

UDC 536.248.2

L.M.Musabekova<sup>1</sup>, A.T.Kalbayeva<sup>1</sup>, O.S.Balabekov<sup>2</sup>, S.D.Kurakbayeva<sup>1</sup>, A.Zh.Usenova<sup>1</sup>

<sup>1</sup>South Kazakhstan state university named after M.O. Auezov Shymkent, Kazakhstan;

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

## CONCENTRATION OSCILLATIONS AND MOVING FRONTS IN THE CHEMICAL REACTORS. NUMERICAL EXPERIMENT.

**Abstract.** The paper deals with the numerical model 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. In numerical experiment 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 numerical 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, transition regimes, autocatalytic multi-stage reaction, the numerical research.

УДК 536.248.2

Л.М.Мусабекова<sup>1</sup>, А.Т.Калбаева<sup>1</sup>, О.С.Балабеков<sup>2</sup>, С.Д.Куракбаева<sup>1</sup>, А.Ж. Усенова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Южно-Казахстанский государственный университет им.М.Ауэзова, Шымкент, Казахстан;

<sup>2</sup>Южно-Казахстанский государственный педагогический институт, Шымкент, Казахстан

## КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ ОСЦИЛЛЯЦИИ И ПОДВИЖНЫЕ ФРОНТЫ В ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРАХ. ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

**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. В численном эксперименте 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 значе-

ния 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 кон-центрационных 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, переходные режимы, многостадийные автокаталитические реакции, численные исследования.

### Введение

Исследование абсорбции, сопровождающейся химическими реакциями и подвижными концентрационными фронтами, является весьма актуальным, поскольку такие явления сопровождают многие современные технологические процессы. Известные исследования в данной области пока не дают детального описания, достаточного для создания надежных методик инженерного расчета [1-3].

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. В то же время описание волновых фронтов и колебательных процессов в реакционно-диффузионных системах является не только актуальной научной проблемой, имеющей также большое практическое значение, но и связано с большими математическими трудностями. Поэтому в этих исследованиях велика роль компьютерного эксперимента.

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 рассмотрены численные модели 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.

### 3. Численная модель подвижных фронтов в проточных химических реакторах

Рассмотрим процесс абсорбции с подвижным фронтом, сопровождающейся мгновенной химической реакцией:



В работе [4] была показана математическая модель процесса хемосорбции с учетом влияния неидеальности системы. Были получены расчетные выражения для концентраций активного компонента абсорбента  $B$  и продукта реакции  $E$  в слое жидкости в момент времени, предшествующему образованию подвижного фронта реакции [5]. Были рассчитаны концентрации компонентов на межфазной границе. 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. В этот момент времени на межфазной поверхности достигается максимальная концентрация поверхностно-активного продукта реакции  $E$ . Расчетные выражения концентрации компонентов использованы, как начальные данные для вычисления профилей концентраций компонентов  $A$ ,  $B$  и  $E$  с учетом влияния продукта реакции и неидеальности системы для периода времени абсорбции  $t > t^*$ .

Фронт реакции становится подвижным в момент времени  $t > t^*$ . При условии  $t > t^*$  математическая модель [6] не имеет аналитических решений. Поэтому была разработан

адаптивный модифицированный метод с использованием схемы Кранка-Никольсона, по которой выполнен численный эксперимент [7]. Дополнительно использован метод отдельных прогонок для определения профилей концентрации компонентов  $A$ ,  $B$ ,  $E$ , а также специально модифицированный итерационный метод для контроля профиля концентрации продукта реакции. Рассмотрим применение метода Кранка-Никольсона. На рисунке 1 показана сетка точек на следующих уровнях времени:  $t_l, t_{l+1} = t_l + \Delta t_l$ .

Для решения численной модели составляем разностные схемы с учетом граничных условий для компонентов  $A$  и  $E$ . Обозначим соответственно для концентраций компонентов  $B$  и  $E$ :  $B_i^j = B(x_i, t_j)$ ,  $E_i^j = E(x_i, t_j)$ , тогда используя метод конечных разностей по неявной схеме, получим схему расчета для компонента  $B$ :

$$\begin{aligned} & \tilde{D}_{BB} [aB_{i-1}^{j+1} - (a+b)B_i^{j+1} + bB_{i+1}^{j+1} + aB_{i-1}^j - (a+b)B_i^j + bB_{i+1}^j] + \\ & + \tilde{D}_{BE} [aE_{i-1}^{j+1} - (a+b)E_i^{j+1} + bE_{i+1}^{j+1} + aE_{i-1}^j - (a+b)E_i^j + bE_{i+1}^j] = \left[ \frac{B_i^{j+1} - B_i^j}{\Delta t_j} \right] (a+b)ab \end{aligned} \quad (2)$$

