

УДК 661.961.621
 DOI 10.17513/snt.40649

ПРИМЕНЕНИЕ ТРИЖДЫ ПЕРИОДИЧЕСКИХ МИНИМАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ В КАЧЕСТВЕ КАТАЛИЗАТОРОВ ПАРОВОЙ КОНВЕРСИИ МЕТАНА

Мустафин Р.М., Зинина С.А., Кузнецов И.Е.

*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
 «Самарский государственный технический университет», Самара, Российская Федерация,
 e-mail: ravid-bk211@mail.ru*

Развитие водородной энергетики, призванной заменить ископаемое топливо, требует совершенствования технологий. Основной промышленный метод получения водорода – паровая конверсия метана, где эффективность катализаторов критически зависит от их формы. Целью работы является сравнение инновационных форм катализатора на основе трижды периодических минимальных поверхностей (TPMS) с традиционными для формирования рекомендаций по изготовлению катализаторов. В работе проанализированы три формы, основанные на трижды периодических минимальных поверхностях: Schwarz – P (Primitive), Schwarz – PL (Primitive Lattice), Neovius и одна форма катализатора в виде цилиндра. В качестве метода исследования выбрано численное моделирование (CFD) реактора с различными формами катализатора. В результатах представлены контуры распределения температур, мольного содержания водорода и графики зависимости выхода водорода и перепада давления от критерия Рейнольдса. Сделан вывод, что использование форм, основанных на трижды периодических минимальных поверхностях, дает прирост к конверсии метана и выходу водорода по сравнению с цилиндрическими формами. Самая высокая степень конверсии метана была обнаружена на частицах формы Neovius. Однако катализаторы в виде трижды периодических минимальных поверхностей создают высокое гидравлическое сопротивление. Внедрение подобных форм катализатора должно сопровождаться дополнительным технико-экономическим анализом.

Ключевые слова: возобновляемая энергетика, водород, паровая конверсия метана, CFD-моделирование, Ansys Fluent, TPMS

APPLICATION OF THREE TIMES PERIODIC MINIMUM SURFACES AS CATALYST FOR METHANE STEAM CONVERSION

Mustafin R.M., Zinina S.A., Kuznetsov I.E.

*Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education
 “Samara State Technical University”, Samara, Russian Federation,
 e-mail: ravid-bk211@mail.ru*

The development of hydrogen energy, designed to replace fossil fuels, requires improved technology. The main industrial method of producing hydrogen is steam conversion of methane, where the effectiveness of catalysts critically depends on their shape. The aim of the work is to compare innovative catalyst forms based on thrice periodic minimum surfaces (TPMS) with traditional ones to form recommendations for the manufacture of catalysts. The paper analyzes three shapes based on three times periodic minimal surfaces: Schwarz – P (“Primitive”), Schwarz – PL (“Primitive Lattice”), Neovius and one shape of the catalyst in the form of a cylinder. Numerical simulation (CFD) of a reactor with various forms of catalyst was chosen as the research method. The results show the contours of the temperature distribution, molar hydrogen content, and graphs of the dependence of hydrogen yield and pressure drop on the Reynolds criterion. It is concluded that the use of molds based on thrice periodic minimum surfaces provides an increase in methane conversion and hydrogen yield compared to cylindrical molds. The highest degree of methane conversion was found on Neovius particles. However, catalysts in the form of thrice periodic minimum surfaces create high hydraulic resistance. The introduction of such forms of catalyst should be accompanied by additional technical and economic analysis.

Keywords: renewable energy, hydrogen, steam methane reforming, CFD modeling, Ansys Fluent, TPMS

Введение

Разработка эффективного, экологичного и безопасного источника возобновляемой энергии – важнейшая технологическая проблема современной энергетики. В этом контексте водород привлекает всё больше внимания в качестве перспективного топлива и энергоносителя [1].

Современная энергосистема по-прежнему опирается на ископаемое топливо, что является причиной значительных выбросов парниковых газов. Использование водорода позволяет смягчить негативное

воздействие на климат, однако масштабное внедрение водородных технологий сдерживается рядом факторов, связанных с его производством в промышленных объёмах.

