

# NGHIÊN CỨU VÀ MÔ HÌNH HOÁ QUÁ TRÌNH VẬN TẢI CHẤT TRONG MÔI TRƯỜNG XÓP KHI CÓ MỘT HỆ PHẢN ỨNG HOÁ HỌC PHỨC TẠP

MAI XUÂN KỲ, TẠ HỒNG ĐỨC, PHẠM NGỌC ANH

## I. ĐẶT VẤN ĐỀ

Ngày nay có đến trên 90% các phản ứng hoá học được thực tiễn hoá trong công nghiệp là những phản ứng sử dụng xúc tác [1], trong đó các phản ứng xúc tác trong hệ đồng thể thật ra không nhiều mà chủ yếu là những phản ứng xúc tác dị thể, trong đó chất xúc tác là những chất rắn xốp và chất phản ứng thường là chất khí hay chất lỏng.

Các quá trình vận tải chất và phản ứng hoá học xảy ra đồng thời trên bề mặt và trong nội bộ các phần tử xúc tác rắn xốp ấy là rất phức tạp và từ lâu đã trở thành đối tượng nghiên cứu của các nhà công nghệ hoá học.

Quá trình vận tải bên ngoài xảy ra qua lớp biên thuỷ lực trên bề mặt ngoài phần tử chất rắn, có thể chi phối được thông qua vận tốc của môi trường liên tục, thì quá trình vận tải bên trong không gian mao quản của các vật thể xốp phụ thuộc vào cấu trúc của hệ mao quản, các thông số công nghệ, tính chất của các cấu tử tham gia quá trình vận tải và đặc biệt bị chi phối nhiều bởi tính phức tạp của hệ (hệ hai hay nhiều cấu tử).

Vận tốc của quá trình hoá học dị thể khi sử dụng các chất xúc tác xốp, có bề mặt bên trong phát triển chẳng những phụ thuộc vào vận tốc của phản ứng hoá học mà còn phụ thuộc (thậm chí có khi hoàn toàn được quyết định) bởi vận tốc của các quá trình vận tải chất và vận tải năng lượng bên trong không gian mao quản của các vật thể xốp [2, 3].

Ảnh hưởng của quá trình vận tải bên trong vật thể xốp lên hiệu quả của phản ứng hóa học dị thể lần đầu tiên được Damkoehler [1] nghiên cứu định lượng vào những năm 30 của thế kỷ trước. Sau đó, quá trình được nhiều nhà khoa học nghiên cứu và phát triển, trong đó đặc biệt phải kể đến Frank-Kamenetsky [2], Thiele, Zeldovitch và Aris [3].

Bài báo này trình bày một nghiên cứu về quá trình vận tải trong không gian mao quản của một phần tử xúc tác xốp, khi trong đó xảy ra một hệ phản ứng hoá học phức tạp:

$$\sum_{j=1}^N v_{ij} A_j = 0 \quad i = 1, 2, 3, \dots, M \quad (1)$$

với  $v_{ij}$  là hệ số tỉ lượng của cấu tử  $A_j$  trong phản ứng thứ  $i$ .

Khi hệ là phức tạp quá trình khuếch tán không thể mô tả bằng định luật Fick I nữa mà khi đó mật độ dòng khuếch tán của một cấu tử không phải chỉ phụ thuộc vào gradient nồng độ của cấu tử đó mà phụ thuộc cả vào gradient nồng độ và nồng độ của tất cả các cấu tử trong hệ.

Để mô tả quá trình khuếch tán trong hệ nhiều cấu tử, sử dụng phương trình Maxwell – Stefan [4]:

$$C \nabla x_j = \sum_{i=1}^N \frac{x_j j_i - x_i j_j}{D_{ij}} \quad (2)$$

trong đó: C: nồng độ chung của hỗn hợp ( $\text{mol/m}^3$ );  $x_j$ : phần mol của cấu tử  $A_j$ ;  $j_j$ : mật độ dòng của cấu tử  $A_j$  ( $\text{mol/m}^2 \cdot \text{s}$ );  $D_{ij}$ : Hệ số khuếch tán trong hệ 2 cấu tử  $i \neq j$  ( $\text{m}^2/\text{s}$ ).

