

研究论文

乙炔加氢反应器二维非均相机理动态建模及分析

罗雄麟, 刘建新, 许 锋, 左 信
(中国石油大学自动化研究所, 北京 102249)

摘要: 乙炔加氢反应器具有非线性、慢时变的特点, 当前用于预测控制的模型过于简化, 使得对反应器长期运行的控制效果难以达到最佳, 因此有必要建立精确的模型作为乙炔加氢反应器的实验室虚拟装置, 研究更加有效的控制方法。通过机理分析的方法建立了乙炔加氢反应器严格的二维非均相动态数学模型, 并且考虑了催化剂失活的问题。基于动态流程模拟软件 gPROMS 分析了重要模型参数对反应器稳态模拟的影响, 为不同的装置选择参数提供了依据, 并且针对本文模拟的实际对象提供了一组数据。模拟分析了催化剂失活对于系统长期运行的影响。对所建立的动态数学模型进行了动态模拟, 结果基本反映了实际生产情况。将动态机理模型线性化, 得到动态机理模型在不同操作点上的线性状态空间模型特征值, 以此进行稳定性分析。动态模拟和稳定性分析的结果表明, 在反应温度控制开环的条件下, 所研究的反应器在大范围的操作点是稳定的。

关键词: 乙炔加氢反应器; 非均相; 动态模拟; 参数分析; 稳定性分析

中图分类号: TQ 018

文献标识码: A

文章编号: 0438-1157 (2008) 06-1454-08

Heterogeneous, two-dimensional dynamic modeling and analysis of acetylene hydrogenation reactor

LUO Xionglin, LIU Jianxin, XU Feng, ZUO Xin

(Research Institute of Automation, China University of Petroleum, Beijing 102249, China)

Abstract: The industrial acetylene hydrogenation system has the characteristics of nonlinearity and slow parameter variance. The model, which is applied to model predictive control currently, is so simple that the predictive control result could not achieve the optimal effect during a long-term operation. So it is necessary to establish an accurate model of reactor as the virtual instrument in laboratory. Based on the model, it is possible to further study the more effective control method. In this paper, a heterogeneous, two-dimensional and dynamic model for an industrial acetylene hydrogenation system was developed through process analysis. The condition for activity loss with time, due to hydrocarbon deposition resulting from acetylene green oils, was also considered. The dynamic process simulation software gPROMS was utilized to perform its simulation, and the dynamic process could predict the changing trend. The effects of important parameters on the system simulation were analyzed, and a group of parameter values were chosen for the reactor which was studied in this paper. By linearizing the dynamic model at different operation points, the different latent roots of the linear state space model were obtained and used to analyze the system stability at different operation points. The simulation and stability analysis showed that the reactor was under control.

Key words: acetylene hydrogenation reactor; heterogeneous; dynamic simulation; parameters analysis; stability

引言

乙炔加氢反应器是乙烯厂回收系统的一个重要装置,其运行状况直接影响着乙烯产品的纯度和产量,有关人员对其模拟、控制及优化进行了较深入研究。涂飞等^[1]、Gordon^[2]和 Gobbo^[3]建立了当前广泛使用的一维拟均相动态机理模型;Szukiewicz等^[4]建立了一维非均相模型,并且与拟均相模型进行了仿真对比,证明了非均相模型能更准确描述反应器特性;张东平等^[5]采用 Aspen 软件对反应器进行模拟计算,提出了最佳操作方案。左信等^[6]通过机理模型建立了软测量仪表并且用于实际装置。罗雄麟等^[7]将预测控制与常规控制相结合的复合控制策略成功应用到了实际生产装置上,取得了较好的经济效益;Gobbo^[3]考虑了催化剂的失活,提出了经验公式,并通过动态模拟软件 gPROMS 对前加氢反应器进行了动态优化研究。

然而,当前普遍使用的乙炔加氢反应器一维拟均相模型^[1-3],与实际情况有一定偏差;其次,当前大部分乙炔加氢反应器模型中对催化剂活性的表示方式也不够得当,甚至不考虑催化剂失活;最后,乙炔加氢反应器是气体轴向流动的放热反应,现还未有对其稳定性分析的研究。因此,深入研究反应机理,考虑反应器内混合气体和催化剂中因不同的传递系数造成的温度和浓度的径向与轴向分布,以及催化剂粒子内的浓度和温度梯度,同时考虑催化剂失活,建立更精确的模型,即严格的二维非均相动态机理模型来进行乙炔加氢反应器的动态特性研究是很有必要的。本文将建立严格动态机理模型作为实验室虚拟装置,为乙炔加氢反应器的控制和优化构建研究平台,以利于研究更有效的先进控制及优化方法,推动乙炔反应器的控制水平的提高。

