

ТУРБУЛЕНТНЫЙ ТЕПЛОМАССОБМЕН ПРИ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ В УСЛОВИЯХ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ УРАВНЕНИЙ СОХРАНЕНИЯ

Холпанов Л.П.*, Поляков Ю.С.**

*Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка (Россия)

**USPolyResearch, Эшланд, Пенсильвания 17921 (США)

Тепломассоперенос, характеризующийся перемещением фронта химических превращений с конечной скоростью, наиболее адекватно можно описать с помощью уравнений сохранения гиперболического типа [1]. Использование уравнений этого типа позволяет устранить важный недостаток параболической формулировки законов сохранения уравнений, связанный с предположением бесконечной скорости распространения тепловых возмущений.

Впервые гиперболическое уравнение переноса было предложено Максвеллом на основе анализа традиционных уравнений переноса [2]. Позже уравнения гиперболического типа были получены другими методами [1,3]. В настоящее время этот тип уравнений переноса получил широкое применение и развитие.

Типичными примерами приложений, где необходимо использовать гиперболическую форму законов сохранения, являются быстрые полимеризационные процессы [4,5]. Некоторые другие процессы, характеризующиеся движением фронта химических превращений, также требуют использования моделей на основе гиперболических уравнений переноса.

В настоящем сообщении в качестве объекта исследования рассмотрен турбулентный конвективный тепломассоперенос во внутренней трубе (реакторе), в которой проходит химическая реакция с выделением (поглощением) тепла (Рис. 1). Снаружи этот реактор коаксиально охлаждается (нагревается) турбулентным потоком теплоносителя. На границе раздела реактор-охлаждающая (нагревающая) жидкость применены условия сопряжения – равенства температур и локальных тепловых потоков.

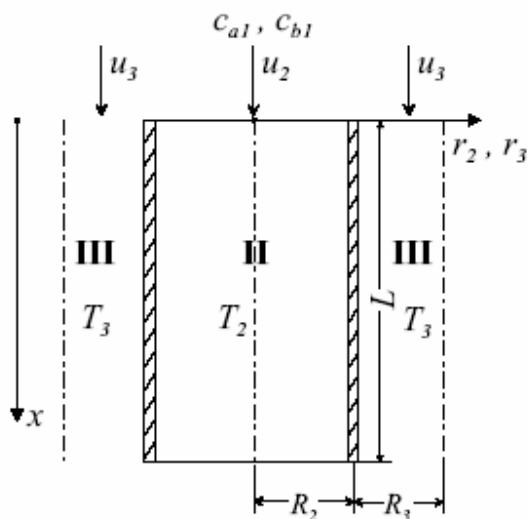


Рис. 1. Схема трубчатого реактора

Обозначим зону реактора и зону охладителя (нагревателя) вместе через зону I, которая представляет собой две концентрические трубы (общая зона не обозначена), зону реактора – через зону II, зону охладителя (нагревателя) – через зону III.

При построении математической модели предполагали, что мономер и катализатор в зоне II и жидкость для охлаждения в зоне III движутся со скоростями u_2, u_3 , соответственно, равными распределению турбулентных скоростей, рассчитанных по одной из моделей, характеризующих закон затухания турбулентности при приближении к стенке. Эффективные коэффициенты турбулентного переноса представляются в виде суммы турбулентных и молекулярных коэффициентов. При этом их значения базируются на физической постановке моделей, в основе которых лежат положения о полном затухании турбулентных пульсаций на стенке. Также проведены расчеты с использованием осредненных коэффициентов турбулентного переноса вдали от стенки. Однако вблизи стенки, на расстоянии 2 - 3 шагов от стенки, предполагается, что эти коэффициенты меняются по закону Ландау-Левича. В обоих случаях принимается, что основную роль вблизи стенки играет молекулярный перенос.

Также предполагали, что конвективный турбулентный перенос зависит только от координаты в поперечном направлении, что следует из уравнения неразрывности.

С этими приближениями система уравнений количества движения, вещества и энергии [6] для осредненных концентраций и температур принимает следующий вид.

