

УДК 536.248.2

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АВТОВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В НЕИЗОТЕРМИЧЕСКИХ РЕАКЦИОННО-ДИФФУЗИОННЫХ СИСТЕМАХ

Л.М.Мусабекова
ЮКГУ им. М. Ауезова, г.Шымкент

В данной работе представлена численная модель автоволновых процессов в неизотермических реакционно-диффузионных системах в проточных трубчатых реакторах. Для численной модели построены графики концентрационных и температурных фронтов.

Изучение автоволновых процессов в химических аппаратах сопряжено с чрезвычайно большими математическими трудностями. Поэтому в данной работе поставлена задача исследования возникновения диссипативных структур в неизотермических системах, которая до сих пор мало изучена.

Модель содержит диффузионно-кинетические уравнения для двух реагентов при наличии обратимой реакции первого порядка и уравнение переноса тепла с учетом теплового эффекта реакции. Зависимости константы скоростей реакций от температуры для прямой и обратной стадий приняты подчиняющимися уравнению Аррениуса [1,2].

Рассмотрим превращение вещества X в вещество Y в химическом реакторе по схеме частично обратимой реакции первого порядка:



где k_1 и k_2 - константы скоростей прямой и обратной реакций.

Соответствующая система уравнений массопереноса и теплообмена выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} + \frac{j}{S} \frac{\partial C_A}{\partial z} - k_1 C_A + k_2 C_B, \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 C_B}{\partial z^2} + \frac{j}{S} \frac{\partial C_B}{\partial z} + k_1 C_A - k_2 C_B, \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \bar{\chi} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{j}{S} \frac{\partial T}{\partial z} + \frac{\Delta H}{\bar{\rho} \bar{c}_p}, \quad (4)$$

где C_A, C_B - концентрации компонентов A и B соответственно; C_{A0} - концентрация реагента A на входе в реактор; D_A, D_B - коэффициенты диффузии реагентов, t, z - временная и пространственная координаты соответственно; j - общий расход реагентов через реактор; T - температура; $\bar{\chi}$ - усредненный коэффициент теплопроводности; $\bar{\rho}$ - усредненная плотность смеси реагентов; \bar{c}_p - усредненная теплоемкость смеси; ΔH - суммарный тепловой эффект реакции; S - площадь поперечного сечения реактора.

Для облегчения дальнейшего анализа примем постоянными средние значения коэффициентов диффузии и теплопроводности, а также плотности и теплоемкости смеси реагентов. Такое допущение представляется оправданным, поскольку известно, что наиболее сильной является аррениусовская температурная зависимость констант скоростей реакции [3]:

$$k_1 = k_{10} \exp(-E_1/(k_B T)), \quad (5)$$

$$k_2 = k_{20} \exp(-E_2/(k_B T)), \quad (6)$$

где k_{10}, k_{20} - стандартные значения констант скоростей прямой и обратной реакций, E_1, E_2 - энергии активации прямой и обратной реакций, k_B - константа Больцмана.

Перейдем в подвижную систему координат, что позволит упростить форму базовой системы уравнений. Для этого введем новые координаты:

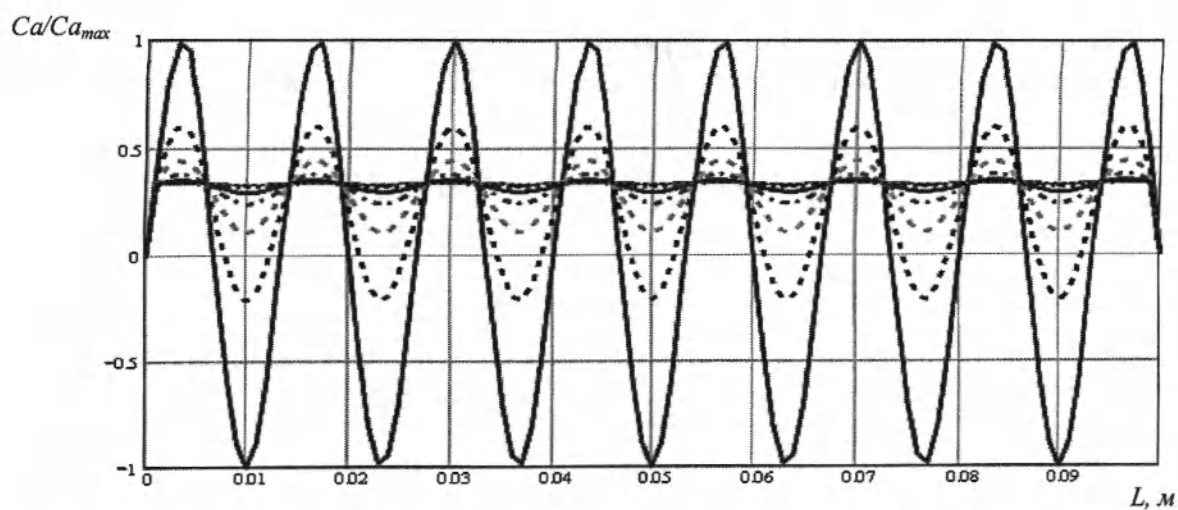
$$t, \eta = z + \frac{j}{S} t. \quad (7)$$

