

Міністерство освіти і науки України
ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ "ОДЕСЬКА ПОЛІТЕХНІКА"

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
до курсової роботи по курсу
"МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ОБ'ЄКТІВ
В ХІМІЧНІЙ ТЕХНОЛОГІЇ"
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 курсової роботи по курсу "Математичне моделювання та оптимізація об'єктів в хімічній технології" 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. – 37 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 курсової роботи по курсу "Математичне моделювання та оптимізація об'єктів в хімічній технології"
Частина 1. В методичних вказівках надані рекомендації стосовно структури роботи, вибору математичної моделі каталітичного хімічного реактору та методів оптимізації показників процесу, а також пояснення роботи та інтерфейсу оригінальних прикладних програм, що використовуються для розрахунків за індивідуальними завданнями. Методичні вказівки призначено для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія.

ЗМІСТ

ВСТУП -----	4
1 СТРУКТУРА КУРСОВОЇ РОБОТИ -----	4
2 ВИБІР МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ -----	6
3 ВИКОНАННЯ РОЗРАХУНКІВ НА ПЕОМ -----	6
4 РОЗРАХУНОК КАТАЛІТИЧНИХ РЕАКТОРІВ ДЛЯ ПРОЦЕСУ ОКИСЛЮВАННЯ МЕТАНОЛА У ФОРМАЛЬДЕГІД-----	6
4.1 Реактор з адіабатичним шаром каталізатору -----	8
4.2 Трубчастий реактор -----	10
4.3 Комбінований реактор -----	11
4.4 Приклад виконання розрахунків комбінованого реактору -----	12
5 ПОЛІПШЕННЯ ТЕХНІКО-ЕКОНОМІЧНИХ ПОКАЗНИКІВ ПРОЦЕСУ окислювання метанолу в формальдегід-----	15
5.1 Можливі шляхи поліпшення показників процесу -----	16
5.2 Розрахунок першого варіанту оптимізації комбінованого реактору ----	17
5.3 Розрахунок другого варіанту оптимізації комбінованого реактору ----	19
5.4 Розрахунок третього варіанту оптимізації-----	20
6 РОЗРАХУНОК ПАРАМЕТРИЧНОЇ ЧУТЛИВОСТІ -----	21
7 РОЗРАХУНОК МАТЕРІАЛЬНОГО БАЛАНСУ СХЕМИ УСТАНОВКИ ОДЕРЖАННЯ ФОРМАЛІНУ -----	24
7.1 Розрахунок матеріального балансу для базового варіанту -----	26
7.2 Розрахунок матеріального балансу поліпшеного варіанту-----	27
8 РОЗРАХУНОК КОНСТРУКТИВНИХ РОЗМІРІВ РЕАКТОРА І ІНШИХ АПАРАТІВ -----	28
8.1 Розрахунок конструктивних розмірів реактора -----	29
8.2 Розрахунок конструктивних розмірів підконтактного теплообмінника	30
8.3 Розрахунок реактора для базового варіанту-----	31
8.4 Розрахунок підконтактного теплообмінника для базового варіанту----	33
8.5 Розрахунок реактора для поліпшеного варіанту -----	34
8.6 Розрахунок підконтактного теплообмінника для поліпшеного варіанту	35
ПЕРЕЛІК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ -----	37

ВСТУП

Курсову роботу присвячено розрахунку і вибору основних технологічних і конструктивних характеристик апаратів хіміко-технологічної схеми конкретного виробництва, а також визначенню показників функціонування даної ХТС. Виконуючи дану роботу, студенти проводять основні розрахунки на ЕОМ, користуючись програмними модулями розрахунків за математичними моделями основних типів хімічних реакторів, а також інших апаратів і хіміко-технологічних схем.

У процесі виконання курсової роботи вирішуються дві задачі. Перша – розрахунок і аналіз показників роботи окремих апаратів і схеми в цілому при заданих їхніх характеристиках. Друга полягає в розробці та обґрунтуванні пропозицій по поліпшенню техніко-економічних показників хіміко-технологічної схеми.

Ознайомившись із сучасними методами проектування хімічних апаратів і хіміко-технологічних схем, студенти закріплюють навички практичного застосування законів хімічної кінетики, гідродинаміки, тепло- і масообміну, методів обчислювальної математики, а також банку прикладних програм в інженерних розрахунках, навчаються аналізувати та узагальнювати отримані результати при рішенні проектних задач.

Курсова робота виконується по індивідуальним завданням.

1 СТРУКТУРА КУРСОВОЇ РОБОТИ

При виконанні курсової роботи студенту необхідно:

- розглянути хіміко-технологічну схему, вивчити математичні моделі, що описують процеси в окремих апаратах схеми, ознайомитися з необхідними прикладними програмами;
- по вихідним даним, виданим у завданні, розрахувати показники роботи окремих апаратів і схеми в цілому (базовий варіант);
- розробити пропозиції і визначити умови проведення процесу з метою одержання кращих техніко-економічних показників хіміко-технологічної схеми, чим у базовому варіанті.

Курсова робота оформляється у виді пояснювальної записки відповідно до вимог, прийнятих в ОНПУ.

Пояснювальна записка повинна містити в собі: титульний лист; завдання на проектування; зміст; введення; теоретичні основи процесу і опис технологічної схеми [1–6]; математичні моделі апаратів [7–10], характеристику розрахункових методів, алгоритмів і використаних прикладних програм; основну частину – розрахунки базового і поліпшених варіантів із докладним аналізом отриманих результатів і обґрунтуванням запропонованих рішень; визначення параметричної чутливості; розрахунок обсягів каталізатора, основних конструктивних характеристик реактора і підконтактного теплообмінника для базового і поліпшеного варіантів; висновок; список використаних джерел; додатки (по необхідності). У теоретичних основах

процесу повинні бути обов'язково висвітлені такі питання: хімізм процесу, використовувані каталізатори, кінетика процесу і теоретично оптимальний режим. У тексті основної частини, що розбивається на розділи і підрозділи, докладно описуються результати розрахунків показників роботи реактора і схеми для кожного з розглянутих варіантів реалізації процесу, їхній аналіз, порівняння і аргументація рішень, що вибираються, на всіх етапах проектування, приводяться технологічна схема установки, схема реактора, графіки зміни температури і ступеня перетворення від часу контакту по каталізатору для базового і обраного варіантів.

При описі розрахунків і вибору умов здійснення каталітичного процесу не потрібно призводити рекомендації з методичних вказівок, а конкретно показати в тексті пояснювальної записки, як і з якою ціллю змінювалися управляючі параметри – температура входу ($T_{вх}$) для адіабатичного шару, температури холодоагенту ($T_{хл}$) і входу ($T_{вх}$), лінійної швидкості потоку (ω) – для шару каталізатора в трубці. Основні результати розрахунків на ЕОМ приводяться в таблицях. Проте приведення одних таблиць недостатньо. У тексті пояснювальної записки обов'язково повинні бути пояснені отримані результати і прийняті в результаті аналізу рішення.

Після одержання результатів розрахунків проводиться їхній аналіз, у результаті якого виконують розрахунки зі зміненими вхідними параметрами або остаточно вибирають параметри роботи шару каталізатора. Свій вибір необхідно аргументувати, використовуючи в кожному випадку той або інший принцип вибору (усі вони описані в методичних вказівках), приводячи в тексті необхідні для цього значення параметрів і їхні порівняння з обмеженнями.

Наприклад, при описі вибору параметрів роботи останнього шару в адіабатичному реакторі або адіабатичного шару в комбінованому реакторі потрібно довести, що виконується умова досягнення максимального виходу по цільовому продукту (або концентрації формальдегіду) при урахуванні обмеження по температурі виходу з шару. Так знаходять оптимальну ступінь перетворення, її значення може бути поза заданим обмеженням для реактора.

У випадку трубчастого реактора оптимальний ступінь перетворення знаходять у заданому інтервалі, порівнюючи вихід формальдегіду декількох розрахунків для різних ступенів перетворення.

Наприкінці розділу приводяться висновки, що підкреслюють найбільш важливі технологічні параметри і розміри каталітичного шару, що встановлено на кожному етапі розрахунків.

При поясненні отриманих результатів по оптимізації реактора для обраних значень d_3 , $d_{тр}$, числа шарів і т.д. варто ґрунтуватися на теорії процесу, порівнюючи теоретично оптимальний профіль із побудованими графіками залежностей температури і ступеня перетворення від часу контакту по каталізатору для базового та обраного варіантів.

Графічна частина – схема реактора з розмірами і графіки зміни температури, ступеня перетворення від часу контакту для базового і обраного варіантів реактора – виконується на листі формату А1. На листі може бути

розташована блок-схема використовуваної прикладної програми. Обсяг пояснювальної записки – 25–40 аркушів.

2 ВИБІР МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ

Математична модель, що описує процес у реакторі того або іншого типу, повинна враховувати тільки основні фізико-хімічні процеси, що роблять найбільш істотний вплив на характеристики процесу в цілому. Математичні моделі, що описують різноманітні типи апаратів, приведені в [7–10]. Наприклад, при розрахунку стаціонарного режиму в нерухомому, адіабатично працюючому, шарі каталізатора для випадку, коли діаметр реактора більше висоти шару каталізатора, звичайно враховується перенос речовини і теплоти за рахунок потоку і їхня зміна за рахунок хімічного перетворення. Для опису процесу в трубчастому реакторі необхідно враховувати ще і перенос теплоти через стінку трубки до теплоносія та виникаючий за рахунок цього перенос речовини та теплоти у радіальному напрямку.

У пояснювальній записці повинна бути приведена конкретна математична модель для даного реактору з відповідними рівняннями кінетики, початковими і граничними умовами, обмеженнями.

3 ВИКОНАННЯ РОЗРАХУНКІВ НА ПЕОМ

Для виконання розрахунків на ПЕОМ використовується програмний комплекс “COMPLEX1.EXE”, що включає в себе такі програми:

- “Адіабатичний реактор”;
- “Трубчастий реактор”;
- “Підконтактний теплообмінник”;
- “Схема”.

COMPLEX1.EXE – програмний комплекс, призначений для розрахунку трубчастого і адіабатичного реакторів процесу одержання формальдегіду з метанолу на окисних каталізаторах, для розрахунку підконтактного теплообмінника інтервальним методом і самої схеми виробництва ітераційним методом.

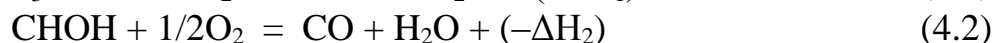
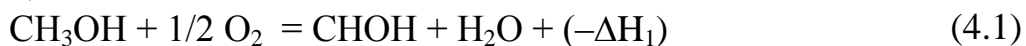
Даний програмний комплекс знаходиться в директорії LABS.

У пояснювальній записці повинно бути приведений докладний опис програм, що використовувались в роботі: математична модель, використаний розрахунковий метод, алгоритм рішення або блок-схема, вхідні та вихідні параметри.

4 РОЗРАХУНОК КАТАЛІТИЧНИХ РЕАКТОРІВ ДЛЯ ПРОЦЕСУ ОКИСЛЮВАННЯ МЕТАНОЛА У ФОРМАЛЬДЕГІД

Розрахунок каталітичних реакторів проводиться на прикладі процесу окислювання метанолу у формальдегід на окисному залізо-молібденовому

каталізаторі. У даному процесі протікають дві послідовні, практично необоротні реакції:



Енергія активації першої реакції (4.1) помітно більше, чим другої (побічної) (4.2). Для цього випадку теоретично оптимальним режимом є ізотермічний режим при максимально припустимій температурі. Тому в реальних реакторах необхідно підібрати такі умови проведення процесу, що дозволили б максимально наблизитися до теоретично оптимального режиму. Для окисного залізо-молібденового каталізатора припустимий температурний діапазон роботи – 210–365°C. Гранично припустима температура по термостійкості каталізатора складає 380°C.

