УДК 536.46

УСЛОВИЯ ТЕПЛОВОГО ВЗРЫВА ПРИ ВЫНУЖДЕННОЙ КОНВЕКЦИИ РЕАГИРУЮЩЕЙ СМЕСИ

Б. В. Новожилов, Н. Г. Самойленко, Г. Б. Манелис

Институт проблем химической физики РАН, 142432 Черноголовка, sam@icp.ac.ru

Исследуются условия возникновения теплового взрыва в цилиндрическом химическом реакторе, снабженном некоторым количеством симметрично расположенных мешалок, вызывающих вынужденную конвекцию реагирующей смеси. Рассмотрение проведено в приближении бесконечного значения числа Пекле и в предположении о ламинарном движении жидкости. Найдено критическое значение параметра теплового взрыва (параметра Франк-Каменецкого) в зависимости от количества мешалок и расстояния между осями мешалок и реактора. Расчеты показывают, что при увеличении количества мешалок возможность реализации теплового взрыва уменьшается и критическое значение параметра может в несколько раз превзойти его классическое значение. Обнаружена существенная зависимость параметра теплового взрыва от расположения мешалок, которое определяет теплоотвод из реактора.

Ключевые слова: тепловой взрыв, вынужденная конвекция, ламинарное движение.

ВВЕДЕНИЕ

Реакторы с вынужденным перемешиванием реагирующей смеси применяются в химической технологии для интенсификации процессов тепло- и массопереноса. Если химическая реакция экзотермична, то улучшение теплообмена с окружающей средой приводит к изменению условия теплового взрыва по сравнению со случаем, когда перемешивание отсутствует. При этом, естественно, возникает вопрос о вычислении критических условий и сравнении их с классическим значением [1, 2]. Несмотря на очевидную актуальность проблемы, в литературе практически отсутствуют публикации по этому вопросу. Укажем лишь работу [3], где исследовалось влияние перемешивания на условия возникновения теплового взрыва для плоского случая, и работу авторов [4], где рассматривался случай цилиндрической геометрии. В работе [4] решена задача о тепловом взрыве в прямом круговом цилиндре, причем в части объема цилиндра — между двумя цилиндрическими поверхностями — жидкость принудительно перемешивалась. При этом была принята простейшая модель конвективного теплопереноса. Он описывался путем введения эффективного коэффициента температуропроводности, который считался равным сумме молекулярного и конвективного коэффициентов. Было исследовано влияние интенсивности перемешивания, доли перемешиваемого объема и его положения на параметр теплового взрыва. Увеличение интенсивности перемешивания и доли перемешиваемого объема приводит к росту критического значения этого параметра. Нетривиальным результатом проведенного анализа является нахождение оптимального (при заданной доле перемешиваемого объема) положения области перемешивания, при котором достигается минимальная вероятность возникновения теплового самовоспламенения.

Полное решение задачи о тепловом взрыве в условиях вынужденной конвекции реагирующей среды требует, прежде всего, определения поля скоростей вязкой жидкости при заданном движении мешалок реактора. Даже в простейшей постановке речь не может идти об аналитическом решении этой задачи. Она очень трудна и при использовании численных методов моделирования. Поэтому имеет смысл провести исследование указанного круга задач в рамках приближенного рассмотрения процесса конвективной теплопроводности.

В настоящей работе на примере простейшей модели химического реактора исследуется задача о тепловом взрыве при заданном ламинарном движении реагирующей жидкой смеси. В приближении бесконечного значения числа Пекле найдено критическое значение параметра теплового взрыва (параметра Франк-Каменецкого) в зависимости от числа мешалок

Работа выполнена при поддержке Международного научно-технического центра (проект № 1529).

