

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОМАССОБМЕНА В ТРУБЧАТОМ КАТАЛИТИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ СПОСОБАХ НЕРЕГУЛЯРНОЙ УКЛАДКИ ЗЕРЕН КАТАЛИЗАТОРА

В.М. Ханаев, О.П. Кленов, Е.С. Борисова, А.С. Носков

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, г.Новосибирск

Современные каталитические реакторы трубчатого типа содержат до 20-30 тысяч отдельных трубок длиной до 15 метров. Эффективность использования достоинств вновь разрабатываемых катализаторов, повышение показателей уже используемых катализаторов самым существенным образом зависят от методов загрузки трубчатых реакторов. Разброс величины насыпной плотности и, соответственно, гидравлического сопротивления в разных трубках приводит к реализации различных режимов течения в разных трубках. Это может вызвать существенное ухудшение показателей процесса, перегрев и термодезактивацию катализатора. Влияние загрузки трубчатых реакторов на показатели как каталитического процесса, так и на срок службы реактора, гораздо больше, чем для адиабатических реакторов. В настоящей работе методами математического моделирования исследовалось влияние способа загрузки катализатора на основные характеристики процесса в трубчатом реакторе (температуру, степени превращения реагентов).

Изучение формирования пространственно-неоднородных структур в неподвижном зернистом слое. Математическое моделирование укладки

При моделировании укладки зернистого слоя считалось, что все частицы катализатора имеют форму сфер одинакового размера, которые укладывались на опорную решетку в цилиндрической обечайке. Это предположение позволяет резко упростить расчет координат уложенных частиц, а также не рассматривать проблемы, связанные с изменением ориентации частиц. При расчетах предполагалось, что расположение частиц на опорной решетке задается произвольным образом. Далее происходила последовательная укладка остальных частиц. Считалось, что в процессе укладки они не взаимодействуют друг с другом. Частицы укладывались в устойчивое расположение по отношению к силе тяжести. Очевидно, что устойчивое положение возможно, когда частица опирается на три сферы, две сферы и стенку цилиндра. После заполнения опорной решетки число вакантных мест, куда можно поместить новую частицу, становится конечным. При этом часть мест, свободных для новых частиц, являются конкурентными между собой, то есть занятие конкурентного места приводит к тому, что соседнее свободное место становится недоступным. Поэтому при формировании зернистого слоя существенным является порядок заполнения реактора.

Было выбрано 4 алгоритма упорядоченной укладки заполнения реактора, которые отражали возможные варианты экспериментальной укладки слоя, и 2 алгоритма регулярной укладки.

Упорядоченные укладки:

1. вариант «минимум» – каждая новая частица укладывалась в наиболее глубокое место (с минимальной потенциальной энергией).
2. заполнение вакантных мест происходит от цилиндрической стенки.
3. заполнение вакантных мест - от оси цилиндра.
4. вариант «случайный» - используется датчик случайных чисел, согласно которому выбираются вакантные места.

Регулярные упаковки:

1. кубическая,
2. тетраэдрическая.

На рисунке 1 показаны примеры алгоритмов упорядоченных укладок частиц.

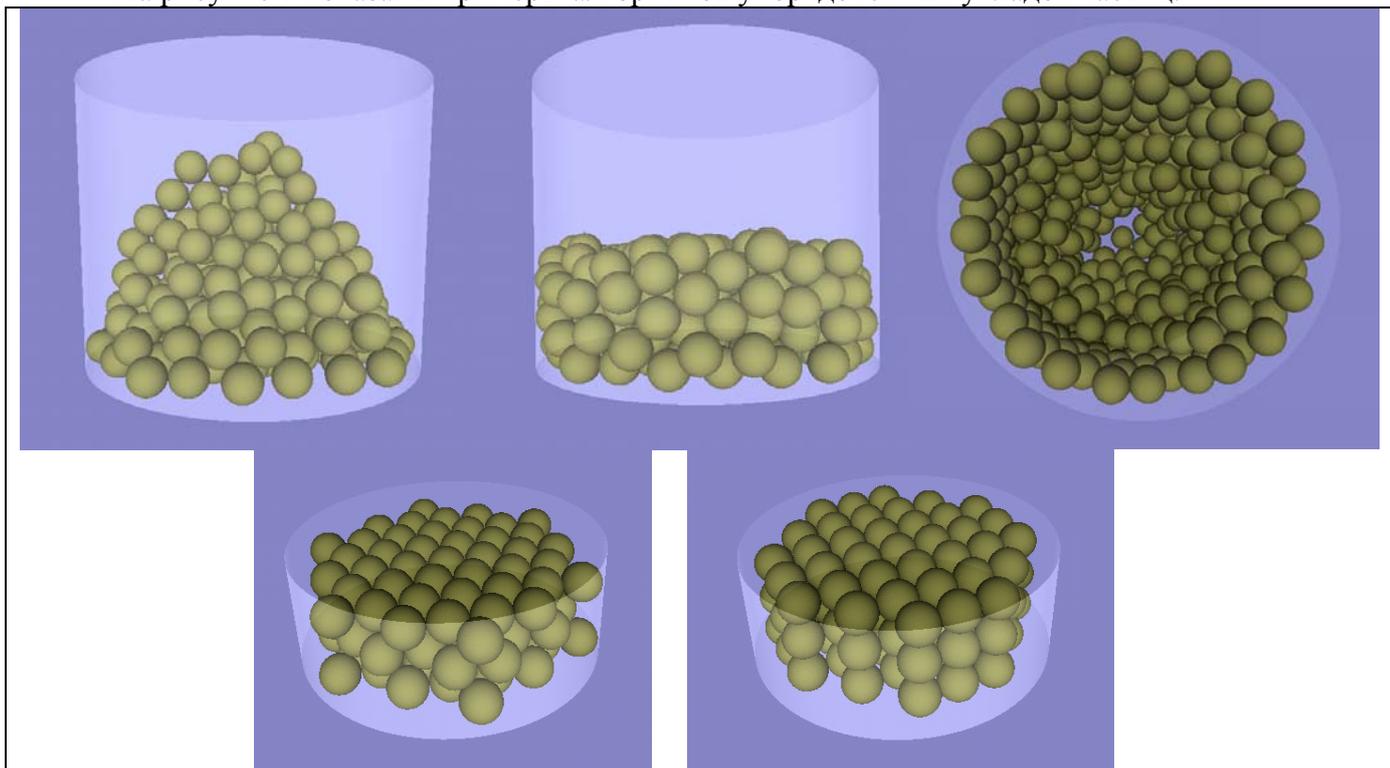


Рис. 1. Примеры укладок частиц. Вверху примеры упорядоченной укладки: загрузка от центра, «минимальная» загрузка, загрузка от стенки (вид сверху). Внизу – регулярные упаковки: тетраэдрическая и кубическая.

