

О НЕЕДИНСТВЕННОСТИ И НЕУСТОЙЧИВОСТИ РЕЖИМОВ ГОРЕНИЯ ГАЗОВОЙ СМЕСИ ПРИ ДЕЙСТВИИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Излагаются результаты теоретического исследования динамического поведения химически активной газовой смеси при нелинейном воздействии лазерного излучения. Первым методом Ляпунова выделены области возможных режимов горения. Показано, что вследствие температурной зависимости коэффициента поглощения смеси число стационарных состояний увеличивается до пяти. Данные линейного анализа подтверждены численным экспериментом.

Теоретическое изучение возможных режимов горения несжимаемой газовой смеси, поглощающей лазерное излучение, показало, что в случае простой экзотермической химической реакции при постоянной скорости течения смеси в реакторе и коэффициенте поглощения излучения, зависящем только от концентрации поглощающего компонента, существуют одно или три стационарных состояния [1]. Исследования динамики сложных химических превращений без учета [2] и при учете [3] температурной зависимости коэффициента поглощения среды показали, что число стационарных состояний системы может возрастать до пяти.

В настоящей работе устойчивость горения изучается для случая простой экзотермической реакции, при этом учитывается зависимость коэффициента поглощения смеси от температуры, плотности от температуры и давления, изменение скорости течения по длине реактора.

Рассматривается прохождение лазерного излучения через химически активный оптически тонкий слой газовой смеси в реакторе. Движение газа обусловлено перепадом давления по его длине. Зависимость скорости мономолекулярной реакции $A \rightarrow B$ от температуры определяется законом Аррениуса. Коэффициент поглощения излучения для смеси $\kappa = \kappa_1 c + \kappa_2 (1 - c)$ определяется показателями поглощения κ_1 и κ_2 чистых веществ А и В [3], c — относительная концентрация компонента А. Температурная зависимость κ_i описывается формулой $\kappa_i = \kappa_{0i} \exp(-E_i/RT)$, где κ_{0i} и E_i — эмпирические константы, причем $E_1 = E_2 = E_*$. Отток тепла через стенки реактора в окружающую среду происходит по закону Ньютона. Справедливо уравнение состояния идеального газа.

Для анализа режимов работы химических реакторов используется нуль-мерная модель [4], полученная из одномерной системы дифференциальных уравнений в частных производных. В безразмерных переменных динамическая система 3-го порядка баланса импульса, тепла и вещества имеет вид

$$\begin{aligned} \tau > 0: \frac{dv}{d\tau} &= -2v(v - v_{\text{BX}}) - 2\gamma m \frac{\Theta}{\Theta_{\text{BX}}} = \Psi_1(v, \Theta, c), \\ \frac{d\Theta}{d\tau} &= -2v(\Theta - \Theta_{\text{BX}}) + \frac{\Theta}{\tau \Theta_{\text{BX}}} \left\{ -4\delta(\Theta - \Theta_{\text{BX}}) - d(\Theta - \Theta_{\text{CP}}) + \right. \\ &+ Q \text{Da} \exp\left(-\frac{1}{\Theta}\right) + F[\sigma_1 c + \sigma_2(1 - c)] \exp\left(-\frac{\mu}{\Theta}\right) \left. \right\} = \Psi_2(v, \Theta, c), \\ \frac{dc}{d\tau} &= -2(c - c_{\text{BX}}) \left\{ v + 2 \text{Le} \left[2 - m - \frac{\Theta_{\text{BX}}}{\Theta} \right] \right\} - \text{Da} c \exp\left(-\frac{1}{\Theta}\right) = \Psi_3(v, \Theta, c), \\ \tau = 0: v &= v_{\text{H}}, \Theta = \Theta_{\text{H}}, c = c_{\text{H}}; \\ \tau &= \frac{tu_{\text{HX}}}{L}, v = \frac{u}{u_{\text{BX}}}, \Theta = \frac{RT}{E}, \tilde{p} = \frac{p}{p_{\text{BX}}}, m = \frac{\tilde{p}_{\text{HX}} - \tilde{p}_{\text{HX}}}{\tilde{p}_{\text{HX}} + \tilde{p}_{\text{HX}}}, \\ n &= \frac{\tilde{p}_{\text{ВЫХ}} + \tilde{p}_{\text{ВХ}}}{2}, \gamma = \frac{p_{\text{ВХ}}}{\rho_{\text{HX}} u_{\text{HX}}^2}, F = \frac{IL}{\rho_{\text{ВХ}} c v u_{\text{ВХ}}} \frac{R}{E} (\kappa_{01} + \kappa_{02}), \text{Le} = \frac{D}{Lu_{\text{ВХ}}}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\sigma_1 = \frac{\kappa_{01}}{\kappa_{01} + \kappa_{02}}, \quad \sigma_2 = \frac{\kappa_{01}}{\kappa_{01} + \kappa_{02}}, \quad \mu = \frac{E^*}{E}, \quad \delta = \frac{\lambda}{\rho_{\text{вх}} c_V u_{\text{вх}} L}, \quad \text{Da} = \frac{k_0 L}{u_{\text{вх}}},$$

