

На правах рукописи

Пескова Елизавета Евгеньевна

**Моделирование химически реагирующих потоков
с использованием вычислительных алгоритмов
высокого порядка точности**

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Автореферат на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2018

Работа выполнена на кафедре прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики в ФГБОУ ВО «Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва»

Научный руководитель: Тишкин Владимир Федорович,
член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН, заместитель директора

Официальные оппоненты: Савенкова Надежда Петровна,
доктор физико-математических наук, факультет вычислительной математики и кибернетики Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова, ведущий научный сотрудник

Вельмисов Петр Александрович,
доктор физико-математических наук, профессор, Ульяновский государственный технический университет, заведующий кафедрой «Высшая математика»

Ведущая организация: Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук

Защита состоится 11 октября 2018 г. в ____ часов на заседании диссертационного совета Д 002.024.03, созданного на базе ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИПМ им. М.В. Келдыша РАН <http://keldysh.ru>

Автореферат разослан «____» _____ 2018 г.

Учёный секретарь диссертационного совета
к.ф.-м.н.

М.А. Корнилина

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования определяется необходимостью создания численных алгоритмов и эффективных методов их реализации для моделирования динамики многокомпонентного газа с учетом процессов диффузии, теплопроводности, вязкости и химических реакций.

Одним из направлений химической промышленности является процесс термического пиролиза углеводородов, продуктом которого являются низшие олефины – этилен и пропилен. В Институте катализа имени Г.К. Борескова СО РАН (группа аэрозольного катализа под руководством к.ф.-м.н. Снытникова В.Н.) проводятся работы по созданию технологий переработки углеводородов для невысоких производительностей^{1, 2}. Математическое моделирование процессов пиролиза углеводородов является актуальной задачей, решение которой позволит изучить динамику газового потока при различных условиях протекания реакции и отказаться от дорогостоящих натуральных экспериментов. В результате расчетов можно получить данные, которые в дальнейшем можно использовать при планировании экспериментальных работ.

Цели работы. Построение численного алгоритма повышенного порядка точности и эффективного метода его реализации для моделирования течения вязкого теплопроводного сжимаемого газа с химическими превращениями с использованием многопроцессорных вычислительных систем. Проведение математического моделирования процесса пиролиза этана в проточном реакторе на основе построенных алгоритмов. Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

1. разработать численный алгоритм высокого порядка точности (на основе ENO и WENO схем) для решения системы уравнений, включающей законы сохранения массы, импульса, энергии, уравнения неразрывности для каждой компоненты газовой смеси;
2. провести вычислительный эксперимент на основе построенной схемы для брутто-реакции пиролиза этана, проанализировать адекватность полученных результатов;
3. построить параллельный вычислительный алгоритм с использованием технологии MPI на основе разработанных разностных схем и создать программный комплекс для моделирования течения газа в химическом реакторе;
4. провести численное моделирование потоков многокомпонентного газа с

¹ Стадниченко О.А., Снытников В.Н., Снытников Вл.Н. Математическое моделирование потоков многокомпонентного газа с энергоемкими химическими процессами на примере пиролиза этана // Вычислительные методы и программирование. 2014. Т. 15. С. 658-668.

² Stadnichenko O.A., Snytnikov V.N., Snytnikov Vl.N., Masyuk N.S. Mathematical modeling of ethane pyrolysis in a flow reactor with allowance for laser radiation effects // Chemical Engineering Research and Design. 2016. V. 109. P. 405–413.

химическими реакциями на примере пиролиза этана в проточном реакторе, сравнить результаты вычислительного эксперимента с экспериментальными данными.

Научная новизна работы заключается в проведении математического моделирования динамики многокомпонентного реагирующего газа с химическими превращениями с использованием существенно неосциллирующих схем повышенного порядка точности. Для решения уравнений химической кинетики был применен метод решения, основанный на специфическом виде химических задач, обладающий малой трудоемкостью. Построен параллельный вычислительный алгоритм, разработан программный комплекс для нахождения газодинамических параметров, а также концентраций продуктов реакции на многопроцессорной вычислительной технике.

Проведено численное моделирование потоков многокомпонентного реагирующего газа с химическими процессами в проточном реакторе на примере пиролиза этана. Проанализирована кинетика процесса, исследована динамика газового потока с учетом теплообменных и диффузионных процессов, а также химических реакций пиролиза этана. Сравнение данных экспериментов по конверсии этана в ходе термического пиролиза с данными, полученными в ходе вычислительного эксперимента, показало высокую степень достоверности полученных результатов.

Практическая значимость работы. Практическая значимость работы определяется созданием программного комплекса для моделирования течения вязкого теплопроводного сжимаемого химически активного газа. Разработанный программный комплекс может быть использован для исследования и анализа широкого класса задач, описывающих течения газа с химическими процессами, в частности, газофазного пиролиза углеводородов в проточном реакторе с внешним обогревом реакционной зоны. Полученную методику и программный комплекс можно применять при разработке химико-технологических установок по пиролизу углеводородов, а также для определения начальных условий для максимальной конверсии исходной газовой смеси.

Методы исследования. Для описания математической модели движения ламинарного потока химически активного газа с учетом процессов диффузии, вязкости, теплопроводности использовалась система уравнений Навье-Стокса для многокомпонентного газа в приближении малых чисел Маха. Для исследования математической модели использовались численные методы решения уравнений математической физики, в частности интегро-интерполяционный метод. Аппроксимация конвективных членов системы уравнений Навье-Стокса проводится с использованием WENO алгоритма пятого порядка точности. Расчет уравнений химической кинетики выделяется в отдельный шаг и основан на специфическом виде химических задач. Численные расчеты были выполнены с помощью разработанного комплекса программ, написанного на языке C++.