Ціллю розрахунку каталітичного реактора є вибір таких технологічних і конструктивних його параметрів, при яких для заданих обмежень досягається максимальний вихід цільового продукту.

Спрощена схема одержання формальдегіду окислюванням метанолу на окисних каталізаторах зображена на рис. 4.1.

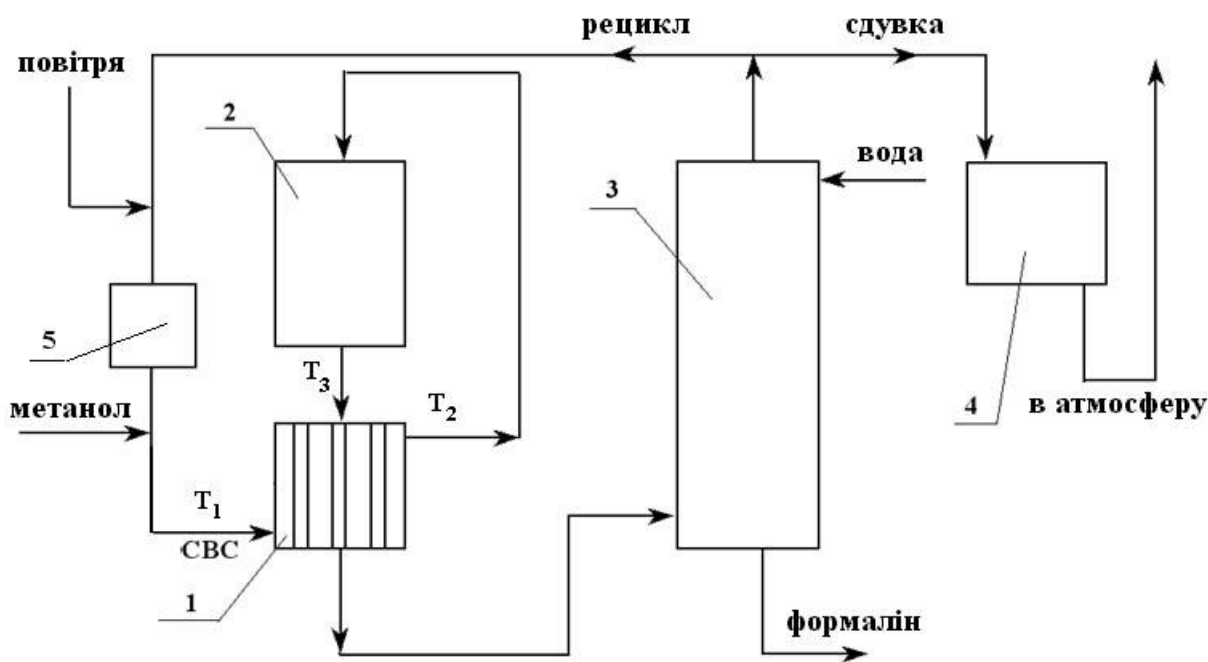


Рис. 4.1 – Спрощена схема одержання формальдегіду окислюванням метанолу на окисних каталізаторах: 1 – підконтактний теплообмінник; 2 – реактор; 3 – абсорбер; 4 – реактор каталітичного очищення; 5 – компресор; T_1 – початкова температура вихідної суміші ($\geq 80^\circ\text{C}$); T_2 – кінцева температура вихідної суміші; T_3 – температура на вході в трубки підконтактного теплообмінника

Свіже повітря розбавляють газом, що рециркулює. Це дозволяє знизити вибухонебезпечність сумішей повітря з метанолом і довести вміст в газі до 10–12% (об.). В отриману суміш після компресора 5 подають метанол.

Отримана спиртово-повітряна суміш подається в підконтактний теплообмінник 1, де нагрівається до необхідної температури і надходить на вхід у реактор 2. Гарячі реакційні гази після реактора віддають тепло вихідній суміші в підконтактному теплообміннику і надходять в абсорбер 3, зрошуваний водою, що поглинає формальдегід з утворенням 37%-ого формаліну.

Частина газу, що відходить з абсорбера, надходить на рециркуляцію, а інша кількість проходить реактор каталітичного очищення 4 і скидається в атмосферу.

Отримані результати розрахунків на ЕОМ процесу в шарі каталізатора дозволяють однозначно визначити всі основні технологічні параметри – склад і температуру суміші на вході в апарат, час контакту для адіабатичного шару, 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.

4.1 РЕАКТОР З АДІАБАТИЧНИМ ШАРОМ КАТАЛІЗАТОРУ

Реактор з адіабатичним шаром каталізатора може бути одношаровим або мати декілька послідовно розташованих шарів. У останньому випадку частина теплоти, що виділяється в результаті хімічної реакції, знімається в міжшаровому просторі одним із відомих засобів – подачею “холодного” байпасу або в проміжних теплообмінниках.

Вихідна газова суміш надходить на полку з адіабатичним шаром каталізатора, де хімічний процес проходить без теплообміну з навколишнім середовищем. На виході з шару температура не повинна перевищувати максимально припустимої за умовами термостійкості для даного каталізатора.

Для багатшарового реактора з метою рівномірної роботи шарів каталізатора процес у більшості випадків доцільно проводити так, що б ступінь перетворення в кожному з шарів була приблизно однакова:

$$X_i = X_{\text{заг}} / n . \quad (4.3)$$

Число необхідних шарів каталізатора можна визначити по формулі:

$$n = \Delta T_{\text{ад}} / \Delta T_{\text{пр}} , \quad (4.4)$$

де $\Delta T_{\text{ад}}$ – температура адіабатичного розігріву; $\Delta T_{\text{пр}} = T_{\text{макс}}^{\text{доп}} - T$ – обрана зміна температури в одному шарі каталізатора.

У курсовій роботі для реактора із трьома шарами каталізатора рекомендуються наступні ступені перетворення на виході: $X_1 = 0,34-0,345$; $X_2 = 0,685-0,69$; $X_3 \geq 0,992$. Для чотирьох шарів: $X_1 = 0,255-0,26$; $X_2 = 0,505-0,51$; $X_3 = 0,755-0,76$; $X_4 \geq 0,992$.

У технічних розрахунках адіабатичний розігрів процесу

$$\Delta T_{\text{ад}} = - \frac{\Delta H_p \cdot C_0}{C_p \cdot \rho} , \quad (4.5)$$

де ΔH_p – зміна ентальпії реакції, кДж/моль; C_0 – початкова концентрація вихідного компонента на вході в реактор при $X = 0$ моль/м³; C_p – питома теплоємність суміші, кДж/(кг·К); ρ – густина суміші, кг/м³. Для процесу окислювання метанолу у формальдегід $\Delta H_p=160$ кДж/моль; $C_p=1,01$ кДж/(кг·К); $\rho=1,29$ кг/м³.

Для розрахунку стаціонарних режимів у шарі каталізатора для даного процесу використовується модель ідеального витиснення. З описом математичної моделі можна ознайомитися в [9, 10]. Моделювання процесу в шарі каталізатора, що працює в адіабатичному режимі, проводиться з використанням програми “Адіабатичний реактор”.

Розрахунок багат шарового реактора здійснюють послідовно. Спочатку розраховують перший шар таким чином. Обирається одна з вхідних характеристик у якості управляючої, і розраховуються поля температур і концентрацій у шарі для декількох значень цього параметра. Можна рекомендувати в якості управляючого параметра для адіабатичного шару каталізатора температуру на вході в шар. Для скорочення числа розрахунків можна використовувати такий спосіб. Задається орієнтований час контакту явно більше, ніж потрібно по технологічним умовам. Після проведення розрахунків на ЕОМ аналізуються поля температур і концентрацій усіх варіантів, і вибирається мінімальний час контакту, що забезпечує необхідні вихідні параметри – ступінь перетворення, селективність, температуру. У тому випадку, якщо для заданих ступенів перетворення на виході з шару температура перевищує максимально припустиму або навпаки – набагато менше припустимої, необхідно відповідно зменшити або збільшити $T_{вх}$ з відповідним коригуванням значення часу контакту і повторно виконати розрахунок на ЕОМ.

Розрахунки наступних шарів виконуються аналогічно. Значення вхідних параметрів у другому і наступних шарах визначається по вихідних параметрах попереднього шару з урахуванням особливостей обраного засобу відводу теплоти між шарами каталізатора.

Час контакту і умови проведення процесу в останньому шарі каталізатора вибирають по максимальному виходу цільового продукту з урахуванням обмежень по максимальній припустимій температурі. У роботі обов'язково необхідно довести, що вдалося досягти максимуму по виходу цільового продукту або по концентрації формальдегіду. Тільки таким способом вирішується задача вибору оптимального часу контакту і ступеня перетворення в реакторах такого типу.

Якщо в результаті аналізу отриманих результатів вдасться знайти декілька варіантів, що задовольняють вищезгаданим умовам і обмеженням, то перевагу варто віддати тому з них, для якого вихід продукту, тобто добуток селективності на ступінь перетворення, на виході з реактора виявиться найбільшим.

4.2 ТРУБЧАСТИЙ РЕАКТОР

У трубчастому каталітичному реакторі каталізатор розташовано у трубках. Через стінки трубок здійснюється відвід (для екзотермічних процесів) або підвід (для ендотермічних процесів) тепла за допомогою зовнішнього теплоносія, що подається в міжтрубний простір.

Для моделювання процесу в трубчастому реакторі використовується двохпараметрична дифузійна математична модель [9,10].

На показники роботи трубчастого реактора помітний вплив роблять багато параметрів. Використовуючи для проектування таких реакторів програму “Трубчастий реактор”, рекомендується в якості управляючих параметрів прийняти середню температуру зовнішнього теплоносія $T_{\text{хл}}$, температуру суміші на вході в каталізатор $T_{\text{вх}}$, швидкість суміші в трубках ω_0 , внутрішній діаметр трубки $d_{\text{тр}}$, ефективний діаметр зерна каталізатора d_3 , склад вихідної суміші, тобто початкові концентрації компонентів C_{i0} . Довжина трубок задається орієнтовно і остаточно вибирається в ході розрахунків.

Приступаючи до розрахунку, потрібно перевірити, щоб обрані діаметри трубки зерна каталізатора задовольняли умові – поле швидкостей у трубці було достатньо однорідним:

$$6 \leq d_{\text{тр}}/d_3 \leq 4 \quad (4.6)$$

Тому в курсовій роботі обмежують число параметрів, що підбирається, приймаючи деякі незмінними (на підставі завдання або за узгодженням із керівником). Спочатку краще вибирати параметри по температурі “гарячої точки” – максимальній температурі в трубці для екзотермічних процесів $T_{\text{г.т.}}$, що повинна бути близькою до максимально припустимої за умовами роботи каталізатора $T_{\text{макс}}^{\text{доп}}$. Для скорочення числа розрахунків доцільно зробити так. Наприклад, при виборі температури теплоносія виконують два розрахунки при крайніх значеннях із заданого діапазону. По отриманих парах значень $T_{\text{хл}}-T_{\text{г.т.}}$ інтерполяцією знаходять значення $T_{\text{хл}}$, при якому максимальна $T_{\text{г.т.}}$ дорівнює $T_{\text{макс}}^{\text{доп}}$, і використовують цю температуру теплоносія для наступного наближення. Два-три наближення дозволяють достатньо точно підібрати температуру теплоносія. На температуру $T_{\text{г.т.}}$ в меншому ступені впливає температура суміші на вході в каталізатор.

Після добору температури теплоносія визначають час контакту, що забезпечує необхідні значення параметрів на виході з реактора.

У тому випадку, якщо при обраному часі контакту гідравлічний опір $\Delta P_{\text{тр}}$ не відповідає заданому ΔP_3 , то вибирають іншу лінійну швидкість реакційної суміші і всі серії розрахунків, починаючи з добору температури теплоносія, потрібно повторити. Тому варто звернути увагу на гідравлічний опір реактора, що відповідає заданим ступеням перетворення, починаючи з перших розрахунків.