Для реализации всего экологического потенциала водорода требуются экономичные и чистые низкоуглеродные методы его получения из возобновляемых источников, а также эффективные технологии очистки и транспортировки. Таким образом, создание устойчивой водородной энергетики сегодня напрямую зависит от решения задач его производства, хранения и конечного ис-

пользования [2; 3]. Сегодня водород производят в основном из ископаемого топлива, чаще всего с помощью каталитической паровой конверсии метана.

Форма катализатора является важным фактором, влияющим на ход реакции паровой конверсии метана. Среди различных форм катализаторов можно выделить традиционные (сфера, цилиндры, кольца Рашига) и инновационные (решетчатые и ТПМП-структуры). Ключевые преимущества ТПМП – значительная удельная площадь поверхности и высокая теплопроводность [4–6]. Непрерывность этих структур также помогает снизить перепады давления, улучшить смешивание реагентов и избежать появления застойных зон [7–9]. Различные типы ТПМП (такие, как Schwarz Primitive [10], Diamond [11], Gyroid [12] и другие) активно исследуются для многих задач. Перечень задач включает эффективный теплоперенос, где ТПМП-структуры превосходят обычные конструкции [13; 14].

Цель исследования – сравнение инновационных форм катализатора на основе трижды периодических минимальных поверхностей (ТПМП) с традиционными

для формирования рекомендаций по изготовлению катализаторов. Для выполнения сравнения была разработана численная модель течения газа с проведением химической реакции в структуре, помещенной в химический реактор.

Материалы и методы исследования

В работе рассматриваются различные формы катализаторов для паровой конверсии метана: ТПМП Schwarz – P (Primitive), Schwarz – PL (Primitive Lattice), Neovius. Эта структура сравнивается с классической цилиндрической формой катализатора.

Моделирование процесса проводилось численными методами в программной среде Ansys Fluent. С его помощью можно проанализировать, как форма катализатора определяет конечную степень конверсии метана и интенсивность образования водорода.

Конструкция смоделированного химического реактора – цилиндрический канал (диаметр 13 мм, длина 130 мм), в центральной части которого расположена катализическая вставка (рис. 1, 2). Входной и выходной участки служат для выравнивания потока и исключения его обратного движения.

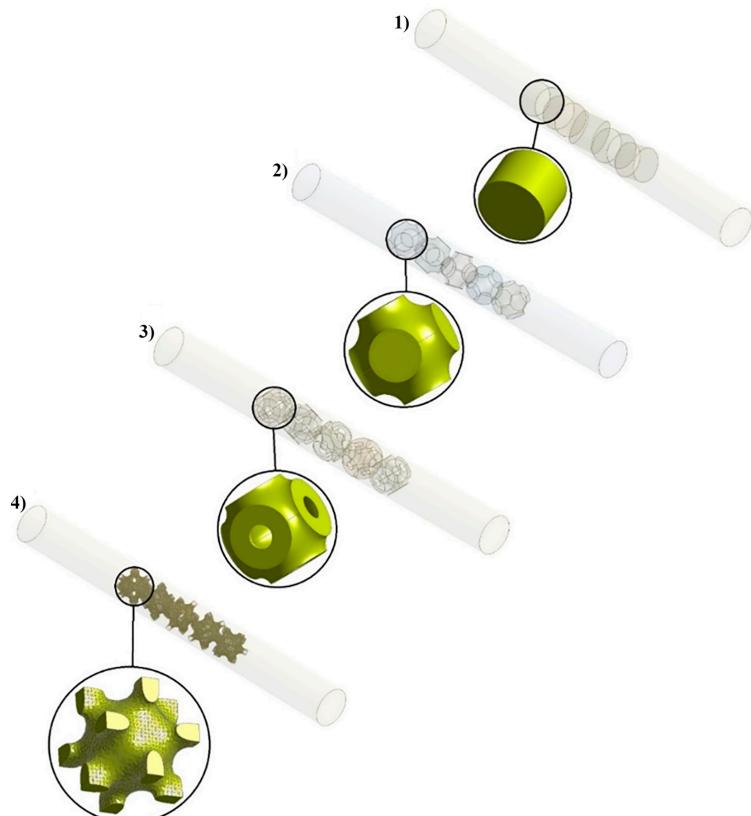
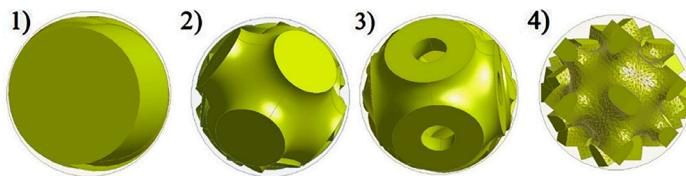


