На правах рукописи

Елюхина Инна Владимировна

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОЦЕНИВАНИЕ НЕИЗВЕСТНЫХ ПАРАМЕТРОВ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ И ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Специальность 02.00.04 - Физическая химия

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Челябинск 1998

Работа выполнена на кафедре промышленной теплоэнергетики Южно-Уральского государственного университета.

Научный руководитель: заслуженный деятель науки и техники РФ, доктор технических наук, профессор Торопов Е.В.

Официальные оппоненты: доктор технических наук профессор Л.П.Холпанов;

кандидат физико-математических наук, доцент Л.А.Прокудина.

Ведущая организация: Уральский научно-исследовательский теплотехнический институт (УралВТИ, г.Челябинск).

Защита состоится "15" апреля 1998 г., в _____ часов, на заседании специализированного совета Д 053.13.03 по защите диссертаций на соискание ученой степени доктора наук при Южно-Уральском государственном университете.

Отзывы в двух экземплярах, заверенных гербовой печатью, просим присылать по адресу: 454080, г.Челябинск, пр. им.В.И.Ленина, 76, ЮУрГУ, совет ЮУрГУ.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке университета

Автореферат разослан "___" _____ 1998 г

Ученый секретарь
специализированного совета
д.ф.-м.н., профессор Б.Р.Гельчинский

Актуальность проблемы. При исследовании физико-химических процессов, протекающих в промышленных установках, возникают проблемы, связанные с описанием механизма турбулентного переноса, в частности, задачи построения надёжных адекватных реальности математических моделей турбулентных течений в плоских каналах и рабочих процессов в топочных устройствах с кипящим слоем.

Турбулентные течения газов и жидкостей являются основными режимами течений. Имеется большое число научных публикаций по теории турбулентных течений, но вопросы их практических расчетов освещены недостаточно. Наиболее часто на практике для замыкания системы уравнений используются полуэмпирические гипотезы. В химической промышленности, металлургии, энергетике достаточно распространены аппараты с плоскими и прямоугольными каналами, для которых замыкающие соотношения для длины пути смешения и вихревой вязкости, полученные ранее для течений в круглой трубе и пограничном слое, изучены слабо.

Необходимо построить математическое описание турбулентных течений в плоских каналах, получить надёжные зависимости для практических приложений, дающие достаточно точное соответствие реальным процессам турбулентного переноса количества движения, кинетической энергии турбулентности для широкого класса течений: для широкого диапазона чисел Рейнольдса, для каналов с различной степенью шероховатости и т.д.

Недостаточно исследованы вопросы описания физико-химических процессов при одновременном протекании тепло- и массообмена. Требуется провести расчёт локальной теплоотдачи с учётом тепловыделений за счёт химических реакций в пограничном слое и оценить влияние интенсивности тепловыделений на теплоотдачу в потоке.

Несмотря на широкое распространение аппаратов с кипящим слоем в металлургической и химической промышленности, их использование в топочной технологии, в частности, в газифицирующих предтопках, является новым направлением, ввиду чего требуются новые методы исследования и расчета.

Нелинейные дифференциальные уравнения, описывающие протекающие в физико-химических, гидродинамических системах процессы, содержат неизвестные коэффициенты, определение которых возможно только экспериментально. В большинстве аппаратов химической, металлургической промышленности и в энергетике прямое измерение характеризующих протекающие процессы параметров затруднительно или невозможно, и необходимо по косвенным измерениям оценить их истинное значение.

Методы параметрической идентификации, в которых используется информация, заключённая как в дифференциальных уравнениях процессов, так и в экспериментальных данных, дают возможность по косвенным измерениям восстановить вектор состояния системы и оценить неизвестные параметры более точно, чем обычно применяемыми статистическими методами.

Фундаментальные идеи методов идентификации систем были

разработаны в 60-70г.г.. Ситуации, возникающие в реальных технических системах, требуют расширения круга теоретических и прикладных вопросов данной теории применительно к конкретным задачам оценивания неизвестных параметров и состояний.

Направление работы согласуется с перечнем критических технологий федерального уровня согласно указа президента РФ N-903 от 13 июля 1996г. и постановлению правительства 2728п-П8 от 21 июля 1996г., что подтверждает её актуальность.

Цель работы заключается в следующем:

- построение адекватных реальности эффективных математических моделей и параметрическая идентификация турбулентных течений в плоских каналах и физико-химических процессов в топочных устройствах с кипящим слоем, работающих в режиме газогенерации;
- разработка методов параметрической идентификации, устойчивых алгоритмов оценивания неизвестных параметров, входящих в математические модели, и их статистических характеристик;
- исследование тепломассопереносных свойств потоков с учётом тепловыделений в пограничном слое, анализ влияния интенсивности внутренних источников на процессы локальной теплоотдачи в канале.

Научная новизна работы. Разработаны методы параметрической идентификации процессов турбулентного обмена в газифицирующих топочных устройствах и при течениях в плоских каналах. Получены эффективные алгоритмы оценивания характеристик и определения точности построенных моделей, представляющих системы нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений, которые позволяют надежно корректировать математическое описание для различных режимов по экспериментальному материалу. Установлена идентифицируемость систем, обеспечивающая существование и единственность решения задачи идентификации.

При математическом моделировании турбулентных течений в плоских каналах выбран набор замыкающих соотношений, найдены оценки неизвестных констант и построена модель, наиболее адекватно описывающая широкую область течений, в частности, для чисел Рейнольдса $Re \in [4500,\ 230000]$ Предложенные выражения для масштаба турбулентности имеют единый вид для ламинарного подслоя, буферной зоны и турбулентного ядра и позволяют с большой степенью точности отразить процессы по всей толщине пограничного слоя.

Выполнено математическое описание газифицирующего кипящего слоя с учётом неоднородности тепловыделения горящих частиц по высоте слоя, движения твёрдой дисперсной фазы, непрерывной газовой фазы, газовых пузырей.

Аналитически описаны процессы локальной теплоотдачи с учетом тепловыделений за счет химических реакций, протекающих в диффузионной области. С учетом молекулярных и молярных составляющих переноса в турбулентном

ядре, буферной зоне и ламинарном подслое турбулентного пограничного слоя аналитически получена зависимость для расчета температурного напора и построено критериальное уравнение теплоотдачи в пограничном слое с учетом тепловыделений.