Phương trình Maxwell – Stefan được Gunn R.D và King C.I [4] viết dưới dạng ma trận:

$$(j_j) = (H_{ji})^{-1} \cdot (g_i) \quad (2a)$$

$$H_{ji} = \frac{x_i}{D_{ij}} - \left[ \sum_{m=1}^N \frac{x_m}{D_{im}} \right] \delta_{ij} \quad (2b)$$

$$\delta_{ji} = \begin{cases} 1 & \forall i = j \\ 0 & \forall i \neq j \end{cases} \quad (2c)$$

$$(g_j) = C \cdot \nabla x_j \quad (2d)$$

Từ (2a) và (2b) rõ ràng “hệ số khuếch tán” của một cấu tử nào đó trong hệ nhiều cấu tử là một hàm số của thành phần và hệ số khuếch tán phân tử của tất cả các cấu tử trong hệ – việc tính toán mật độ dòng khuếch tán của các cấu tử trong hệ do đó là hết sức phức tạp.

Trong một số trường hợp, chẳng hạn khi có một cấu tử nào đó rất dư so với các cấu tử khuếch tán hoặc khi các cấu tử tham gia khuếch tán có đặc trưng tương tự nhau, có thể mô tả, tính toán quá trình thông qua định luật Fick [3].

Sau đây trình bày kết quả thiết lập và giải một số mô hình khuếch tán bên trong vật thể xốp khi sử dụng các phép đơn giản hoá đã nêu trên nhằm xác định một cách định lượng ảnh hưởng của quá trình khuếch tán bên trong lên quá trình tổng thể.

## II. THIẾT LẬP MÔ HÌNH KHUẾCH TÁN BÊN TRONG KHI CÓ MỘT HỆ PHẢN ỨNG HOÁ HỌC PHỨC TẠP

### 1. Tỉ lượng hoá học hệ phản ứng hoá học phức tạp

Khi trong không gian xét cân bằng xảy ra hệ phản ứng:

$$\sum_{j=1}^N \nu_{ij} A_j = 0 \quad i = 1, 2, 3, \dots, M \quad (3)$$

Ma trận hệ số tỉ lượng tương ứng sẽ là:

$$(v_{ji}) = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{1M} \\ v_{21} & v_{22} & \dots & v_{2M} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_{N1} & v_{N2} & \dots & v_{NM} \end{pmatrix} \quad (4)$$

Hạng của ma trận này chẳng hạn là S. Như vậy trong hệ sẽ có S cấu tử chìa khoá và S phản ứng độc lập tuyến tính. Ma trận  $(v_{kp})$  là ma trận hệ số tỉ lượng tương ứng với các cấu tử chìa khoá và các phản ứng độc lập tuyến tính.

k: là chỉ số của các cấu tử chìa khoá  $k = 1, 2, \dots, S$ ; p: là chỉ số của các phản ứng đã chuyển đổi theo số lượng các phản ứng độc lập tuyến tính  $p = 1, 2, \dots, S$ ; l: là chỉ số ứng với các cấu tử không chìa khoá còn lại  $l = S + 1, S + 2, \dots, N$ .

Để bài toán đơn giản ta chấp nhận giả thiết: “các phản ứng thành phần trong hệ đều là phản ứng bậc 1”, như vậy vận tốc của các phản ứng thành phần là:

$$(r_i) = (k_{ij})(p_j) \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (5)$$

trong đó  $(p_j)$  là áp suất riêng phần (nồng độ) của các cấu tử. Số lượng phản ứng thành phần cũng như số lượng các cấu tử trong một hệ phức tạp có thể là rất nhiều, trong các phép tính toán cân bằng chỉ cần lập và giải cân bằng chất cho (S) các cấu tử chia khoá trên cơ sở (S) các phản ứng độc lập tuyến tính.

Ta tính và xác lập tương quan giữa vận tốc các phản ứng độc lập tuyến tính  $(r_p)$  và các phản ứng thành phần cơ sở  $(r_i)$ .

