

Всероссийское СМИ

«Академия педагогических идей «НОВАЦИЯ»

Свидетельство о регистрации Эл №ФС 77-62011 от 05.06.2015 г.

(выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций)

Сайт: akademnova.ru

e-mail: akademnova@mail.ru

Шариков Ю.В., Ткачев И.В., Снегирев Н.В. Моделирование реакторных процессов // Материалы по итогам I –ой Всероссийской научно-практической конференции «Теория и практика современной науки», 20 – 30 октября 2018 г. – 0,2 п. л. – URL: http://akademnova.ru/publications_on_the_results_of_the_conferences

СЕКЦИЯ: ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

Ю.В. Шариков

Профессор факультета переработки минерального сырья

И.В. Ткачев

Аспирант 2-ого года факультета переработки минерального сырья

Н.В. Снегирев

Аспирант 2-ого года факультета переработки минерального сырья

Санкт-Петербургский горный университет

Научный руководитель: Ю.В. Шариков, д.т.н., профессор

г. Санкт-Петербург, Ленинградская область,

Российская Федерация

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКТОРНЫХ ПРОЦЕССОВ

Модель реакторных процессов выводится на основе блочного принцип а моделирования сложных процессов. На первом этапе при создании модели реакторного процесса проводится системный анализ процессов, происходящ их в химическом реакторе [1].

Для описания процессов переноса вещества и тепла в химических реакторах используют обычно либо модель идеального перемешивания, либо модель идеального вытеснения. Модель идеального перемешивания применяется для описания процессов в аппаратах, в которых время гомогенизации смеси при поступлении возмущения на вход гораздо меньше, чем время пребывания смеси в аппарате [3].

На протяжении десятилетий разрабатывались различные модели для понимания, проектирования, моделирования или оптимизации работы

реакторов, используемых в нефтеперерабатывающей промышленности. Эта разработка была параллельна необходимости большой возможности детального прогнозирования, мотивированная непрерывными изменениями в процессе условий (то есть характер сырья, новый реактор и конструкция катализатора, реакция условия и т. д.). Общепринятая классификация основана на различных уровнях сложности каждой модели. Например, Шинар предложил простую классификацию, которая различает интеллектуальные модели. Модели обучения имеют тип нейронной сети и прогностические модели могут быть подклассифицированы как детерминированные и стохастические модели.

С одной стороны, в детерминированных моделях непрерывные модели (то есть моделирование дисперсии, диффузии или эффективных транспортных моделей с использованием уравнений Фика и Фурье по законам массы и тепловой дисперсии соответственно) представлены дифференциальными уравнениями, имеющими одну или несколько независимых переменных; дискретные модели и конечно-разностные модели, описываемые с использованием главным образом капиллярного, сферической катализатора или ячеистой модели, которые были введены Динсом и Лapidусом. Промежутки между катализатором элементами идеализируются как прекрасно перемешивающиеся для представления дисперсионного поведения.

Стохастические модели с учетом случайного расположения частиц и пустые пространства в катализаторе. Чисто стохастические модели могут быть если имеется достаточная статистическая информация о структуре катализатора, пустотного пространства и дискретных путей жидкости. Их применение в например, может быть разработано путем изменения размера ячейки и выбора размеры ячеек, чтобы соответствовать размеру

распределения пустотных пространств в катализаторе. Однако использование такой модели представляется сомнительным из-за вычислительной стоимости.

Альтернатива в стиле стохастической модели может быть использование детерминированных моделей, основанных на дифференциальных уравнениях при рассмотрении пустотных пространств в упаковке в качестве источников возмущений в структурах концентрации, температуры, и скорости потока через слой катализатора. В этих моделях, также известных как детерминированные модели со случайным возмущением, частицы и пустоты могут быть расположенных случайным образом по всему слою, и статистические свойства расположения катализатора может быть рассчитано. В то время как чисто стохастические модели меняют оригинальную концепцию дисперсионных моделей, вводя случайное распределение параметров в дискретных моделях приводят к большому числу вариаций модели без изменения исходного характера модели. Поскольку детерминированные модели описываются дифференциальными уравнениями, их применение с использованием параметров модели, распределенных случайным образом, подходят только для макромасштабных исследований, где влияние насыпной плотности катализатора пренебрежимо мало. Существует другая классификация, основанная на последовательных уровнях моделирования на различных плоскостях наблюдений:

- Микроскопический уровень, который соответствует элементам большого объема при молекулярном масштабе, но при небольших элементах в гранулометрии слоя. Транспортные процессы описываются теоретически дифференциальными уравнениями типа континуума.

