



národní  
úložiště  
šedé  
literatury

## **Vliv hydrodynamiky na HDS testy ve zkrápěném reaktoru**

Tukač, V.  
2012

Dostupný z <http://www.nusl.cz/ntk/nusl-112736>

Dílo je chráněno podle autorského zákona č. 121/2000 Sb.

Tento dokument byl stažen z Národního úložiště šedé literatury (NUŠL).

Datum stažení: 23.04.2024

Další dokumenty můžete najít prostřednictvím vyhledávacího rozhraní [nusl.cz](http://nusl.cz) .

## Vliv hydrodynamiky na HDS testy ve zkrápěném reaktoru

doc. Ing. Vratislav Tukač, CSc.<sup>a</sup>, Ing. Aneta Prokešová<sup>a</sup>, prof. Ing. Jirí Hamík, DrSc.<sup>a</sup>,  
Ing. Michal Zbuzek<sup>b</sup>, Ing. David Kubíčka PhD.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5,  
166 28 Praha 6, ČR, [vratislav.tukac@vscht.cz](mailto:vratislav.tukac@vscht.cz)

<sup>b</sup> Výzkumný ústav anorganické chemie, a.s. - UniCRE, Revoluční 84, 400 01 Ústí n. Labem,  
ČR, [michal.zbuzek@vuanch.cz](mailto:michal.zbuzek@vuanch.cz)

### Úvod

Současné nároky na hluboké odsíření motorových paliv na úroveň 10 ppm obsahu síry vedou ke hledání stále aktivnějších a stabilnějších katalyzátorů. Dlouhodobé testování aktivivity odsířovacích katalyzátorů se provádí v kontinuálních zkrápěných reaktorech. Chování těchto reaktorů je značně ovlivněno hydrodynamikou toku fázi, strukturou a případným ředěním vrstvy katalyzátoru a také transportem hmoty a tepla.

Cílem práce bylo vyhodnocení parametru toku plynné a kapalně fáze v HDS testovacím laboratorním zkrápěném reaktoru a nalezení takových podmínek, aby byl vliv transportních dějů na experimentální měření minimální.

Mezi nejrozšířenější katalytické procesy patří hydrorafinace. Cílem hydrogenační rafinace je odstranění nežádoucí látky způsobující otravu katalyzátorů v různých navazujících výrobcích, nestabilitu produktů, jejich korozivnost, toxicitu apod. Užívá se jí ke zlepšení kvality řady ropných destilátů – tryskových paliv a bílých olejů, naftenických rozpouštědel, benzinových a petrolejových produktů, viskózních mazacích olejů, a těžších frakcí až po vakuové destiláty. Reakce se provádí za středně vysokých tlaků a vyšších teplot za přítomnosti katalyzátorů, které zejména určují výsledek procesu. Při výběru vhodného katalyzátoru jsou kladeny nejvyšší požadavky na jeho aktivitu, selektivitu a stabilitu vlastností. Pro porovnání vlastností a kvalit různých katalyzátorů slouží průtočné nebo diskontinuální aparatury, konstruované do různé vysokých tlaků a teplot. Při hydrorafinačních reakcích se reakční podmínky procesu volí podle použitého katalyzátoru a druhu zpracovávané směsi. Lze je charakterizovat teplotou, která se pohybuje mezi 150 °C až 500 °C, provozním tlakem 0,5 MPa až 19 MPa a průtokem rafinované směsi 1,5 h<sup>-1</sup> až 2,0 h<sup>-1</sup> (vztaženo na objem lože katalyzátoru). Za podmínek procesu dochází částečně k hydrogenačním nenasycených vazeb a k hydrogenolyze méně pevných vazeb typu C-S, C-N a C-O.

V posledních letech se stále zpřísňují evropské direktivy pro postupné snižování obsahu těchto sloučenin v palivech. Na základě nařízení EURO 5 od 1.1.2009 smí obsah síry v motorových palivech činit pouze 10 mg/kg. Surová ropa obsahuje široké spektrum sloučenin síry s rozdílnými body varu. Jejich odstranění vyžaduje zvláštní zpracování, přesto však není kompletní, z důvodu technických a ekonomických omezení.

