

文章编号: 1004-0609(2004)11-1918-08

固定床中对流扩散与反应耦合问题的一个解析解^①

徐曾和¹, 翟玉春², 纪智玲²

(1. 东北大学 资源与土木工程学院, 沈阳 110004; 2. 东北大学 材料与冶金工程学院, 沈阳 110004)

摘 要: 考虑到冶金固定床是颗粒堆积的松散多孔介质, 首先将单一颗粒的动力学方程推广到多颗粒的微元体上, 导出了化学反应项的具体形式, 建立了冶金固定床一维对流、反应、扩散方程, 然后求出其解析解; 通过实例计算分析主气流中反应气体的浓度分布。结果表明: 颗粒大小和孔隙率对反应进程有很大的影响, 其影响可以用 Thiele 数和 Peclet 数定量衡量; 微元体的反应类型不等于反应器的反应类型; 化学反应速率对反应气体浓度的影响超过对流速度, 而扩散的影响最小; 微元体的综合反应速率、对流速度以及反应器的长度本身是影响反应器反应类型的重要因素。

关键词: 颗粒动力学; 微元体动力学; 化学反应; 对流; 扩散; 解析解

中图分类号: TF 01

文献标识码: A

An analytical solution for coupled convection-diffusion and chemical reaction in fixed beds

XU Zeng-he¹, ZHAI Yu-chun², JI Zhi-ling²

(1. School of Resource and Civil Engineering, Northeastern University, Shenyang 110004, China;

2. School of Material and Metallurgy, Northeastern University, Shenyang 110004, China)

Abstract: In view of the fact that fixed bed is porous media of granule aggregation, the dynamics of a single particle is extended to the dynamics of representative element volume including multiple particles, so that the more exact chemical reaction term can be deduced. Then one-dimensional model for instable convection, chemical reaction and diffusion in fixed bed is proposed and solved analytically. Computation cases show that the scale of pellet and the porosity of bed have great impact on the reaction process taking place in reactor, which can be measured by Thiele module and Peclet module, the reaction behavior of REV is not the same as that of reactor. For the gas concentration, chemical reaction has greater impact than convection has, because Thiele module is proportional positively to L^2/D and Peclet module is to L/D , and diffusion has the least impact. The overall rate of REV, length of reactor itself and convection all contribute remarkably to the performance of reactor.

Key words: dynamics of single particle; dynamics of representative element volume; chemical reaction; convection and diffusion; analytical solution

气固反应是冶金工业中的主要反应类型, 固定床中的固相物质是人工制备的, 因此固定床可简化为均匀颗粒堆积而成的松散多孔介质。通常关于颗粒动力学的研究是在主气流中反应气体的浓度已知的情况下进行的。但在固定床中, 反应气体的浓度

是待定的, 且气体浓度也受到反应的影响。因此在反应器中化学反应与气体的传质过程是耦合的。

一般来说对流、扩散和反应对反应器中的气体浓度分布都有影响。许多文献给出了传质微分方程的通用形式^[1-4], 但具体的研究极少。Loureiro 等^[5]

① 基金项目: 国家自然科学基金重点资助项目(50136020); 教育部重点资助项目(01056)

收稿日期: 2003-11-04; 修订日期: 2004-08-30

作者简介: 徐曾和(1953-), 男, 教授, 博士。

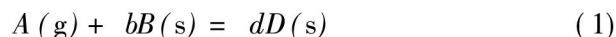
通讯作者: 徐曾和, 教授; 电话: 024-23841546; E-mail: xuzenghe@yahoo.com.cn

研究了固定床中浓度波的传播, 其控制方程是略去了扩散项的单波方程。Douglas 等^[6]利用单波方程研究了气体吸附以及对流对固定床中浓度波传播的影响。Loureiro 等^[7]还研究了求解单波方程的两种数值方法。与此同时, Ferreira 等^[8]研究了不存在对流作用的反应扩散方程。Winkelman 等^[9]用反应扩散方程研究了稳定条件下吸附和一级化学反应同时发生的问题。Whitaker 等^[10, 11]用反应扩散方程研究无对流时固定床中的气体运动。冶金中关于固定床等温反应的研究大多不考虑扩散^[12-14]。因此同时考虑对流、反应、扩散研究固定床式反应器中反应的工作极少见。鞭岩利用对流反应扩散方程研究了填料床中的反应转化, 但只考虑了稳定问题^[15]。

为了研究对流、扩散与反应的耦合作用, 首先要给出化学反应项的准确形式。冶金动力学对单颗粒的综合反应速率已作了详尽的研究。但颗粒不能全面反映床层的性质, 如孔隙率、渗透性等。而这些性质对反应器中发生的反应、对流、扩散有很大的影响。如果用足够多的颗粒的集合体取代单一颗粒作为反应器的表征性体积单元, 即微元体, 可以克服上述困难。这是因为在微元体上可以定义孔隙率、渗透性、对流速度、气体浓度等参数和变量。但这首先需要将单颗粒动力学推广到微元体上。在颗粒为等径圆球和密集堆积的条件下, 本文首先将颗粒的综合动力学推广到微元体上, 然后建立对流、反应、扩散模型, 求出了解析解; 并进行了实例计算与分析。结果表明: 微元体的反应类型不等于反应器的反应类型; 反应器自身特性和外部因素对反应器的反应类型都有重要影响, 并对这些影响作了详细的分析。