Также моделировались укладки частиц, при которых первый опорный слой имел регулярную структуру. Было исследовано изменение по высоте структуры укладки частиц.

На рис 2 показаны горизонтальные срезы неподвижного слоя, выполненные на разной высоте.

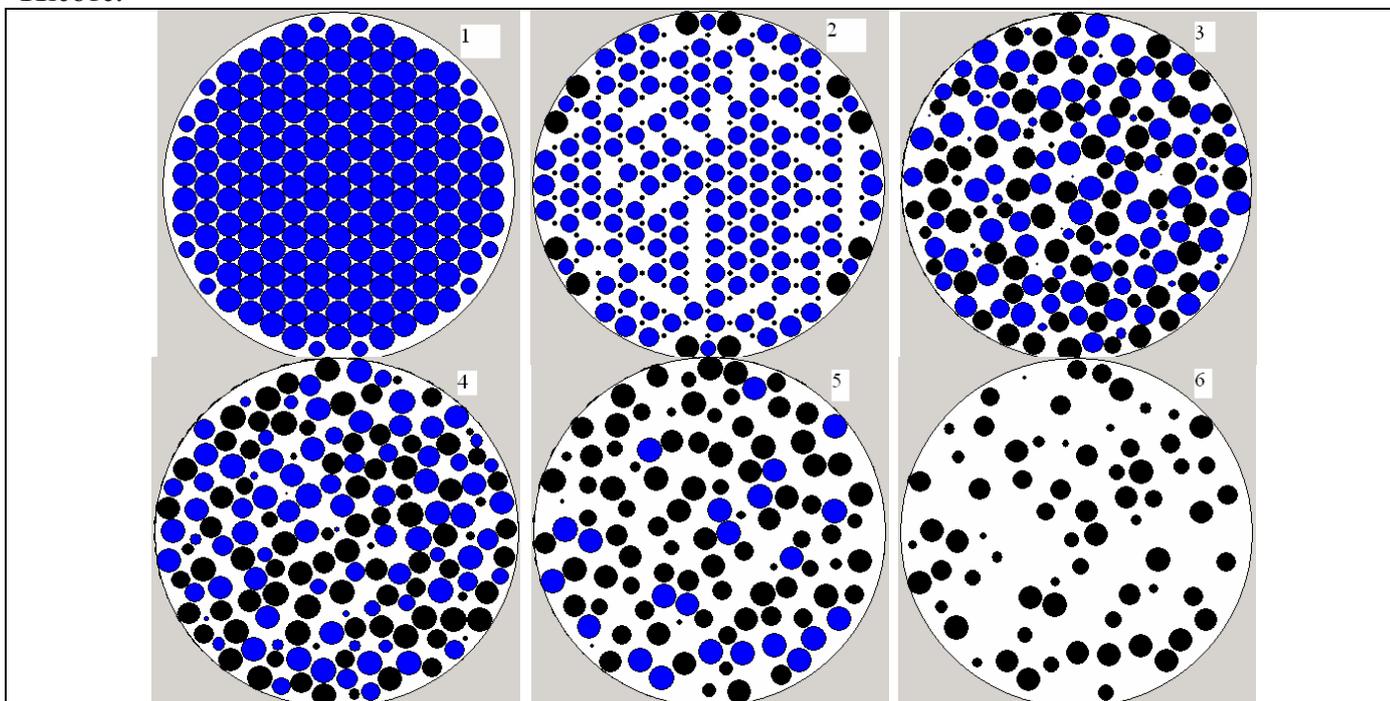


Рис. 2. Горизонтальные срезы неподвижного слоя, выполненные на разной высоте слоя. Слой сформирован «минимальным» методом на регулярно упакованный опорный монослой частиц.

Видно, что с увеличением высоты слоя регулярность упаковки нарушается, переходя в конечном итоге к упорядоченному типу укладки. Таким образом, было показано, что упорядоченная укладка является статистически устойчивой и не зависит от начального слоя.

Был произведен расчет распределения порозности по радиусу аппарата, для различных способов укладки и различной высоте зернистого слоя. Результаты представлены на рисунке 3.