Từ (3) ta có vận tốc biến đổi chất của một cấu tử  $A_j$  bất kì là:

$$(R_j) = (v_{ji})(r_i) = (v_{jp})(r_p) \quad (6)$$

và vận tốc biến đổi chất của các cấu tử chia khoá sẽ là

$$(R_k) = (v_{ki})(r_i) = (v_{kp})(r_p). \quad (7)$$

Như vậy khi có mô tả động học và xác định được vận tốc của phản ứng thành phần, từ (7) ta tính được vận tốc của các phản ứng độc lập tuyến tính:

$$(r_p) = (v_{kp})^{-1}(v_{ki})(r_i). \quad (8)$$

Sử dụng đại lượng vận tốc của các phản ứng độc lập tuyến tính, tính được vận tốc biến đổi chất của các cấu tử chia khoá  $(R_k)$  với  $(k = 1, 2, \dots, S)$ :

$$(R_k) = (v_{kp})(r_p) \quad (9)$$

Vận tốc biến đổi chất của các (I) cấu tử (không chia khoá) còn lại: từ (3) đã có:

$$(R_l) = (v_{lp})(r_p). \quad (10)$$

Từ (9) ta có:

$$(R_l) = (v_{lp})(v_{kp})^{-1}(R_k) \quad (11)$$

$$(R_l) = (\alpha_{lp})(R_k) \quad (11a)$$

với  $l = s + 1, s + 2, \dots, N$ ;  $k, p = 1, 2, \dots, S$ .

## 2. Mô hình khuếch tán trong vật thể xốp khi xảy ra một hệ phản ứng hoá học phức tạp

Xét một vật thể rắn xốp, chẳng hạn là một phần tử xúc tác mà trong không gian xốp của nó xảy ra hệ phản ứng phức tạp (1)

$$\sum_{j=1}^N v_{ji} A_j = 0 \quad i = 1, 2, 3, \dots, M.$$

Để mô tả và hiểu biết về hệ, rõ ràng phải định lượng được tất cả các cấu tử trong hệ thông qua việc thiết lập và giải các phương trình cân bằng chất của các cấu tử tương ứng.

Đã có phương trình cân bằng chất tổng quát cho một cấu tử  $A_j$  [5]

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} = -\text{div}(C_j \bar{\omega}) + \text{div}(D_{eff} \text{grad} C_j) + \sum_{i=1}^M v_{ji} r_i \quad (12)$$

trong đó:  $\sum_{i=1}^M v_{ji} r_i$  là vận tốc biến đổi chất của cấu tử  $A_j$  là:  $R_j = \sum_{i=1}^M v_{ji} r_i$

Khi chấp nhận giả thiết:

- Quá trình là ổn định  $\frac{\partial C_j}{\partial t} = 0$ .

- Trong không gian xốp không có dòng đối lưu:  $\text{div}(C_j \vec{\omega}) = 0$ .

Và chú ý rằng  $D_{\text{eff}} \cdot \text{grad} C_j = j_j$  (mật độ dòng của cấu tử  $A_j$ ). Ta có phương trình cân bằng chất cho cấu tử  $A_j$  sẽ là:

$$R_j - \left[ \frac{d}{dz} (j_j) + \frac{F}{z} (j_j) \right] = 0 \quad (13)$$

ở đây:  $z$  là toạ độ không gian;  $F$  là hệ số hình dạng của phân tử:

$$F = \begin{cases} 0 & \text{tám phẳng} \\ 1 & \text{hình trụ} \\ 2 & \text{hình cầu} \end{cases}$$

Trong phương trình cân bằng chất (13) mật độ dòng khuếch tán của cấu tử  $A_j$  trong hệ nhiều cấu tử phải được tính bằng phương trình Maxwell-Stefan (2), (2a). Mặt khác, để mô tả và định lượng các cấu tử trong hệ chỉ cần thiết lập và giải phương trình cân bằng chất ứng với các cấu tử chia khoá, ta có phương trình cân bằng chất cho cấu tử  $A_k$  trong một phân tử xúc tác xốp hình cầu:

$$R_k - \left[ \frac{d}{dR} (j_k) + \frac{2}{R} (j_k) \right] = 0 \quad (13a)$$

$k=1, 2, 3, \dots, S$  ( $S$ : hạng của ma trận  $v_{ij}$ );  $p=1, 2, 3, \dots, S$

$$(R_k) - \left[ \frac{d}{dR} (H_{kp})^{-1} (g_p) + \frac{2}{R} (H_{kp}) (g_p) \right] = 0 \quad (14)$$

trong đó phân tử của ma trận  $H_{kp}$  theo (2a) là:

$$H_{kp} = \left\{ \frac{x_k}{D_{kp}} - \sum_{m=1}^N \frac{x_m}{D_{km}} \cdot \delta_{kp} \right\} \frac{1}{\psi}$$

với  $\psi$  là hệ số thẩm của vật thể xốp [6].

