NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI
ILMIY AXBOROTNOMASI, [2026-6]
ISSN:2181-1458
ISSN:2181-0427

02.00.00-KIMYO FANLARI
journal.namdu.uz
CHEMICAL SCIENCES

UDK 547.057; 665.652.72

METANNI OKSIKONDENSATLASH JARAYONINI MAQBULLASHTIRISH VA MODELLASHTIRISHNING TEXNOLOGIK ASOSLARI

Nargiza Tursunova
Normurot Fayzullaev
Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti, Samarqand, O‘zbekiston
t-nargiza2019@mail.ru

Annotatsiya. *Ushbu maqolada metanni oksikondensatlash jarayonini nazariy maqbullashtirish va matematik modellashtirish masalalari ko‘rib chiqilgan. Jarayon unumdorligiga ta’sir etuvchi asosiy mustaqil o‘zgaruvchilar sifatida CH4:O2 oqimi nisbati, ishchi harorat va metan sarfi tanlanib, ularning metan konversiyasi hamda C2-uglevodorodlar selektivligiga ta’siri baholangan.*

Kalit so‘zlar: *adiabatik reaktor, bosim, kvadratik model, metan, metanning oksidlanishli kondensatlanishi, maqbullashtirish, matematik modellashtirish, harorat, qaynash qatlamli reaktor.*

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ОПТИМИЗАЦИИ И МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ОКСИКОНДЕНСАЦИИ МЕТАНА

Аннотация. *В данной статье рассматриваются вопросы теоретической оптимизации и математического моделирования процесса оксиконденсации метана. В качестве основных независимых переменных, влияющих на эффективность процесса, были выбраны соотношение потоков CH4:O2, рабочая температура и потребление метана, и было оценено их влияние на конверсию метана и селективность по углеводородам C2.*

Ключевые слова: *адиабатический реактор, давление, квадратичная модель, метан, окислительная конденсация метана, оптимизация, математическое моделирование, температура, реактор с псевдоожиженным слоем.*

TECHNOLOGICAL FOUNDATIONS FOR OPTIMIZATION AND MODELING OF THE METHANE OXYCONDENSATION PROCESS

Abstract. *This article examines the issues of theoretical optimization and mathematical modeling of the methane oxycondensation process. The CH4:O2 flow ratio, operating temperature and methane consumption were selected as the main independent variables affecting the process efficiency, and their impact on methane conversion and C2 hydrocarbon selectivity was assessed.*

Keywords: *adiabatic reactor, pressure, quadratic model, methane, oxidative condensation of methane, optimization, mathematical modeling, temperature, fluidized bed reactor.*

Kirish

Metanning oksidlanishli kondensatlanishi (MOK) tabiiy gazni bevosita etan va etilen kabi qimmatli C_2-uglevodorodlarga aylantirishning eng muhim noan’anaviy yo‘nalishlaridan biri hisoblanadi [1-4]. Ushbu jarayonning dolzarbligi shundaki, u an’anaviy bug‘li krekingga muqobil ravishda metandan to‘g‘ridan-to‘g‘ri olefinlar olish imkonini beradi, biroq yuqori harorat, kuchli ekzotermiya va chuqur oksidlanish mahsulotlari hosil bo‘lishi bilan bog‘liq murakkab kinetik va reaktor muammolari uning sanoat tatbiqini cheklab kelmoqda [5-8].

So‘nggi yillarda MOK jarayonini samarali boshqarishda katalizator tabiatidan tashqari, texnologik parametrlarni maqbullashtirish va matematik modellashtirishga alohida e’tibor qaratilmoqda. Jumladan, CH_4/O_2 nisbati, ishchi harorat va metan sarfi jarayon unumdorligi hamda mahsulot selektivligiga bevosita ta’sir qiluvchi asosiy omillar sifatida qaraladi. MOK jarayonini nazariy tahlil qilishda izotermal ideal sig‘imli reaktor (CSTR) modeli va kvazigomogen kinetik yaqinlashuv keng qo‘llaniladi. Bu yondashuv reaktor ichidagi modda oqimlari, metan va kislorod konversiyasi, shuningdek C_2-uglevodorodlar selektivligini hisoblash imkonini beradi. Differensial tenglamalar tizimini yechish uchun to‘rtinchi tartibli Runge-Kutta usuli qo‘llangani, kirish ma’lumotlari sifatida harorat, bosim, tezlik konstantalari va gaz aralashmasi tarkibi olingani ko‘rsatilgan. Bunday yondashuv adabiyotdagi mikrokinetik va reaktor modellari bilan mos

keladi hamda jarayon parametrlarining maqsadli mahsulot chiqishiga ta'sirini bashorat qilish uchun qulay hisoblanadi [4, 9-11].

Reaktor konstruksiyasi nuqtai nazaridan adiabatik va qaynash qatlamli tizimlar MOK uchun ko'p muhokama qilinadigan variantlardan sanaladi. Adiabatik reaktorlar konstruksiya soddaligi, past metall sig'imi va sanoatda qulayligi bilan tavsiflangan, biroq katta issiqlik effekti tufayli qatlam bo'ylab harorat noteng taqsimlanishi va selektivlik pasayishi mumkinligi ko'rsatilgan. Shu sababli ko'p bosqichli adiabatik qurilmalar yoki qaynash qatlamli reaktorlarda massa va issiqlik almashinuvini hisobga olgan modellar muhim ahamiyat kasb etadi [12-17].

Shunday qilib, metanni oksikondensatlash jarayonini maqbullashtirish va modellashtirish ilmiy hamda amaliy jihatdan dolzarb vazifa bo'lib, u reaksiyaning kinetik qonuniyatlarini, harorat-bosim rejimlarini, CH_4/O_2 nisbatini va reaktor gidrodinamikasini bir vaqtning o'zida hisobga olishni talab qiladi. Bunday kompleks yondashuv orqali metan konversiyasi, S_2 selektivligi va etilen chiqishini bashorat qilish, shuningdek sanoat miqyosida samarali reaktor rejimlarini asoslash mumkin [9-17].

