

К МЕТОДИКЕ ПРОЕКТИРОВАНИЯ ТРУБЧАТОГО РЕАКТОРА

Е.Н. Малыгин¹, П.Г. Михайлова², В.С. Рябинин¹, А.С. Усков¹

Кафедры: «Автоматизированное проектирование технологического оборудования», ФГБОУ ВПО «ТГТУ» (1); «Компьютерно-интегрированные системы в химической технологии», ФГБОУ ВПО «Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева» (2), г. Москва; stafman@mail.ru

Представлена членом редколлегии профессором Н.Ц. Гапановой

Ключевые слова и фразы: математическое моделирование; трубчатый реактор.

Аннотация: Рассмотрена задача поиска оптимальных режимных и конструктивных характеристик трубчатого реактора с возможностью управления активностью катализатора по длине трубки, и дана оценка теоретически возможного выхода целевого продукта.

Обозначения

C_A, C_B – концентрация сырья и полезного продукта соответственно, моль/м ³ ;	K_i – константа скорости i -й реакции, $i = 1, 2, 3$;
c, c_x – теплоемкость исходной смеси и хладагента, Дж/К;	K_{i0} – предэкспоненциальный множитель i -й реакции;
σ, γ, ν – стехиометрические коэффициенты;	Q_i – тепловой эффект i -й реакции, Дж/моль;
P – периметр трубки, м;	R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К);
E_i – энергия активации i -й реакции, Дж/моль;	S – удельная поверхность катализатора, м ² /м ³ ;
F – поверхность раздела реакционной зоны и рубашки, м ² ;	S_0 – активность «неразбавленного» катализатора, м ² /м ³ ;
K_T – коэффициент теплопередачи, Вт/(м ² ·ч);	$T(l)$ – температура в зоне реакции, К;
G – расход исходной смеси, поступающей в реактор, кг/ч;	$T_x(l)$ – температура хладагента, К;
G_x – расход хладагента, кг/ч;	W_i – скорость i -й реакции, моль/ч.
L – длина реакционной зоны м;	

Методика проектирования реакционного оборудования. Множество определяемых режимных и конструктивных характеристик разделяется на два подмножества: в первое входят характеристики, получаемые на основании расчетов с использованием кинетических закономерностей процессов, протекающих в реакторе, – массотеплообмене, гидродинамики движения сред; во второе подмножество входят конструктивные характеристики, определяемые при проведении прочностных расчетов.

В первое подмножество входят: концентрации реагентов; температуры в зоне реакции, хладо- и теплоагента; расходы сырья, хладо- и теплоагентов; поля скоростей движущихся сред; форма и геометрические размеры реакционной зоны; поверхности теплообмена между зоной реакции и хладо-, теплоносителем; толщина и характеристика материала стенок, через которые осуществляется теплообмен. При этом объем реакционной зоны задан и определяется исходя из производи-

тельности всей химико-технологической системы, а толщины стенок, через которые осуществляется теплообмен, задаются проектировщиком и далее уточняются по результатам прочностных расчетов.

Во второе подмножество входят конструктивные характеристики всех элементов реактора, получаемые в результате их прочностных расчетов в зависимости от массовых нагрузок, температур, давления, характеристик материалов. Очевидно, что элементы подмножеств итерационно уточняются.

Подобный подход порождает систему взаимосвязанных задач (рис. 1). Методика решения каждой задачи системы и жизненный цикл поиска режимных и конструктивных характеристик реактора представлены соответственно на рис. 2, 3.

Характеристики катализатора могут изменяться в процессе эксплуатации – нестационарный режим, оставаться неизменными – стационарный режим, или задаваться в качестве некоего распределения по длине реакционной зоны, например, для снятия температурного перегрева в лобовой части реакционной зоны.

