

УДК 544.723

Бирюков А.Б., Новикова Е.В., Гнигнев П.А., Манойлов Д.В.

Донецкий национальный технический университет

Диагностика тепловой работы реактора синтеза углеродных наноматериалов при использовании ограниченного числа датчиков

Запропоновано алгоритм роботи експертної системи для аналізу теплової роботи реакторів піролітичного синтезу ВНМ, що заснована на побудові моментальних теплових балансів, яка не має в своєму складі газоаналізатора для визначення вмісту компонентів в газоподібному середовищі, з реактору *Предложен алгоритм работы экспертной системы для анализа тепловой работы реакторов пиролитического синтеза УНМ, основанной на построении моментальных тепловых балансов, не имеющей в своем составе газоанализатора для определения содержания компонентов в газообразной среде, покидающей реактор* Working algorithm of expert system for carbon nanotubes pyrolytic synthesis reactors thermal work analysis basing on momentous heat balances constructing which has no gas analyzer for determining components content in gas flux living reactor in gauges set is proposed

V – расход газообразного потока (н.ф.у.);

t – температура газообразной среды;

c – теплоемкость газообразной среды;

Q – статья теплового баланса;

τ – время;

χ – доля прореагировавшего углеводорода;

γ – доля инертного газа в составе исходной смеси газов для подачи в реактор;

Γ – условное обозначение инертного газа.

индексы верхние

эл. нагр. – электрический нагреватель;

пот. реак. – тепловые потери реактора;

энд. – указатель эндотермического эффекта;

Σ – указатель того, что берется интегральное значение величины за некоторый период времени.

нижние индексы

исх. угл. – исходный углеводород;

газ. прод. – газообразные продукты, покидающие реактор;

пр. – указатель принадлежности к приходной статье теплового баланса;

расх. – указатель принадлежности к расходной статье теплового баланса;

н, к – указатель того, что берется расход газов на входе и выходе из реактора соответственно.

Введение

Имеется множество сведений о синтезе углеродных наноматериалов (УНМ), в частности углеродных нанотрубок (УНТ), при помощи различных методов (электродуговое осаждение, CVD-синтез, каталитический пиролиз на поверхности подложек с катализатором и т.д.) [1]. При обилии информации о результатах применения каждого из методов в различных модификациях сложно определить с выбором оптимальных условий работы каждого конкретного реактора.

Применение систем диагностики позволяет исследовать влияние различных технологических параметров на интенсивность протекания процесса образования УНМ:

- вид углеводорода или состав углеводородной смеси;
- доля инертных разбавляющих газов в случае добавки последних;
- температура в реакционной зоне;
- характер подачи газов в реактор (скорость истечения, параметры пульсации и т.д.);
- состояние подложки с катализатором (неподвижное, кипящий слой, виброоживленное состояние и т.д.).

Анализ публикаций на тему исследования

Область производства УНМ характеризуется постоянным уточнением сведений о рациональных параметрах реализации технологий (например, выбор углеводорода, температуры процесса, параметры подвода исходной среды и т.д.) [1-3].

Особенностью данной зарождающейся области промышленности должен служить высокий уровень способности к перестройке на новые технологические параметры не только опытных, но и опытно-промышленных и промышленных реакторов. Таким образом, особую роль приобретает система АСУ ТП реактора, которая должна приобрести также функции экспертной системы, позволяющей интерпретировать информацию, получаемую от датчиков, для динамического «доисследования» процесса [4].

В работе [4] предложена экспертная система для углубленного исследования тепловой работы реакторов пиролитического синтеза УНМ на подложках с катализатором. Применение данной системы дает возможность «доисследования» процесса в плане определения важных параметров процесса на основании сигналов от стандартного набора датчиков, что важно для оптимизации работы реакторов.

Постановка задачи исследования

В данной работе усилия сосредоточены на разработке алгоритма работы экспертной системы для анализа тепловой работы реакторов пиролитического синтеза

УНМ, основанной на построении моментальных тепловых балансов, не имеющей в своем составе газоанализатора для определения содержания компонентов в газообразной среде, покидающей реактор (рис. 1).

