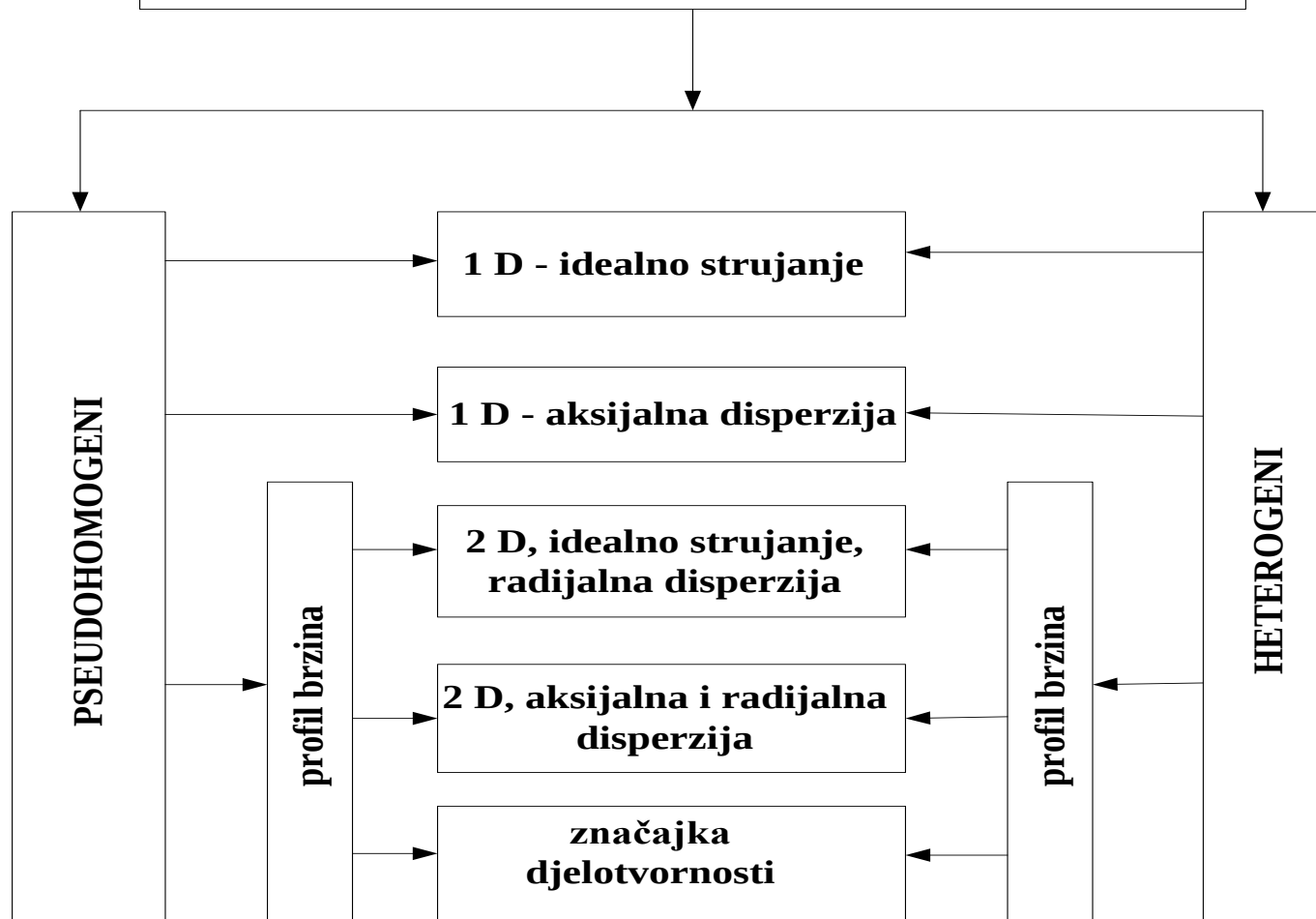


2 D MODELI CIJEVNIH REAKTORA ZA PSEUDOHOMOGENE I HETEROGENE SUSTAVE

akad. god. 2025./26.

MODELI CIJEVNIH REAKTORA S NEPOKRETNIM SLOJEM KATALIZATORA



2D modeli – promjene veličina stanja u aksijalnom i radijalnom smjeru

- Zbog složenosti fizičkog sustava i modeli su vrlo različiti i specifični.
- Često se koristi ***jednodimenzijski IS model***, a također i složeniji ***DS model*** koji su opisani prije, uz pretpostavku pseudohomogenosti reaktorskog prostora.

Za značajnu grupu **cijevnih reaktora s nepokretnim slojem katalizatora** koriste se složeniji modeli i to:

- ***Dvodimenzijski (2D) pseudohomogeni model*** uz radijalnu raspodjelu koncentracija i temperature, (***RS model***),
- ***Heterogeni jednodimenzijski*** model s idealnim strujanjem (***HID model***) te
- ***Heterogeni dvodimenzijski*** model koji uzima u obzir promjenu svojstava krute i fluidne faze u radijalnom smjeru (***HRS model***).

