

Системный анализ процессов химической технологии

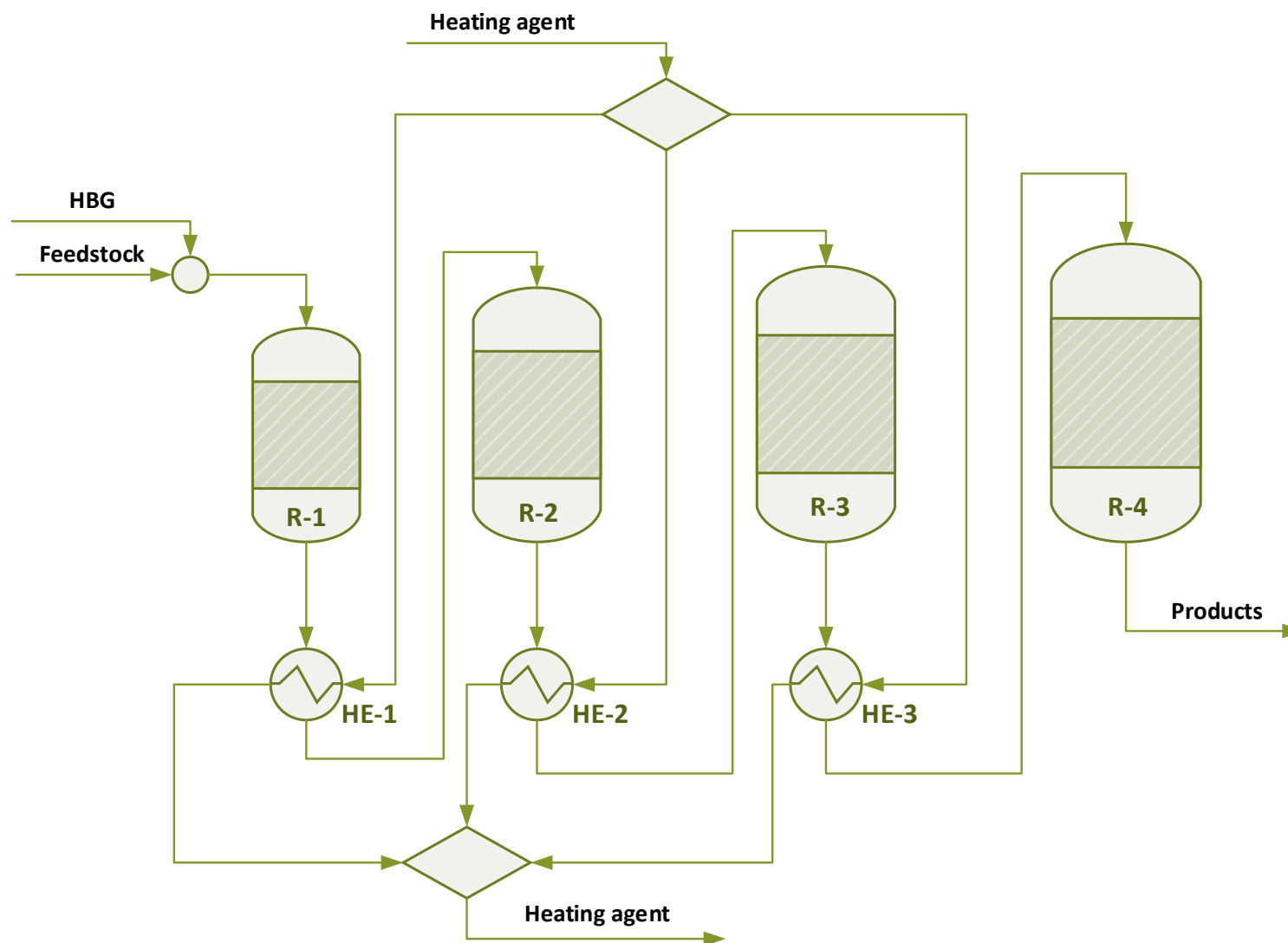
Расчет химико-технологической схемы
процесса каталитического риформинга



