DOI: 10.15593/2224-9400/2017.3.07
УДК 66.974.434

**Н.Р. Валиуллин, А.Г. Хлуденев, Д.А. Иванцов**

Пермский национальный исследовательский
политехнический университет, Пермь, Россия

# РЕШЕНИЕ ОДНОПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ДИФФУЗИОННОЙ МОДЕЛИ РЕАКТОРА В СЛУЧАЕ РЕАКЦИИ ПЕРВОГО ПОРЯДКА

*Процессы химической технологии – это сложные физико-химические системы. Сложность их заключается в недостатке исходной информации, сложной взаимосвязи параметров, характеризующих процесс и непредсказуемости поведения. Для изучения данных систем одним из наиболее универсальных является метод математического моделирования, который позволяет достаточно точно описать процесс, протекающий в исследуемом оборудовании.*

*В связи с этим актуальными являются исследования, связанные с моделированием химических процессов, протекающих в реакторах различного типа. Метод математического моделирования в совокупности с опытными данными позволяет определить важные гидродинамические характеристики процесса, в частности коэффициент продольной диффузии, которые способствуют пониманию сути процесса и расчету аппарата. Метод позволяет сравнить опытные данные с теоретическими и сделать вывод о корректности полученных данных.*

*В данной работе рассмотрена однопараметрическая диффузионная модель трубчатого реактора при протекании реакции первого порядка. С помощью теории обобщенных функций и уравнений математической физики получено фундаментальное решение этой модели, представляющее собой распределение концентрации от точечного мгновенного источника. На основе полученного результата решена задача Коши для данной модели, а также получено решение в случае отсутствия химической реакции.*

***Ключевые слова:*** *математическая модель, обобщенные функции, диффузионная модель, фундаментальное решение.*

**N.R. Valiullin, A.G. Hludenev, D.A. Ivancov**

Perm National Research Polytechnic University,
Perm, Russian Federation

## THE SOLUTION OF ONE-PARAMETRICAL DIFFUSIVE MODEL IN CASE OF REACTION OF THE FIRST ORDER

*Processes of chemical technology is a complex physico-chemical system. The difficulty is the lack of baseline information, the complex relationship of the parameters characterizing the process and unpredictability of behavior. To study these systems one of the most universal is the method of mathematical modeling, which allows to accurately describe the process occurring in the test equipment.*

*In this regard, relevant are the studies related to the modelling of chemical processes in reactors of various types. The method of mathematical modeling in combination with experimental data allows to identify the important hydrodynamic characteristics of the process, in particular, the coefficient of longitudinal diffusion, which contribute to the understanding of the process and calculation apparatus. The method allows to compare the experimental with theoretical data and draw a conclusion about the correctness of the received data.*

*In this paper, we consider a one-parameter diffusion model of a tubular reactor with a first-order reaction. With the help of the theory of generalized functions and equations of mathematical physics, a fundamental solution of this model is obtained, which is the distribution of concentration from a point instantaneous source. On the basis of the obtained result, the Cauchy problem for this model is solved, and a solution is obtained in the absence of a chemical reaction.*

***Keywords**: mathematical model, the generalized functions, diffusive model, the fundamental solution.*

Процессы химической технологии – это сложные физико-химические системы, переменные в пространстве и во времени. Для изучения данных систем одним из наиболее универсальных является метод математического моделирования [1–10].

В этой связи актуальными являются исследования, связанные с моделированием химических процессов, протекающих в реакторах различных типов.

Цель данной работы – получение математической зависимости для определения коэффициента продольной диффузии в трубчатом реакторе с продольным перемешиванием.

Рассмотрим материальный баланс однопараметрической диффузионной модели [11]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u\frac{\partial C}{\partial z} - w, \qquad (1)$$

где $C(z,t)$ – концентрация вещества, моль/м$^3$; $D$ – коэффициент продольной диффузии, м$^2$/с; $u$ – линейная скорость, м/с; $w$ – скорость химической реакции, моль/м$^3$с; $t$ – время, с; $z$ – продольная координата, м.

Будем рассматривать изотермический реактор, в котором протекает реакция первого порядка:

$$w = kC, \qquad (2)$$

где $k$ – константа скорости реакции.

