

УДК 66.011

ЭТАПЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И РАСЧЕТА КАСКАДА ПРОТОЧНЫХ РЕАКТОРОВ В РЕЖИМЕ ПОДВИЖНЫХ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ФРОНТОВ

А.Т.Калбаева, А.Х.Махатова, Б.Р.Тауасаров
ЮКГУ им. М.Ауезова, г.Шымкент

Определение режимов работы химических реакторов, при которых в системе реагирующих веществ происходит образование и распространение нелинейных концентрационных волн, играет важную роль в методиках расчета и оптимизации современных химических реакторов. Наличие нескольких стационарных состояний в проточных реагирующих системах приводит к необходимости детального анализа устойчивости каждого стационарного состояния и возникающих в окрестности неустойчивых точек нестационарных и периодических режимов [1, 2]. В настоящее время отсутствует общий подход к этим проблемам и получены только частные результаты соответствующего анализа распространения нелинейных волн в трубчатом

химическом реакторе в случае неустойчивости стационарной точки кинетического процесса.

Важной задачей является разработка нелинейных моделей, позволяющих описать общие характерные особенности распространения волновых фронтов в реакционно-диффузионных системах, а также методов компьютерного моделирования и численного исследования стационарных режимов в трубчатом реакторе в случае нелинейной химической кинетики рассмотренного типа.

В настоящей работе приводится краткое описание методики расчета времени пребывания реагентов в химическом аппарате при наличии подвижных границ раздела в виде концентрационных волновых фронтов. Данная методика разработана на основе анализа известных литературных данных и собственных теоретических исследований авторов [1-3].

Для получения приближенной оценки необходимого времени пребывания реагентов в каскаде реакторов, работающих в динамических режимах бегущего волнового концентрационного фронта, рассмотрим отдельно случаи двух модельных сред: среды типа «брюсселятор» и среды с тремя стационарными состояниями (к этому же случаю можно отнести реакционно-диффузионную среду с системой Белоусова-Жаботинского).

Для модельной среды типа «брюсселятор» воспользуемся для характеристики профиля концентрации выражением, полученным в [4,5], поскольку численный эксперимент подтверждает качественное соответствие с такой аппроксимацией.

При оценке минимального времени пребывания будем принимать скорость волнового фронта равной критической скорости распространения бегущей волны.

Перепишем выражение для профиля волны в виде [6, 7]:

$$C \approx 3 \left(C_{01} - \frac{R_2}{R_1} \right) \operatorname{sch}^2 \left(\sqrt{\frac{(C_{01}R_1 - R_2)}{4D}} (L - v^* \tau) \right), \quad (1)$$

где L - длина реактора;

τ - время пребывания;

D - коэффициент диффузии;

v^* - скорость волнового фронта;

R_1, R_2 - параметры, зависящие от стационарного состояния;

C_{01} - концентрация реагента в стационарном состоянии.

Введем в качестве основного исходного критерия для расчета степень превращения в реакторе:

$$\eta = \frac{C_0 - C}{C_0}. \quad (2)$$

Тогда (2) можно переписать в виде:

$$\eta = 1 - \frac{3}{C_0} \left(C_{01} - \frac{R_2}{R_1} \right) \operatorname{sch}^2 \left(\sqrt{\frac{(C_{01}R_1 - R_2)}{4D}} (L - v^* \tau) \right). \quad (3)$$

Обозначим $S = \sqrt{\frac{(C_{01}R_1 - R_2)}{4D}} (L - v^* \tau)$ и перепишем (2) в виде:

$$\eta = 1 - \frac{3}{C_0} \left(C_{01} - \frac{R_2}{R_1} \right) \operatorname{sch}^2(S) = 1 - \frac{3}{C_0} \left[\frac{2}{\exp(S) + \exp(-S)} \right]^2. \quad (4)$$

Используем далее разложение экспонент в ряд Тейлора, ограничиваясь для минимальной оценки времени пребывания двумя членами разложения:

$$\exp(S) \approx 1 + S + \frac{S^2}{2}; \quad \exp(-S) \approx 1 - S + \frac{S^2}{2}.$$

