

Міністерство освіти і науки України
ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ "ОДЕСЬКА ПОЛІТЕХНІКА"

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
до лабораторних робіт по курсу
"МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ОБ'ЄКТІВ
В ХІМІЧНІЙ ТЕХНОЛОГІЇ" ЧАСТИНА 1
для здобувачів вищої освіти за спеціальністю
161 – Хімічні технології та інженерія

Затверджено на засіданні кафедри ТНРЕ
Протокол № 11, від 24.05.2021 р.

Одеса: ОП, 2021

Методичні вказівки до лабораторних робіт по курсу "Математичне моделювання та оптимізація об'єктів в хімічній технології" Частина 1 для здобувачів вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія / Уклад. В.В. Брем, Ю.М. Єпутатов, О.В. Макаров, О.А. Борщ ; Держ. ун-т "Одес. політехніка". – Одеса, 2021. – 45 с.

Укладачі: Брем В.В., к.х.н., доцент,
Єпутатов Ю.М., к.х.н., доцент,
Макаров О.В., ст. викладач,
Борщ О.А., ст. викладач

*В.В. Брем, Ю.М. Єпутатов, О.В. Макаров, О.А. Борщ. 161 – Хімічні технології та інженерія. **Методичні вказівки до лабораторних робіт по курсу "Математичне моделювання та оптимізація об'єктів в хімічній технології" Частина 1.** В методичних вказівках наведені короткі теоретичні відомості за темами робіт, пояснення роботи та інтерфейсу прикладних програм, а також надано рекомендації щодо ходу виконання лабораторних за окремими індивідуальними завданнями. Методичні вказівки призначено для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія.*

ЗМІСТ

1 Лабораторна робота № 1. Моделювання процесу газоочищення у реакторі з адіабатичним шаром каталізатора з використанням моделі ідеального витіснення	4
2 Лабораторна робота № 2. Моделювання реактора каталітичного очищення промислових газових викидів	10
3 Лабораторна робота № 3. Розрахунок параметрів роботи адіабатичного шару каталізатора по спрощеній моделі.....	13
4 Лабораторна робота №4. Моделювання процесу окислення метанолу в формальдегід в реакторі з адіабатичними шарами каталізатора	18
5 Лабораторна робота №5. Моделювання трубчастого реактора для процесу окислення метанолу на окісних каталізаторах	24
6 Лабораторна робота №6. Моделювання комбінованого каталітичного реактора за допомогою прикладних програм	29
7 Лабораторна робота №7. Розрахунок кожухотрубчатих теплообмінників за допомогою прикладних програм.....	32
8 Лабораторна робота №8. Моделювання і розрахунок підконтактного теплообмінника трубчастого реактора окислення метанолу	40
Перелік рекомендованої літератури.....	45

1 Лабораторна робота № 1. Моделювання процесу газоочищення у реакторі з адіабатичним шаром каталізатора з використанням моделі ідеального витіснення

1 МЕТА РОБОТИ:

- провести розрахунки полів концентрацій компонентів і температури в адіабатичному шарі каталізатора реактора газоочищення, використовуючи прикладні програми;
- аналізуючи отримані результати, визначити технологічні параметри адіабатичного реактора для очищення газових викидів.

2 ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

Каталітичний спосіб знешкодження газових сумішей реалізується в схемі з контактного апарату із стаціонарно працюючим адіабатичним шаром нерухомого зернистого каталізатора та зовнішнього рекуперативного теплообмінника, в якому відбувається попередній нагрів початкової суміші теплом газів, що реагують. Автотермічне проведення процесу очищення стаціонарними методами можливе при вмісті горючих домішок порядку 5–10 г/м³ (адіабатичне розігрівання таких сумішей дорівнює 150–300 °С), а при меншому їх вмісті для підігрівання суміші до температури початку реакції окислення необхідно постійне додаткове підведення тепла від стороннього теплоносія чи додаток палива у суміш. Приклад технологічної схеми процесу каталітичного знешкодження приведено на рис. 1.1.

Основною ланкою системи є контактний вузол, що складається з каталітичного реактора адіабатичного типу з нерухомим шаром каталізатора і теплообмінника-рекуператора. Як правило для процесу каталітичного знешкодження використовується одношаровий адіабатичний реактор. У ряді випадків можливе застосування багатшарового реактора, тоді між полицями з каталізатором розташовуються міжшарові теплообмінники, в яких відбирається надмірне тепло, що виділяється в ході реакції, за допомогою зовнішнього теплоносія. Початкова газова суміш поступає на полицю з адіабатичним шаром каталізатора, де хімічний процес проходить без теплообміну з навколишнім середовищем. На виході з шару температура не повинна перевищувати максимально допустиму за умовами термостійкості для даного каталізатора.

Розрахунок реактора з адіабатичним шаром каталізатора проведемо на прикладі процесу очищення газових викидів від токсичних вуглеводнів і оксиду вуглеводу на окисному мідно-хромовому каталізаторі ІКТ–12–8. Вміст токсичних компонентів в суміші, що очищається, дозволяє провести процес автотермічно.

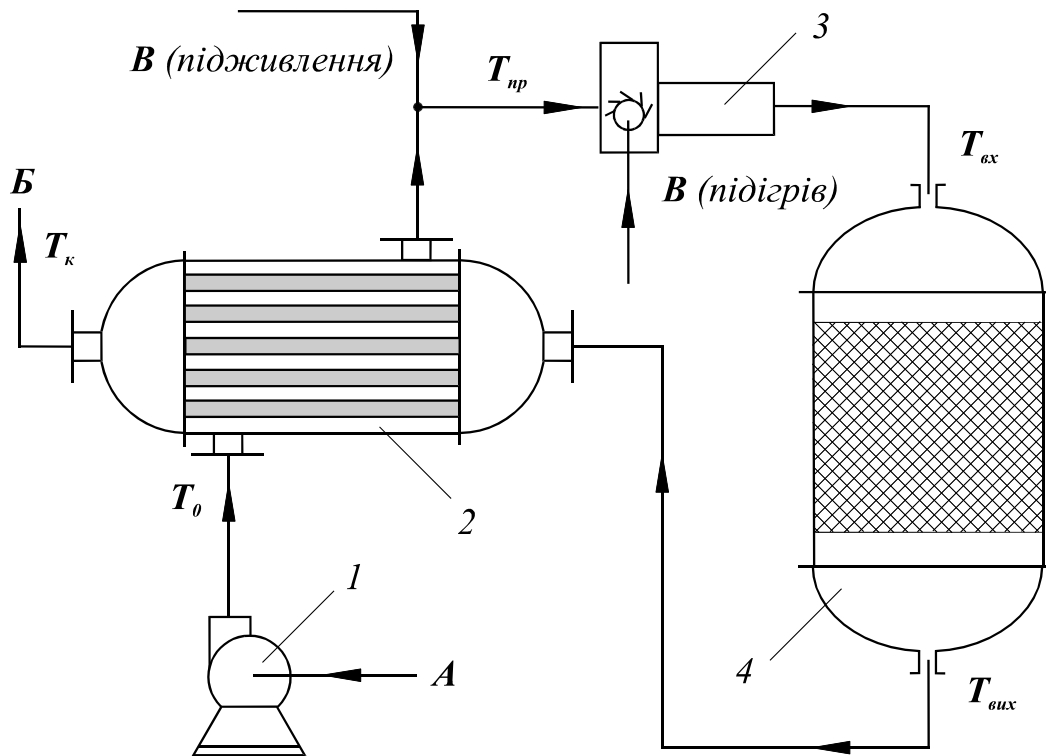
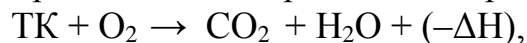


Рис.1.1 – Принципова технологічна схема процесу каталітичного очищення: 1 – газодувка, 2 – теплообмінник, 3 – джерело тепла, 4 – каталітичний реактор, А – газ на очищення, Б – очищений газ, В – паливо.

У даному процесі протікає безповоротна екзотермічна реакція типу:



де ТК - токсичний компонент.

При розрахунку параметрів каталітичних шарів адіабатичного реактора повинна застосовуватися відповідна математична модель процесу. Для розрахунку стаціонарних режимів в адіабатичному шарі каталізатора для даного процесу використовується модель ідеального витіснення. Рівняння матеріального і енергетичного балансів мають вигляд:

$$-U \frac{\partial C_i}{\partial Z} - W = \frac{\partial C_i}{\partial t}, \quad (1.1)$$

$$-U \cdot C_p \cdot \rho \frac{\partial T}{\partial Z} + W \cdot (-\Delta H) = C_a \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (1.2)$$

де U – лінійна швидкість суміші, м/с; ΔH – зміна ентальпії, кДж/м³; W – швидкість хімічного перетворення, 1/с; Z – поточна координата, м; T , C_i – поточні значення температури і концентрації і-го компонента, відповідно, К і % об.; C_p , C_a – теплоємність газової суміші і реакційного об'єму, відповідно, кДж/кг·К і кДж/м³К; ρ - густина газової суміші, кг/м³; t – час, с.

Рівняння кінетики в загальному випадку виражається наступною залежністю:

$$W = f(\bar{C}, T) \quad (1.3)$$

де – \bar{C} вектор концентрації $\{C_1, C_2, \dots, C_n\}$.

У математичну модель РІВ входять також граничні і початкові умови, а також обмеження. Граничні умови для РІВу – умови протікання процесу на вході в шар:

$$Z = 0: C = C_{ex}; T = T_{ex} \quad (1.4)$$

Початкові умови встановлюють значення концентрації і температури в реакторі в початковий момент часу.

$$t = 0: C = C(Z); T = T(Z) \quad (1.5)$$

$$T_{min} < T < T_{max}; C_{min} < C < C_{max}; \text{ і інш.} \quad (1.6)$$

Система рівнянь (1.1–1.6) являє собою математичний опис РІВ в розмірній формі. При описі стаціонарних режимів в рівняннях балансів похідні за часом прирівнюються нулю.

3 РОЗРАХУНОК ПРОЦЕСУ В АДІАБАТИЧНОМУ ШАРІ КАТАЛІЗАТОРА

Для процесу, що протікає в адіабатично працюючому шарі каталізатора, справедливе співвідношення:

$$T_{вих} = T_{ex} + \Delta T_{ад} \cdot x \quad (1.7)$$

де $T_{вх}$, $T_{вих}$ – температури на вході і на виході з шара каталізатора, відповідно, К; x – ступінь перетворення, частки; $\Delta T_{ад} = \Delta T_{ад}^{1\%} \cdot C_0$ – адіабатичне розігрівання реакційної суміші при повному ступені перетворення, К; C_0 – концентрація компонента в початковій суміші, % об; $\Delta T_{ад}^{1\%} = (-\Delta H)/(c_p \cdot \rho)$ – адіабатичне розігрівання реакційної суміші при повному ступені перетворення, якщо концентрація компонента дорівнює 1%.

Фізичне значення параметра $\Delta T_{ад}$ таке: він показує, на скільки може розігрітися реакційна суміш при повному ступені перетворення.

Після визначення величини адіабатичного розігрівання необхідно оцінити необхідне число шарів каталізатора для здійснення даного процесу при заданих обмеженнях. Необхідне кількість шарів визначається по формулі:

$$N = \Delta T_{ад} / \Delta T_{доп} \quad (1.8)$$

де $\Delta T_{доп}$ – допустима зміна температури в шарі каталізатора.

Відповідно кількості шарів визначають ступень перетворення у кожному шарі.

Для мідно-хромового каталізатора ІКТ-12-8, що використовується в різних установках газоочищення, допустимий інтервал роботи становить 250–750°C.

Розрахунок параметрів процесу газоочищення у кожному шарі окремо проводиться з використанням програмного комплексу GAZO. Система рівнянь (1.1–1.6) вирішується методом Рунге-Кутта четвертого порядку точності з автоматичним вибором величини кроку по координаті. Індекс процесу в програмі GAZO вибирається по заданому компоненту, вводяться початкові дані і розраховуються поля концентрацій і температур в шарі каталізатора. За

результатами розрахунків на ЕОМ підбирають параметри роботи шару каталізатора – температуру суміші на вході ($T_{вх}$) і час контакту (τ_k), при яких досягається потрібна міра окислення (x) і виконуються умови по термостійкості каталізатора.

При виконанні першого розрахунку полів концентрацій і температури використовується орієнтовний час контакту для адіабатичного шару. Його потрібно задавати в цьому розрахунку явно більшим, ніж потрібно, наприклад 1,0 с. Виконавши черговий розрахунок, уточнюють величину часу контакту. Такий підхід дозволяє зменшити кількість розрахунків і більш точно визначити параметри роботи шару каталізатора. При аналізі отриманих результатів для адіабатичного шару обирається такий час контакту, при якому досягається задана ступінь перетворення. При цьому необхідно пам'ятати, що температура у шарі каталізатора не повинна перевищувати допустиму величину по термостійкості каталізатора. Розрахунок кожного наступного варіанту треба виконувати, проаналізувавши результати попереднього. Якщо для варіанту, що розглядається, температура в адіабатичному шарі перевищує допустиму, необхідно продовжити розрахунки варіантів, зменшуючи вхідну температуру, а якщо температура в шарі виявляється набагато нижчою допустимої – збільшуючи її.

4 РОЗРАХУНОК ПАРАМЕТРИЧНОЇ ЧУТЛИВОСТІ

Кількісною мірою зміни вихідних величин при зміні вхідних параметрів служить параметрична чутливість – границя відношення зміни вихідної величини до відповідної зміни вхідної:

$$P = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta q}{\Delta A} \quad (1.9)$$

де q , A – вихідний і вхідний параметри, відповідно.

Вираз (1.9) є ніщо інше, як:

$$P = dq / dA \quad (1.10)$$

На практиці використовують наступне наближений вираз:

$$P \approx \Delta q / \Delta A \quad (1.11)$$

Параметрична чутливість використовується при оцінці можливості практичної реалізації процесу, при розробці систем автоматичного управління. Для вибраного варіанта необхідно визначити параметричну чутливість по каналу “температура виходу – температура входу”. Для цього необхідно підготувати початкові дані для розрахунку по програмі GAZO.EXE.

