



乙烯裂解炉管内裂解反应的 CFD 模拟

毕文涛¹, 郭英锋², 沙莎², 闵健²

(1. 洛阳石油化工工程公司, 洛阳 471003; 2. 北京化工大学, 北京 100029)

摘要: 应用计算流体力学 (CFD) 软件 Fluent6.2, 采用详细化学反应机理模型-涡扩散概念 (EDC) 模型, 对乙烯裂解炉 2-1 型反应管内主反应进行了三维数值模拟。模拟结果表明, EDC 模型可正确求解裂解反应, 主要产物收率与工业数据吻合较好; 沿反应管轴向油气吸热升温, 裂解反应加剧, 产物产率逐渐发生变化; 沿反应管径向存在明显的流体流速和温度的变化, 而产物产率的变化没有流体流速和温度的变化明显。

关键词: 乙烯; 裂解炉; 涡扩散概念模型; 数值模拟

中图分类号: TQ021 文献标识码: A 文章编号: 1672-6510 (2008) 01-0049-04

CFD Simulation on the Cracking Reactions in Tubular Reactor of Ethylene Cracking Furnace

BI Wen-tao¹, GUO Ying-feng², SHA Sha², MIN Jian²

(1. Luoyang Petrochemical Engineering Corporation, Luoyang 471003, China;
2. Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: The Eddy Dissipation Concept (EDC) model was chosen to simulate the ethylene tubular cracking furnace (2-1 type) in three dimensions by using Computational Fluid Dynamics (CFD) package Fluent6.2. The simulation results show that the cracking reactions could be predicted well by the EDC model and the yields of products are in good agreement with the industry data. In the tube axis direction, the temperature rises and cracking reactions intensify so as to the yields changing gradually. And velocity and temperature change obviously in radial direction where the yields change little.

Keywords: ethylene; cracking furnace; Eddy Dissipation Concept model; numerical simulation

乙烯裂解生产装置的核心部分是管式裂解炉, 而裂解炉的关键部分是反应管, 整个装置的产品分布、产品质量乃至经济效益都与反应管的操作状况密切相关。在小口径反应管内进行的湍流流动、传质、传热和裂解反应等过程, 它们高度耦合在一起, 其内部十分重要的化学工程参数不易测得, 这就使得对管式裂解炉运行机制与规律的了解和性能优化调整非常困难^[1,2]。

随着计算机和计算技术的迅速发展, 以及流体力学和化学动力学等学科的进步及其与数值计算方面的结合, 使得对反应管内各种复杂过程的模拟计算成为可能。近年来, 国内外许多研究者利用计算流体力学方法较准确地描述和模拟了上述复杂过程, 证明计

算流体力学是管式裂解炉设计改进与优化操作的一个很有效的途径^[2]。已有的乙烯裂解炉反应管工艺数学模型大部分为一维模型, 少数为二维模型。在一维模型中, 假设反应管内的流体流动为活塞流, 忽略径向上流体流速、温度和浓度的变化, 模拟计算只能得到反应管径向上各种参数的平均值, 不能阐明这些参数的变化对裂解反应过程的影响。Froment^[3]和张红梅^[4-7]等在一维模型的基础上考虑径向上的传质和传热, 建立了二维模型。但是, 在该二维模型中简化了反应管内流体流动和传热过程, 忽略了流体流动形式影响流体的传热能力, 而且反应体系包括了 49 个反应, 对每个反应均取有限反应速率和涡旋反应速率进行模拟, 计算量过大。

收稿日期: 2007-09-10; 修回日期: 2007-11-07

作者简介: 毕文涛 (1973—), 男, 河南洛阳人, 工程师; 通讯作者: 闵健, 讲师, minjian@mail.buct.edu.cn.

本文对工业裂解炉中反应管内流动、传热、传质及裂解反应过程不经任何简化建立三维数学模型;并简化裂解反应组分和反应体系,采用化学反应机理模型-涡扩散概念(EDC)模型仅对主反应体系进行计算,湍流模型用标准 $k-\epsilon$ 双方程模型,揭示了反应管内各个过程的具体细节以及它们之间的相互影响,得到了反应管内的流场、温度场和浓度场等详细信息,揭示了反应管内流动、传热、传质和裂解反应的基本特点.