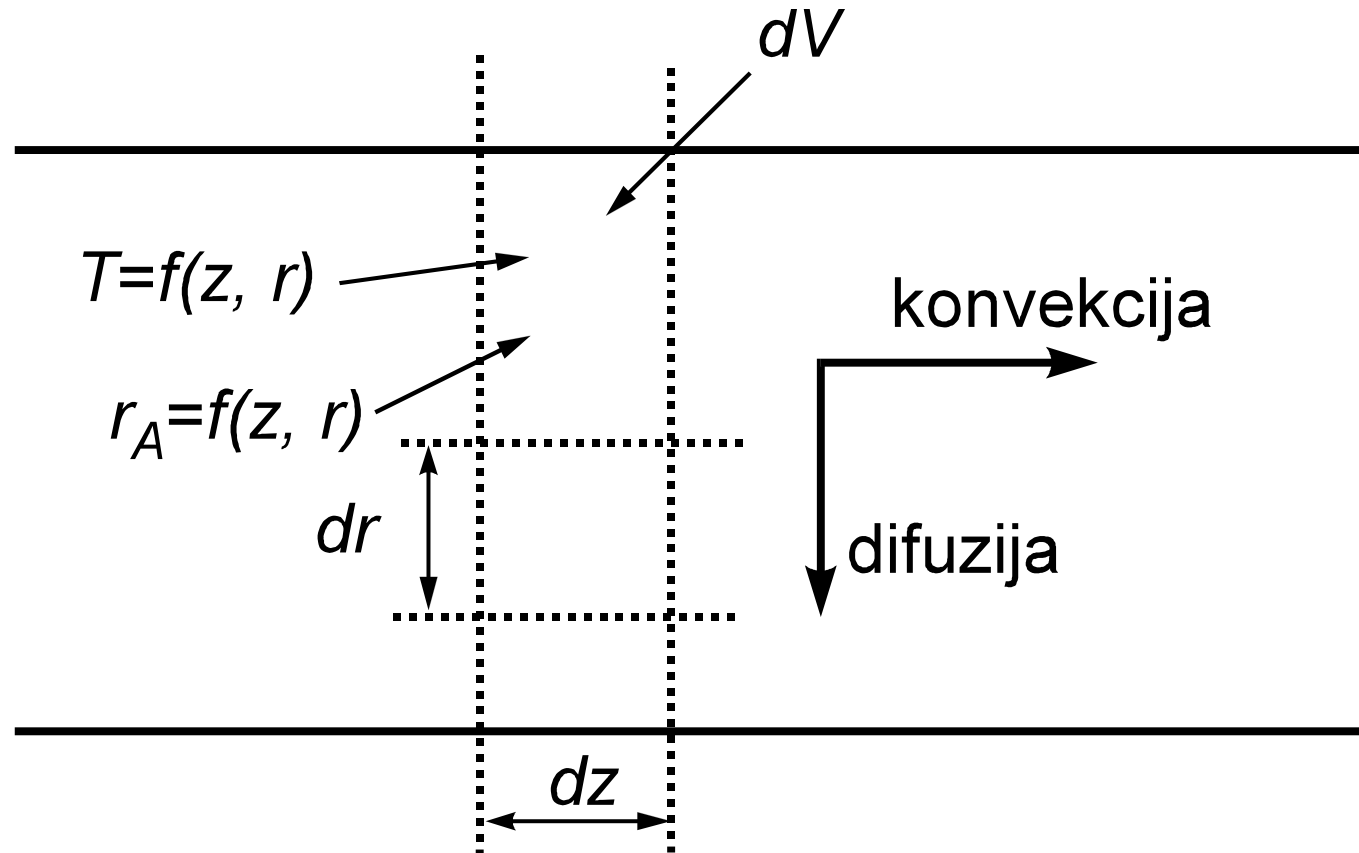
- **Svi** heterogeni modeli uzimaju u obzir promjenu varijabli i parametara u **pojedinim fazama**, npr. plin – krutina, plin – kapljevina, itd.
- Bilance za čvrstu fazu i fluid međusobno su povezane **konstitutivnim jednadžbama** koje u većini slučajeva **opisuju procese prijenosa kroz granični sloj fluida do površine čvrste faze**
- Složeniji modeli su opravdani kada su reakcije **egzotermne** ili **endotermne** - tada nije moguće postići izoternost u radijalnom smjeru.
- Uslijed **temperaturnih** razlika nastaju i **koncentracijske** razlike.

- Općenito, postojanje radijalnih gradijenata koncentracije i temperature posljedica je odstupanja od idealnog strujanja te nastajanja temperaturnih gradijenata **uslijed prijenosa topline iz unutrašnjosti reaktora kroz stijenku na medij za hlađenje/grijanje u plaštu**
- **Kako se dolazi do 2D modela?**
Ako se 1D modelima pridoda ***član za prijenos tvari u radijalnom smjeru (difuzija)*** dolazimo do odgovarajućeg 2D modela

Pseudohomogeni dvodimenzijski model (RS model)

- Koristi se za modeliranje reaktora s nepokretnim slojem katalizatora.
- Unutar reaktorskog prostora ***ne razlikuje*** se posebno fluidna faza od krute faze (katalizatora), pa je reaktorski prostor prema tome ***"homogen"***.
- Prijenos tvari i topline u radijalnom smjeru definira se ***prosječnim koeficijentima difuzije i vođenja topline***.
- Kinetički model sadrži ***koncentracije*** komponenata u ***fluidu*** (plinu), a ne na ili u katalizatoru (što općenito nije realna situacija).
- **Model se često koristi za reakcije koje nisu jako egzotermne ili endotermne.**

Pseudohomogeni dvodimenzijski model (RS model)