У діапазоні $\pm (3-10)^\circ\text{C}$ до вибраної температури входу потрібно проаналізувати ще декілька (4-6) варіантів. Для кожної отриманої температури при знайденому раніше значенні часу контакту необхідно прорахувати стаціонарний режим. Середнє арифметичне значення параметричної чутливості при позитивному і негативному відхиленнях і буде бути параметричною чутливістю при даних умовах.

5 МЕТОДИКА ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. За початковими даними для заданого складу реакційної суміші (табл. 1.1) визначити величину адіабатичного розігріву $\Delta T_{ад}$. Адіабатичний розігрів необхідно розрахувати за індивідуальним завданням свого варіанту, приймаючи $x = 0,995$. У табл. 2 приведені дані по адіабатичному розігріву різних реакційних сумішей при повному окисленні вибраного компонента з концентрацією, рівна 1% об.
2. Оцінити необхідне кількість шарів адіабатичного реактора.
3. Виконати розрахунки полів концентрацій і температури для кожного адіабатичного шару і на основі проведеного аналізу отриманих результатів вибрати температуру входу $T_{вх}$ і час контакту $\Delta T_{ад}$ для досягнення значення $x_{вих} \geq 99,99\%$.
4. Для вибраного варіанту побудувати графік залежності $\tau_k = f(x)$, по якому оцінити час контакту, необхідний для досягнення $x=0,99$ і $x=0,90$.
5. Для двох варіантів розрахувати величину параметричної чутливості по каналу $T_{вих} - T_{вх}$ при зміні вхідної температури в інтервалі $\pm(3-10)^\circ\text{C}$ і визначити допустиме значення температури входу.

При розрахунку параметрів роботи шару каталізатора потрібно враховувати, щоб вибраний температурний інтервал знаходився приблизно посередині допустимого інтервалу роботи каталізатора.

6 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі по лабораторній роботі повинно бути описано:

- мета роботи;
- короткі теоретичні відомості;
- всі виконані розрахунки згідно з приведеною методикою з висновками по кожному варіанту.

Розрахунки потрібно описувати стисло, наприклад, у вигляді таблиці з наборами початкових даних для кожного з них і аналізом отриманих результатів. У протоколі повинні бути приведені графіки залежностей $T = f(\tau_k)$ і $\tau_k = f(x)$.

7 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

1. Охарактеризувати конструкцію адіабатичного реактора, умови роботи і температурні поля шарів каталізатора.
2. Математична модель, що описує процес в адіабатичному реакторі.
3. Як проводиться вибір параметрів роботи адіабатичного шару?
4. Як визначається параметрична чутливість?
5. Фізичне значення адіабатичного розігріву.

8 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Початкові дані приведені в табл. 1.1 і 1.2. Номер завдання відповідає номеру прізвища студента по журналу.

Таблиця 1.1 – Індекс і концентрація токсичного компоненту

№ варіанту	Індекс компонента	Концентрація % об.	№ варіанту	Індекс компонента	Концентрація % об.
1	1	3,382	13	18	1,035
2	8	0,205	14	3	0,357
3	2	1,251	15	13	0,306
4	10	0,193	16	8	0,234
5	3	0,325	17	1	2,951
6	13	0,294	18	2	1,083
7	4	0,255	19	15	0,376
8	11	0,763	20	2	1,049
9	5	0,204	21	11	0,884
10	16	0,765	22	10	0,207
11	7	0,273	23	12	0,331
12	15	0,422	24	18	1,246

Таблиця 1.2 – Величина адіабатичного розігріву

Речовина	Індекс	Адiабатичний розігрів, $\Delta T_{ад}^{1\%}$	Речовина	Індекс	Адiабатичний розігрів, $\Delta T_{ад}^{1\%}$
СО	1	91	Стирол	10	1483
Метан	2	297	Етанол	11	410
Бутан	3	868	Бутанол	12	907
Пентан	4	1179	Фенол	13	996
Гептан	5	1495	Ацетон	14	597
Декан	6	2050	Фурфурол	15	775
Бензол	7	1101	Акролеїн	16	428
Толуол	8	1318	Етилацетат	17	751
Ксилол	9	1413	Оцет. к-та	18	291

2 Лабораторна робота № 2. Моделювання реактора каталітичного очищення промислових газових викидів

1 МЕТА РОБОТИ:

- провести розрахунки полів концентрацій і температури компонентів в шарах каталізатора реактора газоочищення, використовуючи прикладну програму;
- аналізуючи отримані результати, визначити технологічні параметри адіабатичного реактора для очищення газових викидів.

2 ОСОБЛИВОСТІ РОЗРАХУНКУ ПРОЦЕСУ ГАЗООЧИЩЕННЯ

У газах промислових виробництв, що відходять, як правило, міститься цілий ряд компонентів. При окисленні вони по-різному впливають на швидкість хімічного перетворення. Через різноманіття поєднання різних компонентів в більшості випадків не представляється можливим детальне вивчення процесу газоочищення і побудови надійних кінетичних моделей. У той же час є кінетичні рівняння окислення окремих компонентів.

Для оцінки основних технологічних параметрів подібних процесів на практиці поступають таким чином. Проводять моделювання процесу очищення реальної суміші на моделі однокомпонентної суміші. Подібність між об'єктом і моделлю буде дотримуватися, якщо будуть однакові поля температур. Для процесу, що протікає в адіабатично працюючому шарі каталізатора, справедливе співвідношення (1.7). Як випливає з цього співвідношення, при однакових значеннях температур на вході $T_{вх}$ для досягнення рівних температур виходу необхідно, щоб:

$$(\Delta T_{ад} \cdot x)_{p.c.} = (\Delta T_{ад} \cdot x)_m \quad (2.1)$$

де індекс p.c. відноситься до реальної суміші, а індекс м. – до модельної суміші. Оскільки потрібно досягти практично повну ступінь перетворення, то можна прийняти $x = 1$. Тоді замість (2.1) отримаємо:

$$(\Delta T_{ад})_{p.c.} = (\Delta T_{ад})_m \quad (2.2)$$

Адіабатичний розігрів реальної суміші розраховується по формулі

$$\Delta T_{ад}^{\Sigma} = \sum_{i=1}^n \Delta T_{ад,i}^{1\%} \cdot C_{i,0} \cdot x_i, \quad (2.3)$$

де $\Delta T_{ад,i}^{1\%}$ – адіабатичний розігрів реакційної суміші при повному окисленні і-го компонента при його концентрації 1% (об.); $C_{i,0}$ – концентрація і-го компонента в початковій суміші, % (об.).

Обирають з усіх компонентів один, який має мінімальну швидкість окислення та найбільш важко окислюється. Розраховується концентрація обраного компонента C_0 , яка забезпечувала б таку ж величину адіабатичного розігріву, що і задана суміш $\Delta T_{ад}^{\Sigma}$:

$$c_0 = \Delta T_{ad}^{\Sigma} / \Delta T_{ad}^{1\%} . \quad (2.4)$$

Тепер реактор газоочищення можна розраховувати як апарат для повного окислення одного вибраного компонента при його початковій концентрації, що дорівнює знайденому значенню c_0 . Індекс процесу в програмі GAZO вибирається по цьому компоненту, вводяться початкові дані і розраховуються поля концентрацій і температур в шарі каталізатора. За результатами розрахунків на ЕОМ підбирають параметри роботи шару каталізатора – температуру суміші на вході ($T_{вх}$) і час контакту (τ_k), при яких досягається потрібна міра окислення.

Оскільки не завжди точно відомо, який з компонентів найбільш трудно окислюється, то проводиться перевірочний розрахунок. Вибирається той компонент, концентрація якого в реальній суміші максимальна. Для цього компонента повторюються всі розрахунки, як і для того, що важко окислюється.

Методика розрахунків полів концентрацій і температури для адіабатичного шару приведена у лабораторній роботі №1. При цьому, якщо не вдається провести процес в одному шарі, переходять до двохшарового реактора.

Максимальний час контакту для однокомпонентних сумішей необхідно визначає такі умови роботи реактора каталітичного газоочищення, які забезпечують повне окислення всіх токсичних компонентів, що містяться в реальній суміші.

3 МЕТОДИКА ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. За початковим даними для заданого складу реакційної суміші (табл.2.1) визначити величину сумарного адіабатичного розігріву ΔT_{ad}^{Σ} . Адіабатичний розігрів і-го компонента необхідно розрахувати за індивідуальним завданням свого варіанту, приймаючи $x = 0,995$. У табл. 1.2 (лабораторна робота № 1) приведені дані по адіабатичним розігрівам різних реакційних сумішей при повному окисленні вибраного компонента з концентрацією 1% об.
2. Оцінити необхідне кількість шарів адіабатичного реактора

$$N = \Delta T_{ad}^{\Sigma} / \Delta T_{доп}$$

де $\Delta T_{доп}$ – допустима зміна температури в шарі каталізатора. Для каталізатора ІКТ-12-8 допустимий інтервал роботи становить 250–750°C.

3. Розрахувати приведені концентрації по компоненту, який важко окислюється, і по компоненту з максимальним вмістом в початковій суміші.

Таблиця 2.1 – Концентрації токсичних компонентів в суміші

Індекс компонента	1	2*	3*	4*	5	7*	8	10*	11	12	13*	14	15	16	18*	
Номера варіантів	1	0,24		0,16				0,02			0,04			0,12		
	2	0,9	0,26			0,04				0,12			0,05			
	3	0,11						0,05				0,11			0,11	0,08
	4	0,12				0,05		0,04		0,21		0,03				0,1
	5	0,18			0,03				0,02		0,03				0,17	0,07
	6	0,14					0,08	0,02		0,08			0,05		0,29	
	7	0,16		0,06		0,05		0,02			0,09			0,03	0,1	
	8	0,1	0,18			0,01		0,04		0,32						0,16
	9	0,08			0,04	0,02		0,01		0,08			0,15	0,12		
	10	0,4						0,05		0,08		0,11	0,14			0,04
	11	0,13					0,02		0,09		0,01			0,04	0,27	
	12	0,27				0,03		0,04		0,06			0,1		0,05	0,21
	13	0,1		0,11				0,07			0,04			0,08	0,09	
	14	0,44	0,12			0,1				0,15			0,03			0,11
	15	0,12				0,02	0,06	0,02			0,15			0,03	0,07	
	16	0,16			0,08			0,03		0,05			0,21		0,05	
	17	0,07				0,02		0,01		0,21	0,05	0,11		0,05		
	18	0,17				0,03		0,04		0,28		0,05				0,15
	19	0,11			0,07			0,01		0,12			0,18	0,09		
	20	0,15					0,09	0,04		0,14			0,08		0,11	
Ком-понент	СО	Метан	Бутан	Пентан	Гептан	Бензол	Толуол	Стирол	Етанол	Бутанол	Фенол	Ацетон	Фурфурол	Акролеїн	Оцет. к-та	
$\Delta T_{ad}^{1\%}$	91	297	868	1179	1495	1100	1318	1483	410	907	996	597	775	428	291	

4. Виконати розрахунки полів концентрацій і температури для адіабатичного шару для двох значень приведеної концентрації і на основі аналізу отриманих результатів вибрати температуру входу $T_{\text{вх}}$ і час контакту τ_k для досягнення $x_{\text{вих}}$ не менше за 99,5 %.
5. Вибрати час контакту τ_k , яке гарантує повне окислення всіх токсичних компонентів. При розрахунку багат шарового реактора потрібно враховувати, що ступінь перетворення в кожному шарі повинна бути приблизно однакова.

4 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі до лабораторної роботи повинно бути описано мета роботи, короткі теоретичні відомості, хід виконання роботи згідно з приведеною методикою, всі виконані розрахунки з висновками по кожному варіанту.

Розрахунки потрібно описувати стисло, наприклад, у вигляді таблиці з наборами початкових даних для кожного з них і аналізом отриманих результатів. У протоколі повинні бути приведені графіки залежностей $T = f(\tau_k)$ та $x = f(\tau_k)$.

5 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Початкові дані приведені в табл. 2.1. Номер завдання відповідає номеру прізвища студента по журналу.

6. КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

1. Охарактеризувати конструкцію адіабатичного реактора, умови роботи і температурні поля шарів каталізатора.
2. Математична модель, що описує каталітичний процес в адіабатичному реакторі.
3. Особливості розрахунку процесу каталітичного газоочищення.
4. Фізичне значення «приведеної» концентрації.
5. Як проводиться вибір параметрів роботи адіабатичного шару?
6. Фізичне значення адіабатичного розігріву.
7. Обґрунтувати можливість розрахунку реактора для каталітичного очищення реальних газових викидів з використанням однокомпонентної суміші.

3 Лабораторна робота № 3. Розрахунок параметрів роботи адіабатичного шару каталізатора по спрощеній моделі

1 МЕТА РОБОТИ:

- проведення розрахунків параметрів роботи адіабатичного шару каталізатора по спрощених моделях і зіставлення отриманих результатів з результатами розрахунків по математичній моделі (лабораторна робота №1) на прикладі реактора каталітичного газоочищення.

