

文章编号: 1008-1542(2008)03-0231-05

裂解炉管结构对裂解产物收率影响的数值模拟

方明星, 贾志刚

(北京化工大学化学工程学院, 北京 100029)

摘要: 利用计算流体力学(CFD)软件 Fluent 6.3, 在相同温度边界条件下分别对 3 种不同结构的炉管管内石脑油的裂解反应进行了三维数值模拟, 深入分析了 3 种不同结构炉管的轴向、径向的温度分布和主要裂解产物浓度的分布规律。模拟结果表明, 炉管结构对炉管长度方向上以及炉管径向上的温度分布和主要裂解产物浓度的分布规律有着显著影响。用数值模拟方法裂解炉管对掌握管内部的裂解反应和主要裂解产物的分布规律有着重要作用, 可以为炉管的结构优化设计提供理论依据。

关键词: 乙烯裂解炉; GK5 炉管; 数值模拟; 计算流体力学

中图分类号: TQ054 文献标识码: A

Numerical simulation of the influence of GK coil structures of cracking furnace on cracking product yields

FANG Ming-xing, JIA Zhi-gang

(College of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: In this paper, the influence of three different coil structures on cracking product yields is simulated by Fluent 6.3 CFD software with the same temperature boundary condition. The profiles of temperature and main cracking product yields in direction of axis and radius are studied. The results show that the coil structure has a significant influence on the temperature and main cracking product yield profiles in direction of axis and radius. It is useful to study the cracking reaction features and main cracking product profiles in GK5 coil by means of CFD simulation, and helpful to optimize the structure of coils in ethylene cracking furnace.

Key words: ethylene cracking furnace; GK5 coil; numerical simulation; CFD

管式炉裂解技术是当今生产乙烯的主要技术, 裂解炉的炉管结构对乙烯收率等重要操作参数的影响很大。由于裂解过程的复杂性, 利用实验方法来定量地研究炉管内化学反应、流动、传热过程存在较大的困难。随着计算机技术的发展, 利用数值模拟的方法来研究炉管内的流动、传热和反应, 是目前定量地研究裂解规律的一个经济、快速的有效方法^[1]。

国内外许多研究者对乙烯裂解炉炉管内的裂解反应进行了大量的数值模拟工作。早期的裂解反应计算采用的是简化了的一维模型^[2-7]和二维模型^[8]。近年来, 研究人员已开始采用三维模型来研究炉管内的流动、传热、化学反应等问题。有些文献对炉管的几何形状进行了简化^[9], 将炉管简化成直管或 U 型结构, 但没有对这种简化的计算结果可能造成的影响进行深入的研究。

针对上述问题, 笔者以 KTI 裂解炉中的 GK5 型炉管为研究对象, 采用王宗祥等建立的轻质油裂解反应

收稿日期: 2008-04-09; 修回日期: 2008-05-21; 责任编辑: 张士莹

作者简介: 方明星(1981-), 男, 河南信阳人, 硕士研究生, 主要从事流体力学在化工过程中的应用等方面的研究。

联系人: 贾志刚

动力学模型^[7],对管内的流动、传热和裂解反应等过程进行三维数值模拟,对比分析了3种不同结构的炉管在相同的热边界条件下炉管轴向、径向的温度分布和主要裂解产物的浓度分布规律,以研究这些结构改变带来的影响。

1 数学模型

裂解炉内炉管数学模型由质量、动量、能量和组分等基本守恒方程组及湍流双方程模型和裂解反应动力学模型构成。

炉管内流体的湍流模型采用目前工程上广泛应用的 $k-\varepsilon$ 双方程湍流模型^[10]来描述;选用王宗祥等建立的轻质油裂解制乙烯动力学模型描述裂解反应历程^[7,11]。炉管数学模型涉及的方程有连续性方程、动量方程、能量方程、组分方程、湍动能方程、湍动能耗散率方程,这些方程可以用如下通用形式表示,详细描述见文献^[12]。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\varphi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\varphi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w\varphi) = \frac{\partial}{\partial x}(\Gamma\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\Gamma\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\Gamma\varphi \frac{\partial \varphi}{\partial z}) + S\varphi.$$