Tadqiqot metodologiyasi

Metanni oksikondensatlash jarayonini nazariy o'rganish va texnologik parametrlarni maqbullashtirish maqsadida tadqiqot matematik modellashtirish usulida amalga oshirildi. Hisoblashlarda metanning oksidlanishli kondensatlanishi jarayoni uchun asosiy komponentlar sifatida CH_4, O_2, C_2H_4, C_2H_6, CO_2, CO, H_2 va H_2O qabul qilindi. Jarayonni tavsiflash uchun kvazigomogen kinetik model va izotermal ideal sig'imli reaktor (CSTR) yaqinlashuvi qo'llanildi. Oddiy differensial tenglamalar tizimi Koshi boshlang'ich shartlari asosida yechildi, hisoblash ishlari esa MathCad dasturida to'rtinchi tartibli Runge–Kutta usuli yordamida bajarildi. Dasturga reaksiya harorati, bosim, alohida bosqichlar uchun reaksiya tezlik konstantalari hamda dastlabki gaz aralashmasining tarkibi kiritildi.

Tadqiqotda jarayon unumdorligiga ta'sir etuvchi uchta asosiy mustaqil omil tanlandi: CH_4/O_2 nisbati, reaksiya harorati va metan sarfi. Ularning qiymatlari quyidagi diapazonda qabul qilindi: CH_4/O_2=1-3, harorat 700-900 °C, metan sarfi esa $(1,2\text{-}2,8)\cdot10^{-3}$ mol/s. Jarayonni nazariy maqbullashtirish uchun ikkinchi tartibli kvadratik regressiya modeli qo'llanildi, bunda omillar orasidagi chiziqli, kvadrat va o'zaro ta'sir koeffitsientlari hisobga olindi. Ekspluatatsion hisob-kitoblar uchun asosiy ishchi rejim sifatida 800 °C harorat, $CH_4:O_2$=2 (hajmiy), metan oqimi $1,6\cdot10^{-2}$ mol/s, reaktor uzunligi 80 sm, nayning ichki diametri 1,2 mm, katalizator massasi 1,45 g va bosim 1 atm qabul qilindi. Ushbu sharoitlarda etan va etilenning umumiy unumi 26-42 % oralig'ida o'zgarishi ko'rsatildi.

Chiqish ko'rsatkichlari sifatida metan konversiyasi, kislorod konversiyasi va C_2-uglevodorodlar bo'yicha selektivlik hisoblandi. Metan konversiyasi CH_4 kirish va chiqish miqdorlari farqi asosida, kislorod konversiyasi esa O_2 kirish va chiqish miqdorlari nisbati orqali aniqlandi. C_2-uglevodorodlar selektivligi esa hosil bo'lgan etan va etilen miqdorining metan sarflanish miqdoriga nisbati orqali baholandi. Barcha hisoblangan natijalar jadval va grafik ko'rinishida vizuallashtirildi, bu esa jarayon parametrlarining mahsulot chiqishiga ta'sirini solishtirish imkonini berdi.

Haroratning oshishi reaksiya tezligini kuchaytirishi, biroq juda yuqori qiymatlarda chuqur oksidlanish jarayonlari kuchayishi mumkinligi hisobga olindi. CH_4/O_2 mol nisbatini oshirish orqali kislorod konversiyasini pasaytirish va C_2 selektivligini yaxshilash mumkinligi nazariy jihatdan ko'rsatildi. Bosim esa asosan gaz zichligi va kontakt vaqti orqali reaksiya tezligiga ta'sir qiluvchi omil sifatida qaraldi; selektivlikka uning ta'siri nisbatan kam deb baholandi.

Reaktor rejimi nuqtai nazaridan adiabatik tizimlarning o'ziga xos jihatlari ham hisobga olindi. Matnda qayd etilganidek, MOK kabi kuchli ekzotermik reaksiyalarda katalizator qatlami bo'ylab haroratning bir tekis taqsimlanmasligi mumkin, bu esa maqsadli mahsulotlar selektivligini pasaytirishi ehtimolini tug'diradi. Shu sababli nazariy tahlilda ko'p bosqichli adiabatik qurilmalardan foydalanish imkoniyati ham ko'rib chiqildi va bunday yondashuv har bir bosqichda reaksiya sharoitlarini moslashtirish orqali umumiy unumdorlikni oshirishga xizmat qilishi ta'kidlandi.

Shunday qilib, tajriba qismida metanni oksikondensatlash jarayonini nazariy tadqiq etish uchun qo'llangan model, hisoblash algoritmi, texnologik parametrlar oralig'i va baholash mezonlari bayon etildi. Qo'llangan matematik yondashuv jarayonning optimal sharoitlarini aniqlash, metan konversiyasi hamda C_2-uglevodorodlar selektivligini bashorat qilish va keyingi sanoat miqyosidagi tadqiqotlar uchun asos yaratish imkonini berdi.

Tahlil va natijalar

Bog'liq bo'lmagan o'zgaruvchilarga $CH_4:O_2$ oqimi nisbati (X_1), ishchi harorat (X_2) va metanning sarfi (X_3) kiradi. Ushbu o'zgaruvchilar reaksiyaning unumdorligi va mahsulotlar selektivligiga ta'sir ko'rsatishi mumkin. $CH_4:O_2$ oqimi nisbati (X_1) metan va kislorod o'rtasidagi o'zaro aloqalarni belgilaydi. Ishchi harorat (X_2) reaksiya jarayonining faolligini va reaksiyaning o'tkazish darajasini belgilaydi, chunki harorat yuqori bo'lsa, reaksiyaning intensivligi ortishi mumkin. Metanning sarfi (X_3) esa, metanning umumiy miqdori va uning reaksiyada ishlatilishiga asoslanadi, bu esa metanning oksikondensatlash jarayonida qanchalik samarali foydalanishini ko'rsatadi.