1 微元体的反应动力特性

考虑等温条件下无孔隙颗粒的气固反应, 反应前后颗粒大小不变, 如式(1)和图 1 所示



式中 g 表示气体, s 表示固体。将单一颗粒综合速率方程推广到微元体, 首先要给出微元体内孔隙内表面积的大小。按晶体学^[16]的研究, 等径圆球的密集堆积只有三种方式, 如图 2 所示。并且在密堆积条件下的孔隙率和致密度是常数, 与球的大小无关。因此可取一个胞体研究孔隙率、固体致密度和孔隙内表面积, 其结果与取一个微元体相同。

由图 2 可知, 对于体心立方堆积, 一个胞体中有两个颗粒, 因此其致密度为 $n_s = \sqrt{3}\pi/8 \approx 0.68$, 孔隙率 $n = 1 - n_s = 0.32$ 。对于面心立方堆积, 致密度 $n_s = \sqrt{2}\pi/6 \approx 0.74$, 孔隙率 $n = 1 - n_s = 0.26$ 。对于密排立方堆积, 致密度为 $n_s = \sqrt{2}\pi/6 \approx 0.74$, 孔隙率 $n = 1 - n_s = 0.26$ 。同样可以取一个胞体研究颗粒表面积和孔隙内表面积。例如, 体心立方堆积, 一个胞体中有两个颗粒, 因此颗粒表面积为 $f_b = 2 \times 4\pi r_s^2$, 胞体的边长 $a_b = 4r_s/\sqrt{3}$ 。这样颗粒表

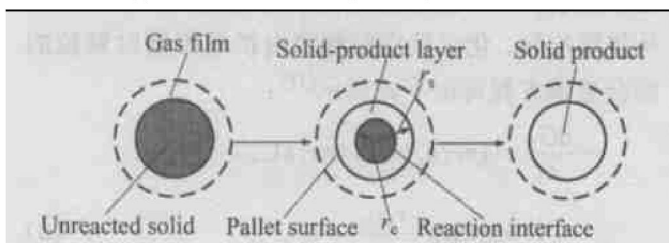


图 1 形成固相产物的气固相反应过程(缩核模型)

Fig. 1 Gas-solid reaction process
(Shrinking core model)

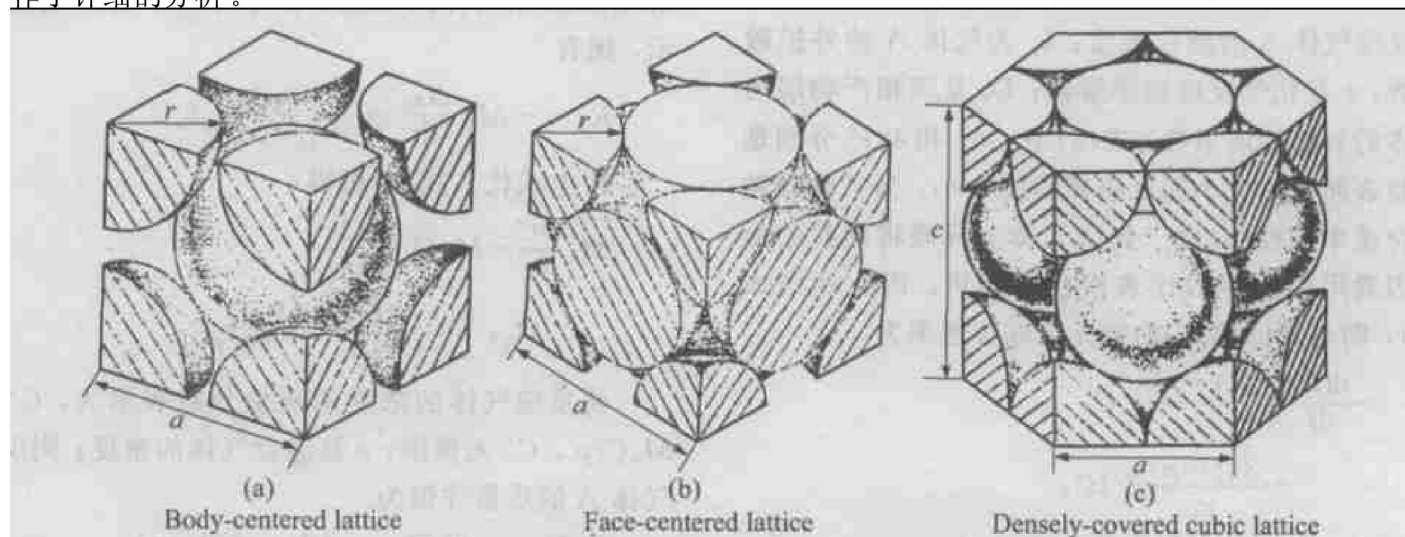


图 2 等径圆球密集堆积

Fig. 2 Idealized aggregation of pellets with uniform radius

面积与胞体体积之比就是比表面积

$$S_b = \frac{2 \times 4\pi r_s^2}{(4/\sqrt{3} r_s)} = \frac{3(1-n)}{r_s} \quad (2)$$

