

L.M.Musabekova¹, A.T.Kalbayeva¹, O.S.Balabekov²,
S.D.Kurakbayeva¹, G.Zh. Elbergenova¹

¹South Kazakhstan state university named after M.O. Auezov, Shymkent, Kazakhstan;

²South Kazakhstan State Pedagogical Institute, Shymkent, Kazakhstan
mleyla@bk.ru, kalbaeva@mail.ru, sevam@mail.ru

CONCENTRATION OSCILLATIONS AND MOVING FRONTS IN THE CHEMICAL REACTORS. MATHEMATICAL MODELS AND THEIR ANALYSIS

Abstract. The paper deals with the simulation of kinetic regimes in chemical reactors for two cases: the absorption process with the moving front, accompanied by an instantaneous chemical reaction and transition regimes in through-reactors with multi-stage autocatalytic reactions.

In the first case paper deals with a problem of gas absorption accompanied by an instantaneous, irreversible reaction in the liquid layer taking into account the influence of reaction resulting product on the arising and velocity of a moving reaction plane. The effect of such factors as gas phase diffusion resistance, absorbed component concentration in gas phase, active component concentration in liquid, and values of the direction and cross diffusion coefficients has been investigated. It is shown that surface concentration of a reaction resulting product reaches its maximum value in the moment when reaction plane starts moving into the liquid depth. The results obtained are likely to be of useful for chemical engineering science.

In the second case approximate relations for calculating velocities of wave concentration fronts under the system non-ideality have been obtained. It was shown that non-ideality led to increasing wave front velocity in the transition regime. The results of the research can be used in the engineering method of calculating the intensity of the processes of chemical transformations and optimal working volume of non-isothermal reactor and for the design of various chemical apparatuses.

Key words: modelling of chemical reactors, moving front, instant chemical reaction, recycle, autocatalytic two-stage reactor, Belousov-Zhabotinsky reaction

УДК536.248.2

Л.М.Мусабекова¹, А.Т.Калбаева¹, О.С.Балабеков²,
С.Д.Куракбаева¹, Г.Ж. Ельбергенова¹

¹Южно-Казахстанский государственный университет им.М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан;

²Южно-Казахстанский государственный педагогический институт, Шымкент, Казахстан

КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ И ПОДВИЖНЫЕ ФРОНТЫ В ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРАХ. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ИХ АНАЛИЗ

Аннотация. В статье рассматривается моделирование кинетических режимов в химических реакторах для двух случаев: процесса абсорбции с движущимся фронтом, сопровождающейся мгновенной химической реакцией и переходных режимов в проточных реакторах с многостадийными автокаталитическими реакциями.

В первом случае в статье рассматривается проблема абсорбции газа, сопровождающейся мгновенной необратимой реакцией в слое жидкости с учетом влияния реакции получаемого продукта на скорость движущегося фронта реакции. Было исследовано влияние таких факторов, как сопротивление диффузии

газовой фазы, концентрация абсорбируемого компонента в газовой фазе, концентрации активного компонента в жидкости, а также значения прямых и перекрестных коэффициентов диффузии. Показано, что поверхностная концентрация реакции полученного продукта достигает максимального значения в тот момент, когда фронт реакции начинает двигаться в глубину жидкости. Полученные результаты могут быть полезны для инженерной химической науки.

Во втором случае были получены приближенные соотношения для расчета скорости концентрационных волновых фронтов для неидеальной системы в переходных колебательных режимах. Было показано, что неидеальность привела к увеличению скорости волнового фронта в переходном режиме. Результаты исследования могут быть использованы в методике инженерного расчета интенсивности процессов химических превращений и оптимального рабочего объема неизотермического реактора и при проектировании различных химических аппаратов.

Ключевые слова: моделирование химических реакторов, движущийся фронт, мгновенная химическая реакция, рецикл, автокаталитический двухкаскадный реактор, реакция Белоусова-Жаботинского.

Введение

Моделирование химических реакторов для осуществления сложных физико – химических процессов требует учета особенностей кинетики химических превращений и условий протекания тепло- и массопереноса. При этом зачастую правильный выбор модельной системы позволяет добиться большей общности выводов и дать возможность создать методы расчета широкого класса систем и реакторов.

В работе рассмотрено моделирование для двух случаев: процесса абсорбции с подвижным фронтом, сопровождающейся мгновенной химической реакцией, и переходных режимов в проточных реакторах с многостадийным механизмом химической реакции, сопровождающихся режимами концентрационных осцилляций.

