**УДК 66.074.3**

Чибирёв М.А, магистрант 2-ого курса

(РХТУ им. Менделеева, г. Москва)

Глебов М.Б., профессор, доктор технических наук, заведующий кафедрой кибернетики химико-технологических процессов.

(РХТУ им. Менделеева, г. Москва)

# РАСЧЕТНОЕ ОБОСНОВАНИЕ ВЫБОРА ДИАМЕТРА ГРАНУЛ АКТИВИРОВАННОГО УГЛЯ ДЛЯ УДАЛЕНИЯ ОЗОНА В НЕПОДВИЖНОМ СЛОЕ

# CALCULATION-BASED SELECTION OF ACTIVATED CARBON PARTICLE DIAMETER FOR OZONE REMOVAL IN A FIXED BED

В работе предложен расчетный подход, учитывающий внешнюю массоотдачу, внутрипористую диффузию и гидравлическое сопротивление неподвижного слоя активированного угля при выборе диаметра гранул с целью удаления озона из газового потока. Показано, что уменьшение размера гранул способствует интенсификации массопереноса, но сопровождается увеличением перепада давления, тогда как применение более крупных гранул снижает сопротивление потоку, одновременно усиливая влияние внутренней диффузии. Предложенный подход может использоваться для предварительного выбора фракций активированного угля и последующего планирования экспериментальных исследований.

***Ключевые слова:*** *озон, активированный уголь, неподвижный слой, диаметр гранул, массоперенос, гидравлическое сопротивление.*

The study addresses the selection of an appropriate activated carbon particle diameter for ozone removal in a fixed bed. A calculation-based approach is proposed that accounts for external mass transfer, intraparticle diffusion, and the hydraulic resistance of the bed. It is shown that decreasing the particle size enhances mass transfer but increases the pressure drop, whereas larger particles reduce flow resistance while increasing the influence of intraparticle diffusion. The proposed approach can be used for the preliminary selection of activated carbon size fractions and for planning subsequent experimental studies.

***Keywords:*** *ozone, activated carbon, fixed bed, particle diameter, mass transfer, pressure drop.*

## Введение

Уменьшение диаметра гранул увеличивает внешнюю удельную поверхность слоя и сокращает характерную длину внутрипористой диффузии, но одновременно повышает гидравлическое сопротивление потоку. В моделях угольных фильтров существенным может быть именно внутренний перенос [1, 2], при этом сравнительные исследования подтверждают влияние размера фракции [3, 4].

Цель работы заключалась в определении расчётно-допустимого диапазона диаметров гранул активированного угля на основе совместного учёта внешнего массопереноса, внутрипористой диффузии и гидравлического сопротивления неподвижного слоя.

**Постановка расчетной задачи**

Рассмотрен условный неподвижный слой активированного угля высотой H = 50 мм и порозностью ε = 0,4 при аксиальном движении потока с поверхностной скоростью u = 0,1 – 0,3 м/с и варьированием диаметра частиц $d_p$ = 0,3 – 2 мм. Для воздуха при 25 °C приняты ρ = 1,184 кг/м$^3$, μ = 1,85 · 10$^{-5}$ Па·с и $D_m$ = 1,5 · 10$^{-5}$ м$^2$/с. Целевое соотношение концентраций озона на выходе и входе: $C_{вых}/C_{вх}$ = 0,1.

Для ориентировочного расчета эффективной константы удаления озона использовали модель идеального вытеснения и определяли по выражению (1):

$$k_{eff} = \frac{u}{H} \ln\left(\frac{C_{вх}}{C_{вых}}\right) \quad (1)$$

где $k_{eff}$ - эффективная объёмная константа удаления озона, с$^{-1}$, отнесённая к объёму неподвижного слоя; данная величина не является собственной кинетической константой активированного угля.

**Расчетная методика**

Гидродинамические параметры рассчитывали через критерий Рейнольдса (2):

$$Re = \frac{\rho u d_p}{\mu} \quad (2)$$

и критерий Шмидта (3):

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_m} \quad (3)$$

Определяли критерий Шервуда по корреляции Wakao-Funazkri [5], а затем выражали из него коэффициент внешней массоотдачи (4):

$$Sh = \frac{k_c d_p}{D_m} = 2 + 1{,}1 Re^{0{,}6} Sc^{\frac{1}{3}} \quad (4)$$

где $k_c$ – коэффициент внешней массоотдачи, м/с.

Внешний перенос оценивали критерием Мирса [6] (5):

$$C_{Me} = \frac{k_{eff} R_p}{(1-\varepsilon) k_c} < 0{,}15 \quad (5)$$

где $R_p$ – радиус гранулы, м.