Jakákoli frakce plynového oleje obsahuje velké množství různých látek jak nasyčených tak nenasycených uhlovodíků, různých typů simatých, dusíkatých a kyslíkatých látek. Proto není jednoduše vypracovat podrobný kinetický model pro hydrogenaci. Z tohoto důvodu, pokud jde o simulaci laboratorního reaktoru, se předpokládá, že frakce je složena z příslušných nenasycených a nasyčených uhlovodíků a sirmých pseudokomponent.

Pro odhad kinetických parametrů byl v práci Bellose a Papayannakose<sup>1</sup> použit zjednodušený matematický model. Kinetická rovnice (1) pro odstraňování síry závisí na parciálním tlaku vodíku a sulfanu v plynné fázi a je n-tého řádu s ohledem na koncentraci síry. S cílem popsat spotřebu vodíku, CHT je považována za maximální možnou specifickou spotřebu vodíku a CH je reálná specifická spotřeba vodíku po určité době hydrogenace. Rovnice spotřeby vodíku je přímo úměrná druhé mocnině rozdílu (CHT – CH).

$$R_{HDS} = K_S \cdot e^{-\frac{H_S}{RT}} \cdot \frac{P_{H_2} \cdot C_S^2}{1 + K_1 P_{H_2} + S} \quad (1)$$

$$R_{HDT} = K_S \cdot e^{-\frac{K_S}{RT}} \cdot \frac{P_{H_2S} (CHT - CH)^2}{1 + K_1 \cdot P_{H_2S}} \quad (2)$$

Popis hmotnostní bilance založené na zkrápěném toku pro odstraňování síry je popsán rovnicí (3) a rovnice (4) je hmotnostní bilance pro produkci sulfanu.

$$M_L \frac{dC_S}{dMC} = -R_{HDS} \quad (3)$$

$$\frac{dN_{H_2S}}{dMC} = R_{HDS} \frac{10^{-6}}{32} \quad (4)$$

Při navrhování a provozu katalytických reaktorů je nutné brát v úvahu postupnou ztrátu aktivity katalyzátoru po dobu jeho životnosti. Širokou pestrost mechanismů a model deaktivace katalyzátoru popisují Butt, Carberry a Schloser<sup>2</sup>. Aktivitu katalyzátoru v daném čase  $a(t)$  lze definovat jako podíl rychlosti reakce na katalyzátoru v čase  $t$ , ku rychlosti na čerstvém katalyzátoru.

$$a(t) = \frac{-r_A'(a)}{-r_A'(t=0)} \quad (5)$$

$$-r_A' = [k(T)]f_n(C_A, C_B, \dots, C_P)] \quad (6)$$

V řadě katalytických procesů je možné zvýšením teploty kompenzovat pokles aktivity. Rychlost deaktivace katalyzátoru,  $r_d$ , může být vyjádřena

$$r_d = -\frac{da}{dt} = p[a(t)]k_d'(T)q(C_A, C_B, \dots, C_P)] \quad (7)$$

Funkce členu aktivity,  $p[a(t)]$ , v rovnici podílu může, jak můžeme vidět nabývat různých forem. Například pro rozklad 1. řádu

$$p(a) = a \quad (8)$$

a pro reakci rozkladu 2. řádu

$$p(a) = a^2 \quad (9)$$

Zejména funkce,  $p(a)$ , se bude lišit podle reakci a příčiny nebo mechanismem u deaktivace. Příčiny či kategorie jsou celkem tři, do kterých je tradičně ztráta katalytické aktivity rozdělena a to: slinování neboli státnutí, znečištění nebo zakoksovování a otrava katalyzátoru.

Studiem a popisem deaktivace hydrosulfurizačních katalyzátorů a mechanismem deaktivace se zabývá mnoho autorů. Pro HDS experimenty se používají různé typy reaktorů a to jak vsádkové tak reaktory se zkrápěným ložem, nebo vzestupným tokem fázi. Poměrné zmenšení reaktorů má mnoho výhod, nejdůležitější z nich jsou menší nároky na vybavení a cena, méně spotřebovaného materiálu a tím také nižší potřeba katalyzátoru na testy.

