Дулькина Наталия Александровна. Математическое моделирование химических реакторов с учётом структуры потоков и уровня смешения : диссертация ... кандидата технических наук : 05.13.01, 05.13.18.- Волгоград, 2002.- 192 с.: ил. РГБ ОД, 61 03-5/589-0

Министерство образования Российской Федерации Волгоградский государственный технический университет

***tu>***

На правах рукописи

***/***

ДУЛЬКИНА НАТАЛИЯ АЛЕКСАНДРОВНА

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ С УЧЕТОМ СТРУКТУРЫ ПОТОКОВ И УРОВНЯ СМЕШЕНИЯ**

Специальность 05.13.01 — «Системный анализ, управление и

обработка информации»

Специальность 05.13.18 — «Математическое моделирование,

численные методы и комплексы программ»

ДИССЕРТАЦИЯ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА ТЕХНИЧЕСКИХ НАУК

Научный руководитель — доктор технических наук, профессор Рябчук Е.В.

Волгоград 2002

**2**

**ОГЛАВЛЕНИЕ**

**ПРИНЯТЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ 4**

**ВВЕДЕНИЕ , 7**

**1 АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ СТРУКТУРЫ ПОТОКОВ В ХИМИЧЕСКИХ  
РЕАКТОРАХ** **13**

1.1 Идеальные модели структуры noTOKQB 13

1. *Модель реактора идеального вытеснения* т--й'- *1$*
2. *Модель реактора идеального смешения....* ;. ,;к..,; *14*
3. *Каскад реакторов идеального смешения* : *16*

1.2 Комбинированные модели структуры потоков 17

1. *Реактор с диффузионной моделью структуры потоков* *17*
2. *Реактор с ячеечной моделью структуры потоков* *19*
3. *Сложные модели с последовательным и параллельным соединением звеньев* *22*

1.3 РЇДЕНТИФИКАЦИЯ СТРУКТУРЫ ПОТОКОВ В ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРАХ МЕТОДОМ

входных возмущений 25

1.4 Реальные модели структуры потоков в химических реакторах 29

1. *Математическая модель реактора с ламинарным потоком* *29*
2. *Математическая модель реактора с турбулентным потоком* *30*
3. *Математическая модель реактора реального вытеснения с*

*произвольной функцией отклика* *31*

*1.4.4. Математическая модель реактора реального смешения* *31*

1.5. Моделирование уровня смешения в химических реакторах З 3

1. *Понятие об уровне смешения* *'.:,.:х-.\:33*
2. *Оценка влияния уровня смешения на степень конверсии* л...... *36*
3. *Экспериментальное определение уровня сегрегации* *38*

1.6 Масштабирование уровня сегрегации в химических реакторах 39

Выводы к главе 1 и постановка задач исследования 43

**2 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ  
ПОТОКОВ И УРОВНЯ СМЕШЕНИЯ В ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРАХ...45**

1. Изучение радиального перемешивания в проточных аппаратах вытеснения : 45
2. Идентификация структуры потоков при последовательном соединении звеньев идеального вытеснения и смешения 52
3. Экспериментальное изучение структуры сегрегированного и

десегрегированного потоков в реакторах смешения.. 55

Выводы к главе 2 61

**J**

**3 ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ПОТОКОВ И  
УРОВНЯ СМЕШЕНИЯ В ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРАХ** **62**

1. Прогнозирование уровня сегрегации в промышленных реакторах смешения 62
2. Экспресс-метод расчета реакторов идеального смешения 74
3. Расчет политронных реакторов вытеснения с учетом реологических

СВОЙСТВ РЕАКЦИОННОЙ массы 75

1. Расчет геометрических і'азмеров политропных трубчатых реакторов82
2. Систематизированный алгоритм расчета химических реакторов с

учетом структуры потоков и уровня смешения 85

Выводы К ГЛАВЕ 3 100

**4 РАСЧЕТ ПРОМЫШЛЕННЫХ РЕАКТОРОВ ВЫТЕСНЕНИЯ И  
СМЕШЕНИЯ** **101**

1. Математическое моделирование промышленного реактора гидрохлорирования ацетилена 101
2. Математическое моделирование промышленного реактора получения метил енхлорида 109
3. Математическое моделирование промышленного реактора ксантогепирования спиртов 1 15

Выводы К ГЛАВЕ 4 121

**5 РАЗРАБОТКА ПЕРСПЕКТИВНЫХ КОНСТРУКЦИЙ ХИМИЧЕСКИХ  
РЕАКТОРОВ** **122**

1. кожухотрубный каталитический реактор 122
2. шнековый реактор смешения 126
3. Комбинированный реактор с зонами смешения и вытеснения 128

