

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕГЕНЕРАЦИИ ВОЗДУХА В ИЗОЛИРУЮЩЕМ ДЫХАТЕЛЬНОМ АППАРАТЕ**

При нарушении нормальной экологической обстановки и при различных аварийных ситуациях, связанных с выбросом в воздух ядовитых веществ, необходимо применение изолирующих дыхательных аппаратов (ИДА) для защиты органов дыхания. В качестве источников кислорода и поглотителей диоксида углерода в ИДА с химически связанным кислородом используются в основном регенеративные продукты на основе надпероксида калия ( $\text{KO}_2$ ) в форме гранул, блоков, таблеток и т.п. Это вещество имеет высокую реакционную способность к  $\text{CO}_2$  и парам воды выдыхаемого воздуха.

При моделировании работы ИДА целесообразно использовать системный подход и иерархический принцип построения сложных систем, как совокупности подсистем, находящихся между собой в иерархическом подчинении. При таком подходе ИДА рассматривается как многоступенчатая структура, а математическая модель строится на основе предварительного моделирования его составных частей, связываемых специально введенными для этого соотношениями или общими переменными.

Основными уровнями моделирования ИДА являются:

1. Уровень элементарной частицы регенеративного продукта: процесс описывается только химическим взаимодействием реагентов.
2. Уровень малого объема (зерно, гранула, таблетка). Закономерности первого уровня дополняются закономерностями массопереноса.
3. Уровень реактора аппарата. Учитывается характер движения потока.
4. Уровень аппарата. Учитывается конфигурация и взаимная связь рабочих зон ИДА (маска, гофротрубка, реактор, дыхательный мешок).
5. Уровень системы «человек–аппарат» или «искусственные легкие–аппарат». Добавляется учет закономерностей дыхания человека.

Рассмотрим каждый из уровней.

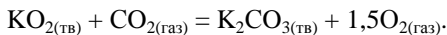
1. Уровень элементарной частицы регенеративного продукта

Физико-химический процесс регенерации воздуха в замкнутом цикле основан на реакции взаимодействия надпероксида калия с водой и диоксидом углерода, в результате чего происходит выделение кислорода и поглощение  $\text{CO}_2$ .

---

\* Работа выполнена под руководством канд. хим. наук Н.Ф. Гладышева, канд. техн. наук, доц. ГОУ ВПО ТГТУ А.В. Майстренко.

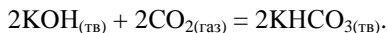
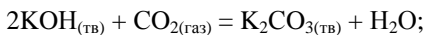
По данным [1 – 3] взаимодействие надпероксида калия с диоксидом углерода в присутствии водяных паров может быть представлено итоговым уравнением



При этом первичным актом в процессе регенерации является взаимодействие с водяным паром по уравнению



Затем идет образование карбоната или бикарбоната калия по уравнениям



Специфика данной топохимической реакции обусловлена малой подвижностью молекул в твердой фазе, поэтому химическая реакция, возникнув в какой-либо точке реакционного пространства, будет распространяться в соседние области исходного реагента. Этим обстоятельством определяются основные особенности топохимических реакций:

- для инициирования процесса необходимо образование критического зародыша новой фазы (конечного продукта) на поверхности или в объеме исходной твердой фазы;

- рост зародышей новой фазы вглубь исходной старой фазы. В изотропной среде граница раздела (фронт химической реакции) с постоянной скоростью  $v$  движется вглубь исходной фазы. Таким образом, в самом начале можно постулировать, что скорость топохимической реакции ( $w$ ) будет пропорциональна площади границы раздела ( $S$ ) и скорости движения фронта реакции ( $v_{\text{фр}}$ ).

Скорость топохимической реакции определяется следующим образом:  $w = -\frac{dm_{\text{исх}}}{dt}$ , где  $m_{\text{исх}}$  – масса исходного реагента. Важным параметром является степень превращения  $\alpha$ :  $\alpha = -\frac{m_0 - m_{\text{исх}}}{m_0}$ . Скорость

реакции можно выразить через степень превращения:  $w = m_0 \frac{d\alpha}{dt}$ .