Hlavním problémem malých laboratorních jednotek je, že průtoky plynu a kapaliny jsou mnohem nižší, než v průmyslových jednotkách, přestože řada z nich pracuje za stejné objemové rychlosti a poměru plyn/nástřik rychlosti jako průmyslové jednotky. Výsledkem jsou problémy s dynamikou kapaliny stejně jako vliv stěn a nedokonalé smočení katalyzátoru, které se objevují. Cílem výzkumu bylo najít nové cesty pro eliminaci tohoto chování. Toto lze řešit použitím ředěného lože katalyzátoru. Neidealitý, jako je vliv stěn, nízké využití katalyzátoru, jeho nedokonalé smočení a axiální promíchávání lze minimalizovat ředěním katalyzátoru pomocí inertních částic o malém průměru. Lepší vlastnosti ředěného katalytického lože za snížené rychlosti toku fázi jsou připisovány omezené axiální disperzi kapaliny a mnohem vyšší zádrži kapaliny. Toto vede k lepšímu smočení lože a lepšímu využití katalyzátoru.

Katalytické hydrorafinace jsou jedny z nejdůležitějších procesů zpracování ropy v petrolejářském průmyslu. Během hydrorafinaci probíhají jak hydrogenolyzy sirných (hydrosulfurizace), dusíkatých

(hydrodenitrogenace) látek, tak částečně i hydrokrakování a hydrogenace sloučenin a hydrodeoxygenace.

Zkrápěné reaktory patří díky své zpracovatelské kapacitě k nejpoužívanějším reaktorům, nejvíce analýz těchto typů reaktorů byly prezentovány Dudukovicem a kol.<sup>3</sup> Někteří autoři použili pro popis pseudohomogenní modely zanedbávající transport mezi plynnou a kapalinou fází a katalyzátorem a jiní brali v úvahu přenos hmoty mezi fázemi. Většina modelů bere v úvahu reakce HDS, které jsou také nejvíce studovanými reakcemi a zahrnují jednu ze sloučenin znečišťující životní prostředí. Společně řešení jsou založena na rovnici deaktivace katalyzátoru nebo Langmuir-Hinshelwoodových kinetických modelech. Nicméně modely zahrnující reakce jako jsou hydrogenace aromátů (HDA) a hydrodenitrogenace (HDN) jsou v literatuře vzácné. Avšak tyto reakce jsou také neméně důležité, jelikož jako v případě síry jsou stanoveny i maximální limity obsahu aromátů a dusíku.

## EXPERIMENTY

Experimenty s rozdělením dob prodlení stopovací látky v modelovém laboratorním reaktoru se zřetelnou vrstvou katalyzátoru poskytlý podklady pro vyhodnocení hydrodynamických parametrů, jako jsou tlaková ztráta, doba prodlení, zádržť kapaliny a míra podélného promíchávání v reaktoru. Byly testovány různé katalyzátory a velikosti zrn a množství ředicího inertu. Podmínky pro zanedbatelné vlivy nedokonalého smočení katalyzátoru, nerovnoměrné distribuce kapaliny a podélného a radiálního promíchávání byly stanoveny na základě publikovaných kritérií. Modelování dvoufázového toku vrstvou katalyzátoru s hydrodesulfurizační reakcí bylo provedeno pseudohomogenním modelem v programu Aspen Plus.