Практическая и теоретическая ценность. Разработанные методы оценивания параметров турбулентных течений в плоских каналах и определения точности найденных математических моделей могут быть использованы для оценивания параметров турбулентных течений газов, жидкостей со сложной реологией, с высокомолекулярными добавками в плоских каналах, в пограничных слоях с различной шероховатостью, с рифлениями, со сложным рельефом поверхности.

На основании экспериментальных данных, полученных на ТЭЦ-2 г.Челябинска, оценены неизвестные параметры, характеризующие процессы тепломассопереноса в кипящем слое твердого топлива, необходимые для исследования линейной устойчивости и развития нелинейной конвективной неустойчивости слоя, а также для анализа рабочих процессов в топочных устройствах с кипящим слоем, работающих в режиме газогенерации на углях Челябинского региона.

Получены зависимости, обеспечивающие расчёт локальной теплоотдачи в пограничном слое при турбулентных режимах течения с учётом тепловыделений, что даёт возможность более корректно описать процессы тепло- и массопереноса в диффузионной области протекания химических реакций при движении в плоских каналах, пограничных слоях.

Достоверность полученных результатов подтверждается хорошим согласием экспериментальных и расчётных данных, а также обеспечивается корректной постановкой задачи и учётом всех необходимых факторов при математическом моделировании процессов.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на Международной научно-технической конференции "Проблемы ресурсо- и природосбережения в энергетике" (11-15 октября 1994г., Украина, Харьков), III Минском Международном Форуме по тепло- и массообмену ММФ-96 (20-24 мая 1996г., г.Минск), Международном семинаре "Modelling, advanced process tehnology, expert and control system of heat transfer phenomena" (8-10 июля 1996г., Россия, г.Екатеринбург), Межгосударственной научно-технической конференции "Проблемы развития металлургии Урала на рубеже XX1 века" (14-17 мая, 1996, Россия, г. Магнитогорск), научно-технической конференции стран СНГ "Минеральная часть топлива, шлакование, загрязнение и очистка котлов" (17-19 сентября 1996г., Россия, г.Челябинск), межвузовской научной конференции "Математическое моделирование и краевые задачи" (28-30 мая 1997г., Россия, г.Самара), 49 научно-технической конференции Челябинского государственного технического университета (8-29 апреля 1997г., Россия).

Публикации. Основное содержание диссертации отражено в 4 статьях.

Структура и объём работы. Диссертация состоит из введения, четырёх

глав, основных выводов, списка литературы из 149 названий и трех приложений. Изложена на 142 страницах машинописного текста, содержит 3 таблицы, 12 рисунков.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность изучения химической кинетики в промышленных условиях, решающим образом зависящих от результирующего эффекта процессов тепло- и массопереноса, турбулентной диффузии. Поставлены задача построения адекватной реальности математической модели физико-химических процессов, протекающих при сжигании твёрдых топлив в промышленных топочных устройствах с кипящим слоем; а также задачи математического описания процессов турбулентности в плоских каналах и исследования на его основе влияния тепловыделений от химических реакций на процессы локальной теплоотдачи в пограничном слое.

В первой главе проведено математическое моделирование турбулентных течений в плоских каналах. Рассмотрены основные подходы к изучению природы турбулентности. Выделены проблемы, возникающие при построении математического описания турбулентности.

Математическая модель турбулентных течений в плоских каналах содержит уравнения Рейнольдса и баланса турбулентной кинетической энергии в потоке:

$$\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial t} + \overline{u_j}\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\nu\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \overline{\tilde{u}_i\tilde{u}_j}\right), \qquad (1)$$

$$\frac{\partial E}{\partial} + \overline{u_j}\frac{\partial E}{\partial x_j} = -\overline{\tilde{u}_i\tilde{u}_j}\frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\nu\frac{\partial E}{\partial x_j} - \left(\frac{1}{2}\overline{\tilde{u}_j\tilde{u}_i\tilde{u}_i} + \frac{1}{\rho}\overline{\tilde{u}_j\tilde{P}}\right)\right) - \nu\overline{\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}\right)\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}\right)}. \qquad (2)$$

В систему уравнений входят неизвестные моменты 2 и 3 порядков:
$-\overline{\tilde{u}_i\tilde{u}_j}, \overline{\tilde{u}_j\tilde{u}_i\tilde{u}_i}, \overline{\tilde{u}_j\tilde{P}/\rho}, \nu\overline{(\partial\tilde{u}_i/\partial x_j)(\partial\tilde{u}_i/\partial x_j)}$.

Для их моделирования выбраны выражения, широко применяемые в различных теориях и дающие наибольшее соответствие реальным процессам переноса импульса и преобразования турбулентной кинетической энергии. Использованы соотношения Л.Прандтля, А.Н.Колмогорова, В.Г.Невзглядова, Брэдшоу, Г.С.Глушко. Проведён анализ фундаментальных теорий, предложенных Дж.Буссинеском, Л.Прандтлем, Дж.Тейлором, Т.Карманом.

В работе рассматриваются два варианта моделей по отношению к заданию переноса энергии турбулентности: - математическое описание, учитывающее только диффузионный перенос; (3)
- диффузионно - конвективная модель. (4)

Принимаем, что перенос осевой компоненты импульса обусловлен, главным образом, диффузией градиентного типа при мелкомасштабной

турбулентности и полагаем конвективное слагаемое для случая переноса количества движения равным нулю.

Исследуется полностью развитое турбулентное течение в плоском канале постоянной ширины, в наиболее важных аспектах подобное течению в пограничном слое. На основе достаточно строгого математического описания турбулентности построены относительно простые расчетные зависимости. С использованием полуэмпирических гипотез осуществлено описание процессов обыкновенными дифференциальными уравнениями, которые с помощью теории размерностей приведены к безразмерному виду. Для случая диффузионно-конвективного переноса энергии (4) модель имеет вид:

$$\frac{dU^+}{dy^+} = \frac{1 + p^+ y^+}{1 + \varepsilon^+} \quad ; \tag{5}$$

$$\left(1+\frac{\varepsilon^+}{k}\right)\frac{d^2E^+}{dy^{+2}} + \left(\frac{d\varepsilon^+}{dy^+} - \frac{3}{2}CE^+\right)\frac{dE^+}{dy^+} - \left(\frac{E^{+2}}{l_d^+}\right) + \varepsilon^+\left(\frac{1+p^+y^+}{1+\varepsilon^+}\right)^2 = 0; \tag{6}$$

где $P^+ = -\frac{1}{\mathrm{Re}\sqrt{f/32}}$; $f \cong 0{,}079/\mathrm{Re}^{0,25}$; $U^+ = \bar{U}_1/U_*$; $y^+ = yU_*/\nu$;

$\varepsilon^+ = \varepsilon_{22}^{(t)}/\nu$; k, C - параметры, подлежащие определению.

