Управляемые системы, ИМ,ИК СО АН СССР 1970 г. выпуск 4-5.
УДК.66.01.011

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ В РЕАКТОРАХ С НЕПОДВИЖНЫМ СЛОЕМ КАТАЛИЗАТОРА

В.П.Гаевой, В.А.Кириллов

Для расчета стационарных режимов в реакторах с неподвижным слоем катализатора успешно применяется квазигомогенная модель. Однако при расчете нестационарных процессов в ряде случаев [1] необходимо учитывать внешний перенос вещества и тепла к наружной поверхности зерна катализатора.

Математическое описание нестационарных процессов в этом случае имеет вид:

$$\frac{\partial x_1}{\partial t'}+\frac{\partial x_1}{\partial \xi}=\sigma_1(x_2-x_1),$$

$$\varepsilon\frac{\partial x_2}{\partial t'}=\sigma_1(x_1-x_2)+W(x_2,\theta_2),$$

$$\frac{\partial \theta_1}{\partial t'}+\frac{\partial \theta_1}{\partial \xi}=\sigma_2(\theta_2-\theta_1),$$

$$\gamma\frac{\partial \theta_2}{\partial t'}-\frac{1}{Pe}\frac{\partial^2 \theta_2}{\partial \xi^2}=-\sigma_2(\theta_2-\theta_1)+\Delta\theta_{ad}W(x_2,\theta_2),$$

$$x_1\big|_{t'=0}=x_1^0(\xi),\ x_2\big|_{t'=0}=x_2^0(\xi);\ \theta_1\big|_{t'=0}=\theta_1^0(\xi),$$

$$\theta_2\big|_{t'=0}=\theta_2^0(\xi),\ x_1\big|_{\xi=0}=x_0(t'),\ \theta_2\big|_{\xi=0}=\theta_2(t')$$

$$\frac{\partial \theta_2}{\partial \xi}\Big|_{\xi=0}=Pe\,St\left[\theta_2-\varphi_0(t')\right],$$

$$\frac{\partial \theta_2}{\partial \xi}\Big|_{\xi=1}=-Pe\,St\left[\theta_2-\varphi_1(t')\right],$$

где все коэффициенты положительны и постоянны:

$$\sigma_1=\beta S_{yd}\cdot\tau,\ \sigma_2=\frac{\alpha\cdot S_{yd}\tau}{C_p},\ \tau=\frac{L}{U};$$

$$\varepsilon=\frac{\varepsilon_2(1-\varepsilon_1)}{\varepsilon_1},\ \gamma=\frac{C_k(1-\varepsilon_1)}{C_p},\ Pe=\frac{UL}{\lambda_{ck}}C_p;$$

$$W(x_2,\theta_2)=K\tau\cdot f(x_2,\theta_2),\ \Delta\theta_{ad}=\frac{\Delta T_{ad}}{E/RT_0^2};$$

$$t'=\frac{t}{\varepsilon_1\tau},\ \xi=\frac{l}{L},\ St=\frac{\beta}{U}\approx\frac{\alpha}{UC_p}$$

x_1, x_2 – степени превращения в потоке и катализаторе;
θ_1 и θ_2 – температура газа и катализатора соответственно;
β, α – коэффициенты массо- и теплообмена между потоком и катализатором; S_{yd} – удельная поверхность слоя; τ – время контакта; L – длина слоя; U – скорость газа на полное сечение аппарата; t – время; ε_1 – пористость слоя; ε_2 – пористость зерна; C_k,

C_p - теплоемкости зерна катализатора и газовой смеси соответственно; $\lambda_{ск}$ - теплопроводность слоя зерен; K - константа скорости реакции; $f(X_2, \theta_2)$ - кинетическая зависимость; ΔT_{ad} - адиабатический разогрев; E - энергия активации; R - газовая постоянная; T_0 - опорная температура; T - текущая температура; ℓ - продольная координата слоя.