Внутренний перенос оценивали критерием Вайса-Пратера [7] (6):

$$C_{WP} = \frac{k_{eff} {R_p}^2}{(1-\varepsilon) D_p} < 1 \quad (6)$$

где $D_p$ - эффективный коэффициент внутрипористой диффузии озона, м$^2$/с.

Для ориентировочного расчета приняли $D_p = 3 \cdot 10^{-6}$ м$^2$/с. Это значение требует экспериментального уточнения, поскольку зависит от поровой структуры материала и соотношения механизмов переноса [1].

Перепад давления рассчитывали по уравнению Эргуна [8] (7):

$$\frac{\Delta P}{H} = \frac{150 \mu (1-\varepsilon)^2 u}{\varepsilon^3 {d_p}^2} + \frac{1{,}75 \rho (1-\varepsilon) u^2}{\varepsilon^3 d_p} \quad (7)$$

где $\Delta P$ – перепад давления, Па.

Расчётно-допустимую область определяли условиями: $C_{Me} < 0{,}15$, $C_{WP} < 1$, $\Delta P < 500$ и Re $\geq 3$. Нижней границей $d_p$ задавали гидравлическое ограничение и область применимости корреляции массоотдачи Wakao-Funazkri, верхней – критерии Мирса и Вайса-Пратера.

**Результаты расчета**

Таблица 1. Рассчитанные параметры процесса при $D_p = 3 \cdot 10^{-6}$ м$^2$/с

| u, м/с | $d_p$, мм | Re | $C_{Me}$ | $C_{WP}$ | $\Delta P$, Па |
|---|---|---|---|---|---|
| 0,1 | 0,4 | 2,56 | 0,01 | 0,1 | 512 |
| 0,1 | 0,8 | 5,12 | 0,033 | 0,41 | 134 |
| 0,1 | 1,2 | 7,68 | 0,064 | 0,92 | 62 |
| 0,2 | 0,4 | 5,12 | 0,016 | 0,2 | 1073 |
| 0,2 | 0,8 | 10,24 | 0,05 | 0,82 | 292 |
| 0,2 | 1,2 | 15,36 | 0,095 | 1,84 | 141 |
| 0,3 | 0,4 | 7,68 | 0,021 | 0,31 | 1682 |
| 0,3 | 0,8 | 15,36 | 0,063 | 1,23 | 475 |
| 0,3 | 1,2 | 23,04 | 0,119 | 2,76 | 235 |

При $d_p$ = 0,4 мм критерии $C_{Me}$ и $C_{WP}$ остаются ниже предельных значений, однако перепад давления составляет от 512 до 1682 Па. При u = 0,1 м/с Re = 2,56 < 3, что выходит за принятую область применимости выбранной корреляции массоотдачи. При $d_p$ = 0,8 мм все принятые условия выполняются при скорости u = 0,1 и 0,2 м/с. Увеличение диаметра до 1,2 мм снижает сопротивление, однако при u = 0,2 м/с приводит к увеличению критерия Вайса-Пратера до 1,84 и возможному ограничению диффузии в порах угля. При рассмотренных условиях ограничение переноса внутрипористой диффузией возникает раньше внешнего.

По результатам расчёта построена графическая зависимость сочетаний диаметра частиц и поверхностной скорости газа, удовлетворяющих принятым транспортным и гидравлическим ограничениям (рис. 1).