$$Q = \frac{(-\Delta H) R}{\rho_{\text{вх}} c_V E}.$$

Здесь t — время; T — температура; c — относительная концентрация компонента А; ρ — плотность; p — давление; k_0 , E , $(-\Delta H)$ — предэкспоненциальный множитель, энергия активации, тепловой эффект реакции; R — универсальная газовая постоянная; L — длина кюветы; u — скорость подачи смеси; λ , c_V , D , d — коэффициенты теплопроводности, теплоемкости, диффузии, эффективный коэффициент теплообмена с окружающей средой; I — интенсивность лазерного излучения. Индексы н, вх относятся к начальному состоянию и входу в реактор, в дальнейшем знак \sim опускается.

Стационарные состояния системы (1) определяются условиями

$$\Psi_1(v_s, \Theta_s, c_s) = 0, \quad \Psi_2(v_s, \Theta_s, c_s) = 0, \quad \Psi_3(v_s, \Theta_s, c_s) = 0$$

и могут быть найдены с помощью бифуркационной диаграммы:

$$\Theta_{\text{ср}} = \Theta_s + \frac{1}{d} \left\{ \frac{2v_s(\Theta_s - \Theta_{\text{вх}})n\Theta_{\text{лх}}}{\Theta_s} + 4\delta(\Theta_s - \Theta_{\text{вх}}) - Q \text{Da} c_s \exp\left(-\frac{1}{\Theta_s}\right) - F[\sigma_1 c_s + \sigma_2(1 - c_s)] \exp\left(-\frac{E}{\Theta_s}\right) \right\},$$

$$v_s = \frac{1}{2} \left(v_{\text{вх}} + \sqrt{v_{\text{вх}}^2 - 4\gamma m \frac{\Theta_s}{\Theta_{\text{вх}}}} \right), \quad (2)$$

$$c_s = \frac{2c_{\text{вх}} \left\{ v_s + 2 \text{Le} \left[2 - m - \frac{\Theta_s}{\Theta_{\text{вх}}} \right] \right\}}{2 \left\{ v_s + 2 \text{Le} \left[2 - m - \frac{\Theta_s}{\Theta_{\text{вх}}} \right] \right\} + \text{Da} \exp\left(-\frac{1}{\Theta_s}\right)}.$$

На рис. 1 представлены возможные бифуркационные диаграммы. Как видно, система имеет одно (кривая 1), три (2) или пять (3–5) положений равновесия. Неединственные стационарные состояния возникают вследствие наличия в системе двух нелинейных источников подачи тепла (за счет химической реакции и воздействия лазерного излучения) при переменной скорости движения смеси. Причем при более низких температурах область множественности состояний равновесия возникает из-за положительной связи скорость химической реакции — температура, а при более высоких температурах сказывается связь коэффициент поглощения — температура.