При розрахунку трубчастого реактора варто визначити час контакту, що забезпечує при заданих обмеженнях мінімальне і максимальне значення ступеня перетворення, зазначеного в завданні на проектування, і вибрати з них

той, при якому досягається більший вихід формальдегіду. Таким чином можливо частково вирішити задачу вибору оптимальних параметрів (ступінь перетворення, час контакту, довжина шару каталізатора).

У остаточному обраному варіанті максимальна температура в трубці повинна бути близька до припустимої, гідравлічний опір реактора не більше заданого, а час контакту i , відповідно, довжина трубки, при яких досягається оптимальний ступінь перетворення, по можливості меншим.

4.3 КОМБІНОВАНИЙ РЕАКТОР

У комбінованому каталітичному реакторі каталізатор розташований двома шарами. Перший по прямованню газового потоку шар знаходиться в трубках трубчастої частини реактора. Через стінки трубок здійснюється відвід (для екзотермічних процесів) або підвід (для ендотермічних процесів) тепла за допомогою зовнішнього теплоносія, що подається в міжтрубний простір. Безпосередньо після трубчастої частини газова суміш надходить на полку з адіабатичним шаром каталізатора, де хімічний процес проходить без теплообміну з навколишнім середовищем. При такій конструкції реактора заключна частина хімічного процесу в адіабатичному шарі проходить при більш високій температурі, чим у тому випадку, якби він доводився до того ж ступеня перетворення в більш довгій трубчастій частині. Цим пояснюється основна перевага комбінованого реактора для даного процесу – 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, що працює в адіабатичних умовах. З описом математичних моделей і прикладних програм, що реалізують ту або іншу математичну модель можна ознайомитися в [10].

При розрахунку трубчастої частини комбінованого реактора використовують ту ж методику, що і для трубчастого (див. підрозділ 4.2). Відмінність полягає в тому, що необхідний ступінь перетворення на виході з трубчастої частини нижче, чим у трубчастому реакторі. Час контакту, необхідний для досягнення заданих параметрів на виході з трубчастої частини, визначають так. Після добору параметрів процесу в трубчастій частині реактора по обмеженнях ($T_{г.т.} \leq T_{\max}^{\text{доп}}$; $P_{\text{тр}} \leq (0,9-0,97)\Delta P_{\text{доп}}$) вибирають декілька значень часу контакту, при яких ступінь перетворення входить у заданий діапазон ступенів перетворення в трубчастій частині $X_{\text{тр}} = 0,86 - 0,92$. Для всіх обраних таким способом вихідних перетинів трубки оцінюють температуру на виході з адіабатичного шару каталізатора:

$$T_{\text{вих}} = T_{\text{вх}} + \Delta T_{\text{ад}} \cdot X_{\text{ад}} \quad (4.7)$$

де $T_{\text{вх}}$ – температура на вході в адіабатичний шар (у даному випадку середня температура відповідного вихідного перетину трубки), °С; $\Delta T_{\text{ад}}$ – адіабатичний розігрів, °С; $X_{\text{ад}}$ – зміна ступеня перетворення в адіабатичному шарі: $X_{\text{ад}} = X_{\text{р}} -$

$X_{тр}$, X_p – заданий ступінь перетворення на виході з реактора; $X_{тр}$ – ступінь перетворення на виході з трубчастої частини.

Вибирається той час контакту для трубчастої частини, при якому параметри процесу забезпечують температуру на виході з адіабатичного шару, близьку до максимально допустимої. Параметри процесу в обраному перетині, а також у двох сусідніх розглядаються як вихідні для адіабатичного шару каталізатора. Для цих варіантів проводиться розрахунок у шарі на ЕОМ.

Час контакту в адіабатичному шарі каталізатора для складних процесів вибирають виходячи з двох умов – досягнення заданого ступеня перетворення і максимального виходу цільового продукту – аналогічно останньому шару в адіабатичному реакторі (дивися рекомендації для вибору параметрів останнього шару адіабатичного реактора розділ 4.1).

4.4 ПРИКЛАД ВИКОНАННЯ РОЗРАХУНКІВ КОМБІНОВАНОГО РЕАКТОРУ

Таблиця вихідних даних

1	Продуктивність по формаліну, тис.т/рік	100
2	Ступінь перетворення на виході, % з трубчастої частини з адіабатичного шару	$\approx 92,0$ $\geq 99,2$
3	Діапазон лінійних швидкостей, м/с	1,3 – 2,2
4	Пористість шару каталізатора, частки у трубчастій частині в адіабатичному шарі	0,41 – 0,42 0,39 – 0,41
5	Тиск на виході апарата, МПа	0,13
6	Перепад тиску в реакторі, Мпа	0,03
7	Діапазон температур на вході, °С	160 – 190
8	Максимальна температура, °С у трубчастій частині в адіабатичному шарі	не більш 365 355
9	Діаметр зерен каталізатора, мм у трубчастій частині в адіабатичному шарі	5 5
10	Концентрації компонентів, моль/м ³ : метанолу формальдегіду пар води кисню	3,07 0,00 1,20 4,35
11	Співвідношення $d_{тр}/d_3$, (у трубчастій частині)	$4 \leq d_{тр}/d_3 \leq 6$
12	Діаметр реактора, не більш, м	3,6
13	Внутрішній діаметр трубки, м	0,025
14	Діапазон температур теплоносія, °С	240–270
15	Число трубок у реакторі, шт.	≤ 8000

4.4.1 Розрахунок базового варіанту

Спочатку визначалися показники роботи трубчастої частини комбінованого реактора. Як управляючі параметри для трубчастої частини були обрані середня температура зовнішнього теплоносія $T_{\text{хл}}$ і швидкість суміші в трубках ω .

Перед розрахунком перевіряємо, щоб обрані діаметри трубки і зерна каталізатора задовольняли умові (4.6). При заданому діаметрі трубки 0,025 м і обраному розмірі зерна каталізатора 0,005 м умова виконується – $d_{\text{тр}}/d_3 = 5$.

Приймаємо температуру на вході в реактор рівною 180°C, пористість шару каталізатора у трубчастій частині 0,41, гідравлічний опір $\Delta P_{\text{тр}}=0,029$ МПа. Результати розрахунків приведені в табл. 4.1.

Таблиця 4.1 – Результати розрахунків трубчастої частини

№ вар.	ω	$T_{\text{хл}}$	$T_{\text{гт}}$	X	Sel	τ_k	ΔP
1	2,0	240	284,0	0,428	–	–	0,029
2	2,0	270	395,7	0,956	–	–	0,029
3	2,0	265	380,7	0,931	–	–	0,029
4	2,0	260	363,8	0,887	–	–	0,029
5	1,95	259	363,8	0,907	–	–	0,029
6	1,89	258	364,5	0,923	–	0,452	0,029

Розрахунок почали з $\omega = 2,0$ м/с при довжині трубки $L = 1,2$ м. Спочатку були виконані два розрахунки при крайніх значеннях із заданого діапазону по температурі теплоносія (варіант 1 та 2). У першому варіанті температура в гарячій точці була дуже низкою, а в другому – значно перевищувала припустиму. У наступних розрахунках зменшили діапазон зміни температури теплоносія $T_{\text{хл}}$. Встановили, що при $T_{\text{хл}} = 265^\circ\text{C}$ температура в гарячій точці дістає значення $T_{\text{гт}} = 380,7^\circ\text{C}$, що також перевищує припустиме значення (варіант 3), а при $T_{\text{хл}} = 260^\circ\text{C}$ температура в гарячій крапці дорівнює значення $T_{\text{гт}} = 363,8^\circ\text{C}$ (варіант 4). Однак, у цьому варіанті ступінь перетворення не досягає значення, що рекомендується – 0,887. Тому необхідно збільшити час контакту. Цього можна досягти або за рахунок збільшення довжини трубки (але при цьому збільшується перепад тиску), або за рахунок зменшення лінійної швидкості. Лінійну швидкість зменшуємо до 1,95 м/с і знову підбираємо температуру теплоносія $T_{\text{хл}}$. У варіанті 5 при $T_{\text{хл}} = 259^\circ\text{C}$ температура гарячої точки трохи менше припустимого значення ($T_{\text{гт}} = 363,8^\circ\text{C}$) та ступінь перетворення не досягає значення, що рекомендується – 0,907. Ще зменшуємо лінійну швидкість – до 1,89 м/с. У варіанті 6 при $T_{\text{хл}} = 258^\circ\text{C}$ досягли значення $T_{\text{гт}} = 364,5^\circ\text{C}$. Тобто температура гарячої точки наближається до припустимого значення. При цьому ступінь перетворення склала $X = 0,923$. Для цього режиму обрані 4 значення часу контакту (перетини 1–4), при яких значення ступеня перетворення попадає в інтервал, що рекомендується, і виконуються задані

обмеження – по температурі гарячої точки і перепаду тиску. Вихідні значення для кожного перетину приведені в табл. 4.2.

Для цих даних, що є вхідними для адіабатичного шару були проведені розрахунки по кожному з перетинів (табл. 4.3). У таблицю розрахунків адіабатичного шару заносилися дані при тому часі контакту, при якому концентрація формальдегіду була максимальною.

Таблиця 4.2 – Значення параметрів на виході з трубчастій частини для варіанту б табл. 4.1

№ пер.	X	τ_k	ΔP	T	C_m	C_ϕ	C_b	C_k
1	0,875	0,373	0,024	312,76	0,382	2,615	3,960	2,970
2	0,898	0,399	0,026	300,95	0,313	2,676	4,037	2,931
3	0,913	0,426	0,028	291,06	0,268	2,715	4,090	2,905
4	0,923	0,452	0,029	283,31	0,236	2,739	4,128	2,886

Таблиця 4.3 – Результати розрахунків адіабатичного шару

№ пер.	$T_{\text{вих}}$	X	Sel	τ_k	C_ϕ^{max}
1	355,6	0,975			
2	347,5	0,992	0,947	0,278	2,884
				0,320	2,883
3	335,7	0,993	0,939	0,344	2,863
				0,365	2,862
4	325,5	0,992	0,934	0,386	2,844
				0,407	2,842

Якщо при декількох значеннях часу контакту концентрація формальдегіду була однаковою, то вибирався той варіант, при якому час контакту був найменшим.

По максимальному виходу продукту і з урахуванням дотримання обмежень був обраний перетин 2 (табл. 4.3).

Проводимо матеріальний розрахунок ХТС по програмі «СХЕМА» і уточнюємо концентрацію води. Для збіжності матеріального балансу необхідно повторно розрахувати реактор з уточненою концентрацією води. $C_b = 0,605$ моль/м³. Розрахунки проводилися аналогічно попередньому випадку при лінійній швидкості 1,96 м/с і температурі теплоносія $T_{\text{хл}} = 257^\circ\text{C}$ одержали температуру в гарячій точці $T_{\text{гт}} = 365,8^\circ\text{C}$ при перепаді тиску 0,029 МПа. Таким чином, одержані вихідні параметри не перевищують припустимих меж. Для цього режиму обрані 3 значення часу контакту, при яких значення ступеня перетворення попадає в інтервал, що рекомендується. Вихідні значення для кожного часу контакту наведені у табл. 4.4

Таблиця 4.4 – Значення параметрів на виході з трубчастої частини

№ пер.	X	τ_k	T	C_m	C_ϕ	C_b	C_k	ΔP
1	0,885	0,359	311,07	0,352	2,641	3,40	2,953	0,026
2	0,906	0,385	299,14	0,287	2,698	3,473	2,916	0,028
3	0,915	0,398	292,96	0,260	2,721	3,504	2,90	0,029

Для цих даних, що є вхідними для адіабатичного шару були проведені розрахунки по кожному з перетинів (табл. 4.5).