Положения, выносимые на защиту:

- Численный алгоритм высокого порядка точности для решения системы уравнений, описывающей динамику многокомпонентного вязкого теплопроводного сжимаемого газа с учетом химических реакций.
- Параллельный программный комплекс на основе построенных схем, разработанный с использованием технологии MPI для параллельных вычислений.
- Результаты расчетов задачи по моделированию динамики газового потока на примере брутто-реакции пиролиза этана.
- Результаты расчетов задачи по моделированию процесса пиролиза этана в проточном реакторе с внешним обогревом реакционной зоны.

Достоверность результатов подтверждается хорошей согласованностью с экспериментальными данными, а также с результатами, полученными другими авторами. Параллельный программный комплекс верифицирован путем сравнения результатов расчетов последовательной и параллельной версий.

Личный вклад автора. Автору принадлежит решение основных задач диссертации. Все положения, выносимые на защиту, получены лично автором в процессе научной работы. Научный руководитель В.Ф. Тишкин обозначил общее направление работ, предложил использование ряда методик и алгоритмов, принимал участие в обсуждениях результатов. Материалы, полученные другими исследователями, обозначены в работе ссылками.

Апробация результатов. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих семинарах, международных и всероссийских конференциях: семинары Средне-Волжского математического общества; V Международная научно-техническая конференция молодых специалистов, аспирантов и студентов «Математическое и компьютерное моделирование естественнонаучных и социальных проблем» (г. Пенза, 2011 г.); V Международная математическая школа «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» имени Е.В. Воскресенского (г. Саранск, 2011 г.); VI Международная научно-техническая конференция «Аналитические и численные методы моделирования естественнонаучных и социальных проблем (г. Пенза, 2011 г.); VI Международная математическая школа-семинар «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» имени Е.В. Воскресенского (г. Саранск, 2013 г.); II Международная конференция и молодёжная школа "Информационные технологии и нанотехнологии" (г. Самара, 2016 г.); VII Всероссийская научная молодежная школа-семинар «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» имени Е.В. Воскресенского с международным участием (г. Саранск, 2016 г.); Семинар ИПМ им. М.В. Келдыша РАН под руководством Б.Н. Четверушкина (г. Москва, 2016 г.); XI Международная научно-техническая конференция «Аналитические и численные методы моделирования естественно-научных и социальных проблем» (г. Пенза, 2016 г.); XLV Научная конференция «Огарёвские чтения» (г. Саранск, 2016 г.);

Международная научная конференция «Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ) 2017» (г. Казань, 2017г.); XII Международная научно-техническая конференция «Аналитические и численные методы моделирования естественно-научных и социальных проблем» (г. Пенза, 2017 г.); XIII Международная научная конференция «Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании» (г. Саранск, 2017 г.).

Публикации. По теме диссертационной работы опубликовано 14 статей, из них 4 – в научных журналах, входящих в перечень изданий, рекомендуемых ВАК РФ. Получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2017612056.

Структура и объем диссертации. Диссертационное исследование состоит из введения, 3 глав, заключения и списка литературы. Материал изложен на 95 страницах, содержит 9 таблиц и 21 рисунок. Список литературы состоит из 118 наименований.

Содержание работы

Введение. Обоснована актуальность выбранной темы исследования по математическому моделированию термического пиролиза углеводородов. Представлена установка химического реактора по пиролизу углеводородов, для которого проводились вычислительные эксперименты. Кратко изложены численные алгоритмы, применяемые в настоящем исследовании. Проведен литературный обзор методов математического моделирования газодинамических течений и методов решения уравнений химической кинетики. Представлены сведения о целях, задачах, новизне, практической значимости и апробации работы.

Глава 1. Численный алгоритм расчета течения многокомпонентного реагирующего газа. В данной главе описывается математическая модель динамики многокомпонентного вязкого сжимаемого газа с учетом процессов теплопроводности, диффузии, химических реакций. Описана разностная схема повышенного порядка точности для представленной математической модели. Проведены расчеты для течения газа в замкнутом реакторе.

Для описания дозвуковых течений газовой смеси используется система уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха^{3,4,5}:

³ Борисов В.Е., Якуш С.Е. Применение адаптивных иерархических сеток для расчета течений реагирующих газов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2015. Т. 16. Вып. 2.

⁴ Almgren A.S., Bell J.B., Colella P., Howell L.H., Welcome M.L. A Conservative Adaptive Projection Method for the Variable Density Incompressible Navier-Stokes Equations // Journal of Computational Physics. 1998. 142. P. 1-46.

⁵ Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // Combustion Theory and Modelling. P. 535-556.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho Y_i \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_i + Q_i, \\
\frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) - \nabla \pi + \nabla \cdot \bar{\tau}, \\
\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho h \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{q}.
\end{aligned} \tag{1}$$

Система дополнена уравнением состояния и условием на дивергенцию вектора скорости:

$$\begin{aligned}
p_0 &= \rho RT \sum_i \left(Y_i / M_{wi} \right), \\
S \equiv \nabla \cdot \vec{v} &= \frac{1}{\rho C_p T} \left(\nabla \cdot \lambda \nabla T + \sum_i \rho D_{im} \nabla Y_i \nabla h_i \right) + \frac{1}{\rho} \sum_i \frac{M_w}{M_{wi}} (\nabla \cdot \rho D_{im} \nabla Y_i) \\
&+ \frac{1}{\rho} \sum_i \left(\frac{M_w}{M_{wi}} - \frac{h_i}{C_p T} \right) Q_i.
\end{aligned}$$

Здесь ρ – плотность смеси, \vec{v} – вектор скорости, Y_i – массовая доля i -ой компоненты, T – температура, M_{wi} – молекулярная масса i -ой компоненты, $\pi = p - p_0$ – динамическая составляющая давления, p_0 – термодинамическая составляющая давления, \vec{J}_i – вектор диффузионного потока, \vec{q} – вектор потока тепла, h – энтальпия смеси, $\bar{\tau}$ – тензор вязких напряжений, Q_i – скорость образования или расхода i -ой компоненты.

Тензор вязких напряжений определяется следующим образом:

$$\bar{\tau} = \mu(\nabla \vec{v} + (\nabla \vec{v})^T) - \frac{2}{3} \mu(\nabla \cdot \vec{v})I,$$

где I – единичный тензор, μ – коэффициент динамической вязкости.

