



УДК 532.546; 533.15

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ СМЕСИ РЕАГИРУЮЩИХ ГАЗОВ В НЕОДНОРОДНОМ СЛОЕ КАТАЛИЗАТОРА

К. И. Михайленко, С. Ф. Урманчеев

Институт механики УНЦ РАН, Уфа

Аннотация. Рассматривается поведение жидкости, протекающей через неподвижный насыпной пористый слой гранулированного катализатора. Методами вычислительного эксперимента исследуются эффекты неравномерности поля скорости жидкости, возникающие при искривлении поверхности слоя и влияние возникающей неоднородности на скорость и характер протекания химических реакций.

Ключевые слова: многофазная система, пористая среда, катализатор, математическое моделирование, численные методы, катализатор

1 Введение

Известно, что двумерное течение вязкой жидкости в прямоугольном канале описывается законом Пуазейля. Эпюра продольной скорости при этом имеет форму параболы:

$$v(x) = \frac{\Delta p L^2}{4\mu h} \left[\frac{x}{L} - \left(\frac{x}{L} \right)^2 \right], \quad x \in [0, L],$$

где Δp — перепад давления в канале; μ — вязкость жидкости; h — длина канала; L — ширина канала.

При наличии пористой среды в канале должно происходить выравнивание профиля. Можно показать, что в этом случае он описывается следующим выражением:

$$v(x) = \frac{\Delta p}{\mu h \zeta^2} \left[\frac{e^{\zeta x} - e^{\zeta(x-L)} + e^{-\zeta(x-L)} - e^{-\zeta}}{e^{\zeta L} - e^{-\zeta L}} - 1 \right],$$

$$x \in [0, L], \quad \zeta^2 = \frac{\alpha_2 \eta_\mu}{a^2}.$$

Здесь α_2 — объемная концентрация пористой среды; a — характерный размер гранул; η_μ — некоторый структурный коэффициент, связанный со свойствами пористой среды [1].

Описанные профили далеки от реально наблюдаемой картины течения на выходе из пористого слоя. Так, в некоторых работах [2–7] отмечается оригинальное явление, заключающееся в возникновении за неподвижным однородным зернистым слоем крупномасштабных неоднородностей. Данный эффект получил название «эффекта заячьих ушей» по форме эпюры продольной скорости вблизи стенок канала, когда скорость на выходе из слоя оказывается в несколько раз больше в пристеночной области по сравнению со скоростью в центре канала.

В литературе можно встретить два основных объяснения данного эффекта.

В соответствии с одним из предположений, возникновение неоднородности скорости можно объяснить наличием неоднородностей гранулированного слоя в пристеночной области канала [8, 9]. В качестве варианта данного предположения можно рассматривать гипотезу, утверждающую, что микроскопические неоднородности слоя служат «затравкой», вызывающей макроскопические неоднородности профиля скорости жидкости.

Другое предположение, основывающееся на более поздних детальных исследованиях [3, 10–12] связывает эффект с макроскопическими геометрическими неоднородностями всего слоя. Для пояснения данного явления М. А. Гольдштиком [3] была построена теоретическая модель протекания жидкости сквозь искривленную поверхность слоя гранулированной среды, в предположении о возникновении завихренности потока при неортогональном протекании через границу неподвижного слоя.

В настоящей работе представлена математическая модель, позволяющая описать явления, возникающие внутри и вне неподвижного слоя гранулированной среды. Модель базируется на основных гипотезах механики многофазных сред [1]. С использованием представляемой модели были проведены расчеты, позволяющие объяснить характер образования неоднородности поля скорости за слоем. Кроме того, показана степень влияния скоростной неоднородности на скорость химической реакции в случае протекания реагирующей жидкости сквозь слой гранулированного катализатора.

2 Математическая модель

Будем считать, что гранулированная среда состоит из гладких сферических частиц одинакового размера. Предположение об одинаковости сферических частиц приводит к достаточно простому выражению для сил межфазного взаимодействия, описываемого силой Стокса.