Построим равномерную сетку с шагом $\Delta\xi = 1/M$ по пространственной переменной и $\Delta t = t_0/N$ - по временной. /M и N - целые числа/. В узлах сетки аппроксимируем исходную дифференциальную систему конечно-разностной:

$$\frac{X_{1,j}^{k+1} - X_{1,j}^{k}}{\Delta t} + \frac{X_{1,j}^{k+1} - X_{1,j-1}^{k+1}}{\Delta\xi} = \sigma_1 (X_{2,j}^{k+1} - X_{1,j}^{k+1});$$

$$\varepsilon \frac{X_{2,j}^{k+1} - X_{2,j}^{k}}{\Delta t} - \sigma_1 (X_{1,j}^{k+1} - X_{2,j}^{k+1}) = W(X_{2,j}^{k}, \theta_{2,j}^{k});$$

$$\frac{\theta_{1,j}^{k+1} - \theta_{1,j}^{k}}{\Delta t} + \frac{\theta_{1,j}^{k+1} - \theta_{1,j-1}^{k+1}}{\Delta\xi} = \sigma_2 (\theta_{2,j}^{k} - \theta_{1,j}^{k+1});$$

$$\frac{1}{Pe} \frac{\theta_{2,j+1}^{k+1} - 2\theta_{2,j}^{k+1} + \theta_{2,j-1}^{k+1}}{\Delta\xi^2} - \gamma \frac{\theta_{2,j}^{k+1} - \theta_{2,j}^{k}}{\Delta t} =$$

$$= \sigma_2 (\theta_{2,j}^{k+1} - \theta_{1,j}^{k+1}) - \Delta\theta_{ad} W(X_{2,j}^{k}, \theta_{2,j}^{k}) .$$

Или после приведения подобных:

$$(1 + \rho + \Delta t \sigma_1) X_{1,j}^{k+1} = X_{1,j}^{k} + \rho X_{1,j-1}^{k+1} + \Delta t \sigma_1 X_{2,j}^{k+1} ; \qquad /1/$$

$$(\varepsilon + \Delta t \sigma_1) X_{2,j}^{k+1} = \varepsilon X_{2,j}^{k} + \Delta t \sigma_1 X_{1,j}^{k+1} + \Delta t \; W(X_{2,j}^{k}, \theta_{2,j}^{k}) ; \qquad /2/$$

$$(1 + \rho + \Delta t \sigma_2) \theta_{1,j}^{k+1} = \theta_{1,j}^{k} + \rho \theta_{1,j-1}^{k+1} + \Delta t \sigma_1 \cdot \theta_{2,j}^{k} ; \qquad /3/$$

$$\frac{1}{Pe} \frac{\Delta t}{\Delta\xi} \left(\theta_{2,j+1}^{k+1} + \theta_{2,j-1}^{k+1} \right) - \left(\frac{2\Delta t}{Pe \cdot \Delta\xi^2} + \gamma + \Delta t \sigma_2 \right) \theta_{2,j}^{k+1} =$$

$$= \gamma \theta_{2,j}^{k} - \Delta t \sigma_2 \theta_{1,j}^{k+1} + \Delta t \, \Delta\theta_{ad} \, W(X_{2,j}^{k}, \theta_{2,j}^{k}) , \qquad /4/$$

где $\rho = \Delta t / \Delta\xi$.

С начальными и граничными условиями:

$$\left. \begin{aligned} & X_{1,j}^{0} = X_1^0 (j \cdot \Delta\xi), \quad X_{2,j}^{0} = X_2^0 (j \cdot \Delta\xi); \\ & \theta_{1,j}^{0} = \theta_1^0 (j \cdot \Delta\xi), \quad \theta_{2,j}^{0} = \theta_2^0 (j \cdot \Delta\xi); \\ & X_{1,0}^{k+1} = X_0 (k\Delta t + \Delta t), \; \theta_{1,0}^{k+1} = \theta_0 (k\Delta t + \Delta t); \end{aligned} \right\} \qquad /5/$$

$$\left. \begin{aligned} & \theta_{2,1}^{k+1} = (1 + \Delta\xi \cdot Pe \cdot St) \theta_{2,0}^{k+1} - \Delta\xi \cdot Pe \cdot St \cdot \varphi_0^{k+1}; \\ & \theta_{2,M-1}^{k+1} = (1 + \Delta\xi \cdot Pe \cdot St) \theta_{2,M}^{k+1} - \Delta\xi \cdot Pe \cdot St \cdot \varphi_1^{k+1}. \end{aligned} \right\} \qquad /6/$$

Решаем задачу /1/ - /6/ послойно, переходя с k -го слоя на $k+1$ -й /$k = 0, 1, \ldots, N-1$ /. Если найдены значения искомых переменных на k -м слое, то их значения на $k+1$ -м слое находим следующим образом: подставим выражение для $X_{2,j}^{k+1}$ из /2/ в правую часть уравнения /1/, получим рекуррентную формулу для нахождения $X_{1,j}^{k+1}$:

$$\left(1+\rho+\frac{\varepsilon\cdot\Delta t\cdot\sigma_1}{\varepsilon+\Delta t\sigma_1}\right)X_{1,j}^{k+1}=X_{1,j}^{k}+\rho X_{1,j-1}^{k+1}+$$
$$+\frac{\Delta t\cdot\varepsilon\cdot\sigma_1}{\varepsilon+\Delta t\sigma_1}X_{2,j}^{k}+\frac{\Delta t^2\sigma_1}{\varepsilon+\Delta t\sigma_1}W(X_{2,j}^{k};\theta_{2,j}^{k}). \qquad /7/$$

