

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 температуропроводности;  $\bar{\rho}$  - усредненная плотность смеси реагентов;  $\bar{c}_p$  - усредненная теплоемкость смеси;  $\Delta H$  - суммарный тепловой эффект реакции;  $S$  - площадь поперечного сечения реактора.

Для облегчения дальнейшего анализа примем постоянными средние значения коэффициентов диффузии и температуропроводности, 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:

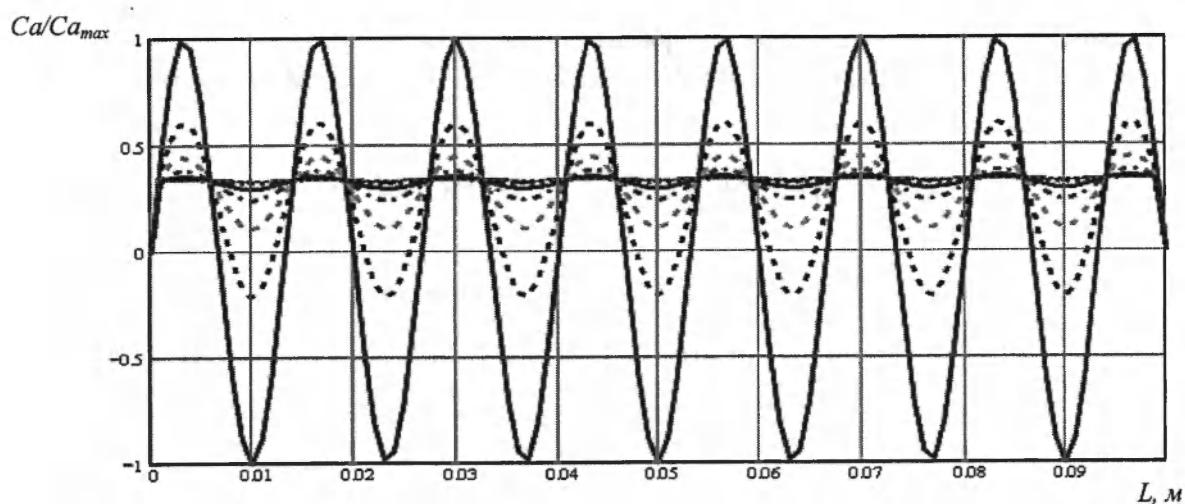
$$t, \eta = z + \frac{j}{S} t. \quad (7)$$

Тогда вместо (2), (3), (4) получим:

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

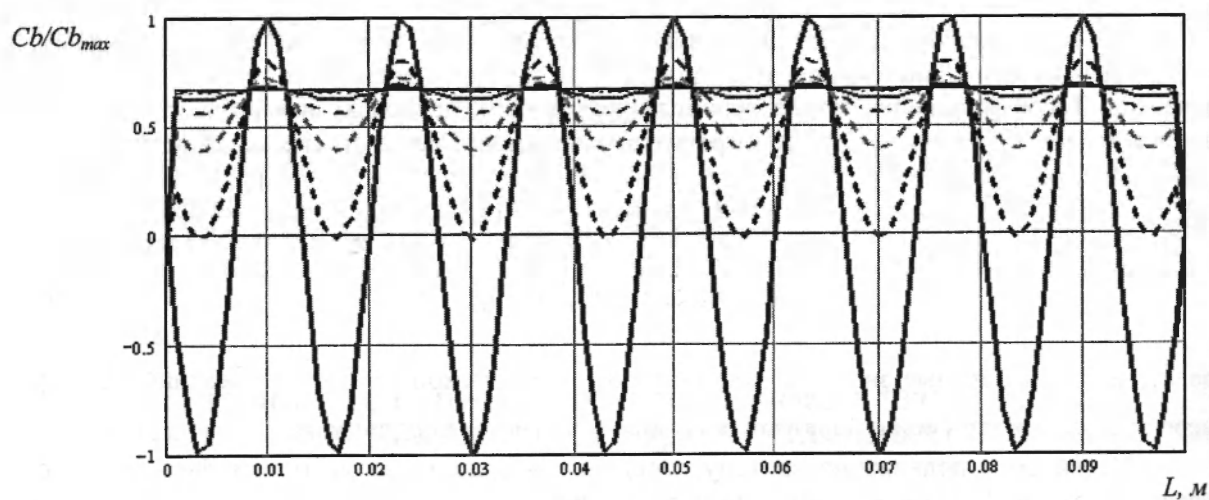
$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 C_B}{\partial \eta^2} + k_1 C_A - k_2 C_B, \quad (9)$$

