

На правах рукописи

Галдина Дарья Денисовна

**ТЕПЛОЙ ВЗРЫВ ЧАСТИЦ В СЛУЧАЙНОМ ПОЛЕ
ТЕМПЕРАТУРЫ СРЕДЫ**

Специальность 05.13.18 – Математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук



Москва – 2016

Работа выполнена в Московском государственном техническом
университете имени Н.Э. Баумана

**Научный
руководитель:** доктор технических наук, профессор
Деревич Игорь Владимирович

**Официальные
оппоненты:** **Пахомов Максим Александрович**, доктор физико-
математических наук, ведущий научный сотрудник
отдела термогазодинамики, Федеральное государственное
бюджетное учреждение науки Институт теплофизики им.
С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской
академии наук, профессор РАН

Аветисян Артур Робертович, кандидат физико-
математических наук, старший научный сотрудник,
Институт проблем безопасного развития атомной
энергетики Российской академии наук, доцент кафедры
проблем безопасного развития современных
энергетических технологий

**Ведущая
организация:** Федеральное государственное учреждение "Федеральный
исследовательский центр Институт прикладной
математики им. М.В. Келдыша Российской академии
наук"

Защита состоится « ___ » _____ 20__ г. в ___ час. 00 мин. на
заседании диссертационного совета Д 212.141.15 при Московском
государственном техническом университете имени Н.Э. Баумана по адресу:
Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1, зал заседания Учёного совета.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Московского
государственного технического университета имени Н.Э. Баумана и на сайте
bmstu.ru.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью, просим
отправлять по адресу: 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1, МГТУ
им. Н.Э. Баумана, ученому секретарю диссертационного совета Д 212.141.15.

Автореферат разослан « ___ » _____ 20__ г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат технических наук, доцент

Аттетков
Александр Владимирович

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Во многих технических приложениях, например, камеры сгорания авиационных двигателей, тепловые энергетические станции, каталитические химические реакторы и в природных явлениях, например, лесных пожарах, встречаются дисперсные системы химически реагирующих частиц в условиях существенных случайных флуктуаций температуры, концентрации реагентов, скорости потока. По сравнению с детерминированным значением параметров наличие флуктуаций характеристик среды вносит принципиально новые эффекты в физику процессов горения и теплового взрыва. основополагающий вклад в развитие современной теории горения и взрыва внесли целый ряд российских и зарубежных ученых: Н. Н. Семёнов, Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, В.Б. Либрович, А.Г. Мержанов, В.Р. Кузнецов, В.А. Сабельников, F. A. Williams, P. A. Libby, S. V. Pore и др.

Детерминированная теория горения разработана достаточно полно. В связи с широким использованием турбулентных реагирующих течений возникает проблема учета влияния флуктуаций скорости потока, концентраций реагентов и температуры на интенсивность химических экзотермических реакций. В случае гомогенного горения разработаны различные модели турбулентного смешения газообразных реагентов. В то же время вопрос о влиянии флуктуаций температуры на скорость химических превращений исследован недостаточно. В модели химической реакции Аррениуса скорость реакции экспоненциальным образом зависит от температуры. Поэтому следует ожидать существенного влияния флуктуаций температуры среды на интенсивность химических превращений.

Флуктуации температуры характерны не только для турбулентных течений, но и появляются в аппаратах химической технологии. Например, в реакторах синтеза искусственной нефти по технологии Фишера-Тропша (GTL, gas to liquid). В этой технологии из синтез-газа ($\text{CO} + \text{H}_2$) на кристаллитах кобальта, внедренных в пористую поверхность гранул катализатора, происходит образование высокомолекулярных органических соединений. Синтез сопровождается экзотермическими реакциями, мощность которых достаточна, чтобы вызвать существенные перегревы гранул катализатора. Флуктуации температуры в реакторах возникают при выключении реактора, при пуске и переходе на другие условия эксплуатации. Флуктуации температуры могут возникать и в системе охлаждения реактора. Охлаждение реактора осуществляется потоком кипящей воды при повышенном давлении. Известно, что в двухфазной среде могут появляться флуктуации температуры с заметной амплитудой.

Существенные флуктуации температуры характерны при обтекании гиперзвуковых летательных аппаратов в высоких слоях атмосферы. При обтекании обшивки летательного аппарата возможно возникновение экзотермических химических реакций.

Воспламенение дисперсного топлива и тепловой взрыв дисперсных гранул – быстрый рост температуры – являются важными явлениями, определяющими

компоновку камер сгорания и технологические условия эксплуатации каталитических реакторов.

В детерминированной теории горения и взрыва условия теплового взрыва определяются критической температурой, величина которой зависит от геометрии объекта и химической кинетики. Существенная зависимость скорости химической реакции от температуры и экстремальное свойство случайных процессов приводят к принципиально новым эффектам, изучение которых представляет интерес с научной и практической точек зрения.

В диссертации рассматривается влияние флуктуаций температуры среды на тепловую стабильность одиночных частиц с гетерогенными химическими реакциями, проходящими на внутренней пористой поверхности или на внешней поверхности частиц. Под тепловой стабильностью понимаются условия, когда частица не переходит в область высокой температуры, соответствующей диффузионной стадии горения.

Постановка задачи диссертационной работы близка к современному бурно развивающемуся направлению исследований о влиянии случайных флуктуаций параметров среды на поведение систем с резко меняющимися параметрами. Этот класс задач актуален для микробиологии, генетики, передачи информации, экономики.

Современная теория случайных процессов создана трудами советских, российских и зарубежных ученых: А.А. Марков, А.Н. Колмогоров, И.И. Гихман, А.В. Скороход, В.И. Тихонов, Р.Л. Стратонович, Р. Р. Lévy, К. Itô, Н. Risken, N.G. Kampen, W. Feller, H.A. Kramers и др.