Вычисленные по /7/ значения $X_{1,j}^{k+1}$ подставляем в правую часть равенства /2/ и вычисляем $X_{2,j}^{k+1}$. По рекуррентной формуле /3/ вычисляем $\theta_{1,j}^{k+1}$ и подставляем в правую часть системы /4/, которую решаем методом прогонки. Условие применимости метода прогонки [2] к системе /4/ выполнено, так как

$$\Delta t/Pe\cdot\Delta\xi^2>0,\ \gamma+\Delta t\sigma_1\geqslant\gamma>0.$$

Кроме того, определитель матрицы системы /1/ - /2/ отличен от нуля при любом k, следовательно, система /1/ - /4/ - /6/ разрешима для $k=0,1,\ldots,N-1$

Исследуем устойчивость системы /1/ - /6/. Пусть $X_{1,j}^k$, $X_{2,j}^k$, $\theta_{1,j}^k$, $\theta_{2,j}^k$ - точное решение системы, а $\widetilde{X}_{1,j}^k$, $\widetilde{X}_{2,j}^k$, $\widetilde{\theta}_{1,j}^k$, $\widetilde{\theta}_{2,j}^k$ - приближенное.

Введем обозначения:

$$\delta_{i,j}^k=X_{i,j}^k-\widetilde{X}_{i,j}^k,\quad \varepsilon_{i,j}^k=\theta_{i,j}^k-\widetilde{\theta}_{i,j}^k.$$

Тогда $\delta_{i,j}^k$, $\varepsilon_{i,j}^k$ удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$(1+\rho+\Delta t\sigma_1)\delta_{1,j}^{k+1}=\delta_{1,j}^{k}+\rho\delta_{1,j-1}^{k+1}+\Delta t\sigma_1\delta_{2,j}^{k+1}; \qquad /8/$$

$$(\varepsilon+\Delta t\sigma_1)\delta_{2,j}^{k+1}=\varepsilon\delta_{2,j}^{k}+\Delta t\sigma_1\delta_{1,j}^{k+1}+\Delta t\left[\frac{\partial\widetilde{W}}{\partial X_2}\delta_{2,j}^{k}+\frac{\partial\widetilde{W}}{\partial\theta_2}\varepsilon_{2,j}^{k}\right]; \qquad /9/$$

$$(1+\rho+\Delta t\sigma_2)\varepsilon_{1,j}^{k+1}=\varepsilon_{1,j}^{k}+\rho\varepsilon_{1,j-1}^{k+1}+\Delta t\sigma_2\cdot\varepsilon_{2,j}^{k}; \qquad /10/$$

$$\frac{1}{Pe}\frac{\Delta t}{\Delta\xi^2}(\varepsilon_{2,j+1}^{k+1}+\varepsilon_{2,j-1}^{k+1})-\left(\frac{2\Delta t}{Pe\Delta\xi^2}+\gamma+\Delta t\sigma_2\right)\varepsilon_{2,j}^{k+1}=$$
$$=-\gamma\varepsilon_{2,j}^{k}-\Delta t\sigma_2\cdot\varepsilon_{2,j}^{k+1}+\Delta t\Delta\theta_{ad}\left[\frac{\partial W}{\partial X_2}\delta_{2,j}^{k}+\frac{\partial W}{\partial\theta_2}\varepsilon_{2,j}^{k}\right]. \qquad /11/$$

с начальными и граничными условиями:

$$\delta_{i,j}^0=X_{i,j}^0-\widetilde{X}_{i,j}^0,\quad \varepsilon_{i,j}^0=\theta_{i,j}^0-\widetilde{\theta}_{i,j}^0;$$
$$\delta_{1,0}^{k+1}=X_0^{k+1}-\widetilde{X}_0^{k+1},\quad \varepsilon_{1,0}^{k+1}=\theta_0^{k+1}-\widetilde{\theta}_0^{k+1}; \qquad /12/$$

$$\varepsilon_{2,1}^{k+1}-\varepsilon_{2,0}^{k+1}=\Delta\xi\cdot PeSt\left[\varepsilon_{2,0}^{k+1}-\mu_0^{k+1}\right];$$
$$\varepsilon_{2,M-1}^{k+1}-\varepsilon_{2,M}^{k+1}=\Delta\xi\cdot PeSt\left[\varepsilon_{2,M}^{k+1}-\mu_1^{k+1}\right];$$
$$\mu_0^{k+1}=\varphi_0^{k+1}-\widetilde{\varphi}_0^{k+1},\ \mu_1^{k+1}=\varphi_1^{k+1}-\widetilde{\varphi}_1^{k+1}, \qquad /13/$$

