

УДК 541.24:532.5

РАСЧЕТ ТЕЧЕНИЯ В ХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ ПО УТИЛИЗАЦИИ ХЛОРОРГАНИЧЕСКИХ ОТХОДОВ

В. Н. Ветлуцкий, В. Л. Ганимедов, М. И. Мучная, А. Н. Шворак

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН,
630090 Новосибирск

Представлена математическая модель газодинамического тракта химического реактора для хлоролiza углеводородного сырья. Течение в канале реактора описывается различными системами уравнений: алгебраической, обыкновенных дифференциальных, «узкого канала» и Навье — Стокса. На вход реактора подается смесь из 27 веществ, участвующих в 42 реакциях. Решения строятся с помощью различных численных методов. Результаты расчетов представлены графическими распределениями температуры и массовых концентраций по каналу реактора.

В настоящее время наряду с поиском безотходных технологий становится актуальной задача активной переработки как отходов функционирующих производств, так и уже накопленных. Данная работа направлена на решение проблемы ликвидации экологически вредных отходов хлорорганического производства. Их переработка в промышленных объемах возможна только в газовой фазе при высокой температуре (≈ 900 К). Особенно остро стоит проблема утилизации очень устойчивых веществ ароматического ряда.

Цель работы — создание математической модели газодинамического тракта функционирующего реактора по производству четыреххлористого углерода и исследование с ее помощью процессов в реакторе. Реактор представляет собой длинную толстостенную трубу, стенки которой нагреты омическим подогревателем до температуры 900–950 К (рис. 1). Внутреннюю область можно условно разбить на зоны смешения I и реакции II. В зоне смешения к входной смеси подмешивается горячий газ из зоны реакции, в результате чего смесь испаряется и прогревается до температуры начала реакции. Далее в зоне реакции происходит быстрое энерговыделение с последующим образованием CCl_4 .

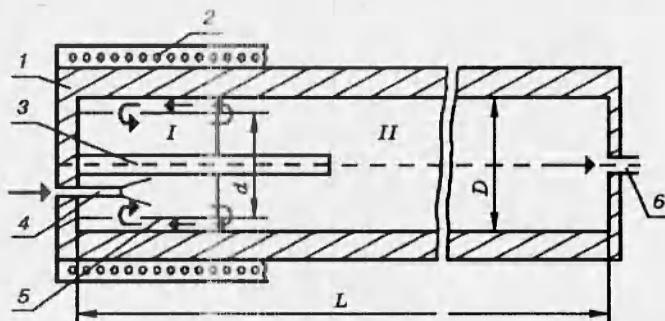


Рис. 1. Схема реактора:

I — зона смешения (эжектор); II — зона реакций; 1 — бронированная оболочка; 2 — омический подогреватель; 3 — калориметрическая штанга; 4 — подающая трубка; 5 — обечайка с окнами; 6 — выходная трубка.

Смесь на входе состоит из растворенных в CCl_4 перерабатываемых углеводородов и хлора в жидком состоянии. Смесь подается в реактор под давлением 150–180 атм при температуре 400 К. Газодинамический тракт реактора должен обеспечить распыление вводимого вещества, его испарение, прогрев газа до начала реакции и достаточное время пребывания в зоне высоких температур и давлений до завершения необходимых реакций. Течение в канале реактора при рабочих параметрах турбулентное.

Большое число задач газовой динамики с учетом химических реакций приведено в [1]; основная часть результатов представлена для течения компонентов воздуха, ракетных топлив и продуктов их сгорания. Однако для реагирующих смесей различных хлоруглеводородов со сложной кинетикой [2, 3] подобные результаты авторам настоящей работы неизвестны.

1. Камера смешения представляет собой двухконтурный кольцевой канал с окнами в области впрыска. Вдоль оси располагается измерительная штанга с датчиками температуры. Входная смесь подается через трубку, которая расположена нецентрально относительно оси реактора. Благодаря этому устройству, которое условно можно назвать эжектором, поступающая в жидком виде входная смесь смешивается с горячими продуктами реакции, испаряется и прогревается. При этом продукты реакции, двигаясь назад к началу эжектора вдоль внешнего контура, нагреваются дополнительно от горячей стенки. Таким образом осуществляется интенсификация нагрева смеси до начала основных экзотермических реакций, что в конечном счете позволяет уменьшить длину реактора.

