

AUTOKATALITIKUS FRONTREAKCIÓK KONVEKTÍV INSTABILITÁSÁNAK NUMERIKUS VIZSGÁLATA

BÁBA PÉTER, HORVÁTH DEZSŐ, TÓTH ÁGOTA

A sűrűség- és a felületi feszültségkülönbség következtében kialakuló konvekció hatását tanulmányozzuk a jódát-arzénessav autokatalitikus frontreakcióban. Bemutatjuk, hogy a felületi feszültség változása tovább módosítja a kizárólag sűrűségkülönbség miatt torzult front alakját és terjedési sebességét. A reakció-diffúzió-advekcio egyenletek numerikus megoldása révén kapott eredményeink jó egyezést mutatnak a kísérletekkel.

1. Bevezetés

A műszaki- és a természettudományok, azon belül is a kémiai tudományok, egyre népszerűbb eszköze a numerikus áramlástani modellalkotás. A kémiai technológiában a különböző ipari folyamatokban, például a keveréses tankreaktorok optimalizálásában, kiemelkedő szerep jut ezen modelleknek. A kémiai reakciók lejátszódása során a reaktánsoktól eltérő fizikai tulajdonságokkal rendelkező termék keletkezik. Folyadékfázisban ezért a kémiai összetétel változása miatt a különböző fizikai paraméterekben kialakuló gradiensek konvektív áramlásokat indukálhatnak, melyeknek jelentős hatása lehet magára a reakcióra is.

Munkánkban a konvekciónak az autokatalitikus frontreakciókra gyakorolt hatását mutatjuk be. Ezen reakciók jellemzője, hogy a reakcióban képződő termék mennyisége befolyásolja a keletkezésének sebességét. Amennyiben a reakciót egy nem kevert edényben játszátjuk le, akkor az átalakulás egy vékony zóna mentén játszódik le jelentős sebességgel. A határvonalat reakciófrontnak hívjuk, amely addig halad előre a folyadékfázisban, amíg rendelkezésre állnak reaktánsok. A front terjedési sebességét a reakció különböző transzportfolyamatokkal történő kölcsönhatása szabja meg, amit a legegyszerűbb esetben (diffúzió) az autokatalitikus komponensek diffúzióállandója szabályoz. Homogén közegben a front állandó sebességgel halad és állandó alakkal rendelkezik, miközben a reakciófront mentén – a front két oldalának eltérő fizikai tulajdonsága miatt – megközelítőleg állandó gradiens áll fenn, amely az egész közeg mozgását is képes lehetővé tenni, torzítva az állandó frontalakot és módosítva a front terjedési sebességét is.

Folyadékfázisú reakciókban a sűrűség az egyik olyan fizikai paraméter, amelynek változása áramlást kelthet. A folyamatok során változhat a sűrűség az anyagi minőség,

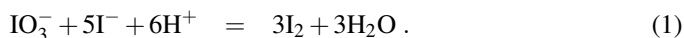
illetve a kémiai összetétel változása vagy a reakcióban keletkező hő miatt [1]. A folyadékáramlás kialakulása mindig a front terjedési irányától és a sűrűségváltozás előjelétől függ. Egy függőleges csőben alulról indított síkfront esetén a sűrűség reakció során történő csökkenése instabil rétegződés kialakulásához vezet, és a felhajtóerő miatt egy függőleges irányú áramlás alakul ki, egy előrehaladó és lemaradó szegmensekkel jellemezhető cellás szerkezetet eredményezve. A függőlegesen lefelé haladó front azonban végig stabil rétegződést hoz létre, azaz a kezdetben síkfront alakja nem változik. Ennek az ellenkezője igaz abban az esetben, ha a reakció során a sűrűségváltozás pozitív, tehát a termékoldat sűrűsége növekszik. Továbbá vízszintes csőben a cső egyik oldalán indított front a sűrűséggradiens előjelétől függetlenül minden esetben instabil rétegződést alakít ki, amelynek hatására olyan konvektív áramlás indukálódik, ami egy vízszintesen terjedő, aszimmetrikus alakzatot hoz létre. A fenti, kizárólag sűrűségkülönbség miatt fellépő stabilitásvesztést Rayleigh–Taylor-instabilitásnak nevezik.