Pro testování zrychlené deaktivace hydrodesulfurizačních katalyzátorů bude používán laboratorní zkrápěný reaktor o vnitřním průměru 30 mm, který se nachází ve Výzkumné základně UNIPETROL RPA v Livínově. Reaktor je zahříván promíchávanou solnou lázní. Uvnitř reaktoru jsou termočlánky, které zaznamenávají teplotu podél lože katalyzátoru. Termočlánky jsou umístěny podél lože katalyzátoru a to na začátku, uprostřed a ve spodní vrstvě lože katalyzátoru. Nástřik plynu a kapaliny je zajištěn shora a před vstupem do reaktoru je smíchán nástřik kapaliny a plynu. Do jednotky je dodáván technický vodík o čistotě >99%. Nástřik plynu je kontrolován a měřen hmotnostním průtokoměrem (Brooks). Na výstupu z reaktoru je směs produktů ochlazena a vedena do nízkotlakových separátorů. Kapalně produkty jsou shromažďovány v jednom ze separátorů po dobu 4 až 6 hodin. Po izolaci jsou produkty převedeny dál do vzorkovací lahve a následně analyzovány. Množství katalyzátoru je 100 ml. Katalyzátor je doplněn inertním materiálem SiC a to z důvodu, zlepšení tepelné vodivosti lože, rovnoměrnější distribuce kapaliny a eliminaci nedokonalého smočení lože katalyzátoru. Velikost částic inertního materiálu SiC je 1 – 2 mm. Nad ředěným ložem katalyzátoru je umístěna vrstva inertního materiálu SiC v množství 215 ml. Lože katalyzátoru je rozděleno do dvou částí a to, první část je ředěna 5 ml katalyzátoru CoMo + 10 ml SiC 0,1 mm a druhá část je ředěna v poměru 10 ml katalyzátoru + 10 ml SiC 0,1 mm. Na dně reaktoru je navrstveno 10 ml SiC o velikosti částic 2 – 3 mm, silikonová vlna a 10 ml SiC o velikosti částic 1 – 2 mm.

Modelový hydrodynamický reaktor byl tvořen skleněnou trubkou o průměru 30,4 mm a délce 765 mm. Opět byly použity 3 elektrody ve tvaru kovových kroužků po vnitřním obvodu reaktoru a jednou společnou elektrodou, umístěnou v ose kolony. Přívod kapaliny i plynu byl centrálně umístěnou tryskou. Byla použita dávkovací smyčka o objemu 52 µl a konduktometry byly nastaveny na následující hodnoty: pro elektrodu 1: 300 µS.cm<sup>-1</sup>, pro elektrodu 2: 3 mS.cm<sup>-1</sup> a pro elektrodu 3: 30 mS.cm<sup>-1</sup>. Kapalina byla do reaktoru dávkována kontinuálně pomocí HPLC čerpadla, průtok byl nastaven dle požadavků experimentu. Naměřená data byla zaznamenávána pomocí programu Clarity a vyhodnocována programem Matlab. Vzduch byl přiváděn kontinuálně přes hmotnostní průtokoměr (FMA 1900 Omega Engineering) a čidlo pro měření tlaku (BD Sensor) do horní části reaktoru v místě distributoru kapaliny.

## VÝSLLEDKY A DISKUSE

Na základě vyhodnocení laboratorních měření byly určeny tlaková ztráta a množství kapaliny a Peceletova kritéria ve zřetelném loži katalyzátoru. Byly vymezeny hranice zanedbatelného vlivu

transportních jevů na výsledky aktivních měření. Simulační modely byly použity pro srovnání s provedenými pokusy ovlivnění HDS aktivivity katalyzátorů s dobrou shodou.

Jedním z faktorů, které mají vliv na míru axiální disperze, je velikost částic výplně reaktoru. Pokud jsou přítomné částice příliš velké vzhledem k vnitřnímu průměru reaktoru či jeho dělice, může docházet k významnému uplatnění axiální disperze a následné odchylce od ideálního pístového toku.