Априори очевидно, что нецентральный впрыск уменьшает эффективность работы эжектора. Поэтому в расчетной модели эжектора принята схема центрального впрыска входной смеси.

Задача расчета эжектора рассматривается в одномерном приближении. Течение описывается на основе интегральных законов сохранения массы, импульса и энергии в алгебраической форме. Во всех областях течение осреднено по сечению по составу смеси, скорости и температуре. Эффекты переноса учитывались для турбулентного режима течения. Подробно постановка задачи и алгоритм ее решения изложены в [4].

Главный результат по расчету эжектора представлен на рис. 2. Здесь по оси абсцисс отложен диаметр внутреннего канала эжектора d , по оси ординат — температура на выходе из него T_d при двух значениях диаметра сопла подающей трубки d_0 . Для простоты расчет проведен только для четырех веществ (Cl_2 , $\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$, HCl и CCl_4), которые дают основной вклад в массовый и энергетический балансы. Входная смесь состояла из 86 % Cl_2 и 14 % $\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$. Во всех расчетах диаметр канала реактора $D = 0,228$ м, длина эжектора $l = 0,8$ м, давление $p = 1,5 \cdot 10^7$ Н/м², массовый расход $G = 4,12$ кг/с. Температура обогреваемой стенки $T_w = 873$ К, температура входной смеси $T_{mix} = 403$ К.

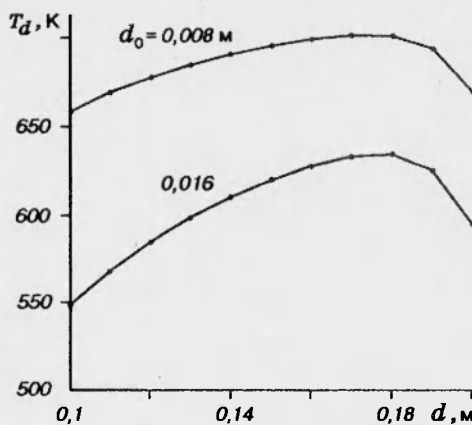


Рис. 2. Зависимость $T_d(d)$.

Зависимость $T_d(d)$ имеет четко выраженный экстремум. Его значение характеризует максимальную эффективность эжектора, которую можно достичь геометрической оптимизацией. Положительный эффект дает уве-

лишение скорости эжектирующего газа. Как видно из рис. 2, уменьшение d_0 в 2 раза, что соответствует увеличению скорости впрыска в 4 раза, привело к повышению температуры смеси более чем на 100 К.

2. Рассмотрим течение в реакторе после эжектора. Ось x направим вдоль оси трубы. Температура стенок T_w принимается постоянной. На вход подается смесь из N веществ с массовыми концентрациями

$$c_i = \rho_i / \rho = \frac{M_i n_i}{\sum_{i=1}^N M_i n_i} \quad \left(\sum_{i=1}^N c_i = 1, 0, \quad i = 1, 2, \dots, N \right),$$

где n_i — число частиц i -го вещества в единице объема; M_i — его молекулярная масса; ρ — плотность смеси.

Будем полагать, что при $x = x_0$ смесь однородна по сечению, имеет среднюю температуру T_0 и массовый расход G . В этом случае течение в реакторе с учетом происходящих в нем реакций при $x \geq x_0$ с хорошей точностью описывается в одномерном приближении, когда все параметры усреднены по сечению и зависят только от координаты x . Тогда уравнения неразрывности, движения, энергии, концентраций и состояния запишутся в следующем виде [5–7]:

$$\rho u F = G, \quad (1)$$

$$\rho u \frac{du}{dx} = -\frac{dp}{dx} - \epsilon_l \zeta \frac{\rho u^2}{2D}, \quad (2)$$

$$\rho u \frac{dh}{dx} = u \frac{dp}{dx} - \epsilon_l \frac{\alpha}{c_p} \frac{4}{D} (h - h_w), \quad (3)$$

