УДК 517.958:531.332(534-14)

Математическое моделирование колебаний газа в реакторе пиролиза метана



И. В. Кудинов, К. В. Трубицын, А. В. Еремин, В. Д. Долгих

Самарский государственный технический университет, Россия, 443100, Самара, ул. Молодогвардейская, 244.

Аннотация

Разработана математическая модель колебаний газа, возникающих под действием внешней гармонической нагрузки, с учетом пространственно-временной нелокальности. Модель построена на основе уравнения равновесия (движения) и модифицированного закона Гука, в который включены релаксационные члены, учитывающие длину и время свободного пробега микрочастиц (электронов, атомов, молекул, ионов и др.).

Численное исследование модели показало, что при совпадении собственной частоты колебаний газа с частотой внешней нагрузки возникает резонанс, характеризующийся резким увеличением амплитуды колебаний, величина которой ограничивается коэффициентом трения газа. В случае, когда частота внешней нагрузки близка к собственной частоте колебаний газа, наблюдаются бифуркационно-флаттерные колебания (биения), сопровождающиеся периодическим увеличением и уменьшением амплитуды колебаний в каждой точке пространственной переменной. При этом колебания газа характеризуются бесконечным множеством амплитуд и частот.

Периодические изменения перемещений и давления газа, варьирующиеся от нуля до некоторого максимального значения и распространяющиеся вдоль реактора пиролиза метана, способствуют очистке его

Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ Научная статья

© Коллектив авторов, 2024

© СамГТУ, 2024 (составление, дизайн, макет)

∂ @ Контент публикуется на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ru)

Образец для цитирования

Кудинов И. В., Трубицын К. В., Еремин А. В., Долгих В. Д. Математическое моделирование колебаний газа в реакторе пиролиза метана // Вести. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки, 2024. Т. 28, № 4. С. 773–789. EDN: SRKXEK. DOI: 10.14498/vsgtu2115.

Сведения об авторах

Игорь Васильевич Кудинов (© https://orcid.org/0000-0002-9422-0367 доктор технических наук, профессор; заведующий кафедрой; каф. физики; e-mail: igor-kudinov@bk.ru

Константин Викторович Трубицын D https://orcid.org/0000-0003-1888-2905 кандидат экономических наук, доцент; декан; теплоэнергетический факультет; e-mail:tef-samgtu@yandex.ru

Антон Владимирович Еремин D https://orcid.org/0000-0002-2614-6329 доктор технических наук, доцент; заведующий кафедрой; каф. промышленной теплоэнергетики; e-mail:a.v.eremin@list.ru

Виктор Дмитриевич Долгих b https://orcid.org/0000-0003-1505-3810 ассистент; каф. физики; e-mail:torressva12@yandex.ru внутренних поверхностей от рыхлых углеродных отложений. Удаленный со стенок реактора углерод скапливается в нижней части между двумя газоплотными задвижками, что позволяет удалять его без остановки процесса пиролиза.

Данная модель может быть полезна для оптимизации процессов очистки реакторов и повышения эффективности пиролиза метана.

Ключевые слова: реактор пиролиза метана, получение водорода и углерода, математическая модель колебаний газа, учет пространственновременной нелокальности, гармоническая внешняя нагрузка, численное решение, резонансные и бифуркационно-флаттерные колебания, способ удаления углерода.

Получение: 11 сентября 2024 г. / Исправление: 28 октября 2024 г. / Принятие: 19 ноября 2024 г. / Публикация онлайн: 27 декабря 2024 г.

Введение. Известные методы промышленного получения водорода, такие как паровая конверсия метана, электролиз воды и газификация угля, характеризуются высокой энергоемкостью и сопровождаются выбросами углекислого газа в окружающую среду [1,2]. Более экологичным и менее энергозатратным является метод получения водорода путем пиролиза [3–6]. Процесс термокаталитического разложения метана позволяет получать высокочистый водород без образования оксидов углерода [7-8]. Однако данный процесс сопровождается интенсивным отложением углерода (пиролизного графита) на внутренних стенках реактора, что может привести к его полному зауглероживанию и остановке процесса пиролиза [9-11]. В работе [5] предложена схема устройства поплавкового типа для барботажных реакторов, позволяющая удалять сажевые частицы без остановки процесса производства водорода. Данное устройство обеспечивает контроль уровня жидкометаллической среды, который может значительно изменяться в зависимости от скорости подачи газа, что в некоторых режимах может приводить к аварийным ситуациям, связанным с переливом жидкого металла за пределы тигеля реактора. Тем не менее эффективные методы очистки стенок газофазных реакторов пиролиза метана от углеродных отложений в процессе их непрерывной работы до сих пор не разработаны, что существенно ограничивает промышленное применение пиролизного метода получения водорода.

В настоящей работе предлагается акустический метод очистки внутренней поверхности газофазного реактора пиролиза метана от углеродных отложений. Основная идея метода заключается в организации колебательных процессов изменения давления и перемещения газа в каждой точке по длине реактора. Исследования математических моделей автоколебаний газа позволяют создать теоретическую основу для управления процессами в различных акустических системах, таких как двигатели внутреннего сгорания, выхлопные системы, турбины электростанций и др. [12–14].

Разработка математической модели колебательных процессов в газе требует учета пространственно-временной нелокальности реальных процессов, что позволяет учесть внутреннюю структуру среды (длину и время свободного пробега микрочастиц) путем введения в определяющие уравнения соответствующих релаксационных коэффициентов. Вывод классических уравнений колебательных процессов в твердых телах, газах и жидкостях основан на уравнении равновесия (движения), получаемом из второго закона Ньютона, а также на эмпирических законах Гука и Ньютона (для касательного напряжения в движущихся жидкостях и газах). Поскольку в эмпирических законах напряжения и деформации (градиенты перемещения) не разделены во времени, любое изменение деформации приводит к мгновенному изменению напряжения, что подразумевает бесконечную скорость передачи импульса. В результате решения классических волновых уравнений описывают скачкообразные изменения напряжений и перемещений. Это связано с допущениями о локальном термодинамическом равновесии и сплошности среды, которые не учитывают молекулярно-атомное строение веществ. Для учета этого строения при выводе волновых уравнений используются модифицированные формулы эмпирических законов Гука и Ньютона, включающие временные слагаемые с релаксационными коэффициентами, связанными с длиной и временем свободного пробега микрочастиц [12–17].

