УДК 661.631

А. С. МУРАТОВ

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ НЕЛОКАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА В ХИМИЧЕСКИХ АППАРАТАХ С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ НЕОДНОРОДНОСТЬЮ ПОТОКОВ

(Представлена академиком НАН РК О. С. Балабековым)

Обоснована структура нелокальных уравнений переноса тепла и массы в химических аппаратах с учетом явлений тепловой и диффузионной релаксации в условиях пространственной неоднородности структуры потоков в аппарате.

Ранее в ряде статей нами были разработаны методы описания процессов переноса тепла и массы в реагирующих физико-химических системах с учетом явлений диффузионной и тепловой релаксации [1–3]. При этом в большинстве случаев предполагалось, что можно ограничиться приближением пространственной однородности структуры потоков в химическом аппарате.

В настоящей статье устанавливается общая структура уравнений тепло- и массопереноса в системах с нелокальными соотношениями между потоками и термодинамическими силами в условиях, приближенных к реальным, т.е. разрабатывается методика пространственного усреднения в случае пространственной неоднородности распределения потоков фаз.

В основе вывода уравнений переноса на базе модельных релаксационных ядер [1] лежат соотношения, связывающие в нелокальной форме потоки и термодинамические движущие силы:

$$J_i = -\sum_{k=1}^{n}\int_0^t dt_1 N_{ik}(R,t-t_1)\nabla\left(\frac{\nu_k(R,t_1)}{T}\right) - \int_0^t dt_1 N_{iT}(R,t-t_1)\frac{\nabla T}{T^2}, \quad (1)$$

$$J_T = -\sum_{k=1}^{n}\int_0^t dt_2 N_{Tk}(R,t-t_2)\nabla\left(\frac{\nu_k}{T}\right) - \int_0^t dt_2 N_{TT}(R,t-t_2)\frac{\nabla T}{T^2}, \quad (2)$$

где N – релаксационные ядра переноса, и суммирование ведется по всем компонентам системы.

Если при переходе к макроскопическому описанию принимается в качестве характерного одно время релаксации, можно использовать аппроксимацию ядра переноса в следующем виде:

$$N(R,t-t_1) = \eta(R,t)\exp(-(t-t_1)/\tau), \quad (3)$$

где $\eta(R,t)$ – некоторая функция координат и времени [2].

После дифференцирования по времени и преобразований получаем

$$\frac{\partial J_m}{\partial t} = \lambda_1 J_m - \int_0^t\left[\eta_m\left(\lambda_1 + \frac{1}{\tau_m}\right)\beta\nabla\nu - \frac{\eta_x}{\tau_x}\nabla\beta\right]\times \exp(\lambda_2 s)dt_1 + \eta_m\beta\nabla\nu, \quad (4)$$

$$\frac{\partial J_h}{\partial t} = \lambda_1 J_h - \int_0^t\left[\eta_h\left(\lambda_1 + \frac{1}{\tau_h}\right)\nabla\beta - \frac{\eta_x}{\tau_x}\beta\nabla\nu\right]\times \exp(\lambda_2 s)dt_1 + \eta_h\nabla\beta. \quad (5)$$

Используя разработанную в [4, 5] технику исключения интегральных членов, получаем следующие выражения для потоков тепла и массы:

$$\frac{\partial^2 J_m}{\partial t^2} = (\lambda_1+\lambda_2)\frac{\partial J_m}{\partial t} - \lambda_1\lambda_2 J_m - \eta_m\beta\nabla\nu\left(\lambda_1+\lambda_2+\frac{1}{\tau_m}\right) + \frac{\eta_x}{\tau_x}\nabla\beta + \eta_m\frac{\partial}{\partial t}(\beta\nabla\nu),$$

$$\frac{\partial^2 J_h}{\partial t^2} = (\lambda_1+\lambda_2)\frac{\partial J_h}{\partial t} - \lambda_1\lambda_2 J_h - \eta_h\nabla\beta\left(\lambda_1+\lambda_2+\frac{1}{\tau_h}\right) + \frac{\eta_x}{\tau_x}\beta\nabla\nu + \eta_h\frac{\partial}{\partial t}(\nabla\beta). \quad (6)$$