式中 n 是孔隙率。按相同的方法可以导出, 面心立方堆积和密排六方堆积的孔隙比表面积也可以用式(2)表示, 只要注意对不同的堆积方式孔隙率是不同的。由于 $1-n$ 是固相物质的致密度, 因此上式表明单位多孔介质内的孔隙内表面积与固相物质致密度成正比, 与颗粒半径成反比。这是易于理解的。式(2)与多孔介质体积的大小无关。这意味着与微元体内所包含的颗粒多少无关。也与微元体的形状无关。按照连续介质的观点, 合理的表征性体积单元取决于颗粒和所研究问题的相对尺度, 既没有绝对的大小也没有固定形状。因此式(2)是孔隙比表面的合理表达式。对非等径圆球、非密集堆积和随机堆积, 文献[17]利用充填机理(filling mechanism)和共据机理(occupation mechanism), 研究了颗粒堆积体的孔隙率和粒径分布的关系, 不仅可以给出定性关系, 还可以给出定量描述。在文献[17]的基础上, 可以研究更复杂堆积条件下单位体积多孔介质内颗粒的比表面积, 这将另文叙述。

在冶金动力学中颗粒的综合速率常以反应气体的浓度表示, 一些典型的颗粒综合速率方程, 比如外扩散控制、化学反应控制和内扩散控制时颗粒的综合速率方程可由下式所示^[17]:

$$\begin{aligned} -\frac{dG_A}{dt} &= 4\pi r_s^2 k_g C_A = 4\pi r_c^2 k C_A \\ &= 4\pi D_e \frac{r_s r_c}{r_s - r_c} \end{aligned} \quad (3)$$

式(3)的含义是单一颗粒的在单位时间因化学反应而消耗的反应气体的量。式中 G_A 为反应气体 A 的摩尔数; r_s 为颗粒半径; r_c 是未反应核的半径; C_A 为反应气体 A 的摩尔浓度; k_g 为气体 A 的外扩散系数; k 是化学反应速率常数; D_e 是固相产物层内气体的有效传质系数。式(3)中 $4\pi r_s^2$ 和 $4\pi r_c^2$ 分别是颗粒表面积的大小和反应界面的大小。为了将颗粒综合速率方程(3)推广到微元体上只需将颗粒的面积因素用微元体的比表面代替即可。因此利用式(2), 则与式(3)对应的微元体综合速率为

$$\begin{aligned} -\frac{dG_A}{dt} &= \frac{3(1-n)}{r_s} k_g C_A \\ &= \frac{3(1-n)}{r_s} Z^2 k C_A \\ &= \frac{3(1-n)}{r_s} D_e \frac{Z}{1-Z} C_A \end{aligned} \quad (4)$$

式(4)是单位体积多孔介质, 在单位时间内因化学

反应所消耗的反应气体的量。当综合速率由化学反应与外扩散联合控制时, 颗粒的综合反应速率以及在微元体上的推广为

$$\begin{aligned} -\frac{dG_A}{dt} &= \frac{4\pi r_c^2}{1/k + 1/k_g} \\ &= \frac{3(1-n)}{r_s} \frac{Z^2}{1/k + 1/k_g} \end{aligned} \quad (5)$$

式中 $Z = r_c/r_s$, 是未反应核半径和颗粒半径之比, 也可以用来表征固相反应物的转化率。由此可见利用微元体比表面的表达式(2)可以使我们摆脱从颗粒的综合速率方程出发研究反应器中的反应和传递过程, 同时又可利用冶金动力学关于颗粒反应动力学的现有成果。本文作者研究外扩散控制的情况时, 微元体的综合速率方程由式(4)表示。

2 冶金固定床的一维对流-反应-扩散方程及其解答

研究一维填充床。若微元体的孔隙率为 n , 反应是一级的, 对流速度 v 是常量。考虑到反应气体是被消耗的, 因此反应气体 A 的质量守恒方程为

$$M_A \frac{\partial C}{\partial t} = M_A D_e \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - M_A v \frac{\partial C}{\partial x} - R_A \quad (6)$$

式中 D_e 是气体在多孔介质孔隙通道中的有效扩散系数, 即 $D_e = D_A n / \tau$, D_A 是扩散系数, τ 是曲折因子; v 是混合气体在多孔介质孔隙通道中流动的真实速度, 与单位面积多孔介质上的平均速度的关系为 $vn = u$; R_A 是单位时间内在单位体积微元体上因反应而消耗的反应气体的质量; M_A 是反应气体 A 的摩尔质量。式(4)的第一式即是外扩散控制条件下, 单位时间内在单位体积微元体上因反应而消耗的反应气体的质量, 以摩尔计。若以质量表示, 则有

$$R_A = -M_A \frac{dG_A}{dt} = \frac{3(1-n)}{r_s} M_A k_g C \quad (7)$$

将上式代入式(6)可得

$$\begin{aligned} M_A \frac{\partial C}{\partial t} &= M_A D_e \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \\ &M_A v \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{3(1-n)}{r_s} M_A k_g C \end{aligned} \quad (8)$$

将反应气体的浓度用质量分数表示为, $C^* = M_A C / \rho$, C^* 无量纲; ρ 是混合气体的密度; 则反应气体 A 的质量守恒为

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} = D_e \frac{\partial^2 C^*}{\partial x^2} - v \frac{\partial C^*}{\partial x} - \frac{3(1-n)}{nr_s} k_g C^* \quad (9)$$

式中 x 是空间坐标, t 是时间。 D_e 是床层中反应

气体的有效扩散系数。若反应器长度用 L 表示, 则可引入如下无量纲自变量 $\bar{x} = x/L$, $\bar{t} = Dt/L^2$ 。将其代入式(9)可得

$$\frac{\partial C^*}{\partial \bar{t}} = D_e \frac{\partial^2 C^*}{\partial \bar{x}^2} - \bar{v} \frac{\partial C^*}{\partial \bar{x}} - \bar{\mu} C^* \quad (10)$$