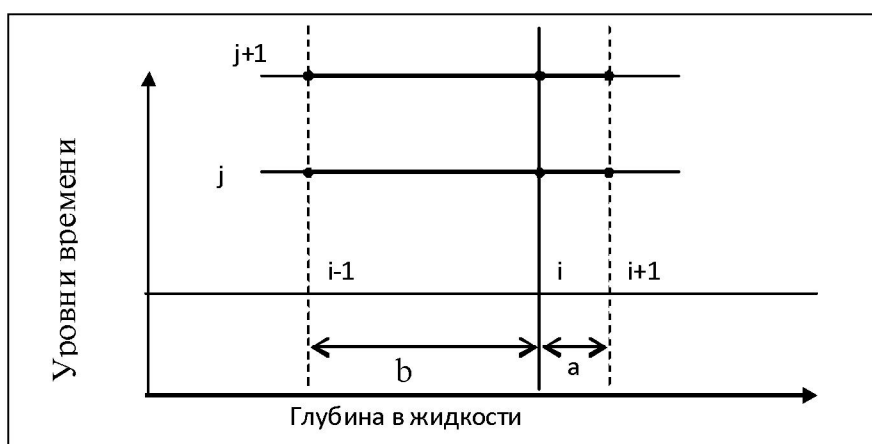


Рисунок 1-Сетка точек

Упростим выражения и получим численную математическую модель вычисления профилей концентраций абсорбента  $B$  для периода времени  $t > t^*$ :

$$\begin{aligned} & \tilde{D}_{BB} \left[ aB_{i-1}^{j+1} - \left( a+b + \frac{\delta}{\tilde{D}_{BB}} \right) B_i^{j+1} + bB_{i+1}^{j+1} \right] + \tilde{D}_{BE} [aE_{i-1}^j - (a+b)E_i^j + bE_{i+1}^j] = \\ & \tilde{D}_{BB} \left[ -bB_{i+1}^j + \left( a+b - \frac{\delta}{\tilde{D}_{BB}} \right) B_i^j - aB_{i-1}^j \right] + \tilde{D}_{BE} [-bE_{i+1}^j + (a+b)E_i^j - aE_{i-1}^j] \end{aligned} \quad (3)$$

Аналогично рассчитаем для компонента  $E$  [8]. Используя метод конечных разностей по неявной схеме, получим разностную схему для компонента  $A$ . Упростим выражение и получим численную математическую модель для расчета профилей концентраций улавливаемого компонента  $A$  для периода  $t > t^*$ :

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{AA} \left[ aA_{i-1}^{j+1} - \left( a+b + \frac{\delta}{\tilde{D}_{AA}} \right) A_i^{j+1} + bA_{i+1}^{j+1} \right] + \tilde{D}_{AE} \left[ aE_{i-1}^j - (a+b)E_i^j + bE_{i+1}^j \right] = \\ \tilde{D}_{AA} \left[ -bA_{i+1}^j + \left( a+b - \frac{\delta}{\tilde{D}_{AA}} \right) A_i^j - aA_{i-1}^j \right] + \tilde{D}_{AE} \left[ -bE_{i+1}^j + (a+b)E_i^j - aE_{i-1}^j \right] \end{aligned} \quad (4)$$

Для продукта реакции  $E$ :

$$\begin{aligned} \tilde{D}_{EA} \left[ aA_{i-1}^{j+1} - (a+b)A_i^{j+1} + bA_{i+1}^{j+1} \right] + \tilde{D}_{EE} \left[ aE_{i-1}^{j+1} + \left( a+b + \frac{\delta}{\tilde{D}_{EE}} \right) E_i^{j+1} - bE_{i+1}^{j+1} \right] = \\ \tilde{D}_{EA} \left[ -bA_{i+1}^j + (a+b)A_i^j - aA_{i-1}^j \right] + \tilde{D}_{EE} \left[ -bE_{i+1}^j + \left( a+b - \frac{\delta}{\tilde{D}_{EE}} \right) E_i^j - aE_{i-1}^j \right] \end{aligned} \quad (5)$$

Для решения этой задачи, соответственно для первой области, в которой рассчитаны профили концентраций компонентов  $A$  и  $E$  и второй области соответственно для компонентов  $B$  и  $E$  был использован метод раздельных прогонок. Для вычисления коэффициентов прогонки использованы граничные условия для первой и второй области в отдельности. Вычисления проведены итерационным методом с точностью  $\varepsilon=0.01$ .

Для расчета профилей концентрации продукта реакции по разработанной модифицированной численной схеме использован метода Ньютона-Рафсона. Программа с численной моделью и расчетные графики разработаны в инженерном пакете *MathCAD14*.

Были проведены расчеты с различными значениями параметра  $w$  [9-11]. На рисунке 2 показаны полученные результаты расчетов при значении параметра  $w=0.03$  для профиля концентрации компонентов  $A$  и  $B$  в разные периоды времени  $T_0-T_6$ , начиная от времени проникновения фронта реакции  $t^*$  с интервалом времени  $\Delta t$ , где ось абсцисс - длина реактора  $L$ .

На рисунке 3 показаны полученные результаты расчетов для профиля концентрации компонента  $E$  в разные периоды времени  $T_0-T_6$  начиная от времени проникновения фронта реакции  $t^*$  с интервалом времени  $\Delta t$  для значения концентрации компонента  $B=8$  моль/м<sup>3</sup> с учетом значений параметра межмолекулярного взаимодействия  $w=0.03$ .

Было установлено, что с возрастанием параметра  $w$  концентрация продукта реакции на фронте реакции возрастает, а время формирования фронта реакции  $t^*$  уменьшается, т.е. то время, при котором фронт реакции начинает двигаться вглубь жидкости. Установлено, что с возрастанием концентрации компонента  $B$  и параметра  $w$  выход продукта реакции возрастает. С возрастанием концентрации компонента  $B$  время формирования фронта реакции  $t^*$  возрастает, а с возрастанием параметра  $w$  наоборот уменьшается.

