

УДК 532.546.6

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ГИДРОДИНАМИКА В РАЗРАБОТКЕ КАТАЛИТИЧЕСКИХ РЕАКТОРОВ

© 2011 г. **О.П. Кленов,**
А.С. Носков

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, Новосибирск

Введение

Применение в химической технологии вычислительной гидродинамики (CFD-Computational Fluid Dynamics в англоязычной литературе) за последнее десятилетие превратилось из экзотических примеров (численное решение уравнений Навье—Стокса было доступно очень ограниченному числу научных центров) в распространенную практику крупных исследовательских и технологических центров, чему способствовали следующие факторы. Во-первых, стремительное развитие средств вычисления на уровнях как персонального компьютера, так и центров коллективного пользования позволяет создавать и реализовывать сложные программные алгоритмы, например, для решения трехмерных нелинейных уравнений Навье—Стокса гидродинамики течения. Во-вторых, на рынке появились коммерческие пакеты компьютерных программ с дружественным интерфейсом и on-line поддержкой фирм-производителей, позволяющие широкому кругу исследователей, не являющихся узкими специалистами в области математического моделирования и численных методов решения нелинейных дифференциальных уравнений, проводить комплексные расчеты химико-технологических процессов, в частности, детальной гидродинамической картины,

Цель настоящей работы — показать эффективность применения вычислительной гидродинамики при решении задач химической технологии. В первом ее разделе на основе анализа публикаций ведущего научного издательства «Elsevier Science»

дан краткий обзор динамики использования метода вычислительной гидродинамики в химической технологии, указаны основные коммерческие и свободные пакеты отечественных и зарубежных компьютерных программ по гидродинамике, их типовая структура. Во втором разделе приведены три примера решения методами вычислительной гидродинамики задач химической технологии, с которыми сталкивается Институт катализа в текущей деятельности.

Краткий обзор применения вычислительной гидродинамики в химической технологии

Анализ публикаций «Elsevier Science» показывает, что за последнее десятилетие доля статей, в которых используются результаты, полученные методом CFD, от общего числа публикаций по химической технологии (Chemical Engineering) имеет устойчивую тенденцию роста с 1,7 % в 1993 г. до 5,8 % в 2010 г.

На рис. 1 показано общее число публикаций в области химической технологии и доля публикаций по вычислительной гидродинамике издательства «Elsevier Science» за 1992—2010 гг. (представленные данные получены по результатам поиска на портале издательства «ScienceDirect» (<http://www.sciencedirect.com>)).

На рис. 2 представлено распределение числа публикаций, связанных с CFD, по областям интересов и объектам исследования, очень условное, так как подмножества, на которые можно разделить весь объем публикаций, существенно пересекаются. Значительная доля публикаций описывает, например, комплексные исследования, как гидродинамической

Кленов О.П. – канд. тех. наук, ст. науч. сотрудник лаборатории нестационарных каталитических методов очистки газов. Тел.: 330-62-78. E-mail: klen@catalysis.ru.

Носков А.С. – докт. хим. наук, зав. лабораторией нестационарных каталитических методов очистки газов, зам. директора по научной работе. Тел.: 330-68-78. E-mail: noskov@catalysis.ru.

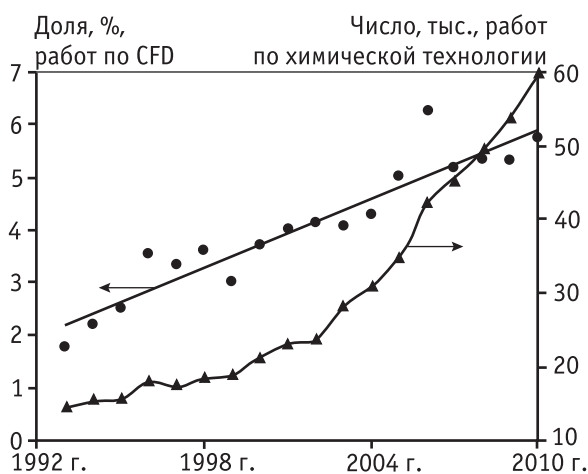


Рис. 1. Число публикаций издательства «Elsevier» в области химической технологии (Chemical Engineering) и вычислительной гидродинамики (CFD) за 1992–2010 гг.



Рис. 2. Распределение публикаций по вычислительной гидродинамике по тематике и объектам исследования

картины течения, так и тепло-, массопереноса в приложении к аппаратам разного типа. Тем не менее, такого рода распределение дает определенную информацию о направлениях работ с применением CFD.

Наибольшее число работ по CFD относится к исследованию гидродинамической картины течения: полей давления, скорости и турбулентности в аппаратах химической технологии (35 %). Это связано, по-видимому, с тем, что получение информации о детальной трехмерной картине течения в химических аппаратах долгое время было достаточно трудоемко и дорого. Использование CFD позволяет с большой степенью достоверности восполнить дефицит информации в этой области. Большая доля (21 %) связана с развитием и совершенствованием методов CFD применительно к химическим технологиям, что свидетельствует о востребованности метода и росте его популярности как инструмента исследования.

Значительная (более 28 %) доля публикаций посвящена изучению процессов тепло- и массопереноса в химико-технологических процессах и аппаратах, что в очередной раз подчеркивает важность такого рода информации для разработки и создания аппаратов химической технологии.

Основная часть числа публикаций связана в той или иной мере с процессами в неподвижных зернистых слоях, поэтому точную долю работ по процессам в неподвижном зернистом слое установить достаточно трудно. На этом общем фоне проще выделить публикации, связанные с другими объектами химической технологии: доля целевых работ по топливным элементам 7 %, по многофазным реакторам с механическим перемешиванием (slurry reactors) 5 % и по аппаратам с кипящим слоем 4 %.

Пакеты программ вычислительной гидродинамики. Появление коммерческих и свободно доступных пакетов CFD программ — одна из основных причин широкого распространения этого метода в химической технологии. К настоящему времени лист пакетов CFD, в той или иной мере протестированных и принятых к использованию потребителями, насчитывает более 80 позиций (данные из сайта <http://www.cfd-online.com>).