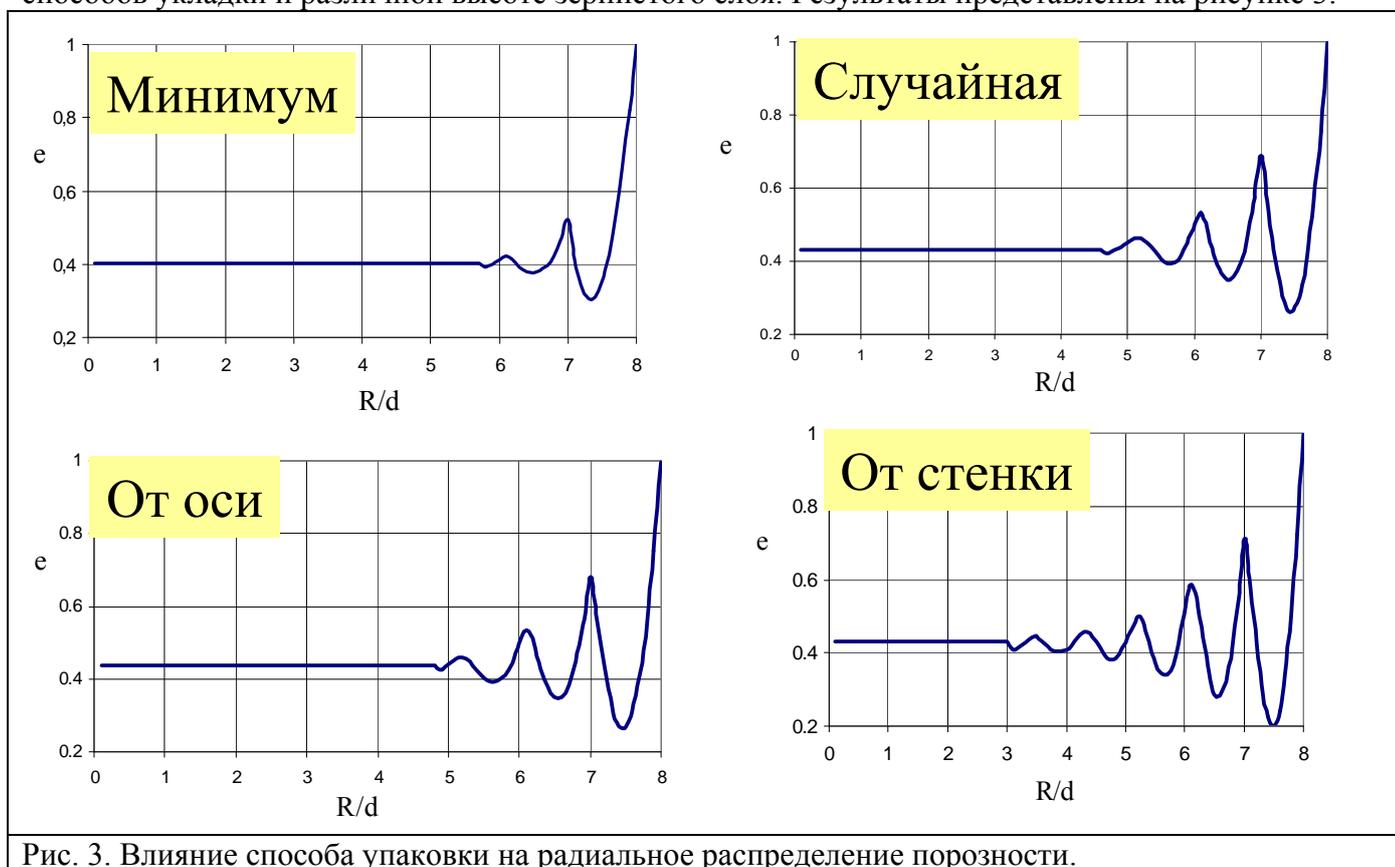


Рис. 3. Влияние способа упаковки на радиальное распределение порозности.

Возле стенки аппарата изменение порозности носит периодический характер, что свидетельствует о более регулярной упаковке шаров. К оси аппарата периодичность изменения порозности пропадает, это означает, что укладка здесь случайная. Можно видеть, что для всех способов загрузки наблюдаются уплотнения, имеющие форму колец. Число колец зависит от способа укладки. Наиболее сильно это выражено при способе укладки «от стенки». При данном способе, «кольца» уплотнений распространяются в глубь практически до центра реактора.

Таким образом, по результатам имитационного моделирования загрузки каталитического слоя получено, что:

Различные алгоритмы укладки зернистого слоя влияют на среднюю порозность по слою и вариации порозности у стенки, причем эти результаты статистически устойчивы.

Максимально плотные укладки реализуются, когда шары последовательно укладываются в места с минимальной потенциальной энергией.

Рыхлые упаковки получаются, когда шары равномерно укладываются по сечению по случайному алгоритму.

Рассмотренные способы укладки дают различные распределения порозности по радиусу.

Гидравлическое сопротивление частиц в слое

Обычно слой частиц рассматривается как система каналов (капилляров) с гидравлическим диаметром d_h (внутренняя задача), либо как совокупность обтекаемых частиц (внешняя задача)[1]. Данный подход позволяет определить через характерный размер частиц и порозность слоя среднюю скорость потока и перепад давления в слое. Однако при расчете профиля локальных скоростей по радиусу, так как гидравлический диаметр d_h при $r=0$ (на стенке) стремится к бесконечности, на стенке возникают бесконечные скорости. В данной работе предложено модифицировать гидравлический диаметр у стенки, таким образом, чтобы его радиус не превышал расстояния до стенки, что соответствует ясному физическому представлению: диаметр струи не должен выходить за пределы аппарата. Это позволило корректно, в соответствии с имеющимися данными, описать профиль скоростей у стенки аппарата (в литературе этот профиль известен как “уши” скорости у стенки).

Было показано, что распределение средней скорости потока по радиусу слоя зависит от распределения порозности и, следовательно, также оказывается различным для разных типов упаковки частиц. Наиболее равномерный профиль скорости получается для минимальной укладки. Для укладки от стенки имеют место существенные колебания средней скорости по радиусу. Тетраэдрическая укладка характеризуется минимумом распределения средней скорости во внутренней части трубки, так как основной поток идет около стенки.

Распределения порозности и скорости, полученные моделированием различных типов упаковок слоя, были использованы для моделирования каталитических процессов.

Моделирование каталитических процессов

Методами математического моделирования исследовалось влияние способа загрузки катализатора на основные характеристики процесса в трубчатом реакторе (температуру, степени превращения реагентов). Исследование проводилось для экзотермических и эндотермических реакций. В качестве модельной экзотермической реакции была выбрана реакция окисления метанола в формальдегид (кинетика, начальные данные и условия проведения процесса были взяты из [2]), в качестве эндотермической – паровая конверсия метана (кинетика, начальные данные и условия проведения процесса взяты из [3]). Исследование проводилось в 2 этапа:

1). Влияние средней порозности слоя.