Дифференцируя по параметру, находим производные потоков по времени:

$$\tau_1\frac{\partial J_1}{\partial t} + \left(1 - \tau_1\frac{\partial}{\partial t}\ln\eta_1\right)J_1 = \eta_1\nabla\nu, \quad (7)$$

$$\tau_2 \frac{\partial J_2}{\partial t} = \left(1 - \tau_2 \frac{\partial}{\partial t} \ln \eta_2\right) J_2 = \eta_2 \nabla \beta. \quad (8)$$

С помощью последних соотношений исключим из законов сохранения потоки в явном виде. Тогда для переноса массы получаем

$$\frac{\partial^2 \nu}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial t} \nabla J_1 = 0, \quad (9)$$

$$\tau_1 \nabla \frac{\partial J_1}{\partial t} + \Phi_1 \nabla J_1 + J_1 \nabla \Phi_1 = \eta_1 \nabla \nu, \quad (10)$$

где

$$\Phi_1 = 1 - \tau_1 \frac{\partial \ln(\eta_1)}{\partial t}. \quad (11)$$

Отсюда следует выражение для потока

$$J_1 = \left(\nabla\left(\tau_1 \frac{\partial^2 \nu}{\partial t^2} - \Phi_1 \nabla J_1 + \eta_1 \Delta \nu\right) - \nabla \Phi_1 \frac{\partial \nu}{\partial t}\right) \Big/ \Delta \Phi_1. \quad (12)$$

Подставляя значение потока в закон сохранения, получаем уравнения переноса

$$\frac{\partial \nu}{\partial t} + \nabla\left(\nabla\left(\tau_1 \frac{\partial^2 \nu}{\partial t^2} - \Phi_1 \nabla J_1 + \eta_1 \Delta \nu\right) - \right.$$

$$\left. - \nabla \Phi_1 \frac{\partial \nu}{\partial t}\right) \Big/ \Delta \Phi_1 = 0, \quad (13)$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial t} + \nabla\left(\nabla\left(\tau_2 \frac{\partial^2 \beta}{\partial t^2} - \Phi_2 \nabla J_2 + \eta_2 \Delta \beta\right) - \right.$$

$$\left. - \nabla \Phi_2 \frac{\partial \beta}{\partial t}\right) \Big/ \Delta \Phi_2 = 0, \quad (14)$$

где

$$\Phi_2 = 1 - \tau_2 \frac{\partial \ln(\eta_2)}{\partial t}. \quad (15)$$

Данные уравнения упрощаются для изотропной среды, когда

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial R} = 0. \quad (16)$$

В этом случае получаем уравнения переноса тепла и массы гиперболического типа с конечной скоростью распространения возмущения:

$$\tau_1 \frac{\partial^2 \nu}{\partial t^2} = \left(1 - \tau_1 \frac{\partial}{\partial t} \ln \eta_1\right) \frac{\partial \nu}{\partial t} + \eta_1 \Delta \nu, \quad (17)$$

$$\tau_2 \frac{\partial^2 \beta}{\partial t^2} = \left(1 - \tau_2 \frac{\partial}{\partial t} \ln \eta_2\right) \frac{\partial \beta}{\partial t} + \eta_2 \Delta \beta. \quad (18)$$

При временах релаксации, малых по сравнению со временем наблюдения, эти уравнения нужно рассматривать как сингулярно возмущенные по времени и учитывать это при решении задач для конкретного вида функции $\eta(R,t)$. Уравнения, подобные полученным выше, выведены в [1–5] как уравнения переноса в средах с памятью. В отличие от феноменологического подхода в нашем случае вид функции $\eta(R,t)$ может быть найден для конкретной среды методами статистической физики.

Полученные уравнения переноса в случае $\tau = 0$ редуцируются к классическим уравнениям переноса параболического типа, а законы переноса – к законам Фика и Фурье.

Аналогичный подход может быть использован и для описания более сложной ситуации, когда необходимо учитывать анизотропию среды и пространственную неоднородность потоков. Установим принципиальный характер и рассмотрим свойства базовых решений полученных уравнений в приближении квазипостоянных коэффициентов.

