

УДК 536.46

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛООБМЕНА И ХИМИЧЕСКОГО РЕАГИРОВАНИЯ ГОРЮЧЕЙ СМЕСИ В ПРОТОЧНОМ РЕАКТОРЕ

Р. С. Буркина, К. М. Моисеева

Томский государственный университет, 634050 Томск, Moiseeva_KM@t-sk.ru

Исследованы режимы работы проточного реактора с инертным внутренним телом. Проведено численное исследование процесса горения метановоздушной смеси. Определены параметрические области возможных режимов работы реактора в зависимости от безразмерных параметров теплообмена смеси с инертным телом и боковой поверхностью и от параметра течения смеси. Показано существование областей неединственности устанавливающегося режима работы. Рассмотрено влияние инертного внутреннего тела на распределение областей возможных режимов работы реактора.

Ключевые слова: проточный реактор, теплообмен, экзотермическая реакция, устойчивые и неустойчивые стационарные состояния системы, стабилизация горения.

ВВЕДЕНИЕ

Изучение процессов тепло- и массообмена на фоне экзотермических химических реакций для различного вида горелочных устройств актуально в связи с широким их применением в промышленности. Химические и энергетические реакторы используются, например, для эффективного сжигания низкокалорийных топлив или получения синтез-газа. Процессы тепло- и массопереноса играют существенную роль в процессе горения, определяя энергоэффективность и устойчивость работы реактора [1, 2]. Особенности процессов теплообмена и теплопереноса отчасти определяются конструкцией реактора. Изменяя ее, можно повлиять на энергоэффективность горелочного устройства. При исследовании горения в реакторе особое внимание уделяется вопросам устойчивости устанавливающихся режимов работы. Неустойчивые режимы, с одной стороны, могут быть опасны для конструкции горелочного аппарата, а с другой стороны, колебательные и автоколебательные режимы позволяют организовать процесс горения с рекуперацией тепла, что повышает энергоэффективность аппарата.

В реакторе возможна реализация как устойчивых, так и неустойчивых режимов работы. Параметрические области их реализации

в реакторе идеального смешения рассматривались в работах [3–5]. В [3] определены области устойчивого единственного стационарного состояния, квазистационарных режимов, режимов Франк-Каменецкого, а также области автоколебаний. В [4] для предельного случая малых значений параметров Тодеса ($Td \ll 1$) и Аррениуса ($Ar \ll 1$) при значениях параметров Дамкёлера Da и Семёнова Se порядка единицы определены параметрические области: единственного высоко- или низкотемпературного стационарного состояния (СС), двух возможных СС и релаксационных колебаний. В [5] для экзотермической автокаталитической реакции в параметрическом пространстве (Se, Da) аналитически получены области одного или трех СС системы. В [6] рассматривался реактор идеального смешения с инертным внутренним телом, инертное тело участвует в теплообмене и влияет на изменение температуры и, тем самым, на реализацию тех или иных режимов работы реактора. Аналитически определено шесть областей возможных режимов работы реактора: единственного высоко- или низкотемпературного СС, колебательного режима, высокотемпературного СС или колебательного режима, низкотемпературного СС или колебательного режима и двух возможных стационарных состояний.

В случае одномерной постановки задачи горения при распределении температуры смеси и концентрации горючего компонента вдоль оси реактора существенное влияние на процесс

Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки РФ, регистрационный номер НИР 1.3942.2011.

© Буркина Р. С., Моисеева К. М., 2014.

горения, кроме параметров теплообмена, может оказывать скорость течения смеси. Расчеты для проточного реактора в одномерной постановке задачи проведены в работах [7–11]. В [7] экспериментально подтверждено существование колебательных режимов горения газовой смеси, движущейся как через полые трубки, так и через пористую среду. Важным условием возникновения колебательного режима является наличие градиента температуры вдоль направления движения газовой смеси. В [8] для некоторого набора параметров системы рассчитаны области устойчивого, неустойчивого и колебательного режимов горения. В ходе линейного анализа решения на устойчивость установлено [8], что колебательный режим реализуется при умеренных скоростях потока, а при больших и малых скоростях горение устойчиво. В [9] рассмотрена двухтемпературная модель горения газа, определены устойчивые режимы горения в зависимости от скорости подачи газа. В [10] показана принципиальная возможность реализации автоколебательных режимов работы реактора. В [11] аналитически определены пять стационарных состояний, два из которых неустойчивы, два — высокотемпературные, одно — низкотемпературное. В зависимости от расхода газа и температуры хладагента стационарные состояния вступают в различные сочетания и образуют семь областей. В [12, 13] для проточного реактора в одномерной постановке задачи горения в зависимости от скорости поступления жидкого реагента определены два стационарных режима работы реактора: высокотемпературный при малых скоростях подачи реагента, низкотемпературный при высоких скоростях подачи.

В работе [6] в зависимости от параметра теплообмена смеси с поверхностью инертного тела, а также от параметров Se и Da аналитически определены области возможных режимов работы реактора идеального смешения. Учет пространственного распределения температуры реакционной смеси и концентрации горючего компонента может внести существенные поправки в описание областей возможных режимов работы реактора. Целью настоящей работы является численное определение параметрических областей возможных режимов работы проточного реактора с инертным внутренним телом в зависимости от безразмерных параметров теплообмена реакционной смеси с боковой

поверхностью реактора и внутренним телом, а также от безразмерного параметра, характеризующего скорость течения реакционной смеси.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Проточный реактор представляет собой цилиндрическую трубу длиной L , радиуса r . Температура боковой поверхности реактора постоянна и равна T_s . Вдоль оси реактора расположен цилиндр (инертное тело) радиуса $r_1 < r$. Реакционная смесь обменивается теплом с боковой поверхностью реактора и инертным телом по закону Ньютона с коэффициентами теплообмена α_s и α_1 соответственно. Начальная температура инертного тела равна T_{1b} , начальная температура смеси в реакторе — T_b , начальная относительная концентрация горючего компонента — a_b . Реакционная смесь втекает в реактор ($x = 0$) со скоростью v , температура входящей смеси T_v , относительная концентрация горючего компонента a_v . На выходе из реактора ($x = L$) реализуется свободное вытекание смеси. Теплообмен инертного тела с внешней средой на границах $x = 0$ и $x = L$ отсутствует. В реакторе протекают экзотермические химические реакции первого порядка с аррениусовской зависимостью скорости от температуры. Описываемая модель реактора представлена на рис. 1.