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



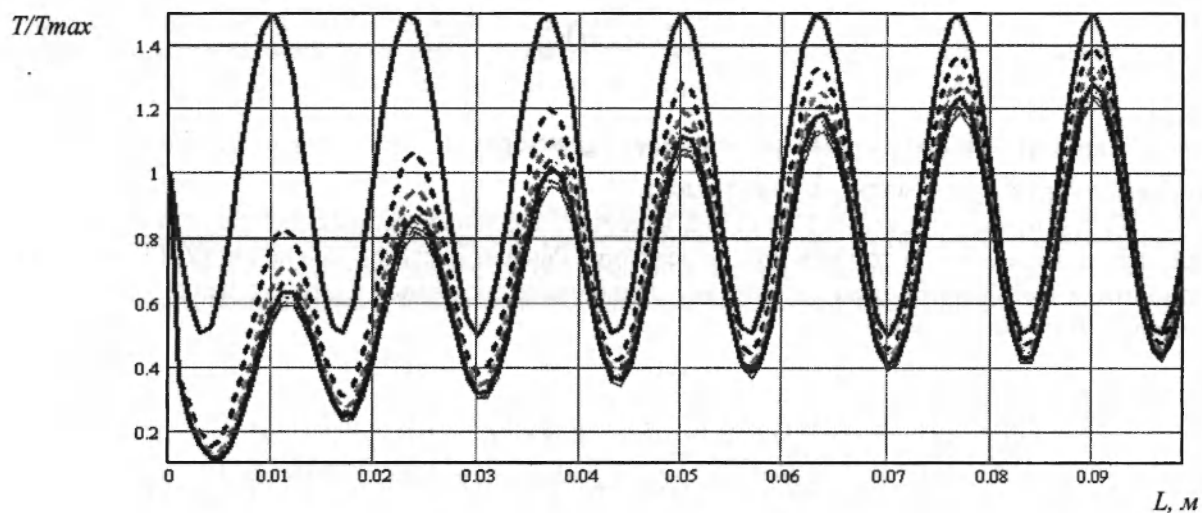
Условные обозначения: —  $Ca_0$ , - -  $Ca_1$ , - · -  $Ca_2$ , · · ·  $Ca_3$ , —  $Ca_4$  (где 1,2,3,4-периоды времени)

Рисунок 1 - Распределение концентрации компонента А по длине реактора



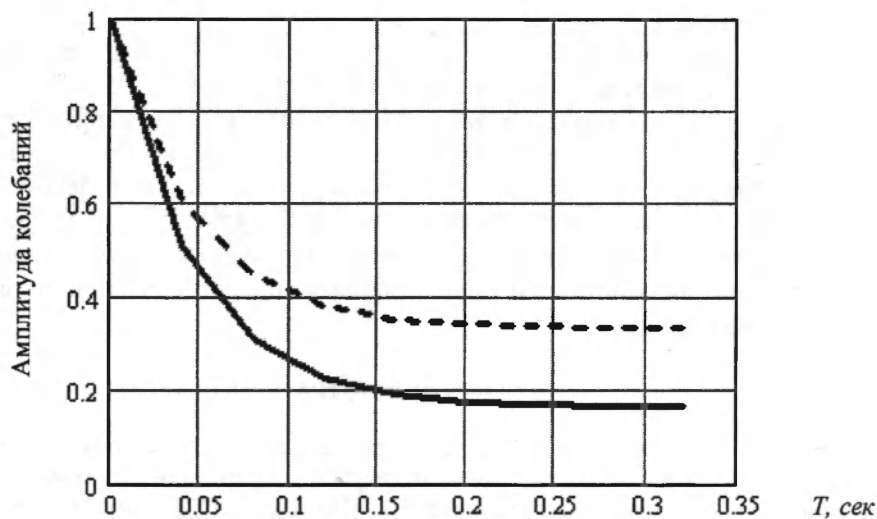
Условные обозначения: —  $Cb_0$ , - -  $Cb_1$ , - · -  $Cb_2$ , · · ·  $Cb_3$ , —  $Cb_4$  (где 1,2,3,4-периоды времени)

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]:

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

$$B = \alpha_2 \exp(\lambda t) \sin\left(\frac{m\pi}{L} \eta\right), \quad (12)$$

$$\theta = \alpha_3 \exp(\lambda t) \sin\left(\frac{m\pi}{L} \eta\right), \quad (13)$$

где  $L$  - характерный продольный размер (длина реактора);  $\alpha_i$  - амплитуды бегущих структур;  $m$  - номер структурной моды,  $\lambda$  - инкремент.