Исследование диссертации ограничивается статистически стационарными случайными процессами, для которых справедлива эргодическая теорема: осреднение по ансамблю случайных реализаций процесса совпадает с осреднением по времени.

Выделяют два класса случайных процессов, свойства которых принципиально различаются. Критерием принадлежности к этим классам служит поведение автокорреляционной функции. Выделяют белый шум с дельта-коррелированной во времени автокорреляционной функцией и цветной шум с конечным временем затухания автокорреляционной функции. Приближение белого шума справедливо, когда временной интегральный масштаб автокорреляционной функции существенно меньше характерного времени релаксации системы. С математической точки зрения исследования с участием дельта-коррелированного во времени случайного процесса существенно более просты, чем с цветным шумом.

В литературе отмечается, что под воздействием цветного шума в поведении динамической системы появляются принципиально новые эффекты, исчезающие для белого шума.

В теоретических работах, выполненных в двухтысячных годах в России, были проведены исследования влияния белого шума на процесс воспламенения при гетерогенной химической реакции на поверхности частиц. Полученные результаты иллюстрируют ряд необычных эффектов, обусловленных экстремальными свойствами случайных процессов. Результаты, полученные в

этих исследованиях для дельта-коррелированного во времени процесса, некорректно использовать в случае, когда время релаксации системы сопоставимо с интегральным временным масштабом флуктуаций температуры среды. Это существенно сужает область практического использования выводов проделанных ранее исследований, кроме того пропадает ряд принципиальных эффектов, характерных для цветного шума. Следует также отметить, что аналитические формулы ранних исследований не подкреплялись ни экспериментом, ни данными прямого численного моделирования.

Актуальность диссертации следует из недостаточной разработанности методов аналитического и численного моделирования поведения частиц с гетерогенными экзотермическими химическими реакциями в условиях существенных флуктуаций температуры среды.

Основной целью диссертационной работы является изучение влияния флуктуаций температуры среды, моделируемых случайным процессом с конечным временем затухания автокорреляционной функции, на границу возникновения теплового взрыва. Скорость химической реакции аппроксимируется зависимостью Аррениуса. Исследования диссертации реализованы на основе двух принципиально различных подходов. Аналитический подход использует аппарат функции плотности распределения вероятности флуктуаций температуры частиц с учетом экзотермической химической реакции. В отличие от случая дельта-коррелированного во времени процесса для цветного шума необходима специальная процедура при получении замкнутого уравнения для функции плотности вероятности распределения температуры частиц. При замыкании уравнения для функции плотности вероятности используется эффективный современный математический аппарат, разработанный в трудах российского математика В.И. Кляцкина и основанный на методе функционального дифференцирования.

В диссертации предложен также метод прямого численного моделирования динамики изменения температуры частиц с химической экзотермической реакцией в случайном поле температуры среды. На основе решения системы стохастических дифференциальных уравнений моделируется как цветной шум флуктуаций температуры среды, так и случайное поведение температуры тепловыделяющих частиц в условиях возникновения теплового взрыва.

Полученные в диссертации оригинальные результаты представляют научный и практический интерес для развития теории дисперсных турбулентных потоков с химическими превращениями, а также при конструировании и выработке рекомендаций по выбору конструкторских решений и режимных параметров работы каталитических реакторов для синтеза искусственной нефти.

Для достижения поставленных целей потребовалось **решение следующих основных задач:**

- Переход от уравнений Лагранжа теплообмена одиночных частиц к континуальному описанию на основе функции плотности вероятности

распределения актуальной температуры частиц с гетерогенными химическими реакциями в случайном поле температуры среды.

– Получение замкнутого уравнения для функции плотности вероятности распределения актуальной температуры частиц. Исследование на основе системы уравнений для осредненной температуры и дисперсии температуры частиц взрывного поведения частиц с внутренним тепловыделением.

– Расчет времени ожидания теплового взрыва на основе уравнения Понтрягина для среднего времени первого пересечения случайным процессом границ заданного интервала.

– Получение аналитических решений для осредненных параметров случайной температуры частиц без тепловыделения, которые используются для тестирования метода прямого численного моделирования.

– Разработка метода прямого численного моделирования актуальной температуры частиц с внутренним тепловыделением в случайном поле температуры среды. Тестирование метода численного моделирования. Сопоставление результатов аналитического и численного методов исследования.

Научная новизна. В диссертации получены следующие новые научные результаты, которые выносятся на защиту:

– Впервые получено замкнутое уравнение для функции плотности вероятности распределения температуры частиц с внутренними экзотермической реакцией при температуре среды, моделируемом случайным процессом Гаусса с конечным временем вырождения автокорреляционной функции (цветной шум).

– Впервые на основе системы сопряженных уравнений для средней температуры и дисперсии температуры проведен анализ взрывного поведения частиц с тепловыделением в случайном поле температуры среды.

– Впервые на основе решения уравнения Понтрягина для среднего значения первого времени пересечения случайным процессом заданных границ интервала проведены расчеты времени задержки теплового взрыва.

– Впервые на основе решения системы стохастических дифференциальных уравнений предложен метод прямого численного моделирования актуальной температуры частиц с внутренним тепловыделением в среде с температурой моделируемой цветным шумом. Проведен анализ результатов, полученных аналитическими методами и прямым численным моделированием.

Практическая значимость диссертационной работы связана с ее прикладной ориентацией. Результаты работы использованы в ФГБНУ ТИСНУМ (г. Троицк, Россия) при разработке промышленного реактора Фишера-Тропша с неподвижным слоем катализатора мощностью 5000 нм³/ч с продуктивностью 500 кг/ч стабильных жидких углеводородов.