Для расчетов использовалась двумерная стационарная квазигомогенная модель, включающая в себя 2 эффективных коэффициента переноса тепла – коэффициент радиальной теплопроводности и коэффициент теплообмена со стенкой, которые зависят от средней порозности слоя (они определялись по формулам, приведенным в [4]). Температура стенки предполагалась постоянной (для реакции окисления метанола), или изменяющейся по длине для паровой конверсии (профиль температуры стенки трубки был построен по данным [5]).

Для реакции окисления метанола расчеты показали, что уменьшение средней порозности слоя в пределах $0.7 - 0.38$ всегда приводит к увеличению конверсии метанола, при этом очень быстрый рост степени превращения метанола (в 1.5 – 2 раза и более) происходит при уменьшении порозности от 0.7 до 0.5-0.45. В этом диапазоне изменения η также происходит заметное увеличение выхода формальдегида. Дальнейшее уменьшение η приводит к незначительному росту конверсии метанола и к некоторому снижению выхода формальдегида (рис.4).

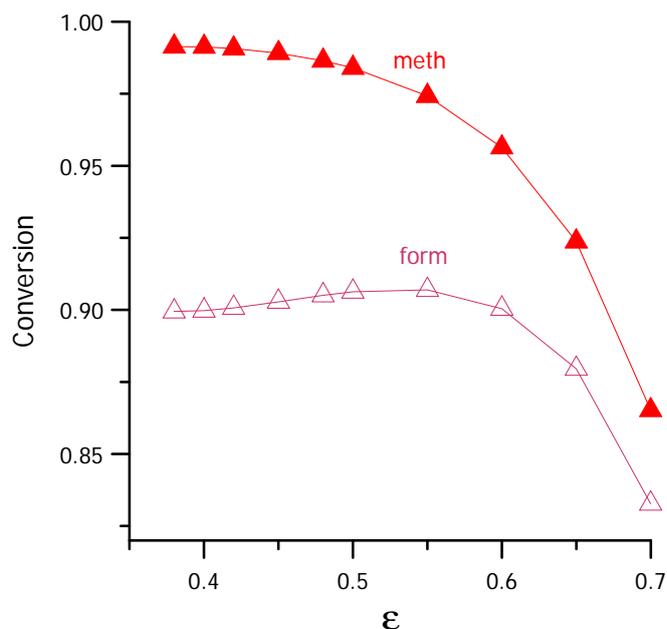


Рис.4.

Конверсия метанола и выход формальдегида в зависимости от средней порозности слоя.

Результаты расчетов паровой конверсии метана показали, что эффективные коэффициенты теплопереноса очень слабо зависят от средней порозности слоя. Конверсия метана увеличивается с уменьшением порозности, хотя и незначительно (от 67.5% при $\epsilon = 0.7$ до 73% при $\epsilon = 0.4$). Выход CO + H₂ также несколько увеличивается с уменьшением порозности. Очевидно, что, из-за достаточно большой длины слоя, температура газа на выходе будет близка к температуре стенки трубы, а значения выходных концентраций реагентов - близкими к равновесным значениям при этой температуре, причем эти равновесные значения не зависят от средней порозности слоя (рис.5).

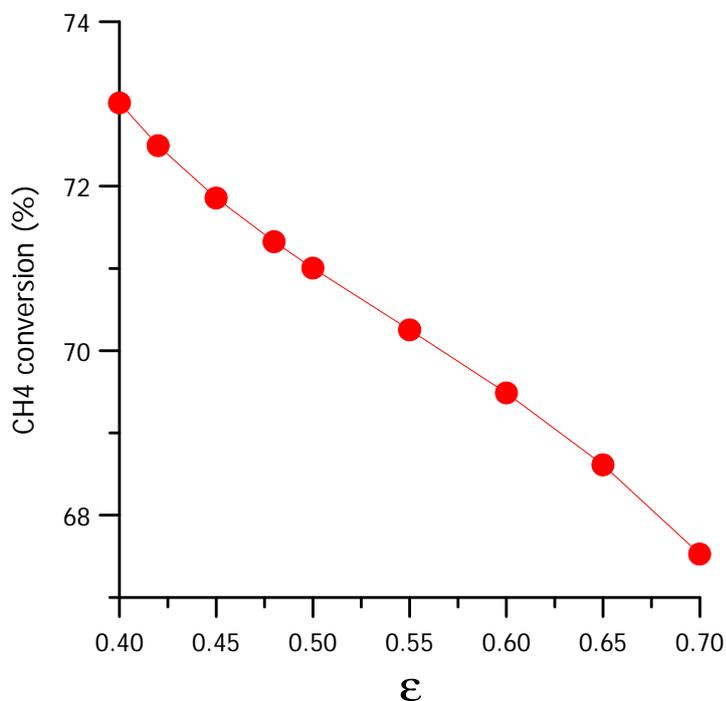


Рис.5. Конверсия метана в зависимости от средней порозности слоя (для реакции паровой конверсии метана).

2). Влияние неравномерного радиального распределения порозности.

Для изучения влияния неравномерного распределения порозности по радиусу трубки использовалась математическая модель, построенная в [6]. В модели предполагается, что процессы теплопереноса описываются одним эффективным переменным коэффициентом радиальной теплопроводности, который, в свою очередь, определяется распределением порозности и скорости по радиусу трубки. Для сферических зерен катализатора приводятся формулы, позволяющие рассчитать этот коэффициент.

При расчете процесса окисления метанола температура стенки предполагалась постоянной. Результаты приводятся для следующих способов укладки шаров: минимальная укладка, укладка от стенки и тетраэдрическая укладка, в результате которых средняя порозность слоя получается примерно одинаковой.