Nyitott folyadékfelszín alkalmazásakor a felületi feszültség változása is indukálhat folyadékáramlást. A sűrűségváltozáshoz hasonlóan a vízszintesen terjedő front mentén kialakuló éles gradiens megszüntetésére irányuló erők ébrednek. A határfelületen azonban – ellentétben a sűrűségkülönbséggel – sosem létezik stabil rétegződés, az instabilitást csak az azt létrehozó intenzív mennyiségben kialakuló homogén eloszlás szünteti meg. Ebben az esetben a folyadék mindig a kisebb felületi feszültséggel rendelkező rész felől a nagyobb felületi feszültséggel rendelkező rész felé áramlik, ami mintegy magára húzza a környezetében elhelyezkedő folyadékrészt. Ezen fenti jelenség a Marangoni-instabilitás.

Mivel a jódát–arzénessav reakcióban mind a sűrűség [2, 3], mind a felületi feszültség változhat [4, 5], a reakció térbeli lejtáztatásakor mindkét instabilitás egyszerre tanulmányozható. Munkánkban először a vizsgált reakciót, majd az alkalmazott kísérleti rendszert mutatjuk be. A 3. fejezetben a rendszer szimulációjára épített modellt, a 4.-ben pedig a modell egyenleteinek numerikus megoldására alkalmazott algoritmust ismertetjük. Végül a szimuláció és a kísérletek során kapott eredményeket értékeljük és hasonlítjuk össze.

2. A jódát–arzénessav reakció

Jelen tanulmányban a jodátiókok és az arzénessav között kialakuló autokatalitikus frontreakció során indukált konvektív áramlások szimulációjára épített numerikus modellt mutatjuk be. A reakció két fő lépésre bontható. Az elsőben, a Dushman-reakcióban [6], a jódát- és a jodidionok savas közegbeli kölcsönhatása során jód keletkezik

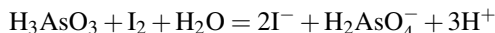


A reakció empirikus sebességi egyenlete

$$r_1 = (k_1 + k_2[\text{I}^-])[\text{I}^-][\text{IO}_3^-][\text{H}^+]^2 ,$$

ahol $k_1 = 4,5 \cdot 10^3 \text{ dm}^9/(\text{mol}^3\text{s})$ és $k_2 = 4,5 \cdot 10^8 \text{ dm}^{12}/(\text{mol}^4\text{s})$. A keletkező jód egy

gyors reakcióban (Roebuck-reakció) [7] oxidálja az arzénessavat arzénsavvá

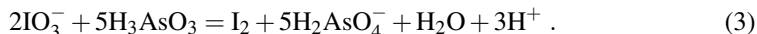


az $r_2 = k_3 [\text{I}_2] [\text{H}_3\text{AsO}_3] / ([\text{I}^-] [\text{H}^+])$ empirikus sebességi egyenlet szerint, ahol $k_3 = 3,2 \cdot 10^{-2} \text{ mol}/(\text{dm}^3 \text{ s})$. A két reakciólépés közül az (1) egyenlet szerinti Dushman-reakció a sebességmeghatározó lépés.

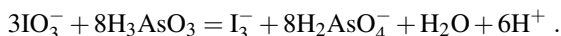
A reaktánsok kezdeti koncentrációjának arányától ($R = [\text{H}_3\text{AsO}_3]_0 / [\text{IO}_3^-]_0$) függően a termékelegy összetétele is más lesz [8]. Amennyiben az arzénessav van sztöchiometriai feleslegben, azaz $R > 3$, úgy a jód csak átmeneti termék és az összes jódation gyakorlatilag jodidionná redukálódik



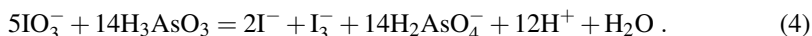
Jodátfelesleg esetén ($R < 2,5$) az arzénessav teljes mennyisége arzénsavvá oxidálódik, míg a jódation jóddá redukálódik