$$\rho u \frac{dc_i}{dx} = M_i J_i \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (4)$$

$$p = \rho (R/M) T. \quad (5)$$

Здесь F — площадь сечения канала, u — скорость, p — давление. Индекс w относится к параметрам на стенке. Второе слагаемое в правой части уравнения (2) учитывает силы трения на стенке, а последний член в (3) — теплообмен между газом и стенкой реактора. Выражения для коэффициентов ζ и α взяты из работ [5] и [8]:

$$\zeta = 0,316 / \text{Re}^{0,25}, \quad \text{Nu}_f = (\alpha D) / \lambda = 0,023 \text{Re}^{0,8} \text{Pr}^{0,4},$$

где $\text{Re} = (\rho u D) / \mu$; $\text{Pr} = (\mu c_p) / \lambda$ — число Прандтля; μ , λ — коэффициенты вязкости и теплопроводности. Коэффициент $\epsilon_l = f(x/D, \text{Re})$ учитывает влияние начального участка трубы [8]. В уравнении (4) J_i — скорость образования i -го компонента, которая имеет вид [7]

$$J_i = \sum_{j=1}^m (b_{ij} - a_{ij}) k_j \prod_{n=1}^N (\rho(c_n/M_n))^{a_{nj}}, \quad (6)$$

где N — число компонентов; m — число реакций; a_{ij} , b_{ij} — стехиометрические коэффициенты; k_j — константа скорости j -й реакции; R — газовая постоянная; $M = \frac{1}{\sum_{i=1}^N c_i / M_i}$ — эффективная молекулярная масса смеси.

Энтальпия смеси газов выражается через энтальпии компонентов:

$$h = \sum_{i=1}^N \left(c_i \int_{\hat{c}}^T c_{p_i} dT + c_i h_i^0 + c_i h_i^{ev} \right) \approx \\ \approx \sum_{i=1}^N (c_i c_{p_i} T + c_i h_i^{\hat{c}} + c_i h_i^{ev}) = h_s + \sum_{i=1}^N (c_i h_i^0 + c_i h_i^{ev}). \quad (7)$$

Первое слагаемое в (7) — статическая энтальпия, второе — энтальпия образования веществ, третье — энтальпия фазового перехода. Из (7) следует

$$T = \frac{h - \sum_{i=1}^N (c_i h_i^0 + c_i h_i^{ev})}{\sum_{i=1}^N (c_i c_{p_i})}.$$

Вязкость веществ полагалась зависящей только от температуры по степенному закону

$$\frac{\mu}{\mu_{\infty}} = \left(\frac{T}{T_{\infty}} \right)^{0.76}.$$

В качестве μ_{∞} использовалась вязкость веществ при $T_{\infty} = 288$ К. Удельная теплоемкость считалась постоянной и бралась при $T = 500$ К, $\text{Pr} = 0,7$, энтальпия фазового перехода h^{ev} при $T = 403$ К и $p = 150$ атм принималась для хлора равной $1,12 \cdot 10^5$ Дж/кг, для углеводородного сырья — $2,93 \cdot 10^5$ Дж/кг.

Для решения системы $N + 2$ дифференциальных уравнений (2)–(4) необходимо задать при $x = x_0$ значения

$$u(x_0), \quad h(x_0) \quad \text{и} \quad c_i(x_0) \quad (i = 1, \dots, N). \quad (8)$$

Система (1)–(5) справедлива только для газа и фазовый переход не описывает. Но удельная теплота испарения составляет значительную долю в энергетическом балансе реакций хлоролиза, и ее учет необходим. В разработанной модели эта проблема решена следующим образом. Положим, что фазовый переход осуществлен, и его удельная теплота Q_{ev} известна. Пусть на шаге dx приращение статической энтальпии за счет химических реакций и теплоотдачи от стенки составляет

$$\Delta h_s = \sum_{i=1}^N c_i c_{p_i} \Delta T.$$

Введем параметр Θ ($0 \leq \Theta \leq 1$) и разобьем на две части приращение

$$\Delta h_s = \Delta h_{s1} + \Delta h_{s2},$$

$$\text{где} \quad \Delta h_{s1} = (1 - \Theta) \sum_{i=1}^N c_i c_{p_i} \Delta T, \quad \Delta h_{s2} = \Theta \sum_{i=1}^N c_i c_{p_i} \Delta T.$$