Тогда модель примет следующий вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u\frac{\partial C}{\partial z} - kC. \qquad (3)$$

Введем линейный оператор $L$:

$$L = \frac{\partial}{\partial t} - D\frac{\partial^2}{\partial z^2} + u\frac{\partial}{\partial z} + k. \qquad (4)$$

Найдем фундаментальное решение оператора $L$ [12–15], т.е. найдем обобщенную функцию $\varepsilon(z,t) \in D'(R^2)$, удовлетворяющую в $R^2$ уравнению

$$L(\varepsilon(z,t)) = \delta(z,t), \qquad (5)$$

где $\delta(z,t)$ – дельта-функция Дирака.

Решение уравнения (5) представляется в следующем виде:

$$\varepsilon(z,t) = \frac{\theta(t)}{2\sqrt{D\pi t}} e^{-kt} e^{\frac{-(z-ut)^2}{4Dt}}, \qquad (6)$$

$$\theta(t) = \begin{cases} 0 & t \le 0, \\ 1 & t > 0. \end{cases} \qquad (7)$$

Обобщенная функция (6) является фундаментальным решением однопараметрической диффузионной модели для реакции первого порядка. Функция (6) представляет собой распределение концентрации от точечного мгновенного источника. Функция согласуется с опытными данными: при больших $z$ и малых $t$ величина $\varepsilon(z,t)$ чрезвычайно мала и ею можно пренебречь.

Рассмотрим свойства функции $\varepsilon(z,t)$:

1) функция неотрицательна;

2) обращается в нуль при $t < 0$;

3) бесконечно дифференцируема при $\forall\,(z,t) \in R^2$ (кроме точки (0;0));

4) при $t > 0$ $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon(z,t)dz = e^{-kt}$;

5) $\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon(z,t)dzdt = \dfrac{1}{k}$;

6) $\varepsilon(z,t) \to \delta(z)$ в $D^{'}(R^1), t \to +0$ (сходится в пространстве обобщенных функций к $\delta(z)$ при $t \to +0$).

С помощью фундаментального решения $\varepsilon(z,t)$ оператора $L$ (4) можно построить решение уравнения с произвольной правой частью $F(z, t)$:

$$L(C(z,t)) = F(z,t), \tag{8}$$

$$C(z,t) = \varepsilon(z,t)\cdot F(z,t) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} F(\gamma,\tau)\varepsilon(z-\gamma,t-\tau)d\gamma d\tau. \tag{9}$$

Представим источник $F(z,t)$ в виде «суммы» точечных источников $F(\gamma,\tau)\delta(z-\gamma,t-\tau)$:

$$F(z,t) = F(z,t)\cdot\delta(z,t) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} F(\gamma,\tau)\delta(z-\gamma,t-\tau)d\gamma d\tau. \tag{10}$$

В силу равенства (5) каждый точечный источник $F(\gamma,\tau)$ $\delta(z-\gamma,t-\tau)$ определяет влияние. Поэтому решение (9) представляет наложение (суперпозицию) этих влияний.

Если трубчатый реактор характеризуется большой длиной, то в течение небольшого промежутка времени влияние концентрации, заданной на границе, в центральной части реактора оказывается весьма слабым, и концентрация на этом участке определяется, в основном, лишь начальным распределением концентрации. В этом случае учет длины реактора не имеет значения. Поскольку изменение длины реактора не окажет существенного влияния на концентрацию интересующего нас участка, поэтому ставится задача Коши.

Рассмотрим задачу Коши для однопараметрической диффузионной модели (в случае реакции первого порядка):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u\frac{\partial C}{\partial z} - kC, \tag{11}$$

$$C(z,0) = C_0(z).$$

Продолжим функцию $C(z, t)$ нулем при $t < 0$:

$$\tilde{C}(z,t) = \begin{cases} C(z,t) & t \geq 0, \\ 0 & t > 0. \end{cases} \tag{12}$$

Продолженная функция $\tilde{C}(z,t)$ удовлетворяет в $R^2$ следующему уравнению:

$$\frac{\partial \tilde{C}}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \tilde{C}}{\partial z^2} - u\frac{\partial \tilde{C}}{\partial z} - k\tilde{C} + C_0(z)\cdot\delta(t). \tag{13}$$

Равенство (13) показывает, что начальное возмущение $C_0(z)$ для функции $\tilde{C}(z,t)$ играет роль мгновенно действующего источника $C_0(z)\cdot\delta(t)$, и классическое решение задачи Коши (11) содержится среди тех решений уравнения (13), которые обращаются в нуль при $t < 0$.

