

ратора и исследовать характер изменения основных параметров процесса по длине канала. Температура капель топлива быстро достигает значения, соответствующего состоянию насыщения паров, и далее на всем отрезке пути движения капель незначительно изменяется в связи с падением давления (см. рисунок *a*) в канале, которое в свою очередь обусловлено процессом парообразования, характеризуемого долей испарившегося топлива x . Видно (см. рисунок *b*), что с увеличением производительности генератора интенсифицируется процесс аэродинамического дробления капель топлива и сокращается длина участка испарения.

Результаты расчета использованы при проектировании опытного образца генератора ГИГ-1500, который был успешно применен при ликвидации пожара на одной из шахт Печорского бассейна.

Поступила в редакцию 17/VI 1983,
после доработки — 11/X 1983

ЛИТЕРАТУРА

1. П. А. Тинт, Л. М. Пинков, Э. К. Снйрде. Тр. Таллинского политехн. ин-та, 1975, № 377.
2. A. S. Alkidas. J. Heat and Mass Transfer. 1981, 24, 12, 1913.
3. А. А. Борисов, Б. Е. Гельфанд и др. ПМТФ, 1970, 1, 168.
4. J. S. Habib. J. of Heat Transfer, 1976, 7, 421.
5. J. Richard. Priem and Marcus F. Heidman propellant vaporisation as a design criterion for rocket-engine combustion chambers NASA. Technical report R — 67, 1960.
6. А. В. Иестеренко. Основы термодинамических расчетов вентиляции и кондиционирования воздуха. М.: Высшая школа, 1971.
7. В. П. Исаченко, В. А. Осипова, А. С. Сукомел. Теплопередача. М.: Энергия, 1976.

О ЧИСЛЕ СТАЦИОНАРНЫХ РЕЖИМОВ АДИАБАТИЧЕСКОГО ПРОТОЧНОГО ХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА С АВТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИЕЙ

Ю. С. Рязанцев, В. М. Шевцова
(Москва)

Одним из фундаментальных вопросов математической теории химических реакторов, так же как и теории распространения пламени, является вопрос о существовании и числе стационарных режимов. Решение этой задачи оказывается сравнительно простым лишь для реакторов идеального вытеснения и идеального перемешивания [1]. В случае проточного реактора с продольной дисперсией вопрос о числе стационарных режимов наиболее полно исследован для одномерной модели реактора с одностадийной экзотермической реакцией, скорость которой зависит от концентрации и температуры по закону $f_0(c) = c^n \exp(-E/RT)$. В работах [2, 3] численным методом установлено, что в адиабатическом реакторе в зависимости от значений определяющих параметров может реализовываться от одного до трех стационарных режимов, в неадиабатическом реакторе с линейным теплообменом [5] — от одного до семи.

Наряду с анализом реактора, в котором протекает реакция со степенной зависимостью от концентрации, большой интерес представляет исследование вопроса о числе стационарных режимов в случае, когда в реакторе протекает экзотермическая реакция типа Лэнгмюра — Хиншельвуда

$$f(c) = k_1 c \exp(-E/RT)/(1 + k_2 c)^2, \quad (1)$$

которая, в частности, описывает окисление угарного газа СО на платиновом катализаторе [6], гидрогенизацию этилена [7], некоторые биологические процессы [8] и др. Отметим, что в отличие от реактора со степенной реакцией в реакторе с автокаталитической реакцией неедин-

ственность стационарного режима оказывается возможной даже в случае изотермического процесса [9].

В данной работе путем численного анализа проведено полное исследование вопроса о числе стационарных решений для одномерного неизотермического адиабатического проточного реактора с продольным перемешиванием, когда скорость химической реакции зависит от концентрации по закону (1).