Из зарубежных пакетов CFD известность на российском рынке получили (в алфавитном порядке) ANSYS-Fluent, CFdesign (Blue Ridge Numerics, Inc.), CFX (AEA Technology Engineering Software), FLOW-3D (Flow Science, Inc.), Passage (Technalysis, Inc), STAR (CD-adapco), и т.д. Известны также российские разработки, например, Gas Dynamics Tool и COMGA.

Большинство коммерческих CFD пакетов имеют структуру «три в одном», состоящую из трех основных блоков:

- 1) упрощенный САПР — система трехмерного проектирования модели исследуемого физического объекта;
- 2) генератор расчетных объемов (сеток), на которые разбивается модель физического объекта;
- 3) вычислительный процессор, в котором реализуется алгоритм численного решения уравнений Навье—Стокса, а также анализируются и визуализируются результаты.

Ряд разработчиков пакетов CFD предлагает дополнительные возможности интегрирования программ CFD с пакетами компьютерных программ расчета термических и механических напряжений в исследуемых физических объектах. Кроме того, возможна интеграция некоторых пакетов CFD с ком-

пьютерными программами исследования сложных химических реакций (например, CHEMKIN).

Примеры применения вычислительной гидродинамики

В Институте катализа СО РАН исследования с применением CFD были начаты в 2001 г. с появлением лицензированного пакета CFD программ Fluent 6.12 [1]. Это существенно упростило оптимизацию процессов смешения и распределения реакционных потоков и исследования процессов тепло-, массопереноса, которые возникали в ходе разработки новых каталитических процессов и их аппаратного оформления, а также в оценке возможностей действующих каталитических реакторов при модификации каталитических систем. Ранее такого рода исследования проводились на модельных экспериментальных стендах с использованием достаточно сложных методик измерения (термоанемометрия, радиоизотопные метки и т.п.).

В настоящей статье приводятся примеры применения вычислительной гидродинамики в трех разных областях химической технологии: классическая задача аэродинамики — падение частиц катализатора сложной формы в потоке воздуха, распределение и теплообмен потока вязкой жидкости в реакторной колонне, расчет переходных режимов в каталитических блоках сотовой структуры с учетом аэродинамических особенностей и хода каталитической реакции.

Решение аэродинамических задач в химической технологии. Верификация результатов сравнением с экспериментом. Процесс первичного риформинга в производствах метанола и аммиака проводят в трубчатых реакторах с трубами диаметром 76—110 мм и высотой более 12,0 м. Катализатор, применяемый в этом процессе, имеет достаточно сложную геометрическую форму. Как правило, это цилиндрические частицы с плоскими или выпуклыми торцами и несколькими сквозными отверстиями, число которых варьируется у разных производителей от четырех до семи. Кроме того, на цилиндрической поверхности частиц могут быть расположены продольные канавки.

При разработке перспективного метода плотной и однородной загрузки частиц катализатора в трубы трубчатого реактора первичного риформинга [2, 3] потребовалось определение величины аэродинамического сопротивления таких частиц катализатора.

Точные величины аэродинамического сопротивления были необходимы для определения скорости свободного падения частицы в вертикальной трубе при ее торможении встречным потоком воздуха и выбора оптимальной скорости встречного потока.

Модель участка трубы с падающей частицей показана на рис. 3. Частица катализатора свободно падает со скоростью v в трубе диаметром d_0 под влиянием силы тяжести. Частица тормозится встречным потоком воздуха, имеющим скорость w .

Численное решение трехмерных уравнений Навье–Стокса с помощью вычислительной гидродинамики позволяет определить поля скорости и давления вокруг и на поверхности частицы. Расчеты были проведены для разных скоростей потока $w_0 = (v - w)$ — от 1,0 до 30,0 м/с, углов атаки (между главной осью частицы и направлением потока тормозящего воздуха) $\alpha = 0, 45$ и 90 град, и размеров частицы. Диапазон чисел Рейнольдса, определенных по диаметру частицы и скорости набегающего потока воздуха: $10^3 < Re_\infty < 10^5$ соответствует турбулентному режиму обтекания частицы. В расчетах использовалась $k-\epsilon$ модель турбулентности.

Поле скорости потока воздуха в вертикальном сечении трубы (плоскость $Z = 0$) показано на рис. 4. Распределение статического давления на поверхности падающей частицы показано на рис. 5. По



Рис. 3. Свободное падение частиц катализатора ($g = 9,8 \text{ м/с}^2$) при загрузке труб трубчатого реактора. Диаметр трубы $d_0 = 96 \text{ мм}$. Исследованный диапазон скорости $1,0 \leq w_0 \leq 30,0 \text{ м/с}$, $w_0 = (v - w)$. Угол атаки частицы $\alpha = 0, 45$ и 90 град. Среда – воздух при нормальных условиях. Диаметр частиц $d = 13,3$ и $16,3 \text{ мм}$, длина $l = 17,0$ и $20,1 \text{ мм}$

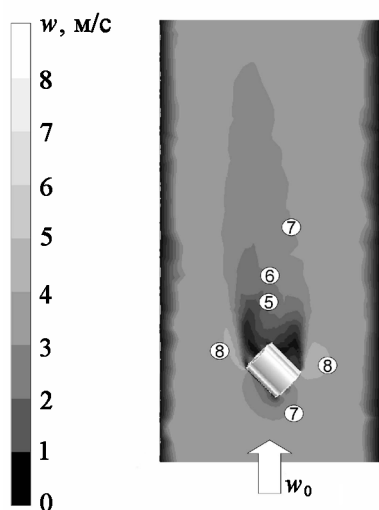


Рис. 4. Поле скорости потока в вертикальном сечении трубы при обтекании падающей частицы катализатора. Скорости, м/с, соответствуют шкале, а также указаны на линиях равной скорости. $w_0 = 7,5$ м/с; $\alpha = 45$ град. Размеры частицы: $d = 16,3$ мм, $l = 20,1$ мм, диаметры 4-х отверстий 4,3 мм