Рассмотрим выражения (11)-(13) в качестве начальных данных для расчета концентраций двух компонентов и температуры в реакторе. Решаем систему уравнений (2)-(4) конечно-разностным методом. Выражения (8)-(10) приводим к расчетным соответственно для компонентов А, В и температуры:

$$Ua_i^{j+1} = Ua_i^j \left[ 1 - 2\Delta t D_x / \eta^2 - \Delta t (k_1 + k_2) \right] + \Delta t D_x / \eta^2 (Ua_{i+1}^j + Ua_{i-1}^j) + k_2 \Delta t \quad (14)$$

$$Ub_i^{j+1} = Ub_i^j \cdot \left[ 1 - 2\Delta t D_y / \eta^2 - \Delta t (k_1 + k_2) \right] + \Delta t D_y / \eta^2 (Ub_{i+1}^j + Ub_{i-1}^j) + k_1 \Delta t \quad (15)$$

$$T_i^{j+1} = 2T_i^j - T_{i-1}^j - \eta^2 H_1 / \bar{\chi} \rho C_p (k_1 Ub_{i-1}^j + k_2 Ua_{i-1}^j) \quad (16)$$

С учетом выражений (14)-(15) были рассчитаны и построены распределения концентраций компонентов А, В и температуры среды по длине реактора для разных периодов времени (рисунки 1-3). Расчеты проводились в прикладном пакете Mathcad2001. На рисунке 4 представлены графики зависимости амплитуды колебаний концентраций компонентов А и В от времени пребывания. Как видно из рисунка, амплитуда колебаний со временем уменьшается и становится постоянной.

Таким образом, с помощью полученной численной модели для автоволновых процессов были рассчитаны распределения концентраций компонентов А, В и температуры среды по длине реактора для разных периодов времени. Установлено, что амплитуда колебаний с течением временем сначала уменьшается, а потом стабилизируется. Из рисунков видно, что распределение концентрации и температуры по длине реактора имеет волновой характер, что подтверждает явление развития циркуляционных ячеек. Результаты и выводы работы в дальнейшем можно использовать в научно-исследовательских и проектных организациях при разработке и проектировании очистных и теплообменных аппаратов различной, в том числе и большой, единичной мощности.

#### Литература

- 1 Юнусова А.А., Мусабекова Л.М. Особенности расчета реакторов с подвижным концентрационным фронтом // Труды международной научно-методической конференции «Ауэзовские чтения-4» и третьей научной конференции вузов Южного региона. Т.8. - Шымкент: ЮКГУ им. М.Ауезова, 2004. - С.156-159.
- 2 Юнусова А.А., Мусабекова Л.М., Бренер А.М. Моделирование бегущих волновых фронтов в трубчатом неизотермическом реакторе // Труды международной научно-практической конференции «Наука и образование на современном этапе». Южно-Казахстанский Гуманитарный институт им. М. Сапарбаева. - Т.1. - Шымкент, 2005. - С.199-204.
- 3 Brenner A.M., Musabekova L.M. Autowave regimes of heat and mass transfer in the non-isothermal through-reactors // Advanced Computational Methods in Heat transfer IX. Wessex Institute of Technology. Published by WIT Press Ashurst Lodge, Ashurst Southampton SO40 7AA, UK. - 2006. - P.181-191
- 4 Мусабекова Л.М., Юнусова А.А., Юнусова Д.У., Бренер А.М. Моделирование процессов переноса тепла и массы в реакторах смешанного типа с учетом объемного распределения фаз // Вестник НАН РК. - 2007. - №2. - С.39-42.

### **Қорытынды**

Кинетикалық тұрақтылардың температурадан өте күшті тәуелділігі жағдайларында изтермиялық емес ағындық аппараттардағы жылу және масса алмасудың сандық математикалық үлесі құрастырылды және осы фактормен белгілінген стационарлы режим тұрақтылығы және аппаратта температуралық циркуляциялық және концентрациялық құрылымдардың құрылуы шарттары анықталды.

### **Summary**

This paper presents the results of numerical experiments for concentration waves in reacting diffusion systems. It is shown that transfer processes with consideration of dependencies of transfer coefficients on the coordinates and chemical potentials can also be described by equation of the same type. In the paper the pre-conditions and computations leading to the mentioned non-linear equation have been adduced.