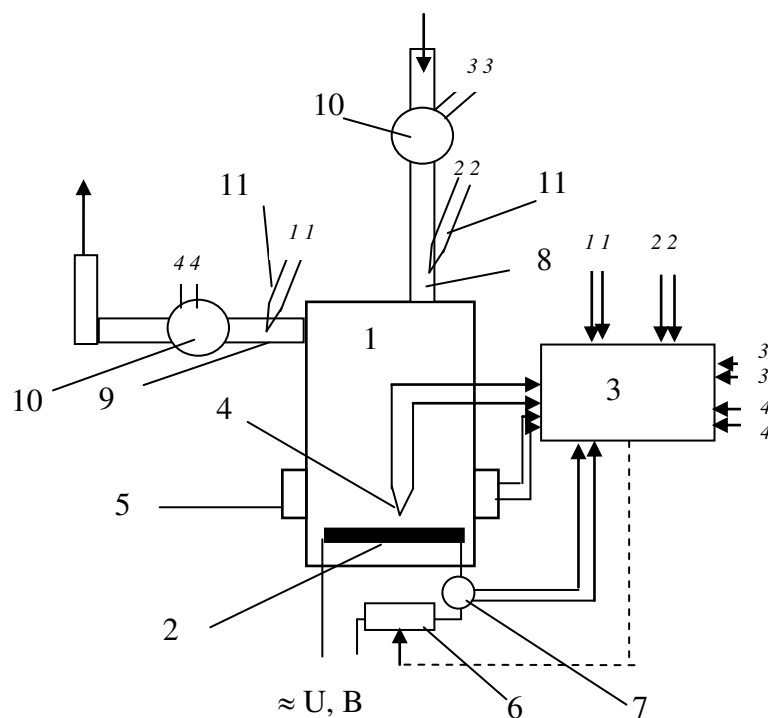


Рис. 1. Структурная схема системы диагностики тепловой работы реактора УНМ (1 – реактор; 2 – электрический нагреватель; 3 – контроллер; 4 – термopара в реакционной зоне; 5 – датчики диэлектрической проницаемости реакционного пространства; 6 – реостат, для управления тепловой мощностью, выделяемой на нагревателе реактора; 7 – прибор для замера мощности, потребляемой нагревателем; 8 – патрубок подвода углеводорода; 9 – патрубок отвода газообразных продуктов; 10 – расходомеры; 11-11 – термopары; 1-1, 2-2, 3-3, 4-4, 5-5 – сигналы от соответствующих чувствительных элементов)

Изложение основных материалов исследования и результатов

Согласно работе [4] моментальный тепловой баланс работы реактора составляется на основании сигналов датчиков при помощи следующего набора зависимостей.

Приходная часть

1. Теплота с исходным углеводородом $Q_{\text{пр}}^{\text{исх угл}}$, Вт:

$$Q_{\text{пр}}^{\text{исх угл}} = V^{\text{исх угл}} \cdot c(t^{\text{исх угл}}) \cdot t^{\text{исх угл}}. \quad (1)$$

2. Теплота от нагревателя:

$Q_{\text{пр}}^{\text{эл нагр}}$ – моментальная мощность источника тепла, Вт.

Расходная часть

1. Теплота с уходящими газообразными продуктами, Вт:

$$Q_{\text{расх}}^{\text{газпрод}} = V^{\text{газпрод}} \cdot c(t^{\text{газпрод}}) \cdot t^{\text{газпрод}}. \quad (2)$$

2. Тепловые потери реактора:

$Q_{\text{расх}}^{\text{потрреак}}$ – моментальные тепловые потери реактора, Вт.

3. Покрытие эндотермического эффекта реакций:

$Q_{\text{расх}}^{\text{энд}}$ – тепловой поток, расходуемый на покрытие эндотермического теплового эффекта реакций пиролиза углеводородов, Вт.

Уравновешивание моментального теплового баланса производится путем определения величины $Q_{\text{расх}}^{\text{энд}}$:

$$Q_{\text{расх}}^{\text{энд}} = Q_{\text{пр}}^{\text{исх угл}} + Q_{\text{пр}}^{\text{элнагр}} - Q_{\text{расх}}^{\text{газпрод}} - Q_{\text{расх}}^{\text{потрреак}}. \quad (3)$$

Изменение величины расхода тепла на покрытие эндотермического эффекта реакций во времени $Q_{\text{расх}}^{\text{энд}}(\tau)$ позволяет судить об истощении реакционной способности катализатора.