1. Моделирование подвижных фронтов в проточных химических реакторах

Рассматривается процесс хемосорбции, в котором может возникнуть подвижный концентрационный фронт реакции:



Компонент B является активным компонентом, изначально присутствующим в слое жидкости в растворенном виде. Компонент A диффундирует из глубины газовой фазы к поверхности раздела жидкой и газовой фаз и до определенного момента не может проникнуть в глубь жидкого слоя, поскольку уже на поверхности раздела жидкой и газовой фаз происходит мгновенная химическая реакция и образуется новый компонент E .

Как только происходит исчерпывание компонента B вблизи поверхности раздела, фронт реакции начинает перемещаться с некоторой скоростью в глубину слоя жидкости. Однако скорость его перемещения не постоянна, а изменяется во времени. В этот момент концентрации компонентов A и B на поверхности фронта реакции равны нулю, имеет место только диффузия компонентов A и B в жидком слое, которая лимитирует скорость процесса.

Процесс хемосорбции рассматривается во временном интервале [1]. При моделировании диффузионных процессов используем понятие о практических коэффициентах диффузии. Данный подход при описании многокомпонентной диффузии в жидкой фазе удобен, чем использование уравнений Максвелла-Стефана, поскольку дает явное выражение для потоков компонентов через их градиенты. Ранее мы принимали, что при малых концентрациях химически активной примеси B в растворе, что и реализуется в большинстве хемосорбционных процессов, практические коэффициенты диффузии можно считать постоянными [2-3].

Однако это не всегда адекватно отвечает модели процесса. Таким образом, при описании модели не учитывается межмолекулярное взаимодействие. Для неидеальной системы, т.е. для учета межмолекулярного взаимодействия необходимо использовать зависимость коэффициента диффузии от концентрации компонента [4] и параметр W_{AX} , учитывающий межмолекулярное взаимодействие:

$$\tilde{D} = D_i (1 - 2w_{AX} X), \quad (2)$$

$$w_{AX} = \kappa [2\varepsilon_{AX} - (\varepsilon_{AA} + \varepsilon_{XX})], \quad (3)$$

где \tilde{D} - коэффициент диффузии компонента в реальной системе; D_i - коэффициент диффузии для идеальной системы; $\varepsilon_{AX}, \varepsilon_{AA}, \varepsilon_{XX}$ - энергии взаимодействия соответственно между молекулами реагентов A и X , A и A , X и X ; κ - параметр, зависящий от модели жидкого состояния, X - в данном случае жидкая среда, A - диффундирующий компонент, в нашем случае компоненты A, B, E, X - среда.

Потоки компонентов B и E в жидкой фазе описываются следующими уравнениями, с учетом перекрестных диффузионных потоков:

$$\begin{aligned} j_B &= -\tilde{D}_{BB} \frac{\partial C_B}{\partial X} - \tilde{D}_{BE} \frac{\partial C_E}{\partial X}, \\ j_E &= -\tilde{D}_{EB} \frac{\partial C_B}{\partial X} - \tilde{D}_{EE} \frac{\partial C_E}{\partial X}. \end{aligned} \quad (4)$$

Рассмотрим начальный период процесса абсорбции, когда фронт реакции совпадает с межфазной границей и в слое жидкости отсутствуют источники массы. Тогда в жидкой фазе при $X > 0$ ($X = 0$ – поверхность раздела фаз) справедливы законы сохранения масс компонентов B и E . Данное условие записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_B}{\partial t} + \nabla j_B &= 0, \\ \frac{\partial C_E}{\partial t} + \nabla j_E &= 0. \end{aligned} \quad (5)$$

С учетом выражений (3) и (4) получаем уравнения конвективной диффузии компонентов B и E , справедливые при $X > 0, t > 0$:

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{BB} \frac{\partial^2 C_B}{\partial^2 X} + \tilde{D}_{BE} \frac{\partial^2 C_E}{\partial^2 X} &= \frac{\partial C_B}{\partial t}, \\ \tilde{D}_{EB} \frac{\partial^2 C_B}{\partial^2 X} + \tilde{D}_{EE} \frac{\partial^2 C_E}{\partial^2 X} &= \frac{\partial C_E}{\partial t}. \end{aligned} \quad (6)$$