и расстояния между осями мешалок и реактора. Расчеты показывают, что при увеличении количества мешалок возможность реализации теплового взрыва уменьшается, и критическое значение параметра может в несколько раз превзойти его классическое значение. Обнаружена существенная зависимость параметра теплового взрыва от расположения мешалок, которое определяет теплоотвод из реактора.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Поскольку большинство химических реакторов с механическим перемешиванием смеси имеют симметрию, близкую к цилиндрической, ограничимся рассмотрением процесса теплового взрыва в прямом круговом цилиндре радиуса R_0, основания которого теплоизолированы, а температура боковой поверхности (T_a) поддерживается постоянной.

Предположим, что цилиндрический химический реактор снабжен некоторым количеством одинаковых мешалок, оси которых параллельны оси цилиндра, а сами они расположены симметрично относительно этой оси.

Отвлекаясь от конструкции мешалок и считая жидкость несжимаемой, зададим ее движение посредством функции тока

$$\psi(r,\varphi) = \Psi\zeta(r,\varphi),$$

где функция радиальной и угловой координат $\zeta(r,\varphi)$ порядка единицы. Под r понимается отношение текущего значения радиальной координаты к радиусу реактора, так что $0 \leqslant r \leqslant 1$. Тогда компоненты скорости движения жидкости представляются в виде

$$u_r = -\frac{\Psi}{r}\frac{\partial\zeta}{\partial\varphi},\ u_\varphi = \Psi\frac{\partial\zeta}{\partial r}.$$

Как правило, в реальных устройствах конвективный перенос тепла во много раз превышает молекулярный. Соотношение между конвективной и молекулярной теплопроводностью характеризуется числом Пекле

$$\mathrm{Pe} = \frac{UR_0}{æ},$$

где æ — молекулярная температуропроводность, U — характерная скорость движения жидкости. При скоростях движения жидкости порядка сантиметров или метров в секунду и разумных размерах реактора произведение UR_0 на несколько порядков превышает молекулярную температуропроводность жидкости ($æ \approx 10^{-3}$ см^2/с). Именно в этом пределе ($\mathrm{Pe} \gg 1$) и рассматривается процесс теплового взрыва в настоящей работе.

Легко понять, что в рассматриваемом приближении линии тока являются изотермами. При достаточно быстром движении частица жидкости за время одного оборота вдоль линии тока не успевает сколько-нибудь изменить свою температуру за счет молекулярной теплопроводности. Формально это вытекает из следующих соображений. В уравнении теплопроводности конвективный теплоперенос описывается слагаемым вида

$$\vec{u}\cdot\nabla T = \frac{\Psi}{r}\Big(\frac{\partial\zeta}{\partial r}\frac{\partial T}{\partial\varphi} - \frac{\partial\zeta}{\partial\varphi}\frac{\partial T}{\partial r}\Big).$$

Поскольку остальные члены уравнения теплопроводности конечны, этот член также не должен обращаться в бесконечность.

В рассматриваемом приближении $\mathrm{Pe} \to \infty$ и, следовательно, $\Psi \to \infty$. Поэтому якобиан функций $\zeta(r,\varphi)$ и $T(r,\varphi)$ должен обращаться в нуль. Указанное свойство линий тока позволяет свести задачу к пространственно-одномерной. Если известно положение изотерм, достаточно рассмотреть процесс теплопроводности только в нормальном к ним направлении.

В дальнейшем используются безразмерные величины, принятые в теории теплового взрыва [2]:

$$\tau = \frac{æt}{R_0^2},\quad \theta = \frac{E}{RT_a^2}(T - T_a),$$

$$\delta = \frac{E}{RT_a^2}\frac{Q}{c}\frac{R_0^2 k}{æ}\exp\Big(-\frac{E}{RT_a}\Big),$$

где Q и c — тепловой эффект реакции и теплоемкость смеси на единицу массы, k и E — константы химической реакции.

