

УДК 513.83

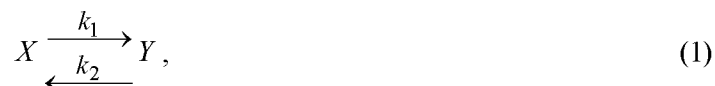
Л. М. МУСАБЕКОВА

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ БЕГУЩИХ ВОЛНОВЫХ ФРОНТОВ В ХИМИЧЕСКИХ РЕАКТОРАХ

(Представлена академиком НАН РК О. С. Балабековым)

Рассмотрена численная модель тепло- и массопереноса в проточном химическом реакторе с обратимой реакцией первого порядка и установлены условия, при которых теоретический анализ предсказывает формирование в такой системе автоволновых режимов переноса тепла и массы.

Рассмотрим схему реакции



где k_1 и k_2 константы скоростей прямой и обратной стадий реакции.

Будем считать, что на вход в реактор поступает только компонент X . Рассмотрим систему уравнений массопереноса и теплообмена:

$$\frac{\partial C_X}{\partial t} = D_X \frac{\partial^2 C_X}{\partial z^2} + \frac{j}{S} \frac{\partial C_X}{\partial z} - k_1 C_X + k_2 C_Y, \quad (2)$$

$$\frac{\partial C_Y}{\partial t} = D_Y \frac{\partial^2 C_Y}{\partial z^2} + \frac{j}{S} \frac{\partial C_Y}{\partial z} + k_1 C_X - k_2 C_Y, \quad (3)$$

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

где C_X, C_Y – концентрации компонентов X и Y ; C_{X0} – входная концентрация X ; D_X, D_Y – коэффициенты диффузии реагентов; t, z – временная и пространственная координаты; j – суммарный поток реагентов через реактор; T – температура; $\bar{\chi}$ – усредненный коэффициент температуропроводности; $\bar{\rho}$ – средняя плотность смеси реагентов; \bar{c}_p – средняя теплоемкость; ΔH – суммарное тепло химической реакции; S – поперечное сечение реактора.

Выражения для констант скоростей реакций описывается законом Аррениуса:

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

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

где k_{10}, k_{20} – стандартные значения констант скоростей; E_1, E_2 – энергии активации; k_B – константа Больцмана.

Тепловой эффект химической реакции описывается формулой

$$\Delta H = H_1 k_1 C_X + H_2 k_2 C_Y. \quad (7)$$

Для подвижной системы координат $t, \eta = z + \frac{j}{S}t$ получим:

$$\frac{\partial C_X}{\partial t} = D_X \frac{\partial^2 C_X}{\partial \eta^2} - k_1 C_X + k_2 C_Y, \quad (9)$$

$$\frac{\partial C_Y}{\partial t} = D_Y \frac{\partial^2 C_Y}{\partial \eta^2} + k_1 C_X - k_2 C_Y, \quad (10)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \bar{\chi} \frac{\partial^2 T}{\partial \eta^2} + \frac{H_1 k_1 C_X + H_2 k_2 C_Y}{\bar{\rho} c_p} \quad (11)$$

Рассмотрим численное решение данной системы уравнений.

1. Определяем конечно-разностные выражения для C_X

$$\frac{\partial C_X}{\partial t} = D_X \frac{\partial^2 C_X}{\partial \eta^2} - k_1 C_X + k_2 C_Y \quad (12)$$

Введем обозначения:

$$U = C_x, W = C_y \quad (13)$$

Получим для $\frac{\partial C_X}{\partial t}$:

$$\frac{U_i^{j+1} - U_i^j}{\Delta t} \quad (14)$$

Для: $\frac{\partial^2 C_X}{\partial \eta^2}$:

$$U_i^{j+1} = U'_{i+1} - U'_i = \frac{U_{i+1}^{j+1} - U_i^{j+1}}{\eta^2} - \frac{U_i^{j+1} - U_{i-1}^{j+1}}{\eta^2} \quad (15)$$