В начальной стадии процесса, т.е. до момента начала движения фронта реакции вглубь жидкой фазы, концентрация компонента A в жидкой фазе равна нулю, а потому равна нулю и равновесная концентрация C_A^* в газовой фазе. При этом компоненты B и E предполагаются нелетучими. Уравнения молекулярной диффузии компонентов A и E , справедливые при $X > 0, t > t^*$:

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{AA} \frac{\partial^2 C_A}{\partial^2 X} + \tilde{D}_{AE} \frac{\partial^2 C_E}{\partial^2 X} &= \frac{\partial C_A}{\partial t}, \\ \tilde{D}_{EA} \frac{\partial^2 C_A}{\partial^2 X} + \tilde{D}_{EE} \frac{\partial^2 C_E}{\partial^2 X} &= \frac{\partial C_E}{\partial t}. \end{aligned} \quad (7)$$

Выражения для граничных условий для компонентов B и E при $X = 0$:

$$\tilde{D}_{BB} \frac{\partial C_B}{\partial X} + \tilde{D}_{BE} \frac{\partial C_E}{\partial X} = \alpha C_{A\infty}, \quad \text{при } t > 0, \quad (8)$$

$$\tilde{D}_{EB} \frac{\partial C_B}{\partial X} + \tilde{D}_{EE} \frac{\partial C_E}{\partial X} = -2\alpha C_{A\infty},$$

$$\frac{\partial C_E}{\partial X} = 0, \quad t > t^*. \quad (9)$$

Граничные условия (8) показаны для момента времени, когда на свободной поверхности происходит химическая реакция и образуется вещество E .

Системы уравнений (6), (7) с граничными условиями решаем с помощью преобразования Лапласа. Тогда решение системы уравнений (6), (7) с учетом преобразованных граничных условий [5] представим в виде:

$$y_1 = C_1 e^{h_1 x} + C_2 e^{h_2 x} + \frac{b}{p}, \quad (10)$$

$$y_2 = C_3 e^{h_1 x} + C_4 e^{h_2 x}.$$

Получаем расчетные выражения для концентраций активного компонента абсорбента B и продукта реакции E в слое жидкости в момент времени, предшествующему образованию подвижного фронта реакции [6]. Принимая в выражениях $x=0$, находим концентрацию компонентов на межфазной границе:

$$C_{BS} = \frac{2\alpha C_{A\infty}}{(R_2 - R_1)} \left(\frac{2T_2 + T_1}{\sqrt{S_1}} - \frac{2T_2 R_1 + T_1 R_2}{\sqrt{S_2}} \right) \sqrt{\frac{t}{\pi}} + C_{B\infty}, \quad (11)$$

$$C_{ES} = \frac{2\alpha C_{A\infty}}{(R_2 - R_1)} \left(\lambda_1 \frac{2T_2 + T_1}{\sqrt{S_1}} - \lambda_2 \frac{2T_2 R_1 + T_1 R_2}{\sqrt{S_2}} \right) \sqrt{\frac{t}{\pi}}. \quad (12)$$

В тот момент времени, когда концентрация вещества B на межфазной границе становится равной нулю фронт реакции становится подвижным и начинает перемещаться в глубь слоя жидкости:

$$t^* = \frac{C_{B\infty}^2 \pi (R_2 - R_1)^2}{4\alpha^2 C_{A\infty}^2 \left(\frac{2T_2 R_1 + T_1 R_2}{\sqrt{S_2}} - \frac{2T_2 + T_1}{\sqrt{S_1}} \right)^2}. \quad (13)$$

В этот момент времени на межфазной поверхности достигается максимальная концентрация поверхностно-активного продукта реакции E :

$$C_{ES} = \frac{C_{B\infty} \left[\lambda_1 \sqrt{S_2} (2T_2 + T_1) - \lambda_2 \sqrt{S_1} (2T_2 R_1 + T_1 R_2) \right]}{\left[\sqrt{S_2} (2T_2 + T_1) - \sqrt{S_1} (2T_2 R_1 + T_1 R_2) \right]}. \quad (14)$$

Моделирование химических реакторов для осуществления сложных физико – химических процессов требует учета особенностей кинетики химических превращений и условий протекания

тепло- и массопереноса. При этом зачастую правильный выбор модельной системы позволяет добиться большей общности выводов и дать возможность создать методы расчета широкого класса систем и реакторов.

Бегущие реакционные фронты часто возникают в процессах, протекающих в химических реакторах [7]. Их возникновение может быть обусловлено как особенностями кинетики химических реакций, так и быть следствием взаимодействия кинетики диффузионного переноса и химических превращений.