Для системы уравнений (5-6) известны условия на твёрдой стенке:

$$y^+ = 0: U^+ = 0, E^+ = 0. \tag{7}$$

Второе граничное условие для уравнения энергии неизвестно и подлежит определению.

В главе обсуждены выражения для вихревой вязкости ε, предложенные Ван-Дристом, И.Ротта, Л.Г.Лойцянским, Рейхардтом, Бьёргумом, Дайслером, Худимото, Хама, Майлсом, Шаблевским.

Для моделирования переноса кинетической энергии применен подход Прандтля-Колмогорова, обладающий тем преимуществом перед другим подходом, Невзглядова-Драйдена, что в модель явно входит турбулентная вязкость:

1. $\varepsilon^+ = l_1^+\sqrt{E^+}$. Гипотеза А.Н.Колмогорова. (8)

Система также замыкается по простой схеме замыкания с использованием понятия длины пути перемешивания:

2. $\varepsilon^+ = l_2^{+2}\frac{dU^+}{dy^+}$. Гипотеза Л.Прандтля. (9)

Таким образом, в диссертационной работе исследование процессов турбулентного обмена проводится по следующим основным моделям:

1.выражение для ε - (9), для слагаемого u_iE - (4); (10)

2.выражение для ε - (9), для слагаемого u_iE - (3); (11)

3.выражение для ε - (8), для слагаемого u_iE - (4); (12)

4.выражение для ε -(8), для слагаемого u_iE - (3). (13)

Для масштабов турбулентности, длины пути смешения и длины диссипации, в работе предложено использовать построенные из асимптотических соображений выражения, имеющие единый вид для ламинарного подслоя, буферной зоны и турбулентного ядра:

$$l_i^+ = C_{1i} y^+ \left[1 - \exp\left(-\left(y^+ / y_0^+\right)^{j_1}\right)\right] \exp\left(1 - y^+ / h^+\right), \tag{14}$$

$$l_d^+ = C_2 y^+ \left[1 - \exp\left(-\left(y^+ / y_1^+\right)^{j_2}\right)\right] \exp\left(1 - y^+ / (y_d^+ h^+)\right), \tag{15}$$

где i=1,2 - номер модели; j_1, j_2 = 1,2 - два варианта степени выражений y^+ / y_0^+ и y^+ / y_1^+ соответственно; $C_1, C_2, y_0^+, y_1^+, y_d^+$- неизвестные константы.

Математическая модель турбулентных течений в плоских каналах (5-7, 14, 15) содержит неизвестные коэффициенты, в связи с чем возникает проблема оценивания их значений, обеспечивающих наилучшее совпадение теории с экспериментом и выбор полуэмпирической гипотезы, позволяющей построить наиболее адекватную реальным процессам модель турбулентности. Решение данной задачи в настоящей диссертации реализовано с помощью методов параметрической идентификации.

Во второй главе выполнена параметрическая идентификация, оценены неизвестные параметры математических моделей турбулентных течений в плоских каналах и выбрана модель, дающая наибольшее согласие эксперименту, исходя из численного анализа значений минимумов построенных для исследуемых моделей функций качества. Для данной модели в главе выполнена постановка задачи идентификации и рассмотрены этапы реализации процедуры параметрической идентификации и оценивания параметров нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений. Основные результаты, полученные при реализации методов параметрической идентификации, приведены для всех описанных моделей.

Проведён литературный обзор методов, используемых для решения задач построения описания процессов, объектов с использованием полученной в результате обработки экспериментального материала информации, что представляет собой процесс идентификации.

В работе реализована идентификация в узком смысле, т.е. при известных структуре модели, в качестве которой в данном случае выступает вид уравнения, и зависимости выходных параметров от входных.

Математическая модель измерений построена по экспериментальным значениям осреднённой скорости и кинетической энергии турбулентности Лауфера и Ж.Конт-Белло.

Измерения параметров возможны в ограниченном числе точек, количество измеряемых параметров невелико; размерность вектора измеряемых параметров $\psi \in R^m$ меньше размерности вектора состояния системы $U \in R^n$, расширенного вектором неизвестных параметров $a \in R^k$ (m<n+k). Ввиду этого

одним из важнейших становится вопрос наблюдаемости и идентифицируемости системы. Идентифицируемость определяет возможность существования и единственности решения задачи оценивания неизвестных коэффициентов. Система является наблюдаемой, если между вектором состояния системы U и вектором измеряемых величин ψ существует взаимо однозначное соответствие; является идентифицируемой, если взаимо однозначное соответствие существует между вектором состояния системы U, расширенным вектором оцениваемых параметров a_d и вектором измеряемых величин ψ.

Если математическая модель процесса представляет собой систему нелинейных дифференциальных уравнений, то для локальной идентифицируемости системы необходимо, чтобы Якобиан, расширенный вектором неизвестных параметров, был невырожден. Для глобальной идентифицируемости на систему необходимо наложить дополнительные условия знакоопределенности всех главных миноров матрицы Якоби J.

В терминах матрицы Якоби J =

$$\begin{Vmatrix} \frac{\partial U^+}{\partial U_0^+} & \cdots & \frac{\partial U^+}{\partial(\frac{\partial E^+}{\partial y^+})_0} & \frac{\partial U^+}{\partial K} & \frac{\partial U^+}{\partial C} & \frac{\partial U^+}{\partial C_1} & \frac{\partial U^+}{\partial C_2} & \frac{\partial U^+}{\partial y_0^+} & \frac{\partial U^+}{\partial y_1^+} & \frac{\partial U^+}{\partial y_d^+} \\ \frac{\partial E^+}{\partial U_0^+} & \cdots & \frac{\partial E^+}{\partial(\frac{\partial E^+}{\partial y^+})_0} & \frac{\partial E^+}{\partial K} & \frac{\partial E^+}{\partial C} & \frac{\partial E^+}{\partial C_1} & \frac{\partial E^+}{\partial C_2} & \frac{\partial E^+}{\partial y_0^+} & \frac{\partial E^+}{\partial y_1^+} & \frac{\partial E^+}{\partial y_d^+} \\ \frac{\partial}{\partial U_0^+}\frac{\partial U^+}{\partial y^+} & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \frac{\partial}{\partial y_d^+}\frac{\partial U^+}{\partial y^+} \\ \frac{\partial}{\partial U_0^+}\frac{\partial E^+}{\partial y^+} & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \frac{\partial U^+}{\partial y_d^+}\frac{\partial E^+}{\partial y^+} \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \frac{\partial U^+}{\partial U_0^+}\frac{\partial^4 E^+}{\partial y^{+4}} & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \frac{\partial U^+}{\partial y_d^+}\frac{\partial^4 E^+}{\partial y^{+4}} \end{Vmatrix} \quad (16)$$

согласно численным расчётам установлены локальная и глобальная идентифицируемость математической модели турбулентных течений по эмпирической информации.