Ezen két kezdeti összetétel között a termékoldat minden esetben tartalmaz jódot és jodidionokat. Az $R = 8/3$ összetételnél [9] a fő jódtartalmú termék a trijodidion a $\text{I}_2 + \text{I}^- \rightleftharpoons \text{I}_3^-$ egyensúly alapján



A kísérletek során az általunk alkalmazott kezdeti összetételnél ($R = 2,8$) a nettó reakciót a (2) és a (3) nettó egyenletek lineáris kombinációjaként lehet felírni és a termék oldatrész arzénsavat, trijodidiont, és hidrogéniont tartalmaz



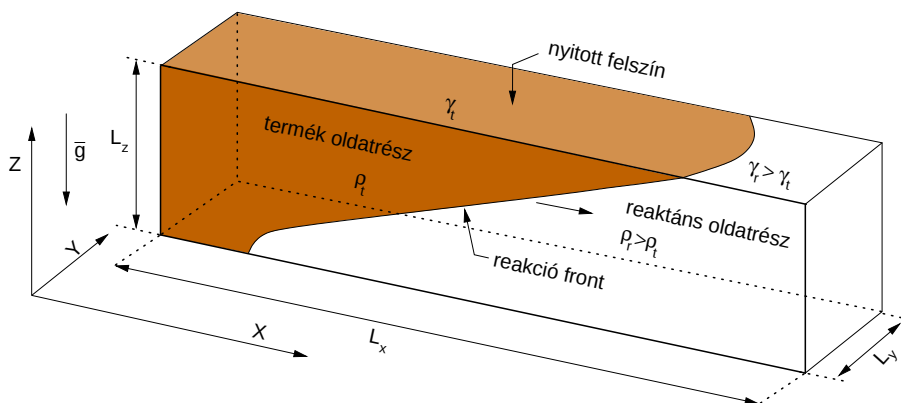
A trijodidion disszociációja során jód molekula és jodidion keletkezik. A termékben megjelenő jodid- és hidrogénionok a reakció autokatalitikus komponensei, ezért vizes oldatbeli diffúziójuk határozza meg a front haladási sebességét.

A reakció lejárásdátuma során az oldat sűrűsége csökken, és mivel a jód felületaktív molekula, az oldatban a felületi feszültség is hasonló változást mutat [4]. A jodát-arzénessav rendszerben a reakcióból származó hő elhanyagolható, tehát mind a sűrűségváltozás, mind a felületi feszültségben tapasztalható különbségek az oldat összetételében bekövetkező változás eredményei.

3. Kísérleti rendszer

A kísérletek során a reaktánsoldat $12,9 \text{ mmol}/\text{dm}^3$ koncentrációjú kálium-jodát oldatból és $36,1 \text{ mmol}/\text{dm}^3$ koncentrációjú arzénessav oldatból állt, ami az $R = 2,8$ aránynak

felel meg. Ezt az oldatot áramoltattuk két párhuzamos plexilap közé, mely lapokat szintén plexiből készült távtartó lemez tartott állandó távolságra egymástól. Az így kialakított reakciócella hossza 50 cm, magassága a nyitott kísérletek esetén 1,2 cm, míg a zárt elrendezés esetén 0,2 cm. A cella szélességét 0,5 cm és 1,0 cm között változtattuk. Nyitott elrendezés során két további plexilap került beépítésre a cella falai mentén 0,2 cm-es magasságig, melyek a folyadékfelszín görbületmentességét biztosították. A front inicializálása két függőleges elrendezésű, párhuzamos, 0,25 mm átmérőjű platina elektróddal történt. Az elektródákra 3,5 V nagyságú feszültséget kapcsolva az anód felületén hidrogénionok keletkeznek, melyek elindítják a reakciófrontot (lásd az 1. ábrát).