Величина $Q_{\text{расх}}^{\text{потрреак}}$ определяется при помощи расчетной модели с учетом геометрических и теплофизических характеристик ограждения реакторов и замеряемого значения температуры в реакционной зоне. Вторым вариантом определения этой величины может служить обработка сигналов термопар, заделанных в стенках реактора, позволяющих идентифицировать величины потоков теплопотерь.

Основным компонентом газовой смеси, покидающей реактор, является водород, остальные компоненты представлены недоразложенными углеводородами, в случае добавления в исходную газовую смесь инертных газов последние полностью уходят с газовым потоком, покидающим реактор. Для значительной части существующих реакторов стационарный газоанализатор для изучения состава газообразной среды, покидающей реактор, не установлен. В данной работе создан алгоритм, позволяющий определять величину теплового потока для реакторов, не имеющих в составе КИП стационарного газоанализатора, в которых пиролитическое разложение исходного углеводорода протекает по следующей схеме:



и при этом не образуются никакие другие продукты.

Сущность алгоритма заключается в сопоставлении расходов исходного и покидающего реактор газов.

В общем случае, полагая, что каталитическому разложению подвергается только часть углеводорода, а остальная в своем начальном состоянии переходит в конечный состав газов, покидающих установку, имеем:

– для случая подачи чистого углеводорода конечный газ характеризуется наличием двух компонентов (исходного углеводорода и водорода) и имеет следующий процентный состав:

$$\%C_mH_{2n} = \frac{1-\chi}{1+\chi \cdot (n-1)} \cdot 100; \quad \%H_2 = \frac{\chi \cdot n}{1+\chi \cdot (n-1)} \cdot 100;$$

– для случая использования в качестве начального сырья смеси исходного углеводорода и инертного газа в составе конечного газа имеем исходный углеводород, инертный газ и водород при следующем процентном соотношении:

$$\%C_mH_{2n} = \frac{(1-\chi) \cdot (1-\gamma)}{(1+\chi \cdot (n-1)) \cdot (1-\gamma) + \gamma} \cdot 100; \quad \%H_2 = \frac{\chi \cdot n \cdot (1-\gamma)}{(1+\chi \cdot (n-1)) \cdot (1-\gamma) + \gamma} \cdot 100;$$

$$\%I = \frac{\gamma}{(1+\chi \cdot (n-1)) \cdot (1-\gamma) + \gamma} \cdot 100.$$

Доля прореагировавшего углеводорода определяется как:

$$\chi = \frac{V_k - V_n}{(n-1) \cdot V_n}.$$

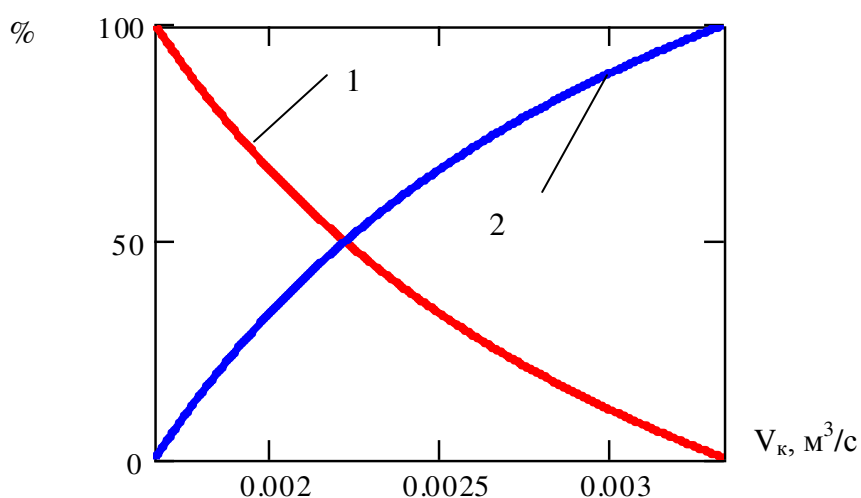


Рис. 2. Процентное содержание компонентов в газовой смеси, покидающей реактор синтеза УНТ, в зависимости от ее расхода для случая отсутствия инертного газа (1 – исходный углеводород, 2 – водород)