Основываясь на высокой реакционной способности регенеративного продукта к диоксиду углерода, примем допущение о том, что лимитирующей стадией является химическое превращение на границе раздела старой и новой фаз. Кроме того, предполагается, что радиусы всех зерен одинаковы. В этом случае вся поверхность исходного зерна мгновенно превращается во фронт химической реакции, который со

скоростью  $v_{\text{фр}}$  начинает двигаться к центру зерна. Площадь границы раздела фаз равна  $S(\tau) = N \cdot 4\pi r^2$ , где  $r$  – текущий радиус непрореагировавшей части зародыша.

Зависимость степени превращения  $\alpha$  от величины  $r$  и времени  $\tau$  определяется выражением

$$\alpha = 1 - \frac{m}{m_0} = 1 - \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 \rho}{\frac{4}{3}\pi R^3 \rho} = 1 - \frac{r^3}{R^3}, \quad r = R - v_{\text{фр}} \tau.$$

Окончательное кинетическое уравнение можно представить в виде так называемого уравнения сжимающейся сферы:

$$1 - (1 - \alpha)^{\frac{1}{3}} = \frac{v_{\text{фр}} \tau}{R}.$$

## 2. Уровень малого объема.

Процесс хемосорбции газообразного компонента твердым пористым сорбентом включает в себя внешний массообмен между ядром потока и поверхностью пористого тела, диффузию в пористом материале и, наконец, химическое взаимодействие. В [4 – 6] рассматриваются различные механизмы процесса массопереноса в капиллярно-пористых материалах. Учитывая, что большинство элементарных видов массопереноса имеет градиентный характер, совокупность элементарных актов переноса массы заменяется единым эквивалентным переносом в форме уравнения Фика:  $\vec{j} = -D_3 \text{grad} C$ . Коэффициент эффективной диффузии определяется по формуле  $D_3 = \frac{D_H \varepsilon}{\hat{T}}$ , где  $D_H$  – коэффициент молекулярной диффузии;  $\varepsilon$  – пористость сорбента;  $\hat{T}$  – коэффициент извилистости.

Считая сорбцию  $\text{CO}_2$  независимой от сорбции паров воды и приняв за основу химического взаимодействия реакцию типа бимолекулярной, процесс хемосорбции частицей шарообразной формы можно описать следующим образом:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_3 \left( \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c}{\partial r} \right) - \frac{\partial a}{\partial t}; \quad \frac{\partial a}{\partial t} = kc \left( 1 - \frac{a}{a_0} \right).$$

Начальные условия:  $a(0, r) = 0, \quad c(0, r) = 0.$

Граничные условия:  $c(t, r) = c_0, \quad \left. \frac{dc}{dr} \right|_{r=0} = 0.$

### 3. Уровень реактора аппарата.

Рассмотрим однопараметрическую диффузионную модель. Уравнение массопереноса при вынужденной конвекции с учетом поглощения  $\text{CO}_2$  будет иметь вид:

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} + w(t) \frac{\partial c}{\partial x} = - \frac{\partial a}{\partial t},$$

где  $w(t) = \frac{v(t)}{S}$ ;  $S$  – полное сечение патрона;  $v(t)$  – объемная скорость потока в аппарате.

Граничные условия на левой границе:  $\left. \frac{dc}{dx} \right|_{x=0} = 0$ ; на правой гра-

нице:  $w(t)c_{\text{вх}} = w(t)c(H)$ .

Начальное условие:  $c(0) = 0$ .

Для описания процесса теплопереноса примем следующие допущения:

1) коэффициенты теплопроводности, теплоемкости и теплоотдачи не зависят от температуры:  $c = 922$  Дж/(кг · К),  $\lambda = 0,15$  Вт/(м · К),  $\alpha = 20$  Вт/(м · К);

2) скорость выделения тепла пропорциональна скорости поглощения диоксида углерода. Величина теплового эффекта реакции:  $q = 6,7 \cdot 10^6$  Дж/м<sup>3</sup>;

3) температура твердой и газовой фаз одинакова;

4) температура постоянна вдоль слоя продукта. Вычисляется значение температуры вдоль оси потока (средняя температура по слою).

