

## ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГИБРИДНЫХ ВОЛН ГОРЕНИЯ В АППАРАТАХ СЛОЖНОЙ ГЕОМЕТРИИ

В. И. Дробышевич

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 630090 Новосибирск

Предложена математическая модель для численного исследования гибридных волн горения в цилиндрических и сферических аппаратах. По ранее разработанному алгоритму написана программа и проведена большая серия численных расчетов. Для различных расходов газа исследованы такие характеристики процесса, как положение точки стационара, максимальная температура газа, скорость газа в точке стационара, ширина зоны горения и т. д. Проведено моделирование переходных режимов при изменении расхода газа.

Ключевые слова: математическая модель, гибридная волна горения.

### ВВЕДЕНИЕ

Исследование процесса распространения фильтрационных волн горения при течении реагирующего газа сквозь зернистый слой инертных частиц было начато в СО АН СССР в 1981 г. [1]. На основе проведенных исследований сформулирован механизм распространения волны горения, построена математическая модель процесса и изучены его основные характеристики. Результаты этих исследований обобщены в обзоре [2]. В дальнейшем было начато исследование процесса распространения гибридных волн горения, реализующегося при движении реагирующего газа сквозь слой каталитически активных частиц [3]. Однако детализация этого процесса возможна только численными методами. Поэтому был разработан специальный вычислительный алгоритм [4], который позволил провести исследование этого процесса [5].

Целью работы является изучение влияния параметров математической модели на характеристики распространения фронта гибридных волн горения.

### 1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА

Рассматривается процесс, в котором в аппарате сферической ( $\gamma = 2$ ) или цилиндрической ( $\gamma = 1$ ) симметрии реагирующий газ прокачивается сквозь слой каталитически активных частиц (рис. 1). При построении матема-

тической модели диффузией и теплопроводностью в газовой фазе пренебрегаем. Коэффициенты тепло- и массообмена зависят от линейной скорости потока, эффективный коэффициент теплопроводности твердой фазы — от скорости потока и интенсивности излучения поверхности зерен.

Пусть  $\rho_{g,i}$ ,  $\rho_{s,i}$  — плотность  $i$ -го компонента в газовом потоке и на катализаторе,  $T_g$ ,  $T_s$  — температуры газового потока и катализатора, тогда система уравнений имеет вид:

$$\varepsilon \frac{\partial \rho_{g,i}}{\partial t} + \frac{1}{r^\gamma} \frac{\partial}{\partial r} (ur^\gamma \rho_{g,i}) + \beta(\rho_{g,i} - \rho_{s,i}) = -\varepsilon M_i \sum W_{g,k} \nu_{i,k},$$

$$r = R_0: \quad \rho_{g,i} = \rho_{in,i},$$

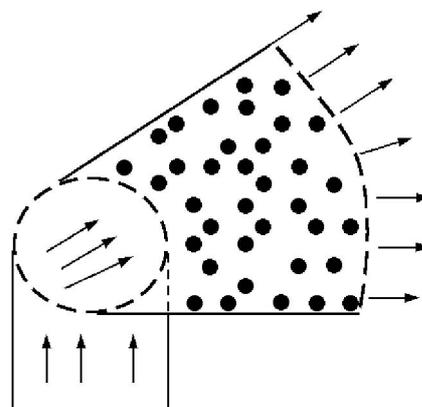


Рис. 1. Схема движения газа в сегменте сферического аппарата

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (номер проекта 04-01-00171), а также Регионального гранта РФФИ (номер 05-03-98000-р-Обь-а)