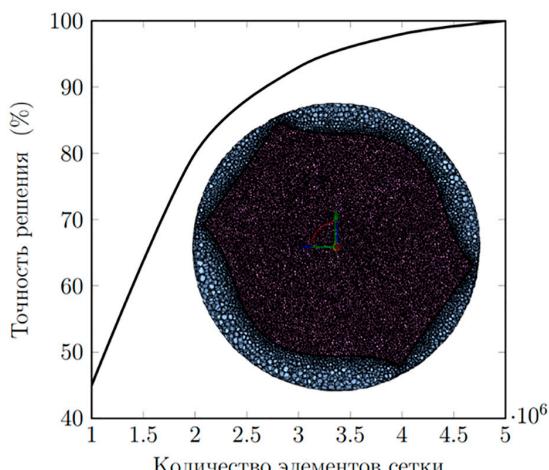
Рис. 1. Геометрия реформера паровой конверсии метана с видом катализатора:
1) цилиндрическая форма катализатора; 2) форма катализатора в виде Schwarz-P;
3) форма катализатора в виде Schwarz-P Lattice; 4) форма катализатора в виде Neovius

Источник: составлено авторами по результатам данного исследования



*Рис. 2. Геометрия реформера паровой конверсии метана, радиальный вид:
1) цилиндрическая форма катализатора; 2) форма катализатора в виде Schwarz-P;
3) форма катализатора в виде Schwarz-PL; 4) форма катализатора в виде Neovius
Источник: составлено авторами по результатам данного исследования*

Вычислительная область была дискретизирована на сеточные элементы, после чего было выполнено исследование сходимости решения по сетке на основе анализа температуры на выходе реактора (рис. 3). Результаты показали, что оптимальным для поставленной задачи является разбиение на 5 миллионов ячеек.



*Рис. 3. Вид сетки и сеточная сходимость
Источник: составлено авторами по результатам данного исследования*

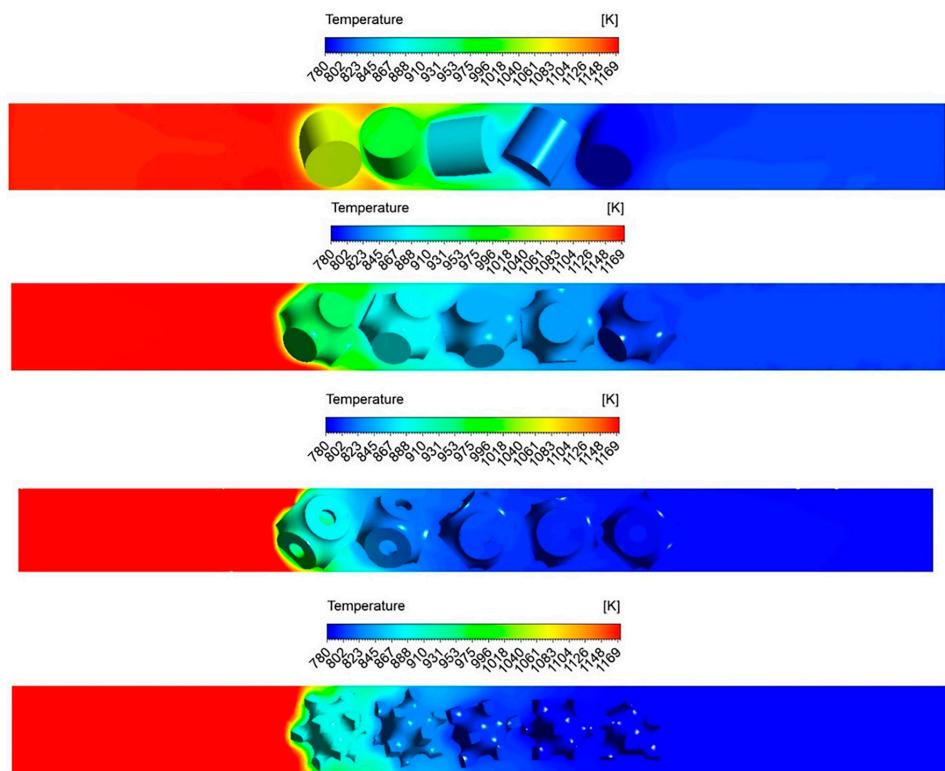
На входном участке модели задавалась газовая смесь метана и водяного пара в мольном соотношении $\text{H}_2\text{O}:\text{CH}_4 = 2:1$ с температурой 900°C и диапазоном входных скоростей от 0,01 до 0,1 м/с. Сравнительный анализ различных геометрий катализаторов проводился при условии равенства их масс. Общая пористость всех катализаторных структур в модели была установлена на уровне 0,44, а материалом для них выбран широко применяемый в промышленности катализатор на основе никеля, нанесенного на оксид алюминия ($\text{Ni}-\text{Al}_2\text{O}_3$). Для описания кинетики химических реакций использовалась пользовательская функция (UDF), реализованная на языке C, в основу которой легла модель, предложенная в работе [15].