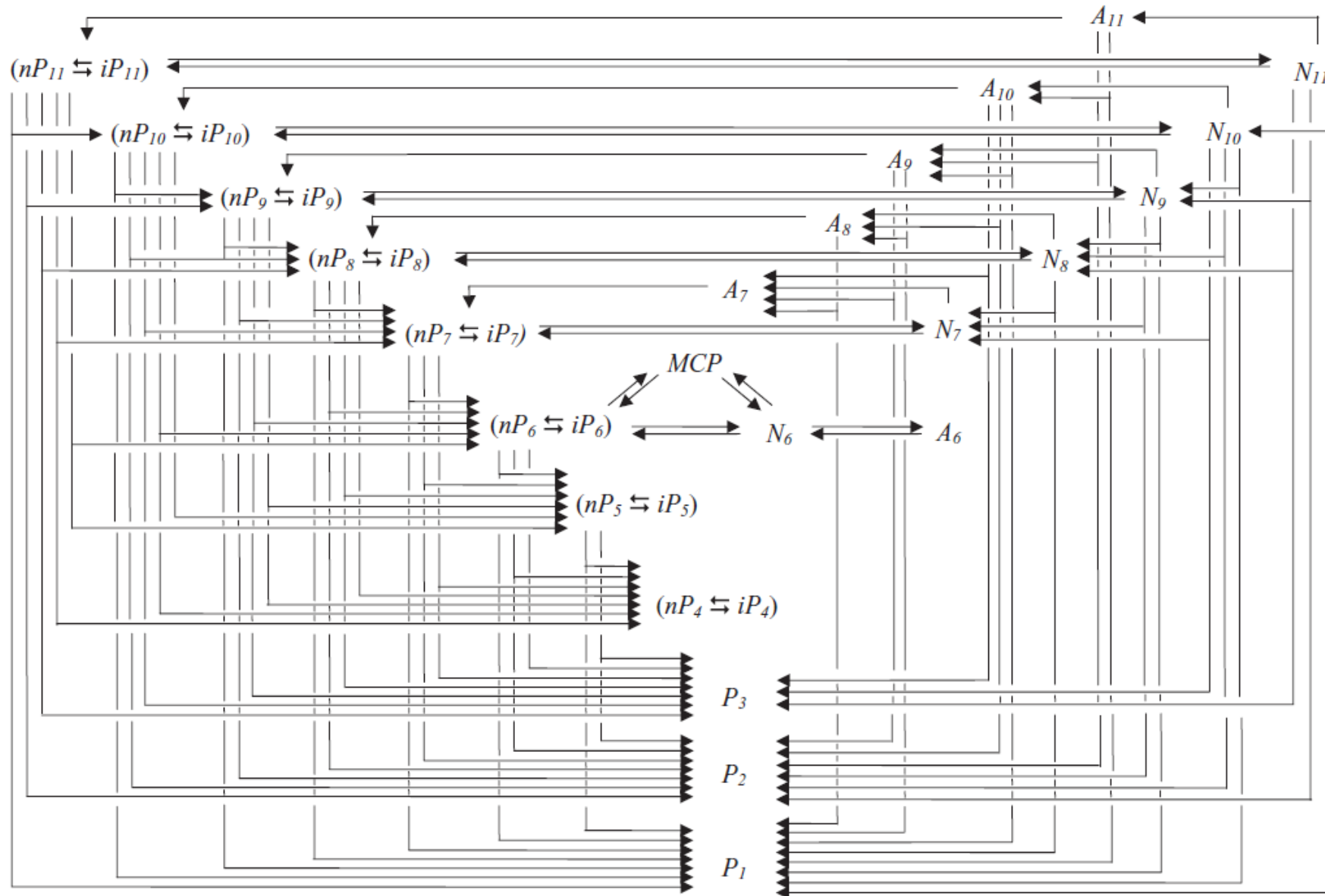
Чузов Вячеслав Алексеевич

к.т.н., доцент ОХИ ИШПР

Упрощенная блок-схема процесса каталитического риформинга



КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА РИФОРМИНГА



КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА РИФОРМИНГА

Кинетические и термодинамические параметры химических реакций процесса риформинга