Часть Δh_{s2} объединим с третьим членом (7), учитывающим фазовый переход, а в статической энтальпии оставим только часть Δh_{s1} . Таким образом, на следующем шаге приращение температуры газа из-за искусственной «перекачки» части энтальпии в член фазового перехода будет меньше и составит $\Delta T_1 = (1 - \Theta) \Delta T$. Процедура перераспределения энтальпии из статического члена в фазовый осуществлялась до тех пор, пока ее количество не совпадало с полной энтальпией испарения. Практика расчетов показала, что тип функции $\Theta(T)$ должен соответствовать типу функции k_i , описывающей скорость экзотермической реакции, дающей главный вклад

в энергетический баланс. Для приведенной в работе [4] схемы химических реакций выбрана функция

$$\Theta = A \exp(B/T).$$

Параметры A и B определялись из условия: при $T = T_0$ $\Theta = \Theta_0$, а при $T = T_k$ $\Theta = \Theta_k$. Все расчеты выполнены при $T_0 = 680$ К, $\Theta_0 = 0,01$, $T_k = 850$ К, $\Theta_k = 0,99$.

Таким образом, для системы уравнений (2)–(4) с начальными данными (8) поставлена задача Коши. Переносные свойства среды учитываются через источниковые члены в (2) и (3), прогрев смеси эжектором — через начальные данные (8), фазовый переход — через искусственное перераспределение энтальпии между членами в (7).

Схема химических реакций приведена в [4]. Рассматривается 27 веществ, которые участвуют в 42 реакциях. Эта схема разработана в ИХКиГ СО РАН, ее первый вариант изложен в работе [3]. Характеристики веществ сведены в таблицу.

Система (2)–(4) с начальными данными (8) решалась численно L -устойчивым (m, k) -методом решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений, который имеет второй порядок точности [9]. Матрица Якоби из соображений точности определена аналитически. Характерное время расчета — 1 ч на РС/АТ-486.

В результате расчета в каждом сечении определялись: давление, плотность, скорость, температура газа и концентрации всех реагирующих веществ.

В качестве интегральных параметров определялись время пребывания в реакторе и количество тепла, переданное от стенки в поток.

На рис. 3 при $G = 4,12$ кг/с приведено распределение по длине реактора концентрации гексахлорбензола, который является одним из трудноперерабатываемых веществ. Как видно из графика, значение $c_{C_6Cl_6} = 0,05$ для реактора длиной 18 м — предельное для данного расхода в смысле полноты переработки. Для переработки более высоких концентраций ароматических веществ

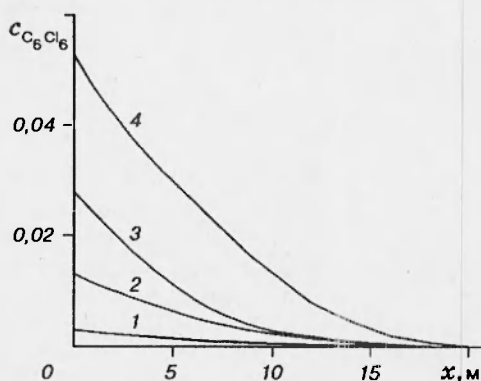


Рис. 3. Зависимость $c_{C_6Cl_6}(x)$. Во входной смеси $c_{C_6Cl_6}$: 1 — 0,003, 2 — 0,013, 3 — 0,028, 4 — 0,053.

необходимо уменьшать массовый расход, что приведет к увеличению времени пребывания смеси в реакторе.