На основе принятых допущений уравнение, описывающее распределение температуры внутри патрона, учитывает перенос тепла потоком воздуха при вынужденной конвекции и путем теплопроводности в зернистом слое, а также отдачу от стенок патрона и имеет вид:

$$c_{\text{г}} \rho_{\text{г}} \frac{\partial T}{\partial t} + c_{\text{г}} \rho_{\text{г}} \omega \frac{\partial T}{\partial X} = \lambda_{\text{т}} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + q \frac{\partial a}{\partial t} - \frac{2\alpha}{R} (T - T_{\text{сп}}).$$

Граничные условия на стадии выдоха:

$$c_{\text{г}} \rho_{\text{г}} \omega T_{\text{вх}} = c_{\text{г}} \rho_{\text{г}} \omega T(0) - \lambda_{\text{т}} \left. \frac{dT}{dx} \right|_{X=0}, \quad \left. \frac{dT}{dx} \right|_{X=H} = 0.$$

Граничные условия на стадии вдоха:

$$c_{\text{г}} \rho_{\text{г}} \omega T_{\text{вх}} = c_{\text{г}} \rho_{\text{г}} \omega T(H) - k_2 \lambda_{\text{т}} \left. \frac{dT}{dx} \right|_{X=H}, \quad \left. \frac{dT}{dx} \right|_{X=0} = 0.$$

Начальное условие:  $T(0, X) = T_{\text{ср}}$ .

#### 4. Уровень аппарата.

Для нахождения концентрации  $\text{CO}_2$  во вдыхаемой газозвдушной смеси ( $c_{\text{вд}}$ ) и концентрации  $\text{CO}_2$ , поступающего в патрон на стадии выдоха ( $c_{\text{вх}}$ ), необходимо учесть влияние вредного пространства. Вредный объем ИДА включает подмасочное пространство, гофротрубку и свободное от адсорбента пространство в патроне ИДА. Известные концентрации  $\text{CO}_2$ : в выдыхаемом воздухе ( $c_{\text{выд}}$ ); в потоке, поступающем во вредное пространство из патрона на стадии вдоха ( $c_{\text{п}}$ ). Исходя из уравнений материального баланса для компонент газозвдушной смеси, искомые концентрации  $\text{CO}_2$  можно рассчитать по формулам:

$$c_{\text{вх}} = \frac{c_{\text{п}}V_{\text{во}} + c_{\text{выд}}(V_{\text{выд}} - V_{\text{во}})}{V_{\text{выд}}}; \quad c_{\text{вд}} = \frac{c_{\text{выд}}V_{\text{во}} + c_{\text{п}}(V_{\text{выд}} - V_{\text{во}})}{V_{\text{выд}}},$$

где  $V_{\text{во}}$  – объем вредного пространства;  $V_{\text{выд}}$  – объем вдоха-выдоха, а  $c_{\text{п}}$  находится как средняя за период вдоха концентрация на выходе из патрона

$$c_{\text{п}} = \frac{1}{V_{\text{выд}}} \int_{t_l + t_b}^{t_l + 1} c(c_{\text{дм}}, \tau) V(\tau) d\tau.$$

Предполагая, что дыхательный мешок является ячейкой идеального смешения, среднюю за цикл вдоха-выдоха концентрацию  $\text{CO}_2$  в дыхательном мешке можно рассчитать по формуле

$$c_{\text{дм}} = \frac{1}{V_{\text{выд}}} \int_{t_l}^{t_l + t_b} c(c_{\text{вх}}, \tau) V(\tau) d\tau.$$

При расчете температуры во вредном пространстве (на входе и на входе в патрон при выдохе) должна быть учтена теплоотдача от стенок гофротрубки ( $S_1$ ) и от торца патрона.

$$\hat{T}_{\text{вх}} = \frac{T_{\text{выд}}(V_{\text{выд}} - V_{\text{вд}}) + T_{\text{п}}V_{\text{во}}}{V_{\text{выд}}}, \quad \hat{T}_{\text{вд}} = \frac{T_{\text{выд}}V_{\text{во}} + T_{\text{п}}(V_{\text{выд}} - V_{\text{во}})}{V_{\text{выд}}},$$

$$T_{\text{вх}} = \frac{\hat{T}_{\text{вх}} + A_1 T_{\text{ср}}}{1 + A_1}, \quad T_{\text{вд}} = \frac{\hat{T}_{\text{вд}} + A_1 T_{\text{ср}}}{1 + A_1},$$