Методы исследования. В диссертации используются методы теории горения, теории обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений математической физики, теории случайных процессов и методы функционального анализа, методы численного анализа математических моделей и вычислительной математики.

Достоверность и обоснованность полученных результатов и выводов гарантируется строгостью используемого математического аппарата и подтверждается сравнением результатов, полученных с использованием вычислительных экспериментов с аналитическим решением. Сформулированные в работе допущения обоснованы как путем их содержательного анализа, так и методами математического моделирования.

Апробация результатов работы. Результаты работы докладывались на 8-ом Международном симпозиуме по турбулентности, тепло- и массопереносу (Сараево, Босния и Герцеговина, 2015), Всероссийской конференции «Авиадвигатели XXI века» (Москва, 2015), 6-ой Российской национальной конференции по теплообмену (Москва, 2014), Всероссийской конференции XXXI «Сибирский теплофизический семинар» (Новосибирск, 2014), XIX Школе-семинаре молодых ученых и специалистов под руководством РАН А.И.Леонтьева (Орехово-Зуево, Россия, 2013), 7-ой Всероссийской конференции «Необратимые процессы в природе и технике» (Москва, 2013), Международной конференции «Математические модели технических наук» (Париж, Франция, 2012), XVII Школе-семинаре молодых ученых и специалистов под руководством РАН А.И.Леонтьева (Зеленоград, Россия, 2011).

Результаты использованы при выполнении проектов, поддержанных РФФИ: **11-08-00645-а** (Численное и экспериментальное исследование процессов тепло и массопереноса в реакторах с неподвижным слоем катализатора для синтеза высокомолекулярных углеводов), **14-08-00970-а** (Теоретическое и экспериментальное исследование влияния флуктуаций тепловых и гидродинамических параметров на тепловую стабильность каталитического реактора синтеза Фишера-Тропша).

Публикации. Основные научные результаты диссертации опубликованы в 12 научных работах, в том числе в 5 статьях из Перечня ведущих рецензируемых научных журналов и изданий и 5 трудах Международных и Российских конференций.

Личный вклад соискателя. В диссертацию включены лишь результаты, полученные лично соискателем и результаты, в получении которых соискатель принимал непосредственное активное участие. Заимствованный материал обозначен в работе ссылками.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы, трех приложений и списка обозначений. Диссертационная работа изложена на 93 страницах, содержит 15 иллюстраций. Библиография включает в себя 116 наименований.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность избранной темы, степень ее разработанности, цели и задачи, научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, методология и методы диссертационного исследования, положения, выносимые на защиту, степень договоренности и апробация результатов.

В первой главе представлен обзор литературы по влиянию флуктуаций температуры на потерю тепловой устойчивости частиц с гетерогенной экзотермической реакцией, проходящей на поверхности пор в частице. Флуктуации температуры оказывают наибольшее воздействие на границу начала теплового взрыва или воспламенения частиц. Отмечается, что в научной литературе вопрос о влиянии флуктуаций температуры на динамику потери тепловой устойчивости исследован недостаточно. Изучение потери тепловой стабильности в случайном поле температур среды требует привлечения современных методов теории случайных процессов и функционального анализа. В обзоре указаны теоретические работы, имеющие непосредственное отношение к теме диссертации. Анализируются принципиальные ограничения, в которых выполнены эти работы. Формулируются цели и задачи исследования, новизна полученных результатов и структура диссертации.

Во второй главе описывается метод аналитического исследования влияния флуктуации температуры на интенсивность тепловыделений при гетерогенной химической реакции в частицах. Уравнение для температуры одиночной сферической частицы $\Theta_p(t)$, внутри которой проходит экзотермическая химическая брутто-реакция, а тепло с поверхности отводится за счет теплоотдачи, имеет вид

$$\frac{d\Theta_p(t)}{dt} = \frac{1}{\tau_\Theta} [\Theta_f(t) - \Theta_p(t)] + W_Q(\Theta_p(t)). \quad (1)$$

Здесь $\Theta_f(t)$ – случайная температура газа, $W_Q(\Theta_p) = (QA/c_p) \exp(-E/R_u\Theta_p)$ – аппроксимация Аррениуса мощности тепловыделения в результате химической реакции, Q – тепловой эффект реакции, A – предэкспоненциальный множитель, E – энергия активации, R_u – универсальная газовая постоянная, c_p – удельная теплоемкость материала частиц, τ_Θ – время тепловой релаксации частиц.

Степень вовлечения частиц во флуктуации температуры зависит от параметра тепловой инерции частиц $\Omega_\Theta = \tau_\Theta/T_\Theta$ (T_Θ – интегральный временной масштаб автокорреляционной функции флуктуаций температуры среды).

На Рис. 1 представлена классическая диаграмма Семенова, на которой показаны стационарные решения уравнения (1) без флуктуаций температуры среды.

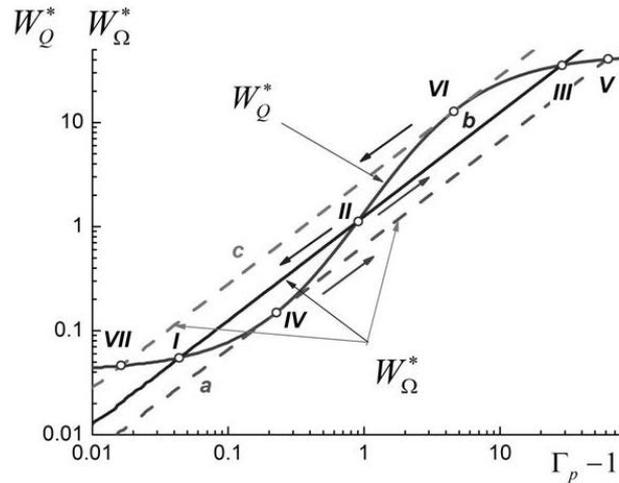


Рис. 1. Диаграмма Семенова. Стационарные значения температуры *I-VI* обозначены точками. Стрелками показано изменение температуры частиц. Штриховые кривые проходят через касательные точки с координатами