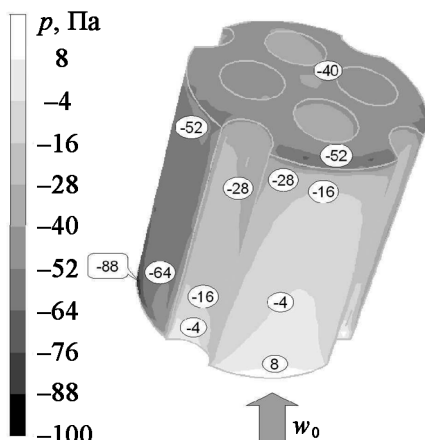


Рис. 5. Распределение статического давления p на поверхности падающей частицы. Давления, Па, указаны на изобарах. Слева – шкала давлений. $w_0 = 7,5$ м/с; $\alpha = 45$ град. Размеры частицы: $d = 16,3$ мм, $l = 20,1$ мм, диаметры 4-х отверстий 4,3 мм

распределению давления на поверхности частицы определялась сила торможения:

$$\vec{F}_p = - \int_A p(A) \vec{n} dA = - \sum_{i=1}^k p_i A_i \vec{n}_i,$$

где dA — участок поверхности частицы, $\vec{n}$ — единичный вектор, нормальный к участку dA , p — статическое давление потока на участке dA .

Сила сопротивления была измерена на аэродинамическом стенде (рис. 6), где воспроизводились

условия загрузки катализатора в вертикальной трубе диаметром 96 мм. Частица катализатора размещалась неподвижно в трубе на жесткой державке, соединенной с прецизионными электронными весами «Sartorius». Замеры массы частицы были выполнены с погрешностью 1 мг, что соответствует погрешности 10 мН замера силы сопротивления. В разных экспериментах частица закреплялась на насадке под углами атаки 0, 45 и 90 град, обдувалась снизу потоком воздуха с известными характеристиками. Скорость потока варьировалась от 3,0 до 12,6 м/с.

Силу сопротивления воздуха определяли из показаний весов F и веса частицы в неподвижной среде F_0 :

$$F_p = F_0 - F.$$

Сравнение экспериментальных данных по замерам силы сопротивления F_p и расчетных данных, полученных посредством вычислительной гидродинамики, показано на рис. 7, где представлены графики зависимости силы сопротивления F_p от скорости потока воздуха для двух частиц катализатора, отличающихся размером и углом атаки. Результаты расчетов с применением CFD (кривые) и экспериментальные данные (точки) хорошо совпадают.

Сравнение классических зависимостей коэффициента аэродинамического сопротивления C_w от числа Рейнольдса для шара и цилиндра [4, 5] с результатами, полученными авторами, показано на рис. 8, где $C_w = 2F_p / (\rho w_0^2 S_0)$, $Re = \rho w_0 d / \mu$. F_p — сила сопротивления, d — диаметр шара и цилиндра, S_0 — сечение Миделя — площадь проекции частицы на сечение, нормальное к вектору скорости потока плотностью ρ и вязкостью μ .

Исследованный авторами диапазон Re от 10^3 до 10^5 соответствует турбулентному режиму обтекания шара и сплошного цилиндра, при котором с увеличением Re резко расширяется область отрыва потока на поверхности частицы и интенсифицируется вихревой след, что приводит к увеличению коэффициента сопротивления и появлению локального минимума на кривых $C_w = f(Re)$ [5].

Картина обтекания частиц катализатора с несколькими отверстиями существенно отличается от известных данных для шара и сплошного цилиндра. В области $Re < 4 \cdot 10^3$ полученные результаты аналогичны известным данным для обтекания сплошного цилиндра. Однако с увеличением Re резкого изменения коэффициента сопротивления не происходит. Как показывают полученные авторами данные вычислительной гидродинамики и

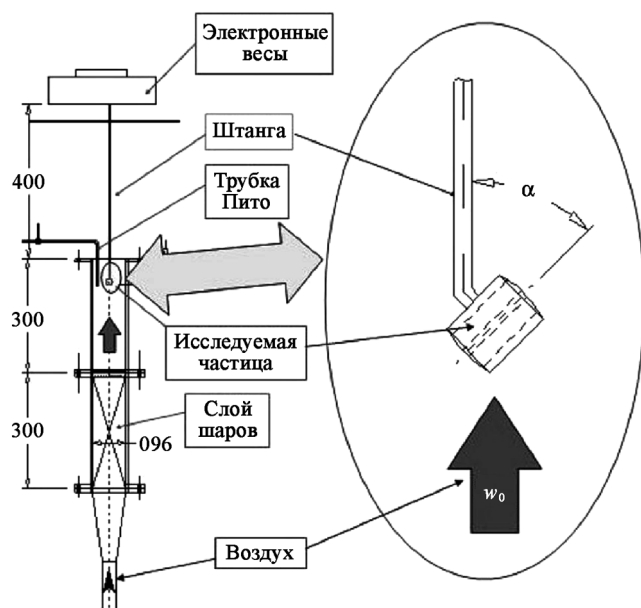


Рис. 6. Схема экспериментального стенда для определения коэффициентов сопротивления частицы катализатора во встречном потоке воздуха, размещенной на металлической державке с углом атаки α к потоку воздуха

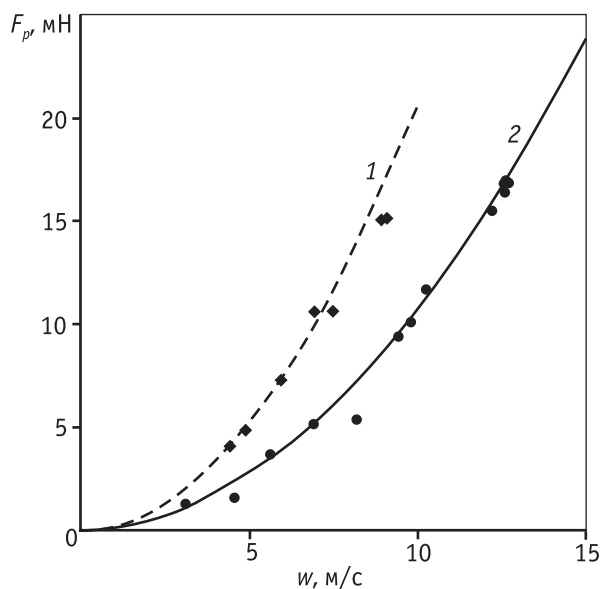


Рис. 7. Сравнение экспериментальных (точки) и расчетных (кривые) данных зависимости $F_p(w)$ для двух частиц катализатора: 1 – $d = 16,3$ мм, $l = 20,1$ мм, диаметры 4-х отверстий 4,3 мм, $\alpha = 45$ град; 2 – $d = 13,3$ мм, $l = 17,0$ мм, диаметры 4-х отверстий 3,4 мм, $\alpha = 90$ град