Для упрощения математической постановки задачи принято, что радиальная составляющая потоков тепла и концентрации реакционной смеси отсутствует, изменение температуры смеси за счет трения о поверхность реактора не учитывается, расход реакционной смеси по реактору задан постоянным, $G = \rho v = \text{const}$. При таких допущениях безразмерная математическая постановка задачи имеет вид:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + A_v \frac{\partial \theta}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + I_1(\theta_1 - \theta) + I_s(\theta_s - \theta) + \eta \exp \frac{\theta}{1 + \text{Ar}\theta}, \quad (1)$$

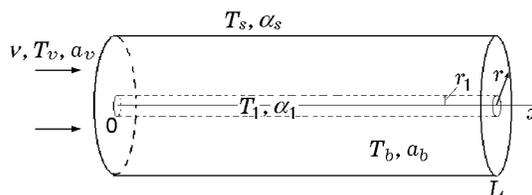


Рис. 1. Модель проточного реактора с инертным внутренним телом

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial \tau} = k_\chi \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial \xi^2} + \frac{I_1}{k_{c\rho}} (\theta - \theta_1), \quad (2)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial \tau} + A_v \frac{\partial \eta}{\partial \xi} = \text{Le} \frac{\partial^2 \eta}{\partial \xi^2} - \text{Td} \eta \exp \frac{\theta}{1 + \text{Ar}\theta}. \quad (3)$$

Начальные и граничные условия:

$$\tau = 0: \quad \theta(\xi, 0) = \theta_b, \quad \theta_1(\xi, 0) = \theta_{1b},$$

$$\eta(\xi, 0) = \eta_b, \quad (4)$$

$$\xi = 0: \quad \frac{\partial \theta(0, \tau)}{\partial \xi} = A_v (\theta(0, \tau) - \theta_v),$$

$$\frac{\partial \theta_1(0, \tau)}{\partial \xi} = 0, \quad (5)$$

$$\text{Le} \frac{\partial \eta(0, \tau)}{\partial \xi} = A_v (\eta(0, \tau) - 1),$$

$$\xi = \xi_L: \quad \frac{\partial \theta(\xi_L, \tau)}{\partial \xi} =$$

$$= \frac{\partial \theta_1(\xi_L, \tau)}{\partial \xi} = \frac{\partial \eta(\xi_L, \tau)}{\partial \xi} = 0. \quad (6)$$

Безразмерные параметры и переменные определяются из соотношений:

$$\xi = \frac{x}{x_{ref}}, \quad \tau = \frac{t}{t_{ad}}, \quad \eta = \frac{a}{a_v},$$

$$\theta = \frac{E}{RT_{ref}^2} (T - T_{ref}), \quad x_{ref} = \sqrt{\frac{\lambda}{c\rho_b}} t_{ad},$$

$$t_{ad}(T_{ref}) = \frac{c\rho_b RT_{ref}^2}{EQ w_{0*}}, \quad A_v = \frac{c\rho_b v_b \sqrt{RT_{ref}^2}}{\sqrt{\lambda EQ w_{0*}}},$$

$$\text{Ar} = \frac{RT_{ref}}{E}, \quad \text{Td} = \frac{c}{Q} \frac{RT_{ref}^2}{a_v E},$$

$$k_{c\rho} = \frac{r_1^2 c_1 \rho_1}{(r^2 - r_1^2) c\rho}, \quad k_\chi = \frac{\lambda_1}{c_1 \rho_1} \frac{c\rho_b}{\lambda},$$

$$\text{Le} = \frac{Dc\rho_b}{\lambda}, \quad w_{0*} = \rho_b a_v k_0 \exp \left(-\frac{E}{RT_{ref}} \right),$$

$$I_1 = \frac{\tilde{\alpha}_1 RT_{ref}^2}{EQ w_{0*}}, \quad I_s = \frac{\tilde{\alpha}_s RT_{ref}^2}{EQ w_{0*}},$$

$$\tilde{\alpha}_s = \frac{2r\alpha_s}{r^2 - r_1^2}, \quad \tilde{\alpha}_1 = \frac{2\alpha_1 r_1}{r^2 - r_1^2}.$$

Здесь индексы 1, s , b , v соответствуют параметрам инертного тела, боковой поверхности реактора, начальным и входным параметрам соответственно, ad — параметрам в адиабатическом состоянии, ref — масштабным. Размерные параметры и переменные: λ — коэффициент теплопроводности, ρ — плотность, c — теплоемкость, D — коэффициент диффузии, E — энергия активации, k_0 — предэкспонент в уравнении Аррениуса, Q — тепловой эффект, R — универсальная газовая постоянная, t — время, v — скорость потока реакционной смеси, x — координата по пространству; безразмерные переменные и параметры: η — глубина превращения, θ — температура, τ — безразмерное время, ξ — безразмерная пространственная координата, A_v — безразмерный параметр скорости потока смеси, I_1 — параметр теплообмена реакционной смеси с инертным внутренним телом, I_s — параметр теплообмена реакционной смеси с боковой поверхностью реактора, k_χ — отношение температуропроводности инертного тела к температуропроводности реакционной смеси.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ИХ АНАЛИЗ

Для численного построения решения задачи (1)–(6) использован метод прогонки. Расчеты проводили по неявной разностной схеме с четырехточечным шаблоном. Аппроксимационную сходимость проверяли на последовательно сгущающихся сетках, счетные параметры выбирали таким образом, чтобы погрешность расчетов составляла не более 3 %.