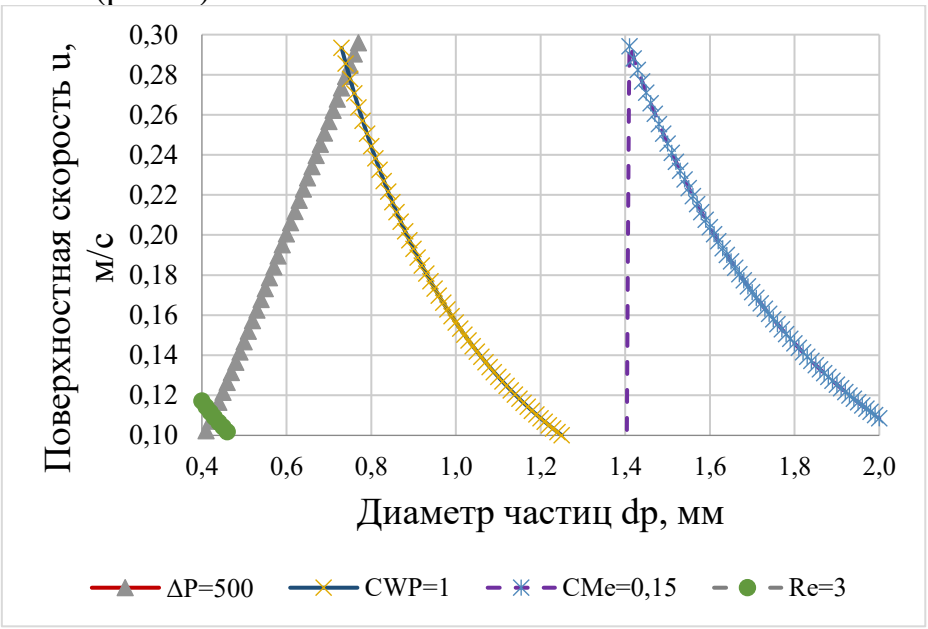


Рисунок 1. Область выбора диаметра частиц по критериям переноса и гидравлическому сопротивлению при $D_p = 3 \cdot 10^{-6}$ м$^2$/с.

Расчетно-допустимая область выбора диаметра частиц сужается с ростом скорости. При u > 0,282 м/с ограничения $C_{WP} < 1$ и $\Delta P < 500$ Па одновременно не выполняются. Рост $D_p$ смещает верхнюю границу к большему диаметру частиц, поэтому численные интервалы необходимо подбирать на основе конкретного угля.

Расчет основан на допущении о протекании процесса по модели идеального вытеснения, кинетике первого порядка, сферическом эквиваленте частиц и равномерной укладке. Он не учитывает дезактивацию активной поверхности угля, влажность, аксиальную дисперсию и несферичность гранул.

**Выводы**

Полученная в результате расчета область рационального диаметра частиц при заданных ограничениях позволяет выбрать фракции угля для последующей экспериментальной проверки. Для принятых условий H = 50 мм, ε = 0,4, $C_{вых}/C_{вх}$ = 0,1, $D_p = 3 \cdot 10^{-6}$ м$^2$/с и $\Delta P < 500$ Па. Расчётно-допустимые интервалы диаметра частиц составили 0,47 - 1,25 мм при u=0,1 м/с, 0,60 - 0,88 мм при u = 0,20 м/с и 0,69 - 0,79 мм при u = 0,25 м/с. Нижняя граница области определяется гидравлическим сопротивлением и областью применимости корреляции внешней массоотдачи, а верхняя — ограничением внутрипористой диффузии. Критерий Мирса в рассмотренном диапазоне не ограничивает выбор диаметра частиц. При скорости около 0,28 м/с расчётно-допустимая область исчезает. Полученные интервалы следует рассматривать как ориентировочные, поскольку они зависят от эффективного коэффициента диффузии, характеристик конкретного угля и принятых требований к степени очистки и перепаду давления.

**Список литературы**

1. Khararoodi M. G., Haghighat F., Lee C.-S. Removal of indoor air ozone using carbon-based filters: systematic development and validation of a predictive model // Building and Environment. 2022. Vol. 219. Art. 109157. DOI: 10.1016/j.buildenv.2022.109157.

2. Álvarez P. M., Masa F. J., Jaramillo J., Beltrán F. J., Gómez-Serrano V. Kinetics of ozone decomposition by granular activated carbon // Industrial & Engineering Chemistry Research. 2008. Vol. 47, No. 8. P. 2545-2553. DOI: 10.1021/ie071360z.

3. Pradyasti A., Azhariyah A. S., Karamah E. F., Bismo S. Preparation of zinc oxide catalyst with activated carbon support for ozone decomposition // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. 2018. Vol. 105, No. 1. Art. 012013. DOI: 10.1088/1755-1315/105/1/012013.

4. Namdari M., Lee C.-S., Haghighat F. A systematic comparative study of granular activated carbons and catalysts for ozone removal // Building and

Environment. 2022. Vol. 224. Art. 109510. DOI: 10.1016/j.buildenv.2022.109510.

5. Wakao N., Funazkri T. Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid mass transfer coefficients in packed beds: correlation of Sherwood numbers // Chemical Engineering Science. 1978. Vol. 33, No. 10. P. 1375-1384. DOI: 10.1016/0009-2509(78)85120-3.

6. Mears D. E. Tests for transport limitations in experimental catalytic reactors // Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development. 1971. Vol. 10, No. 4. P. 541-547. DOI: 10.1021/i260040a020.

7. Weisz P. B., Prater C. D. Interpretation of measurements in experimental catalysis // Advances in Catalysis. 1954. Vol. 6. P. 143-196. DOI: 10.1016/S0360-0564(08)60390-9.

8. Ergun S. Fluid flow through packed columns // Chemical Engineering Progress. 1952. Vol. 48, No. 2. P. 89-94.