Кроме того, в модели вязкие эффекты будут учитываться не только в силах межфазного взаимодействия, но и в тензорах вязких напряжений фаз.

На основании введенных предположений можно записать систему уравнений. Для двумерной области она примет следующий вид.

Уравнение неразрывности жидкой фазы:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \rho_i \vec{v}_i = 0. \quad (1)$$

Уравнения движения жидкой фазы:

$$\frac{\partial \rho_i \vec{v}_i}{\partial t} + \nabla_k \rho_i v_1^k \vec{v}_i = -\alpha_i \text{grad } p + \mu_i \Delta \vec{v}_i + \vec{F}_{ij} + \rho_i \vec{g}, \quad (2)$$

В представленных выражениях использованы обозначения:

ρ_i — осредненная (эффективная) плотность i -ой фазы;

α_i — объемное содержание i -ой фазы;

\vec{v}_i — вектор скорости i -ой фазы;

p — давление в жидкости;

μ_i — динамическая вязкость фазы;

\vec{F}_{ij} — вектор сил межфазного взаимодействия;

\vec{g} — ускорение свободного падения.

Эффективная плотность и объемная концентрация жидкости связаны соотношением

$$\rho_i = \alpha_i \rho_i^0,$$

где ρ_i^0 — истинная плотность фазы (константа для несжимаемой жидкости и твердой фазы).

Для суммы объемных концентраций жидкости α_1 и гранулированной среды α_2 выполняется соотношение

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1.$$

Сила межфазного взаимодействия записывается с учетом объемных концентраций фаз:

$$\vec{F}_{ij} = -\vec{F}_{ji} = \eta_\mu \alpha_i \alpha_j a^{-2} (\vec{v}_i - \vec{v}_j),$$

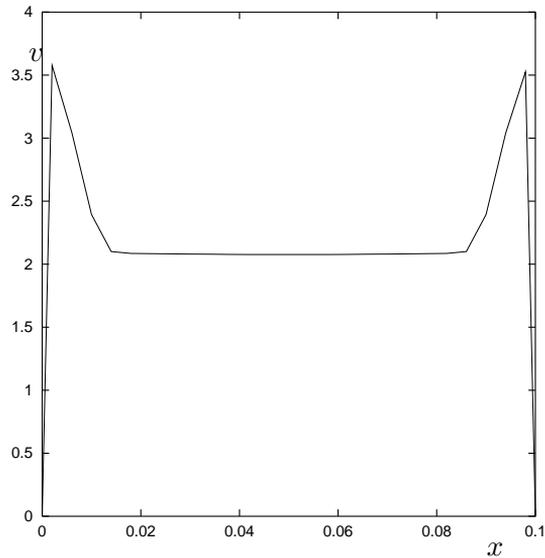


Рис. 1: Профили продольной скорости жидкости на выходе из плоского насыпного слоя переменной пористости

где a — радиус частиц зернистого слоя; η_μ — структурный коэффициент, определяемый формой и структурой поверхности гранул. Для гладких сферических частиц $\eta_\mu = \frac{9}{2}\mu$ [1].

Для математического моделирования процессов течения жидкости через неподвижный насыпной пористый слой в двумерной расчетной области использовался метод контрольного объема [13].

3 Неоднородности поля скорости

На основе представленной модели был проведен ряд вычислительных экспериментов, имеющих целью выявить причины образования эффекта «заячьих ушей».

Рассмотрим простой случай протекания жидкости сквозь плоский слой пористой среды. Хорошо известно, что слой оказывает выравнивающее действие на скорость протекающей сквозь него жидкости. То же говорит и вычислительный эксперимент.