2. Переходные режимы в проточных реакторах с учетом многостадийности и неидеальности реакций

Многостадийность реакций и неидеальность реакционно-диффузионных систем в реакторе существенно влияют на формирование режима процесса и должны учитываться при моделировании явлений переноса и оптимизации реактора [8]. В нашей работе указанные аспекты моделирования исследуются на примере автокаталитических реакций двух видов.

Рассмотрим следующую модельную схему реакций, в которой основными реагентами являются компоненты X и Y , промежуточными - A , C , а первая стадия носит автокаталитический характер [9]:



где k_1, k_2, k_3 - константы скоростей стадий процесса.

Пусть в реактор осуществляется непрерывный подвод компонента Y со скоростью q . Тогда систему кинетических уравнений для основных компонентов можно записать в виде [10]:

$$\frac{dX}{dt} = k_1XY - k_2X, \quad (18)$$

$$\frac{dY}{dt} = q - k_1XY - k_3Y. \quad (19)$$

Множество стационарных состояний находим в результате решения системы алгебраических уравнений [11]:

$$k_1XY - k_2X = 0, \quad (20)$$

$$q - k_1XY - k_3Y = 0. \quad (21)$$

Следующая стационарная точка является устойчивой, что объясняется автокаталитическими свойствами компонента X :

$$X_{00} = 0; Y_{00} = q/k_3. \quad (22)$$

При малой скорости подвода компонента Y :

$$q < k_2k_3/k_1 \quad (23)$$

стационарная точка (22) является единственной. С возрастанием скорости подвода q , после превышения критического значения

$$q^* = k_2 k_3 / k_1, \quad (24)$$

в системе возникает еще одно стационарное состояние

$$X_{01} = \frac{qk_1 - k_2 k_3}{k_1 k_2}; Y_{01} = \frac{k_2}{k_1}. \quad (25)$$

При выполнении условия

$$q > k_2 k_3 / k_1 \quad (26)$$

стационарная точка (22) становится неустойчивой. Новое возникающее стационарное состояние, напротив, устойчиво. Соответствующая стационарная точка может иметь тип либо узла, либо устойчивого фокуса. При этом в системе возникает затухающий колебательный переходный режим. Проведенный нами подробный анализ режимов в этом случае дал следующие результаты [12-14].

Если $\frac{k_3}{k_2} \geq 1$, то при любых q стационарная точка (25) при условии (26) представляет собой

устойчивый узел. Поэтому колебательный режим не возникает. Если $\frac{k_3}{k_2} < 1$, то при условии (26)

имеем всегда

$$q^* < \frac{2k_2^2}{k_1} \left[1 - \sqrt{1 - \frac{k_3}{k_2}} \right]. \quad (27)$$

Отсюда следует, что при скорости подачи реагента Y , превышающей критическую величину q^* , и при условии $k_3/k_2 < 1$, в диапазоне скоростей подачи реагента

$$q_1 < q < q_2, \quad (28)$$

где

$$q_1 = \frac{2k_2^2}{k_1} \left[1 - \sqrt{1 - \frac{k_3}{k_2}} \right], q_2 = \frac{2k_2^2}{k_1} \left[1 + \sqrt{1 - \frac{k_3}{k_2}} \right]. \quad (29)$$

возникает переходной колебательный режим [15].

Рассмотрим далее автокаталитическую реакцию следующего вида:



В идеальной системе справедливо следующее соотношение для химического потенциала продукта реакции [16,17]:

$$\mu = \mu^* + RT \ln X, \quad (31)$$

где μ^* - стандартное значение химического потенциала; R - газовая постоянная; T - температура.

Рассмотрим случай неидеальной реакционно-диффузионной системы в реакторе с автокаталитической реакцией (30). Можно получить следующее выражение для химического потенциала продукта реакции в разбавленной бинарной системе [18-20] с учетом формулы (2):

$$\mu = \mu^* + RT \ln X + \omega_{AX} (1 - X)^2, \quad (32)$$

Поскольку раствор принимается разбавленным, считаем, что $X \ll 1$. Тогда можно записать приближенное равенство:

$$\mu = \mu^* + RT \ln X + \omega_{AX} (1 - 2X). \quad (33)$$

В соответствии с положениями термодинамики разбавленных растворов [21] коэффициент диффузии определяется величиной производной химического потенциала по концентрации. Тогда получаем:

$$\frac{\partial \mu}{\partial X} = \frac{RT}{X} - 2\omega_{AX} = \frac{RT}{X} (1 - 2\omega_{AX} X), \quad (34)$$