экспериментальные результаты, зависимость $C_w = f(Re)$ для частиц катализатора в области Re от 10^3 до $4 \cdot 10^5$ имеет плавный характер без каких-либо экстремумов, что связано со сквозными отверстия-

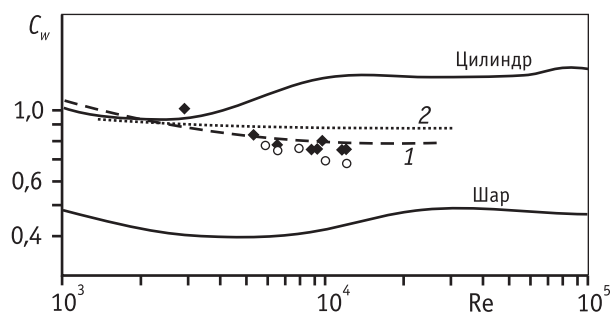


Рис. 8. Сравнение зависимости коэффициента аэродинамического сопротивления C_w от числа Рейнольдса для исследованных частиц катализатора (кривые 1 и 2) и классических результатов для обтекания шара и цилиндра [4, 5]. Кривая 1 соответствует частице катализатора диаметром 16,3 мм, длиной 20,1 мм, с четырьмя отверстиями диаметром 4,3 мм и углом атаки 45 град, кривая 2 – частице с $d = 13,3$ мм, $l = 17,0$ мм, четырьмя отверстиями диаметром 3,4 мм и $\alpha = 90$ град

ми в частице и перетоком газа через них, приводящими к частичному разрушению погранслоя на частице, уменьшению размеров турбулентного следа и снижению в нем интенсивности турбулентности.

Хорошее совпадение представленных результатов с применением CFD и данных эксперимента свидетельствуют о надежности метода вычислительной гидродинамики как для получения прикладных результатов, используемых в технологических целях, так и для изучения гидродинамической картины течения в целом.

Данные, полученные с помощью вычислительной гидродинамики, послужили основой для определения оптимальных технологических параметров загрузки частиц катализатора в трубчатый реактор.

Анализ работы существующих реакторов. Исследование распределения потока во входной области реактора гидрирования. Один из путей развития химической промышленности — «эволюционный», с заменой каталитических систем в действующих реакторах. Для достижения успеха необходима комплексная оценка работы реактора в новых условиях, так как зачастую новый катализатор имеет, например, существенно меньшее гидравлическое сопротивление, что изменяет распределение реакционного потока в слое катализатора, а повышение активности катализатора приводит к изменению картины тепло-, массопереноса.

Создание нового катализатора гидрирования растительных масел, отличающегося гидродинамическим сопротивлением, и его внедрение в производство потребовало оценки гидродинамической

картины течения в действующем реакторе гидрирования. Входная область реактора показана на рис. 9.

Реакционная смесь поступает через боковой ввод в нижней части реактора, проходит через спиралевидные ряды труб нагревателя в центральную часть реактора и поднимается вверх, фильтруясь через неподвижный слой катализатора.

Параметры реактора и реакционного потока:

Диаметр реактора, м	1,0
Диаметр нагревательных труб, м	0,04
Расход смеси, м ³ /ч	0,3—1,4
Температура смеси на входе, °С	80
Температура нагревательных труб, °С	200
Плотность смеси, г/см ³	0,916
Теплоемкость смеси, Дж/(кг·К)	1845
Теплопроводность смеси, Вт/(м·К)	0,145
Re (по входным параметрам смеси)	104—518

Вязкость, кг/(м·с), масла в исследованном диапазоне температур интерполировалась степенной функцией: $\mu = AT^B$, где $A = 1,34 \cdot 10^{10}$, $B = -4,72$, T — температура масла, К. При расчетах использовалась модель ламинарного течения.

Применение метода компьютерной гидродинамики позволяет получить подробную визуальную информацию о детальной картине течения потока в исследуемом аппарате. Распределение линий тока в реакторе показано на рис. 10, в левой части которого показаны нагревательные трубы, в правой — для большей наглядности распределения потока в осевой части реактора — трубы не показаны. Видно, что

трубы нагревателя делят входной поток на две части. Часть потока не проходит через трубы и распределяется в кольцевом пространстве между стенкой реактора и трубами. Вторая часть потока проходит в центр реактора и разделяется на два потока: один формирует вихревое течение в районе днища реактора, другой поступает наверх в слой катализатора.

Направление движения потока, показанное стрелками-векторами скорости, и распределение температуры в вертикальном сечении реактора, проходящем через входной патрубок, приведены, соответственно, на рис. 11, а, б. На рис. 12 показано распределение температуры на входе в слой катализатора.

Согласно приведенным результатам, течение потока в реакторе, сформированное боковым подводом потока и внутренним теплообменником, вызывает значительные неравномерности температуры потока на входе в слой катализатора, что свидетельствует о неудачном выборе конструкции нагревателя и может оказать негативное влияние на эффективность работы реактора и технико-экономические показатели процесса в целом при замене катализатора.

Как видно из приведенного примера, визуализация потока позволяет получить достаточно полное представление о детальной структуре потока, объяснить распределение температуры в реакторе и оценить эффективность работы нагревательного устройства и реактора в целом.

