

УДК 51-7

Численное моделирование распространения фронта горения по слою катализатора

Язовцева О.С.

Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук

Аннотация: Работа посвящена численному исследованию распространения фронта горения в неподвижном слое катализатора со сферической формой зерна при проведении гетерогенных химических реакций с детальным описанием кинетики на примере выжиг коксовых отложений из слоя катализатора. Математическая модель, описывающая выжиг, является системой уравнений математической физики с начально-краевыми условиями. Вычислительный алгоритм для системы построен на основе принципа расщепления по физическим процессам с подбором адекватных методов интегрирования для каждого из них. Фронт горения описан как тепловая волна, перемещающаяся по слою катализатора. В модели реализован динамический режим выжиг, заключающийся в подаче реакционной смеси переменных температуры и состава. Анализ результатов расчета выявил преимущества динамического выжиг перед стационарным.

Ключевые слова: фронт горения, волновые процессы, окислительная регенерация, математическое моделирование, вычислительный алгоритм.

Во многих промышленных процессах присутствуют явления, труднопредсказуемые с точки зрения теории, однако существенно меняющие ход всего процесса. К таким явлениям относится распространение тепловых волн в слое катализатора [1]. Оценка условий возникновения волн представляет собой актуальную задачу [2]. Этот вопрос напрямую связан с теорией движения фронта горения и распространения пламени [3].

Работа посвящена численному исследованию распространения фронта горения в неподвижном слое катализатора со сферической формой зерна при проведении гетерогенных химических реакций с детальным описанием кинетики на примере выжиг коксовых отложений из слоя катализатора.

Математическая модель процесса описана системой уравнений математической физики и является двухфазной – это подразумевает составление отдельных уравнений для слоя катализатора и слоя газа [4].

Для описания процессов в зерне катализатора используются уравнения диффузии-конвекции-реакции [5]. Они записываются для каждого вещества, участвующего в реакции. В них учтена диффузия веществ в поры зерна, а также изменения концентраций в ходе химических превращений как источниковый член. Гетерогенные реакции приводят к уменьшению объема реакционной смеси. В модели это учтено за счет использования вынужденного конвективного переноса – стефановского потока. Материальный баланс зерна катализатора также включает в себя обыкновенные дифференциальные уравнения для концентраций веществ твердой фазы реакции.

Уравнение теплового баланса для слоя катализатора получено осреднением по радиусу из уравнения теплового баланса зерна катализатора в предположении изотермичности зерна. Оно учитывает обмен энергией зерна катализатора и слоя газа, распространение тепла по скелету катализатора и суммарный тепловой эффект реакций.

Уравнения для описания движения газа в слое катализатора записаны, исходя из модели реактора идеального вытеснения [6].

Для математической модели выжиг коксовых отложений разработан вычислительный алгоритм на основе принципа расщепления по физическим процессам. Для обхода ограничений на шаг интегрирования по времени задачи химии решены трехстадийным методом Рунге-Кутты пятого порядка точности, успешно применяемым для расчета динамики веществ в многостадийных реакциях [7, 8]. Диффузионные потоки рассчитаны с использованием гиперболической модели [9].

На основе реализованного на языке C++ вычислительного алгоритма получена динамика распространения тепловых волн по регенерируемому слою катализатора. Скорость распространения фронта горения согласуется с оценками [2].

Для снижения длительности и величины температурного воздействия на слой катализатора хорошо зарекомендовал себя динамический режим выжиг коксовых отложений [10]. Он заключается в подаче реакционной смеси переменных температуры и состава. Для этого в математическую модель добавлены нестационарные граничные условия. Сравнительный анализ динамического и стационарного режима выявил преимущества первого.