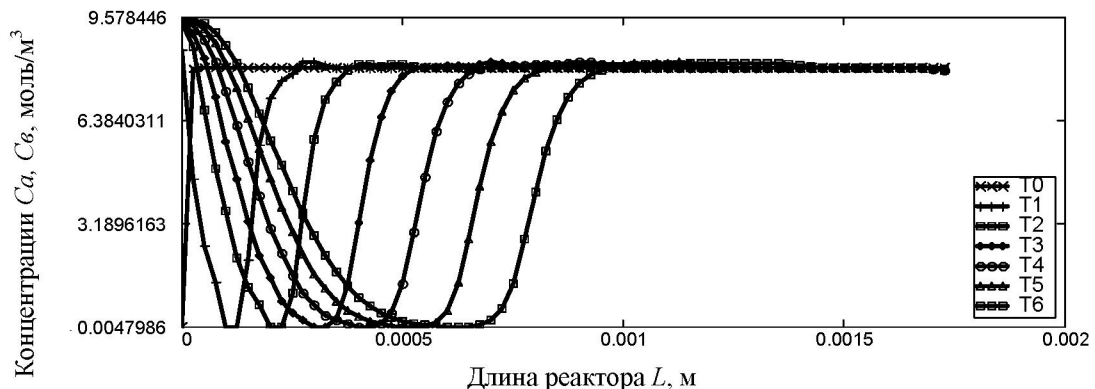


Рисунок 2- Профили концентрации компонентов  $A$  и  $B$  по длине реактора  $L$  в различные моменты времени  $T$  при  $w=0.03$ .  $C_a, C_b$  - концентрации компонентов  $A$  и  $B$  в моль/м<sup>3</sup>

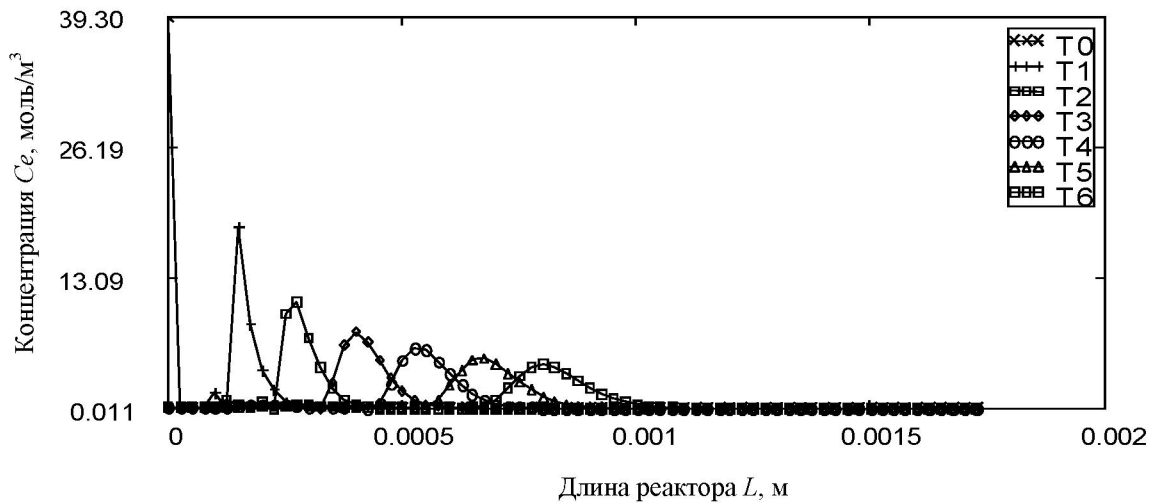


Рисунок 3- Профили концентрации компонента E по длине реактора L в различные моменты времени T при  $w=0.03$  для значения концентрации компонента B=8 моль/м<sup>3</sup>, C<sub>e</sub> - концентрация компонента E в моль/м<sup>3</sup>

## 2. Моделирование двухкаскадного автокаталитического реактора с рециклом в системе колебательных реакций Белоусова-Жаботинского

Реакция Белоусова - Жаботинского моделирует многие нелинейные явления в химической кинетике. Поскольку основные особенности поведения системы можно моделировать с помощью упрощенной схемы по механизму Нойеса - Филда, используем ее для математического моделирования двухкаскадного автокаталитического реактора с рециклом, в котором осуществляется реакция Белоусова-Жаботинского [12-15]. Обозначим, компоненты реакции следующим образом:



Тогда изменение во времени концентраций компонентов в замкнутой системе можно описать с помощью уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= k_1AY - k_2XY + k_3AX - 2k_4X^2, \\ \frac{dY}{dt} &= -k_1AY - k_2XY + hk_5BZ, \\ \frac{dZ}{dt} &= 2k_3AX - k_5BZ, \end{aligned} \tag{6}$$

В приведенных уравнениях баланса не учитываются входные и выходные потоки. Тем самым предполагается, что в реактор проточного типа с перемешиванием подается только компонента у (Br<sup>-</sup>), а компоненты реакции x (HBrO<sub>2</sub>) и z (Ce<sup>4+</sup>) представляют собой промежуточные продукты, возникающие в ходе реакции.