1. ábra. A nyitott cellában haladó reakciófront sematikus ábrázolása, ahol ρ_r a reaktánsok sűrűsége, ρ_t a termék sűrűsége, γ_r a reaktánsok felületi feszültsége, γ_t pedig a termék oldatrész felületi feszültségét jelöli.

A termékben jelenlévő jód sötét színe kiváló indikátora a front aktuális helyzetének és alakjának. A front tér- és időbeli viselkedésének leírásához 3–5 másodperces intervallumokkal fényképfelvételt készítettünk. A készült felvételek szürkességi skála értékeinek hosszanti, a front terjedési irányába eső inflexiós pontjai adták a front aktuális pozícióját. A front terjedési sebességét az átlagos frontpozíció időbeli változásából nyertük a frontpozíció-idő görbe lineáris szakaszára illesztett egyenes meredekségeként.

4. Az alkalmazott modell

A rendszer numerikus szimulációja során az alábbi egyenletek kerülnek megoldásra. Elsőként a komponensmérleg-egyenlet, amely tartalmazza a vizsgált i . komponens – jodidion, jodátion, valamint a hidrogénion – koncentrációjának az advekciónál, diffúzió-

ból és a lejátszódó reakciókból származó változását

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \vec{u} \nabla c_i = D_i \nabla^2 c_i + v_i r_1 ,$$

ahol v_i az i . komponens sztöchiometriai együtthatója a (4) egyenletben. A jodidion és a jódmolekula diffúzóállandójának $D_{I^-} = D_{I_2} = 2 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, míg a hidrogénionénak $D_{H^+} = 4 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ értékeket választjuk [10]. A komponensek advekciónak számítása a (6) Navier–Stokes-egyenletből kapott sebességértékek alapján történik. Az egyenlet megoldása során a koncentrációmezőre zéró-gradiens típusú peremfeltételt alkalmazunk.

A közegmozgást az inkompresszibilis kontinuitási és a momentumegyenlet a

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = \frac{\eta}{\rho_0} \nabla^2 \vec{u} - \frac{\nabla p}{\rho_0} + \frac{\rho}{\rho_0} \vec{g} \quad (6)$$

alakban írja le, ahol u a folyadékáramlás sebessége, η a dinamikus viszkozitás, $\rho = \rho_0 + \rho_1 c_1$ az oldat sűrűsége, ρ_0 a reaktánsoldat kezdeti sűrűsége, p pedig a nyomás. Az (5) és a (6) egyenletekben alkalmazzuk a Boussinesq-közelítést, amelynek értelmében a folyadék sűrűségét a gravitációs tag kivételével állandónak tekintjük, mivel a kísérleti rendszerünkben kis mértékű az összetétel miatti sűrűségváltozás.

A folyadék tapad a falhoz, így a sebességmező esetén minden vektor komponensére állandó (nulla) értékű peremfeltételt alkalmazunk a szabad felszín esetét kivéve. A Marangoni-hatás szimulációjához a modellezett térrész felső felszínének sebességértékeire a

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial z} = \left(\frac{d\gamma}{dc_1} \right) \nabla c_1 ,$$

összefüggést használjuk, ahol c_1 az autokatalizátor jodidion koncentrációja, mivel a reakcióban kis mennyiségben keletkező felületaktív jód koncentrációja a képződött jodidion koncentrációjával arányosnak tekinthető [11].

A nyomásmező számítása során kizárólag az oldat összetételének változásából adódó sűrűségváltozással számoltunk. Ennek segítségével a gravitációs tagban a felhajtóerőből származó közegmozgást tudjuk meghatározni. A nyomásértékekre peremfeltételként a hidrosztatikai nyomásnak megfelelő értékeket alkalmaztuk a

$$\vec{n} \cdot \nabla p = \rho(\vec{n} \cdot \vec{g})$$

egyenlet szerint, ahol $\vec{n}$ a peremhez tartozó normálvektor.