На Рис. 1 изображены $W_{\Omega}^* = -(1 - \Gamma_p) / \Omega_{\Theta}$ – безразмерная мощность теплоотдачи с поверхности частиц, $\Gamma_p = \Theta_p / \langle \Theta_f \rangle$ – безразмерная температура частиц, $W_Q^* = Q^* \exp(-E^* / \Gamma_p)$ – безразмерная мощность тепловыделения ($Q^* = QAT_{\Theta} / c_p \langle \Theta_f \rangle$ – безразмерный тепловой эффект реакции). Из Рис. 1 видно, что значение температуры частицы, соответствующее корню **II** на диаграмме Семенова, является критическим. Бесконечно малое превышение этого значения приводит к экспоненциальному росту температуры (тепловому взрыву, воспламенению) и переходу в область высокой температуры, соответствующей температуре частиц **III**. В детерминированной теории тепловой взрыв произойдет, только если начальная температура частиц, которые вносятся в среду, превышает значение второго корня на диаграмме Семенова. Результаты работы относятся к наиболее интересному диапазону температур частиц с тремя стационарными корнями.

После осреднения по ансамблю случайных реализаций температуры газа выделяются осредненная постоянная компонента $\langle \Theta_f \rangle$ и флуктуации $\theta_f(t)$ вдоль траектории частицы, которые считаются заданными,

$$\Theta_f(t) = \langle \Theta_f \rangle + \theta_f(t), \quad \langle \theta_f(t) \rangle = 0.$$

Угловыми скобками обозначается результат осреднения по ансамблю. Флуктуации температуры газа, которые «видит» частица, моделируются статистически стационарным случайным процессом Гаусса с конечным временем вырождения автокорреляционной функции (цветной шум).

Исследование проводится на основе функции плотности распределения вероятности (ФПВ) распределения температуры частиц

$$\Phi(\Theta_p, t) = \langle \delta(\Theta_p - \Theta_p(t)) \rangle.$$

Здесь $\delta(x)$ – дельта-функция Дирака, Θ_p – координата в фазовом пространстве. Угловыми скобками обозначается результат осреднения по ансамблю.

Функция плотности вероятности содержит всю информацию об осредненных параметрах флуктуаций температуры частиц.

В этой же главе выводится замкнутое уравнение для функции плотности вероятности актуальной температуры частиц. Процесс замыкания уравнения для функции плотности вероятности в случае цветного шума основан на аппарате функционального дифференцирования, разработанного в трудах российского математика В.И. Кляцкина. Замкнутое уравнение для функции плотности вероятности имеет вид

$$\frac{\partial \Phi(\Theta_p, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \Theta_p} \left\{ \left[\frac{\langle \Theta_f \rangle - \Theta_p}{\tau_\Theta} + \frac{QA}{c_p} \exp\left(-\frac{E}{R_u \Theta_p}\right) \right] \Phi(\Theta_p, t) \right\} = \frac{\langle \Theta_f^2 \rangle}{\tau_\Theta} \frac{\partial^2}{\partial \Theta_p^2} [f_\Theta(\Theta_p, t) \Phi(\Theta_p, t)]. \quad (2)$$

Здесь $f_\Theta(\Theta_p, t)$ – функция отклика частиц, учитывающая генерацию флуктуаций температуры частиц в результате вовлечения частиц во флуктуации температуры среды и колебания скорости химической реакции. Для инерционных частиц без химической реакции функция отклика всегда меньше единицы. Колебания мощности тепловыделения приводят к дополнительной генерации флуктуаций температуры, в этом случае функция отклика может быть существенно выше единицы. Отметим, что этот эффект реализуется только для цветного шума, моделирующего флуктуации температуры среды. В диссертации автокорреляционная функция флуктуаций температуры среды экспоненциально затухает во времени. Это приближение соответствует временной структуре энергоемких флуктуаций температуры в турбулентных потоках.

Стационарное решение уравнения для функции плотности вероятности (2) является бимодальным, максимумы расположены в области температур частиц, совпадающих с **I** и **III** корнями на диаграмме Семенова (Рис. 2). Из Рис. 2 следует, что в среде с флуктуациями температуры тепловой взрыв безусловно произойдет.

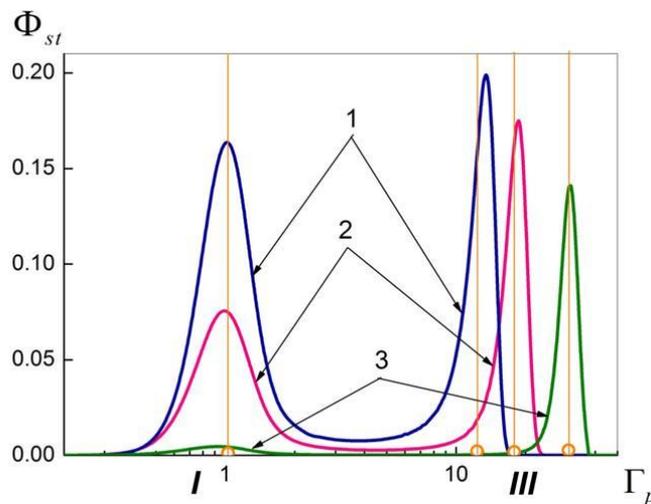


Рис. 2. Стационарное распределение ФПВ случайной температуры частицы:
 Ω_Θ : 1 – 0.8; 2 – 1.0; 3 – 1.5

Анализ динамики теплового взрыва проводится на основе сопряженной системы уравнений для осредненной температуры и дисперсии температуры частиц, которая получается из замкнутого уравнения (2). Уравнения для моментов флуктуаций температуры частиц являются сопряженными. Рост осредненной температуры увеличивает дисперсию температуры частиц, которая, в свою очередь, вызывает увеличение скорости химической реакции и приводит к дальнейшему разогреву частиц.