Таблиця 4.5

Результати розрахунків адіабатичного шару

№ пер.	$T_{\text{вих}}$	X	Sel	τ_k	C_ϕ
1	356,3	0,986			
				0,268	2,880
2	344,4	0,994	0,944	0,288	2,881
				0,308	2,879
				0,288	2,867
3	335,8	0,993	0,9418	0,308	2,868
				0,328	2,866

По максимальному виходу продукту і з урахуванням дотримання обмежень був обраний перетин 2.

Розрахунок реактора з уточненою концентрацією води дав наступні параметри:

- трубчаста частина – час контакту – 0,385 с;
- ступінь перетворення – 0,906;
- адіабатичний шар – час контакту – 0,288 с;
- ступінь перетворення – 0,994;
- селективність – 0,944;
- вихід формальдегіду – 0,938.

Був проведений розрахунок матеріального балансу. Збіжність матеріального балансу досягнута. Концентрація води $C_b = 0,604$ моль/м³. Результати розрахунків матеріального балансу приведені в розділі 7.

ПОЛІПШЕННЯ ТЕХНІКО-ЕКОНОМІЧНИХ ПОКАЗНИКІВ ПРОЦЕСУ ОКИСЛЮВАННЯ МЕТАНОЛУ В ФОРМАЛЬДЕГІД

Найбільш перспективний шлях поліпшення техніко-економічних показників процесу – створення таких умов роботи реактора, при яких режим у ньому був би найбільше близький до теоретично оптимального. Наприклад, при протіканні однієї екзотермічної необоротної реакції процес доцільно проводити в ізотермічних умовах при максимально можливій температурі. Ці ж рекомендації ставляться і до випадку протікання двох послідовних необоротних реакцій у випадку, якщо енергія активації першої із них більше

другої. Для оборотної екзотермічної реакції необхідно забезпечити зменшення температури з ростом ступеня перетворення і т.д. [6–10]

5.1 Можливі шляхи поліпшення показників процесу

Для процесу окислювання метанолу в формальдегід, що складається з двох послідовних необоротних реакцій з більшою енергією активації основної реакції, оптимальним є ізотермічний режим при максимально припустимій температурі. У реакторах зазначених типів наблизитися до нього можна за рахунок зміни різноманітних параметрів. Роздивимося вплив деяких із них на показники роботи реактора.

Розмір зерна каталізатора. Процес на зерні каталізатора протікає зі значним внутрішньо дифузійним гальмуванням. Тому при зменшенні розміру зерна опір внутрішньому масопереносу знижується і зростає швидкість реакції, що спостерігається. За рахунок цього для досягнення однакових ступенів перетворення потрібно менший час контакту по каталізатору. Також при зменшенні розміру зерна зростає і селективність процесу. Все це помітно покращує техніко-економічні показники процесу. Проте, при зменшенні розміру зерна зростає, по-перше, гідравлічний опір реактора, що призводить до зростання експлуатаційних витрат, по-друге, значно зростає параметрична чутливість, що може призвести до неможливості управління процесом із використанням реальних систем автоматичного регулювання. У завданні на проектування введено ряд обмежень по використанню зерен каталізатора різноманітних розмірів.

Слід зазначити, що розмір параметричної чутливості знижується зі зменшенням концентрації метанолу. Тому у перших шарах використовують більш велике зерно, а в останніх шарах, навпаки, раціонально використовувати більш дрібне зерно каталізатора.

Внутрішній діаметр трубки. Оскільки частина теплоти, що виділяється в результаті хімічної реакції, відводиться через стінки трубки зовнішнім теплоносієм, то профіль температур по діаметру трубки має параболічну залежність. Максимальні значення температур знаходяться по осі трубки. Зі зменшенням діаметра трубки при однакових інших умовах, перепад температур по радіусу зменшується і, відповідно, знижується максимальна температура. Це дозволяє за інших рівних умов працювати при більш високих значеннях температур холодоагенту. При цьому середньо інтегральне значення температури в кожному перетині буде вище, тобто ближче до оптимальних температур здійснення процесу. Проте зменшення діаметра трубки при незмінній продуктивності спричиняє за собою збільшення загального числа трубок у реакторі. З урахуванням обмежень на їхнє число, це може призвести до збільшення числа паралельно працюючих апаратів, що ускладнить і зробить дорожчою схему.

Збільшення числа шарів для адіабатичного реактора. При фіксованих вхідних концентраціях компонентів розмір адіабатичного розігріву є постійною величиною. При збільшенні числа шарів каталізатора відповідно зменшується перепад температури в одному шарі каталізатора. Отже, при тих же обмеженнях

по температурах виходу з шарів каталізатора можна збільшувати температури на виході в кожний шар. У результаті цього, по-перше, режим буде ближче до теоретично оптимального, а по-друге, за рахунок більш високих температур процесу для досягнення тих же ступенів перетворення буде потрібно значно менший час контакту. Проте, збільшення числа шарів ускладнить та зробить дорожчим каталітичний реактор.

Для комбінованого реактору поліпшити показники роботи реактора можливо за рахунок вибору оптимального часу контакту в трубчастій частині, який забезпечить максимальні припустимі температури на виході з адіабатичного шару каталізатора.

З аналізу шляхів поліпшення техніко-економічних показників процесу випливає, що прагнення наблизитися до оптимального режиму може значно ускладнити і зробити дорожчим реактор. Тому необхідно крім урахування чисто технологічної оптимізації проводити й оптимізацію по економічних параметрах, наприклад по приведених витратах.

Нижче приведені розрахунки наступних варіантів поліпшення техніко-економічних показників процесу:

1. Діаметр трубки прийнятий рівний 20 мм при тих же розмірах зерен, – 5 мм. Для адіабатичного шару запропоновано використовувати зерно 5 мм. Для порівняння приведені результати розрахунків і при діаметрі зерна 2 мм.
2. Діаметр трубки залишається незмінним (20 мм), а розмір зерна зменшений до 4 мм.
3. Діаметр трубки прийнятий рівний 16 мм, а розмір зерна зменшений до 3 мм.

В другому і третьому варіантах розмір зерна каталізатора в адіабатичному шарі залишався рівним 2 мм.

5.2 РОЗРАХУНОК ПЕРШОГО ВАРІАНТУ ОПТИМІЗАЦІЇ КОМБІНОВАНОГО РЕАКТОРУ

Діаметр трубки – 20 мм, розмір зерна – 5 мм. Результати розрахунків трубчастої частини приведені в табл. 5.1.

Таблиця 5.1 – Результати розрахунків трубчастої частини

№ вар.	ω	$T_{хл}$	$T_{гг}$	X	Sel	τ_k	ΔP
1	2,0	272	363,0	0,926			0,029
2	2,05	274	365,7	0,924			0,029
3	2,07	274	364,7	0,920	0,968	0,348	0,029

Розрахунок проводився аналогічно базовому варіанту. Варіюючи температуру холодоагенту $T_{хл}$ і лінійну швидкість, підібрали режим, при якому виконувалися задані обмеження: по температурі гарячої точки, ступеню перетворення і перепаду тиску (варіант 3). Для цього режиму обрані 3 значення

часу контакту, при яких значення ступеня перетворення попадає в інтервал, що рекомендується (перетини 1–3). Вихідні значення для кожного часу контакту приведені в табл. 5.2

Таблиця 5.2 – Значення параметрів на виході з трубчастій частини для варіанту 3

№ пер.	X	τ_k	T	C_m	C_ϕ	C_b	C_k	ΔP
1	0,883	0,292	308,94	0,360	2,638	3,387	2,959	0,025
2	0,902	0,316	299,91	0,301	2,690	3,454	2,925	0,027
3	0,920	0,348	291,17	0,244	2,736	3,520	2,892	0,029

Для цих даних, що є вхідними для адіабатичного шару, були проведені розрахунки по кожному з перетинів, використовуючи зерно каталізатора 5 мм. (табл. 5.3).

По максимальному виходу продукту і з урахуванням дотримання обмежень був обраний перетин 2. Для цього варіанту проведені розрахунки при використанні зерна каталізатору розміром 2 мм (перетин 2). Як видно з отриманих результатів, зменшення тільки діаметру трубки (при незмінних розмірах зерен каталізатора в трубчастій частині та адіабатичному шарі) дає збільшення виходу формальдегіду на 0,2% (93,8 у базовому варіанті та 94,0, перетин 2 табл. 5.3). Якщо в адіабатичному шарі використовувати зерна каталізатору розміром 2 мм, це дає збільшення виходу формальдегіду ще на 1,0%: вихід продукту у перетин 2 (2 мм), табл. 5.3, досягає 95,0%. Тому у наступних варіантах розмір зерна каталізатора в адіабатичному шарі буде залишатися рівним 2 мм.

Таблиця 5.3 – Результати розрахунків адіабатичного шару (діаметр зерна 5 і 2 мм)

№ пер.	$T_{\text{вих}}$	X	Sel	τ	C_ϕ	Вихід
1 (5 мм)	356,2	0,988				
				0,261	2,887	
2 (5 мм)	346,0	0,993	0,947	0,276	2,888	0,940
				0,30	2,887	
				0,268	2,863	
3 (5 мм)	331,9	0,992	0,940	0,308	2,864	0,932
				0,328	2,863	
				0,134	2,919	
2 (2 мм)	343,6	0,996	0,954	0,144	2,920	0,950
				0,154	2,919	

Для першого варіанта оптимізації на виході з реактора отримані такі параметри: ступінь перетворення – 0,996; селективність – 0,954; вихід

формальдегіду – 0,950. Збільшення виходу цільового продукту в порівнянні з базовим варіантом склало 1,20%

5.3 РОЗРАХУНОК ДРУГОГО ВАРІАНТУ ОПТИМІЗАЦІЇ КОМБІНОВАНОГО РЕАКТОРУ

Діаметр трубки – 20 мм, розмір зерна – 4 мм. Розрахунок проводився аналогічно базовому варіанту. При лінійної швидкості 1,95 м/с і температурі теплоносія $T_{\text{хл}} = 259^{\circ}\text{C}$ одержали температуру в гарячій точці $T_{\text{гт}} = 365,1^{\circ}\text{C}$ при перепаді тиску 0,029 МПа. Ступінь перетворення на виході з трубчастої частини – 0,918. Для цього режиму обрані 4 значення часу контакту, при яких значення ступеня перетворення попадає в заданий інтервал (перетини 1–4). Вихідні значення для кожного часу контакту приведені в табл. 5.4

Таблиця 5.4 – Значення параметрів на виході з трубчастої частини (2 варіант)

№ пер.	X	τ_k	T	C_m	C_{ϕ}	C_b	C_k	ΔP
1	0,877	0,284	316,59	0,378	2,634	3,356	2,975	0,026
2	0,907	0,310	300,72	0,286	2,717	3,456	2,925	0,028
3	0,918	0,323	292,75	0,252	2,747	3,494	2,906	0,029
4	0,897	0,297	306,64	0,315	2,691	3,423	2,941	0,027

Для цих даних, що є вхідними для адіабатичного шару були проведені розрахунки по кожному з варіантів (табл. 5.5).

Таблиця 5.5 – Результати розрахунків адіабатичного шару (2 варіант)

№ пер.	$T_{\text{вих}}$	X	Sel	τ	C_{ϕ}	Вихід
1	356,1	0,977				
				0,131	2,931	
2	342,2	0,996	0,959	0,139	2,932	0,955
				0,155	2,931	
				0,141	2,912	
3	333,1	0,996	0,952	0,171	2,913	0,948
				0,186	2,911	
				0,123	2,944	
4	351,0	0,997	0,962	0,131	2,945	0,959
				0,139	2,944	

По максимальному виходу продукту і з урахуванням дотримання обмежень був обраний перетин 2.

Для другого варіанта оптимізації на виході з реактора отримані такі параметри: ступінь перетворення – 0,996; селективність – 0,959; вихід

формальдегіду – 0,955. Збільшення виходу цільового продукту при заміні каталізатора в трубці з 5 мм на 4 мм склало 0,5%.