5. A reakció-diffúzió-advekciónak modell numerikus megoldása

A két instabilitás hatásának együttes modellezéséhez a nyílt forráskóddal rendelkező OpenFOAM programcsomagot [12] használjuk, amely véges térfogat térbeli diszkretizációt alkalmaz. A programcsomaghoz több megoldó algoritmus érhető el attól függően,

hogy milyen hidrodinamikai problémát szeretnénk megoldani. Az általunk készített megoldó rutin a PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators) [13] és a SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) módszereket ötvöző, PIMPLE nevet viselő és az inkompresszibilis fluidumok tranzeins áramlásának modellezésére alkalmazható modulon alapszik, és egyben tartalmazza a komponensmérleg-egyenlet megoldásának implicit Euler-módszerét.

Az algoritmus a Navier–Stokes-egyenlet megoldása során operátor-szétválasztással előbb egy semi-implicit prediktor lépésben, majd több korrekter lépésben közelíti a nyomás (p) és a sebesség ($\vec{u}$) értékeit. A könnyebb kezelhetőség érdekében az egyenletekben a nyomást a hidrosztatikai nyomással korrigáljuk, bevezetve a

$$p_{rgh} = \frac{p}{\rho_0} - \rho' \vec{g} \cdot \vec{r}$$

egyenlettel definiált p_{rgh} -t, amellyel a p nyomást fejezzük ki a (6) egyenletben, ahol $\rho' = \rho/\rho_0$. Ennek következtében a nyomásra vonatkozó peremfeltétel is az

$$\vec{n} \cdot \nabla p_{rgh} = -(\vec{n} \cdot \nabla \rho')(\vec{g} \cdot \vec{r})$$

alakra módosul. Az eljárásban ezen peremfeltételek megfelelő beállítása után a (6) egyenlet diszkretizálásával előálló

$$M \cdot u_i = -\nabla p_{rgh} - \vec{g} \cdot \vec{r} \nabla \rho'$$

algebrai egyenletrendszer oldjuk meg semi-implicit módszerrel úgy, hogy az M mátrixban csak a főátlóban lévő sebesség értékeket tekintjük ismeretlennek, a többi explicit módon fejezzük ki az

$$A \cdot u_i^* - H(u_i) = -\nabla p_{rgh} - (\vec{g} \cdot \vec{r}) \nabla \rho' \quad (7)$$

egyenletnek megfelelően, ahol A az M mátrix diagonális elemek együtthatóit, a H pedig az off-diagonális elemeket tartalmazó mátrix. Mivel az A mátrix diagonális, annak egyszerű invertálása miatt u_i^* számítható a (7) egyenletből az

$$u_i^* = A^{-1} (H(u_i) - \nabla p_{rgh} - (\vec{g} \cdot \vec{r}) \nabla \rho') \quad (8)$$

értelmében.

Az így kapott sebességmezőből (u_i^*) a korrekter lépésben először a nyomásmezőt számíthatjuk ki, figyelembe véve az (5) egyenletben szereplő kontinuitási kritériumot, amelynek értelmében a (8) egyenlet divergenciájának el kell tűnnie a korrigált sebességmezőre, azaz

$$\nabla \cdot (A^{-1} \cdot \nabla p_{rgh}^*) = \nabla [A^{-1} (H(u_i^*) - (\vec{g} \cdot \vec{r}) \nabla \rho')] \quad (9)$$

A korrigált nyomásmezőből már a korrigált sebességmező is egyből számítható az

$$u_i^{**} = A^{-1} (H(u_i^*) - \nabla p_{rgh}^* - (\vec{g} \cdot \vec{r}) \nabla \rho') \quad (10)$$

felhasználásával. A (9) és a (10) egyenletekből álló korrektor lépés tetszőleges számban megismételhető, de esetünkben egy ismétlés is már kellően pontos sebesség- és nyomás-értéket szolgáltat, azaz a

$$\nabla \cdot (A^{-1} \cdot \nabla p_{rgh}^{**}) = \nabla [A^{-1} (H(u_i^{**}) - (\vec{g} \cdot \vec{r}) \nabla \rho')] \quad (11)$$

$$u_i^{***} = A^{-1} (H(u_i^{**}) - \nabla p_{rgh}^{**} - (\vec{g} \cdot \vec{r}) \nabla \rho') \quad (12)$$

egyenletek megoldásai tekinthetők az iterációs lépéshez tartozó új értékeknek ($\vec{u}^{***} \approx \vec{u}^{n+1}$ és $p^{**} \approx p^{n+1}$).

