

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИБРИДНЫХ ВОЛН ГОРЕНИЯ

В. И. ДРОБЫШЕВИЧ, Л. В. ЯУШЕВА

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
Новосибирск, Россия*
e-mail: drob@labchem.sscs.ru

В статье описана математическая модель для моделирования динамических процессов в гибридной волне горения. Разработан метод построения разностной схемы с различными временными шагами в подобластях. Проведены расчеты для различных режимов гибридных волн горения газов.

В данной работе предложена модель и алгоритм для исследования процесса формирования и распространения гибридной волны горения в неподвижном слое катализатора и проведены исследования таких процессов.

Под гибридной волной горения понимается процесс с гомогенной зоной реакции в газе, продуваемом сквозь неподвижный слой катализатора, в котором также имеет место гетерогенная химическая реакция.

Характерной чертой таких процессов является существование движущегося фронта с большими градиентами. Для правильного описания подобного фронта необходимо построение алгоритма с использованием переменной временной сетки в различных областях интегрирования.

Подобные алгоритмы предложены и обоснованы для одномерного параболического уравнения [1, 2]. Для многомерного параболического уравнения построение и обоснование изложено в работах [3, 4]. Обобщение алгоритмов для квазилинейных уравнений, когда коэффициенты уравнения зависят от решения, сделано в работе [4].

Процесс фильтрационного горения газов характеризуется аномально высокими температурами в узкой зоне газо-фазного горения [5]. Такой же характер имеет процесс гибридного горения, когда каталитическая реакция на поверхности частицы не доминирует над газо-фазной реакцией [6].

Для численных расчетов подобных режимов разработан специальный алгоритм с малыми пространственно-временными шагами в зоне газо-фазного горения [2-4].

При описании математической модели учитываются конвективный поток в газе, теплопроводность по каркасу слоя частиц и обмен по теплу и массе между газом и катализатором, при этом в слое катализатора наряду с гомогенной реакцией в потоке газа имеет место гетерогенная реакция на поверхности пористой частицы катализатора. Кроме того, мы не учитываем в потоке процессы теплопроводности и диффузии.

В аппарате с неподвижным слоем в самом начале слоя устанавливается течение газа с постоянной скоростью. Поэтому будем предполагать, что расход газа есть величина постоянная, т. е. $G = \rho u$ — константа.

Рассмотрим математическую модель процесса формирования гибридной волны.

Температурные поля описываются системой уравнений:

на катализаторе:

$$(1 - \varepsilon_0)(c_p \rho)_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \lambda_s \frac{\partial^2 T_s}{\partial z^2} + \alpha_{fc} (T_f - T_s) + (1 - \varepsilon_0) Q_c W_c(T_s, X_s) \quad (1)$$

в потоке:

$$\varepsilon_0 (c_p \rho)_f \frac{\partial T_f}{\partial t} = -u (c_p \rho)_f \frac{\partial T_f}{\partial z} + \alpha_{fs} (T_s - T_f) + \varepsilon_0 Q_f W_f(T_f, X_f) \quad (2)$$

граничные условия

$$z = 0 : T_f = T_{f0}, \quad \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial z} = 0,$$

$$z = H : \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial z} = 0,$$

концентрационные поля описываются системой уравнений:

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 01-01-00819).

в потоке:

$$\varepsilon_0 \frac{\partial X_f}{\partial t} = -u \frac{\partial X_f}{\partial z} + \beta_{fs} (X_s - X_f) + \varepsilon_0 W_f (T_f, X_f) \quad (3)$$

на катализаторе

$$(1 - \varepsilon_0) \frac{\partial X_s}{\partial t} = +\beta_{fs} (X_f - X_s) + (1 - \varepsilon_0) W_s (T_s, X_s) \quad (4)$$

граничные условия

$$z = 0 : X_f = X_{f0},$$

В данной работе в правой части использовалась реакция первого порядка

$$W_i = k_{0i} \exp \left(-\frac{E_i}{R} \left(\frac{1}{T_i} - \frac{1}{T_{0i}} \right) \right) X_i, \quad i = f, s,$$

при этом опорная температура выбирается так, чтобы k_{0i} не сильно отличалась от 1. Однако предлагаемый алгоритм элементарно обобщается на несколько произвольных реакций.

В силу того, что зона горения на несколько порядков меньше длины аппарата, необходимость правильного описания структуры волны автоматически приводит к требованию малого временного шага в зоне горения. В тоже время, вне зоны горения можно применять более крупные шаги.

В силу этого при построении разностного аналога на основе интегро-интерполяционного метода используются различные временные шаги в различных областях интегрирования [6].

В силу нелинейности систем разностных уравнений организуется итерационный процесс с выбором глобального временного шага в зависимости от сходимости итерационного процесса.

Для задач с нелинейной правой частью имеет место сходимость при достаточно малом τ , ограниченного сверху константой, зависящей от производной правой части по решению. От аналогичной константы зависит сходимость итерационного процесса по этой нелинейности.

