МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТРЕХФАЗНОГО КАТАЛИТИЧЕСКОГО ПРОЦЕССА НА ПОРИСТОМ ЗЕРНЕ

В. А. Кириллов, В. К. Королев,
И. А. Михайлова, С. И. Фадеев
(Новосибирск)

В работе представлена полная математическая модель каталитического процесса на пористом зерне катализатора в стационарных условиях для системы из трех фаз газ-жидкость-твердое на основе физических и физико-химических закономерностей. Пористое зерно катализатора рассматривается в виде каталитически активной пластинки, на которой протекает реакция гидрирования в жидкой и паровой фазах. Пластинка с одной стороны обдувается газожидкостным потоком, а с другой – парогазовым. Со стороны газожидкостного потока жидкость контактирует с поверхностью зерна и под действием капиллярных сил впитывается внутрь пористой структуры с известной функцией распределения пор по радиусам, создавая затопленные поры, размер которых меньше некоторого критического радиуса. Выделение тепла в ходе химических реакций в жидкой и парогазовой фазах приводит к испарению жидкости как на внешней стороне пластинки, так и внутри зерна. Скорости фазовых переходов определялись на основе молекулярно-кинетической теории. Предполагается, что температуры всех фаз в каждой точки внутри зерна равны, а перенос тепла по толщине пластины осуществляется за счет теплопроводности и движения фаз, вызванных градиентом давления, и капиллярными силами. Перенос вещества по жидкой и парогазовой фазам осуществляется за счет конвективного переноса и эффективной диффузии. Парогазовая фаза является многокомпонентной со значительно различающимися бинарными коэффициентами диффузии компонент. Это дает основание использовать подходы многокомпонентной диффузии и модель пылевидного газа для описания переноса по газовой фазе [1].

Полученная математическая модель имеет вид нелинейной краевой задачи, определяющей распределение по зерну катализатора концентраций в жидкой и парогазовой фазах, долей фаз, температуры, давления, скорости впитывания с учетом пористой структуры зерна. В связи с многокомпонентностью смеси и существенным различием коэффициентов бинарной диффузии компонент для записи граничных условий использовалось выражение для потоков вещества по газовой фазе в форме, предложенной в [2]. Отметим, что выполнение балансных соотношений должно быть следствием краевой задачи. В связи с этим постановка граничных условий представляла сложную проблему.

Предлагаемая модель дает возможность проведения анализа стационарных режимов при всех возможных состояниях пористого зерна. Проведены расчеты конкретных каталитических процессов и сравнение с экспериментом. Численное исследование краевой задачи проводилось методом продолжения по параметру [3]. В результате установлено наличие трех различных фазовых стационарных состояний пористого зерна: практически несмоченной пористой структуры, когда жидкость находится на внешней поверхности зерна и вся испаряется в тонком приповерхностном слое; заполненной пористой структуры, когда жидкость фильтруется через зерно; промежуточного состояния, при котором жидкость смачивает только часть пористой структуры, тогда как остальная часть остается несмоченной. Положение границы между смоченной и сухой частями зерна зависит от параметров задачи.

[1] *Mason E.A., Malinauskas A.P.* Gas Transport in Porous Media: The Dasty Gas Model. (Chem.Eng.Monographs, V.17). – Amsterdam: Elsvier, 1983. – 196 p.

[2] *Krishna R., Wesselingh J.A.* The Maxwell - Stefan approach to mass transfer // Chem.Eng.Sci. – 1997. – V.52. – P.861-911.

[3] *Фадеев С.И.* Программа численного решения нелинейных краевых задач для систем обыкновенных дифференци-

альных уравнений с параметрамм // Вычислительные методы линейной алгебры. (Тр. Ин-та математики СО АН СССР). - Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние. – 1990. – Т.17. – С.104-198.

E-mail: fadeev@math.nsc.ru