Trường hợp quá trình khuếch tán trong miền chuyển tiếp (giữa khuếch tán phân tử và khuếch tán Knudsen) theo Bosanquet [7] ta có:

$$H_{kp} = \left\{ \frac{x_k}{D_{kp}} - \left[ \frac{1}{D_{kp}} + \sum \frac{x_m}{D_{km}} \right] \delta_{kp} \right\} \frac{1}{\psi} \quad (14b)$$

Rõ ràng để giải phương trình (14) nhằm tìm được phân bố nồng độ các cấu tử trong không gian xốp là không đơn giản, đặc biệt trong việc tính ma trận nghịch đảo  $(H_{ij})^{-1}$  cũng như  $(H_{pk})^{-1}$ . Với hệ chứa trên 03 cấu tử, bài toán đã rất phức tạp.

Chính vì vậy mà nhiều tác giả đã tìm cách đơn giản hoá phương trình Maxwell-Stefan (2), (2a) cũng có nghĩa là đơn giản hoá phương trình (14) để bài toán có thể giải được dễ dàng hơn.

Các nghiên cứu để đơn giản hoá phương trình Maxwell-Stefan (2), (2a) cũng như phương trình (14) đều tập trung vào hai vấn đề:

- Một là xem hệ số khuếch tán của mọi cấu tử trong hệ nhiều cấu tử là hằng số (không phải là hàm số) để sử dụng được định luật Fick trong tính toán.

- Hai là tìm phương pháp tính toán hệ số khuếch tán đó sao cho đạt độ chính xác cao, sai số phạm phải là chấp nhận được.

Frairbanks D.F., Wilke L.R. [7] giả thiết hệ số khuếch tán của một cấu tử trong hệ nhiều cấu tử bằng hệ số khuếch tán của nó trong hệ hai cấu tử với  $\sum j_j = 0$ , và tính hệ số khuếch tán của cấu tử  $A_j$  trong hệ nhiều cấu tử như sau:

$$\frac{1}{D_{jT}} = \frac{1}{1 - x_j} \sum_{m=1}^N \frac{x_m}{D_{jm}} \quad (15)$$

P. Schneider [6] cho rằng ma trận  $(H_{kp})$  có thể là ma trận đường chéo nếu như thoả mãn điều kiện:

$$\frac{\max |H_{kp}|}{\min |H_{kk}|} \leq 0,1 \quad (k \neq p).$$

Ông cũng đã cho rằng, khi trong hệ có một cấu tử  $A_m$  nào đó rất dư so với các cấu tử khác, có thể xem hệ số khuếch tán của từng cấu tử trong hệ nhiều cấu tử như là hệ số khuếch tán giữa cấu tử đó với cấu tử  $A_m$  nghĩa là:

$$D_{iT} = D_{im} \quad (16)$$

Vận dụng các giả thiết trên có thể đơn giản hoá phương trình (2a):

$$j_k = -D_e \text{grad} C_k \quad (17)$$

và phương trình (14)

$$(R_k) - D_{ek} \left[ \frac{d^2 C_k}{dR^2} + \frac{2}{R} \frac{dC_k}{dR} \right] = 0 \quad (18)$$

trong đó

$$D_{ei} = \psi D_{iT} \quad (19)$$

Với  $D_{iT}$  là hệ số khuếch tán của cấu tử  $A_i$  trong hệ nhiều cấu tử tính theo lý thuyết (15), (16) và khi quá trình khuếch tán xảy ra trong miền chuyển tiếp thì:

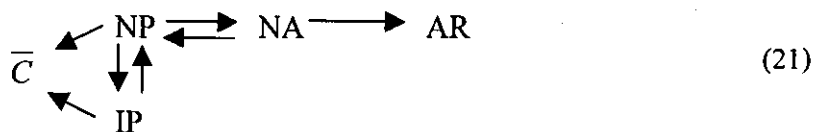
$$D_{ie} = \frac{1}{\psi} \left( \frac{1}{D_{Ki}} + \frac{1}{D_{iT}} \right) \quad (20)$$

Trong các biểu thức trên:  $\psi$ : là hệ số thẩm của phần tử xúc tác, là một hàm số của độ xốp và thường được xác định bằng thực nghiệm [6];  $x_i$ : là phần mol của cấu tử  $A_i$ ;  $C$ : là nồng độ chung của hệ, mol/l.

