

деляемой фракции увеличивается расход изопрена-сырца, отбираемого с верха колонны К-2, а принятые нами в качестве критерия оптимальности удельные энергозатраты, находятся в обратной зависимости от расхода дистиллята колонны К-2.

Литература

1. Кирпичников П.А. Альбом технологических схем основных производств промышленности синтетического ка-

учука [Текст] / П.А. Кирпичников, В.В. Береснев, Л.М. Попова. – Л.: Химия, 1986. – 224 с.

2. Павлов, С.Ю. Выделение и очистка мономеров для синтетического каучука [Текст] / С.Ю. Павлов – Л.: Химия, 1987. – 232 с.
3. Островский, Г.М. Выбор оптимальных тарелок питания в замкнутой системе ректификационных колонн [Текст] / Г.М. Островский, [и др.] // ТОХТ. – 2008. – Т. 42. – № 4. – С. 401 – 412.

УДК 536.248.2

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ АППАРАТОВ С ПОДВИЖНЫМИ ФРОНТАМИ РАЗДЕЛА КИНЕТИЧЕСКИХ ЗОН

Л.М. Мусабекова

Кандидат технических наук, доцент

Кафедра «Вычислительная техника и программное
обеспечение»Южно-Казахстанский государственный университет им.
М. Ауезовапр. Тауке-хана, 5, г. Шымкент, Республика Казахстан,
160024

Контактный тел.: (07252) 30-14-12 0705-202-64-08

E-mail: mleyla@bk.ru

Наведені результати числових досліджень хімічних апаратів з рухомими фронтами поділу кінетичних зон. Подана оцінка впливу параметрів процесу на швидкість пересування фронту реакції, концентрацію продукту та компоненту реакції на границі поділу фаз

Ключові слова: моделювання, рухомі границі, кінетичні зони

Приводятся результаты численных исследований химических аппаратов с подвижными фронтами раздела кинетических зон. Дана оценка влияния параметров процесса на скорость перемещения фронта реакции, концентрацию продукта и компонента реакции на границе раздела фаз

Ключевые слова: моделирование, подвижные границы, кинетические зоны

This work represents results of computational simulation of the chemical apparatuses with moving boundary planes of kinetic zones. The evaluation of control parameters influence on the velocity of moving reaction plane, boundary reaction product and component concentration is given

Key words: simulation, moving boundaries, kinetic zones

В работе [1] показана математическая модель процесса хемосорбции с движущимся фронтом мгновенной необратимой реакции при малых числах Рейнольдса в системе газ-жидкость до и после момента времени формирования фронта реакции $t=t^*$. Разработанная в работе модель, в отличие от известной работы авторов [2], учитывает:

- влияние диффузионного переноса продукта реакции на кинетические характеристики хемосорбции;
- межмолекулярное взаимодействие при расчете реакционно-диффузионных систем.

Для неидеальной системы т.е. для учета межмолекулярного взаимодействия использована зависимость коэффициента диффузии от концентрации компонен-

та [3,4] и параметр w_{AX} , учитывающий межмолекулярное взаимодействие:

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

$$w_{AX} = \kappa [2\epsilon_{AX} - (\epsilon_{AA} + \epsilon_{XX})], \tag{2}$$

где D - коэффициент диффузии компонента в реальной системе; D_i - коэффициент диффузии для идеальной системы; $\epsilon_{AX}, \epsilon_{AA}, \epsilon_{XX}$ - энергии взаимодействия соответственно между молекулами реагентов A и X , A и A , X и X ; κ - параметр, зависящий от модели жидкого состояния [5].

Численный эксперимент проведен для системы SO_2 в растворе Na_2SO_3 . Для этих систем получены надежные экспериментальные данные многими исследователями [2]. В основу положен метод Кранка-Никольсона и метод раздельных прогонок. Использованы адаптивные алгоритмы и достигнута сходимость расчета, что позволяет нам рассчитывать на достоверность полученных результатов. Диапазон исходных данных выбран достаточно широкий, основные данные взяты из работы [2], при этом время абсорбции ограничивается временем пребывания газовой и жидкой фаз в аппарате. Для каждого численного эксперимента проведены расчеты [1,4,5] с различными значениями следующих параметров:

- парциального давления улавливаемого компонента в газовой фазе p_A от $3.322 \cdot 10^2$ до $14.322 \cdot 10^2$ Па;
- концентрации компонента V_∞ в глубине слоя жидкости от 5.073 до 9.073 моль/м³;
- коэффициента диффузии улавливаемого компонента D_A от $2 \cdot 10^{-9}$ до $14 \cdot 10^{-9}$ м²/с;
- коэффициента диффузии абсорбента D_B от $2.1 \cdot 10^{-9}$ до $3.1 \cdot 10^{-9}$ м²/с;
- коэффициента диффузии продукта реакции D_E от $2 \cdot 10^{-9}$ до $5 \cdot 10^{-9}$ м²/с;
- константы Генри H от 12 до 15 м³Па/моль;
- коэффициента массоотдачи α от $0.6 \cdot 10^{-5}$ до $1.34 \cdot 10^{-5}$ моль/(м² сПа).

Рассмотрим оценку влияния параметров процесса на скорость перемещения фронта реакции. Нами была рассчитана скорость перемещения фронта реакции V [1,4] через интервалы времени Δt , характерное время t_p и глубина проникновения h_p :

$$V = \Delta x / \Delta t, t_p = t^* + \Delta t_1 + \Delta t_2, h_p = \Delta x_1 + \Delta x_2. \tag{3}$$

Пусть $\Delta t_1, \Delta t_2$ - интервалы времени в течении которых скорость фронта V реакции перемещается по координатам $\Delta x_1, \Delta x_2$. При этом контролируем начальное значение скорости фронта V_1 таким образом, изменяя шаг по координате Δx_1 , чтобы выполнялось условие:

$$V_0 < V_1 < V_2. \tag{4}$$

Наиболее принципиальным результатом численного эксперимента можно считать обнаружение того, что в начальный период времени на стадии процесса $t > t^*$ скорость перемещения фронта реакции быстро возрастает, а начиная с некоторого момента эта скорость начинает уменьшаться и медленно стремится к нулю (рис. 1). По первому участку до момента $t = t_p$,

соответствующего максимальной скорости перемещения фронта реакции была сделана оценка характерной глубины проникновения фронта реакции, что невозможно сделать, используя другие известные модели этого процесса.

Второй участок начинается от момента времени проникновения $t = t_p$ и известен из литературных источников: движение фронта реакции на этом участке хорошо описывается с помощью пленочной модели по закону $V \approx 1/\sqrt{t}$.

С возрастанием параметра w от 0 до 0,05 скорость перемещения фронта реакции практически не изменяется на первом участке, и падает на втором участке. Для коэффициентов диффузии улавливаемого компонента D_A и активного компонента D_B : с возрастанием параметра w от 0 до 0,05 скорость перемещения фронта реакции падает на первом и втором участках.

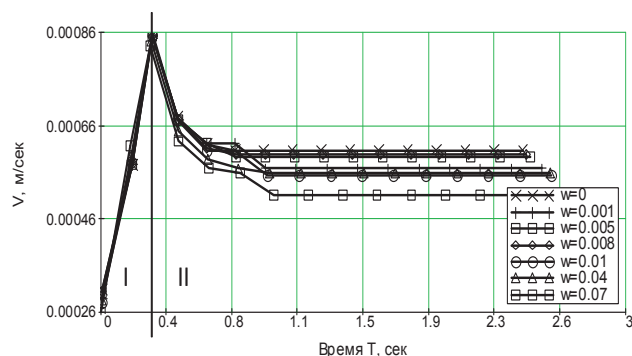


Рис. 1. Скорость перемещения фронта реакции V для концентрации активного компонента $V = 5$ моль/м³ и параметра w_{AX} равным от 0 до 0,07

Рассмотрим оценку влияния параметров процесса на поверхностную концентрацию продукта реакции C_e (рис. 2). Были рассчитаны концентрации компонента E на поверхности фронта реакции через интервалы времени Δt_j . Результаты численного эксперимента показали, что в начальный момент времени поверхностная концентрация продукта реакции имеет максимальное значение, а затем с течением времени медленно уменьшается до нуля. Расчеты показали, что с возрастанием параметра w от 0 до 0,05 поверхностная концентрация продукта реакции уменьшается. Для параметра w равном от 0 до 0,01 значение продукта реакции практически не меняется, а для значений параметра w начиная с 0,03 уменьшается.