После постановки задачи горения проведена серия расчетов для определения устанавливающихся режимов работы. Расчеты показали принципиальную возможность реализации высокотемпературного или низкотемпературного стационарного состояния либо колебательного режима в зависимости от безразмерных параметров задачи.

Основной целью настоящей работы являлось определение параметрических областей возможных режимов работы реактора. Области строили в фазовом пространстве с осями координат, аналогичными осям в фазовом пространстве работы [6], в котором определено шесть областей возможных режимов рабо-

ты реактора идеального смешения. В настоящей работе на оси ординат представлено отношение $1/(A_v + I_s)$, качественно соответствующее безразмерному комплексу $Se/(1 - I_1)$ из [6]. В работе [6] на оси абсцисс приведен параметр Da , которому в распределенной задаче качественно соответствует отношение Td/A_v . Так как параметр Td зависит только от характеристик смеси и для каждого параметрического пространства задан, на оси абсцисс использовались значения $1/A_v$, при этом качественные закономерности распределения параметрических областей не изменились.

Расчеты проводили для метановоздушной смеси со следующим набором размерных параметров [14, 15]: $\rho = 1.241 \text{ кг/м}^3$, $Q = 50.125 \text{ МДж/кг}$, $\rho_1 = 4500 \text{ кг/м}^3$, $E = 0.238 \text{ МДж/моль}$, $k_0 = 9.66 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$, $c = 1065 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$, $c_1 = 530.8 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$, $\lambda = 0.024 \text{ Дж/(м} \cdot \text{К} \cdot \text{с)}$, $\lambda_1 = 22 \text{ Дж/(м} \cdot \text{с} \cdot \text{К)}$, $r = 0.09 \text{ м}$, $r_1 = 0.03 \text{ м}$. Соответствующие безразмерные параметры равнялись $\theta_v = -21.82$, $\eta_b = 1$, $k_{c\rho} = 225.9$, $Td = 1.53 \cdot 10^{-2}$, $k_\chi = 0.5$, $Ag = 0.03$, $Le = 1$. В качестве масштабной (T_{ref}) выбирали температуру либо нагретой боковой поверхности, либо предварительно нагретого инертного внутреннего тела.

В работе [16] для метановоздушной смеси показано, что на установление режимов работы реактора, помимо параметров теплообмена I_1 , I_s и параметра течения смеси A_v , существенно может влиять протяженность реактора ξ_L . В данной работе области возможных режимов рассчитаны при $\xi_L = 48$ и 80 . Первое значение соответствует переходному значению ξ_L из [16]. При этом значении в системе происходил переход от затухающих колебаний к установившимся. Второе значение ξ_L выбрано для того, чтобы оценить, насколько меняется картина распределения параметрических областей при увеличении протяженности реактора практически в два раза.

В случае инициирования горения горячей боковой поверхностью реактора масштабную температуру выбирали равной температуре стенки, $T_{ref} = T_s$. Тогда $\theta_s = 0$, $\theta_{1b} = -21.82$. Было определено, что в зависимости от параметров теплообмена I_1 , I_s и параметра течения смеси A_v в реакторе возможна реализация высоко- или низкотемпературного стационарного состояния или колебательного режима. На рис. 2 показано изменение положения фронта пламени вдоль оси реактора во времени. Поло-

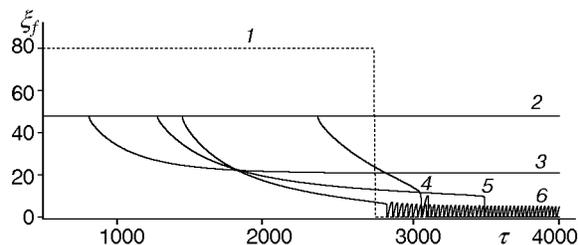


Рис. 2. Зависимость положения фронта горения ($\eta = 0.5$) от времени:

$\theta_b = -21.82$, $I_1 = 0.72$, $\theta_s = 0$, $\theta_{1b} = -21.8$; кривые: 1 — $\xi_L = 80$, $I_s = 0.39$, $A_v = 3.85$; 2 — $\xi_L = 48$, $I_s = 0.39$, $A_v = 3.85$; 3 — $\xi_L = 48$, $I_s = 1.55$, $A_v = 0.58$; 4 — $\xi_L = 48$, $I_s = 0.39$, $A_v = 0.39$; 5 — $\xi_L = 48$, $I_s = 1.16$, $A_v = 0.58$; 6 — $\xi_L = 48$, $I_s = 0.77$, $A_v = 0.39$