2 ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

За спрощену модель адіабатичного шару можна прийняти чарункову модель з ізотермічних реакторів ідеального витіснення (РІВ). Математичну модель можна представити у вигляді спрощених рівнянь матеріального і теплового балансу, а також характеристичних рівнянь ізотермічних РІВ:

$$C = C_0 (1 - X) = C_{0j} (1 - X_{pj}) \quad (3.1)$$

$$T = T_{0j} + \Delta T_{ад}^{1\%} \Delta C \quad (3.2)$$

$$\tau = \sum \tau_j \quad (3.3)$$

$$\tau_j = c_{0j} \int_0^{X_{pj}} \frac{dx}{|r_j|} \quad (3.4)$$

де j – індекс реактора, $j = 1, 2, \dots, m$; X – поточна ступінь перетворення; C – поточна концентрація; T – поточна температура; C_0 – початкова концентрація для адіабатичного шару; C_{0j} – початкова концентрація для кожного ізотермічного РІВ; ΔC – зміна концентрації в кожному РІВ; T_{01} – вхідна температура на вході в РІВ; $\Delta T_{ад}^{1\%}$ – розігрів на 1% компоненту, що окислюється; X_{pj} – розрахункова ступінь перетворення для кожного РІВ.

$$X_{pi} = \frac{\Delta C_j}{C_j} = \left(1 - \frac{C_0}{C_{0j}} \right) + \frac{C_0}{C_{0j}} X \quad (3.5)$$

$$\Delta C_j = C - C_{0j}$$

При розрахунку часу перебування в реакторі використовується кінетичне рівняння першого порядку для ізотермічних умов

$$r_j = k_j C = k C_{0j} (1 - X_{pj}) \quad (3.6)$$

де k – усереднена константа швидкості реакції для кожного РІВ.

Усереднену константу швидкості можна знайти двома способами.

1. По середній температурі

$$T_{cpj} = (T_{0j} + T_{j \text{ вих}}) / 2 \quad (3.7)$$

$$k_j = k_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT_{cp}}} \quad (3.8)$$

2) Усередненням констант швидкостей реакцій при температурі входу і виходу в дільниці адіабатичного шару, що замінюється ізотермічним РІВ

$$k_{j \text{ вх}} = k_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT_{0j}}} \quad (3.9)$$

$$k_{j \text{ вих}} = k_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT_{\text{вих}}}} \quad (3.10)$$

$$k_j = \frac{k_{j \text{ вх}} + k_{j \text{ вих}}}{2} \quad (3.11)$$

Більш точні результати отримують, якщо для кожної дільниці константу швидкості реакції представити у вигляді лінійної залежності

$$k = a + bt \quad (3.12)$$

де a і b - константи, що визначаються для кожної ділянки по знайденим $k_{j \text{ вх}}$ і $k_{j \text{ вих}}$:

$$\begin{cases} k_{j \text{ вх}} = a_j + b_j T_0 \\ k_{j \text{ вих}} = a_j + b_j T_{j \text{ вих}} \end{cases} \quad (3.13)$$

Рішення системи рівнянь:

$$b_j = (k_{j \text{ вих}} - k_{j \text{ вх}}) / (T_{j \text{ вих}} - T_{0j}) \quad (3.14)$$

$$a_j = k_{j \text{ вх}} - (k_{j \text{ вих}} - k_{j \text{ вх}}) / \left(\frac{T_{j \text{ вих}}}{T_{0j}} - 1 \right) \quad (3.15)$$

Таким чином, час контакту для кожної ділянки адіабатичного шару, що замінюється ізотермічним РІВ, можна визначити трьома способами:

а)
$$\tau_j = C_{0j} \int_0^{X_{pj}} \frac{dx}{k_j C_{0j} (1 - X_{pj})} \quad (3.16)$$

де k_j – константа швидкості, знайдена з середньої температури по рівняннях (3.7, 3.8).

б)
$$\tau_j = C_{0j} \int_0^{X_j} \frac{dx}{k_j C_{0j} (1 - X_{pj})} \quad (3.17)$$

де k_j – константа швидкості, знайдена з середньої температури по рівняннях (3.9, 3.11)

в)
$$\tau_j = C_{0j} \int_0^{X_j} \frac{dx}{(a_j + b_j T) C_{0j} (1 - X_{pj})} \quad (3.18)$$

Для виконання розрахунку необхідно використати залежність температури в шарі від X_{pj} :

$$T = T_{0j} + \Delta T_{\text{ад}}^{1\%} \cdot \Delta C_j = T_{0j} + \Delta T_{\text{ад}}^{1\%} \cdot C_{0j} \cdot X_{pj}$$

тепер

$$\tau_j = C_{0j} \int_0^{X_{pj}} \frac{dx}{[a_j + b_j (T_{0j} + \Delta T_{\text{ад}}^{1\%} C_j X_{pj})] C_{0j} (1 - X_{pj})} \quad (3.19)$$

Інтеграл в рівняннях (3.16, 3.17) є табличними, інтеграл в рівнянні (3.19) після нескладних перетворень приводиться до табличного інтеграла типу

$$\begin{aligned} \int \frac{dx}{Ax^2 + Bx + C} &= \frac{1}{\sqrt{(-\Delta)}} \ln \frac{2Ax + B - \sqrt{(-\Delta)}}{2Ax + B + \sqrt{(-\Delta)}} \quad \text{при } \Delta = 4AC - B^2 < 0 \\ &= \frac{2}{\sqrt{\Delta}} \arctg \frac{2Ax + B}{\sqrt{\Delta}} \quad \text{при } \Delta = 4AC - B^2 > 0. \end{aligned}$$

Така спрощена модель адіабатичного шару дозволяє досить просто розраховувати поля температури і концентрації в шарі, а також час контакту.

3 ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Розбивають задану ступінь перетворення в адіабатичному шарі на 5–10 діляниць з інтервалом 0,1–0,2. Подальші обчислення проводять відповідно до блок-схеми, приведеної на рис. 3.1. Висхідні дані для розрахунків приведені в табл. 3.1 і 3.2.

4 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі приводяться результати розрахунків полів концентрації і температури, а також по визначенню часу контакту з використанням всіх трьох способів, проводиться зіставлення отриманих значень з результатами розрахунків з використанням програми GAZO по моделі ідеального витіснення (лабораторна робота №1).

5 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Початкові дані приведені в табл. 3.1 і 3.2. Номер завдання відповідає номеру прізвища студента по журналу.

Таблиця 3.1 – Кінетичні характеристики і величини адіабатичного розігріву для різних компонентів

Індекс	Компонент	Передекспонентний множник K_0 , 1/с	Енергія активації, кДж/моль	Адіабатичний розігрів, $\Delta T_{ад}^{1\%}$
1	Оксид вуглеводу	600	31800	91
2	Метан	$1,14 \cdot 10^6$	79600	297
3	Бутан	$7,7 \cdot 10^5$	69500	864
4	Пентан	$1,180 \cdot 10^5$	57400	1179
5	Гептан	$0,438 \cdot 10^5$	43200	1495
6	Декан	$1,45 \cdot 10^6$	62800	2050
7	Бензол	$1,2 \cdot 10^5$	46000	1100
8	Толуол	$2,51 \cdot 10^4$	47900	1318
9	Ксилол	$1,45 \cdot 10^6$	74100	1517
10	Стирол	$1,20 \cdot 10^5$	46100	1483
11	Етанол	$1,09 \cdot 10^6$	62400	456
12	Бутанол	$1,6 \cdot 10^5$	48600	907
13	Фенол	$1,2 \cdot 10^5$	46000	1021
14	Ацетон	$1,6 \cdot 10^5$	49800	597
15	Фурфурол	$1,9 \cdot 10^3$	30100	775

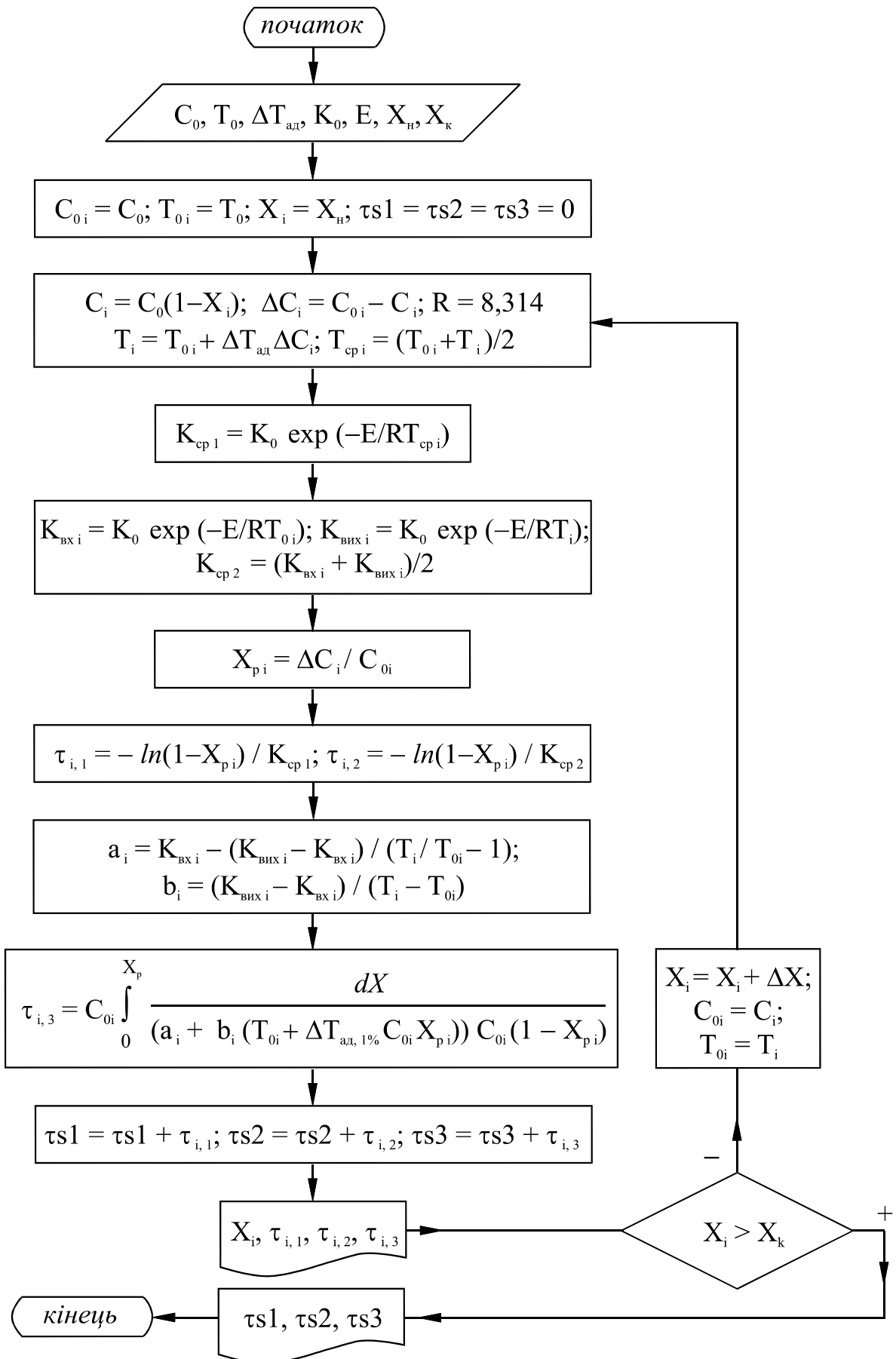


Рис. 3.1 – Блок-схема алгоритму розрахунку

Таблиця 3.2 – Індекси і концентрації токсичних компонентів

№ вар.	Індекс компонента	Концентрація % об.	№ вар.	Індекс компонента	Концентрація % об.
1	1	3,382	13	18	1,035
2	8	0,205	14	3	0,357
3	2	1,251	15	13	0,306
4	10	0,193	16	8	0,234
5	3	0,325	17	1	2,951
6	13	0,294	18	2	1,083
7	4	0,255	19	15	0,376
8	11	0,763	20	2	1,049
9	5	0,204	21	11	0,884
10	16	0,765	22	10	0,207
11	7	0,273	23	12	0,331
12	15	0,422	24	18	1,246

6 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

1. Математична модель ізотермічного РІВ.
2. Способи знаходження усереднених констант швидкостей.
3. Розрахунок часу перебування у РІВ.
4. Алгоритму розрахунку часу перебування.

4 Лабораторна робота №4. Моделювання процесу окислення метанолу в формальдегід в реакторі з адіабатичними шарами каталізатора

1 МЕТА РОБОТИ:

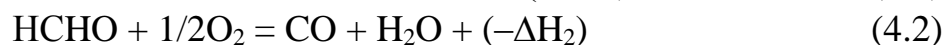
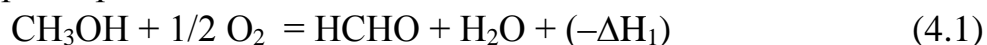
- провести розрахунки полів концентрацій компонентів і температури в адіабатичних шарах каталізатора реактора для окислення метанолу в формальдегід, користуючись прикладними програмами;
- аналізуючи отримані результати, визначити технологічні параметри шарів каталізатора.

2 ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

У адіабатичному реакторі каталізатор розташований на декількох полицях, між якими знаходяться міжшарові теплообмінники, призначені для відведення тепла для екзотермічних процесів за допомогою зовнішнього теплоносія. Початкова газова суміш поступає на полицю з адіабатичним шаром каталізатора, де хімічний процес проходить без теплообміну з навколишнім середовищем. На виході з шару температура не повинна

перевищувати максимально допустиму за умовами термостійкості для даного каталізатора. Схема такого реактора приведена на рис. 4.1а.

Розрахунок реактора з адіабатичними шарами каталізатора проводимо на прикладі процесу окислення метанолу в формальдегід на окисному залізо-молібденовому каталізаторі. У даному процесі протікають дві послідовні, практично безповоротні реакції:



Енергія активації першої реакції (4.1) помітно більше, ніж другий (побічної). Для цього випадку теоретично оптимальним режимом є ізотермічний режим при максимально допустимій температурі. Для даного каталізатора температурний діапазон роботи 220 – 365 °С.