Тогда после ряда элементарных преобразований получаем выражение, связывающее время пребывания в реакторе, его длину и заданную степень превращения:

$$\tau \approx \left[L - \sqrt{\frac{D_{ef}}{C_0 k_1} \left(\frac{3}{\eta} - \frac{1}{g} \right)} \right] / v^*. \quad (5)$$

где

$$g = \frac{R_2}{R_1 C_0}; \quad (6)$$

Для среды с тремя стационарными состояниями (или реакционно-диффузионной среды с системой Белоусова-Жаботинского) используем для оценки необходимого времени пребывания реагентов в динамическом режиме выражение, полученное в [5,6], поскольку численные эксперименты и литературные данные [8] подтверждают правомерность такой аппроксимации.

$$C = \frac{C_{01} + C_{02}}{2} + \frac{C_{01} - C_{02}}{2} \operatorname{th} \left(-\frac{1}{2} \left[\sqrt{\frac{k}{2D_{ef}}} (C_{01} - C_{02})(L - v^*t) + C(0) \right] \right). \quad (7)$$

Используем обозначение:

$$S = -\frac{1}{2} \left[\sqrt{\frac{k}{2D_{ef}}} (C_{01} - C_{02})(L - v^*t) + C(0) \right]. \quad (8)$$

Тогда из определения гиперболического тангенса:

$$\operatorname{th}(S) = \frac{\exp(S) - \exp(-S)}{\exp(S) + \exp(-S)}. \quad (9)$$

В разложении экспонент в ряд Тейлора после ряда преобразований приходим к следующей схеме расчета необходимого времени пребывания:

А) Определяем вначале вспомогательный параметр **M**:

$$M = C_{01} + C_{02} - 2C_0(1 - \eta). \quad (10)$$

Б) Определяем вспомогательный параметр **N** из уравнения:

$$M \cdot N^2 + N(C_{01} - C_{02}) + 2M = 0. \quad (11)$$

В) Получаем оценку времени пребывания:

$$\tau \approx \frac{C_0 + 2N}{\alpha(C_{01} - C_{02})v^*} + \frac{L}{v^*}. \quad (12)$$

Для каскада реакторов полученные оценки необходимого времени пребывания в отдельной диффузионной ячейке для различных систем, обладающих множеством стационарных состояний и автоколебательными динамическими режимами, должны использоваться в общей системе расчетных уравнений с учетом известной структуры потоков [9, 10, 11].

Таким образом, предлагается следующая общая схема моделирования и расчета [12].

Выбор модельной кинетической схемы:

Для броматных систем и систем с окислительно-восстановительными реакциями, содержащих ионы металлов – модель типа БЖ.

Для систем с органическими восстановителями – модель типа системы Белоусова-Жаботинского с учетом обратимости стадий реакций.

Для систем с ферментативными реакциями и биохимических систем – модель с автокатализом или «Брюсселятор».

Моделирование структуры потоков и определение числа каскадов.

Анализ множественности стационарных состояний для каждого каскада.

Исследование устойчивости стационарных состояний.

Анализ условий формирования волновых режимов массопереноса и оценка параметров волновых фронтов.

Расчет степени превращения реагентов.

Последовательность расчета при этом такова:

Исходя из критериальных уравнений при известной структуре потоков в каждом из реакторов каскада, рассчитывается необходимая средняя скорость потоков фаз в сечении рубчатого реактора.

Затем по этой средней скорости при заданном расходе обрабатываемой субстанции определяется диаметр аппарата.

Затем при заданной степени превращения в реакторе и определенной средней скорости потоков по описанной выше методике рассчитывается необходимое время пребывания в реакторе.

Если длина реактора задается из конструктивных соображений или также задается, то рассчитанное время пребывания используется для определения необходимого числа реакторов в каскаде.

Если же длина реактора не задана, то она может подбираться путем итерационного расчета по описанной методике для обеспечения заданной степени превращения.