где  $A_1 = \frac{\alpha_1 S_2 t_b}{c_{\text{г}} \rho_{\text{г}} (V_{\text{выд}} + V_{\text{во}})}$ ;  $S_2 = S_1 + S$ ;  $\alpha_1 = 10 \text{ Вт} \cdot \text{К}/\text{м}^2$ ;  $T_{\text{выд}} = 36,6 \text{ }^\circ\text{C}$ ;

$T_{\text{п}}$  находится как средняя за период вдоха температура на выходе из патрона

$$T_{\text{п}} = \frac{1}{V} \int_{t_l + t_b}^{t_l + 1} T(0, \tau) V(\tau) d\tau.$$

$T_{\text{дм}}$  находится как средняя за период выдоха температура на выходе из патрона с учетом потерь тепла в окружающую среду

$$\hat{T}_{\text{дм}} = \frac{1}{V} \int_{t_l}^{t_l + t_b} T(H, \tau) V(\tau) d\tau.$$

$$T_{\text{дм}} = \frac{\hat{T}_{\text{дм}} + A_2 T_{\text{ср}}}{1 + A_2},$$

где  $A_2 = \frac{\alpha_1 S_3 t_{\text{в}}}{c_1 \rho_{\Gamma} V_{\text{выд}}}$ ;  $S$  – площадь поверхности дыхательного мешка.

Таким образом, получены расчетные формулы для нахождения концентрации  $\text{CO}_2$  и температуры на входе в патрон, а также расчетные формулы для нахождения величин, характеризующих работу аппарата: концентрации  $\text{CO}_2$  на входе и в дыхательном мешке и температуры вдыхаемого воздуха.

5. Уровень «человек – аппарат» или «Установка ИЛ – аппарат».

Сформулируем уравнения, описывающие скорость потока в аппарате и концентрацию  $\text{CO}_2$  на входе в аппарат. При заданных значениях легочной вентиляции ( $Vnt$ ) и частоте дыхания  $N$  на испытательном стенде «Искусственные легкие» (ИЛ) можно рассчитать объем вдоха (выдоха) ( $V_{\text{выд}}$ ) и период вдоха (выдоха) ( $t_{\text{в}}$ ):  $t_{\text{в}} = \frac{1}{2N}$ ,  $V_{\text{выд}} = \frac{Vnt}{N}$ . Объемная скорость потока находится по формуле:  $V(t) = \frac{\pi V_{\text{выд}}}{2t_{\text{в}}} \sin \frac{\pi t}{t_{\text{в}}}$ .

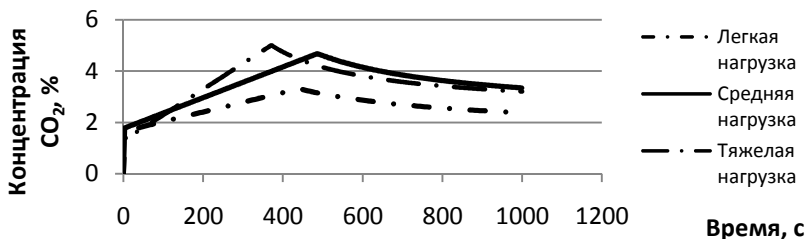
При работе стенда ИЛ в режиме без накопления концентрация диоксида углерода на входе в ИДА постоянна и равна  $c_{\text{выд}} = c_{\text{ч}} = \frac{Q}{Vnt}$ ,

где  $Q$  – нагрузка по  $\text{CO}_2$ , задаваемая режимом работы ИЛ, а в режиме с накоплением концентрация диоксида углерода рассчитывается как сумма концентрации  $\text{CO}_2$  потока, поступившего в ИЛ из ИДА на стадии вдоха, и концентрации  $\text{CO}_2$ , задаваемого установкой ИЛ:  $c_{\text{выд}} = c_{\text{вд}} + c_{\text{ч}}$ .

