

УДК 519.63

## **Моделирование процессов в порах зерна катализатора**

Узянбаев Р.М.<sup>1,2</sup>, Губайдуллин И.М.<sup>1,3</sup>, Фасхутдинова Р.И.<sup>3</sup>

Уфимский государственный нефтяной технический университет<sup>1</sup>, Национальный  
исследовательский Мордовский государственный университет им. Огарёва<sup>2</sup>, ИНК  
УФИЦ РАН<sup>3</sup>

Процесс импортозамещения программного обеспечения позволяет поднять на качественно высокий уровень математическое моделирование. С одной стороны, появились новые технологические и конструктивные решения для моделирования самого объекта или процесса, а с другой стороны, усовершенствовались информационно-компьютерные технологии, такие как теория анализа и хранения больших данных, параллельные вычисления, 4D моделирование. Математическое описание каталитических процессов и аппаратов с помощью дифференциальных уравнений было предложено в середине прошлого века и успешно развивалось до 90-х гг. Но уровень и точность вычислительной техники не позволяли адекватно численно решать сложные уравнения в частных производных, которые описывали процессы тепло- и массопереноса в порах зерна катализатора. Уже на начальном этапе необходимо численно решать уравнения с использованием очень мелкого шага, например, для расчёта концентрации химически реагирующих веществ по радиусу зерна катализатора. Таким образом, актуальной задачей является модификация параметров математических моделей сложных процессов на более глубоком уровне (детализированные химические превращения в порах зерна), реализация параллельных эффективных алгоритмов, расчет нестационарных режимов работы каталитических процессов и аппаратов. Более детально разработаны двухфазные математические модели, особенно системы газ-твёрдое. К числу таких относится окислительная регенерация – процесс контролируемого выжига коксовых отложений в порах дезактивированного катализатора.

Стратегия моделирования заключается в последовательном исследовании и анализе основных закономерностей регенерации на моделях различных уровней: кинетическом [1], зерна и слоя катализатора, контактного аппарата, агрегата в целом.

Основной вопрос, интересующий исследователей, – какие перегревы возможны при регенерации зерен катализатора в зависимости от выбора начальных условий: массы отложившегося кокса, размера зерна, температуры газа и содержания в нем кислорода. Другой важный вопрос – оценка влияния процессов переноса тепла и вещества в порах зерна на характер и скорость выжига кокса.

В разработанной модели учитывается перенос компонентов по зерну катализатора как за счет диффузии, так и стефановским потоком. При построении модели сделаны допущения, обычно принимаемые в литературе [2]: 1) зерно катализатора сферическое, его размер и структура пор не изменяются в ходе процесса; 2) теплофизические параметры, коэффициенты теплообмена и обмена, энергии активации инвариантны относительно изменению температуры; 3) температура зерна и содержащегося в его порах газа в любой точке одинаковы; 4) массой газа в порах по сравнению с массой зерна катализатора можно пренебречь. Единственное дополнительное допущение сделано при выводе соотношений – отложения кокса имеют вид гранул, число которых в ходе регенерации не меняется.

С учетом сказанного математическое описание процесса регенерации на зерне катализатора представляется следующей системой дифференциальных уравнений параболического

типа.

Запишем уравнения материального и теплового балансов для зерна катализатора:

$$\varepsilon_k \frac{dy_i}{dt} = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 D^* \frac{\partial y_i}{\partial r} - r^2 \mu y_i) + \frac{\gamma_k S_k}{C_0} \sum_{j=1}^J \nu_{ij} W_j, \quad (1)$$

$$C_k \frac{\partial T_k}{\partial t} = \frac{\lambda}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial T_k}{\partial r}) + \gamma_k S_k \sum_{j=1}^J Q_j W_j, \quad (2)$$