Dvodimenzijski pseudohomogeni modeli cijevnog reaktora
s nepokretnim slojem katalizatora

Pseudohomogeni dvodimenzijski model (RS model)

- Sloj katalizatora smanjuje **disperziju** strujanja u osnom (aksijalnom) smjeru tako da se zadržava samo **konvektivni** član idealnog strujanja.
- U radijalnom smjeru se pretpostavlja prijenos tvari i topline **difuzijom**.
- **Difuzija tvari** je uzrokovana temperaturnim razlikama između stijenke reaktora i reakcijske smjese.
- Model se primjenjuje **samo u slučaju kada se toplina prenosi kroz stijenku reaktora**.
- Za reaktore u **adijabatskom ili izotermnom radu** model se **ne koristi** - tada ne postoje koncentracijski ili temperaturni gradijenti

Pretpostavke pri izvođenju
dvodimenzijskog pseudohomogenog modela
za reaktore s nepokretnim slojem katalizatora

- Disperzija se u osnom, aksijalnom smjeru može **zanemariti**, jer je konvekcijski član uvijek mnogo značajniji.
- Reakcijska smjesa kroz reaktor prolazi **idealnim** strujanjem
- Prijenos tvari i topline može biti i u **radijalnom** smjeru, a formalno se opisuje difuzijom
- Parametri D_r , K_r i U su stalni po čitavoj dužini reaktora (prosječne vrijednosti).

Pseudohomogeni dvodimenzijski model

– *idealno strujanje*

- Tada je **bilanca množine tvari**

idealno
strujanje

$$u_s \frac{\partial C_A}{\partial z} - D_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} \right) - \rho_k r_A = 0$$

ρ_k - gustoća katalizatora, kg/m³

- Bilanca topline** je

$$u_s \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\lambda}{\rho_g c_{p_s}} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) + \frac{(-\Delta H_r) \rho_k r_A}{\rho_s c_{p_s}} = 0$$



K_r (ili oznaka h_r) ili $D_{h,r}$

Pseudohomogeni dvodimenzijski model

– *idealno strujanje*

- **Rubni uvjeti** potrebni za rješavanje ovih, međusobno zavisnih jednažbi su:

$$\left. \begin{array}{l} C_A = C_{A_0} \\ T = T_0 \end{array} \right\} \text{ za } z = 0$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \text{ za } r = 0 \text{ i } \frac{\partial C_A}{\partial r} = 0 \text{ za } r = R$$

i

$$\frac{\partial T}{\partial r} = -\frac{U}{\lambda} (T_R - T_w) \text{ za } r = R$$

*

T_w - temperatura stijenke reaktora

Pseudohomogeni dvodimenzijски model

– *idealno strujanje*

* **Objašnjenje rubnog uvjeta:**

Najveći otpor prijenosu topline nalazi se uz stijenku, pa se temperatura reakcijske smjese već na maloj udaljenosti znatno razlikuje od temperature stijenke $\Rightarrow$ **postoji toplinski granični sloj** kroz koji se toplina prenosi **brzinom** proporcionalnom **temperaturnoj razlici** $T_{r=R} - T_w$

- Ta je brzina jednaka **brzini vođenja topline** kroz sloj unutar reaktora u **radijalnom smjeru** (tj. *toplina koja se prenese do stijenke reaktora konvekcijom = toplini koja se prenese sa stijenke u reaktor vođenjem*).
- Parametri D_r i λ moraju se poznavati, odnosno izračunati iz eksperimenata.

Pseudohomogeni dvodimenzijski LM model

- Model **realnije opisuje stvarnost**, jer je vrlo vjerojatno da će postojati temperaturni gradijenti po presjeku reaktora ako se reakcijska smjesa želi npr. hladiti, a reakcija je egzotermna
- **Koristi se za reakcije u kapljevitom i u plinovitom sustavu**

Pseudohomogeni dvodimenzijski LM model

- Bilanca tvari:

$$u(r) \frac{\partial C_A}{\partial z} - D_r \left[\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_A}{\partial r} \right] - \rho_k r_A = 0$$

- Bilanca topline:

$$u(r) \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\lambda}{\rho_g c_{p_s}} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) + \frac{(-\Delta H_r) \rho_k r_A}{\rho_s c_{p_s}} = 0$$

- Rubni uvjeti identični kao i u prethodnom slučaju (IS), ali postoje i drugi oblici, npr. za **adijabatski način rada (nema izmjene topl. kroz stijenku)**:

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad \text{za} \quad r = R$$

$$T = T_s \quad \text{za} \quad r = R$$

Napomena: Kod homogenog i pseudohomogenog modela IS nisu mogući rubni uvjeti za adijabatski rad!

DS model?