Алгоритм решения задачи параметрической идентификации зависит, прежде всего, от критерия качества, роль которого здесь играет степень соответствия экспериментальных и расчётных данных.

Вид функции качества, являющейся аналитическим выражением критерия качества, численные значения и свойства получаемых оценок параметров зависят, главным образом, от принципа оценивания, положенного в основу идентификации. В такой постановке решение задачи оценивания параметров сводится к минимизации выбранного критерия качества на множестве

возможных значений неизвестных параметров. Для этой цели применяются различные алгоритмы, используемые при решении экстремальных задач и задач оптимального управления.

Неизвестные параметры $k, C, C_1, C_2, y_0^+, y_1^+, y_d^+$, входящие в математическую модель турбулентных течений, и неизвестное начальное условие для уравнения энергии $(dE^+/dy^+)_0$ находились из условия минимума функции качества, построенной по методу максимального правдоподобия:

$$\Phi = \|\psi_P - \psi_e\|^T \mathbf{B}_1^{-1} \|\psi_P - \psi_e\|. \qquad (17)$$

Метод Ньютона малопригоден для идентификации подобных систем ввиду увеличения объёма вычислений на каждом шаге итерационного процесса, погрешностей при вычислении функций чувствительности высших порядков, обусловленных разбросами экспериментальных данных и методическими погрешностями численных методов.

Численную реализацию алгоритма минимизации функции качества затрудняет овражный характер функции. Кроме того, уравнение энергии турбулентности обладает высокой чувствительностью к граничным данным, и задание значения производной $(dE^+/dy^+)_0$, отличающегося от истинного, приводит к неустойчивости расчётного процесса. В связи с этим выбран следующий алгоритм расчёта: первоначально по экспериментальным значениям профиля осреднённой скорости и напряжений Рейнольдса из уравнения Рейнольдса (5) находилась длина смешения, а затем идентификацией уравнения баланса турбулентной кинетической энергии (6) определялись остальные параметры.

Наиболее эффективным для отыскания минимума целевой функции (17) оказался метод Хука-Дживса. Расчеты показали, что наименьшие значения Ф достигаются при задании в зависимостях (14, 15) для длины диссипации и длины пути смешения $j_1 = 1, j_2 = 2$. Для идентифицируемых моделей (10-13) с указанными степенями j_1, j_2 были получены следующие минимальные значения функции качества:

$$\Phi 1 = 1{,}94;\ \Phi 2 = 4{,}03;\ \Phi 3 = 2{,}48;\ \Phi 4 = 3{,}85. \qquad (18)$$

Видно, что функция Ф является наименьшей для модели 1 (10). Из этого следует, что диффузионно-конвективная модель, использующая гипотезу Л.Прандтля, наиболее адекватно отражает процессы турбулентных течений в плоских каналах. Полученные для этой модели коэффициенты обеспечивают наибольшее согласие теории с экспериментом.

Результаты измерений являются случайными величинами. Ввиду этого при решении задачи получены точечные оценки неизвестных коэффициентов, точность которых определяется с помощью интервальных оценок при данном уровне доверия. Доверительные интервалы характеризуют разброс параметров не только в результате погрешностей измерений, но и ввиду турбулентного,

хаотического характера процессов.

При решении задачи математического моделирования турбулентных течений в плоских каналах методами параметрической идентификации из условия минимума функции качества в пространстве неизвестных параметров найдены оценки для неизвестных величин и их 95% доверительные интервалы. В случае модели (10) для числа Рейнольдса Re=40500 они принимают следующие значения: $c = -0.106 \pm 0.08$; $c_1 = 0.124 \pm 0.08$; $c_2 = 0.48 \pm 0.02$;

$$y_0^+ = 26.2 \pm 1.9;\ y_1^+ = 4.42 \pm 0.3;\ y_d^+ = 0.52 \pm 0.03;\ k = 0.54 \pm 0.03 \qquad (19)$$

Параметр y_0^+ играет роль демпфирующего множителя, предложенного Ван-Дристом; их значения в пределах точности 5,0% совпадают.

Расчеты проводились отдельно для различных чисел Рейнольдса из интервала [4500, 230000], и оцениваемые параметры принимали близкие значения, отличающиеся друг от друга не более, чем на 4,0%; коэффициенты y_0^+ и y_1^+ оставались постоянными при изменении Re (рис.1). Это подтверждает применимость принятой математической модели для широкого класса течений и позволяет предположить, что найденные соотношения соответствуют природе турбулентных течений.

Проверка адекватности математической модели (5-7, 9, 14, 15) с коэффициентами (19) показала, что модель с вероятностью 0,95 адекватна реальным турбулентным течениям, кроме течений с малой скоростью с $Re<4,5*10^3$, что, по-видимому, связано с реализацией переходных режимов течения при этих числах Рейнольдса.

На рис.2,3 приведено сравнение экспериментальных и рассчитанных по формулам (5-7,9,14,15) значений профиля осреднённой скорости и кинетической энергии турбулентности для плоских течений. Следует отметить хорошую сходимость экспериментальных и полученных методами параметрической идентификации данных. Теоретическая кривая соответствует Re=40500.

Одной из исследуемых характеристик турбулентности является масштаб турбулентности, в частности, длина пути перемешивания. Как видно из рис.4, кривая, описываемая уравнением (14) с коэффициентами (19), удовлетворительно согласуется с эмпирическими данными на всем экспериментально исследованном интервале. Выражение для длины пути перемешивания, предложенное Ван-Дристом, справедливо при $y^+ < 100$.

<u>В третьей главе</u> рассмотрены основные задачи математического моделирования физико-химических систем.

Отмечено, что учёт различного рода физико-химических факторов, усложняющих математическое описание системы, отражается в рассмотрении дополнительных слагаемых, описывающих диффузию, источниковых членах и т.д. в уравнениях сохранения.

