ЖЭТФ, 2012, том 142, вып. 2 (8), стр. 386–389

ЭФФЕКТ МАЯТНИКА КАПИЦЫ В ПРОТОЧНОМ РЕАКТОРЕ

Н. И. Ваганова, Э. Н. Руманов [*]

Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 2 сентября 2011 г.

В широком диапазоне параметров уравнения проточного экзотермического реактора имеют три стационарных решения, описывающих состояния: горячее, холодное и промежуточное, неустойчивое. Сходство с уравнениями одномерного движения указывает на возможность стабилизации неустойчивости малым высокочастотным возмущением (эффект маятника Капицы). Такая стабилизация получена при численном моделировании.

1. ВВЕДЕНИЕ

Первые исследования проточного экзотермического реактора [1, 2] показали, что пространство параметров разбивается на две части; в одной из них каждой «точке» отвечает лишь одно стационарное состояние, в другой части таких состояний три. В зависимости от начальных условий, реактор переходит либо в горячий режим, при котором успевает пройти почти полное превращение поступающей смеси, либо в холодный, при котором вещество течет через систему, почти не испытывая превращения. Формально имеется еще промежуточное состояние, однако оно неустойчиво. При определенных условиях развиваются релаксационные колебания [3–5]: после вспышки наступает пауза, в течение которой продукты замещаются свежей смесью, затем следует новая вспышка.

В работе [6] было высказано пожелание найти способ стабилизации неустойчивого режима, чтобы превращение могло идти до ценных полупродуктов. Зельдович сравнивал реактор и звезду на главной последовательности (например, Солнце). Баланс термоядерного источника и лучистого отвода энергии тоже дает три стационарных состояния, но устойчивым является среднее из них, поскольку теплоемкость звезды отрицательна (см. [7]). Мы рассмотрим стабилизацию неустойчивого режима, исходя из математической аналогии между уравнениями реактора и одномерного движения в поле потенциальной силы и силы трения. В неустойчивом состоянии потенциал достигает максимума. Действие высокочастотного возмущения создает на месте максимума некоторый минимум эффективной потенциальной энергии, чем и обеспечивается стабилизация (эффект маятника Капицы [8]).

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Запишем уравнения реактора в виде, удобном для дальнейшего численного моделирования:

$$\frac{d\eta}{dt} = \Phi(\eta, \theta) - \frac{\eta}{D}, \tag{1}$$

$$\frac{d\theta}{dt} = Z\Phi - \frac{Z+\theta}{S}. \tag{2}$$

Здесь η — концентрация продукта реакции (глубина превращения), $0 < \eta < 1$, $\theta = (E/T_b^2)(T - T_b)$, энергия активации E и температура T выражены в одинаковых единицах, $T_b = T_a + Q/c$, T_a — температура термостата и поступающей смеси, Q — теплота реакции, c — теплоемкость. Скорость реакции в простейшем случае равна

$$\Phi = (1-\eta)e^{\theta}, \tag{3}$$

причем в качестве масштаба времени в уравнениях (1), (2) выбрана величина $(1/k)\exp(E/T_b)$, k — постоянный множитель, имеющий размерность частоты, и принято, что $\exp(E/T) \approx \exp(E/T_b)/\exp\theta$ Система (1), (2) содержит три параметра: числа Дамкёлера (Damköhler) $D = \tau k \exp(-E/T_b)$, Семенова $S = D/(1+\tau\tau_f^{-1})$ и Зельдовича $Z = EQ/cT_b^2$, где τ — время пребывания смеси в реакторе, τ_f —

[*] E-mail: ed@ism.ac.ru

время остывания без протока, $\tau \gg \tau_f$. Обычно $E \gg T$, так что $Z \gg 1$. При данном Z область трех решений на плоскости (D, S) имеет вид полуострова, заканчивающегося точкой возврата $D_c = \exp(Z-2)$, $S_c = 4D_c/Z$. Температура в этой точке $\theta_c = 2 - Z$.