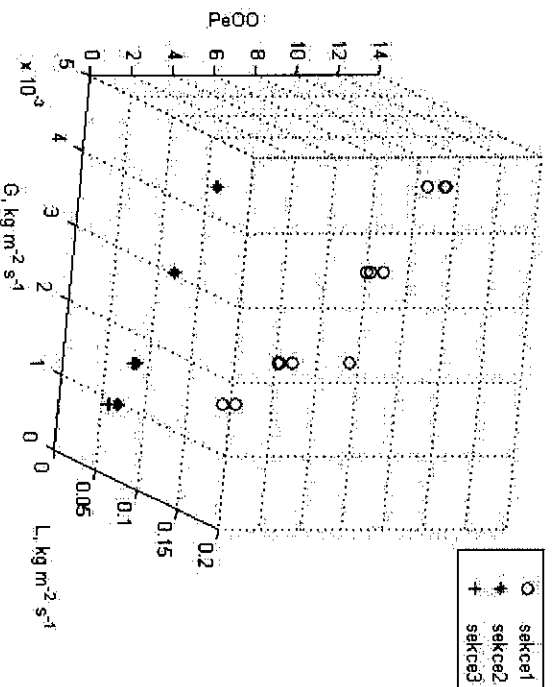
U obou reaktorů byl použit stejný typ a velikost výplně, a to jak katalyzátor, tak inertní částice. Vzhledem k poměrně malému vnitřnímu průměru reaktoru (30 mm) a velikosti částic katalyzátoru (1,2 mm) a inertu (0,15 a 1,5 mm) vyhovují dobře podmínice, pro katalyzátor rovno 23:

$$\frac{D}{d_p} \geq 10$$

v tomto případě byl poměr vnitřního průměru reaktoru ku velikosti částice větší než požadovaných 10 pro spodní zónu vyplněnou katalyzátorem a jemným SiC, činila hodnota 200, pro vrchní zónu, kde výplň tvořil pouze hrubší SiC o průměru 1-2 mm, byl poměr D/d<sub>p</sub> roven 20. Také poměr délky katalytického lože ku velikosti částice katalyzátoru nabýval v tomto případě větších hodnot (1667) než požadované 100.

$$\frac{L}{d_p} \geq 100$$

Axiální promíchávání v loži reaktoru je charakterizováno Pecletovým kritériem. Byl vyhodnocena rovnice popisující Pecletovo kritérium s otevřenými okrajovými podmínkami (PeOO). Na obrázku 1 je zobrazena závislost PeOO na mimovrstvé rychlosti kapaliny a plynu v loži zředěného katalyzátoru. Vzhledem k odlišným vlastnostem výplně reaktoru v jeho jednotlivých částech byly také tyto části samostatně vyhodnocovány a následně zobrazeny v grafu. PeOO 1 charakterizuje vstupní část reaktoru (nadloží) od vstupu kapaliny a plynu do reaktoru až po první elektrodu, kdy je lože tvořeno 1-2 mm SiC. Jak je vidět, v tomto případě nabývá Pecletovo číslo největších hodnot a také vykazuje nejvýraznější závislost na mimovrstvé rychlosti kapaliny a plynu, kdy má rostoucí tendenci s rostoucími průtoky. V první zóně obsahující katalyzátor a inertní SiC o velikosti 0,1-0,15 mm zředěné v poměru 1:2 je hodnota Pecletova čísla menší než v hrubozrnném nadloží, a zároveň nabývá nepatrně vyšších hodnot než v poslední zóně reaktoru, která je tvořena katalyzátorem a SiC v poměru 1:1. Hodnoty Pecletova kritéria závisí také na výšce vrstvy, tedy nejvyšší vrstvě odpovídá největší hodnota.



Obr. 1: Závislost PeOO na mimovrstvé rychlosti kapaliny a plynu.