Далее:

$$\frac{U_i^{j+1} - U_i^j}{\Delta t} = \frac{Dx}{\eta^2} (U_{i+1}^{j+1} - U_i^{j+1} - U_i^{j+1} + U_{i-1}^{j+1}) - k_1 U_i^{j+1} + k_2 W_i^{j+1} \quad (16)$$

Сгруппируем к виду:

$$-\Delta t Dx U_{i+1}^{j+1} + (\eta^2 + 2\Delta t Dx + \eta^2 k_1 \Delta t) U_i^{j+1} - \Delta t Dx U_{i-1}^{j+1} = \eta^2 (U_i^j + k_2 \Delta t W_i^{j+1}) \quad (17)$$

Отсюда легко определяются коэффициенты прогонки:

$$A = -\Delta t Dx, B = (\eta^2 + 2\Delta t Dx + \eta^2 k_1 \Delta t), C = -\Delta t Dx, D_j = \eta^2 (U_i^j + k_2 \Delta t W_i^{j+1}) \quad (18)$$

Из условия на левой границе для $C_X = C_A$, а также, учитывая выражение:

$$U_0 = E_0 U_1 + F_0 \quad [2], \quad (19)$$

определяем коэффициенты E_0, F_0 . Поскольку U_1 неизвестно, примем: $U_1 = U_0$, тогда $E_0 = 1, F_0 = 0$.

Для нахождения значений E, F на следующих уровнях времени используем выражения [2]:

$$E_j = \frac{A_j}{B_j - C_j E_{j-1}}, F_j = \frac{D_j + C_j F_{j-1}}{B_j - C_j E_{j-1}}, \quad (20)$$

где коэффициенты A, B, C, D определены выше.

Из условия на правой границе $U_M = 0$ и с учетом выражения [2]:

$$U_{M-1} = E_{M-1} U_M + F_{M-1} \quad (21)$$

определяем остальные концентрации компонента А.

2. Определяем конечно-разностные выражения для C_Y :

$$\frac{W_i^{j+1} - W_i^j}{\Delta t} = \frac{Dx}{\eta^2} (W_{i+1}^{j+1} - W_i^{j+1} - W_i^{j+1} + W_{i-1}^{j+1}) + k_1 U_i^{j+1} - k_2 W_i^{j+1}, \quad (22)$$

$$-\Delta t Dx W_{i+1}^{j+1} + (\eta^2 + 2\Delta t Dx + \eta^2 k_2 \Delta t) W_i^{j+1} - \Delta t Dx W_{i-1}^{j+1} = \eta^2 (W_i^j + k_1 \Delta t U_i^{j+1}) \quad (23)$$

Отсюда легко находятся коэффициенты прогонки:

$$A = -\Delta t D_x, \quad B = (\eta^2 + 2\Delta t D_x + \eta^2 k_2 \Delta t), \quad C = -\Delta t D_x, \quad D_j = \eta^2 (W_i^j + k_1 \Delta t U_i^{j+1}). \quad (24)$$

Из условия на левой границе для $C_y = 0$, а также с учетом выражения [2]:

$$W_0 = E_0 W_1 + F_0 \quad (25)$$

определяем коэффициенты E_0, F_0 :

$$E_0 = 0, \quad F_0 = 0.$$

Для нахождения значений E, F на следующих уровнях времени используем выражения [2]:

$$E_j = \frac{A_j}{B_j - C_j E_{j-1}}, \quad F_j = \frac{D_j + C_j F_{j-1}}{B_j - C_j E_{j-1}}, \quad (26)$$

где коэффициенты A, B, C, D определены выше.

Из условия на правой границе $W_M = C_B$, с учетом выражения [2]:

$$U_{M-1} = E_{M-1} U_M + F_{M-1} \quad (27)$$

определяем остальные концентрации компонента В.

