

计算多孔催化剂有效因子的区域分割法*

陈尚伟

(四川轻化工学院轻工系, 自贡 643033)

摘 要 提出了计算多孔催化剂颗粒有效因子的区域分割法, 将整个一维区间划分为几个子区间, 然后在每个子区间内用一点配置法求解非线性扩散-反应问题。采用区域分割法, 针对三种不同形状的催化剂颗粒, 对幂函数型动力学方程和双曲型动力学方程进行了大量的计算。所得的计算结果与正交配置解吻合。区域分割法的优点是使用简便、计算快速。采用区域分割法还可以计算催化剂颗粒死区半径, 所得计算结果合理。

关键词 有效因子 区域分割法 非线性扩散-反应问题 死区半径

引言

多孔催化剂颗粒的有效因子对多相催化反应器的设计和模拟极为重要, 因此有效因子的计算是一个引人注目的问题。除一级不可逆反应外, 有效因子的计算归结为求解非线性扩散-反应问题。关于这一类型的常微分方程, 国外学者曾提出一些近似处理方法^[1~3], 国内学者也提出多种求近似解的方法^[4~7]。Finlayson对几种数值方法进行比较, 认为当催化剂颗粒内浓度梯度的变化较平缓时, 正交配置法无疑是最好的方法^[8]。但是, 当浓度梯度变化幅度较大时, 正交配置法需要采用多个内部配置点, 最终归结为求解多个方程偶联的非线性方程组, 因而计算工作量颇大。为了克服这一缺陷, 本文提出用区域分割法求解催化剂颗粒内的扩散-反应问题, 该法将颗粒的反应区划分为几个子区间, 使每个子区间上浓度梯度的变化相对平缓, 从而可以用一点配置法求解扩散-反应问题, 以便简化求解过程, 减少计算工作量。

1 方法的建立

1.1 无死区的区域分割法

催化剂颗粒内部扩散-反应方程的无量纲形式为

$$\frac{1}{x^m} \frac{d}{dx} \left(x^m \frac{dy}{dx} \right) = \phi^2 f(y) \quad (1)$$

式中

$$x = r/r_0 \quad y = c_A/c_{AS} \quad f(y) = \frac{R(c)}{R(c_S)} \quad \phi^2 = \frac{r_0^2 R(c_S)}{(D_A c_{AS})} \quad (2)$$

m 的值视催化剂颗粒的形状而定, 对于片形、圆柱和球形颗粒, 分别取为 0、1 和 2。

1996-11-18 收到初稿, 1997-02-25 收到修改稿。

联系人及第一作者: 陈尚伟, 男, 52岁, 教授。

* 四川省教委自然科学基金资助项目[川教科(1995)36号]。

式(1)的边界条件为

$$\begin{aligned} x = 0 \quad \frac{dy}{dx} &= 0 \\ x = 1 \quad y &= 1 \end{aligned} \quad (3)$$

将一维区间 $[0, 1]$ ($x \in [0, 1]$) 分割成 N 个子区间 $[0, b_1], [b_1, b_2], \dots, [b_{N-1}, 1]$, 引入新的变量 $u_1, u_2, \dots, u_N$, 使在第一区间 $[0, b_1]$ 内存在

$$u_1 = \frac{x}{b_1} \quad (4)$$

因此 $u_1 \in [0, 1]$. 并且式(1)成为

$$\frac{1}{b_1^2 u_1^m} \frac{d}{du_1} \left(u_1^m \frac{dy}{du_1} \right) = \phi^2 f(y) \quad (5)$$

相应边界条件为

$$\begin{aligned} u_1 = 0 \quad \frac{dy}{du_1} &= 0 \\ u_1 = 1 \quad y &= y^{(b_1)} \end{aligned} \quad (6)$$

对其余第 i ($i \geq 2$) 区间, 作变换

$$u_i = \frac{x - b_{i-1}}{b_i - b_{i-1}} \quad (7)$$

因此 $u_i \in [0, 1]$. 将式(7)代入式(1)得到

$$\frac{1}{(b_i - b_{i-1})^2} \frac{d^2 y}{du_i^2} + \frac{m}{(b_i - b_{i-1})[b_{i-1} + (b_i - b_{i-1})u_i]} \frac{dy}{du_i} = \phi^2 f(y) \quad (8)$$

