

DOI: 10.53403/9785951505156_2022_251

Компьютерная томография как метод определения геометрических параметров насадочно-каталитического слоя

**В. С. Мосеева, А. Н. Букин, С. А. Марунич, Ю. С. Пак,
М. Б. Розенкевич**

РХТУ им. Д. И. Менделеева, Москва

blacklee@mail.ru

Предложен способ оценки максимально допустимого содержания катализатора в его смеси с насадкой методом мультиспиральной компьютерной томографии. Показано, что при объемной доле гидрофобного катализатора в слое более 14–20 об. % наблюдается изменение геометрических параметров насыпной решетки, что должно оказывать влияние на характер течения жидкости.

Введение

Особенностью колонн химического изотопного обмена в системе *вода – водород* является использование комбинированной загрузки гидрофобного катализатора и гидрофильной насадки. Основной сложностью моделирования и эксплуатации таких противоточных колонн является оценка влияния структуры потоков на массообменные характеристики. Чередование гидрофобных и гидрофильных участков по сечению и высоте колонны приводит к пульсациям потоков газа и жидкости. Работы по моделированию структуры потоков в таком случае направлены на изучение распределения жидкости в объеме насадочно-каталитического слоя, влияния смачиваемости материалов и расчета гидравлического сопротивления. Для описания гидродинамики потоков в насыпных колоннах обычно применяются следующие модели: полуэмпирический анализ на основе критериального подобия лабораторных и промышленных установок, метод случайных блужданий [1–3], теория перколяции [4, 5], а также метод компьютерной вычислительной гидродинамики (CFD) [6, 7]. Развитие вычислительных мощностей компьютеров позволило заметно повысить точность расчета и предсказания гидродинамических параметров насадочных регулярных и нерегулярных слоев. Сложность применения гото-

вых программных решений заключается в необходимости точного знания большого количества физически трудно измеряемых констант. На практике для повышения точности расчетных моделей в их алгоритмы закладывают критериальные выражения, полученные при исследовании процесса на лабораторных установках. При разработке математических моделей движения жидкости через насыпные слои важными параметрами являются геометрические характеристики загрузки: доля свободного объема, эквивалентный диаметр, извилистость.

В рамках данной работы для исследования смешанных загрузок Pt катализатора на основе сополимера стирола и дивинилбензола (Pt/СДВБ с размером гранул 0,8–1,2 мм) и насадки СПН 3×3×0,2 мм было предложено использовать метод мультиспиральной компьютерной томографии (МСКТ). В результате обработки томографических изображений насыпных смесей катализатора и насадки были оценены минимальное содержание катализатора в колонне, при котором происходит изменение типа движения жидкости (достигается порог перколяции), и средний размер агломератов частиц катализатора в колонне.

Методическая часть

Для оценки влияния Pt катализатора (гранулы Pt/СДВБ размером 0,8–1,2 мм) на расположение элементов насадки (СПН 3×3×0,2 мм) была исследована внутренняя структура насадочно-каталитического слоя путем анализа визуализации результатов мультиспиральной компьютерной томографии (МСКТ) модельных насыпных слоев. Для этого было подготовлено 6 образцов с содержанием катализатора от 0 до 33 %. Насадка и катализатор смешивались и загружались в пластиковый контейнер. Затем образцы помещали в томограф Siemens Biograph mCT-S40 3R со следующими параметрами сканирования: 120 мАс, 140 кВ. Визуализация результатов сканирования осуществлялась в программе RadiAnt, а последующий анализ полученных изображений – в Siams Photolab.

Результаты сканирования модельных загрузок в вертикальном направлении в зависимости от объемной доли катализатора представлены на рис. 1.

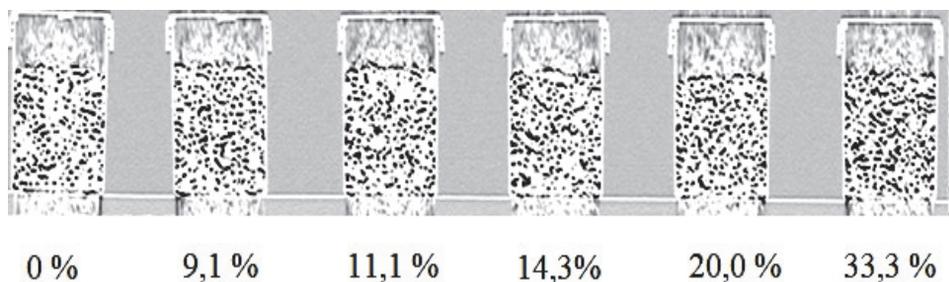


Рис. 1. Результаты визуализации сканирования модельных загрузок катализатора и насадки на томографе Siemens Biograph mCT-S40 3R в зависимости от объемной доли катализатора