Ma'lumotlar quyidagi jadvalda keltirilgan bo'lib, har bir o'zgaruvchi turli sharoitlar va faktorlarga tayangan holda reaksiyaning unumdorligini va har bir mahsulotning selektivligini belgilovchi muhim parametrlardir.

1-jadval.

Metanni oksikondensatlash jarayonini nazariy maqbullashtirish natijalari

Mustaqil o‘zgaruvchilar	Belgilashlar	Kodlash		
		-1	0	1
CH_4/O_2	x_1	1	2	3
Harorat (^oS)	x_2	700	800	900
CH_4 ning sarfi (10^{-3} mol/sek)	x_3	1,2	2,0	2,8

$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{3} \beta_i x_i + \sum_{i=1}^{3} \beta_{ii} x^2 + \sum_{i=1}^{2} \sum_{j=i+1}^{3} \beta_{ij} \cdot x_i x_j$

Quyidagi jadvalda reaktorning eksplutatsion parametrlari keltirilgan.

2-jadval

Reaktorning eksplutatsion parametrlari

Eksplutatsiya sharoiti	Parametrlar
Harorat	800^oS
$CH_4:O_2$	2 (hajmiy)
Metanning oqimi	$1,6 \cdot 10^{-2}$mol/sek
Reaktorning uzunligi	80 sm
Nayning ichki diametri	1,2 mm
Katalizator massasi	1,45g
Bosim	1 atm

Yuqorida qayd etilgan sharoitda olingan natijalar shuni ko‘rsatadiki, etan va etilen uglevodorodlar unumi 26% dan 42% gacha oraliqda o‘zgaradi. Bu natijalardan kelib chiqib, yuqoridagi tenglamani ikkinchi tartibli kvadratik model bilan to‘ldirish mumkin. Bunday model, reaksiya sharoitlarining va parametrlarining o‘zgarishi bilan metanning konversiyasi va mahsulotlar selektivligining qanday o‘zgaradiganini aniqlash uchun samarali hisob-kitob metodi hisoblanadi. Kvadratik modelni to‘ldirish jarayonida, turli o‘zgaruvchilarning o‘zaro ta’siri va ularning har birini ishlatish natijalarini aniqlash imkonini beruvchi tenglamalar ishlab chiqiladi. Bu, katalizator va reaktor shartlariga muvofiq, mahsulotlarning unumdorligini bashorat qilishga yordam beradi.

$Y = -350,94 + 20,179X_1 + 0,712X_2 + 19,61X_3 - 0,018X_1 \cdot X_2 + 2,11X_1 \cdot X_3 -$

$(6,13 \cdot 10^{-3})X_2 \cdot X_3 - 3,419X_1^2 - (4,16 \cdot 10^{-4})\, X_2^2 - 3,891X_3^2$ (1)

Ma’lumki, adiabatik turdagi reaktorlar zamonaviy katalitik jarayonlarda eng ko‘p qo‘llaniladigan qurilmalardan biri hisoblanadi. Bunday reaktorlarning qimmatli jihati shundaki, ular reaksiyaning harorat intervali keng doirada o‘zgargan holatlarda ham selektivlikning katta farq bilan o‘zgarib ketishini cheklaydi. Shu bilan birga, adiabatik reaktorlar kichik metall sig‘imi (o‘rtacha 2–3 t/m³ katalizatorga to‘g‘ri keladi) va nisbatan sodda konstruksiyasi sababli ishlab chiqarishda arzon va qulay hisoblanadi. Adiabatik reaktorlarning yana bir muhim afzalligi – katta issiqlik chiqishi bilan kechadigan reaksiyalarda ortiqcha harorat o‘sishini samarali tarzda minimallashtirish qobiliyatidir. Bunday sharoitda katalizator qatlamidagi haroratning boshqarilishi ta’minlanadi, natijada reaksiyaning umumiy unumdorligi oshadi. Ayniqsa, oksidlanishli kondensatlanish kabi kuchli ekzotermik reaksiyalarda bu jihat katta ahamiyat kasb etadi.

Reaksiyaning katta issiqlik effekti sababli katalizator qatlamida haroratning bir xil taqsimlanmasligi, turli qatlamlarda selektivlikning pasayishiga olib kelishi mumkin. Natijada maqsadli mahsulotlar-etan va etilenning umumiy chiqishi ma’lum darajada cheklanadi.

Shuning uchun, metanni oksidlanishli kondensatlash jarayonini amalga oshirishda ko‘p bosqichli (4-5 pog‘onali) adiabatik qurilmalardan foydalanish samarali hisoblanadi. Bunday tizim har bir bosqichda reaksiya sharoitlarini moslashtirish imkonini berib, jarayonning umumiy unumdorligini oshiradi va katalizatorning faolligini uzoq muddat davomida barqaror saqlab turishni ta’minlaydi.

Shu bilan birga, nazariy maqbullashtirish natijalari amaliyotdagi eksperimental natijalar bilan solishtirilishi kerak, bu jarayonning yangi katalizatorlar va reaksiya sharoitlarini ishlab chiqishda qo‘llaniladi.

MOK jarayonini nazariy modellashtirish jarayonida asosiy e’tibor quyidagi texnologik omillarning ta’sirini baholashga qaratilgan:

Harorat rejimi-reaksiyaning borish tezligi va mahsulotlar taqsimoti haroratga keskin bog‘liq. Haroratning oshishi metanning faollashishi va konversiya darajasini kuchaytiradi, biroq ortiqcha yuqori harorat selektivlikning pasayishiga va chuqur oksidlanish mahsulotlari (CO, CO_2) hosil bo‘lishining ortishiga olib kelishi mumkin.