№	Реакция	$k, \text{ч}^{-1} (T = 763.15 \text{ K})$	$E_a, \text{кДж / моль}$	$\Delta H \text{ кДж / моль}$	№	Реакция	$k, \text{ч}^{-1} (T = 763.15 \text{ K})$	$E_a, \text{кДж / моль}$	$\Delta H \text{ кДж / моль}$	№	Реакция	$k, \text{ч}^{-1} (T = 763.15 \text{ K})$	$E_a, \text{кДж / моль}$	$\Delta H \text{ кДж / моль}$
1	$P_{11} \rightarrow N_{11} + H_2$	0.0356	188.41	60.9	25	$P_7 + H_2 \rightarrow P_5 + P_2$	0.0018	230.27	-43.34	49	$N_8 \rightarrow A_8 + 3H_2$	0.215	125.6	201.71
2	$P_{11} + H_2 \rightarrow P_{10} + P_1$	0.0075	230.27	-54.2	26	$P_7 + H_2 \rightarrow P_4 + P_3$	0.0043	230.27	-42.2	50	$N_8 + H_2 \rightarrow N_7 + P_1$	0.0007	230.27	-57.9
3	$P_{11} + H_2 \rightarrow P_9 + P_2$	0.01	230.27	-43.44	27	$P_6 \rightarrow N_6 + H_2$	0	188.41	44.1	51	$N_7 + H_2 \rightarrow P_7$	0.0019	188.41	-33
4	$P_{11} + H_2 \rightarrow P_8 + P_3$	0.0135	230.27	-42	28	$P_6 \rightarrow MCP + H_2$	0.0042	188.41	60.5	52	$N_7 \rightarrow A_7 + 3H_2$	0.0788	125.6	204.93
5	$P_{11} + H_2 \rightarrow P_7 + P_4$	0.0135	230.27	-43.6	29	$P_6 + H_2 \rightarrow P_5 + P_1$	0.0018	230.27	-54.1	53	$N_6 + H_2 \rightarrow P_6$	0.0204	188.41	-44.1
6	$P_{11} + H_2 \rightarrow P_6 + P_5$	0.0191	230.27	-43.3	30	$P_6 + H_2 \rightarrow P_4 + P_2$	0.0016	230.27	-43.64	54	$N_6 \rightarrow A_6 + 3H_2$	0.1368	125.6	206.18
7	$P_{10} \rightarrow N_{10} + H_2$	0.0243	188.41	36.5	31	$P_6 + H_2 \rightarrow 2P_3$	0.0025	230.27	-40.5	55	$N_6 \rightarrow MCP$	0.004	188.41	16.4
8	$P_{10} + H_2 \rightarrow P_9 + P_1$	0.0015	230.27	-54.3	32	$P_5 + H_2 \rightarrow P_4 + P_1$	0.0018	230.27	-54.6	56	$MCP + H_2 \rightarrow P_6$	0.0008	188.41	-60.5
9	$P_{10} + H_2 \rightarrow P_8 + P_2$	0.0054	230.27	-43.54	33	$P_5 + H_2 \rightarrow P_3 + P_2$	0.0022	230.27	-42.14	57	$MCP \rightarrow N_6$	0.0238	188.41	-16.4
10	$P_{10} + H_2 \rightarrow P_7 + P_3$	0.016	230.27	-42	34	$N_{11} + H_2 \rightarrow P_{11}$	0.005	188.41	-60.9	58	$A_{11} + 4H_2 \rightarrow P_{11}$	0.0016	188.41	-236.7
11	$P_{10} + H_2 \rightarrow P_6 + P_4$	0.0095	230.27	-43.7	35	$N_{11} \rightarrow A_{11} + 3H_2$	0.6738	125.6	175.8	59	$A_{11} + H_2 \rightarrow A_{10} + P_1$	0.0006	167.47	-54.92