Классические уравнения, описывающие колебания упругих тел, являются гиперболическими. Нахождение их точных аналитических решений для случаев незатухающих колебаний представляет значительные трудности. Решения подобных задач получены лишь в отдельных частных случаях при конкретно заданных законах возмущений нагрузки [12, 13, 18]. Проблема, заложенная в формуле Гука и связанная с бесконечной скоростью распространения потенциалов исследуемых полей, ранее рассматривалась только в работе [19] применительно к колебаниям упругого стержня. Как показали проведенные исследования, учет релаксационных свойств среды позволяет существенно уточнить математическую модель колебательного процесса по сравнению с моделью, в которой эти свойства не учитываются. Так, погрешность классической теоретической модели при описании экспериментальных данных была снижена с 42 до 15% за счет учета релаксационных явлений.

В настоящей работе получена математическая модель упругих колебаний газа с учетом его релаксационных свойств и сил внутреннего трения при воздействии внешней нагрузки, изменяющейся по гармоническому закону. При выводе модели используется релаксационная формула закона Гука, учитывающая временную зависимость избыточного давления и деформации.

1. Математическая постановка задачи. Согласно закону Гука, возникающее в газе избыточное давление пропорционально деформации [13]:

$$p = \rho_0 e^2 \varepsilon, \tag{1}$$

где p-избыточное давление; ρ_0- плотность газа в свободном состоянии; $e = \sqrt{\partial p/\partial \rho} -$ скорость волны; $\varepsilon = du/dx -$ деформация; u-перемещение; x-координата.

В работе [8] показано, что избыточное давление и избыточная плотность, а также избыточная плотность и деформация связаны линейными соотношениями:

$$p = e\rho; \quad \rho = -\rho_0 \frac{\partial u}{\partial x}$$

Из второго закона Ньютона следует:

$$F = m \frac{d^2 u}{dt^2} = \rho_0 S \Delta x \frac{d^2 u}{dt^2},\tag{2}$$

775

где F— результирующая сила, действующая на газ; m— масса газа; S— площадь поперечного сечения цилиндрической трубы; Δx — длина элементарного участка.

Сила давления на элементарном участке газовой среды $x + \Delta x$ равна произведению плошали сечения на разность давлений в сечениях:

$$F = S\Delta x \frac{dp}{dx}.$$

Подставляя это выражение в (2), получаем уравнение равновесия

$$\rho_0 S \Delta x \frac{d^2 u}{dt^2} = S \Delta x \frac{dp}{dx}.$$
(3)

Подставляя (1) в (3), находим

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = e^2 \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}.$$
(4)

Уравнение (4) представляет собой классическое волновое уравнение, опи-сывающее незатухающие колебания среды, так как оно не учитывает внутреннее сопротивление среды. Для учета сопротивления предположим, что сила сопротивления пропорциональна изменению перемещения во времени:

$$F = r \frac{\partial u}{\partial t},\tag{5}$$

где *r* — коэффициент сопротивления. Подставляя (5) (как дополнительную силу, действующую на газ) в (3), получаем

$$\rho_0 S \Delta x \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + r \frac{\partial u}{\partial t} = S \Delta x \frac{\partial p}{\partial x}.$$

Отсюда следует, что

$$\rho_0 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{r}{\Delta \mathbf{v}} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial x},\tag{6}$$

где $\Delta \mathbf{v} = S \Delta x - \mathbf{o} \mathbf{b}$ ъем элементарного участка.

Второе слагаемое в левой части уравнения (6) представляет силу сопротивления, отнесенную к единице объема газа.

Подставляя (1) в (6), получаем

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = e^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},\tag{7}$$

где $\gamma = r/(\rho_0 \Delta v)$. Уравнение (7) описывает колебания газовой среды с учетом внутреннего сопротивления, то есть затухающие колебания. При его выводе использован закон Гука (1), исключающий причинно-следственную связь явлений. Причину (движущую силу) в законе Гука представляет деформация, а следствием является избыточное давление p. Причина и следствие здесь не связаны со

временем. В связи с этим любое изменение причины вызывает мгновенное (скачкообразное — с бесконечной скоростью) изменение следствия. Однако в реальных средах перенос возмущений (импульса) происходит с некоторым запаздыванием, учитываемым временами релаксации. С целью его учета запишем формулу (1) в виде

$$p + \tau_1 \frac{\partial p}{\partial t} + \tau_1^2 \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = \rho_0 e^2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \tau_2 \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + \tau_2^2 \frac{\partial^3 u}{\partial x \partial t^2} \right), \tag{8}$$

где τ_1, τ_2 — времена релаксации давления и градиента перемещения.

Формула (8) представляет собой эмпирическую формулу закона Гука (1), модифицированную с учетом релаксационных явлений, то есть с учетом эффектов запаздывания. Их учет выполняется слагаемыми, включающими производные по времени от давления и градиента перемещения в произведении с коэффициентами релаксации и позволяющими учесть конечную скорость передачи импульса, что связано с учетом длины и времени свободного пробега микрочастиц (носителей энергии).