На Рис. 3 показан взрывной характер поведения осредненной температуры и дисперсии температуры частиц. На рисунке $\gamma_f = \theta_f / \langle \Theta_f \rangle$, $\gamma_p = \theta_p / \langle \Theta_f \rangle$ – флуктуации температуры среды и частиц, $\sigma_f = \langle \gamma_f^2 \rangle^{1/2}$.

Следует отметить, что начальная температура частиц на Рис. 3 совпадает с осредненной температурой среды, которая лежит ниже первого корня на диаграмме Семенова. В детерминированной теории при таких начальных данных воспламенение не произойдет. В среде со случайной температурой наблюдается монотонный дрейф температуры частиц к критическому уровню начала теплового взрыва.

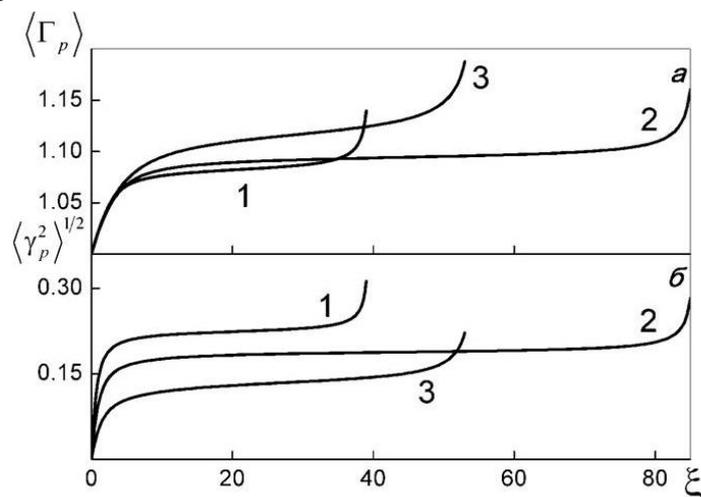


Рис. 3. Зависимость безразмерных температуры (а) и амплитуды флуктуаций температуры частиц (б) от безразмерного времени: 1 – $\Omega_{\ominus} = 1.5$, $\sigma_f = 10\%$;
2 – $\Omega_{\ominus} = 1$, $\sigma_f = 12\%$; 3 – $\Omega_{\ominus} = 0.7$, $\sigma_f = 15\%$

Во второй главе показано, что временная структура корреляции флуктуации температуры газа обуславливает самоускоряющийся дрейф температуры частиц к критическому значению, после которого частицы воспламеняются. Критический уровень температуры устанавливается на основе классической диаграммы Семенова.

В третьей главе проведен спектральный анализ параметров флуктуации температуры частиц без химической реакции. Получены замкнутые выражения для спектров флуктуаций температуры частиц через спектр флуктуаций температуры среды. Получены формулы для дисперсии и автокорреляционной функции флуктуации температуры частиц для различных аппроксимаций спектра флуктуаций температуры среды. Полученные формулы используются

для тестирования метода прямого численного моделирования, разработанного в четвертой главе диссертации.

В четвертой главе проведен анализ среднего времени ожидания теплового взрыва. Исследования проведены в рамках аналитического подхода и на основе метода прямого численного моделирования. Расчеты среднего времени ожидания теплового взрыва проведены на основе уравнения Понтрягина для среднего времени первого выхода случайного процесса за установленные границы интервала. Уравнение Понтрягина является следствием замкнутого уравнения для функции плотности вероятности (2). В качестве границ интервала выбираются осредненное значение температуры среды и критическая температура, соответствующая второму корню на диаграмме Семенова. Под средним временем ожидания теплового взрыва понимается среднее время первого пересечения случайной температурой частиц критического значения, равного второму корню на диаграмме Семенова. Представлены результаты расчетов среднего времени ожидания воспламенения для различных интенсивностей флуктуаций температуры среды и параметра тепловой инерции. Показано, что использование приближения дельта-коррелированным во времени процессом флуктуаций температуры среды приводит к существенному (на порядок) увеличению времени ожидания теплового взрыва.

В этой же главе представлена модель прямого численного моделирования воспламенения частиц в случайном поле температур. Моделирование временной структуры флуктуаций температуры среды осуществляется на основе решения системы стохастических дифференциальных уравнений

$$\frac{d\gamma_f(\xi)}{d\xi} = \eta(\xi) - \gamma_f(\xi); \quad (3)$$

$$\frac{d\Gamma_p(\xi)}{d\xi} = \frac{(1 + \gamma_f(\xi)) - \Gamma_p(\xi)}{\Omega_0} + Q^* \exp\left(-\frac{E^*}{\Gamma_p(\xi)}\right). \quad (4)$$

Здесь $\xi = t/T_0$ – безразмерное время; $\eta(\xi)$ – затравочный дельта-коррелированный во времени случайный процесс Гаусса с нулевым средним значением, дисперсией $\langle \eta^2 \rangle$ и автокорреляционной функцией

$$\langle \eta(\xi') \eta(\xi'') \rangle = \langle \eta^2 \rangle \Psi_0(\xi' - \xi'') = 2\tau_0 \langle \eta^2 \rangle \delta(\xi' - \xi'').$$

Численное интегрирование системы стохастических обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ) (3) и (4) осуществляется методом Эйлера-Маруямы. Результаты численного моделирования сопоставляются с точными аналитическими результатами третьей главы. Осредненные результаты получаются в результате осреднения по большому числу траекторий $10^4 - 10^6$.