Варьируя входные условия, например, расход потока, можно исследовать чувствительность распределения потока во входном участке реактора. На рис. 13 показаны графики распределения температуры



Рис. 9. Нижняя часть реактора гидрирования растительных масел

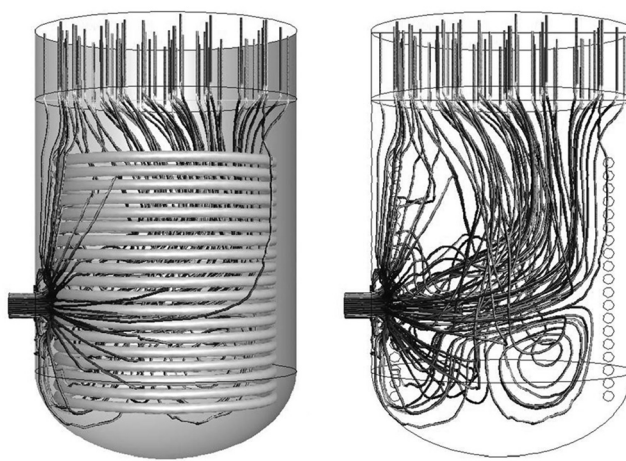


Рис. 10. Течение потока (линии тока) в реакторе. Расход смеси 0,6 м³/ч

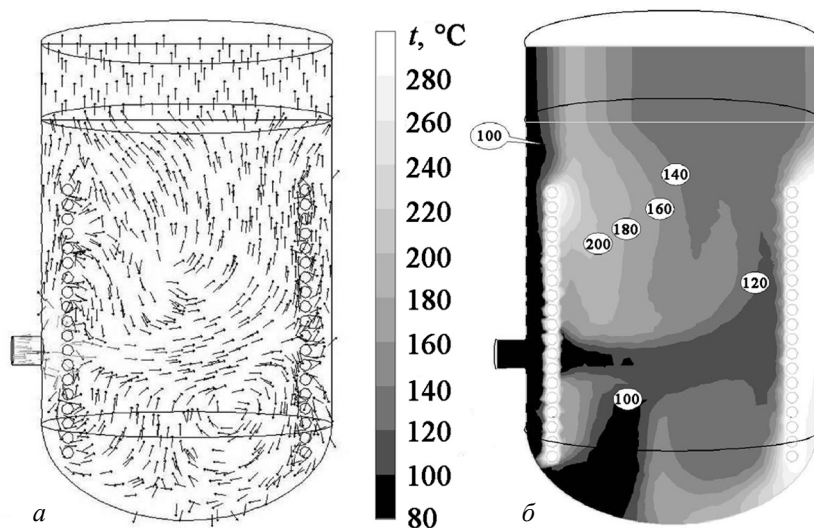


Рис. 11. Направление движения потока при расходе смеси $Q = 0,6 \text{ м}^3/\text{ч}$ (а) и распределение температуры, $^{\circ}\text{C}$, (б) в вертикальном сечении реактора

по диаметру реактора на входе в слой катализатора для трех значений Q — расхода потока. Видно, что увеличение расхода в исследованном диапазоне существенно уменьшает неравномерность распределения потока на входе в слой катализатора.

Исследование переходных процессов в каталитических системах с химической реакцией. Использование каталитических систем в ряде случаев сталкивается с необходимостью исследования быстрых переходных процессов, существенно зависящих от времени. Например, для эффективного применения автомобильных

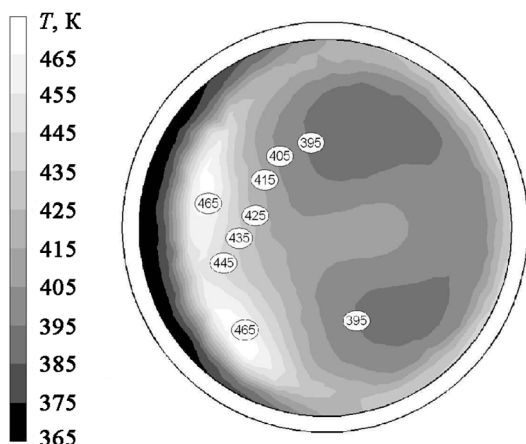


Рис. 12. Распределение температуры, К, потока на входе в слой катализатора

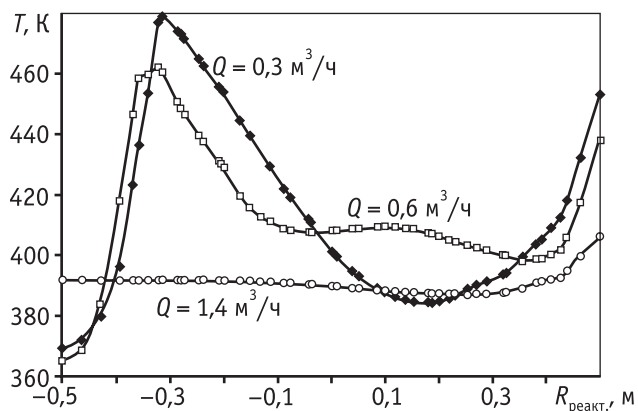


Рис. 13. Влияние Q — расхода потока на степень неоднородности последнего на входе в слой катализатора