1 模拟对象和工况条件

对年产 6 万吨乙烯的某石油化工厂利用乙烷裂解制取乙烯的实际生产的工业裂解炉进行模拟,该裂解炉炉膛内共有 24 组 2-1 型炉管组成.图 1 为裂解炉反应管示意图,两个入口管在裂解炉底部合成一个出口管至横跨断.反应炉管总长度为 23 753.6 mm,炉管两个入口内径相同,为 50 mm,出口管内径为 76 mm.



图 1 裂解炉反应管示意图

Fig. 1 Diagram of one reaction tube

乙烷裂解过程中,裂解气和水蒸气的质量流量分别为 3 744 和 864 kg/h,单只管的质量流量分别为 156 和 36 kg/h;物料入口温度 672 °C;出口压力 78.7 kPa.

2 EDC 模型

计算采用大型计算流体力学软件 Fluent 平台进行,利用 CFD 方法建立质量、动量及能量守恒的基本微分方程组,描述裂解炉反应管内所发生的湍流流动、传热和裂解反应细节.采用目前工程上广泛应用的标准 $k-\epsilon$ 双方程湍流模型来描述气体运动,而用 EDC 详细化学反应机理模型来封闭方程组.可用物料的 8 个组分和 5 个主反应来概括乙烯裂解过程^[8,9]:



Arrhenius 公式为

$$k = Ae^{-E/RT} \quad (6)$$

式中: k 为反应速率, s^{-1} ; A 为指前因子, s^{-1} ; E 为反应活化能, $J \cdot mol^{-1}$; R 为气体常数 $8.314 41 J \cdot (mol^{-1} \cdot K^{-1})$; T 是物料温度, K. 表 1 为主要反应的 Arrhenius 参数值^[9].

表 1 各反应 Arrhenius 参数值

Tab. 1 Parameter of Arrhenius in reactions

反应	1	2	3	4	5
A/s^{-1}	4.6×10^{13}	3.8×10^{11}	9.8×10^8	1.0×10^{12}	7.1×10^{13}
$E/J \cdot mol^{-1}$	2.7×10^8	2.7×10^8	1.5×10^8	1.7×10^8	2.5×10^8

EDC 模型假定反应发生在微小的湍流结构中,该尺度下的反应为定压反应,初始条件设为计算单元中当前的物质和温度.反应由 Arrhenius 方程控制,求解积分采用 ISAT 数值法可极大地提高计算速度^[10].但由于反应机理具有不同的刚性,数值积分计算量很大,求解过程用双精度求解器以避免反应刚性机理中固有的大指前因子和活化能产生的舍入误差.

3 计算结果及讨论

由于裂解过程的复杂性,包括流体流动、扩散、传热及化学反应等同时在炉管内进行,并且处于高温和密闭状态,而受目前检测手段的限制,很难测得反应管内的各项数据.在工业生产中,常常通过产物收率来控制装置的运行.表 2 为模拟计算所得到的主要产物的收率与工业设计数据的对比.

表 2 模拟结果与工业值比较

Tab. 2 Calculated results compared with industrial data

项目	出口管温度 /°C	产物收率/%			
		C_2H_4	C_2H_6	CH_4	H_2
工业值	835	43.1	47.0	2.7	3.3
模拟值	830	43.2	49.0	2.1	3.2

由表 2 可以看出,两者的数据吻合较好,误差基本在 5%之内.说明本文方法对反应管的模拟切实可行.因此,可以通过模拟计算的结果来研究反应管内流体流速、温度和组分浓度分布等情况,了解和掌握其内部的流动、传热、传质及反应规律.

3.1 反应管轴向上参数变化规律

图 2 显示温度 (T) 和速度 (v) 沿反应管轴向上的变化规律.其中, l 为沿反应管轴向距离, L 为反应管总长度.