Các số liệu để giải bài toán được lấy trên cơ sở phản ứng Reforming dầu mỏ trên xúc tác Pt/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, tại T = 767 K.

### 3. Hệ phản ứng Reforming dầu mỏ

Hệ phản ứng Reforming dầu mỏ là một hệ phức tạp gồm nhiều phản ứng hoá học và nhiều cấu tử từ C1 → C10. Sản phẩm của Reforming là xăng chất lượng cao với hàm lượng các hydro cacbon thơm và Naphtene cao. Đề bài toán đơn giản hơn HENNINGSON – BUNGARD – NIELSON/8/ đã gộp các cấu tử thành các *giá cấu tử* với một số các bon trung bình nhất định và do đó có thể mô tả hệ phản ứng Reforming như sau:



Như vậy trong hệ có 7 phản ứng và 6 cấu tử, bao gồm:

NA	n. Parafin	AR	Aromate
IP	Isoparafin	$\bar{C}$	Các sản phẩm phân huỷ $\bar{C}=3$
NA	Naphtene	H <sub>2</sub>	Hydro

Các phản ứng được xem là bậc 1, nghĩa là:

$$r_i = k_i \cdot p_i$$

và đã tính được: Hệ có 4 phản ứng độc lập:  $p=1, 2, \dots, S$ , và chọn 4 cấu tử chìa khoá:  $k=1, 2, \dots, S$  (NP, IP, NA, AR).

Từ ma trận hệ số tỉ lượng ( $v_{ji}$ ) tương đương ứng với hệ phản ứng (21), ma trận hệ số tỉ lượng ứng với các cấu tử chìa khoá và các phản ứng độc lập tuyến tính là:

$$(v_{kp}) = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(v_{kp})^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

theo (8) và (9) ta có:

$$(R_k) = \begin{pmatrix} (-k_1 - k_2 - k_4)p_1 + k_6 p_2 + k_5 p_3 \\ k_2 p_1 - (k_6 - k_7)p_2 \\ k_1 p_1 - (k_3 + k_5)p_3 \\ k_3 \cdot p_3 \end{pmatrix}$$

Tại  $T = 767 \text{ K}$ ,  $P = 4,67 \text{ MPa}$

$$k_i = \begin{pmatrix} 2,405 \cdot 10^{-5} \\ 8,1542 \cdot 10^{-2} \\ 0,2715 \\ 4,440 \cdot 10^{-4} \\ 8,5860 \cdot 10^{-5} \\ 2,1010 \cdot 10^{-2} \\ 1,1740 \cdot 10^{-2} \end{pmatrix}, [\text{kmol/m}^3 \cdot \text{s} \cdot \text{MPa}].$$

Từ phương trình (13) mô hình khuếch tán và phản ứng hoá học cho một cấu tử chìa khoá trong phần tử xúc tác xếp hình cầu, với hệ Reforming như sau:

$$D_{ek} \left( \frac{d^2 C_k}{dR^2} + \frac{2}{R} \frac{dC_k}{dR} \right) + R_k = 0.$$

Với các điều kiện biên:

$$C_k = C_k^0 \text{ tại } R = R^0 \text{ (tại mặt ngoài phần tử xúc tác).}$$

$$\frac{dC_k}{dR} = 0 \text{ tại } R = 0 \text{ (tại tâm phần tử xúc tác).}$$

### III. PHƯƠNG PHÁP GIẢI MÔ HÌNH VÀ THẢO LUẬN KẾT QUẢ

Nếu như xem phần tử rắn xốp là đẳng nhiệt, để xác định phân bố nồng độ các cấu tử trong không gian xốp, chỉ cần giải các phương trình cân bằng chất:

$$D_{ek} \left[ \frac{d^2 C_k}{dR^2} + \frac{2}{R} \frac{dC_k}{dR} \right] + R_k = 0.$$

Theo (15) và (16) đã tính được hệ số khuếch tán của các cấu tử trong không gian mao quản như ghi ở bảng sau:

Bảng 1. Hệ số khuếch tán của các cấu tử trong không gian mao quản

Cấu tử	$\psi \frac{1-x_k}{\sum \frac{x_k}{D_{kj}}} = D_{ek} \cdot 10^6, \text{ m}^2/\text{s}$	$\psi D_{kH_2} = D_{ek} \cdot 10^6, \text{ m}^2/\text{s}$
NP	0,3422	1,2280
IP	0,3730	1,2320
NA	0,3733	1,2870
AR	0,3733	1,3540