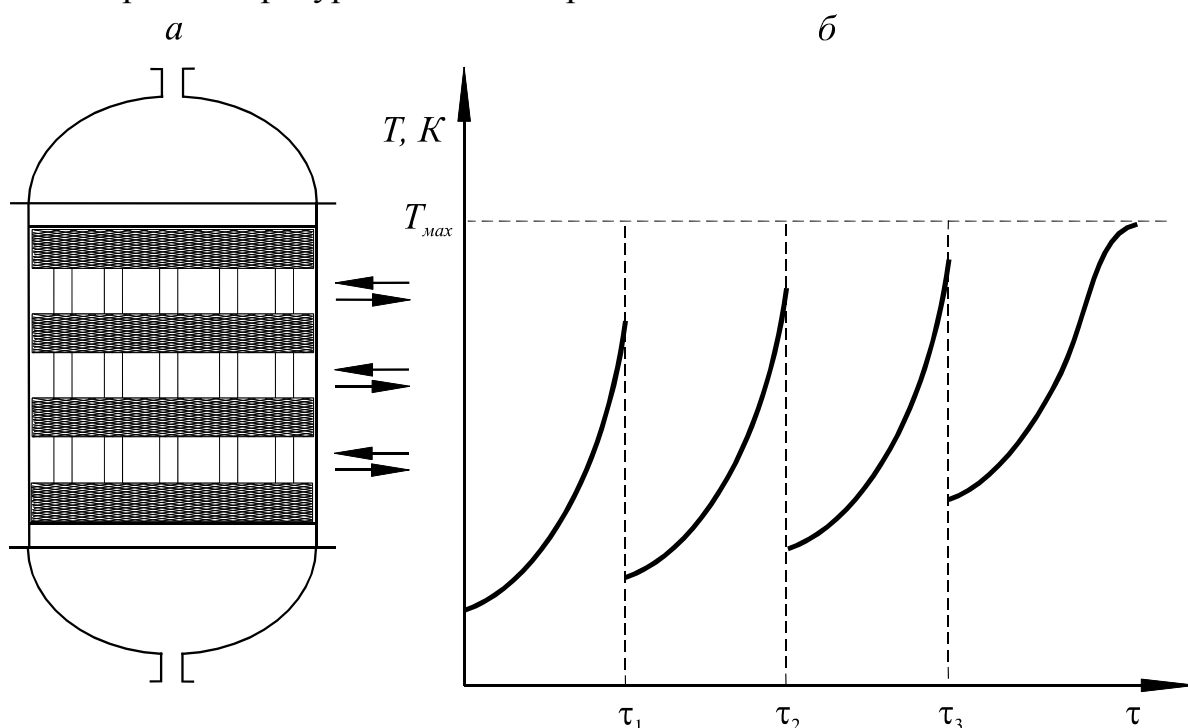


Рис. 4.1 – Моделювання процесу окислення метанолу в формальдегід в реакторі з адіабатичними шарами каталізатора: а – схема реактора, б – залежність зміни температури по шарам каталізатора

На рис. 4.1б приведена характерна залежність зміни температури по шарам каталізатора.

При розрахунку параметрів каталітичних шарів адіабатичного реактора повинна застосовуватися відповідна математична модель процесу. Для розрахунку стаціонарних режимів в адіабатичному шарі каталізатора використовується модель ідеального витіснення.

Для процесу окислення метанолу і формальдегіду, в якому протікають дві послідовні безповоротні реакції, система рівнянь має вигляд:

$$-\omega \frac{\partial C_M}{\partial \ell} - W_1 = 0 \quad (4.3)$$

$$-\omega \frac{\partial C_{\phi}}{\partial \ell} + W_1 - W_2 = 0 \quad (4.4)$$

$$-\omega \frac{\partial C_B}{\partial \ell} + W_1 + W_2 = 0 \quad (4.5)$$

$$-\omega \frac{\partial C_k}{\partial \ell} - \frac{1}{2}(W_1 + W_2) = 0 \quad (4.6)$$

$$-\omega C_p \rho \frac{\partial T}{\partial \ell} + q_1 W_1 + q_2 W_2 = 0 \quad (4.7)$$

$$W_1 = \frac{K_1 C_M}{1 + a_1 C_M + a_2 C_B + a_3 \frac{C_M}{C_K}} \quad (4.8)$$

$$W_2 = \frac{K_1 C_{\phi}}{1 + b_1 C_M + b_2 C_B + b_3 \frac{C_{\phi}}{C_K}} + \frac{K_3 C_M}{1 + b_1 C_B + b_2 \frac{C_M}{C_K}} \quad (4.9)$$

Граничні умови:

$$\ell=0; C_M=C_{Mex}; C_{\phi}=C_{\phi ex}; C_B=C_{Bex}; C_K=C_{Kex}; T=T_{ex}. \quad (4.10)$$

Початкові умови:

$$t=0: C_M=C_M(\ell); C_{\phi}=C_{\phi}(\ell); C_B=C_B(\ell); C_K=C_K(\ell); T=T(\ell), \quad (4.11)$$

де W_1, W_2 – швидкості основної і побічної реакцій на зерні каталізатора, моль/(м³·с); C_M, C_{ϕ}, C_B, C_K – концентрація метанолу, формальдегіду, води, кисню, відповідно, моль/м³; T – температура газу, К; ω – лінійна швидкість реакційної суміші, м/с; ℓ – поточна координата шару каталізатора в трубці, м; C_p – середня теплоємність реакційної суміші, кДж/(кг·К); ρ – середня густина реакційної суміші, кг/м³; q_1, q_2 – теплові ефекти реакцій, кДж/моль; $K_1, K_2, K_3, a_1, a_2, a_3, b_1, b_2, b_3, V_1, V_2, V_3, V_4, V_5, \alpha$ – параметри, що залежать від розміру зерна каталізатора.

Розрахунок процесів, що протікають в адіабатичному шарі каталізатора, проводиться з використанням програми «Адіабатичний реактор», що входить до складу програмного комплексу COMPLEX. Система рівнянь (4.3–4.11) вирішується методом Рунге-Кутта четвертого порядку точності з автоматичним вибором величини шагу по координаті.

Початкові дані записуються у виділені вікна панелі, а при переході до розрахунку нового варіанту необхідно виправити значення тільки тих величин, які змінюються. Результати розрахунку виводяться на екран монітору. Можливий запис результатів на диск, але для цього необхідно указати ім'я файлу.

Методика розрахунків полів концентрацій і температури для адіабатичного шару приведена у лабораторній роботі №1. При аналізі отриманих результатів для адіабатичного шару вибирається такий час контакту, при якому досягається задана ступінь перетворення для даного шару. При цьому необхідно пам'ятати, що температура в шарі каталізатора не

повинна перевищувати допустиму, але кращі технологічні параметри (селективність і вихід цільового продукту) буде мати реактор з більш високими вихідними температурами з кожного шару каталізатора.

Час контакту і умови проведення процесу в останньому шарі каталізатора вибирають по максимальному виходу цільового продукту з урахуванням обмежень по максимально допустимій температурі.

Для процесів з послідовних реакцій максимальному виходу проміжного продукту відповідає максимум його концентрації, тому можна користуватися концентрацією формальдегіду для вибору варіантів останнього шару каталізатора. У роботі обов'язково необхідно довести, що вдалося досягнути максимуму по концентрації формальдегіду. У кожній точці, що знаходиться поблизу екстремуму, треба розрахувати вихід продукту за формулою

$$B = X \cdot Sel \quad (4.12)$$

По максимуму виходу визначають оптимальну ступень перетворення, яка може відрізнитися від заданої. Таким чином вирішується задача вибору оптимального часу контакту і ступеня перетворення в реакторах такого типу.

Отримані результати розрахунків на ЕОМ процесу в шарах каталізатора дозволяють однозначно визначити всі основні технологічні параметри – склад і температуру суміші на вході в апарат, час контакту по шарах, склад і температуру реакційної суміші на виході з кожного шару каталізатора і на виході з реактора, безрозмірні характеристики хімічного процесу – ступінь перетворення, селективність і вихід цільового продукту. Ці дані використовуються на подальших етапах проектування технологічної схеми і самого реактора.

3 МЕТОДИКА ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Для заданого складу реакційної суміші (за початковим даними табл. 4.1 і 4.2) оцінити необхідну кількість шарів адіабатичного реактора за формулою:

$$N = \Delta T_{ад} / \Delta T_{доп} ,$$

де $\Delta T_{доп} = T_{маx} - T_{вх}$ – допустима зміна температури в шарі каталізатора; $\Delta T_{ад} = (-\Delta H)c_0 / (c_p \cdot \rho) \cdot X$ – адіабатичний розігрів суміші; град; $-\Delta H = 160$ кДж/моль; $C_p = 1000$ – теплоємність реакційної суміші, Дж/(кг · К); $\rho = 1,29$ – густина реакційної суміші, кг/м³; C_0 – концентрація метанолу на вході в реактор, моль/ м³.

За технологічними умовами приймаються наступні температури та ступені перетворення на виході з шарів каталізатора ($T_{маx}$, X): для 1 шару – 345 °С, 0,34–0,345; для 2 шару – 350 °С, 0,68–0,69; для 3 – 355 °С, $\geq 0,992$. Тоді при температурах входу 230–250 °С допустима зміна температури в шарі каталізатора складе $\Delta T_{доп} = (120–140)$ °С. Величину адіабатичного розігріву необхідно розрахувати за початковим даними свого варіанту, приймаючи $X = 0,995$.

2. Розрахувати реактор при умові завантаження у всі шари зерен каталізатора одного розміру – 6 мм. Підбір часу контакту в кожному шарі здійснюється при

варіюванні температури входу ($T_{вх}$). Загальна ступінь перетворення в реакторі повинна бути не менше за 0,990. Ступінь перетворення в одному шарі дорівнює відношенню загального ступеня перетворення в реакторі до кількості шарів каталізатора. Визначити максимальний вихід формальдегіду і оптимальну ступінь перетворення.

3. Розрахувати реактор при умові завантаження в шари зерен каталізатора різного розміру: 1 шар – 6 мм; 2 шар – 4 мм; 3-й і подальші шари – 2 мм при тих же умовах (див. п.2). Визначити вихід формальдегіду.

4. Порівняти максимальний вихід формальдегіду двох варіантів завантаження каталізатора в реакторі.

4 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі по лабораторній роботі повинна бути описана мета роботи, короткі теоретичні відомості, хід виконання роботи згідно з приведеною методикою, всі виконані розрахунки з висновками по кожному варіанту.

Розрахунки потрібно описувати стисло, наприклад, у вигляді таблиці з наборами початкових даних для кожного з них і аналізом отриманих результатів. У протоколі повинні бути побудовані графіки зміни температури, ступеня перетворення і селективності за часом контакту для двох варіантів завантаження.

5 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

1. Охарактеризувати конструкцію адіабатичного реактора, умови роботи і температурні поля шарів каталізатора.
2. Математична модель, що описує каталітичний процес в адіабатичній частині реактора.
3. Як проводиться вибір параметрів роботи адіабатичного шару?
4. Зіставте показники роботи реактора при двох варіантах завантаження.
5. Вплив розміру зерна каталізатора на показники роботи шару.
6. Вплив числа шарів каталізатора на показники роботи реактора
7. Технологічні вимоги, що пред'являються до адіабатичного шару.
8. Фізичне значення наступних параметрів: адіабатичний розігрів, ступінь перетворення, селективність, вихід продукту.

6 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Номер завдання відповідає номеру прізвища студента по журналу. Склад початкової суміші приймається по номеру варіанту. Спочатку по таблиці 4.1 визначають умовні позначення концентрацій – ліві колонки цифр для студентів групи 1, праві – 2. Потім по таблиці 4.2 знаходять значення концентрацій чотирьох компонентів (моль/м^3), які використовуються в розрахунках.

Таблиця 4.1 – Склад початкової суміші

№ варіанту	Умовне позначення концентрації компонента							
	метанол		формальдегід		вода		кисень	
1	M1	M1	Ф1	Ф3	B1	B3	K1	K1
2	M2	M3	Ф1	Ф3	B1	B3	K1	K1
3	M1	M1	Ф2	Ф1	B1	B3	K1	K3
4	M2	M3	Ф2	Ф1	B1	B3	K1	K3
5	M1	M1	Ф1	Ф3	B1	B3	K2	K3
6	M2	M3	Ф1	Ф3	B1	B3	K2	K3
7	M1	M2	Ф2	Ф3	B1	B3	K2	K3
8	M2	M3	Ф2	Ф2	B1	B3	K2	K3
9	M1	M2	Ф1	Ф2	B2	B3	K1	K3
10	M2	M3	Ф1	Ф3	B2	B3	K1	K2
11	M1	M2	Ф2	Ф3	B2	B3	K1	K2
12	M2	M3	Ф2	Ф2	B2	B3	K1	K2
13	M1	M2	Ф1	Ф2	B2	B3	K2	K2
14	M2	M3	Ф1	Ф3	B2	B2	K2	K2
15	M1	M2	Ф2	Ф3	B2	B2	K2	K3
16	M2	M3	Ф2	Ф2	B2	B2	K2	K3
17	M3	M2	Ф1	Ф2	B1	B2	K1	K3
18	M1	M3	Ф3	Ф3	B1	B2	K1	K2
19	M3	M2	Ф3	Ф3	B1	B2	K1	K2
20	M1	M3	Ф1	Ф2	B1	B2	K3	K2
21	M3	M3	Ф1	Ф2	B1	B1	K3	K3
22	M1	M2	Ф3	Ф3	B1	B1	K3	K3
23	M3	M3	Ф3	Ф2	B1	B1	K3	K2

Таблиця 4.2 – Значення концентрацій компонентів на вході в реактор (моль/м³)

Компоненти	Умовні позначення концентрації		
метанол	M1=2,65	M2=2,75	M3=2,85
формальдегід	Ф1=0,0	Ф2=0,2	Ф3=0,4
вода	B1=1,2	B2=1,3	B3=1,4
кисень	K1=3,4	K2=3,6	K3=3,8

Початкові дані, загальні для всіх варіантів:

Ступінь перетворення метанолу на виході з реактора	≥ 0,992
Температура парово-газової суміші на вході в шари каталізатора	> 215 ⁰ C
Гранична допустима температура в адіабатичному шарі	≤ 355 ⁰ C

5 Лабораторна робота №5. Моделювання трубчастого реактора для процесу окислення метанолу на окисних каталізаторах

1 МЕТА РОБОТИ:

- провести розрахунки полів концентрацій компонентів і температури в шарі каталізатора трубчастого реактора для окислення метанолу в формальдегід, користуючись прикладними програмами;
- аналізуючи отримані результати, визначити технологічні параметри трубчастого реактора.