жением фронта пламени ξ_f считалась точка, в которой относительная концентрация горючего компонента равнялась $\eta = 0.5$. Координата $\xi = 0$ определяет вход в реактор, $\xi = \xi_L$ — выход из реактора. Значение $\xi_f = 0$ на рис. 2 соответствует установлению фронта пламени на входе в реактор, значение $\xi_f = \xi_L$ подразумевает, что фронт пламени находится за реактором. Кривая 2 на рис. 2 определяет установившееся низкотемпературное стационарное состояние, фактически в этом случае воспламенение внутри реактора отсутствует. Увеличение параметра ξ_L , отвечающего за протяженность реактора, приводит к тому, что смесь, проходя через реактор, зажигается за счет теплообмена с нагретой боковой поверхностью, и в системе устанавливается высокотемпературное стационарное состояние (кривая 1 на рис. 2). Уменьшение параметра течения смеси A_v при неизменности остальных параметров так же может привести к переходу от низкотемпературного СС к высокотемпературному (кривая 4 на рис. 2). Причем этот переход происходит плавно по сравнению с переходом в случае увеличения протяженности расчетной области. При изменении параметра теплообмена I_s система от высокотемпературного СС может перейти к колебательному режиму (кривая 6 на рис. 2). Параметр теплообмена реакционной смеси с боковой поверхностью реактора не только влияет на устойчивость устанавливающихся режимов работы, но также может изменить характер устанавливающегося стационарного состояния. Кривые 3, 5 на рис. 2 построены при одних и тех же значениях расчетных параметров и различаются только параметром теплообме-

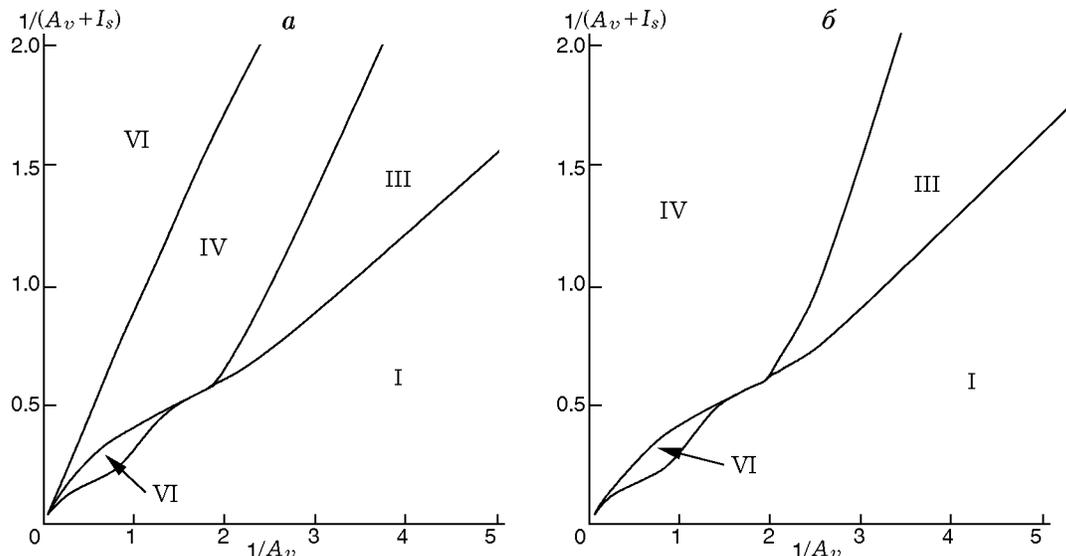


Рис. 3. Области возможных режимов горения метановоздушной смеси в проточном реакторе длиной $\xi_L = 48$ (а) и 80 (б) при $I_1 = 0.72$, $\theta_s = 0$, $\theta_{1b} = -21.8$

на I_s . Значение I_s для кривой 3 выше, поэтому смесь отдает больше тепла в стенку и горючий компонент не выгорает полностью вдоль оси реактора. Согласно рис. 2 фронт устанавливается в точке $\xi_f = 20.8$. Расчеты показали, что далее вдоль оси реактора идет слабое выгорание и на выходе концентрация горючего компонента равна $\eta(\xi_L) = 0.27$. Для кривой 5 значение параметра I_s уменьшается по сравнению с кривой 3, следовательно, уменьшается отток тепла от смеси к боковой поверхности. Смесь накапливает тепло, в результате и в реакторе возникает вспышка. После вспышки система выходит на высокотемпературное СС.

По результатам расчетов в параметрическом пространстве $(1/A_v, 1/(A_v + I_s))$ выделены четыре области возможных режимов работы реактора: I — область единственного низкотемпературного СС, III — область колебательного режима, IV — область единственного высокотемпературного СС, VI — область двух возможных СС: высокотемпературного или низкотемпературного. Результаты расчетов при $\xi_L = 48$ и 80 представлены на рис. 3. Нумерация областей на рис. 3 соответствует работам [6, 17]. Ранее в [17] были проведены расчеты горения смеси пропана с кислородом в проточном реакторе с инертным внутренним телом в случае инициирования процесса нагретой боковой поверхностью реактора; в параметрическом пространстве $(1/A_v, 1/(A_v + I_s))$ определено шесть областей возможных режи-

мов работы реактора. Сравнение рис. 3 с результатами работы [6] позволяет сделать вывод, что при заданных параметрах метановоздушной смеси исчезают области неединственных состояний II и V [6, 17]. Это может быть связано с энергетическими характеристиками реакционной смеси. Распределение остальных областей возможных режимов работы реактора качественно не изменяется.