式(8)的边界条件为

$$\begin{aligned} u_i = 0 \quad y &= y^{(b_{i-1})} \\ u_i = 1 \quad y &= y^{(b_i)} \end{aligned} \quad (9)$$

用对称问题的一点正交配置法求解式(5)得到

$$\frac{h}{b_1^2} [y^{(b_1)} - y^{(1)}] = \phi^2 f[y^{(1)}] \quad (10)$$

当 $m=0, 1$ 和 2 时, 式中常数 h 分别取为 $2.5, 6$ 和 10.5 .

采用非对称问题的一点正交配置法求解式(8)可得

$$\begin{aligned} \frac{1}{(b_i - b_{i-1})^2} [4y^{(b_{i-1})} - 8y^{(i)} + 4y^{(b_i)}] + \frac{2m}{(b_i - b_{i-1})(b_i + b_{i-1})} \\ [y^{(b_i)} - y^{(b_{i-1})}] = \phi^2 f[y^{(i)}] \end{aligned} \quad (11)$$

第一区间内按一点正交配置法得到的试函数为

$$y = y^{(b_1)} - (1.25 + 0.25m)[y^{(b_1)} - y^{(1)}](1 - u_1^2) \quad (12)$$

因此得到

$$\left. \frac{dy}{du_1} \right|_{u_1=1} = (2.5 + 0.5m)[y^{(b_1)} - y^{(1)}] \quad (13)$$

对不同形状的催化剂颗粒 ($m=0, 1, 2$), 任意第 i ($i \geq 2$) 区间内按一点正交配置法得到的试函数为

$$y = y^{(b_{i-1})} + [y^{(b_i)} - y^{(b_{i-1})}]u_i + 2[2y^{(i)} - [y^{(b_{i-1})} + y^{(b_i)}]]u_i(1 - u_i) \quad (14)$$

由上式导出

$$\left. \frac{dy}{du_i} \right|_{u_i=0} = 4y^{(i)} - y^{(b_i)} - 3y^{(b_{i-1})} \quad (15)$$

$$\left. \frac{dy}{du_i} \right|_{u_i=1} = 3y^{(b_i)} + y^{(b_{i-1})} - 4y^{(i)} \quad (16)$$

令式(16)中 $i = i - 1$ 得到

$$\left. \frac{dy}{du_{i-1}} \right|_{u_{i-1}=1} = 3y^{(b_{i-1})} + y^{(b_{i-2})} - 4y^{(i-1)} \quad (17)$$

由于

$$\left. \frac{dy}{du_i} \right|_{u_i=0} = \left. \frac{dy}{du_{i-1}} \right|_{u_{i-1}=1} \quad (i \geq 2) \quad (18)$$

因此得到 $y^{(b_2)} = 4y^{(2)} + (2.5 + 0.5m)y^{(1)} - (5.5 + 0.5m)y^{(b_1)}$ (19)

并且对所有不同形状的催化剂颗粒都有

$$y^{(b_i)} = 4y^{(i)} + 4y^{(i-1)} - 6y^{(b_{i-1})} - y^{(b_{i-2})} \quad (i \geq 3) \quad (20)$$

令式(11)中 $i = 2$, 并将式(19)的 $y^{(b_2)}$ 代入后得到第二区间的配置方程为

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(b_2 - b_1)^2} [8y^{(2)} + (10 + 2m)y^{(1)} - (18 + 2m)y^{(b_1)}] \\ & + \frac{2m}{(b_2 - b_1)(b_2 + b_1)} [4y^{(2)} + (2.5 + 0.5m)y^{(1)} - (6.5 + 0.5m)y^{(b_1)}] \\ & = \phi^2 f[y^{(2)}] \end{aligned} \quad (21)$$

