

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИТИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЙ В АКТИВНЫХ РЕАГИРУЮЩИХ СРЕДАХ. ПРОЕКТ № 41

Координатор: д-р техн. наук Носков А. С.
Исполнители: ИК, МТЦ, ИМ, ИХН СО РАН

Осуществлены моделирование и экспериментальное изучение факторов, определяющих критические явления в реагирующих средах, — флуктуаций температур, изменений структуры активной пористой среды и локальных перегревов слоя катализатора. Для локальных флуктуаций структуры слоя в реагирующих средах имитационное моделирование и прямое наблюдение методом ЯМР-томографии показали сходные результаты (рис. 1). Результаты важны для описания процессов, приводящих к тепловому взрыву реактора и технологическим авариям.

Экспериментально обнаружены и на основе физической и математической моделей объяснены автоколебания температуры и доли жидкости внутри частично смоченного зерна катализатора (рис. 2).

Экспериментально и методами имитационного моделирования показана связь между структурой слоя и методом его формирования. Разработана двумерная стационарная квазигомогенная модель расчета каталитического процесса с учетом способа укладки зернистого слоя, которая включает уравнение теплового баланса, уравнения материального баланса (для системы из M компонентов) и теплопроводность по стенке аппарата. С помощью данной модели изучено влияние способа загрузки на распределение температуры и конверсии по высоте трубки для процессов окисления метанола в формальдегид (рис. 3) и конверсии метана. По результатам моделирования показано, что следствием неравномерного распределения порозности являются очень крутые радиальные градиенты температур и концентраций в горячей точке, которые могут приводить к разрушению аппарата. Также было по-

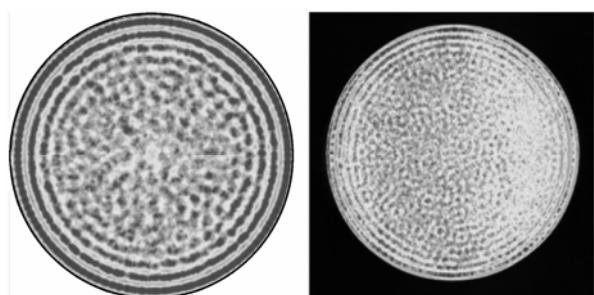


Рис. 1. Моделирование (слева) и ЯМР-исследование (справа) локальных флуктуаций порозности в неподвижном зернистом слое.

Fig. 1. Computational modeling (left) and NMR investigation (right) of local fluctuation of the void fraction of the fixed bed.

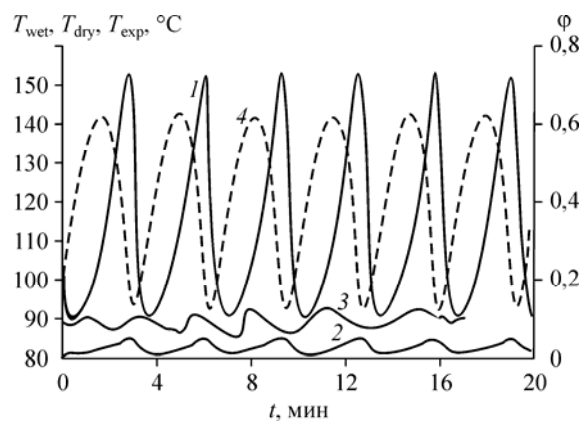


Рис. 2. Моделирование жидкофазного гидрирования α -метилстирола на отдельном зерне катализатора. 1, 2 — установившиеся периодические автоколебания температуры в верхней и нижней частях зерна; 3 — экспериментальная температура нижней части зерна; 4 — расчетная доля заполнения пористого пространства зерна жидкостью.

Fig. 2. Modeling of α -methylstyrene liquid phase hydrogenation on a single catalyst pellet. 1, 2 — periodic oscillations of temperature of the upper and lower parts of the pellet. 3 — experimentally measured temperature of the lower part of the pellet. 4 — calculated fraction of the pellet porous space liquid filling.