Выражая p из (8) и подставляя в (6), получаем

$$\rho_{0}\frac{\partial^{2}u}{\partial t^{2}} + \tau_{1}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right) + \tau_{1}^{2}\frac{\partial^{2}}{\partial t^{2}}\left(\frac{\partial p}{\partial x}\right) + \frac{r}{\Delta v}\frac{\partial u}{\partial t} = \rho_{0}e^{2}\left(\frac{\partial^{2}u}{\partial x^{2}} + \tau_{2}\frac{\partial^{3}u}{\partial x^{2}\partial t} + \tau_{2}^{2}\frac{\partial^{4}u}{\partial x^{2}\partial t^{2}}\right).$$
(9)

Подставляя $\partial p/\partial x$ из (6) в (9), находим

$$\tau_1^2 \frac{\partial^4 u}{\partial t^4} + \tau_1 \eta \frac{\partial^3 u}{\partial t^3} + \eta \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial u}{\partial t} = e^2 \Big(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \tau_2 \frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial t} + \tau_2^2 \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial t^2} \Big), \quad (10)$$

где $\eta = 1 + \tau_1 \gamma$ — безразмерный комплекс.

Соотношение (10) представляет собой волновое (гиперболическое) уравнение продольных колебаний газа с учетом его релаксационных свойств и внутреннего трения. Если принять $\tau_1 = \tau_2 = \gamma = 0$, то уравнение (10) принимает вид уравнения (4).

Рассмотрим краевую задачу о колебаниях газа в цилиндрическом канале, один конец которого закрыт, а второй свободен, при некотором начальном перемещении, изменяющемся линейно от пространственной переменной. Математическая постановка задачи включает уравнение (10) и краевые условия вида

$$u(x,0) = \alpha(\delta - x); \quad \frac{\partial u(x,0)}{\partial t} = 0; \quad \frac{\partial^2 u(x,0)}{\partial t^2} = 0; \quad \frac{\partial^3 u(x,0)}{\partial t^3} = 0; \quad (11)$$

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = 0; \quad u(\delta,t) = 0, \tag{12}$$

где α — коэффициент, характеризующий начальное перемещение газа; δ — длина канала.

В случае, когда давление на открытом конце системы изменяется по некоторому гармоническому закону, первое граничное условие (12) примет вид

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = A_1 \cos(\omega t),\tag{13}$$

где $A_1 = F/(ES)$ — безразмерная амплитуда колебаний; F — сила, вызывающая колебания газа на открытом конце; $\omega = 2\pi\nu$ — круговая частота; ν — частота колебаний; E — модуль упругости; S — площадь сечения канала.

Для приведения задачи (10), (11), (12) к безразмерному виду введем следующие обозначения:

$$\Theta = u/u_0, \ \xi = x/\delta, \ \mathsf{Fo} = et/\delta, \ \mathsf{Fo}_1 = e\tau_1/\delta, \ \mathsf{Fo}_2 = e\tau_2/\delta, \ \mathsf{Fo}_3 = \delta\gamma/e, \ u_0 = \alpha\delta,$$

где Θ , ξ , Fo, Fo₁, Fo₂ — соответственно безразмерные перемещение, координата, время и коэффициенты релаксации; Fo₃ — безразмерный коэффициент сопротивления; $u_0 = m\delta$ — длина столба газа в начальный момент времени (t = 0).

С учетом введенных обозначений задача (10)–(12) принимает вид

$$\begin{split} \mathsf{Fo}_{1}^{2} \frac{\partial^{4} \Theta}{\partial \mathsf{Fo}^{4}} + \mathsf{Fo}_{1} \eta \frac{\partial^{3} \Theta}{\partial \mathsf{Fo}^{3}} + \eta \frac{\partial^{2} \Theta}{\partial \mathsf{Fo}^{2}} + \mathsf{Fo}_{3} \frac{\partial \Theta}{\partial \mathsf{Fo}} = \\ &= \frac{\partial^{2} \Theta}{\partial \xi^{2}} + \mathsf{Fo}_{2} \frac{\partial^{3} \Theta}{\partial \xi^{2} \partial \mathsf{Fo}} + \mathsf{Fo}_{2}^{2} \frac{\partial^{4} \Theta}{\partial \xi^{2} \partial \mathsf{Fo}^{2}}, \quad \mathsf{Fo} > 0, \ 0 < \xi < 1; \quad (14) \end{split}$$

$$\Theta(\xi,0) = 1 - \xi; \quad \frac{\partial \Theta(\xi,0)}{\partial \mathsf{Fo}} = 0; \quad \frac{\partial^2 \Theta(\xi,0)}{\partial \mathsf{Fo}^2} = 0; \quad \frac{\partial^3 \Theta(\xi,0)}{\partial \mathsf{Fo}^3} = 0; \quad (15)$$

$$\frac{\partial \Theta(0, \mathsf{Fo})}{\partial \xi} = 0; \quad \Theta(1, \mathsf{Fo}) = 0.$$
(16)

Граничное условие (13) в безразмерном виде записывается так:

$$\frac{\partial \Theta(0, \mathsf{Fo})}{\partial \xi} = A_1 \cos(A_2 \mathsf{Fo}), \tag{17}$$

где $A_2 = 2\pi\nu\delta/e$ — безразмерная частота колебаний.

2. Аналитическое решение задачи без учета внешней нагрузки. Решение задачи (14), (15), (16) представляется в виде

$$\Theta(\xi, \mathsf{Fo}) = \sum_{k=1}^{\infty} \phi_k(\mathsf{Fo})\psi_k(\xi), \qquad (18)$$

где $\phi_k(\mathsf{Fo})$ — неизвестные функции времени; $\psi_k(\xi) = \cos(r\pi\xi/2), r = 2k - 1$. Подставляя (18) в (14), получаем

$$\sum_{k=1}^{\infty} \left[\mathsf{Fo}_{1}^{2} \frac{d^{4} \phi_{k}}{d\mathsf{Fo}^{4}} + \mathsf{Fo}_{1} \eta \frac{d^{3} \phi_{k}}{d\mathsf{Fo}^{3}} + \eta \frac{d^{2} \phi_{k}}{d\mathsf{Fo}^{2}} + \mathsf{Fo}_{3} \frac{d \phi_{k}}{d\mathsf{Fo}} + \mathsf{Fo}_{2}^{2} \frac{d^{2} \phi_{k}}{d\mathsf{Fo}^{2}} \right) \right] \cos \frac{r \pi \xi}{2} = 0, \quad (19)$$