Існує ще шлях до поліпшення показників роботи реактора. Це підбір такого значення часу перебування в трубчастій частині, при якому температура в адіабатичному шарі наблизиться до оптимальної. Дійсно, якщо розглянути варіант 2, то можливо побачити, що температура на виході з адіабатичного шару складає лише 342,2°C. Тобто її можливо збільшити ще на 10-12°C. Це можливо досягнути за рахунок зменшення часу контакту в трубчастій частині – перетин 4 (табл. 5.4). Розрахунок адіабатичного шару показав, що при нових умовах вихід продукту збільшується ще на 0,4%. Тобто сумарне збільшення виходу цільового продукту у другому варіанті поліпшення склало 0,9% в порівнянні з першим варіантом, а в порівнянні з базовим варіантом – 2,10%.

5.4 РОЗРАХУНОК ТРЕТЬОГО ВАРІАНТУ ОПТИМІЗАЦІЇ

Діаметр трубки – 16 мм, розмір зерна – 3 мм. Результати розрахунків трубчастої частини, які проводились аналогічно базовому варіанту при $\omega = 1,85$ м/с і $T_{\text{хл}} = 257^\circ\text{C}$ для обраних перетинів приведені в табл. 5.6.

Таблиця 5.6 – Результати розрахунків трубчастої частини (3 варіант)

№ пер.	X	τ_k	T	C_m	C_ϕ	C_b	C_k	ΔP
1	0,888	0,246	321,66	0,343	2,678	3,380	2,962	0,027
2	0,909	0,254	312,10	0,280	2,737	3,449	2,928	0,028
3	0,920	0,262	305,26	0,247	2,766	3,485	2,910	0,029

Для цих даних, що є вхідними для адіабатичного шару були проведені розрахунки по кожному з варіантів (табл. 5.7). По максимальному виходу продукту і з урахуванням дотримання обмежень був обраний перетин 2.

Таблиця 5.7 – Результати розрахунків адіабатичного шару (3 варіант)

№ пер.	$T_{\text{вих}}$	X	Sel	τ	C_ϕ
1	354,6	0,972			
				0,10	2,958
2	350,2	0,995	0,968	0,108	2,960
				0,123	2,960
				0,123	2,946
3	337,3	0,995	0,951	0,130	2,947
				0,138	2,946

По максимальному виході продукту і з урахуванням дотримання обмежень був обраний перетин 2.

Для третього варіанта оптимізації на виході з реактора отримані такі параметри: ступінь перетворення – 0,995; селективність – 0,968; вихід формальдегіду – 0,963. Збільшення виходу цільового продукту в порівнянні з базовим варіантом – на 2,50%.

Розрахунки варіантів поліпшення техніко-економічних показників процесу показали, що:

- при зменшенні діаметра трубки з 25 до 20 мм при тих же розмірах зерен 5 мм збільшення виходу формальдегіду досягає 0,2%. Якщо в адіабатичному шарі використовувати зерна каталізатору розміром 2 мм замість 5 мм, це дає збільшення виходу формальдегіду ще на 1,0%. Збільшення виходу цільового продукту в порівнянні з базовим варіантом склало 1,20%;
- при зменшенні розміру зерен с 5 до 4 мм при тому же діаметрі трубки 20 мм збільшення виходу формальдегіду досягає 0,5–0,9% в порівнянні з першим варіантом, а в порівнянні з базовим варіантом – 2,10%;
- при зменшенні діаметра трубки с 25 до 16 мм та зменшенні розміру зерен с 5 до 3 мм збільшення виходу цільового продукту в порівнянні з базовим варіантом складає 2,50%.

Таким чином був обраний третій варіант поліпшення техніко-економічних показників процесу.

Параметрична чутливість характеризує ступінь зміни якогось параметра процесу в реакторі при варіюванні одного з вхідних параметрів.

РОЗРАХУНОК ПАРАМЕТРИЧНОЇ ЧУТЛИВОСТІ

Параметрична чутливість характеризує ступінь зміни якогось параметра процесу в реакторі при варіюванні одного з вхідних параметрів. Дана величина має велике значення для оцінки можливості промислової реалізації процесу і необхідна при виборі каналу управління для автоматичного регулювання.

Як правило, найбільша параметрична чутливість для екзотермічних процесів в адіабатичному шарі каталізатора відзначається по каналу “температура на виході” – “температура на вході”, а в трубчастому реакторі – по каналу “температура в гарячій точці” – “температура теплоносія”.

Оскільки при доборі умов проведення процесу в реакторі того або іншого типу проводиться серія розрахунків при зміні вхідних умов, то при визначенні значення параметричної чутливості немає необхідності у виконанні більшого числа додаткових розрахунків на ЕОМ.

Величина параметричної чутливості розраховується для комбінованого реактора по його трубчатій частині, тому що аналогічна характеристика в адіабатичній частині при значно меншій концентрації метанолу незначна. Проведені розрахунки по каналам “температура гарячої точки – температура теплоносія”, “температура гарячої точки – лінійна швидкість”, “температура гарячої точки – температура входу” для базового та найкращого з поліпшених варіантів.

Визначення параметричної чутливості розглянемо на прикладі каналу «температура гарячої точки – температура теплоносія» для базового варіанту. Обраний за результатами аналізу проведених розрахунків стаціонарний режим (розділ 4.5) приймається як базовий. Далі температура змінюється на деяку величину ($\pm 5^\circ\text{C}$), у обидві сторони від базової і розраховуються нові стаціонарні режими, у яких інші вихідні показники залишаються незмінними. При тому ж часі контакту τ_k , що і у базовому варіанті, визначають температуру гарячої точки, не зважаючи на обмеження по температурі, ступінь перетворення та гідравлічний опір (табл. 6.1).

Таблиця 6.1 – Розрахунок параметричної чутливості для базового варіанту по каналу «температура гарячої точки – температура теплоносія»

Варіант	Температура теплоносія	Температура гарячій точки	Параметрична чутливість
Базовий	257	365,8	
Відхилення на $+\Delta T$	262	382,2	3,28
Відхилення на $-\Delta T$	252	347,2	3,72

Середнє значення параметричної чутливості можливо розрахувати по наступній формулі:

$$\frac{dT_{\text{ГТ}}}{dT_{\text{ХЛ}}} = \frac{\left(\sum \frac{T_{\text{ГТ}}^0 - T_{\text{ГТ}}^i}{T_{\text{ХЛ}}^0 - T_{\text{ХЛ}}^i} \right)}{m} \quad (6.1.)$$

де $\frac{dT_{\text{ГТ}}}{dT_{\text{ХЛ}}}$ – параметрична чутливість по дослідному каналу «температура гарячої точки – температура теплоносія»; $T_{\text{ХЛ}}^0, T_{\text{ГТ}}^0$ – температура відповідно теплоносія та гарячої точки для базового варіанта; $T_{\text{ХЛ}}^i, T_{\text{ГТ}}^i$ – температура теплоносія та гарячої точки для змінених умов на вході; m – кількість розрахунків при зміні вхідного параметра.

Середнє значення параметричної чутливості складає 3,5 град/град

Результати інших розрахунків параметричної чутливості для базового і поліпшених варіантів приведені в табл. 6.2–6.4.

Таблиця 6.2 – Розрахунок параметричної чутливості для поліпшеного варіанту по каналу «температура гарячої точки – температура теплоносія»

Варіант	Температура теплоносія	Температура гарячій точки	Параметрична чутливість
Поліпшений	257,0	366,0	
Відхилення на $+\Delta T$	262,0	394,5	5,70
Відхилення на $-\Delta T$	252,0	334,0	6,40

Середнє значення параметричної чутливості складає 6,05 град/град

Таблиця 6.3 – Розрахунок параметричної чутливості базового та поліпшеного варіантів по каналу «температура гарячої точки – лінійна швидкість»

Варіант	Лінійна швидкість	Температура гарячої точки	Параметрична Чутливість
Базовий	1,96	365,8	
Відхилення на + $\Delta\omega$	2,06	358,9	-73,0
Відхилення на - $\Delta\omega$	1,86	373,1	-77,0
Поліпшений	1,85	366,0	
Відхилення на + $\Delta\omega$	1,95	355,6	-104,0
Відхилення на - $\Delta\omega$	1,75	377,3	-113,0

Середнє значення параметричної чутливості для базового варіанту складає 75 град/(м/с), для поліпшеного 108,5 град/(м/с).

Таблиця 6.4 – Розрахунок параметричної чутливості базового та поліпшеного варіантів по каналу «температура гарячої точки – температура входу»

Варіант	Температура входу	Температура гарячої точки	Параметрична Чутливість
Базовий	180	365,8	
Відхилення на + $\Delta T_{вх}$	190	366,0	0,02
Відхилення на - $\Delta T_{вх}$	170	365,4	0,02
Поліпшений	180	366,0	
Відхилення на + $\Delta T_{вх}$	190	366,1	0,01
Відхилення на - $\Delta T_{вх}$	170	365,9	0,01

Середнє значення параметричної чутливості для базового варіанту складає 0,02 град/град, для поліпшеного 0,01 град/град. Так як ця величина дуже мала, то надалі цей канал не буде розглядатися.

Після визначення значення параметричної чутливості необхідно оцінити можливість промислової реалізації розрахованого реактора. Для цього варто визначити припустимий діапазон зміни вхідних параметрів.

Можливі відхилення температур у найбільш небезпечних місцях шару каталізатора (у “гарячій точці”) при флуктуації температури теплоносія можуть скласти:

$$\Delta T_{тр} = \delta \frac{dT_{гг}}{dT_{хл}} \quad (6.2)$$

Припустиме значення $\Delta T_{тр}$ можливо визначити з наступної умови

$$T_{\text{дод}}^{\text{прип}} \geq T_{\text{гт}} + \Delta T_i \quad (6.3)$$

де $T_{\text{гт}}$ – температура в гарячій точці; ΔT_i – можливі відхилення температури в цих перетинах; $T_{\text{дод}}^{\text{прип}} = 380^\circ\text{C}$ – гранично припустима температура по термостійкості каталізатора.

Далі з (6.2) знаходимо припустимі відхилення температури теплоносія. Так, для базового варіанта це значення складе

$$\delta = (380 - 365,8) / 3,5 = 4,06 \text{ град}$$

Для поліпшеного варіанту:

$$\delta = (380 - 366) / 6,05 = 2,31 \text{ град.}$$

Таким чином, для базового варіанту треба використовувати таку систему автоматичного регулювання, яка би забезпечувала відхилення температури теплоносія не більш $\pm 4^\circ$, а для поліпшеного – $\pm 2^\circ$.

Існуючі засоби КВПіА дозволяють регулювати температуру потоків з точністю $\delta = \pm (2 \dots 5)^\circ$. Тобто при таких значеннях відхилень існує можливість промислової реалізації.

Аналогічним чином були знайдені допустимі відхилення по лінійної швидкості, які складають:

- для базового варіанту – $\delta = (380 - 365,8) / 75 = 0,19 \text{ м/с}$;
- для поліпшеного варіанту – $\delta = (380 - 366) / 108,5 = 0,13 \text{ м/с}$.

Такі значення також припустимі для практичної реалізації.

7 РОЗРАХУНОК МАТЕРІАЛЬНОГО БАЛАНСУ СХЕМИ УСТАНОВКИ ОДЕРЖАННЯ ФОРМАЛІНУ

Повні характеристики всіх матеріальних і енергетичних потоків технологічної схеми є основою технологічних розрахунків устаткування, що дозволяють визначити основні розміри апаратів і їх кількість, яка потрібна для забезпечення необхідної продуктивності. Матеріальний і енергетичний баланси розраховуються на підставі заданої продуктивності і даних, отриманих на попередньому етапі проектування при визначенні технологічних характеристик реактора або схеми.

У даній курсовій роботі матеріальні розрахунки використовуються для уточнення концентрації води на вході в реактор і визначення матеріальних потоків для упорядкування матеріального балансу реактора.