Тогда, из уравнений (17) и (18), усредняя их по сечению трубчатого реактора F и по периоду T, равному времени пребывания реакционной смеси в аппарате, получаем для нелокальной системы без перекрестных потоков уравнения следующего вида:

$$\tau_1 \frac{\partial^2 \overline{\nu}}{\partial t^2} + A_1 \frac{\partial \overline{\nu}}{\partial t} + B_1 \frac{\partial^2 \overline{\nu}}{\partial z^2} = 0, \quad (19)$$

$$\tau_2 \frac{\partial^2 \overline{\beta}}{\partial t^2} + A_2 \frac{\partial \overline{\beta}}{\partial t} + B_2 \frac{\partial^2 \overline{\beta}}{\partial z^2} = 0, \quad (20)$$

где

$$\overline{\nu} = \int_f \eta df, \ \overline{\beta} = \int_f df, \quad (21)$$

$$A_1 = -\frac{1}{FT} \int_t \int_f \left(1 - \tau_1 \frac{\partial}{\partial t} \ln \eta_1\right) dt df, \quad (22)$$

$$A_2 = -\frac{1}{FT} \int_t \int_f \left(1 - \tau_2 \frac{\partial}{\partial t} \ln \eta_2\right) dt df, \quad (23)$$

$$B_1 = -\frac{1}{FT} \int_t \int_f \eta_1 dt df, \quad (24)$$

$$B_2 = -\frac{1}{FT} \int_t \int_f \eta_2 dt df. \quad (25)$$

Поскольку справедливы неравенства

$$B_1 < 0;\ B_2 < 0, \qquad (26)$$

оба полученных уравнения (19) и (20) являются уравнениями гиперболического типа.

Их решение может быть описано в виде суперпозиции простых волн- гармоник Фурье:

$$\overline{\nu} = \Lambda_1 \exp(i(kz - \omega t)), \qquad (27)$$

$$\overline{\beta} = \Lambda_2 \exp(i(kz - \omega t)). \qquad (28)$$

Отсюда получаем дисперсионное соотношение

$$\omega^2 + \frac{B_1}{\tau_1}k^2 + i\omega\frac{A_1}{\tau_1} = 0. \qquad (29)$$

Полученное соотношение для действительного волнового числа k и частоты $\omega = \omega_1 + \omega_2 i$ может выполняться только на линии нейтральной устойчивости:

$$\omega_1 = 0. \qquad (30)$$

При этом дисперсионное соотношение преобразуется к виду

$$\omega_2^2 + \frac{A_1}{\tau_1}\omega_2 - \frac{B_1}{\tau_1}k^2 = 0. \qquad (31)$$

Для того чтобы соотношение (31) могло выполняться, в действительной области необходимо соблюдение условия

$$A_1^2 + 4B_1\tau_1 > 0. \qquad (32)$$

Аналогичное условие может быть получено для второго уравнения системы:

$$A_2^2 + 4B_2\tau_2 > 0. \qquad (33)$$

На рисунке показаны характерные кривые дисперсионного соотношения на нейтральной линии.

Для полного анализа задачи рассмотрим возможность распространения концентрационных или тепловых волн с различными инкрементами или декрементами, т.е. в виде

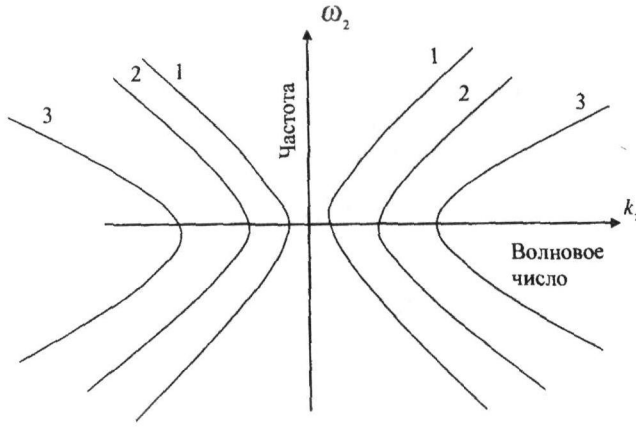
$$k = k_1 + k_2 i, \qquad (34)$$

$$\omega = \omega_1 + \omega_2 i. \qquad (35)$$

В этом случае дисперсионное соотношение представляется в виде системы уравнений для действительной и мнимой частей:

$$\omega_1^2 - \omega_2^2 - \frac{A_1}{\tau_1}\omega_2 + \frac{B_1}{\tau_1}(k_1^2 - k_2^2) = 0, \qquad (36)$$

$$2\omega_1\omega_2 + \frac{A_1}{\tau_1}\omega_1 + \frac{2B_1}{\tau_1}k_1k_2 = 0. \qquad (37)$$



Графики дисперсионного соотношения для системы (36), (37): 1 – $A_1/B_1 = 1$; 2 – 1,5; 3 – $A_1/B_1 = 2$

Установим, при каких условиях в данной системе могут возникнуть бегущие концентрационные и температурные волны.

Для этого в уравнениях (36, 37) сделаем замену переменной:

$$\overline{\nu} = \overline{N}\exp(\varsigma_1 t) \text{ и } \overline{\beta} = \overline{B}\exp(\varsigma_2 t). \qquad (38)$$

Подставляя эти формы в уравнения переноса, получаем

$$\frac{\partial^2\overline{N}}{\partial t^2} + \left(2\varsigma_1 + \frac{A_1}{\tau_1}\right)\frac{\partial\overline{N}}{\partial t} + \frac{B_1}{\tau_1}\frac{\partial^2\overline{N}}{\partial z^2} + \varsigma_1^2\overline{N} = 0, \qquad (39)$$

$$\frac{\partial^2\overline{B}}{\partial t^2} + \left(2\varsigma_2 + \frac{A_2}{\tau_2}\right)\frac{\partial\overline{B}}{\partial t} + \frac{B_2}{\tau_2}\frac{\partial^2\overline{B}}{\partial z^2} + \varsigma_2^2\overline{B} = 0. \qquad (40)$$

Тогда выбором констант ς_1 и ς_2 в следующем виде:

$$\varsigma_1 = -\frac{A_1}{2\tau_1};\ \varsigma_2 = -\frac{A_2}{2\tau_2}, \qquad (41)$$

редуцируем уравнения к виду

$$\frac{\partial^2\overline{N}}{\partial t^2} + \frac{B_1}{\tau_1}\frac{\partial^2\overline{N}}{\partial z^2} + \frac{A_1^2}{4\tau_1^2}\overline{N} = 0, \qquad (42)$$

$$\frac{\partial^2\overline{B}}{\partial t^2} + \frac{B_2}{\tau_2}\frac{\partial^2\overline{B}}{\partial z^2} + \frac{A_2^2}{4\tau_{12}^2}\overline{B} = 0. \qquad (43)$$

Ищем решения полученных уравнений в виде

$$\overline{N} = \Phi_1(z - c_1 t), \qquad (44)$$

$$\overline{B} = \Phi_2(z - c_2 t). \qquad (45)$$

Отсюда получаем

$$\left(c_1^2+\frac{B_1}{\tau_1}\right)\Phi_1''+\frac{A_1^2}{4\tau_1^2}\Phi_1=0, \qquad (46)$$

$$\left(c_2^2+\frac{B_2}{\tau_2}\right)\Phi_2''+\frac{A_2^2}{4\tau_2^2}\Phi_2=0. \qquad (47)$$

Решение этих уравнений зависит от знака коэффициента при второй производной. При соблюдении условий

$$c_1^2>-\frac{B_1}{\tau_1}, \qquad (48)$$

$$c_2^2>-\frac{B_2}{\tau_2} \qquad (49)$$

в системе могут возникать и распространяться бегущие концентрационные и температурные волны.