Задача (13) называется обобщенной задачей Коши для уравнения (3) с источником $C_0(z)\cdot\delta(t)$ и заключается в нахождении обобщенной функции $\tilde{C}(z,t)\in D(R^2)$, обращающейся в нуль при $t < 0$ и удовлетворяющей уравнению (13).

Решение задачи (13) представляется в следующем виде:

$$\tilde{C}(z,t) = \frac{\theta(t)}{2\sqrt{D\pi t}}e^{-kt}\int_{-\infty}^{+\infty} C_0(x)\cdot e^{\frac{-(z-x-ut)^2}{4Dt}}dx. \tag{14}$$

Рассмотрим случай, когда константа скорости $k = 0$, тогда уравнение (3) примет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u\frac{\partial C}{\partial z}. \tag{15}$$

Рассмотрим функцию

$$G(z,t)=\frac{1}{2\sqrt{D\pi t}}e^{\frac{-(z-ut)^2}{4Dt}}. \quad (16)$$

Функция (16) совпадает с нормальным распределением с дисперсией $2Dt$ и математическим ожиданием $ut$. Функция (16) удовлетворяет уравнению (15).

Рассмотрим следующее начальное возмущение для функции $\tilde{C}(z,t)$: $C_0(z)=C_0\cdot\delta(t)$. Этому соответствует мгновенное введение вещества в реактор в сечение $z = 0$ с концентрацией $C_0$, тогда решение уравнение (13) будет иметь вид

$$\tilde{C}(z,t)=\frac{\theta(t)}{2\sqrt{D\pi t}}e^{-kt}\int_{-\infty}^{+\infty}C_0\delta(x)\cdot e^{\frac{-(z-x-ut)^2}{4Dt}}dx=\frac{\theta(t)}{2\sqrt{D\pi t}}e^{-kt}C_0e^{\frac{-(z-ut)^2}{4Dt}}. \quad (17)$$

Если $t > 0$ и $k = 0$, получим

$$\tilde{C}(z,t)=\frac{1}{2\sqrt{D\pi t}}C_0e^{\frac{-(z-ut)^2}{4Dt}}=C_0G(z,t). \quad (18)$$

Таким образом, получено решение для однопараметрической диффузионной модели в случае мгновенного введения вещества с концентрацией $C_0$, которое вместе с экспериментальными данными позволит определить коэффициент продольной диффузии.

## Список литературы

1. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. – М.: Химия, 1976. – 463 с.

2. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высшая школа, 1991. – 400 с.

3. Закгейм А.Ю. Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов: учеб. пособие для вузов. – М.: Логос, 2009. – 304 с.

4. Кутепов А.М., Бондарева Т.Н., Беренгартен М.Б. Общая химическая технология. – М.: Академкнига, 2007. – 528 с.

5. Арис Р. Анализ процессов в химических реакторах. – М.: Химия, 1967. – 328 с.

6. Мошев Е.Р. Математическое моделирование процессов и аппаратов химической технологии / Перм. гос. техн. ун-т. – Пермь, 2006. – 98 с.

7. Слинько М.Г. Моделирование химических реакторов. – Новосибирск: Наука, 1968. – 76 с.

8. Корсаков-Богатков С.М. Химические реакторы как объекты математического моделирования. – М.: Химия, 1967. – 223 с.

9. Безденежных А.А. Математические модели реакторов. – Киев: Техника, 1970. – 380 с.

10. Голованчиков А.Б. Дулькина Н.А. Моделирование структуры потоков в химических реакторах. – Волгоград: Изд-во ВГТУ, 2009. – 240 с.

11. Химическая гидродинамика: справ. пособие / А.М. Кутепов, А.Д. Полянин, З.Д. Запрянов, А.В. Вязьмин, Д.А. Казенин. – М.: Квантум, 1996. – 336 с.

12. Владимиров В.С. Уравнения математической физики. – 2-е изд., стер. – М.: Физматлит, 2003. – 400 с.

13. Владимиров В.С. Сборник задач по уравнениям математической физики. – 4-е изд., стер. – М.: Физматлит, 2003. – 288 с.

14. Владимиров В.С. Обобщенные функции в математической физике. – 2-е изд. – М.: Наука,1979. – 320 с.

15. Соболев С.Л. Некоторые применения функционального анализа в математической физике. – 3-е изд. – М.: Наука, 1988. – 336 с.