2 ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

У трубчастому каталітичному реакторі каталізатор розташований в трубках. Через стінки трубок здійснюється відведення (для екзотермічних процесів) або підведення (для ендотермічних процесів) тепла за допомогою зовнішнього теплоносія, що подається в міжтрубний простір. Схема такого реактора приведена на рис. 5.1а, а графік зміни температури в шарі каталізатора – на рис. 5.1б.

При розрахунку параметрів процесу в трубчастому реакторі використовується двохпараметрична дифузійна математична модель процесу. Для процесу окислення метанолу і формальдегіду, в якому протікають дві послідовні безповоротні реакції, система рівнянь має вигляд:

$$Dr \left(\frac{\partial^2 C_M}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_M}{\partial r} \right) - \omega \frac{\partial C_M}{\partial l} - W_1 = 0 \quad (5.1)$$

$$Dr \left(\frac{\partial^2 C_\phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_\phi}{\partial r} \right) - \omega \frac{\partial C_\phi}{\partial l} + W_1 - W_2 = 0 \quad (5.2)$$

$$Dr \left(\frac{\partial^2 C_B}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_B}{\partial r} \right) - \omega \frac{\partial C_B}{\partial l} + W_1 + W_2 = 0 \quad (5.3)$$

$$Dr \left(\frac{\partial^2 C_k}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_k}{\partial r} \right) - \omega \frac{\partial C_k}{\partial l} - \frac{1}{2} (W_1 - W_2) = 0 \quad (5.4)$$

$$\lambda r \left(\frac{\partial^2 C_T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_T}{\partial r} \right) - \omega C_p \rho \frac{\partial C_T}{\partial l} + q_1 W_1 - q_2 W_2 = 0 \quad (5.5)$$

$$W_1 = \frac{K_1 C_M}{1 + a_1 C_M + a_2 C_B + a_3 \frac{C_M}{C_K}} \quad (5.6)$$

$$W_2 = \frac{K_1 C_\phi}{1 + b_1 C_M + b_2 C_B + b_3 \frac{C_\phi}{C_K}} + \frac{K_3 C_M}{1 + b_1 C_B + b_2 \frac{C_M}{C_K}} \quad (5.7)$$

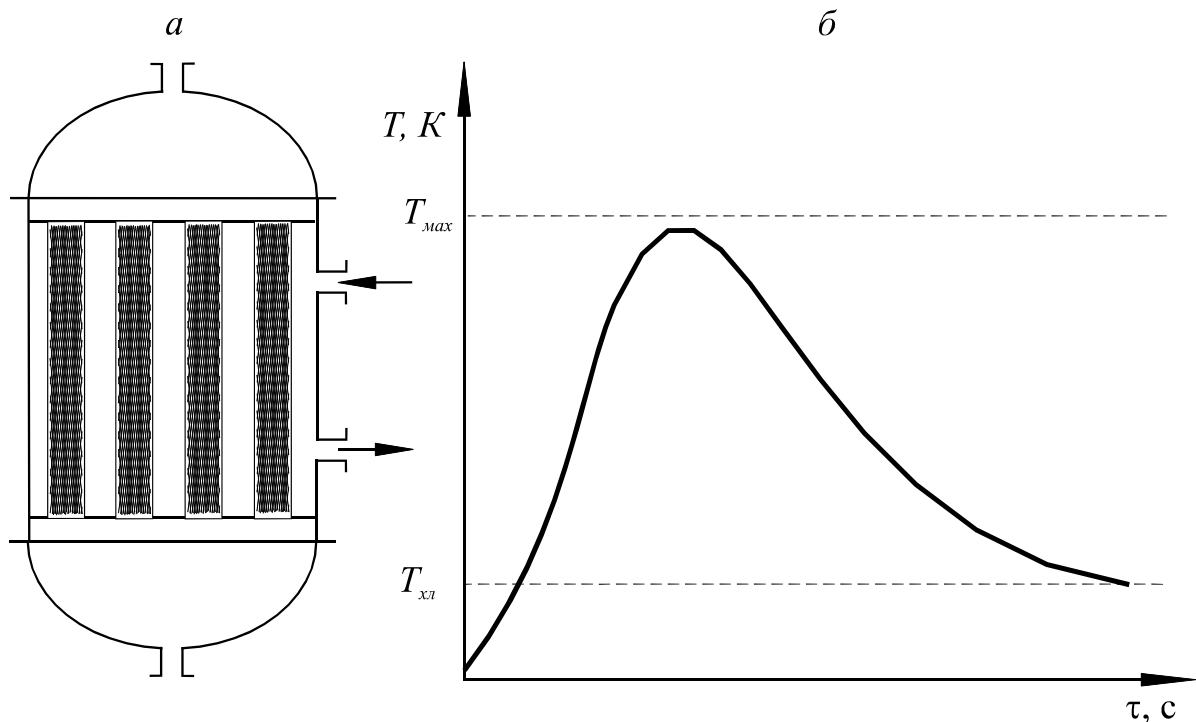


Рис. 5.1 – Моделювання процесу окислення метанолу в формальдегід в трубчастому реакторі: а – схема реактора, б – залежність зміни температури від часу

Граничні умови:

$$r=0: \quad \frac{\partial C_M}{\partial r} = \frac{\partial C_\phi}{\partial r} = \frac{\partial C_B}{\partial r} = \frac{\partial C_K}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (5.8)$$

$$r=R: \quad \frac{\partial C_M}{\partial r} = \frac{\partial C_\phi}{\partial r} = \frac{\partial C_B}{\partial r} = \frac{\partial C_K}{\partial r} = 0 \quad (5.9)$$

$$\lambda_r \frac{\partial T}{\partial r} = K(T_X - T) \quad (5.10)$$

Початкові умови:

$$t=0; \quad C_M=C_{MВХ}; C_\phi=C_{\phiВХ}; C_B=C_{BВХ}; C_K=C_{KВХ}; T=T_{ВХ}, \quad (5.11)$$

де W_1, W_2 – швидкості основної і побічної реакцій на зерні каталізатора, моль/(м³·с); C_M, C_ϕ, C_B, C_K – концентрація метанолу, формальдегіду, води, моль/м³; D_r, λ_r – ефективні коефіцієнти радіальної дифузії (м²/с) і радіальної теплопровідності (Вт/м·к) відповідно; T, T_X – температура газу і хладоагенту, К; ω – лінійна швидкість реакційної суміші, м/с; ℓ – поточна координата шару каталізатора в трубці, м; r, R – поточний і внутрішній радіус трубки, м; C_p – середня теплоємність реакційної суміші, кДж/(кг·К); ρ – середня густина реакційної суміші, кг/м³; q_i – теплові ефекти реакцій, кДж/моль; K – коефіцієнт теплопередачі від реакційної суміші до холодоагенту, Вт/м²·К.

На показники роботи трубчастого реактора помітний вплив надають багато які його параметри. Тому для вибору всіх параметрів, що впливають на показники хімічного процесу, необхідно виконати велике число розрахунків на

ЕОМ. У лабораторній роботі рекомендується обмежитися у якості керуючих параметрів найбільш істотними – середньою температурою зовнішнього теплоносія в міжтрубному просторі, температурою на вході в каталізатор і швидкістю газової суміші в трубках, приймаючи інші незмінними у всіх варіантах.

Розрахунок процесів, що протікають в трубчастому реакторі, проводиться з використанням програми «Трубчастий ректор», що входить до складу програмного комплексу COMPLEX. Система рівнянь (5.1–5.11) вирішується методом прогонки. Початкові дані записуються у виділені вікна панелі, а при переході до розрахунку нового варіанту необхідно виправити значення тільки тих величин, які змінюються. Результати розрахунку виводяться на екран дисплея. Можливий запис результатів на диск, але для цього необхідно вказати ім'я файлу.

Отримані результати розрахунку на ЕОМ шару каталізатора в трубках дозволяють однозначно визначити всі основні технологічні параметри трубчастого реактора – склад і температуру суміші на вході в апарат, довжину трубок і час контакту в трубчастій частині, швидкість реакційної суміші в трубках з каталізатором, середню температуру зовнішнього теплоносія, що подається в міжтрубний простір для відведення тепла реакції, склад і температуру реакційної суміші на виході з трубок з каталізатором, безрозмірні характеристики хімічного процесу: ступінь перетворення, селективність і вихід цільового продукту. Ці дані використовуються на подальших етапах проектування технологічної схеми і самого реактора.

3 МЕТОДИКА ВИКОНАННЯ РОБОТИ

1. Перед початком розрахунків необхідно вибрати розмір зерен каталізатора для трубчастої частини. При цьому потрібно використати співвідношення:

$$4 \leq D_{mp}/D_z \leq 6 \quad (5.12)$$

2. Спочатку вибір параметрів потрібно провести, орієнтуючись на обмеження по допустимій для даного каталізатора температурі (T_{max}). Максимальна температура в трубці, так звана температура "гарячої точки" ($T_{г.т.}$), повинна бути близькою до допустимої (T_{max}), але не перевищувати її. Найбільший вплив на $T_{г.т.}$ при фіксованих діаметрі трубки і розмірі зерна каталізатора надає інтенсивність тепловідводу в зоні реакції, що визначається середньою температурою зовнішнього теплоносія в міжтрубному просторі (T_x). Два-три наближення дозволяють підібрати T_x , при якій температура "гарячої точки" виявляється досить близькою до допустимої температури, але не перевищує її.

3. Після підбору температури теплоносія, встановити необхідний час контакту для трубчастого реактора. При цьому необхідно домогтися одночасного виконання наступних обмежень: по ступеню перетворення і по гідравлічному опору реактора. Якщо остання умова не виконується,

вибирають іншу лінійну швидкість реакційної суміші в трубках і всю серію розрахунків, починаючи з підбору температури теплоносія, доводиться повторювати.

За результатами розрахунків на ЕОМ для всіх прийнятних варіантів визначити концентрації компонентів в реакційній суміші і її температуру на виході з трубчастої частини. Розрахунок кожного наступного варіанту треба виконувати, проаналізувавши результати попереднього. Якщо внаслідок аналізу отриманих результатів вдається знайти декілька варіантів, що задовольняють вище названим умовам і обмеженням, перевагу потрібно віддати тому з них, для якого вихід продукту, тобто добуток селективності на ступінь перетворення, на виході з реактора виявиться найбільшим.

4. Розрахувати величину параметричної чутливості по каналах $T_{г.т.} - T_{хл.}$, $T_{г.т.} - T_{вх}$ і $T_{г.т.} - \omega$ при зміні вхідної температури і температури холодоагенту в інтервалі $\pm(3-5)^{\circ}\text{C}$, лінійній швидкості $\pm(0,1-0,2)$ м/с. Методика визначення параметричної чутливості викладена в лабораторній роботі №1.

4 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі по лабораторній роботі повинні бути описані: мета роботи, короткі теоретичні відомості, хід виконання роботи згідно з приведеною методикою, усі виконані розрахунки з висновками по кожному варіанту.

У протоколі повинні бути побудовані графіки зміни температури, ступеня перетворення і селективності від часу контакту для трубчастого реактора.

5 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

1. Охарактеризувати конструкцію трубчастого реактора, умови роботи і його температурне поле.
2. Математична модель, що описує каталітичний процес в трубчастій частині реактора.
3. Як проводиться вибір параметрів трубчастої частини?
4. Охарактеризуйте вплив наступних параметрів на показники роботи трубчастого реактора: температура холодоагенту; лінійна швидкість; температура на вході.
5. Фізичне значення наступних параметрів: адіабатичний розігрів, ступінь перетворення, селективність, вихід продукту.
6. Параметрична чутливість трубчастого реактора

6 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Початкові дані приведені в табл. 4.1 і 4.2 (лабораторна робота №4). Додаткові дані приведені в табл. 5.1.

Таблиця 5.1 – Початкові дані

Група 1			Група 2		
№ вар.	Внутрішній діаметр трубки, м	Діапазон температури Холодоагенту, °С	№ вар.	Внутрішній діаметр трубки, м	Діапазон температури холодоагенту, °С
1	0,020	240 – 285	1	0,022	230 – 285
2	0,022	235 – 275	2	0,024	235 – 290
3	0,024	230 – 270	3	0,026	235 – 275
4	0,027	225 – 265	4	0,028	220 – 270
5	0,030	220 – 260	5	0,030	225 – 265
6	0,024	230 – 280	6	0,020	235 – 285
7	0,027	220 – 270	7	0,024	225 – 275
8	0,021	235 – 280	8	0,021	235 – 285
9	0,022	235 – 290	9	0,025	235 – 275
10	0,024	235 – 275	10	0,028	230 – 270
11	0,027	220 – 270	11	0,022	225 – 270
12	0,030	220 – 260	12	0,030	220 – 265
13	0,024	230 – 280	13	0,018	230 – 285
14	0,027	220 – 270	14	0,021	225 – 270
15	0,021	235 – 280	15	0,027	230 – 270
16	0,022	225 – 280	16	0,020	235 – 280
17	0,024	235 – 275	17	0,026	225 – 275
18	0,018	240 – 290	18	0,016	240 – 295
19	0,020	230 – 280	19	0,028	230 – 270
20	0,022	230 – 290	20	0,024	230 – 280
21	0,024	230 – 280	21	0,020	230 – 285
22	0,026	220 – 280	22	0,026	220 – 260
23	0,018	240 – 290	23	0,018	240 – 285
24	0,022	230 – 280	24	0,026	235 – 285
25	0,021	230 – 280	25	0,022	240 – 280

Початкові дані, загальні для всіх варіантів:

Ступінь перетворення на виході з реактора, %	96, – 97,5
Перепад тиску в реакторі, МПа	0,03
Діапазон лінійних швидкостей, що рекомендується, м/с	1,3 – 2,2
Пористість шару каталізатора, частки	0,4 – 0,42
Діапазон температур на вході в реактор, °С	160 – 190
Максимальна температура в трубці, °С	не більше за 365 °С
Можливо використати зерна каталізатора діаметром, мм	3; 4; 5; 6

6 Лабораторна робота №6. Моделювання комбінованого каталітичного реактора за допомогою прикладних програм

1 МЕТА РОБОТИ:

- провести розрахунки полів концентрацій компонентів і температури у двох шарах каталізатора комбінованого реактора для окислення метанолу в формальдегід, користуючись готовими прикладними програмами;
- аналізуючи отримані результати, визначити технологічні параметри для обох шарів каталізатора комбінованого реактора.