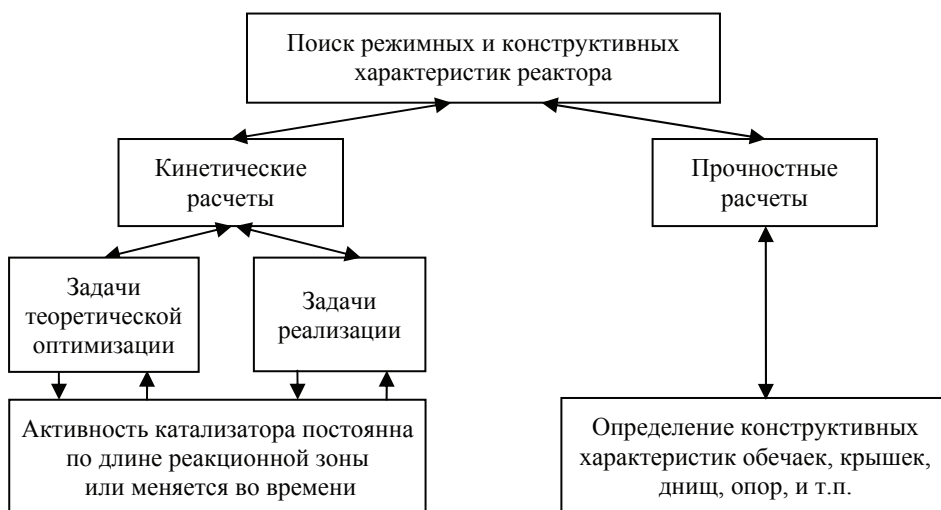


Рис. 1. Система задач для расчета трубчатого реактора

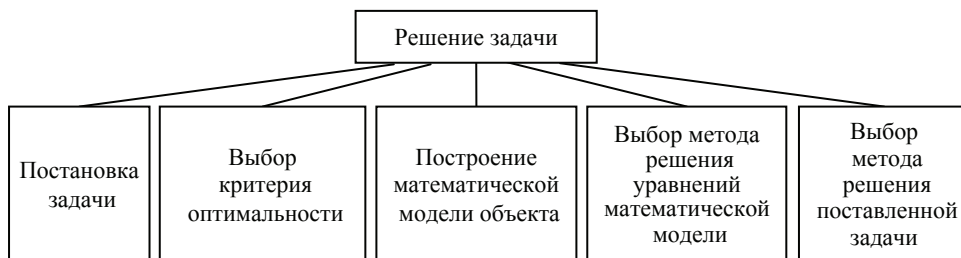


Рис. 2. Методика решения поставленной задачи

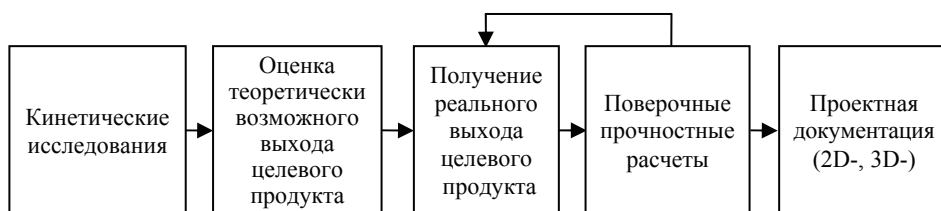


Рис. 3. Жизненный цикл получения целевого продукта

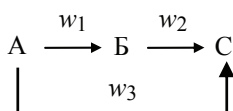


Рис. 4. Последовательно-параллельный кинетический механизм химических превращений

Разработке методологии проектирования трубчатого реактора посвящено большое количество работ [1, 2]. Отличительной особенностью предлагаемой методики является возможность получения теоретически возможного выхода целевого продукта и теоретически возможного распределения активности катализатора по длине реакционной зоны, а также получение реализуемого распределения активности катализатора. Подобный подход позволяет принять наиболее рациональное проектное решение.

В качестве примера рассмотрим решение задачи поиска основных режимных и конструктивных характеристик реактора с заданным выходом целевого продукта при последовательно-параллельном механизме химических реакций (рис. 4).

В качестве критерия оптимальности примем разницу между заданным выходом целевого продукта $C_B(L)_3$ и значением $C_B(L)$, получаемым в процессе решения задачи. Здесь L – длина реакционной зоны, $0 \leq l \leq L$.

Рассмотрим постановку задачи теоретической оптимизации, когда реальные условия теплообмена не учитываются, а температура по длине реакционной зоны ограничена условием

$$T_{\min} \leq T(l) \leq T_{\max}. \quad (1)$$

Кроме этого, предположим, что активность катализатора целесообразно изменять по длине зоны реакции. Введем понятие функции «разбавления» катализатора $\varphi(l)$, которая удовлетворяет условию

$$0 \leq \varphi(l) \leq 1. \quad (2)$$

Тогда активность катализатора S будет иметь вид

$$S(l) = S_0 \varphi(l).$$

При $\varphi(l) \equiv 1$ активность катализатора по длине трубки одинакова.