Согласно рис. 3 для реактора относительно малой протяженности в параметрическом пространстве $(1/A_v, 1/(A_v + I_s))$ вероятно возникновение дополнительной области двух возможных режимов работы реактора (область VI) над областью единственного высокотемпературного СС (область IV). Это можно объяснить влиянием протяженности реактора на время пребывания смеси в нем. При одном и том же значении A_v смесь в более протяженном реакторе дольше обменивается теплом с боковой поверхностью реактора и в случае зажигания боковой поверхностью может загореться даже при малом значении параметра теплообмена смеси с поверхностью реактора I_s . В реакторе длиной $\xi_L = 48$ при параметрах расчета, соответствующих точке в дополнительной области IV, смесь при $\theta_b = -21.82$ не успеет прогреться и воспламениться. В случае поступления смеси в реактор с начальной температурой $\theta_b = 3$ при неизменности остальных параметров система выходит на высокотемпературное СС. Таким образом, в реакторе дли-

ной $\xi_L = 48$ возникает дополнительная область двух возможных СС. Примером влияния параметра ξ_L на установление режима работы служат кривые 1, 2 на рис. 2. Безразмерные параметры расчета кривой 1 соответствуют точке в дополнительной области VI на рис. 3,а, для кривой 2 — области IV на рис. 3,б. Согласно рис. 2 в случае $\xi_L = 80$ смесь за время продвижения по реактору успеваеет зажечься и система выходит на высокотемпературное СС, в случае $\xi_L = 48$ смесь не успеваеет достаточно прогреться и зажигания не происходит.

Характер определенного колебательного режима качественно соответствует колебаниям из [17]. Воспламенение возникает вблизи входа в реактор, и тепловая волна вместе с волной выгорания смещается в сторону выхода из реактора. Максимальная длина распространения тепловой волны при длине расчетной области $\xi_L = 48$ равна $\xi = 19$. Температура инертного тела, как и в случае зажигания смеси пропана с кислородом [17], колеблется в точке вблизи входа в реактор. Максимальная амплитуда колебаний температуры реакционной смеси подчиняется закономерностям, определенным для зажигания пропанокислородной смеси из [17], уменьшение параметров A_v и I_s приводит к уменьшению амплитуд колебаний параметров.

При зажигании метановоздушной смеси нагретым инертным телом в качестве масштабной выбирали начальную температуру предварительно нагретого инертного тела, $T_{1b} = T_{ref}$. Тогда $\theta_{1b} = 0$. Температуру боковой поверхности в данном случае считали равной температуре втекающей смеси $\theta_s = -21.8$.

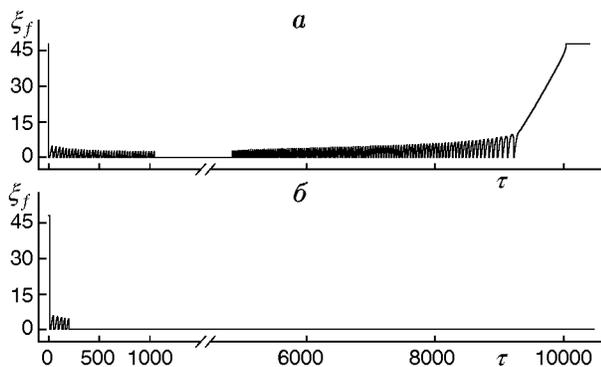


Рис. 4. Зависимость положения фронта горения ($\eta = 0.5$) от времени:

$I_1 = 0.72$, $\theta_{1b} = 0$, $\theta_s = -21.8$, $\xi_L = 48$, $I_s = 0.012$, $A_v = 0.25$ (а) и 0.27 (б)

Расчеты показали, что при этих допущениях в системе возможно высокотемпературное или низкотемпературное СС в зависимости от безразмерных параметров расчета. Области установившихся колебаний при данном типе зажигания не реализуются, на границе между областями высокотемпературного и низкотемпературного СС возможны затухающие колебания со срывом на то или иное стационарное состояние. На рис. 4 представлены два варианта движения фронта пламени ξ_f во времени в случае затухающих колебаний: рис. 4,а соответствует срыву колебаний на низкотемпературное СС, рис. 4,б — срыву колебаний на высокотемпературное СС. Расчет обоих вариантов выполнен при одних и тех же безразмерных параметрах, различаются только значения параметра течения смеси A_v . При $A_v = 0.25$ в системе реализуется низкотемпературное СС. При этом колебания устанавливаются в начале процесса и сперва срываются на высокотемпературный режим горения, а затем после некоторого накопления горючего компонента и охлаждения смеси система вновь выходит на колебательный режим, который в свою очередь срывается на низкотемпературное СС. Увеличение параметра течения смеси до значения $A_v = 0.27$ приводит к уменьшению времени пребывания смеси в реакторе. Боковая поверхность реактора для данного случая иницирования горения считается холодной и служит стоком тепла, забирая его от реакционной смеси. В случае $A_v = 0.27$ смесь, продвигаясь по реактору, не успеваеет достаточно сильно охладиться, поэтому колебания срываются на высокотемпературный режим горения с последующим установлением высокотемпературного СС.

Проведенные расчеты позволили построить области возможных режимов работы реактора в параметрическом пространстве $(1/A_v, 1/(A_v + I_s))$. Положение областей возможных режимов работы реакторов длиной $\xi_L = 48$ и 80 показано на рис. 5. Область двух возможных режимов работы реактора (область VI на рис. 5,а) при $\xi_L = 48$ по сравнению со случаем $\xi_L = 80$ слегка расширяется в сторону области единственного низкотемпературного СС (I на рис. 5,а). Это связано с тем, что с уменьшением длины реактора сокращается время пребывания смеси в реакторе, следовательно, смесь отдает меньше тепла в окружающую среду через боковую поверхность реактора. Механизм установления высокотемпературного СС в об-