Возможные режимы горения газовой смеси исследуются методом малых отклонений от положения равновесия [5]. Введем новые переменные $\xi_1 = v - v_s$, $\xi_2 = \Theta - \Theta_s$, $\xi_3 = c - c_s$ и разложим правые части (1) в ряд Тейлора по степеням ξ_i ($i = 1, 3$). Уравнения первого приближения примут вид $\dot{\xi} = M \xi$, где $M = \|a_{ij}\|$ — матрица линейного преобразования:

$$a_{11} = \left(\frac{\partial \Psi_1(v, \Theta, c)}{\partial v} \right)_s = -4v_s + 2v_{\text{вх}},$$

$$a_{12} = \left(\frac{\partial \Psi_1(v, \Theta, c)}{\partial \Theta} \right)_s = -\frac{2m}{\Theta_{\text{вх}}} \gamma,$$

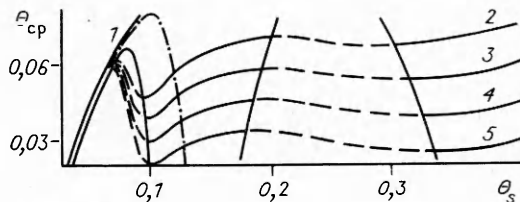


Рис. 1. Бифуркационные диаграммы при $c_{\text{вх}} = 0,0025$ (1), $0,0125$ (2), $0,015$ (3), $0,0175$ (4), $0,02$ (5).

$$\begin{aligned}
a_{12} &= \left(\frac{\partial \Psi_1(v, \Theta, c)}{\partial c} \right)_s = 0, \\
a_{21} &= \left(\frac{\partial \Psi_2(v, \Theta, c)}{\partial v} \right)_s = -2(\Theta_s - \Theta_{\text{BX}}), \\
a_{22} &= \left(\frac{\partial \Psi_2(v, \Theta, c)}{\partial \Theta} \right)_s = -\frac{2v_s \Theta_{\text{BX}}}{\Theta_s} - \frac{1}{n\Theta_{\text{BX}}} \left\{ (4\delta + d)\Theta_s - \frac{\mu}{\Theta_s} F\sigma_2 \exp\left(-\frac{\mu}{\Theta_s}\right) \right\} + \\
&\quad + \frac{c_s}{n\Theta_s \sigma_{\text{BX}}} \left[Q \text{Da} \exp\left(-\frac{1}{\Theta_s}\right) + \mu F(\sigma_1 - \sigma_2) \exp\left(-\frac{\mu}{\Theta_s}\right) \right] = y_1 + y_2 c_s, \\
a_{23} &= \left(\frac{\partial \Psi_2(v, \Theta, c)}{\partial c} \right)_s = \frac{\Theta_s}{n\Theta_{\text{BX}}} \left\{ Q \text{Da} \exp\left(-\frac{1}{\Theta_s}\right) + F(\sigma_1 - \sigma_2) \exp\left(-\frac{\mu}{\Theta_s}\right) \right\}, \\
a_{31} &= \left(\frac{\partial \Psi_3(v, \Theta, c)}{\partial v} \right)_s = \frac{\text{Da} c_s \exp\left(-\frac{1}{\Theta_s}\right)}{v_s + 2\text{Le} \left[2 - m - \frac{\Theta_{\text{BX}}}{\Theta} \right]} = y_3 c_s, \\
a_{32} &= \left(\frac{\partial \Psi_3(v, \Theta, c)}{\partial \Theta} \right)_s = \frac{\text{Da} c_s \exp\left(-\frac{1}{\Theta_s}\right)}{\Theta_s^2} \left\{ \frac{2\text{Le} \Theta_{\text{BX}}}{v_s + 2\text{Le} \left[2 - m - \frac{\Theta_{\text{BX}}}{\Theta} \right]} - 1 \right\} = y_4 c_s, \\
a_{33} &= \left(\frac{\partial \Psi_3(v, \Theta, c)}{\partial c} \right)_s = -2 \left\{ v_s + 2\text{Le} \left[2 - m - \frac{\Theta_s}{\Theta_{\text{BX}}} \right] \right\} = \text{Da} \exp\left(-\frac{1}{\Theta_s}\right).
\end{aligned}$$

Поведение решений системы (1) вблизи особой точки определяется значениями корней характеристического уравнения

$$\begin{aligned}
v^3 + \sigma v^2 + \Delta v + \vartheta &= 0; \\
\sigma &= -(a_{11} + a_{22} + a_{33}), \\
\Delta &= \begin{vmatrix} a_{11}a_{21} & a_{11}a_{31} & a_{22}a_{32} \\ a_{12}a_{22} & a_{13}a_{33} & a_{23}a_{33} \end{vmatrix}, \\
\vartheta &= - \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}.
\end{aligned}$$