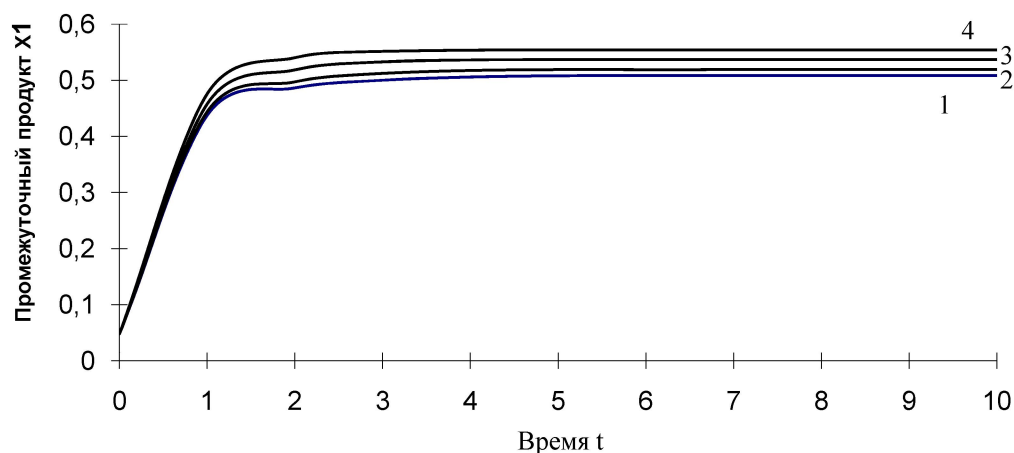
Рассмотрим каскад из двух одинаковых реакторов [16]. Два реактора с взаимным массообменном можно рассматривать также в случае потока, текущего лишь в одном направлении, из реактора 1 в реактор 2. Тогда уравнения баланса массы для промежуточных продуктов x, y и z можно представить в виде:

$$\begin{aligned} \frac{dX_1}{dt} &= k_1A_1Y_1 - k_2X_1Y_1 + k_3A_1X_1 - 2k_4X_1^2, \\ \frac{dY_1}{dt} &= -k_1A_1Y_1 - k_2X_1Y_1 + hk_5BZ_1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dZ_1}{dt} &= 2k_3A_1X_1 - k_5BZ_1, \\ \frac{dX_2}{dt} &= k_1A_2Y_2 - k_2X_2Y_2 + k_3A_2X_2 - 2k_4X_2^2 + D_{12}(X_1 - X_2), \\ \frac{dY_2}{dt} &= -k_1A_2Y_2 - k_2X_2Y_2 + hk_5BZ_2 + D_{22}(Y_1 - Y_2), \\ \frac{dZ_2}{dt} &= 2k_3A_2X_2 - k_5BZ_2 + D_{32}(Z_1 - Z_2), \end{aligned} \quad (7)$$

Поскольку аналитическое решение полученных систем невозможно, было проведено численное исследование [17-20], некоторые результаты которого для реактора с рециклом показаны на рисунках 4-6.

Численный эксперимент был проведен в предположении, что компоненты а и в находилась в большом избытке и что их концентрации не зависят от времени, а константы скоростей реакций равны следующим значениям:  $k_1=2$ ,  $k_2=3$ ,  $k_3=1$ ,  $k_4=1$ ,  $k_5=1$ . Значения параметров следующие: константы скоростей реакций равны следующим значениям:  $a_1=1$ ;  $a_2=1,2$ ;  $d_{11}=0,1$ ;  $d_{21}=0,1$ ;  $d_{31}=0,1$ ;  $d_{12}=0,05$ ;  $d_{22}=0,05$ ;  $d_{32}=0,05$ . В качестве начальных условий можно взять при  $t=0$   $y_1=y_2=0,1$ ;  $x_1=x_2=z_1=z_2=0$



а)