当 $i \geq 3$, 将式(20)中 $y^{(b_i)}$ 代入式(11)整理得到

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(b_i - b_{i-1})^2} [8y^{(i)} + 16y^{(i-1)} - 20y^{(b_{i-1})} - 4y^{(b_{i-2})}] \\ & + \frac{2m}{(b_i - b_{i-1})(b_i + b_{i-1})} [4y^{(i)} + 4y^{(i-1)} - 7y^{(b_{i-1})} - y^{(b_{i-2})}] \\ & = \phi^2 f[y^{(i)}] \end{aligned} \quad (22)$$

若将区间 $[0, 1]$ 分割成 N 个子区间, 可以得到关于 $y^{(i)} (i = 1, 2, \dots, N)$ 的 N 个配置方程和直接计算 $y^{(b_i)} (i = 2, 3, \dots, N)$ 的 $N - 1$ 个关系式. 求解过程可在计算机上完成. 从第一区间开始, 先假设 $y^{(b_1)}$ 的值, 使式(10)变成只含未知量 $y^{(1)}$ 的代数方程, 解出 $y^{(1)}$ 后使第二区间的配置方程仅含未知量 $y^{(2)}$. 求出 $y^{(2)}$ 后可直接由式(19)计算 $y^{(b_2)}$. 依此类推, 最后可求得 $y^{(b_N)}$. 由于 $y^{(b_N)}$ 的理论值应为 1, 因此若算得的 $y^{(b_N)}$ 与 1 的偏差满足一定的精度要求, 则 $y^{(b_1)}$ 假设正确, 否则调整 $y^{(b_1)}$ 重新计算, 直至满足. 显然, N 个配置方程的求解完全可以独立进行, 从而可以避免联立求解非线性代数方程组的麻烦.

对一维催化剂颗粒, 可按下式计算有效因子

$$\begin{aligned} \xi = (m + 1) \{ & b_i^{m+1} \sum_{j=1}^2 W_{1,j} f(y_{1,j}) u_{1,j} + \sum_{i=2}^N (b_i - b_{i-1}) \\ & \cdot \sum_{j=1}^3 W_{i,j} f(y_{i,j}) [b_{i-1} + (b_i - b_{i-1}) u_{i,j}]^m \} \end{aligned} \quad (23)$$

式中, $y_{i,j}$ ($i=1, 2, \dots, N$) 表示 i 区间的浓度 y_i 在 j 处的计算值, $w_{i,j}$ 代表相应位置处的加权系数. 当 $x \in [0, 1]$ 的区间划分为 N 等分时, 计算式(23)简化为

$$\xi = \frac{(m+1)}{N^{m+1}} \left\{ \sum_{j=1}^2 w_{1,j} f(y_{1,j}) u_{1,j} + \sum_{i=2}^N \sum_{j=1}^3 w_{i,j} f(y_{i,j}) [(i-1) + u_{i,j}]^m \right\} \quad (24)$$

因此, 算出各区间配置点处和区间边界处的 y 值后即可由式(23)或式(24)计算有效因子 ξ .

1.2 有死区的区域分割法

当反应受内扩散影响严重时, 催化剂颗粒存在死区. 设死区的范围为 $x \in [0, b_0]$, 则反应区的范围为 $x \in [b_0, 1]$, 可将反应区 $[b_0, 1]$ 分割成 N 个区间 $[b_0, b_1]$, $[b_1, b_2]$, $\dots$, $[b_{N-1}, 1]$. 与无死区情况类似, 通过变换式(7)将扩散-反应方程式(1)转换成式(8). 此时式(7)和式(8)适合于包括第一区间在内的任意区间, 即 $i=1, 2, \dots, N$.

在第一区间($i=1$), 求解式(8)的边界条件为

$$\begin{aligned} u_1 = 0, \quad y = y^* \quad \text{及} \quad \frac{dy}{du_1} = 0 \\ u_1 = 1, \quad y = y^{(b_1)} \end{aligned} \quad (25)$$

对可逆反应, 边界条件式(25)中 y^* 为无量纲平衡浓度 y_e ; 若非可逆反应, 可令 y^* 趋于零, 实际计算中可以取为小的正数. 除第一区间外的任意区间 i ($i \geq 2$), 求解式(8)仍采用边界条件式(9).