1 反应器严格动态机理模型的建立

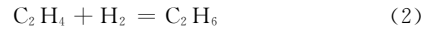
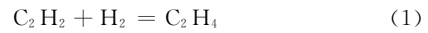
整个乙炔加氢反应系统包括多段催化剂床层,床层之间取出反应热,补充氢气。考虑反应器的热量散失,由固定床反应器的基本质量和能量衡算公式,推导出新的反应器二维非均相模型。其模型化的基本假设为:

(1) 反应器轴向导热和扩散可以忽略,这对于固定床 $\frac{L}{\phi} > 50$ 的反应器来说是允许的;

(2) 充分考虑径向质量和热量的扩散,同时假定气相主体与催化剂颗粒的温度、浓度不同;

(3) 催化剂内部的浓度、温度梯度用引入孔总有效率因子加以考虑。

在乙炔加氢反应器中,碳二馏分主要发生以下加氢反应



当前国内多家乙烯厂使用的碳二加氢催化剂对 CO 不敏感,所以不再使用 CO 调节乙炔加氢反应器的出口产品质量,则此模型中不考虑 CO 的影响。乙炔加氢和乙烯加氢的化学反应本征动力学模型^[1]分别为

$$-r_1 = k_1 e^{\frac{-E_1}{R_g T}} p_{H_2} \quad (3)$$

$$-r_2 = k_2 e^{\frac{-E_2}{R_g T}} \frac{p_{C_2H_4} p_{H_2}}{p_{C_2H_6}} \quad (4)$$

对于催化剂活性的影响,本文将使用张志良^[8]根据现场数据提出的经验公式,将催化剂活性表述为运行时间与当前运行温度的函数。

流体相质量和热量衡算式

$$\begin{aligned} \epsilon \frac{\partial p_{g,k,i}(Z,R,t)}{\partial t} &= -u \frac{\partial p_{g,k,i}(Z,R,t)}{\partial Z} + \\ \epsilon D_{R,i} \left[\frac{\partial^2 p_{g,k,i}(Z,R,t)}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial p_{g,k,i}(Z,R,t)}{\partial R} \right] &+ \\ k_{g,i} \alpha [p_{s,k,i}(Z,R,t) - p_{g,k,i}(Z,R,t)] & \quad (5) \\ \epsilon \rho_g c_{p,g} \frac{\partial T_{g,k}(Z,R,t)}{\partial t} &= -\rho_g u c_{p,g} \frac{\partial T_{g,k}(Z,R,t)}{\partial Z} + \\ \lambda_R^g \left[\frac{\partial^2 T_{g,k}(Z,R,t)}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial T_{g,k}(Z,R,t)}{\partial R} \right] &+ \\ ha [T_{s,k}(Z,R,t) - T_{g,k}(Z,R,t)] & \quad (6) \end{aligned}$$

式中 $k=1, 2, \dots, n$ 分别表示反应器床层序号, n 为总床层数; $i=a, b, c$ 分别表示乙炔、乙烯和氢气,它们的生成速率分别为

$$r_a = \eta_1 r_1 \quad (7)$$

$$r_b = -\eta_1 r_1 + \eta_2 r_2 \quad (8)$$

$$r_c = \eta_1 r_1 + \eta_2 r_2 \quad (9)$$

催化剂相质量和热量衡算式为

$$\begin{aligned} (1-\epsilon) \frac{\partial p_{s,k,i}(Z,R,t)}{\partial t} &= k_{g,i} \alpha [p_{g,k,i}(Z,R,t) - \\ p_{s,k,i}(Z,R,t)] &+ (1-\epsilon) \theta r_i \quad (10) \\ (1-\epsilon) \rho_s c_{p,s} \frac{\partial T_{s,k}(Z,R,t)}{\partial t} &= \\ ha [T_{g,k}(Z,R,t) - T_{s,k}(Z,R,t)] &+ \\ \lambda_R^s \left[\frac{\partial^2 T_{s,k}(Z,R,t)}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial T_{s,k}(Z,R,t)}{\partial R} \right] &+ \\ \sum_{j=1}^2 \eta_j \theta (-r_j) (-\Delta H_j) & \quad (11) \end{aligned}$$