Таким образом, условия сходимости итерационного процесса и сходимости решения разностной задачи к решению дифференциальной совпадают, что позволяет эффективно регулировать временной шаг в процессе решения.

Так как производная правой части по решению во времени меняется довольно значительно, в данной работе применяется алгоритм автоматического регулирования основного временного шага τ . Суть его состоит в следующем: если число итераций $N_k > N_{\max}$, выполнение итераций прекращалось, временной шаг τ уменьшался, и расчет повторялся; при числе итераций $N_k < N_{\min}$ для нахождения нового решения временной шаг τ увеличивался; при числе итераций в интервале $[N_{\min}, N_{\max}]$ шаг оставался постоянным.

Численные эксперименты проводились для двух режимов. Мы исследовали режим формирования волны горения и режим распространения сформировавшейся волны навстречу потоку газа.

При формировании волны горения время выхода на режим движения волны существенно зависит от начального распределения температуры. Из аналитических приближений [5, 6] известна температура на выходе из аппарата. Если в качестве начального распределения взять размазанную по нескольким точкам сетки ступеньку, где минимальная температура равна входной, а максимальная выходной, то время выхода на режим заметно уменьшается.

На рис. 1 и 2 приведены профили температур потока и катализатора при следующих параметрах системы: скорость потока = 0.2 м/с, длина аппарата = 0.35 м.

На первом рисунке реакция присутствует только в газовой фазе и

$$k_f = 1.0, \quad E_f = 36000, \quad T_{of} = 450 \text{ }^\circ\text{K}, \quad \Delta T_{ad} = 1000.$$

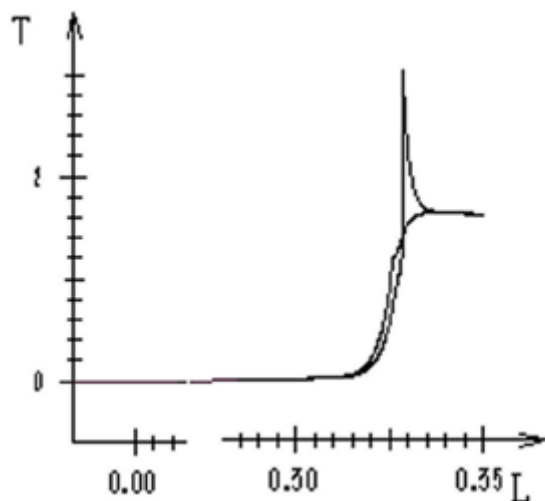
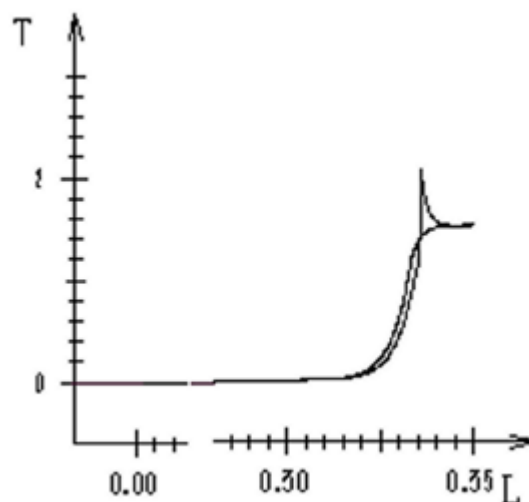
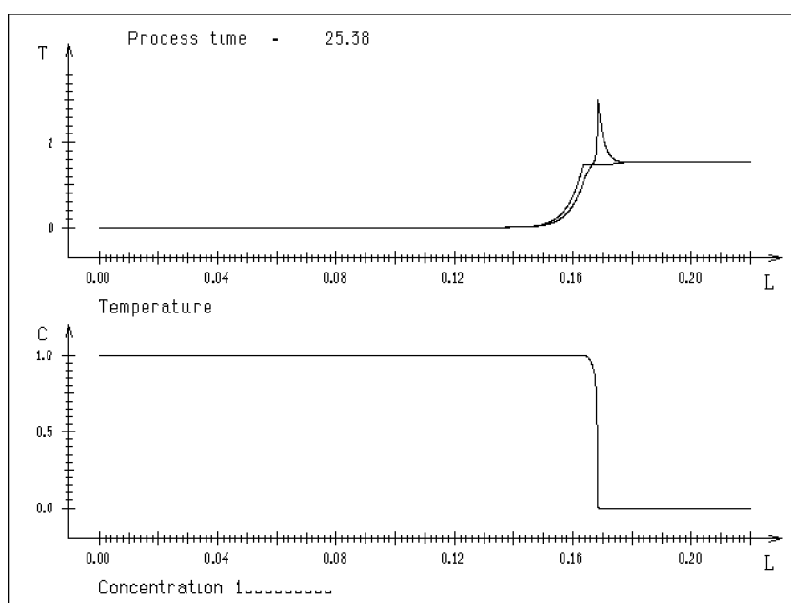
На рисунке представлены профили после режима формирования волны. Максимальная температура = 1503 С, выходная = 820 С, ширина зоны горения = 0.0008 м. Ширина зоны горения определялась по точкам, в которых концентрация равнялась 0.01 и 0.99 соответственно.