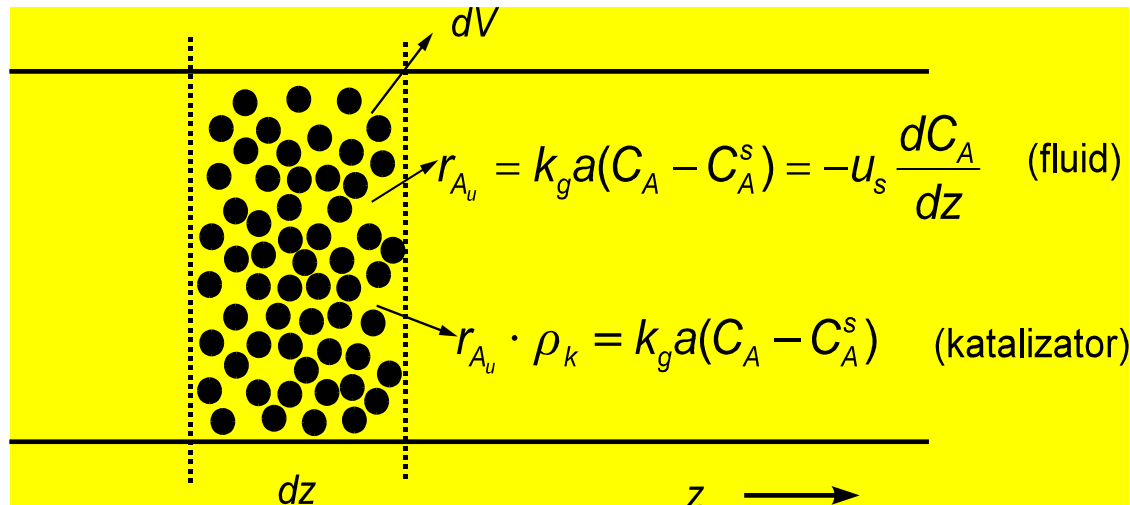
$$\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}$$

Rubni uvjeti identični kao u IS i LM)

Modeli uz pretpostavku heterogenosti sustava (HR modeli)

- Heterogeni modeli ili kraće HR modeli su skraćeni naziv za modele cijevnih reaktora u kojima je uzeta u obzir **heterogenost** reaktorskog prostora.
- Balance komponente i topline postavljaju se **odvojeno** za pojedinu fazu, npr. za fluid i krutu fazu, katalizator.
- HR modeli mogu biti **jednodimenzijski** ili **dvodimenzijski**, a ovi posljednji su općenito najsloženiji modeli cijevnih reaktora.



Model CR s nepokretnim slojem katalizatora (heterogeni sustav)

Jednodimenzijski heterogeni (HR) model

Model se osniva na sljedećim pretpostavkama:

- Strujanje kroz reaktor je *idealno*.
- ***Ne postoje radijalni gradijenti*** koncentracije tvari niti temperature.
- Kemijska reakcija se odigrava na ***površini*** katalizatora
- ***Nema usporenja unutarfaznom difuzijom.***

Model je prikladan za ***brze*** reakcije u ***adijabatskom*** reaktoru.

- Bilance se postavljaju za tvari i toplinu u fluidu i u katalizatoru:

Bilanca za komponentu u fluidu:

$$r_{A_u} = k_g a_s (C_A - C_A^s) = -u_s \frac{dC_A}{dz}$$

- Ukupna brzina reakcije određena je brzinom prijenosa tvari do površine katalizatora.

$$k_g a_s (C_A - C_A^s) = \rho_k r_A^s \eta$$

$\eta!$

*- značajku
djelotvornosti treba
rješavati za svaki
korak iteracije po
dužini reaktora*

Bilanca za toplinu u fluidu:

$$\frac{dT}{dz} u_s \rho_g c_p = h_f a_s (T^s - T) - \frac{4U}{d_r} (T - T_0)$$

- U jednadžbi ***ne postoji član za toplinu reakcije***, jer se reakcija odigrava na ***površini*** katalizatora, a ne u fluidu.

T_s - temperatura katalizatora,

T - temperatura fluida,

T_0 - temperatura plašta reaktora

h_f - međufazni prosječni koeficijent prijenosa topline za fluid

$$h_f a_s (T^s - T) = \rho_k (-\Delta H_r) r_A^s \eta$$

$\eta!$

Bilanca komponente za katalizator:

$$r_{A_u} = k_g a_s (C_A - C_A^s)$$

Kemijska reakcija na površini katalizatora (odnosi se na ***cijelu***, ukupnu površinu) jednaka je brzini međufaznog prijenosa reaktanta A do te površine.

Bilanca topline za katalizator:

$$(-\Delta H_r) \rho_k r_{A_u} = h_f (T^s - T)$$

- Potrebni su samo **početni uvjeti** (jer je model jednodimenzijski HR)

$$C_A = C_{A_0} \text{ i } T = T_0 \text{ za } z = 0$$

Bilance za fluid i bilance za katalizator međusobno su povezane brzinom međufaznog prijenosa tvari i topline!

Složeniji oblik jednodimenzijskog HR modela

- ***Složeniji*** jednodimenzijski model uzima u obzir i ***unutarfazne gradijente koncentracije i temperature*** u zrnu katalizatora.
(Opaska: model je jednodimenzijski s obzirom na fluid!)
- Temperatura fluida u radijalnom smjeru je ***stalna***, ali postoji ***raspodjela*** temperature kroz zrno katalizatora.
- Isto vrijedi i za ***koncentraciju*** tvari.
- Model se koristi **za opis adijabatskog cijevnog reaktora sa slojem katalizatora, kad je reakcija jače egzotermna odn. endotermna.**

- **Bilance za fluid** su:

$$r_{A_u} = k_g a_s (C_A - C_A^s) = -u_s \frac{dC_A}{dz}$$

i

$$\frac{dT}{dz} u_s \rho_g c_p = h_f a_s (T^s - T) - \frac{4U}{d_r} (T - T_0)$$

*isto kao kod jednostavnijeg
1D HR modela!*

C_A^s - koncentracija tvari A,

T^s - temperatura na površini zrna katalizatora.