3. Модель следующего уровня строится на основе осесимметричных уравнений «узкого канала», дополненных уравнениями для концентраций компонентов [4, 7]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(r\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(r\rho v)}{\partial r} &= 0, & p &= \rho(R/M)T, \\ \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial r} &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r\mu \frac{\partial u}{\partial r} \right), & \frac{\partial p}{\partial r} &= 0, \\ \rho u \frac{\partial h}{\partial x} + \rho v \frac{\partial h}{\partial r} &= u \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\eta) + \mu \left(\frac{\partial u}{\partial r} \right)^2, \\ \rho u \frac{\partial c_i}{\partial x} + \rho v \frac{\partial c_i}{\partial r} &= -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\rho c_i V_i) + M_i J_i, & i &= 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (9)$$

Вещество	M	$c_p, \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}}$	$h_0 \cdot 10^{-5}, \frac{\text{Дж}}{\text{кг}}$
Cl_2	70,9	522,3	0
Cl	35,45	640,3	34,21
HCl	36,45	803,8	-25,36
CCl_4	153,8	654,6	-6,22
C_2Cl_4	165,8	573,6	-0,858
C_4Cl_8	331,6	583,1	-5,94
C_4Cl_6	260,7	632,9	1,726
C_6Cl_{12}	497,4	609,2	-7,579
C_6Cl_{10}	426,5	639,7	-5,182
C_6Cl_{14}	568,3	600,0	-9,59
* C_6Cl_{10}	426,6	590,8	-8,88
C_6Cl_8	355,6	610,2	-5,877
C_6Cl_6	284,7	617,5	-1,189
* C_6Cl_8	355,6	658,0	-2,053
* C_6Cl_{12}	497,4	566,9	-11,10
C_8Cl_{12}	521,4	615,7	-6,828
C_4Cl_{10}	402,5	591,3	-8,870
C_2Cl_6	236,7	714,0	-5,994
C_2Cl_5	201,3	695,2	1,928
C_2HCl_5	202,3	713,5	-7,036
C_2HCl_4	166,8	772,8	3,801
$\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_4$	167,8	768,2	-8,97
$\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_3$	132,4	858,9	4,79
$\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3$	133,4	862,4	-11,29
$\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_2$	97,9	1033,0	8,177
$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$	98,9	1022,0	-13,53
C_2Cl_8	319,6	707,0	-8,20

* Изомер.

Газодинамический тракт моделируется круглым каналом, в начальном участке которого на оси расположена измерительная штанга круглого сечения. В постановке задачи предполагается, что на входе все компоненты находятся в газообразном состоянии, фазовый переход отсутствует. В (9) r — поперечная координата; v — соответствующая ей компонента скорости; q — тепловой поток; V_i — скорость диффузии i -го вещества. Остальные обозначения те же, что и для системы (1)–(5). Тепловой поток образуется за счет теплопроводности и диффузионного переноса энтальпии компонентов:

$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial r} + \rho \sum_{i=1}^N h_i c_i V_i.$$

Диффузионные свойства смеси описываются в форме закона Фика

$$c_i V_i = -D_i \frac{\partial c_i}{\partial r} \quad (i = 1, 2, \dots, N),$$

где D_i — «эффективные» коэффициенты диффузии [10], определяемые с помощью соотношений Стефана — Максвелла. Для расчета турбулентной вязкости привлекалась алгебраическая двуслойная модель. В коэффициенты теплопроводности и диффузии также введены поправки на турбулентность.

Система уравнений приводится к безразмерному виду. Линейные ве-

личины обезразмериваются на радиус канала r_w , остальные переменные обезразмериваются по их значениям на входе. Для системы уравнений ставятся граничные и начальные условия.

Граничные условия на стенке канала

$$r = 1: \quad u(x, 1) = v(x, 1) = 0, \quad T(x, 1) = T_w/T_0, \quad \frac{\partial c_i}{\partial r}(x, 1) = 0;$$

на поверхности штанги

$$r = rr: \quad u(x, rr) = v(x, rr) = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r}(x, rr) = \frac{\partial c_i}{\partial r}(x, rr) = 0;$$

на оси течения (ниже по течению от штанги)

$$r = 0: \quad v(x, 0) = \frac{\partial u}{\partial r}(x, 0) = \frac{\partial T}{\partial r}(x, 0) = \frac{\partial c_i}{\partial r}(x, 0) = 0.$$