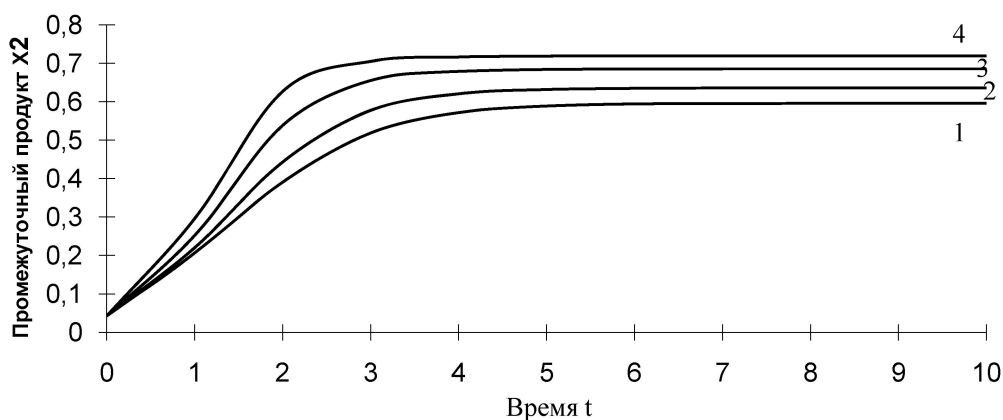
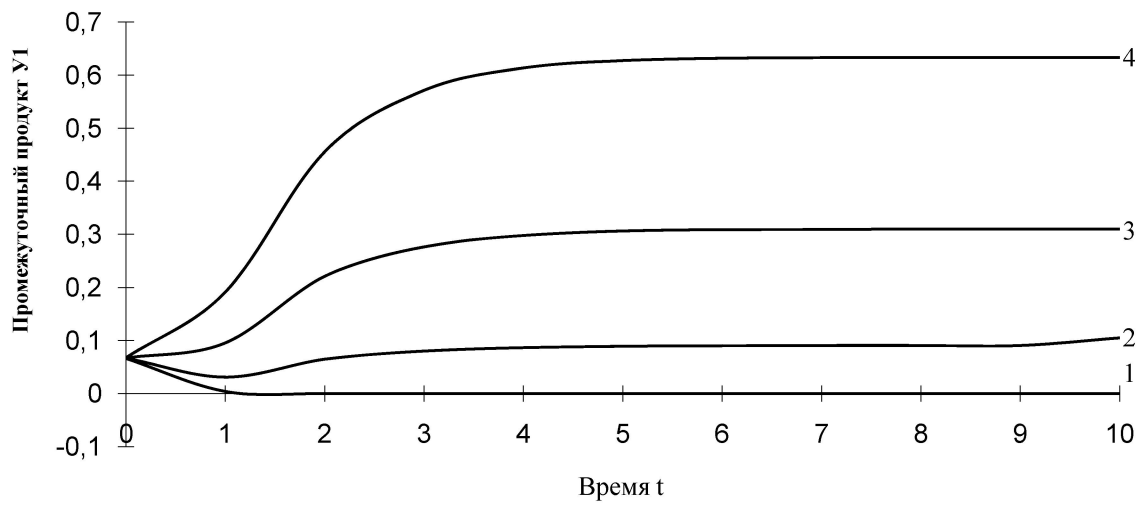
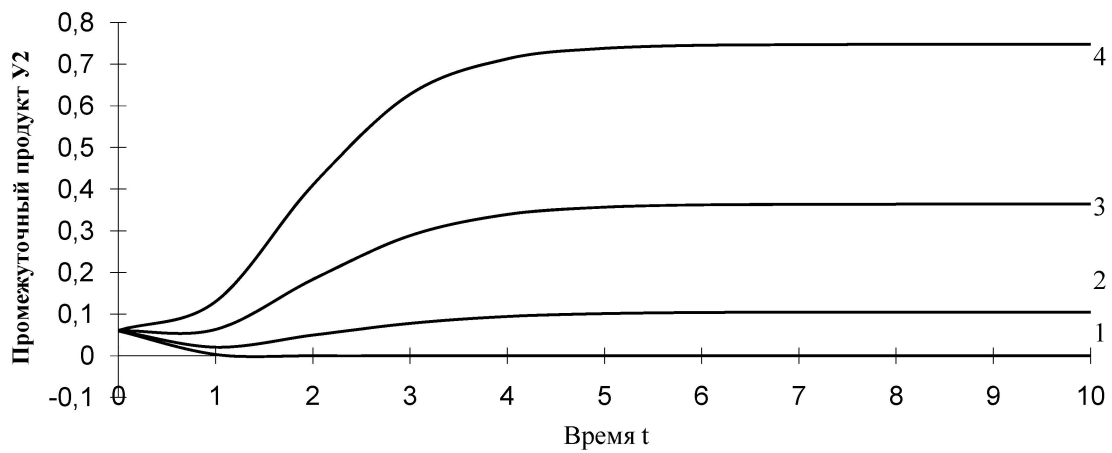
б) 1 -  $h=0$ ; 2 -  $h=0,3$ ; 3 -  $h=1$ ; 4 -  $h=2$ 

Рисунок 4 - Изменение концентраций промежуточных продуктов в реакторе проточного типа с перемешиванием в случае рецикла  $k_1=2$ ,  $k_2=3$  (система Белоусова-Жаботинского). а), б) – промежуточные комплексы  $X_1$ ,  $X_2$  соответственно

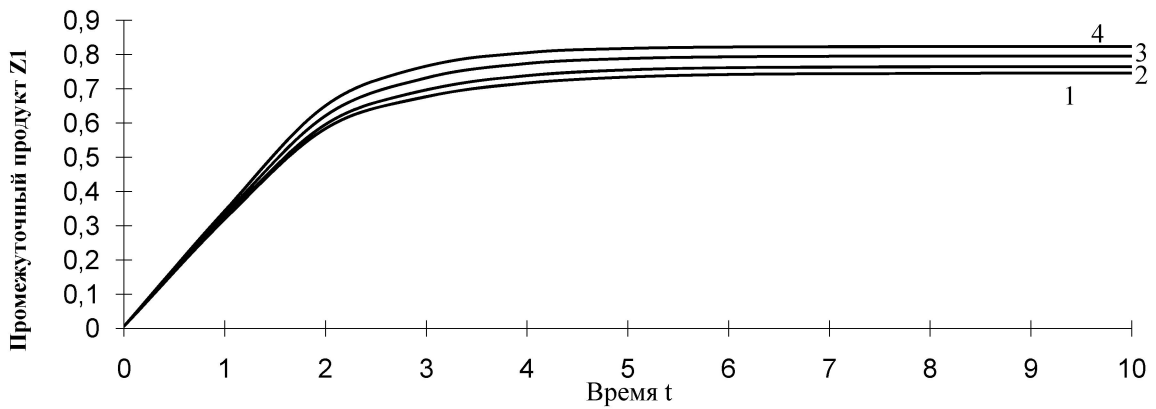


в)