Использование предложенных зависимостей представлено на рис. 2 и рис. 3. Для обоих рассмотренных случаев расход исходного потока газов установлен на уровне 100 л/мин ($1.67 \cdot 10^{-3}$ м³/с). В первом случае рассматривается пиролитическое разложение метана при отсутствии инертного газа, на рис. 2 соответственно презентуется изменение долей метана и водорода в зависимости от расхода газа, покидающего реактор. Для рассматриваемого примера предельное значение расхода уходящих газов численно равно

удвоенному расходу исходного углеводорода, что соответствует случаю полного каталитического разложения метана. Необходимым условием правильности полученных данных является выполнение условия равенства суммы долей компонентов смеси ста процентам при любом значении расхода уходящих газов в диапазоне от V_n до $2 \cdot V_n$.

На рис.3 продемонстрировано использование разработанных зависимостей для случая разбавления исходного углеводорода (метана) инертным газом, например, азотом или аргоном.

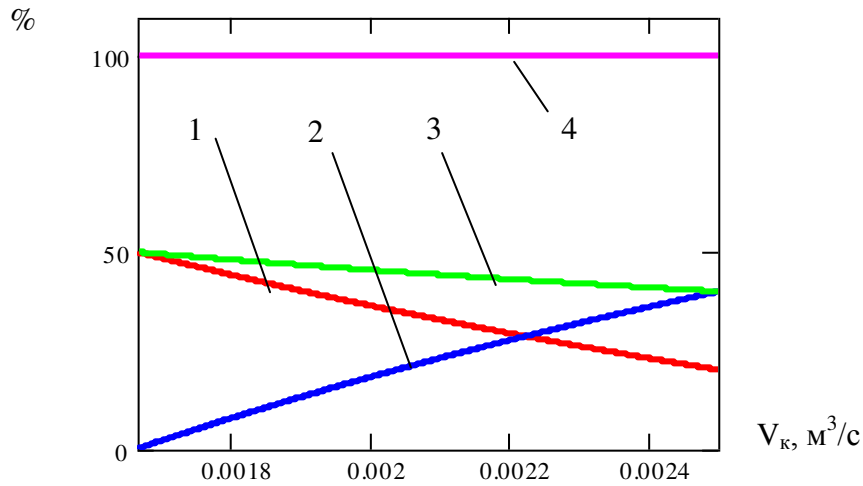


Рис. 3. Процентное содержание компонентов в газовой смеси, покидающей реактор синтеза УНТ, в зависимости от ее расхода для случая использования инертного газа (1 – исходный углеводород, 2 – водород, 3 – инертный газ, 4 – линия проверки правильности определения содержания компонентов)

В рассмотренном примере исходная доля инертного газа составляет 50%. Возможные значения расхода уходящих газов изменяются в пределах от V_n до $1.5 V_n$. Левая граница этого диапазона соответствует полному отсутствию каталитического разложения углеводорода, правая – полному разложению исходного углеводорода (метана).

Получение информации о составе газов, покидающих реактор, позволяет определять значение теплоемкости уходящих газов $c(t^{\text{газпрод}})$:

$$c(t^{\text{газпрод}}) = 0.01 \cdot (c_{\text{C}_m\text{H}_{2n}}(t^{\text{газпрод}}) \cdot \%C_m\text{H}_{2n} + c_{\text{H}_2}(t^{\text{газпрод}}) \cdot \%H_2 + c_{\Gamma}(t^{\text{газпрод}}) \cdot \% \Gamma),$$

где $c_{\text{C}_m\text{H}_{2n}}(t^{\text{газпрод}})$, $c_{\text{H}_2}(t^{\text{газпрод}})$, $c_{\Gamma}(t^{\text{газпрод}})$ – теплоемкости компонентов газовой смеси, покидающих реактор, взятые при соответствующей температуре.

