

Ниже предпринята попытка обработать экспериментальные данные с помощью простейшей модели порового пространства, рассмотренной в [14] и предполагающей, что все поры, выходящие на поверхность, имеют одинаковые размеры, а поперечное сечение пор меняется по мере выгорания с расстоянием до поверхности. Как и в случае расчета без учета внутривыворного реагирования в рассматриваемой области изменения параметров, результаты обработки согласуются с формулой Ленгмюра (13). Получены следующие значения эффективных констант с учетом внутривыворного реагирования: $1600 < T_a < 1800$ К: $E_B = 93$ ккал/моль, $A_B = 2,42 \cdot 10^3$ м/с, $\gamma = 0,3 + 3,0 \cdot 10^{-3} (1800 - T_a)$; $1800 < T_a < 2400$ К: $\gamma = 0,95$, $\beta = 2 \cdot 10^{-8}$ м/с; $2400 < T_a < 3200$ К: $E_B = 56$ ккал/моль, $A_B = 2,6 \cdot 10^{-3}$ м/с, $\gamma = 0,9 + 7 \cdot 10^{-4} (3200 - T_a)$.

Однако для указанного соответствия при расчете по формулам [14] оказалось необходимым при $T_a = 1600$ К выбирать начальный радиус пор r_0 , равным $0,5 \cdot 10^{-8}$ м, в диапазоне $T_a = 1800 \div 2400$ К, $r_0 = 2 \cdot 10^{-8}$ м, а в области $T_a \leq 3200$ К необходимо монотонное возрастание r_0 до $15 \cdot 10^{-8}$ м. По порядку величины r_0 соответствует экспериментальным результатам [15]. Существенное увеличение r_0 с ростом температуры при $T_a > 2400$ К, возможно, отражает неучитываемое в рассматриваемой модели растрескивание углеродистого образца, в объеме которого отмечается неизотермичность ($\Delta T \sim 200$ К), связанная со способом нагрева графитового шара [1].

ЛИТЕРАТУРА

1. Головина Е. С. Высокотемпературное горение и газификация углерода.— М.: Энергоатомиздат, 1983.
2. Ренкисбулут М., Юань М. С. Теплопередача, 1983, 105, 2, 144.
3. Yuen M. C., Chen L. W. Intern. J. Heat and Mass Transfer, 1978, 21, 537.
4. Берд Р., Стьюарт В., Лайфут Е. Явления переноса.— М.: Химия, 1974.
5. Sayegh N. N., Gauvin W. H. AIChE J., 1979, 25, 3, 522.
6. Ranz W. E., Marshall W. R. Chem. Eng. Prog., 1952, 48, 141—146, 173.
7. Гинзбург И. П. Теория сопротивления и теплопередачи.— Л.: Изд-во ЛГУ, 1970.
8. Yuge T. J. Heat Transfer, 1960, 82, 214.
9. Acivos A. Chem. Eng. Sci., 1966, 21, 4, 343.
10. Хаустович Г. П. ТВТ, 1966, 6, 879.
11. Брдлик П. М., Дубовик В. И. ПМТФ, 1969, 2, 120.
12. Исатаев С. И., Ползик В. В. Проблемы теплоэнергетики и прикладной теплофизики. № 6.— Алма-Ата: Наука, 1970.
13. Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинематике.— М.: Наука, 1967.
14. Головин А. М., Песочин В. Р. ФГВ, 1978, 14, 1, 11.
15. Оренбах М. С. Реакционная поверхность при гетерогенном горении.— Новосибирск: Наука, 1973.

Поступила в редакцию 24/XI 1986,
после доработки — 14/XII 1987

ФРОНТАЛЬНЫЕ РЕЖИМЫ ПРОТЕКАНИЯ ЭКЗОТЕРМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ ПРИ РАДИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЙ ПОДАЧЕ РЕАГЕНТОВ

А. С. Бабаджанян, В. А. Вольперт, Вл. А. Вольперт,
С. П. Давтян, И. Н. Меграбова

(Черноголовка)

Использование проточных трубчатых реакторов вытеснения, которые широко применяются в химической технологии, в ряде случаев связано с определенными сложностями. К ним относится прилипание вязких продуктов реакции к стенкам реактора, образование струйных течений и т. д. В связи с этим представляет интерес изучение проточных реакторов другой геометрии, в частности цилиндрических и

сферических: в одном случае активная зона реактора расположена между двумя коаксиальными цилиндрами, в другом — между двумя концентрическими сферами. Для каждого из указанных типов реакторов возможны два способа организации процесса: при внутренней подаче исходные реагенты подаются через боковую поверхность внутреннего цилиндра (через внутреннюю сферу) в активную зону реактора, где происходит химическое превращение и продукты реакции выводятся затем через боковую поверхность внешнего цилиндра (через внешнюю сферу); при внешней подаче исходные вещества подаются в активную зону реактора через его внешнюю поверхность, а продукты выводятся через внутреннюю.