A számításokat egy $350 \times 30 \times 75$ téglatest elemből álló háromdimenziós tömbben végezzük, amely egy $15 \text{ mm} \times 5\text{--}10 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ -es fizikai térrészt reprezentál. A megoldó rutin az idő szerinti deriváltakat implicit Euler-módszerrel fejezi ki $5 \cdot 10^{-5}$ s hosszúságú időlépcsőkre. A gradienseket és a Laplace-operátorokat lineáris interpolációt alkalmazó, a divergenciákat pedig upwind [14] sémákkal közelítjük. A kapott algebrai egyenletek megoldása prekondicionált bikonjugált gradiens módszerrel történik, ahol a prekondicionáló mátrixot nem teljes LU-felbontással [14] határozzuk meg 10^{-12} nagyságú hibahatárral a sebesség-, a nyomás- és a koncentrációértékekre egyformán.

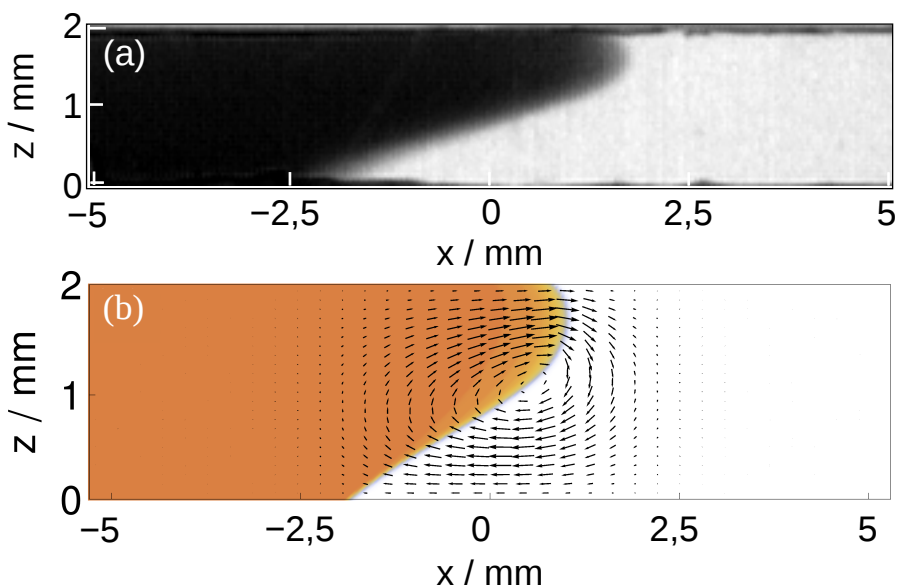
6. Eredmények

A különböző gradiensek által keltett folyadékáramlások hatására a frontalak torzulásából tudunk következtetni. Kísérleteinkben a termék oldatrészben jelenlévő jódtól sötét színe rajzolja ki, míg számításaink során a komponensegyenletek megoldásából kapott jódtól koncentrációeloszlása adja meg adott időpillanatban a front alakját.

A zárt folyadékfelszínnel végzett kísérletek a kizárólag a sűrűséggradiens által keltett konvekció vizsgálatára adnak lehetőséget, míg a nyitott felszínnel rendelkező cellánál a Rayleigh-Taylor és a felületi feszültség különbségéből adódó Marangoni-instabilitás együttes hatása vizsgálható.