Физически условия (48), (49) интерпретируются как условия достаточно больших времен релаксации. При этом в системе могут возникать бегущие волны с фазовыми скоростями c_1, c_2 и частотами

$$\varpi_1=\frac{A_1}{4\tau_1}\sqrt{\frac{c_1\tau_1+B_1}{\tau_1}}, \qquad (50)$$

$$\varpi_2=\frac{A_2}{4\tau_2}\sqrt{\frac{c_2\tau_2+B_2}{\tau_2}}. \qquad (51)$$

Аналогичный анализ при усреднении по сечению и времени пребывания в реакторе для системы с перекрестными эффектами приводит к уравнениям вида

$$\frac{\partial^3\overline{\nu}}{\partial t^3}-A_1\frac{\partial^2\overline{\nu}}{\partial t^2}+B_1\frac{\partial\overline{\nu}}{\partial t}+D_1\frac{\partial\overline{\beta}}{\partial z}\frac{\partial^2\overline{\nu}}{\partial z^2}+$$

$$+E_1\frac{\partial\overline{\beta}}{\partial z}\frac{\partial\overline{\nu}}{\partial z}+F_1\frac{\partial^2}{\partial z\partial t}\left(\overline{\beta}\frac{\partial\overline{\nu}}{\partial z}\right)=0; \qquad (52)$$

$$\frac{\partial^3\overline{\beta}}{\partial t^3}-A_2\frac{\partial^2\overline{\beta}}{\partial t^2}+B_2\frac{\partial\overline{\beta}}{\partial t}+D_2\frac{\partial\overline{\nu}}{\partial z}\frac{\partial^2\overline{\beta}}{\partial z^2}+$$

$$+E_2\frac{\partial\overline{\beta}}{\partial z}\frac{\partial\overline{\nu}}{\partial z}+F_2\frac{\partial^2}{\partial z\partial t}\left(\overline{\nu}\frac{\partial\overline{\beta}}{\partial z}\right)=0. \qquad (53)$$

Полный анализ этой системы затруднителен. Однако отметим, что известно наличие в описываемых подобными уравнениями системах диспергирующих бегущих волн [6]. Это явление имеет также экспериментальное подтверждение [6, 7], но не имело ранее теоретического объяснения и описания.

Таким образом, можно сделать вывод, что обобщенная методология релаксационных ядер переноса позволяет получить уравнения переноса тепла и массы в химических аппаратах с учетом многокомпонентности физико-химических систем.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Муратов А.С., Мырзахметова Б.Ш.* Новые подходы к моделированию процессов тепло- и массопереноса в неравновесных физико-химических системах // Труды международной конференции «Вычислительные технологии и математическое моделирование в науке, технике и образовании». Алматы: КазНУ-ИВТ СО РАН, 2002. Ч. 3. С. 285-289.

2. *Муратов А.С., Мырзахметова Б.Ш., Балабеков О.С.* Нелинейные модели релаксационных ядер переноса на основе приближения Пригожина в системах с термодиффузией // Изв. НАН РК. Сер. хим. 2003. № 3. С. 103-108.

3. *Муратов А.С., Мырзахметова Б.Ш., Балабеков О.С.* Особенности вывода нелокальных уравнений переноса в нелинейных средах // Вестник НАН РК. 2003. № 5. С. 89-92.

4. *Ким Л.А., Бренер А.М.* Временная нелокальность уравнений переноса тепла и массы в интенсивных технологических процессах // ТОХТ. 1996. Т. 30, № 3. С. 258-262.

5. *Ким Л.А., Бренер А.М.* Учет перекрестных эффектов в нелокальных уравнениях переноса тепла и массы // ТОХТ. 1998. Т. 32, № 3. С. 247-250.

6. *Brener A.M., Muratov A.S., Tashimov L.* Non-linear model of time dependent relaxation cores for the systems with cross transfer effects // Proceedings of the Advan. Comp. Methods in Heat Transfer. **VIII.** Lisbon, 2004. P. 321-332.

Резюме

Реакция – диффузиялық жүйесіндегі жылу және масса алмасу теңдеуінің, аппараттағы ағын құрылымының кеңістіктік бибіртектестік жағдайындағы жылу және диффузиялық релаксация құбылысы ескерілген, жалпы құрылымы айқындалған.

Summary

The main structure of heat and mass transfer equations in the reacting diffusion systems with allowing for the heat and diffusion relaxation under conditions of space heterogeneity of reagents fluids in the apparatuses have been obtained.

Поступила 3.09.06г.