В настоящей работе теоретически изучаются стационарные режимы работы цилиндрического и сферического реакторов. Задача рассматривается в наиболее простой постановке, в которой предполагается радиально-симметричное движение реакционной массы и не учитывается зависимость теплофизических параметров от глубины превращения и температуры.

В обычных приближениях теории горения дифференциальные уравнения, описывающие стационарные режимы работы реактора для случая конденсированных исходных веществ и продуктов реакции, имеют вид

$$\kappa \frac{1}{r^n} \frac{d}{dr} \left(r^n \frac{dT}{dr} \right) - (-1)^m u \left(\frac{r_m}{r} \right) \frac{dT}{dr} + q\varphi(a) \Phi(T) = 0, \quad (1)$$

$$(-1)^m u \left(\frac{r_m}{r} \right)^n \frac{da}{dr} + \varphi(a) \Phi(T) = 0. \quad (2)$$

При записи (1), (2) предполагается, что длина цилиндра существенно больше его диаметра (это позволяет пренебречь влиянием торцов цилиндра) и реакция носит одностадийный характер с аррениусовской температурной зависимостью

$$\Phi(T) = k_0 e^{-E/R_0 T}$$

и кинетикой $\varphi(a)$. Здесь T — температура; a — концентрация исходного вещества; κ — коэффициент теплопроводности; $q = Q/c$; Q — тепловой эффект реакции; c — теплоемкость смеси; r — радиальная координата; u — скорость подачи реагента на входе в реактор; k_0 — предэкспоненциальный множитель; E — энергия активации; R_0 — газовая постоянная. Для цилиндрического реактора $n = 1$, для сферического $n = 2$; для задач с внутренней подачей $m = 0$, с внешней подачей $m = 1$.

В случае внутренней подачи граничные условия имеют вид

$$r = r_0: T = T_n, \quad a = 1; \quad r = r_1: \frac{dT}{dr} = 0, \quad (3)$$

где r_0 и r_1 — радиусы внутренней и внешней поверхностей реактора соответственно; T_n — исходная температура реагента. В случае внешней подачи граничные условия на входе в реактор и на выходе из него задаются аналогично. Наряду с этими могут задаваться и другие граничные условия, однако в настоящей работе они не рассматриваются.

Поскольку постановка задачи и методы исследования для реакторов с внутренней и внешней подачей сходны, то ограничимся более подробным рассмотрением внутренней подачи, а затем коротко остановимся на результатах, полученных для другого случая. Стационарные режимы работы реактора исследуются ниже приближенно-аналитическими методами и численно.

Рассмотрим цилиндрический реактор с внутренней подачей. Для проведения приближенного анализа будем считать, что зона реакции расположена целиком внутри реактора, и предположим сильную температурную зависимость функции $\Phi(T)$. В этом случае основное химическое превращение происходит в узком температурном интервале, что

позволяет воспользоваться приближением Зельдовича — Фраик-Каме-нецкого [1] и считать зону реакции сосредоточенной при $r = R$, причем $a = 1$ при $r < R$ и $a = 0$ при $r > R$. Величина R — положение зоны реакции — должна находиться при решении задачи. В областях прогрева ($r_0 < r < R$) и продуктов реакции ($R < r < r_1$) необходимо решать уравнения (1), (2) без источника

$$\kappa \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dT}{dr} \right) - u \frac{r_0}{r} \frac{dT}{dr} = 0, \quad u \frac{r_0}{r} \frac{da}{dr} = 0 \quad (4)$$

с последующим сопряжением полученных решений при $r = R$ по формулам

$$[T] = 0, \quad \kappa \left[\frac{dT}{dr} \right] = qur_0/R, \quad (5)$$

$$\kappa \left[\left(\frac{dT}{dr} \right)^2 \right] = 2q \int_0^{T(R)} \Phi(T) dT. \quad (6)$$

Здесь квадратные скобки обозначают скачок функции при $r = R$:

$$[f] = f(R - 0) - f(R + 0).$$

Первое из условий (5) означает непрерывность температуры, второе дает связь между разностью потоков тепла по обе стороны зоны реакции и скоростью горения и может быть получено вычитанием из (1) уравнения (2), домноженного на q , и интегрированием по зоне реакции. Условие (6) получено в предположении пулевого порядка реакции ($\varphi(a) = 0$ при $a \leq 0$, $\varphi(a) = 1$ при $a > 0$) домножением уравнения (1) на dT/dr и последующим интегрированием по зоне реакции. Случай кинетики $\varphi(a)$ более общего вида обсуждается ниже.