- **Bilance za tvar i toplinu u katalizatoru** su:

$$\frac{D_e}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dC_{A_i}}{dr} \right) - \rho_k r_{A_u} (C_{A_i}, T_i) = 0$$

unutarfazni
gradijenti

$$\frac{\lambda_s}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dT_i}{dr} \right) + (-\Delta H_r) \rho_k r_{A_u} (C_{A_i}, T)_i = 0$$

C_{A_i} i T_i - koncentracija, odnosno temperatura unutar zrna katalizatora

D_e – djelotvorni koeficijent difuzije u poroznom zrnu katalizatora

λ_s – djelotvorni koeficijent toplinske difuzivnosti u katalizatoru

Rubni uvjeti su (za fluid):

$$C_A = C_{A_0} \quad \text{i} \quad T = T_0 \quad \text{za} \quad z = 0$$

Uvjet za česticu katalizatora u centru simetrije:

$$\frac{dC_{A_i}}{dr} = \frac{dT_i}{dr} = 0 \quad \text{za} \quad r = 0$$

Uvjet na vanjskoj površini katalizatora:

$$k_g (C_A^s - C_A) = -D_e \frac{dC_{A_i}}{dr} \quad \text{za} \quad r = \frac{d_p}{2}$$

$$h_f (T^s - T) = -\lambda_k \frac{dT_i}{dr} \quad \text{za} \quad r = \frac{d_p}{2}$$

- Model je prikazan sustavom nelinearnih diferencijalnih jednažbi prvog i drugog reda i može se riješiti pogodnim numeričkim metodama.

(Opaska: model je jednodimenzijski s obzirom na fluid – obične, a ne parc. dif. jednažbe)

- Model postaje jednostavniji uz pretpostavku da su čestice katalizatora i uz egzotermne reakcije **praktički izotermne** (nema značajnih temperaturnih gradijenata unutar čestice katalizatora).
- Glavni otpor prijenosu **topline** nalazi se u **graničnom** sloju/filmu **fluida** oko čestice katalizatora.
- Otpor prijenosu **tvari** značajan je **unutar** poroznog zrna, tj. unutarfazna difuzija je često spora.

Dvodimenzijski HM model

- Primjena modela zavisi od mogućnosti rješavanja složenog sustava PD jednačbi, kao i dostupnih eksperimentalnih podataka.
- Uzimaju se u obzir i promjene varijabli i parametara u ***osnom (aks.) i radialnom*** smjeru.
- Primjena modela zavisi od poznavanja mnogih parametara koji se nalaze u modelu (λ_k , λ_f , $\mathbf{D}_r$, $\mathbf{k}_g$, $\mathbf{h}_f$, itd.).

Dvodimenzijski HM model

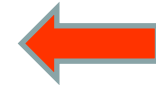
- Model je dan sustavom jednažbi:

- *za fluid*



$$k_g a_s (C_A - C_A^s) = \varepsilon D_r \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) - u_s \frac{\partial C_A}{dz}$$

$$h_f a_s (T^s - T) = u_s \rho_g c_p \frac{\partial T}{\partial z} - \lambda_f \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right)$$



- kovektivni prijenos tvari u aks. smjeru izjednačen je s prijenosom tvari u rad. smjeru i prijenosom tvari na površinu katalizatora; isto vrijedi i za prijenos topline!

Dvodimenzijski HM model

- U zrnju katalizatora

$$k_g a_s (C_A - C_A^s) = \eta \rho_k r_A^s$$

toplina koja se prenosi
vođenjem kroz katalizator

$$h_f a_s (T^s - T) = \eta \rho_k (-\Delta H_r) r_A^s + \lambda_k \left(\frac{\partial^2 T_i}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T_i}{\partial r} \right)$$

toplina koja se razvije reakcijom

Nema prostorne varijable u aksijalnom smjeru, jer je katalizator nepomičan unutar reaktora!

Dvodimenzijski HM model

- Rubni uvjeti** dani su izrazima:

$$C_A = C_{A_0} \quad i \quad T = T_0 \quad za \quad z = 0$$

$$\frac{dC_A}{dr} = 0 \quad za \quad z = 0$$

$$\frac{dT}{dr} = \frac{dT_i}{dr} = 0 \quad za \quad r = 0 \quad za \quad sve \quad z$$

$$\frac{dC_A}{dr} = 0 \quad za \quad r = 0 \quad za \quad sve \quad z$$

postoji razlika
između fluida i
krutine uz
stijenku reaktora,
 $h_{f,w}$ i $h_{f,k}$

$$h_{f,w} (T_w - T) = \lambda_f \frac{dT}{dr} \quad za \quad r = R \quad za \quad sve \quad z$$
$$h_{f,k} (T_w - T) = \lambda_k \frac{dT_i}{dr} \quad za \quad r = R \quad za \quad sve \quad z$$

- U praksi se koriste modeli koji su optimalni s obzirom na zahtjeve dimenzioniranja i poznavanja parametara.

U osnovi to znači da model treba:

- sadržavati parametre koji su poznati i koji su izračunati s **dovoljnom točnošću** i
- numerički i algoritamski mora biti dovoljno **jednostavan i primjenljiv** u realnim situacijama.