Начальные условия на входе в канал

$$x = 0: \quad u(0, 1) = u(0, rr) = 0, \quad u(0, 1 - \delta \geq r \geq rr + \delta) = 1, \\ T(0, 1) = T_w/T_0, \quad T(0, 1 - \delta \geq r \geq rr) = 1, \\ p(0, r) = 1, \quad c_i(0, r) = c_{i0}, \quad v(0, r) = 0.$$

Здесь rr — радиус штанги; δ — расстояние от стенки и штанги, на котором начальные профили скорости и температуры меняются линейно.

Метод решения, а также его конечно-разностная реализация для течения нереагирующего газа описаны в работе [11]. В данной задаче разница в порядках скоростей газодинамических и химических процессов вызвала необходимость модификации метода. Она заключается в том, что после расчета на каждом шаге по x газодинамических величин этот шаг делится на 100, и на каждом таком шаге решаются уравнения для концентраций.

Приведем результаты для следующего варианта: $L = 18$ м, $D = 0,228$ м, длина внутренней штанги 4,5 м, диаметр штанги 0,042 м, $G = 4,12$ кг/с, $T_0 = 570$ К, $T_w = 890$ К, $p_0 = 150$ атм. Состав смеси: Cl_2 — 78 %, CCl_4 — 11 %, C_4Cl_8 — 1,9 %, $\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3$ — 5,5 %, $\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$ — 1,1 %, C_2Cl_4 — 0,6 %, C_6Cl_{12} — 0,11 %, C_6Cl_6 — 0,19 %, C_4Cl_{10} — 0,9 %, C_2Cl_6 — 0,67 %, C_4Cl_6 , C_6Cl_{10} , C_6Cl_{14} — по 0,01 %, концентрации остальных 14 компонентов в начальном составе равны нулю.

Расчет данного варианта потребовал 25 ч на РС/АТ-486. Для сравнения заметим, что расчет этого варианта с замороженными химическими

реакциями занял 2 мин. В результате получены профили по сечению канала продольной и поперечной компонент скорости, температуры, плотности, массовых концентраций.

На рис. 4 приведены профили температуры в безразмерном виде в нескольких сечениях канала, по оси ординат отложено расстояние от оси канала ($r = 0$) до стенки ($r = 1$). Профили имеют сложный вид, что объясняется суперпозицией процессов, идущих с разной скоростью. Рассмотрим основные процессы, определяющие картину течения.

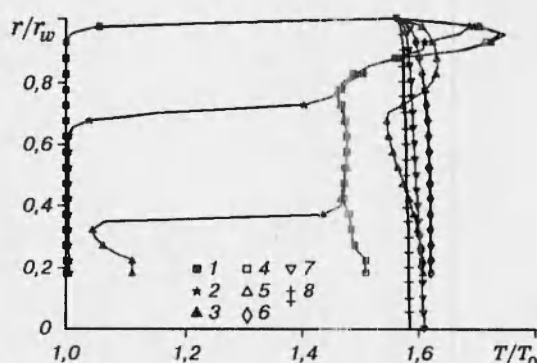


Рис. 4. Профили температуры при x , см: 1 — 1, 2 — 3, 3 — 11, 4 — 13, 5 — 100, 6 — 250, 7 — 900, 8 — 1800.

На первом этапе преобладают реакции $C_2H_3Cl_3$ и $C_2H_4Cl_2$ с молекулярным хлором, продуктами которых являются HCl и C_2Cl_6 . Реакции идут с выделением тепла и быстрее всего возле нагретой стенки. Выделяемое при этом тепло распространяется за счет диффузии и теплопроводности в глубь канала, ускоряя там реакции. Интересно, что наличие на оси канала измерительной штанги тоже ускоряет протекание реакций. Поток на ней тормозится, и тепло, которое выделяется при очень медленно идущих здесь реакциях, не сносится с основным потоком, а накапливается, поднимая температуру пограничного слоя, что ускоряет реакции. Распад $C_2H_3Cl_3$ и $C_2H_4Cl_2$ заканчивается у стенки при $x = 3$ см, а при $x > 12$ см — по всему сечению канала.

