

УДК 544.723.2

**В. А. Данилов**

**ЯЧЕЕЧНАЯ МОДЕЛЬ АДСОРБЕРА**

*Ключевые слова: Адсорбция, массообмен, кривая адсорбции.*

*Разработана ячеечная модель колонного адсорбера. Выполнено моделирование процесса адсорбции для системы C<sub>20</sub>H<sub>42</sub> – C<sub>30</sub>H<sub>62</sub> – C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> в адсорбере диаметром 10 мм и слоем адсорбента 50 мм. Показано удовлетворительное согласование с экспериментальными данными.*

*Keywords: Adsorption, mass transfer, breakthrough curve.*

*TSR model for column adsorber is developed. Model validation is shown using the system C<sub>20</sub>H<sub>42</sub> – C<sub>30</sub>H<sub>62</sub> – C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> with 10 mm column adsorber and 50 mm height adsorbent. The predicted breakthrough curves are in reasonable agreement with the reported experimental data.*

**Введение**

Модель идеального вытеснения и диффузионная модель широко применяются при моделировании процессов адсорбции [1-4]. Недостатками используемых моделей является ограниченный диапазон применимости идеализированных моделей и проблема интерпретации результатов при сравнении с экспериментальными данными. Целью данной работы является разработка ячеечной модели применительно для процесса адсорбции в колонных адсорберах. Разработка модели и сравнение с экспериментальными данными выполнена совместно с Vrije Universiteit Brussel [5].

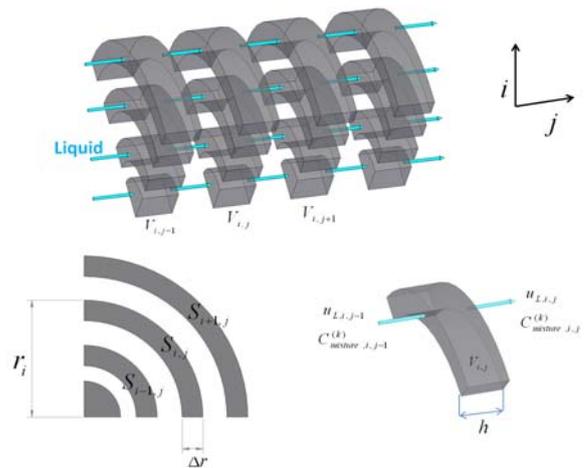
**Ячеечная модель**

Достоинством ячеечной модели является возможность описания различных частных случаев идеализированной структуры потоков в аппарате: при n=1 модель идеального перемешивания; при 1<n<∞ диффузионная модель; при n=∞ модель идеального вытеснения. Адсорбция компонента в пористом слое твердого адсорбента включает несколько стадий: перенос компонента из ядра фазы до частиц адсорбента; перенос компонента внутри пор частиц адсорбента; адсорбция на поверхности; десорбция компонента; перенос компонента по поверхности адсорбента. При составлении ячеечной модели колонна разбивается на сегменты как показано на рис.1. Каждый сегмент i, j имеет объем V<sub>i,j</sub> и площадь поперечного сечения S<sub>i,j</sub>. Допускается полное перемешивание и отсутствие поперечных потоков между сегментами. Ячейка i, j характеризуется объемом V<sub>i,j</sub> = h S<sub>i,j</sub> с порозностью ε<sub>i,j</sub>, где S<sub>i,j</sub> площадь поперечного сечения ячейки, S<sub>i,j</sub> = π(r<sub>i</sub><sup>2</sup> – r<sub>i-1</sub><sup>2</sup>)/4.

Уравнения баланса компонента для ядра фазы в каждой ячейки составляется с учетом входящих и выходящих потоков и адсорбции в ячейке

$$V_{i,j} \frac{dC_{i,j}^{(k)}}{dt} = S_{i,j-1} C_{i,j-1}^{(k)} u_{L,i,j-1} - S_{i,j} C_{i,j}^{(k)} u_{L,i,j} + N_{i,j}^{(k)} \quad (1)$$

где C<sub>i,j</sub><sup>(k)</sup> - концентрация k-компонента в ядре фазы; u<sub>L,i,j</sub> - скорость фазы; N<sub>i,j</sub><sup>(k)</sup> -поток массы k-компонента из ядра фазы к границе раздела.