模型初始及边界条件

$$\left. \frac{\partial p_{s,k,i}(Z,R,t)}{\partial R} \right|_{R=0} = \left. \frac{\partial p_{g,k,i}(Z,R,t)}{\partial R} \right|_{R=0} = 0 \quad (12)$$

$$\left. \frac{\partial T_{g,k}(Z,R,t)}{\partial R} \right|_{R=0} = \left. \frac{\partial T_{s,k}(Z,R,t)}{\partial R} \right|_{R=0} = 0 \quad (13)$$

$$\left. \frac{\partial p_{s,k,i}(Z,R,t)}{\partial R} \right|_{R=\frac{d_k}{2}} = \left. \frac{\partial p_{g,k,i}(Z,R,t)}{\partial R} \right|_{R=\frac{d_k}{2}} = 0 \quad (14)$$

$$\left. \frac{\partial T_{g,k}(Z,R,t)}{\partial R} \right|_{R=\frac{d_k}{2}} = -\frac{h_w^g}{\lambda_R^g} \left[T_{g,k} \left(Z, \frac{d_k}{2}, t \right) - T_w \right] \quad (15)$$

$k=1, 2, \dots, n$ 分别表示反应器床层序号, n 为总床层数。

$$\left. \frac{\partial T_{s,k}(Z,R,t)}{\partial R} \right|_{R=\frac{d_k}{2}} = -\frac{h_w^s}{\lambda_R^s} \left[T_{s,k} \left(Z, \frac{d_k}{2}, t \right) - T_w \right] \quad (16)$$

$$T_{g,k}(0,R,t) = T_{s,k}(0,R,t) = T_{g,k,0} \quad (17)$$

$$p_{g,k,i}(0,R,t) = p_{s,k,i}(0,R,t) = p_{g,k,i,0} \quad (18)$$

$$\left. \frac{\partial p_{g,k,i}(Z,R,t)}{\partial Z} \right|_{Z=L_k} = \left. \frac{\partial p_{s,k,i}(Z,R,t)}{\partial Z} \right|_{Z=L_k} = 0 \quad (19)$$

$$\left. \frac{\partial T_{g,k}(Z,R,t)}{\partial Z} \right|_{Z=L_k} = \left. \frac{\partial T_{s,k}(Z,R,t)}{\partial Z} \right|_{Z=L_k} = 0 \quad (20)$$

当 $k=1$ 时, $p_{g,k,i,0}$ 为入口操作条件决定; $k>1$ 时, 且此处 $p_{g,k,i,0}$ 是由前一段各气体出口摩尔量、补充氢气的摩尔量、出口温度和入口总压等计算得出的, 各段出口混合气体温度及各组分分压为截面平均值

$$T_{g,k,out}(t) = \frac{2}{d_k} \int_0^{\frac{d_k}{2}} T_{g,k}(L,R,t) dR \quad (21)$$

$$p_{g,k,i,out}(t) = \frac{2}{d_k} \int_0^{\frac{d_k}{2}} p_{g,k,i}(L,R,t) dR \quad (22)$$

催化剂粒子孔总有效利用率随反应的进行和随温度发生变化, 所以它与位置有关。为了精确地进行反应器计算, η 由催化剂颗粒内传递模型求解得出^[9], 即以下几个微分方程

$$D_i^c \left[\frac{d^2 p_i}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dp_i}{dx} \right] = r_i \quad (23)$$

$$\lambda^c \left[\frac{d^2 T}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{dT}{dx} \right] = \sum_{j=1}^2 \eta_j T(-r_j) (-\Delta H_j) \quad (24)$$

$j=1, 2$ 分别表示反应 (1) 和 (2), 粒子内各组分的变化速率方程中 η 皆为 1。

对于催化剂粒子, 边界条件为

$$\left. \frac{dp_i}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=0} = 0 \quad (25)$$

$$D_i^c \left. \frac{dp_i}{dx} \right|_{x=\frac{\phi}{2}} = k_{g,i} (p_i - p_{s,i}) \quad (26)$$

$$\lambda^c \left. \frac{dT}{dx} \right|_{x=\frac{\phi}{2}} = h(T - T_s) \quad (27)$$

2 模型参数分析

器壁处传热系数 (h_w)、气体径向扩散系数 (D_R)、径向热导率 (λ_R)、粒子内有效热导率 (λ^c) 和粒子内气体有效扩散系数 (D^c) 的计算方法见文献 [9]; 相间传质 (k_g) 和传热参数 (h) 的计算式见文献 [10]。

gPROMS 是英国 PSE 公司于 1997 年推出的基于化工机理模型的计算软件包, 编程语言简单, 其模型代码开放性使得研究者可以根据自己的方程来构造出合适的模型, 然后可以选择不同的求解器对不同类型的模型进行模拟求解。gPROMS 软件还具有线性化、动态优化和参数估计等功能。