где $D = D_i (1 - 2\omega_{AX} X)$ - коэффициент диффузии компонента в реальной системе; D_i - коэффициент диффузии для идеальной системы. Таким образом, для неидеальной системы кинетическое уравнение можно переписать в виде

$$\frac{\partial X}{\partial t} + V \frac{\partial X}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_i (1 - 2\omega_{AX} X) \frac{\partial X}{\partial z} \right) + f(X). \quad (35)$$

В реакторе возможны два стационарных состояния:

$$X_{01} = 0; \quad X_{02} = A \frac{k_1}{k_2}. \quad (36)$$

Отсюда можно сделать вывод, что неидеальность смеси не изменяет характера стационарных режимов реактора. В то же время значение начальной скорости волнового фронта будет отличаться от рассчитываемого без учета неидеальности.

Неидеальность реакционно-диффузионной системы для сильно разбавленных растворов не приводит к качественно новым эффектам, не свойственным идеальным системам [22]. Решающую роль продолжает играть все же нелинейность кинетических соотношений. Но в случае концентрированных растворов ситуация может быть другой. Этот вопрос требует дополнительных исследований.

Заключение

Расчетные выражения $C_B(X, t^*)$ и $C_E(X, t^*)$ могут использоваться как начальные данные для вычисления профилей концентраций компонентов A, B и E с учетом влияния продукта реакции и неидеальности системы для периода времени абсорбции $t > t^*$.

Проведенный анализ показывает, что скорость подвода реагентов в химических реакторах не только регулирует производительность реактора, но и может качественно менять множество стационарных и переходных режимов их работы. Обычно подобные изменения связывают с тепловым режимом эксплуатации. Однако, как показывает наше исследование, причина качественных изменений может носить и кинетический характер. Отметим, что этот фактор зачастую не учитывается в практике расчета и проектирования химических реакторов.