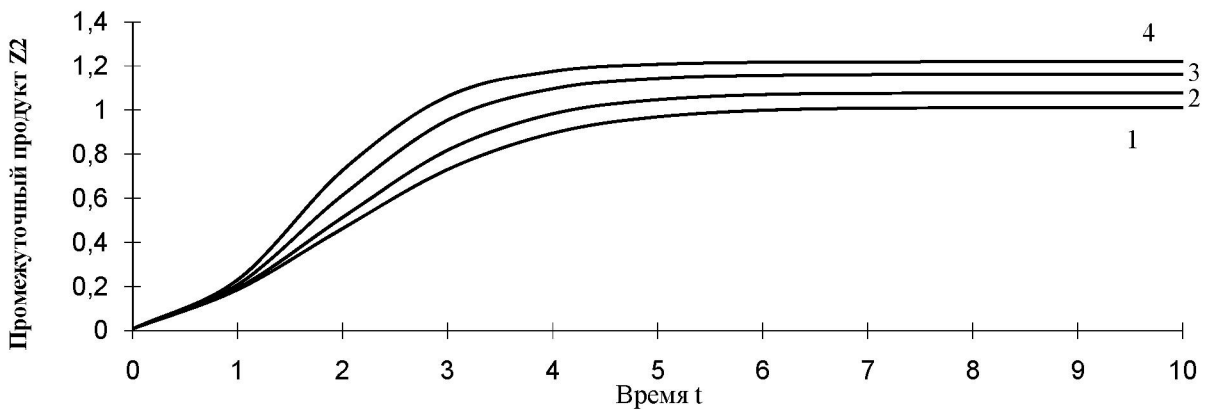


г) 1 -  $h=0$ ; 2- $h=0,3$ ; 3 -  $h=1$ ; 4 -  $h=2$

Рисунок 5 - Изменение концентраций промежуточных продуктов в реакторе проточного типа с перемешиванием в случае рецикла  $k_1=2$ ,  $k_2=3$  (система Белоусова-Жаботинского). в), г) – промежуточные комплексы  $Y_1$ ,  $Y_2$  соответственно



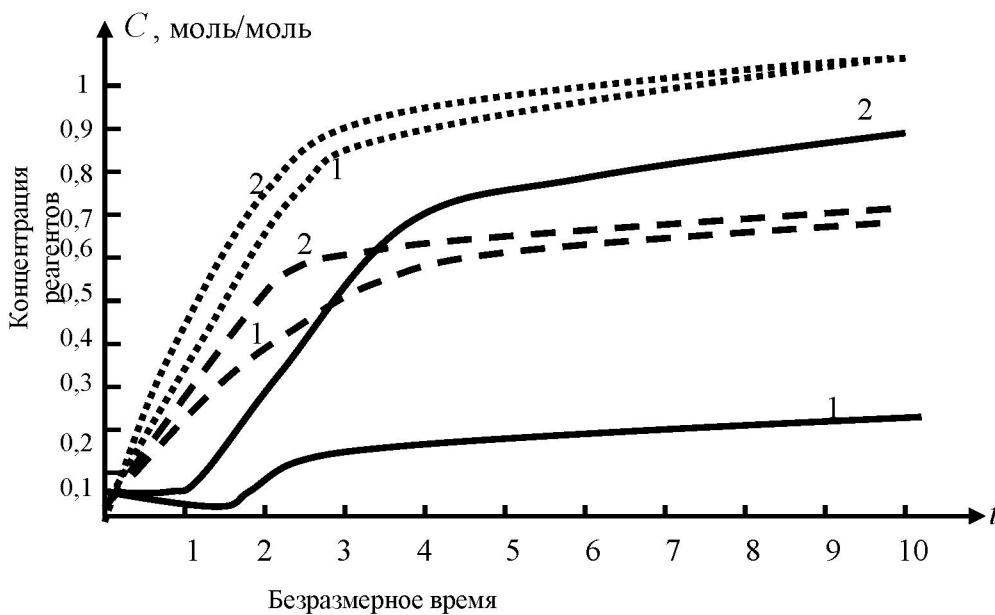
д)



е) 1 -  $h=0$ ; 2- $h=0,3$ ; 3 -  $h=1$ ; 4 -  $h=2$

Рисунок 6 - Изменение концентраций промежуточных продуктов в реакторе проточного типа с перемешиванием в случае рецикла  $k_1=2, k_2=3$ (система Белоусова- Жаботинского). д), е) – промежуточные комплексы  $Z_1, Z_2$  соответственно

На рисунке 7 представлены обобщенные графики численного эксперимента на начальных периодах стабилизации в двухкаскадном реакторе для системы реакций Белоусова-Жаботинского.



1-  $h = 0$ ; 2 -  $h=2$ .

— комплекс  $Y_1$ ; - - комплекс  $X_1$ ; ..... - продукт реакции  $Z_1$

Рисунок 7- Изменение концентраций реагентов на выходе каскада реакторов с рециклом для системы реакций Белоусова-Жаботинского

### Заключение

Как видно из результатов расчетов, неидеальность системы влияет на характеристики процесса, поэтому неидеальность необходимо учитывать при расчете абсорбции, сопровождающейся быстрой химической реакцией.

Анализ данных численного эксперимента показал, что для системы реакций Белоусова-Жаботинского влияние рецикла проявляется в установлении стабильных характеристик реактора (т.е. концентраций основных продуктов реакции) за более короткое время. Наибольший интерес представляет временная зависимость компонента У при различных соотношениях констант реакций  $k_1, k_2$  и  $k_3$  а также при различных стехиометрических соотношениях  $h$ . Видно, что с



увеличением  $k_1$  и  $k_2$  концентрация компонента У в системе тем не менее возрастает и стабилизируется на временах, зависящих от стехиометрического соотношения последней стадии реакции. При отсутствии последней стадии ( $h=0$ ) происходит быстрое истощение компонента У в системе. Проведенный численный эксперимент позволяет рекомендовать эту модель для расчета процессов сложного химического взаимодействия в многокаскадных автокаталитических реакторах.