Для розрахунку матеріальних потоків циклічної схеми основного блока установки одержання формаліну (рис. 7.2) використаний метод послідовно-рівнобіжного рахунку, реалізований у прикладній програмі “СХЕМА”.

Перелік вихідних даних програми “СХЕМА”:

- Продуктивність установки по формаліну, тис.т / рік;
- Безрозмірні параметри хімічного процесу в реакторі – ступінь перетворення і селективність;
- Концентрації продуктів у потоку на вході в реактор для метанолу, кисню і води, моль/м³.

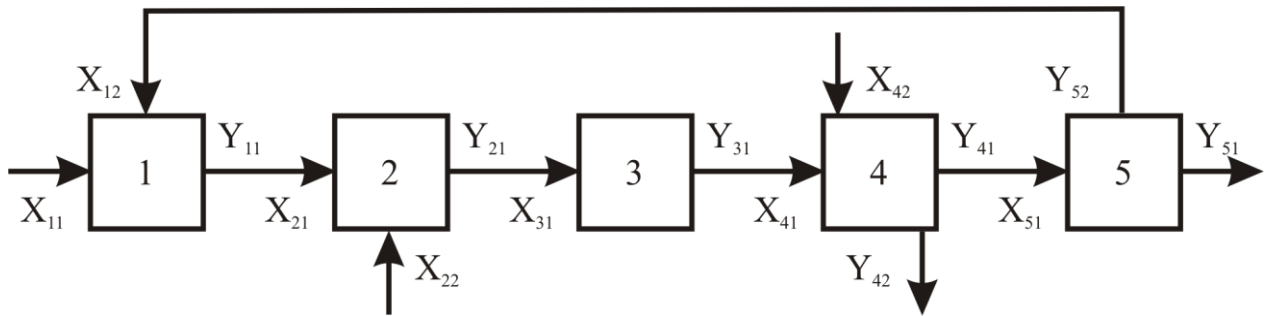


Рис. 7.2 – Основний (розрахунковий) блок: 1,2 – змішувачі; 3 – реактор; 4,5 – роздільники; X_{ij} – вхідні потоки; Y_{ij} – вихідні потоки; i – індекс елемента (апарата); j – порядковий номер вхідного або вихідного потоку апарата

Всі інші параметри математичної моделі використані при упорядкуванні програми у виді констант, значення яких розраховані з використанням показників діючого виробництва.

У результаті розрахунку визначаються частки сдувки і рециклу, а також мольні потоки шести компонентів (кмоль/годину) на вході і виході всіх апаратів схеми, концентрація води на вході в реактор. Зробивши матеріальний розрахунок схеми можна перевірити, чи відповідає знайденому розміру задана концентрація води у вихідній суміші. Якщо відмінність суттєва, то розрахунок реактора повторюють із новою концентрацією води.

Об'ємну швидкість вихідної суміші в реакторі (V_0) визначають по такому виразу:

$$V_0^{н.у} = \frac{\sum X_{31} + \sum Y_{31}}{2} \cdot \frac{22,4}{3600} \quad (7.1)$$

де $V_0^{н.у}$ – об'ємна швидкість суміші в реакторі при нормальних умовах, m^3/c ; $\sum X_{31}, \sum Y_{31}$ – суми мольних потоків усіх компонентів на вході (X_{31}) і на виході (Y_{31}), кмоль/годину.

Для робочих умов об'ємну швидкість перераховують по рівнянню Менделєєва-Клапейрона

$$V_0^{р.у} = V_0^{н.у} \cdot \frac{T_{роб} \cdot P_0}{T_0 \cdot P_{роб}} \quad (7.2)$$

$$P_{роб} = (P_{вх} + P_{вих})/2; \quad (7.3)$$

$$P_{вх} = P_{вих} + \Delta P_p. \quad (7.4)$$

Результати розрахунку матеріального балансу по кожному апарату, як правило, представляють у виді таблиці.

Розрахунок матеріальних потоків по програмі “СХЕМА” повинен бути виконаний для двох варіантів – базового і поліпшеного. На підставі отриманих даних розраховується видатковий коефіцієнт по метанолу – кількість кг метанолу, що витрачається на одержання 1 тони готового продукту – формаліну. По даному показнику проводиться порівняння поліпшеного варіанту із базовим.

7.1 РОЗРАХУНОК МАТЕРІАЛЬНОГО БАЛАНСУ ДЛЯ БАЗОВОГО ВАРІАНТУ

Результати розрахунків мольних потоків (кмоль/год) по програмі “Схема” представлені у таблиці 7.1.

Таблиця 7.1 – Мольні потоки схеми (базовий варіант)

Компонент	X ₁₁	X ₂₂	Y ₂₁ X ₃₁	Y ₃₁ X ₄₁	X ₄₂	Y ₄₂	Y ₄₁ X ₅₁	Y ₅₁	Y ₅₂ X ₁₂
CH ₃ OH	0	160	160	0,957	0	0,957	0	0	0
O ₂	117	0	226	142	0	0	142	33,5	109
N ₂	441	0	1870	1870	0	0	1870	410	1430
H ₂ O	0	0	31,4	199	285,0	443	41,1	9,67	31,4
СНОН	0	0	0	150	0	150	0	0	0
СО	0	0	37,7	37,7	0	0	37,7	8,88	37,7

Розрахуємо об’ємну швидкість вихідної суміші в реакторі при нормальних та робочих умовах:

$$V_0^{н.у} = \frac{\sum X_{31} + \sum Y_{31}}{2} \cdot \frac{22,4}{3600} = 14,69 \text{ м}^3/\text{с};$$

Гідравлічний опір трубчастої частини реактора $\Delta P_{тр} = 0,029 \text{ МПа}$

$$P_{вих} = 0,130 \text{ МПа}; P_{вх} = 0,130 + 0,029 = 0,159 \text{ МПа}$$

$$P_{роб} = (0,130 + 0,159) / 2 = 0,1445 \text{ МПа} = 144,5 \text{ кПа}$$

Прийmemo $T_{роб} = 300^\circ\text{C} = 573 \text{ К}$.

$$V_0^{р.у} = 14,69 \cdot 573 \cdot 101,325 \cdot 10^3 / (273 \cdot 144,5 \cdot 10^3) = 21,62 \text{ м}^3/\text{с}.$$

Складемо матеріальний баланс реактора (табл. 7.2) та матеріальний баланс схеми (табл. 7.3) (потоки наведені у кг/годину).

За отриманими даними розраховуємо видатковий коефіцієнт по метанолу– це кількість кг метанолу, яка витрачається на отримання 1 тони готового продукту – формаліну:

$$a = 5106,2 / 12,5 = 408,50 \text{ кг/т}.$$

Таблиця 7.2 – Матеріальний баланс реактора

Прихід			Розхід		
Потік X ₃₁ :	кг/годину	% мас	Потік Y ₃₁ :	кг/годину	% мас
М	5106,2	6,88	М	30,6	0,04
O ₂	7235,1	9,75	O ₂	4555,2	5,92
N ₂	52458,7	80,78	N ₂	52458,7	77,96
H ₂ O	565,2	1,35	H ₂ O	3580,1	8,28
Ф	0	0	Ф	4491,9	6,23
СО	807,5	1,24	СО	1056,2	1,57
Всього	66172,7	100,0	Всього	66172,7	100,0

Таблиця 7.3 – Матеріальний баланс схеми

Прихід, кг/годину		Розхід, кг/годину	
Потік X ₁₁ (повітря):	16104,3	Потік Y ₄₂ (формалін):	12500,0
O ₂	3752,5	M	30,6
N ₂	12351,8	H ₂ O	7977,5
		Ф	4491,9
Потік X ₂₂ (метанол):	5106,2	Потік Y ₅₁ (здувка):	13847,2
		O ₂	1072,6
Потік X ₄₂ (вода):	5136,7	N ₂	12351,8
		H ₂ O	174,1
		CO	248,7
Всього	26347,2	Всього	26347,2

7.2 РОЗРАХУНОК МАТЕРІАЛЬНОГО БАЛАНСУ ПОЛІПШЕНОГО ВАРІАНТУ

Результати розрахунків мольних потоків (моль/год) по програмі “СХЕМА” представлені у таблиці 7.4.

Розрахуємо об’ємну швидкість вихідної суміші в реакторі при нормальних та робочих умовах:

$$V_0^{н.у} = \frac{\sum X_{31} + \sum Y_{31}}{2} \cdot \frac{22,4}{3600} = 14,315 \text{ м}^3/\text{с};$$

Прийемо $T_{роб} = 300^\circ\text{C} = 573 \text{ К}; P_{роб} = 144,5 \text{ кПа}$

$$V_0^{р.у} = 14,315 \cdot 573 \cdot 101,325 \cdot 10^3 / (273 \cdot 144,5 \cdot 10^3) = 21,068 \text{ м}^3/\text{с}.$$

Складемо матеріальний баланс реактора (табл. 7.5) та матеріальний баланс схеми (табл. 7.6) (потоки наведені у кг/годину). За отриманими даними розраховуємо видатковий коефіцієнт по метанолу:

$$a = 4976,9/12,5 = 398,15 \text{ кг/т}.$$

Як видно видатковий коефіцієнт по метанолу зменшився.

Таблиця 7.4 – Мольні потоки схеми (поліпшений варіант)

Компо- нент	X ₁₁	X ₂₂	Y ₂₁ X ₃₁	Y ₃₁ X ₄₁	X ₄₂	Y ₄₂	Y ₄₁ X ₅₁	Y ₅₁	Y ₅₂ X ₁₂
CH ₃ OH	0	156,0	156,0	0,78	0	0,78	0	0	0
O ₂	112,0	0	220,0	141,0	0	0	141,0	32,3	108,0
N ₂	422,0	0	1840,0	1840,0	0	0	1840,0	422,0	1420,0
H ₂ O	0	0	30,8	191,0	293,0	443,0	40,0	9,18	30,8
СНОН	0	0	0	150,0	0	150,0	0	0	0
СО	0	0	16,6	21,6	0	0	21,6	4,95	16,6

Таблиця 7.5 – Матеріальний баланс реактора(полішений варіант)

Прихід			Розхід		
Потік X ₃₁ :	кг/годину	% мас	Потік Y ₃₁ :	кг/годину	% мас
M	4976,9	6,88	M	24,9	0,03
O ₂	7051,9	9,75	O ₂	4496,7	6,0
N ₂	51446,1	81,27	N ₂	51446,1	78,50
H ₂ O	554,6	1,36	H ₂ O	3429,2	8,14
Φ	0	0	Φ	4493,9	6,40
CO	465,4	0,74	CO	604,1	0,92
Всього	64494,9	100,0	Всього	64494,9	100,0

Таблиця 7.6 – Матеріальний баланс схеми

Прихід, кг/годину		Розхід, кг/годину	
Потік X ₁₁ (повітря):	15395,6	Потік Y ₄₂ (формалін):	12500,0
O ₂	3587,3	M	24,9
N ₂	11808,3	H ₂ O	7981,2
		Φ	4493,9
Потік X ₂₂ (метанол):	4976,9	Потік Y ₅₁ (здувка):	13144,3
		O ₂	1032,1
Потік X ₄₂ (вода):	5271,8	N ₂	11808,3
		H ₂ O	165,2
		CO	138,7
Всього	25644,3	Всього	25644,3

8 РОЗРАХУНОК КОНСТРУКТИВНИХ РОЗМІРІВ РЕАКТОРА І ІНШИХ АПАРАТІВ

У даному розділі приводяться розрахунки конструктивних розмірів реактора та інших апаратів [11–16]. Якщо вибирається стандартний апарат, виконують розрахунки тільки для тих розмірів, що необхідні для його вибору і приводиться повне найменування апарата по державному стандарту, наприклад: “Холодильник 800 ХКГ-6-16-М1-0/20-6-4 гр.Б ДЕРЖСТАНДАРТ 15120-79”. Програми для розрахунків на ЕОМ, що використовуються при проектуванні реакторів, дозволяють крім технологічних параметрів, визначити для трубчастій частини довжину трубок з каталізатором та фіктивні швидкості газу в трубках ω (по обсягу газу при нормальних умовах), для адіабатичної частини – умовний час перебування для кожного шару каталізатора. Цих даних достатньо, щоб визначити розміри і число апаратів по заданій продуктивності.