Однако, реальная геометрия слоя должна отличаться от идеальной. Известно, что объемная концентрация пористого слоя должна уменьшаться в пристеночной области, стремясь к нулю на стенке канала. Существуют работы [14-16], показывающие что толщина области с уменьшен-

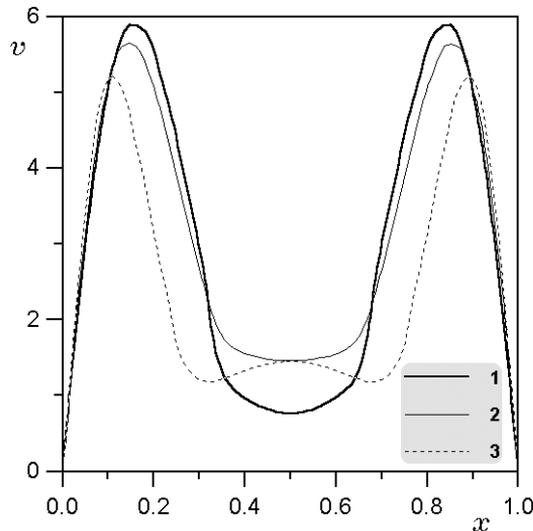


Рис. 2: Профили продольной скорости жидкости на выходе из искривленного слоя для различной кривизны (кривая 1 для $\vartheta = 30^\circ$, 2 — $\vartheta = 20^\circ$, 3 — $\vartheta = 10^\circ$)

ной пористостью незначительна и равна трем-пяти диаметрам гранул насыпного слоя. Не смотря на такую незначительность, данное изменение концентрации пористости должно оказывать какое-либо влияние на характер движения жидкости. На Рис. 1 показан профиль скорости жидкости на выходе из слоя с областью пристеночного уменьшения пористости, полученный в результате расчета. Важно отметить, что в этом расчете ширина области с уменьшенной пористостью значительно превышала указанный выше размер в 3–5 диаметров гранул.

Из рисунка хорошо видно, что наличие пристеночной особенности вносит возмущение в картину, возникающую при протекании жидкости сквозь неподвижный слой. Однако полученное в результате расчетов возмущение оказывается мало как по сравнению с экспериментальными данными, так и по сравнению с результатами вычислительного эксперимента при искривленной поверхности слоя.

Другое объяснение причины образования эффекта «заячьих ушей» основано на предположении о искривлении пористого слоя под действием протекающей сквозь него жидкости. На Рис. 2 показаны эпюры продольной скорости жидкости, протекающей сквозь пористый насыпной

слой с искривленной внешней поверхностью различной кривизны. Под кривизной поверхности слоя, ϑ , которая задается в численном эксперименте как дуга окружности, понимается величина угла между нормалью к поверхности стенки канала и касательной к окружности в точке соприкосновения со стенкой. Кривизна слоев характеризуется следующими значениями: для эшюры 1 — $\vartheta = 30^\circ$, 2 — $\vartheta = 20^\circ$, 3 — $\vartheta = 10^\circ$. Из рисунка видно, что изменение уровня искривленности слоя достаточно слабо влияет на общую картину эффекта.

Совместный расчет с учетом как искривления слоя, так и изменения пористости показывает, что в развитие эффекта «заячьих ушей» гораздо больший вклад вносится именно искривлением пористого слоя.

Объяснение причины образования рассматриваемого эффекта, по-видимому, заключается в том, что, как показывает вычислительный эксперимент, поток жидкости в слое направлен таким образом, чтобы течение происходило перпендикулярно поверхности слоя, что приводит к увеличению объема жидкости, притекающей к стенкам канала.

Такое поведение жидкости легко объяснимо, если принять во внимание поле давления, изобары которого повторяют контуры поверхности слоя, в то время как направление скорости жидкости перпендикулярно изобарам давления.

4 Влияние гидродинамических неоднородностей на эффективность каталитического реактора

Из предыдущего раздела видно, сколь сильное влияние на картину течения жидкости сквозь неподвижный насыпной пористый слой оказывает как искривление самого слоя, так и изменение его пористости в пристеночной области. Учет указанных особенностей приводит к возникновению расчетной картины течения значительно отличающейся от расчета для плоского пористого слоя. Можно предположить, что возникающая особенность должна каким-либо образом проявить себя и в случае наличия протекания химических реакций параллельно с течением сквозь слой.