где разность $W(X_{2,j}^k;\theta_{2,j}^k)-W(\widetilde{X}_{2,j}^k;\widetilde{\theta}_{2,j}^k)$ **заменена** /по теореме о среднем/ на выражение:

$$\frac{\partial\widetilde{W}}{\partial X_2}\delta_{2,j}^k+\frac{\partial\widetilde{W}}{\partial\theta_2}\varepsilon_{2,j}^k$$

Оценим $|\delta_{i,j}^{k+1}|$, $|\varepsilon_{i,j}^{k+1}|$ через $|\delta_{i,j}^k|$, $|\varepsilon_{i,j}^k|$, коэффициенты системы /8/ - /11/ и граничные условия /12/ - /13/. Если $|\varepsilon_{2,j}^{k+1}|$ достигает своего максимального значения при $j=0$, либо при $j=M$, то из граничного условия /13/ следует

$$\max_j |\varepsilon_{2,j}^{k+1}| \le \max\{|\mu_0^{k+1}|, |\mu_1^{k+1}|\}. \qquad /14/$$

Если $|\delta_{1,j}^{k+1}|$, $|\varepsilon_{1,j}^{k+1}|$ достигают своих максимальных значений при $j=0$, то

$$\max_j |\delta_{1,j}^{k+1}| \le |\delta_{1,0}^{k+1}| \le \max_k |\delta_{1,0}^{k}|$$

$$\max_j |\varepsilon_{1,j}^{k+1}| \le |\varepsilon_{1,0}^{k+1}| \le \max_k |\varepsilon_{1,0}^{k}| \qquad /15/$$

Если $\delta_{1,j}^{k+1}$ принимает свое наибольшее положительное значение при некотором $j=\ell\ne 0$, то $\delta_{1,\ell-1}^{k+1} \le \delta_{1,\ell}^{k+1}$ Заменив в уравнении /8/ $\delta_{1,\ell-1}^{k+1}$ на $\delta_{1,\ell}^{k+1}$, получим:

$$(1+\Delta t\sigma_1)\delta_{1,\ell}^{k+1} \le \delta_{1,\ell}^{k} + \Delta t\sigma_1\delta_{2,\ell}^{k+1} \le$$
$$\le \max_j |\delta_{1,j}^{k}| + \Delta t\sigma_1 \max_j |\delta_{2,j}^{k+1}|. \qquad /16/$$

Если $\delta_{1,j}^{k+1}$ принимает свое наименьшее отрицательное значение при некотором $j=m\ne 0$, то $\delta_{1,m-1}^{k+1} \ge \delta_{1,m}^{k+1}$, и из уравнения /8/ следует

$$(1+\Delta t\sigma_1)\delta_{1,m}^{k+1} \ge \delta_{1,m}^{k} + \Delta t\sigma_1\delta_{2\,m}^{k+1} \ge -\max_j |\delta_{1,j}^{k}| + \Delta t\sigma_1 \max_j |\delta_{2,j}^{k+1}|. \qquad /17/$$

Введем обозначения:

$$|\delta_i^k| = \max_j |\delta_{i,j}^k|, \quad |\varepsilon_i^k| = \max_j |\varepsilon_{i,j}^k| \quad (i=1,2). \qquad /18/$$

Из неравенств /16/ - /17/, учитывая обозначения /18/, получим:

$$(1+\Delta t\sigma_1)|\delta_1^{k+1}| \le |\delta_1^k| + \Delta t\sigma_1 |\delta_2^{k+1}|. \qquad /19/$$

Аналогичным образом из уравнений /9/ - /11/ получаем неравенства:

$$(\varepsilon+\Delta t\sigma_1)|\delta_2^{k+1}| \le \varepsilon|\delta_2^{k+1}| + \Delta t\sigma_1|\delta_1^{k+1}| + \Delta t\cdot S[|\delta_2^k| + |\varepsilon_2^k|]; \qquad /20/$$

$$(1+\Delta t\sigma_2)|\varepsilon_1^{k+1}| \le |\varepsilon_1^k| + \Delta t\sigma_2|\varepsilon_2^k|; \qquad /21/$$

$$(\gamma+\Delta t\sigma_2)|\varepsilon_2^{k+1}| \le \gamma|\varepsilon_2^k| + \Delta t\sigma_2|\varepsilon_1^{k+1}| + \Delta t\,\Delta\theta_{a\partial} S[|\delta_2^k| + |\varepsilon_2^k|]. \qquad /22/$$