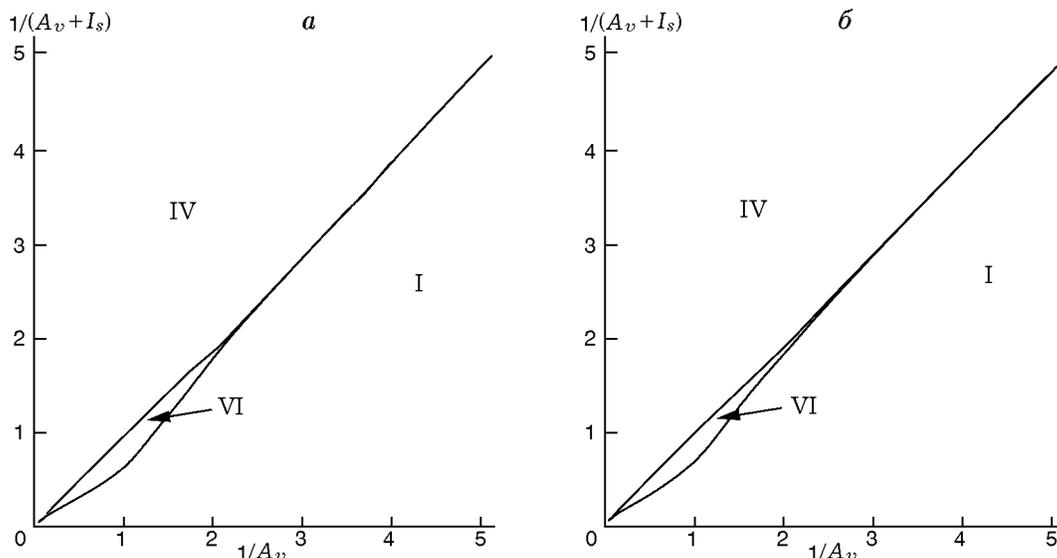


Рис. 5. Области возможных режимов горения метановоздушной смеси в проточном реакторе длиной $\xi_L = 48$ (а) и 80 (б) при $I_1 = 0.72$, $\theta_{1b} = 0$, $\theta_s = -21.8$

ласти VI следующий: смесь, подогретая до начала процесса до температуры, превышающей температуру инертного тела, в начале процесса за счет теплообмена незначительно повышает температуру инертного тела. В свою очередь инертное тело нагревает смесь вдоль оси реактора, и на некоторой глубине ξ_* происходит вспышка. После вспышки температура смеси понижается за счет поступления свежей холодной смеси и теплоотвода в окружающую среду через боковую поверхность реактора. Если реактор достаточно протяженный, то теплоотдача в стенки превышает поступление тепла от нагретого инертного тела и происходит срыв на низкотемпературное стационарное состояние.

Согласно рис. 5 при иницировании горения предварительно нагретым внутренним телом отсутствуют области установившихся колебательных режимов работы реактора. Это может быть связано с тем, что инертное тело выступает в роли стабилизатора и влияет на распределение температуры в реакторе. Расчеты областей показали, что при $1/A_v > 2.6$ на границе между областями высокотемпературного (IV на рис. 5) и низкотемпературного СС (I на рис. 5) возникают затухающие колебания, которые срываются на то или иное стационарное состояние в зависимости от значений I_s и A_v . Пример срыва при изменении параметра скорости потока A_v показан на рис. 4.

Срыв на высокотемпературное СС из-за влияния параметра I_s связан с тем, что при относительно малых значениях параметра теплообмена смеси с боковой поверхностью реактора инертное тело забирает тепло от смеси и подогревает ее по всей длине реактора. В итоге амплитуда колебаний температуры и концентрации смеси понижается (верхний предел падает за счет теплоотдачи телу, нижний предел поднимается за счет нагрева инертным телом), пока не выходит на промежуточное значение, соответствующее высокотемпературному состоянию. После срыва колебаний смесь разогрывается за счет выгорания горючего компонента и выходит на высокотемпературное СС. Увеличение параметра I_s приводит к тому, что смесь отдает больше тепла боковой поверхности реактора, и инертное тело осуществляет не теплоотвод, а подогрев потока. Смесь нагревается инертным телом, повышается амплитуда колебаний температуры смеси и концентрации горючего компонента. В определенный момент тело охлаждается до температуры меньше масштабной, после чего происходит срыв колебаний температуры реакционной смеси. Так как боковая поверхность реактора по-прежнему забирает тепло, смесь начинает охлаждаться и одновременно накапливается горючий компонент. Система при больших значениях τ выходит на низкотемпературное СС. Серия расчетов показала, что небольшое отклонение в зна-