На Рис. 4 и Рис. 5 показано сопоставление данных прямого численного моделирования с аналитическими результатами третьей главы. Видно, что автокорреляционная функция флуктуаций температуры среды экспоненциально спадает во времени.

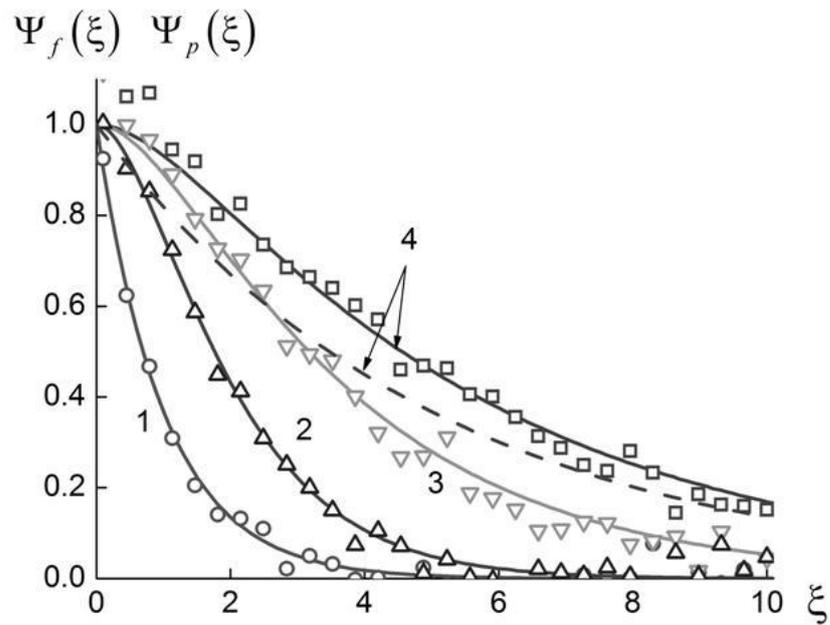


Рис. 4. Автокорреляционные функции газа (1) и частиц (2)-(4): Ω_{\odot} : 2 – 1; 3 – 3; 4 – 5. Точки – данные численного моделирования, кривые – расчет по аналитическим формулам

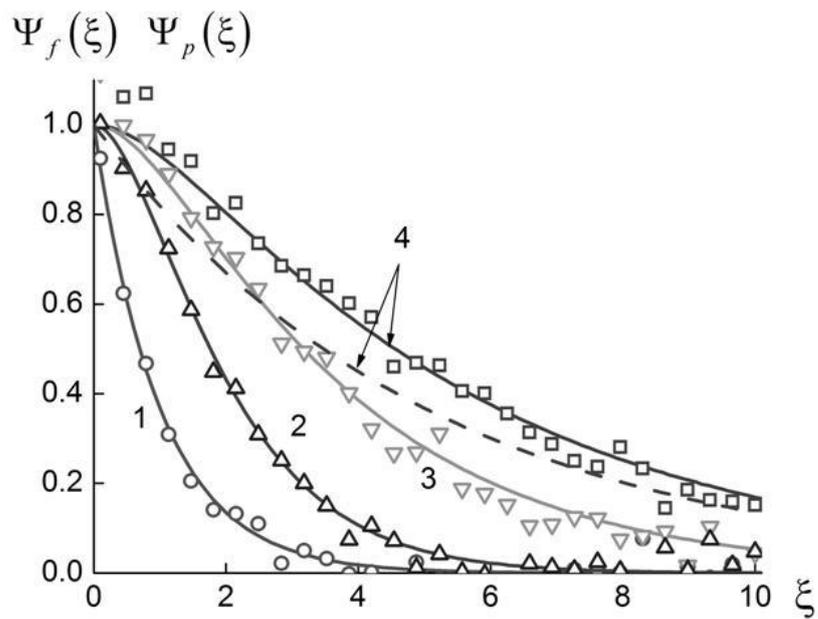


Рис.5. Автокорреляционные функции газа (1) и частиц (2) – (4): 2 – $\Omega_{\odot} = 1$; 3 – $\Omega_{\odot} = 3$; 4 – $\Omega_{\odot} = 5$. Точки – данные численного моделирования, кривые – расчет по аналитическим формулам.

Численное моделирование позволяет получить детальную картину развития теплового взрыва. На Рис. 6 представлен пример типичной траектории температуры частиц в случайном поле температуры среды. Видно, что актуальная температура частиц дрейфует к критическому значению, после которого происходит тепловой взрыв. Отметим, что в детерминированной теории тепловой взрыв при начальной температуре частиц, равной температуре среды (ниже, чем значение первого корня на диаграмме Семенова), в принципе невозможен. Осреднение по ансамблю реализаций случайного времени первого пересечения актуальной температурой частиц критического значения представляет среднее время ожидания теплового взрыва.

В диссертации проведено сопоставление среднего времени ожидания теплового взрыва, вычисленного по аналитическому приближению путем решения уравнения Понтрягина и найденного путем прямого численного моделирования.

На Рис. 7 представлен пример расчета времени ожидания теплового взрыва по двум методикам. Видно, что аппроксимация белого шума для флуктуации температуры среды завышает на порядок время воспламенения частиц в случайной среде. На рисунке $\Xi_{[\Gamma_{\min}, \Gamma_{\max}]} = T_{[\Theta_{\min}, \Theta_{\max}]} / T_{\Theta}$ – безразмерное время первого пересечения случайной температурой частиц критического значения $\Theta_{\max} = \Theta_{cr}$. Смысл Рис. 7 в следующем. Если погрузить в среду с флуктуациями температуры частицу с внутренним тепловыделением с начальной температурой Θ_p^0 ($\Gamma_p^0 = \Theta_p^0 / \langle \Theta_f \rangle$), то среднее значение времени ожидания теплового взрыва будет равно $T_{[\Theta_{\min}, \Theta_{\max}]}$.

