## Гидродинамические модели и режимы течения различных сред через неупорядоченные и упорядоченные структуры

А. В. Беспалов, Е. М. Чечёткина

Российский химико-технологический университет им. Д. И. Менделеева

Показано преимущество упорядоченных структур перед неупорядоченными. Используя численное моделирование, установлено наличие различных режимов течения среды в каналах блока, расположенных под углом 90° к набегающему потоку, в зависимости от размещения их по высоте блока.

В химической промышленности широкое распространение получили зернистые катализаторы, засыпаемые в неподвижный катализаторный слой «внавал», образуя неупорядоченный слой. Доступность поверхности, тепло- и массоперенос на зернах катализатора в значительной степени зависят от режимов обтекания [1], которые в неупорядоченном зернистом слое имеют сложную неустойчивую структуру. Из-за неоднородности упаковки зерен течение становится также неоднородным. Даже при равномерном распределении потока на входе в зернистый слой прохождение его через зернистый слой, состоящий из частиц различной формы (гранулы, таблетки, кольца и т. д.) характеризуется неравномерностью распределения скоростей по сечению и объему слоя. В зависимости от расходов потока и размеров зерна в неупорядоченном неподвижном зернистом катализаторном слое обнаружено пять наиболее характерных гидродинамических режимов [2], что усложняет управление его использованием.

Все эти недостатки зернистых слоев привели к тому, что в последнее время значительный интерес проявляется к катализаторам новых геометрических форм: блочным катализаторам сотовой структуры, изготовленным непосредственно из каталитической массы или нанесенным блочным катализаторам сотовой структуры. Каналы в блочном катализаторе сотовой структуры — сквозные и имеют по всей высоте блочного катализатора один и тот же гидравлический диаметр. Их укладывают в реактор так, чтобы образовать упорядоченную структуру катализаторного слоя. Это позволяет создать однородное течение реагентов в реакторе, что благоприятно для реализации ряда химических превращений, особенно в том случае, если процесс тормозится внешнедиффузионным сопротивлением.

Характер течения реагентов оказывает существенное влияние на эффективнось работы реактора и доступность поверхности блочного катализатора. Вопрос о поле скоростей реагирующей смеси в каналах блочного катализатора сотовой структуры — один из основных при рассмотрении процессов переноса в неподвижном упорядоченном катализаторном слое. По известной скорости течения в каналах блока можно судить о величине коэффициента массообмена в них.

Как правило, регулярное расположение каналов одинакового размера в блочном катализаторном слое сотовой структуры совпадает с направлением потока (газофазные и жидкофазные процессы). Интенсивность процессов тепло- и массопереноса между газовым потоком и поверхностью носителя сотовой структуры характеризуется критерием Нуссельта (Nu), который для широкого спектра геометрических конфигураций каналов и различных режимов течения газов при вынужденной конвекции оценивают по следующим формулам [3]:

$$Nu = k_{\mu} \operatorname{Re}^{0.5} \operatorname{Pr}^{0.33}$$
(1)

для ламинарного режима;

$$Nu = k_T \,\mathrm{Re}^{0.8} \,\mathrm{Pr}^{0.4} \tag{2}$$

для турбулентного режима,

где Re, Pr — критерии Рейнольдса и Прандтля;  $k_n$ ,  $k_T$  — коэффициенты, зависящие от геометрической конфигурации каналов. Точное значение их довольно сложно найти теоретически.

Из приведенных формул видно, что критерий Нуссельта для газов в основном определяется режимом течения, критерием Рейнольдса и геометрической конфигурацией каналов. В [4] показано, что в каналах сотовой структуры, расположенных по направлению потока даже при высоких его скоростях, равных 5–10 м/с, реализуется режим, близкий к ламинарному (Re = 100–1000).

Известно [5], что в каталитических камерах сгорания газовых турбин находят широкое применение блочные катализаторы сотовой структуры с каналами малого размера, чтобы обеспечить максимальную активную поверхность и наибольшую степень конверсии. Типичные числа Рейнольдса в каналах составляют величину порядка 10 000.

Но может быть и другое расположение каналов по отношению к набегающему потоку. Сквозные каналы по отношению к набегающему потоку сориентированы под углом 90°. Поток обтекает блочный катализатор сотовой структуры сверху вниз, причем он подается таким образом, чтобы создать различные потенциальные скорости по обе стороны блочного катализатора сотовой структуры. В этом случае происходит контактирование реагентов потока с катализатором как по всей его внешней поверхности, так и по поверхности сквозных каналов.

Чтобы достаточно полно определить характер течения в каналах блочного катализатора, установленного таким образом, была предложена математическая модель для его описания.

На входе в расчетную область [6, 7] задается профиль вертикальной скорости [8]. Оценим падение гидравлического напора вдоль блока с числом каналов, равным *M*. Обозначим через  $P_1$ ,  $P_2$ ,  $\Delta P_1$ ,  $\Delta P_2$  давления на входе в реактор и их гидравлический перепад, а давления для произвольного *m*-го слева и справа от блока, соответственно  $P_1 + \Delta P_1 m/M$  и  $P_2 + \Delta P_2 m/M$ . Так как на выходе из реактора

$$\Delta P = P_1 + \frac{\Delta P_1}{M}m - P_2 - \frac{\Delta P_2}{M}m = (P_1 - P_2)\frac{M - m}{M},$$

то, следовательно, градиент давления вдоль оси

$$\frac{dP}{dx} = \frac{P_1 - P_2}{l} \frac{M - m}{M} \,. \tag{3}$$

При решении уравнения для функции тока необходимо задать значения  $\psi(x,y)$  на всех границах расчетной области. Воспользуемся профилем скоростей Пуазейля в канале u(y). Рассмотрим установившееся течение одного направления между плоскостями y = h и  $y = h + \Delta h$ . Тогда уравнение движения имеет вид:

$$\frac{d^2u}{dy^2} = -\frac{dP/dx}{\mu} \,. \tag{4}$$

Решая уравнение (5), получим профиль течения Пуазейля в плоском канале и получим выражение для функции тока.