- **Jednodimenzijski pseudohomogeni modeli** prikladni su za **brz prethodni proračun reaktora** (kada radijalni gradijenti temperature nisu značajni) $\Rightarrow$ idealizacija stvarnog stanja.
- Dvodimenzijski pseudohomogeni modeli koriste se za reaktore koji se **griju ili hlade** kroz **stijenku** (radijalni gradijenti koncentracije i temperature ne mogu se zanemariti).
- Heterogeni modeli najbolje opisuju **složene procese prijenosa** tvari i kemijske reakcije u sloju katalizatora.
- Heterogeni modeli zahtijevaju **veći broj poznatih parametara** koji se odnose posebno na fluid, a posebno na kruti katalizator.

Numeričke metode

- Rješavanje mnogih problema u području kemijskog inženjerstva (a i drugdje), svodi se na rješavanje **običnih** (ODJ) i **parcijalnih** diferencijalnih jednačbi (PD jednačbi).
- U reakcijskom inženjerstvu mnogi tipovi reaktorskih modela dani su **PD jednačbama**, npr. dvodimenzijski pseudohomogeni i heterogeni model cijevnog reaktora, pa zatim modeli reaktora u nestacionarnom radu, itd.
- Do primjene elektroničkih računala, korištenje dvodimenzijskih i drugih složenijih modela bilo je praktički neizvedivo.

Numeričke metode

- Postoji cijeli niz problema vezanih uz rješavanje PD jednačbi s obzirom na **izbor metode** za numeričko rješavanje jednačbi.
- **Rubni i početni** uvjeti mogu također uvjetovati izbor numeričke metode.

Problemi numeričkog rješavanja odnose se na:

- izbor **prikladnog** algoritma,
- na postavljanje odgovarajućih **rubnih** uvjeta
- na probleme **stabilnosti i točnosti** numeričkog postupka.

Složeni modeli reaktora primjer su tzv. **paraboličkih** PD jednačbi.

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D = 0$$

a) eliptička: $B^2 - 4AC < 0$

b) parabolička: $B^2 - 4AC = 0$

c) hiperbolička: $B^2 - 4AC > 0$

Numeričke metode

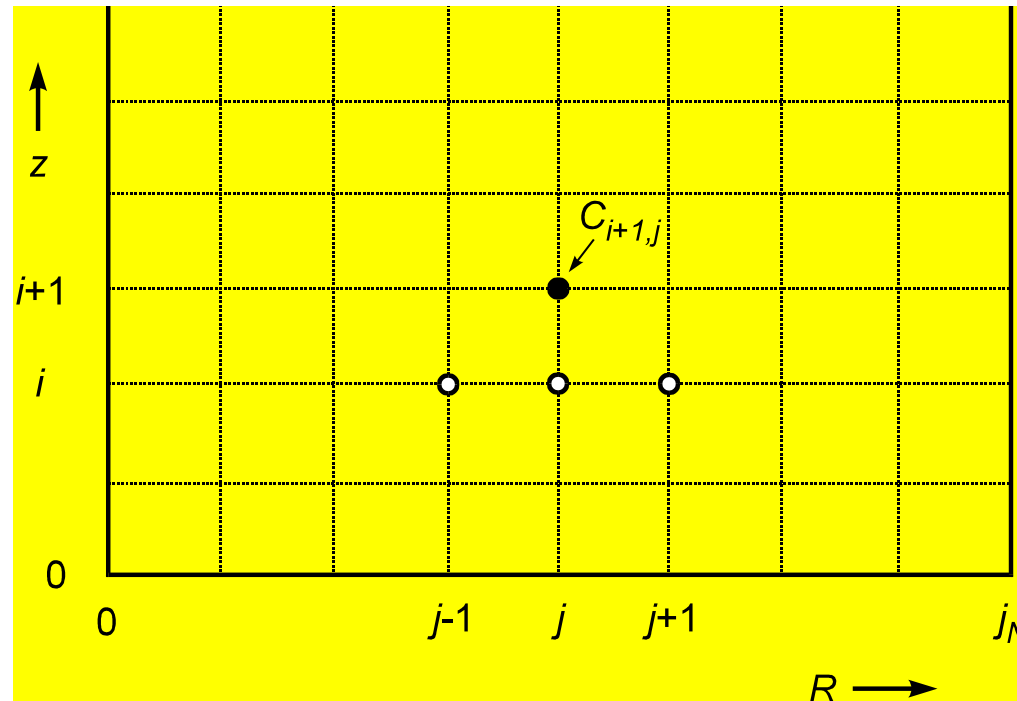
- Postoji čitav niz numeričkih metoda pogodnih za primjenu na elektroničkim računalima.

Metode se razlikuju po:

- vrsti i složenosti algoritma rješavanja,
- po broju potrebnih osnovnih računskih operacija,
- po ograničenjima s obzirom na stabilnost postupka
- po točnosti dobivenih rješenja

- Mogu se spomenuti sljedeće:
 - ❖ Neposredna metoda (eksplicitna),
 - ❖ Implicitne metode, npr. Crank - Nicolsonova metoda
 - ❖ **Metoda linija (djelomičnih aproksimacija)**
 - ❖ Metoda kolokacija

- **Neposredne metode** zasnivaju se na aproksimaciji svih derivacija u PD jednađbama s **konačnim razlikama** koje su izvedene iz razvoja u Taylorov red.



Koordinativna mreža i neposredna metoda rješavanja 2D modela CR

- Polumjer, odnosno dužina reaktora dijele se na određeni broj točaka kroz koje se vuku pravci paralelni promjeru, odnosno dužini.