Выражения для вектора диффузионного потока компонента и вектора потока тепла для смеси определяются с использованием модели средних по смеси значений³:

$$\begin{aligned}
\vec{J}_i &= -\rho D_{im} \nabla Y_i, \\
\vec{q} &= -\lambda \nabla T - \sum_i h_i \rho D_{im} \nabla Y_i.
\end{aligned}$$

Здесь D_{im} – средний по смеси коэффициент диффузии i -ой компоненты, λ – коэффициент теплопроводности смеси, h_i – энтальпия i -ой компоненты:

$$h_i = \int_{T_0}^T C_{pi}(T) dT + h_i^0.$$

Здесь h_i^0 – энтальпия образования i -ой компоненты при стандартной температуре $T_0 = 298.15$ К, C_{pi} – удельная теплоемкость i -ой компоненты при постоянном давлении, задается многочленом, аппроксимирующим известные термодинамические табличные данные в нужном интервале температур.

Скорость образования или расхода i -ой компоненты определяется суммированием скоростей по всем N элементарным стадиям реакции:

$$Q_i = M_{wi} \sum_n v_{in} w_n.$$

Здесь v_{in} – стехиометрические коэффициенты i -ой компоненты в стадии реакции n , w_n – скорость n -ой стадии.

Для построения дискретной модели вводится сетка, равномерная по каждому направлению: $\omega_\Delta = \omega_{\Delta x} \times \omega_{\Delta y}$, $\omega_{\Delta x} = \{\Delta_i, i = 1, \dots, N_x, \Delta_i = [x_{i-1}, x_i], |\Delta_i| = x_i - x_{i-1} = h_x, h_x N_x = L_x\}$, $\omega_{\Delta y} = \{\Delta_j, j = 1, \dots, N_y, \Delta_j = [y_{j-1}, y_j], |\Delta_j| = y_j - y_{j-1} = h_y, h_y N_y = L_y\}$, где $L_{x(y)}$ – размеры расчетной области вдоль осей $\{x, y\}$. Все газодинамические параметры рассматриваются как интегральные средние в ячейках сетки.

При решении уравнений Навье-Стокса используется процедура расщепления по физическим процессам, а именно учет химических превращений выделяется в отдельный шаг, на котором решается следующая система уравнений³:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = Q_i, \\ \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = - \sum_i Q_i h_i. \end{cases} \quad (2)$$

С учетом (2) в векторной форме уравнения (1), описывающие течение многокомпонентного реагирующего газа с учетом расщепления потоков на конвективные и диффузионные составляющие, можно представить в виде:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial (F^{(1)}(U) - H^{(1)}(U))}{\partial x} + \frac{\partial (F^{(2)}(U) - H^{(2)}(U))}{\partial y} = 0. \quad (3)$$

Векторы $U, F^{(1)}(U), F^{(2)}(U), H^{(1)}(U), H^{(2)}(U), Q$ имеют следующий вид:

$$U = \begin{pmatrix} \rho Y_i \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho h \end{pmatrix}, F^{(1)}(U) = \begin{pmatrix} \rho u Y_i \\ \rho u^2 \\ \rho u v \\ \rho h u \end{pmatrix}, F^{(2)}(U) = \begin{pmatrix} \rho v Y_i \\ \rho u v \\ \rho v^2 \\ \rho h v \end{pmatrix},$$

$$H^{(1)}(U) = \begin{pmatrix} J_{ix} \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ q_x \end{pmatrix}, H^{(2)}(U) = \begin{pmatrix} J_{iy} \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ q_y \end{pmatrix}.$$

$$J_{ix} = \rho D_{mi} \frac{\partial Y_i}{\partial x}, J_{iy} = \rho D_{mi} \frac{\partial Y_i}{\partial y},$$

$$q_x = \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_{j=1}^M h_j \rho D_{mj} \frac{\partial Y_j}{\partial x}, q_y = \lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \sum_{j=1}^M h_j \rho D_{mj} \frac{\partial Y_j}{\partial y},$$

$$\tau_{xx} = \mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right), \tau_{yy} = \mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right),$$

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right).$$

Здесь $i = 1, 2, \dots, M$, M – количество элементов в реагирующей смеси.

Для численного решения уравнений химической кинетики используется специализированная явная схема второго порядка точности, основанная на специфическом виде химических задач⁶. Систему дифференциальных уравнений, описывающую химические превращения в (2), можно представить в следующем виде:

$$\frac{dc_i}{dt} = -c_i \varphi_i(\mathbf{c}) + \psi_i(\mathbf{c}), \quad \mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_M).$$

Здесь $c_i = \rho Y_i / M_{wi}$, причем $c_i \geq 0$, $\varphi_i(\mathbf{c}) \geq 0$, $\psi_i(\mathbf{c}) \geq 0$.

Решение данной системы находится простыми итерациями:

$$\hat{c}_i^{s+1} = \frac{c_i + \tau \psi_i(\bar{\mathbf{c}}^s)(1 + \tau \varphi_i(\bar{\mathbf{c}}^s)/2)}{1 + \tau \varphi_i(\bar{\mathbf{c}}^s) + (\tau \varphi_i(\bar{\mathbf{c}}^s))^2 / 2}, \bar{\mathbf{c}}^s = \frac{(\mathbf{c} + \hat{\mathbf{c}})}{2}, \hat{\mathbf{c}}^0 = \mathbf{c}.$$

Здесь c_i – решение в исходный момент времени, \hat{c}_i – решение в новый момент времени. Для решения системы необходимо выполнить только две итерации, последующие итерации выполнять не следует: они не повышают порядок точности и ухудшают надежность схемы⁶.