2 ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

У комбінованому каталітичному реакторі каталізатор розташований двома шарами. Перший, по рушенню газового потоку, шар знаходиться в трубках трубчастої частини реактора. Через стінки трубок здійснюється відведення (для екзотермічних процесів) або підведення (для ендотермічних процесів) тепла за допомогою зовнішнього теплоносія, що подається в міжтрубний простір. Безпосередньо після трубчастої частини газова суміш поступає на полицю з адіабатичним шаром каталізатора, де хімічний процес проходить без теплообміну з навколишнім середовищем. Схема такого реактора приведена на рис. 6.1а, а графік зміни температури в шарах каталізатора – на рис. 6.1б.

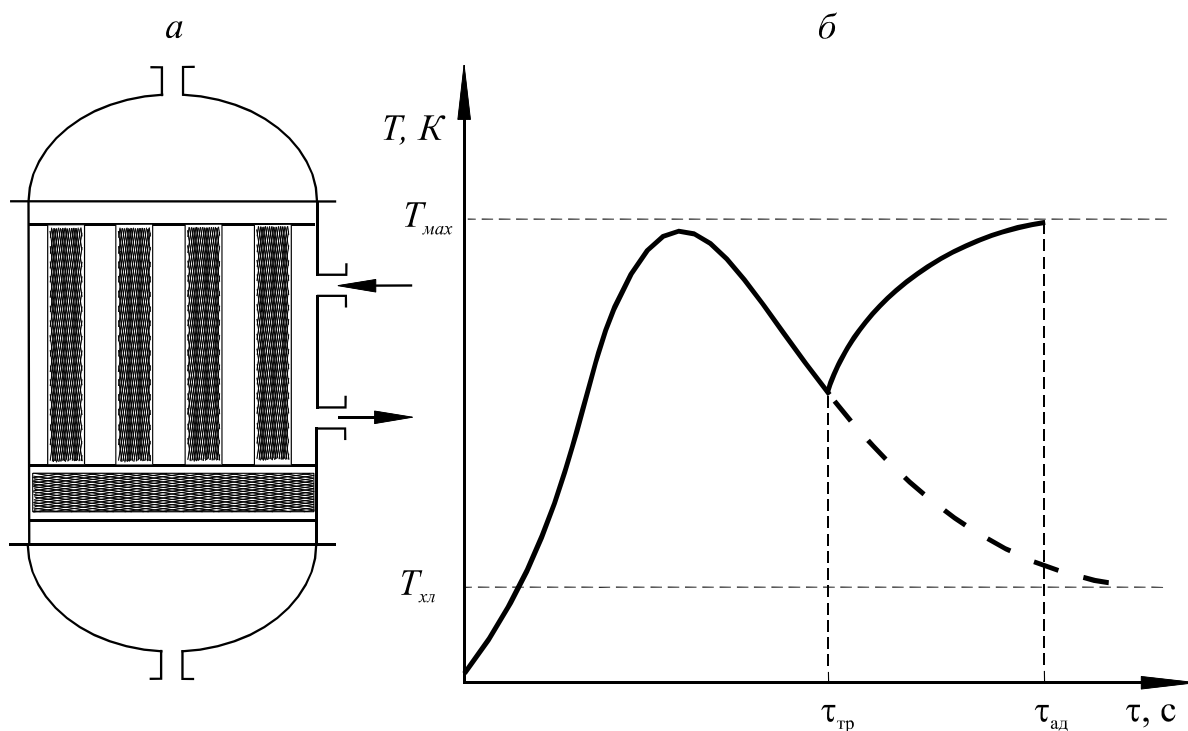


Рис. 6.1 – Моделювання процесу окислення метанолу в формальдегід в комбінованому реакторі: а – схема реактора, б – залежність зміни температури від часу

Як видно з рис. 6.1б заключна частина хімічного процесу в адіабатичному шарі проходить при більш високій температурі, ніж в тому випадку, якби він доводився до того ж ступеня перетворення в більш довгій трубчастій частині (показано – – –). Цим пояснюється основна перевага комбінованого реактора для процесу окислення метанолу в формальдегід – умови проведення процесу ближче до теоретично оптимальних і, як наслідок, більш висока селективність хімічного процесу, а отже, і більш високий вихід цільового продукту.

При розрахунку параметрів каталітичних шарів комбінованого реактора використовуються відповідні математичні моделі процесу для трубчастого реактора і для шару, працюючого в адіабатичних умовах. З описом математичних моделей і прикладних програм «Трубчастий реактор» і «Адіабатичний реактор», що входять до складу програмного комплексу COMPLEX, треба ознайомитися в методичних вказівках до лабораторних робіт №№ 4, 5.

Отримані результати розрахунку на ЕОМ шару каталізатора в трубках і адіабатичного шару дозволяють однозначно визначити всі основні технологічні параметри комбінованого реактора: температуру суміші на вході в апарат, довжину трубок і час контакту в трубчастій частині, швидкість реакційної суміші в трубках з каталізатором, середню температуру зовнішнього теплоносія, що подається в міжтрубний простір для відведення тепла реакції, час контакту для адіабатичного шару, склад і температуру реакційної суміші на виході з трубок з каталізатором і на виході з реактора, безрозмірні характеристики хімічного процесу – ступінь перетворення, селективність і вихід цільового продукту. Ці дані використовуються на подальших етапах проектування технологічної схеми і самого реактора.

3 МЕТОДИКА ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Розрахунок комбінованого реактора проводиться роздільно, спочатку для трубчастої частини, а потім для адіабатичної. Методика розрахунку трубчастого реактора, що проводиться по програмі «Трубчастий реактор», описана в лабораторній роботі № 5.

1. Вибрати розмір зерен каталізатора для трубчастої частини. При цьому потрібно використати співвідношення (5.12).

2. Аналогічно трубчастому реактору для трубчастої частини комбінованого реактора підібрати температуру в міжтрубному просторі ($T_{\text{хл}}$), при якій температура "гарячої точки" виявляється досить близькою до допустимої температури, але не перевищує її.

3. Після підбору температури теплоносія, встановити час контакту для трубчастої частини комбінованого реактора. Оскільки правильність вибору часу контакту і пов'язаної з ним довжини трубки можна оцінити за результатами розрахунку адіабатичного шару каталізатора, на цьому етапі звичайно зупиняються на декількох варіантах, для яких ступінь перетворення

входить в заданий діапазон в трубчастій частині реактора (0,86 – 0,92). Крім того, ухвалюючи рішення про можливі довжини трубки з каталізатором, треба врахувати обмеження по гідравлічному опорі реактора. Для трубчастої частини, де зосереджено гідравлічний опір каталізатора всього апарату, можна прийняти умову

$$\Delta P_{тр} < (0,9 - 0,95) \Delta P_p$$

де $\Delta P_{тр}$ і ΔP_p – гідравлічний опір трубчастої частини і реактора загалом. Якщо ця умова не виконується, вибирають іншу лінійну швидкість реакційної суміші в трубках і всю серію розрахунків, починаючи з підбору температури теплоносія, доводиться повторювати.

4. За результатами розрахунків на ЕОМ для всіх прийнятних варіантів з різною довжиною трубок визначають концентрації компонентів в реакційній суміші і її температуру на виході з трубчастої частини. Ці параметри використовують як початкові величини для подальшого розрахунку адіабатичного шару по програмі «Адіабатичний реактор».

Методика розрахунків полів концентрацій і температури для адіабатичного шару комбінованого реактора аналогічна визначенню умов проведення процесу в останньому шарі каталізатора для багатошарового адіабатичного реактору (див. лабораторній роботі № 4).

4 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі по лабораторній роботі повинна бути описана мета роботи, короткі теоретичні відомості, хід виконання роботи згідно з приведеною методикою, всі виконані розрахунки з висновками по кожному варіанту. Розрахунки потрібно описувати стисло, наприклад, у вигляді таблиці з наборами початкових даних для кожного з них і аналізом отриманих результатів. У протоколі повинні бути побудовані графіки зміни температури, ступеня перетворення і селективності від часом контакту для реактора в цілому.

5 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

1. Охарактеризувати конструкцію комбінованого реактора, умови роботи і температурне поле двох його шарів каталізатора.
2. Математичні моделі, що описують каталітичний процес в трубчастій та адіабатичній частинах комбінованого реактора.
3. Як проводиться вибір параметрів трубчастої частини?
4. Технологічні вимоги, що пред'являються до адіабатичного шару каталізатора.
5. У якого типу реакторах можна найкращим образом реалізувати теоретично оптимальний температурний режим для реакції $A \rightarrow B \rightarrow D$ для випадку, коли $E_1 > E_2$.

6 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Початкові дані приведені в табл. 4.1, 4.2 до лабораторної роботи № 4 і в табл. 5.1 до лабораторної роботи № 5.

Початкові дані, загальні для всіх варіантів:

Температура парово-газової суміші на вході в реактор	(170 – 190) ⁰ С
Гранична допустима температура:	
в трубках	365 ⁰ С
в адіабатичному шарі	355 ⁰ С
Можливо використати зерна каталізатора діаметром, мм	
в трубках	3; 4; 5; 6
в адіабатичному шарі	2; 3; 4
Ступінь перетворення метанолу в реакторі	≥0,992
Інтервал ступеня перетворення метанолу на виході з трубчастої частини	0,86 – 0,92
Швидкість газу в трубках (перше наближення)	1,8 м/с
Допустимий гідравлічний опір реактора	0,03 МПа

7 Лабораторна робота №7. Розрахунок кожухотрубчатих теплообмінників за допомогою прикладних програм

1 МЕТА РОБОТИ:

- використовуючи прикладні програми, провести перевірочний розрахунок теплообмінника і визначити запас поверхні теплообміну.

2 ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

При виконанні курсових і дипломних проектів доводиться вирішувати, принаймні, два типи задач, пов'язаних з проектуванням теплообмінної апаратури: вибір теплообмінного апарату з серії типових для конкретної технологічної схеми і перевірочний розрахунок апарату в зв'язку із зміною технологічних параметрів процесу.

У першому випадку спочатку виконується завчасний розрахунок, а потім перевірочний, а у другому – тільки перевірочний розрахунок. Для перевірочного аналізу використовується алгоритм вибору критеріальних рівнянь для конкретних умов теплопередачі і розрахунку параметрів по цих рівняннях. При цьому, як правило, використовується метод послідовних наближень.

Використання ЕОМ різних типів при розрахунку теплообмінних апаратів дозволяє звільнити студента від громіздких одноманітних розрахунків, дозволяє прораховувати велику кількість варіантів і визначати оптимальні конструктивні параметри теплообмінників.

Програмний комплекс TEP1.EXE дозволяє розраховувати теплообмінники типу ТН, ТК, ХН, КН, КК, а також типу "труба в трубі".

3 МЕТОДИКА ВИКОНАННЯ РОБОТИ

3.1 Попередній розрахунок теплообмінника

Попередній розрахунок теплообмінника виконується по стандартній методиці. Необхідні початкові дані можна знайти в книзі Павлов К.Ф., Романков П.Г., Носков А.А. "Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии" або в інших довідниках.

Методику попереднього розрахунку розглянемо на наступному прикладі: "Вибрати теплообмінник для нагріву бензину (ж) від 20°C до 100°C при витраті 25 т/годину. Коефіцієнт теплопередачі прийняти по довіднику згідно з режимом."

1. Спочатку необхідно вибрати зовнішній теплоносій і режим теплопередачі. Для нагрівання бензину від 20°C до 100°C вибираємо найбільш економічний теплоносій – гріюча водяна пара низького тиску (0,3–0,5 МПа). У розрахунку приймаємо температуру конденсації пари 150°C. Бензин, що нагрівається направляємо в трубки, а пару, що конденсується – в міжтрубний простір. По області застосування підходить теплообмінник типу Т (ТН або ТК).

2. Температурна схема:

20 → 100 – бензин в трубках
150 ← 150 – пара в міжтрубному просторі

Різниця температур

$$\Delta t_{\bar{\delta}} = 130$$

$$\Delta t_{\bar{m}} = 50$$

Середня різниця температур

$$\Delta t_{cp} = \frac{\Delta t_{\bar{\delta}} - \Delta t_{\bar{m}}}{2,3 \lg \Delta t_{\bar{\delta}} / \Delta t_{\bar{m}}} = 83,81 K$$

3. Тепловий потік визначають по витраті теплоти на нагрів бензину

$$Q = G_{\bar{\delta}} \cdot C_{\bar{\delta}} \cdot (T_{\bar{\delta}к} - T_{\bar{\delta}н}) = 25 \cdot 1000 / 3600 \cdot 1,84 \cdot (100 - 20) = 1022 \text{ кВт}$$

Витрата сухої гріючої пари з урахуванням 5% втрат теплоти

$$G_n = Q \cdot 1,05 / r = 1022 \cdot 1,05 / 2149,5 = 0,499 \text{ кг/с} = 1,8 \text{ т/ч,}$$

де $r = 2149,5$ кДж/кг – теплота пароутворення води при 150°C.