Оказалось, что температуры в слое катализатора и, как следствие, степени превращения реагентов, зависят существенным образом от способа укладки зерен в трубку. Для минимальной укладки порозность слоя практически одинакова по всему сечению, исключая пристеночную область. Для укладки от стенки характерны существенные колебания порозности по радиусу. Тетраэдрическая укладка характеризуется очень низкой (минимальной возможной) порозностью во внутренней части трубки, но при этом образуются пустые области около стенки. В результате распределение скоростей по радиусу также оказывается различным: наиболее равномерным – для минимальной укладки, с существенными колебаниями – для укладки от стенки, и с наиболее низкими скоростями во внутренней части трубки, так как основной поток идет около стенки – для тетраэдрической укладки. Так как наибольший вклад в эффективный коэффициент теплопроводности вносит конвективная составляющая, величина которой пропорциональна локальной скорости $u(r)$, то в зонах внутри трубки, в которых скорости фильтрации газа низкие, перенос тепла будет происходить менее интенсивно. Это, возможно, и приводит к разогреву до очень высоких температур в слоях с неравномерной укладкой. Следствием неравномерного распределения порозности являются и очень крутые радиальные градиенты температур и концентраций в горячей точке для неравномерных укладок. Конверсия метанола при этом будет несколько выше, из-за более высоких температур в слое катализатора, но выход формальдегида может оказаться ниже (например, для тетраэдрической укладки), из-за протекания параллельной реакции окисления формальдегида (рис.6 (а, б)).

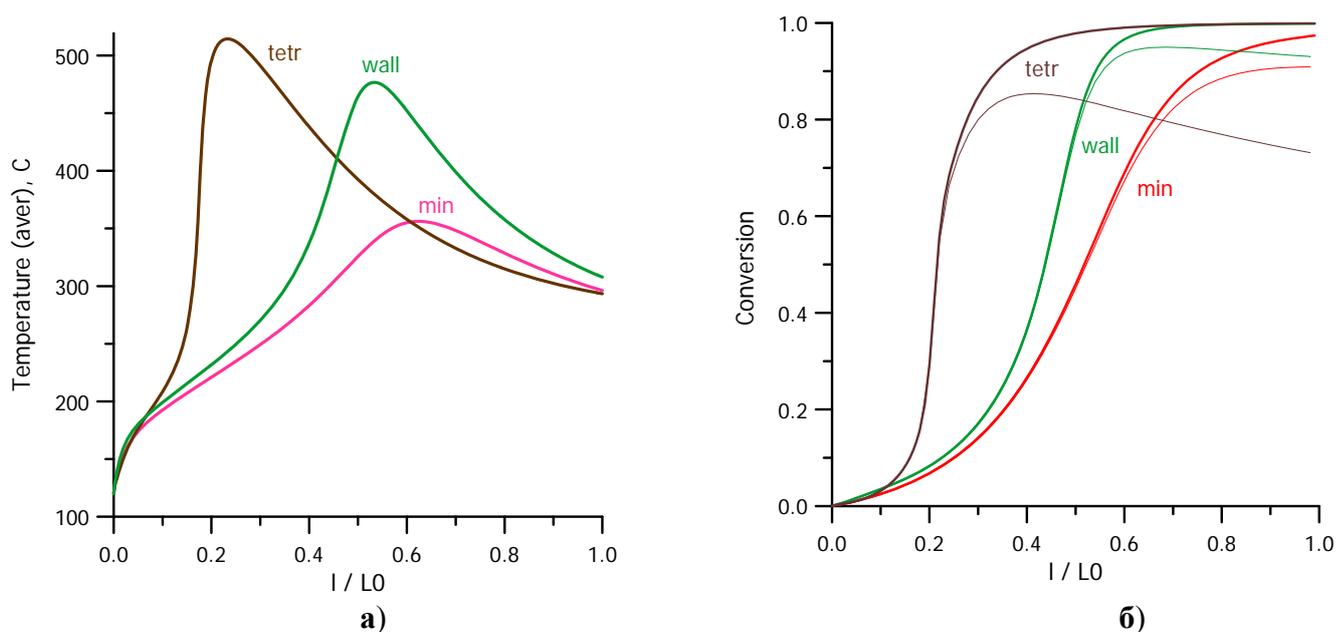


Рис.6. Зависимость средней температуры (а), конверсии метанола (б, сплошные линии), и выхода формальдегида (б, пунктирные линии) от способа укладки слоя.

При расчете процесса паровой конверсии метана решалась полная система уравнений, приведенная в [6], учитывающая изменение температуры стенки трубки по толщине и по высоте слоя. Тепловой поток на внешнюю поверхность стенки задавался согласно данным [7]. При указанном способе нагрева (*top fired*) температура стенки получается почти постоянной, с небольшим максимумом на расстоянии ~ 3 м от начала слоя. Результаты расчетов приводятся для тех же способов укладки сферических зерен: минимальной, от стенки и тетраэдрической укладки. Расчеты показали, что способ укладки практически не влияет на средние по сечению температуры и концентрации реагентов (рис.7 (а, б)). В то же время способ укладки оказывает существенное влияние на температуру стенки трубы – максимальная температура стенки оказывается существенно выше (более чем на 50° для укладки от стенки и более чем на 250° для тетраэдрической укладки по сравнению с минимальной) (рис.8). Во внутренней части слоя коэффициенты эффективной радиальной теплопроводности велики вне зависимости от способа укладки (из-за больших чисел Рейнольдса и, соответственно, конвективной составляющей теплопроводности). Несмотря на изменения этих коэффициентов по радиусу трубки, перенос тепла внутри слоя всегда будет происходить достаточно интенсивно. В пристеночной области, наоборот, изменение коэффициента теплопроводности будет играть существенную роль в связи с резким уменьшением скорости и, соответственно, конвективной составляющей теплопроводности. Поэтому температура стенки, определяемая в результате подвода заданного количества тепла извне и отвода тепла внутрь слоя, которое зависит от локальных значений коэффициента теплопроводности в пристеночной области, будет различной для разных типов укладки.