$$\begin{aligned}
(1 - \varepsilon) \frac{\partial \rho_{s,i}}{\partial t} + \beta(\rho_{s,i} - \rho_{g,i}) &= \\
&= -(1 - \varepsilon) M_i \sum W_{s,k} \nu_{i,k}, \\
\varepsilon c_{p,g} \rho_g \frac{\partial T_g}{\partial t} + \frac{c_{p,g}}{r^\gamma} \frac{\partial}{\partial r} (\rho_g u r^\gamma T_g) + \alpha(T_g - T_s) &= \\
&= \varepsilon \sum Q_k W_{g,k}, \\
r = R_0: \quad T_g = T_{in}, \\
(1 - \varepsilon) c_{p,s} \rho_s \frac{\partial T_s}{\partial t} - \frac{1}{r^\gamma} \frac{\partial}{\partial r} (r^\gamma \lambda \frac{\partial T_s}{\partial r}) + \alpha(T_s - T_g) &= \\
&= (1 - \varepsilon) \sum Q_k W_{s,k}, \\
r = R_0: \quad \lambda \frac{\partial T_s}{\partial r} = 0, \quad r = R_k: \quad \lambda \frac{\partial T_s}{\partial r} = 0.
\end{aligned}$$

Здесь  $t$  — время,  $r$  — текущий радиус,  $R_0$  — внутренний радиус аппарата,  $\varepsilon$  — пористость слоя,  $u$  — скорость газа,  $\alpha$  и  $\beta$  — коэффициенты тепло- и массообмена,  $M$  — молекулярная масса,  $W$  — скорость реакции,  $\nu$  — стехиометрический коэффициент,  $c_p$  — удельная теплоемкость,  $\lambda$  — эффективный коэффициент теплопроводности,  $Q$  — тепловой эффект реакции,  $T_{in}$ ,  $\rho_{in}$  — температура и плотность на входе, индекс  $s$  соответствует твердой фазе, индекс  $g$  — газовой.

Для одной реакции первого порядка можно записать более простые формулы, так как достаточно рассчитывать только концентрацию одного компонента.

Введем безразмерные переменные и параметры:

$$X = \rho_{g,1}/\rho_{in,1}, \quad Y = \rho_{s,1}/\rho_{in,1},$$

$$\chi = (c_p \rho)_s / (c_p \rho)_g, \quad T_{ad} = \rho_{in,1} Q / c_{p,g} \rho_g.$$

Тогда

$$\begin{aligned}
\varepsilon \frac{\partial X}{\partial t} + \frac{1}{r^\gamma} \frac{\partial}{\partial r} (u r^\gamma X) + \beta(X - Y) &= \\
&= -\varepsilon k_g X \exp\left(-\frac{E_g}{R} \left(\frac{1}{T_g} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right), \\
r = R_0: \quad X = 1, \\
(1 - \varepsilon) \frac{\partial Y}{\partial t} + \beta(Y - X) &= -(1 - \varepsilon) k_s Y \times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\varepsilon \frac{\partial T_g}{\partial t} + \frac{1}{r^\gamma} \frac{\partial}{\partial r} (u r^\gamma T_g) + \beta(T_g - T_s) &= \\
&= \varepsilon T_{ad} k_g X \exp\left(-\frac{E_g}{R} \left(\frac{1}{T_g} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right), \\
r = R_0: \quad T_g = T_{in}, \\
(1 - \varepsilon) \chi \frac{\partial T_s}{\partial t} - \frac{1}{r^\gamma} \frac{\partial}{\partial r} (r^\gamma a \frac{\partial T_s}{\partial r}) + \beta(T_s - T_g) &= \\
&= (1 - \varepsilon) T_{ad} k_s Y \exp\left(-\frac{E_s}{R} \left(\frac{1}{T_s} - \frac{1}{T_{ref}}\right)\right), \\
r = R_0: \quad a \frac{\partial T_s}{\partial r} = 0, \quad r = R_k: \quad a \frac{\partial T_s}{\partial r} = 0, \\
P = \sum \frac{\rho_i}{M_i} RT, \quad G = u \rho_g r^\gamma = \text{const.}
\end{aligned}$$

Здесь  $a(r, T_s, T_g)$  — эффективный коэффициент температуропроводности,  $k$  — константа скорости реакции при некоторой температуре  $T_{ref}$ ,  $E$  — энергия активации,  $R$  — универсальная газовая постоянная,  $T_{ad}$  — адиабатическая температура.

Если все уравнения (1) проинтегрировать для стационарного профиля  $\int_{R_0}^{R_k} r^\gamma dr$ , то с учетом граничных условий и в предположении, что на выходе из аппарата  $X = 0$  и  $T_g = T_s$ , легко получить соотношение  $T_g = T_s = T_{ad} + T_{in}$ .