## References

1. Kafarov V.V. Metody kibernetiki v khimii i khimicheskoi tekhnologii [Methods of Cybernetics in chemistry and chemical technology]. Moscow, Khimiia, 1976, 463 p.

2. Kafarov V.V., Glebov M.B. Matematicheskoe modelirovanie osnovnykh protsessov khimicheskikh proizvodstv [Mathematical modeling of the basic processes of chemical productions]. Moscow, Vysshaia shkola, 1991, 400 p.

3. Zakgeim A.Iu. Obshchaia khimicheskaia tekhnologiia: vvedenie v modelirovanie khimiko-tekhnologicheskikh protsessov [General chemical technology: an introduction to modeling of chemical processes]. Moscow, Logos, 2009, 304 p.

4. Kutepov A.M., Bondareva T.N., Berengarten M.B. Obshchaia khimicheskaia tekhnologiia [General chemical technology]. Moscow, Akademkniga, 2007, 528 p.

5. Aris R. Analiz protsessov v khimicheskikh reaktorakh [Analysis of processes in chemical reactors]. Moscow, Khimiia, 1967, 328 p.

6. Moshev E.R. Matematicheskoe modelirovanie protsessov i apparatov khimicheskoi tekhnologi [Mathematical modeling of processes and devices of chemical technology]. Perm, Permskii gosudarstvennyi tekhnicheskii universitet, 2006, 98 p.

7. Slin'ko M.G. Modelirovanie khimicheskikh reaktorov [Modeling of chemical reactors].Novosibirsk, Nauka, 1968, 76 p.

8. Korsakov-Bogatkov S.M. Khimicheskie reaktory kak ob"ekty matematicheskogo modelirovaniia [Chemical reactors as objects of mathematical modeling]. Moscow, Khimiia, 1967, 223 p.

9. Bezdenezhnykh A.A. Matematicheskie modeli reaktorov [Mathematical models of reactors]. Kiev, Tehnika, 1970. – 380 p.

10. Golovanchikov A.B. Dul'kina N.A. Modelirovanie struktury potokov v khimicheskikh reaktorakh [Simulation of flow structures in chemical reactors]. Volgograd, VGTU, 2009, 240 p.

11. Kutepov A.M., Polianin A.D., Zaprianov Z.D., Viaz'min A.V., Kazenin D.A. Khimicheskaia gidrodinamika [Chemical Hydrodynamics]. Moscow, Kvantum, 1996, 336 p.

12. Vladimirov V.S. Uravneniia matematicheskoi fiziki [Equations of mathematical physics]. 2nd ed. Moscow, FIZMATLIT, 2003, 400 p.

13. Vladimirov V.S. Sbornik zadach po uravneniiam matematicheskoi fiziki [Problems on equations of mathematical physics]. 4th ed. Moscow, FIZMATLIT, 2003, 288 p.

14. Vladimirov V.S. Obobshchennye funktsii v matematicheskoi fizike [Functions in mathematical physics]. 2nd ed. Moscow, Nauka, 1979, 320 p.

15. Sobolev S.L. Nekotorye primeneniia funktsional'nogo analiza v matematicheskoi fizike [Some applications of functional analysis in mathematical physics]. 3rd ed. Moscow, Nauka, 1988, 336 p.

Получено 04.09.2017

## Об авторах

**Валиуллин Наиль Рафикович** (Пермь, Россия) – студент 4-го курса, кафедра машин и аппаратов производственных процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29; e-mail: nail_valiyllin@mail.ru).

**Хлуденев Александр Григорьевич** (Пермь, Россия) – кандидат технических наук, доцент кафедры машин и аппаратов производственных процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: hludenev46@yandex.ru).

**Иванцов Денис Андреевич** (Пермь, Россия) – студент 3-го курса, кафедра машин и аппаратов производственных процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: ivancov.ongp14@mail.ru).

## About the authors

**Nail R. Valiullin** (Perm, Russian Federation) – Student, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., 614990, Perm, e-mail: nail_valiyllin@mail.ru).

**Alexander G. Hludenev** (Perm, Russian Federation) – Ph.D. in Technical Sciences, Associate professor, Department of Machines and Apparatus of Production Processes of the Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., 614990, Perm, e-mail: hludenev46@yandex.ru).

**Denis A. Ivancov**(Perm, Russian Federation) – Student, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., 614990, Perm, e-mail: ivancov.ongp14@mail.ru).