Для аппроксимации системы уравнений (3) используется консервативная нелинейная дифференциально-разностная схема вида:

⁶ Белов А.А., Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Моделирование химической кинетики в газах // Математическое моделирование. 2016. Т 28, № 8. С. 46-64.

$$\frac{dU_{ij}}{dt} + \frac{\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)} - \tilde{F}_{i-1/2j}^{(1)}}{h_x} + \frac{\tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)} - \tilde{F}_{ij-1/2}^{(2)}}{h_y} - \left(\frac{\tilde{H}_{i+1/2j}^{(1)} - \tilde{H}_{i-1/2j}^{(1)}}{h_x} + \frac{\tilde{H}_{ij+1/2}^{(2)} - \tilde{H}_{ij-1/2}^{(2)}}{h_y} \right) = 0.$$

Здесь $\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)}$, $\tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)}$ – дискретные потоки, отвечающие за конвективный перенос, которые рассчитываются по схеме Лакса-Фридрихса-Русанова^{7,8}:

$$\begin{aligned} \tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left(\tilde{F}^{(1)}(U_{i+1/2j}^r) + \tilde{F}^{(1)}(U_{i+1/2j}^l) - \alpha_1 (U_{i+1/2j}^r - U_{i+1/2j}^l) \right), \\ \tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left(\tilde{F}^{(2)}(U_{ij+1/2}^r) + \tilde{F}^{(2)}(U_{ij+1/2}^l) - \alpha_2 (U_{ij+1/2}^r - U_{ij+1/2}^l) \right), \\ \alpha_1 &= \max \left(\sqrt{(u_{i+1/2j}^r)^2 + (v_{i+1/2j}^r)^2}, \sqrt{(u_{i+1/2j}^l)^2 + (v_{i+1/2j}^l)^2} \right), \\ \alpha_2 &= \max \left(\sqrt{(u_{ij+1/2}^r)^2 + (v_{ij+1/2}^r)^2}, \sqrt{(u_{ij+1/2}^l)^2 + (v_{ij+1/2}^l)^2} \right). \end{aligned}$$

$\tilde{H}_{i+1/2j}^{(1)}$, $\tilde{H}_{ij+1/2}^{(2)}$ – потоки, отвечающие за диффузионный перенос и перенос тепла, для их расчета используется схема с центральными разностями.

Для нахождения значений вектора переменных U слева и справа от границы между i и $i + 1$ ячейками $U_{i+1/2j}^r, U_{i+1/2j}^l$ используется WENO схема пятого порядка точности^{9, 10}. Вводится вектор переменных $q = q(U) = (\rho Y_i, u, v, h)$. С помощью WENO алгоритма проводится его интерполяция на границе между ячейками, а затем пересчитывается значение искомого вектора $U_{i+1/2j}^r = U(q_{i+1/2j}^r)$.

Интерполяция на границе между ячейками проводится следующим образом:

⁷Русанов В.В. Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1961. Т. 1, № 2. С. 267-279.

⁸Lax P.D. Weak solutions of nonlinear hyperbolic equations and their numerical computation. // Communications on Pure and Applied Mathematics. 1954. V. 7, № 1. P.159 -193.

⁹Shu C.W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws // ICASE Report 97-65. 1997.

¹⁰Жалнин Р.В., Змитренко Н.В., Ладонкина М.Е., Тишкин В.Ф. Численное моделирование развития неустойчивости Рихтмайера-Мешкова с использованием схем высокого порядка точности // Математическое моделирование. 2007. Т. 19, № 20. С. 61-66.

$$q_{i+1/2j} = \sum_{l=0}^{K-1} \omega_l q_{i+1/2j}^{(l)}.$$

Здесь $q_{i+1/2j}^{(l)} = \sum_{k=0}^{K-1} c_{lk} \bar{q}_{i-l+k}$, $l = 0, \dots, K-1$ – значение на грани, полученное на шаблоне $S_l^{(i)} = \{x_{i-l}, \dots, x_i, \dots, x_{i-l+K-1}\}$, ω_l – весовые коэффициенты, удовлетворяющие условиям:

$$\omega_l = \frac{\alpha_l}{\sum_{s=0}^{K-1} \alpha_s}, \alpha_l = \frac{d_l}{(\varepsilon + \beta)^2}, l = 0, \dots, K-1.$$

Введение малой величины ε исключает случай обращения знаменателя в ноль, β – индикатор гладкости, d_l – коэффициенты, полученные при интерполяции значения на границе ячейки на расширенном шаблоне $S_*^{(i)} = \{x_{i-K+1}, \dots, x_i, \dots, x_{i+K-1}\}$. Для получения схемы пятого порядка точности полагается $K = 3$.

Вычисленное таким образом поле скорости \vec{v}^* не удовлетворяет условию³ на дивергенцию скорости S , поэтому оно должно быть скорректировано после вычисления динамической составляющей давления π :

$$\vec{v} = \vec{v}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \pi.$$

Уравнение для динамической составляющей давления:

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla \pi = \frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \vec{v}^* - S).$$

Дискретизация по времени проводится по схеме Рунге-Кутты 3-го порядка⁹:

$$\begin{aligned} U^* &= U^n + \Delta t \cdot L(U^n), \\ U^{**} &= \frac{3}{4} U^n + \frac{1}{4} U^* + \frac{1}{4} \Delta t \cdot L(U^*), \\ U^{n+1} &= \frac{1}{3} U^n + \frac{2}{3} U^{**} + \frac{2}{3} \Delta t \cdot L(U^{**}). \end{aligned}$$

Для верификации численного алгоритма рассмотрена задача моделирования динамики многокомпонентного реагирующего газа в замкнутом реакторе для процесса термического разложения этана. При построении математической модели была принята брутто-схема пиролиза этана¹¹, представленная в таблице 1.

¹¹ Мухина Т.Н., Барабанов Н.Л., Бабаш С.Е., Меньшиков В.А., Аврех Г.Л. Пиролиз углеводородного сырья. Москва: Химия, 1987. 240 с.

В начальный момент времени реактор нагрет до температуры 950 К, заполнен этаном, давление в области $p = 101325$ Па. Задача рассматривалась в следующей области: $[0; 220\text{мм}] \times [0; 21\text{мм}]$.