Имеют место два предельных случая: фильтрационная волна горения ( $k_s = 0$ ) и каталитическая тепловая волна ( $k_g = 0$ ). Эти режимы различаются механизмом передачи энергии. Рассмотрим уравнение для температуры твердой фазы в случае стационарного профиля параметров, проинтегрированное по объему аппарата. В первом случае (рис. 2)

$$\int_{R_0}^{R_v} \alpha(T_s - T_g) r^\gamma dr = \int_{R_v}^{R_k} \alpha(T_g - T_s) r^\gamma dr$$

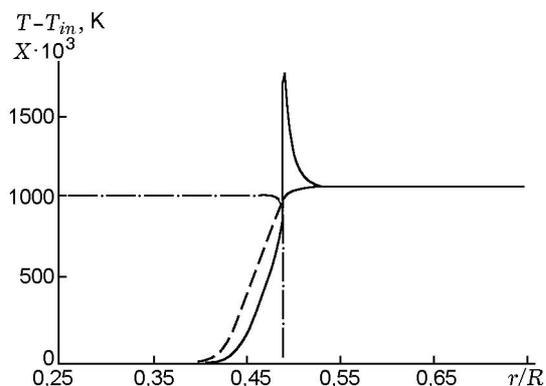


Рис. 2. Фильтрационная волна горения:  
сплошная линия — температура газа, штриховая — температура твердой фазы, штрихпунктирная — концентрация  $X$

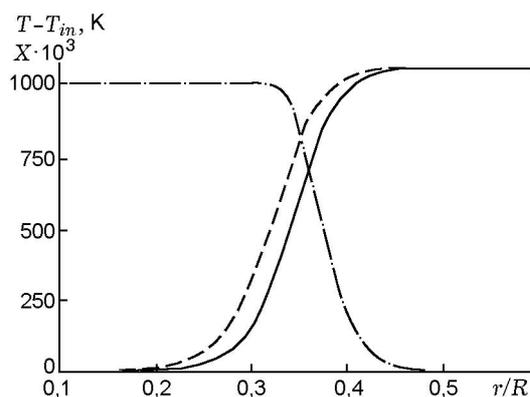


Рис. 3. Каталитическая тепловая волна:  
сплошная линия — температура газа, штриховая — температура твердой фазы, штрихпунктирная — концентрация  $X$

( $R_v$  — положение точки с максимальной температурой газа), т. е. разогретый газ нагревает слой частиц за фронтом волны горения, за счет теплопроводности тепло передается в зону до фронта, где зернистый слой нагревает газ до температуры воспламенения. Во втором случае (рис. 3)

$$\int_{R_0}^{R_k} \alpha(T_s - T_g) r^\gamma dr = (1 - \varepsilon) T_{ad} \int_{R_0}^{R_k} W r^\gamma dr.$$

Следовательно, все тепло, выделившееся в ходе каталитической реакции, идет на подогрев газового потока.

Для расчета параметров модели использовались следующие соотношения [6]:

$$u = u_0 R_0^\gamma (T_g/T_{in})/r^\gamma, \quad Nu_e = \beta d_e/\mu,$$

$$Re_e = u d_e/\mu,$$

$$a(r, T_s, T_g) = D_g(12 + Re_e) + 0,227\varepsilon(T_s/100)^3$$

( $D$  — коэффициент диффузии),

$$Re_e > 30: \quad Nu_e = 0,3474 Re_e^{0,64},$$

$$Re_e = 30 \div 2: \quad Nu_e = 0,638 Re_e^{0,47},$$

$$Re_e < 2: \quad Nu_e = 0,4532 Re_e^{0,85}.$$

Разработан специальный численный алгоритм решения для такого класса задач: в зоне горения, которая намного меньше длины аппарата, используются мелкие пространственный и временной шаги. Это позволяет существенно сократить время расчета.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Расчеты выполнялись при следующих значениях параметров:  $E_g/R = 15\,758$  К,  $E_s/R = 8\,400$  К,  $k_g = 10$ ,  $k_s = 1$ ,  $T_{in} = 300$  К,  $T_{ad} = 1\,050$  К,  $T_{ref} = 1\,050$  К.