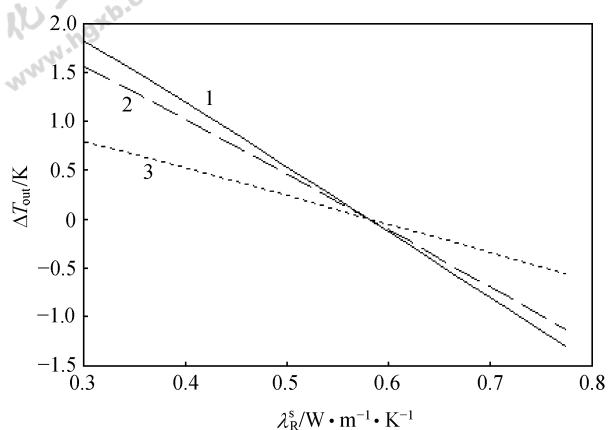
通过 gPROMS 的编程语言将模型方程式 (3) ~ 式 (27) 编入软件, 然后对系统进行稳态模拟。通过参数计算与模拟实际现场运行情况的对比确定参数值, 使模拟结果较准确地反映实际工况, 对比结果如表 1 所示。

表 1 稳态模拟结果与实际工况的对比
Table 1 Comparison between predicted and actual results of chief variables

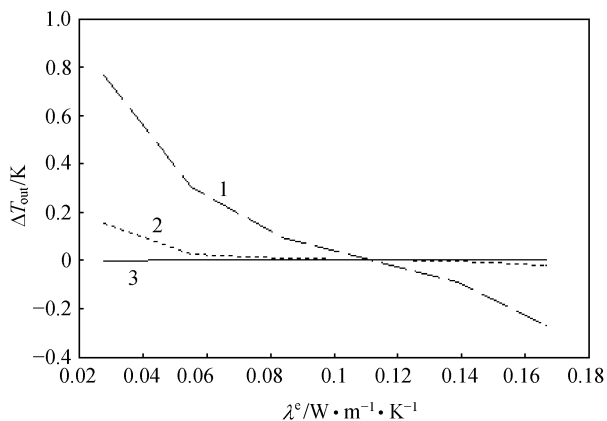
Bed	Outlet acetylene/%(mol)		Outlet temperature/K	
	Pred.	Actu.	Pred.	Actu.
No. 1	0.50	0.50	365.3	365.3
No. 2	5.03×10^{-3}	5.00×10^{-3}	354.0	353.3
No. 3	1.52×10^{-4}	1.35×10^{-4}	323.8	323.5

主要参数值 $h_w^g = 1.8 \times 10^{-3} \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 、 $h_w^s = 0.127 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 、 $\lambda_R^s = 0.578 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 、 $\lambda^c = 0.115 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 、 $k_{g,c} = 4.3 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 和 $D_c^c = 2.75 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ 。以此为基准, 分别改变各参数值, 研究参数对稳态模拟的影响。其中催化剂径向热导率 (λ_R^s)、粒子内有效热导率 (λ^c)、氢气相间传质系数 ($k_{g,c}$) 和粒子内氢气有效扩散系数 (D_c^c) 等 4 个参数对模拟结果影响较大, 如图 1。出口气体温度对于这些参数的敏感程度高。其他参数的变化对反应器内温度和物质分布影响不如这些参数显著。不同的乙炔加氢装置参数可能不同, 但充分考虑这些敏感的参数, 对于精确模拟国内众多乙炔加氢反应器具有重要意义。

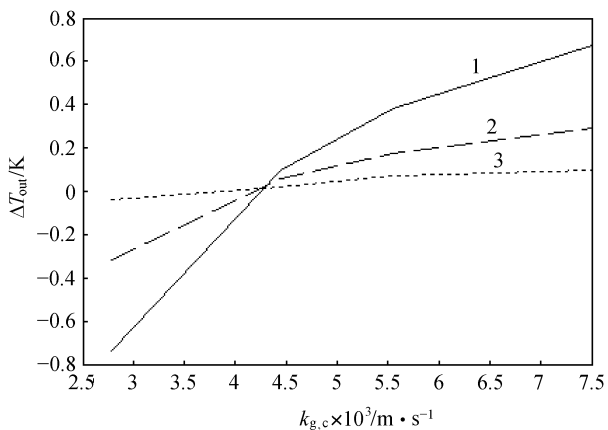
加氢催化剂使用一段时间后, 其表面会被高分子烃所覆盖, 导致活性下降。为了研究慢时变变量



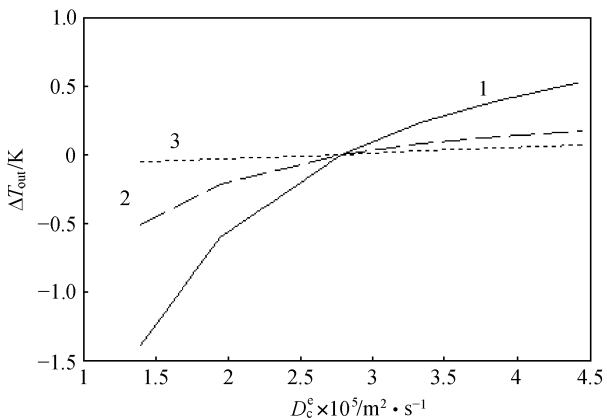
(a) effect of radial heat conductive coefficient of catalyst on outlet temperature