2 模拟对象和工况条件

以KTI公司的GK5型炉管为研究对象。该炉管共有2程,其中第1程为2根小管径盘管,在第1程的末端,2根管连接至1根较大管径的出口管。该炉管4根1组,在三维空间布置时每根炉管的底部水平段的长度不完全一致。笔者研究的炉管结构包括入口管与出口管连接处尺寸最长的1根(模型a)、最短的1根(模型c)以及将上述炉管结构简化成U型管(模型b)。模型a、模型b和模型c的结构如图1所示,模型的具体尺寸和操作条件见表1和表2。

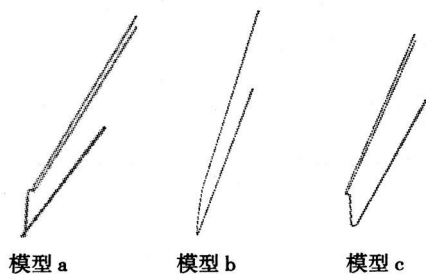


图1 炉管的外形图

Fig. 1 Geometry model of the coils

表1 3种模型的结构尺寸

Tab. 1 Geometrical parameters of the three models

项目	模型 a	模型 b	模型 c
连接处长度/mm	1 568	2 356	953
炉管长度/mm	20 438	20 438	21 109
入口管管径/ (mm × mm)	48 × 6.0	48 × 6.0	48 × 6.0
出口管管径/ (mm × mm)	70 × 6.5	48 × 6.0	70 × 6.5

表2 主要操作参数

Tab. 2 Main operating parameters

参数	指标
裂解原料质量速率/(kg · h ⁻¹)	27 000
稀释蒸汽质量速率/(kg · h ⁻¹)	13 500
稀释比值	0.5
入口温度/K	882
出口温度/K	1 105
入口压力/MPa	0.169

3 边界条件

根据炉管设计手册,裂解原料的组成参见表3。原料的入口速度为64 m/s,温度为882 K。其中炉管壁面采用无滑移假设,即壁面流速和湍动能以及湍动能耗散率均为0。炉管壁面的边界条件采用该炉管设计手册中的温度分布,温度 T 与炉管的各点的定量关系式见式(1),由此关系式生成用户定义函数作为温度边界条件。

$$T = 810.11812 + 211.2077Z - 38.62158Z^2 + 2.93958Z^3 - 0.08398Z^4, \quad (4.202 \leq Y \leq 5.800). \quad (1)$$

$$T = -3239.58059 + 2787.12097Z - 675.38559Z^2 +$$

$$79.92307Z^3 - 4.6286Z^4 + 0.10507Z^5, \quad (4.144 \leq Y \leq 4.202).$$

表 3 原料的组成
Tab.3 Feedstock compositions

组分	质量分数/ %	组分	质量分数/ %
$p-C_3H_8$	0.21	$i-C_{10}H_{22}$	3.26
$p-C_4H_{10}$	3.20	$i-C_{11}H_{24}$	1.03
$p-C_5H_{12}$	7.26	$i-C_{12}H_{26}$	0.04
$p-C_6H_{14}$	6.18	$n-C_5H_{10}$	1.55
$p-C_7H_{16}$	4.75	$n-C_6H_{12}$	8.45
$p-C_8H_{18}$	4.39	$n-C_7H_{14}$	6.39
$p-C_9H_{20}$	4.05	$n-C_8H_{16}$	4.82
$p-C_{10}H_{22}$	2.75	$n-C_9H_{18}$	3.13
$p-C_{11}H_{24}$	0.36	$n-C_{10}H_{20}$	0.87
$i-C_4H_{10}$	1.07	$n-C_{11}H_{22}$	0.04
$i-C_5H_{12}$	8.29	$\alpha-C_7H_8$	0.69
$i-C_6H_{14}$	8.00	$\alpha-C_8H_{10}$	3.54
$i-C_7H_{16}$	4.13	$\alpha-C_9H_{12}$	1.12
$i-C_8H_{18}$	3.30	$\alpha-C_{10}H_{14}$	0.17
$i-C_9H_{20}$	3.91		