В табл. 1 приведены характеристики стационарных волн для аппарата цилиндрической геометрии, в табл. 2 — для сферического аппарата. Во всех таблицах  $G$  — расход газа,  $T_{g,max}$  — максимальная температура газа,  $R_v$  — положение точки с максимальной температурой газа,  $u_v$  — линейная скорость потока в точке максимума,  $\Delta X$  — ширина зоны, в которой происходит основное химическое превращение.

Как видно из таблиц, при фильтрационном горении ( $k_s = 0$ )  $T_{g,max} - T_{in} \cong 1\,750$  К,  $\Delta X \cong 0,004$  м, в случае гибридного горения ( $k_s = 1$ )  $T_{g,max} - T_{in} \cong 1\,650$  К,  $\Delta X \cong 0,01$  м. Интересно отметить, что во всех случаях линейная скорость потока в точке максимума температуры примерно одинакова:  $u_v \cong 1,7$  м/с.

В табл. 3 приведены результаты расчета для сферического аппарата при увеличении константы скорости каталитической реакции. Как видно, с ростом  $k_s$  снижается максимальная температура и увеличивается ширина зоны химического превращения. Растет также линейная скорость потока в точке максимума температуры газа. В табл. 4 показано, как меняются характеристики процесса, когда коэффициенты тепло- и массообмена умножаются на коэффициенты 0,4 и 5,0. Существенно

Т а б л и ц а 1

Характеристики стационарных волн горения в аппарате  
цилиндрической геометрии ( $T_{ad} = 1050$  К)

Тип волны горения	$G$ , кг/с	$T_{g,max} - T_{in}$ , К	$R_v$ , м	$u_v$ , м/с	$\Delta X$ , м
Гибридная, $k_s = 1,0$	0,135	1 651,740	0,507175	1,73171	0,01017
	0,090	1 652,180	0,340350	1,72074	0,01012
	0,045	1 653,380	0,173700	1,68686	0,01000
Фильтрационная, $k_s = 0$	0,135	1 748,540	0,532475	1,73124	0,00425
	0,090	1 749,370	0,357025	1,72204	0,00420
	0,045	1 751,92	0,181750	1,69374	0,00407

Т а б л и ц а 2

Характеристики стационарных волн горения  
в сферическом аппарате ( $T_{ad} = 1050$  К)

Тип волны горения	$G$ , кг/с	$T_{g,max} - T_{in}$ , К	$R_v$ , м	$u_v$ , м/с	$\Delta X$ , м
Гибридная, $k_s = 1,0$	0,15	1 652,100	0,752300	1,72460	0,01015
	0,10	1 652,380	0,615450	1,71814	0,01000
	0,06	1 652,820	0,478225	1,70777	0,01007
	0,02	1 654,010	0,279025	1,67320	0,00995
Фильтрационная, $k_s = 0$	0,15	1 749,10	0,770750	1,72567	0,00420
	0,10	1 749,75	0,630425	1,71914	0,00417
	0,06	1 750,58	0,489700	1,71020	0,00415
	0,02	1 753,04	0,285400	1,68035	0,00400

Т а б л и ц а 3

Влияние параметра  $k_s$  на характеристики гибридной волны  
горения в сферическом аппарате ( $T_{ad} = 1050$  К)

$k_s$	$G$ , кг/с	$T_{g,max} - T_{in}$ , К	$R_v$ , м	$u_v$ , м/с	$\Delta X$ , м
1,0	0,10	1 652,380	0,615450	1,71814	0,01000
3,0	0,10	1 502,39	0,589100	1,73120	0,01935
9,0	0,10	1 258,09	0,530200	1,84753	0,03170
1,0	0,06	1 652,82	0,478225	1,70777	0,01007
3,0	0,06	1 502,51	0,458125	1,71767	0,01930
9,0	0,06	1 258,84	0,413600	1,82251	0,03150

Таблица 4

Влияние коэффициентов обмена на характеристики волн горения в сферическом аппарате ( $T_{ad} = 1050$  К)

