

А. Х. Курчев, И. М. Губайдуллин (Уфа, БашГУ, ИНК РАН РБ). Математическое моделирование экзотермического процесса получения фталевого ангидрида в реакторе с неподвижным слоем катализатора.

Фталевый ангидрид (ФА, химическая формула $C_6H_4(CO)_2O$, бесцветные кристаллы) является сырьем в производстве алкидных смол, пластификаторов (эфиров фталевой кислоты), красителей. ФА получают путем парафозного каталитического окисления о-ксилола кислородом воздуха в неподвижном слое катализатора.

Для понимания физико-химической сущности каталитической реакции, последующего математического моделирования экзотермического каталитического процесса и определения условий его промышленной реализации необходима разработка его математической модели [1]. Все модели сильноэкзотермических процессов являются двухфазными, поскольку всегда различают концентрации компонентов в подвижной газовой фазе и неподвижной фазе — слое катализатора [2].

Математическое описание процесса представляется системой дифференциальных уравнений: параболического для расчета температуры катализатора, гиперболических для расчета температуры газового потока и концентраций компонентов и обыкновенных дифференциальных уравнений для расчета концентраций на зерне катализатора:

$$\begin{aligned} \tau = 0 : \quad T &= T_0, \quad \theta = T_0, \quad x = x_0, \quad y = 0, \\ \frac{\partial T}{\partial \tau} - U \frac{\partial T}{\partial \xi} &= \beta(\theta - T), \quad \frac{\partial x}{\partial \tau} + \frac{\partial x}{\partial \xi} = \beta(y - x), \\ \gamma \frac{\partial \theta}{\partial \tau} &= \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} + \beta_0(T - \theta) + \sum \Delta \theta_j \omega_j + \alpha_{xoi}(\theta_x - \theta), \\ \xi = 0 : \quad \frac{1}{Pe} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} &= \alpha(\theta - T_0), \quad T = T_0, \quad x = x_0, \\ \xi = 1 : \quad \frac{1}{Pe} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} &= 0, \\ \frac{\partial y_i}{\partial \tau} &= (\beta \tau_k)(x_i - y_i) + \sum v_{ij} \omega_j. \end{aligned}$$

С помощью математического описания проведен вычислительный эксперимент для трубчатого реактора объемом $3,5 \text{ м}^3$ и использованием в качестве хладагента насыщенного водного раствора $NaCl$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Слинко М. Г. Принципы и методы технологии каталитических процессов. — Теорет. основы хим. технол., 1999, т. 33, № 5, с. 528–538.
2. Матрос Ю. Ш. Нестационарные процессы в каталитических реакторах. Новосибирск: Наука, 1982, 256 с.