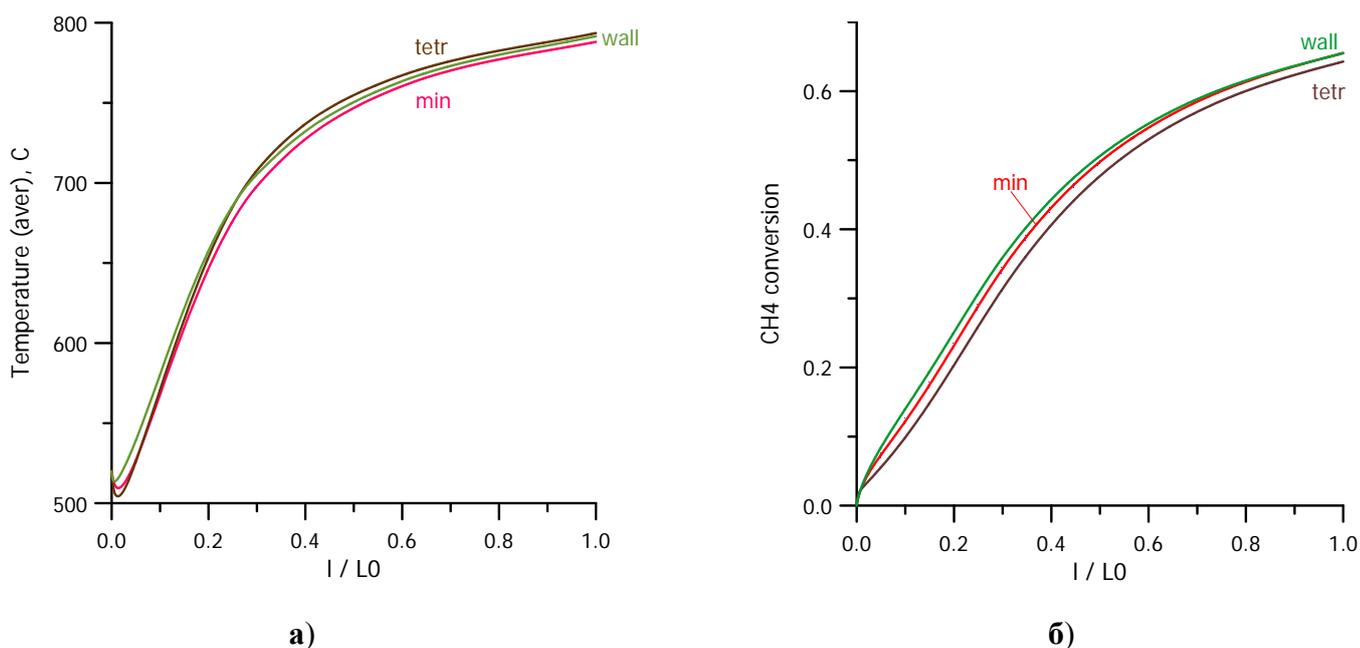


Рис.7.

Зависимость средней температуры (а) и средней по сечению степени превращения метана (б) от способа укладки слоя.

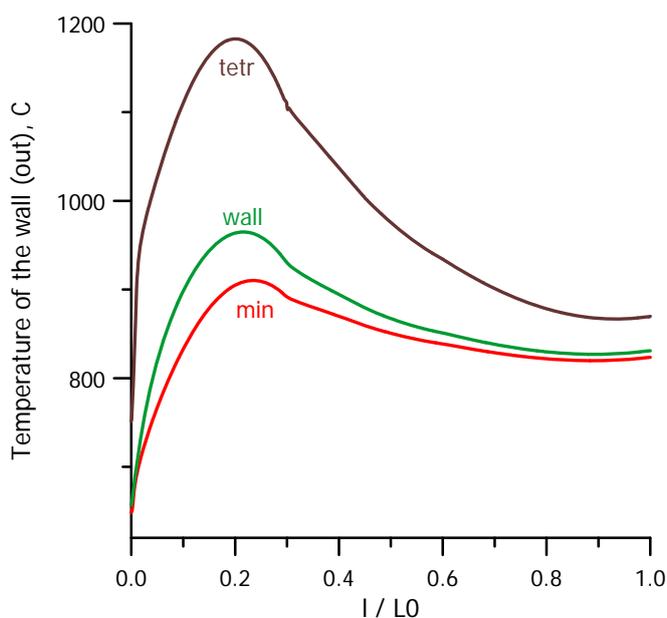


Рис.8. Зависимость температуры стенки трубы (внешняя поверхность) от способа укладки слоя для паровой конверсии метана.

Таким образом, методами математического моделирования было показано, что способ загрузки катализатора в трубку (который определяет как общее количество катализатора, так и равномерность его распределения по радиусу трубки) оказывает существенное влияние на основные характеристики процесса. Более плотная загрузка, как правило, приводит к улучшению конверсии и выхода целевого продукта. Неравномерная загрузка трубки может привести к перегреву слоя (для экзотермического процесса), или к повышению температуры стенки и возникновению существенных температурных градиентов по длине стенки трубы (для паровой конверсии метана).

Практическая реализация

Полученные на основе методов математического моделирования рекомендации по укладке частиц в трубы трубчатых реакторов легли в основу исходных данных для разработки устройств загрузки промышленных реакторов.

Промышленные трубчатые реакторы паровой конверсии природного газа, используемые в производстве метанола и аммиака, состоят из 496 труб диаметром 70-110 мм и высотой ~13 м. При разработке устройств загрузки возникло две основных задачи:

- а) обеспечение безопасной доставки катализатора в формируемый слой в трубе высотой до 13 м,

Под безопасной доставкой имеется в виду полное устранение вероятности разрушения частиц при загрузке. Для решения первой задачи был предложен оригинальный способ безопасной транспортировки частиц катализатора в вертикальной трубе. Частицы катализатора засыпаются в трубу непрерывной струей через верхний открытый фланец и падают в трубе до момента укладки на поверхность формируемого слоя. Для того, чтобы скорость падения не превысила предельной, начиная с которой может наступить разрушение частиц при их падении в слой, частицы тормозятся встречным потоком воздуха с необходимыми характеристиками. Т.к. в процессе паровой конверсии природного газа применяются катализаторы сложных форм и размеров, то для определения необходимых величин скоростей встречного потока был выполнен цикл теоретических и экспериментальных исследований по определению коэффициентов аэродинамического сопротивления частиц в потоке воздуха. Кроме того, были разработаны расчетные методы определения коэффициентов сопротивления частиц сложной формы, которые

проводились с помощью пакета программ вычислительной гидродинамики Fluent. Численно моделировалась детальная 3хмерная картина обтекания частицы при падении в трубе. Расчетные модели позволили провести исследования в широком диапазоне скоростей тормозящего потока. Результаты численных расчетов были протестированы по известным в литературе данным для обтекания сферы и цилиндра.