Тогда вместо (2), (3), (4) получим:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 C_A}{\partial \eta^2} - k_1 C_A + k_2 C_B, \quad (8)$$

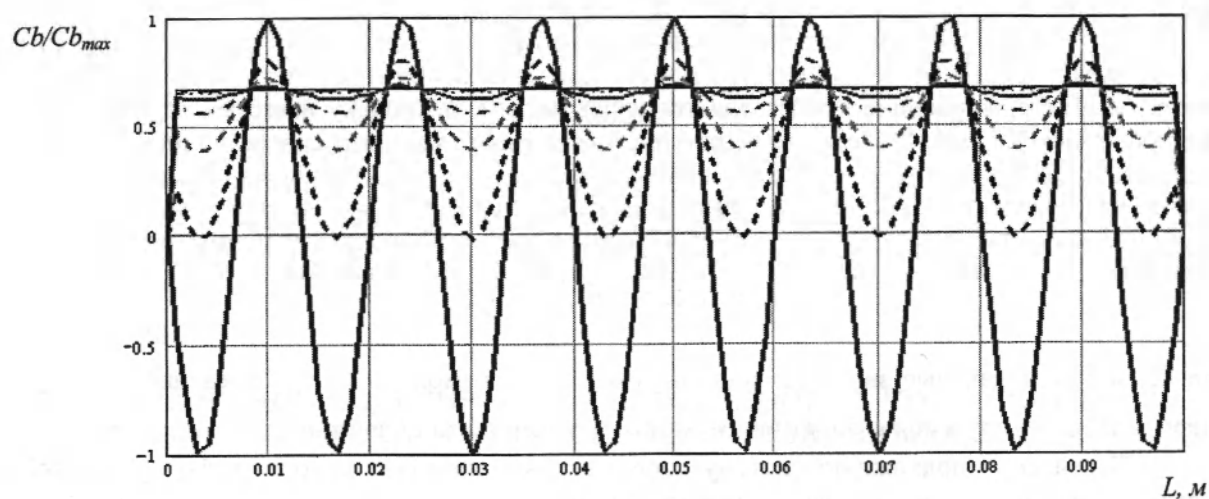
$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 C_B}{\partial \eta^2} + k_1 C_A - k_2 C_B, \quad (9)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \bar{\chi} \frac{\partial^2 T}{\partial \eta^2} + \frac{H_1 k_1 C_A + H_2 k_2 C_B}{\bar{\rho} \bar{c}_p}. \quad (10)$$



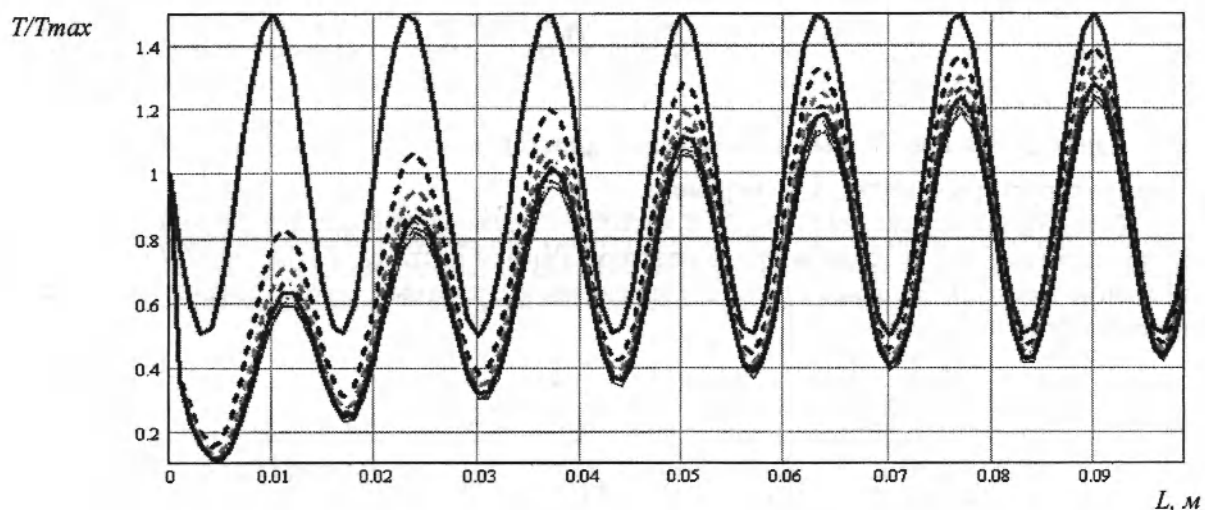
Условные обозначения: — Ca_0 , - - Ca_1 , - · - Ca_2 , · · · Ca_3 , — Ca_4 (где 1,2,3,4-периоды времени)