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ 131**

**СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ 133**

**ПРИЛОЖЕНИЯ** **144**

Приложение 1 144

Приложение 2 166

Приложение 3 171

Приложение 4 173

Приложение 5 184

ПРИНЯТЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

*С -* дифференциальная функция отклика, *безразм.;*

*са* -текущая концентрация реагирующего компонента А, *кмолъА/м;*

*са0* - начальная концентрация реагирующего компонента, *кмольАІм ;*

*сак -* конечная концентрация реагирующего компонента, *кмольА/м3;*

*си, сивх, сис* - концентрация индикатора: текущая, на входе при импульсном

нале, средняя, *кг/м3;*

*сип* - концентрация индикатора внутри реактора (вблизи мешалки), *кг/м';*

*Ми* - масса индикатора, *кг;*

*qv -* объемный расход реакционной массы, *м /с;*

*qm -* массовый расход реакционной массы, *кг/с;*

*q -* безразмерный расход реакционной массы;

<7v/ - объемный расход из зоны сегрегации, *м3/с;*

*qVd -* объемный расход из зоны десегрегации, *мУс;*

*V-* объем реактора, *м3;* ч"

К/ - объем зоны сегрегации, *м3;*

*V$ -* объем зоны десегрегации, *м ;*

*F -* площадь сечения аппарата, *м2;*

*I -* длина аппарата (труб), *м;*

*d -* диаметр аппарата, *м;*

*d„ -* диаметр натурного аппарата, *м;*

*dv -* диаметр модельного аппарата, *м;*

*de -* внутренний диаметр труб, *м;*

*Dm -* диаметр мешалки, *м;*

*Wr -* скорость химической реакции, *моль А1{м -с);* ; ^

*к -* константа скорости химической реакции, *безразм.;*

**5**

*Е-* энергия активации в уравнении Аррениуса, *Длс/моль;*

v - текущая скорость реакционной массы, *м/с;*

vc. - средняя скорость реакционной массы, *м/с;*

v\-7 vp vz " компоненты скорости;

*со-* угловая скорость вращения мешалки, *с'];*

*т-* текущее время пребывания, *с;* (в разделе 3.3 г-касательное напряжение, *Па);*

*тс* - среднее время пребывания, *с;*

*тс] -* среднее время пребывания сегрегированного потока, *с;*

*та)* - среднее время пребывания десегрегированного потока, *с;*

*тп -* время перемешивания, *с;*

*Р -* функция перемешивания, *безразм.;*

*/3-* доля объема, *безразм.;*

*а -* доля расхода, *безразм.;*

*О-* текущее безразмерное время пребывания; *безразм.;*

*Ор -* время растворения, *безразм.;*

*вп -* время перемешивания, *безразм.;*

*г* - текущий радиус трубы реактора, *м;*

*R -* радиус трубы реактора, *м;*

*к -* константа консистептпости, *безразм.;*

/7? — порядок реакции, *безразм.;*

*п -* индекс течения, *безразм.;*

*п -* число ячеек (число груб в разделе 3.4), *безразм.:*

*а -* дисперсия, *оезразм.;*

*Qc-* удельная мощность теплопередачи, *Вт/м';*

*Q,* - удельная теплота реакции, *Вт/моль А;*

*Q„* - тепловые потери, *Вт;*

*Qi---* тепло, передаваемое за счет теплопередачи, *Вт;*

*S —* уровень смешения, *безразм.;*

/- уровень сегрегации, *безразм.;*

*і] -* степень превращения, *безразм.;*

*7]г -* локальная степень превращения по радиусу, *безразм.;*

*Re —* критерий Рейнольдса;

*Ре/ -* критерий Пекле продольной диффузии;

*Str ~* модифицированный критерий Струхаля;

*Г/, Г2...* - геометрические симплексы подобия; *\*

*Da -* критерий Дамкеллера; *'*

*D* - коэффициент молекулярной диффузии, *м"/с;*

*D/* - коэффициент продольной диффузии, *м"1е;*

*v-* коэффициент кинематической вязкое ти, л/7с;

*р -* плотность, *кгім* ;

*ср* - теплоемкость, *кДж1{кг-К);*

*tH, tK* - начальная, конечная температура реакционной массы,

*t\*m ї.хк -* начальная, конечная температура хладагента, °С.

ВВЕДЕНИЕ

Проблемы интенсификации процессов в химических реакторах, связанные с повышением глубины переработки сырья, снижением энергозатрат и матери­альных ресурсов, привлекают в последнее время все большее внимание.