Условие сопряжения (5) и граничные условия (3) позволяют выписать вид температурных зависимостей через неизвестную величину R :

$$T(r) = \begin{cases} T_r - q + q(r/R)^{ur_0/\kappa}, & r_0 < r < R, \\ T_r, & R < r < r_1, \end{cases}$$

где температура в зоне реакции имеет вид

$$T_r = T_n + q - q(r_0/R)^{ur_0/\kappa}. \quad (7)$$

Условие (6) сопряжения решения в зоне реакции дает уравнение для определения радиуса фронта горения R :

$$\left(\frac{ur_0}{R} \right)^2 = \frac{2\kappa}{q} \int_0^{T_r} \Phi(T) dT. \quad (8)$$

Равенство (8) имеет простой физический смысл: зона реакции расположена таким образом, чтобы скорость поступления к ней реагента равнялась скорости его потребления.

Прежде чем приступить к анализу уравнения (8), отметим, что сделанное предположение о полном расходе реагента внутри реактора приводит в этой постановке к тому, что решение не зависит от радиуса внешнего цилиндра (при $R < r_1$) и означает фактически, что рассматривается полубесконечный реактор ($r \geq r_0$). Метод узкой зоны реакции позволяет учесть конечность реактора. Для этого наряду с рассматриваемым надо рассмотреть также и случай, когда зона реакции находится частично внутри реактора. При этом радиус фронта R должен полагаться равным радиусу внешнего цилиндра r_1 , а неизвестной будет конечная глубина превращения. В настоящей работе этот анализ не проводится, так как будет ясно из дальнейшего, большого интереса он не представляет.

Поскольку при практической реализации рассматриваемого процесса теплофизические параметры реакционной смеси и размеры реактора

заданы, то наибольший интерес представляет изучение зависимости радиуса фронта и температуры в зоне реакции от скорости подачи реагентов, которая может варьироваться независимо от других параметров. Для исследования этой зависимости будем анализировать уравнение (8), которое с учетом приближенного равенства

$$\int_{T_n}^{T_f} \Phi(T) dT \approx k_0 \frac{R_0 T_f^2}{E} e^{-\frac{E}{R_0 T_f}}$$

и обозначений

$$\alpha = \frac{u}{v}, \quad \delta = \frac{\kappa}{v r_0}, \quad v = \sqrt{\frac{2\kappa}{q} k_0 \frac{R_0 T_a^2}{E} e^{-\frac{E}{R_0 T_a}}},$$

$$T_a = T_n + q, \quad \sigma = q/T_a, \quad Z = \frac{E(T_a - T_n)}{2R_0 T_a^2}$$

может быть записано относительно безразмерного радиуса в виде

$$\rho = \alpha \left(1 + \frac{\sigma}{\rho^{\alpha/\delta} - \sigma} \right) e^{\frac{Z}{\rho^{\alpha/\delta} - \sigma}}. \quad (9)$$

Заметим, что v есть приближенное значение нормальной скорости фронта, α — безразмерная скорость подачи, в зависимости от которой и будет определяться безразмерный радиус ρ как решение уравнения (9).

Обозначим правую часть равенства (9) через $F_\delta(\rho)$. Поскольку $F_\delta(\rho)$ — монотонно-убывающая функция ρ , то можно видеть, что (9) имеет единственное решение $\rho(\alpha)$ при любых значениях параметров и $\rho(\alpha) \geq \alpha$. Так как

$$F_\delta(1) = \frac{\alpha}{1 - \sigma} e^{\frac{Z}{1 - \sigma}},$$

то при $\alpha < \alpha_0 = (1 - \sigma) e^{Z/(1 - \sigma)}$ $\rho(\alpha) < 1$, и решение физического смысла не имеет. Поэтому в дальнейшем будем рассматривать значения $\alpha > \alpha_0$.

Для определения характера зависимости $\rho(\alpha)$ рассмотрим сначала случай $\delta \rightarrow 0$. На рис. 1 качественно показана эволюция кривых $F_\delta(\rho)$ и решений $\rho(\alpha)$ при $\alpha < 1$: так как при каждом ρ $F_\delta(\rho) \rightarrow \alpha$, если $\delta \rightarrow 0$, то при $\alpha < 1$ $\rho(\alpha) \rightarrow 1$. Аналогично проверяется, что при $\alpha > 1$ $\rho(\alpha) \rightarrow \alpha$, если $\delta \rightarrow 0$. Таким образом, предельным положением зависимостей $\rho(\alpha)$ при $\delta \rightarrow 0$ является кусочно-линейная функция (рис. 2, 5)

$$\rho(\alpha) = \begin{cases} 1, & \alpha < 1, \\ \alpha, & \alpha \geq 1. \end{cases}$$