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] Dil'man V.-V., Sokolov V.-V., Kulov N.-N., Yudina L.-A. (2012) Experience in Developing and Operating a High-Intensity Absorber for Process Gas Purification from Carbon Dioxide, Theoretical Foundations of Chemical Engineering, 46:1-7. DOI: 10.1134/S0040579512010034
- [2] Puschke, J., Preisig, H.-A. (2011) Dynamic Characteristics of Counter-Current Flow Processes, Chemical Engineering Transactions, 24: 247-252. DOI:10.3303/CET1332212
- [3] Preisig, H.-A., (2013) Systematic Modelling of Flow and Pressure Distribution, Chemical Engineering Transactions, 32: 1267-1272. DOI: 10.3303/CET1124042
- [4] Brenner A.M., Musabekova L.M. (2006) 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. Vol.53. 2006.-P.181-191. DOI :10.2495/HT060181
- [5] Musabekova, L.M., Brenner, A.M. (2007) Methods for calculating the process of chemisorption in systems with a moving front of an instantaneous irreversible reaction. Heat Transfer Research. Vol.38. P.135-142. DOI: 10.1615/HeatTransRes.v38.i2.40.
- [6] Мусабекова Л.М. (2009) Моделирование реакционно-диффузионных систем с подвижным фронтом реакции с учетом межмолекулярного взаимодействия. Поиск [Poisk].2:216-222
- [7] Мусабекова Л.М. (2010) Компьютерное моделирование химических аппаратов с подвижными фронтами раздела кинетических зон. Восточно-Европейский журнал передовых технологий [Vostochno-Evropejskij zhurnal peredovyh tehnologij]2/10(44):49-52.
- [8] Мусабекова Л.М. (2011) Методика расчета реакционно-диффузионных процессов с учетом неидеальности системы. Международная научно-техническая конференция НЭРПО-2011, МГОУ, Москва, С. 294-299.
- [9] 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.
- [10] Musabekova L. M., Dausheeva N.N., Zhumataev N.S., Jamankarayeva M.A.. (2014) Methods for evaluating the influence of large-scale effect on heat and mass efficiency of chemical apparatuses. 17th Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction. Chemical engineering transactions, Prague, Czech Republic. vol. 39, P.1549-1554. DOI: 10.3303/CET1439259.
- [11] 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, Chemical engineering transactions, Prague, Czech Republic. vol. 52, P.217-222. DOI: 10.3303/CET1652037.
- [12] Field R.J., Noyes R.M. (1974). Oscillations in Chemical Systems, Part 5. Quantitative Explanation of Band Migration in the Belousov - Zhabotinskii Reaction. J. Am. Chem. Soc. Vol 96.- 1986 p.
- [13] Smoes M.L. (1980) Chemical Waves in the Oscillatory Zhabotinskii System. A Transition from Temporal to Spatio-Temporal Organisation, in Haken H., Ed., Dynamics of Synergetic Systems, Springer, Verlag, Berlin. 80 p.
- [14] Reusser E.J., Field R.J. (1979) The Transition from Phase Waves to Trigger Waves in a Model of the Zhabotinskii Reaction. J. Am. Chem. Soc. Vol. 101. 1063 p.
- [15] Tyson J.J., Fife P.C. (1980). Target Patterns in a Realistic Model of the Belousov-Zhabotinskii Reaction. J. Chem. Phys. Vol. 73. 2224 p.
- [16] Тауасаров Б.Р., Калбаева А.Т., Бренер А.М. (2003) Моделирование двухкаскадного автокаталитического реактора с рециклом. Поиск [Poisk].4:175-179
- [17] 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», Шымкент. С.81-85.
- [18] 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.

[19] 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.

[20] 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.

## REFERENCES

[1] Dil'man V.-V., Sokolov V.-V., Kulov N.-N., Yudina L.-A. (2012) Experience in Developing and Operating a High-Intensity Absorber for Process Gas Purification from Carbon Dioxide, Theoretical Foundations of Chemical Engineering, 46:1–7. DOI: 10.1134/S0040579512010034

[2] Puschke, J., Preisig, H.-A. (2011) Dynamic Characteristics of Counter-Current Flow Processes, Chemical Engineering Transactions, 24: 247-252. DOI:10.3303/CET1332212

[3] Preisig, H.-A., (2013) Systematic Modelling of Flow and Pressure Distribution, Chemical Engineering Transactions, 32: 1267-1272. DOI: 10.3303/CET1124042

[4] Brener A.M., Musabekova L.M. (2006) 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. Vol.53. 2006.-P.181-191. DOI :10.2495/HT060181

[5] Musabekova, L.M., Brener, A.M. (2007) Methods for calculating the process of chemisorption in systems with a moving front of an instantaneous irreversible reaction. Heat Transfer Research. Vol.38. P.135-142. DOI: 10.1615/HeatTransRes.v38.i2.40.