Установлено, что уравнения границы неединственных стационарных состояний совпадают с уравнениями границы $\vartheta = 0$ и на плоскости параметров температура окружающей среды — концентрация на входе имеют вид

$$\begin{aligned}
\Theta_{\text{CP}} &= \Theta_s + \frac{1}{d} \left\{ \frac{2v_s(\Theta_s - \Theta_{\text{BX}})n\Theta_{\text{BX}}}{\Theta_s} + 4\delta(\Theta_s - \Theta_{\text{BX}}) - \right. \\
&\quad \left. - Q \text{Da} c_s \exp\left(-\frac{1}{\Theta_s}\right) - F[\sigma_1 c_s + \sigma_2(1 - c_s)] \exp\left(-\frac{\mu}{\Theta_s}\right) \right\}, \quad (3)
\end{aligned}$$

$$c_{\text{BX}} = \frac{2 \left\{ v_s + 2\text{Le} \left[2 - m - \frac{\Theta_{\text{BX}}}{\Theta_s} \right] \right\} + \text{Da} \exp\left(-\frac{1}{\Theta_s}\right)}{2 \left\{ v_s + 2\text{Le} \left[2 - m - \frac{\Theta_{\text{BX}}}{\Theta_s} \right] \right\}} c_s,$$

$$c_s = \frac{a_{33}(a_{12}a_{21} - a_{11}y_1)}{a_{11}(a_{33}y_2 - a_{23}y_4) + a_{12}a_{23}y_3}, \quad (4)$$

v_s определяется с помощью (2).

Граница нейтральной устойчивости совпадает с границей $\sigma = 0$. Параметрические уравнения (2), (3) совместно с выражением

$$c_s = -(a_{11} + a_{33} + y_1)/y_2 \quad (5)$$

определяют положение границы нейтральной устойчивости на плоскости $(\Theta_{cp}, c_{вх})$.

Линейная теория предсказывает приближенное значение периода колебаний [6]

$$\tau_k = \frac{4\pi}{\sqrt[3]{\left(\sqrt[3]{-\frac{S_2}{2} + \sqrt{S_3}} + \sqrt[3]{\frac{S_2}{2} + \sqrt{S_3}}\right)}}, \quad (6)$$

где $S_1 = \Delta - \sigma^3/3$; $S_2 = 2\sigma^3/27 - \sigma\Delta/3 + \vartheta$; $S_3 = (S_1/3)^3 + (S_2/2)^2$.

На плоскостях (Θ_s, Θ_{cp}) и $(\Theta_{cp}, c_{вх})$ можно выделить области возможных режимов горения (рис. 1, 2). Сплошной линией показана граница области неединственных стационарных состояний $\vartheta = 0$, построенная по уравнениям (2)–(4); штрихпунктирной — граница нейтральной устойчивости $\sigma = 0$, построенная по уравнениям (2), (3) и (5). Штриховой линией показаны неустойчивые и нереализуемые режимы горения. Как видно из рис. 1, граница области неединственности стационарных состояний проходит через экстремумы бифуркационных диаграмм. Это означает, что положения равновесия, расположенные под кривой $\vartheta = 0$, являются седлами.

На рис. 1 показано, что граница области неединственности состоит из двух ветвей, поэтому в зависимости от параметров прямая $\Theta_{cp} = \text{const}$ пересекает одну из этих областей (три стационарных состояния; область II на рис. 2) или две одновременно (пять стационарных состояний; область III). Таким образом, если в системе существуют одно или три состояния равновесия, то кривая $\vartheta = 0$ имеет одну точку возврата 1-го рода; если одно, три или пять стационарных состояний, то три точки возврата 1-го рода и точку самопересечения (см. рис. 2). Положения равновесия, расположенные под кривой $\sigma = 0$ для параметров области IV, неустойчивы, в системе реализуются автоколебания. При $\vartheta > 0$, $\sigma > 0$ (см. рис. 2, I) система обладает единственным, всегда устойчивым положением равновесия. Уменьшение градиента давления приводит к увеличению области существования трех стационарных состояний, смещению ее в сторону более низких значений $c_{вх}$ и сокращению области существования пяти положений равновесия.