4. Для вибраного режиму теплопередачі коефіцієнт теплопередачі рівний

120–340 Вт/(м²·К), тому можна вважати, що поверхня теплопередачі знаходиться в межах (по формулі $F = Q / (K \cdot \Delta t_{cp})$)

$$\text{мінімум } F = 1022 \cdot 1000 / (340 \cdot 83,81) = 35,8 \text{ м}^2$$

$$\text{максимум } F = 1022 \cdot 1000 / (120 \cdot 83,81) = 101,6 \text{ м}^2$$

5. По довіднику (с. 211) можна запропонувати теплообмінники з трубами 25×2 мм з різною кількістю труб на один хід. Для більш точного вибору розрахуємо швидкість бензину в трубках. Об'ємна витрата бензину

$$V_6 = G_6 / \rho = 25 \cdot 1000 / 820 = 30,5 \text{ м}^3/\text{ч} = 0,00847 \text{ м}^3/\text{с}$$

Для ефективної роботи теплообмінника необхідно забезпечити турбулентний режим течії бензину при $Re > 10000$, тому швидкість повинна бути більшою, ніж

$$\min w = 10000 \cdot \mu_6 / (d_{\text{вн}} \cdot \rho_6) = 10000 \cdot 0,00019 / (0,021 \cdot 820) = 0,11 \text{ м/с},$$

де $\mu_6 = 0,00019 \text{ Па} \cdot \text{с}$ – динамічна в'язкість бензину (по гексану) при 80°C . У довідниках рекомендується швидкість рушення рідини 0,5–2,5 м/с. На цій основі перетин труб на один хід повинен бути в межах:

$$\min S = V_6 / 2,5 = 0,00339 \text{ м}^2, \quad \max S = V_6 / 0,11 = 0,077 \text{ м}^2$$

При площі перетину трубки $S_{\text{тр}} = 0,000346 \text{ м}^2$ це відповідає 8 і 222 трубкам.

6. Тепер по довіднику можна вибрати:

- одноходові з d_k 400мм $F = 35$ і 52 м^2 (111 труб на один хід)
- двоходові з d_k 400мм $F = 47 \text{ м}^2$ (50 труб на один хід)
- чотирьохходові з d_k 600мм $F = 49, 65, 98 \text{ м}^2$ (52,5 труб на хід)
- чотирьохходові з d_k 800мм $F = 64, 96 \text{ м}^2$ (102 труби на хід) і ін.

Вибираємо одноходовий апарат, як більш простий з $F = 52 \text{ м}^2$, тому що $F = 35 \text{ м}^2$ відповідає максимальному значенню K .

3.2 Перевірочний розрахунок теплообмінника

Перевірочний розрахунок теплообмінника проводиться з використанням комплексу програм "TEPL.EXE", що дозволяє провести розрахунок теплообмінників декількох типів. Вибір відповідної програми здійснюється відповідно до прийнятого режиму теплопередачі. Для розрахунку необхідно увести відповідні вихідні дані. Умовам теплопередачі у прикладі відповідає програма CALFPI.

Програма CALFTI

Ця програма дозволяє розрахувати теплообмінник у тих випадках, коли агрегатний стан теплоносіїв не змінюється. Використовувані в розрахунку позначення величин наступні:

Характеристика теплоносія в трубному просторі

Q1	об'ємна витрата	$\text{м}^3/\text{с}$
G1	масова витрата	кг/з
T1H	початкова температура	К
T1K	кінцева температура	К
RO1	густина	кг/м^3
DM1	в'язкість	$\text{Па} \cdot \text{с}$
AL1	теплопровідність	$\text{Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$

C1	питома теплоємність	Дж/(кг·К)
-----------	---------------------	-----------

Характеристика теплоносія в міжтрубному просторі

Q2	об'ємна витрата	м ³ /с
G2	масова витрата	кг/с
T2H	початкова температура	К
T2K	кінцева температура	К
RO2	густина	кг/м ³
DM2	в'язкість	Па·с
AL2	теплопровідність	Вт/(м·К)
C2	питома теплоємність	Дж/(кг·К)

Характеристики теплообмінника

F	площа поверхні	м ²
NT	число трубок	шт
DH	зовнішній діаметр трубок	м
DEL	товщина стінок трубок	м
TL	довжина трубок	м
DK	внутрішній діаметр кожуха	м
ST	крок між трубками	м
NP	число перегородок	шт
NX	число ходів	шт
SUMR	сумарний термічний опір забруднень	м ² ·К/Вт
KT	коефіцієнт, що визначає напрямок руху теплоносіїв.	

З чотирьох величин **Q1**, **Q2**, **G1** і **G2** повинна бути задана яка-небудь одна. Останнім спочатку привласнюють значення 0 і вони потім обчислюються в процесі виконання розрахунків по рівнянню теплового балансу.

При відсутності перегородок у міжтрубному просторі вводиться **NP=0**, при відомому значенні числа перегородок вводиться їхнє число. Якщо задано **NP=1**, число перегородок розраховується, виходячи з відстані між ними рівному 0,4 м.

Для визначення обраного напрямку руху теплоносіїв використовується коефіцієнт **KT**. Для прямогоку **KT=0**, для противотоку **KT=1**.

Програма CALFP1

Ця програма призначена для виконання розрахунків конденсаторів і парових підігрівників з повною конденсацією пари в міжтрубному просторі. Потік рідини або газу направляється в трубки. У розрахунках використовуються наступні позначення величин:

Характеристика теплоносія в міжтрубному просторі

GP	витрата пари	кг/с
TP	температура пари	К
RP	питома теплота конденсації пари	Дж/кг

Властивості конденсату при температурі плівки:

ROW	густіть	кг/м ³
DMW	в'язкість	Па·с
LAMW	теплопровідність	Вт/(м·К)

Характеристика теплоносія в трубному просторі

QR	об'ємна витрата рідини (газу)	м ³ /с
GR	масова витрата рідини	кг/с
THR	початкова температура	К
TKR	кінцева температура	К

Властивості рідини при середній температурі:

ROR	густина	кг/м ³
DM	в'язкість	Па·с
LAMR	теплопровідність	Вт/(м·К)
CR	питома теплоємність	Дж/(кг·К)

Конструктивні характеристики теплообмінника

F	площа поверхні	м ²
NT	число трубок	шт
DTH	зовнішній діаметр трубок	м
DL	довжина трубок	м
DEL	товщина стінки трубок	м
NX	число ходів	шт
PROVP	теплова провідність забруднень стінок трубки з боку пари	Вт/(м ² ·К)
PROVR	те ж, з боку рідини	Вт/(м ² ·К)
KR	коефіцієнт для визначення розташування теплообмінника.	

З трьох величин **GP**, **GR** і **QR** повинна бути задана яка-небудь одна. Іншим спочатку привласнюють значення 0 і вони потім обчислюються при виконанні розрахунків по рівнянню теплового балансу. Для визначення розташування апарата в просторі використовується коефіцієнт **KR**. Для вертикальних теплообмінників **KR**=0, для горизонтальних **KR**=1.

Програма CALFP2

Ця програм призначена для виконання розрахунків конденсаторів і парових підігрівників з повною конденсацією пари в трубному просторі. Потік рідини або газу направляється в трубки. Використовувані в розрахунку позначення величин:

Характеристика теплоносія в трубному просторі

GP	витрата пари	кг/с
TP	температура пари	К
TPL	прийнята температура плівки конденсату	К
RP	питома теплота конденсації пари	Дж/кг

Властивості конденсату при температурі плівки:

ROW	густина	кг/м ³
DMW	в'язкість	Па·с
LAMW	теплопровідність	Вт/(м·К)

Характеристика теплоносія в міжтрубному просторі

QR	об'ємна витрата рідини (газу)	м ³ /с
GR	масова витрата рідини	кг/с
THR	початкова температура	К
TKR	кінцева температура	К

Властивості рідини при середній температурі:

ROR	густина	кг/м ³
DM	в'язкість	Па·с
LAMR	теплопровідність	Вт/(м·К)
CR	питома теплоємність	Дж/(кг·К)
TSR	прийнята середня температура рідини	К

Конструктивні характеристики теплообмінника

F	площа поверхні	м ²
NT	число трубок	шт
DTH	зовнішній діаметр трубок	м
DL	довжина трубок	м
DEL	товщина стінки трубок	м
NX	число ходів	шт
PROVP	теплова провідність забруднень стінок трубки з боку пари	Вт/(м ² ·К)
PROVR	те ж, з боку рідини	Вт/(м ² ·К)
KR	коефіцієнт для визначення розташування теплообмінника.	

З трьох величин **GP**, **GR** і **QR** повинна бути задана яка-небудь одна. Іншим спочатку привласнюють значення 0 і вони потім обчислюються при виконанні розрахунків по рівнянню теплового балансу. Для визначення розташування апарата в просторі використовується коефіцієнт **KR**. Для вертикальних теплообмінників **KR=0**, для горизонтальних **KR=1**.

Програма "Підконтактний теплообмінник"

Ця програма дозволяє розрахувати підконтактний теплообмінник реактора, у якому реакційна суміш охолоджується вихідною газовою сумішшю. Особливість розрахунку таких теплообмінників полягає в тім, що витрата суміші, що проходить по трубному і міжтрубному просторах однаковий. Програму можна використовувати для газових сумішей, теплофізичні властивості яких близькі до властивостей повітря.

Використовувані в розрахунку вихідні дані:

Зовнішній діаметр трубки	м
Товщина стінки трубки	м
Крок між трубками	м
Діаметр кожуха апарата	м
Відстань між перегородками в міжтрубному просторі	м
Масова подача газової суміші	кг/год
Початкова температура вихідної суміші	°C
Кінцева температура вихідної суміші	°C
Початкова температура охолоджуваного теплоносія	°C
Надлишковий тиск на вході в реактор	МПа
Надлишковий тиск на виході	МПа

У програмах визначаються теплове навантаження і витрата теплоносія по рівнянню теплового балансу, розраховуються рушійна сила процесу теплопередачі і значення коефіцієнтів тепловіддачі і теплопередачі, визначається запас поверхні теплопередачі.

З аналізу отриманих результатів вибирається необхідний теплообмінник.

4 ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Вибрати типовий теплообмінник загальнопромислового призначення за наступним даними:

Таблиця 7.1 – Вихідні дані

№	Речовина	Режим	Витрата, т/год	Температура, С		Тиск, МПа
				Початкова	кінцева	
1	Бензин (р)	Нагрів	15	20	160	0,1
2	Бензин (р)	Охолодження	25	120	60	0,1
3	Метан (г)	Охолодження	12	140	60	0,1
4	Метан (г)	Нагрів	12	20	250	0,1
5	Ацетон (п)	Конденсація	10	56	56	0,1
6	Диетіловий ефір (п)	Конденсація	2.5	34	34	0,2
7	Метанол (п)	Конденсація	12	65	65	0,1
8	Повітря (г)	Нагрів	15	20	140	0,1
9	Водень (г)	Нагрів	6	20	160	0,1
10	Толуол (п)	Конденсація	15	111	111	0,1
11	Бензол (п)	Конденсація	16	80	80	0,1
12	Гас (р)	Охолодження	20	140	60	0,1
13	Гас (р)	Нагрів	16	20	160	0,1
14	Анілін (р)	Охолодження	18	140	60	0,1
15	Гас (р)	Нагрів	8	60	260	0,1
16	Нітробензол (р)	Нагрів	1.5	45	85	0,1
17	Ізопропанол (р)	Охолодження	10	110	50	0,1
18	Водень (г)	Охолодження	16	440	160	0,1
19	Оксид вуглеводу	Нагрів	10	20	250	0,1
20	CCl ₄ (п)	Конденсація	10	76	76	0,1
21	Етанол (п)	Конденсація	17	78	78	0,1
22	Бензол (п)	Конденсація	12	80	80	0,1
23	Хлор (г)	Нагрів	12	20	160	0,1
24	Аміак (г)	Нагрів	6	20	200	0,1

8 Лабораторна робота №8. Моделювання і розрахунок підконтактного теплообмінника трубчатого реактора окислення метанолу

1 МЕТА РОБОТИ:

провести розрахунки підконтактного теплообмінника трубчатого реактора окислення метанолу за допомогою прикладних програм.

2 ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

Основною причиною великої похибки традиційного методу розрахунку поверхневого теплообмінника є відсутність обліку впливу на коефіцієнти тепловіддачі (α_1 і α_2), а отже, і на коефіцієнт теплопередачі (K) температур стінок. Температури стінок трубки з обох сторін не бувають задані і самі залежать від інтенсивності встановленого процесу теплопередачі.

У практиці моделювання та розрахунку теплообмінної апаратури на ЕОМ широко поширений метод, в якому коефіцієнти тепловіддачі (α_1 , α_2) і коефіцієнт теплопередачі K обчислюють за усередненими для всієї поверхні теплообміну значенням температур стінки T_{c1} і T_{c2} , що визначаються ітераційно. На рис. 8.1 приведена блок-схема алгоритму ітераційного розрахунку теплообмінника за усередненими уздовж поверхні теплообміну параметрам.

У зв'язку з тим, що теплоємності теплоносіїв і, відповідно, коефіцієнти тепловіддачі істотно залежать від температур теплоносіїв і поверхонь стінок, алгоритм розрахунку теплообмінників за усередненими параметрами теплообміну можна застосовувати лише у випадках невеликих змін температур теплоносіїв в теплообміннику.

Зазначений недолік усувається в так званому поінтервальному методі розрахунку теплообмінної апаратури. Суть методу зводиться до наступного. Найвний діапазон зміни температури одного з теплоносіїв ($T_{1\text{поч}} - T_{1\text{кін}}$ або $T_{2\text{поч}} - T_{2\text{кін}}$) розбивають на деяке число інтервалів, таких що в межах кожного інтервалу можна було вважати температури теплоносіїв і стінок незмінними. У межах першого інтервалу температура цього теплоносія згідно зробленим допущенням може бути прийнята постійною, а температуру другого теплоносія на кінці першого інтервалу можна легко визначити з рівняння теплового балансу. Тепер до першого інтервалу може бути застосований алгоритм розрахунку теплообміну за усередненими параметрами. Для нього ітераційно розраховують температури стінок, а потім значення параметрів теплопередачі (теплове навантаження q_i , коефіцієнт теплопередачі K_i , рушійну силу теплопередачі $\Delta t_{\text{ср},i}$) і площу поверхні теплообміну F_i , що забезпечує передачу частини кількості теплоти на першому інтервалі.