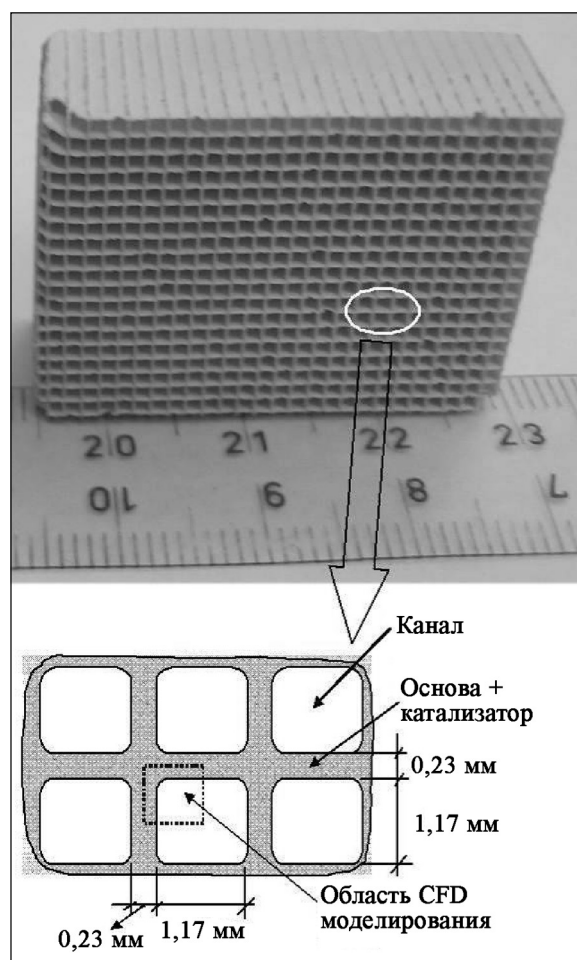


Рис. 14. Фрагмент катализатора автомобильного конвертора. Внизу — область поперечного сечения сотовой частицы, в которой проводились расчеты с использованием вычислительной гидродинамики

каталитических конверторов (дожигателей) необходимо знать процессы, происходящие в конверторе в момент пуска двигателя, когда выхлопы из двигателя подаются на холодный катализатор.

В автомобильных конверторах с целью снижения потерь мощности двигателя и минимизации гидравлического сопротивления катализатор выполнен в виде сотовой частицы с большим числом (60—155 на 1 см^2) сквозных параллельных каналов.

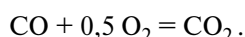
На рис. 14 показаны фрагмент сотовой частицы, основные размеры каналов, а также область, в которой велись расчеты с применением вычислительной гидродинамики. Выбор области как одной четвертой части одного канала обусловлен симметрией течения в каналах и процессов тепло-, массопереноса в стенках сотовой частицы.

Трехмерная модель области моделирования и ее основные размеры показаны на рис. 15. Модель состоит из свободного входного участка длиной 1,5 мм и фрагмента сотовой частицы длиной 7,0 мм. Стенка канала имеет двухслойную структуру, состоящую из основы — химически инертной перегородки сотовой частицы толщиной 75 мкм и нанесенного на основу каталитически активного 40-мкм слоя (катализатора). Поперечные размеры, мкм, канала модели: 585×585 .

Физико-химические свойства сотовой частицы и начальные параметры потока:

Удельная плотность катализатора и основы, г/см^3	1,32
Теплоемкость катализатора и основы, Дж/(кг·К)	1138
Теплопроводность катализатора и основы, Вт/(м·К)	0,35
Температура потока входная, $^{\circ}\text{C}$	300
Температура катализатора в начальный момент, $^{\circ}\text{C}$	27
Скорость потока на входе в модель, м/с	0,82
Концентрация СО на входе (ост. воздух), мас.%	0,7242
Re (по параметрам потока в канале)	28,3

В расчетах использовалась модельная одностадийная реакция глубокого окисления оксида углерода:



Скорость реакции описывалась уравнением первого порядка по концентрации СО:

$$r_{\text{CO}} = kC_{\text{CO}},$$

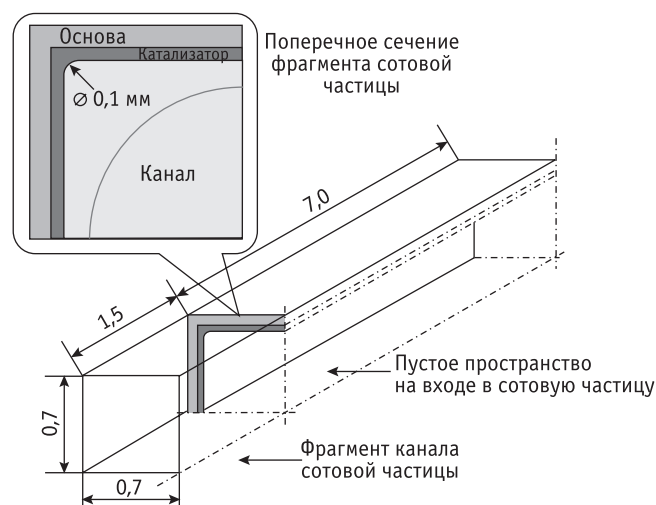


Рис. 15. Трехмерная модель фрагмента сотовой частицы, и ее основные размеры, мм

$$k = k_0 \exp[-E/(RT)],$$

где $k_0 = 7,0 \cdot 10^{14}$, $E = 1,17 \cdot 10^8$ Дж/(г·моль).

В модели реализуется ламинарный режим течения ($Re = 28,3$), поэтому при использовании программ CFD применялось классическое трехмерное уравнение Навье—Стокса.

Сценарий нестационарных расчетов: на холодный катализатор с $T_{\text{кат}} = 300\text{ К}$ подавалась смесь воздуха и оксида углерода с температурой 573 К. Входная концентрация СО составляла 0,72 мас.%. Исследовалась динамика изменения параметров катализатора и потока.

На рис. 16 показано распределение температуры по длине модели в моменты $\tau = 0,5; 3,5; 5,0$ и $10,0$ с. Для каждого момента представлены два графика: на левом показаны температуры на входном участке и в канале сотовой частицы, на правом — температуры на входном участке и в объеме катализатора. Температуры показаны на графиках точками, представляющими каждую расчетную ячейку соответствующей области (входного участка, канала частицы и катализатора). Общее количество точек на каждой паре графиков $N = 436659$ — число расчетных ячеек в модели фрагмента сотовой частицы. Из-за большого количества точек они сливаются на графике в одну полосу. По ширине полосы можно определить максимальную и минимальную температуры и, в целом, охарактеризовать неоднородность распределения температуры в поперечном сечении катализатора или канала вдоль оси сотовой частицы.

