

К. Ф. С а б и т о в а, И. М. Г у б а й д у л л и н (Уфа, БашГУ, ИНК РАН). Математическое моделирование гетерогенной экзотермической реакции $A \rightarrow B$ на зерне и в слое катализатора.

В работе, представленной данным сообщением, приведены математические модели процесса согласно предложенному М. Г. Слинько иерархическому подходу [1], [2]: сначала рассматривается поведение реакционной системы на зерне, а затем — в слое катализатора. При моделировании реакций, протекающих в реакционной смеси газ–твердое с выделением тепла, необходим учет процессов тепло- и массопереноса в слое катализатора, а также между газовой фазой и зерном катализатора. Решение задачи проводится в нескольких измерениях. Во-первых, процесс является нестационарным, т.е. рассматривается зависимость от времени, во-вторых, рассматривается слой зерен и зависимость по радиусу зерна, т.е. здесь — трехмерная задача.

Уравнения изменения температуры и концентрации в газовом потоке имеют вид:

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} + \frac{\partial T}{\partial \xi} = \beta(\theta - T), \quad \frac{\partial x}{\partial \tau} = \frac{\partial x}{\partial \xi} = \beta(y - x),$$

$$\tau = 0: \quad T = T_0, \quad \xi = 0: \quad T = T_0, \quad x = 0, \quad x = x_0.$$

В слое катализатора:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{1}{\rho_2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial \theta}{\partial \rho} \right) = \varphi \Delta \theta \omega,$$

где x, T — концентрация и температура в газе; y, θ — концентрация и температура в катализаторе; $\varphi = kR_3^2/D$ — параметр Тиле; $\Delta \theta$ — адиабатический разогрев; $\omega = kc(r)$ — скорость реакции, k — константа скорости реакции; $k = k_0(-E/(RT))$ [3].

При варьировании параметров моделей (адиабатического разогрева и параметра Тиле) проведен вычислительный эксперимент и определены температуры зажигания и затухания, выявлено явление гистерезиса. Найдены условия существования трех режимов протекания реакции, один из которых является неустойчивым.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Слинько М. Г. Принципы и методы технологии каталитических процессов. — Теор. основы хим. технол., 1999, т. 33, № 5, с. 600.
2. Спивак С. И., Губайдуллин И. М., Вайман Е. В. Обратные задачи химической кинетики. Уфа: РИО БашГУ, 2003, 110 с.
3. Сабитова К. Ф. Математическое моделирование экзотермического процесса на зерне катализатора. — В сб.: Тезисы VI региональной школы-конференции для студентов, аспирантов и молодых ученых по математике, физике и химии. Уфа: РИЦ БашГУ, 2006, с. 120–127.