Уравнения для зоны II:

$$\frac{\partial c_a}{\partial \tau} + f_1 \frac{\partial^2 c_a}{\partial \tau^2} + u_2 [r_2] \frac{\partial c_a}{\partial x} = \text{div} D_a [r_2] \text{grad} c_a - k_a^0 c_a c_b \exp \left[-\frac{E_a}{RT_2} \right], \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_b}{\partial \tau} + f_2 \frac{\partial^2 c_b}{\partial \tau^2} + u_2 [r_2] \frac{\partial c_b}{\partial x} = \text{div} D_b [r_2] \text{grad} c_b - k_b^0 c_b \exp \left[-\frac{E_b}{RT_2} \right], \quad (2)$$

$$\rho_2 c_{p2} \left(\frac{\partial T_2}{\partial \tau} + f_3 \frac{\partial^2 T_2}{\partial \tau^2} + u_2 [r_2] \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) = \text{div} \lambda_2 [r_2] \text{grad} T_2 + Q_a k_a^0 c_a c_b \exp \left[-\frac{E_a}{RT_2} \right]. \quad (3)$$

Уравнение для зоны III:

$$\rho_3 c_{p3} \left(\frac{\partial T_3}{\partial \tau} + u_3 [r_3] \frac{\partial T_3}{\partial x} \right) = \text{div} \lambda_3 [r_3] \text{grad} T_3. \quad (4)$$

Для решения системы уравнений (1)–(4) выпишем граничные и начальные условия.

Введем обобщенную функцию: $F = \{c_a, c_b, T_2\}$. Тогда согласно условию симметрии

$$\frac{\partial F}{\partial r_2} = 0 \text{ при } r_2 = 0. \quad (5)$$

Условия сопряжения зон II и III записываются в виде

$$T_2 = T_3, \quad \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial r_2} = \lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial r_3} \text{ при } r_2 = r_3 = R_2. \quad (6)$$

Условия сопряжения (6) выражают равенства температур и локальных тепловых потоков на границе раздела между зонами II и III. Применяя их, можно найти локальное распределение температур в каждой зоне.

Условия отсутствия потока через непроницаемую стенку записываются в виде

$$\frac{\partial c_a}{\partial r_2} = \frac{\partial c_b}{\partial r_2} = 0 \text{ при } r_2 = R_2. \quad (7)$$

На границе зоны III принимаем условие симметрии

$$\frac{\partial T_3}{\partial r_3} = 0 \text{ при } r_3 = R_2 + R_3. \quad (8)$$

Такой выбор граничного условия основан на допущении, что аппарат, в котором происходят быстрые химические реакции, организован в виде совокупности трубчатых элементов, расположенных параллельно.

Используем периодическое условие на входе в реактор

$$c_a = c_{a1}(r_2)[1 + \alpha_1 \sin \omega_1 t], c_b = c_{b1}(r_2)[1 + \alpha_2 \sin \omega_2 t], T_2 = T_{21}[1 + \alpha_3 \sin \omega_3 t], T_3 = T_{31}[1 + \alpha_4 \sin \omega_4 t] \text{ при } x = 0. \quad (9)$$

Условие на выходе записывается в виде

$$\frac{\partial F}{\partial x} = 0 \text{ при } x = L, \quad (10)$$

где $F = \{c_a, c_b, T_2, T_3\}$.

Используем начальные условия

$$c_a = c_{a0}, c_b = c_{b0}, T_2 = T_{20}, T_3 = T_{30}. \quad (11)$$

Рассмотрим численную схему на примере уравнения (1). Будем использовать метод переменных направлений с конечно-разностными приближениями второго порядка. Обозначим шаги: $h_\tau - t$, $h_i - x$, $h_j - r_2$ или r_3 . Шаг по времени h_τ принимается постоянным, а h_i , h_j — переменными, $\bar{h}_i = (h_i + h_{i+1})/2$. Дифференциальные члены будем аппроксимировать методом контрольного объема. Значение нелинейного члена, обусловленного химической реакцией, будем заимствовать с предыдущего шага по времени.