Литература

1. Киселев О.В., Матрос Ю.Ш. Распространение фронта горения газовой смеси в зернистом слое катализатора. // Физика горения и взрыва. 1980. Т. 16, № 2. С. 25-30.
2. Боресков Г.К., Киселев О.В., Матрос Ю.Ш. Оценки основных характеристик фронта экзотермической реакции в неподвижном слое катализатора // Докл. АН СССР, 1979. Т. 248, № 2. С. 406-408.
3. Зельдович Я.Б. К теории распространения пламени // Журн. физ. Химии. 1948. Т. 22. С. 27.
4. Масагутов Р.М., Морозов Б.Ф., Кутепов Б.И. Регенерация катализаторов в нефтепереработке и нефтехимии. М.: Изд-во Химия, 1986. 144 с.
5. Малиновская О.А., Бесков В.С., Слинько М.Г. Моделирование каталитических процессов на пористых зернах. Новосибирск: Наука, 1975. 265 с.
6. Слинько М.Г. Моделирование химических реакторов. Новосибирск: Наука, 1968. 95 с.
7. Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Zagoruiko A.N. Numerical Simulation of Oxidative Regeneration of a Spherical Catalyst Grain // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. V. 15. P. 485–495. DOI: 10.1134/S2070048223030079.
8. Peskova E.E., Yazovtseva O.S. Application of the Explicitly Iterative Scheme to Simulating Subsonic Reacting Gas Flows. Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2024. Vol. 64, № 2. P. 326–339. DOI: 10.1134/S0965542524020106.
9. Chetverushkin B.N., Olkhovskaya O.G., Gasilov V.A. An Explicit Difference Scheme for a Nonlinear Heat Conduction Equation // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. V. 15. P. 529–538. DOI: 10.1134/S2070048223030031.

10. Балаев А.В., Дробышев В.И., Губайдуллин И.М., Масагутов Р.М.
Исследование волновых процессов в регенераторах с неподвижным слоем катализатора // Распространение тепловых волн в гетерогенных средах. 1983. С. 233-246.

MSC 34D20

Numerical simulation of the combustion front propagation through the catalyst layer

O.S. Yazovtseva

Steklov Mathematical Institute of Russian Academy of Sciences

Abstract: The work is devoted to a numerical study of the propagation of the combustion front in a fixed catalyst layer with a spherical grain shape during heterogeneous chemical reactions with a detailed description of the kinetics using the example of burning coke sedimentation from the catalyst layer. The mathematical model describing the burning is a system of equations of mathematical physics with initial boundary conditions. The computational algorithm for the system is based on the principle of splitting by physical processes with the selection of adequate integration methods for each of them. The combustion front is described as a heat wave moving through the catalyst layer. The model implements a dynamic burning mode, which consists in supplying a reaction mixture of variable temperature and composition. The analysis of the calculation results revealed the advantages of dynamic burning over stationary.

Keywords: combustion front, wave processes, oxidative regeneration, mathematical modeling, computational algorithm.

References

1. Kiselev O.V., Matros Yu.Sh. Propagation of the combustion front of a gas mixture in a granular layer of the catalyst // Physics of combustion and explosion. 1980. Vol. 16, № 2, P. 25-30.
2. Boreskov G.K., Kiselev O.V., Matros Yu.Sh. Estimates of the main characteristics of the front of an exothermic reaction in a fixed catalyst layer // The Proceedings of the USSR Academy of Sciences. 1979. Vol. 248, № 2. P. 406-408.
3. Zeldovich Ya.B. On the theory of flame propagation // Journal of Physics. Chemistry. 1948. Vol. 22. P. 27.
4. Masagutov R.M., Morozov B.F., Kutepov B.I. Regeneration of catalysts in oil processing and petrochemistry. Moscow, USSR, 1987. 144 p.
5. Malinovskaya O.A., Beskov V.S., Slinko M.G. Modeling of catalytic processes on porous grains. Novosibirsk: Nauka, 1975. 265 p.
6. Slinko M.G. Modeling of chemical reactors. Novosibirsk: Nauka, 1968. 95 p.
7. Gubaydullin I.M., Peskova E.E., Yazovtseva O.S., Zagoruiko A.N. Numerical Simulation of Oxidative Regeneration of a Spherical Catalyst Grain // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. V. 15. P. 485–495. DOI: 10.1134/S2070048223030079.
8. Peskova E.E., Yazovtseva O.S. Application of the Explicitly Iterative Scheme to Simulating Subsonic Reacting Gas Flows. Computational Mathematics and

Mathematical Physics. 2024. Vol. 64, № 2. P. 326–339. DOI:
10.1134/S0965542524020106.

9. Chetverushkin B.N., Olkhovskaya O.G., Gasilov V.A. An Explicit Difference Scheme for a Nonlinear Heat Conduction Equation // Mathematical Models and Computer Simulations. 2023. V. 15. P. 529–538. DOI: 10.1134/S2070048223030031.
10. Balaev A.V., Drobyshovich V.I., Gubaydullin I.M., Masagutov R.M. Investigation of wave processes in regenerators with a fixed catalyst layer // Propagation of heat waves in heterogeneous media. 1983. P. 233-246.