Тип волны горения	$\beta$	$G$ , кг/с	$T_{g,max} - T_{in}$ , К	$R_v$ , м	$u_v$ , м/с	$\Delta X$ , м
Гибридная	$\beta \cdot 0,4$	0,02	1 504,670	0,34725	0,99752	0,02885
	$\beta \cdot 1,0$	0,02	1 654,01	0,279025	1,67320	0,00995
	$\beta \cdot 5,0$	0,02	1 614,20	0,190675	3,51001	0,00460
Фильтрационная	$\beta \cdot 0,4$	0,15	1711,38	0,997600	1,01054	0,00510
	$\beta \cdot 1,0$	0,15	1 749,10	0,770750	1,72567	0,00420
	$\beta \cdot 5,0$	0,15	1 639,20	0,518275	3,60970	0,00407

Таблица 5

Характеристики волн горения в сферическом аппарате ( $T_{ad} = 1050$  К)

Тип волны горения	$G$ , кг/с	$T_{g,max} - T_{in}$ , К	$R_v$ , м	$u_v$ , м/с	$\Delta X$ , м
Гибридная, $k_s = 1,0$	0,010	610,645	0,524800	0,110215	0,03450
	0,004	637,248	0,345275	0,104825	0,03437
Фильтрационная, $k_s = 0$	0,010	706,954	0,529650	0,119649	0,01740
	0,004	733,038	0,348675	0,113296	0,01565

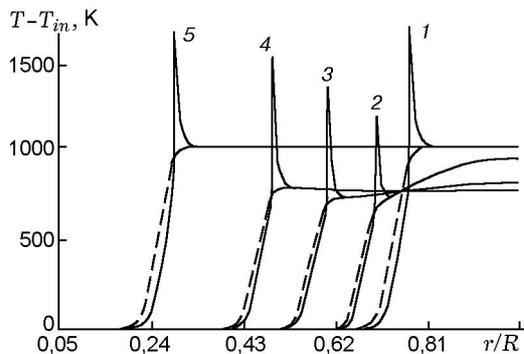


Рис. 4. Движение фронта фильтрационной волны горения при уменьшении расхода газа: сплошная линия — температура газа, штриховая — температура твердой фазы

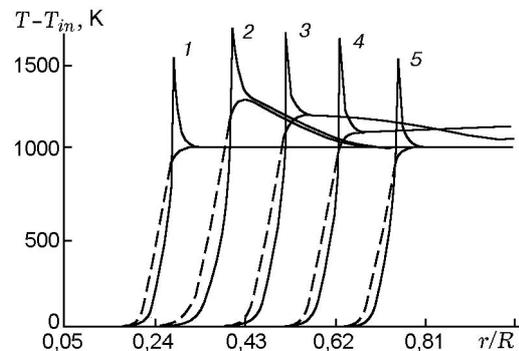


Рис. 5. Движение фронта гибридной волны горения при увеличении расхода газа: сплошная линия — температура газа, штриховая — температура твердой фазы

возрастает скорость потока; заметно (особенно для гибридной волны) сужается зона горения и нелинейно меняется максимальная температура.

В табл. 5 приведены результаты расчета при следующих значениях параметров:  $E_g/R = 15\,758$  К,  $E_s/R = 8\,400$  К,  $k_g = 10$ ,  $k_s = 1$ ,  $T_{in} = 300$  К,  $T_{ad} = 450$  К,  $T_{ref} = 800$  К. Видно, что, хотя исходные данные изменились, скорость потока, ширина зоны горения и макси-

мальная температура остались примерно одинаковыми.