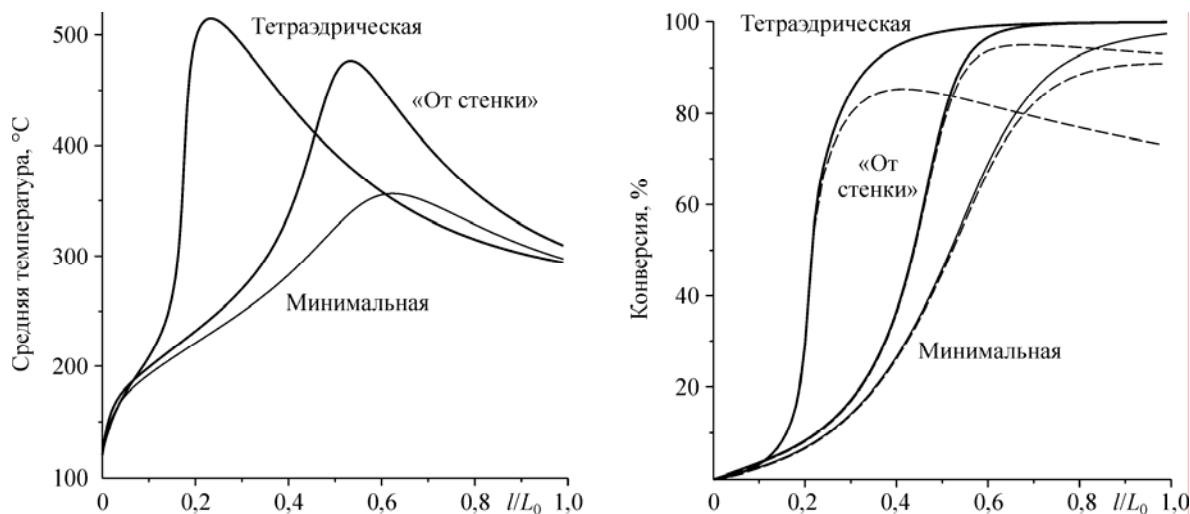


Рис. 3. Профиль температуры и конверсии (сплошная линия — метанол, штриховая — формальдегид) по длине слоя при различных способах укладки для окисления метанола в формальдегид: $\text{CH}_3\text{OH} + \frac{1}{2}\text{O}_2 = \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$ и $\text{CH}_2\text{O} + \frac{1}{2}\text{O}_2 = \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$.

Fig. 3. Temperature and conversion profiles for oxidation methanol to formaldehyde (firm line — methanol, hatch — formaldehyde) for various packing ways: $\text{CH}_3\text{OH} + \frac{1}{2}\text{O}_2 = \text{CH}_2\text{O} + \text{H}_2\text{O}$ и $\text{CH}_2\text{O} + \frac{1}{2}\text{O}_2 = \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$.

казано, что перераспределение активности катализатора по длине каталитического слоя может приводить к появлению множественности

стационарных состояний и, в частности, к появлению высокотемпературных режимов работы реактора.

Основные публикации

1. Koptuyug I. V., Lysova A. A. In situ monitoring of multiphase catalytic reactions at elevated temperatures by MRI and NMR// Stapf S., Han S.-I. (Eds.). NMR Imaging in Chemical Engineering. Wiley-VCH, 2005. P. 570—589.
2. Koptuyug I. V., Lysova A. A., Matveev A. V. et al. NMR imaging as a tool for studying mass transport in porous materials// Fluid Transport in Nanoporous Materials/ NATO Science Series II: Mathematics, Physics and Chemistry, V. 219/ W. C. Conner, J. Fraissard (Eds.). Kluwer Academic Publishers, 2006.
3. Koptuyug I. V., Lysova A. A., Sagdeev R. Z. et al. In situ MRI of the structure and function of multiphase catalytic reactors// Catal. Today. 2005. V. 105. P. 464—468.
4. Koptuyug I. V., Sagdeev D. R., Gerkema E., Van As H., Sagdeev R. Z. Solid-state ^{27}Al MRI and NMR thermometry for catalytic applications with conventional (liquids) MRI instrumentation and techniques// J. Magn. Reson. 2005. V. 175. P. 21—29.
5. Koptuyug I. V., Lysova A. A., Kulikov A. V. et al. Functional MRI and NMR spectroscopy of an operating gas-liquid-solid catalytic reactor// Magn. Reson. Imaging. 2005. V. 23. P. 221—225.
6. Khanaev V. M., Borisova E. S., Noskov A. S. Optimization of the active component distribution through the catalyst bed for the case of adiabatic reactor// Chemical Engineering Science. 2005. V. 60, Iss. 21. P. 5792—5802.