Основу современного подхода к решению Проблем химической техноло­гии составляет системный анализ, в соответствии с которым задачи моделиро­вания и оптимизации сложных химико-технологических систем решаются в тесной связи друг с другом, объединены общей стратегией и подчинены одной цели: созданию высокоэффективного химического производства [1]. Централь­ным понятием системного анализа является понятие системы — иерархической структуры с целым рядом взаимосвязанных подсистем и элементов. С этой точ­ки зрения процесс получения химического вещества в реакторе представляет собой физико-химическую систему (ФХС), состоящую из гидромеханических, тепловых, массообменных процессов и непосредственно процесса химического взаимодействия. Построение математических моделей является основой всего системного анализа. Это центральный этап исследования или проектирования любой системы. От качества модели зависит судьба всего последующего анализа [2, 3].

Все химические реакторы делятся на две большие группы — реакторы вытеснения и реакторы смешения. Соответственно этой классификации в осно­ве расчета каждой группы лежат физические и математические модели идеаль­ного вытеснения и идеального смешения. Фундаментом физического и матема­тического моделирования реальных реакторов является учение о структуре по­токов, в основе которого лежит вероятностный процесс распределения частиц по времени их пребывания в объекте. Учение о структуре потоков возникло в середине XX века. Большой вклад в развитие этого учения внесли зарубежные ученые Левеншпиль О. и Данкверст П. Отечественную школу по изучению структуры потоков возглавил академик Кафаров BjB.

Реальные промышленные реакторы всегда занимают промежуточное по­ложение между идеальными моделями. Для их описания используют модели с

4

ячеечной и диффузионной структурой потоков или комбинированные модели. Однако одной из основных проблем моделирования структуры потоков хими­ческих реакторов остается их идентификация по функциям отклика. Дело в том, что идентификация проводится обычно по интегральным параметрам функций распределения времени пребывания (РВП), которые часто обезличивают форму кривых отклика. Показано [3, 29], что одним и тем же кривым отклика может соответствовать несколько моделей структуры потоков. Эта неоднозначность идентификации структуры потоков по кривым отклика может быть нивелиро­вана при получении дополнительной информации из внутреннего объема объ­екта исследований.

Существующие традиционные методы расчета химических реакторов, основанные на кинетических исследованиях химических реакций и гидромеха­нических моделях структуры потоков с использованием теории подобия вызы­вают трудности из-за эффекта масштабирования, связанные с несовместимо­стью определяющих критериев подобия: химического - Дамкеллера и гидроме­ханического - Рейнольдса. Избежать этой трудности возможно при совместном решении системы уравнений, описывающей кинетику, структуру потоков, тепловые и массообменные процессы в химических реакторах, используя методы математического моделирования.

Кроме того, анализ физических и математических моделей основных ти­пов химических реакторов по структуре потоков показывает, что ещё одной проблемой в настоящее время является учёт уровня смешения при переходе от лабораторных исследований к промышленным объектам [4]. ;

На современном этапе развития науки и техники моделирование химиче­ских реакторов, интенсификация их работы и оптимизация конструкций невоз­можны без применения средств вычислительной техники и математического моделирования [5]. Это дает возможность существенно ускорить проекти­рование химических реакторов и с высокой точностью определять оптималь­ные рабочие параметры процесса, основываясь на известных данных кинетики химических реакций, гидродинамики, тепло- и массопереноса [6-8].

Цели настоящей работы:

- рассмотреть процесс, происходящий в химическом реакторе как взаимосвя­  
занную систему, состоящую из гидромеханических, тепловых, массообмен-  
иых и химических процессов;

**і  
к і**

* разработать физическую и математическую модель и методику расчета реак­торов по функциям отклика сегрегированного и десегрегированного потоков;
* разработать метод идентификации структуры потоков комбинированной моде­ли последовательного соединения звеньев идеального смешения и вытеснения;
* разработать физическую и математическую модель и метод прогнозирова­ния уровня смешения промышленных реакторов, учитывающих эффект масштабирования при переходе от модельного реактора к натурному;
* разработать математическую модель политропного реактора вытеснения с уче­том реологических свойств реакционной массы и составить алгоритм расчета его геометрических размеров;
* провести анализ математических моделей основных типов химических реакто­ров и разработать комплексную программу их расчета на ЭВМ с учетом струк­туры потоков и уровня смешения.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, выводов и приложений. Диссертация содержит 143 страницы основного текста, 37 рисунков, 8 про­грамм расчетов па ЭВМ. Библиографический список включает 123 наименова­ния. Общий объем работы— 188 страниц.