В безразмерных переменных уравнения и граничные условия для концентрации и температуры реагента в проточном одномерном неизотермическом реакторе с реакцией (1) можно записать в виде

$$\frac{1}{\text{Pe}_\Theta} \frac{d^2\Theta}{dx^2} - \frac{d\Theta}{dx} + B \text{Da} \frac{c}{(1+k_2c)^2} \exp[\Theta/(1+\varepsilon\Theta)] = 0, \quad (2)$$

$$\frac{1}{\text{Pe}_c} \frac{d^2c}{dx^2} - \frac{dc}{dx} - \text{Da} \frac{c}{(1+k_2c)^2} \exp[\Theta/(1+\varepsilon\Theta)] = 0;$$

$$x = 0: \quad \frac{d\Theta}{dx} = \text{Pe}_\Theta \Theta, \quad \frac{dc}{dx} = \text{Pe}_c (c - 1), \quad (3)$$

$$x = 1: \quad \frac{d\Theta}{dx} - \frac{dc}{dx} = 0.$$

Здесь

$$\Theta = \frac{E(T - T_0)}{RT_0^2}; \quad B = \frac{(-\Delta H)c_0}{\rho c_p T_0}; \quad \text{Da} = \frac{Lk_1 \exp(-1/\varepsilon)}{v};$$

$$\text{Pe}_\Theta = \rho v c_p L / k; \quad \text{Pe}_c = vL / D; \quad \varepsilon = RT_0 / E; \quad x = XL, \quad c = y/c_0;$$

T — температура; X — координата вдоль реактора; y — концентрация; c_0 — концентрация во входном потоке; T_0 — температура входного потока; v — скорость входного потока; D — эффективный коэффициент диффузии; B — адиабатическая температура полного превращения; Da — число Дамкеллера; Pe_Θ , Pe_c — тепловое и массовое числа Пекле.

Будем считать, что $\text{Pe}_\Theta = \text{Pe}_c = \text{Pe}$, тогда система уравнений (2) имеет первый интеграл, и задача может быть записана в виде

$$\frac{1}{\text{Pe}} \frac{d^2\Theta}{dx^2} - \frac{d\Theta}{dx} + \text{Da} \frac{(B - \Theta)}{[1 + k_2(1 - \Theta/B)]^2} \exp\left(\frac{\Theta}{1 + \varepsilon\Theta}\right) = 0, \quad (4)$$

$$x = 0: \quad \frac{d\Theta}{dx} = \text{Pe}\Theta, \quad (5)$$

$$x = 1: \quad \frac{d\Theta}{dx} = 0,$$

при этом концентрация связана с температурой соотношением

$$c(x) = [B - \Theta(x)]/B.$$

Для численного определения числа стационарных решений задачи (4), (5) использовался метод стрельбы. Уравнение (4) интегрировалось на отрезке $[0, 1]$ методом Рунге — Кутты; счет начинался с правого конца. Температура на выходе варьировалась в пределах $0 < \Theta(1) \leq B$. При расчете для сокращения времени счета точки бифуркации решения определялись по методу [10], этим методом можно найти только точки бифуркации, в которых производная $d\text{Da}/d\Theta(1) = 0$, и стационарное решение устойчиво (точка A на рис. 1), если же стационарное решение в точке бифуркации неустойчиво (точка B на рис. 1), то этот метод не пригоден.

В задачу (4), (5) входят пять безразмерных параметров Pe , B , Da , ε , k_2 . Результаты расчета показали, что в зависимости от конкретных значений этих параметров задача (4), (5) может иметь от одного до трех стационарных решений.

На рис. 1 приведены графики семейства кривых, определяющих связь температуры на выходе из реактора с числом Дамкеллера при фиксированном значении $k_2 = 3$, $\varepsilon = 0,05$, $B = 6$ и различных числах

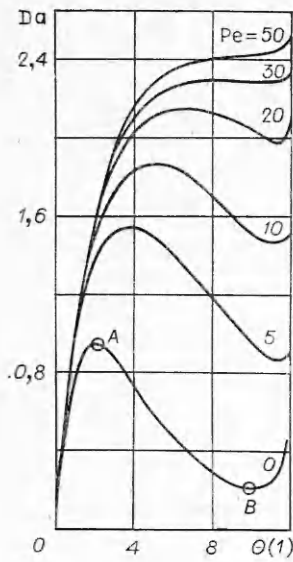


Рис. 1.