12	$P_{10} + H_2 \rightarrow 2P_5$	0.0095	230.27	-43.2	36	$N_{11} + H_2 \rightarrow N_{10} + P_1$	0.0134	230.27	-78.6	60	$A_{11} + H_2 \rightarrow A_9 + P_2$	0.0006	167.47	-43.11
13	$P_9 \rightarrow N_9 + H_2$	0.05	188.41	35.8	37	$N_{11} + H_2 \rightarrow N_9 + P_2$	0.0134	230.27	-68.54	61	$A_{10} + 4H_2 \rightarrow P_{10}$	0.0016	188.41	-235.98
14	$P_9 + H_2 \rightarrow P_8 + P_1$	0.003	230.27	-54.3	38	$N_{11} + H_2 \rightarrow N_8 + P_3$	0.008	230.27	-66.2	62	$A_{10} + H_2 \rightarrow A_9 + P_1$	0.0006	167.47	-53.25
15	$P_9 + H_2 \rightarrow P_7 + P_2$	0.0039	230.27	-43.44	39	$N_{10} + H_2 \rightarrow P_{10}$	0.0054	188.41	-36.5	63	$A_{10} + H_2 \rightarrow A_8 + P_2$	0.0006	167.47	-41.11
16	$P_9 + H_2 \rightarrow P_6 + P_3$	0.0068	230.27	-42	40	$N_{10} \rightarrow A_{10} + 3H_2$	0.3198	125.6	199.48	64	$A_{10} + H_2 \rightarrow A_7 + P_3$	0	167.47	-40.05
17	$P_9 + H_2 \rightarrow P_5 + P_4$	0.0058	230.27	-43.5	41	$N_{10} + H_2 \rightarrow N_9 + P_1$	0.0134	230.27	-55	65	$A_9 + 4H_2 \rightarrow P_9$	0.0016	188.41	-237.03
18	$P_8 \rightarrow N_8 + H_2$	0.0266	188.41	36.7	42	$N_{10} + H_2 \rightarrow N_8 + P_2$	0.0134	230.27	-43.34	66	$A_9 + H_2 \rightarrow A_8 + P_1$	0.0005	167.47	-52.92
19	$P_8 + H_2 \rightarrow P_7 + P_1$	0.0019	230.27	-54.2	43	$N_{10} + H_2 \rightarrow N_7 + P_3$	0.008	230.27	-45.5	67	$A_9 + H_2 \rightarrow A_7 + P_2$	0.0005	167.47	-42.54
20	$P_8 + H_2 \rightarrow P_6 + P_2$	0.0056	230.27	-43.44	44	$N_9 + H_2 \rightarrow P_9$	0.0054	188.41	-35.8	68	$A_8 + 4H_2 \rightarrow P_8$	0.0011	188.41	-238.41
21	$P_8 + H_2 \rightarrow P_5 + P_3$	0.0034	230.27	-41.8	45	$N_9 \rightarrow A_9 + 3H_2$	0.2205	125.6	201.23	69	$A_8 + H_2 \rightarrow A_7 + P_1$	0.0001	167.47	-54.68
22	$P_8 + H_2 \rightarrow 2P_4$	0.007	230.27	-43.8	46	$N_9 + H_2 \rightarrow N_8 + P_1$	0.0127	230.27	-53.4	70	$A_7 + 4H_2 \rightarrow P_7$	0.0016	188.41	-237.93
23	$P_7 \rightarrow N_7 + H_2$	0.0076	188.41	33	47	$N_9 + H_2 \rightarrow N_7 + P_2$	0.0127	230.27	-46.24	71	$A_6 + 3H_2 \rightarrow N_6$	0.0015	125.6	-206.18
24	$P_7 + H_2 \rightarrow P_6 + P_1$	0.0027	230.27	-54.3	48	$N_8 + H_2 \rightarrow P_8$	0.0025	188.41	-36.7					