Bosimning ta’siri-reaksiya bosimi gaz fazasi zichligi va zarrachalar o‘zaro to‘qnashish ehtimolini o‘zgartiradi, bu esa metan va kislorodning reaksiyaga kirishish sur’atlariga ta’sir ko‘rsatadi. Maqbul bosimning tanlanishi konversiya va selektivlik o‘rtasidagi muvozanatni ta’minlaydi.

Metan/kislorod reagentlar nisbati-reaksiya muhitida kislorodning ortiqcha yoki yetishmasligi jarayon unumdorligiga hal qiluvchi ta'sir ko'rsatadi.

Shuning uchun, reaksiya harorati, bosim va reagentlar nisbatining kompleks tahlili orqali kislorod konversiyasi hamda S_2 uglevodorodlari hosil bo'lish selektivligini nazariy maqbullashtirish mumkin.

Hisoblash metodikasi. Izotermal ideal sig'imli reaktor modeli quyidagi ko'rinishda yoziladi:

$$\frac{dy_i}{d\tau} = \frac{W_i - W_i^0}{W^0} \quad (2)$$

bu yerda: W_i- i-komponentning joriy sarfi; W_i^0 -i-komponentning reaktor kirishidagi sarfi; $d\tau$- shartli kontakt vaqti, dy_i-komponentning hosil bo'lish tezligi.

MOK reaksiyasi uchun komponentlar: CH_4,O_2, C_2H_4, C_2H_6, CO_2, CO, H_2, H_2O.

Oddiy differensial tenglamalar tizimi (2.6) Koshi boshlang'ich shartlari bilan yechiladi:

$$y_i(0) = y_i^0 \quad (3)$$

Reaktorning istalgan nuqtasida reagentlarning mol miqdoriy ulushi quyidagi formula bo'yicha hisoblanadi:

Differensial tenglamalar tizimini yechish uchun MathCad dasturida Koshi masalasini yechishga mo'ljallangan, to'rtinchi tartibli Runge-Kutta usuli qo'llanilgan. Hisoblash uchun dasturga kiritilgan dastlabki ma'lumotlar quyidagilardan iborat bo'ldi: reaksiya harorati, bosim, kvazigomogen kinetik model doirasida alohida bosqichlar uchun reaksiya tezlik konstantalari, shuningdek dastlabki gaz aralashmasining tarkibi (metan, kislorod va inert/tashuvchi komponentlar ulushi). Barcha kinetik hisob-kitoblar izotermal ideal sig'imli reaktor yaqinlashuvida bajarildi; tezlik konstantalari Arrenius tipidagi temperatura funksiyasi orqali berildi.

Chiqish ko'rsatkichlari sifatida quyidagilar hisoblanib, jadval va grafik ko'rinishida vizuallashtirildi:

Metan konversiyasi:

$$X_{CH4} = \left(F_{CH4}^{in} - F_{CH4}^{out}\right)/F_{CH4}^{in}. \quad (4)$$

Kislorod konversiyasi:

$$X_{O2} = \left(F_{O2}^{in} - F_{O2}^{out}\right)/F_{O2}^{in}. \quad (5)$$

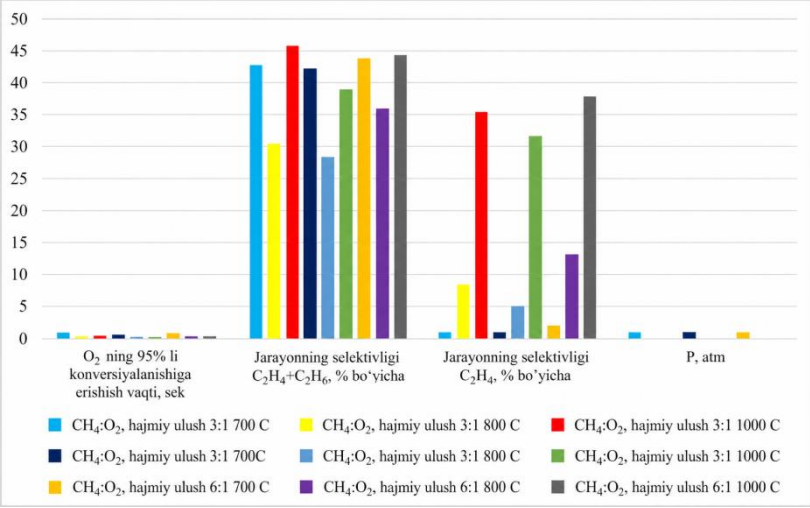
C_2 uglevodorodlar bo'yicha selektivlik:

$$S_{C2} = \left(F_{C2}^{out}/\left(F_{CH4}^{in} - F_{CH4}^{out}\right)\right). \quad (6)$$

Parametrlar intervali termodinamik cheklovlar va jarayonning kimyoviy xususiyatlarini inobatga olgan holda belgilandi: Harorat: 700-1000°C (modelda hisoblashda Kelvin shkalasiga o'tkazildi). Metan/kislorod molyar nisbati: 2-5

MOK reaktorining ishlab chiqarish quvvati. Maqbul texnologik sharoitlar-xususan, 0,05 MPa ortiqcha bosim va 8500 mm diametrdagi reaktor parametrlari asosida-MOK reaktorining birlik quvvati yiliga 16 ming tonna etilen ishlab chiqarishga qodir. Ushbu texnologiya mahalliy sharoitda amalga oshirilishi mumkin bo'lgan innovatsion yondashuv hisoblanadi.

Agar ushbu jarayon yirik sanoat klasterlarida tatbiq etilsa, reaktorlar 2-3 ta parallel ishlovchi apparatlardan iborat reaktor blogi tarzida tuzilishi mumkin. Bunda 4 texnologik liniya bo'yicha umumiy etilen ishlab chiqarish quvvati yiliga 120-200 ming tonna darajasiga yetkazilishi mumkin.