На втором графике помимо реакции в потоке присутствует реакция на катализаторе

$$k_s = 10.0, \quad E_s = 20000, \quad T_{of} = 450 \text{ }^\circ\text{K}, \quad \Delta T_{ad} = 1000.$$

При этом максимальная температура = 1047 С, выходная = 753 С, ширина зоны горения = 0.0015 м. Как и ожидалось ширина зоны горения намного больше, чем в режиме гибридной волны.

На рис. 3 и 4 показаны профили температур и концентраций при режиме движения волны. Длина аппарата = 0.22 м. Для учета переноса тепла излучением, коэффициент теплопроводности увеличен в 100 раз в зоне по 3 мм. слева и справа от пика температуры.

Рис. 1. $k_f = 1.0$, $k_s = 0.0$.Рис. 2. $k_f = 1.0$, $k_s = 10.0$.Рис. 3. $k_f = 10.0$, $k_s = 0.0$.

На третьем рисунке реакция присутствует только в газовой фазе и

$$k_f = 10.0, \quad E_f = 30000, \quad T_{of} = 680^\circ\text{K}, \quad \Delta T_{ad} = 1000.$$

При этом максимальная температура = 1497 С, выходная = 764 С, ширина зоны горения = 0.0042 м.

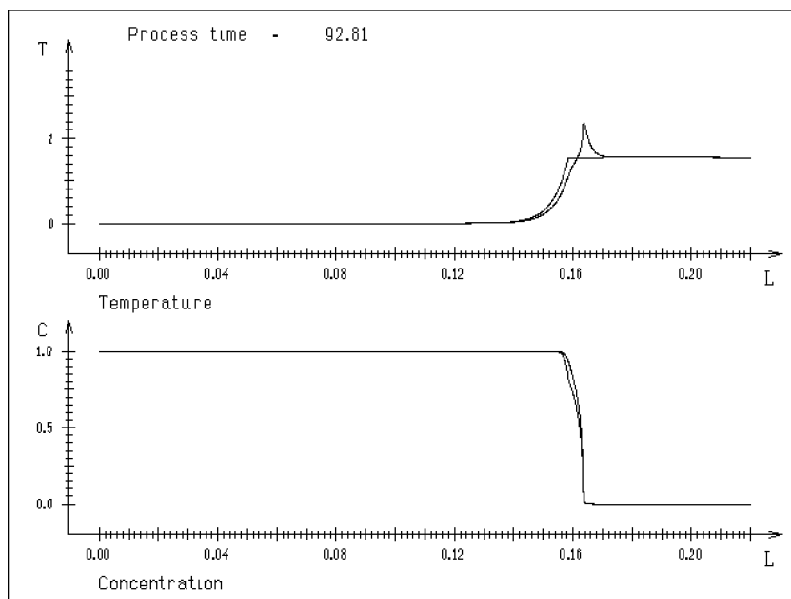
На четвертом графике помимо реакции в потоке присутствует реакция на катализаторе

$$k_s = 2.0, \quad E_s = 15000, \quad T_{of} = 485^\circ\text{K}, \quad \Delta T_{ad} = 1000.$$

При этом максимальная температура = 1178 С, выходная = 781 С, ширина зоны горения = 0.014 м.

Список литературы

- [1] EWING R. E., LAZAROV R. D., PASCIAK J. E., VASSILEVSKI P. S. Finite element methods for parabolic problems with time steps variable in space // Wyoming: Univ. of Wyoming, 1989. Report 1989-05. 23 p.
- [2] DROBYSHEVICH V. I., LAEVSKY YU. M. An algorithm of solution of parabolic equations with different time-steps in Subdomains // Rus. J. of Numer. Anal. and Math. Modeling. 1992. Vol. 7, No. 3. P. 205-220.

Рис. 4. $k_f = 10.0$, $k_s = 2.0$.

- [3] ДРОБЫШЕВИЧ В. И. Difference schemes with different time-steps in subdomains for solving parabolic equations // Rus. J. of Numer. Anal. and Math. Modeling. 1994. Vol. 9, No. 5. P. 429–444.
- [4] ДРОБЫШЕВИЧ В. И. Неявный и явно-неявный алгоритмы с различными временными шагами в под-областях // Сибирский математический журнал. 1995. Т. 3. С. 1–2.
- [5] БАВКИН В. С., ЛАЕВСКИЙ Ю. М. Filtration gas combustion, Combust. Explos. Shok. Wavea. 1987. Vol. 23. P. 531–547.
- [6] БАБКИН В. С., БАРАННИК Г. Б., ИСМАГИЛОВ З. Р., ЛАЕВСКИЙ Ю. М., ПОТАТНЯКОВ С. И. Гибридная тепловая волна при фильтрационном горении газа // ДАН СССР. 1989. 304. С. 630–633 .