Предложенная математическая модель использовалась для моделирования процесса регенерации воздуха в изолирующем дыхательном аппарате. Моделирование проводилось при различных нагрузках на аппарат – легкой, средней и тяжелой. В таблице приведены величины легочной вентиляции, концентрации диоксида углерода в выдыхаемом воздухе в зависимости от нагрузки. Считается, что в начальный момент времени вредное пространство не содержит диоксида углерода.

Нагрузка	Объемная скорость ГВС, $\text{дм}^3/\text{мин}$	Частота дыхания, выд./мин	$c_{\text{выд}}$ , % об.
Легкая	12	10	4,15
Средняя	32	20	4,9
Тяжелая	70	20	5

На графике показана зависимость концентрации  $\text{CO}_2$  на входе при различных нагрузках.



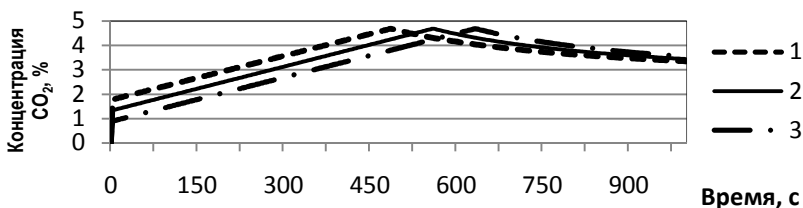
**Рис. 1. График изменения концентрации диоксида углерода во вдыхаемой смеси при различных нагрузках**

Анализируя графики, построенные с помощью предложенных соотношений, можно оценить время защитного действия самоспасателя при различных нагрузках. Согласно ГОСТ Р 53260–2009 защитная способность самоспасателя исчерпывается при увеличении объемной доли диоксида углерода на входе и в дыхательном мешке свыше 3%. Таким образом, время защитного действия ИДА при легкой нагрузке составляет 390 с, а при средней и тяжелой – 200 и 180 с соответственно.

Ряд численных экспериментов позволяет сделать вывод о прямой зависимости величины концентрации  $\text{CO}_2$  на входе от начального вредного объема.

На рисунке 2 представлены зависимости концентрации  $\text{CO}_2$  во вдыхаемой смеси от времени при различных начальных значениях вредного объема.

ИДА с начальным вредным объемом в  $0,3 \text{ дм}^3$  при средней нагрузке обладает временем защитного действия 200 с, в то время как ИДА с начальным вредным объемом в  $0,225 \text{ дм}^3$  и в  $0,15 \text{ дм}^3$  обладают временем защитного действия 290 и 330 с соответственно.



**Рис. 2. График изменения концентрации диоксида углерода во вдыхаемой смеси при средней нагрузке при различных начальных значениях вредного объема:**

1 –  $0,3 \text{ дм}^3$ ; 2 –  $0,225 \text{ дм}^3$ ; 3 –  $0,15 \text{ дм}^3$

Предложенная модель позволяет исследовать эффективность работы ИДА при различных нагрузках и используется в исследованиях конструктивных особенностей регенеративного патрона и в проектировании дыхательного аппарата с увеличенным временем защитного действия.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bovard, R.M. // *Aerospace Med.* – 1960. – V. 31. – P. 407.
2. Мельников А.Х., Фирсова Т.П., Молодина А.Н. // *ЖНХ.* – 1962. – Т. 7, № 6. – С. 1228.
3. Вольнов, И.И. Перекисные соединения щелочных металлов / И.И. Вольнов. – М. : Наука, 1980. – С. 81.
4. Кримштейн, А.А. Исследование процесса взаимодействия углекислого газа и водяного пара с регенеративным надперекисным продуктом применительно к индивидуальным изолирующим средствам защиты : дис. ... канд. хим. наук / А.А. Кримштейн. – Тамбов : ТНИХИ, 1969. – 275 с.
5. Исаченко, В.П. Теплопередача / В.П. Исаченко, В.А. Осипова, А.С. Сукомел. – М. : Энергоиздат, 1981. – 416 с.
6. Рудобашта, С.П. Диффузия в химико-технологических процессах / С.П. Рудобашта, Э.М. Карташов. – М. : Химия, 1993. – 208 с.