От двух уравнений первого порядка (1), (2) можно перейти [9, 10] к одному уравнению второго порядка. Это можно сделать, например, выразив η через θ и $d\theta/dt$ с помощью (2) и подставив это выражение в (1):

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{dV}{d\theta} - \gamma\frac{d\theta}{dt}, \tag{4}$$

$$-\frac{dV}{d\theta} = \left(\frac{Z}{D} - \frac{\theta+Z}{S}\right) e^\theta - \frac{\theta+Z}{DS}, \tag{5}$$

$$\gamma = \frac{1}{D} + e^\theta - \frac{\theta+Z-1}{S} - \frac{d\theta}{dt}. \tag{6}$$

Выражение (4) подобно уравнению одномерного движения частицы с единичной массой и координатой θ под действием потенциальной силы (5) и силы трения. Коэффициент трения (6) в зависимости от параметров может быть как положительным, так и отрицательным. В этом уравнение (4) сходно с уравнением Ван дер Поля [11]. Возможность отрицательного трения обусловлена, очевидно, накачкой — протоком вещества через реактор. Потенциал V в зависимости от параметров имеет либо один минимум, либо три экстремума — два минимума и максимум между ними. Значения температур, отвечающих точкам экстремумов, разумеется, те же, что и для стационарных решений (1), (2). Однако, рассматривая потенциал V, можно увидеть, какой из минимумов более глубокий, различить абсолютно устойчивое и метастабильное состояния.

Рассмотрим теперь реактор, у которого некоторый участок стенки подогрет до $\theta = \theta_m$, где θ_m — температура максимума $V(\theta)$ в выражении (5). Скорость охлаждающего потока для этого участка меняется по закону $\sin\omega t$, $\omega\tau \gg 1$. Соответственно в правой части (2) добавляется слагаемое $-(\theta - \theta_m)\varepsilon \sin\omega t$. Множитель ε пропорционален амплитуде движения поршня, управляющего таким потоком. При усреднении по малому периоду $1/\omega$ в точке θ_m появляется локальный минимум V, неустойчивое состояние превращается в устойчивое.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Нестационарные решения системы (1), (2) с возмущающей добавкой получены численным интегрированием. Использовалась подпрограмма RKF45 компилятора FORTRAN 77. Возмущенная задача содержит пять параметров. Мы ограничились рассмотрением нескольких примеров, в которых принято $D = 50$, $S = 42$, $Z = 7$. Тогда глубина исходных минимумов примерно одинакова. На рис. 1 показана зависимость $\theta(t)$, температура $\theta_m \approx -3.57$. Это значение температуры приближенно удерживалось, когда амплитуда возмущения превышала величину $\varepsilon \approx 0.7$ (кривая *1*). При $\varepsilon = 0.6$ наблюдается быстрый переход к горячему режиму (кривая *2*). Согласно [8] решение должно состоять из двух частей: усредненной плавной траектории, показанной на рис. 1, и быстрых осцилляций около этой траектории. Осцилляции видны на рис. 2, где показан участок решения при большом увеличении. Обращает на себя внимание хаотическая составляющая осцилляций. К ее происхождению мы вернемся ниже.

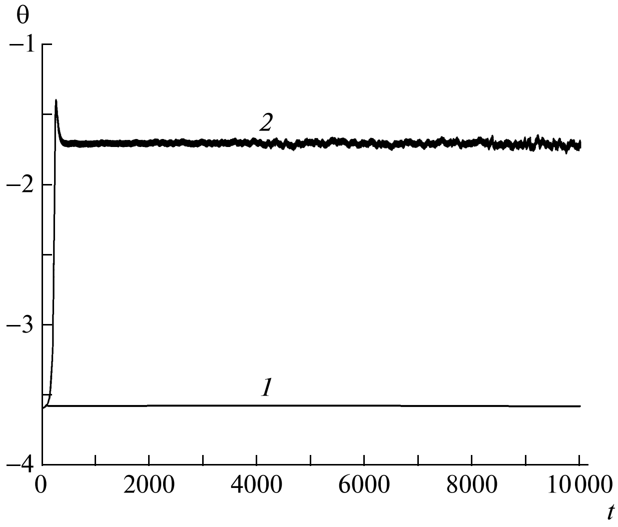

Рис. 1. Зависимости температуры от времени: стабилизация неустойчивой точки (*1*) и выход на горячий режим (*2*)