注: p 表示正构烷烃; i 表示异构烷烃; n 表示环烷烃; α 表示芳烃。

4 计算方法

借助于 Fluent 6.3 计算流体力学软件,对 3 种不同结构的炉管内部裂解反应模型进行求解,包括连续性方程、动量方程、能量方程,湍流模型采用标准 $k-\epsilon$ 双方程模型。炉管内的反应动力学模型采用王宗祥等建立的轻质油裂解制乙烯动力学模型^[7,11]。共 48 个裂解反应方程,包括 26 个一次反应式和 22 个二次反应式。对动量方程、能量方程、湍动能方程及湍动能耗散率的离散均采用一阶迎风差分格式,采用 Simple 算法耦合求解速度、压力方程。炉管壁面的受热情况是按照该炉管设计守则中的温度分布曲线给出,几何模型及网格计算结构图见图 2。

5 计算结果及讨论

经过数值模拟计算,分别得到了 3 种不同结构的炉管在同一个温度边界条件下,炉管壁面温度分布和管内主要裂解产物的浓度分布规律以及炉管出口管截面 S 的温度分布和 C_2H_4 的浓度分布规律。

5.1 炉管壁面的温度分布及主要裂解产物浓度分布

炉管壁面的温度不仅受炉膛内烟气温度的影响,而且还与炉管内介质及裂解反应有关。图 3 为炉管的壁面温度分布情况。

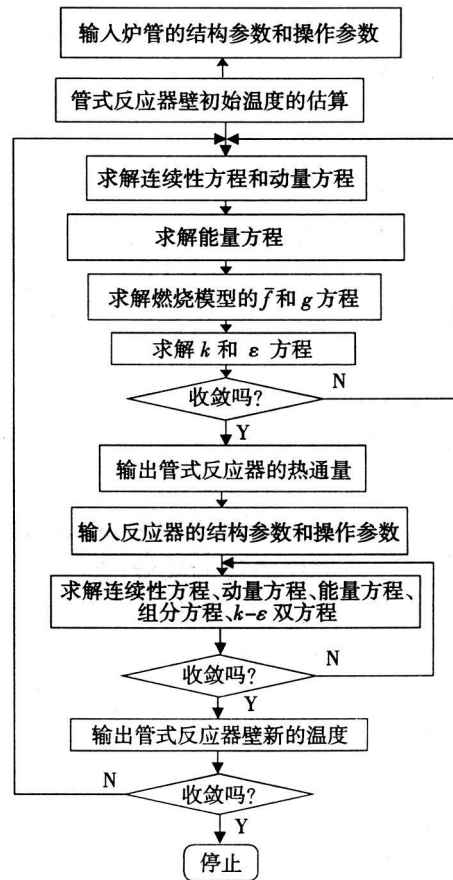


图 2 几何模型及网格计算结构图

Fig.2 Geometric model and grid computing structure diagram

从图3可以看出,沿着炉管的长度方向0~10.0 m处,由于炉膛中燃烧产生的热量以辐射传热的方式传到炉管内部进而加热裂解原料,当裂解原料的温度还未达到石脑油的裂解反应所需要的温度时,裂解反应还未发生,吸收的热量主要用来加热裂解原料和炉管壁面,所以炉管壁面的温度沿轴向由1070 K逐渐升高至1210 K;在入口管与出口管的连接部分,裂解原料的裂解反应速率逐渐增大,炉管壁面所吸收的热量大部分都被裂解反应吸收,管壁温度下降至1190 K后就基本维持不变。随后在炉管的后半程,由于裂解原料的减少以及裂解反应速率的减小,炉管壁面的温度又有所回升,达到1245 K;在炉管的出口端,二次反应速率开始加快,导致管壁温度又略有下降,在炉管的出口处降至1230 K。