Литература

- 1 Тауасаров Б.Р. Влияние неидеальности системы на нелинейные концентрационные фронты в трубчатых химических реакторах// Доклады НАН РК.-2005.-№6.- С.32-40.
- 2 Тауасаров Б.Р. Основные аспекты моделирования проточных реакторов с множеством стационарных состояний// Вестник НАН РК.- 2005.- №3.- С.38-45.
- 3 Калбаева А.Т., Тауасаров Б.Р., Корбан М.С. О волновых решениях реакционно-диффузионной модели трубчатых реакторов//Материалы Международной научно-теоретической конференции молодых ученых «Проблемы общественного развития, науки и образования», посвященной Дню независимости Республики Казахстан. – Шымкент, 2004. - С.5-7.
- 4 Калбаева А.Т., Тауасаров Б.Р., Бренер А.М. Моделирование двухкаскадного реактора с частично обратимой реакцией типа «брюсселятор»//Поиск, серия естественных и технических наук. – 2003.-№4 (2). - С.170-174.
- 5 Тауасаров Б.Р., Калбаева А.Т., Бренер А.М. Моделирование двухкаскадного автокаталитического реактора с рециклом// Поиск, серия естественных и технических наук. – 2003.- №4 (2). - С.175-179.
- 6 Калбаева А.Т., Тауасаров Б.Р. Численное исследование реакционно-диффузионных систем в проточных трубчатых реакторах//Труды международной научной конференции «Наука и образование на пороге XXI века», посвященной 10-летию Южно-Казахстанского гуманитарного института имени М.Сапарбаева. - Шымкент, 2004. - Т.2. - С.81-85.
- 7 Тауасаров Б.Р., Калбаева А.Т., Бренер А.М. Численное решение кинетических уравнений системы «брюсселятор» с учетом обратимости двух стадий реакции//Наука и образование Южного Казахстана, серии: Химия, химическая технология. Процессы и аппараты. - 2003. - Т.2, №35. – С.120-123.
- 8 Калбаева А.Т., Бренер А.М., Тауасаров Б.Р. Моделирование кинетики реакций типа «брюсселятор» с учетом обратимости стадий реакции//Наука и образование Южного Казахстана, серии: Химия, химическая технология. Процессы и аппараты. - 2003. - Т.2, №35. – С.44-46.
- 9 Калбаева А.Т., Тауасаров Б.Р., Бренер А.М. Условия образования концентрационных волн в трубчатых химических реакторах//Наука и образование Южного Казахстана, серии: Химия, химическая технология. Процессы и аппараты. - 2004. – Т.2, №5(40). - С.86-90.
- 10 Калбаева А.Т., Тауасаров Б.Р. Численное моделирование стационарных режимов проточных автокаталитических реакторов//Материалы Международной научно-теоретической конференции молодых ученых. – Шымкент, 2004. – С. 86-89.
- 11 Тауасаров Б.Р., Калбаева А.Т. Исследование множества стационарных режимов проточных автокаталитических реакторов// Вестник НАН РК. - 2005.- №1. – С.134-138.
- 12 Калбаева А.Т., Бренер А.М. Моделирование кинетики автокаталитической системы реакций с учетом обратимости стадий реакции//Сборник научных трудов аспирантов, магистрантов, стажеров-исследователей ЮКГУ имени М.Ауезова. – Шымкент, 2003.- №4. – С.7-9.

Қорытынды

Бұл жұмыста химиялық аппарат бөлігінің жылжымалы шектері концентрациялық толқындар түрінде болған жағдайда реагенттер болу уақытын есептеу әдістері келтірілген. Бұл әдістеме белгілі әдебиеттік талдау мәліметтеріне және авторлардың жеке теориялық зерттеулер негізіне сүйеніп құрылған.

Summary

The paper deals with methods for calculating time-staying of reagents in the chemical apparatuses in the presence of moving concentration waves and plates. This methodology is carried out on base of analysis of references and own author's theoretic investigations.