3. Определяем конечно-разностные выражения для температуры Т:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \bar{\chi} \frac{\partial^2 T}{\partial \eta^2} + \frac{H_1 k_1 C_X + H_2 k_2 C_Y}{\bar{\rho} \bar{c}_p}, \quad (28)$$

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\Delta t} = \frac{\chi}{\eta^2} (T_{i+1}^{j+1} - T_i^{j+1} - T_i^{j+1} + T_{i-1}^{j+1}) + \frac{H_1 k_1 U_i^{j+1} + H_2 k_2 W_i^{j+1}}{\rho C_p}, \quad (29)$$

$$\rho C_p \eta^2 T_i^{j+1} - \rho C_p \eta^2 T_i^j = \rho C_p \Delta t \chi (T_{i+1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i-1}^{j+1}) + \Delta t \eta^2 H_1 k_1 U_i^{j+1} + \Delta t \eta^2 H_2 k_2 W_i^{j+1}, \quad (30)$$

$$\rho C_p \eta^2 T_i^{j+1} - \rho C_p \Delta t \chi (T_{i+1}^{j+1} - 2T_i^{j+1} + T_{i-1}^{j+1}) = \rho C_p \eta^2 T_i^j + \Delta t \eta^2 H_1 k_1 U_i^{j+1} + \Delta t \eta^2 H_2 k_2 W_i^{j+1}. \quad (31)$$

Сгруппируем к виду

$$-\rho C_p \Delta t \chi T_{i+1}^{j+1} + \rho C_p (\eta^2 + 2\Delta t \chi) T_i^{j+1} - \rho C_p \Delta t \chi T_{i-1}^{j+1} = \eta^2 (\rho C_p T_i^j + \Delta t H_1 k_1 U_i^{j+1} + \Delta t H_2 k_2 W_i^{j+1}). \quad (32)$$

Отсюда легко определяются коэффициенты прогонки:

$$A = -\rho C_p \Delta t \chi, \quad B = \rho C_p (\eta^2 + 2\Delta t \chi), \quad C = A, \quad D = \eta^2 (\rho C_p T_i^j + \Delta t H_1 k_1 U_i^{j+1} + \Delta t H_2 k_2 W_i^{j+1}). \quad (33)$$

Из условия на левой границе для $T_0 = T_{нач}$, а также с учетом выражения

$$T_0 = E_0 T_1 + F_0 \quad (34)$$

определяем коэффициенты E_0, F_0 , принимая $T_0 = T_1$:

$$E_0 = 1, \quad F_0 = 0. \quad (35)$$

Для нахождения значений E, F на следующих уровнях времени используем выражения (Рочч):

$$E_j = \frac{A_j}{B_j - C_j E_{j-1}}, \quad F_j = \frac{D_j + C_j F_{j-1}}{B_j - C_j E_{j-1}}, \quad (36)$$