Представим $T(l)$ и $\varphi(l)$ в виде:

$$T(l) = \sum_{i=0}^k a_i l^i; \quad \varphi(l) = \sum_{j=0}^n b_j l^j,$$

тогда поиск распределений $T(l)$ и $\varphi(l)$ сведется к поиску коэффициентов a_i и b_j с учетом (1) и (2).

Таким образом, постановка задачи теоретической оптимизации трубчатого реактора с известным кинетическим механизмом химических превращений сводится к следующему [3]:

– необходимо найти такие $C_A(0)$, a_i , k , b_j , n , G , L , что критерий оптимальности $I[C_A(0), a_i, k, b_j, n, G, L] = |C_B(L)_3 - C_B(L)|$ достигает минимума при выполнении условий – уравнений математической модели реактора.

Математическая модель реактора имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{dC_A(l)}{dl} &= -\frac{SF}{G}(W_1 + W_3); & \frac{dC_B(l)}{dl} &= \frac{SF}{G}(W_1 - W_2); \\ C_A(0) &= C_{A0}; \quad C_B(0) = 0; \quad 0 \leq l \leq L, & K_i &= K_{i0} \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right), \quad i = \overline{1,3}; \\ W_1 &= K_1 \frac{C_B^{\nu}}{1 + bC_A^c}; & W_2 &= K_2 C_A; & W_3 &= K_3 \frac{C_B^{\gamma}}{1 + bC_A^c}; \end{aligned} \quad (3)$$

$$S(l) = S_0 \varphi(l); \quad \varphi(l) = \sum_{j=0}^n b_j l^j, \quad 0 \leq \varphi(l) \leq 1; \quad T(l) = \sum_{i=0}^k a_i l_i;$$

$$T_{\min} \leq T(l) \leq T_{\max}; \quad C_A(0)_{\min} \leq C_A(0) \leq C_A(0)_{\max}, \quad G_{\min} \leq G \leq G_{\max}, \quad L_{\min} \leq L \leq L_{\max}.$$

Система (3) решалась методом Рунге–Кутты, поиск экстремума критерия оптимальности осуществлялся методом перебора. В результате решения поставленной задачи теоретической оптимизации проектировщик получает результаты, которые реализовать обычно нельзя, но они позволяют иметь ориентир, к которому нужно стремиться. Осуществить загрузку катализатора в виде меняющейся непрерывной функции невозможно, поэтому при решении задачи реализации распределение активности катализатора будем представлять в виде кусочно-постоянной функции, то есть в виде двух, максимум трех, участков с постоянной активностью на каждом. Температурное распределение $T(l)$ в задаче реализации будет результатом решения уравнения теплового баланса (условий теплообмена).

Постановка задачи реализации (два участка с различной активностью катализатора): необходимо найти такие $C_A(0)$, $T(0)$, $T_x(0)$, G , G_x , L , φ_1 , φ_2 , $l_{\text{пер}}$, что критерий оптимальности $I[C_A(0), T(0), T_x(0), G, G_x, L, \varphi_1, \varphi_2, l_{\text{пер}}] = |C_B(L)_3 - C_B(L)|$ достигает минимума при выполнении условий – уравнений математической модели реактора (4):