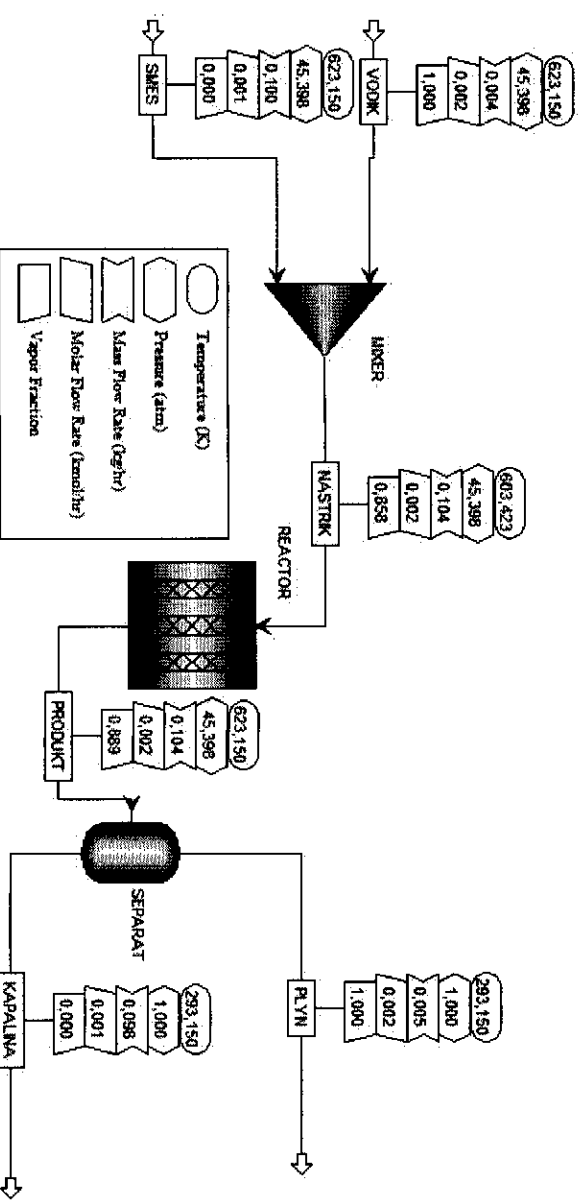
Chování zkrápěného reaktoru je významně ovlivňováno strukturou a uspořádáním lože katalyzátoru. V závislosti na něm může docházet k nežádoucím jevům jako je nedokonalé smočení částic katalyzátoru, výraznému stěnovému toku, kanálikovému obtoku katalytických částic a nárůstu axiální disperze odchýlením režimu reaktoru od ideálního pistového toku. Tyto jevy jsou obzvláště výrazné v případě použití neúměrně velkých částic katalyzátoru vzhledem k vnitřnímu průměru reaktoru. Pro předcházení těmto jevům je vhodné ředit katalytické lože inertními částicemi malého průměru, které vyplní mezery mezi částicemi katalyzátoru a zajistí rovnoměrnější tok ložem. Tím se zlepší smočení katalytických částic, zrovnoměří distribuce kapaliny a dojde k potlačení nežádoucí axiální disperze. Hydrodynamické poměry v loži byly sledovány pomocí metody distribuce dob prodlení odezvy na vzruch po pulzní změně vodivosti toku kapaliny následkem značkovací vodivé kapaliny. Pro zpracování získaných charakteristik byl použit PD model uvažující pístový tok s axiální disperzí. Pomocí výpočtu první a druhých momentů jednotlivých sekcí lože katalyzátoru byla získána Pecletova čísla, následně výpočtem zjištěna zadrž kapalin a další parametry lože.

Vzhledem k rozdělení reaktoru do sekcí, z nichž každá měla rozdílné složení z hlediska druhu nebo množství inertní látky a katalyzátoru, byla následně získaná data vyhodnocována zvlášť pro každou sekci, s přihlédnutím právě k jejich rozdílným vlastnostem. Byl pozorován výrazný vliv axiálního promíchávání v první sekci reaktoru, která obsahovala pouze hrubozrnný SiC o velikosti částic 1-2 mm. Naopak spodní dvě sekce lože, obsahující katalyzátor s jemnozrnným SiC o velikosti částic 0,1-0,15 mm vykazovaly nízké hodnoty Pecletova čísla. Také vliv hmotnostního toku kapaliny byl výraznější pro nadložní část, kde docházelo s rostoucím tokem kapaliny k výraznějšímu růstu Pecletova čísla.

Pro simulaci zkrápěného reaktoru za testovacích podmínek byl vytvořen pseudohomogenní kinetický model reaktoru v programu Aspen Plus V7.1. Parametry pro výpočet zjednodušeného simulačního schématu, modelem zkrápěného reaktoru byly převzaty pro metodu testování dlouhodobé aktivity HDS katalyzátorů. V tabulce I, jsou uvedeny standardní podmínky pro zkrápěný model reaktoru.