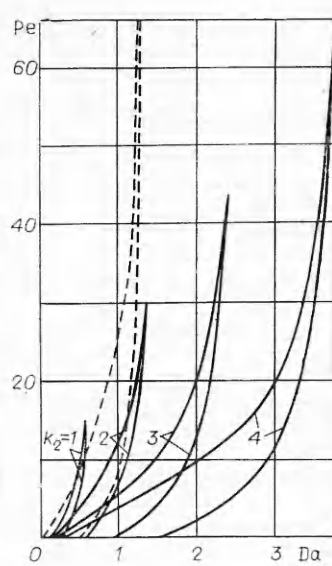


Рис. 2.

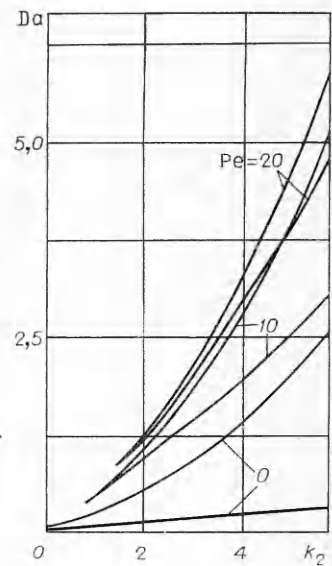


Рис. 3.

Пекле. Видно, что если $Pe = 0$, то при $0,22 < Da < 0,93$ каждому значению Da соответствует три значения $\Theta(1)$, т. е. существуют три решения задачи, при $Da < 0,22$ и $Da > 0,93$ — одно решение, при $Da = 0,22$ и $0,93$ — два. С ростом числа Пекле до $Pe \approx 4$ область неединственности расширяется, затем сужается и совсем исчезает при $Pe = 44$.

На рис. 2 представлена зависимость $Pe(Da)$ для различных значений k_2 при $B = 6$ и $\epsilon = 0,05$. В областях, ограниченных кривыми, существуют три стационарных режима, на самих кривых — два, вне — один. Отметим, что при расчетах не использовалось разложение экспоненты в уравнении (4) по Франк-Каменецкому. На рис. 2 штриховыми линиями показана зависимость Pe от Da при $k_2 = 2$, $B = 6$, $\epsilon = 0$ в случае, когда используется разложение Франк-Каменецкого. Видно, что

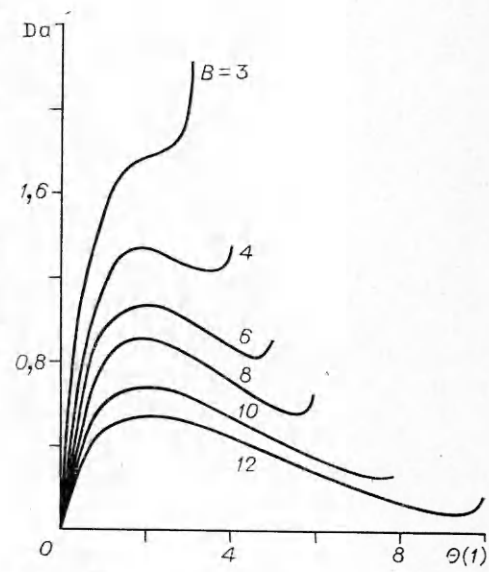
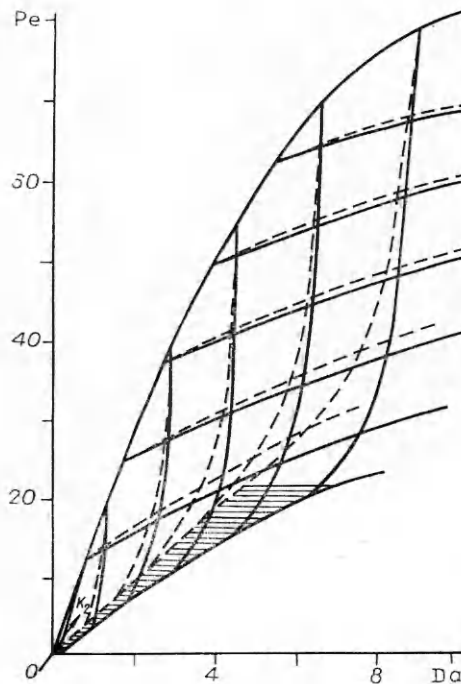


Рис. 5.