1-rasm. Metanni oksikondensatlash jarayonini nazariy maqbullashtirish natijalari

Jarayonning texnologik parametrlari. Maqbul reaktor turini aniqlash. Jarayonning issiqlik effektini hisoblash. Har qanday texnologik jarayonni amalga oshirishda apparat dizaynini loyihalashtirishda e'tibor qaratilishi lozim bo'lgan asosiy omillardan biri – bu jarayonning issiqlik effekti hisoblanadi. Jarayon vaqtida yuz beradigan issiqlik unumi yoki so'rilishi reaksiyaning termodinamik xususiyatlarini belgilaydi va uning umumiy energetik unumdorligiga to'g'ridan-to'g'ri ta'sir ko'rsatadi. Shuning uchun reaksiyaning issiqlik effektini aniq va aniqlangan usullar asosida hisoblash katta

ahamiyatga ega.

Ushbu maqsadda hisoblashlar Gess qonuniga asosan amalga oshiriladi. Gess qonuniga ko‘ra, reaksiyaning umumiy issiqlik effekti, uning oraliq bosqichlarining issiqlik effektlari yigindisiga teng bo‘ladi. Bu usul orqali reaksiyada qatnashuvchi moddalarning standart ta’sirchanlik entalpiyalari yordamida reaksiyaning entalpiya o‘zgarishi (ΔH) aniqlanadi. Natijada, ushbu ma’lumotlar asosida reaktorning issiqlik rejimini maqbullashtirish, energiya sarfini kamaytirish va jarayon unumdorligini oshirish imkoni yaratiladi.

$$\Delta H^o = \sum\left(v_i \Delta H^o_{f,i}\right)_{ox} - \sum\left(v_i \Delta H^o_{f,i}\right)_{dastt} \quad (7)$$

Bunda$i$-komponentning stexiometrik koeffitsient

3- jadval

Komponentlar hosil bo‘lish harorati

Komponent	CH_4	O_2	C_2H_4	C_2H_6	CO	CO_2	H_2O
kDj/mol	-74.8	0	52.5	-84.7	-110.5	-393.5	-241.8

Olib borilgan termodinamik tahlil natijalariga ko‘ra, metanni oksidlanishli kondensatlash jarayoni kuchli ekzotermik xususiyatga ega ekanligi aniqlandi. MOK jarayonining umumiy termal ta’siri 1 tonna metan (CH_4) sarflanganda taxminan 6,5 megajoulga teng ekanligi qayd etildi. Bunday yuqori energiya effekti reaktor ichida sezilarli darajada qizishga olib keladi. Aniq hisob-kitoblarga asosan, reaktorda adiabatik (ya’ni tashqi muhitga issiqlik bermasdan) sharoitda 85 tonna xom ashyoni qayta ishlash jarayonida harorat 1400°C gacha ko‘tarilishi mumkin.

Ushbu ma’lumotlar MOK jarayonining yuqori energiya siyg‘imini, shuningdek, reaktor konstruksiyasini loyihalashda va uning issiqlik muvozanatini ta’minlashda issiqlikni samarali boshqarish zarurligini yanada tasdiqlaydi.

Metanni oksikondensatlash reaksiyasi reaktorini modellashtirish. Katalizatorli reaktorlarda gazsimon va qattiq fazalarning o‘zaro ta’sirdagi harakati yuqori darajada murakkab dinamikaga ega bo‘lib, bu kabi tizimlarning aniq tahlili va maqbul boshqaruvi uchun matematik modellashtirish zarur hisoblanadi. Gaz va qattiq zarralar oqimi o‘rtasidagi kinetik va gidrodinamik bog‘lanishlar reaktorning ishlash unumdorligiga, shuningdek, reaksiya tezligi va mahsulot unum sifatlariga katta ta’sir ko‘rsatadi.

Katalizatorli reaktorlarda belgilangan statik qatlamda joylashgan zarralarning gaz oqimidagi harakat darajasi va uning dinamik xususiyatlari qatlamdagi gaz oqimining tezligi, bosim yo‘qotishi, g‘ovaklik darajasi hamda zarralar atrofidagi oqim xossalari aniqlanadi.

Modellashtirish jarayonida reaktor ichidagi massa va energiya almashinuvini hisobga olgan holda, jarayonning to‘liq dinamikasini tahlil qilish va tajriba sharoitlari uchun moslashtirish imkonini beradi va reaktorni maqbullashtirish, energiya sarfini kamaytirish va mahsulot unumini oshirishga xizmat qiladi:

$$Re_{kp} = Ar/(1400 + 5.22 \cdot \sqrt{Ar} \quad (8)$$

$$Ar = \frac{d_p^3 \cdot (\rho_p - \rho_g) \cdot g}{\mu_g^2} \quad (9)$$

$$Re_{kp} = \omega_{kp} \cdot d_p / \vartheta_g \quad (10)$$

3-jadvalda katalizator zarralarining o‘lchamiga bog‘liq holda o‘lchash tezligini aniqlash bo‘yicha amalga oshirilgan hisob-kitob natijalari keltirilgan. Ushbu jadvalda nisbatan yirik va mayda o‘lchamli katalizator zarralari uchun gaz oqimining harakat tezligi bilan bog‘liq parametrlar, shu jumladan, o‘lchash tezligi (ya’ni gaz oqimi tomonidan zarralarning harakatga keltirilish chegarasidagi minimal tezlik) aniqlangan.