炉管壁面的温度分布如图3所示时,炉管内部的裂解原料吸收热量发生裂解反应,主要裂解产物 CH_4 的浓度(本文浓度指质量分数,下同)分布如图4所示。

由图4可知,由于 CH_4 在整个过程中不参加二次反应,所以其浓度沿炉管长度方向不断增加,3种模型的内部 CH_4 的浓度分布规律十分相似。与模型a相比,模型c入口管与出口管的连接部分更靠近炉膛底部,连接部分的炉管壁面受到底部燃烧器火焰的作用更直接,故其内部裂解原料裂解程度更大, CH_4 浓度较模型a中的 CH_4 浓度略高。模型b的裂解原料在管内停留的时间更长,会在一定程度上造成出口处 CH_4 浓度偏高。

炉管壁面的温度分布如图3所示时,炉管内部的裂解原料吸收热量发生裂解反应, C_2H_4 的浓度分布如图5所示。

由图5可知,模型a和模型c中, C_2H_4 的浓度沿炉管轴向的分布规律极其类似,模型b中的 C_2H_4 浓度分布情况与模型a和模型c略有差异。在模型a和模型c中,沿炉管的长度方向,在0~4.0 m处,炉管吸收的热量主要用来加热裂解原料,裂解反应速率很小,因此 C_2H_4 的浓度增加得较慢;在4.0~11.0 m处,随着裂解反应越来越剧烈, C_2H_4 的浓度迅速上升;随后由于裂解原料的不断减少以及部分生成的 C_2H_4 又发生了二次反应,故在接近炉管的出口端 C_2H_4 浓度增加的速度有所变缓。模型c入口管与出口管的连接部分与模型a相比更靠近炉膛底部,受到底部燃烧器火焰高温的作用更显著,故其内部裂解原料裂解程度更大, C_2H_4 浓度较模型a中的 C_2H_4 浓度略高。模型b中,在0~4.0 m处,炉管吸收的热量主要用来加热, C_2H_4 的浓度增加得较慢;在4.0~10.0 m处,随着裂解反应越来越剧烈, C_2H_4 的浓度迅速上升;在10.0~15.0 m处,由于此模型的入口管与出口管连接部分为弯管结构,裂解原料和裂解产物在管中停留的时间较模型a和模型c更长,生成的 C_2H_4 参与二次反应的程度较模型a和模型c更显著,故其内部

