УДК 662.612.324

# ОСОБЕННОСТИ ПРОТЕКАНИЯ ПРОЦЕССА ТЕПЛО- И МАССООБМЕНА В СЛОЕ КАТАЛИЗАТОРА

Д.У.Юнусова, А.А.Юнусова, А.М.Бренер
ЮКГУ им.М.Ауезова, г.Шымкент

Учет зависимости констант скоростей реакции от температуры является более существенным при расчете процесса массообмена во всем слое катализатора, т.к. температурный эффект при этом может суммироваться.

Для установления закономерностей массообмена в слое катализатора рассмотрим адиабатический реактор, для которого уравнения тепломассопереноса в слое можно записать в виде:

$$\frac{\partial C_X}{\partial t} = D_X \frac{\partial^2 C_X}{\partial z^2} + \frac{j}{S}\frac{\partial C_X}{\partial z} - k_1 C_X + k_2 C_Y, \tag{1}$$

$$\frac{\partial C_Y}{\partial t} = D_Y \frac{\partial^2 C_Y}{\partial z^2} + \frac{j}{S}\frac{\partial C_Y}{\partial z} + k_1 C_X - k_2 C_Y, \tag{2}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\overline{\chi}\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}+\frac{j}{S}\frac{\partial T}{\partial z}+\frac{\Delta H}{\overline{\rho c}_p} \tag{3}$$

Проведем исследование влияния теплового эффекта реакции на устойчивость стационарного решения, следуя методам работы [1].

Будем далее полагать, что в реактор входит один реагент $X$, а все параметры и свойства реагентов постоянны, за исключением констант скоростей реакций. Такое предположение можно обосновать резкой зависимостью констант скоростей реакций от температуры в соответствии с законом Аррениуса:

$$k_1=k_{10}\exp\left(-E_1/(RT)\right), \tag{4}$$

$$k_2=k_{20}\exp\left(-E_2/(RT)\right) \tag{5}$$

Для суммарного тепла реакции имеем:

$$\Delta H=\Delta H_1 k_1 C_X+\Delta H_2 k_2 C_Y \tag{6}$$

Перепишем уравнения модели, используя автомодельные переменные, введенные в работах [1, 2]:

$$t,\ \eta=z+\frac{j}{S}t \tag{7}$$

В результате получаем:

$$\frac{\partial C_X}{\partial t}=D_X\frac{\partial^2 C_X}{\partial \eta^2}-k_1C_X+k_2C_Y, \tag{8}$$

$$\frac{\partial C_Y}{\partial t}=D_Y\frac{\partial^2 C_Y}{\partial \eta^2}+k_1C_X-k_2C_Y, \tag{9}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}=\overline{\chi}\frac{\partial^2 T}{\partial \eta^2}+\frac{\Delta H_1k_1C_X+\Delta H_2k_2C_Y}{\overline{\rho c}_p} \tag{10}$$

Из условия существования ненулевых решений системы получаем условие, которое следует также из правила Гесса [1-3]:

$$\Delta H_1=-\Delta H_2 \tag{11}$$

Тогда из системы (8)–(10) следует балансовое соотношение для равновесных концентраций реагентов:

$$\frac{C_{X0}}{C_{Y0}}=\frac{k_2}{k_1}=\frac{k_{20}}{k_{10}}\exp\left(-\frac{(E_2-E_1)}{RT_0}\right) \tag{12}$$

Линеаризуя систему в окрестности начальной температуры, получаем:

$$\exp\left(-\frac{E}{RT}\right)\approx\exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right)\left(1+\frac{E}{RT_0^2}\theta\right) \tag{13}$$

Теперь можно переписать систему возмущенных уравнений в виде:

$$\frac{\partial x}{\partial t}=D_X\frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2}-K_1x+K_2y-K_1\frac{E_1C_{X0}}{RT_0^2}\theta+K_2\frac{E_2C_{Y0}}{RT_0^2}\theta, \tag{14}$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = D_Y \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} + K_1 x - K_2 y + K_1 \frac{E_1 C_{X0}}{RT_0^2}\theta - K_2 \frac{E_2 C_{Y0}}{RT_0^2}\theta, \tag{15}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \overline{\chi} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} + \frac{\Delta H(K_1 x - K_2 y)}{\overline{\rho c}_p} + \frac{\Delta H K_1 (E_1 - E_2) C_{X0}}{\overline{\rho c}_p RT_0^2}\theta, \tag{16}$$

где

$$x = C_X - C_{X0}, \tag{17}$$

$$y = C_Y - C_{Y0}, \tag{18}$$

$$\theta = T - T_0 \tag{19}$$

Отсюда получаем:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = D_X \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} - K_1 x + K_2 y + K_3 \theta, \tag{20}$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = D_Y \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} + K_1 x - K_2 y - K_3 \theta \tag{21}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \overline{\chi} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \eta^2} - h(K_1 x - K_2 y) + K_3 h \theta \tag{22}$$

Решения системы ищем в виде:

$$x = \alpha_1 \exp(\lambda t) \sin\left(\frac{m\pi}{L}\eta\right) \tag{23}$$

$$y = \alpha_2 \exp(\lambda t) \sin\left(\frac{m\pi}{L}\eta\right) \tag{24}$$

$$\theta = \alpha_3 \exp(\lambda t) \sin\left(\frac{m\pi}{L}\eta\right) \tag{25}$$

## Литература


1 Холодниок М., Клич А., Кубичек М., Марек М. Методы анализа нелинейных динамических моделей. - М.: Мир, 1991.-366 с.

2 Сол А., Шоуолтер К. Распространение волновых фронтов в реакционно-диффузионных системах //Колебания и бегущие волны в химических системах: кн. – М.:Мир, 1988.-С.451-473.

3 Стерн С.А. Процессы проникновения газов //Технологические процессы с применением мембран.- М.:Мир, 1976.-С.303-369.

4 Sarka T., Lesek F., Cermankova H. Axial dispersion in a reactor wile a helical flow //Collect. Czech. Chem. Commun. - 1971. – Vol. 36. – P. 3543-3548.

5 Мусабекова Л.М., Бренер А.М. Математическое моделирование процесса хемосорбции с мгновенной реакцией в слое жидкости //Математические методы в технике и технологиях: сб. науч. тр.- СПб., 2000. -Т.3.- С.11-13.



## Қорытынды

Мақалада катализатордың толық қабатының жылу және жалпыауысу процесінде ағуы, сондай-ақ температурадан әсер ету жылдамдығының констант байланыстылығының есебі қарастылған.



## Summary

The article analyses the course of the process of heat- and mass exchange in the full lager of a catalyst as well as considering the constants of reaction velocities from the temperature.