Математическая модель (5-7), достаточно точно отражающая состояние

Зависимость оценок параметров от числа Рейнольдса

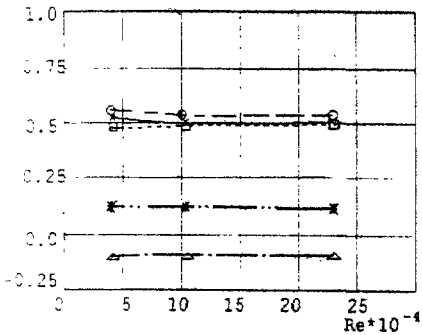

Рис.1

* — C_1; □ — C_2;
Δ — C; O — K;
x — y^+_d.

Зависимость длины пути смешения от поперечной координаты

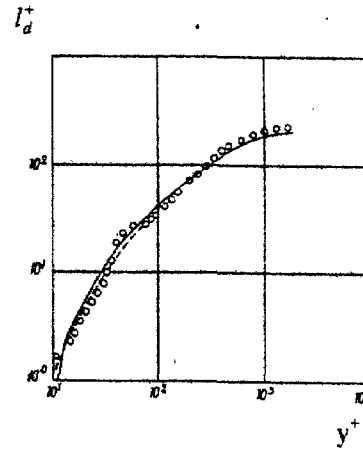

Рис. 4

O - экспериментальные значения;
- - - расчетная кривая по Ван-Дристу;
. — -расчетная кривая по зависимости (14) с коэффициентами (19).

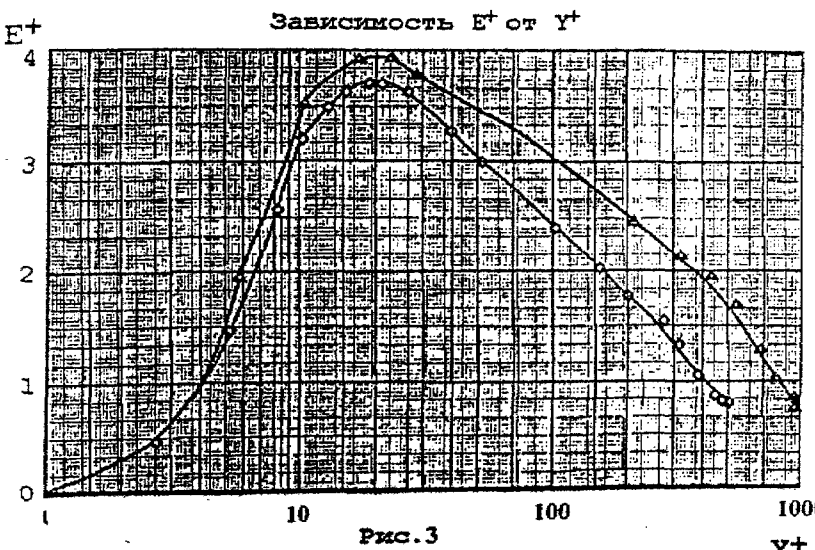

Рис.3

O - Re=4,05*10^4; Δ - Re=1,03*10^5;
—— - теоретические значения.

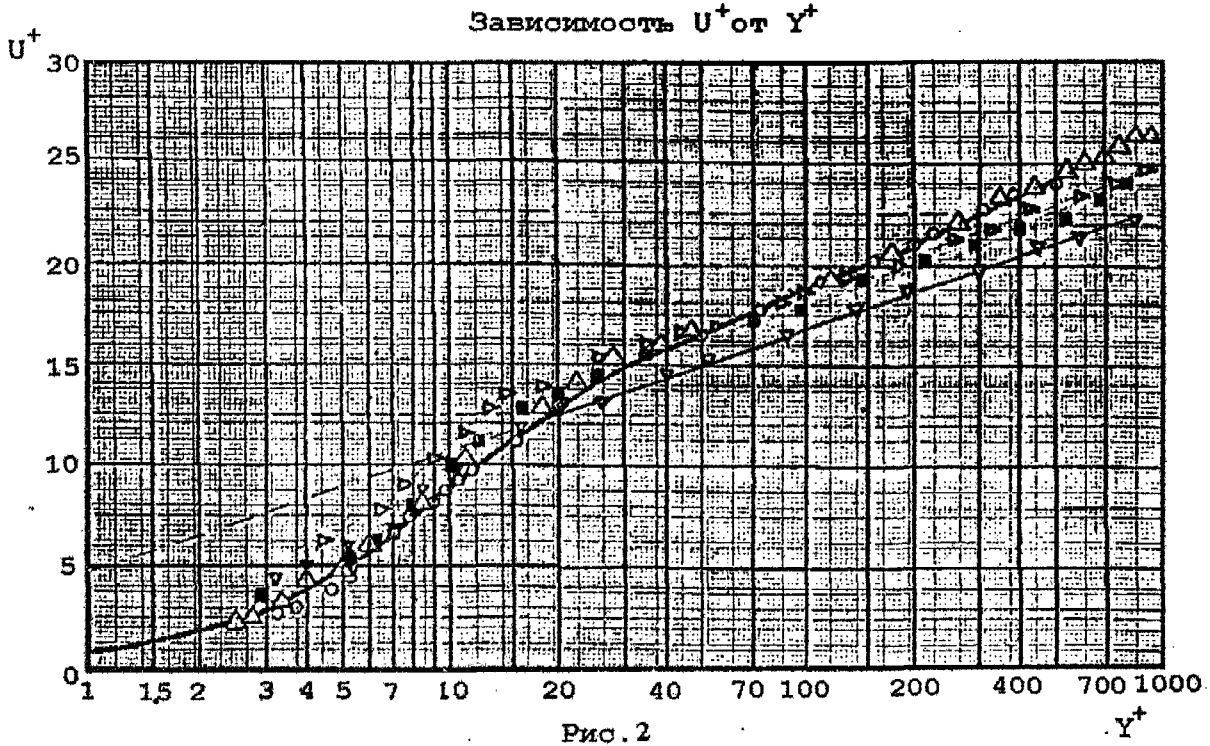

Рис.2

○ – $Re=4,05*10^4$; △ – $Re=1,03*10^5$;

■ – $Re=5,7*10^4$; ▷ – $Re=2,3*10^5$; ▽ – $Re=1,2*10^5$;

——— – теоретические значения.

системы, служит основой при описании физико-химических процессов, при оценке влияния физико-химических факторов на турбулентность.