Данные по обтеканию частиц катализатора были использованы для расчета скоростей тормозящего потока воздуха. В качестве предельной скорости падения частиц в слой была выбрана скорость, эквивалентная скорости свободного падения частицы с высоты 2.0 м. Были проведены тесты для частиц различных типов реального катализатора паровой конверсии, которые показали гарантированную сохранность частиц при таких условиях загрузки. Решение второй задачи связано с разработкой способа укладки частиц в формируемый слой, при котором реализуется плотная и однородная упаковка. Для выявления параметров, влияющих на характеристики неподвижного слоя в трубе, была проведена серия экспериментов по загрузке катализатора в трубы, в которых определялась порозность слоя в трубе в зависимости от условий упаковки. Результаты показали, что плотностью упаковки слоя можно управлять, изменяя высоту падения частиц в слой (Рис. 9). Это дает возможность реализации рекомендаций, полученных при математическом моделировании каталитического процесса паровой конверсии природного газа.

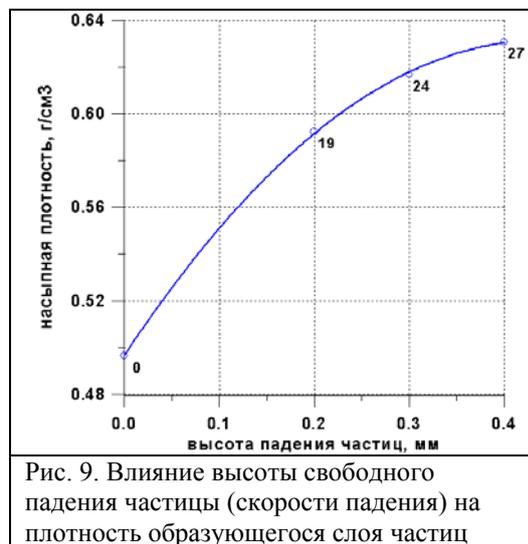


Рис. 9. Влияние высоты свободного падения частицы (скорости падения) на плотность образующегося слоя частиц

Полученные результаты послужили исходными данными для разработки устройства загрузки трубчатых реакторов. Для реализации встречного потока воздуха в трубу опускается гибкий шланг, через который поступает сжатый воздух с параметрами, необходимыми для обеспечения требуемой скорости падения частиц. Частицы катализатора поступают в трубу через дозатор, регулирующий расход частиц. По мере заполнения трубы катализатором шланг поднимается из трубы. Управление дозатором и механизмом подъема шланга осуществляется блоком управления, реализующим автоматический режим загрузки. При этом высота свободного падения частиц, определяемая расстояние между нижним срезом шланга и верхней границей формируемого слоя, устанавливается опционально и выдерживается автоматически для загрузки всех труб реактора.

Выполнены загрузки 3 крупнейших в России промышленных реакторов паровой конверсии природного газа на агрегатах М-750 производства метанола на ЗАО «Метанол» г.Томск) и ОАО «Метафракс» (г.Губаха). Во всех случаях основной параметр, по которому оценивается качество выполненной загрузки - разброс перепадов давления на трубках (однородность загрузки) не превышал $\pm 4\%$, что соответствует лучшим показателям в мировой практике. Реакторы успешно эксплуатируются до настоящего времени.

Выводы.

Методами математического моделирования исследовалось влияние способа загрузки катализатора на основные характеристики процесса в трубчатом реакторе. Показано, что оптимальными являются укладки, обеспечивающие наиболее равномерное распределение порозности по радиусу трубки, включая пристеночную зону. Полученные на основе методов математического моделирования рекомендации по укладке частиц в трубы трубчатых реакторов легли в основу исходных данных для разработки устройств загрузки промышленных реакторов.

Приложение 1.

Двумерная стационарная квазигомогенная модель расчета каталитического процесса с учетом распределения порозности по радиусу трубки (включающая теплоперенос по стенке трубки) ([6]).

Для слоя катализатора:

Уравнение теплового баланса:

$$G(r) \cdot C_p \cdot \frac{\partial T}{\partial z} = \lambda_{eff}(r) \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + (1 - \varepsilon(r)) \cdot \sum_{j=1}^N Q_j R_j ; \quad (1)$$

Уравнения материального баланса (для системы из М компонентов):

$$G(r) \cdot \frac{\partial X_i}{\partial z} = \rho \cdot D_{eff}(r) \cdot \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial X_i}{\partial r} \right) + (1 - \varepsilon(r)) \cdot \mu_i \cdot \bar{R}_i, \quad i = 1, \dots, M . \quad (2)$$

Для стенки трубки:

Тепловой баланс:

$$\lambda_{st} \cdot \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} + \frac{\lambda_{st}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \theta}{\partial r} \right) = 0. \quad (3)$$

Граничные условия (для внутренней части трубки, $0 \leq r \leq R_0$):

$$z = 0, \quad T(r) = T_0, \quad X_i(r) = X_{i,0}, \quad i = 1, \dots, M \quad (4)$$

$$r = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial X_i}{\partial r} = 0, \quad i = 1, \dots, M \quad (5)$$

$$r = R_0, \quad T(R_0) = \theta(R_0); \quad \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial r} = \lambda_{st} \frac{\partial \theta}{\partial r}, \quad \frac{\partial X_i}{\partial r} = 0, \quad i = 1, \dots, M \quad (6)$$

Граничные условия (для стенки трубки, $R_0 \leq r \leq R_0 + R_{st}$):

$$z = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0; \quad z = L, \quad \frac{\partial \theta}{\partial z} = 0; \quad (7)$$

$$r = R_0, \quad T(R_0) = \theta(R_0); \quad \lambda_{eff} \frac{\partial T}{\partial r} = \lambda_{st} \frac{\partial \theta}{\partial r}; \quad (8)$$

$$r = R_0 + R_{st}, \quad \lambda_{st} \frac{\partial \theta}{\partial r} = Q_w(z). \quad (9)$$