在第一区间按一点正交配置法得到

$$\frac{1}{(b_1 - b_0)^2} [4y^* - 8y^{(1)} + 4y^{(b_1)}] + \frac{2m}{(b_1 - b_0)(b_1 + b_0)} [y^{(b_1)} - y^*] = \phi^2 f[y^{(1)}] \quad (26)$$

将一点正交配置法用于任意第 i ($i \geq 2$) 区间, 结果与式(11)相同.

借助一点正交配置构造的试函数可获得第一、二两个区间端点的无量纲浓度表达式

$$y^{(b_1)} = 4y^{(1)} - 3y^* \quad (27)$$

$$y^{(b_2)} = 4y^{(2)} + 2y^* - 5y^{(b_1)} \quad (28)$$

当 $i \geq 3$, 关于 $y^{(b_i)}$ 的表达式即为前面的式(20). 将式(27)和式(28)分别代入式(26)和式(11)可以得到头两个区间($i=1, 2$)关于配置点处浓度 $y^{(i)}$ 的代数方程为

$$\text{当 } i=1 \quad 8 \left[\frac{1}{(b_1 - b_0)^2} + \frac{m}{(b_1 - b_0)(b_1 + b_0)} \right] [y^{(1)} - y^*] = \phi^2 f[y^{(1)}] \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \text{当 } i=2 \quad & \frac{8}{(b_2 - b_1)^2} [y^{(2)} - 2y^{(b_1)} + y^*] \\ & + \frac{4m}{(b_2 - b_1)(b_2 + b_1)} [2y^{(2)} + 3y^{(b_1)} + y^*] = \phi^2 f[y^{(2)}] \end{aligned} \quad (30)$$

当 $i \geq 3$, 所得到的配置点方程即为前面的方程式(22).

由以上推导可见, 将反应区 $[b_0, 1]$ 分割成 N 个子区间可以得到关于 $y^{(i)}$ ($i=1, 2, \dots, N$) 的 N 个配置点方程和直接计算 $y^{(b_i)}$ ($i=1, 2, \dots, N$) 的 N 个关系式. 计算时假设死区半径 b_0 , 使方程式(29)变成只含未知量 $y^{(1)}$ 的代数方程. 以后的计算过程与不含死区

的情形相同。若最后算得的 $y^{(b_N)}$ 偏离 1 的程度满足一定的精度要求, 则 b_0 假设正确, 否则应调整 b_0 的值重新计算, 直至满足。

有效因子可按式计算

$$\xi = (m+1) \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 (b_i - b_{i-1}) W_{i,j} f(y_{i,j}) [b_{i-1} + (b_i - b_{i-1}) u_{i,j}]^m \quad (31)$$

式中, $j=1, 2, 3$ 分别表示 $u_i=0, 1/2, 1$ 的位置处, $y_{i,j}$ 表示 i 区间内无量纲浓度 y_i 在 j 点处的计算值; $W_{i,j}$ 为 j 点处的加权系数。

若将反应区 $[b_0, 1]$ 等间隔分割, 则

$$\xi = \frac{(m+1)}{N^{m+1}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 W_{i,j} f(y_{i,j}) [(i-1) + u_{i,j}]^m \quad (32)$$

2 计算结果与讨论

作者按上述区域分割法计算了片形、圆柱形和球形催化剂颗粒采用不同反应动力学模型时有效因子与 Thiele 模数 ϕ 的关系, 并将区间四等分的计算结果 ξ_D 与正交配置法^[8]的数值解 ξ_N 进行了比较。

2.1 n 级不可逆反应

对 n 级不可逆反应, $f(y)$ 可表示为

$$f(y) = y^n \quad (33)$$

当 $n \neq 1$ 时, 任意 i 区间的配置点方程均为关于 $y^{(i)}$ 的非线性代数方程。作者取 $n=0.5, 1.5, 2$ 和 2.5 ; $\phi=0.5, 1, \dots, 10$ 进行了计算, 将 0.5 级不可逆反应的计算结果列于表 1 中。由表 1 可见, 用区域分割法计算的有效因子值 ξ_D 与数值解的精确值 ξ_N 十分吻合。 $n=1.5, 2, 2.5$ 的计算结果同样表明, ξ_D 与 ξ_N 是很接近的。