Коэффициент вихревой вязкости, оценка которого получена методами параметрической идентификации, при турбулентном движении характеризует переносные свойства потока также и в отношении тепла и вещества, т.е. играет роль трёх переносных коэффициентов: $\varepsilon_m = \varepsilon_q = \varepsilon_S = \varepsilon$. (20)

Результаты, полученные ранее, приложимы и для расчёта подобных процессов переноса массы, тепла. Согласно гипотезе Л.Прандтля длина пути смешения имеет одинаковое значение для вязкости, диффузии, процессов передачи тепла.

При одновременном протекании тепло- и массообмена в среде, возникают трудности, связанные с определением результирующего эффекта указанных механизмов. Подобные вопросы важны, в частности, при математическом описании течений химически реагирующих жидкостей, диссоциирующего газа и т.д.. Данные процессы характеризуются наличием источников и стоков у поверхности, и обычные конвективные формулы неадекватно отражают состояние системы.

В главе рассмотрены процессы, протекающие в диффузионной области, т.е. когда лимитирующим звеном реакции является массоотдача:

$$\frac{1}{k^*} = \frac{1}{k} + \frac{1}{\beta}, \quad \text{диффузионная область: } k \gg \beta: k^* \approx \beta,$$

$$\text{кинетическая область: } k \ll \beta: k^* \approx k \,. \qquad (21)$$

Для математического описания использовано уравнение теплообмена с учетом источников тепла. Плотность тепловыделений задана следующим образом:

$$q_v^d = Q_p \frac{1}{1/\beta + 1/k} C = Q_p \beta C \,. \qquad (22)$$

Исследована возможность применения модели (5-7) при моделировании тепло- и массообмена при тепловыделениях в результате химических реакций в пограничном слое с использованием численных методов в связи с тем, что учёт переменности параметров при аналитических расчётах приводит к громоздким вычислениям. Задача решена аналитически в случае распределения скоростей по трёхслойной схеме Мартинелли.

В результате интегрирования уравнения, отражающего процессы теплообмена в потоке, в пределах пограничного слоя были получены зависимости для температурного перепада по толщине турбулентного ядра, ламинарного подслоя и буферной зоны с учётом тепловыделений. Суммарный температурный напор в пограничном слое определяется выражением вида:

$$\Delta t = \frac{1}{u_* \rho c_p} \left[\frac{q_v^d \nu^2}{2u_*^2} f_1(\mathrm{Pr}, \mathrm{Re}_X) - q_C f_2(\mathrm{Pr}, \mathrm{Re}_X) \right]. \qquad (23)$$

С учетом векторных представлений о тепловом потоке построено

критериальное уравнение локальной теплоотдачи при тепловыделениях в пограничном слое:

$$Nu_X = F_1(\mathrm{Re}_X, \mathrm{Pr}) Nq\, \mathrm{Re}_X^{-0,8}\, \mathrm{Pr} + F_2(\mathrm{Re}_X, \mathrm{Pr})\, \mathrm{Re}_X^{0,9}\, \mathrm{Pr}, \qquad (24)$$

где Nq -критерий объёмной плотности тепловыделений, характеризующий отношение плотностей тепловых потоков за счёт тепловыделений и конвективного теплообмена в канале.

Уравнение (24) вырождается в обычную конвективную формулу при предельном переходе:

$$q_v^d = 0:\ Nu_X = F\mathrm{Re}_X^{0,9}\, \mathrm{Pr}. \qquad (25)$$

Суммарная локальная теплоотдача складывается из конвективной составляющей и эффекта от тепловыделений в ходе химических реакций: $Nu = Nu_0 + Nu_X$. В рамках уравнения (24) исследована зависимость теплоотдачи от тепловыделений, которая носит нелинейный характер ввиду влияния плотности тепловыделений на теплофизические свойства потоков (рис.5).

В отличие от теоретических исследований пограничных слоев с тепловыделениями, проводимых Е.В.Тороповым, в работе аналитически получено критериальное уравнение для локальной теплоотдачи в турбулентном пограничном слое. В процессе решения осуществлён полный учёт молекулярных и молярных составляющих в ламинарном подслое и турбулентном ядре.

В четвёртой главе проведено математическое моделирование физико-химических процессов в топочных устройствах с кипящим слоем, обоснована необходимость глубокого теоретического анализа, создания математического описания движения твёрдой фазы, ожижающего агента, движения пузырей, горения твёрдых частиц, процесса перемешивания при разработке промышленных аппаратов, трудно поддающихся моделированию методами теории подобия, при создании принципиально новых конструкций.

Для описания рабочих процессов, реализуемых при сжигании бурых углей в промышленных установках на ТЭЦ-2 г.Челябинска, за основу выбрана модель Д.Парка, скорректированная для случая быстрой реакции, в частности, сжигания твердых топлив в кипящем слое, А.И.Тамариным и Л.И.Левенталем. Выбор модели обусловлен подобием постановок задач, хорошими результатами, полученными авторами для исследуемых кипящих слоев, аналогичными граничными условиями, полнотой описания процессов, учетом в уравнениях баланса основных составляющих переноса.

В отличие от исследований А.И.Тамарина и Л.И.Левенталя, где принималась изотермическая модель, в настоящей работе осуществлен учет неоднородности генерации тепла на поверхности частиц топлива и поглощения окислителя по толщине слоя. В модель включено уравнение баланса энергии для ожижающего агента, важное при исследовании газогенерации в связи с процессами догорания углерода в среде.

Уточненная для случая газогенерации математическая модель стационар-

Зависимость числа Нуссельта от интенсивности тепловыделений в пограничном слое

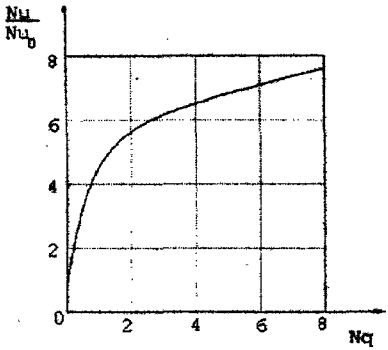

Рис. 5

Распределение температуры T_C по высоте кипящего слоя

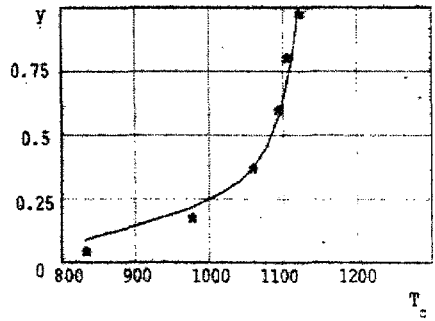

Рис. 6

* - экспериментальные данные;
— - теоретическая кривая.