Легко проверяется, что и для любых значений параметров функция $\rho(\alpha) \rightarrow \alpha$ при увеличении α . Выход на асимптотику $\rho = \alpha$ происходит достаточно быстро. Действительно, поскольку $\rho(\alpha) \geq \alpha$, то из (9) следует

$$\rho(\alpha) \leq \alpha \left(1 + \frac{1}{\alpha^{\alpha/\delta} - 1} \right) e^{\frac{Z}{\alpha^{\alpha/\delta} - 1}}.$$

Например, при $Z = 4$, $\delta = 0,1$ $\alpha \geq 1,6$ эта оценка дает $\rho < 1,01\alpha$, а если $\alpha \geq 2$, $\rho < 1,000003\alpha$.

Существенный вопрос, который возникает при изучении зависимости радиуса фронта от скорости подачи, — о монотонности этой зависимости. Для простоты ограничимся областью значений параметров, в которой $\rho^{\alpha/\delta} \gg \sigma$, что имеет место при достаточно больших α/δ , так как $\rho > 1$, а $\sigma < 1$. Тогда уравнение (9) можно упростить так:

$$\rho = \alpha e^{Z\rho^{-\alpha/\delta}}. \quad (10)$$

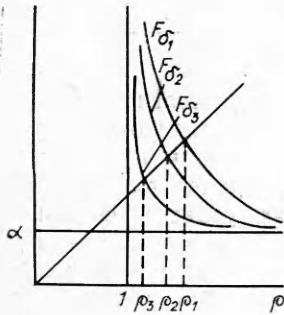


Рис. 1. Графическое решение уравнения (9) при $\alpha < 1$.

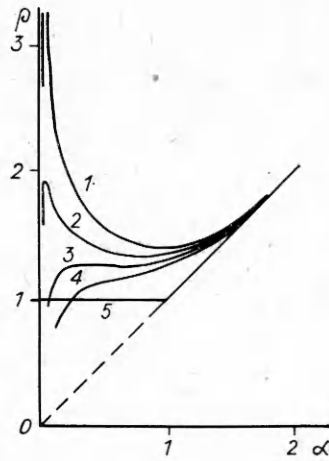


Рис. 2. Зависимость радиуса фронта от скорости подачи для цилиндрического реактора. 1-4 - $\delta = 0,1$; 5 - $\delta \rightarrow 0$; Z равно: 1 - 10, 2 - 5, 3 - 2,72, 4 - 1.

Считая, что $\rho = \rho(\alpha)$, и дифференцируя (10) по α , получим

$$\rho' = \left[1 - \alpha Z e^{-\frac{\alpha}{\delta} \ln \rho} \left(\frac{\ln \rho}{\delta} + \frac{\alpha}{\delta} \frac{\rho'}{\rho} \right) \right] e^{\frac{Z\sigma}{\delta} \ln \rho}. \quad (11)$$

Полагая в (11) $\rho'(\alpha) = 0$ и обозначая $\alpha/\delta \cdot \ln \rho = x$, находим

$$x e^{-x} = 1/Z.$$

При $Z > e$ это уравнение имеет два решения $x_1(Z)$ и $x_2(Z)$, которые сливаются при $Z = e$ ($x_1(e) = x_2(e) = 1$), а если $Z < e$, решений нет. Таким образом, условием немонотонности зависимости $\rho(\alpha)$ является $Z > e$.

Исключая ρ из равенства (10) и принимая

$$\alpha/\delta \cdot \ln \rho = x_i(Z), \quad i = 1, 2,$$

получим

$$\delta/\alpha \cdot x_i = \ln \alpha + (1/x_i). \quad (12)$$

Уравнение (12) служит для определения тех значений α , в которых зависимость $\rho(\alpha)$ имеет экстремумы. Верхняя ветвь кривой рис. 3 дает при различных Z значения $\alpha_{\min}(Z)$, в которых $\rho(\alpha)$ имеет минимум, нижняя ветвь — значения, в которых достигается максимум. Величина α_* находится из условия

$$\alpha_* (\ln \alpha_* + 1) = \delta,$$

которое получается из (12). Нижняя ветвь кривой имеет при $Z \rightarrow \infty$ асимптотику $\alpha \sim \delta/Z^2$, верхняя ветвь —

$$Z \sim \frac{\delta}{\alpha \ln \alpha} \exp \frac{\alpha \ln \alpha}{\delta}.$$

Верхняя ветвь растет медленно, и при реальных значениях параметров оба экстремума достигаются при $\alpha < 1$ ($\alpha = 1$ отвечает $Z = \sqrt{\delta} \exp(1/\sqrt{\delta})$ и при $\delta < 0,1$ $Z > 7,47$).