8.1 РОЗРАХУНОК КОНСТРУКТИВНИХ РОЗМІРІВ РЕАКТОРА

Для трубчастого реактора або для трубчастої частини комбінованого реактора на підставі технологічних розрахунків уже відомі значення наступних параметрів: внутрішнього діаметра трубки, висоти шару каталізатора в трубці і лінійній швидкості реакційної суміші в трубках. Тому конструктивний розрахунок починають із визначення необхідного числа трубок прийнятого раніше розміру по об'ємній швидкості вихідної суміші в реакторі V_0 (розд. 7) і визначеної в результаті технологічних розрахунків лінійної швидкості ω . Якщо для обраних умов здійснення процесу число трубок перевищує 8000 шт. (що є обмеженням за умовами виготовлення реактора), то в цьому випадку процес необхідно здійснювати в декількох паралельно працюючих ректорах.

Можна визначити діаметр корпусу трубчастого реактора D , знаючи обране число трубок n і їхній діаметр, обмовивши розташування трубок у трубному штахеті. Наприклад, при розташуванні трубок по вершинах правильного шестикутника можна скористатися системою рівнянь

$$\begin{aligned} D &= t(b-1) + 4d_n; \\ b &= 2a - 1; \\ n &= 3a(a-1) + 1; \end{aligned} \quad (8.1)$$

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

При розташуванні труб по вершинах трикутника можливо використати співвідношення:

$$n = K \cdot \pi \cdot D^2 / (3,47 \cdot t^2) \quad (8.2)$$

де $K = 0,7...0,85$.

Товщину стінок трубок прийняти рівної 1-2 мм. Остаточний діаметр корпусу реактора приймають рівним стандартному по ДЕРЖСТАНДАРТ 9617-76 (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 1000–1800мм → 10мм, 2000–2600мм → 12мм, 2800–3200 → 14мм, 3400–3800 → 18мм, 4000 → 24мм.

Довжина трубок визначається конструктивно. Висоту шару каталізатора (в програмі – довжина трубок з каталізатором) збільшується на 100–150 мм.

У комбінованому реакторі діаметр корпусу апарата розраховують по його трубчастій частині. По обраному діаметрі, знаючи витрату реакційної суміші V_0 , визначають лінійну швидкість в адіабатичній частині $\omega_{ад}$ і висоту шару каталізатора з урахуванням раніше знайденого часу контакту:

$$h_{ш} = \tau_{ад} \cdot \omega_{ад} \quad (8.3)$$

Як і для всіх апаратів, загальний гідравлічний опір комбінованого реактора не повинно перевищувати задане значення ΔP_3 .

У комбінованому реакторі

$$\Delta P_p = \Delta P_{тр} + \Delta P_{ад}, \quad (8.4)$$

де $\Delta P_{\text{тр}}$ – перепад тиску в трубці, що розраховується по програмі на ЕОМ; $\Delta P_{\text{ад}}$ – гідравлічний опір адіабатичного шару.

Гідравлічний опір шару каталізатора розраховується по формулі [12]:

$$\Delta p = L \cdot \frac{\omega^2 \rho}{2} \cdot \frac{a}{\varepsilon^3} \cdot f_3, \quad (8.5)$$

де L – висота шару каталізатора, м; ω – лінійна швидкість реакційної суміші (на повний перетин реактора) м/с; ρ – густина суміші, кг/м³; $a = a_0 \cdot (1 - \varepsilon) = \frac{6}{d_3} \cdot (1 - \varepsilon)$ – питома поверхня шару, м²/м³; ε – шпаристість шару каталізатора; d_3 – еквівалентний діаметр зерна, м; $f_3 = \frac{38,4}{\text{Re}_3} + 0,56$ – коефіцієнт; $\text{Re}_3 = \frac{4\omega}{a\nu}$; ν – коефіцієнт кінематичної в'язкості суміші, м²/с.

Якщо ΔP_p буде більше $\Delta P_{\text{доп}}$, необхідно зменшити гідравлічний опір трубчастої частини, зрадивши вхідні параметри.

При проектуванні адіабатичного реактора при наявності обмеження по гідравлічному опорі, що у даному випадку зосереджено в шарах каталізатора, для розрахунку їх діаметрів використовується ітераційна процедура. Як правило поступають таким чином. Задаються яким-небудь стандартним діаметром апарата [14], для якого розраховують лінійну швидкість реакційної суміші і відповідно висоти шарів каталізатора. Потім оцінюють гідравлічний опір шарів по формулі (8.5).

Якщо сумарне значення ΔP для всього реактора менше ΔP_3 , то зменшують діаметр апарата. При $\Delta P > \Delta P_3$ діаметр апарата збільшують. У випадку невеликого добору значень лінійної швидкості реактор буде мати або великий гідравлічний опір, або мати не виправдано великі розміри, що в остаточному підсумку позначається на техніко-економічних показниках.

Діаметр апаратів не повинний перевищувати припустимі за умовою транспортабельності значення ($D \leq 4,0$ м), у противному випадку встановлюють декілька паралельно працюючих реакторів із меншим стандартним діаметром.

Висоти шарів каталізатора визначають по формулі (8.3), використовуючи обраний в результаті розрахунків час контакту в кожному шарі і знайдену швидкість потоку.

8.2 РОЗРАХУНОК КОНСТРУКТИВНИХ РОЗМІРІВ ПІДКОНТАКТНОГО ТЕПЛООБМІННИКА

Розміри підконтактного теплообмінника розраховуються, користуючись програмою “Підконтактний теплообмінник”. При підготуванні вихідних даних використовують результати матеріальних розрахунків. Особливістю розрахунку в даному випадку є те, що діаметр кожуха уже відомий, він дорівнює діаметру реактора. Задавшись діаметром трубок кожухотрубних теплообмінників (використовують звичайно труби 20×2, 25×2, 38×3 мм) і кроком між ними t , визначають число трубок по рівняннях (8.1) або (8.2). Довжину трубок задають довільно, наприклад 1 м. Здійснив розрахунок на

ЕОМ, одержують значення коефіцієнтів теплопередачі і тепловіддачі та інші дані, котрі необхідно проаналізувати. У першу чергу оцінюється значення коефіцієнтів теплопередачі і тепловіддачі, що повинні відповідати звичайним значенням відповідних величин для аналогічних умов [16].

Правильність попереднього вибору довжини трубок оцінюється конструктивно у відповідності з діаметром патрубка на корпусі теплообмінника.

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

$$L_{\text{тр}} \geq 2,5 \cdot D_{\text{патр}}, \quad (8.6)$$

де $D_{\text{патр}}$ – діаметр патрубка для підводу вихідної суміші.

Значення $D_{\text{патр}}$ визначається по припустимих лінійних швидкостях прямування суміші в трубопроводах:

$$D_{\text{патр}} = \sqrt{\frac{4 \cdot V_0}{\pi \cdot w_{\text{прип}}}} \quad (8.7)$$

Можлива припустима лінійна швидкість $w_{\text{прип}}$ приймається в таких межах: для газів 10–15 м/с, для водяної пари – до 20 м/с, для рідин – до 5 м/с.

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

$$h \geq 1,2 \cdot D_{\text{патр}}. \quad (8.8)$$

Загальна довжина трубок $L_{\text{тр}}$ повинна відповідати умові

$$L_{\text{тр}} = (N+1) \cdot h \quad (8.9)$$

де N – число перегородок. Умова перевіряється після розрахунків теплообмінника. Якщо умова (8.9) не виконується, проводять розрахунки підконтактного теплообмінника з новими вихідними даними.

Для виконання умов (8.6) або (8.8–8.9) у підконтактному теплообміннику можна варіювати розмірами трубок і відстанню між ними. При зміні шагу необхідно врахувати, що існує обмеження на мінімальний шаг між трубками $t \geq (1,3-1,5) \cdot d_n$, де d_n – зовнішній діаметр трубок, м. Звичайно, потрібні додаткові розрахунки підконтактного теплообмінника.

8.3 РОЗРАХУНОК РЕАКТОРА ДЛЯ БАЗОВОГО ВАРІАНТУ

Об'ємна швидкість вихідної суміші в реакторі при робочих умовах (розд.7.1) $V_0^{p.y.} = 21,62 \text{ м}^3/\text{с}$. Розрахуємо кількість трубок при $d_{\text{тр}}=0,025 \text{ м}$ та $d_3=0,005 \text{ м}$.

Площа поперечного переріза трубки

$$S_{\text{тр}} = \frac{\pi d_{\text{тр}}^2}{4} = \frac{3,14 \cdot 0,025^2}{4} = 4,906 \cdot 10^{-4} \text{ (м}^2\text{)}.$$

При лінійній швидкості реакційної суміші в трубках $\omega=1,96 \text{ м/с}$ необхідне число трубок складе

$$n = \frac{V_0^{py}}{S_{tr} \cdot \omega} = \frac{21,62}{4,906 \cdot 10^{-4} \cdot 1,96} = 22484 \text{ шт.}$$

Так як число трубок перевищує 8000 шт., то в цьому випадку процес необхідно здійснювати в 3 паралельно працюючих реакторах. Тоді для одного реактора об'ємна швидкість суміші складе $V_0^{p.y.} = 21,62/3 = 7,207 \text{ м}^3/\text{с}$, а число трубок $n = 7495$ шт. Таким чином, обмеження виконується.

Визначимо діаметр корпусу трубчастого реактора D по (8.2). Прийmemo зовнішній діаметр трубок $d_n = 0,027 \text{ м}$, крок між трубками $t = 1,3 \cdot d_n = 0,0351 \text{ м}$, $K = 0,75$. Тоді

$$D = \sqrt{\frac{3,47 \cdot n \cdot t^2}{\pi \cdot K}} = 3,69 \text{ м.}$$

Знайдений діаметр перевищує обмеження ($D \leq 3,6 \text{ м}$). Тому приймаємо, що процес необхідно здійснювати в 4 паралельно працюючих реакторах. Тоді для одного реактора об'ємна швидкість суміші складе $V_0^{p.y.} = 21,62/4 = 5,405 \text{ м}^3/\text{с}$, а число трубок $n = 5621$ шт., діаметр корпусу $D = 3,194 \text{ м}$. Усі обмеження виконуються. Приймаємо стандартний діаметр $D = 3,2 \text{ м}$.

По обраному діаметрі, знаючи витрату реакційної суміші V_0 , визначимо лінійну швидкість в адіабатичній частині $\omega_{ад}$.

$$\omega_{ад} = V_0^{p.y.}/S_p = \frac{V_0^{p.y.} \cdot 4}{\pi \cdot D^2} = \frac{5,405 \cdot 4}{3,14 \cdot 3,2^2} = 0,672 \text{ м/с}$$

Висоту шару каталізатора з урахуванням знайденого часу контакту визначимо по (8.3):

$$h_{ш} = \tau_{ад} \cdot \omega_{ад} = 0,288 \cdot 0,672 = 0,194 \text{ м}$$

Гідравлічний опір шару каталізатора розраховується по формулі (8.5):

$$\Delta p = L \cdot \frac{\omega^2 \rho}{2} \cdot \frac{a}{\varepsilon^3} \cdot f_3$$

Для заданих умов:

$$a = \frac{6}{d_3} \cdot (1 - \varepsilon) = \frac{6}{0,005} (1 - 0,4) = 720 \text{ м}^2/\text{м}^3;$$

$$Re_3 = \frac{4 \cdot \omega}{a \cdot \nu} = \frac{4 \cdot 0,672}{720 \cdot 33,8 \cdot 10^{-6}} = 110,5; \quad f_3 = \frac{38,4}{Re_3} + 0,56 = 0,908$$

Густина та коефіцієнт кінематичної в'язкості суміші при робочих умовах [16]: $\rho = 0,763 \text{ кг/м}^3$; $\nu = 33,8 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$. Тоді гідравлічний опір

$$\Delta p = 0,194 \cdot \frac{0,672^2 \cdot 0,763}{2} \cdot \frac{720}{0,4^3} \cdot 0,908 = 340 \text{ Па}$$

Загальний гідравлічний опір комбінованого реактора розраховується по (8.4):

$$\Delta P_p = \Delta P_{tr} + \Delta P_{ад} = 0,028 + 0,00025 = 0,02834 \text{ МПа.}$$

Обмеження по гідравлічному опору виконується.