Az első esetben a függőleges orientációjú iniciálást követően egy átmeneti idő után $5,4 \text{ mm/min}$ sebességgel terjedő stabil frontalak jön létre, és a kezdetben függőleges front a terjedés irányába dől, ugyanis a reakció során bekövetkező sűrűségcsökkenés miatt felhajtóerő indukálódik, így a kisebb sűrűségű termék oldatrész a reaktánsokat tartalmazó oldatrész fölé igyekszik elhelyezkedni, míg a reaktánsok a termékelegy alá csúsznak. Mindez egy balról jobbra haladó reakciófrontnál az óramutató járásával megegyező konvekciós gyűrű keletkezését támasztja alá. A front haladása miatt enyhén aszimmetrikus alakzat kissé torzul a felső fal lassító hatása miatt, és a zárt cellában (ld. a 2. (a) ábrát) a front csúcsa a cella felső fala alatt körülbelül $0,25 \text{ mm}$ -rel helyezkedik el. A 2. (b) ábrán szemléltetett modelleredmények a kialakuló frontalakok és a front terjedési sebességének (25 mm/min) tekintetében nagyságrendi egyezést mutatnak a kísérleti úton meghatározott értékekkel.

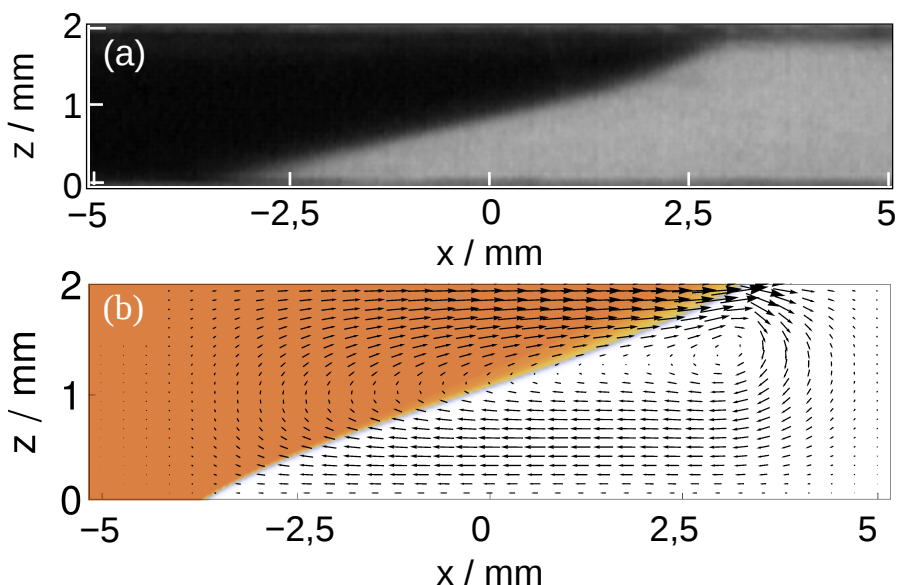
A 3. ábrán látható nyitott felszín esetén a felületi feszültségbeli változás a frontalak további torzulását eredményezi a folyadék felszínén, közvetlenül a folyadék-gáz határ-



2. ábra. A zárt cellában kialakuló állandó frontalak (a) és a szimuláció eredményeként kapott frontalak a sebességmezővel (b) az 5 mm széles cella esetén. A sötét szín a jódot tartalmazó termék oldatrészt jelöli, míg a világos terület a friss reaktánsokat tartalmazóét.

felületen. A termék oldatrész felületi feszültsége lecsökken a benne található jód miatt, és így azt a nagyobb felületi feszültséggel rendelkező reaktáns oldatrész magára húzza. A felszínen tehát egy további erő ébred, amely további folyadékmozgást indukál hozzáadódva az egyébként is jelen lévő felhajtóerőből eredő konvekcióhoz. Ezzel összhangban a nyílt felszínnel rendelkező cellában a front kétszer gyorsabban terjed az 5 mm széles cellában, mint zárt elrendezés esetén.