Пусть n — число мешалок. Выберем при данном n вихрь, для которого $-\pi/n \leqslant \varphi \leqslant \pi/n$. В дальнейшем рассматривается модель невязкой жидкости. Конкретизируем вид функции тока $\zeta(r,\varphi)$ так, чтобы в области вихря эта величина менялась от нуля до единицы:

$$\zeta_{n,m}(r,\varphi) = 1 - \sin\pi r^m\cos\frac{n\varphi}{2}. \qquad (1)$$

Легко видеть, что на границах вихря ($r = 1$ или $\varphi = \pm\pi/n$) функция тока постоянна и

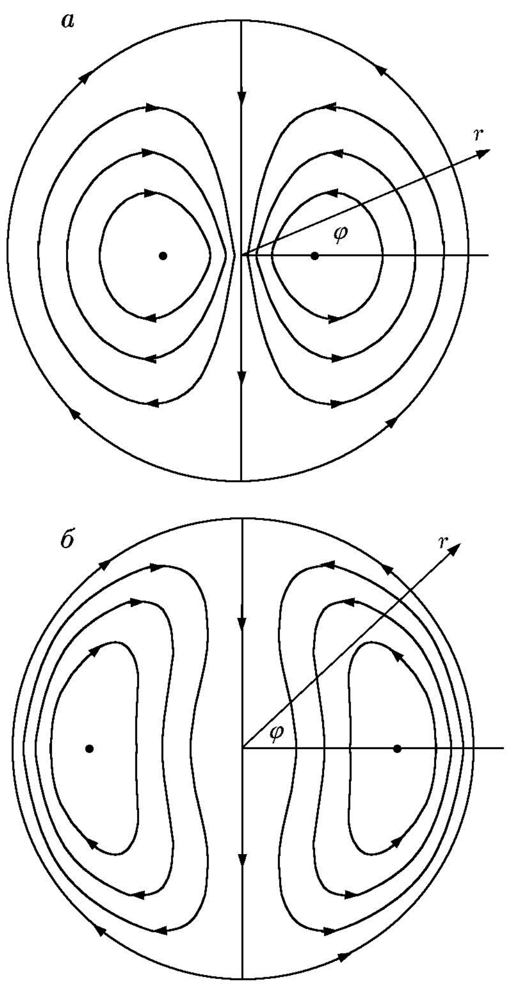

Рис. 1. Линии тока при $n = 2$:
а — $r_0 = 1/3$, *б* — $r_0 = 2/3$

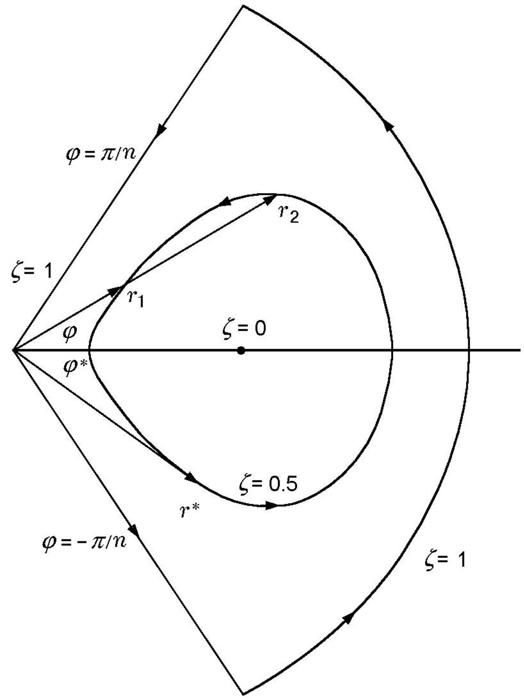

Рис. 2. Геометрия линий тока

равна единице. Таким образом, контур вихря является изотермой с температурой окружающей среды ($T = T_a$ или $\theta = 0$). Функцию тока (1) имеет смысл рассматривать только при четном числе мешалок. При нечетном числе возникают контактные поверхности, разделяющие противоположно направленные течения жидкости, что приводит к неустойчивости течения.

Параметр m связан с координатой центра вихря r_0 простым соотношением

$$r_0 = 2^{-1/m}. \tag{2}$$

В центре вихря при $r = r_0$, $\varphi = 0$ и $\zeta = 0$ достигается максимальная температура. На рис. 1 изображены линии тока при $n = 2$.