Результаты исследования и их обсуждение

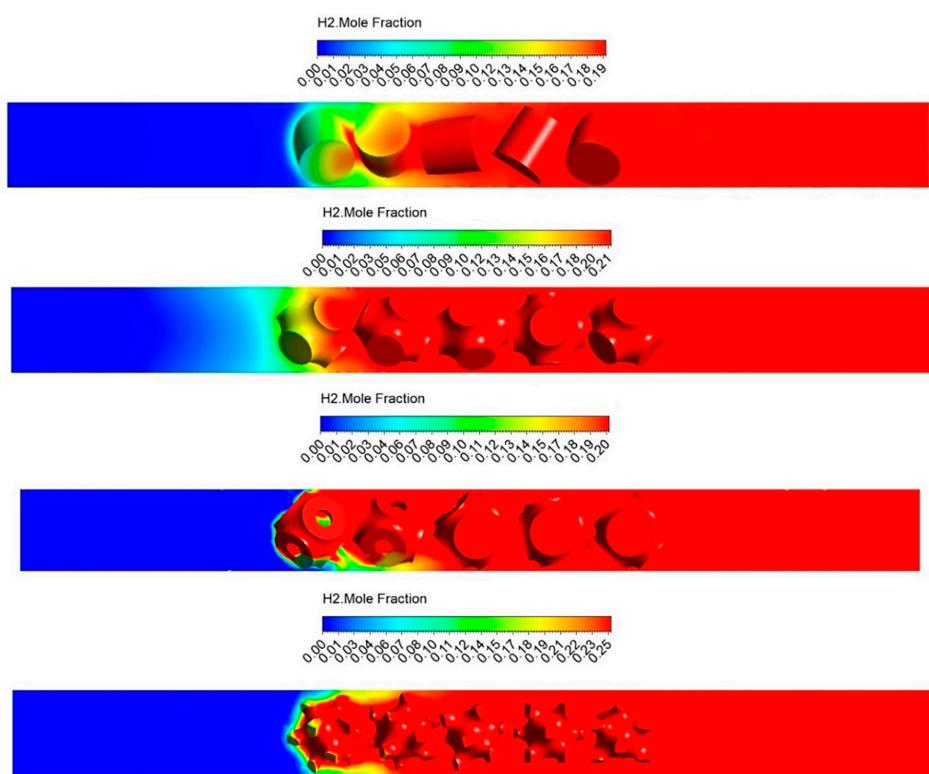
В результате проведенных расчетов были получены контуры распределения температуры для четырех исследуемых конфигураций катализаторов (рис. 4). Анализируя температурное поле на контурах, можно увидеть, что температура на катализаторах типа Schwarz – PL и Neovius снижается интенсивнее. Это может свидетельствовать о высокой скорости протекания паровой конверсии метана в этих катализаторах по сравнению с цилиндрической структурой и конфигурацией Schwarz – P. Вероятной причиной такой разницы являются увеличенная продолжительность контакта реагентов с активной поверхностью и большая эффективная площадь катализа в сложных структурах Schwarz – PL и Neovius.