Рисунок 1 - Распределение концентрации компонента А по длине реактора



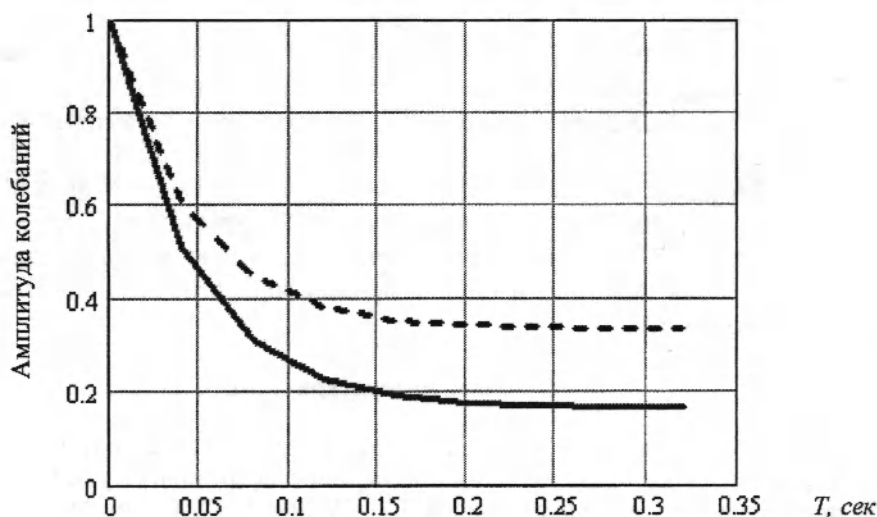
Условные обозначения: — Cb_0 , - - Cb_1 , - · - Cb_2 , · · · Cb_3 , — Cb_4 (где 1,2,3,4-периоды времени)

Рисунок 2 - Распределение концентрации компонента В по длине реактора



Условные обозначения: — T_0 , - - T_1 , - · - T_2 , · · · T_3 , — — T_4 (где 1,2,3,4-периоды времени)

Рисунок 3 - Распределение температуры среды по длине реактора



Условные обозначения: — А, - - В

Рисунок 4 - Зависимость амплитуды колебаний концентраций компонентов А и В от времени пребывания

Будем искать диссипативную структуру типа бегущих циркуляционных ячеек в форме[4]:

$$A = \alpha_1 \exp(\lambda t) \sin\left(\frac{m\pi}{L} \eta\right), \quad (11)$$

где W - скорость фильтрации на входе в зону плотного осадка; u - скорость стесненного осаждения; m - пористость осадка; $K(\sigma)$ - эмпирическая функция проницаемости плотного осадка от напряжения в слое; $\frac{\partial P}{\partial x}$ - градиент давления в слое осадка.

Описанная математическая модель отражает основные особенности процесса осаждения и может быть предложена для систематической организации экспериментальных исследований и оптимизации режимов работы реактора.

Литература

- 1 Волошук В.М., Седунов Ю.С. Процессы коагуляции в дисперсных системах.- Л.: Гидрометеониздат, 1975.-С.435.
- 2 Галкин В.А. Уравнение Смолуховского.- М.: Физматлит, 2001.- 336 с.
- 3 J.M. Ball, J. Carr, O. Penrose. The Becker-Doring Cluster Equations: Basic Properties and Asymptotic Behaviour of Solutions// Commun Math. Phys. 104.- 1986.- P. 657-692.
- 4 Bellomo N, Toskani G. On the Cauchy problem for the nonlinear Boltzmann equation: global existence, uniqueness and asymptotic stability// Jour. Math. Phys.- 1985.- V.26, No2.- P. 334-338.
- 5 DiPerna R.J., Lions P.L. Solutions globales de l'equation de Boltzmann// C.R. Acad. Sc. Paris.- 1988, t. 306.- P. 343-346.
- 6 Duncan D.B., Soheili A.R. Approximating the Becker-Döring Cluster Equations// Commun. Math. Phys.- 2000.- V. 119.- P. 1-31.
- 7 Плишке М., Рац З. Активная зона в модели ограниченной диффузией агрегации и в модели Идена /Фракталы в физике.- М.: Мир, 1988.- С. 301- 309.

Қорытынды

Бұл мақалада реакциялы-диффузиялық жүйелердегі және дисперсиялы фазадағы эмульсиялық және суспензиялық коагуляция бөлшектерінің математикалық моделі құрылған. Сонымен қатар, химиялық реакциялардың өтуіне байланысты жаңа дисперсиялық фазаның кластерленуі мен пайда болуы қарастырылған.

Summary

The mathematical model of aggregation and coagulation of particles of a disperse phase in the emulsions and suspensions in reacting systems in which the sedimentation processes are accompanied with arising of a new disperse phase from a chemical reaction have been carried out.