При некотором заданном значении функции тока $0 < \zeta < 1$ можно найти максимальное значение угловой координаты φ^* и соответствующий ему радиус r^* (см. рис. 2):

$$\varphi^* = \frac{2}{n}\arccos(1-\zeta),\ r^* = r_0. \tag{3}$$

Каждому значению угловой координаты $\varphi < \varphi^*$ соответствуют два значения радиальной координаты:

$$r_1^m = \frac{1}{\pi}\arcsin\frac{1-\zeta}{\cos(n\varphi/2)},$$
$$r_2^m = 1 - \frac{1}{\pi}\arcsin\frac{1-\zeta}{\cos(n\varphi/2)}. \tag{4}$$

При $\varphi = 0$

$$r_1^* = \left[\frac{1}{\pi}\arcsin(1-\zeta)\right]^{1/m},$$
$$r_2^* = \left[1 - \frac{1}{\pi}\arcsin(1-\zeta)\right]^{1/m}. \tag{5}$$

Перейдем к выводу уравнения теплопроводности в координатах τ $(0 \leqslant \tau < \infty)$ и ζ $(0 \leqslant \zeta \leqslant 1)$. Обозначим через $j(\zeta)$ поток тепла через замкнутый контур $\zeta = \text{const}$. Тепловой баланс в области, лежащей между двумя близкими изотермами ζ и $\zeta + \Delta\zeta$, записывается в виде

$$[j_{n,m}(\zeta) - j_{n,m}(\zeta + \Delta\zeta) + \\ + \delta_{n,m} e^{\theta} \Delta S_{n,m}]\Delta\tau = \Delta S_{n,m}\Delta\theta,$$

где $\Delta S_{n,m}$ — площадь, заключенная между рассматриваемыми изотермами. Устремляя временно́й интервал и расстояние между изотермами к нулю, получаем

$$\frac{\partial\theta}{\partial\tau} = -\frac{1}{\sigma_{n,m}(\zeta)}\frac{\partial j_{n,m}(\zeta)}{\partial\zeta} + \delta_{n,m}e^{\theta}.$$

Здесь $\sigma_{n,m}(\zeta)$ — производная от площади $S_{n,m}(\zeta)$, охватываемой линией тока,

$$\sigma_{n,m}(\zeta) = \frac{dS_{n,m}}{d\zeta}. \qquad (6)$$

Очевидно, что

$$j_{n,m}(\zeta) = -\oint\limits_{\zeta} \frac{\partial\theta}{\partial\nu} dl,$$

где ν — направление нормали к контуру $\zeta = \text{const}$, а интеграл берется по всему контуру. Так как

$$\frac{\partial\theta}{\partial\nu} = \frac{\partial\theta}{\partial\zeta}\Big(\frac{\partial\zeta_{n,m}}{\partial\nu}\Big)_{\zeta_{n,m}=\zeta},$$

то

$$j_{n,m}(\zeta) = -\omega_{n,m}(\zeta)\frac{\partial\theta}{\partial\zeta},$$

$$\omega_{n,m}(\zeta) = \oint\limits_{\zeta} \Big(\frac{\partial\zeta_{n,m}}{\partial\nu}\Big)_{\zeta_{n,m}=\zeta} dl.$$

В цилиндрических координатах

$$\Big(\frac{\partial\zeta_{n,m}}{\partial\nu}\Big)_{\zeta_{n,m}=\zeta} = \sqrt{\Big(\frac{\partial\zeta_{n,m}}{\partial r}\Big)^2 + \frac{1}{r^2}\Big(\frac{\partial\zeta_{n,m}}{\partial\varphi}\Big)^2},$$

тогда

$$\omega_{n,m}(\zeta) = \oint\limits_{\zeta} \sqrt{\Big(\frac{\partial\zeta_{n,m}}{\partial r}\Big)^2 + \frac{1}{r^2}\Big(\frac{\partial\zeta_{n,m}}{\partial\varphi}\Big)^2} dl. \qquad (7)$$

Очевидно, что $\omega_{n,m}(\zeta)$ — циркуляция вектора скорости по контуру $\zeta = \text{const}$ для функции тока, заданной в виде (1).