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА РИФОРМИНГА

Свойства индивидуальных компонентов

Компонент	Обозначение в модели	M	SG	RON	$C_p = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3$				$H_f^\circ, \text{J / mol}$
					A	B	C	D	
P11	c[0]	156.313	0.7439	-14.1	-8.40E+00	1.05E+00	-5.80E-04	1.24E-04	-270500.00
P10	c[1]	142.286	0.7342	-16.01	-7.91E+00	9.61E-01	-5.29E-04	1.13E-07	-249800.00
P9	c[2]	128.259	0.7217	-17	-8.37E+00	8.73E-01	-4.83E-04	1.03E-07	-229200.00
P8	c[3]	114.232	0.7068	-19	-6.10E+00	7.71E-01	-4.20E-04	8.86E-08	-208600.00
P7	c[4]	100.205	0.6882	0	-5.15E+00	6.76E-01	-3.65E-04	7.66E-08	-187900.00
P6	c[5]	86.178	0.664	24.8	-4.41E+00	5.82E-01	-3.12E-04	6.49E-08	-167300.00
P5	c[6]	72.151	0.631	61.7	-3.63E+00	4.87E-01	-2.58E-04	5.31E-08	-146500.00
P4	c[7]	58.124	0.5844	93.8	9.49E+00	3.31E-01	-1.11E-04	-2.82E-09	-126200.00
P3	c[8]	44.094	0.5077	98.9	-4.22E+00	3.06E-01	-1.59E-04	3.22E-08	-103900.00
P2	c[9]	30.07	0.3564	0	5.41E+00	1.78E-01	-6.94E-05	8.71E-09	-84740.00
P1	c[10]	16.043	0.3	0	1.93E+01	5.21E-02	1.20E-05	-1.13E-08	-74900.00
N11	c[11]	154.297	0.8006	70	-5.83E+01	1.13E+00	-6.54E-04	1.47E-07	-209600.00
N10	c[12]	140.26	0.8031	70.31	-6.30E+01	1.08E+00	-6.31E-04	1.40E-07	-213300.00
N9	c[13]	126.243	0.7977	17.8	-6.25E+01	9.89E-01	-5.80E-04	1.29E-07	-193400.00
N8	c[14]	112.216	0.7922	45.6	-6.39E+01	8.89E-01	-5.11E-04	1.10E-07	-171900.00
N7	c[15]	98.189	0.774	74.8	-6.19E+01	7.84E-01	-4.54E-04	9.37E-08	-154900.00
N6	c[16]	84.162	0.7834	83	-5.45E+01	6.11E-01	-2.52E-04	1.32E-08	-123200.00
MCP	c[17]	84.162	0.7536	91.3	-5.01E+01	6.38E-01	-3.64E-04	8.01E-08	-106800.00
A11	c[18]	148.25	0.8624	110	-4.22E+01	9.77E-01	-6.26E-04	1.57E-07	-33800.00
A10	c[19]	134.222	0.8646	100.4	-2.30E+01	7.93E-01	-4.40E-04	8.57E-08	-13820.00
A9	c[20]	120.195	0.8665	101.5	-3.13E+01	7.49E-01	-4.60E-04	1.08E-07	7830.00
A8	c[21]	106.168	0.8718	107.9	-4.31E+01	7.07E-01	-4.81E-04	1.30E-07	29810.00
A7	c[22]	92.141	0.8718	120.1	-2.44E+01	5.13E-01	-2.77E-04	4.91E-08	50030.00
A6	c[23]	78.114	0.8844	108	-3.39E+01	4.74E-01	-3.02E-04	7.13E-08	82980.00
H2	c[24]	2.016	9.00E-05	0	2.71E+01	9.27E-03	-1.38E-05	7.65E-09	0.00