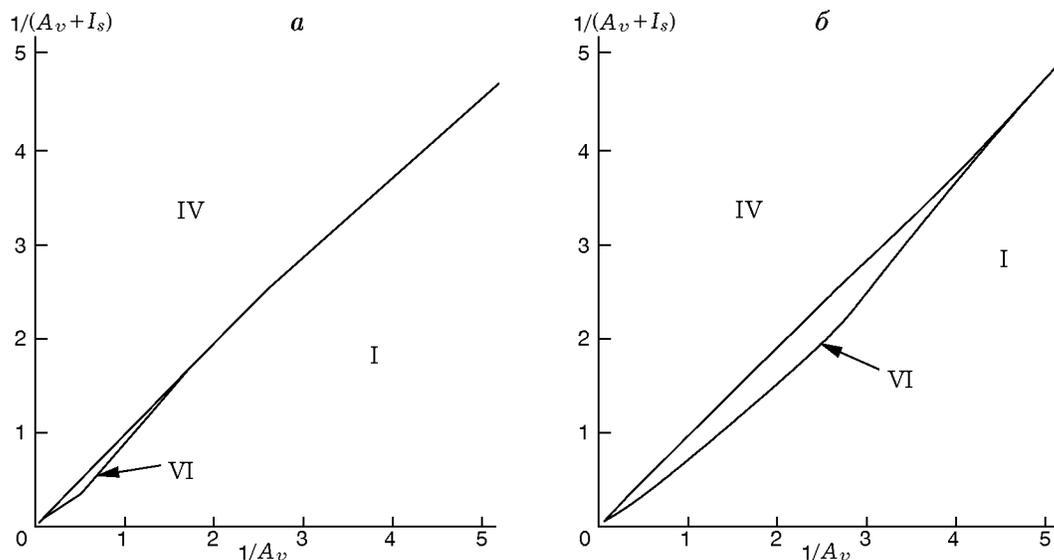


Рис. 6. Области возможных режимов горения метановоздушной смеси в проточном реакторе длиной $\xi_L = 48$ при $\theta_{1b} = 0$, $\theta_s = -21.8$, $I_1 = 3$ (а) и 0.2 (б)

чениях параметров I_s и A_v может изменить характер устанавливающегося СС, но система не выходит на колебательный режим работы.

Влияние параметра теплообмена смеси с инертным внутренним телом I_1 на распределение параметрических областей режимов работы реактора при зажигании пропанокислородной реакционной смеси нагретой боковой поверхностью реактора рассматривалось в [17]. Показано, что увеличение I_1 приводит к уменьшению или полному исчезновению областей двух возможных режимов работы реактора. Согласно [17] при повышении значения I_1 от 0.25 до 1 полностью исчезает область неединственного состояния V и за счет расширения области единственного высокотемпературного СС IV сужается область колебательного режима III. Увеличение теплообмена реакционной смеси с инертным телом ведет к сокращению колебательных областей; по-видимому, это связано с тем, что инертное тело стабилизирует процесс, отводя часть тепла. В настоящей работе рассматривалось влияние параметра I_1 на распределение областей возможных режимов работы реактора при инициировании горения предварительно разогретым инертным телом.

Для качественной оценки областей устанавливающихся режимов работы реактора были проведены расчеты горения метановоздушной смеси при $I_1 = 0.2$ и 3. Заданные значения

I_1 отличались приблизительно в четыре раза в меньшую и большую сторону от значения, используемого в предыдущих расчетах ($I_1 = 0.72$). Остальные безразмерные параметры соответствовали параметрам метановоздушной смеси, приведенным выше. Протяженность реактора равнялась $\xi_L = 48$. Результаты расчета при $I_1 = 3$ и 0.2 представлены на рис. 6.

Анализ рис. 6 и рис. 5,а позволяет оценить влияние параметра I_1 на распределение параметрических областей работы реактора. Прежде всего, стоит отметить, что увеличение или уменьшение параметра теплообмена смеси с инертным телом не приводит к возникновению колебательных областей работы реактора, три рассматриваемые картины параметрических областей качественно совпадают. В случае зажигания метановоздушной смеси инертным внутренним телом при трех заданных значениях параметра I_1 (0.2, 0.72, 3) в реакторе возможны всего три области режимов работы: область единственного низкотемпературного СС, область единственного высокотемпературного СС и область двух возможных СС (высокотемпературного или низкотемпературного). Сравнение расположения и размеров параметрических областей возможных режимов работы реактора позволяет сделать вывод о том, что при зажигании реакционной смеси инертным внутренним телом параметр I_1 качественно влияет на размер области двух

возможных стационарных состояний (область VI). С увеличением параметра I_1 область VI уменьшается, при этом правая граница области смещается вдоль оси абсцисс к началу координат. Область единственного низкотемпературного СС (область I) с увеличением параметра I_1 расширяется в сторону области VI. Описанные изменения можно объяснить тем, что с увеличением теплообмена смеси с инертным телом растет отток тепла от нагретой смеси к инертному телу, кроме того, реакционная смесь отдает тепло холодной боковой поверхности реактора. При увеличении параметра I_1 отток тепла от смеси становится существеннее, поэтому диапазон значений I_s , соответствующий области двух возможных стационарных состояний, уменьшается, размер области VI относительно оси ординат сокращается. Вдоль оси абсцисс область двух возможных СС с ростом I_1 сжимается, что также можно объяснить влиянием теплообмена. При увеличении параметра I_1 теплообмен между смесью и телом протекает быстрее, поэтому при малых значениях A_v (или больших значениях $1/A_v$) смесь за счет увеличения времени пребывания в реакторе успевает охладиться сильнее, вероятность срыва с высокотемпературного СС увеличивается.

Отсутствие колебательных областей в случае инициирования горения метановоздушной смеси предварительно разогретым инертным телом очевидно связано со стабилизирующей ролью инертного тела. Это утверждение основано на двух фактах. Во-первых, увеличение параметра I_1 , а значит, и влияния инертного тела приводит к стабилизации процесса горения. Такая стабилизация показана в работе [17] на примере зажигания смеси пропана с кислородом горячей боковой поверхностью реактора, а также в настоящей работе на примере зажигания метановоздушной смеси предварительно нагретым инертным внутренним телом. В обоих случаях наблюдалось сокращение или исчезновение колебательных областей и областей неединственности при увеличении параметра I_1 . Во-вторых, существующие расчеты смеси пропана с кислородом показали, что характер колебательного режима при инициировании горения нагретым внутренним телом [18] и при зажигании этой же смеси нагретой боковой поверхностью [17] различаются. В случае зажигания инертным внутренним телом колебания температуры реакционной сме-

си и концентрации горючего компонента происходят в точке вблизи входа в реактор, т. е. в глубь реактора тепловая волна и волна выгорания не продвигаются. В случае зажигания нагретой боковой поверхностью подобная динамика колебаний характерна только для температуры инертного тела. Кроме того, согласно [18] и [17] амплитуда колебаний температуры реакционной смеси при зажигании инертным внутренним телом уменьшается приблизительно в десять раз по сравнению со случаем зажигания боковой поверхностью, что можно объяснить стабилизирующей ролью инертного тела.

