

# Математическое моделирование термодинамически – сопряженных процессов в каталитическом мембранном реакторе

ШЕЛЕПОВА ЕКАТЕРИНА ВЛАДИМИРОВНА  
e-mail: shev@catalysis.ru

ВЕДЯГИН А. А.

НОСКОВ А. С.

**Математическое моделирование термодинамически – сопряженных  
процессов в каталитическом мембранном реакторе**

Шелепова Е.В., Ведягин А.А., Носков А.С.

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН  
630090, г. Новосибирск, проспект ак. Лаврентьева, 5  
E-mail: shev@catalysis.ru

Основной проблемой процессов дегидрирования является наличие жестких термодинамических ограничений. Окислительное дегидрирование, более выгодное с термодинамической стороны, характеризуется низкой селективностью по целевому продукту и образованием кислородсодержащих примесей. Наиболее эффективно процесс может быть реализован в каталитическом мембранном реакторе, где во внутренней его части, покрытой мембраной (нанесенной на керамическую подложку) и заполненной частицами катализатора, протекает процесс дегидрирования пропана. Отщепляемый водород отводится через мембрану во внешнюю часть реактора, где протекает каталитическое горение водорода. Отводимый через мембрану водород позволяет сместить равновесие реакции дегидрирования в сторону образования продуктов, тем самым повышая выход продуктов [1-3].

В работе представлено математическое моделирование каталитического мембранного реактора для термодинамически - сопряженных процессов. Двумерная стационарная модель каталитического мембранного реактора включает в себя уравнения тепло- и массопереноса и граничные условия для внутренней и внешней части трубки и керамической подложки.

Для решения системы уравнений в частных производных воспользуемся на первом этапе при переходе к дискретному аналогу интегро - интерполяционным методом, а также методом прямых, не аппроксимируя при этом производные по длине. Система уравнений в частных производных сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений по длине для узловых значений по радиусу трубки, которая решалась с помощью полунявного метода типа Розенброка 2-го порядка точности с автоматическим выбором шага интегрирования.

При численном анализе был получен набор параметров, определяющих наибольшую степень превращения исходных реагентов и селективность по целевым продуктам реакции. Проведенное математическое моделирование позволило оценить эффективность использования мембранного реактора в сравнении с трубчатый реактором, а также оценить концентрационный и энергетический эффект реакции горения водорода на характеристики процесса дегидрирования пропана.

Литература

. Шелепова Е.В., Ведягин А.А., Носков А.С. Влияние каталитического горения водорода на процессы дегидрирования в мембранном реакторе. Часть I. Математическая модель процесса // Физика горения и взрыва, 2011, No.5, стр.3-12.

. Е.В. Шелепова, А.А. Ведягин. Экологический и энергетический аспекты процесса дегидрирования пропана при его реализации в мембранном реакторе // Альтернативная энергетика и экология, 2011, No.2, стр.98-101.

. Shelepova E.V.\*, Vedyagin A.A., Mishakov I.V., Noskov A.S. Mathematical modeling of the propane dehydrogenation process in the catalytic membrane reactor. // Chem. Eng. J., 2011, doi:10.1016/j.cej.2011.06.048.