где $\nu_k = r^2 \pi^2 / 4.$

Соотношение (19) можно преобразовать к виду

$$\mathsf{Fo}_{1}^{2} \frac{d^{4} \phi_{k}}{d\mathsf{Fo}^{4}} + l_{1} \frac{d^{3} \phi_{k}}{d\mathsf{Fo}^{3}} + l_{1} \frac{d^{2} \phi_{k}}{d\mathsf{Fo}^{2}} + l_{2} \frac{d \phi_{k}}{d\mathsf{Fo}} + \nu_{k} \phi_{k} = 0, \tag{20}$$

где $l = \mathsf{Fo}_1 \eta, \ l_1 = \eta + \nu_k \mathsf{Fo}_2^2, \ l_2 = \mathsf{Fo}_3 + \nu_k \mathsf{Fo}_2.$

Характеристическое уравнение для (20) имеет вид

$$\mathsf{Fo}_1^2 z^4 + l z^3 + l_1 z^2 + l_2 z + \nu_k = 0.$$
⁽²¹⁾

Уравнение (21) имеет следующие корни:

$$z_{jk} = -\frac{BD_{jk}}{4Fo_1^2}, \quad j = 1, 2, 3, 4; \ k = \overline{1, \infty},$$

где $B = Fo_1 - \sqrt{3}/3; D_{jk}$ — некоторые постоянные.

С учетом найденных значений z_{jk} общее решение уравнения (20) записывается так:

$$\phi_k(\mathsf{Fo}) = C_{1k}e^{z_{1k}\mathsf{Fo}} + C_{2k}e^{z_{2k}\mathsf{Fo}} + C_{3k}e^{z_{3k}\mathsf{Fo}} + C_{4k}e^{z_{4k}\mathsf{Fo}},$$
(22)

где C_{ik} — константы интегрирования, $i = 1, 2, 3, 4; k = \overline{1, \infty}$.

Подставляя (22) в (18), находим

$$\Theta(\xi, \mathsf{Fo}) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{4} C_{ik} e^{z_{ik} \mathsf{Fo}} \cos \frac{r\pi\xi}{2}.$$
(23)

Соотношение (23) точно удовлетворяет граничным условиям (16) и уравнению (14), но не соответствует начальным условиям (15). Составляя невязку и требуя ее ортогональности координатным функциям $\psi_k(\xi)$, для C_{ik} получим систему алгебраических уравнений, решение которой имеет вид

$$C_{1k} = \frac{\mu_k z_{2k} z_{3k} z_{4k}}{(z_{1k} - z_{4k})(z_{3k} - z_{1k})(z_{2k} - z_{1k})},$$

$$C_{2k} = -\frac{\mu_k z_{1k} z_{3k} z_{4k}}{(z_{2k} - z_{1k})(z_{2k} - z_{4k})(z_{3k} - z_{2k})},$$

$$C_{3k} = \frac{\mu_k z_{1k} z_{2k} z_{4k}}{(z_{3k} - z_{4k})[z_{1k} z_{2k} - z_{3k}(z_{3k} - z_{2k} - z_{1k})]},$$

$$C_{4k} = -\frac{\mu_k z_{1k} z_{2k} z_{3k}}{z_{4k}^2(z_{1k} + z_{2k} + z_{3k} - z_{4k}) - z_{1k} z_{4k}(z_{2k} + z_{3k}) - z_{2k} z_{3k}(z_{4k} + z_{1k})},$$

где $\mu_k = 8[\cos(r\pi\xi/2) - 1]/(r^2\pi^2), \ k = \overline{1,\infty}.$

После определения C_{ik} точное решение краевой задачи (14)–(16) находится из (23). Результаты расчетов по формуле (23) представлены на рис. 1, 2. Анализ показывает, что увеличение коэффициентов релаксации приводит к уменьшению амплитуды и частоты колебаний, а также сглаживанию кривых колебательного процесса (рис. 1). Расчеты демонстрируют разнонаправленное движение газа в различных точках канала в одинаковые моменты



Рис. 1. Колебания газа в точке $\xi = 0$: $1 - \mathsf{Fo}_1 = 0.1$, $\mathsf{Fo}_2 = 0.001$, $\eta = 0.5$; $2 - \mathsf{Fo}_1 = 0.5$, $\mathsf{Fo}_2 = 0.001$, $\eta = 0.5$ (k = 1000 - число членов ряда (23))

[Figure 1. Gas oscillations at $\xi = 0$: $1 - Fo_1 = 0.1$, $Fo_2 = 0.001$, $\eta = 0.5$; $2 - Fo_1 = 0.5$, $Fo_2 = 0.001$, $\eta = 0.5$ (k = 1000 – the number of terms in the series (23)]



Рис. 2. Колебания газа в точках $\xi = 0.2$ (линия 1) и $\xi = 0.8$ (линия 2); Fo₁ = 0.1, Fo₂ = 0.001, $\eta = 0.5, k = 1000$

[Figure 2. Qas oscillations at points $\xi = 0.2$ (line 1), and $\xi = 0.8$ (line 2); Fo₁ = 0.1, Fo₂ = 0.001, $\eta = 0.5, k = 1000$]

времени (см. рис. 2). Наблюдается уменьшение амплитуды и увеличение частоты колебаний при приближении к точке закрепления $\xi = 1$. В целом колебания газа по длине цилиндрического канала характеризуются бесконечным числом амплитуд и частот.

3. Численное решение задачи с учетом внешней нагрузки. Для выполнения расчетов с учетом внешней нагрузки (17) необходимо ввести понятие волновых пакетов. Для этого решение уравнения (4) для волны, движущейся вдоль оси *x*, представим в виде [20]:

$$u(x,t) = A\cos(\omega t + kx + \varphi), \qquad (24)$$

где A—амплитуда колебаний; ω —круговая частота; $k = 2\pi/\lambda$ —волновое число; λ —длина волны; φ —фаза волны.