В приложении П.1. представлен строгий вывод из первых принципов уравнения релаксационного типа для температуры частиц (1). Проведена оценка характерных временных масштабов, при которых достаточно рассмотрение температуры, осредненной по объему частиц.

В приложении П.2. содержатся некоторые сведения по теории функциональных производных и детали замыкания уравнения для функции плотности вероятности.

В приложении П.3. представлено замкнутое уравнение для функции плотности вероятности для дельта-коррелированных во времени флуктуаций температуры среды. Отмечается принципиальное отличие от выведенного в диссертации уравнения (2) для цветного шума.

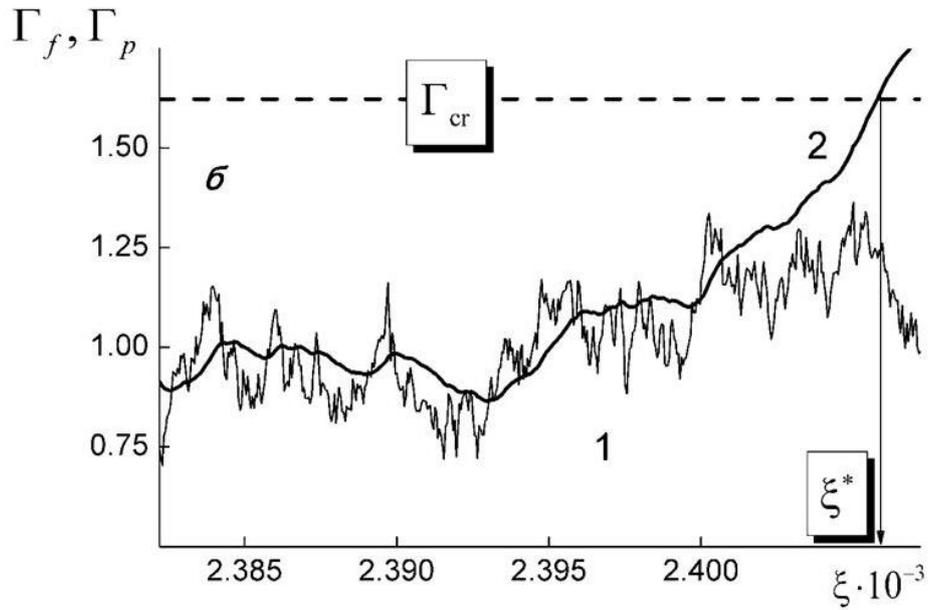


Рис. 6. Пример случайных температур газа (1) и частиц с тепловыделением (2). Точка пересечения температурой частиц критического уровня (штриховая линия) является случайным временем воспламенения

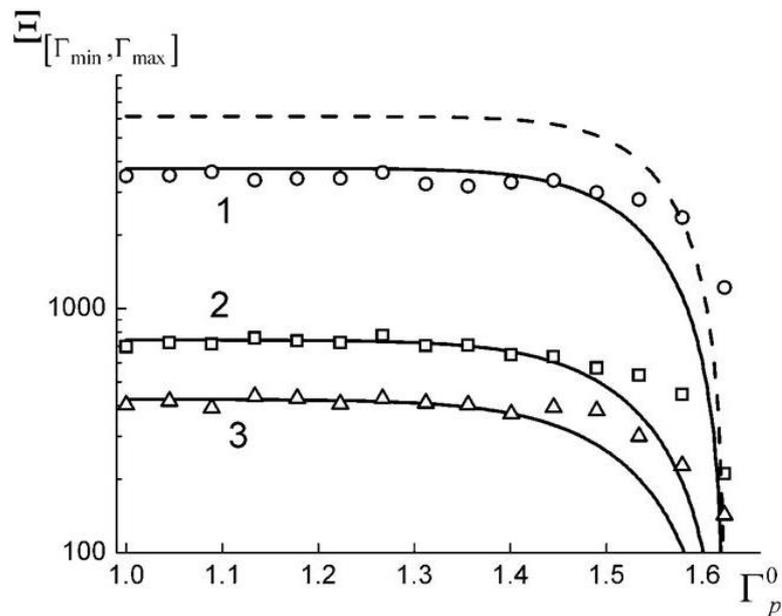


Рис. 7. Влияние амплитуды флуктуаций температуры газа на время ожидания теплового взрыва частиц $\Omega_0 = 1.5$. Точки – результаты прямого численного моделирования, кривые – решение уравнения Понтрягина: 1 – $\langle \gamma_f^2 \rangle^{1/2} = 10\%$; 2 – $\langle \gamma_f^2 \rangle^{1/2} = 12\%$; 3 – $\langle \gamma_f^2 \rangle^{1/2} = 13\%$. Пунктиром показан результат для белого шума флуктуаций температуры газа $\langle \gamma_f^2 \rangle^{1/2} = 13\%$

Основные результаты диссертационной работы

В диссертации разработан аналитический и численный методы исследования влияния флуктуаций температуры среды на процесс потери тепловой устойчивости частиц с гетерогенной экзотермической химической реакцией. Реакция может проходить на пористой поверхности внутри частицы или на ее поверхности.

1. Получено замкнутое уравнение для функции плотности вероятности распределения случайной температуры частиц. Показано, что колебания тепловыделения в результате экзотермической химической реакции вносят существенный вклад в дисперсию флуктуаций температуры частиц. Амплитуда флуктуаций температуры частиц растет по мере приближения к критической температуре, определяемой на основе диаграммы Семенова.