- U presjecištima pravaca računaju se vrijednosti zavisnih varijabli prema postavljenim aproksimacijama.
- Postoji velik broj mogućih aproksimacija koje se postavljaju s obzirom na broj zadržanih članova u Taylorovom redu
- Tako je **središnja aproksimacija drugog reda za prvu derivaciju**

$$y'(x_{i,j}) = \frac{y(x_{i,j+1}) - y(x_{i,j-1})}{2\Delta x}$$

dok je za **drugu derivaciju**

(D.S. Riggs i sur.)

$$y''(x_{i,j}) = \frac{y(x_{i,j+1}) - 2y(x_{i,j}) + y(x_{i,j-1}))}{(\Delta x)^2}$$

- Za rješavanje su potrebne **rubne vrijednosti funkcija** koje se računaju iz rubnih uvjeta.
- **Rubni uvjeti** odnose se na vrijednosti zavisnih varijabli na geometrijskim granicama reaktora, odnosno za $z = 0$ i $r = 0$ (centar simetrije) kao i za $r = R$, tj. na stijenci reaktora.

Na primjer, **rubni uvjeti za $r = 0$ i $r = R$** su

$$\frac{\partial C_A}{\partial r} = 0 \quad \text{za} \quad r = 0$$

Ovaj uvjet proizlazi iz razloga **simetrije** u osi reaktora.

Drugi rubni uvjet je

$$\frac{\partial C_A}{\partial r} = 0 \quad \text{za} \quad r = R$$

- Taj uvjet znači da **ne postoji mogućnost "prolaza" komponente kroz stijenku reaktora.**
- Stabilnost numeričkog rješenja vezana je uz izbor **veličine odsječaka** u radijalnom i aksijalnom smjeru.

- Tako je **stabilno rješenje** za parabolični tip PD jednačbi drugog reda postignuto ako je ispunjen uvjet

$$\alpha \frac{\Delta z}{(\Delta r)^2} < 0.5$$

α - konstanta; u slučaju 2D modela $h_z = D_r / u_s$; $h_r = \lambda_r / u_s$

- Implicitne metode** (npr. Crank - Nicolsonova metoda)- algoritamski složenije, ali rješenja su stabilna; izračunavanje vrijednosti funkcija na osnovi aproksimacija derivacija
- Metoda linija** se zasniva na aproksimaciji samo druge derivacije, dok se prva derivacija se **ne aproksimira**.
- Na taj način dobiva se sustav od **N običnih** diferencijalnih jednačbi **prvog reda** za svaki odsječak u smjeru osi reaktora.

- Algoritamski je **metoda linija** jednostavna, a za rješavanje diferencijalnih jednačbi obično se koriste poznate metode, kao npr. numerička metoda Runge – Kutta.
- Uz opće **metode konačnih razlika**, rješavanje PD jednačbi moguće je i drugim metodama, posebice **metodom težinskih ostataka** ("*weighted residuals*") odnosno **metodom ortogonalnih kolokacija** (aproksimacija PDJ polinomom odn. funkcijom približenja (Legendre, Jacobi, Chebishev, Hermite)).

Koeficijenti prijenosa

- Modeli cijevnih reaktora sadržavaju cijeli niz različitih koeficijenata ***prijenosa tvari i topline***.
- Bez pouzdanih metoda njihovog određivanja nije moguća primjena složenijih jedno- i dvodimenzijskih modela, a posebice heterogenih modela.
- Treba razlikovati prijenos tvari i topline ***unutar*** zrna katalizatora od prijenosa kroz ***sloj*** katalizatora – tzv. "mikro" i "makro" prijenos.

Prijenos tvari i topline kroz zrno katalizatora

- Prijenos difuzijom može se prikazati osnovnom relacijom

$$N_i = -D_e \frac{dC_i}{dz}$$

D_e se naziva koeficijent prosječne (djelotvorne) difuzije i može se smatrati rezultantom udjela molekularne i Knudsenove difuzije

$$\frac{1}{D_e} = \frac{1 + \left(m^{\frac{1}{2}} - 1\right)x}{D_{e,m}} + \frac{1}{D_{e,k}}$$

$D_{e,m}$ i $D_{e,k}$ - koeficijenti molekularne, odnosno Knudsenove difuzije,
 x - udjel ključne komponente,
 m - omjer molekulskih masa.

$D_{e,m}$ i $D_{e,k}$ su funkcije molekulske, odnosno Knudsenove difuzije,

$$D_{e,m} = D_m f\left(\frac{\varepsilon}{\delta}\right)$$

$$D_{e,k} = D_k f\left(\frac{\varepsilon}{\delta_p}\right)$$

ε - poroznost,

δ_p - značajka usporenja

- Koeficijenti D_m i D_k računaju se iz poznatih izraza Chapman – Enskog.
- D_e može se eksperimentalno odrediti i iz kinetičkih mjerenja.
- Pri difuziji **kapljevina** u pore katalizatora, Knudsenova se difuzija općenito može **zanemariti**, a prosječna difuzija je za faktor od 10 manja od one koja vrijedi za plinove.
- **Toplinska vodljivost unutar zrna katalizatora**, λ_e uglavnom je dovoljno velika da spriječi nastanak temperaturnih gradijenata.