Как видно из рисунка 5, контуры выхода водорода существенно различаются для четырех исследованных морфологий катализатора. Катализаторы ТПМП демонстрируют пиковое значение выхода, тогда как цилиндрические образцы – наименьшее. Также наблюдается сдвиг начала реакции: на ТПМП она стартует раньше. Причина кроется в геометрии: форма ТПМП способствует большей задержке реагентов, ускоряя инициирование процесса, в то время как обтекаемые цилиндры оказывают меньшее гидродинамическое сопротивление, что отодвигает начало активного выделения водорода.

Результатом проведенного моделирования являются зависимости степени конверсии метана и перепада давления в реформере от формы катализатора (рис. 6). Также на графике степени конверсии метана выделены экспериментальные данные [15], которые использовались для проведения валидации данных, полученных в результате численного моделирования. Использование в качестве катализаторов форм, основанных на трижды периодических минимальных поверхностях, показывает существенный прирост к конверсии метана порядка 13-25%. Однако вместе с тем их использование увеличивает гидравлическое сопротивление на 15-20%.



*Рис. 4. Контуры температуры для трех форм катализаторов:
ТПМП Schwarz – P (Primitive), Schwarz – PL (Primitive Lattice), Neovius, цилиндры, сферы
Источник: составлено авторами по результатам данного исследования*



*Рис. 5. Контуры конверсии метана для трех форм катализаторов:
ТПМП Шварца P, цилиндры, сферы
Источник: составлено авторами по результатам данного исследования*

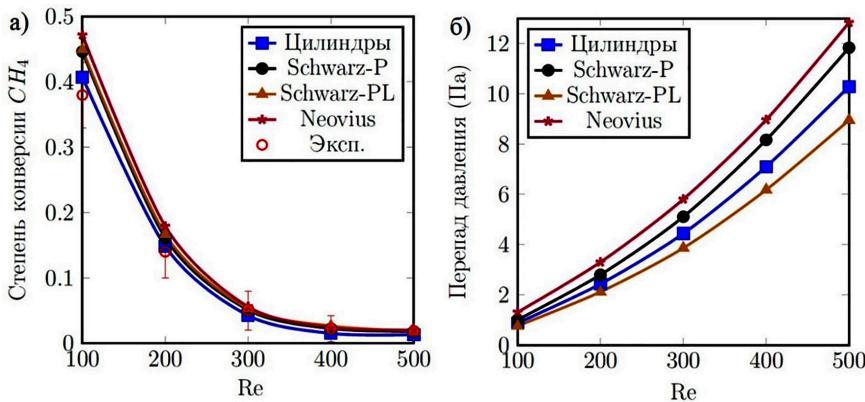


Рис. 6. Результаты проведенного моделирования:

- а) зависимость конверсии метана от Re , для различных форм катализаторов;
 б) зависимость перепада давления в реформере от Re , для различных форм катализаторов
 Источник: составлено авторами по результатам данного исследования

Заключение

Результаты показали большой потенциал в использовании трижды периодических минимальных поверхностей в качестве катализаторов для химических реакций. Эффект от внедрения таких форм в процесс паровой конверсии метана дает прирост к выходу водорода на 13-25%. Но такой прирост сопровождается существенными гидравлическими потерями, что говорит о необходимости проведения технико-экономического анализа.