Hisoblash natijalari shuni ko‘rsatadiki, katalizator zarralarining geometrik o‘lchami o‘zgarishi oqimning gidrodinamik rejimlariga sezilarli ta’sir ko‘rsatadi. Yirik zarralar uchun o‘lchash tezligi ancha yuqori bo‘lib, bu ularning og‘irligi va muqovimligi bilan bog‘liq. Mayda zarralar esa kamroq o‘lchash tezligida harakatga kelishi mumkin, bu esa ularning reaktor ichidagi tarqalishi va reaksiya maydonidagi faol ishtirokini oshiradi.

Jadvaldagi ma’lumotlar asosida katalizator sistemasini maqbul tanlash, reaktor ichidagi oqim rejimini to‘g‘ri loyihalash hamda reaksiya unumdorligini maksimallashtirish imkoni yaratiladi.

4-jadval

Har xil o‘lchamdagi katalizator zarralari uchun hisoblash natijalari

	a zarracha	b zarracha	c zarracha
Zarrachalar diametri, mm	0.1	0.5	1
Uyma zichlik, kg/m^3	724	800	800
Haqiqiy zichlik kg/m^3	1905	1905	1905
G‘ovaklik	0.62	0.58	0.58
ArximedKriteriysi	3	327	2613
Re_{kr}	0.0036	0.42	2.2785
O‘lchab olishning boshlang‘ich tezligi m/s	0.0058	0.13	0.46

Zich va suyultirilgan fazada gaz hajmi quyidagi formulalar bilan hisoblandi:

$G_0^b = S \cdot (U - U_{mf})$ (11)

$G_0^e = S \cdot U_{mf}$ (12)

To‘liq aralashtirish sigmentlarida reaktor xajmiga bog‘liq nisbatda amalga oshiriladi.

$h_k = l_k - l_{k-1} = \frac{D_k^b - D_{k-1}^b}{2}$ (13)

Massa-almashish jarayonlarini aniq va ishonchli modellashtirish hamda hisoblash uchun qaynash qavatida gaz fazasining xususiyatlarini, jumladan, gaz pufakchalarining fazoda qanday taqsimlanishini bilish muhim ahamiyat kasb etadi. Gaz pufakchalari qaynash qavatidagi zich faza – ya’ni qattiq zarralar bilan to‘lgan hajmda – turli intensivlikda harakat qilib, ular bilan doimiy massa va energiya almashinuvida bo‘ladi.

Shu bois, zich faza va gaz pufakchalari o‘rtasidagi massa-almashish jarayonini tavsiflovchi asosiy parametr – bu massa-almashish koeffitsienti hisoblanadi. Ushbu koeffitsientni aniqlashda gaz pufakchalarining o‘rtacha diametri hal qiluvchi rol o‘ynaydi. Gaz pufakchasi diametri uning sirt maydoni va shunday qilib, gaz-qattiq faza orasidagi aloqa yuzasiga bog‘liq bo‘lgan holda, massa almashish unumdorligiga to‘g‘ridan-to‘g‘ri ta’sir ko‘rsatadi.

Shunday qilib, massa-almashish koeffitsientini hisoblashda gaz pufakchalari o‘rtacha diametrini e’tiborga olish, jarayonni aniq modellashtirish, reaktor ichidagi moddalar konsentratsiyasini to‘g‘ri taqsimlash va texnologik tizim unumdorligini oshirish imkonini beradi. Ushbu yondashuv, ayniqsa, sanoat miqyosidagi katalitik qaynash qavatidagi reaktorlarni loyihalash va maqbullashtirishda muhim hisoblanadi.

$K_{be} = 0.11/D_b$ (14)

Har bir komponentning qaynash qavatidagi zich faza va gaz pufakchalari o‘rtasidagi o‘zaro ta’sirida yuz beradigan massa-almashish jarayonini aniq va to‘g‘ri baholash maqsadida, maxsus matematik ifoda-hisoblash formulasi qo‘llaniladi. Ushbu formula orqali gaz fazasidan qattiq fazaga yoki aksincha, moddaning o‘tish tezligi aniqlanadi va bu jarayonning unumdorligini baholash imkoni tug‘iladi.

Ma’lum balandlikda joylangan katalizator qavatidagi pufakcha diametri quyidagi formulalar bilan aniqlanadi:

$D^b = 1.4 \cdot \rho_p \cdot d_p \left(\frac{U_{mf}}{U}\right) \cdot l + d_0$ (15)

$d_0 \left(\frac{6 \cdot G}{\pi}\right)^{0.4} / g$ (16)

$G = \left(\frac{U - U_{mf}}{n_0}\right)^{0.4} / g$ (17)

Katalizatordagi kimyoviy reaksiyadagi i-komponent sarfi qattiq fazada quyidagi formulalar bilan aniqlandi:

$W_{rad}^e = \frac{K_{qay} * K_{CH4}^e * K_{oksid} * (P_{O2}^e)^{0.5}}{K_{qay} * K_{CH4}^e + K_{oksid} * (P_{O2}^e)^{0.5}}$ (18)

$W_1^b = k_1 * p_{CH3}^e$ (19)

$W_2^b = k_2 * p_{C2H6}^e (P_{O2}^e)^{0.5}$ (20)

$W_3^b = k_3 * p_{CH4}^e (P_{O2}^e)^{0.5}$ (21)

$W_4^b = k_4 * p_{C2H4}^e * P_{O2}^e$ (22)

$Wr_5^b = k_5 * p_{CO}^e * P_{O2}^e$ (23)

Izotermal rejimni barqaror ravishda saqlab turish har qanday katalitik reaksiyaning unumdorligi va barqarorligi uchun muhim omil hisoblanadi. Xususan, qaynash qatlamli reaktorlarda bu vazifani amalga oshirish uchun reaktor maxsus issiqlik chiqaruvchi elementlar (ya’ni issiqlik almashinuvchilar) bilan jihozlangan bo‘lishi lozim. Bunday konstruktiv yondashuv reaktor ichida haroratning bir xil taqsimlanishini ta’minlash, mahalliy qizib ketish (lokal peregrev) holatlarining oldini olish va shu orqali reaksiya mahsulotlarining selektivligini oshirish imkonini yaratadi.