式中 $\bar{v} = vL/D$ 是反应器的 Peclet 数, 反映了对流速度与扩散速度的相对大小; 而反应器的 Thiele 数为 $\bar{\mu} = 3(1-n)L^2 k_g / (nr_s D_e)$ 反映了化学反应速率与扩散速度的相对大小。由化学反应计量关系可以导出以固相反应物 B 表示的综合速率和 B 的转化率

$$-\frac{dG_A}{dt} = -\frac{1}{b} \frac{dG_B}{dt}, \quad Z^3 = 1 - \frac{3bM_B}{\rho_B r_s} k_g \int_0^t C^* dt \quad (11)$$

式中 G_B 是固相物质 B 的摩尔数, ρ_B 是其密度, M_B 是其摩尔质量, b 是其化学计量系数。将 C^* 对时间积分是考虑到在反应器内气体浓度是空间位置 and 时间的函数。式(11)表明只要求出了反应气体浓度, 即可求出固相物质的反应速度和转化率。考虑反应气体的如下初边值问题

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial C^*}{\partial \bar{t}} &= \frac{\partial^2 C^*}{\partial \bar{x}^2} - \bar{v} \frac{\partial C^*}{\partial \bar{x}} - \bar{\mu} C^* \\ C^*(x, 0) &= C^*_{\infty} \\ C^*(0, t) &= C^* \\ \left[\frac{\partial C^*}{\partial \bar{x}} + \bar{h} C^* \right] \Big|_{\bar{x}=L} &= \bar{h} C^*_{\infty} \\ \bar{h} &= \frac{hL}{D}, \quad \bar{h}_{\infty} = \frac{hC_{\infty}L}{D} \end{aligned} \right\} \quad (I)$$

为求问题(I)的解析解, 将 $C^*(\bar{x}, \bar{t})$ 分解为稳定和非稳定两个部分

$$C^*(\bar{x}, \bar{t}) = C_1^*(\bar{x}) + C_2^*(\bar{x}, \bar{t}) \quad (12)$$

令稳定部分带有非齐次边界条件, 非稳定部分带有齐次边界条件。由于 $\bar{v}$ 、 D 和 $\bar{\mu}$ 总大于零, 容易导出稳定问题的特征根 λ_1 、 λ_2 是实根, 因此容易求得

$$C_1^*(x) = A_1 e^{\lambda_1 \bar{x}} + A_2 e^{\lambda_2 \bar{x}}, \quad \lambda_1 = \frac{\bar{v}^2 + \sqrt{\bar{v}^2 + 4\bar{\mu}}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{\bar{v}^2 + \sqrt{\bar{v}^2 + 4\bar{\mu}}}{2} \quad (13)$$

$$A_1 = \frac{C_0 e^{\lambda_2(\bar{\lambda}_2 + \bar{h})} - \bar{h}_{\infty}}{e^{\lambda_2(\bar{\lambda}_2 + \bar{h})} - e^{\lambda_1(\bar{\lambda}_1 + \bar{h})}}, \quad A_2 = \frac{\bar{h}_{\infty} - C_0 e^{\lambda_1(\bar{\lambda}_1 + \bar{h})}}{e^{\lambda_2(\bar{\lambda}_2 + \bar{h})} - e^{\lambda_1(\bar{\lambda}_1 + \bar{h})}} \quad (14)$$

对于非稳定问题 C_2^* 的解, 可引入一个新函数 $w(\bar{x}, \bar{t})$, 求得 $w(\bar{x}, \bar{t})$ 和 $C_2^*(\bar{x}, \bar{t})$ 为

$$w(\bar{x}, \bar{t}) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{N(\beta_m)} \sin \beta_m \bar{x} e^{-\beta_m^2 \bar{t}} \cdot \int_0^{\bar{x}} \sin \beta_m x [\bar{h} C_{\infty} - C_1(x)] e^{-\frac{x^2}{2}} dx \quad (15)$$

$$C_2^*(\bar{x}, \bar{t}) = w(\bar{x}, \bar{t}) \exp \left[\frac{\bar{v}}{2} \bar{x} - \left[\frac{\bar{v}^2}{4} + \bar{\mu} \right] \bar{t} \right] \quad (16)$$

$$\frac{1}{N(\beta_m)} = \frac{2 \left[\beta_m^2 + \left[\frac{\bar{v}}{2} + \bar{h}_{\infty} \right]^2 \right]}{L \left[\beta_m^2 + \left[\frac{\bar{v}}{2} + \bar{h}_{\infty}^2 \right] + \left[\frac{\bar{v}}{2} + \bar{h}_{\infty} \right] \right]} \quad (17)$$

式中 β_m 是下列方程的正根

$$\left[\bar{h}_{\infty} + \frac{\bar{v}}{2} \right] / \beta_m + \cot \left[\bar{h}_{\infty} + \frac{\bar{v}}{2} \right] = 0 \quad (18)$$

将式(14)~(17)代入式(12)即得一维固定床中反应气体 A 的浓度分布。

3 计算实例与分析

下面通过实例计算分析对流、反应、扩散对气体输运及反应器特性的影响, 本文作者主要从传输角度进行讨论。计算中取 $D = 0.0003 \text{ m}^2/\text{s}$, $C_0 = 0.5$, $C_{\infty} = 0$, $h = 0.15 \text{ m/s}$, 反应器入口端气体压力 $P_0 = 1.1 \text{ MPa}$, 反应器出口端气体压力 $P_L = 1.0 \text{ MPa}$, 其它参数在计算中给出。