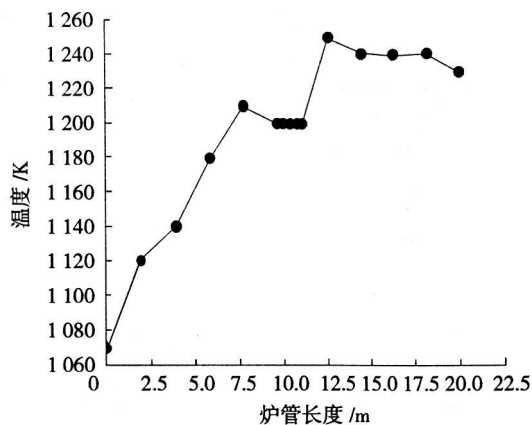


图3 炉管的壁面温度分布

Fig. 3 Temperature profile along axis

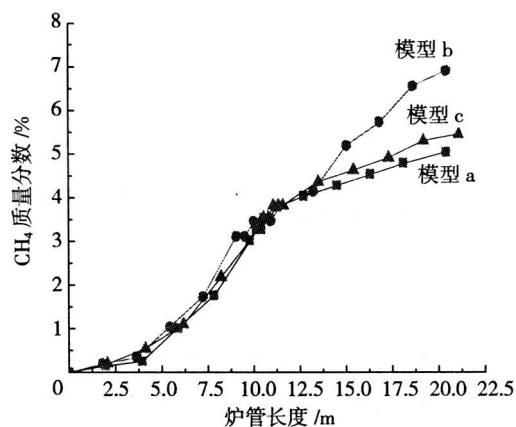


图4 裂解产物 CH_4 的浓度分布

Fig. 4 CH_4 mass concentration along axis

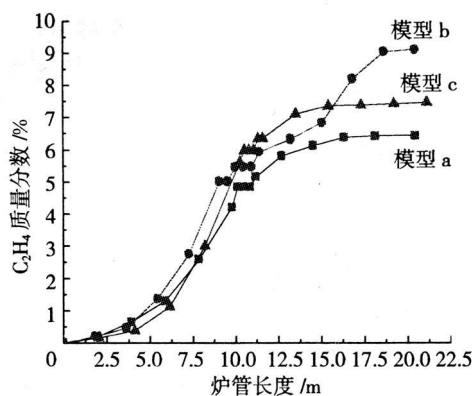


图5 裂解产物 C_2H_4 的浓度分布

Fig. 5 C_2H_4 mass concentration along axis

C_2H_4 浓度上升的梯度较模型 c 略低, 由于一次反应生成的 C_2H_4 的速率大于二次反应消耗 C_2H_4 的速率, 故在炉管的后半程 C_2H_4 浓度仍是逐渐上升的。

裂解原料吸收炉膛中, 燃烧放出的热量在炉管内发生裂解反应, 部分裂解产物又参与了二次反应。整个裂解过程中, 其浓度沿炉管长度方向的变化取决于一次反应生成的量与参与二次反应消耗的量的相对大小。当炉管壁面的温度分布如图 3 所示时, C_3H_6 的浓度分布如图 6 所示。

从图 6 可以看出, 炉管壁面开始吸收的热量用于原料升温, 裂解反应速率很小, 所以 C_3H_6 的浓度在炉管入口处增加缓慢。随着裂解反应速率的逐渐增加, C_3H_6 的浓度开始剧增。在炉管的后半程, 由于裂解原料的减少, 生成的 C_3H_6 参加二次反应的速率相对于一次反应的速率较大, 故在炉管的出口处 C_3H_6 的浓度略有下降。模型 a 和模型 c 中裂解产物 C_3H_6 的浓度变化规律基本一致, 沿炉管长度方向各处的浓度大小也基本相同。模型 b 由于入口管与出口管连接部分为 U 型结构, 使得 10.0~15.0 m 处生成的 C_3H_6 在炉管中停留时间更长而且参与了二次反应, C_3H_6 的浓度较模型 a 和模型 c 中的 C_3H_6 的浓度明显偏低。此外, 模型 a 和模型 c 是双程分支变径结构, 模型 b 的比表面积较模型 a 和模型 c 大, 故模型 b 单位时间内吸收的热量最多, 裂解程度最大, 使得该模型出口处 C_3H_6 浓度较模型 a 和模型 c 中炉管出口处 C_3H_6 的浓度要高。

5.2 炉管径向的温度分布及 C_2H_4 浓度分布

为了进一步分析炉管内部径向的温度分布和 C_2H_4 浓度的分布规律, 在炉管的后半程(10.0 m 处) 取一个截面(简称面 S)。3 种模型的炉管壁面温度分布如图 3 所示时, 截面 S 的温度分布如图 7 所示。由于炉管内部裂解反应的吸热作用, 使得炉管中心到炉管壁面存在一个较大的温度梯度。

由图 7 可以看出, 3 种不同结构的炉管截面 S 上的温度变化趋势大致相同。模型 a 中, 从炉管中心($r=0$) 到离管中心 0.017 1 m 处, 温度由约 1 034 K 缓慢地升至 1 049 K, 温差约为 15 K; 从离管中心 0.017 1 m 炉管壁面温度为 1 049 K 到急剧上升至 1 230 K 左右, 温差约为 180 K。模型 c 中, 从炉管中心($r=0$) 到离管中心 0.022 8 m 处, 温度由大约 1 050 K 缓慢升至 1 070 K, 温差约为 20 K; 从离管中心 0.022 8 m 处炉管壁面温度为 1 070 K 到急剧上升至 1 220 K, 温差约为 150 K。模型 b 中, 从炉管中心($r=0$) 到离管中心 0.014 0 m 处, 温度由大约 1 041 K 缓慢升至 1 080 K, 温差约为 39 K; 从离管中心 0.014 0 m 处炉管壁面温度为 1 080 K 到急剧上升至 1 200 K, 温差约为 120 K。