Таблица 1

Схема и кинетические параметры механизма брутто-реакции пиролиза этана

№	Стадия	$A_i, 1/с$ или $л/(моль \cdot с)$	$E_i, Дж/моль$
1	$C_2H_6 \rightarrow C_2H_4 + H_2$	$1.08E + 16$	$2.5E + 5$
2	$2C_2H_6 \rightarrow C_2H_4 + 2CH_4$	$3.16E + 16$	$2.7E + 5$

В ходе реакции в результате нагрева происходит перераспределение и образование новых элементов смеси: этилена, водорода, метана. Степень конверсии этана к моменту установления при указанных температурах составляет около 41% (рис. 1), что близко к наблюдаемым в экспериментах значениям конверсии – около 40%¹².

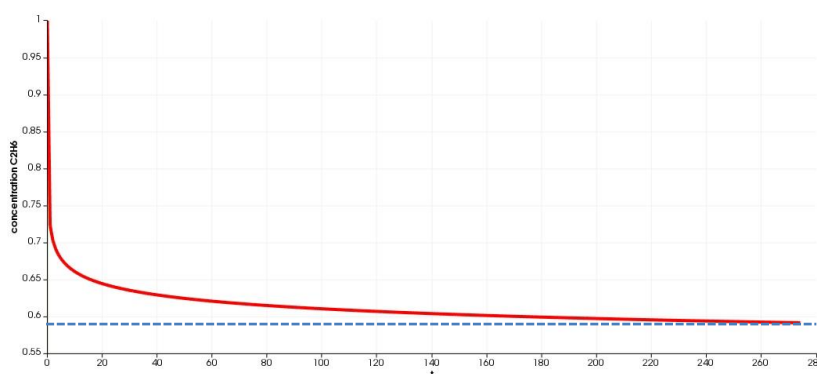


Рис. 1. Изменение массовой доли этана

Глава 2. Программная реализация алгоритма расчёта газодинамических течений. В данной главе описывается параллельный алгоритм для реализации построенных разностных схем и программный комплекс для моделирования динамики многокомпонентных реагирующих течений. Программный комплекс реализован на основе технологии для распределенных вычислений MPI на языке C++.

В главе приведено описание параллельного вычислительного алгоритма на основе принципов геометрического параллелизма, описаны схемы межпроцессорного взаимодействия. Представлены основные модули программного комплекса, а именно:

¹² Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А., Тишкин В.Ф. Математическое моделирование динамики многокомпонентного газа с использованием WENO схем на примере пиролиза этана // Журнал Средневолжского математического общества. 2016. Т. 18. № 3. С. 98-106.

- модуль *start_up()*, предназначенный для чтения из файлов начальных данных, декомпозиции расчетной области и передачи параметров всем процессорам;
- модуль *init()*, осуществляющий заполнение массивов начальных данных и массивов консервативных переменных;
- модуль *calc_one_time_step()*, реализующий численный алгоритм расчета газодинамических параметров на одном шаге по времени;
- модуль *bnd_cond()*, определяющий набор условий на границе расчетной области;
- модуль *bnd_exch()*, реализующий межпроцессорный обмен данными;