颗粒的外扩散系数 k_g , 已得到较充分的研究, 可用如下关联式估算^[18]

$$S_h = 2.0 + 0.6 R_e^{1/2} S_c^{1/3}, \quad S_h = \frac{k_g r_s}{D_e}, \quad R_e = \frac{2r_s \rho v}{\mu}, \quad S_c = \frac{\mu}{\rho D_e} \quad (19)$$

式中 S_h 是 Sherwood 数, R_e 是 Renold 数, S_c 是 Schmidt 数; μ 是流体的动力粘性系数; 对于颗粒堆积的多孔介质, 可从下式估算渗透率 k 和渗透系数 K ^[20]

$$k = \frac{\epsilon^3}{45(1-\epsilon)^2 r_s^2}, \quad K = \frac{k}{\mu} \quad (20)$$

若流体不可压缩, 可导出渗流速度为 $v =$

$$-K \frac{p_L - p_0}{L} = \text{const}.$$

从式(19)、(20)可以看出颗粒半径 r_s 和孔隙率 n 对外扩散系数 k_g 和渗透系数 K 有影响, 因此它们对反应进程有影响, 这种影响可用 Thiele 数和 Peclet 数衡量。为了简便起见, 在图表中的 Thiele 数简记为 Th , Peclet 数简记为 Pe 。图 3(a)、(c) 所示分别是 r_s 对 Thiele 数、Peclet 数和它们的比值

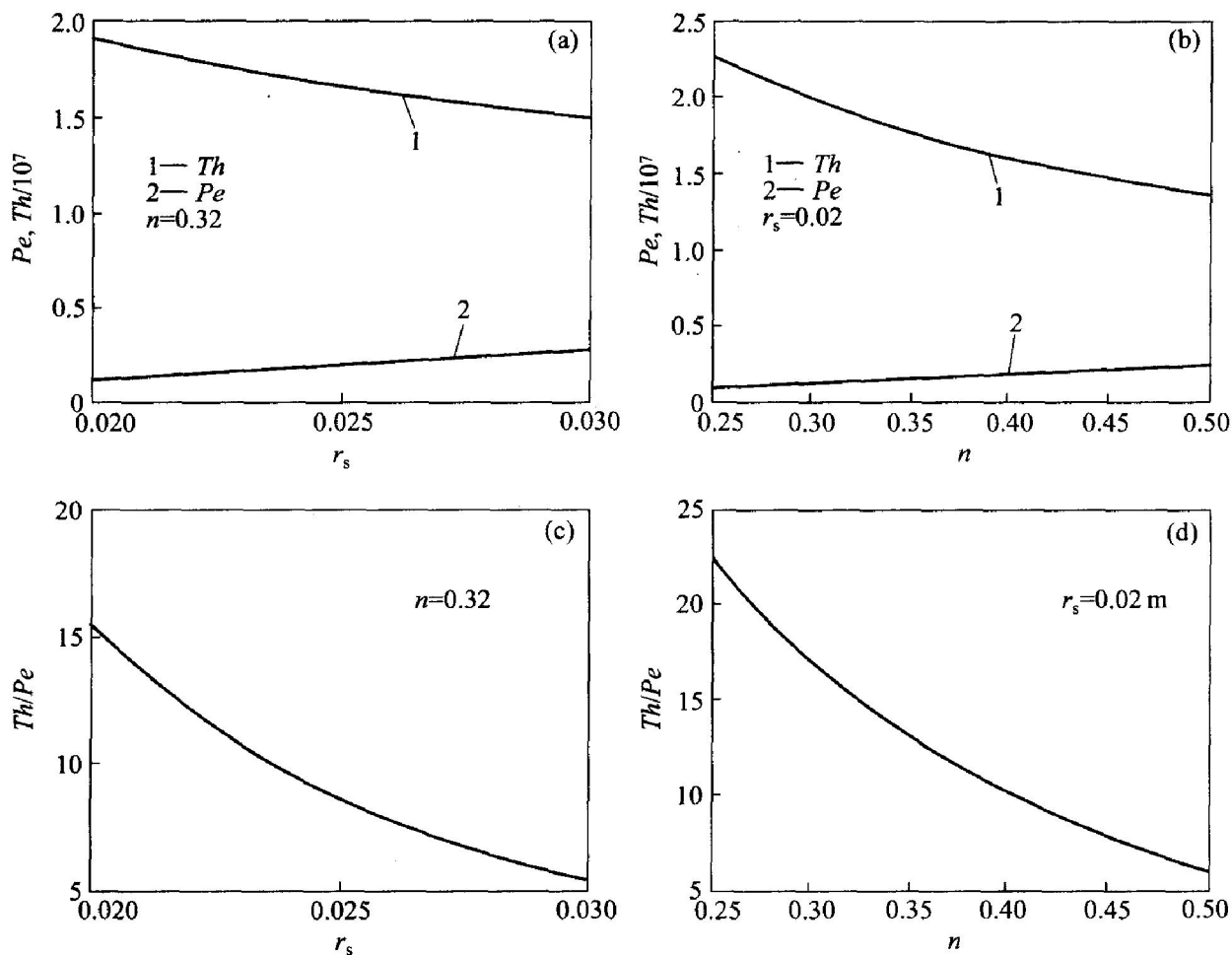


图3 颗粒半径、孔隙率对 Thiele 数和 Peclet 数的影响
Fig. 3 Effect of pellet radius and porosity on Thiele module and Peclet module