Подставляя (24) в (4), получаем

$$\omega = ke$$

Данное соотношение является дисперсионным и позволяет определить фазовую скорость волны:

 $e = \omega/k.$

Если ω и k изменяются пропорционально, то фазовая скорость остается постоянной. В этом случае волна называется недиспергирующей. Если зависимость ω от k нелинейна, то фазовая скорость становится частотно-зависимой, и волна приобретает дисперсионные свойства. Такие волны не могут быть описаны простой гармонической функцией. Вид дисперсии определяется соотношением между частотами собственных колебаний газа и внешней нагрузки. Изменение частоты нагрузки приводит к формированию волновых пакетов, возникающих при суперпозиции колебаний с близкими частотами. В данной работе волновые пакеты моделируются наложением собственных колебаний газа и внешней нагрузки с переменной частотой.

Для моделирования таких пакетов в задаче (14)–(16) первое граничное условие (16) заменяется на (17). Аналитическое решение модифицированной задачи затруднительно, поэтому перейдем к численному методу. Упростим уравнение (14), пренебрегая членами с Fo₁² и Fo₂².

Для построения разностной схемы введем равномерную сетку в области $0 \le \xi \le 1, 0 \le \text{Fo} \le T$ с шагами $\Delta \xi = 0.005, \Delta \text{Fo} = 0.005$, и узлами сетки

$$\xi_k = k\Delta \xi, \quad k = \overline{0, K}; \quad \mathsf{Fo}_i = i\Delta\mathsf{Fo}, \quad i = \overline{0, J}$$

при K = 200, J = 50000.

Используя сеточные функции $\Theta_k^i = \Theta(\xi_k, \mathsf{Fo}_i)$ и аппроксимируя производные центральными разностями, запишем задачу в виде

$$\begin{split} &\mathsf{Fo}_3 \frac{\Theta_k^{i+1} - \Theta_k^i}{\Delta \mathsf{Fo}} + \mathsf{Fo}_1 \eta \frac{\Theta_k^{i+1} - 3\Theta_k^i + 3\Theta_k^{i-1} - \Theta_k^{i-2}}{\Delta \mathsf{Fo}^3} + \eta \frac{\Theta_k^{i-1} - 2\Theta_k^i + \Theta_k^{i+1}}{\Delta \mathsf{Fo}^2} = \\ &= \frac{\Theta_{k-1}^i - 2\Theta_k^i + \Theta_{k+1}^i}{\Delta \xi^2} + \mathsf{Fo}_2 \Big(\frac{\Theta_{k-1}^i - 2\Theta_k^i + \Theta_{k+1}^i}{\Delta \xi^2 \Delta \mathsf{Fo}} - \frac{\Theta_{k-1}^i - 2\Theta_k^i + \Theta_{k+1}^i}{\Delta \xi^2 \Delta \mathsf{Fo}} \Big) \end{split}$$

со следующими начальными и граничными условиями:

$$\begin{split} \Theta_k^0 &= 1 - \xi_k; \quad \frac{\Theta_k^1 - \Theta_k^0}{\Delta \mathsf{Fo}} = 0; \quad \frac{\Theta_k^0 - 2\Theta_k^1 + \Theta_k^2}{\Delta \mathsf{Fo}^2} = 0; \\ \frac{\Theta_1^i - \Theta_0^i}{\Delta \xi} &= A_1 \cos(A_2 \, \mathsf{Fo}_i); \quad \Theta_K^i = 0. \end{split}$$

Результаты расчетов показывают следующее:

- при $Fo_1 = Fo_2 = Fo_3 = 0$ имеют место незатухающие колебания (консервативная система);
- при $Fo_1 = Fo_2 = A_1 = A_2 = 0$, $Fo_3 = 0.3$ наблюдается экспоненциальное затухание амплитуды (рис. 3);
- при резонансе ($A_2 = 1.575$) происходит рост амплитуды, ограниченный трением (рис. 4);
- вблизи резонанса ($A_2 = 1.5$) имеют место бифуркационно-флаттерные колебания с периодической модуляцией амплитуды (рис. 5).

4. Акустический метод очистки реактора пиролиза метана от углерода. В настоящей работе на основе результатов исследования локальнонеравновесных колебаний газа с учетом внешней нагрузки предлагается метод очистки реактора пиролиза метана от углеродных отложений.

Схема реактора пиролиза метана с устройством для организации бифуркационно-флаттерных колебаний газа представлена на рис. 6.

Предлагаемая установка предназначена для автоматической очистки внутренних поверхностей реактора от углеродных отложений и их удаления без прерывания процесса пиролиза. Конструкция установки включает следующие элементы: 1— поршень, выполняющий функцию внешней нагрузки; 2 трубка для отбора водорода; 3— корпус реактора; 4— трубка для подачи метана; 5, 6— газоплотные задвижки; 7— камера для сбора углерода; 8— электрические нагревательные спирали.

При нагреве метана до температуры пиролиза происходит его разложение на водород и углерод. Наибольшая температура наблюдается вблизи стенок реактора, что приводит к интенсивному образованию углеродных отложений, как было установлено в результате экспериментов.

Поршень 1 выполняет возвратно-поступательные движения с частотой, близкой к собственной частоте колебаний газа. Это инициирует бифуркационно-флаттерные колебания, которые разрушают углеродные отложения. При открытии задвижки 5 (при закрытой задвижке 6) отложения под действием силы тяжести поступают в камеру 7.

Процесс удаления углерода из камеры 7 выполняется в следующей последовательности: задвижка 5 закрывается, а задвижка 6 открывается. Углерод выводится в окружающую среду без остановки процесса пиролиза.

Процессы очистки и удаления отложений выполняются периодически. Интервалы между циклами определяются скоростью образования углерода.

