

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ ДЛЯ АНАЛИЗА РАБОТЫ ПРОМЫШЛЕННЫХ ОБЪЕКТОВ НЕФТЕХИМИИ

Хлебникова Е.С., Беккер А.В.

Научный руководитель: Ивашкина Е.Н., д.т.н., профессор  
Томский политехнический университет, 634050, Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30  
e-mail: elena.khle@gmail.com

Одной из основных целей математического моделирования технологических систем является прогнозирование как на этапе их проектирования, так и эксплуатации основных характеристик и особенностей функционирования в реальных условиях промышленного производства.

Ранее на кафедре химической технологии топлива и химической кибернетики на основании данных, полученных на российском нефтехимическом предприятии, была разработана математическая модель процесса алкилирования бензола этиленом в присутствии катализаторного комплекса  $AlCl_3$ . В результате данная модель позволяет проводить численные исследования промышленной технологии [1].

Изучение гидродинамики таких процессов, а именно стадии смешения реагентов, невозможно без применения современных методов вычислительной гидродинамики.

Целью данной работы являлось численное исследование процесса алкилирования бензола этиленом и оценка целесообразности реконструкции смесительного оборудования реакторного блока установки получения этилбензола с использованием методов вычислительной гидродинамики.

Для оценки эффективности работы новой камеры смешения было выполнено моделирование данного смесителя с использованием программных комплексов *Abaqus* и *Flow Vision*.

С помощью программного продукта *Abaqus* 6.6 была создана геометрическая модель смесительных элементов (рис. 1).

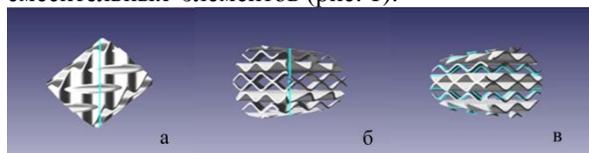


Рис. 1. Геометрические модели смесительных элементов

В дальнейшем была создана модель смесительного устройства, в которую монтируются данные элементы (рис. 2).

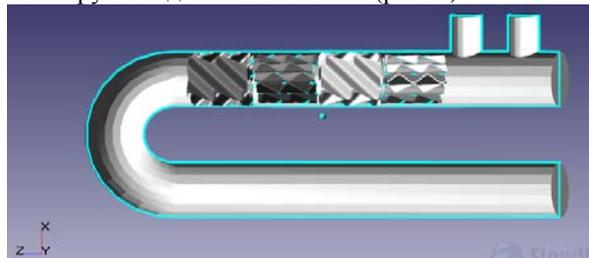


Рис. 2. Модель смесителя в продольном сечении

С использованием выбранного программного обеспечения применение методов вычислительной гидродинамики к исследованию процесса смешения реагентов подразумевало последовательное выполнение следующих этапов:

1. Формирование геометрической модели, которая в дальнейшем дискретизировалась, задание необходимых физических условий, начальных и граничных условия решения дифференциальных уравнений.

2. С использованием программного продукта *Flow Vision* выполнения численных расчетов основных уравнений динамики жидкости и газа, с точки зрения определения базовых физических параметров (скорость, давление, плотность, температура, энтальпия и т. д.), запись результатов решения в память.

3. Анализ результатов решения в виде графиков, таблиц, а также контурных/векторных схем, привязанных к исходной геометрии.

Задание физической модели начиналось с задания физико-химических свойств смешиваемых веществ, в частности этилена, бензола и катализаторного комплекса (табл. 1).

Таблица 1. Физико-химические свойства сырьевых потоков

Свойство	Бензол	Каткомплекс	Этилен
Молярная масса, кг/моль	0,0781	0,4095	0,024
Плотность, кг/м <sup>3</sup>	878	1050	1,178
Вязкость, кг/(м·сек)	0,0006	0,001	1,04·10 <sup>-5</sup>
Массовый расход, кг/сек	3,61	2,23	0,36
Массовая скорость, кг/(м <sup>2</sup> ·сек)	766,87	444,4	21,09

Модель движения жидкость/газ выбиралась на основе допущения о том, что жидкости и газы подчиняются закону трения Ньютона [2]:

$$\tau = \mu \frac{\partial v}{\partial n}, \quad (1)$$

где  $\mu$  – динамическая вязкость, Па·с;  $v$  – скорость жидкости, м/с;  $n$  – направление, перпендикулярное границе частицы жидкости, в точке которой определяется касательное напряжение.

В выборе модели массопереноса учитывались химические реакции, сопровождающие процесс перемешивания (модель «Перемешивание + Химия»).

Дифференциальные уравнения аппроксимировались на расчётной сетке в предположении, что каждая ячейка представляет собой конечный объём, в котором скорости изменения физических величин сбалансированы потоками этих величин через грани ячейки [3].