На этот процесс накладываются реакции распада C_2Cl_6 . Сначала содержание его в смеси возрастает, а затем он полностью распадается с образованием CCl_4 и выделением тепла. Быстрее всего реакции протекают возле стенки канала. Концентрация C_2Cl_6 становится нулевой у стенки при $x = 11$ см, у штанги — при $x \simeq 1,4$ м, в основном потоке — при $x = 2,5$ м.

На рис. 4 видно, что при $x > 2,5$ м, когда заканчиваются основные реакции, профиль температуры выравнивается по сечению. Далее вниз по течению температура в канале медленно падает, приближаясь к температуре стенки. Сравнение распределения вдоль канала среднего по сечению значения температуры с температурой, полученной для этого варианта с помощью одномерной модели без учета фазового перехода, показывает их качественное совпадение. Различие этих величин на участке, где закончились основные реакции, составляет 2 %.

4. Изучение структуры течения во входном участке реактора проводилось на основе численного решения нестационарной системы уравнений Навье — Стокса. Эта система для многокомпонентной смеси газов приведена в [4]. Была принята схема течения в зоне смешения, при которой нецентральный впрыск входной смеси заменялся на кольцевой вдув в торце реактора, что позволило свести задачу к осесимметричной.

Нестационарность задачи определялась нестационарным вдувом. До времени выхода на стационарный режим t_{st} расход газа рос, как линейная функция времени. Время выхода на стационарный режим вдува подбиралось опытным путем в зависимости от числа Re и характера задания граничных условий. В начальный момент времени задавалось состояние полного покоя с нулевым продольным градиентом давления.

Для численного решения системы уравнений Навье — Стокса использовалась неявная разностная схема переменных направлений, предложенная в [12]. Схема имеет второй порядок аппроксимации по пространственным переменным и допускает экономичный метод решения (скалярные прогонки). Наиболее полный алгоритм решения задачи представлен в [13].

Опыт работы с моделью «узкого канала» показал, что на расчеты течений с химическими реакциями тратится большое количество машинного времени. Поэтому при расчетах по модели Навье — Стокса решено пока ограничиться приближением совершенного газа и провести анализ результатов в рамках этого ограничения.

Расчеты выполнены для воздуха при $Re = 100$ на равномерной сетке с числом узлов 41×31 . Исследовалась протяженность зоны смешения в зависимости от расположения щели в торце реактора. Положение щели определялось заданием внутреннего радиуса кольца r_1 , образующего щель. При параметрических расчетах внешний радиус кольца r_2 вычислялся из условия равенства расхода газа при любом расположении щели. Результаты расчетов приведены на рис. 5. На графике представлено распределение относительных значений максимума продольной скорости по

длине входного участка реактора. По падению относительного максимума продольной скорости можно оценить протяженность зоны смешения.

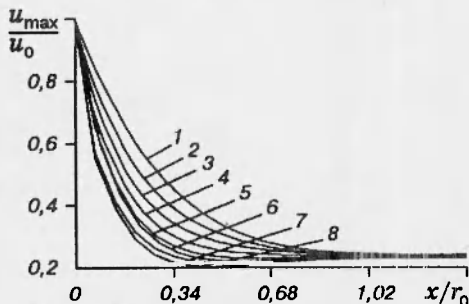


Рис. 5. Результаты расчетов (r_0 — радиус канала реактора). 1 — $r_1/r_0 = 0,18$, $r_2/r_0 = 0,51$; 2 — $r_1/r_0 = 0,27$, $r_2/r_0 = 0,55$; 3 — $r_1/r_0 = 0,36$, $r_2/r_0 = 0,60$; 4 — $r_1/r_0 = 0,45$, $r_2/r_0 = 0,66$; 5 — $r_1/r_0 = 0,55$, $r_2/r_0 = 0,72$; 6 — $r_1/r_0 = 0,64$, $r_2/r_0 = 0,79$; 7 — $r_1/r_0 = 0,73$, $r_2/r_0 = 0,87$; 8 — $r_1/r_0 = 0,82$, $r_2/r_0 = 0,95$.