На рис. 2 приведены зависимости $\rho(\alpha)$ при различных значениях параметров, полученные численным решением уравнения (10). Заметим, что точки минимумов $\rho(\alpha)$ в тех случаях, когда они существуют, удовлетворяют условию $\rho^{\alpha/\delta} \gg \sigma$, при котором можно перейти к уравнению (10). Для объяснения немонотонности зависимости $\rho(\alpha)$ заметим, что температура горения возрастает при увеличении скорости подачи. Это следует из анализа уравнений (7) и (10), а также из непосредственного численного решения системы (1), (2), которое обсуждается

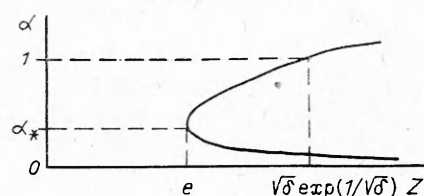


Рис. 3. Координаты экстремумов зависимости $\rho(\alpha)$ как функции Z .

ниже, и связано с потерями тепла на внутренней поверхности реактора.

При очень малых скоростях подачи, несмотря на низкую температуру горения, все вещество успевает прореагировать вблизи внутренней поверхности реактора. При увеличении скорости подачи температура горения возрастает, но остается еще низкой, и зона реакции сносится от внутренней поверхности реактора. Это сопровождается растяжением профиля концентрации, и для конечных реакторов ширина зоны реакции может стать соизмеримой с размерами реактора. При дальнейшем увеличении скорости подачи при наличии сильной температурной зависимости скорости реакции (отсюда и возникает условие $Z > e$) рост температуры горения приводит к резкому ускорению химической реакции, и зона реакции смещается к центру реактора, где скорость движения среды выше и может реализоваться условие равенства скоростей поступления реагентов в зону реакции и их потребления. При этом формируются характерные для фронтальных режимов профили температуры и концентрации и зона реакции является узкой, т. е. основное химическое превращение происходит в узком температурном интервале вблизи температуры горения. При дальнейшем увеличении скорости подачи температура горения становится близкой к адиабатической и химическая реакция не ускоряется. Зависимость радиуса фронта от скорости подачи выходит на асимптотику $\rho = \alpha$, профиль температуры не меняется и совпадает с профилем температуры для плоского фронта.

Отметим, что в отличие от горения в плоском потоке реагента [2] режим стабилизированного горения в цилиндрическом реакторе осуществляется и при скоростях подачи u , больших нормальной скорости горения v . При достаточно больших u радиус фронта находится по формуле

$$R = r_0 \cdot u/v.$$

Определяемая из (1) величина R может при достаточно больших u оказаться больше, чем r_1 , т. е. формально зона реакции расположена вне реактора. В этом случае режима стабилизированного горения не существует, исходные вещества выносятся из реактора, не успевая прореагировать.

До сих пор рассматривались стационарные решения системы (1), (2) для реакции нулевого порядка. Для более общей кинетики (8) заменяется на уравнение

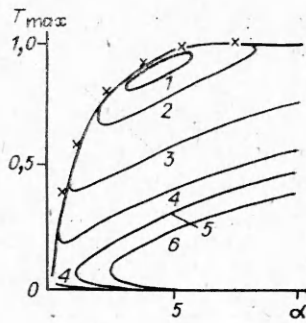
$$\left(\frac{ur_0}{R}\right)^2 = \frac{\kappa}{q} \int_0^{T_r} \Phi(T) dT \Big/ \int_0^1 \frac{\xi d\xi}{\varphi(\xi)},$$

которое отличается от (8) наличием постоянного множителя. Так как этот множитель входит и в выражение для нормальной скорости v , то радиус фронта ρ будет, как и выше, удовлетворять уравнению (9). Таким образом, все полученные для реакции нулевого порядка результаты относятся и к кинетике общего вида.

Наряду с приближенно-аналитическим исследованием стационарных режимов работы цилиндрического реактора с внутренней подачей проводился численный анализ этих режимов. Система (1), (2) изучалась численно для реакции первого порядка при $T_n = 300$ К, $r_0 = 10^{-2}$ м и значениях теплофизических констант, соответствующих полимериза-

Рис. 4. Зависимость максимальной температуры от скорости подачи; $r_0 = 0,01$ м.

r_1 , м: 1 — 0,08, 2 — 0,1, 3 — 0,4, 4 — 0,4, 5 — 0,6, 6 — 0,8; точки — расчет по методу узкой зоны.