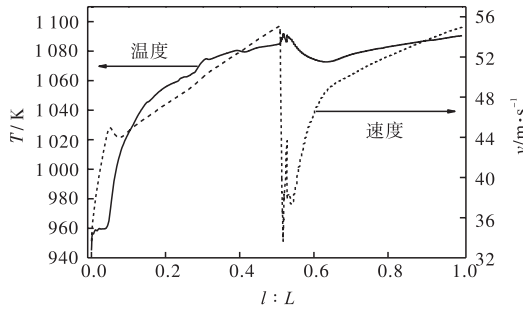


图2 轴向温度和速度分布

Fig. 2 Axial profile of temperature and velocity

由图2可以看出,在反应管的前30%,油气升温较快,在反应管的后50%~65%,油气升温则趋于缓慢,并有一个降温升温的拐点.这是由于在反应管的前30%,从反应管外吸收的热量主要用于油气升温,当油气温度升到1060K时,裂解反应开始加剧,吸收的热量则主要用于发生裂解反应,使得在反应管的后30%油气升温变慢.而在50%~65%附加化学反应激烈,吸热量大,温度降低出现拐点.首先沿管长温度升高,裂解气体的体积增大了,同时进行的裂解反应是分子体积增加的反应,随着反应的进行,油气体积增大.以上两种原因导致管内流速升高.在反应管底部两个进口管合成一个出口管,由于容积有个骤变,导致速度出现锐减后又激增.随后管壁温度升高、反应进行,油气体积增大,管内流速又升高.

图3为反应管轴向上主要产物收率(y)变化规律.由图3可见,在反应管的前20%裂解产物收率较低,在反应管的后20%,C₂H₄、CH₄和H₂的收率逐渐增加.这是因为在反应管的前20%,油气温度较低,只有少量反应物发生了裂解反应,当油气温度升到1060K时,裂解反应加剧,产物收率发生明显变化.

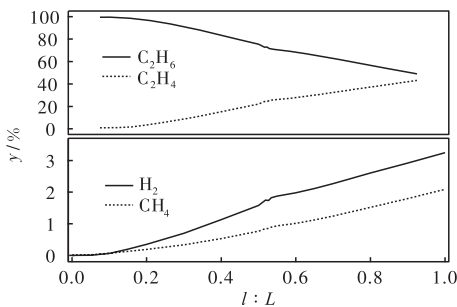


图3 轴向产物收率分布

Fig. 3 Axial profile of product yield

3.2 反应管径向上参数变化规律

3.2.1 流体流速和温度径向分布规律

图4为反应管不同截面径向温度分布图.其中, r

为沿反应管径向距离, R 为反应管管径.在管壁区域有很大的温差,这因为管壁处流体流动存在一个层流边界层,热阻大,导致温度差别大;而管内流体主区域,流动处于湍流状态,温度梯度非常小,温度基本均匀.在沿反应管不同截面处,温度分布同截面趋势一致;在离出口越近的截面,温度分布差别小,造成这种现象的原因有两个;一是原料因吸热温度升高,体积增大,流速增大,边界层减少,传热阻力减小,径向上的温差减小;二是离出口近处,裂解反应已达到平衡,管壁传热主要用于物料升温,使得温度差别变小.这种变化规律与文献3中的结论一致,进一步说明该模型能比较真实地模拟反应管内的反应传热过程.

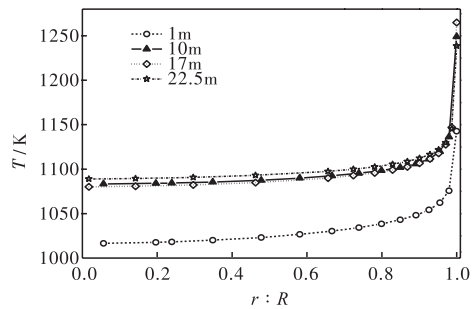


图4 不同截面径向温度分布

Fig. 4 Radial profiles of temperature at various sections along tubular reactor length

图5为反应管不同截面径向速度分布图,在反应管径向上存在着明显的速度分布,从管中心至管壁90%的径向区域内,流体流速高且变化不大;而在管壁附近10%的区域内,流速迅速降低.

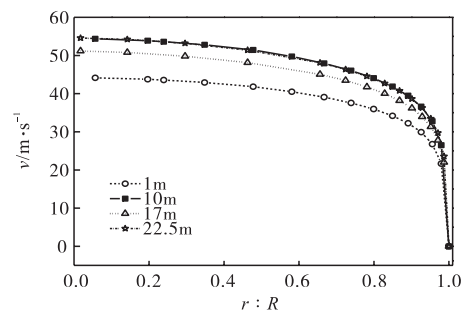


图5 不同截面径向速度分布

Fig. 5 Radial profiles of velocity at various sections along tubular reactor length

通过比较湍流黏度和分子黏度的大小,确定在反应管内壁1% R 的区域为层流层.流体的流动形式直接影响其传热过程,层流层的存在使管壁附近流体温度差别很大,显示了在管壁附近10%的区域内,流体温

度迅速降低,温差约 150 K,而在自管中心至管壁 90%以上的径向区域内,温度变化不大,温差只有 40 K 左右.