После того как стабилизация получена, возникает задача: найти порог стабилизации, минимальное критическое значение ε. Вблизи порога глубина минимума эффективной потенциальной энергии мала. Представим себе, что на систему кроме синусоидального возмущения действует некоторый шум. Если случайно несколько малых отклонений направлены в одну сторону, они могут перебросить систему через невысокий барьер, вызвать переход в устойчивое состояние (переходы Крамерса [12]). В реакторе такие переходы изучались в работе [10]. Наиболее опасны мягкие моды шума [10, 13, 14]. В случае численного моделирования роль шума играют неизбеж-

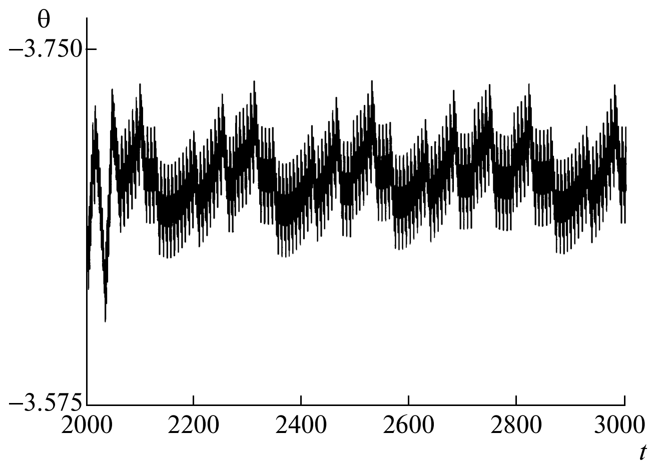

Рис. 2. Осцилляции около усредненной траектории

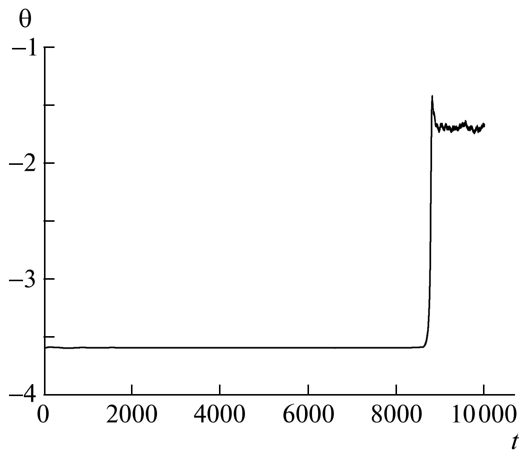

Рис. 3. Переход Крамерса

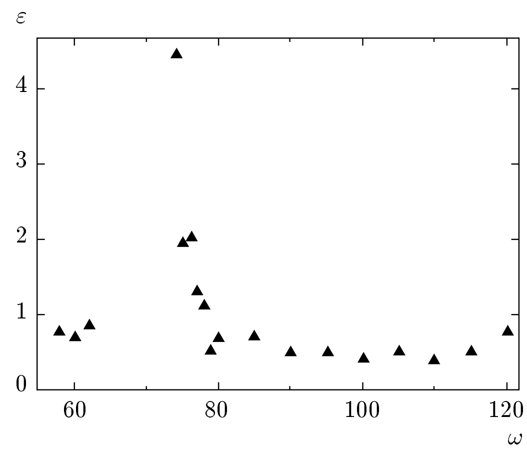

Рис. 4. Критическое значение ε для ряда частот

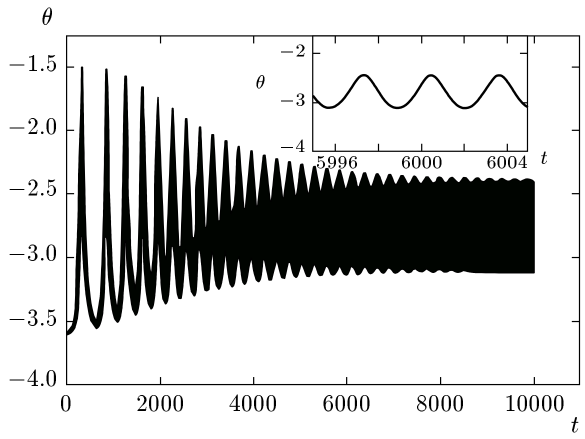

Рис. 5. Вынужденные колебания температуры в реакторе

ные округления при решении уравнений в конечных разностях. Переход Крамерса под действием такого «шума» можно видеть на рис. 3, а на регулярные осцилляции накладываются хаотические мягкие моды, создавая своеобразную перемежаемость (рис. 2). По той же причине не удается найти критическое значение ε с высокой точностью, на рис. 4 приведен ряд значений этой величины при разных частотах. В интервале ± 5 около значения $\omega = 70$ стабилизация достигается лишь при нереально высоких ε. По-видимому, границы этого интервала отвечают точкам бифуркации на кривой нелинейного резонанса. В работе [15] изучалось периодическое воздействие на реактор (без ссылки на [8]), наблюдались колебания, амплитуда которых сравнима с «расстоянием» до устойчивого режима. Пример таких колебаний в наших расчетах показан на рис. 5. Вставка на этом рисунке показывает несколько осцилляций. Для выявления их структуры используется большое увеличение по оси абсцисс.