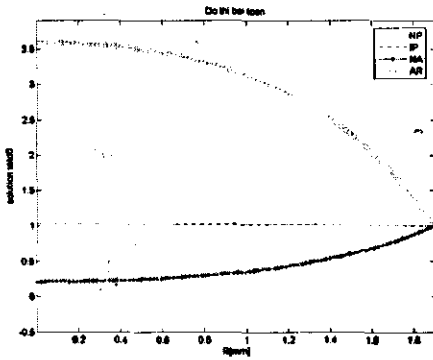
Khi xem quá trình khuếch tán xảy ra trong miền chuyển tiếp, đã tính được hệ số khuếch tán trong miền chuyển tiếp của các cấu tử như bảng 2.

Bảng 2. Hệ số khuếch tán của các cấu tử trong miền chuyển tiếp

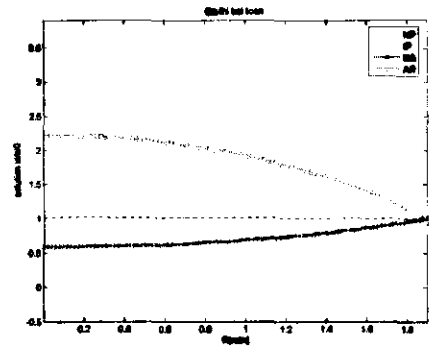
Cấu tử	$D_{ek} = \left( \frac{1}{D_{kH_2, \text{eff}}} + \frac{1}{D_{k, \text{eff}}} \right)^{-1} 10^6, \text{ m}^2/\text{s}$	$D_{ek} = \left( \frac{1}{D_{N, \text{eff}}} + \frac{1}{D_{k, \text{eff}}} \right)^{-1} 10^6, \text{ m}^2/\text{s}$
NP	0,5041	0,2444
IP	0,5048	0,2597
NA	0,5163	0,2605
AR	0,5338	0,2533

Mô hình được giải trên cơ sở khai thác phần mềm MATLAB 7.0.4 và đã thu được các nghiệm bằng số về phân bố nồng độ các cấu tử chia khoá trong không gian mao quản của một phần tử xúc tác xốp hình cầu đường kính tương đương  $D = 3,8\text{mm}$  được trình bày trên hình 1, 2, 3, 4.

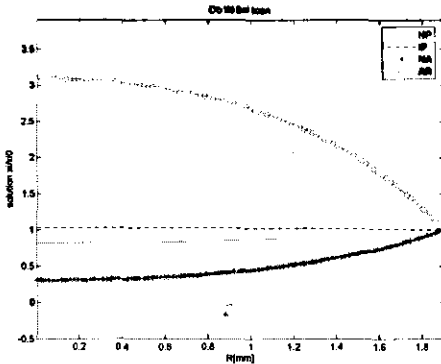
Từ kết quả hình 1, 2, 3, 4 cho thấy rằng bằng các cách tính hệ số khuếch tán của hệ nhiều cấu tử theo các cơ chế khác nhau ta thu được hình ảnh phân bố của chúng trong không gian mao quản là khác nhau. Các kết quả thu được đều cho thấy rằng cấu tử AR (các hợp chất thơm) và cấu tử NA (các hydrocacbon no mạch vòng) là những sản phẩm chính của phản ứng bị kìm hãm rất mạnh do hiện tượng khuếch tán bên trong. Chính vì vậy mà trong những thập kỷ cuối của thế kỉ trước, các nhà sản xuất và cung cấp xúc tác trên thế giới mong muốn chế tạo xúc tác Reforming có cấu trúc xốp với mao quản đồng đều, cấu hình phân tử hợp lý, đảm bảo quá trình vận tải sản phẩm ra khỏi vùng phản ứng một cách nhanh chóng nhất có thể.