ВЫВОДЫ

Для проточного реактора рассчитаны режимы горения метановоздушной смеси при зажигании ее двумя способами: горячей боковой поверхностью и горячим внутренним телом. Определена принципиальная возможность реализации областей различных режимов работы реактора, качественно соответствующих областям из работы [6].

Для случая зажигания смеси нагретой боковой поверхностью определены четыре области возможных режимов горения в реакторе: две области единственного стационарного состояния, область двух стационарных состояний и область колебательного режима работы реактора. При зажигании смеси нагретым инертным телом определены три области: две области единственного устойчивого стационарного состояния и область двух стационарных состояний: высокотемпературного и низкотемпературного. В обоих случаях протяженность реактора влияет на распределение областей возможных режимов работы проточного реактора.

Показано, что инертное тело играет роль стабилизатора. При зажигании реакционной смеси инертным внутренним телом исчезает область колебательного режима работы реактора по сравнению со случаем зажигания боковой поверхностью. При зажигании смеси предварительно нагретым телом увеличение параметра I_1 , отвечающего за теплообмен реакционной смеси с инертным внутренним телом, приводит к уменьшению области двух возможных стационарных состояний, а уменьшение этого параметра, наоборот, расширяет область двух режимов работы реактора.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Перлмуттер Д.** Устойчивость химических реакторов. — Л.: Химия, 1976.
2. **Архипов В. А.** Химико-технологические системы. Моделирование и управление: учебное пособие. — Томск: Изд-во Том. гос. ун-та, 2007.
3. **Коловертных Н. Е., Худяев С. И., Штейнберг А. С.** Характерные режимы экзотермического реагирования в системе пористое тело — газ // Физика горения и взрыва. — 1980. — Т. 16, № 4. — С. 67–75.
4. **Буркина Р. С., Виллюнов В. Н.** Асимптотический анализ релаксационных колебаний в реакторе идеального смешения при теплоотдаче в его стенки // Хим. физика. — 1985. — Т. 4, № 12. — С. 1703–1706.
5. **Корсунский Б. Л., Самойленко Н. Г., Деюн Е. В., Ильченко А. О.** Стационарные режимы экзотермической автокаталитической реакции в реакторе идеального смешения // Хим. физика. — 2008. — Т. 27, № 6. — С. 14–19.
6. **Буркина Р. С., Моисеева К. М.** Горение в реакторе идеального смешения с инертной внутренней насадкой // Хим. физика. — 2014. — Т. 33, № 5. — С. 47–53.
7. **Рабинович О. С., Силенков М. А., Фатеев Г. А.** Колебательные режимы горения газовой смеси в трубках малого диаметра // Инж.-физ. журн. — 1998. — Т. 71, № 4. — С. 579–583.
8. **Марута К., Паре Дж. К., Ох К. С., Фуджимори Т., Минаев С. С., Фурсенко Р. В.** Особенности горения газа в узком нагретом канале // Физика горения и взрыва. — 2004. — Т. 40, № 5. — С. 21–29.
9. **Князева А. Г., Чумаков Ю. А.** Двухтемпературная модель горения газа в модельном горелочном устройстве цилиндрической формы // Изв. Том. политехн. ун-та. — 2007. — Т. 311, № 4. — С. 24–30.
10. **Прокофьев В. Г., Кирдяшкин А. И., Саламатов В. Г., Смоляков В. К.** Нестационарное горение газа в инертном пористом слое // Физика горения и взрыва. — 2010. — Т. 46, № 6. — С. 32–38.
11. **Бостанджиян С. А., Шкадинский К. Г.** Множественность стационарных состояний и переходные режимы в цилиндрическом реакторе с неподвижным слоем катализатора // Теорет. основы хим. технологии. — 2010. — Т. 44, № 2. — С. 131–137.
12. **Деюн Е. В., Корсунский Б. Л., Самойленко Н. Г., Финаева Ю. Н.** Тепловые режимы противоточного реактора. Система газ — жидкость // Хим. физика. — 2012. — Т. 31, № 1. — С. 33–37.
13. **Кустова Л. В., Финаева Ю. Н., Самойленко Н. Г., Корсунский Б. Л.** Двухтемпературная модель противоточного реактора вытеснения. Система газ — жидкость // Хим. физика. — 2012. — Т. 31, № 7. — С. 36–40.
14. **Кухлинг Х.** Справочник по физике: пер. с нем. — М.: Мир, 1985.
15. **Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М.** Математическая теория горения и взрыва. — М.: Наука, 1980.
16. **Буркина Р. С., Моисеева К. М.** Влияние длины проточного реактора на режимы горения в нем метановоздушной смеси // Изв. вузов. Физика. — 2013. — Т. 56, № 6/3. — С. 104–107.
17. **Буркина Р. С., Моисеева К. М.** Динамика химических процессов в проточном реакторе при теплообмене на боковой поверхности реактора и инертной насадке внутри него // Хаос и структуры в нелинейных системах. Теория и эксперимент. — Караганда, 2012. — С. 300–306.
18. **Буркина Р. С., Моисеева К. М.** Экзотермические химические реакции в проточном реакторе // Сб. науч. тр. II Всерос. науч.-техн. конф. молодых ученых, аспирантов и студентов с международным участием «Высокие технологии в современной науке и технике». — Томск, 2013. — Т. 2. — С. 404–408.

Поступила в редакцию 27/XI 2013 г.