ции метилметакрилата ($E = 8,4 \cdot 10^4$ Дж/моль, $k_0 = 10^7$ 1/с, $\kappa = 5 \cdot 10^{-7}$ м²/с, $q = 170$ К [3]). Варьировались скорость подачи реагента на входе в реактор и радиус внешнего цилиндра.

Численный анализ показал, что возможна неединственность стационарных режимов. На рис. 4 приведена зависимость максимальной температуры от скорости подачи для каждого из режимов от скорости подачи при различных значениях внешнего радиуса. При $r_1 = 0,1$ м наряду с низкотемпературным режимом, существующим при всех скоростях подачи, имеется интервал скоростей, для которых имеют место также высокотемпературный и промежуточный режимы. Им соответствует замкнутая ветвь в зависимости $T_{\max}(\alpha)$.

Рассматриваемым значениям параметров соответствует $Z \approx 3,85$, для которого зависимость радиуса фронта от скорости подачи является немонотонной (рис. 5). На счете радиус фронта определяется как координата точки, в которой глубина превращения равна $1/2$. Существенное отличие кривых 3 и 2 при $\alpha < 1$ связано со значением δ ($v \approx 2 \cdot 10^{-5}$ м/с, $\delta \approx 2,59$).

Вид зависимости $\rho(\alpha)$ позволяет объяснить отсутствие высокотемпературного решения как при больших скоростях подачи (при $r_1 = 0,1$ м $\alpha > 8,3$), так и при малых ($\alpha < 1,8$): при $\alpha > 10$ и $\alpha < 1$ радиус фронта превосходит радиус внешнего цилиндра, а в случае $8,3 < \alpha < 10$ и $1 < \alpha < 1,8$ сказывается, по-видимому, протяженность зоны реакции.

При уменьшении r_1 интервал скоростей подачи, для которого существует высокотемпературное решение, сужается, поскольку сужается интервал значений α , для которых $\rho(\alpha) < r_1$, а затем исчезает. При этом уменьшается и исчезает замкнутая ветвь в зависимости $T_{\max}(\alpha)$. При увеличении r_1 она расширяется, и при $r_1 \approx \max_{\alpha} \rho(\alpha)$ замкнутая ветвь касается ветви, соответствующей низкотемпературному решению. При дальнейшем увеличении r_1 замкнутая ветвь размыкается, высокотемпературное решение существует при всех α (при условии $\alpha > \alpha_0$ и $R < r_1$), но появляется интервал значений скорости подачи, на котором отсутствует низкотемпературное решение. Это связано с тем, что при большой длине реактора время пребывания в нем реакционной смеси становится сравнимым с характерным временем химической реакции и вещество успевает прореагировать. При росте r_1 интервал скоростей, на котором отсутствует низкотемпературное решение, расширяется, и для любой фиксированной скорости подачи при достаточно большом r_1 будет существовать только высокотемпературный режим.

Важный вывод, который вытекает из проведенного анализа, заключается в том, что неединственность стационарных режимов есть следствие конечности реактора. Если $r_1 \rightarrow \infty$, то в пределе получится, что при всех скоростях подачи существует только высокотемпературное решение, что согласуется с результатами, полученными по методу узкой зоны реакции. На рис. 4 показана зависимость $T_{\max}(\alpha)$, рассчитанная по этому методу.

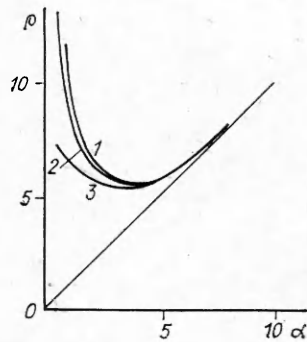


Рис. 5. Зависимость радиуса фронта от скорости подачи.
1 — результаты численного анализа; 2, 3 — расчет по уравнениям (10) и (9).

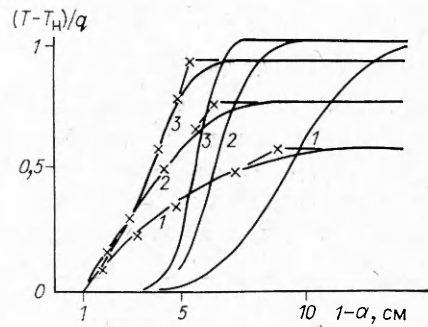


Рис. 6. Профили температуры и концентрации для различных скоростей подачи.
α равно: 1 — 1, 2 — 2, 3 — 4; точки — расчет по методу узкой зоны.

На рис. 6 приведены профили концентрации и температуры, найденные численно для $r_1 = 0,2$ м и различных скоростей подачи. При $\alpha \geq 7$ профили температуры для цилиндрического и плоского фронтов практически совпадают.