Для исследования такого предположения была построена простейшая модель химического каталитического реактора с насыпным слоем гранулированного катализатора.

Рассмотрим модельную химическую реакцию, идущую в присутствии катализатора. Изменение массовых концентраций реагентов будет

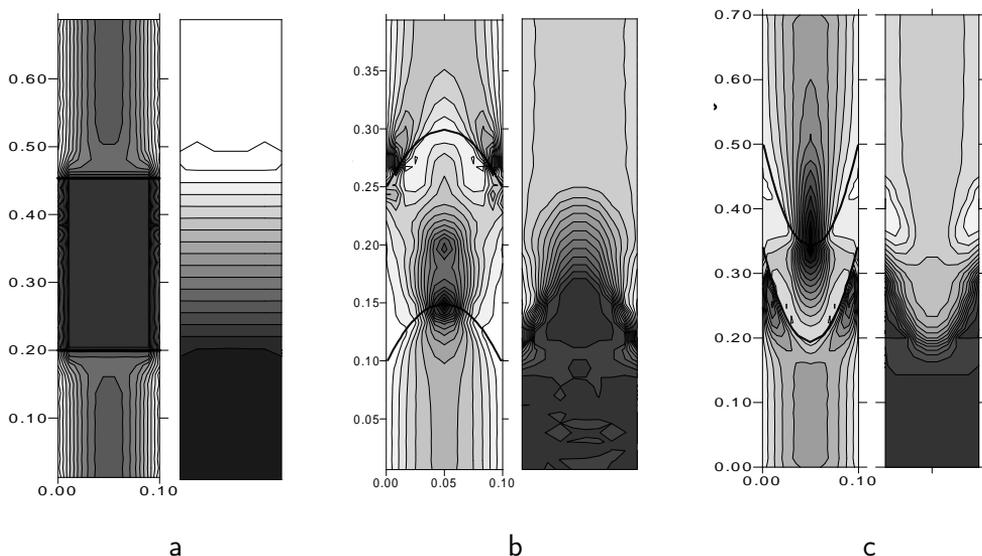


Рис. 3: Качественная картина распределения массовой концентрации c_1 «основного» реагента в канале каталитического реактора с плоским (а), выпуклым (b) и вогнутым (с) насыпным слоем гранулированного катализатора. По осям отложены безразмерные координаты

описываться уравнением вида:

$$\frac{\partial c_m \rho_1}{\partial t} + \nabla c_m \rho_1 \vec{v}_1 = \mathcal{J}_m, \quad (3)$$

где c_m — массовая концентрация вещества; $\mathcal{J}_m = \mathcal{J}(c_1, c_2, T)$ — интенсивность химической реакции.

Кинетические коэффициенты реакции подбирались с таким расчетом, чтобы на плоском слое катализатора один из реагентов вступал в реакцию полностью.

На Рис. 3 представлены результаты математического моделирования протекания установившейся химической реакции на насыпном слое гранулированного катализатора. На Рис. 3(а) показано распределение массовой концентрации c_1 реагента, полностью расходуемого на катализаторе. В данной модели были подобраны значения расхода и кинетических коэффициентов так, чтобы получился «красивый» результат. Под «красивым результатом» понимается практически полное выгорание одного из реагентов на плоском слое катализатора. В дальнейших расчетах данные значения использовались как «стандартные».

На Рис. 3(b) показано распределение массовой концентрации первого реагента, реагирующего на выпуклом слое катализатора. Из рисунка видно, что изменение картины течения жидкости, вызванное наличием эффекта «заячьих ушей» приводит к заметному уменьшению конверсии химического реагента на слое катализатора. По-видимому, такое поведение вызвано значительным увеличением скорости жидкости в пристеночной области и тем, что основной поток жидкости направляется именно в пристеночную область. Наличие указанной особенности потока должно приводить к сокращению времени взаимодействия реагентов с катализатором.

