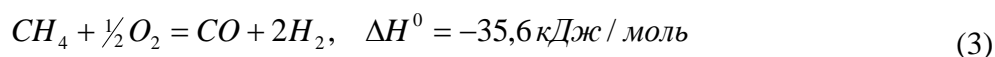
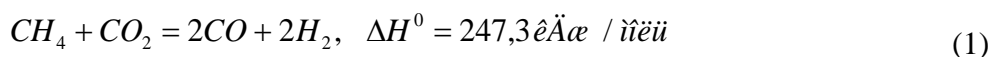


КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ КАТАЛІТИЧНОГО ТРИ-РИФОРМІНГУ МЕТАНУ В ІНТЕГРАЛЬНОМУ ПРОТОЧНОМУ РЕАКТОРІ

Ткаченко А.А., Губарені Є.В., Безносик Ю.О.

Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»

Процес три-риформінгу метану – це комбінація CO_2 -риформінгу (1) (вуглекислотної конверсії), парового риформінгу (2) та парціального окислення метану (3) у реакторі для ефективного виробництва синтез-газу ($\text{CO} + \text{H}_2$) з потрібним відношенням H_2/CO :



Математичне моделювання процесу три-риформінгу метану необхідне для вивчення кінетики процесу та керування процесу, а також його оптимізації.

Розглянемо математичну модель три-риформінгу в синтез-газ в реакторі проточного типу, заповненого твердим пористим матеріалом. Схематичне зображення реактору приведено на рис. 1.

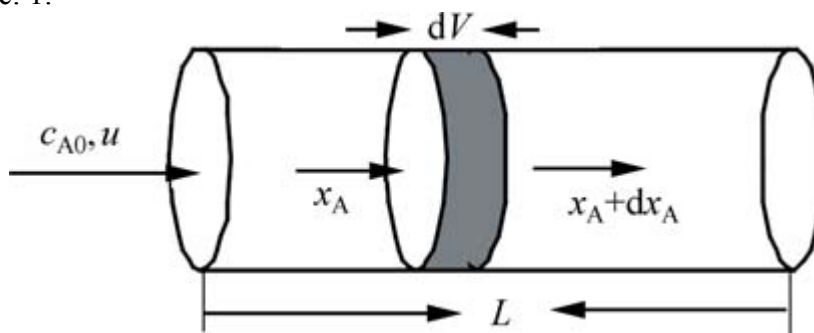


Рис 1. Схема інтегрального проточного реактору.

Початкова концентрація реагенту A на вході в реактор c_{A0} , відповідно його витрата u , швидкість перетворення компоненту A на вході в мікробар товщиною dV становитиме x_A , та $x_A + dx_A$ на виході з нього. Коли процес конверсії досягне стану рівноваги, відповідно до закону збереження маси стан рівноваги можна описати наступними виразами:

$$uc_{A0}dx_A = r_A dV$$

$$dV / (uc_{A0}) = dx_A / r_A$$

Динамічне інтегральне рівняння конверсії по компоненту A :

$$t = c_{A0} \int_0^x dx_A / r_A$$

де V – об'єм реактору, м^3 ; u – витрата реагенту, $\text{м}^3/\text{сек}$; c_{A0} – початкова молярна концентрація $\text{моль}/\text{м}^3$; x_A – швидкість перетворення, %; r_A – швидкість реакції, $\text{моль}/(\text{м}^3 \cdot \text{сек})$; t – час конверсії, сек .

На вхід подаються реагенти CH_4 , O_2 , CO_2 та H_2O у заданому складі, виходом являються такі газоподібні продукти: H_2 , CO , CO_2 та H_2O . Отже в реакторі окрім реакцій (2) і (3) протікає незалежна реакція зсуву водяного газу:



І відповідно до них кінетика процесу три-риформінга основана на законі:

$$r(i) = A \exp\left(\frac{-E_{app,i}}{RT}\right) (P_{CO_2})^{\alpha,i} (P_{H_2O})^{\beta,i} \quad (5)$$

де i – CH_4 чи CO_2 ; $r(i)$ – швидкість перетворення CH_4 чи CO_2 ; A – перед експоненціальний фактор; (α,i) , (β,i) – порядок реакцій; $E_{app,i}$ – енергія активації відносно конверсії CH_4 чи CO_2 .