Таким образом, на основании численного анализа можно сделать вывод о том, что метод узкой зоны реакции дает хорошее приближение для высокотемпературного режима. Низкотемпературный и промежуточный режимы с точки зрения реализации интереса не представляют: первый из-за очень низкой конечной глубины превращения, второй из-за неустойчивости, которая бывает характерна для таких режимов. Поэтому, вероятно, не представляет интереса и приближенно-аналитическое исследование этих режимов.

Завершая обсуждение стационарных режимов работы цилиндрического реактора с внутренней подачей, заметим, что характер зависимости $T_{\max}(\alpha)$ может быть, по-видимому, иным при других значениях параметров. Если функция $\rho(\alpha)$ монотонная, можно ожидать, что замкнутых ветвей в этой зависимости не будет.

Перейдем к рассмотрению сферического реактора с внутренней подачей. Температурный профиль задается выражениями

$$T(r) = \begin{cases} T_r - q + q \exp\left(\frac{u}{\kappa} \frac{r_0^2}{R} - \frac{u}{\kappa} \frac{r_0^2}{r}\right), & r_0 < r < R_s \\ T_r^i, & R < r < r_{1s} \end{cases}$$

$$T_r = T_n + q - q \exp\left(\frac{u}{\kappa} \frac{r_0^2}{R} - \frac{u}{\kappa} r_0\right),$$

а уравнение для определения безразмерного радиуса фронта имеет вид

$$\rho^2 = \alpha \exp\left(Z e^{\frac{\alpha}{\delta} \left(\frac{1}{\rho} - 1\right)}\right). \quad (13)$$

Решение $\rho(\alpha)$ (13) по своим свойствам похоже на решение уравнения (10). В этом случае кривая $\rho(\alpha)$ расположена при всех α над кривой $\rho = \sqrt{\alpha}$, а если $\alpha > e^{-Z}$, $\rho(\alpha) > 1$. С ростом α функция $\rho(\alpha)$ быстро выходит на асимптотику $\rho = \sqrt{\alpha}$.

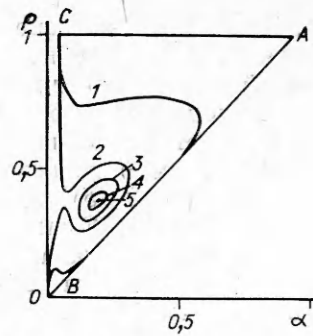
Как и для цилиндрического реактора, $\rho(\alpha)$ — монотонная функция при $Z < e$ и имеет два экстремума при $Z > e$. Действительно, экстремумы зависимости $\rho(\alpha)$ находятся из совместного решения (13) и уравнения

$$\frac{\alpha}{\delta} \left(1 - \frac{1}{\rho}\right) \exp\left(-\frac{\alpha}{\delta} \left(1 - \frac{1}{\rho}\right)\right) = \frac{1}{Z}, \quad (14)$$

которое получится, если продифференцировать (13) по α , считая ρ

Рис. 7. Зависимость $\rho(\alpha)$ для цилиндрического реактора с внешней подачей; $Z = 3$.

δ равно: 1 — 0,075, 2 — 0,1177, 3 — 0,1225, 4 — 0,1250, 5 — 0,1255 (для случаев 3—5 не приведена расположенная при малых α ветвь, соединяющая точки B и C).



функцией α , положить $\partial\rho/\partial\alpha = 0$ и выполнить несложные преобразования, использующие соотношение (13). Из уравнения (14) видно, что решения существуют только при $Z \geq e$. В этом случае можно ввести, как и ранее, величины $x_i(Z)$, в результате получим

$$\frac{\alpha}{\delta} \left(1 - \frac{1}{\rho}\right) = x_i(Z), \quad i = 1, 2.$$

Отсюда и из (13)

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \alpha e^{1/x_i}, \\ \left(1 - \frac{\delta}{\alpha} x_i\right)^2 &= \frac{1}{\rho^2} = \frac{1}{\alpha} e^{-1/x_i} \end{aligned}$$

и, следовательно, значения α_i , при которых достигаются экстремумы, задаются формулами

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \delta x_i + \frac{1}{2} e^{-1/x_i} + \sqrt{\delta x_i e^{-1/x_i} + \frac{1}{4} e^{-2/x_i}}, \\ \rho_i &= \sqrt{\alpha_i} e^{1/2x_i}. \end{aligned}$$

Таким образом, изучены стационарные режимы работы цилиндрических и сферических реакторов с внутренней подачей. При этом рассматривались теплоизолированные реакторы, т. е. на внешней поверхности бралось граничное условие $dT/dr = 0$. Аналогичными методами можно исследовать реакторы с теплопотерями [4].