Выбранный режим сканирования позволяет отличить материал с высокой плотностью от материала с низкой плотностью (металл и СДВБ), но не позволяет отличить воздух от материала носителя катализатора. Таким образом материал насадки на фотографии отображается белым цветом, а все пустоты между насадочными элементами, обусловленные наличием воздуха или катализатора, отображаются черным цветом. Из представленных на рис. 1 данных видно, что по мере увеличения объемной доли катализатора в слое от 0 до 33,3 % возрастает доля черных элементов (черных пикселей). Для количественной оценки распределения катализатора в слое был проведен анализ серии изображений с возрастающей долей катализатора в смеси с целью определения среднего размера и преобладающей формы черных агломератов частиц (воздух и катализатор) для каждого типа загрузки. Однако работа с исходными изображениями осложнена отсутствием четкой границы между белыми и черными пикселями. Поэтому на первой стадии анализа была проведена сегментация изображений по методу простой бинаризации (итеративного деления пополам) в программе JmicroVision (рис. 2).



Рис. 2. Результаты сегментации МСКТ изображений для случая чистого насадочного слоя: а – исходное изображение, б – сегментированное изображение

Сегментация изображений позволила установить четкие границы черных агломератов, их площадь S [пиксели] и форму C [–], а также их долю Θ [доля] на изображении. Площадь S , занимаемая на изображении черной частицей, определялась путем расчета количества пикселей в каждом элементе. Параметром формы частицы была выбрана округлость C (circularity), которая рассчитывается по уравнению

$$C = \frac{4\pi S}{\Pi^2},$$

где Π [пикселей] – «convex» периметр.

Параметр округлости изменяется в диапазоне от 0 до 1 и характеризует шероховатость поверхности частиц и их продолговатость: при $C = 1$ форма частиц совпадает с кругом, а для вытянутых овальных частиц $C \rightarrow 0$.

Под «convex» периметром понимается периметр выпуклой фигуры, эквивалентной по площади данному множеству (агломерату черных частиц)

и включающий данное множество. Например, на рис. 3 представлены различные агломераты пикселей (тип 1–5), имеющих различную площадь (от 9 до 4 пикселей), но одинаковый геометрический попиксельный периметр (12 пикселей). Для каждого типа агломератов была построена выпуклая «convex» фигура и рассчитан ее периметр. Для типов агломератов 1–5 все пиксели имеют общую связь с остальными пикселями, и их можно объединить одной оболочкой. Для типа решетки 6 есть связь между 1 и 2 пикселями, а также между 3 и 4 пикселями. Для расчета периметра такого агломерата используем две независимые «convex» оболочки: попиксельный периметр в этом случае совпадает с расчетным «convex» периметром.

Тип агломерата	Периметр попиксельный	Периметр расчетный	Площадь	Округлость
1 	12	12	9	0,79
2 	12	11,12	8	0,81
3 	12	11,41	7	0,68
4 	12	10,53	6	0,67
5 	12	9,65	5	0,67
6 	12	12	4	0,35

Рис. 3. Методика расчета геометрических характеристик решетки насыпного слоя

Далее для каждого изображения строилась гистограмма распределения черных агломератов по размеру и округлости. Для дальнейших расчетов использовался преобладающий размер. Например, на рис. 4 представлена гистограмма распределения черных агломератов по площади S для случая чистого слоя насадки (0 % катализатора).

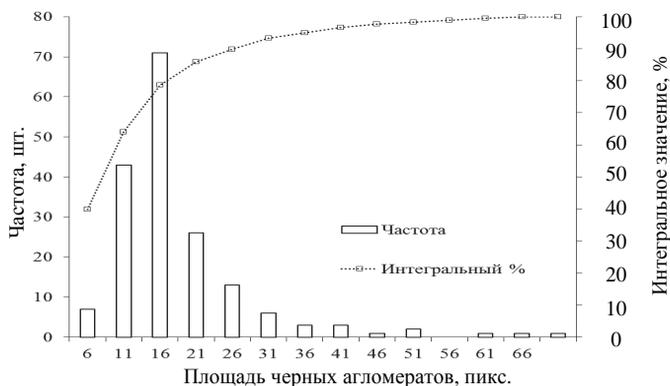


Рис. 4. Гистограмма распределения количества черных агломератов по значению их площади для случая загрузки с чистой насадкой

Обсуждение результатов

По результатам графической обработки экспериментальных данных была построена зависимость геометрического размера для каждой загрузки от объемной доли катализатора (рис. 6).