Prosječna toplinska vodljivost, λ_e kreće se oko $1,2 \cdot 10^{-3}$ (J cm⁻¹ s⁻¹ K⁻¹).

•Teorijski se ***prosječna toplinska vodljivost*** može izračunati prema izrazu

$$\lambda_e = \lambda_k \left(\frac{\lambda_g}{\lambda_k} \right)^\varepsilon$$

ε - poroznost zrna katalizatora

Međufazni koeficijenti prijenosa

- Prosječni koeficijenti prijenosa tvari i topline plina (ili kapljevine) do **površine zrna** katalizatora računaju se iz **empirijskih korelacija**.
- Te relacije sadrže bezdimenzijske značajke, a koje karakteriziraju hidrodinamičke uvjete.
- Postoji velik broj podataka o prijenosu u nepokretnom sloju katalizatora.

- Često se koristi tzv. " **J** " značajka koja se definira relacijom

$$J_b = \frac{k_g}{u} \left(\frac{\mu}{\rho D} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{k_g}{u} (Sc)^{\frac{2}{3}}$$

k_g je koeficijent prijenosa tvari međufaznom difuzijom

- **J_h značajke za prijenos topline** analogne su značajkama za prijenos tvari, pa je tada osnovna relacija

$$J_h = J_b = \frac{h}{uc_p \rho} \left(\frac{c_p \mu}{\lambda} \right)^{\frac{2}{3}} = \frac{h}{uc_p \rho} (Pr)^{\frac{2}{3}}$$

λ - toplinska vodljivost fluida,

h - koeficijent međufaznog prijenosa topline

Postoje različite eksperimentalne metode određivanja koeficijenta prijenosa topline (npr. "reaktor s jednim zrnom katalizatora").

Prijenos tvari i topline u sloju katalizatora

- Prijenos tvari i topline u sloju katalizatora može biti u ***aksijalnom i radijalnom smjeru.***
- Potrebno je poznavati i ***koeficijente prijenosa topline kroz stijenku reaktora.***

Prijenos tvari (prosječna difuzija)

- Difuzija (disperzija) tvari u sloju katalizatora uzrokovana je kako **molekularnom** tako i **vrtložnom** difuzijom (*eddy diffusion*).
- Prosječna difuzija izražava se s umnoškom koeficijenta molekularne difuzije s omjerom ε_p / δ_p .
- δ_p je značajka **usporenja** (*tortuosity factor*) s vrijednošću od oko 1.5.

- Prosječna difuzija kroz sloj dana je izrazom

$$\frac{1}{Pe} = \frac{1}{Pe_m} + \frac{1}{Pe_t}$$

- **Pe_m** i **Pe_t** su Pecletove značajke računate s obzirom na promjer zrna katalizatora za molekularnu, odnosno turbulentnu (vrtložnu) difuziju.
- **Pecletove značajke** mogu se računati poznavajući **Reynoldsovu, Re** i **Schmidtovu značajku, Sc** :

- Tako je

$$\frac{1}{Pe_r} = \frac{\varepsilon}{1.5 Re Sc} + \frac{1}{11(1 + 19.4) \left(\frac{d_p}{d_r} \right)^2}$$

i

$$\frac{1}{Pe_a} = \frac{\varepsilon}{1.5 + Re Sc} + \frac{1}{2}$$

Koeficijenti prijenosa (prolaza) topline kroz stijenku reaktora

Općenito, ukupni koeficijent prolaza topline, U dan je s izrazom

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_s} + \frac{1}{h_f}$$

h_s - koeficijent prijenosa topline kroz sloj katalizatora, a

h_f - koeficijent prijenosa topline kroz medij za zagrijavanje ili hlađenje u plaštu reaktora

- Pri tome se **zanemaruje otpor prijenosu topline kroz samu stijenku reaktora.**
- h_f se nalazi obično iz priručnika (tip medija), a h_s se može proračunati na osnovi empirijskih korelacija.

Prosječna toplinska vodljivost

- Poznavanje prijenosa topline u **radijalnom** smjeru kod cijevnih katalitičkih reaktora bitno je za njihovo dimenzioniranje i izvedbu.
- Prijenos topline u **aksijalnom** smjeru je od mnogo manjeg značenja.
- Prijenos topline u radijalnom smjeru uključuje **vođenje topline, konvekciju** i neki put **radijaciju** između čestica katalizatora i plinske faze.
- Na osnovi predodžbe o prijenosu topline kroz sloj katalizatora, mogu se izvesti različiti modeli, npr. tzv. "aditivni model".
- **Prosječna toplinska vodljivost** kroz sloj katalizatora u radijalnom smjeru **linearno** raste s povećanjem Re značajke i kreće se od **$1 - 10 \text{ kJ h}^{-1} \text{ m}^{-1} \text{ K}^{-1}$** .

Prosječna toplinska vodljivost u radijalnom smjeru, λ_{er}	1 - 11 W/(m K)
Koef. prijenosa topline u radijalnom smjeru, $h_{f,r}$	17 - 90 W/(m K)
Koeficijent prijenosa topline uz stijenku, $h_{f,w}$	110 - 300 W/(m K)
Pecletova značajka kod prijenosa tvari u radijalnom smjeru, Pe_r	6 - 20 (za $Re > 100, Pe = 11$)
Pecletova značajka kod prijenosa tvari u aksijalnom smjeru, Pe_a	0,01 - 10 (za $Re > 10, Pe = 2$)