



Моделирование фронта горения в процессе окислительной регенерации катализатора¹

Язовцева О.С.^{*}, Губайдуллин И.М.^{**,**}, Загоруйко А.Н.^{****}

^{*}Математический институт им. В.А. Стеклова РАН, Москва

^{**}Институт нефтехимии и катализа - обособленное структурное подразделение Уфимского федерального исследовательского центра РАН, Уфа

^{***}Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа

^{****}ФИЦ «Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН», Новосибирск

Исследование посвящено математическому моделированию процесса окислительной регенерации слоя катализатора, в частности, исследованию условий возникновения фронта горения в слое катализатора при регенерации [1]. Окислительная регенерация катализатора — это выжиг коксовых отложений кислородсодержащим газом с целью восстановления каталитической активности.

Хорошо известны проблемы выжига коксовых отложений, связанные с экзотермичностью реакции. Горение кокса сопровождается резким повышением температуры, возникающим в определенный момент времени [2]. Фронт горения перемещается по длине слоя катализатора, образуя большие температурные забросы, что может привести

к необратимой порче катализатора и возникновению опасных ситуаций на производстве [3].

Математическое моделирование выжига коксовых отложений катализатора позволяет эффективно выявлять проблемные участки горения и исследовать возможности управления процессом за счет подбора начальных данных и технологических параметров.

Модель регенерации слоя катализатора включает в себя нестационарные уравнения диффузии-конвекции-реакции для описания химических и диффузионных процессов в зерне катализатора. Граничные условия отвечают условиям массообмена между газом в зерне и в реакционной смеси. Химическое взаимодействие в ходе выжига описано как окисление углерода до его диоксида [2].

Для упрощения постановки задачи принята гипотеза об изотермичности зерна катализатора. Она позволяет не учитывать в тепловом балансе зерна изменение температуры по линейным параметрам зерна [4].

Уравнения учета движения газа в слое катализатора являются стационарными уравнениями переноса, что соответствует модели идеального вы-

¹Работа Язовцевой О.С. выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-71-30012). Работа Губайдуллина И.М. выполнена в рамках государственного задания Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (тема No FMRS-2022-0078).

теснения [5]. Скорость газа принята постоянной [2].

Расчет коэффициентов тепло- и массообмена проведен с использованием критериев подобия [2]. Эффективные коэффициенты теплопроводности реакционной смеси и теплоемкости зерна катализатора рассчитаны с учетом химических составов и пористости зерна [6]. Эффективный коэффициент диффузии рассчитан как среднегармоническое коэффициентов молекулярной и кнудсеновской диффузии с учетом проницаемости пор [7].

Предложенная модель хорошо отражает реальные процессы, протекающие в слое катализатора при его регенерации [2]. Изменение входных данных процесса ощутимо влияет на ход процесса, например, скорость движения фронта горения в значительной степени зависит от скорости реакционной смеси. Это дает основания полагать эффективность динамического управления процессом [8].

Вычислительный алгоритм выполнен на основе интегро-интерполяционного метода. В силу существенной нелинейности уравнения диффузии-конвекции-реакции проинтегрированы явно. При этом уравнения переноса по длине реактора аппроксимированы неявной схемой, поскольку неизвестные функции входят в них линейно. Граничные условия аппроксимированы также неявно: при некоторых параметрах возникает значительный градиент температуры и концентраций на границе зерна катализатора.

В работе представлены результаты моделирования слоя катализатора в процессе окислительной регенерации при нестационарных граничных условиях.

Список литературы

- [1] Балаев А.В., Дробышев В.И., Губайдуллин И.М., Масагутов Р.М. Исследование волновых процессов в регенераторах с неподвижным слоем катализатора // Распространение тепловых волн в гетерогенных средах. Новосибирск: Наука. Сибирское отделение, 1988. с. 233–246.
- [2] Reshetnikov S.I., Petrov R.V., Zazhigalov S.V., Zagoruiko A.N. Mathematical Modeling of Regeneration of Coked Cr-Mg Catalyst in Fixed Bed Reactors // Chemical Engineering Journal, 2020. V. 380. DOI: 10.1016/j.cej.2019.122374.
- [3] Масагутов Р.М., Морозов Б.Ф., Кутелов Б.И. Регенерация катализаторов в нефтепереработке и нефтехимии. М.: Химия, 1987. 144 с.
- [4] Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Zagoruiko A.N. Numerical Simulation of Oxidative Regeneration of a Spherical Catalyst Grain // Mathematical Models and Computer Simulations, 2023. V. 15. p. 485–495. DOI: 10.1134/S2070048223030079.
- [5] Слинько М.Г. Моделирование химических реакторов. Новосибирск: Наука, 1968. 96 с.
- [6] Yazovtseva O.S., Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Sukharev L.A., Zagoruiko A.N. Computer Simulation of Coke Sediments Burning from the Whole Cylindrical Catalyst Grain // Mathematics, 2023. V. 11 (669). DOI: 10.3390/math11030669.
- [7] Малиновская О.А., Бесков В.С., Слинько М.Г. Моделирование каталитических процессов на пористых зернах. Новосибирск: Наука, СО РАН, 1975. 268 с.
- [8] Губайдуллин И.М. Математическое моделирование динамических режимов окислительной регенерации катализаторов в аппаратах с неподвижным слоем. Уфа: Институт Нефтехимии и катализа АН РБ. 1996. Автореферат диссерт. ... канд. физ.-мат. наук.