[6] Musabekova L.M. (2009) Modeling of reaction-diffusion systems with a moving reaction front in view of the intermolecular interaction. Search [Poisk].2:216-222 (In Russian)

[7] Musabekova L.M. (2010) Computer modeling of chemical apparatus with movable section fronts kinetic zones. Journal of Eastern European advanced technology [Vostochno-Evropeskij zhurnal peredovyh tehnologij]2/10(44):49-52. (In Russian)

[8] 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)

[9] 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.

[10] Musabekova L. M., Dausheeva N.N., Zhumataev N.S., Jamankarayeva M.A. (2014) Methods for evaluating the influence of large-scale effect on heat and mass efficiency of chemical apparatuses. 17th Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction. Chemical engineering transactions, Prague, Czech Republic. vol. 39, P.1549-1554. DOI: 10.3303/CET1439259.

[11] 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, Chemical engineering transactions, Prague, Czech Republic. vol. 52, P.217-222. DOI: 10.3303/CET1652037.

[12] Field R.J., Noyes R.M. (1974). Oscillations in Chemical Systems, Part 5. Quantitative Explanation of Band Migration in the Belousov - Zhabotinskii Reaction. J. Am. Chem. Soc. Vol 96.- 1986 p.

[13] Smoes M.L. (1980) Chemical Waves in the Oscillatory Zhabotinskii System. A Transition from Temporal to Spatio-Temporal Organisation, in Haken H., Ed., Dynamics of Synergetic Systems, Springer, Verlag, Berlin. 80 p.

[14] Reusser E.J., Field R.J. (1979) The Transition from Phase Waves to Trigger Waves in a Model of the Zhabotinskii Reaction. J. Am. Chem. Soc. Vol. 101. 1063 p.

[15] Tyson J.J., Fife P.C. (1980). Target Patterns in a Realistic Model of the Belousov-Zhabotinskii Reaction. J. Chem. Phys. Vol. 73. 2224 p.

[16] Tauasarov B.R., Kalbayeva A.T., Brener A.M. (2003) Modeling of a two-stage reactor recycle autocatalytic. Search [Poisk].4:175-179 (In Russian)

[17] Kalbayeva A.T., Tauasarov B.R. (2004) Numerical study of reaction-diffusion systems in the flow tube reactor. Proceedings of the International scientific conference "Science and education on the threshold of the twenty-first century", Shymkent. P.81-85. (In Russian)

[18] Kalbayeva 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)

[19] 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.

[20] 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.

Л.М. Мусабекова<sup>1</sup>, А.Т.Қалбаева<sup>1</sup>, О.С. Балабеков<sup>2</sup>, С.Ж. Құрақбаева<sup>1</sup>, А.Ж. Усенова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті, Шымкент қ., Қазақстан,

<sup>2</sup>Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік педагогикалық институты, Шымкент қ., Қазақстан

### ХИМИЯЛЫҚ РЕАКТОРЛАРДАҒЫ КОНЦЕНТРАЦИЯЛЫҚ ОСЦИЛЛЯЦИЯЛАР ЖӘНЕ ЖЫЛЖЫМАЛЫ ФРОНТТАР. САНДЫҚ ЭКСПЕРИМЕНТ.

**Аннотация.** Мақалада екі жағдай үшін химиялық реакторлардағы кинетикалық режимдерді моделдеу қарастырылады: қозғалмалы фронтпен абсорбция процесінің лездік химиялық реакциясымен алып жүретін және көпжағдайлы автокаталитикалық реакциялармен ағыстың реакторлардағы өтпелі режимдер.

Бірінші жағдайда, мақалада газдың абсорбция мәселесі қарастырылады, ол сұйықтың қабатында алынған өнімнің реакциясына әсерін есептей отырып, реакцияның қозғалатын фронтының жылдамдығына лездік қайтармайтын реакцияны алып жүреді. Сандық эксперименттер келесідей факторлардың әсері зерттелді, газдың фаза диффузиясының кедергісі, газдың фазадағы абсорбцияланған компоненттің концентрациясы, сұйықтығы белсенді компоненттің концентрациясы, сондай-ақ диффузияның тікелей және айқасынан коэффициенттері. Алынған өсімнің реакциясының беттік концентрациясы, реакция фронты сұйықтың түбіне қарай қозғалған мезетте максималды мәнге ие болады. Алынған нәтижелерінің инженерлік химиялық ғылымға пайдасы тиері сөзсіз.

Екінші жағдайда концентратты толқынды фронттар жылдамдығын есептеу үшін, ауыспалы тербелмелі режимде идеалды емес жүйе үшін жуық қатынас алынды. Идеалды еместік ауыспалы режимде толқынды фронттың жылдамдығының өсуіне алып келгендігі көрсетілді. Зерттеу нәтижелері химиялық айналмалы процестердің интенсивтілігін инженерлік есептеу әдістемесінде және изотермиялық емес реактордың тиімді жұмыс көлемінде және түрлі химиялық аппараттарды жобалауды қолданылуы мүмкін.

**Түйін сөздер:** химиялық реакторларды модельдеу, жылжымалы фронт, лездік химиялық реакция, рецикл, өтпелі режимдер, көпжағдайлы автокаталитикалық реакциялар, сандық зерттеу.

#### Сведения об авторах:

Мусабекова Лейла Мұхамеджановна – 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;

Усенова Айсәуле Жолдасовна – к.п.н., старший преподаватель Южно-Казахстанского государственного университета им. М.Ауэзова, Республика Казахстан г. Шымкент.