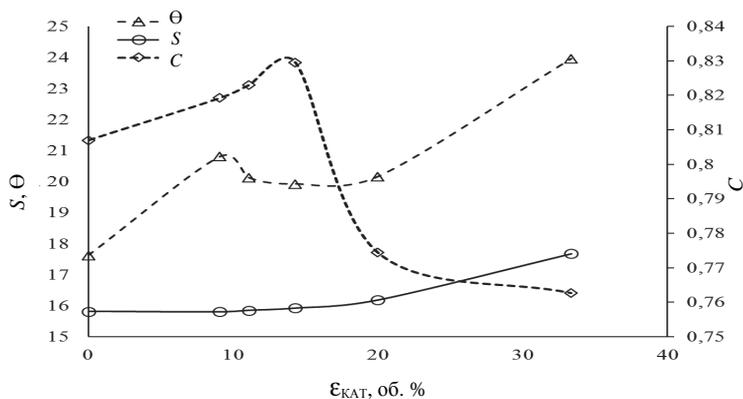


Рис. 5. Результаты анализа томографической визуализации насыпных слоев от объемной доли катализатора

Из рис. 5 видно, что минимальное добавление (от 0 до 9 об. %) катализатора в насадочный слой приводит к увеличению доли (от 18 до 20 %) черных пикселей Θ и параметра округлости C на томографическом изображении среза слоя. Данное явление может быть связано исключительно с изменением разрешающей способности томографа при добавлении в свободный объем насадочного слоя гранул катализатора. Дальнейшее увеличение содержания катализатора в слое до 14,3 об. % не оказывает влияния на параметр Θ . В диапазоне от 0 до 14,3 об. % средний размер S «черных» агломератов пикселей практически не изменяется. После 14,3 об. % катализатора в колонне черные частицы начинают вытягиваться (округлость C резко снижается), увеличивается их средний габарит S , а также возрастает суммарная доля Θ черных пикселей на изображении. Полученные данные могут свидетельствовать о том, что при добавлении катализатора в смешанном режиме в слой насадки отдельные гранулы катализатора располагаются преимущественно внутри элементов насадки и только в присутствии 14,3 об. % и более катализатора начинают видоизменять решетку, заполняя пространство между элементами насадки (см. рис. 6). В этот момент усложняется форма транспортных путей для протекания жидкости: снижаются параметры, характеризующие округлость частиц и извилистость слоя. С увеличением размера заполненных катализатором областей, возрастает расстояние между элементами насадки, что должно сказываться на течении жидкости. При полном отсутствии контакта между насадочными элементами теоретически должен наступить порог перколяции, т. е. жидкость не сможет протекать через такой слой. В реальных условиях в разделительной колонне произойдет переход от пленочного режима течения жидкости к струйному или капельному, что отразится на эффективности колонны.



Рис. 6. Визуализация изменения решетки нерегулярной насадки с изменением объемной доли катализатора

Таким образом, в результате проведенного исследования была предложена методика определения порога перколяции насадочно-каталитических слоев путем анализа визуализации результатов мультиспиральной компьютерной томографии модельных насыпных слоев. Для смешанных слоев гидрофобного катализатора Pt/СДВБ (размер гранул 0,8–1,2 мм) и гидрофильной насадки СПН 3×3×0,2 мм показано, что максимальное содержание катализатора, при котором достигается порог перколяции, составляет 14–20 об. %. При 20 об. % катализатора был определен диаметр агломератов частиц катализатора, который по разным оценкам составил 1,83–2,10 мм. Полученное значение совпадает с эквивалентным диаметром применяемых насадочных элементов (1,95 мм). Эти исследования актуальны для моделирования гидродинамики в колоннах со смешанным слоем катализатора и насадки.

Список литературы

1. Badreddine A.-A., Henrick P. Very large lattice model of liquid mixing in trickle-beds // *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 1986. Vol. 25, N 1. P. 108–115.
2. Barnett V. A simple random walk on parallel axes moving at different rates // *J. Appl. Probab.* 1975. Vol. 12, N 3. P. 466–476.
3. Daw C. S., Halow J. Random walk model for biomass particle mixing in bubbling fluidized beds // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2014. Vol. 53, N 41. P. 15836–15844.
4. Platzer B. Hydrodynamics of trickle-beds. The percolation theory // *Chem. React. Des. Technol.* 1986. Vol. 82, N 8. P. 539–578.
5. Kraub T., Hofmann H. Some experiences with the application of the percolation concept for modelling trickle-bed fluid dynamics // *Chem. Eng. Process.* 1994. Vol. 33, N 2. P. 67–72.
6. Gorshkova E. et al. Three-phase CFD-model for trickle bed reactors // *Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 2012. Vol. 13, N 6. P. 397–404.
7. Amini Y., Nasr Esfahany M. CFD simulation of the structured packings: a review // *Sep. Sci. Technol.* 2019. Vol. 54, N 15. P. 2536–2554.