8.4 РОЗРАХУНОК ПІДКОНТАКТНОГО ТЕПЛООБМІННИКА ДЛЯ БАЗОВОГО ВАРІАНТУ

Попередньо визначимо діаметр патрубка для підведення вихідної суміші по (8.7). Припустима лінійна швидкість $w_{прин}$ прийнята рівної 10 м/с.

$$D_{патр} = \sqrt{\frac{4 \cdot V_0}{\pi \cdot w_{прин}}} = \sqrt{\frac{4 \cdot 5,405}{3,14 \cdot 10}} = 0,83 \text{ м}$$

Приймаємо $D_{патр} = 0,89 \text{ м}$.

Відстань між перегородками h повинна задовольняти умові (8.8)

$$h \geq 1,2 \cdot D_{патр}.$$

Приймаємо $h = 1,1 \text{ м}$.

При розрахунку підконтактного теплообмінника необхідно виконання умови (8.9) $L_{тр} = (N+1) \cdot h$. Для виконання умови можна варіювати розмірами трубок і відстанню між ними. Розрахунки проведені по програмі “Підконтактний теплообмінник”.

Вихідні дані

Початкова температура вихідної суміші, °С	80
Кінцева температура вихідної суміші, °С	180
Температура на вході в трубки, °С	344,4
Масова подача суміші, кг/година	14850
Тиск на вході і виході реактора, МПа	0,16 / 0,13
Діаметр трубок, м	0,038×0,003
Діаметр апарата, м	3,2
Відстань між перегородками, м	1,1

У результаті розрахунків отримані наступні результати:

Необхідна поверхня теплообмінника, м ²	674,3
Довжина трубок, м	2,20
Кількість трубок, шт	2568
Шаг між трубками, м	0,053
Число перегородок, шт	1
Коефіцієнт теплопередачі, Вт/(м ² ·К) –	3,89
Температура на виході, °С	246,7

Як видно, умова (8.9) практично виконується. Таким чином, для реактора та підконтактного теплообмінника для базового варіанту отримані наступні конструктивні параметри:

- діаметр апарата – 3,2 м;
- кількість трубок у реакторі – 5621 шт.;
- шаг між трубками – 0,035 м;
- довжина трубок – 0,755+0,145=0,9 м;
- висота шару каталізатора – 0,194 м;

- поверхня теплообмінника – 675 м²;
- кількість трубок теплообмінника – 2568 шт.;
- довжина трубок теплообмінника – 2,20 м;
- діаметр трубок та товщина стінок – 0,038×0,003 м.

8.5 РОЗРАХУНОК РЕАКТОРА ДЛЯ ПОЛІПШЕНОГО ВАРІАНТУ

Об'ємна швидкість вихідної суміші в реакторі при робочих умовах (розд.7.2) $V_0^{p.y.} = 21,068$ м³/с. Розрахуємо кількість трубок при $d_{тр}=0,016$ м та $d_3=0,003$ м.

Площа поперечного переріза трубки

$$S_{тр} = \frac{\pi d_{тр}^2}{4} = \frac{3,14 \cdot 0,016^2}{4} = 2,01 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2.$$

При лінійній швидкості реакційної суміші в трубках $\omega=1,85$ м/с необхідне число трубок складе

$$n = \frac{V_0^{p.y.}}{S_{тр} \cdot \omega} = \frac{21,068}{2,01 \cdot 10^{-4} \cdot 1,85} = 56669 \text{ шт.}$$

Так як число трубок перевищує 8000 шт., то в цьому випадку процес необхідно здійснювати в 8 паралельно працюючих реакторах. Тоді для одного реактора об'ємна швидкість суміші складе $V_0^{p.y.} = 21,068/8=2,6335$ м³/с, а число трубок $n=7082$ шт. Таким чином, обмеження виконується.

Визначимо діаметр корпусу трубчастого реактора D по (8.2). Приймемо зовнішній діаметр трубок $d_n=0,018$ м, шаг між трубками $t = 1,3 \cdot d_n = 0,0234$ м, $K=0,75$. Тоді

$$D = \sqrt{\frac{3,47 \cdot n \cdot t^2}{\pi \cdot K}} = 2,39 \text{ м.}$$

Знайдений діаметр не перевищує обмеження ($D \leq 3,6$ м). Приймаємо стандартний діаметр $D = 2,4$ м.

По обраному діаметрі, знаючи витрату реакційної суміші V_0 , визначимо лінійну швидкість в адіабатичній частині $\omega_{ад}$.

$$\omega_{ад} = V_0^{p.y.}/S_p = \frac{V_0^{p.y.} \cdot 4}{\pi \cdot D^2} = \frac{2,6335 \cdot 4}{3,14 \cdot 2,4^2} = 0,582 \text{ м/с}$$

Висоту шару каталізатора з урахуванням знайденого часу контакту визначимо по (8.3):

$$h_{ш} = \tau_{ад} \cdot \omega_{ад} = 0,108 \cdot 0,582 = 0,063 \text{ м}$$

Гідравлічний опір шару каталізатора розраховується по формулі (8.5):

$$\Delta p = L \cdot \frac{\omega^2 \rho}{2} \cdot \frac{a}{\epsilon^3} \cdot f_3$$

Для заданих умов:

$$a = \frac{6}{d_3} \cdot (1 - \varepsilon) = \frac{6}{0,002} (1 - 0,4) = 1800 \text{ м}^2/\text{м}^3;$$

$$\text{Re}_3 = \frac{4 \cdot \omega}{a \cdot \nu} = \frac{4 \cdot 0,582}{1800 \cdot 33,8 \cdot 10^{-6}} = 38,3; \quad f_3 = \frac{38,4}{\text{Re}_3} + 0,56 = 1,564$$

Густина та коефіцієнт кінематичної в'язкості суміші при робочих умовах [16]: $\rho = 0,763 \text{ кг/м}^3$; $\nu = 33,8 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$. Тоді гідравлічний опір

$$\Delta p = 0,063 \cdot \frac{0,582^2 \cdot 0,763}{2} \cdot \frac{1800}{0,4^3} \cdot 1,564 = 358 \text{ Па}$$

Загальний гідравлічний опір комбінованого реактора розраховується по (8.4):

$$\Delta P_p = \Delta P_{\text{тр}} + \Delta P_{\text{ад}} = 0,028 + 0,00036 = 0,02836 \text{ МПа.}$$

Обмеження по гідравлічному опору виконується.

8.6 РОЗРАХУНОК ПІДКОНТАКТНОГО ТЕПЛООБМІННИКА ДЛЯ ПОЛІПШЕНОГО ВАРІАНТУ

Попередньо визначаємо діаметр патрубку для підведення вихідної суміші по (8.7). Припустима лінійна швидкість $w_{\text{прип}}$ прийнята рівної 10 м/с.

$$D_{\text{патр}} = \sqrt{\frac{4 \cdot V_0}{\pi \cdot w_{\text{прип}}}} = \sqrt{\frac{4 \cdot 2,6335}{3,14 \cdot 10}} = 0,579 \text{ м}$$

Приймаємо $D_{\text{патр}} = 0,58 \text{ м}$.

Відстань між перегородками h повинно задовольняти умові (8.8)

$$h \geq 1,2 \cdot D_{\text{патр}}.$$

Приймаємо $h = 0,7 \text{ м}$.

При розрахунку підконттактного теплообмінника необхідно виконання умови (8.9) $L_{\text{тр}} = (N+1) \cdot h$. Для виконання умови можна варіювати розмірами трубок і відстанню між ними. Розрахунки проведені по програмі "Підконттактний теплообмінник".

Вихідні дані

Початкова температура вихідної суміші, °С	80
Кінцева температура вихідної суміші, °С	180
Температура на вході в трубки, °С	350,2
Масова подача суміші, кг/година	7234
Тиск на вході і виході реактора, МПа	0,16 / 0,13
Діаметр трубок, м	0,025×0,002
Діаметр апарата, м	2,4
Відстань між перегородками, м	0,7

У результаті розрахунків отримані наступні результати:

Необхідна поверхня теплообмінника, м ²	216,4
Довжина трубок, м	1,41

Кількість трубок, шт	1951
Шаг між трубками, м	0,046
Число перегородок, шт	1
Коефіцієнт теплопередачі, Вт/(м ² ·К) –	5,70
Температура на виході, °С	252,6

Як видно, умова (8.9) практично виконується. Таким чином, для реактора та підконтактного теплообмінника для поліпшеного варіанту отримані наступні конструктивні параметри:

- діаметр апарата – 2,4 м;
- кількість трубок у реакторі – 7082 шт.;
- шаг між трубками – 0,0234 м;
- довжина трубок – 0,470+0,130=0,60 м;
- висота шару каталізатора – 0,063 м;
- поверхня теплообмінника – 216 м²;
- кількість трубок теплообмінника – 1951 шт.;
- довжина трубок теплообмінника – 1,41 м;
- діаметр трубок та товщина стінок – 0,025×0,002 м.

ПЕРЕЛІК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Лебедев Н.Н. Химия и технология основного органического и нефтехимического синтеза. – М.: Химия, 1981.
2. Огородников С.К. Формальдегид. – Л.: Химия, 1985.
3. Боресков Г.К., Матрос Ю.Ш. и др. Химическая промышленность, 1977, № 1, с.48-49.
4. Матрос Ю.Ш., Луговской В.И. и др. Химическая промышленность, 1982, №11, с.674-677.
5. Матрос Ю.Ш. Нестационарные процессы в каталитических реакторах. Новосибирск: Наука, 1982.
6. Царева З.М., Товажнянский Л.Л., Орлова Е.И.. Основы теории химических реакторов (компьютерный курс). – Харьков: ХГПУ, 1997.
7. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. – М.: Химия, 1982.
8. Кафаров В.В., Перов В.Л., Мешалкин В.П. Принципы математического моделирования химико-технологических систем. – М.: Химия, 1974. – 312 с.
9. Комп'ютерні системи проектування. Теорія і практика./ Ред.: М.В. Лобур. – Л.: Львів- Політехніка. 2004. –183 с
- 10.Макаров О.В. Математичне моделювання та оптимізація об'єктів в хімічній технології. Навчальний посібник / О.В. Макаров, В.В. Брем, Ю.М. Єпутатов, О.А. Борщ ; Держ. ун-т "Одес. політехніка". – Одеса, 2021. – 241 с.
- 11.Рейхофельд В.О., Шеин В.С., Ермаков В.И. Реакционная аппаратура и машины заводов основного органического синтеза и синтетического каучука. – М.: Химия, 1975.
- 12.Аэров М.Е., Тодес О.М., Наринский Д.А. Аппараты со стационарным зернистым слоем. Гидравлические и тепловые основы работы. – Л.: Химия, 1979.
- 13.Конструирование и расчеты машин химических производств / Под ред. Э.Э.Кольмана-Иванова. – М.: Машиностроение, 1985.
- 14.Лацинский А.А. Конструирование сварных химических аппаратов: Справочник. – Л.: Машиностроение, 1981.
- 15.Основные процессы и аппараты химической технологии: Пособие по проектированию/ Под ред. Ю.И.Дытнерского. – М.: Химия, 1983.
- 16.Павлов К.Ф., Романков П.Г., Носков А.А. Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии. – Л.: Химия, 1981.