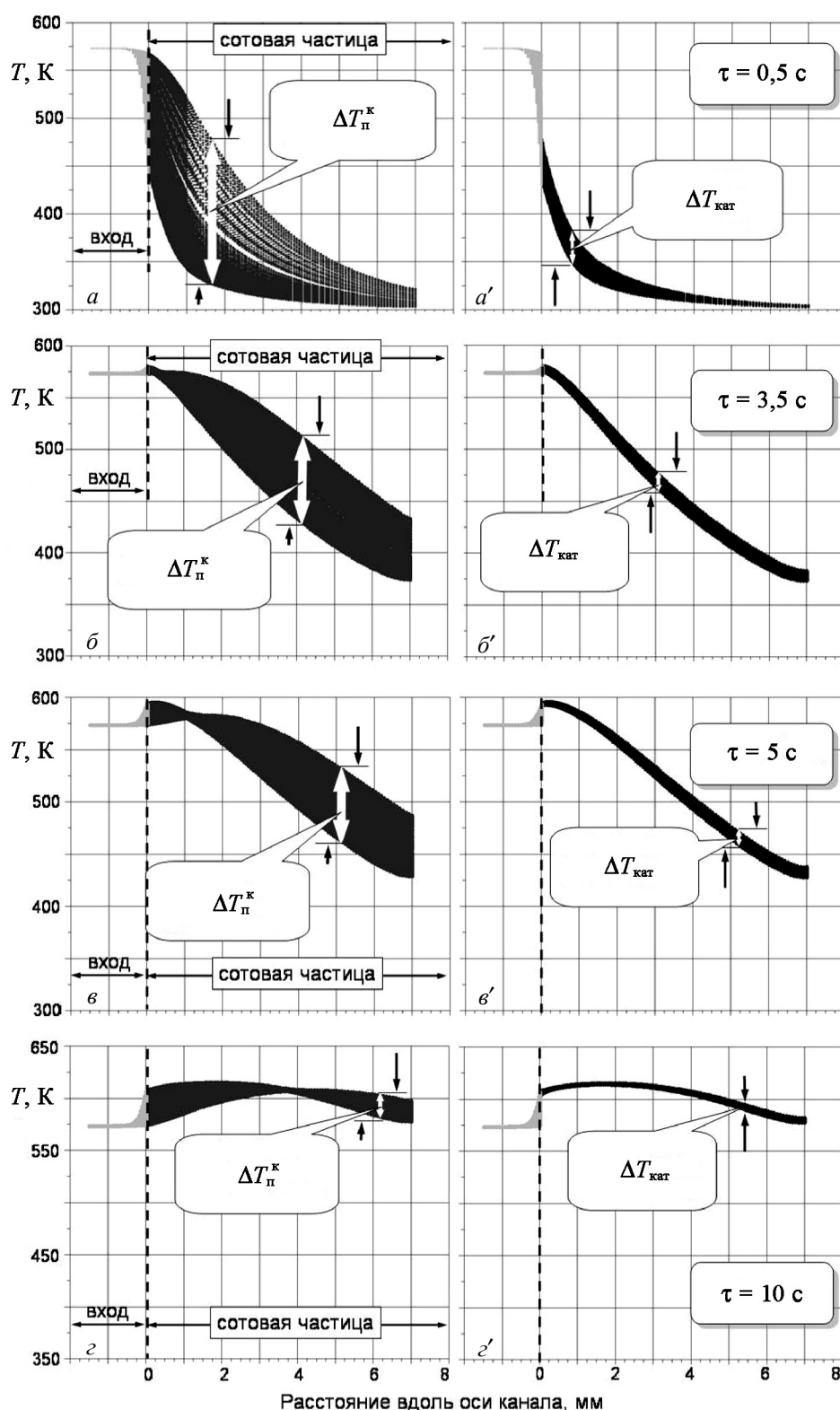


Рис. 16. Распределение температуры по длине модели в разные моменты времени τ . Слева – температура потока на входе и в канале сотовой частицы $\Delta T_{\text{п}}^{\text{к}}$ – разброс температуры потока в канале, справа – температура катализатора ($\Delta T_{\text{кат}}$ – разброс температуры катализатора)

В момент $\tau = 0,5$ с (см. рис. 16, a') температура лобовой части катализатора прогревается до $T_{\text{max}} \approx 450$ К, а начальная температура выходного участка сотовой частицы $T_0 = 300$ К. Поток, движущийся по каналу сотовой частицы (см. рис. 16, a), имеет значительную неоднородность распределения температуры в поперечном сечении, достигающую $\Delta T \approx 190$ К и характеризующую разброс температуры между «горячим» ядром потока на оси канала и погранслоем на «холодной» стенке катализатора.

В момент $\tau = 3,5$ с лобовая часть катализатора прогревается до входной температуры $T_0 = 573$ К, и с этого момента активную роль начинает играть химическая реакция.

На графиках для момента $\tau = 5,0$ с видно, что за счет тепловыделения каталитической реакции окисления оксида углерода температура в начальном участке катализатора длиной $l \approx 1,5$ мм превысила входную температуру $T_0 = 573$ К, и в лобовой части катализатора она равна ~ 600 К. В целом катализатор равномерно не прогреет, и температура плавно меняется по длине частицы от 600 К в начале частицы при $x = 0$ до 430 К на выходе при $x = 7$ мм. Температура потока в начальном участке катализатора длиной $l \approx 1,5$ мм имеет в поперечном сечении разброс от входной температуры ($T_0 =$

573 К) до максимума, равного температуре на стенке катализатора $T_{\max} \approx 600$ К.

Нижние два графика рис. 16 представляют распределение температуры в момент $\tau = 10$ с, к которому температура катализатора и потока в канале сотовой частицы превысила входную температуру 573 К. Во всем объеме катализатора идет реакция окисления СО с выделением тепла, которое разогревает катализатор и поток в канале. Максимальная температура в катализаторе сместилась из лобовой области частицы по ходу потока на расстояние $l \approx 2,0$ мм, $T_{\max} \approx 615$ К.

Как видно из графиков рис. 16, сотовая частица разогревается неравномерно во времени и по объему катализатора. На рис. 17, а приведена зависимость от времени максимальной и минимальной температур в объеме катализатора. Разница между максимальной и минимальной температурами $\Delta T_{\text{кат}}$ достигает значительных величин, и для исследованного режима превышает 200 К при $0,6 \leq \tau \leq 4,0$ с. Неравномерный разогрев и пространственные градиенты температуры могут отрицательно влиять на прочностные свойства катализатора. Это определяет достаточно жесткие требования к прочностным характеристикам катализаторов, применяемых в автомобильных конверторах.