Аналогичная картина возникает и в случае реакции на вогнутом слое катализатора, Рис. 3(c).

5 Заключение

В данной работе методами вычислительного эксперимента показано, что основной причиной образования неоднородности скорости движения жидкости за насыпным пористым слоем гранулированной среды (эффекта «заячьих ушей») является искривление самого слоя. Данный эффект связан с перераспределением поля давления в канале, что вызывает изменение поля скорости жидкости таким образом, что протекающая в слое жидкость отклоняется в направлении стенки канала.

Представленные результаты позволяют сделать вывод о том, что отклонение геометрии слоя гранулированного катализатора от плоского состояния приводит не только к значительным гидродинамическим эффектам, но также влияет и на общую картину протекания химических реакций, происходящих в слое. Важно отметить, что любое изменение формы слоя приводит к снижению уровня конверсии химических реагентов. Таким образом, при использовании химических реакторов с неподвижным насыпным слоем катализатора особое внимание следует уделять сохранности плоской границы слоя.

Список литературы

- [1] Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. Т. 1. М.: Наука, 1987. 464 с.
- [2] Гольдштик М. А., Лебедев А. В., Сорокин В. Н. Клапанный эффект в зернистом слое // ИФЖ. 1978. Т. 34, № 3. С. 389–393.

- [3] Гольдштик М. А. Процессы переноса в зернистом слое. Новосибирск: Институт теплофизики, 1984. 164 с.
- [4] Гольдштик М. А. Парадоксы вязких течений. Новосибирск: Институт теплофизики, 1986. 38 с.
- [5] Попов Е. К., Смирнов Е. В., Абаев Г. М., Штерн П. Г., Турунтаев С. В., Лычагин В. Ф. Вопросы исследования реакторов с неподвижным слоем катализатора // *Аэродинамика химических реакторов*. Новосибирск. 1976. С. 65–71.
- [6] Sato K., Akehata T. Flow distribution in packed beds // *Chem. Eng.* 1958. V. 22, № 7. P. 430–436.
- [7] Schwartz C. T., Smith J. M. Flow distribution in packed beds // *Ind. Chem. Eng.* 1953. V. 45, № 6. P. 1209–1218.
- [8] Вайсман А. М., Гольдштик М. А. Деформирование зернистой среды // *Докл. АН СССР*. 1980. Т. 252, № 1. С. 61–64.
- [9] Григорян С. С., Дао Минь Нгок Гидродинамические проблемы химической технологии. М.: НИИ механики МГУ, 1979. 161 с.
- [10] Вайсман А. М., Гольдштик М. А. Динамическая модель движения жидкости в пористой среде // *МЖГ*. 1978. № 6. С. 89–95.
- [11] Кириллов В. А., Кузьмин В. А., Пьянов В. И., Ханеев В. Н. О профиле скорости в неподвижном зернистом слое // *Докл. АН СССР*. 1979. Т. 245, № 1. С. 159–162.
- [12] Мясников В. П., Котелкин В. Д. Гидродинамическая модель химического реактора с неподвижным слоем катализатора // *Аэромеханика*, 1976. С. 307–315.
- [13] Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат, 1984. 152 с.
- [14] Roblee L. H. S., Baird R. M., Tierney J. W. Radial Porosity variations in packed beds // *Am. Inst. Chem. Eng. J.* 1958. V. 15. P. 460–464.
- [15] Venenati R. F., Brosilow G. B. Void fraction distribution in beds of spheres // *Am. Inst. Chem. Eng. J.* 1962. V. 8. P. 359–361.
- [16] Аэров М. Э., Тодес О. М. Гидравлические и тепловые основы работы аппаратов со стационарным и кипящим зернистым слоем. Л.: Химия, 1968. 512 с.