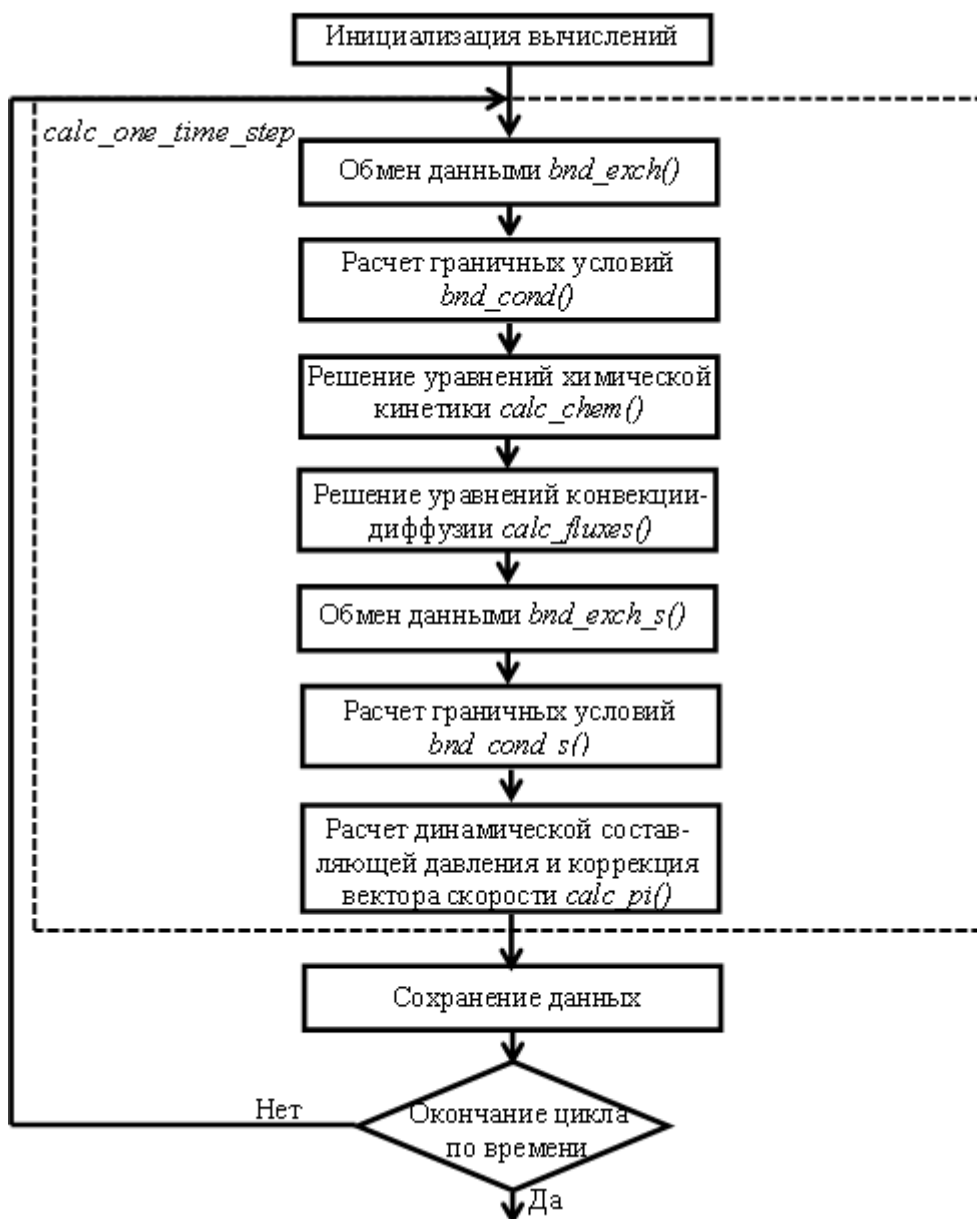


Рис. 2. Схема работы одного вычислительного узла

- модуль *save_vtk()*, выполняющий запись результатов в файл в формате VTK.

На рис. 2 представлена схема работы одного вычислительного узла.

В главе описывается схема передачи данных между процессорами (рис. 3), приведены функции передачи данных, представлены части кода, отвечающие за отправку и получение газодинамических параметров в фиктивных ячейках.

Для организации межпроцессорного обмена в каждой расчетной области вводятся слои фиктивных ячеек на границе. Учитывая особенность построения разностной схемы с использованием WENO алгоритма, в пересылке для каждой границы области участвуют 3 слоя ячеек. Для пересылки и получения данных между процессорами в программном комплексе применяются парные блокирующие функции, выбор которых обусловлен наличием в параллельном алгоритме только обменов между двумя процессорами.

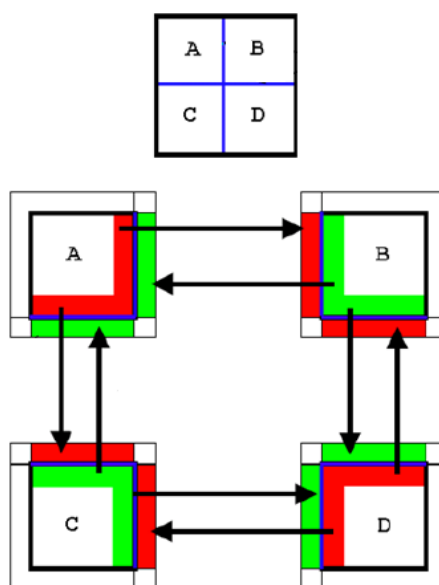


Рис. 3. Схема межпроцессорного обмена

В главе кратко изложена информация о пакете ParaView, возможности которого используются для визуализации и анализа результатов исследований.

Приведены результаты тестирования разработанного программного комплекса с использованием различного количества процессоров на сетках разной размерности (таблица 2). Проведен анализ эффективности алгоритма.

Таблица 2

Результаты измерения производительности

Число процессоров	Время, с		Ускорение, раз		Эффективность	
	281600 ячеек	70400 ячеек	281600 ячеек	70400 ячеек	281600 ячеек	70400 ячеек
1	31698.12	7799.32	1.0	1.0	1.0	1.0

Число процессоров	Время, с		Ускорение, раз		Эффективность	
	281600 ячеек	70400 ячеек	281600 ячеек	70400 ячеек	281600 ячеек	70400 ячеек
2	15903.63	3948.79	1.9931	1.9751	0.99	0.98
4	8004.37	1984.01	3.9601	3.9310	0.99	0.98
8	4123.45	1230.28	7.6872	6.3394	0.96	0.79
16	2605.51	716.92	12.1658	10.8789	0.76	0.68
32	1519.81	417.57	20.8566	18.6778	0.65	0.58
64	811.87	242.86	39.0433	32.1144	0.61	0.50

Глава 3. Моделирование потока многокомпонентного газа в проточном реакторе на примере пиролиза этана. С использованием разработанного программного комплекса проведено исследование динамики течения многокомпонентного сжимаемого вязкого газа с учетом процессов диффузии, теплообмена и химических превращений в проточном реакторе, предназначенном для термического пиролиза этана.

Рассматривается следующая постановка задачи. Геометрия проточного реактора, разработанного в Институте катализа им. Г.К. Борескова СО РАН^{1,2}, схематично представлена на рис. 4. Общая длина реактора 220 мм, диаметр 21 мм, длина нагревательных элементов 70 мм. В начальный момент времени реактор заполнен метаном комнатной температуры $T = 27^\circ\text{C}$. Давление в области $p = 101325$ Па. На вводах (1) и (2) определены условия потока газа с расходом 0.754 Мг/с и 0.316 Мг/с соответственно. Через вводы (1) подается подогретый этан, температура $T = 327^\circ\text{C}$. Через вводы (2) подается защитный газ метан, температура $T = 27^\circ\text{C}$. Выход продуктов пиролиза осуществляется через выход (3).

