

З. А. Шакирова, И. В. Ахметов, И. М. Губайдуллин, А. В. Балаев (Уфа, БашГУ, ИНК РАН). **Двухфазная диффузионная модель экзотермического нестационарного процесса в слое катализатора.**

В настоящее время возможности повышения производительности реакторов за счет увеличения их размеров практически исчерпаны. Возникает задача интенсификации каталитических процессов за счет новых, динамических способов их ведения. К таким способам относятся процессы с периодическим изменением входной температуры, состава и скорости подачи реакционной смеси, процессы спуска и остановки реакторов [1]. При моделировании таких процессов существенно усложняются математические описания, эффективное решение которых возможно с привлечением технологии параллельных вычислений.

Моделирование каталитических процессов, особенно в случае протекания экзотермической реакции, должно быть ориентировано на двухфазные модели [1], т. е. на раздельный учет материального и теплового балансов в слое катализатора и газовом потоке. Для быстрого решения уравнений двухфазных моделей вновь необходимы параллельные вычисления.

Математическое описание нестационарного процесса в слое катализатора представляется следующей системой уравнений материального и теплового балансов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial \tau} + \frac{\partial T}{\partial \xi} &= \beta(\theta - T), & \frac{\partial x}{\partial \tau} + \frac{\partial x}{\partial \xi} &= \beta(y - x), \\ \frac{\partial y}{\partial \tau} &= \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial y}{\partial \rho} \right) + \varphi \sum_{ij} \nu_{ij} \omega_j, & \frac{\partial \theta}{\partial \tau} &= \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial \theta}{\partial \rho} \right) + \varphi \Delta \theta \omega, \end{aligned}$$

начальными и граничными условиями

$$\begin{aligned} \tau = 0 : \quad T &= T_0, \quad \theta = \theta_0, \quad x = 0; & \xi = 0 : \quad T &= T_0, \quad x = x_0, \\ \rho = 0 : \quad \frac{\partial \theta}{\partial \rho} &= 0, \quad \frac{\partial y}{\partial \rho} = 0, & \rho = 1 : \quad \frac{\partial \theta}{\partial \rho} &= \chi(T - \theta), \quad \frac{\partial y}{\partial \rho} = \chi(y - x). \end{aligned}$$

В докладе приводятся результаты, полученные при моделировании модельной экзотермической реакции $A \rightarrow B$ в неподвижном слое катализатора. Построен и реализован алгоритм численного решения систем уравнений математического описания методом матричной прогонки с использованием итерационной процедуры и распараллеливания решений по уравнениям материального и теплового балансов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Смилько М. Г.* Научные основы теории каталитических процессов и реакторов. — Кинетика и катализ, 2000, т. 41, № 6, с. 933–946.