ного одномерного кипящего слоя включает уравнения баланса окислителя в непрерывной и дискретной фазах, учитывающие диффузионный перенос окислителя в непрерывной фазе, организованный перенос окислителя в обеих фазах, поглощение кислорода в непрерывной фазе, обмен кислородом между фазами, а также уравнения баланса энергии, учитывающие диффузионный перенос тепла, перенос тепла конвективно-кондуктивным и радиационным путем, генерацию тепла:

$$KA\frac{d^2C}{dy^2}-B\frac{dC}{dy}-f_1(T_c,E_1)\varphi(1+\alpha_1 y+\alpha_2 y^2)C-D(C_g-C)=0;$$

$$\frac{dC_g}{dy}+D(C_g-C)=0; \qquad \frac{d^2\theta_g}{dy^2}+f_2(T_c,E_1)\varphi(1+\alpha_3 y+\alpha_4 y^2)-H\frac{\varphi}{K}\theta_g=0;$$

$$\frac{d^2\theta}{dy^2}+H\frac{\varphi}{K}\theta=0;\ \theta_g=f(T_c);\ \theta=f(T_r) \qquad (26)$$

$$y=0:\frac{dC}{dy}=\frac{C-C_0}{N-1};C_g=C_0=0.21; \quad \frac{d\theta_g}{dy}=0;\frac{d\theta}{dy}=0;$$

$$y=1:\frac{dC}{dy}=0; \qquad \frac{d\theta_g}{dy}=-\frac{Pe}{K}; \quad \frac{d\theta}{dy}=0$$

Модель содержит неизвестные коэффициенты, подлежащие определению при реализации процедуры идентификации, а именно: эффективная энергия ак-

тивации процесса горения E_1, средний относительный размер горящей частицы $1/\varphi$, средний коэффициент перемешивания K, константы, характеризующие интенсивность поглощения кислорода и интенсивность тепловыделений по толщине слоя α_i (i=1,4). В системе (26) A, B, D, H - константы относительно толщины слоя, вектора состояния системы и оцениваемых параметров.

Математическая модель измерений построена по экспериментальным данным, полученным по измерениям температуры и состава продуктов сгорания при сжигании челябинских бурых углей в топочных устройствах с кипящим слоем на ТЭЦ-2 г.Челябинска.

В результате исследования идентифицируемости предложенной модели установлено, что для рассматриваемого топочного устройства возможно однозначное определение недостающих параметров. Элементы матрицы наблюдаемости, функции чувствительности, найдены из решения системы уравнений для функций чувствительности с нулевыми начальными условиями. Для этого исходная система нелинейных дифференциальных уравнений была продифференцирована по неизвестным параметрам, и осуществлена смена порядка дифференцирования.

Функция качества строилась по методу максимального правдоподобия. Сравнение эффективности применяемых при определении минимума функции методов показало, что при решении задачи параметрической идентификации рабочих процессов в топочных устройствах с кипящим слоем целесообразно применение метода сопряжённых градиентов, обеспечивающего наиболее быструю и устойчивую сходимость к минимуму.

Для определения точности математической модели необходимо найти зависимость между параметрами распределения вероятностей ошибок измерения и ошибок оценивания неизвестных параметров. Ковариационная матрица ошибок оцениваемых параметров B_2 связана с ковариационной матрицей ошибок измерений B_1 соотношением: $B_2 = \left[L^T B_1^{-1} L\right]^{-1}$ (27)

Определитель ковариационной матрицы B_2 характеризует точность математической модели. Это позволяет производить выбор измеряемых величин, место постановки и момент включения измерительной аппаратуры из условия минимума определителя матрицы. Определение разброса оцениваемых параметров даёт возможность рассчитать доверительные интервалы вектора состояния системы и вектора измеряемых величин, что позволяет использовать для доказательства адекватности математической модели реальному процессу известные методы статистической проверки гипотез.

В процессе параметрической идентификации физико-химических процессов в топочных устройствах с кипящим слоем получены следующие оценки неизвестных параметров и их 95% доверительные интервалы:

$\alpha_1 = 5{,}18 \pm 0{,}71$; $\alpha_2 = 2{,}76 \pm 0{,}40$; $\alpha_3 = 2{,}42 \pm 0{,}35$; $\alpha_4 = 1{,}64 \pm 0{,}22$;
$E_1 = 108{,}4 \pm 19{,}2$; $\varphi = 1{,}84 \pm 0{,}34$; $k = 0{,}112 \pm 0{,}018$. (28)

Значения энергии активации углей Челябинского бассейна и коэффициента перемешивания в пределах точности 10,0% совпадают с данными, определенными в результате теоретических и экспериментальных исследований. Значение среднего относительного размера частицы угля $1/\varphi$ равно 0.543, что близко к среднеарифметическому 0,5. Экспериментальные данные распределения температуры по толщине слоя хорошо согласуются с полученным по модели (26) распределением (рис. 6). В связи с этим можно предположить, что найденные оценки имеют вполне реальные значения, и модель соответствует процессам, протекающим при сжигании челябинских бурых углей в топочных устройствах с кипящим слоем.

При проверке адекватности, проводимой методами статистической проверки гипотез, установлено, что математическая модель статистически адекватно описывает процессы, протекающие в системе.

Основные выводы

Таким образом, в настоящей диссертации проведено математическое моделирование физико-химических и гидродинамических процессов, описываемых нелинейными обыкновенными дифференциальными уравнениями. Модели адекватно отражают состояние системы и могут быть рекомендованы для приложения в физико-химических системах в классах, подобных рассмотренным.

1.Построена математическая модель турбулентных течений в плоских каналах, с большой степенью точности описывающая процессы переноса количества движения и кинетической энергии турбулентности в плоских каналах для чисел Рейнольдса $Re \in [4500, 230000]$.

2.Получено распределение масштаба турбулентности, в частности, длины пути смешения, по толщине пограничного слоя. Установлено, что определенные по предложенной зависимости значения длины пути смешения хорошо согласуются с экспериментальными данными для всех участков пограничного слоя.