Для автоматической работы предлагаемой системы диагностики необходимо наличие библиотеки зависимостей теплоемкостей газовых компонентов от температуры,

для газов, которые могут присутствовать во входящем и выходящем газовых потоках. Такие зависимости могут быть либо найдены в справочной литературе в функциональном виде, готовом к использованию, либо в табличном виде [5].

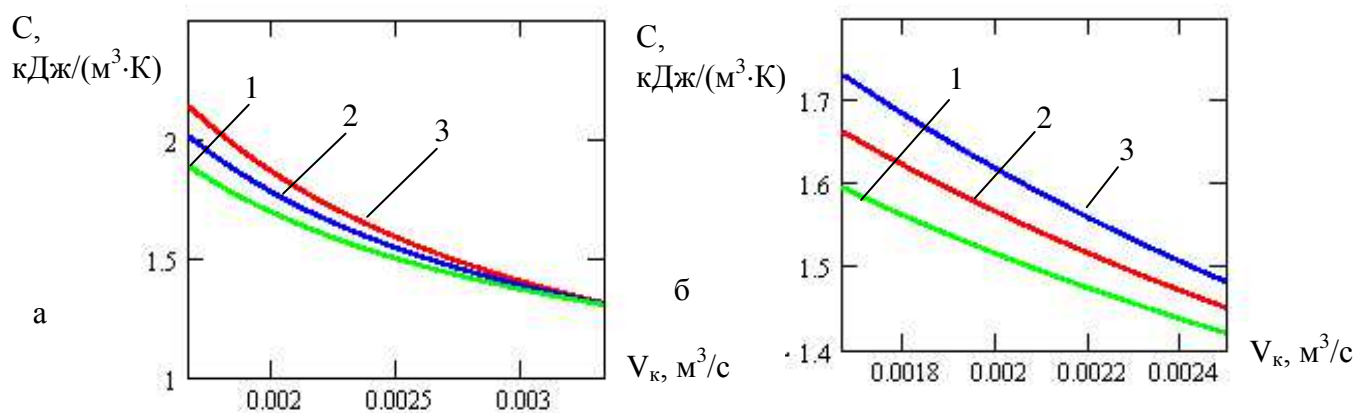


Рис. 4. Зависимость удельной теплоемкости газового потока, покидающего реактор, от расхода уходящих газов для разных значений температуры уходящих газов (а – случай без использования инертного газа, б – с использованием инертного газа; 1 – температура уходящих газов 300°C, 2 – 400°C, 3 – 500°C)

Использование современных вычислительных пакетов типа MathCAD позволяет сравнительно просто получить функциональные зависимости на основании обработки табличных данных. Пример решения этой задачи для случаев без использования инертного газа и с его использованием для исходных данных, задействованных в приведенных выше примерах, представлен на рис. 4.

Выводы

Разработаны подходы для работы экспертной системы, нацеленной на управление тепловой работой реакторов каталитического синтеза УНМ, в аппаратной части которой не используются стационарные газоанализаторы.

В основе предложенных решений лежит углубленная интерпретация информации о расходах газообразных сред на входе и выходе из реактора.

Литература

1. Раков Э.Г. Нанотрубки и фуллерены: Учебн. Пособие. – М.: Университетская книга, Логос, 2006.– 376 с.
2. Ткачев А.Г. Аппаратура и методы синтеза твердотельных наноструктур / А.Г. Ткачев, И.В. Золотухин. – М.: Машиностроение-1, 2007.– 316с.
3. Мищенко С.В. Углеродные наноматериалы. Производство, свойства, применение / С.В. Мищенко, А.Г. Ткачев.–М.: Машиностроение, 2008.–320 с.

4. Бирюков А.Б., Кравцов В.В., Новикова Е.В., Алехина Н.В. Системы диагностики тепловой работы лабораторных, полупромышленных и промышленных реакторов синтеза углеродных наноматериалов // Промышленная теплотехника .– Выпуск (3).– с. 75-80 (Новикова)
5. Казанцев Е.И. Промышленные печи: Справочное руководство для расчета и проектирования, 2-е издание дополненное и переработанное.– М.: Metallurgia, 1975.– 368 с.