Összefoglalásként elmondható, hogy az általunk létrehozott modellel sikerült rekonstruálni a kísérleti eredményeinket. A folyadékáramlás numerikus leírására szolgáló, komponensmérlegben alapuló modellbe építettük be az autokatalitikus reakció kinetikáját leíró egyenleteinket. Numerikus szimulációval a sűrűségkülönbségből adódó Rayleigh–Taylor-instabilitás mellett, a kizárólag nyitott elrendezés esetén, a felületi feszültség gradiense miatti Marangoni-instabilitás hatását is sikerült kimutatni. Az így megalkotott modell és a használt algoritmus segítségével, megfelelő pontossággal és viszonylag kis számítási igénnyel végezhető el hasonló reakció–diffúzió–advekcio rendszerek szimulációja.



3. ábra. A nyitott cellában kialakuló állandó frontalak (a) és a szimuláció eredményeként kapott frontalak a sebességmezővel (b) az 5 mm széles cella esetén. A sötét szín a jódot tartalmazó termék oldatrészt jelöli, míg a világos terület a friss reaktánsokat tartalmazóét.

7. Köszönetnyilvánítás

Ezen közleményt Tóth Jánosnak dedikáljuk 70. születésnapja alkalmából, és köszönjük a nemlineáris dinamika területén végzett több évtizedes munkáját. Továbbá köszönetet mondunk az Európai Űrügynökségnek a pénzügyi támogatásért, illetve Dr. Pópity-Tóth Évának és Dr. Pótári Gábornak a munkában való közreműködésért.

Hivatkozások

- [1] I. R. EPSTEIN AND J. A. POJMAN: *An Introduction to Nonlinear Dynamics: Oscillations, Waves, Patterns, and Chaos*, Oxford University Press, Oxford (1998).
- [2] J. MASERE, D. A. VASQUEZ, B. F. EDWARDS, J. W. WILDER, AND K. SHOWALTER: *J. Phys. Chem.* **98**, 6505 (1994).
- [3] A. DE WIT: *Phys. Rev. Lett.* **87**, 054502 (2001).

- [4] É. PÓPITY-TÓTH, G. PÓTÁRI, I. ERDŐS, D. HORVÁTH, AND Á. TÓTH: J. Chem. Phys. **141**, 044719 (2014).
- [5] L. RONGY AND A. DE WIT: J. Chem. Phys. **124**, 164705 (2006).
- [6] S. DUSHMAN: J. Phys. Chem. **8**, 453 (1904).
- [7] J. R. ROEBUCK: J. Phys. Chem. **6**, 365 (1902).
- [8] N. GANAPATHISUBRAMANIAN AND K. SHOWALTER: J. Phys. Chem. **85**, 2118 (1985).
- [9] É. PÓPITY-TÓTH, V. PIMIENTA, D. HORVÁTH, AND Á. TÓTH: J. Chem. Phys. **139**, 164707 (2013).
- [10] D. HORVÁTH AND Á. TÓTH: J. Chem. Phys. **108**, 1447 (1998).
- [11] L. RONGY, A. DE WIT, AND G. M. HOMSY: Phys. Fluids **20**, 072103 (2008).
- [12] H. G. WELLER, G. TABOR, H. JASAK, AND C. FUREBY: Computers in Phys. **12**, 620 (1998).
- [13] R. I. ISSA: J. Comp. Phys. **62**, 40 (1985).
- [14] J. KARÁTSÓN, R. HORVÁTH, F. IZSÁK: *Parciális differenciálegyenletek numerikus módszerei számítógépes alkalmazásokkal*, Digitális Tankönyvtár (2013).

BÁBA PÉTER

Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1
baba.peter@chem.u-szeged.hu

HORVÁTH DEZSŐ

Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék
6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1
horvathd@chem.u-szeged.hu

TÓTH ÁGOTA

Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék
6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1
atoth@chem.u-szeged.hu

NUMERICAL STUDY OF CONVECTIVE INSTABILITY ARISING IN AUTOCATALYTIC FRONT REACTIONS

PÉTER BÁBA, DEZSŐ HORVÁTH, ÁGOTA TÓTH

We have investigated the density and surface tension driven convection in the autocatalytic reaction of iodate and arsenous acid. We have shown that the change in surface tension will further modify the front shape and velocity as the result of bouyancy. The numerical results of reaction-diffusion-advection equations are in good agreement with the experimental ones.