Для цилиндрического реактора с внешней подачей аналогичный подход позволяет определить профиль температуры в реакторе

$$T(r) = \begin{cases} T_{\Gamma}, & r_0 < r < R, \\ T_{\Gamma} - q + q \left(\frac{R}{r}\right)^{ur_1/\kappa}, & R < r < r_1, \end{cases}$$

температуру горения

$$T_{\Gamma} = T_{\text{н}} + q - q \left(\frac{R}{r_1}\right)^{ur_1/\kappa}$$

и уравнение для радиуса фронта

$$\rho = \alpha \exp(Z\rho^{\alpha/\delta}), \quad (15)$$

где $\rho = R/r_1$; $\delta = \kappa/vr_1$.

Анализ выражения (15) показал, что зависимость радиуса фронта от скорости подачи в этом случае может быть достаточно сложной и существенно зависит от параметров δ и Z . Чтобы охарактеризовать эту связь, удобно сначала рассмотреть асимптотику по малым δ . В этом случае зависимость является неоднозначной и в ней можно выделить две ветви. Нижняя ветвь стремится к прямой $\rho = \alpha$, а верхняя — к $\rho = 1$ (отрезки AB и AC на рис. 7). При этом температура горения на нижней ветви стремится к адиабатической.

Проведенное исследование проиллюстрировано на рис. 7 прямым численным решением уравнения (15) для конкретных значений пара-

метров. При малых, но конечных значениях δ обе ветви решения могут быть немонотонными, причем условие немонотонности, как и в случае внутренней подачи, имеет вид $Z > e$ (см. рис. 7, 1).

Для цилиндрического реактора с внешней подачей при увеличении δ характерно отделение изолированной ветви в зависимости $\rho(\alpha)$. При дальнейшем росте δ изолированная ветвь стягивается в точку и исчезает (см. рис. 7, 3—5). Наличие изолированной ветви определяется размерами реактора. Если рассмотреть скорость подачи, для которой температура горения мала, то при больших r_1 , т. е. при малых δ , стационарный режим будет существовать, поскольку время пребывания реакционной смеси в реакторе велико и она вся успевает прореагировать. При уменьшении r_1 (увеличении δ) время пребывания реакционной смеси в реакторе уменьшается и из-за низкой температуры горения она не успевает прореагировать. Таким образом, появляется интервал величин α , для которых стационарные режимы отсутствуют. При фиксированном значении внешнего радиуса уменьшение скорости подачи приводит к появлению стационарных режимов из-за увеличения времени пребывания реакционной смеси в реакторе, а рост скорости подачи — из-за увеличения температуры горения и, следовательно, скорости химической реакции.

Для сферического реактора с внешней подачей найдено распределение температуры в реакторе

$$T(r) = \begin{cases} T_r, & r_0 < r < R, \\ T_r - q + q \exp\left(\frac{u}{\kappa} \frac{r_1^2}{r} - \frac{u}{\kappa} \frac{r_1^2}{R}\right), & R < r < r_1, \end{cases}$$

где температура горения

$$T_r = T_n + q - q \exp\left(\frac{u}{\kappa} r_1 - \frac{u}{\kappa} \frac{r_1^2}{R}\right),$$

и получено уравнение для радиуса фронта

$$\rho = \sqrt{\alpha} \exp\left\{\frac{Z}{2} \exp\left[\frac{\alpha}{\delta} \left(1 - \frac{1}{\rho}\right)\right]\right\}.$$

Анализ этого уравнения показал, что качественное поведение зависимости $\rho(\alpha)$ такое же, как для цилиндрического реактора с внешней подачей. Здесь также в зависимости $\rho(\alpha)$ могут иметь место немонотонность, неединственность и отделение изолированной ветви.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я. Б., Франк-Каменецкий Д. А. ЖФХ, 1938, 12, 1, 100.
2. Хайкин Б. И., Руманов Э. Н. ФГВ, 1975, 11, 5, 671.
3. Манелис Г. Б., Смирнов Л. П. ФГВ, 1976, 11, 3, 354.
4. Бабаджанян А. С., Вольперт В. А., Вольперт Вл. А. и др. Фронтальные режимы протекания экзотермической реакции в сферических и цилиндрических реакторах. Препринт ОИХФ.— Черногоровка, 1986.

Поступила в редакцию 28/IX 1987

БЕЗГАЗОВОЕ ГОРЕНИЕ В СИСТЕМЕ ТИТАН — УГЛЕРОД — НИКЕЛЬ

А. С. Рогачев, В. М. Шкиро, И. Д. Чаусская, М. В. Швецов
(Черногоровка)

Анализ публикаций последних лет в области безгазового горения показывает возросший интерес к детальному механизму взаимодействия компонентов в волне горения. Поиски путей получения принципиально