

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРОДИНАМИКИ РЕАКТОРА ЕСТЕСТВЕННОЙ ЦИРКУЛЯЦИИ
ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОЙ ТРИМЕРИЗАЦИИ ЭТИЛЕНА В ГЕКСЕН-1**

Кульчаковский П.И.^{1,2}, Ермолаев В.С.³, Рускин О.А.²

Научный руководитель к.т.н., научный сотрудник Н.С. Белинская¹

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

²ООО НИОСТ, г. Томск, Россия

³Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов, г. Троицк, Россия

В настоящее время в промышленности распространен процесс производства линейных альфа-олефинов, в частности гексена-1, который широко применяется в качестве сомомера при производстве линейного полиэтилена низкой плотности (linear low density polyethylene, LLDPE). Одним из наиболее эффективных способов синтеза гексена-1 является селективная тримеризация этилена на хромсодержащих катализаторах [1]. При этом с практической точки зрения важной задачей при разработке технологии является подбор оптимального аппаратного оформления реакторного узла. Так при выборе аппарата следует предусмотреть отсутствие «мертвых зон», а также возможности образования «горячих пятен». Кроме того, необходимо обеспечить интенсификацию процессов тепло- и массообмена. Примером такого реактора может являться эрлифтный аппарат с естественной циркуляцией реакционной массы, описанный в патенте [2].

Аппарат выполнен в виде вертикального трубчатого теплообменника, в верхней зоне которого происходит отделение газовой и жидкой фаз. Трубы в трубной решетке поделены на барботажные и циркуляционные. Нижние концы циркуляционных труб выведены под трубную решетку на расстояние l . Нижняя часть реактора выполнена в виде барботажной колонны, в которую подаются жидкая и газовая фазы. Диаметр и количество входных отверстий выбираются исходя из условий работы.

Попытки определения структуры газожидкостного потока в газлифтом реакторе подобной конструкции были предприняты авторами в [3]. Результаты исследований при малых приведенных скоростях газа ($w_r < 0,1$ м/с) показали формирование в барботажных трубах пузырькового режима течения с распределением отдельных пузырей различных размеров, не зависящих от условий входа газа в трубу. Также было показано, что при приведенных скоростях газа более 10 м/с режим переходит в стержневой, в котором основная масса газа движется в центре трубы, окруженная восходящим потоком жидкости.

Для определения скорости циркуляции жидкости и газо-жидкостной смеси в трубах целесообразно провести анализ распределения давлений в верхней и нижней частях реактора и установить уравнение расчета сопротивления по газовой фазе. Так была оценена приведенная скорость движения газовой фазы 0,052 м/с и приведенная скорость жидкой фазы 0,16 м/с. Истинная скорость жидкости, выраженная через газосодержание, составляла 0,173 м/с.

Следует отметить, что представленная методика применялась для случая подвода газовой фазы непосредственно в барботажные трубки. Для уточнения расчета был проведен численный эксперимент, поскольку прямое оптическое исследование газораспределения затруднено по причине высокого давления процесса (0,5–19 МПа [1]). В частности, в данной работе описываются результаты исследования гидродинамики процесса в модели, созданной в ПО OpenFOAM v6. Однако, следует отметить, что прямое численное моделирование промышленных аппаратов большого объема сопряжено с потребностью в значительных вычислительных ресурсах, а также проблемах с численной сходимостью при интегрировании методом конечных объемов. По этой причине исследование было разделено на две подзадачи:

- определение характеристик течения среды и газораспределения в нижней части аппарата, эллиптическом днище;
- определение характеристик течения среды и газораспределения в модельной части трубного пространства – трех трубках аппарата.

В качестве математической модели тепло-массопереноса в реакторе принята модель взаимопроникающих сред в постановке Эйлер-Эйлер (reactingEulerFoam solver). Основными особенностями модели являются:

- учет механики взаимодействия сред и его влияние на совместное течение;
- учет переходов между фазами;
- учет эффектов инерции за счет использования понятия присоединенных масс;
- учет тепло- и массообмена как внутри фаз, так и между ними.

Расчеты проводились с использованием модели Шиллера-Науманна для описания межфазного трения, закона Генри для описания межфазной диффузии и корреляции из работы Нессета [4] для оценки среднего диаметра пузырьков газа по Сотеру (1,68 мм):

$$d_{32} = 0.289 \rho_L^{-0.552} \mu_L^{-0.048} \sigma^{0.442} U_G^{-0.124},$$

где d_{32} – диаметр по Сотеру, м; ρ_L – плотность жидкой фазы, кг/м³; μ_L – динамическая вязкость жидкости, Па*с; σ – поверхностное натяжение, Н/м; U_G – скорость газа, м/с.

Результаты расчета эллиптического днища приведены на рисунке 1.

