

# АЛГОРИТМ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГИБРИДНОЙ ВОЛНЫ В НЕПОДВИЖНОМ СЛОЕ КАТАЛИЗАТОРА

В. И. ДРОБЫШЕВИЧ, Л. В. ЯУШЕВА

*Институт вычислительной математики*

*и математической геофизики СО РАН, Новосибирск, Россия*

e-mail: drob@labchem.ssc.ru, yauch@labchem.ssc.ru

A mathematical model for simulating the dynamic processes in a hybrid combustion wave is presented. A method for constructing a difference scheme with various time steps in subdomains has been developed. The test calculations for the regime of filtration gas combustion have been carried out.

В данной работе предложены модель и алгоритм для исследования процесса формирования и распространения гибридной волны горения в неподвижном слое катализатора.

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 [1–3]. Для многомерного параболического уравнения построение и обоснование изложено в работах [4–7]. Обобщение алгоритмов для квазилинейных уравнений, когда коэффициенты уравнения зависят от решения, сделано в работах [8, 9].

Процесс фильтрационного горения газов характеризуется аномально высокими температурами в узкой зоне газофазного горения [10]. Такой же характер имеет процесс гибридного горения, когда каталитическая реакция на поверхности частицы не доминирует над газофазной реакцией [11]. Исследование стационарных бегущих волн для реакции первого порядка проводилось полуаналитическими методами [10, 11]. Численное исследование процесса проводилось в работе [12].

Как мы уже отмечали, формирование гибридной волны приводит к образованию узкой зоны, где наблюдаются резкие градиенты температур и концентраций.

В силу этого, математическое моделирование предъявляет очень жесткие требования к качеству разностной схемы и алгоритму ее реализации. Необходимо, чтобы сохранялись все основные свойства дифференциальной задачи, выполнялись интегральные балансы

тепла и массы, обеспечивалась положительность решения, автоматически регулировался временной шаг в зависимости от характеристик решения и т. д.

Для численных расчетов подобных режимов разработан специальный алгоритм с малыми пространственно-временными шагами в зоне газофазного горения [3, 6, 7].

В данной работе предложена математическая модель для описания процесса формирования и движения гибридной волны горения.

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

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

граничными условиями

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

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

Концентрационные поля описываются системой уравнений:

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

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

граничными условиями

$$z = 0 : \quad X_f = X_{f0}.$$

Здесь в правой части использовалась реакция первого порядка

$$W_i = k_{0i} \text{EXP}(-E_i/RT_i) X_i, \quad i = f, s.$$

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 то же время, вне зоны горения можно применять более крупные шаги. Поэтому при построении разностного аналога на основе

интегро-интерполяционного метода используются различные временные шаги в различных областях интегрирования.

В каждый момент времени  $t \in [t_n, t_{n+1}]$  разобьем сеточную область  $\omega_h$  на две подобласти (рис. 1)  $\omega_1 = \{z_j, j = jl, \dots, jp\}$ , и  $\omega_2 = \{z_j, j = 1, \dots, jl\}, j = jp, \dots, J$  и будем предполагать, что все особенности решения реализуются в первой подобласти.

Кроме того, в подобласти, где возникает волна горения, введем вторую сетку по времени, которая имеет значительно меньший временной шаг. Пусть  $p$  — заданное число и  $\tau_p = \tau_n/p$  (индекс  $n$  у  $\tau$  в дальнейшем будем опускать). На временном интервале  $(t_n, t_{n+1}]$  введем сетку  $\omega_\tau^n = \{t_n + l\tau_p, l = 1, \dots, p\}$ , которая при  $l = p$  совпадает с сеткой  $\omega_\tau$ .