Таким образом, уравнение теплопроводности принимает вид

$$\frac{\partial\theta}{\partial\tau} = \frac{1}{\sigma_{n,m}(\zeta)}\frac{\partial}{\partial\zeta}\Big(\omega_{n,m}(\zeta)\frac{\partial\theta}{\partial\zeta}\Big) + \delta_{n,m}e^{\theta} \qquad (8)$$

с граничными условиями

$$\zeta = 0\colon \quad \frac{\partial\theta}{\partial\zeta} = 0, \quad \zeta = 1\colon \quad \theta = 0. \qquad (9)$$

Легко вычислить циркуляцию скорости для контура, охватывающего весь вихрь ($\zeta = 1$). На дуге $r = 1$ и $-\pi/n \leqslant \varphi \leqslant \pi/n$ радиальная компонента скорости отсутствует, а окружная компонента равна

$$\Big(\frac{\partial\zeta_{n,m}}{\partial r}\Big)_{r=1} = \pi m \cos\frac{n\varphi}{2}.$$

На прямолинейных границах контура $0 \leqslant r \leqslant 1$ и $\varphi = \pm\pi/n$, наоборот, окружная компонента равна нулю, а радиальная —

$$-\frac{1}{r}\Big(\frac{\partial\zeta_{n,m}}{\partial\varphi}\Big)_{\varphi=\pm\frac{\pi}{n}} = \mp\frac{n}{2r}\sin\pi r^m.$$

Принимая во внимание эти соотношения, получаем

$$\omega_{n,m}(1) = \frac{4\pi m}{n} + n\int\limits_0^1 \frac{\sin\pi r^m}{r} dr. \qquad (10)$$

При $0 < \zeta < 1$

$$\omega_{n,m}(\zeta) = 2\int\limits_{r_1^*}^{r_2^*} \sqrt{\Big(\frac{\partial\zeta_{n,m}}{\partial r}\Big)^2 + \frac{1}{r^2}\Big(\frac{\partial\zeta_{n,m}}{\partial\varphi}\Big)^2} \times \\ \times \sqrt{1 + r^2\Big(\frac{\partial\varphi}{\partial r}\Big)^2} dr.$$

Учитывая (1)–(4), запишем

$$\omega_{n,m}(\zeta) = 2\int\limits_{r_1^*}^{r_2^*} Z_{n,m}(\zeta, r) L_{n,m}(\zeta, r) dr, \qquad (11)$$

где

$$Z_{n,m}(\zeta, r) = \Big[\Big(\frac{\pi m(1-\zeta)r^{m-1}}{\text{tg }\pi r^m}\Big)^2 + \\ + \frac{n^2}{4r^2}(\sin^2\pi r^m - (1-\zeta)^2)\Big]^{1/2},$$

$$L_{n,m}(\zeta, r) = \sqrt{1 + \frac{[2\pi m(1-\zeta) r^m \cot \pi r^m]^2}{n^2[\sin^2 \pi r^m - (1-\zeta)^2]}}.$$

Для площади $S_{n,m}(\zeta)$, охватываемой линией тока, имеем

$$S_{n,m}(0) = 0,$$

$$S_{n,m}(1) = \pi/n,$$

а при $0 < \zeta < 1$ из определения

$$S_{n,m}(\zeta) = 2\int_0^{\varphi^*} d\varphi \int_{r_1}^{r_2} r dr,$$

учитывая соотношения (1)–(5), получаем

$$S_{n,m}(\zeta) = \int_0^{\frac{2}{n}\arccos(1-\zeta)} P_{n,m}(\zeta,\varphi) d\varphi, \quad (12)$$