Стартовый период ($\tau \leq 10$ с) характеризуется переходными процессами в катализаторе, когда его работа может не обеспечить требуемых показателей конверсии оксида углерода. На рис. 17, б представлено изменение во времени степени превращения оксида углерода для исследованных условий. Конверсия СО, близкая к величине ее при $\tau \rightarrow \infty$, равной 86,94 %, достигается после того, как конвертор проработал не менее 10 с.

Этот пример показывает, что применение вычислительной гидродинамики в сочетании с химической кинетикой позволяет анализировать быстроидущие переходные процессы в реальных каталитических системах. Актуальность таких работ обусловлена необходимостью широкого внедрения автомобильных конверторов.

Заключение

Вычислительная гидродинамика (CFD) становится эффективным методом исследования разных процессов, связанных с тепло-, массопереносом и химическими превращениями. Развитие технологии CFD позволяет значительно сократить

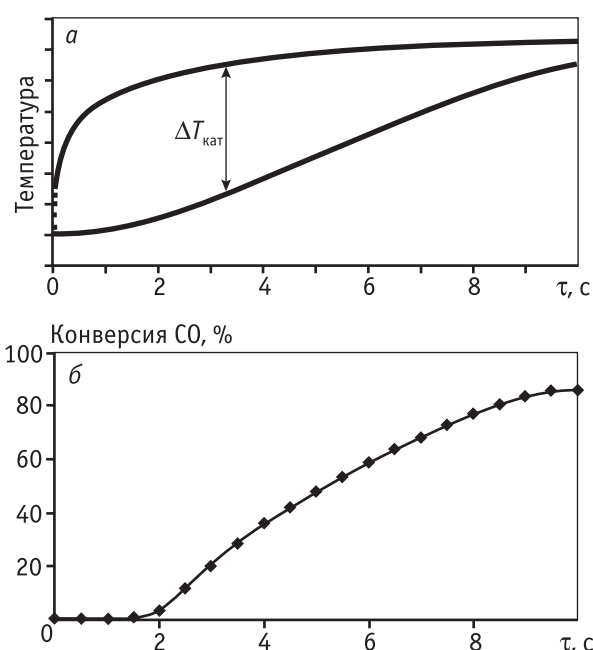


Рис. 17. Изменения во времени: а – максимальной и минимальной температуры в объеме катализатора, б – конверсии оксида углерода (скорость потока на входе в модель – 0,82 м/с, концентрация СО на входе 0,7242 мас.%, ост. – воздух, температуры потока на входе 300 °С, катализатора 27 °С

временные и стоимостные затраты на разработку эффективных аппаратов для химической технологии.

Проведенные в Институте катализа СО РАН исследования продемонстрировали возможность применения метода к широкому классу задач:

- технологическая и экспертная оценка работы контактного аппарата при замене каталитической системы на более активную и энергетически выгодную;
- исследование быстроидущих переходных процессов в структурированных каталитических системах;
- разработка технологических устройств сопровождения, (например, загрузочных устройств для катализаторов сложной формы и т.д.).

Верификация результатов, полученных с применением вычислительной гидродинамики, была выполнена при определении аэродинамического сопротивления частиц катализатора первичного риформинга. Сравнение расчетных и экспериментальных результатов показало хорошее совпадение данных, что свидетельствует о применимости метода вычислительной гидродинамики для технических приложений.

Приведенные примеры использования метода вычислительной гидродинамики показывают, что полученные результаты нашли практическое применение в химической технологии. Данные по аэродинамическому сопротивлению частиц катализатора были использованы при создании и эксплуатации устройств для промышленной загрузки катализатора в трубчатые реакторы первичного риформинга в производстве метанола [3]. При эксплуатации реактора требуется анализ факторов, влияющих на эффективность его работы. Актуальность такого анализа возрастает при модернизации каталитических систем в технологических линиях. Метод вычислительной гидродинамики позволил оценить степень неоднородности реакционного потока и предложить инженерные решения по устранению этих неоднородностей в реакторе гидрирования жирных кислот при замене катализатора на принципиально новую каталитическую систему. Эффективно применение методов CFD в научных исследованиях при разработке катализаторов сложных геометрических форм: сотовых блоков, волокнистых катализаторов и др. Методами CFD можно анализировать нестационарные быстроидущие процессы, что практически невозможно выполнить экспериментально. Примером являются результаты расчета стартового периода каталитического нейтрализатора при очистке выхлопов автомобильного двигателя от оксида углерода.

Развитие методов вычислительной гидродинамики, по-видимому, должно быть направлено на совместное решение гидродинамики газовых (га-

зожидкостных) потоков и прохождения сложной системы каталитических реакций на поверхности твердых частиц катализатора в реакторах с неподвижным слоем, с кипящим слоем и slurry. Это позволит сделать качественный шаг вперед в разработке эффективных конструкций реакторов, адекватных современным катализаторам.

Применение вычислительной гидродинамики позволяет значительно сократить временные и стоимостные затраты на разработку новых эффективных аппаратов для химической технологии и оптимизацию конструкций как собственно каталитических реакторов с неподвижным, кипящим или движущимся слоем, так и других аппаратов химической технологии с движущимися средами.

Авторы выражают благодарность С.А. Покровской за предоставление кинетических данных по окислению оксида углерода.

Литература

1. Fluent. Version 6.1. Fluent Inc., Lebanon, New Hampshire, 2003.
2. Пат. 2180265 (РФ). Способ и устройство для загрузки частиц в трубу трубчатого реактора/ О.П.Кленов, А.С.Носков. 2001.
3. Кленов О.П., Ханаев В.М., Борисова Е.С. и др. // Катализ в промышленности. 2008. Спецвыпуск. С. 38.
4. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М.: Наука, 1974.
5. Дейч М.Е. Техническая газодинамика. М.: Энергия, 1974.