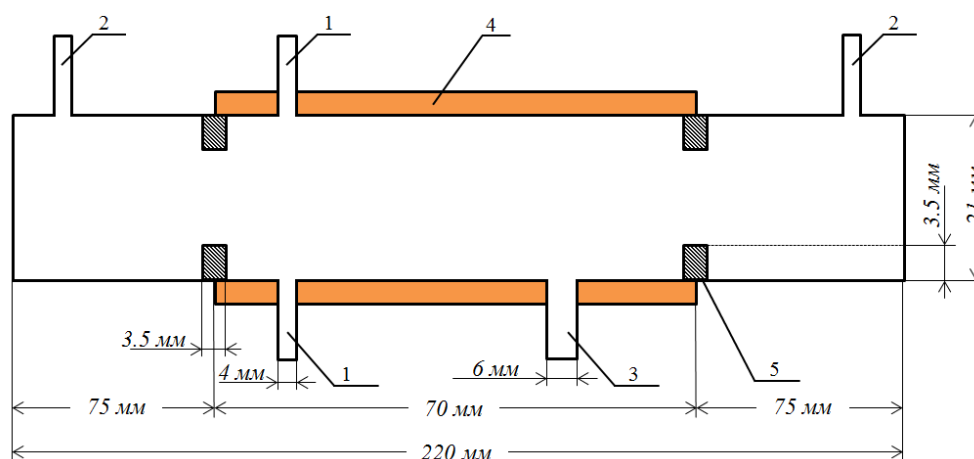


Рис. 4. Геометрия расчетной области

Во второй части главы описывается математическая модель процесса пиролиза этана, построенная на основе кинетической схемы, представляющей собой автокаталитический радикальный механизм пиролиза и состоящей из 15

элементарных стадий¹³ (таблица 3). Для более точного учета таких характеристик компонент смеси, как теплопроводность, теплоемкость и вязкость, используются эффективные зависимости этих характеристик от температуры^{1,2}.

Таблица 3

Схема и кинетические параметры механизма пиролиза этана

№	Стадия	$\lg A_i, 1/c$ или $л/(моль \cdot с)$	$E_i, кДж/моль$
1	$C_2H_6 \rightarrow CH_3^\bullet + CH_3^\bullet$	16.0	360.0
2	$CH_3^\bullet + C_2H_6 \rightarrow CH_4 + C_2H_5^\bullet$	10.0	50.0
3	$C_2H_5^\bullet \rightarrow C_2H_4 + H^\bullet$	13.5	170.0
4	$H^\bullet + C_2H_6 \rightarrow H_2 + C_2H_5^\bullet$	11.0	40.0
5	$H^\bullet + C_2H_4 \rightarrow C_2H_5^\bullet$	10.4	8.4
6	$CH_3^\bullet + C_2H_4 \rightarrow n - C_3H_7^\bullet$	10.9	33.0
7	$n - C_3H_7^\bullet \rightarrow CH_3^\bullet + C_2H_4$	13.9	137.0
8	$C_2H_5^\bullet + C_2H_5^\bullet \rightarrow C_2H_4 + C_2H_6$	10.0	8.4
9	$n - C_3H_7^\bullet + C_2H_4 \rightarrow C_2H_5^\bullet + C_3H_6$	7.4	27.6
10	$CH_3^\bullet + C_2H_4 \rightarrow CH_4 + C_2H_3^\bullet$	8.6	35.0
11	$CH_3^\bullet + C_2H_3^\bullet \rightarrow CH_4 + C_2H_2$	9.95	3.2
12	$C_2H_3^\bullet + H^\bullet \rightarrow C_2H_2 + H_2$	10.0	0.0
13	$C_2H_4 \rightarrow \bullet C_2H_4$	15.8	253.0
14	$\bullet C_2H_4 + C_2H_6 \rightarrow CH_3^\bullet + n - C_3H_7^\bullet$	14.7	216.0
15	$\bullet C_2H_4 \rightarrow C_2H_4$	5.38	0.0

На рис. 5-10 представлены результаты моделирования течения для температуры нагревательных элементов 642°C. В результате нагрева стенок реактора температура подаваемого газа становится достаточной для термического разложения этана на продукты пиролиза. На рис. 5-8 представлены распределения массовых долей основных компонент смеси – этана, этилена, водорода, метана в установившемся течении. В буферных зонах преимущественно присутствует метан за счет постоянной подачи его через вводы (2) (рис. б), возникновение других элементов газовой смеси в этих областях происходит за счет диффузии газа. Наибольшая концентрация целевых продуктов пиролиза – этилена и водорода наблюдается в правой части реакционной зоны, что объясняется движением продуктов в этом направлении и их накоплением. Максимальная температура газа наблюдается в пристеночных областях нагревательных элементов и в правой части зоны

¹³ Nurislamova L.F, Stoyanovskaya O.P., Stadnichenko O.A., Gubaidullin I.M., Snytnikov V.N., Novichkova A.V. Few-Step Kinetic Model of Gaseous Autocatalytic Ethane Pyrolysis and Its Evaluation by Means of Uncertainty and Sensitivity Analysis // Chemical Product and Process Modeling. 2014. 9(2). P. 143-154.

реакции (рис. 9), а, следовательно, в этих областях химические превращения протекают наиболее интенсивно. Максимальное значение плотности (рис. 10) наблюдается на вводах этана и метана, а также в областях буферных зон.