Заключение. Представлена математическая модель колебаний газа, учитывающая его релаксационные свойства, внутреннее трение и воздействие внешней нагрузки, изменяющейся по гармоническому закону с заданной частотой. Модель разработана на основе модифицированного закона Гука, в котором избыточное давление и деформация рассматриваются как зависящие



Рис. 3. Колебания газа в точках $\xi=0$ (линия 1), $\xi=0.4$ (линия 2) и $\xi=0.8$ (линия 3) (Fo $_1=\mathsf{Fo}_2=A_1=A_2=0,\,\mathsf{Fo}_3=0.3)$

[Figure 3. Qas oscillations at points $\xi = 0$ (line 1), $\xi = 0.4$ (line 2), and $\xi = 0.8$ (line 3) $(Fo_1 = Fo_2 = A_1 = A_2 = 0, Fo_3 = 0.3)$]



Рис. 4. Резонансные колебания газа в точках $\xi = 0$ (линия 1), $\xi = 0.4$ (линия 2), $\xi = 0.8$ (линия 3) и $\xi = 1$ (линия 4) (Fo₁ = Fo₂ = 10, Fo₃ = 0.3, A₁ = 0.1, A₂ = 1.575)





Рис. 5. Бифуркационно-флаттерные колебания газа в точках $\xi = 0$ (линия 1), $\xi = 0.8$ (линия 2) и $\xi = 1$ (линия 3) (Fo₁ = Fo₂ = 10, Fo₃ = 0.3, $A_1 = 0.1, A_2 = 1.5$)

[Figure 5. Bifurcation-flutter gas oscillations at points $\xi = 0$ (line 1), $\xi = 0.8$ (line 2), and $\xi = 1$ (line 3) (Fo₁ = Fo₂ = 10, Fo₃ = 0.3, A₁ = 0.1, A₂ = 1.5)]



Рис. 6. Схематическое представление реактора пиролиза метана: 1 – поршень; 2 – трубка для отбора водорода; 3 – цилиндрический корпус реактора; 4 – трубка для подачи метана; 5, 6 – газоплотные задвижки; 7 – камера для сбора углерода; 8 – электрические нагревательные спирали

[Figure 6. Schematic representation of a methane pyrolysis reactor: 1- piston; 2- hydrogen collection tube; 3- cylindrical reactor body; 4- methane inlet tube; 5,6- gas-tight valves; 7- carbon storage vessel; 8- electric heating coils for the reactor]

от времени. Целью разработки модели является изучение динамики колебаний газа в различных условиях.

Для модели, не учитывающей внешнюю нагрузку, получено точное аналитическое решение. Оно показало, что увеличение коэффициентов релаксации приводит к уменьшению амплитуды и частоты колебаний, а также к сглаживанию кривых колебательного процесса.

Анализ численного решения модели с учетом внешней нагрузки выявил, что при частотах внешней нагрузки, близких к резонансным, возникают бифуркационно-флаттерные биения газа. Эти биения характеризуются периодическим увеличением и затуханием амплитуды колебаний.

Предложен метод очистки реактора пиролиза метана от углеродных отложений. Он основан на использовании бифуркационно-флаттерных колебаний газа в реакционной зоне, которые создаются путем организации возвратнопоступательных движений поршня на частотах, близких к резонансным.

Конкурирующие интересы. Конкурирующих интересов не имеем.

Авторский вклад и ответственность. Все авторы внесли равный вклад в разработку концепции исследования, проведение расчетов и подготовку рукописи. Авторы несут совместную ответственность за достоверность представленных результатов и окончательное содержание статьи. Окончательная версия рукописи утверждена всеми соавторами.

Финансирование. Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках реализации государственного задания Самарского государственного технического университета (проект № FSSE-2024-0014).

Благодарность. Авторы выражают признательность рецензентам за детальный анализ работы и конструктивные замечания, существенно повысившие качество публикации.

Библиографический список

- 1. Баранов Н. Н. *Нетрадиционные источники и методы преобразования энергии*. М.: МЭИ, 2012. 384 с. EDN: UOOWV.
- 2. Фортов В. Е., Попель О. С. Энергетика в современном мире. М.: Интеллект, 2011. 168 с. EDN: QMLDHF.
- Dagle R. A, Dagle V. L., Bearden M. D., et al. An overview of natural gas conversion technologies for co-production of hydrogen and value added solid carbon products: OSTI Technical Report. Washington: U.S. Department of Energy, 2017. DOI: https://doi.org/ 10.2172/1411934.
- 4. Кудинов И. В., Пименов А. А., Михеева Г. В. Моделирование термического разложения метана и образования твердых углеродных частиц // *Нефтехимия*, 2020. Т. 60, № 6. С. 781–785. EDN: NXMKAM. DOI: https://doi.org/10.31857/S002824212006012X.
- Kudinov I. V., Pimenov A. A., Kryukov Y. A., Mikheeva G. V. A theoretical and experimental study on hydrodynamics, heat exchange and diffusion during methane pyrolysis in a layer of molten tin // Int. J. Hydrogen Energy, 2021. vol. 46, no. 17. pp. 10183-10190. EDN: BPAKJI. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.12.138.
- 6. Кудинов И. В., Великанова Ю. В., Ненашев М. В. [и др.] Пиролиз метана в расплавленных средах для получения водорода: обзор современных достижений // *Нефmexuмия*, 2023. Т. 63, № 5. С. 627–639. EDN: SBYGPE. DOI: https://doi.org/10.31857/ S0028242123050015.
- Machhammer O., Bode A., Hormuth W. Financial and ecological evaluation of hydrogen production processes on large scale // Chem. Eng. Technol., 2016. vol. 39, no. 6. pp. 1185– 1193. DOI: https://doi.org/10.1002/ceat.201600023.
- Leal Perez B., Medrano Jiménez J. A., Bhardwaj R., et al. Methane pyrolysis in a molten gallium bubble column reactor for sustainable hydrogen production: Proof of concept & techno-economic assessment // Int. J. Hydrogen Energy, 2021. vol. 46, no. 7. pp. 4917–4935. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.11.079.
- Zhao Q., Wang Y., Wang Y.N., et al. Steam reforming of CH₄ at low temperature on Ni/ZrO₂ catalyst: Effect of H₂O/CH₄ ratio on carbon Q₅ deposition // Int. J. Hydrogen Energy, 2020. vol. 45, no. 28. pp. 14281-14292. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene. 2020.03.112.
- Steinberg M. The Carnol process for CO₂ mitigation from power plants and the transportation sector // Energy Conv. Manag., 1996. vol. 37, no. 6–8. pp. 843–848. DOI: https://doi.org/10.1016/0196-8904(95)00266-9.
- Steinberg M. Fossil fuel decarbonization technology for mitigating global warming // Int. J. Hydrogen Energy, 1999. vol. 24, no. 8. pp. 771-777. DOI: https://doi.org/10.1016/ S0360-3199(98)00128-1.
- 12. Бабаков И. М. Теория колебаний. М.: Дрофа, 2004. 592 с. EDN: QJNGJV.
- Кабисов К. С., Камалов Т. Ф., Лурье В. А. Колебания и волновые процессы. М.: Ком-Книга, 2010. 360 с. EDN: QJOEGP.
- Кудинов И. В. рарег Разработка математических моделей и исследование неравновесных явлений с учетом пространственно-временной нелокальности // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки, 2018. Т. 22, № 1. С. 116–152. EDN: UTXSMC. DOI: https://doi.org/10.14498/vsgtu1566.
- 15. Соболев С. Л. Локально-неравновесные модели процессов переноса // УФН, 1997. Т. 167, № 10. С. 1095–1106. DOI: https://doi.org/10.3367/UFNr.0167.199710f.1095.
- Соболев С. Л. Процессы переноса и бегущие волны в локально-неравновесных системах // УФН, 1991. Т. 161, № 3. С. 5–29. DOI: https://doi.org/10.3367/UFNr.0161. 199103b.0005.
- 17. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. М.: Дрофа, 2003. 840 с.
- Филин А. П. Прикладная механика твердого деформируемого тела. Т. 1. М.: Наука, 1976. 353 с.