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Пожелание, высказанное в работе [6], можно считать выполненным. Возможность стабилизации мы продемонстрировали на простом примере одностадийной реакции первого порядка (3). В реальных условиях процесс имеет, как правило, несколько стадий. Число переменных (концентраций) увеличивается, но стабилизация высокочастотным возмущением возможна и в случае нескольких степеней свободы. Расчет для реакций, представляющих практический интерес, выходит за рамки этой работы.

Работа осуществлена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 11-03-00058) и Программы № 12 Президиума РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. Д. А. Франк-Каменецкий, ЖТФ **9**, 1457 (1939).

2. Я. Б. Зельдович, ЖТФ **11**, 193 (1941).

3. Д. А. Франк-Каменецкий, И. Е. Сальников, ЖФХ **17**, 79 (1943).

4. R. Aris and N. R. Amundson, Chem. Eng. Sci. **7**, 129 (1958).

5. D. A. Vaganov, N. G. Samoilenko, and V. G. Abramov, Chem. Eng. Sci. **33**, 1133 (1978).

6. Я. Б. Зельдович, *Вступительная лекция на I Всесоюзном симпозиуме по горению и взрыву*, ИХФ, Черноголовка (1968).

7. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, ч. 1, Наука, Москва (1995), с. 85.

8. П. Л. Капица, ЖЭТФ **21**, 388 (1951).

9. Э. Н. Руманов, ДАН **408**, 325 (2006).

10. Н. И. Ваганова, Э. Н. Руманов, ЖЭТФ **135**, 395 (2009).

11. B. Van der Pol, Radio Rev. **1**, 701 (1920).

12. H. Kramers, Physica (Amsterdam) **7**, 284 (1940).

13. Н. И. Ваганова, Э. Н. Руманов, ДАН **440**, 463 (2011).

14. Н. И. Ваганова, Э. Н. Руманов, Природа № 10, 23 (2011).

15. A. Cinar, J. Deng, S. M. Meerkov, and X. Shu, Amer. Inst. Chem. Eng. J. **33**, 353 (1987).