$$\begin{aligned} \frac{dC_A(l)}{dl} &= -\frac{SF}{G}(W_1 + W_3); & \frac{dC_B(l)}{dl} &= \frac{SF}{G}(W_1 - W_2); \\ \frac{dT(l)}{dl} &= \frac{SF}{Gc} \sum_{i=1}^3 W_i Q_i - \frac{K_T \Pi}{G_x c_x} (T - T_x); & \frac{dT_x(l)}{dl} &= \frac{K_T \Pi}{G_x c_x} (T - T_x); \\ C_A(0) &= C_{A0}, \quad C_B(0) = 0, \quad 0 \leq l \leq L; & K_i &= K_{i0} \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right), \quad i = \overline{1,3}; \quad (4) \\ W_1 &= K_1 \frac{C_B^v}{1 + bC_A^c}; & W_2 &= K_2 C_A; & W_3 &= K_3 \frac{C_B^y}{1 + bC_A^c}; & S(l) &= S_0 \varphi(l); \\ \varphi(l) &= \begin{cases} \varphi_1, & \text{если } 0 \leq l \leq l_{\text{пер}}, \\ \varphi_2, & \text{если } l_{\text{пер}} < l \leq L; \end{cases} & 0 \leq \varphi(l) \leq 1; & T_{\min} \leq T(l) \leq T_{\max}; & G_{x\min} \leq G_x \leq G_{x\max}, \end{aligned}$$

$$C_A(0)_{\min} \leq C_A(0) \leq C_A(0)_{\max}, \quad G_{\min} \leq G \leq G_{\max}, \quad L_{\min} \leq L \leq L_{\max}.$$

Решение задачи реализации проводилось аналогично задаче теоретической оптимизации. Программное обеспечение было реализовано на языке C#. Задав необходимые исходные данные, проектировщик получает оптимальные режимные и конструктивные характеристики реактора, а также графики распределения температур, концентраций и активности катализатора по длине трубки.

Работа выполнена в рамках государственного контракта № 14.В37.21.0234 Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы.

Список литературы

1. Долганов, А.В. Математическое моделирование технологического процесса синтеза эфиров в трубчатом реакторе / А.В. Долганов, В.В. Елизаров. – Казань : Казан. гос. техн. ун-т им. А.Н. Туполева, 2009. – Вып. 1. – С. 94–100.

2. Фролов, С.В. Математическое моделирование и исследование процесса синтеза монометиланилина в трубчатом реакторе / С.В. Фролов, А.А. Третьяков. – Хим. пром-сть. – 2001. – № 8. – С. 35.

3. Малыгин, Е.Н. Математические методы в технических расчетах : учеб. пособие / Е.Н. Малыгин. – Тамбов : Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2010. – 80 с.

The Technique of Designing a Tubular Reactor

E.N. Malygin¹, P.G. Mikhaylova², V.S. Ryabinin¹, A.S. Uskov¹

*Departments: "Computer-Aided Design of Process Equipment", TSTU (1);
"Computer-Integrated Systems in Chemical Technology",
Russian Chemical-Technological University named after D.I. Mendeleev, Moscow (2);
smafman@mail.ru*

Key words and phrases: mathematical modeling; tubular reactor.

Abstract: The article explores the problem of finding the best operational and structural characteristics of a tubular reactor with the ability to control the activity of the catalyst for the length of the tube; the assessment of a theoretically possible yield of the desired product has been made.

Methodik der Projektierung des Rohrreaktors

Zusammenfassung: Im Artikel wird die Aufgabe des Suchens der optimalen Regime- und Konstruktivcharakteristiken des Rohrreaktors mit der Möglichkeit der Steuerung von der Aktivität des Katalisators nach der Rohrlänge und die Einschätzung des theoretisch möglichen Ausgangs des Zielproduktes betrachtet.

Méthode de la conception du réacteur tubulaire

Résumé: Dans l'article est examiné le problème de la recherche des caractéristiques optimales de régime et celles de construction du réacteur tubulaire avec la possibilité de la commande de l'activité du catalyseur à travers la longueur du tube et l'estimation du rendement du produit ciblé possible du point de vue théorique.

Авторы: *Малыгин Евгений Николаевич* – доктор технических наук, профессор кафедры «Автоматизированное проектирование технологического оборудования»; *Рябинин Владимир Сергеевич* – магистрант кафедры «Автоматизированное проектирование технологического оборудования»; *Усков Андрей Сергеевич* – магистрант кафедры «Автоматизированное проектирование технологического оборудования», ФГБОУ ВПО «ТГТУ»; *Михайлова Павла Геннадьевна* – кандидат технических наук, старший преподаватель кафедры «Компьютерно-интегрированные системы в химической технологии», ФГБОУ ВПО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», г. Москва.

Рецензент: *Арзамасцев Александр Анатольевич* – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Компьютерное и математическое моделирование», ФГБОУ ВПО «Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина», г. Тамбов.