- Kudinov I. V., Eremin A. V., Kudinov V. A., et al. Mathematical model of damped elastic rod oscillations with dual-phase-lag // Int. J. Solids Struct., 2020. vol. 200-201. pp. 231-241. EDN: LVYXJK. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2020.05.018.
- Паршаков А. Н. Физика линейных и нелинейных волновых процессов в избранных задачах. Электромагнитные и акустические волны. М.: Интеллект, 2014. 144 с.

MSC: 76V05, 80A32

Mathematical modeling of gas oscillations in a methane pyrolysis reactor

I. V. Kudinov, K. V. Trubitsyn, A. V. Eremin, V. D. Dolgikh

Samara State Technical University, 244, Molodogvardeyskaya st., Samara, 443100, Russian Federation.

Abstract

A mathematical model of gas oscillations induced by external harmonic loading has been developed, taking into account spatiotemporal nonlocality. The model is based on the equilibrium (motion) equation and a modified Hooke's law, which incorporates relaxation terms accounting for the mean free path and time of microparticles (electrons, atoms, molecules, ions, etc.).

Numerical studies of the model have shown that resonance occurs when the natural frequency of gas oscillations coincides with the frequency of the external load. This resonance is characterized by a sharp increase in the amplitude of oscillations, which is limited by the gas friction coefficient. When the frequency of the external load is close to the natural frequency of gas oscillations, bifurcation-flutter oscillations (beats) are observed, accompanied by periodic increases and decreases in the oscillation amplitude at each point of the spatial variable. In this case, the gas oscillations exhibit an infinite number of amplitudes and frequencies.

Periodic variations in gas displacement and pressure, ranging from zero to a certain maximum value and propagating along the length of the methane pyrolysis reactor, contribute to the cleaning of its internal surfaces from loose carbon deposits. The carbon removed from the reactor walls accumulates in

Mathematical Modeling, Numerical Methods and Software Complexes Research Article

© Authors, 2024

© Samara State Technical University, 2024 (Compilation, Design, and Layout)

∂ @ The content is published under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

Please cite this article in press as:

Kudinov I. V., Trubitsyn K. V., Eremin A. V., Dolgikh V. D. Mathematical modeling of gas oscillations in a methane pyrolysis reactor, *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki* [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2024, vol. 28, no. 4, pp. 773–789. EDN: SRKXEK. DOI: 10.14498/vsgtu2115 (In Russian).

Authors' Details:

Konstantin V. Trubitsyn D https://orcid.org/0000-0003-1888-2905 Cand. Econ. Sci., Associate Professor; Dean; Faculty of Thermal Power Engineering; e-mail:tef-samgtu@yandex.ru

Anton V. Eremin ¹ https://orcid.org/0000-0002-2614-6329 Dr. Techn. Sci, Associate Professor; Head of Department; Dept. of Industrial Thermal Power Engineering; e-mail: a.v.eremin@list.ru

Victor D. Dolgikh D https://orcid.org/0000-0003-1505-3810 Assistant; Dept. of Physics; e-mail:torressva12@yandex.ru the lower part between two gas-tight shut-off valves, allowing for its removal without interrupting the pyrolysis process.

This model can be useful for optimizing reactor cleaning processes and improving the efficiency of methane pyrolysis.

Keywords: methane pyrolysis reactor, hydrogen and carbon production, mathematical model of gas oscillations, accounting for spatiotemporal nonlocality, harmonic external load, numerical solution, resonant and bifurcation-flutter oscillations, method of carbon removal.

Received: $11^{\rm th}$ September, 2024 / Revised: $28^{\rm th}$ October, 2024 / Accepted: $19^{\rm th}$ November, 2024 / First online: $27^{\rm th}$ December, 2024

Competing interests. The authors declare no competing interests.

Authors' contributions and responsibilities. All authors contributed equally to the conceptualization of the research, conducting calculations, and preparation of the manuscript. The authors share collective responsibility for the accuracy of the presented results and the final content of the article. The final version of the manuscript has been approved by all co-authors.