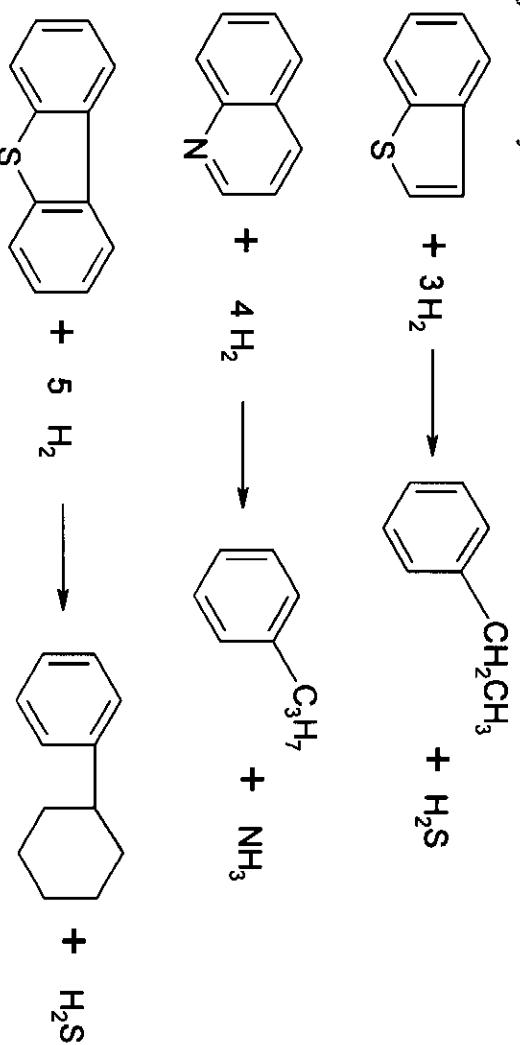
Tab. I: Standardní parametry simulačního modelu reaktoru.

Parametry testování kinetického modelu reaktoru					
	Tlak [MPa]	V katalyzátor [ml]	Nástřik [g/h]	Nástřik H <sub>2</sub> [m <sup>3</sup> H <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> suroviny]	Teplota [°C]
Standardní podmínky	4,6	100	100	350	350



Obr. 2: Schema kinetický model reaktoru vytvořený v programu AspenPlus V7.1

Pro probíhající hydrogenolytické reakce byly použity stechiometrické rovnice, jež jsou znázorněny na obrázku 3. Pro ověření vlastnosti modelu byla použita kinetická data uvedená v literatuře<sup>4</sup> a pro reakční komponenty bylo uvažováno neideální chování komponent. Hodnoty kinetických parametrů jsou uvedeny v tabulce II.



Obr. 2: Stechiometrické rovnice použité v modelech

Tab. VII: Hodnoty rychlostních konstant pro jednotlivé reakce<sup>4</sup>.

Reakce	k [m <sup>3</sup> /(kg <sub>cat</sub> s)]
Benzothiofen - Ethylbenzen	8,11E-04
Chinolin – N-Propylbenzen	1,37E-05
Dibenzothiufen – Cyklohexylbenzen	7,38E-05

Simulační model zkrápněného reaktoru předpokládá neideální chování reakčních komponent. V programu Aspen Plus byla vybrána základní funkce NRTL, jež simuluje neideální chování složek. Stechiometrické modely použité v modelech (kinetický, rovnovážný) byly počítány dle mocninové kinetiky prvního řádu.

## ZÁVĚR

Chování zkrápněného reaktoru je významně ovlivňováno strukturou a uspořádáním lože katalyzátoru. V závislosti na něm může docházet k nežádoucím jevům jako je nedokonalé smočení částic katalyzátoru, výraznému stěnovému toku, kanálkovému obtoku katalytických částic a nárůstu axiální disperze odchycením režimu reaktoru od ideálního pístového toku. Tyto jevy jsou obzvláště výrazné v případě použití neúměrně velkých částic katalyzátoru vzhledem k vnitřnímu průměru reaktoru. Pro předcházení těmto jevům je vhodné feedit katalytické lože inertními částicemi malého průměru, které vyplní mezery mezi částicemi katalyzátoru a zajistí rovnoměrnější tok ložem. Tím se zlepší smočení katalytických částic, zrovnoměrní distribuce kapaliny a dojde k potlačení nežádoucí axiální disperze. Hydrodynamické poměry v loži byly sledovány pomocí metody distribuce dob prodlílení odezvou na vzruch po pulzní změně vodivosti toku kapaliny nástřikem značkovací vodivé kapaliny. Pro zpracování získaných charakteristik byl použit PD model uvažující pístový tok s axiální disperzí. Pomocí výpočtů prvních a druhých momentů jednotlivých sekcí lože katalyzátoru byla získána Pecletova čísla, následně výpočtem zjištěna zádrž kapaliny a další parametry lože.