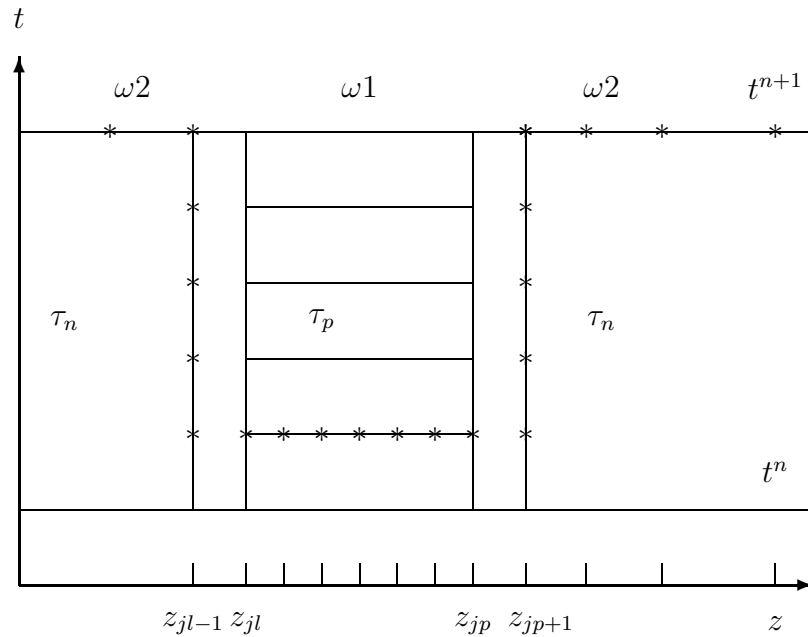


Рис. 1. Сеточная область  $\omega_h \times \omega_\tau^n$ .

Рассмотрим разностный аналог системы уравнений, описывающих температурные и концентрационные поля, в регулярных точках  $z_j$  области  $\omega_2$  во временном интервале  $t_n, t_{n+1}$ .

Температурные поля определяются из системы уравнений:

в газовом потоке

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_0(c_p\rho)_f}{\tau} (Tf_j^{n+1} - Tf_j^n) &= -\frac{u(c_p\rho)_f}{\bar{h}_j} (Tf_j^{n+1} - Tf_{j-1}^{n+1}) + \\ &+ \alpha_{fs} (Ts_j^{n+1} - Tf_j^{n+1}) + \varepsilon_0 Q_f W_f (Tf_j^{n+1}, Xf_j^{n+1}), \end{aligned} \quad (5)$$

на катализаторе

$$\begin{aligned} \frac{(1 - \varepsilon_0)(c_p\rho)_s}{\tau} (Ts_j^{n+1} - Ts_j^n) &= \frac{\lambda_s}{\bar{h}_j} \left( \frac{Ts_{j+1}^{n+1} - Ts_j^{n+1}}{h_{j+1}} - \frac{Ts_j^{n+1} - Ts_{j-1}^{n+1}}{h_j} \right) + \\ &+ \alpha_{fs} (Tf_j^{n+1} - Ts_j^{n+1}) + (1 - \varepsilon_0) Q_s W_s (Ts_j^{n+1}, Xs_j^{n+1}). \end{aligned} \quad (6)$$

Концентрационные профили описываются системой разностных уравнений:

в потоке

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_0}{\tau} \left( Xf_j^{n+1} - Xf_j^n \right) = & -\frac{u}{\hbar_j} \left( Xf_j^{n+1} - Xf_{j-1}^{n+1} \right) + \\ & + \beta_{fs} \left( Xs_j^{n+1} - Xf_j^{n+1} \right) + \varepsilon_0 W_f \left( Tf_j^{n+1}, Xf_j^{n+1} \right), \end{aligned} \quad (7)$$

на катализаторе

$$\frac{(1 - \varepsilon_0)}{\tau} \left( Xs_j^{n+1} - Xs_j^n \right) = \beta_{fs} \left( Xf_j^{n+1} - Xs_j^{n+1} \right) + (1 - \varepsilon_0) W_s \left( Ts_j^{n+1}, Xs_j^{n+1} \right). \quad (8)$$

Приведем систему разностных уравнений, описывающих температурные и концентрационные поля, в регулярных точках  $z_j$  области  $\omega_1$  во временном интервале  $t_{n+(l-1)/p}, t_{n+l/p}$ : в газовом потоке