с начальными и граничными условиями:  $t = 0 : y_i = 0, T_k = T_r; r = 0 : D^* \frac{\partial y_i}{\partial r} = 0, \lambda^* \frac{\partial T_k}{\partial r} = 0; r = R_k : D^* \frac{\partial y_i}{\partial r} - \mu R; y_i = \beta(x_i - y_i) - \mu R Y_i$ , где  $T_k, T_r, T_0$  – температуры катализатора, газа и на входе в слой, К;  $\varepsilon_k$  – пористость зерна;  $D^*$  – эффективный коэффициент диффузии в порах зерна,  $\frac{m^2}{c}$ ;  $\lambda^*, \lambda_{ck}$  – эффективные коэффициенты теплопроводности зерна и слоя катализатора,  $\frac{Вт}{(м \cdot К)}$ ;  $\beta, \alpha$  – коэффициенты массо- и теплообмена на входе в слой, м/с, ( $^2 K$ );  $C_k$  – объемная теплоемкость катализатора, Дж/м<sup>3</sup>К;  $Q$  – тепловые эффекты скоростей стадий химического превращения, Дж/моль;  $\mu$  – стефановский поток, м/с,  $r$  – радиус зерна катализатора, мм;  $x_i, y_i$  – концентрация компонентов в окружающей зерно газовой фазе и порах зерна, мольные доли;  $S_k$  – удельная поверхность коксовых гранул, м<sup>2</sup>/г;  $y_k$  – насыпная плотность катализатора, г/м<sup>3</sup>;  $C_0$  – мольная плотность газа, моль/м<sup>3</sup>.

Систему уравнений (1)-(2) замыкает уравнение для количества кокса на катализаторе и компонентов в объеме коксовых отложений:

$$\frac{dq_c}{dt} = -M_c S_k (w_2 + w_3 + w_5), \quad (3)$$

$$\frac{dz_i q_c}{dt} = \frac{S_k k_I(T) \rho_c (\theta_i^* - z_i)}{R_c} \quad (i = 1, 2; I = i + 5), \quad (4)$$

с начальными условиями:  $t = 0 : q_c = q_c^0, z_1 = z_1^0, z_2 = 0$ ; где  $q_c$  – содержание кокса, г/г;  $M_c$  – молекулярная масса кокса, г/моль;  $\rho_c$  – плотность кокса, г/м<sup>3</sup>;  $z_i$  – объемные компоненты, мольные доли;  $q_c^0$  – начальное содержание кокса.

$$\theta_1^* = \alpha_H \theta_1; \theta_2^* = \alpha_O \theta_2;$$

$$\alpha_H = 1/6; \alpha_O = 4/3;$$

$$R_c = R_0 (q_c / q_c^0)^{1/3}; S_c = S_0 (q_c / q_c^0)^{2/3};$$

где  $\theta_i^*$  – количество адсорбированного коксом водорода и кислорода;  $R_c, S_k$  – радиус и удельная поверхность коксовых гранул;  $R_0, S_0$  – начальный радиус и удельная поверхность коксовых гранул.

## Литература

1. Губайдуллин И.М., Мусина А.Е., Узянбаев Р.М. Моделирование процесса пиролиза пропана и пропан-пропиленовой фракции в среде MATLAB // Вестник Башкирского университета. 2018. Т. 23, № 4. С. 1114-1121.
2. Балаев А.В., Дробышев В.И., Губайдуллин И.М., Масагутов Р.М. Исследование волновых процессов в регенераторах с неподвижным слоем катализатора // В кн.: Распространение тепловых волн в гетерогенных средах. Новосибирск: Наука. Сиб. отделение, 1988. С. 233-246.

MSC2010 35K10

## **Modelling of the processes at the pores of a catalyst grain**

R.M. Uzyanbaev<sup>1,2</sup>, I.M. Gubaydullin<sup>1,3</sup>, R.I. Faskhutdinova<sup>3</sup>

Ufa State Petroleum Technological University<sup>1</sup>, National Research Mordovia State University<sup>2</sup>, Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Science<sup>3</sup>