Результаты проведенных исследований могут быть использованы в инженерной методике расчета интенсивности процессов химических превращений и минимальной длины проточного неизотермического реактора, для проведения технологических расчетов при проектировании химических реакторов для очистки газовых и жидких выбросов.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Baetens D., Van Keer R., Hosten L.H. (1997) Gas-liquid reaction: absorption accompanied by an instantaneous, irreversible reaction, *Comp. Mech. Publ. Moving boundaries IV*, Boston, p.185-190.
- [2] Cussler E.L. (2009) Diffusion: mass transfer in fluid systems, *International Journal of Refrigeration*, Cambridge, UK, 16(4): 282-294.
- [3] Bo S., Ma X., Lan Z., Chen J., Chen H. (2010) Numerical simulation on the falling film absorption process in a counter-flow absorber, *Chemical Engineering Journal*, 156(3): 607-612.
- [4] Мусабекова Л.М. (2011) Методика расчета реакционно-диффузионных процессов с учетом неидеальности системы. Международная научно-техническая конференция НЭРПО-2011, МГОУ, Москва, С. 294-299.
- [5] Musabekova L. M., Dausheeva N.N., Jamankarayeva M.A. (2012) Methodology of calculating reaction-diffusion processes with moving boundaries of kinetic zones. 15-th Conference Process Integration, Modeling and Optimization for Energy Saving and Pollution Reduction. *Chem. Eng. Trans.* 29, Part 2. Prague, Czech Republic. P.1333-1339. DOI: 10.3303/CET1229223.
- [6] Лесбаев А.У., Мусабекова Л.М., Куракбаев Д.С. (2012) Анализ автоволновых процессов в химических реакторах, *Вестник КазНТУ*, 2(90): С.5-10.
- [7] Musabekova L.M., Dausheyeva N.N., Zhumataev N.S., Jamankarayeva M.J. (2016) On modeling the convective mass transfer over moving films interface for the reaction-diffusion systems of the second order. 19th Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction, August. Prague, Czech Republic. *Chemical engineering transactions*, vol. 52. P.217-222. DOI: 10.3303/CET1652037.
- [8] Калбаева А.Т., Бренер А.М. (2003) Моделирование кинетики автокаталитической системы реакций с учетом обратимости стадий реакции. Сборник научных трудов аспирантов, магистрантов, стажеров-исследователей ЮКИУ имени М. Ауезова. Шымкент, 4: 7-9.
- [9] Тауасаров Б.Р., Калбаева А.Т., Бренер А.М. (2003) Моделирование двухкаскадного автокаталитического реактора с рециклом, *Поиск, серия естественных и технических наук*, 4 (2): 175-179.
- [10] Калбаева А.Т., Тауасаров Б.Р. (2004) Численное моделирование стационарных режимов проточных автокаталитических реакторов. Материалы Международной научно-теоретической конференции молодых ученых, Шымкент. С 86-89.
- [11] Тауасаров Б.Р., Калбаева А.Т. (2005) Исследование множества стационарных режимов проточных автокаталитических реакторов, *Вестник национальной академии наук Республики Казахстан*, Алматы, 1: С.134-138.
- [12] Калбаева А.Т., Тауасаров Б.Р. (2004) 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. Т.2: С.81-85.
- [13] Калбаева А.Т., Тауасаров Б.Р., Корбан М.С. (2004) 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: С.5-7.
- [14] Калбаева А.Т., Тауасаров Б.Р., Бренер А.М. (2004) Условия образования концентрационных волн в трубчатых химических реакторах, *Наука и образование Южного Казахстана, серии: Химия, химическая технология. Процессы и аппараты*, Шымкент, 5(40): 86-90.
- [15] Kalbaeva A.T., Kurakbayeva S.D., Zhidebayeva A.N., Musrepova E. (2014) Modelling the Dynamical Regimes of Mass Transfer in Cascades of Through – Reactors. 17th Conference Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction, Prague, Czech Republic. P.1015-1020.
- [16] Yunussov M.B., Kalbaeva A.T., Kurakbayeva S.D., Brenner A.M. (2013) Simulating the transient regimes and concentrate waves in through-reactors with multi-stage kinetics. *Proceedings of the 7th International Conference on Computational Chemistry (COMPUCHEM '13)*, Paris, France. P.18-22.
- [17] Barkanyi A., Nemeth S., Lakatos B.G. (2013) Modelling and Simulation of a Batch Poly(Vinyl Chloride) Reactor, *Chemical Engineering Transactions*, 32: 769-774.
- [18] Carvajal, D., Jara C.C., Irrazabal M.M., 2012, Dynamic Modelling of the Reactive Absorption of CO₂ in Ionic Liquids and its Effect on the Mass Transfer and Fluid Viscosity, *Chemical Engineering Transactions*, 29: 175-180.
- [19] Dateo, C. E., Orban M., De Kepper P., Epstein I. R. (1982) Systematic design of chemical oscillators. Bistability and oscillations in the autocatalytic chlorite-iodide reaction in a stirred-flow reactor, *Journal of the American Chemical Society*, 104(2): 504-509.
- [20] Field R. J., Koros E. and Noyes R. M. (1972) Oscillations in chemical systems, II. Thorough analysis of temporal oscillation in the bromate-cerium-malonic acid system, *Journal of the American Chemical Society*, 94(25): 8649-8664.
- [21] Holodniok M., Klic A., Kubicek M., Marek M. (1984) *Methods of Analysis of Nonlinear Dynamical Models*. Academia, Prague, Czech Republic.
- [22] Manenti F., Cieri S., Restelli M., Lima N.M.N., Linan L.Z., 2011, Dynamic Simulation of the Lurgi-type Reactor for Methanol Synthesis, *Chemical Engineering Transactions*, 24: 379-384.