Funding. This study was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation under the state assignment of Samara State Technical University (Project No. FSSE-2024-0014).

Acknowledgments. The authors express their gratitude to the reviewers for their thorough analysis of the work and constructive feedback, which significantly improved the quality of the publication.

References

- 1. Baranov N. N. Netraditsionnye istochniki i metody preobrazovaniia energii [Unconventional Sources and Methods of Energy Conversion]. Moscow, Moscow University of Economics, 2012, 384 pp. (In Russian). EDN: UOOWV.
- 2. Fortov V. E., Popel O. S. *Energetika v sovremennom mire* [Energetics in the Modern World]. Moscow, Intellekt, 2011, 168 pp. (In Russian). EDN: QMLDHF.
- Dagle R. A, Dagle V. L., Bearden M. D., et al. An overview of natural gas conversion technologies for co-production of hydrogen and value added solid carbon products, OSTI Technical Report. Washington, U.S. Department of Energy, 2017. DOI: https://doi.org/ 10.2172/1411934.
- Kudinov I. V., Pimenov A. A., Mikheeva G. V. Modeling of the thermal decomposition of methane and the formation of solid carbon particles, *Petroleum Chem.*, 2020, vol. 60, no. 11, pp. 1239–1243. EDN: PBZZQR. DOI: https://doi.org/10.1134/S0965544120110122.
- Kudinov I. V., Pimenov A. A., Kryukov Y. A., Mikheeva G. V. A theoretical and experimental study on hydrodynamics, heat exchange and diffusion during methane pyrolysis in a layer of molten tin, *Int. J. Hydrogen Energy*, 2021, vol. 46, no. 17, pp. 10183-10190. EDN: BPAKJI. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.12.138.
- Kudinov I. V., Vellikanova Yu. V., Nenashev M. V., et al. Methane pyrolysis in molten media for hydrogen production: A review of current advances, *Petr. Chem.*, 2023, vol. 63, no. 9, pp. 1017–1026. EDN: ANDKEP. DOI: https://doi.org/10.1134/S0965544123080078.
- Machhammer O., Bode A., Hormuth W. Financial and ecological evaluation of hydrogen production processes on large scale, *Chem. Eng. Technol.*, 2016, vol. 39, no. 6, pp. 1185–1193. DOI: https://doi.org/10.1002/ceat.201600023.
- 8. Leal Perez B., Medrano Jiménez J. A., Bhardwaj R., et al. Methane pyrolysis in a molten gallium bubble column reactor for sustainable hydrogen production: Proof of concept &

techno-economic assessment, *Int. J. Hydrogen Energy*, 2021, vol. 46, no. 7, pp. 4917–4935. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.11.079.

- Zhao Q., Wang Y., Wang Y.N., et al. Steam reforming of CH₄ at low temperature on Ni/ZrO₂ catalyst: Effect of H₂O/CH₄ ratio on carbon Q₅ deposition, *Int. J. Hydrogen Energy*, 2020, vol. 45, no. 28, pp. 14281–14292. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijhydene. 2020.03.112.
- Steinberg M. The Carnol process for CO₂ mitigation from power plants and the transportation sector, *Energy Conv. Manag.*, 1996, vol. 37, no. 6–8, pp. 843–848. DOI: https://doi. org/10.1016/0196-8904(95)00266-9.
- Steinberg M. Fossil fuel decarbonization technology for mitigating global warming, Int. J. Hydrogen Energy, 1999, vol. 24, no. 8, pp. 771-777. DOI: https://doi.org/10.1016/ S0360-3199(98)00128-1.
- 12. Babakov I. M. *Teoriia kolebanii* [Theory of Oscillations]. Moscow, Drofa, 2004, 592 pp. (In Russian). EDN: QJNGJV.
- 13. Kabisov K. S., Kamalov T. F., Lurie V. A. *Kolebaniia i volnovye protsessy* [Oscillations and Wave Processes]. Moscow, KomKniga, 2010, 360 pp. (In Russian). EDN: QJOEGP.
- Kudinov I. V. Development of mathematical models and research strongly nonequilibrium developments taking into account space-time nonlocality, *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ.*, *Ser. Fiz.-Mat. Nauki* [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2018, vol. 22, no. 1, pp. 116–152 (In Russian). EDN: UTXSMC. DOI: https://doi.org/10.14498/vsgtu1566.
- Sobolev S. L. Local non-equilibrium transport models, *Phys. Usp.*, 1997, vol. 40, no. 10, pp. 1043–1053. DOI: https://doi.org/10.1070/PU1997v040n10ABEH000292.
- Sobolev S. L. Transport processes and traveling waves in systems with local nonequilibrium, *Phys. Usp.*, 1991, vol. 34, no. 3, pp. 217-229. DOI: https://doi.org/10.1070/ PU1991v034n03ABEH002348.
- Loitsiansky L. G. Mekhanika zhidkosti i gaza [Mechanics of Fluid and Gas]. Moscow, Drofa, 2003, 840 pp. (In Russian)
- Filin A. P. Prikladnaia mekhanika tverdogo deformiruemogo tela [Applied Mechanics of Deformable Solid Body], vol. 1. Moscow, Nauka, 1976, 353 pp. (In Russian)
- Kudinov I. V., Eremin A. V., Kudinov V. A., et al. Mathematical model of damped elastic rod oscillations with dual-phase-lag, *Int. J. Solids Struct.*, 2020, vol. 200-201, pp. 231-241. EDN: LVYXJK. DOI: https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2020.05.018.
- Parshakov A. N. Fizika lineinykh i nelineinykh volnovykh protsessov v izbrannykh zadachakh. Elektromagnitnye i akusticheskie volny [Physics of Linear and Nonlinear Wave Processes in Selected Problems. Electromagnetic and Acoustic Waves]. Moscow, Intellekt, 2014, 144 pp. (In Russian)