(b) effect of effective conductivity of porous catalyst pellets on outlet temperature



(c) effect of transfer coefficient of hydrogen on outlet temperature



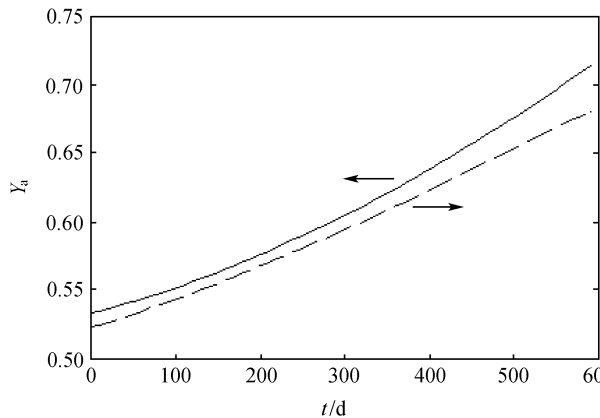
(d) effect of effective diffusion coefficient of hydrogen on outlet temperature

图 1 重要参数对系统模拟的影响

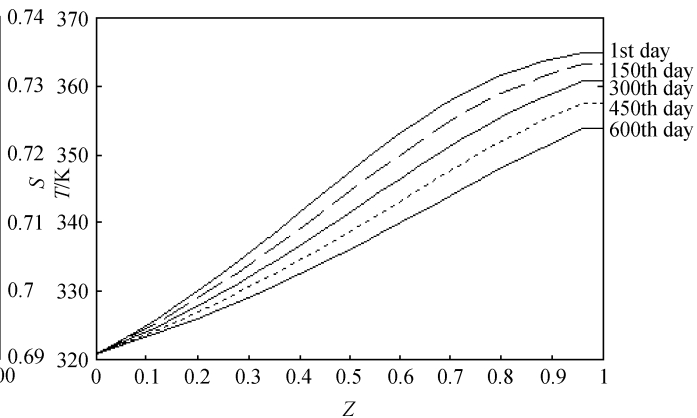
Fig. 1 Effect of important coefficients on system simulation

1—the first reactor bed; 2—the second reactor bed; 3—the third reactor bed;

T_{out} (1) based on 365.5 K; T_{out} (2) based on 351.3 K; T_{out} (3) based on 328.8 K



(a) outlet acetylene concentration and ethylene selectivity for the first reactor bed



(b) temperature profile for axial center of the first reactor bed

图 2 催化剂活性对于系统在长期运行的影响

Fig. 2 Effect of catalyst activity on system at long-term operation

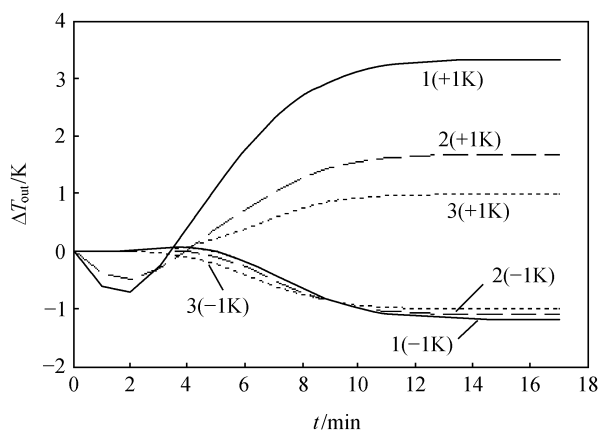
催化剂活性对反应器长期运行的影响,在第一床层对其进行稳态模拟,如图 2,保持运行初期各入口操作条件不变,催化剂活性随运行时间而衰减,反应速率下降,反应器内温度整体下降,虽然乙烯选择性^[1]有一定增加,但乙炔出口摩尔分数增加较大。但这只是理想的模拟结果,工厂操作是不允许出现这种情况的。所以随着运行时间的变化,应该对操作变量值进行适当的调节,以补偿催化剂的活性下降,保证出口产品的质量和加氢反应器稳定、安全运行。