Далі таким же чином послідовно розраховують другий і наступні інтервали зміни температури теплоносія аж до $T_{\text{кін}}$. Отримані для кожного інтервалу значення теплообмінних поверхонь підсумовують, що дає повну

необхідну площу поверхні теплообмінника при заданих температурах теплоносіїв на кінцях теплообмінника.

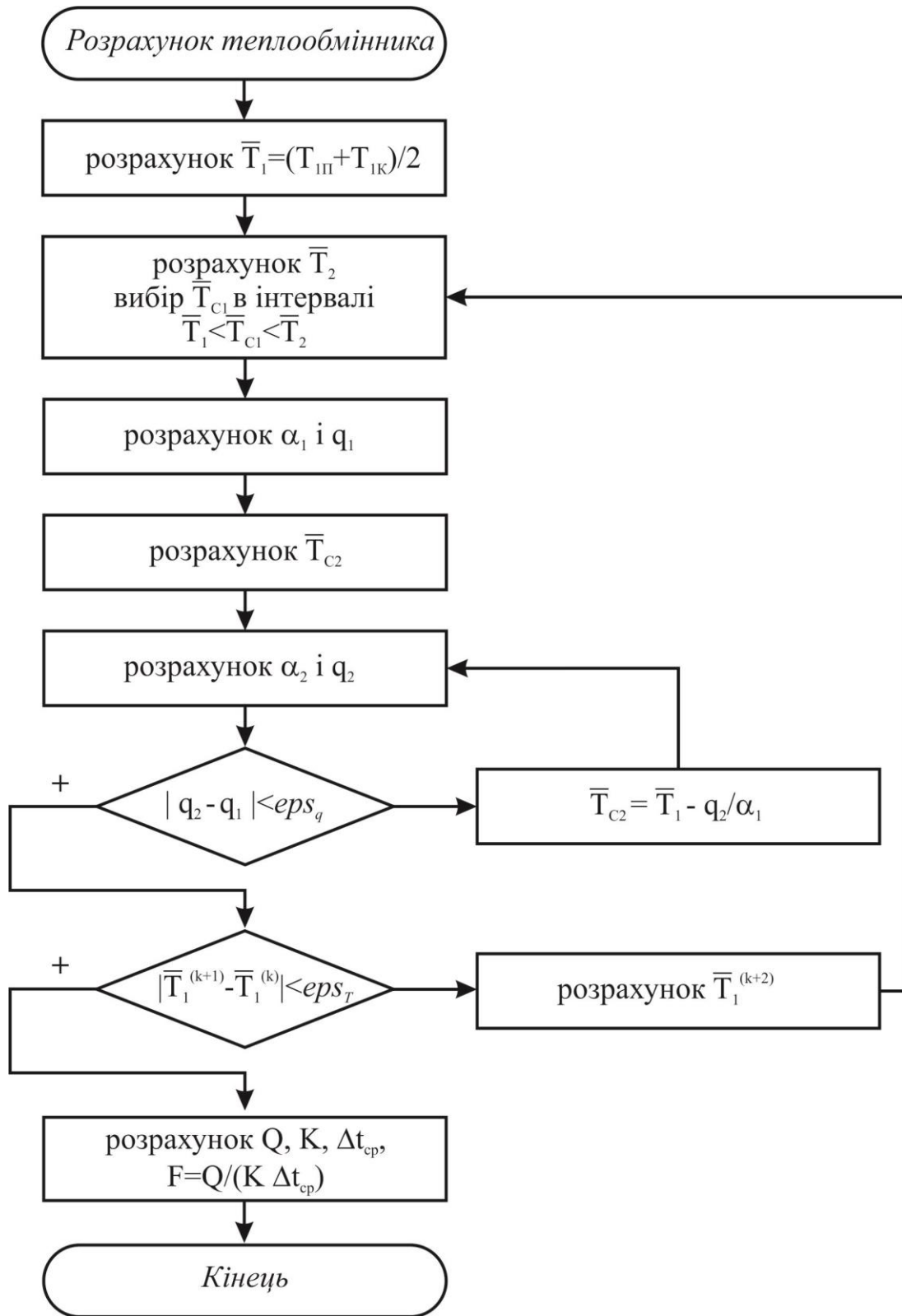


Рис. 8.1 – Блок-схема алгоритму розрахунку теплообмінника по усереднюючим в напрямку поверхні параметрам теплообміну

Програма «Підконтактний теплообмінник» складена за алгоритмом поінтервального розрахунку з ітераційним методом визначення параметрів процесу і поверхні теплопередачі на кожному інтервалі. У програмі задається інтервал температур холодної суміші на вході і виході підконтактного теплообмінника $T_{1\text{поч}} - T_{1\text{кін}}$ (де: $T_{1\text{поч}} = T_0$ – початкова температура вихідної суміші і $T_{1\text{кін}} = T_{\text{вх}}$ – температура на виході теплообмінника, що дорівнює температурі входу в реакційну частину) ділиться на 100 інтервалів.

3 МЕТОДИКА ВИКОНАННЯ РОБОТИ

Трубочастий реактор складається з двох частин: верхньої каталітичної і нижньої теплообмінної (підконтактного теплообмінника). Їх розміри розраховують в такій же послідовності.

1. Для каталітичної частини після виконання технологічного розрахунку реактора в лабораторній роботі «Моделювання трубчастого реактора для процесу окислення метанолу на окисних каталізаторах» вже відомі основні розміри: внутрішній діаметр трубки ($d_{\text{вн}}$, м), її довжина ($L_{\text{тр}}$, м). Залишаються невідомими кількість трубок для заданої продуктивності і діаметр корпусу.

При відомій лінійній швидкості реакційної суміші в трубках (ω , м/с) конструктивний розрахунок починають з визначення необхідного повного перетину трубчастої каталітичної частини по об'ємній подачі вихідної суміші в реактор (V_0 , м³/с) і лінійній швидкості:

$$S = V_0 / \omega \quad (8.1)$$

Об'ємну подачу вихідної суміші в реактор обчислюють, знаючи концентрацію метанолу на вході в реактор, по мольній швидкості подачі метанолу (F_M , моль/с):

$$V_0 = F_M / C_M \quad (8.2)$$

Мольну швидкість подачі метанолу (F_M) знаходять по додатково заданому в лабораторній роботі навантаженні реактора по метанолу (G_M , кг/с), використовуючи молекулярну масу метанолу.

Необхідну кількість трубок з каталізатором, розраховують за співвідношенням:

$$n = S / S_{\text{тр}} \quad (8.3)$$

де $S_{\text{тр}}$ – площа перетину однієї трубки, м²:

$$S_{\text{тр}} = (\pi d_{\text{вн}}^2) / 4 \quad (8.4)$$

Внутрішній діаметр корпусу трубчастого реактора (D_p) можна розрахувати, знаючи число трубок n і їх діаметр, обумовивши розташування трубок в трубній решітці і вибравши крок між трубками (t_p , м). Наприклад, при розташуванні трубок по вершинах правильного шестикутника можна скористатися системою рівнянь:

$$\begin{aligned} D &= t_p (b-1) + 4 d_3; \\ b &= 2 a - 1; \\ n &= 3 a (a - 1) + 1; \end{aligned} \quad (8.5)$$

де $t_p = (1,3-1,5) d_3$ – крок між трубками (по осях), м; d_3 – зовнішній діаметр трубок, м; a і b – число труб відповідно на його діагоналі і на стороні найбільшого шестикутника.

При розташуванні труб по вершинах трикутника можна використовувати співвідношення:

$$n = K \cdot \pi \cdot D^2 / (3,47 \cdot t^2) \quad (8.6)$$

де $K = 0,7 \dots 0,85$.

При визначенні зовнішнього діаметра трубок d_3 товщину стінок трубок прийняти рівною 1–2 мм.

Остаточний діаметр корпусу реактора (D_p) приймають з стандартного ряду внутрішніх діаметрів апаратів: 400, 500, 600, 700, 800, 900, 1000, 1200, 1400, 1600, 1800, 2000, 2200, 2400, 2500, 2600, 2800, 3000, 3200, 3400, 3600, 3800, 4000 мм. Відповідно мінімальна товщина стінки обичайки: при діаметрі 1000–1800 мм → 10 мм, 2000–2600 мм → 12 мм, 2800–3200 → 14 мм, 3400–3800 → 18 мм, 4000 → 24 мм.

2. Розміри теплообмінної частини реактора розраховують, користуючись програмою "Підконтактний теплообмінник". Діаметр кожуха вже відомий, він дорівнює внутрішньому діаметру обичайки реактора. Масову подачу суміші визначають по об'ємній подачі вихідної суміші в реактор (V_0 , м³/с) і густини повітряної суміші ($\rho=1,29$ кг/м³). Для першого наближення задаються діаметром трубок в теплообмінній частині (для кожухотрубних теплообмінників використовують зазвичай труби ($d_n \times \delta$: 20×2, 25×2, 38×3 мм) і приймають крок між ними t_t близьким до мінімального ($1,3 d_3$), а число трубок в теплообмінній частині по рівняннях (8.5) або (8.6). Обраний діаметр трубок і прийнятий крок в подальших розрахунках уточнюють.

Температурну схему підконтактного теплообмінника складають на підставі розрахованих температур входу і виходу для трубчасті частини і заданої температури суміші на вході в теплообмінник.

Виконавши розрахунок на ЕОМ, отримують значення коефіцієнтів теплопередачі і тепловіддачі і швидкості потоків, які необхідно проаналізувати. В першу чергу оцінюється значення коефіцієнтів теплопередачі і тепловіддачі, які повинні відповідати звичайним значенням відповідних величин для аналогічних умов.

Обов'язково оцінюються конструктивні розміри теплообмінних частини, тобто правильність вибору довжини трубок, яка конструктивно пов'язана з числом перегородок в міжтрубному просторі і діаметром штуцера на трубопроводі подачі суміші в міжтрубний простір.

Якщо в міжтрубному просторі перегородки відсутні, то повинна виконуватися умова:

$$L_t \geq 2,5 \cdot D_{шт}, \quad (8.7)$$

де $D_{шт}$ – стандартний діаметр трубопроводу для подачі вихідної суміші, м.

Значення $D_{шт}$ визначається по допустимим лінійним швидкостям руху суміші в трубопроводах:

$$D_{шт} = \sqrt{\frac{4 \cdot V_0}{\pi \cdot W_{доп}}} \quad (8.8)$$

Розраховану величину діаметра штуцера округляють до стандартного значення умовного проходу трубопроводу для подачі суміші. Допустима лінійна швидкість $w_{доп}$ приймається в наступних межах: для газів 10–15 м/с, для водяної пари – до 20 м/с, для рідин – до 5 м/с.

Якщо в міжтрубному просторі встановлені перегородки, то відстань між перегородками h повинна задовольняти умові:

$$h \geq 1,2 \cdot D_{шт} \quad (8.9)$$

Розрахована загальна довжина трубок теплообмінника L_T повинна відповідати умові, де N – число перегородок.

$$L_T = (N+1) \cdot h \quad (8.10)$$

Для виконання умов (8.7 або 8.9, 8.10) в підконтактному теплообміннику можна варіювати діаметр трубок і крок між ними. При зміні кроку необхідно врахувати, що існує обмеження тільки на мінімальний крок між трубками $t_{г} \geq (1,3-1,5) \cdot d_3$, де d_3 – зовнішній діаметр трубок в теплообмінній частині, м.

4 ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ, ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Навантаження реактора по метанолу $G_M = 0,4 + 0,1 \cdot B$ (т/год), де B – номер варіанта. Початкова температура суміші так 60°C для групи 1, 70°C для групи 2.

У протоколі лабораторної роботи наводять результати розрахунку підконтактного теплообмінника, їх оцінку і схему реактора з встановленими розмірами обох частин.

Додаткові вихідні дані:

Результати розрахунку трубчатого реактору за індивідуальними завданнями лабораторної роботи №5.

5 КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

1. Ітераційний алгоритм визначення температур стінок теплообмінної поверхні.
2. Алгоритм поінтервального методу розрахунку теплообмінників.
3. Вхідні, вихідні та управляючі параметри теплообмінника, як об'єкта моделювання
4. Аналіз результатів розрахунку теплообмінника.
5. Методика визначення, перевірки і уточнення довжини трубок в підконтактному теплообміннику.

Перелік рекомендованої літератури

1. Комп'ютерні системи проектування. Теорія і практика./ Ред.: М.В. Лобур. – Л.: Львів- Політехніка. 2004. –183 с
2. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высш. шк., 1991. – 399 с.
3. Яворський В.Т. Загальна хімічна технологія: Підручник / В.Т. Яворський, Т.В. Перекупко, Л.В. Савчук. – Львів: Видавництво Національного університету “Львівська політехніка”, 2005. – 552 с.
4. Царева З.Н., Орлова Е.И. Теоретические основы химической технологии. – К.: Вища школа, 1986. – 271 с.
5. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. – М.: Химия, 1982. – 288 с.
6. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии – М.: Химия, 1985.
7. Кафаров В.В., Перов В.Л., Мешалкин В.П. Принципы математического моделирования химико-технологических систем. – М.: Химия, 1974. – 312 с.
8. Приклади та задачі за курсом «Процеси та апарати хімічної технології» : навч. посібник / Л. Л. ТОВАЖНЯНСЬКИЙ, В. О. Лещенко, А. П. Готлінська та ін.; за ред. Л. Л. ТОВАЖНЯНСЬКОГО ; Нац. техн. ун-т «Харків. політехн. ін-т». — Харків : НТУ «ХП», 2010. — 479 с.
9. Павлов К.Ф., Романков П.Г., Носков А.А. Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии. – Л.: Химия, 1981.