Table 1 Effectiveness factors and radius of dead zone of 0.5 order irreversible reaction

ϕ	Planar ($m=0$)			Cylindrical ($m=1$)			Spherical ($m=2$)		
	ξ_N	ξ_D	b_0	ξ_N	ξ_D	b_0	ξ_N	ξ_D	b_0
0.5	0.959	0.959		0.984	0.965		0.992	0.986	
1	0.850	0.850		0.940	0.923		0.967	0.962	
2	0.568	0.567		0.791	0.779		0.879	0.875	
3	0.385	0.383		0.626	0.621		0.762	0.760	
4	0.289	0.285	0.273	0.500	0.499		0.647	0.648	
5	0.231	0.228	0.418	0.413	0.412	0.360	0.554	0.554	0.282
6	0.192	0.190	0.515	0.352	0.350	0.480	0.481	0.481	0.438
7	0.165	0.163	0.584	0.306	0.304	0.560	0.424	0.423	0.533
8	0.144	0.143	0.636	0.270	0.268	0.619	0.379	0.378	0.599
9	0.128	0.127	0.677	0.242	0.240	0.663	0.342	0.341	0.649
10	0.115	0.114	0.715	0.219	0.218	0.699	0.312	0.310	0.687

通过计算还发现, 在所考虑的 Thiele 模数范围内, 只有 0.5 级反应出现了死区; 可见死区的出现不仅与 Thiele 模数 ϕ 有关, 而且与动力学模型参数有关。

2.2 可逆反应

考虑催化剂颗粒上进行如下可逆反应



文献[7]将 $f(y)$ 表示为

$$f(y) = \frac{K}{K-1} y^{n_1} [a_2(y-1) + 1]^{n_2} - \frac{1}{K-1} [a_3(y-1) + 1]^{n_3} [a_4(y-1) + 1]^{n_4} \quad (35)$$

对可逆反应, 当计算平衡死区时需要用到无量纲平衡浓度 y_e 的值. 在给定参数 $n_1 \sim n_4$ 、 $a_2 \sim a_4$ 及 K 值的条件下, 可由下式

$$K = \frac{[a_3(y_e - 1) + 1]^{n_3} [a_4(y_e - 1) + 1]^{n_4}}{y_e^{n_1} [a_2(y_e - 1) + 1]^{n_2}} \quad (36)$$

计算 y_e . 本文采用不同参数 $n_i (i=1, \dots, 4)$ 、 $a_i (i=2, 3, 4)$ 及 K 值的组合, 进行了大量计算, 所有计算结果表明用区域分割法计算可逆反应的有效因子具有相当高的精度. 表 2 列出了一组有代表性的计算结果.

Table 2 Effectiveness factors and radius of dead zone of reversible reaction if $n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = 1$
($K=5$, $a_2=0.5$, $a_3=-0.5$, $a_4=-0.8$)

ϕ	Planar ($m=0$)			Cylindrical ($m=1$)			Spherical ($m=2$)		
	ξ_N	ξ_D	b_0	ξ_N	ξ_D	b_0	ξ_N	ξ_D	b_0
0.5	0.849	0.852		0.936	0.919		0.965	0.960	
1	0.618	0.618		0.814	0.798		0.880	0.876	
2	0.348	0.345		0.556	0.550		0.684	0.682	
3	0.234	0.230		0.407	0.403		0.534	0.534	
4	0.176	0.171		0.318	0.315		0.432	0.433	
5	0.141	0.136		0.260	0.257		0.361	0.362	
6	0.117	0.113		0.220	0.218		0.309	0.312	
7	0.101	0.097	0.183	0.190	0.189		0.271	0.275	
8	0.088	0.085	0.286	0.168	0.165	0.210	0.240	0.246	
9	0.078	0.075	0.365	0.150	0.147	0.313	0.216	0.216	0.250
10	0.070	0.068	0.428	0.135	0.133	0.390	0.196	0.195	0.345