**Рис. 1 - Ячеечная модель адсорбера**

Уравнения баланса компонента в порах имеет вид

$$V_{s,i,j} \frac{dC_{s,i,j}^{(k)}}{dt} = N_{i,j}^{(k)} - r_{adsorption,i,j}^{(k)} + r_{desorption,i,j}^{(k)} \quad (2)$$

где V<sub>s,i,j</sub> - объем пор; C<sub>s,i,j</sub><sup>(k)</sup> - концентрация k-компонента в фазе на границе раздела; r<sub>adsorption,i,j</sub><sup>(k)</sup> - поток массы k-компонента адсорбируемой на поверхности; r<sub>desorption,i,j</sub><sup>(k)</sup> - поток массы k-компонента десорбируемой на поверхности. Уравнения баланса для адсорбированного компонента

$$\Gamma \frac{d\theta_{i,j}^{(k)}}{dt} = r_{adsorption,i,j}^{(k)} - r_{desorption,i,j}^{(k)} \quad (3)$$

где Γ - поверхностная плотность; θ<sub>i,j</sub><sup>(k)</sup> - концентрация k-компонента адсорбированного на твердой поверхности.

Замыкающими соотношениями являются уравнение массоотдачи, определяющее поток массы от ядра к границе раздела фаз

$$N_{i,j}^{(k)} = (1 - \varepsilon_b) \rho_p k_s^{(k)} (C_{i,j}^{(k)} - C_{s,i,j}^{(k)}) \quad (4)$$

где  $k_s^{(k)}$  - коэффициент массоотдачи.

Уравнение адсорбции определяет поток массы адсорбирующегося и десорбирующегося на поверхности адсорбента

$$r_{adsorption,i,j}^{(k)} = k_{ads}^{(k)} C_{s,i,j}^{(k)} \theta_{i,j}^{(k)} \quad (5)$$

$$r_{desorption,i,j}^{(k)} = k_{des}^{(k)} \theta_{i,j}^{(k)} C_{i,j}^{(k)} \quad (6)$$

Уравнение Langmuir описывает равновесие на границе раздела [2]

$$q_{eq}^{(k)} = q_{sat}^{(k)} \frac{K_L^{(k)} C_L^{(k)}}{1 + \sum_j K_L^{(j)} C_L^{(j)}} \quad (7)$$

где  $K^{(k)}$ ,  $q_{sat}^{(k)}$  - константы.

### Результаты моделирования

Применение ячеечной модели и сравнение с экспериментальными данными на лабораторной установке адсорбера диаметром 10 мм и слоем адсорбента 50 мм для системы  $C_{20}H_{42} - C_{30}H_{62} - C_8H_{18}$  показано в работе Li [5]. Описание лабораторной установки и методика проведения эксперимента приводится в работе [5]. Параметры потока на входе в адсорбер следующие

Мольный расход питания	0.5 mol/min
Мольная доля $C_8H_{18}$	0.98
Мольная доля $C_{20}H_{42}$	0.01
Мольная доля $C_{30}H_{62}$	0.01
Температура	200 C
Давление	10 atm

Для моделирования адсорбера диаметром 10 мм и слоем адсорбента 50 мм использовалась ячеечная модель с числом ячеек  $n_i=5$   $n_j=10$  включающая систему 350 обыкновенных дифференциальных уравнений. Подробное описание разработанной модели приводится в работе [5]. Показано удовлетворительное согласование кривых адсорбции рассчитанных по ячеечной модели с экспериментальными данными [5].

Разработанная совместно с Vrije Universiteit Brussel ячеечная модель колонного адсорбера применяется при моделировании и проектировании адсорберов.

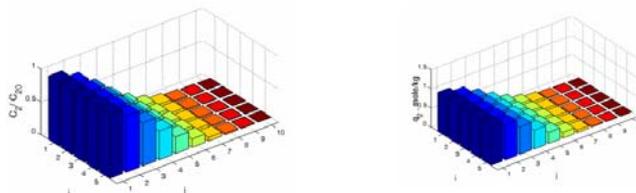


Рис. 2 - Профили концентраций рассчитанные по ячеечной модели адсорбера при  $t = 100$  s.

### Литература

1. M. Suzuki, *Adsorption Engineering*. Elsevier, Amsterdam, 1990.
2. D. W. Ruthven, *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*. Wiley, N.Y., 1984.
3. С. В. Анаников, *Вестник Казанского технологического университета*, **15**, 8, 247-253 (2012)
4. Р. Р. Каримов, М. В. Шулаев, В. М. Емельянов, Г. А. Гадельшина, *Вестник Казанского технологического университета*, **1**, 1, 99-102 (2004)
5. B. Li, Adsorption of long chain alkanes on Fisher-Tropsch wax hydroconversion catalysts: An experimental and modeling study. Ph.D. Thesis. Vrije Universiteit Brussel, Belgium. 2011.