Складывая почленно неравенства /19/ - /22/, получаем:

$$|\delta_1^{k+1}| + \varepsilon|\delta_2^{k+1}| + |\varepsilon_1^{k+1}| + (\gamma+\Delta t\sigma_2)|\varepsilon_2^{k+1}| \le |\delta_1^k| + \varepsilon|\delta_2^k| + |\varepsilon_1^k| +$$
$$+ (\gamma+\Delta t\sigma_2)|\varepsilon_2^k| + \Delta t S(1+\Delta\theta_{a\partial})[|\delta_2^k| + |\varepsilon_2^k|] \qquad /23/$$

$$S = \max\left[\left|\frac{\partial W}{\partial X_2}\right| + \left|\frac{\partial W}{\partial \theta_2}\right|\right].$$

Если ввести норму

$$\|\delta^k\|_v = |\delta_1^k| + \varepsilon|\delta_2^k| + |\varepsilon_1^k| + (\gamma+\Delta t\sigma_2)|\varepsilon_2^k|,$$

то из неравенства /23/ следует неравенство:

$$\|\delta^{k+1}\|_v \le (1+\Delta t\cdot R_1)\|\delta^k\|_v, \qquad /24/$$

где

$$R_1 = S(1+\Delta\theta_{a\partial})/\min\{\varepsilon,\gamma\}.$$

Объединяя неравенства /I4/, /I5/ и /24/ получаем:

$$\|\delta^{k+1}\|_v \leq (1+\Delta t\cdot R_1)\max\{\|\delta^k\|_v, \|\delta_0\|_\varphi\}, \qquad /25/$$

где

$$\|\delta_0\|_\varphi = \max_k |\delta^k_{1,0}| + \max_k |\varepsilon^k_{1,0}| +$$

$$+(\gamma+\Delta t\sigma_2)\max\{\max_k |\mu^k_0|, \max_k |\mu^k_1|\}.$$

Применяя последовательно оценку /25/ для $k, k-1, \dots, 0$, получаем

$$\|\delta^{k+1}\|_v \leq (1+\Delta t\cdot R_1)^k \max\{\|\delta^0\|_v, \|\delta_0\|_\varphi\},$$

поскольку

$$(1+\Delta t\cdot R_1)^k \leq (1+\Delta t\cdot R_1)^N \leq e^{R_1\cdot t_0}$$

и

$$\max\{\|\delta^0\|_v; \|\delta_0\|_\varphi\} \leq \|\delta^0\|_v + \|\delta_0\|_\varphi,$$

то

$$\|\delta^{k+1}\|_v \leq e^{R_1 t_0}(\|\delta^0\|_v + \|\delta_0\|_\varphi).$$

Из последнего неравенства следует оценка:

$$\|\delta^{k+1}\|_c \leq e^{R_1\cdot t_0} K_1(\|\delta^0\|_c + \|\delta_0\|_c), \qquad /26/$$

где

$$K_1 = \frac{\max\{1, \varepsilon_1\gamma + \sigma_2 t_0\}}{\min\{1, \varepsilon, \gamma\}}$$

$$\|\delta^k\|_c = \sum_{i=1}^{2} \max_j |\delta^k_{i,j}| + \sum_{i=1}^{2} \max_j |\varepsilon^k_{i,j}|$$

$$\|\delta_0\|_c = \max_k |\delta^k_{1,0}| + \max_k |\varepsilon^k_{1,0}| + \max\{\max_k |\mu^k_0|, \max_k |\mu^k_1|\}.$$

Оценка /26/ не зависит ни от k, ни от Δt, ни от $\Delta\xi$. Если константы R_1 и K_1 ограничены, то разностная схема /I/ - /6/устойчива.

На основании рассмотренной разностной схемы была составлена типовая программа для расчета переходных режимов в адиабатическом реакторе с неподвижным слоем катализатора и проведен счет.

Поступила в редакцию I5.2.I970г.

Литература

I. Ю.Ш.Матрос, В.А.Кириллов, В.П.Гаевой, Исследование переходных режимов на пористом зерне катализатора. Управляемые системы, /в настоящем сборнике/, стр. I23-I30.

2. С.К.Годунов, В.С.Рябенький, Введение в теорию разностных схем, М., Госиздат., I962.