2.3 双曲型动力学

采用 Langmuir-Hinshelwood 模型来描述多相催化反应动力学时, 所得的各种动力学方程统称为双曲型动力学方程. 文献[7]指出多数场合下双曲型动力学对应的 $f(y)$ 具有下面的形式

$$f(y) = \frac{(1+A)^P y}{(1+Ay)^P} \quad (37)$$

式中, A 、 P 为动力学模型参数. 作者对三种不同形状的催化剂颗粒计算了不同参数 A 、 P 组合下的有效因子, 其中典型的计算结果如表 3 所示. 由表中列出的数据可见, 用本文方法计算的有效因子值与用正交配置法计算的精确解是相当吻合的.

通过大量计算表明, 无论是幂函数型动力学还是双曲型动力学, 利用区域分割法计算多孔催化剂的有效因子都具有较高的精度. 误差大多发生在 ϕ 很大的场合, 但此时对应的催化剂有效因子往往很小, 因此在这样一个 Thiele 模数范围内进行的多相催化反应过程已经失去了工业意义.

计算发现, 死区的出现除与 Thiele 模数 ϕ 有关外, 还与动力学参数有关. 对可逆反应, 平衡

浓度 y_e 的值越大, 则出现死区相对应的 ϕ 值越小. 由式(36)可见, y_e 与动力学参数 n 、 K 及 $a_2 \sim a_4$ 有关, 因此, 在同样的 ϕ 值下是否存在死区或死区半径的大小均与这些动力学参数有关. 同样, 双曲型动力学模型参数 P 、 A 对死区存在与否或死区半径的大小也有重要影响.

Table 3 Effectiveness factors and radius of dead zone of Langmuir-Hinshelwood model ($P=1$, $A=10$)

ϕ	Planar ($m=0$)			Cylindrical ($m=1$)			Spherical ($m=2$)		
	ξ_N	ξ_D	b_0	ξ_N	ξ_D	b_0	ξ_N	ξ_D	b_0
0.5	0.987	0.992		0.997	0.977		0.998	0.999	
1	0.952	0.956		0.987	0.968		0.993	0.993	
2	0.646	0.646		0.908	0.894		0.965	0.965	
3	0.431	0.427		0.712	0.713		0.872	0.870	
4	0.323	0.318	0.179	0.565	0.565	0.080	0.738	0.739	
5	0.259	0.255	0.343	0.466	0.465	0.313	0.627	0.628	0.213
6	0.216	0.212	0.453	0.396	0.394	0.442	0.543	0.544	0.385
7	0.185	0.182	0.531	0.344	0.342	0.528	0.479	0.478	0.489
8	0.162	0.159	0.589	0.304	0.302	0.590	0.427	0.426	0.561
9	0.144	0.142	0.635	0.272	0.270	0.638	0.385	0.384	0.615
10	0.129	0.127	0.672	0.246	0.244	0.676	0.351	0.350	0.656

对不可逆反应, 当内扩散的影响严重时, Bischoff 认为催化剂颗粒中心处反应物的浓度为零^[9]. 可以推之, 如果内扩散的影响严重到足以形成死区, 那么在死区与反应区交界的边界处反应物浓度也应为零或接近于零. 因此, 对不可逆反应动力学和双曲型动力学, 本文提出在死区与反应区交界处无量纲浓度 $y^* \rightarrow 0$ 这一边界条件是与 Bischoff 的假设一致的. 无论对于幂函数型动力学模型, 还是双曲型动力学模型, 在死区存在下计算的有效因子 ξ_D 与有效因子的数值解 ξ_N 十分吻合, 这一事实说明本文提出计算死区半径和相应有效因子的方法是合理的.