Reaktor ichidagi issiqlik almashinuvi jarayonlari qaynash qatlam bilan issiqlik chiqaruvchi yuzalar o‘rtasida yuqori samara bilan amalga oshishi kerak. Shu bois, issiqlik o‘tkazuvchanligi yuqori bo‘lgan materiallardan foydalanish, qaynash qatlamining turbulent harakatini ta’minlash va pufakchalarning zich tarqalishi singari omillar almashinuv unumdorligini belgilaydi.

4-jadvalda diametri 1 mm bo‘lgan katalizator zarralari uchun reaktordagi maqbul ishlash sharoiti-ya’ni ish tezligi hamda maksimal issiqlik uzatish koeffitsienti qiymatlari keltirilgan. Ushbu hisob-kitoblar 750°C haroratda amalga oshirilgan bo‘lib, amaldagi texnologik jarayonni yuqori harorat sharoitida izotermal holatda boshqarish imkoniyatlarini baholashga xizmat qiladi.

Jadvaldan foydalanish orqali qaynash qatlamli reaktorlar konstruksiyasini takomillashtirish, ish rejimini maqbullashtirish va sanoat miqyosidagi texnologik jarayonlarni barqaror holda tashkil etish mumkin.

5-jadval

Metanni katalitik metanni oksidlanishli kondensatlash (MOK) reaksiyasi katalizatorlarining kattaliklari

	a zarrachalar	b zarrachalar	c zarrachalar
Re_{taj}	0.1	3.1	9.7

Issiqlik uzatishdagi maqbul tezlik m/s	0.17	0.95	1.48
A_{max}Vt/m^{2*0}K	1123.9	629.6	490.6
Issiqlik uzatish koeffitsienti Vt/m^{2*0}K	750	492	403

5-jadvalda qaynash qatlamli reaktorning asosiy rejimli va konstruktiv parametrlari to‘liq aks ettirilgan. Ushbu parametrlar reaktordagi texnologik jarayonlarning barqarorligi, yuqori unumdorligi va uzoq muddatli ishonchliligini ta’minlash bilan birga, energiya va massa almashish jarayonlarining maqbul kechishi uchun muhim asos sifatida xizmat qiladi.

Jadval tahlilidan ko‘rinib turibdiki, reaktordagi chiziqli tezlik termogidrodinamik xususiyatlar hisobga olingan holda tanlangan va issiqlik uzatish unumdorligini ta’minlash uchun maqbul qiymatlarda belgilangan. Chiziqli tezlikning bu me’yoriy diapazonda bo‘lishi gaz oqimining qatlamda to‘g‘ri shakllanishini kafolatlaydi, shu bilan birga gaz pufakchalarining hajmi va tarqalish tabiatiga ta’sir ko‘rsatadi.

Gaz pufakchalarining bir xilda tarqalishi qattiq faza (katalizator zarrachalari) va gaz faza o‘rtasidagi aloqa yuzasini oshiradi, bu esa massa va energiya almashinuvini jadallashtiradi. Natijada reaksiyaning lokal zonadagi unumdorligi ortib, maqsadli mahsulotlar unumdorligi yuqori darajada saqlanadi. Shuningdek, qaynash qatlamidagi maqbul gidrodinamik rejim katalizator zarrachalarining bir xil to‘xtovsiz harakatini ta’minlab, ularning faol markazlari doimiy ravishda reaksiya muhiti bilan aloqada bo‘lishini ta’minlaydi.

Shu sababli, qaynash qatlamli reaktorning to‘g‘ri tanlangan rejimli va konstruktiv parametrlari nafaqat reaksiyaning unumdorligini oshiradi, balki katalizatorning xizmat muddatini uzaytiradi hamda reaktorning sanoat miqyosida uzoq muddat barqaror ishlashiga imkoniyat yaratadi.

Mazkur parametrlar qayd etilgan jadvaldagi ma’lumotlar asosida texnologik jarayonni aniq modellashtirish, reaktor konstruksiyasini maqbullashtirish va sanoat miqyosida ishlab chiqarish unumdorligini oshirish imkoniyatini yaratadi. Shuningdek, gaz va qat’iy fazalar o‘rtasidagi o‘zaro ta’sirni kuchaytirish orqali reaksiyalarning tezligi va mahsulotlar unumini yuqori darajaga yetkazishga xizmat qiladi.

6-jadval

Metanni katalitik metanni oksidlanishli kondensatlash reaksiyasi katalizatorining xarakteristikalari

Zarrachalar	Chiziqli tezlik m/s	Katalizator hajmi m^3	G‘ovaklar bilan qatlam hajmi M^3	Issiqlik qatlam balandligi m
A zarrachalar	0.17	121.4	148.6	0.2
V zarrachalar	0.95	121.4	182.8	1.4
S Zarrachalar	1.48	121.4	186.3	2.3

Xulosa va takliflar

Olib borilgan nazariy tahlil va matematik modellashtirish natijalari metanni oksikondensatlash jarayonida texnologik parametrlarni maqbul tanlash jarayon unumdorligini belgilaydigan asosiy omillardan biri ekanini ko‘rsatdi. Jarayonni tavsiflashda CH_4/O_2 nisbati, harorat va metan sarfi eng muhim mustaqil o‘zgaruvchilar sifatida tanlanishi to‘g‘ri ekani asoslandi, chunki aynan ushbu omillar metan konversiyasi va C_2-uglevodorodlar selektivligiga bevosita ta’sir qiladi. Ikkinchi tartibli kvadratik model reaksiyaning maqbul sharoitlarini bashorat qilish uchun samarali usul ekani aniqlandi.