2. Найдено решение стационарного уравнения для функции плотности вероятности случайной температуры частиц. Стационарное распределение имеет бимодальный характер, что свидетельствует о безусловном возникновении теплового взрыва. Максимумы стационарной функции распределения расположены при температурах, соответствующих кинетическому и диффузионному режимам горения частиц.

3. Выведена замкнутая система самосогласованных уравнений для средней температуры и дисперсии температуры частиц. Показано, что температура частиц монотонно дрейфует к критическому значению вследствие взаимного усиления дисперсии температуры и среднего значения температур частиц. На основе численного решения полученной системы уравнений показано, что поведение средней температуры и дисперсии температуры частиц имеет взрывной характер.

4. Записано уравнение Понтрягина для среднего времени первого пересечения температурой частиц критического значения, после которого наступает тепловой взрыв. Это время трактуется как время задержки теплового взрыва.

5. На основе спектрального анализа найдены аналитические выражения для интенсивности флуктуаций температуры и автокорреляционной функции флуктуаций температуры частиц без тепловыделения. Эти результаты использованы для тестирования метода прямого численного моделирования.

6. Предложен метод прямого численного моделирования актуальной температуры частиц с тепловыделением в среде с флуктуациями температуры среды. Флуктуации температуры среды с конечным временем вырождения автокорреляционной функции и случайная температура частиц рассчитываются на основе системы стохастических дифференциальных уравнений. Метод численного моделирования тестируется на основе сопоставления с аналитическими результатами, полученными в диссертации. Время задержки теплового взрыва, найденное из решения уравнения Понтрягина и на основе метода прямого численного моделирования, удовлетворительно согласуются.

Основные результаты диссертации отражены в работах:

- 1. Моделирование гидродинамики в микроканальном реакторе Фишера-Тропша / И.В. Деревич, Д.Д. Галдина и др. // Теоретические основы химической технологии. 2012. № 1 (46). С. 10-23. (1,03 п.л./ 0,92 п.л.)**
2. Derevich I., Galdina D. Explosive behavior of catalyst granules with internal heat release in a fluctuating temperature field. – Recent advances in systems science and mathematical modelling // Proceedings of the 3rd International Conference on Mathematical Models for Engineering Science (MMES '12). Paris, France, 2012. P. 264-270. (0,58 п.л./ 0,3 п.л.)
3. Галдина Д.Д. Использование современных методов функционального анализа для исследований взрывных эффектов во флуктуационных средах // Наука и образование. МГТУ им. Н.Э.Баумана. Электронный журнал. 2013. № 3. URL: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/564020.html> (дата обращения: 30.09.2016) (0,54 п.л./ 0,3 п.л.)
4. Derevich I., Galdina D. Simulation of thermal explosion of catalytic granule in fluctuating temperature field // Journal of Applied Mathematics and Physics. 2013. № 1. P. 1-7. URL: <http://dx.doi.org/10.4236/jamp.2013.15001> (дата обращения: 30.09.2016) (0,75 п.л./ 0,5 п.л.)
- 5. Деревич И.В., Галдина Д.Д. Численное исследование тепловой стабильности гранулы катализатора с внутренним тепловыделением в случайном поле температуры среды // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер.: Естественные науки. 2014. № 2. С. 3 – 20. (1,07 п.л./ 0,95 п.л.)**
6. Кризис гидравлического сопротивления в микроканальных реакторах Фишера-Тропша / Д.Д. Галдина и др. // Труды VI Российской национальной конференции по теплообмену. М., 2014. С. 923-926. (0,62 п.л./ 0,3 п.л.)
7. Автоколебания в частице катализатора синтеза Фишера-Тропша / Д.Д. Галдина и др. // Сибирский теплофизический семинар: Тез. докл. XXXI Всероссийской конференции. Новосибирск, 2014. С 65. (0,42 п.л./ 0,3 п.л.)
- 8. Derevich I., Mordkovich V., Galdina D. Thermal explosion of particles with internal heat generation in turbulent temperature of surrounding fluid.// Proceedings of the Eighth International Symposium On Turbulence, Heat and Mass Transfer. Sarajevo, Bosnia and Herzegovina, 2015. P. 465-468. (0,62 п.л./ 0,3 п.л.)**
9. Деревич И.В., Галдина Д.Д. Нестационарные эффекты в реакторе Фишера-Тропша с неподвижным слоем частиц катализатора // Математика и математическое моделирование. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Электронный журнал. 2015. № 1. С. 18-35. URL: <http://mathmjournal.ru/doc/777093.html> (дата обращения: 30.09.2016) (0,71 п.л./ 0,38 п.л.)
10. Деревич И.В., Галдина Д.Д. Математическое моделирование теплового взрыва гранул с внутренним тепловыделением в случайном поле температур // Авиадвигатели XXI века: Тез. докл. Всероссийской научно-технической конференции, посвященной 85-летию Центрального института авиационного моторостроения им. П.И. Баранова. М., 2015. С.1123-1125. (0,65 п.л./ 0,34 п.л.)

11. Деревич И.В., Галдина Д.Д. Влияние временной структуры флуктуаций температуры газа на воспламенение мелкодисперсных частиц // Теплофизика и аэромеханика. 2016. № 6. С. (0,65 п.л./ 0,3 п.л.)

12. Деревич И.В., Галдина Д.Д. Время задержки воспламенения мелкодисперсных частиц при случайной температуре газа // Теплофизика и аэромеханика. 2017. № 2. С. (0,63 п.л./ 0,3 п.л.)

Подписано к печати _____ г. Заказ № ____
Объём – 1.0 печ.л. Тираж 100 экз.
Типография МГТУ им. Н.Э. Баумана
105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д.5, стр.1
(499) 263-62-01