В результате во *Flow Vision* была сгенерирована расчётная сетка из 117616 ячеек (рис. 3).

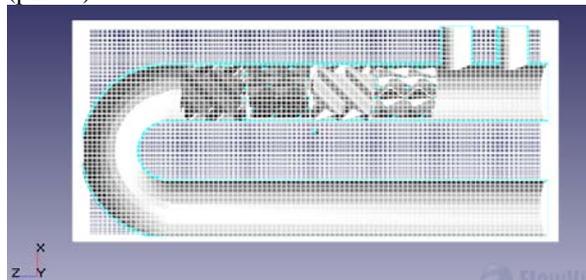


Рис. 3. Генерация расчётной сетки

Сходимость по сетке является оценкой точности получаемого решения, когда экспериментальные данные получить невозможно или они недостоверны. Решение основано на проведении серии расчетов одной и той же задачи с различными расчётными сетками.

В качестве исследуемых параметров были выбраны массовые доли поступающих в смеситель веществ на выходе из него.

Для трех различных сеток были получены результаты изменения массовых долей катализатора, бензола и этилена на выходе из смесителя по шагам.

В начальных условиях массовая доля катализатора в смесителе была принята равной 1, т.е. катализатор заполнял все внутреннее пространство смесителя перед началом расчета. По этой причине массовая доля катализатора на выходе оказалась максимальной на протяжении первых шести шагов, затем, в течение трех шагов резкое уменьшение концентрации и выход на стационарный режим.

При проведении расчетов возникла необходимость определения целесообразности использования одного из патрубков для ввода бензола, а второго – для ввода катализаторного комплекса. Поэтому расчет проводился для двух вариантов:

1. Ввод катализатора в первый патрубок, бензола – во второй.
2. Ввод бензола в первый патрубок (левый), катализатора – во второй (правый);

Результаты решения представлены в форме цветowych схем, цветовая шкала на рисунке отражает численное значение массовой/мольной доли и соответствующий цвет.

Как видно из рис. 4, эффективное перемешивание потоков наблюдается уже после второго смесительного элемента, мольная доля бензола на выходе из смесительного устройства находится на уровне 0,7–0,8.

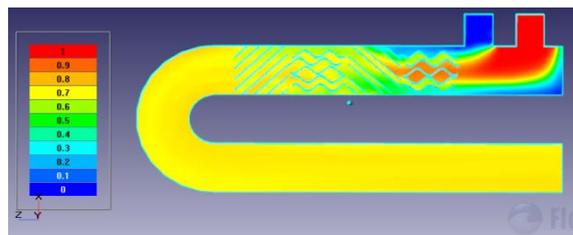


Рис. 4. Мольная доля бензола в продольном сечении устройства (первый вариант ввода)

Изменение мольных долей бензола в продольном сечении устройства для второго варианта ввода представлено на рис.5.

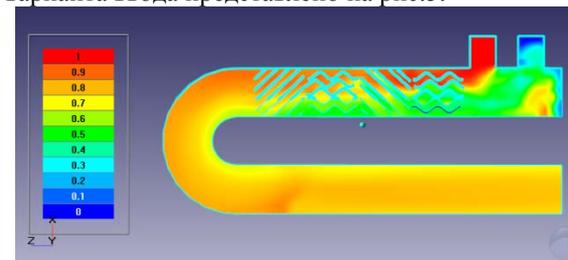


Рис. 5. Мольная доля бензола в продольном сечении устройства (второй вариант ввода)

Мольная доля катализатора в сечении смесителя составила 0,06–0,08, что оказалась ниже, чем в первом варианте ввода.

Выполненные численные исследования показали, что мольная доля катализатора в области смесительных элементов камеры при этом составит 0,06–0,08 (в случае ввода катализатора в первый патрубок, бензола – во второй – 0,1–0,15). Такой результат обуславливается физическими свойствами жидкостей, а также большим массовым расходом бензола относительно расхода катализаторного комплекса.

Проведение дальнейших численных исследований позволит определить оптимальные технологические параметры работы смесительного и реакторного оборудования (расход бензола, этилена и катализаторного комплекса), обеспечивающие эффективное протекание процесса алкилирования при требуемом выходе целевого продукта.

Список литературы:

1. Долганова И.О., Белинская Н.С., Ивашкина Е.Н., Мартемьянова Е.В., Ткачев В.В. Повышение эффективности технологии получения этилбензола с использованием метода математического моделирования // *Фундаментальные исследования*. – 2013. – № 8 (часть 3). – С. 595-600.
2. Чижумов С. Д. Основы гидродинамики: Учебное пособие / С. Д. Чижумов. – Комсомольск-на-Амуре : ГОУВПО «КнАГТУ», 2007.
3. Моделирование трехмерных стационарных и нестационарных течений жидкости и газа [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.flowvision.ru/>