Hisoblashlar shuni ko‘rsatdiki, 800 °C harorat, $CH_4:O_2=2$, metan oqimi $1{,}6\cdot10^{-2}$ mol/s, reaktor uzunligi 80 cm, nayning ichki diametri 1,2 mm, katalizator massasi 1,45 g va 1 atm bosim sharoitida etan va etilenning umumiy unumi 26-42 % oralig‘ida o‘zgaradi.

Modellashtirish natijalariga ko‘ra, kislorodning yuqori konversiyasi sharoitida 750-850 °C oralig‘ida harorat oshishi C_2 uglevodorodlar hosil bo‘lishini kuchaytirishi mumkin. Bosim esa asosan kontakt vaqti va reaktor hajmiga ta’sir ko‘rsatuvchi omil sifatida namoyon bo‘ladi.

Adiabatik sharoitda haroratning keskin ortishi ehtimoli reaktor konstruksiyasini tanlashda va jarayonni masshtablashtirishda alohida e’tibor talab qiladi. Umuman olganda, qo‘llangan matematik yondashuv metanni oksikondensatlash jarayoni uchun maqbul texnologik rejimlarni aniqlash, metan konversiyasi va C_2 selektivligini bashorat qilish hamda keyingi eksperimental tadqiqotlar uchun ishonchli nazariy asos yaratish imkonini berdi. Tanlangan kinetik model ayrim eksperimental natijalar bilan mos kelgan bo‘lsada, real katalizatorlar uchun haroratga bog‘liq ekstremal selektivlik kabi murakkab holatlarni to‘liq aks ettirmasligi mumkin. Shuning uchun kelgusida modelni yuqori bosim va real katalizator sharoitida qo‘shimcha verifikatsiya qilish maqsadga muvofiqdir.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Keller G. E., Bhasin M. M. Synthesis of ethylene via oxidative coupling of methane. I. Determination of active catalysts // *Journal of Catalysis*. 1982. Vol. 73. P. 9–19.

2. Ito T., Lunsford J. H. Synthesis of ethylene and ethane by partial oxidation of methane over lithium-doped magnesium oxide // *Nature*. 1985. Vol. 314. P. 721–722.

3. Zanthoff H.-W., Baerns M. Oxidative coupling of methane in the gas phase. Kinetic simulation and experimental verification // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 1990. Vol. 29. No. 1. P. 2–10.

4. Sun J., Thybaut J. W., Marin G. B. Microkinetics of methane oxidative coupling // *Catalysis Today*. 2008. Vol. 137. No. 1. P. 90–102.

5. Stansch Z., Mleczko L., Baerns M. Comprehensive kinetics of oxidative coupling of methane over the La_2O_3/CaO catalyst // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 1997. Vol. 36. No. 7. P. 2568–2579.

6. Beck B., Fleischer V., Arndt S., González Hevia M., Urakawa A., Horn R., Schomäcker R. Oxidative coupling of methane — a complex surface/gas phase mechanism with strong impact on the reaction engineering // *Catalysis Today*. 2014. Vol. 228. P. 212–218.

7. Fleischer V., Steuer R., Parishan S., Schomäcker R. Investigation of the surface reaction network of the oxidative coupling of methane over Na_2WO_4/Mn/SiO_2 catalyst by temperature programmed and dynamic experiments // *Journal of Catalysis*. 2016. Vol. 341. P. 91–103.

8. Godini H. R., Bhasin M. M. Oxidative coupling of methane: A review study on the catalytic performance // *Molecules*. 2024. Vol. 29. No. 19. Art. 4649.

9. Da Ros S., Fontoura T. B., Schwaab M., de Jesus N. J. C., Pinto J. C. Oxidative coupling of methane for ethylene production: Reviewing kinetic modelling approaches, thermodynamics and catalysts // *Processes*. 2021. Vol. 9. No. 12. Art. 2196.

10. Ortiz-Bravo C. A., Sadegh-Vaziri R., Mota N., Subramanian S., Harold M. P., Baltrusaitis J. Oxidative coupling of methane (OCM): An overview of the challenges and opportunities for developing new technologies // *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. 2021. Vol. 96. Art. 104254.

11. Liu J., Yue J., Lv M., Wang F., Cui Y., Zhang Z., Xu G. From fundamentals to chemical engineering on oxidative coupling of methane for ethylene production: A review // *Carbon Resources Conversion*. 2022. Vol. 5. No. 1. P. 1–14.

12. Cruellas A., Melchiori T., Gallucci F., van Sint Annaland M. Advanced reactor concepts for oxidative coupling of methane // *Catalysis Reviews*. 2017. Vol. 59. No. 3. P. 234–294.

13. Cruellas A., Melchiori T., Gallucci F., van Sint Annaland M. Oxidative coupling of methane: A comparison of different reactor configurations // *Energy Technology*. 2020. Vol. 8. Art. 1900148.

14. Jašo S., Sadjadi S., Godini H. R., Simon U., Arndt S., Görke O., Berthold A., Arellano-Garcia H., Schubert H., Schomäcker R. Experimental investigation of fluidized-bed reactor performance for oxidative coupling of methane // *Journal of Natural Gas Chemistry*. 2012. Vol. 21. P. 534–543.

15. Aseem A., Harold M. P. C_2 yield enhancement during oxidative coupling of methane in a nonpermselective porous membrane reactor // *Chemical Engineering Science*. 2018. Vol. 175. P. 199–207.

16. Alkathiri R., Alshamrani A., Wazeer I., Boumaza M., Hadj-Kali M. K. Optimization of the oxidative coupling of methane process for ethylene production // *Processes*. 2022. Vol. 10. No. 6. Art. 1085.

17. Hassan H. A., Takanabe K. A review on advances in oxidative coupling of methane: Catalysts, engineering, and industrialization // *Reaction Chemistry & Engineering*. 2025. Vol. 10. P. 624–680.