Th/Pe 的影响。从图中可以看出, 当 r_s 增加时, Thiele 数减小, Peclet 数增大。 Th 的减小是因为颗粒越大则比表面积越小, 因而综合速率下降的缘故; Pe 的增大则是因为颗粒越大, 渗透系数越大, 对流加快的缘故。图 3(b)、(d) 所示分别是孔隙率对 Th 、 Pe 和 Th/Pe 的影响。从图中可以看出, n 增大时, Th 数减小, 这同样是因为比表面积减小的原因, Pe 数的增加是因为孔隙率增加, 渗流阻力减小, 对流加快引起的。

图 4 所示是 r_s 对气体浓度的影响。从图中可以看出, r_s 越大, 气体浓度越大。这是因为当 r_s 增大时, Th/Pe 数减小, 综合速率下降, 消耗的气体减小, 同时对流加快, 由其携带进入反应器的气体增加所引起的。图 5 所示是 n 对气体浓度的影响, 从中可以看出, n 越大气体浓度越高, 这同样是因为 n 增加时, 比值 Th/Pe 下降, 对流影响上升, 而反应影响下降所引起。图 3~5 表明, 颗粒半径和孔隙率是影响气体浓度和反应进程的敏感因素, 但它们的作用是通过反应和对流的影响间接体现出来的, 因此下面直接讨论综合速率、对流和反应器长

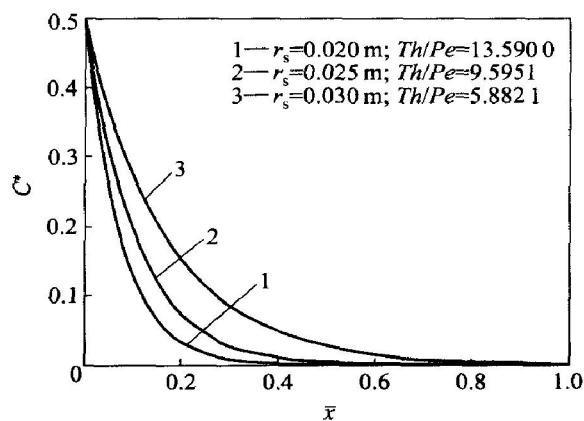


图4 颗粒半径对气体浓度分布的影响
Fig. 4 Effect of granule radius on concentration of reactive gas
($n=0.32$; $L=10$ m)

度的影响。

图 6 所示是反应气体浓度随时间的变化。从图中可以看出, 随时间的发展气体浓度上升, 这主要是因为对流速度比综合反应速率大许多, Th/Pe 很小, 因此反应无法及时消耗由对流带入反应器的反应气体, 从图 6 还可以看出对流对浓度的非稳态

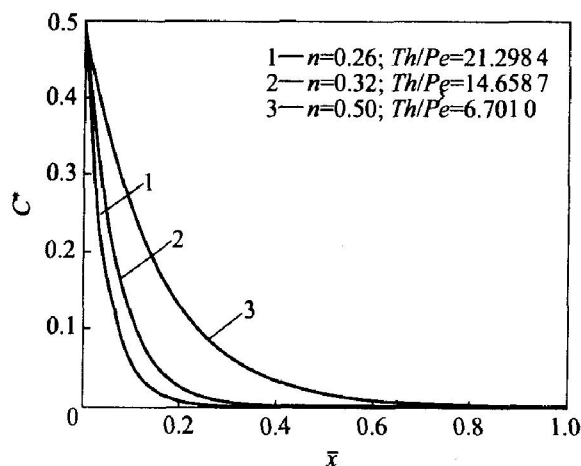


图 5 孔隙率对气体浓度分布的影响

Fig. 5 Effect of porosity on concentration of reactive gas
($r_s = 0.02$ m; $L = 10$ m)

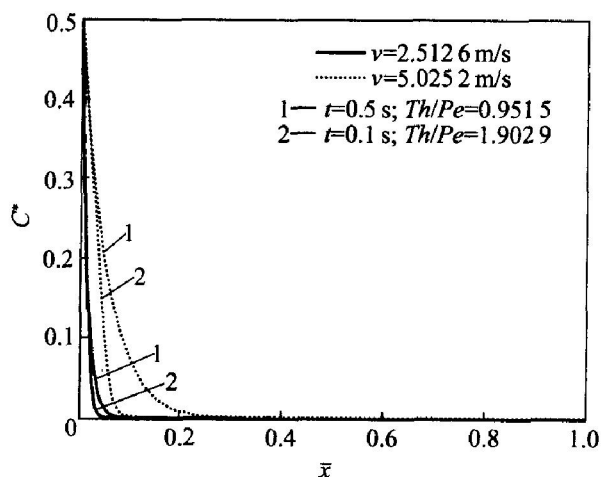


图 6 气体浓度的非稳定分布

Fig. 6 Instable concentration distribution of reactive gas
($n = 0.32$; $r_s = 0.02$ m; $L = 10$ m; $k_g = 0.0015$ m/s)

分布有明显的影响, 对流较快时浓度随时间的变化更明显。

图 7 所示是综合速率对浓度分布的影响。由于其他参数不变, 外传质系数的变化决定了综合速率的变化; 从图中可以看出, 综合速率对反应转化进程有明显的影响, 综合速率越大, 反应气体浓度越小。因此, 当综合速率很大时, 只有加快对流, 才能进一步提高反应速率。综合速率对反应进程的影响可用 Thiele 数衡量, 图 7 给出了相应的 Thiele 数。