Рассмотрим, каким образом параметры, характеризующие интенсивность лазерного излучения F и коэффициенты поглощения σ_1, μ , влияют на область неединственных стационарных состояний. Вычисления показали, что с увеличением интенсивности излучения область существования пяти режимов горения расширяется, смещаясь в сторону более низких концентраций на входе и более высоких температур окружающей среды. Если лазерное излучение поглощается в основном исходным веществом, то область существования трех стационарных состояний уменьшается, а область пяти состояний равновесия значительно увеличивается по сравнению со случаем, когда лазерное излучение преимущественно поглощается продуктом реакции. Усиление температурной зависимости коэффициента поглощения (т. е. увеличение параметра μ) приводит к появлению области существования пяти режимов горения.

Для проверки результатов линейного анализа исходная нелинейная система (1) решалась методом Гира [7]. На рис. 3, 4 показаны численно реализованные режимы с параметрами, соответствующими различным областям на рис. 2. Для случая, когда реактор обладает пятью положениями равновесия (точка K на рис. 2), из которых два седла (свет-

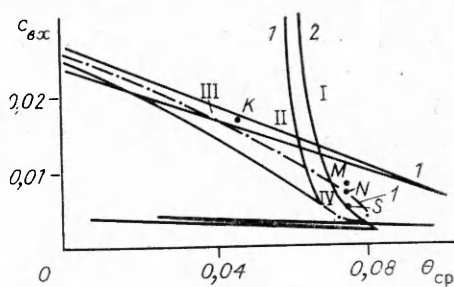


Рис. 2. Взаимное расположение кривых $\vartheta = 0$, $\sigma = 0$ при $p_{вых} - p_{вх} = -10^{-9}$ (I) и -10^{-7} (2).

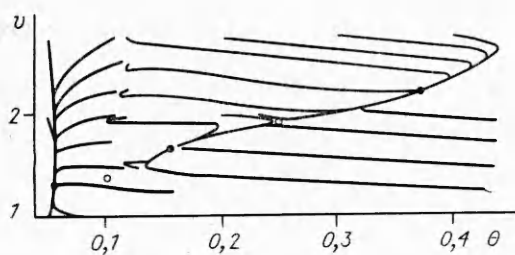


Рис. 3. Фазовый портрет системы при пяти стационарных состояниях.



Рис. 4. Изменение со временем температуры в реакторе.

лые точки) и три устойчивых узла (темные), фазовый портрет показан на рис. 3. На рис. 4 видно изменение характера процесса горения в зависимости от концентрации на входе. Штриховыми линиями нанесены соответствующие значения Θ_s . При $\Theta_{ср} = 0,075$, $c_{вх} = 0,008$ (точка *M* на рис. 2) реализуется устойчивый режим без колебаний (кривая 1); при $c_{вх} = 0,0075$ и $0,005$ (точки *N* и *S* на рис. 2) наблюдаются соответственно устойчивый процесс затухающих колебаний (кривая 2) и автоколебательный режим (кривая 3), что согласуется с результатами приближенно-аналитического исследования. В последнем случае период колебаний равен $0,2498$, а формула (6) дает $\tau_k = 0,2578$.

Таким образом, предсказания линейного анализа подтверждаются результатами численного решения нелинейной задачи. Изученные закономерности нелинейного воздействия лазерного излучения на химически активную смесь могут быть использованы при управлении термохимическими процессами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бухарбаева А. С., Ицкова П. Г., Лукьянов А. Т. Об устойчивости стационарных режимов гомогенного горения при селективном воздействии лазерного излучения // ФГВ.— 1988.— 24, № 3.— С. 26—31.
2. Balakotiah V., Luss D. // Chem. Engng Sci. — 1982.— 37, N 11.— P. 1611—1623.
3. Бункин Ф. В., Кириченко Н. А., Лукьянчук Б. С.— М., 1983.— (Препр./АН СССР. ФИАН; № 266).
4. Лукьянов А. Т., Артюх Л. Ю., Ицкова П. Г. Математическое моделирование задач теории горения.— Алма-Ата: Наука, 1981.
5. Вольтер Б. В., Сальников И. Е. Устойчивость режимов работы химических реакторов.— М.: Химия, 1981.
6. Бронштейн И. Н., Семендяев К. А. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов.— М.: Наука, 1986.
7. Полак Л. С., Гольденберг М. Я., Левицкий А. А. Вычислительные методы в химической кинетике.— М.: Наука, 1984.

г. Алма-Ата

Поступила в редакцию 3/V 1990