

# Математическое моделирование промышленного мембранного реактора для каталитического процесса дегидрирования углеводородов

ШЕЛЕПОВА ЕКАТЕРИНА ВЛАДИМИРОВНА  
*Институт катализа СО РАН (Новосибирск), Россия*  
e-mail: shev@catalysis.ru

ВЕДЯГИН АЛЕКСЕЙ АНАТОЛЬЕВИЧ  
*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН (Новосибирск), Россия*

НОСКОВ АЛЕКСАНДР СТЕПАНОВИЧ  
*Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН (Новосибирск), Россия*

Процессы дегидрирования углеводородов широко используются на практике. Однако эти процессы не лишены недостатков. Основной проблемой процессов дегидрирования является наличие жестких термодинамических ограничений. Окислительное дегидрирование, более выгодное с термодинамической стороны, характеризуется низкой селективностью по целевому продукту и образованием кислородсодержащих примесей. Решением этих проблем могло бы стать проведение процессов дегидрирования в каталитических реакторах с использованием водородпроницаемых мембран. Во внутренней части реактора, заполненной частицами катализатора, протекает процесс дегидрирования пропана. Отщепляемый водород отводится через мембрану во внешнюю часть реактора, где протекает его каталитическое окисление. Отвод водорода из реакционного объема позволяет сместить равновесие реакции дегидрирования в сторону образования продуктов.

Несмотря на широкое распространение работ по исследованию процессов, проводимых в мембранных реакторах, применение мембран на практике до сих пор ограничено. Для успешного применения мембран в химической технологии необходимо оценить преимущества проведения процесса в мембранном реакторе для конкретного процесса, а также оптимизировать параметры мембранного реактора и мембраны. Решением этой фундаментальной научной проблемы может стать разработка детальной математической модели каталитического мембранного реактора.

В работе представлено математическое моделирование каталитического мембранного реактора для термодинамически сопряженных процессов. Двумерная стационарная модель реактора включает в себя уравнения тепло- и массопереноса и граничные условия для внутренней и внешней части трубки и керамической подложки.

Ранее на лабораторном уровне была проведена верификация математической модели мембранного реактора на примере процесса дегидрирования этана (адекватность модели достигается сопоставлением результатов моделирования с экспериментальными данными).

Моделирование промышленного реактора проводили с учетом степени использования зерна катализатора. Дополнительно было рассчитано изменение давления

в реакторе, а также ряд теплофизических свойств, которые при моделировании лабораторного реактора считались постоянными.

Для решения системы уравнений в частных производных при переходе к дискретному аналогу использовали интегро–интерполяционный метод, а также метод прямых, при этом не проводили аппроксимацию производных по длине. Система уравнений в частных производных была сведена к системе обыкновенных дифференциальных уравнений по длине для узловых значений по радиусу трубки, которую решали с помощью полунявного метода типа Розенброка 2-го порядка точности с автоматическим выбором шага интегрирования.

Разработанная модель позволила сформулировать рекомендации по устройству промышленного мембранного реактора, а также провести оптимизацию ряда параметров, которые влияют на такие показатели процесса дегидрирования, как конверсия углеводородов и селективность по целевым продуктам реакции.