- Первый макроскопический уровень, соответствующий местным феноменологическим наблюдениям, который предполагает, что элементы объема достаточно велики, чтобы рассматривать катализатор как локально однородный. На этом уровне могут быть определены районированные переменные (например, удержание жидкости, скорость орошения), и все транспортные процессы могут быть описаны с использованием концепции элементарной транспортной ячейки на основе упрощенного представления катализатора.

- Второй макроскопический уровень, характеризует слой катализатора в целом. Фромент и Бишофф представили, пожалуй, самую популярную классификация непрерывных моделей адиабатического и неадиабатического фиксированного слоя катализатора в реакторах. Они считали, что если градиентами концентрации и температуры по фазовым границам нельзя пренебречь, концепция континуума может быть сужена до фаз, присутствующих в реакторах (гетерогенные модели континуума), а если гетерогенная система флюидов - частиц рассматриваются как единая псевдооднородная фаза, то моделирование непрерывных процессов резко упрощается до переменных состояния одного изотопный континуум (псевдооднородные континуум-модели). Простой псевдооднородная модель, предложенная в литературе для прогнозирования поведения гидроочистки проточных реакторов, можно сгруппировать в два типа: кинетические модели и гидродинамических моделей

Кинетические модели обычно являются функциями внутренних состояний и не учитывают влияние гидродинамики и связанных с ней явлений по коэффициенту конверсии. Гидродинамические модели пытаются включить влияние гидродинамики на использование катализатора, как правило,

предполагая, что имеется поток питания и введение удельной константы кинетической скорости.

В развитии гидродинамики были выполнены два подхода моделей: один, относящийся к общей эффективности реактора к внешнему смешиванию жидкости и другой, относящийся к эффективности контактирования жидкость - твердое вещество, которые могут быть определены с задержкой жидкости или скоростью орошения. Псевдооднородные модели рассматривают слой как псевдоконтинуум, в то время как гетерогенные модели различают температуры и концентрации в объемной газовой фазе и на поверхности катализатора. Каждая категория могут рассматриваться с одномерными или двумерными моделями для учета в меньшей или большей степени подробности информация о градиентах температуры и концентрации внутри реактора.

Уровень сложности модели реактора зависит главным образом, от целей расследования и необходимости использования возможностей прогнозирования. С одной стороны, простейшие модели предполагают либо идеальное смешивание, либо идеальное вытеснение (т. е. известные крайние случаи идеальности). Отклонения от таких идеальных образцов потока часто учитываются с использованием коэффициента осевой дисперсии. С другой стороны, самые сложные модели допускают жидкостной динамике с прямым численным решением уравнений Навье – Стокса наложить на него кинетику. Не существует правил для определения сложности моделей; однако наилучшей практикой является рассмотрение простейших моделей со всеми основными и затем повышением сложности для уменьшения ошибки между экспериментальные и расчетные данные. Уравнение модели сложность которого определяется сильно условиями потока часто бывает достаточно

применения схемы моделирования Фронтмена. В общем, чтобы описать все физические и химические явления реакторных процессов модель должна иметь следующие характеристики:

1. Модель должна быть консервативная система.
2. Модель не должна прогнозировать смещение материала на большие расстояния.
3. Модель должна привести к правильному асимптотическому (стационарному) решению [2].

Список использованной литературы:

1. Шариков Ю. В., Белоглазов И.Н. Реакторное оборудование в процессах нефтегазопереработки. Национальный минерально-сырьевой университет «Горный». СПб, 2012. 135 с.
2. Ancheyta Jorge. Modeling and simulation of catalytic reactors for petroleum refining. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2011. 525 с.
3. Шариков Ю. В., Петров П. А. Универсальная модель каталитического риформинга. Химическое и нефтегазовое машиностроение, 2007, №10.

Опубликовано: 30.10.2018 г.

© Академия педагогических идей «Новация», 2018

© Шариков Ю.В., Ткачев И.В., Снегирев Н.В., 2018