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_0(c_p\rho)_f}{\tau_p} \left( Tf_j^{n+l/p} - Tf_j^{n+(l-1)/p} \right) = & -\frac{u(c_p\rho)_f}{\hbar_j} \left( Tf_j^{n+l/p} - Tf_{j-1}^{n+l/p} \right) + \\ & + \alpha_{fs} \left( Ts_j^{n+l/p} - Tf_j^{n+l/p} \right) + \varepsilon_0 Q_f W_f \left( Tf_j^{n+l/p}, Xf_j^{n+l/p} \right), \end{aligned} \quad (9)$$

на катализаторе

$$\begin{aligned} \frac{(1 - \varepsilon_0)(c_p\rho)_s}{\tau_p} \left( Ts_j^{n+l/p} - Ts_j^{n+(l-1)/p} \right) = & \frac{\lambda_s}{\hbar_j} \left( \frac{Ts_{j+1}^{n+l/p} - Ts_j^{n+l/p}}{h_{j+1}} - \frac{Ts_j^{n+l/p} - Ts_{j-1}^{n+l/p}}{h_j} \right) + \\ & + \alpha_{fs} \left( Tf_j^{n+l/p} - Ts_j^{n+l/p} \right) + (1 - \varepsilon_0) Q_s W_s \left( Ts_j^{n+l/p}, Xs_j^{n+l/p} \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Для концентрации потока:

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_0}{\tau_p} \left( Xf_j^{n+l/p} - Xf_j^{n+(l-1)/p} \right) = & -\frac{u}{\hbar_j} \left( Xf_j^{n+l/p} - Xf_{j-1}^{n+l/p} \right) + \\ & + \beta_{fs} \left( Xs_j^{n+l/p} - Xf_j^{n+l/p} \right) + \varepsilon_0 W_f \left( Tf_j^{n+l/p}, Xf_j^{n+l/p} \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Для концентрации катализатора:

$$\begin{aligned} \frac{(1 - \varepsilon_0)}{\tau_p} \left( Xs_{ij}^{n+l/p} - Xs_{ij}^{n+(l-1)/p} \right) = \\ = \beta_{fs} \left( Xf_{ij}^{n+l/p} - Xs_{ij}^{n+l/p} \right) + (1 - \varepsilon_0) W_s \left( Ts_j^{n+l/p}, Xs_j^{n+l/p} \right). \end{aligned} \quad (12)$$

В данной работе предлагается следующий алгоритм расчета совместных систем уравнений на временном интервале  $(t_n, t_{n+1})$ . При значении  $l = 1$  совместные системы разностных уравнений решаются методом сквозной прогонки в обеих областях. При этом построение разностного аналога для температуры в потоке и на катализаторе в переходных узлах  $jl - 1, jl, jp, jp + 1$  отличается от построения в регулярных узлах из-за переменного временного шага  $\tau$ .

В узле  $j = jl - 1$  разностные соотношения, аппроксимирующие уравнения потока, остаются без изменений, так как все узлы принадлежат одному временному слою  $t_{n+1}$ . А при

рассмотрении разностного аналога уравнений катализатора в узле  $j = jl - 1$  температура  $\overline{T}_{s_{jl}}^{n+1}$  принадлежит подобласти  $\omega_2$  и поэтому применяем соотношения экстраполяции

$$\frac{(1 - \varepsilon_0)(c_p \rho)_s}{\tau} \left( T_{s_{jl-1}}^{n+1} - T_{s_{jl-1}}^n \right) = \frac{\lambda_s}{\hbar_j} \left( \frac{\overline{T}_{s_{jl}}^{n+1} - T_{s_{jl-1}}^{n+1}}{h_{j+1}} - \frac{T_{s_{jl-1}}^{n+1} - T_{s_{jl-2}}^{n+1}}{h_j} \right) +$$

$$+ \alpha_{fc} \left( T_{f_{jl-1}}^{n+1} - T_{s_{jl-1}}^{n+1} \right) + (1 - \varepsilon_0) Q_s W_s \left( T_{s_{jl-1}}^{n+1}, X_{s_{jl-1}}^{n+1} \right), \quad (13)$$

$$\overline{T}_{s_{jl}}^{n+1} = p * T_{s_{jl}}^{n+1/p} - (1 - p) * T_{s_{jl}}^n. \quad (14)$$

Аналогично, используем соотношения интерполяции для температур  $\widetilde{T}_{f_{jl-1}}^{n+1/p}$  и  $\widetilde{T}_{s_{jl-1}}^{n+1/p}$ , принадлежащих подобласти  $\omega_1$ .