3.Построена математическая модель рабочих процессов в топочных устройствах с кипящим слоем, работающих в режиме газогенерации, которая учитывает неоднородность генерации тепла и поглощения ожижающего агента по толщине. Модель позволяет определить распределение концентраций кислорода в непрерывной и дискретной фазах, распределение температуры слоя и газовой фазы по толщине слоя.

4.По результатам экспериментов, полученным при сжигании бурых углей в топочных устройствах с кипящим слоем на ТЭЦ-2 г.Челябинска, оценены неизвестные параметры, входящие в математическое описание, как-то: энергия активации углей Челябинского бассейна, средний относительный размер горящей частицы угля, средний коэффициент диффузии, константы, характеризующие интенсивность поглощения кислорода и интенсивность

тепловыделений по толщине слоя.

5.Разработаны методы параметрической идентифнкации и оценивания неизвестных параметров математических моделей процессов турбулентного обмена в кипящих слоях и плоских каналах.

6.В результате реализации процедуры параметрической идентификации установлена локальная и глобальная идентифицируемость предложенных систем. Из условия минимума функции качества, являющейся критерием соответствия экспериментальных и расчетных данных, определены неизвестные параметры нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений и точность идентифицированных моделей. Проверка адекватности показала, что модели статистически адекватно описывают процессы, дают качественное и количественное соответствие эмпирической информации.

7.Проанализирован процесс теплоотдачи в пограиичном слое при наличии тепловыделений за счёт протекающих в диффузионной области химических реакций. Аналитически получена зависимость для температурного напора в слое прн реализации турбулентного режима течения в плоском канале и построено критериальное уравнение для расчета локальной теплоотдачи в пограничном слое с учетом тепловыделений.

Обозначения

a-вектор неизвестных параметров; B_1-ковариационная матрица ошибок измерения; C_P-изобарная теплоемкость; E-турбулентная кинетическая энергия; E_1-энергия активации; **U**-вектор состояния системы; U-осевая составляющая скороетн; U_*-динамическая скорость; L-матрица функций чувствительности; Nq-критерий объемной плотности тепловыделений; Nu-число Нуссельта; Pe-число Пекле; Pr-число Прандтля; Re-чнсло Рейнольдса; t-время; T_c-температура слоя; T_f-температура газа; Ф-функция качества; x-продольиая координата; y-поперечная координата; q_c -плотность теплового потока на стенке; q_v^d-объемная плотность тепловыделений за счет химических реакций, протекающих в диффузнонной областн; ε -вихревая вязкость; ν-кинематическая вязкость, ρ -плотность; ψ-вектор измеряемых параметров;

индексы: + -безразмерная турбулентная характеристика; x-локальный критерий теплоотдачи в точке с координатой x; — -осредненная турбулентная характеристика; ~ -возмущенная турбулентная характеристика; i(j) - i(j)-ая составляющая; p - расчетные значения; e - экспериментальные значения.

Основное содержание диссертации изложено в публикациях:

1.Елюхина И.В. Параметрическая идентификация физико-химических процессов в топочных устройствах с улучшенными экологическими характеристиками//Проблемы экологии Южного Урала. - Челябинск, 1995 -N4.-с12-15.

2.Елюхина И.В., Торопов Е.В Оценивание методами параметрической

идентификации коэффициентов тепломассопереноса турбулентных течений // Тез. докл. Межд. семинар "Modelling, advanced process tehnology, expert and control system of heat transfer phenomena". - Екатеринбург, 1996. - с.63.

3.Елюхина И.В., Торопов Е.В. Параметрическая идентификация и оценивание неизвестных параметров математической модели турбулентных течений в плоских каналах // Тез. докл. межвуз. научн. конф. "Математическое моделирование и краевые задачи". - Самара, 1997. - с.40-42.

4.Елюхина И.В., Торопов Е.В. Параметрическая идентификация как основа оптимального управления турбулентными режимами течения в аппаратах химического и металлургического производств // Тез. докл. Межгос. научн.-техн. конф. "Проблемы развития металлургии Урала на рубеже XX1 века". - Магнитогорск, 1996. - с.187-188.

5.Елюхина И.В., Торопов Е.В. Параметрическая идентификация турбулентных течений в плоских каналах // Межвуз. сб. научн. тр. - Магнитогорск, 1996.- с.72-76.

6.Елюхина И.В., Торопов Е.В. Физико-химические свойства горючих отходов и их сжигание в газифицирующих предтопках // Тез. докл. Межгос. научн.-техн. конф. "Проблемы развития металлургии Урала на рубеже XX1 века". - Магнитогорск, 1996. - с.185-186.

7.Кузнецов Г.Ф., Торопов Е.В., Елюхина И.В. Оценка влияния гидродинамических условий на интенсивность процессов горения в кипящем слое // Тез. докл. Межд. научно-техн. конф. "Пробл. ресурсо - и природосбережения в энергетике". - Харьков, 1994. - с.17.

8.Торопов Е.В., Елюхина И.В. Влияние физико-химических превращений в кипящем слое рудного материала на устойчивость процесса // Тез. докл. Межгос. научн.-техн. конф. "Проблемы развития металлургии Урала на рубеже XX1 века". - Магнитогорск, 1996. - с.183-184.

9.Торопов Е.В., Елюхина И.В. Особенности аэродинамики запылённых потоков в газоходах котельных агрегатов // Тез. докл. научно-практ. конф. стран СНГ "Минеральная часть топлива, шлакование, загрязнение и очистка котлов". - Челябинск, 1996. - с.47-54.

10.Торопов Е.В., Елюхина И.В. Параметрическая идентификация турбулентных течений в физико-химических системах // Сб. тр. ЮУГУ. - Челябинск, 1998. - с.11-16. (в печати)

11.Торопов Е.В., Елюхина И.В. Параметры вихревой вязкости и турбулентной диффузии в плоских потоках // Проблемы экологии Южного Урала. - Челябинск, 1995. - N 1. - с.29-32.

12.Торопов Е.В., Кузнецов Г.Ф., Елюхина И.В. Исследование и идентификация неустойчивых тепломассообменных процессов в кипящем слое // Докл. Межд. Форума по тепло-и массообмену. ММФ-96. -Минск, 1996.-т.5.-с.105-111.

Издательство Южно-Уральского государственного университета

ЛР № 020364 от 10.04.97. Подписано в печать 24.02.98. Формат 60*84 1/16. Печать офсетная. Усл. печ. л. 1,16. Уч.-изд. л. 1. Тираж 80 экз. Заказ 74/96.

УОП Издательства. 454080, г.Челябинск, пр. им. В.И.Ленина, 76.