对流对气体浓度也有明显的影响, 对流越快, 由其携带的反应气体越多, 气体浓度越高, 图 8 示意地显示了对流的这个特性。因此, 当对流很快时, 只有提高综合速率, 才能提高转化率。对流对

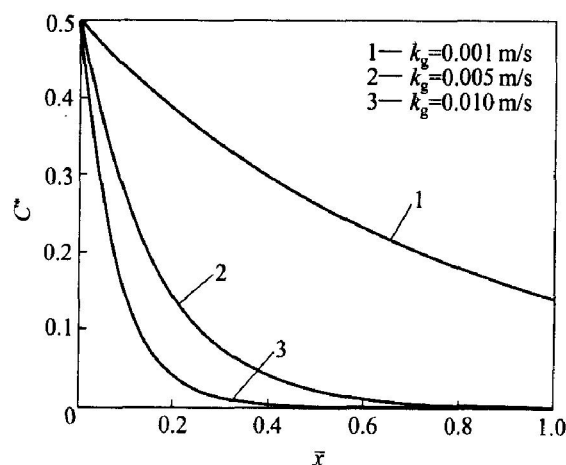


图 7 综合速率对浓度分布的影响

Fig. 7 Effect of overall rate on concentration distribution of reactive gas
($v = 5.0252$ m/s; $n = 0.32$; $L = 10$ m; $r_s = 0.02$)

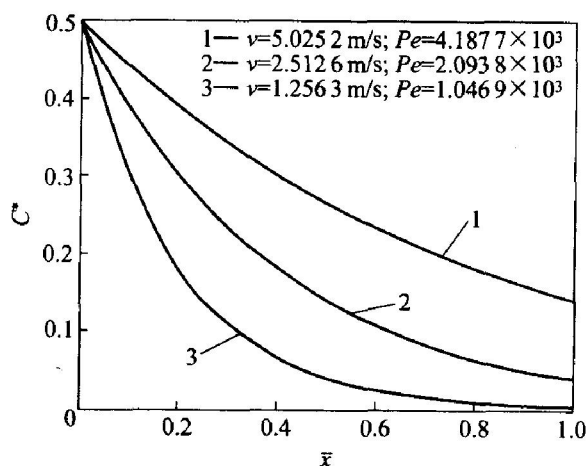


图 8 对流对气体浓度的影响

Fig. 8 Effect of convection rate on gas concentration
($r_s = 0.01$ m; $n = 0.32$; $k_g = 0.001518$ m/s; $L = 10$ m)

气体浓度的影响可用 Peclet 数衡量。

图 9 所示是反应器长度对气体浓度的影响, 采用无量纲长度, 可将不同长度的反应器画在同一张图上, 以方便对比。此时图中同一坐标上的气体浓度并不是不同反应器同样位置上的气体的浓度, 而是同样比例位置上的气体浓度。由于反应器长度不同, 此时逐点比较是无意义的, 但对反应器整体特征的比较仍是有意义的。从图 9 可以看出, 反应器较短时, 对流的影响大, 气体浓度高, 此时只有提高综合速率, 便提高了反应转化率; 而当反应器长度增加时, 对流的作用下降, 气体浓度低。由于进入反应器的反应气体的量是相同的, 反应器长度增加, 意味着气体与固体反应的机会增多。表 1 给出

了反应器长度与气体转化率的关系,可以看出当 L 增大时,转化率上升。因此,上述现象是可以理解的。由于 Thiele 数与反应器长度的平方成正比, Peclet 数与长度的一次方成正比。因此由 Thiele 数和 Peclet 数的比值定量地度量反应器长度对其自身性能的影响。表 1 还给出了反应器长度对 Peclet 数和 Thiele 数的影响。

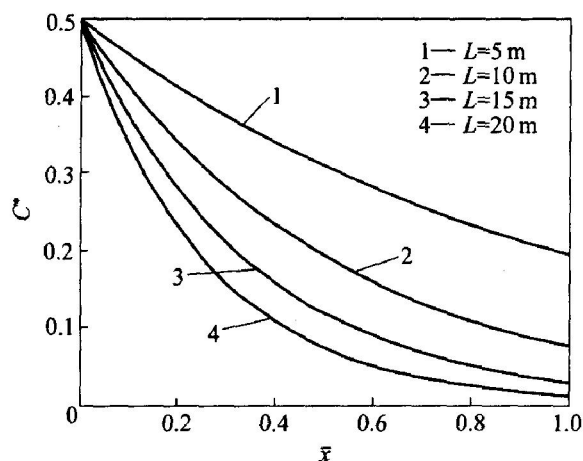


图 9 反应器长度对气体浓度分布的影响

Fig. 9 Effect of reactor length on concentration of reactive gas

$r_s = 0.01 \text{ m}$; $n = 0.32$; $k_g = 0.0015 \text{ m/s}$; $v = 5.0252 \text{ m/s}$

表 1 反应器长度对 Peclet 数 Thiele 数和气体转化率的影响

Table 1 Effect of reactor length on Peclet module, Thiele module and gas conversion