При рассмотрении разностного аналога в узле  $j = jl$ , на временном интервале  $(t_n, t_{n+1/p})$ , для описания тепломассопереноса:

в газовом потоке

$$\frac{\varepsilon_0(c_p \rho)_f}{\tau} \left( T_{f_{jl}}^{n+1/p} - T_{f_{jl}}^{n+(l-1)/p} \right) = -\frac{u(c_p \rho)_f}{\hbar_{jl}} \left( T_{f_{jl}}^{n+1/p} - \widetilde{T}_{f_{jl-1}}^{n+1/p} \right) +$$

$$+ \alpha_{fs} \left( T_{s_{jl}}^{n+1/p} - T_{f_{jl}}^{n+1/p} \right) + \varepsilon_0 Q_f W_f \left( T_{f_{jl}}^{n+1/p}, X_{f_{jl}}^{n+1/p} \right), \quad (15)$$

на поверхности катализатора

$$\frac{(1 - \varepsilon_0)(c_p \rho)_s}{\tau} \left( T_{s_{jl}}^{n+1/p} - T_{s_{jl}}^n \right) = \frac{\lambda_s}{\hbar_j} \left( \frac{T_{s_{jl+1}}^{n+1/p} - T_{s_{jl}}^{n+1/p}}{h_{j+1}} - \frac{T_{s_{jl}}^{n+1/p} - \widetilde{T}_{s_{jl-1}}^{n+1/p}}{h_j} \right) +$$

$$+ \alpha_{fc} \left( T_{f_{jl}}^{n+1/p} - T_{s_{jl}}^{n+1/p} \right) + (1 - \varepsilon_0) Q_s W_s \left( T_{s_{jl}}^{n+1/p}, X_{s_{jl}}^{n+1/p} \right), \quad (16)$$

$$\widetilde{T}_{f_{jl-1}}^{n+1/p} = \frac{1}{p} * T_{f_{jl-1}}^{n+1} + \frac{p-1}{p} * T_{f_{jl-1}}^n, \quad (17)$$

$$\widetilde{T}_{s_{jl-1}}^{n+1/p} = \frac{1}{p} * T_{s_{jl-1}}^{n+1} + \frac{p-1}{p} * T_{s_{jl-1}}^n. \quad (18)$$

Аналогичная методика применяется при рассмотрении разностного аналога, аппроксимирующего процесс тепломассопереноса в узле  $j = jp$ .

Несколько иной подход используется при рассмотрении разностного аналога, аппроксимирующего процесс тепломассопереноса в потоке в узле  $j = jp + 1$ . Определение температуры  $\overline{T}_{f_{jp}}^{n+1}$  из соотношений экстраполяции нецелесообразно, так как конвективные уравнения наиболее чувствительны к экстраполяции.

Поэтому разностный аналог при аппроксимации уравнений потока в узле  $j = jp + 1$  области  $\omega_1$

$$\frac{\varepsilon_0(c_p \rho)_f}{\tau} \left( T_{f_{jp+1}}^{n+1} - T_{f_{jp+1}}^n \right) = -\frac{u(c_p \rho)_f}{\hbar_{jl}} \left( T_{f_{jp+1}}^{n+1} - \overline{T}_{f_{jp}}^{n+1} \right) +$$

$$+ \alpha_{fs} \left( T_{s_{jp+1}}^{n+1} - T_{f_{jp+1}}^{n+1} \right) + \varepsilon_0 Q_f W_f \left( T_{f_{jp+1}}^{n+1}, X_{f_{jp+1}}^{n+1} \right) \quad (19)$$

заменяем на разностный аналог, аппроксимирующий уравнение потока в узле  $j = jp + 1$ , но в области  $\omega_2$