В первой главе представлен литературный обзор теоретических и экспе­риментальных исследований, посвященных рассматриваемым в диссертации вопросам.

Во второй главе представлены результаты экспериментальных исследо­ваний структуры потоков и уровня смешения в химических реакторах, особен-ностыо которых является получение дополнительной информации из внутрен­него объема аппарата.

В третьей главе приведены результаты теоретических исследований структуры потоков и уровня смешения. Проведен анализ математических моде-

**К)**

лей основных типов химических реакторов. На его основе составлен алгоритм расчета химических реакторов с учетом структуры потоков и уровня смешения.

В четвертой главе проведен анализ работы трех промышленных реакто­ров и предложены способы интенсификации их работы. Разработаны методики расчета основных параметров реакторов, оптимизирующих их работу.

В пятой главе представлен патентный обзор и описаны три новые пер­спективные конструкции химических реакторов, новизна которых защищена патентами РФ.

В приложениях приведены программы расчетов на ЭВМ химических ре­акторов с различными структурами потоков с учетом уровня смешения.

Работа выполнена на кафедре «Процессы и аппараты химических произ­водств» Волгоградского государственного технического университета.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

І Ірименение системного подхода к анализу процесса, происходящего в химическом реакторе позволило рассмотреть его как взаимосвязанную физико-химическую систему, состоящую из целого ряда подсистем и элементов: гид­родинамических, химических, тепловых и массообменных процессов. Исполь­зуя математическое моделирование, составляющее основной метод исследова­ния в системном анализе, в диссертационной работе получены следующие результаты:

1. В связи с необходимостью получения дополнительной информации о струк­туре потока из внутреннего объема объекта исследования, разработана мето­дика синхронного снятия кривых отклика из внутреннего объема аппарата и на выходе из него, позволяющая идентифицировать комбинированные моде­ли структуры потоков и последовательность расположения в них зон вытес­нения и смешения и рассчитывать их статистические параметры. Составлена программа расчета на ЭВМ химического реактора с комбинированной моде­лью последовательного соединения зон вытеснения, смешения, вытеснения.
2. Разработаны физическая и математическая модели реактора с функциями отклика сегрегированного и десегрегированного потоков.
3. Разработана методика определения уровня сегрегации, основанная на методе реагирующего индикатора, позволяющая определять кривые отклика сегреги­рованного и десегрегированного потоков и рассчитывать их статистические параметры. Составлена программа расчета на ЭВМ химического реактора с учетом функций отклика сегрегированного и десегрегированного потоков.
4. Разработаны физическая и математическая модели и методика прогнозирова­ния уровня сегрегации, учитывающая время растворения глобул и эффект масштабирования при переходе от лабораторного аппарата к натурному реактору. Составлена программа расчета на ЭВМ химического реактора с уче­том уровня смешения и трансформации кривой отклика при масштабировании.
5. Разработан экспресс-метод расчета реакторов идеального смешения по инте­гральной кинетической кривой.

132

1. Разработан метод расчета числа трубок и их диаметра в политропных кожу-хотрубчатых реакторах па основании математических моделей кинетики и теплообмена.
2. На основании математической модели политропного реактора вытеснения, учитывающей зависимость параметров реакционной массы от температуры, разработан алгоритм расчета, описывающий профиль температуры, скорости и степени конверсии по длине реактора.
3. Проанализированы математические модели, систематизированы методики и разработана единая комплексная программа расчета на ЭВМ девяти основ­ных типов химических реакторов с учетом структуры потоков и уровня смешения. Данная программа позволяет но заданной степени конверсии и производительности прогнозировать объем аппарата и выбирать наиболее эффективный тип промышленного реактора.
4. Разработаны и проанализированы математические модели трех промышлен­ных реакторов, составлены программы их расчета на ЭВМ и предложены способы интенсификации работы данных реакторов, позволяющие:

* увеличить срок службы катализатора в реакторе гидрохлорирования ацетилена на 2,5-3 месяца за счет снижения пиковых температур созданием в нижней крышке реактора адиабатической зоны;
* увеличить производительность реактора производства метиленхлорида по целе­вому продукту на 6-7%, предлагая осуществлять селективный рецикл только по первому продукту реакции, или на 15-20% — за счет увеличения этого рецикла;
* уменьшить в 4-5 раз энергозатраты при работе реактора ксантогенировапия этилового спирта, предложив осуществлять принудительное Интенсивное перемешивание реакционной массы по радиусу только на начальном участке реактора (-20% от общей длины реактора).

10.Разработаны три новые перспективные конструкции химических реакторов, новизна которых защищена патентами РФ.