REFERENCES

- [1] Baetens D., Van Keer R., Hosten L.H. (1997) Gas-liquid reaction: absorption accompanied by an instantaneous, irreversible reaction, *Comp. Mech. Publ. Moving boundaries IV*, Boston, p.185-190.
- [2] Cussler E.L. (2009) Diffusion: mass transfer in fluid systems, *International Journal of Refrigeration*, Cambridge, UK, 16(4): 282-294.
- [3] Bo S., Ma X., Lan Z., Chen J., Chen H. (2010) Numerical simulation on the falling film absorption process in a counter-flow absorber, *Chemical Engineering Journal*, 156(3): 607-612.
- [4] Musabekova L.M. (2011) Method of calculation of reaction-diffusion processes taking into account non-ideal system. *International scientific-technical conference NERPO 2011*, MSOU, Moscow, P. 294-299. (In Russian)
- [5] Musabekova L. M., Dausheeva N.N., Jamankarayeva M.A. (2012) Methodology of calculating reaction-diffusion processes with moving boundaries of kinetic zones. 15-th Conference Process Integration, Modeling and Optimization for Energy Saving and Pollution Reduction. *Chem. Eng. Trans.* 29, Part 2. Prague, Czech Republic. P.1333-1339. DOI: 10.3303/CET1229223.
- [6] Lesbaev A.U., Musabekova L. M., Kurakbayev D.S. (2012) Analysis of the self-oscillatory processes in chemical reactors, *Herald of KazNTU*, 2 (90): P.5-10. (In Russian)
- [7] Musabekova L.M., Dausheeva N.N., Zhumataev N.S., Jamankarayeva M.J. (2016) On modeling the convective mass transfer over moving films interface for the reaction-diffusion systems of the second order. 19th Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction, August. Prague, Czech Republic. *Chemical engineering transactions*, vol. 52. P.217-222. DOI: 10.3303/CET1652037.
- [8] Kalbaeva A.T., Brener A.M. (2003) Modeling system autocatalytic reaction kinetics with reversible reaction steps. *Collection of scientific works of graduate students, master students, trainees and researchers UKGU named after M. Auezov. Shymkent*, 4: 7-9. (In Russian)
- [9] Tauasarov B.R., Kalbaeva A.T., Brener A.M. (2003) Simulation of a two-stage self-catalytic reactor with recycle, *Search, series natural sciences and engineering*, 4 (2): 175-179. (In Russian)
- [10] Kalbaeva A.T., Tauasarov B.R. (2004) Numerical modeling of stationary modes autocatalytic flow reactors. *Proceedings of the International scientific-theoretical conference of young scientists, Shymkent*. P. 86-89. (In Russian)
- [11] Tauasarov B.R., Kalbaeva A.T. (2005) Research of the set of stationary regimes autocatalytic flow reactors, *Bulletin of the National academy of sciences of the Republic of Kazakhstan, Almaty*, 1: P.134-138. (In Russian)
- [12] Kalbaeva A.T., Tauasarov B.R. (2004) Numerical research reaction-diffusion systems in the flow tube reactor. *Proceedings of the International scientific conference "Science and education on the threshold of the XXI century"*, dedicated to the 10th anniversary of M. Saparbayev, Shymkent, South Kazakhstan Humanitarian Institute. Vol.2: P.81-85. (In Russian)
- [13] Kalbaeva A.T., Tauasarov B.R., Korban M.S. (2004) Wave solutions of reaction-diffusion model of the tubular reactors. *Proceedings of the International scientific-theoretical conference of young scientists "Problems of social development, science and education"*, dedicated to the Independence Day of the Republic of Kazakhstan, Shymkent: P.5-7. (In Russian)
- [14] Kalbaeva A.T., Tauasarov B.R., Brener A.M. (2004) The conditions of formation of concentration waves in a tubular chemical reactors, *Science and Education of South Kazakhstan Series: Chemistry, Chemical Engineering. Processes and devices, Shymkent*, 5 (40): 86-90. (In Russian)
- [15] Kalbaeva A.T., Kurakbayeva S.D., Zhidebayeva A.N., Musrepova E. (2014) Modelling the Dynamical Regimes of Mass Transfer in Cascades of Through – Reactors. 17th Conference Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction, Prague, Czech Republic. P.1015-1020.
- [16] Yunussov M.B., Kalbaeva A.T., Kurakbayeva S.D., Brener A.M. (2013) Simulating the transient regimes and concentrate waves in through-reactors with multi-stage kinetics. *Proceedings of the 7th International Conference on Computational Chemistry (COMPUCHEM '13)*, Paris, France. P.18-22.
- [17] Barkanyi A., Nemeth S., Lakatos B.G. (2013) Modelling and Simulation of a Batch Poly(Vinyl Chloride) Reactor, *Chemical Engineering Transactions*, 32: 769-774.
- [18] Carvajal, D., Jara C.C., Irrazabal M.M., 2012, Dynamic Modelling of the Reactive Absorption of CO₂ in Ionic Liquids and its Effect on the Mass Transfer and Fluid Viscosity, *Chemical Engineering Transactions*, 29: 175-180.
- [19] Dateo, C. E., Orban M., De Kepper P., Epstein I. R. (1982) Systematic design of chemical oscillators. Bistability and oscillations in the autocatalytic chlorite-iodide reaction in a stirred-flow reactor, *Journal of the American Chemical Society*, 104(2): 504-509.
- [20] Field R. J., Koros E. and Noyes R. M. (1972) Oscillations in chemical systems, II. Thorough analysis of temporal oscillation in the bromate-cerium-malonic acid system, *Journal of the American Chemical Society*, 94(25): 8649-8664.
- [21] Holodniok M., Klic A., Kubicek M., Marek M. (1984) *Methods of Analysis of Nonlinear Dynamical Models*. Academia, Prague, Czech Republic.
- [22] Manenti F., Cieri S., Restelli M., Lima N.M.N., Linan L.Z., 2011, Dynamic Simulation of the Lurgi-type Reactor for Methanol Synthesis, *Chemical Engineering Transactions*, 24: 379-384.