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon_0(c_p\rho)_f}{\tau} \left( \widetilde{T}f_{jp+1}^{n+1/p} - Tf_{jp+1}^n \right) = -\frac{u(c_p\rho)_f}{\hbar_j l} \left( \widetilde{T}f_{jp+1}^{n+1/p} - Tf_{jp}^{n+1/p} \right) + \\ + \alpha_{fs} \left( \widetilde{T}s_{jp+1}^{n+1/p} - \widetilde{T}f_{jp+1}^{n+1/p} \right) + \varepsilon_0 Q_f W_f \left( Tf_{jp+1}^{n+1/p}, Xf_{jp+1}^{n+1/p} \right). \end{aligned} \quad (20)$$

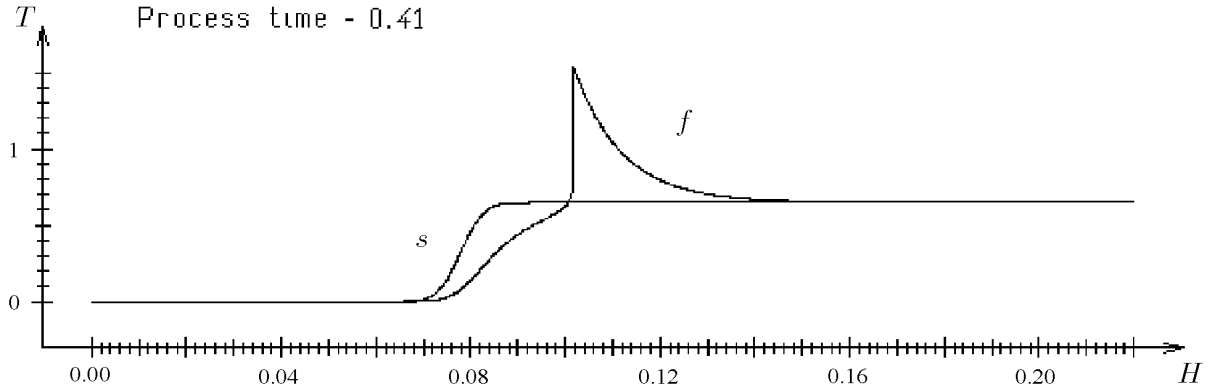


Рис. 2. Профили температур при  $t = 0.4$  с.

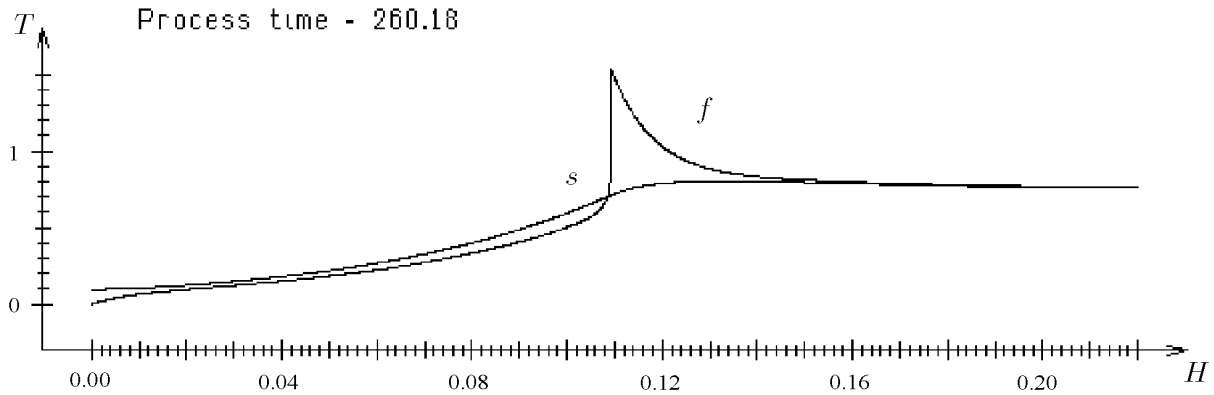


Рис. 3. Профили температур при  $t = 260$  с.