Обозначения:

C_p – теплоемкость газовой смеси, Дж/кг К;
 $G(r)$ – массовый расход, кг/м² сек;
 $D_{eff}(r)$ – эффективный коэффициент радиальной диффузии, м²/сек,
 Q_j – тепловой эффект j – ой реакции, Дж/моль;
 $Q_w(z)$ – тепловой поток на внешнюю поверхность стенки трубки, Вт/м²;
 T – температура катализатора, °К;
 θ – температура стенки трубки, °К;
 X_i – массовая доля i – го компонента;
 z – координата по длине трубки, м;
 r – координата по радиусу трубки, м;
 R_0 – радиус трубки, м;
 R_{st} – толщина стенки трубки, м;
 L – длина слоя катализатора, м;
 \bar{R}_i – скорость образования i – го компонента, моль/м³ сек;
 R_j – скорость j – ой реакции, моль/м³ сек;
– плотность газовой смеси, кг/м³;
 $\lambda_{eff}(r)$ – эффективный коэффициент радиальной теплопроводности, Вт/м К;
 λ_{st} – коэффициент теплопроводности стенки трубки, Вт/м К;
 i – молярная масса i – го компонента, кг/моль;
 $\varepsilon(r)$ – порозность слоя;
 N – число реакций;
 M – количество компонентов в газовой смеси.

Индекс «0» обозначает условия на входе.

Для многих процессов, проходящих в трубчатых реакторах, можно предполагать, что температура стенки трубки постоянна по длине реактора, при этом перепад температур по толщине стенки пренебрежимо мал. В этом случае уравнение теплового баланса для стенки (3), также, как и граничные условия (7) – (9) в математическую модель не включаются, а условие (6) заменяется более простым :

$$r = R_0, \quad T(R_0) = T_w = const \quad (6')$$

Особенностью данной модели является предположение об изменении эффективного коэффициента радиальной теплопроводности по радиусу трубки, в зависимости от распределения по радиусу порозности $\varepsilon(r)$ и скорости газа $u(r)$, которые определяются способом укладки слоя.

Эффективные коэффициенты радиальной теплопроводности и диффузии для сферических зерен катализатора определяются следующими формулами:

$$D_{eff}(r) = \left(1 - \sqrt{1 - \varepsilon(r)}\right) \cdot D_0 + \frac{u(r) \cdot d_p}{1.1 \cdot K_d};$$
$$\lambda_{eff}(r) = \lambda_0(r) + K_1 \cdot Re_p \cdot Pr \cdot \frac{u(r)}{u_0} f(R_0 - r);$$

где:

$$K_d = 8 \cdot \left\{ 2 - \left(1 - \frac{d_p}{R_0} \right)^2 \right\}$$

$$f(R_0 - r) = \begin{cases} \frac{R_0 - r}{K_2 d_p}, & \text{при } 0 \leq (R_0 - r) \leq K_2 d_p; \\ 1, & \text{при } K_2 d_p < (R_0 - r). \end{cases}$$

$$K_1 = 0.25, K_2 = 2.5.$$

D_0 – коэффициент молекулярной диффузии ($\text{м}^2/\text{сек}$); $\lambda_0(r)$ – коэффициент радиальной теплопроводности твердой фазы в неподвижном газе ($\text{Вт}/\text{м К}$); его величина зависит от распределения порозности по радиусу трубки. Для его определения можно использовать зависимости, предлагаемые различными авторами, например, полученные в [7].

Теплофизические свойства газа (теплоемкость, теплопроводность, вязкость, коэффициент молекулярной диффузии) в расчетах полагались постоянными, поэтому числа Re_p (число Рейнольдса, определяемое по эквивалентному диаметру частицы) и Pr также являются постоянными, определяемыми при некоторой средней температуре. Распределение по радиусу расхода газа $G(r)$ предполагается постоянным по длине слоя, а плотность газа в каждой точке трубки рассчитывается по формуле:

$$\rho(r, z) = \left[\left(\sum_{i=1}^M X_i / \mu_i \right) \cdot V_{mol} \right]^{-1},$$

где $V_{mol}(r, z)$ – объем моля газа, который определяется при температуре и давлении в данной точке.

Для численного решения задачи была построена балансная разностная схема второго порядка точности по обеим переменным. При этом строилась сетка с переменным шагом по длине и с постоянными шагами – по радиусу трубки и по толщине стенки. Так как система уравнений, включающая в себя тепловые и материальные балансы, является нелинейной, на каждом шаге проводились итерации для уточнения значений температуры и концентраций реагентов.

Литература.

1. Аэров М. Э., Годес О. М., Наринский Д. А. Аппараты со стационарным зернистым слоем: Гидравлические и тепловые основы работы. – Л.: Химия, 1979.
2. Ю. Ш. Матрос. Нестационарные процессы в каталитических реакторах. Новосибирск, «Наука», 1982.
3. J. Xu and G. F. Froment. Methane steam reforming (part I and II). *AIChE J.*, v.35, N1, pp. 88-103, (1989):
4. O. R. Derkx, A. G. Dixon. Effect of the wall Nusselt number on the simulation of catalytic fixed bed reactors. *Catalysis today*, v.35, N4, pp.435 – 442 (1997).
5. P. M. Plehiers, G. F. Froment. Coupled simulation of heat transfer and reaction in a steam reforming furnace. *Chem. Eng. Technol.*, 12 (1989), pp. 20-26.
6. D. Vortmeyer, E. Haidegger. Discrimination of three approaches to evaluate heat fluxes for wall – cooled fixed bed chemical reactors. *Chem. Eng. Sci.*, v.46, N10, pp.2651 – 2660, 1991.
7. Ib. Dybkjær. Tubular reforming and autothermal reforming of natural gas – an overview of available process. *Fuel Processing Technology*, 42 (1995), pp. 85-107
8. D. Kunii, J. M. Smith. Heat transfer characteristics of porous rocks. *AIChE J.*, v.6, N1, pp.71 – 78, 1960.