

НЕСТАЦИОНАРНАЯ ДВУХТЕМПЕРАТУРНАЯ МОДЕЛЬ РЕАКТОРА ИДЕАЛЬНОГО ВЫТЕСНЕНИЯ С КАТАЛИТИЧЕСКИМИ СТЕНКАМИ

Цыбенова С.Б.

Российский государственный социальный университет,
Россия, 129256, Москва, ул. Вильгельма Пика, д.4,к.5, tsybenova@mail.ru

При моделировании гетерогенно-каталитических процессов типа «газ-твердое» часто используют математическую модель реактора идеального вытеснения, для которой предполагают, что температуры газа и катализатора совпадают. Это приближение хорошо работает в стационарном случае. Нестационарность может приводить к нарушению равновесия между газом и поверхностью катализатора, что при моделировании требует построения двухтемпературной нестационарной модели:

уравнения материального и теплового балансов для газовой фазы –

$$V \left(\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} + v \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \ell} \right) = S \sum_s \gamma_s^G w_s(\mathbf{c}, \mathbf{x}, T_k), \quad (1)$$

$$C_p V \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial \ell} \right) = \alpha S (T_k - T), \quad (2)$$

для каталитической поверхности –

$$\rho_k C_{pk} \frac{\partial T_k}{\partial t} = \sum_s \Delta H_s w_s(\mathbf{c}, \mathbf{x}, T_k) + \alpha (T - T_k) + \beta (T_x - T_k), \quad (3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \sum_s \gamma_s w_s(\mathbf{c}, \mathbf{x}, T_k), \quad (4)$$

где \mathbf{c} , \mathbf{x} – векторы концентраций реагентов в газовой фазе и степеней покрытия адсорбированных веществ на поверхности катализатора соответственно; T , T_k – температура газа и катализатора; S , V , v – площадь каталитической поверхности, объем и скорость потока в реакторе соответственно; ρ , ρ_k , C_p , C_{pk} – плотности и теплоемкости газа и катализатора; γ_s^G , γ_s – стехиометрические векторы для реагентов в газе и интермедиатов; T_x – температура холодильника; ΔH_s , w_s – тепловой эффект и скорость s -й реакции; α , β – коэффициенты теплопередачи «газ-твердое» и стенка катализатора-холодильник соответственно; t – время; ℓ – текущая длина реактора.

Разработан алгоритм и программа расчета двухтемпературной нестационарной модели (1) – (4). В качестве примера рассматривался каталитический механизм окисления, допускающий в кинетической области множественность стационарных состояний и автоколебания. Выделена специфика взаимодействия температурной и кинетической нелинейностей и нестационарности. Показано, что это может приводить к достаточно сложной динамике поведения реактора с каталитическими стенками.