3.2.2 产物收率径向分布规律

径向上的流速和温度分布影响产物收率分布.径向上的速度和温度分布将影响组分浓度分布情况.图 6 和图 7 为反应管不同截面处乙烷和乙烯收率径向分布图.

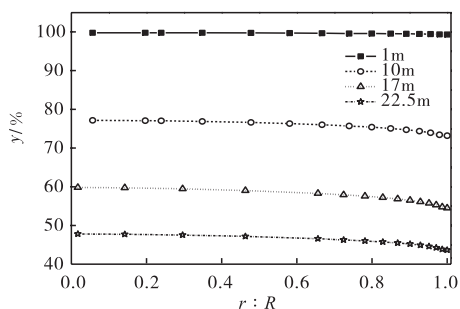


图 6 不同截面径向 C_2H_6 收率分布

Fig. 6 Radial profiles of C_2H_6 yield at various sections along tubular reactor length

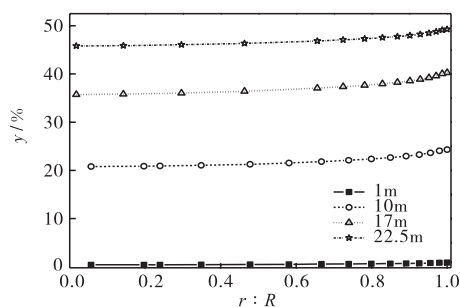


图 7 不同截面径向 C_2H_4 收率分布

Fig. 7 Radial profiles of C_2H_4 yield at various sections along tubular reactor length

图中显示从管中心至管壁乙烯浓度逐渐升高,两者相差 3%左右,可见乙烯浓度变化程度不如流速和温度明显.这是因为乙烯在生成的同时也参与了其他的反应,乙烯的浓度取决于两者的速度之差.自管中心至管壁生成和参与反应的乙烯都增加,两者互相抵消,使乙烯浓度变化不大.同理,反应管径向上其他组分的浓度变化规律与乙烯类似.

4 结 语

对乙烯裂解炉管内 8 个组分和 5 个主反应体系采用 EDC 模型进行三维数值模拟,主要结论有:

(1) 对主要产物收率有较好的预测性,工业数据吻合较好,误差在 5%之内.

(2) 沿反应管轴向油气吸热升温,裂解反应加剧,产物收率逐渐发生变化.

(3) 沿反应管径向存在明显的流体流速和温度的变化,而产物收率的变化不如流体流速和温度的变化明显.

参 考 文 献:

- [1] 江 华,毛 羽,吴德飞,等.燃料对重整加热炉过程影响的数值模拟[J].工业炉,2004,26(1):8—14.
- [2] 江 华,毛 羽,吴德飞,等.连续重整加热炉内多火焰组合燃烧的数值模拟[J].石油大学学报:自然科学版,2004,28(3):78—83.
- [3] Froment G F. Thermal cracking for olefins production fundamentals and their application to industrial problems [J]. Chem Eng Sci, 1981, 36(6): 1271—1282.
- [4] 张红梅,王宗祥.轻质油裂解反应管的二维模型[J].石油学报,1995,11(4):68—77.
- [5] 蓝兴英,高金森,徐春明,等.乙烯管式裂解炉的数值模拟[J].过程工程学报,2004,4(3):221—227.
- [6] 沙 利,张红梅,高金森,等.乙烯裂解炉管内流动反应历程的数值模拟[J].化工学报,2003,54(3):392—397.
- [7] 蓝兴英,张红梅,高金森,等.乙烯裂解炉内传递和反应过程综合数值模拟[J].石油学报,2003,19(6):64—69.
- [8] 俞鸿儒.适用于裂解制造乙烯的气体动力学加热方法[J].大连理工大学学报,2002,42(3):253—260.
- [9] 邹仁筠.石油化工裂解原理与技术[M].北京:化学工业出版社,1982.
- [10] Pope S B. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in-situ adaptive tabulation [J]. Combustion Theory and Modeling, 1997, 1: 41—63.