Движение среды опишем системой двумерных уравнений для переменных функции тока — завихренность, записанной в консервативной форме в безразмерном виде:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial (u\omega)}{\partial x} + \frac{\partial (u\omega)}{\partial y} = \frac{\partial^2 (v\omega)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 (v\omega)}{\partial y^2};$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega;$$

$$u = -\frac{\partial \psi}{\partial y}; \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}.$$
(5)

Для системы (5) в расчетной области рассматривается внутренняя краевая задача с граничными условиями и с допущениями, подробно рассмотренными в [6,7]. Задачу решали по известной методике [9].

При таком расположении блочного катализатора сотовой структуры в реакторе выделяют два основных гидродинамических режима: *протекание и проникновение* (вместо пяти для неупорядоченного зернистого неподвижного катализаторного слоя), причем характерным течением потока в сквозных каналах блочного катализатора является *протекание*, поскольку проникновение реализуется, начиная с 1/6 высоты от низа блочного катализатора сотовой структуры.

Недостаток такого реактора с блочным катализатором сотовой структуры: начиная с 1/6 высоты от низа блока реализуется второй гидродинамический режим — проникновение. При этом гидродинамическом режиме 1/6 блочного катализатора сотовой структуры практически не используется, особенно при небольших числах Рейнольдса (например, менее 50). Возникает задача: уменьшение числа гидродинамических режимов работы блочного катализатора сотовой структуры (в реакторе) с целью более точного и полного управления его использованием.

Поставленная задача решается изготовлением сквозных каналов различной геометрической формы (например, круглая, квадратная, шестиугольная, треугольная и т. д.) в блочном катализаторе сотовой структуры с различным гидравлическим диаметром, причем гидравлический диаметр сквозных каналов в блочном катализаторе сотовой структуры монотонно увеличивается сверху вниз по ходу потока, достигая отношения гидравлических диаметров последнего канала к первому не более 1,5.

Поток обтекает блочный катализатор сотовой структуры сверху вниз, причем поток подается таким образом, чтобы создать различные потенциальные скорости по обе стороны блочного катализатора сотовой структуры. При наличии монотонно увеличивающихся гидравлических диаметров сквозных каналов в блочном катализаторе сотовой структуры сверху вниз по ходу потока происходит контактирование реагентов с катализатором как по внешней поверхности блочного катализатора сотовой структуры, так и по всей поверхности сквозных потоков, включая и сквозные каналы, расположенные на 1/6 высоты от низа блочного катализатора сотовой структуры, при этом наблюдается более полное использование катализатора по всей высоте блочного катализатора сотовой структуры. Расчетным путем, получив профиль скорости течения Пуазейля в сквозных каналах блочного катализатора сотовой структуры и решая систему двумерных уравнений для переменных: функция тока — завихренность, а также экспериментально (методом трассирования), было обнаружено, что во всех сквозных каналах по высоте блочного катализатора сотовой структуры наблюдается только один гидродинамический режим — протекание.

При этом отношение гидравлических диаметров последнего и первого сквозных каналов в зависимости от потенциальных скоростей потока по обе стороны блочного катализатора не может быть более 1,5.

Таким образом, наличие одного гидродинамического режима — протекания во всех сквозных каналах блочного катализатора сотовой структуры, гидравлический диаметр которых монотонно увеличивается по высоте блочного катализатора сотовой структуры при отношении гидравлических диаметров последнего и первого сквозных каналов не более 1,5, увеличивает доступность поверхностей сквозных каналов для реагентов и позволяет более полно использовать блочный катализатор сотовой структуры, даже при значених Рейнольдса менее, чем 50.

## Литература

- 1. Дильман В. В. Роль гидродинамики в оптимизации реакторов // Химическая промышленность 1985. № 4. С. 245–249.
- 2. Кириллов В. А., Огарков Б. Л., Воронов В. Г. Гидродинамические режимы в трехфазном неподвижном зернистом слое. Теоретический анализ // Инж.-физ. журн. 1976. Т. 31. № 3. С. 402.
- Теория тепломассообмена. Учебник для вузов / Под ред. А. И. Леонтьева. М.: Высшая школа, 1979. 456 с.
- Носков А. С., Загоруйко А. Н. // Тез. международного семинара «Блочные носители и катализаторы сотовой структуры». СПб.; Новосибирск.: ИК СО РАН. 1995. Ч. 1. С. 37.
- 5. *Магне* Ф., *Виттон Дж.* Структура потоков в каналах блочных катализаторов // Химическая промышленность. 1999. № 9. С. 7–12.
- 6. Беспалов А. В., Бесков В. С., Чечеткина Е. М., Шинковская Е. Ю., Лесуновский А. В., Герасимов Б. П. Численное моделирование течения в каналах блочного катализатора // ТОХТ. Т. 25. 1991. № 2. С. 234–240.
- Беспалов А. В., Чечеткина Е. М., Шинковская Е. Ю., О выборе диаметра сквозного канала в блочном катализаторе сотовой структуры // ЖПХ. Т. 67. 1994. Вып. 11. С. 1897–1899.
- 8. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М.: Наука, 1974.
- 9. Герасимов Б. П., Елизарова Т. Г., Калачинская И. С. и др. Комплекс программ для числового моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости. Препринт ИПМ АН СССР. № 65. 1985.