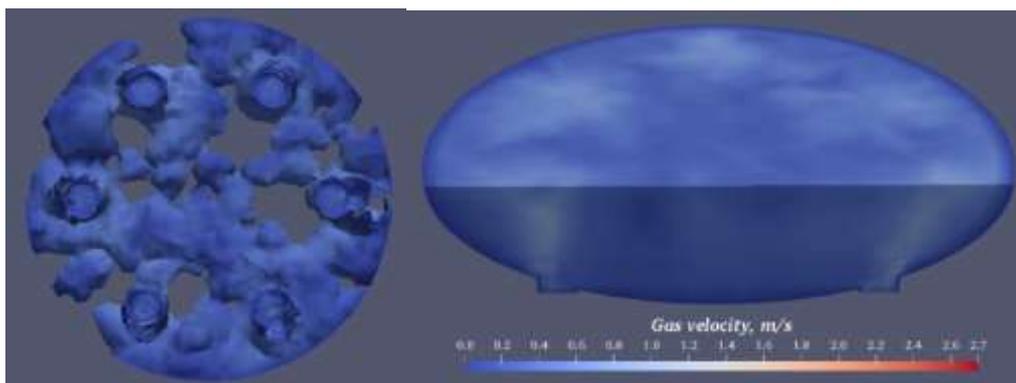


Рис. 1. Изоповерхности газовой фазы и скорость газа в эллиптическом днище реактора

Таким образом, математическое моделирование позволило подобрать оптимальные геометрические характеристики эллиптического днища, в частности подобрать конфигурацию газоподводящих штуцеров, обеспечивающую равномерное газораспределение для распределения по барботажным трубам.

Результаты расчета модельной части трубного пространства приведены на рисунке 2.

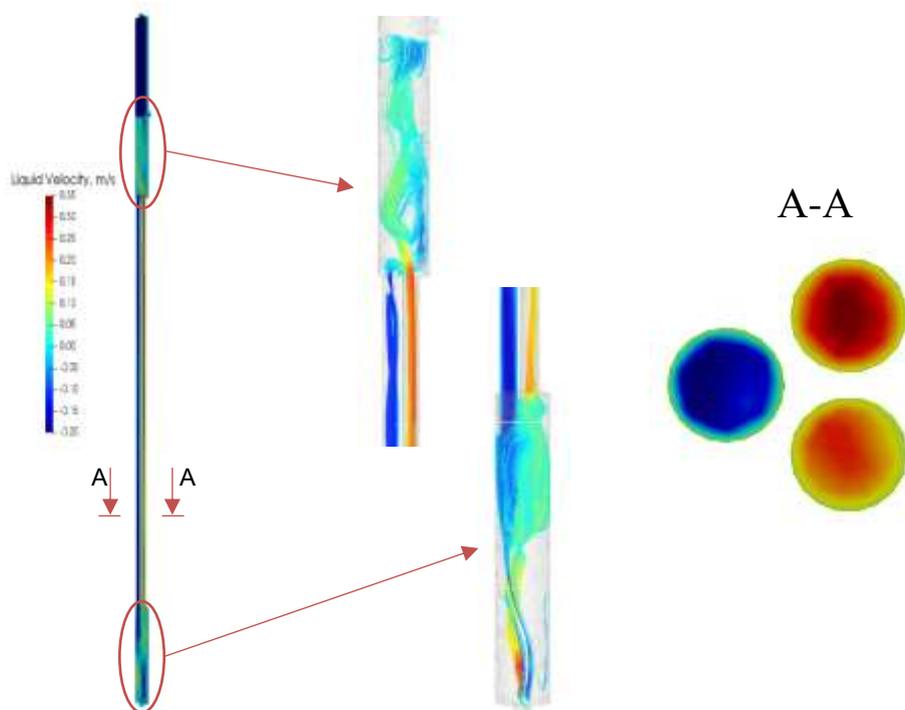


Рис. 2. Линии тока и скорость жидкости в модельной сборке циркуляционных труб

Из рисунка видно, что в аппарате возникает естественная циркуляция – положительные и отрицательные скорости соответствуют восходящему потоку, возникающему в коротких трубках, и нисходящему потоку в удлиненных трубках соответственно. Также моделирование позволило по линиям тока определить характерную высоту верхней части аппарата, способствующую снижению турбулентности потока, а следовательно, и оптимальному разделению газожидкостного потока.

Помимо прочего из рисунка видно, что истинные скорости жидкой фазы в трубах находятся в диапазонах, которые соответствуют скоростям, определенным по методике из работы [3]. Таким образом, можно сделать вывод о том, что результаты CFD-моделирования с высокой степенью точности согласуются с инженерной методикой.

Литература

1. Белов Г. П. Каталитический синтез высших олефинов из этилена // Катализ в промышленности. – 2014. – №. 3. – С. 13-19.
2. Патент wo2021137713 // Process for trimerization of ethylene and apparatus for trimerization of ethylene.
3. Соколов В.Н., Доманский И.В. Газожидкостные реакторы. - 1-е изд. - Л.: Машиностроение, 1976. - 216 с.
4. Nasset J. E. Modeling the Sauter mean bubble diameter in mechanical forced-air flotation machines. – 2011.