ной смеси. Проведенные параметрические расчеты по одномерной модели на примере гексахлорбензола показали возможность полной переработки веществ ароматического ряда в реакторе. Расчет течения в зоне реакций с помощью уравнений узкого канала дает более подробную картину течения и хорошее совпадение с одномерной моделью осредненных параметров. Для серийных параметрических расчетов следует использовать одномерную модель, корректируя ее с помощью разовых двумерных расчетов. Анализ полученных результатов приводит к выводу, что в стационарном режиме греть стенку реактора нужно только в районе камеры смешения, а щель для вдува входной смеси должна располагаться в середине кольцевого канала.

Созданная многоуровневая модель газодинамического тракта реактора дает возможность с помощью ЭВМ оптимизировать составы сырья и найти наиболее экономичные режимы переработки хлорорганических отходов.

Полочка на рис. 5 соответствует стабилизации положения и значения максимума продольной компоненты скорости при исчезающе малых по абсолютной величине значениях поперечной компоненты скорости, что свидетельствует о полном перемешивании вдуваемой струи с окружающим газом.

5. Комплексный подход к решению поставленной задачи помог исследовать различные ее аспекты и получить результаты, не достижимые в рамках одной модели. Выполненные с помощью алгебраической модели расчеты позволяют оптимизировать функцию камеры смешения по прогреву вход-

ЛИТЕРАТУРА

1. Пирумов У. Г., Росляков Г. С. Течение газа в соплах. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1978.
2. Трегер Ю. А., Занавескин Л. Н., Карташов Л. М. и др. Пуск и освоение промышленного производства четыреххлористого углерода деструктивным хлорированием хлоруглеводородов // Хим. пром-сть. 1989. № 9. С. 643-649.
3. Бабушок В. И., Марьин Д. В., Намятов И. Г. и др. Динамика выделения тепла при деструктивном хлорировании хлоруглеводородов // Хим. пром-сть. 1994. № 2. С. 78-82.
4. Ветлуцкий В. Н., Ганимедов В. Л., Мучная М. И., Шворак А. Н. Моделирование процессов в химическом реакторе для хлоролиза углеводородов. Новосибирск, 1994. (Препр. / Рос. акад. наук. Сиб. отд-ние. Ин-т теор. и прикл. механики; № 7).
5. Абрамович Г. Н. Прикладная газовая динамика. М.: Наука, 1969.
6. Назарчук М. М. Течение газа в каналах при наличии теплообмена. Киев: АН УССР, 1963.
7. Неравновесные физико-химические процессы в аэродинамике / Под ред. Г. И. Майкапара. М.: Машиностроение, 1972.
8. Михеев М. А. Основы теплопередачи. М.; Л.: Госэнергоиздат, 1949.

9. Новиков Е. А., Шитов Ю. А. Алгоритм интегрирования жестких систем на основе (m, k) -метода второго порядка точности с численным вычислением матрицы Якоби. Красноярск, 1987. (Препр. /АН СССР. Сиб. отд-ние. ВЦ; № 20).
10. Тирский Г. А. Вычисление эффективных коэффициентов диффузии в ламинарном диссоциированном многокомпонентном пограничном слое // Прикл. математика и механика. 1969. Т. 33, № 1. С. 180–192.
11. Ветлуцкий В. Н., Мучная М. И. Расчет вязкого течения в гиперзвуковом сопле // Изв. АН СССР. МЖГ. 1977. № 4. С. 29–35.
12. Полежаев В. И. Численное решение системы двумерных нестационарных уравнений Навье — Стокса для сжимаемого газа в замкнутой области // Изв. АН СССР. МЖГ. 1967. № 2. С. 103–111.
13. Ветлуцкий В. Н., Шворак А. Н. Расчет щелевого вдува в торце кольцевого канала. Новосибирск, 1994. (Препр. / Рос. акад. наук. Сиб. отд-ние. Ин-т теор. и прикл. механики; № 4).

*Поступила в редакцию 7/X 1994 г.,
в окончательном варианте — 26/XII 1994 г.*