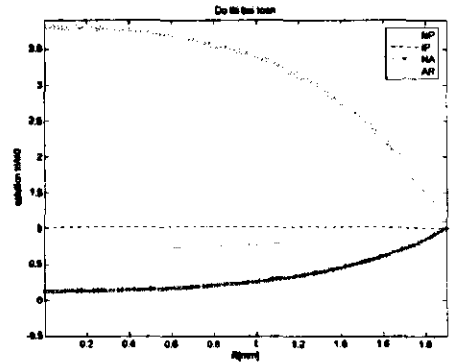
Hình 1.  $\psi \frac{1-x_k}{\sum \frac{x_k}{D_{ki}}} = D_{ek} \cdot 10^6, \text{m}^2/\text{s}$



Hình 2.  $\psi D_{kH_2} = D_{ek} \cdot 10^6, \text{m}^2/\text{s}$



Hình 3.  $D_{ek} = \left( \frac{1}{D_{kH_2\text{eff}}} + \frac{1}{D_{Kkeff}} \right)^{-1} 10^6, \text{m}^2/\text{s}$



Hình 4.  $D_{ek} = \left( \frac{1}{D_{Nkeff}} + \frac{1}{D_{Kkeff}} \right)^{-1} 10^6, \text{m}^2/\text{s}$

Phân bố nồng độ của các cấu tử trong phần tử xúc tác hình cầu khi sử dụng các mô hình hệ số khuếch tán khác nhau trong không gian mao quản và trong miền chuyển tiếp

#### IV. KẾT LUẬN

Bằng bài toán tỉ lượng hoá học đối với một hệ phức tạp đã thiết lập qua hệ giữa vận tốc các phản ứng thành phần của hệ và vận tốc các phản ứng độc lập tuyến tính ứng với các cấu tử chia khoá.

Đã vận dụng phương trình Maxwell-Stefan mở rộng (có kể đến khuếch tán Knudsen trong miền chuyển tiếp) cho một hệ phản ứng phức tạp xảy ra trong xúc tác xốp. Bài toán là phức tạp và để xác định phân bố nồng độ các cấu tử trong hệ bằng bài toán cân bằng chất, cần nhiều thời gian tính toán.

Đã đơn giản hoá phương trình Maxwell-Stefan bằng cách xem hệ số khuếch tán của mọi cấu tử trong hệ nhiều cấu tử là hằng số. Mật độ dòng khuếch tán của từng cấu tử tính theo định luật Fick với các phương pháp tính hệ số khuếch tán khác nhau.

Mô hình đã được giải bằng phương pháp Runge-Kutta trên cơ sở khai thác phần mềm MATLAB 7.0.4 và kết quả thu được cho thấy rằng các cấu tử AR (các hợp chất thơm) và NA (các hydrocacbon no mạch vòng) là các sản phẩm chính của quá trình, bị kìm hãm mạnh bởi quá trình khuếch tán bên trong.

Việc xem hệ số khuếch tán của cấu tử trong hệ nhiều cấu tử như là hệ số khuếch tán trong hệ 2 cấu tử.

Với một cấu tử dư thừa, có lẽ là phạm sai số lớn, vì cách tính này làm cho quá trình khuếch tán có lẽ là nhanh, các đường cong phân bố nồng độ AR, NA trên hình 2 và hình 3 thoải hơn nhiều so các đường cong phân bố nồng độ của chúng ở các cách tính khác nhau (hình 1 và 4).

*Lời cảm ơn.* Công trình do Chương trình Khoa học cơ bản Nhà nước tài trợ.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. E. Fiter, W. Fritz, and G. Emig - Technische Chemie, Springer Verlag Berlin – Heidelberg – NewYork, 1995.
2. D. A. Frank-Kameneski - Stoff und Waermeuebertragung in der chemischen Kinetik – Spinger Berlin/ Heidelberg/ Goettingen, 1959.
3. R. Aris – The mathematical Theory of Diffusion and Reaction in permeable catalysts, Clarendon Press - Oxford, 1975.
4. R. D. Gunn C. I. King AIChE - Journal 15 (1969) 507.
5. Mai Xuân Kỳ - Thiết bị phản ứng trong công nghiệp hoá học 1, 128-131.
6. P. Schneider, M. Cerna Coll - Czechoslov. Chem. Commun. 43 (1) 1978.
7. C. R. Wilke - Ind. Eng. Chem. 42 (1950) 471.
8. J. Henningson, J. Bundgart, M. Nielson Brit - Chem. Eng. 15 (1970) 11.

#### SUMMARY

#### RESEARCHING AND MODELLING MASS TRANFER PROCESS HAVING A COMPLEX SYSTEM OF CHEMICAL IN POROUS MEDIUM

Mass transfer in porous media is closely related to heteromogeneous catalysis reactions. In a multi-component system, the first Fick's law becomes unsuitable to model mass transfer.