Были изучены динамические характеристики волны горения при изменении расхода газа  $G$ . После того, как фильтрационная волна стабилизировалась при  $G = 0,15$  кг/с (рис. 4, кривые 1), расход газа был уменьшен до 0,02 кг/с. Как видно из рисунка, максимальная температура в газовой фазе сначала резко падает (кривые 2), затем начинает медленно повышаться (кривые 3, 4) и довольно

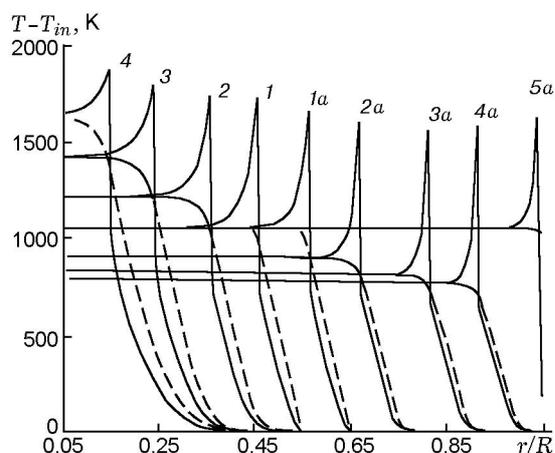


Рис. 6. Неустойчивость стационарной волны фильтрационного горения при потоке газа к центру аппарата:

сплошная линия — температура газа, штриховая — температура твердой фазы

долго выходит на новое стационарное значение (кривые 5). Обратная картина наблюдается при увеличении расхода. На рис. 5 показана динамика профилей температур при увеличении расхода газа в гибридной волне от  $G = 0,02$  кг/с (кривые 1) до  $G = 0,15$  кг/с (кривые 2–5).

Если изменить направление подачи газа (от края аппарата к центру), то стационарная волна горения станет неустойчивой. На рис. 6 показано, как ведут себя профили температур при зажигании вблизи такой точки в режиме фильтрационного горения при  $G = 0,06$  кг/с. При зажигании левее точки стационарной волны (кривые 1) фронт начинает двигаться по потоку, температуры за фронтом волны горения растут (кривые 2–4), но затем фронт выдувается из аппарата и устанавливается «холодный» режим ( $T = T_{in}$ ). При зажигании правее точки стационарной волны (кривые 1a) фронт начинает двигаться против потока. Температуры за фронтом волны горения сначала понижаются (кривые 2a, 3a), затем максимальная температура начинает расти (кривые 4a), и, наконец, устанавливается горячий режим (кривые 5a), когда весь газ сгорает на входе в аппарат, а внутри аппарата температуры равны,  $T = T_{in} + T_{ad}$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный цикл численных исследований для гибридных волн горения в аппаратах сложной геометрии выявил ряд закономерностей.

В случае, когда каталитическая реакция слабо влияет на процесс горения в гибридной волне, в точке максимума температуры газа линейная скорость потока и максимальная температура газа примерно одинаковы при любом расходе газа.

С ростом константы скорости каталитической реакции растут линейная скорость потока в точке максимума температуры газа и ширина зоны реакции, одновременно с этим максимальная температура газа понижается.

При изменении расхода газа в случае, когда фронт волны горения движется против потока, температуры за фронтом горения и максимальная температура газа резко падают, а затем медленно растут к новым стационарным значениям. При движении фронта по потоку температуры возрастают, а затем медленно понижаются.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Бабкин В. С., Дробышевич В. И., Лаевский Ю. М., Потытняков С. И. О механизме распространения волн горения в пористой среде // Докл. АН СССР. 1982. Т. 265, № 5. С. 1157–1161.
2. Бабкин В. С., Лаевский Ю. М. Фильтрационное горение газов // Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23, № 5. С. 27–44.
3. Бабкин В. С., Баранник Б. Г., Исмаилов З. Р. и др. Гибридная тепловая волна при фильтрационном горении газов // Докл. АН СССР. 1989. Т. 304, № 3. С. 630–633.
4. Drobyshevich V. I., Laevsky Yu. M. An algorithm of solution of parabolic equations with time-steps in sub domains // Sov. J. Numer. Anal. and Math. Model. 1992. V. 7, N 3. P. 205–220.
5. Drobyshevich V. I. Mathematical modeling of non-stationary hybrid combustion wave // Advanced Computation and Analysis of Combustion. M.: ENAS Publishers, 1997. P. 114–121.
6. Аэров М. Э., Тодес О. М., Наринский Д. А. Аппараты со стационарным зернистым слоем. Л.: Химия, 1979.