где

$$P_{n,m}(\zeta,\varphi) = \Big(1 - \frac{1}{\pi}\arcsin\frac{1-\zeta}{\cos(n\varphi/2)}\Big)^{2/m} - \Big(\frac{1}{\pi}\arcsin\frac{1-\zeta}{\cos(n\varphi/2)}\Big)^{2/m}.$$

Из (12) находим выражение для производной площади, охватываемой контуром с заданным значением ζ, по этой координате:

$$\sigma_{n,m}(\zeta) = \frac{2}{\pi m} \times \int_0^{\frac{2}{n}\arccos(1-\zeta)} \frac{R_{n,m}(\zeta,\varphi) d\varphi}{\sqrt{\cos^2(n\varphi/2) - (1-\zeta)^2}}, \quad (13)$$

причем

$$R_{n,m}(\zeta,\varphi) = \Big(1 - \frac{1}{\pi}\arcsin\frac{1-\zeta}{\cos(n\varphi/2)}\Big)^{2/m-1} + \Big(\frac{1}{\pi}\arcsin\frac{1-\zeta}{\cos(n\varphi/2)}\Big)^{2/m-1}.$$

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Система (8), (9) с учетом (11), (13) позволяет рассмотреть нестационарный процесс развития экзотермического химического превращения в движущейся реагирующей смеси. При этом естественно задать начальное условие в виде

$$\tau = 0, \quad \theta = 0. \quad (14)$$

Численное интегрирование позволяет найти критическое значение параметра Франк-Каменецкого $\delta^*_{n,m}$, разделяющее при $\tau \to \infty$ стационарные и нестационарные решения. Переходя с помощью соотношения (2) к координате оси мешалки r_0, получаем критическое значение параметра теплового взрыва в зависимости от числа мешалок n и координаты r_0 — $\delta^*_n(r_0)$. Именно эта величина изображена на рис. 3.

Естественно, что в связи с увеличением отношения поверхности теплоотвода к объему реагирующей среды критическое значение параметра теплового взрыва увеличивается с ростом n и может значительно превышать критическое значение параметра теплового взрыва для покоящейся жидкости ($\delta^*_0 = 2$). Также легко объяснить наличие минимума на изображенных кривых. Смещение оси мешалки к периферии вихря приводит к увеличению градиента температуры и, следовательно, к увеличению теплоотвода и критического значения параметра теплового взрыва.

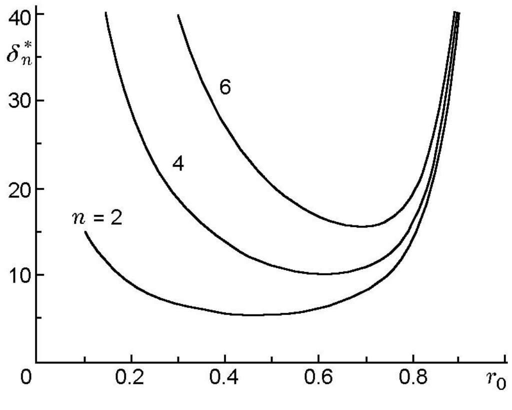

Рис. 3. Зависимость критического значения параметра теплового взрыва от числа мешалок и расстояния от центра реактора до оси мешалки

ЛИТЕРАТУРА

1. **Семенов Н. Н.** Цепные реакции. М.; Л.: Госхимтехиздат, 1934.
2. **Франк-Каменецкий Д. А.** Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.
3. **Kagan L., Berestycki H., Joulin G., Sivashinsky G.** The effect of stirring on the limits of thermal explosion // Combust. Theory Modelling. 1997. V. 1, N 1. P. 97–111.
4. **Новожилов Б. В., Самойленко Н. Г., Манелис Г. Б.** Тепловой взрыв в перемешиваемой среде // Докл. РАН. 2002. Т. 385, № 2. С. 217–219.

Поступила в редакцию 6/VII 2004 г.,
в окончательном варианте — 7/XII 2004 г.