L/m	$Th/10^3$	$Pe/10^3$	Th/Pe	$(C_0 - C_L)/C_0$
5	1.992 2	2.093 8	0.951 5	0.613 5
10	7.968 7	4.187 7	1.902 9	0.850 7
15	17.930 0	6.281 5	2.854 4	0.942 3
20	31.875 0	8.375 3	3.805 8	0.977 7

4 结论

1) 微元体的反应类型不等于反应器的反应类型。在等温条件下影响反应器反应特性的内部因素有微元体的综合速率、反应器长度。外部因素是对流速度。

2) 颗粒大小和孔隙率是影响反应进程的敏感因素。它们的作用是通过综合速率和对流的影响间接反应出来的,并可以用 Thiele 数和 Peclet 数衡量。

3) 当微元体综合反应速率增加一倍时 Thiele

数增加一倍。而当对流速度增加一倍时, Peclet 数增加 L/D 倍。因此微元体综合反应速率的影响比对流速度更大。这还表明反应器长度 L 也是重要的影响因素。

4) 在扩散、对流和化学反应中,化学反应速率的影响最大,对流的影响次之,扩散的影响最小。因此,理论分析和数值分析时,准确地给出化学反应项的具体形式至关重要。

化学反应器中,反应与传递过程的相互作用是十分复杂的现象。本文仅是初步的研究,更深入的问题将在后续论文中陆续进行。

REFERENCES

- [1] Bird R B, Steward W E, Lightfoot E N. Transport Phenomena[M]. New York: John Wiley and Sons Inc, 1960.
- [2] Szekely J. Fluid Flow Phenomena in Metal Processing [M]. New York: Academic Press, 1979.
- [3] 查金荣, 陈家铺. 传递过程原理与应用[M]. 北京: 冶金工业出版社, 1997. 312 - 327.
ZHA Jinrong, CHEN Jiayong. Principles and Applications of Transport Process[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1997. 312 - 327.
- [4] 陶文铨. 数值传热学(第二版)[M]. 西安: 西安交通大学出版社, 2001. 187 - 237.
TAO Wenquan. Numerical Methods in Heat Transfer (2nd Ed) [M]. Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press, 2001. 187 - 237.
- [5] Loureiro J M, Costa C A, Rodrigues A E. Propagation of concentration wave in fixed-bed adsorption reactor [J]. The Chemical Engineering Journal, 1983, 27: 135 - 148.
- [6] Levan M D, Costa C A, Rodrigues A E, et al. Fixed-bed adsorption of gases: Effective of velocity on transition types [J]. AIChE Journal, 1988, 34(6): 996 - 1005.
- [7] Loureiro J M, Rodrigues A E. Two solution method for hyperbolic system of partial differential equations in chemical engineering [J]. Chemical Engineering Science, 1991, 46(12): 3259 - 3267.
- [8] Rose M, Ferreira Q, Rodrigues A E. Diffusion and catalytic zero-order reaction in a macroreticular ion exchange resin [J]. Chemical Engineering Science, 1993, 48(16): 2927 - 2950.
- [9] Winkelman J G M, Beenackers A A C M. Simultaneous absorption and desorption with reversible first-order chemical reaction: Analytical solution and negative enhancement factors [J]. Chemical Engineering Science,

- 1993, 48(16): 2951 - 2955.
- [10] Whitaker S. Diffusion in packed beds of porous particles [J]. AICHE Journal, 1988, 34(4): 337 - 346.
- [11] Whitaker S. Diffusion and reaction in a micropore-macropore model of porous medium [J]. Lat Amer Chem Appl Chem, 1983, 13: 552 - 559.
- [12] Bischoff K B. Conversion of solid particles in continuous fixed bed [J]. Int Eng Chem Fundamental, 1969, 8: 665.
- [13] Moriyama A. Analysis of fluid-solid reaction in fixed-bed reactors under isothermal conditions [J]. Chem Eng, 1970, 34: 1308.
- [14] 肖兴国, 谢蕴国. 冶金反应工程学基础 [M]. 北京: 冶金工业出版社, 1997. 281 - 288.
XIAO Xing-guo, XIE Yun-guo. Basic Engineering Principles of Metallurgical Reaction [M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1997. 281 - 288.
- [15] 鞭岩, 森山昭. 冶金反应工程学 [M]. 北京: 科学出版社, 1981. 77 - 92.
Muchi I, Moriyama A. Engineering of Metallurgical Reaction [M]. Beijing: Science Press, 1981. 77 - 92.
- [16] 冯端. 金属物理学(第一卷, 结构与缺陷) [M]. 北京: 科学出版社, 2000. 182 - 206.
FENG Duan. Physics of Metal (Vol. 1, Structure and Defect) [M]. Beijing: Science Press, 2000. 182 - 206.
- [17] AI Bing-yu. The Packing of Solid Particles [D]. New Southwalse, Australia: The University of Wollongong, 1989.
- [18] 莫鼎成. 冶金动力学 [M]. 长沙: 中南大学出版社, 1987. 131 - 135.
MO Ding-cheng. Kinetics in Metallurgical Process [M]. Changsha: Central South Industrial University Press, 1987. 131 - 135.
- [19] Sohn H Y, Wadsworth M E. 提取冶金速率过程 [M]. 北京: 冶金工业出版社, 1984. 2 - 4.
Sohn H Y, Wadsworth M E. Rate Processes of Extractive Metallurgy Extraction [M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1984. 2 - 4.
- [20] Rumer R R Jr. Resistance to Flow through Porous Media, Flow through Porous Media [M]. New York: Academic Press, 1960. 331 - 376.

(编辑 何学锋)