Применение соотношений интерполяции

$$\widetilde{T}f_{jp+1}^{n+1/p} = \frac{1}{p} * Tf_{jp+1}^{n+1} + \frac{p-1}{p} * Tf_{jp+1}^n, \quad (21)$$

$$\widetilde{T}s_{jp+1}^{n+1/p} = \frac{1}{p} * Ts_{jp+1}^{n+1} + \frac{p-1}{p} * Ts_{jp+1}^n \quad (22)$$

и прогоночного соотношения, устанавливающего связь между температурами катализатора  $Ts_{jp}^{n+1/p}$ ,  $Ts_{jp+1}^{n+1}$  в узле  $j = jp$  делает возможным применение метода сквозной прогонки.

При значении  $l > 1$  ( $l = 2, \dots, p$ ) совместные системы разностных уравнений решаются методом прогонки только в подобласти  $\omega_2$ , где используется мелкий временной шаг.

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  $\tau$ , ограниченном 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  $\tau$ . Суть его состоит в следующем: если число итераций  $N_k > N_{\max}$ , выполнение итераций прекращалось, временной шаг  $\tau$  уменьшался, и расчет повторялся; при числе итераций  $N_k < N_{\min}$  для нахождения нового решения временной шаг  $\tau$  увеличивался; при числе итераций в интервале  $[N_{\min}, N_{\max}]$  шаг оставался постоянным.

По описанному алгоритму написана программа, которая подтвердила эффективность алгоритма. В качестве тестового расчета выбран режим фильтрационного горения газов ( $k_{s0}$ ), в котором реализуются наиболее сильные градиенты температуры и концентрации в газовой фазе. На рис. 2 и рис. 3 приведены профили температур (в потоке —  $f$  и на катализаторе —  $s$ ) для моментов времени  $t = 0.4$  и 260 с. Необходимо отметить, что на оси значений температур за единицу принято значение температуры в 1000 °С.

## 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. *Univ. of Wyoming, Wyoming, Report* 1989–05.
- [2] МАТУС П. П. Об одном классе разностных схем на составных сетках для нестационарных задач математической физики. *Дифференциальные уравнения*, **26**, №7, 1990, 1241–1254.
- [3] DROBYSHEVICH V. I., LAEVSKY YU. M. An algorithm of solution of parabolic equations with different time-steps in Subdomains. *Rus. J. Num. Anal. Math. Modeling*, **7**, No. 3, 1992, 205–220.
- [4] МАТУС П. П. К вопросу построения разностных схем для многомерных параболических уравнений на адаптивно-временных сетках. *Дифференциальные уравнения*, **27**, №11, 1991, 1964–1974.
- [5] МАТУС П. П. Консервативные разностные схемы для параболических и гиперболических уравнений второго порядка в подобластях. *Там же*, **29**, №4, 1993, 700–710.
- [6] DROBYSHEVICH V. I. Difference schemes with different time-steps in subdomains for solving parabolic equations. *Rus. J. Num. Anal. Math. Modeling*, **9**, No. 5, 1994, 429–444.

- [7] ДРОБЫШЕВИЧ В. И. Неявный и явно-неявный алгоритмы с различными временными шагами в подобластях. *Сибирский математический журнал*, **3**, 1995, 1–2.
- [8] МАТУС П. П. Консервативные разностные схемы для квазилинейных параболических уравнений в подобластях. *Дифференциальные уравнения*, **29**, №7, 1993, 1222–1231.
- [9] ВАБИЩЕВИЧ П. Н., МАТУС П. П., ЩЕГЛИК В. С. Операторно-разностные уравнения дивергентного типа. *Там же*, **30**, №7, 1994, 1175–1186.
- [10] ВАВКИН V. S., ЛАЕВСКИЙ YU. M. Filtration gas combustion, *Combust. Explos. Shock. Waves*, **23**, 1987, 531–547.
- [11] БАВКИН В. С., БАРАННИК Г. Б., ИСМАГИЛОВ З. Р., ЛАЕВСКИЙ Ю. М., ПОТАТНЯКОВ С. И. Гибридная тепловая волна при фильтрационном горении газа *Докл. АН СССР*, **304**, 1989, 630–633.
- [12] DROBYSHEVICH V. I. Mathematical Modeling of Non-Stationary Hybrid Combustion Wave. *Advanced Computation & Analysis of Combustion*, ENAS Publishers, Moscow, 1997, 114–121.

Поступила в редакцию 17 февраля 2000 г.