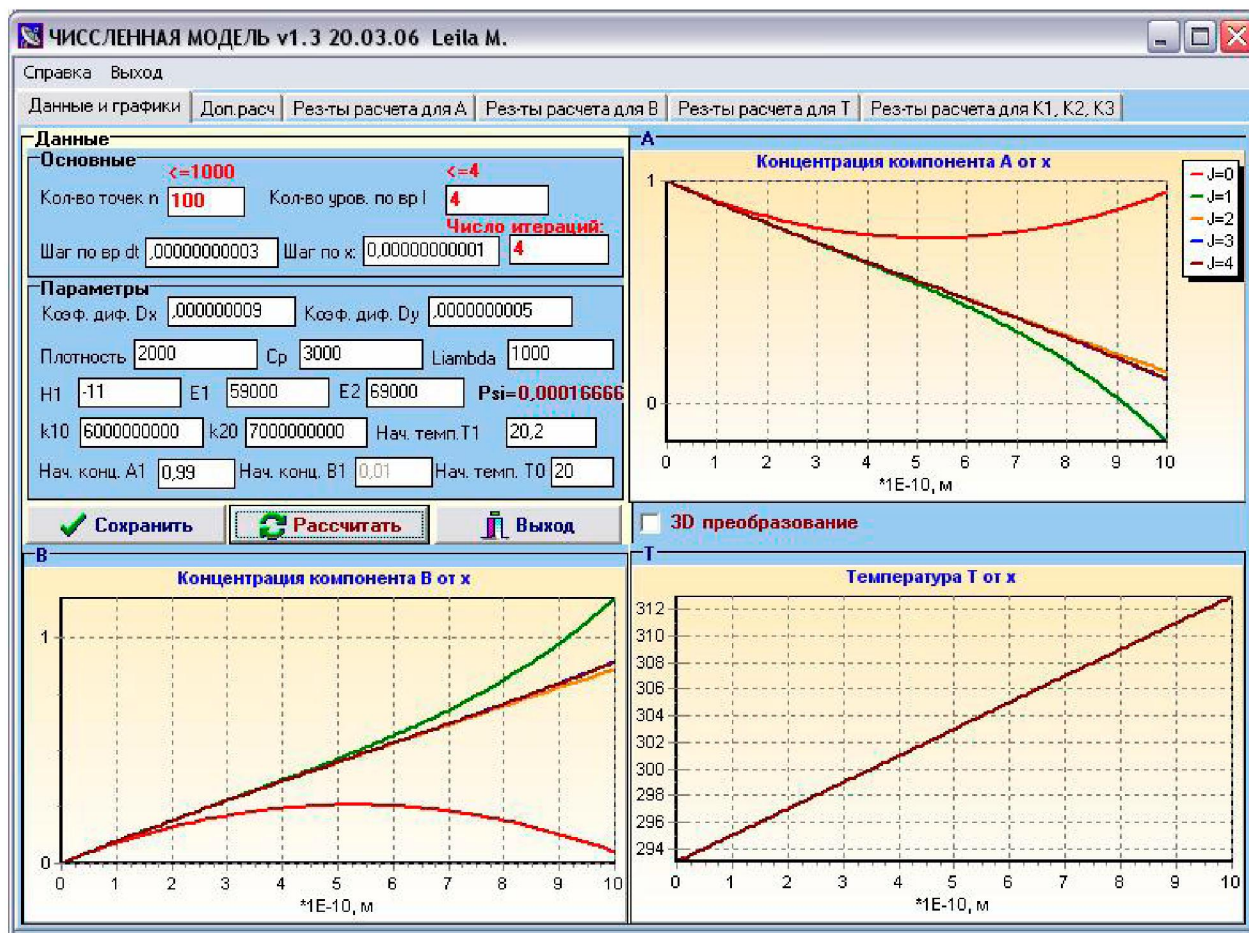
где коэффициенты A, B, C, D определены выше.

Из условия на правой границе $T_M = T_{кон}$ и с учетом выражения

$$T_{M-1} = E_{M-1} T_M + F_{M-1} \quad (37)$$

определяем остальные температуры процесса.

На рисунке представлены результаты численной модели для системы уравнений (9)–(11).



Результаты численной модели

Таким образом, существование устойчивых волновых образований типа бегущих волн и фронтов в неизотермических реакторах обусловлено сложным комплексом как диффузионных, так и тепловых параметров [3, 4]. Проведенный в данной статье анализ позволил выделить ряд таких параметров, которые можно использовать для определения режимов работы неизотермических трубчатых реакторов и расчета тепло- и массообменных процессов в них.

ЛИТЕРАТУРА

1. Brener 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, WIT Press, 2006. P. 181-190.
2. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М., 1980. 509-513 с.
3. Холоднюк М., Клич А., Кубичек М., Марек М. Методы анализа нелинейных динамических моделей. М.: Мир, 1991. 366 с.
4. Заславский Г.М., Сагдеев Р.З. Введение в нелинейную физику. М.: Наука. 1988. 368 с.

Резюме

Бірінші ретті қайтымды реакциялы ағындық химиялық реакторларда жылу және масса алмасудың сандық моделі қарастырылған және мұндай жүйеде теориялық талдаудың жылу және масса алмасудың автотолқындық режимдерінің құрылуын болжайтын шарттары орнатылған.

Summary

The paper deals with the numerical model of heat and mass transfer in the chemical through-reactor under the condition of a reversible first-order reaction. The conditions for existing the autowave regimes of heat and mass transfer have been predicted.