3 乙炔加氢反应器动态模拟

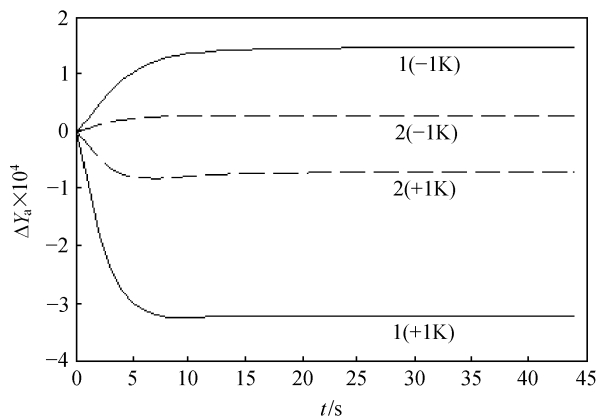
混合气体入口温度变化能引起系统的较大变化,它是反应器控制的两个操作变量之一。在进行稳态模拟的基础上,分别将各段床层入口温度变化 1 K 和 -1 K,保持其他操作条件不变,利用 gPROMS 软件进行动态模拟,观察各段入口温度变化对于本段床层的出口温度和乙炔出口摩尔分数的影响。如图 3 (a)、(b),可见乙炔加氢反应过程具有非常典型的不对称非线性动态特性。各段出口温度对于入口温度变化的动态响应时间约 15 min,前两段乙炔出口摩尔分数对于操作温度变化的动态响应时间约 20 s。图 3 (c) 反映了第三床层乙炔出口摩尔分数对于入口温度变化 0.1 K 和 -0.1 K 的动态响应过程,其动态响应时间较长,约为 8 min。

值得注意的是,在入口温度增加的动态响应中,第一、二床层出口温度先有较小的下降。为了分析原因,以第一床层为例,研究反应器内各点气体和催化剂温度对于入口温度增加 1K 的动态响应,如图 4。

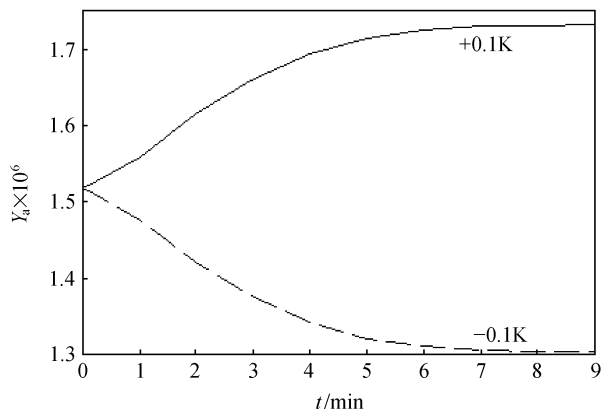
入口温度增加,反应器中部反应加剧,反应消耗更多氢气,两相温度迅速上升;反应器后端的氢气减小,反应速率减小而使反应放热减小,导致反应器轴向 $z=0.95$ 到 $z=1$ 之间温度先略有下降,入口温度变化 1 min 后,反应器中部大量热量传递到后端,反应器末端温度开始急剧上升。还可以看出,反应器中部两相温差比末端两相温差大,原因就是反应器开车初期,床内催化剂活性较高,脱炔反应主要集中在反应器的中前段,相间传热阻力使两相形成了较大的温度梯度。因此,对于反应器的控制不仅要考虑初始响应的下降趋势,还要考虑对床层内催化剂温度的控制,以免造成催化剂内温度



(a) outlet temperature based on different steady-state value for three reactor beds



(b) outlet acetylene concentration based on different steady-state value for the first and second reactor bed



(c) outlet acetylene concentration for the third reactor

图 3 系统对于入口温度的动态响应

Fig. 3 Dynamic response of system to inlet temperature
1—the first reactor bed; 2—the second reactor bed; 3—the third reactor bed

