М. Письмен, Ю. И. Харкац. ИФЖ, 1967, 6.
4. М. А. Красносельский. Топологические методы в теории нелинейных уравнений. ГТТИ, 1956.
5. Функциональный анализ. Под ред. С. Г. Крейна, СМБ, «Наука», 1964.
6. G. R. Cavalas. Chem. Eng. Sci., 1966, 21, 477.
7. Л. М. Письмен, Ю. И. Харкац. Докл. АН СССР, 1966, 168, 632.
8. Б. В. Вольтер. I международный конгресс ИФАК, 1960.
9. Л. М. Письмен. Кинетика и катализ, 1966, 7, 874.

УДК 536.48

ГАЗИФИКАЦИЯ УГЛЕРОДА ПРИ НАЛИЧИИ СУБЛИМАЦИИ И САМОДИФФУЗИИ

Е. С. Головина, Л. Л. Котова

(Москва)

Известно [1, 2], что в области наиболее высоких температур, где наблюдается интенсивное реагирование углерода с газами, процесс находится в своем предельном диффузионном состоянии — скорость его взаимодействия определяется характеристиками переноса газа и слабо зависит от температуры. Весь подводимый к реагирующей поверхности газ благодаря большой интенсивности процесса неизбежно расходуется вблизи внешней поверхности образца, не проникая в его объем. Концентрация окислителя у поверхности близка к нулю. Считается до сих пор на основании результатов, полученных при сравнительно низких температурах, что благодаря этому должно происходить изменение геометрических размеров реагирующего образца с сохранением неизменной плотности в объеме.

Однако как показали последние экспериментальные данные [3], при расширении температурного диапазона исследования более 2000° К, в условиях, когда реализуется развитый диффузионный режим реагирования, происходит расход твердой фазы из внутренних частей тела и уменьшение плотности в его объеме. Наиболее отчетливо это наблюдается на примере реакции углерода с двуокисью углерода.

Практически используемая величина для суммарного описания процесса взаимодействия углерода с газом — удельная скорость суммарного расходования твердого вещества — K_s^c должна, на основании изложенного, для всего широкого диапазона температур, а не только для низких, выражаться суммой, состоящей из удельной поверхностной скорости взаимодействия K_s^s и из удельной объемной скорости взаимодействия K_s^v , т. е.

$$K_s^v = K_s^s + K_s^c.$$