Vzhledem k rozdělení reaktoru do sekcí, z nichž každá má rozdílné složení z hlediska druhu nebo množství inertní látky a katalyzátoru, byla následně získaná data vyhodnocována zvlášť pro každou sekci, s přihlédnutím právě k jejich rozdílným vlastnostem. Byl pozorován výrazný vliv axiálního promíchávání v první sekci reaktoru, která obsahovala pouze hrubozrnný SiC o velikosti částic 1-2 mm. Naopak spodní dvě sekce lože, obsahující katalyzátor s jemnozrnným SiC o velikosti částic 0,1-

0,15 mm vykazovaly nízké hodnoty Pecletova čísla. Také vliv lmotnostního toku kapaliny byl výraznější pro nadložní část, kde docházelo s rostoucím tokem kapaliny k výraznějšímu růstu Pecletova čísla.

Byl vytvořen pseudohomogenní model zkrápěného reaktoru. Model byl vytvořen v počítačovém prostředí Aspen Plus. Pro ověření vlastností vytvořeného pseudohomogenního modelu reaktoru byla použita publikovaná kinetická data a uvažováno neideální chování reakčních komponent. Jako modelová reakční směs byla užita hypotetická směs reprezentativních složek skutečné motorové nafty, jež svými vlastnostmi je blízká realitě. Pro ověření vlastností hypotetické směsi motorové nafty byla vypočtena destilační křivka pro porovnání vlastností hypotetické směsi a směsi, s níž bude probíhat testování. Na základě shody mezi destilační křivkou modelu a skutečnou motorovou naftou byla modelová směs použita k výpočtům simulačního modelu zkrápěného reaktoru.

Parametry pro výpočet zjednodušeného simulačního schématu, byly převzaty s ohledem na zadání pro metodiku testování dlouhodobé aktivity HDS katalyzátorů.

Výpočty byly provedeny pro soubor testovacích teplot a tlaků. Výsledky byly porovnány z hlediska úbytku sloučenin síry a dusíku. Pro porovnání s kinetickým modelem reaktoru byl vytvořen také model rovnovážného modelu reaktoru a porovnány vypočtené výsledky za standardních podmínek a to 350°C a absolutním tlaku 4,6 MPa.

#### **Poděkování:**

Projekt byl řešen za podpory programu TIP ev.č. FR-TI3/084, Ministerstva průmyslu a obchodu ČR, Operačního programu Věda a výzkum pro Inovace EU-MŠMT č. CZ.1.05./2.1.00/03.0071 a Účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT č. 21/2012.

#### **LITERATURA**

1. BELLOS, G.D.; PAPAYANNAKOS, N.G. The use of a three phase microreactor to investigate HDS kinetics: *Catalysis Today*. (2003), 79 - 80, 349 - 355.
2. BUTT J.B., Adv. Chem, 109, 209 (1972); CARBERRY J.J., *Chemical and Catalytic Reactor Engineering* (New York: McGraw-Hill, 1976); SCHLOSSER E. G., *Int. Chem. Eng.* (1977), 17, 41
3. DUDUKOVIC, M. P.; LARACHI, F.; MILLS, P. L. *Catal. Rev.* (2002), 44, 123-246.
4. FROMENT, G.F.; DEPAUW, G.A.; VANRYSSSELBERGHE, V. *Kinetic Modeling and Reactor Simulation in Hydrodesulfurization of Oil Fractions*. *Ind. Eng. Chem. Res.*. (1994), 33, 2975-2988.