Список литературы

- Lubitz W., Tumas W. Hydrogen: an overview // Chemical reviews. 2007. Т. 107. № 10. С. 3900-3903. DOI: 10.1021/cr050200z.
- Mena A., Amrouche F., Lounici M.S., Loubar K. Experimental investigation of hydrogen use in dual fuel and like dual fuel mode // Fuel. 2025. Т. 393. С. 135031. DOI: 10.1016/j.fuel.2025.135031.
- Kumar N.R.S., Suryan A., Manju M.S. Hydrogen As An Alternative Aviation Fuel-A Review // Ammonia and Hydrogen for Green Energy Transition. 2024. С. 265-286. DOI: 10.1007/978-981-97-0507-8_12.
- Брагин Д.М., Еремин А.В., Попов А.И., Шульга А.С. Метод определения коэффициента эффективной теплопроводности пористого материала на основе минимальной поверхности типа Schoen's I-WP (R) // Вестник Ивановского государственного энергетического университета. 2023. № 2. С. 61-68. DOI: 10.17588/2072-2672.2023.2.061-068.
- Брагин Д.М., Еремин А.В. Исследование тепловых свойств пористых полимерных материалов на основе минимальных поверхностей Шварца // Инженерный вестник Дона. 2023. № 9 (105). С. 36. EDN: CFTSYPP.
- Ouda M., Al-Ketan O., Sreedhar N., Ali M.I.H., Al-Rub R.K.A., Hong S., Arafat H.A. Novel static mixers based on triply periodic minimal surface (TPMS) architectures // Journal of Environmental Chemical Engineering. 2020. Т. 8. № 5. С. 104289. DOI: 10.1016/j.jece.2020.104289.
- Guan Y., Zhang X., Cao X., Yang H., Wang S., Cao W., He C. Dual-material TPMS metamaterial with high load-bearing capacity and performance stability // International Journal of Mechanical Sciences. 2025. С. 110613. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2025.110613.
- Al-Ketan O., Lee D.W., Rowshan R., Al-Rub R.K.A. Functionally graded and multi-morphology sheet TPMS lattices: Design, manufacturing, and mechanical properties // Journal of the mechanical behavior of biomedical materials. 2020. Т. 102. С. 103520. DOI: 10.1016/j.jmbbm.2019.103520.
- Feng J., Fu J., Yao X., He Y. Triply periodic minimal surface (TPMS) porous structures: from multi-scale design, precise additive manufacturing to multidisciplinary applications // International Journal of Extreme Manufacturing. 2022. Т. 4. № 2. С. 022001. DOI: 10.1088/2631-7990/ac5be6.
- Guo X., Ding J., Li X., Qu S., Song X., Fuh J.Y.H., Zhai W. Enhancement in the mechanical behaviour of a Schwarz Primitive periodic minimal surface lattice structure design // International Journal of Mechanical Sciences. 2022. Т. 216. С. 106977. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2021.106977.
- Tang W., Zhou H., Zeng Y., Yan M., Jiang C., Yang P., Zhao Y. Analysis on the convective heat transfer process and performance evaluation of Triply Periodic Minimal Surface (TPMS) based on Diamond, Gyroid and Iwp // International Journal of Heat and Mass Transfer. 2023. Т. 201. С. 123642. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123642.
- Hu Y., Zhang Z., Zhang Y., Yuan L., Xia R. Torsional Mechanical Behavior of TPMS Porous Structures: Experimental Insights on Diamond, Gyroid, and Schwarz Primitive Designs // Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures. 2025. DOI: 10.1111/fme.70018.
- Ansari D., Duwig C. A gyroid TPMS heat sink for electronic cooling // Energy Conversion and Management. 2024. Т. 319. С. 118918. DOI: 10.1016/j.enconman.2024.118918.
- Dutkowski K., Kruzel M., Rokosz K. Review of the state-of-the-art uses of minimal surfaces in heat transfer // Energies. 2022. Т. 15. № 21. С. 7994. DOI: 10.3390/en15217994.
- Xu J., Froment G.F. Methane steam reforming, methanation and water-gas shift: I. Intrinsic kinetics // AIChE journal. 1989. Т. 35. № 1. С. 88-96. DOI: 10.1002/aic.690350109.

Конфликт интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Conflict of interest: The authors declare that there is no conflict of interest.

Финансирование: Финансовая поддержка осуществлена Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FSSE-2025-0006) в рамках государственного задания Самарского государственного технического университета (создание новых молодёжных лабораторий).

Financing: Financial support was provided by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (topic no. FSSE-2025-0006) within the framework of the state assignment of Samara State Technical University (creation of new youth laboratories).