过高而造成催化剂过快失活。

氢炔比是乙炔加氢反应器控制的另一个重要操作变量,图 5 (a) 反映了三段床层出口温度分别

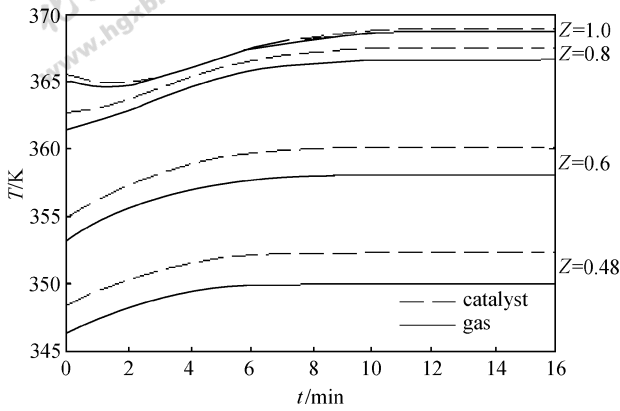
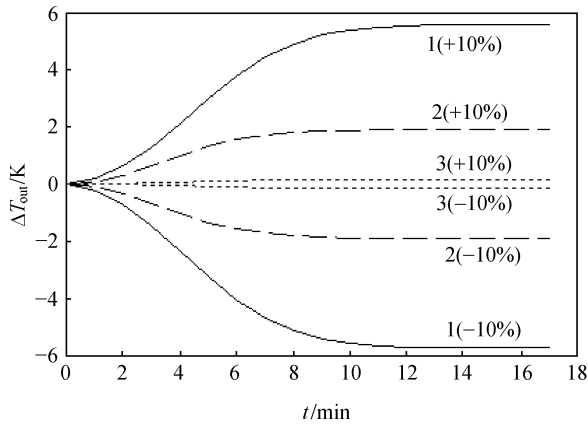
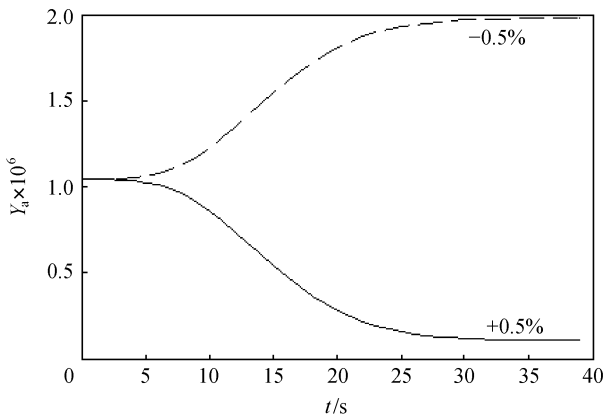


图 4 反应器内轴心各点气固两相相对于入口温度的动态响应

Fig. 4 Temperature of catalyst and gas in any point of the first reactor axial



(a) outlet temperature based on different steady-state value for three reactors
1—the first reactor; 2—the second reactor; 3—the third reactor



(b) outlet acetylene concentration for the third reactor

图 5 系统对于氢炔比的动态响应

Fig. 5 Dynamic response of system to hydrogen-acetylene ratio

对于氢炔比变化 10% 和 -10% 的动态响应。入口氢炔比提高，气体出口温度逐步上升；相反，气体出口温度下降，且两个过程基本对称。图 5 (b) 反映了第三床层乙炔出口摩尔分数对于入口氢炔比变化 0.5% 和 -0.5% 的动态响应过程，其响应时间较短，约为 40 s。

前段床层温度或者氢炔比变化后，影响了后段床层的乙炔入口摩尔分数，而只要后段的入口氢气量保持不变，则后段床层内的温度变化不大，因此前段床层的操作变量能有效地影响后段床层的乙炔出口摩尔分数。

4 稳定性分析

以第一床层为对象，选定入口温度和氢气入口分压作为系统的输入，出口温度和出口乙炔分压作为系统的输出，通过 gPROMS 软件将偏微分方程在轴向进行一阶向后差分离散化，离散为等距 25 段，在径向进行一阶向后差分、二阶中心差分离散化，离散为等距 10 段，即将偏微分方程转化为常微分方程和代数方程。然后借助 gPROMS 软件的线性化功能对 DAE 方程作线性化处理，得到系统的状态空间模型，最后运用 MATLAB 求特征根。

(1) 确定氢炔比为 1，仅改变入口温度，在 320.8~350.8 K 内取值。求得的系统所有特征值的实部均为负值，最大实部为 -52.003，说明反应器在入口操作温度大范围变化内各稳态点都是稳定的。限于篇幅，表 2 列出入口温度为 350.8 K 时，模型中床层轴心催化剂表面温度对应的 24 个特征值。

(2) 确定入口温度为 320.8 K，仅改变入口氢炔比，在 0.5~1.5 内取值。求得的系统所有特征值的实部均为负值，最大实部为 -56.249，说明反应器的第一床层在氢炔比大范围变化内的稳态点都是稳定的。

同理，对第二、三床层在不同的大范围的工作点内分析，结果说明了各段反应器都是稳定的。

5 结论

(1) 通过机理分析的方法，建立了乙炔加氢反应器的严格的二维非均相动态数学模型，考虑了催化剂随运行时间的失活，模型由一系列的微分-代数方程来描述；

表 2 床层轴心催化剂表面温度对应的特征值

Table 2 Eigenvalue corresponding to catalyst surface temperature (350.8 K)