Рис. 4.

результаты существенно изменяются. Область неединственности смещается в сторону меньших чисел Дамкеллера, расширяется и резко вытягивается по оси Pe (до $Pe \geq 100$). Таким образом, можно заключить, что при исследовании числа стационарных режимов в неизотермическом реакторе использование разложения Франк-Каменецкого может приводить к значительным погрешностям.

На рис. 3 приведена зависимость $Da(k_2)$ для различных Pe при $B=6$ и $\epsilon=0,05$ ($Pe=0$ — случай идеального перемешивания). В областях, ограниченных кривыми, существуют три решения, на кривых — два, вне — одно. В частном случае $k_2=0$ результаты совпадают с полученными ранее в [2, 3].

Окончательные результаты по определению области неединственности при $B=6$ и $\epsilon=0,05$ представлены в трехмерной области положительных значений Pe , Da , k_2 на рис. 4. Для значений параметров Pe , Da , k_2 , лежащих внутри трехмерной фигуры, существуют три решения, для лежащих на граничных поверхностях — два, и лежащих вне ее — одно. В отличие от изотермического реактора, рассмотренного в [9], где уже при $Pe \geq 4$ наблюдалось единственное стационарное решение, в анализируемом неизотермическом случае даже при $Pe \approx 50, 60$ и т. д. наблюдаются три стационарных режима.

На рис. 5 показана зависимость числа Da от температуры на выходе из реактора $\Theta(1)$ для различных значений адиабатической температуры при $Pe=5$, $k_2=2$. Для больших B , т. е. для сильно экзотермических реакций или реакций с большой энергией активации, число Da , при котором наблюдается неединственность, уменьшается, а число Pe возрастает. Например, если $B=10$, неединственность наблюдается при $0,12 < Da < 0,55$, а если $B=4$, то $1,24 < Da < 1,33$. При $B=3$ решение всегда единственно.

Можно заметить, что для определенного набора параметров Pe , ϵ , k_2 всегда существует критическое $B=B^*$, такое, что для $B < B^*$ всегда гарантирована неединственность. Это видно из рис. 6, на котором представлена зависимость $Da(B)$ при $Pe=5$, $k_2=2$, $\epsilon=0,05$ для этого случая.

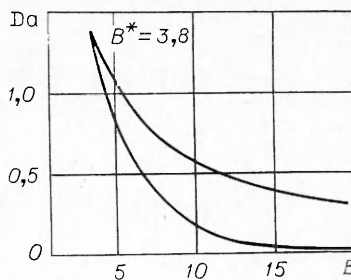


Рис. 6.

Поступила в редакцию 23/VI 1983

ЛИТЕРАТУРА

1. Ed. L. Lapidus, N. Amundson.— In: Chemical Reactor Theory. Prentice — Hall, Englewood Cliffs, 1977.
2. V. Hlavacek, H. Hofmann. Chem. Engng. Sci., 1970, 25, 173.
3. V. Hlavacek, H. Hofmann, M. Kubicek. Chem. Engng. Sci., 1974, 26, 1629.
4. M. Kubicek, V. Hlavacek, H. Hofmann. Chem. Engng. Sci., 1979, 34, 593.
5. R. F. Heinemann, A. B. Poore. Chem. Engng. Sci., 1982, 37, 128.
6. T. T. Tsotsis, A. E. Haderi, R. A. Schmitz. Chem. Engng. Sci., 1982, 37, 1235.
7. T. Matura, M. Kato. Chem. Engng. Sci., 1967, 22, 171.
8. D. D. Bruns, T. E. Bailey, O. Luss. Biotech. Bioengng, 1973, 15, 1131.
9. В. С. Берман, Ю. С. Рязанцев, В. М. Шевцова. ФГВ, 1983, 19, 1, 56.
10. M. Kubicek, V. Hlavacek. Chem. Engng. Sci., 1971, 26, 321.