当炉管截面 S 的温度分布如图 7 所示时, 3 种不同结构的炉管出口管程截面 S 上的 C_2H_4 浓度的分布规律如图 8 所示。

由图 8 可知, 截面 S 上 C_2H_4 的浓度并不完全一致, 而是存在一个浓度梯度, 其梯度没有温度梯度变化显著。图 8 显示沿炉管径向, 从炉管中心到管壁面 C_2H_4 浓度逐渐增加, 但是变化的梯度很小, 均在 1% 之内。

此外, 从图 8 还可以看出, 模型 a 中 C_2H_4 浓度最低, 约为 6.3% (质量分数, 下同); 模型 b 中 C_2H_4 浓度 (下转第 259 页)

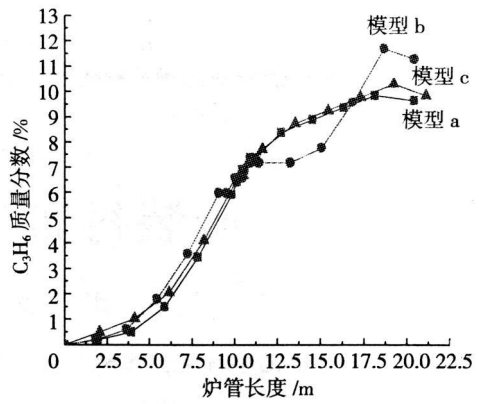


图 6 裂解产物 C_3H_6 的浓度分布
Fig. 6 C_3H_6 mass concentration along axis

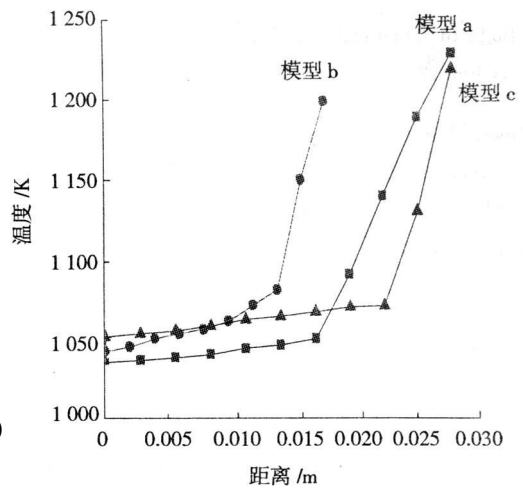


图 7 面 S 的温度分布
Fig. 7 Temperature profile on plane S

- [2] 周振华. 增长转型[M]. 上海: 上海人民出版社, 1997.
- [3] 约瑟夫·A·熊彼特. 经济发展理论[M]. 何 畏, 易家祥, 张军扩, 等译. 上海: 商务出版社, 1997.
- [4] 梁 昭. 国家经济持续增长的主要因素分析[J]. 国民经济管理, 2001, (1): 49-55.
- [5] 柴毅龙. 马克思主义经典著作选读[M]. 北京: 人民出版社, 1995.
- [6] 查尔斯·琼斯. 经济增长导论[M]. 北京: 北京大学出版社, 2002.
- [7] ERICKSON G S. Environment and innovation: The case of the small entity[J]. Industrial Marketing Management, 1996, 8(25): 112-167.
- [8] 李岳平. 经济增长质量评估体系及实证分析[J]. 江苏统计, 2001, (5): 19-22.
- [9] 肖红叶, 李腊生. 我国经济增长质量的实证分析[J]. 统计研究, 1988, (4): 8-14.
- [10] 舒 元. 现代经济增长模型[M]. 上海: 复旦大学出版社, 1998.