Для умов адіабатичного реактору рівняння збереження енергії для газової суміші:

$$\varepsilon \sum_i c_i u_i \frac{\partial T_g}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) + \alpha (T_s - T_g) + \varepsilon \sum_{j_{gas}} Q_j W_j - G \frac{\partial T_g}{\partial x},$$

рівняння збереження енергії для конденсату:

$$(1 - \varepsilon) c_s \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = (1 - \varepsilon) \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \right) + \alpha (T_g - T_s) + (1 - \varepsilon) \sum_{j_{het}} Q_j W_j,$$

рівняння збереження маси для i -того компонента газової суміші:

$$\varepsilon \frac{\partial u_j}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \frac{\partial u_i}{\partial x} \right) + \varepsilon \sum_{j_{gas}} (\beta_{ij} - \alpha_{ij}) W_j - \varepsilon \frac{\partial u_i v_g}{\partial x},$$

і рівняння ідеального газу:

$$p = \sum_i p_i = RT_g \sum u_i,$$

де u_i – молярна концентрація в i -тому газовому компоненті; $G = \varepsilon v_g \sum_i c_i u_i$ – питома теплоємність газового потоку; T_s та T_g – температури сухого пористого матеріалу та газу; α – міжфазний коефіцієнт теплопередачі; λ_s та λ_g – коефіцієнти теплопровідності сухого матеріалу та газу; c_i та c_s – питома теплоємність i -того газового компоненту та газу; D_i – коефіцієнт дифузії i -того компоненту; α_{ij} та β_{ij} – стехіометричні коефіцієнти; W_j та $Q_j = -\sum (\beta_{ij} - \alpha_{ij}) \Delta h_i$ – інтенсивність та теплота j -тої реакції (Δh_i – ентальпія утворення i -тої речовини); v_g – швидкість газу; p – тиск; x – вісь координат; t – час; ε – пористість.

Систему рівнянь завершують граничні умови враховуючи потік газу, тобто це випадок де реактор безперервно отримує постійну кількість свіжої газової суміші.

Граничні умови для системи рівнянь мають вигляд:

$$\frac{\partial T_s}{\partial x} = 0, \text{ при } x = 0 \text{ та } x = L;$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial x} = 0, \text{ при } x = L;$$

$$T_g + b \frac{\partial T_g}{\partial x} = T_g^0, \text{ при } x = 0,$$

де $b = \frac{1}{Pe(T_g)}$, $Pe(T_g) = \sum_i c_i u_i \frac{v_g^0}{\lambda_g^0 \sqrt{\frac{T_g^0}{273}}}$; T_g^0 , v_g^0 та λ_g^0 – температура, швидкість та

теплопровідність газової суміші на вході в реактор.

$$u_i + b_i \frac{\partial u_i}{\partial x} = u_i^0, \text{ при } x = 0,$$

де $b = \frac{1}{Pe(i)}$, $Pe(i) = \sum_i \frac{v_g^0}{D_i^0 \sqrt{\frac{T_g^0}{273}}}$; u_i^0 та D_i^0 – концентрація та коефіцієнт дифузії початкових

реагентів;

$$\frac{\partial u_i}{\partial x} = 0, \text{ при } x = L.$$

Граничні умови для інших речовин, які утворюються і не додаються в потік живлення, такі:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x} = 0, \text{ при } x = 0 \text{ та } x = L.$$

Чисельним рішенням системи рівнянь є вихідні параметри: концентрація продукту реакції та температури твердого матеріалу та газу, як функції часу в кожній точці реактора.

Рівняння (5) може включати в себе елементи, які містять парціальні тиски CH_4 та O_2 . В нашому випадку, оскільки реакція є гетерогенною і відбувається на поверхні в стаціонарному режимі, парціальні тиски CH_4 та O_2 приймаються постійними і тому визначається лише CO_2 . Отже, елементи які містять парціальні тиски CH_4 та O_2 об'єднуються з іншими константами в A у рівнянні (5).

Результатом дослідження є створення математичної моделі для визначення оптимального складу реагентів для отримання синтез-газу потрібного складу та визначення кінетичних залежностей.

Розроблена математична модель три-риформінгу метану для пористих каталітичних систем у реакторі інтегрального проточного типу дозволяє оцінювати вплив факторів (температури, концентрації компонентів, адіабатичності) на процес та порівнювати експериментальні результати роботи з метою впливу хімічних факторів на активність та селективність процесу. Також розроблена нами математична модель дозволяє оптимізувати процес за необхідними параметрами.

АВТОМАТИЗОВАНЕ ПРОЕКТУВАННЯ ОПТИМАЛЬНОГО СКЛАДУ СБС ІЗ ЗАДАНИМИ РЕОЛОГІЧНИМИ ПОКАЗНИКАМИ

Теліцина Н. Є., Скіданова Г. М., Суруп І. В.

Національний технічний університет України «КПІ», natashakxtp@mail.ru

Вступ. Будівельні суміші – основа промислового і житлового будівництва. Від рівня їхнього виробництва та якості залежать темпи і ефективність будівельних робіт, що суттєво впливає на собівартість житла. Одними із найважливіших показників якості будівельного розчину є реологічні показники, що найбільшим чином впливають на зручність роботи з розчином та на якісні показники затверділого розчину. Це вимагає використання ефективних методів проектування їх складів з урахуванням бажаних рівнів заданих реологічних показників.