3 结论

本文提出了计算多孔催化剂颗粒有效因子的区域分割法, 并建立了求解步骤. 该法的优点是将求解催化剂颗粒内非线性扩散-反应微分方程定解问题转化为可以依次求解几个非偶联的代数方程问题, 从而大大简化了求解过程. 对反应受内扩散影响严重的情况, 用区域分割法还可同时计算死区半径, 且计算结果合理.

采用区域分割法对幂函数型动力学和双曲型动力学模型进行了大量的计算. 整个求解过程和计算结果表明, 用区域分割法求解扩散-反应问题, 其数学处理简单, 计算结果准确且运算快速, 耗时少.

符 号 说 明

b ——无量纲子区间长度	K ——可逆反应动力学参数
b_0 ——无量纲死区半径	m ——系数(对片形、圆柱形和球形颗粒分别取 0、1 和 2)
c ——反应组分浓度向量	N ——区间分割数目
c_A ——关键组分浓度, $\text{kmol} \cdot \text{m}^{-3}$	n ——不可逆反应反应级数
D_A ——关键组分的有效扩散系数, $\text{m}^2 \cdot \text{h}^{-1}$	

- R ——反应速率, $\text{kmol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{h}^{-1}$
 r ——一维颗粒中心向外表面方向上的空间坐标, m
 r_0 ——一维颗粒中心向外表面的距离, m
 W ——加权向量
 x ——无量纲距离
 y ——无量纲浓度
 y_e ——无量纲平衡浓度
 $y^{(i)}$ ——第 i 区间配置点处无量纲浓度
 $y^{(b_i)}$ ——第 i 区间端点处的无量纲浓度
 ν_i ——组分 A_i 的化学计量系数, 反应物取负值, 产物取正值
 ξ ——有效因子
 ξ_D ——用区域分割法计算的有效因子
 ξ_N ——有效因子的正交配置解
 ϕ ——Thiele 模数
 下角标
 i, j ——序号
 S ——催化剂颗粒外表面

参 考 文 献

- 1 Wedel S, Lusa D. Chem Engng Commun, 1980, 7 (4,5): 245 ~ 259
- 2 Gottifredi J, Gonzo E, Quiroga O, et al. Chem Engng Sci, 1981, 36(4): 705 ~ 711
- 3 Monica C, Regalbuto William Strieder, Arvind Varma, et al. Chem Engng Sci, 1988, 43(3): 513 ~ 518
- 4 朱炳辰, 宋维端, 房鼎业等. 化工学报, 1984, 35(1): 33 ~ 40, 41 ~ 50
- 5 林正国, 邵念慈, 李奔排等. 化工学报, 1984, 35(1): 66 ~ 71
- 6 房鼎业, 孙启文, 朱炳辰等. 高校化学工程学报, 1990, 4(2): 136 ~ 148
- 7 杨进, 李绍芬. 化工学报, 1987, 38(1): 1 ~ 21
- 8 Finlayson B A. Nonlinear Analysis in Chemical Engineering. New York: McGraw - Hill Inc, 1980. 73 ~ 97, 149
- 9 Bischoff K B. AIChE J, 1965, 11(2): 351 ~ 355

DOMAIN DIVISION METHOD FOR DETERMINING EFFECTIVENESS FACTORS OF POROUS CATALYSTS

Chen Shangwei

(Department of Light Industry Engineering, Sichuan Institute of Light Industry and Chemical Technology, Zigong 643033)

Abstract The domain division method for determining effectiveness factors of porous catalyst pellet is presented. By applying this method, the entire one - dimensional domain is divided into several equidistant subdomains and the nonlinear diffusion - reaction problems in a porous catalyst pellet are solved by using the one - point collocation method within each subdomain. In using the domain division method to determine the effectiveness factors of porous catalysts, a lot of calculations are made with power law type kinetic expressions and Langmuir - Hinshelwood kinetic expressions for three catalyst pellets. The agreement of the calculated results of this method with orthogonal collocation solution is satisfactory. The domain division method is simple for use and is not time consuming. The radius of dead zone can also be determined by using the domain division method, and the calculated results are reasonable.

Keywords effectiveness factor, domain division method, nonlinear diffusion - reaction problem, radius of dead zone