Описание класса Flow

Поля	Описание
mass_flow_rate: <code>real</code>	Массовый расход, кг / ч
mole_flow_rate: <code>real</code>	Мольный расход, кмоль / ч
volume_flow_rate: <code>real</code>	Объемный расход, м ³ / ч
mass_fractions: <code>array of real</code>	Массовые доли
mole_fractions: <code>array of real</code>	Мольные доли
volume_fractions: <code>array of real</code>	Объемные доли
molar_fractions: <code>array of real</code>	Молярные концентрации, моль / л
temperature: <code>real</code>	Температура потока, К
pressure: <code>real</code> ;	Давление потока, МПа
density: <code>real</code>	Плотность потока, г / см ³
molar_mass: <code>real</code>	Средняя молекулярная масса потока, г / моль
heat_capacity: <code>real</code>	Массовая теплоемкость, кДж / кг

Описание класса Flow

Методы	Описание
constructor (mass_flow_rate: <i>real</i> ; mass_fractions: array of <i>real</i> ; temperature, <i>pressure</i> : <i>real</i>)	Создает новый экземпляр класса Flow, заполняя все поля.

Функции для пересчета составов

Пересчет массовых долей в молярные концентрации (моль / л):

$$c_i = \frac{\omega_i \cdot \rho \cdot 1000}{Mr_i}$$

где ω_i - массовая доля i-го компонента; ρ - плотность потока, г / см³; Mr_i - молярная масса i-го компонента, г / моль.

Пересчет молярных концентраций в массовые доли:

$$\rho = \sum_{i=1}^n c_i \cdot Mr_i \qquad \omega_i = \frac{c_i \cdot Mr_i}{\rho}$$

где ω_i - массовая доля i-го компонента; ρ - плотность потока, г / см³; Mr_i - молярная масса i-го компонента, г / моль.

Описание класса Reactor

Поля	Описание
<code>length := 0.0;</code>	Длина реактора, м.
<code>diameter := 0.0;</code>	Диаметр реактора, м.
<code>volume := 0.0;</code>	Объем реактора, м ³ .

Методы	Описание
<code>constructor(length, diameter: real);</code>	Создает новый экземпляр класса Reactor, заполняя все поля.
<code>function calculate(feedstock: Flow): Flow;</code>	Выполняет расчет процесса каталитического риформинга для одного реактора. Возвращает объект класса Flow.

Параметры процесса

Состав сырья и ВСГ, мас. доли

Компонент	Сырье	ВСГ
P11	0.0077	0.0000
P10	0.0682	0.0000
P9	0.0857	0.0000
P8	0.1202	0.0000
P7	0.1241	0.0000
P6	0.1441	0.0000
P5	0.0926	0.0000
P4	0.0000	0.0000
P3	0.0000	0.0000
P2	0.0000	0.0000
P1	0.0000	0.1000
N11	0.0000	0.0000
N10	0.0087	0.0000
N9	0.0356	0.0000
N8	0.0404	0.0000
N7	0.0595	0.0000
N6	0.0423	0.0000
MCP	0.0064	0.0000
A11	0.0096	0.0000
A10	0.0134	0.0000
A9	0.0424	0.0000
A8	0.0577	0.0000
A7	0.0302	0.0000
A6	0.0112	0.0000
H2	0.0000	0.9000


Технологические условия


Параметр	Значение
Температура, К	763.15
Давление, МПа	0.105
Расход сырья, кг / ч	26600
Расход ВСГ, кг / ч	3700
Длина реактора, м	4.902
Диаметр реактора, м	2.438


КОНТАКТНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

ЧУЗЛОВ ВЯЧЕСЛАВ АЛЕКСЕЕВИЧ

к.т.н., доцент ОХИ ИШПР

 Учебный корпус №2, ауд. 136

 +7-962-782-66-15

 chuva@tpu.ru