(上接第 235 页)

最高, 约为 8.65%; 模型 c 中 C_2H_4 浓度介于模型 a 与模型 b 之间, 约为 7.42%。3 种不同结构炉管出口管程截面 S 上的 C_2H_4 浓度大小关系从图 5 中也可以得到进一步验证。

6 结 论

通过对 3 种不同结构的炉管管壁温度和主要裂解产物的浓度以及炉管径向的温度分布和裂解产物的浓度模拟结果分析, 可以得到以下几点结论。

1) 入口管与出口管连接部分为 U 型管结构时, 裂解物质在其内部停留的时间较长, 部分裂解产物参与二次反应程度很大, 所得到的主要裂解产物浓度分布与 GK5 型炉管中的主要裂解产物浓度分布存在较大差异。

2) 炉管各分支结构相同而入口管与出口管连接部分尺寸不同时, 轴向、径向上的温度分布和主要裂解产物的浓度分布规律十分相似; 当入口管与出口管连接部分较短时, 出口处主要裂解产物浓度略高。

3) 裂解炉管结构对乙烯收率及温度分布等影响显著。将实际的炉管简化成直管或 U 型管会带来较大的误差。本方法可以用于优化炉管结构及提高乙烯收率的研究中。

参考文献:

- [1] 蓝兴英, 高金森, 徐春明. 乙烯裂解炉反应管数学模拟新方法[J]. 计算机与应用化学, 2003, 20(5): 672-676.
- [2] FROMENT G F. Thermal cracking for olefins production fundamentals and their application to industrial problems[J]. Chem Eng Sci, 1981, 36(6): 1 271-1 282.
- [3] PAUL S, FROMENT G F. Scaling up of naphtha cracking coils[J]. Ind Eng Chem Process Res Dev, 1981, 20: 366-376.
- [4] RAMANA M V, PARTICK M P, FROMENT G F. The coupled simulation of heat transfer and reaction in a pyrolysis furnace[J]. Chem Eng Sci, 1988, 43(6): 1 223-1 229.
- [5] PARTICK M P, GEERT C R, FROMENT G F. Simulation of the run length of an ethane cracking furnace[J]. Ind Eng Chem Process Res Dev, 1990, 29: 636-641.
- [6] PARAMESWARAN A K, SHARMA V K, KUNZRU D. Modeling of naphtha pyrolysis in swaged coils[J]. Can J Chem Eng, 1988, 66: 957-963.
- [7] 王宗祥, 王延吉, 郝江平. 轻质油裂解反应管的工艺数学模型及应用[J]. 石油化工, 1987, 16(11): 751-757.
- [8] 张红梅, 王宗祥. 轻质油裂解炉反应管的二维模型[J]. 石油学报(石油加工), 1995, 11(4): 68-77.
- [9] 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.
- [10] 周力行. 湍流气粒两相流动和燃烧的理论及数值模拟[M]. 北京: 科学出版社, 1993.
- [11] 大庆石油学院化学反应工程研究室. 油田轻质油热裂解制乙烯反应动力学数学模型(II)[J]. 大庆石油学院学报, 1980, 4(1): 8-25.
- [12] 蓝兴英, 高金森, 徐春明, 等. 乙烯管式裂解炉内传递反应过程综合数值模拟研究(I)——传递及反应过程综合数学模型的建立[J]. 石油学报(石油加工), 2003, 19(4): 21-25.

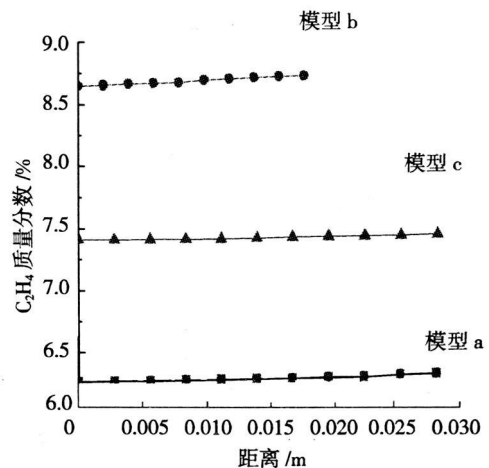


图 8 面 S 的 C_2H_4 浓度分布

Fig. 8 C_2H_4 mass concentration on plane S