Л.М. Мусабекова¹, А.Т. Қалбаева¹, О.С. Балабеков², С.Ж. Құрақбаева¹, Ғ.Ж. Ельбергенова¹

¹М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті, Шымкент қ., Қазақстан;

²Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік педагогикалық институты, Шымкент қ., Қазақстан

ХИМИЯЛЫҚ РЕАКТОРЛАРДАҒЫ КОНЦЕНТРАЦИЯЛЫҚ ОСЦИЛЛЯЦИЯЛАР ЖӘНЕ ЖЫЛЖЫМАЛЫ ФРОНТТАР. МАТЕМАТИКАЛЫҚ ҮЛГІЛЕР ЖӘНЕ ОЛАРДЫ ТАЛДАУ

Аннотация. Бұл мақалада химиялық реакторлардағы кинетикалық режимдерді үлгілеу екі жағдай үшін қаралады: қозғалмалы фронтпен абсорбция үрдісінен бастап, көпсатылы автокаталитикалық реакциялармен ағынды реакторларда өтпелі режимдер. Бірінші жағдайда мақалада реакцияның қозғалмалы фронтының жылдамдығынан алынатын өнімнің реакциясының әсерін ескере отырып, сұйықтықтың қабатында лезде қайтымсыз реакциямен жүруші газдың абсорбциясы мәселесі қарастырылады. Газдық фазаның диффузиясының кедергісі, газдық фазадағы компоненттің абсорбиленуінің концентрациясы, сұйықтықтағы белсенді компоненттің концентрациясы, сондай-ақ диффузияның тікелей және айқас коэффициенттерінің мәндері осы сияқты факторлардың әсерлері зерттелінді. Реакцияның фронты сұйықтық тереңінде қозғала бастағанда алынған өнімнің реакциясының кеңістік концентрациясы өзінің барынша көп мәніне сол сәтте жететіндігі көрсетілген. Алынған нәтижелер инженерлік химиялық ғылым үшін пайдалы болуы мүмкін. Екінші жағдайда өтпелі тербелмелі режимдердегі идеалды емес үшін концентрациялық толқындық фронттардың жылдамдығын есептеуге арналған жуықтау қатынастары алынған. Идеалдық емес өтпелі режимдегі толқындық фронттың жылдамдығының өсуіне әкелетіндігі көрсетілді. Зерттеу нәтижелері химиялық айналу үрдісінің интенсивтілігін және изотермиялық емес реактордың жұмыс көлемінің тиімділігін инженерлік есептеу әдісінде және әртүрлі химиялық аппараттарды жобалауда қолданылуы мүмкін.

Түйін сөздер: жылжымалы фронт, химиялық реакторларды модельдеу, лездік химиялық реакция, рецикл, автокаталитикалық екікасадты реактор, Белоусов-Жаботинский реакциясы.

Сведения об авторах:

Мусабекова Лейла Мухамеджановна – д.т.н., доцент Южно-Казахстанского государственного университета им. М.Ауэзова, Республика Казахстан г.Шымкент;

Қалбаева Айжан Тажихановна – к.т.н., доцент Южно-Казахстанского государственного университета им. М.Ауэзова, Республика Казахстан г. Шымкент;

Балабеков Оразалы Сатимбекович – д.т.н., Академик НАН РК. Южно-Казахстанского государственного педагогического института, Республика Казахстан г. Шымкент;

Құрақбаева Севара Джумағалиевна – к.т.н., доцент Южно-Казахстанского государственного университета им. М.Ауэзова, Республика Казахстан г.Шымкент;

Ельбергенова Газиза Жумашевна – старший преподаватель Южно-Казахстанского государственного университета им. М.Ауэзова, Республика Казахстан г. Шымкент.