Тогда для шага $n+1/2$ (по времени)

$$\begin{aligned} & \frac{2}{h_\tau} [c_{a\ i,j}^{n+1/2} - c_{a\ i,j}^n] + \frac{1}{(h_\tau)^2} \left[c_{a\ i,j}^{n+1/2} - 2c_{a\ i,j}^n + \frac{c_{a\ i,j}^{n-1}}{2} \right] + \frac{u_2 [r_2^j]}{2\bar{h}_i} [c_{a\ i+1,j}^n - c_{a\ i-1,j}^n] = \\ & = D_a [r_2^j] \left[\frac{c_{a\ i+1,j}^n}{\bar{h}_i h_{i+1}} - \frac{2c_{a\ i,j}^n}{h_{i+1} h_i} + \frac{c_{a\ i-1,j}^n}{\bar{h}_i h_i} \right] + \\ & + \frac{1}{2r_2^j \bar{h}_j} \left\{ D_a \left[\frac{r_2^j + r_2^{j+1}}{2} \right] (r_2^j + r_2^{j+1}) \frac{c_{a\ i,j+1}^{n+1/2} - c_{a\ i,j}^{n+1/2}}{h_{j+1}} - D_a \left[\frac{r_2^j + r_2^{j-1}}{2} \right] (r_2^j + r_2^{j-1}) \frac{c_{a\ i,j}^{n+1/2} - c_{a\ i,j-1}^{n+1/2}}{h_j} \right\} - \\ & - k_a^0 c_{a\ i,j}^n c_{b\ i,j}^n \exp \left[-\frac{E_a}{RT_{2\ i,j}^n} \right]. \end{aligned}$$

Для шага $n+1$

$$\begin{aligned} & \frac{2}{h_\tau} [c_{a\ i,j}^{n+1} - c_{a\ i,j}^{n+1/2}] + \frac{1}{(h_\tau)^2} \left[c_{a\ i,j}^{n+1} - c_{a\ i,j}^{n+1/2} + \frac{c_{a\ i,j}^{n-1}}{2} \right] + \frac{u_2 [r_2^j]}{2\bar{h}_i} [c_{a\ i+1,j}^{n+1} - c_{a\ i-1,j}^{n+1}] = \\ & = D_a [r_2^j] \left[\frac{c_{a\ i+1,j}^{n+1}}{\bar{h}_i h_{i+1}} - \frac{2c_{a\ i,j}^{n+1}}{h_{i+1} h_i} + \frac{c_{a\ i-1,j}^{n+1}}{\bar{h}_i h_i} \right] + \\ & + \frac{1}{2r_2^j \bar{h}_j} \left\{ D_a \left[\frac{r_2^j + r_2^{j+1}}{2} \right] (r_2^j + r_2^{j+1}) \frac{c_{a\ i,j+1}^{n+1/2} - c_{a\ i,j}^{n+1/2}}{h_{j+1}} - D_a \left[\frac{r_2^j + r_2^{j-1}}{2} \right] (r_2^j + r_2^{j-1}) \frac{c_{a\ i,j}^{n+1/2} - c_{a\ i,j-1}^{n+1/2}}{h_j} \right\} - \\ & - k_a^0 c_{a\ i,j}^n c_{b\ i,j}^n \exp \left[-\frac{E_a}{RT_{2\ i,j}^n} \right]. \end{aligned}$$

При применении метода переменных направлений для выражения второй производной по времени использованы центральные разностные приближения. В этом

легко убедиться, сложив разностные операторы для второй производной на половинном и полном шагах.

Численные расчеты показали, что учет гиперболического члена существенно влияет на развитие профилей концентраций мономера и катализатора, а также температуры в начале процесса. На выход решений на стационар этот член практически не оказывает никакого значения. Также следует отметить, что внесение гиперболического члена в систему уравнений переноса энергии и вещества приводит к повышению устойчивости численной схемы решения.

Периодические условия на входе для катализатора и мономера также не оказывают существенного влияния на выход решения на стационар.

1. Лыков А.В. Тепломассообмен: (Справочник). М.:Энергия, 1978. 689с.
2. Maxwell I. C. Phil. Trans. Roy. Soc. London. 1867.V.157. P.48-49
3. Предводителев А.С. В. кн. Проблемы тепло-и массопереноса. М.:1970. С.17-26
4. Берлин А.А., Минскер Ю.А., Прочухан Ю.А., Ениколопян Н.С. Макроскопическая кинетика быстрых процессов полимеризации// ВМС. 1989. Т. (А) 31. № 9. С. 1779-1798.
5. Матковский П.Е., Алдошин С.М., Троицкий В.Н., Старцева Г.П. и др. Разработка и промышленная реализация процесса получения синтетических олигодеценовых масел. Черноголовка: Редакционно-издательский отдел ИПХФ РАН, 2004. 124с.
6. Холпанов Л.П., Поляков Ю.С. Математическое моделирование турбулентного тепломассообмена при химических превращениях//ТОХТ 2006.Т.40.№5. С.490-501