Рассмотрим оценку влияния параметров процесса на концентрацию улавливаемого компонента A_S на границе раздела фаз (рис. 3). Были рассчитаны концентрации компонента A на всем временном диапазоне на межфазной границе при $X = 0$. В результате численного эксперимента выделена первая стадия процесса хемосорбции с движущимся фронтом реакции, когда концентрация компонента A на границе раздела фаз быстро возрастает. Затем рост концентрации улавливаемого компонента на границе раздела фаз практически прекращается, что соответствует установлению равновесной концентрации.

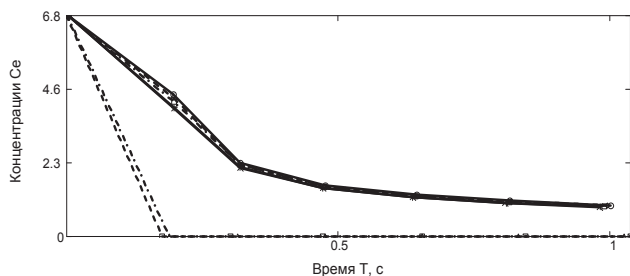


Рис. 2. Поверхностная концентрация продукта реакции C_e при коэффициенте диффузии продукта реакции $D_E=5 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$, 1- $w=0$; 2- $w=0,001$; 3- $w=0,005$; 4- $w=0,008$; 5- $w=0,01$; 6- $w=0,05$

Расчеты показали, что с возрастанием параметра w от 0 до 0,05 концентрация компонента А на границе раздела фаз практически не изменяется. Изменения концентрации компонента А на границе раздела фаз заметны при возрастании парциального давления улавливаемого компонента в газовой фазе p_A и коэффициента диффузии улавливаемого компонента D_A , при этом концентрация компонента А на границе раздела фаз уменьшается.

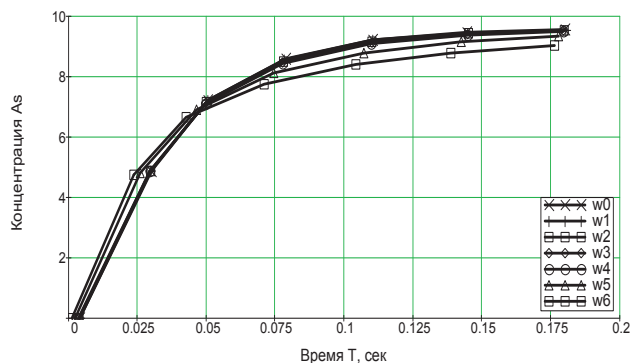


Рис. 3. Концентрация улавливаемого компонента A_S на границе раздела фаз при коэффициенте диффузии улавливаемого компонента $D_A=9.7 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$, 1- $w=0$; 2- $w=0,001$; 3- $w=0,005$; 4- $w=0,008$; 5- $w=0,01$; 6- $w=0,05$

Таким образом, можно сделать вывод, что неидеальность системы начинает сказываться начиная со значений параметра $w=0.001$, т.е., уже при достаточно малых значениях w неидеальность необходимо учитывать при расчете абсорбции, сопровождающей быстрой химической реакцией. Результаты проведенных исследований рекомендуется использовать для проведения технологических расчетов при проектировании промышленных систем очистки газовых и жидких выбросов.

Литература

1. Мусабекова Л.М. Влияние неидеальности системы на концентрацию реагентов на межфазной поверхности при хемосорбции // Научно-технический журнал «Химия. Химическая технология». Ташкент.-2008.-№3.-С.48-52.
2. Baetens D., Van Keer R., Hosten L.H. Gas-liquid reaction: absorption accompanied by an instantaneous, irreversible reaction // Comp. Mech. Publ. Moving Boundaries IV. Boston.-1997.-P.185.
3. Тауасаров Б.Р. Влияние неидеальности системы на нелинейные концентрационные фронты в трубчатых химических реакторах // Доклады НАН РК.-№6.-2005.-С.32-38.
4. Мусабекова Л.М. Учет межмолекулярного взаимодействия при расчете реакционно-диффузионных систем с подвижным фронтом реакции // Вестник Национальной инженерной академии Республики Казахстан.-2008.-№3.-С.94-99.
5. Мусабекова Л.М. Анализ влияния неидеальности на динамику процесса хемосорбции // Международная научная конференция «Нестационарные, энерго- и ресурсосберегающие процессы и оборудование в химической, нано- и биотехнологии (НЭРПО-2008)». Москва.-2008.-С.78-80.