-63.8071+0.21i	-63.74-0.245i	-62.53-0.08i	-62.62+0.216i	-63.67-0.258i	-62.77+0.27i
-63.5955-0.25i	-63.52+0.21i	-62.92-0.24i	-62.97+0.2i	-63.45+0.09i	-63.02-0.15i
-63.04+0.089i	-63.06-0.03i	-67.565	-63.824+7.46i	-62.65-8.07i	-60.876+6.55i
-59.594-6.89i	-58.46+5.05i	-57.14-5.03i	-56.777+3.09i	-56.349-1.26i	-56.048+0.88i

(2) 基于流程模拟软件 gPROMS 对反应器进行了稳态模拟, 分析了系统对于各参数的敏感性, 得出了催化剂径向热导率, 粒子内有效热导率, 氢气相间传质系数和粒子内氢气有效扩散系数对系统模拟影响较大的结论。保持系统运行初期的操作变量值不变, 模拟了催化剂失活对于第一床层长期运行的影响。

(3) 在稳态模拟的基础上, 分别对系统的两个操作变量施加扰动时, 得到反应器各床层混合气体温度和乙炔出口摩尔分数等变量的动态变化趋势。

(4) 通过动态模拟和稳定性分析, 在操作变量控制开环的情况下, 各段反应器在大范围操作点附近都是稳定的。

符 号 说 明

- a ——催化剂比表面积, $\text{m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$
 c_p ——比热容, $\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 D ——气体扩散系数, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
 d ——反应器直径, m
 E ——反应活化能, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
 ΔH ——反应热, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
 h ——相间传热系数, $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 h_w ——反应器壁面传热系数, $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 k ——反应动力学方程指前因子
 k_g ——相间传质系数, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
 L ——反应器高度, m
 n ——反应器总床层数
 p ——气体压力, kPa
 R ——反应器量纲 1 半径
 R_g ——气体常数, $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 r ——反应速率, $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$
 S ——乙烯选择性
 T ——温度, K
 t ——时间, s
 u ——流速, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
 x ——催化剂粒子量纲 1 半径
 Y ——气体摩尔分数
 Z ——反应器量纲 1 长度

- ϵ ——催化剂孔隙率
 η ——效率因子
 θ ——催化剂活性
 λ ——热导率, $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 ρ ——平均密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
 ϕ ——催化剂粒子平均直径, m

下角标

- a, b, c——分别表示乙炔、乙烯和氢气
g——气体主体
k——床层号
out——反应器出口
P——催化剂粒子内
R——反应器径向
s——催化剂表面
w——反应器壁面
0——反应器入口

上角标

- e——有效系数
g——气体主体
s——催化剂表面

References

- [1] Tu Fei (涂飞), Qing Hongying (青红英), Luo Xionglin (罗雄麟), Zuo Xin (左信). Advanced control of acetylene hydrogenation reactor (I): Dynamic mechanism model. *Control and Instruments in Chemical Industry* (化工自动化及仪表), 2003, **30** (1): 20-24
- [2] Gordon W. Modeling and control of the acetylene converter. *Journal of Process Control*, 1996, **6** (1): 7-15
- [3] Gobbo R. Modeling, simulation, and optimization of a front-end system for acetylene hydrogenation reactors. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 2004, **21** (4): 545-556
- [4] Szukiewicz M, Kaczmarski K, Petrus R. Modeling of fixed-bed reactor: two models of industrial reactor for selective hydrogenation of acetylene. *Chemical Engineering Science*, 1998, **53** (1): 149-155
- [5] Zhang Dongping (张东平), Wang Gonghua (王功华). Simulating and analysis of reactor for selective hydrogenation of acetylene. *Petrochemical Technology* (石

- 油化工), 2003, **32** (5): 414-417
- [6] Zuo Xin (左信), Tu Fei (涂飞), Qing Hongying (青红英), Luo Xionglin (罗雄麟). Advanced control of acetylene hydrogenation reactor (II): Soft sensor and its engineering practice. *Control and Instruments in Chemical Industry* (化工自动化及仪表), 2003, **30** (2): 19-21
- [7] Luo Xionglin (罗雄麟), Tu Fei (涂飞), Du Dianlin (杜殿林), Zuo Xin (左信). Advanced control of acetylene hydrogenation reactor (III): Control strategy and its application. *Control and Instruments in Chemical Industry* (化工自动化及仪表), 2003, **30** (3): 10-15
- [8] Zhang Zhiliang (张志良). The analysis and control of reaction depth [D]. Beijing: China University of Petroleum, 2006
- [9] Beerens M. Chemical Reaction Engineering (化学反应工程). Zhang Jiyan (张继炎), trans. Beijing: China Petrochemical Press, 1991: 83-120, 429-445
- [10] Orhan M Tarhan. Catalytic Reactor Design (催化反应器设计). Que Daoyou (阙道悠), trans. Beijing: Hydrocarbon Processing Press, 1989: 81-99