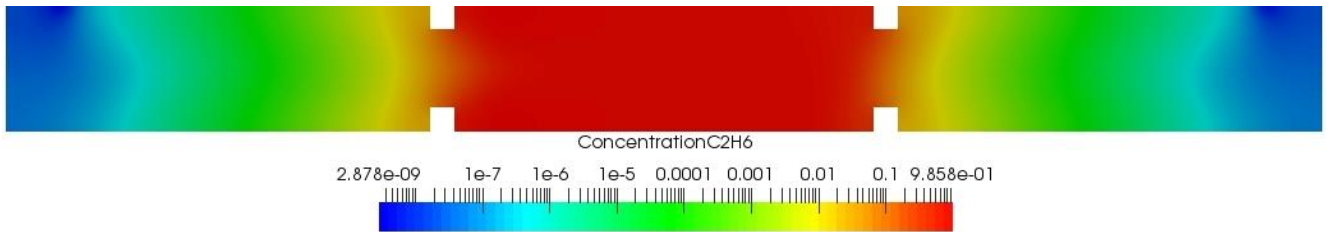


Рис. 5. Распределение массовой доли этана

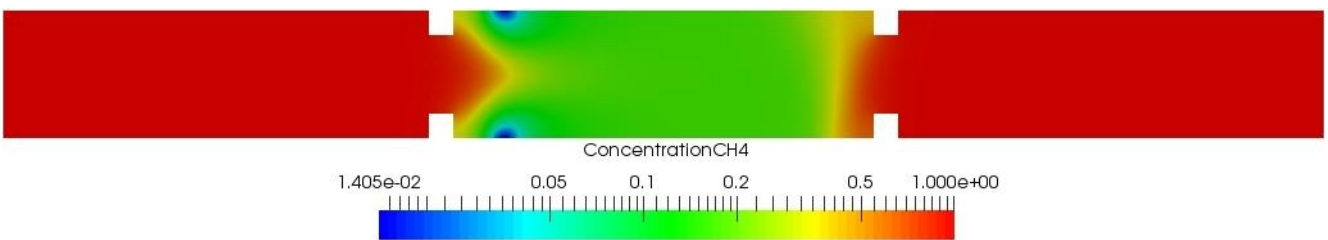


Рис. 6. Распределение массовой доли метана

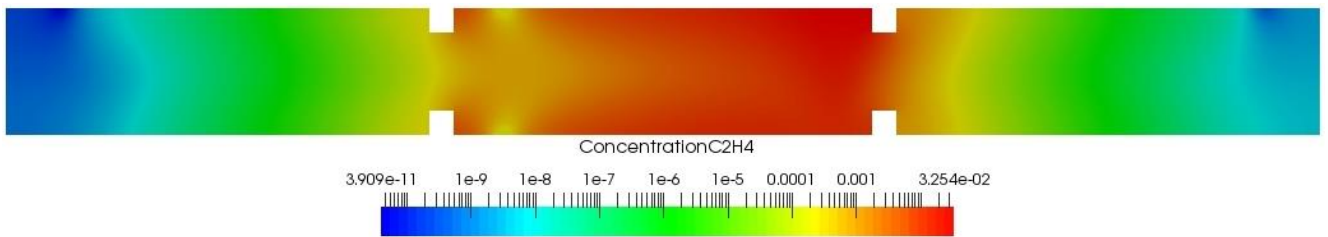


Рис. 7. Распределение массовой доли этилена

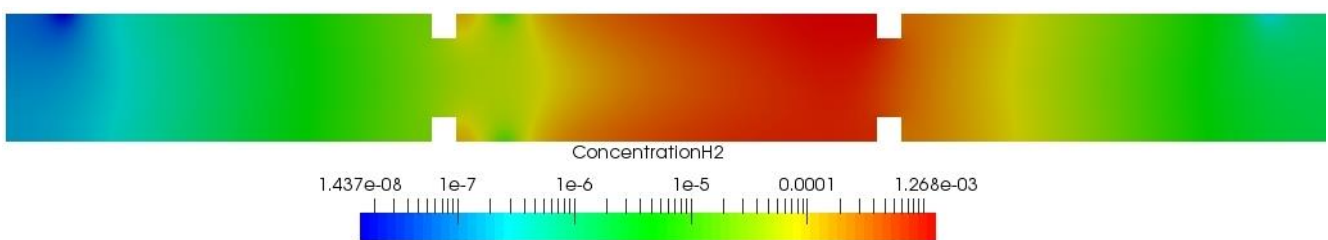


Рис. 8. Распределение массовой доли водорода

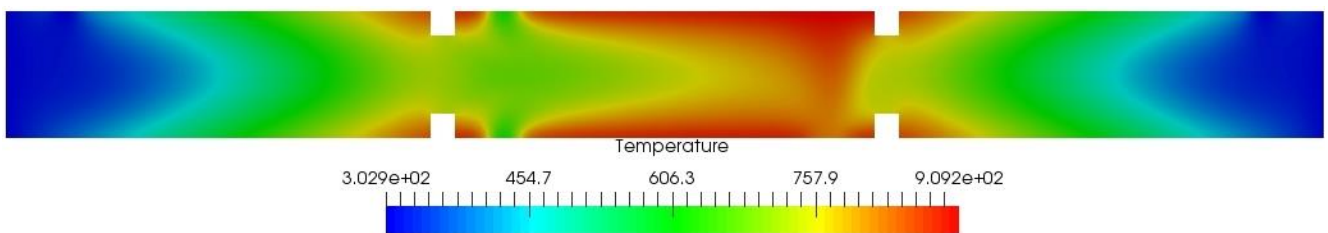


Рис. 9. Распределение температуры

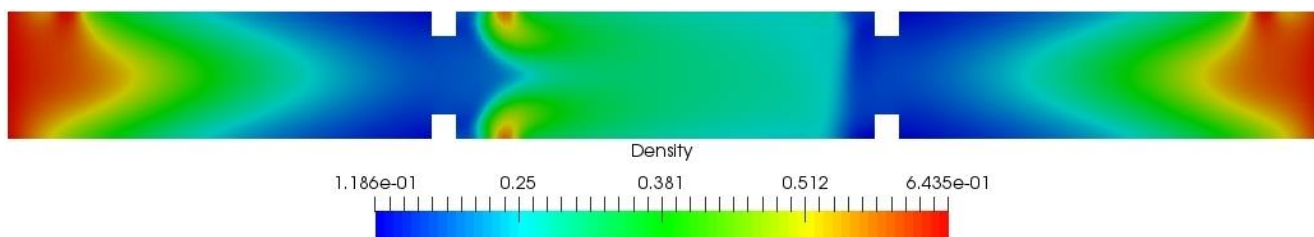


Рис. 10. Распределение плотности

Таким образом, нагрев газа в зоне реакции приводит к его разрежению. Это связано с тем, что по своим характеристикам газ близок к идеальному и давление внутри реактора равно атмосферному.

Проведена серия расчетов для следующих температур: 599°C, 648°C, 700°C, 742°C, 760°C, 778°C. На рис. 11 представлена зависимость конверсии этана от температуры нагревательных элементов по данным экспериментов и по результатам расчетов с помощью разработанного программного комплекса. График зависимости демонстрирует хорошее совпадение экспериментальных данных^{1,2} и результатов расчетов на основе построенных численных алгоритмов.

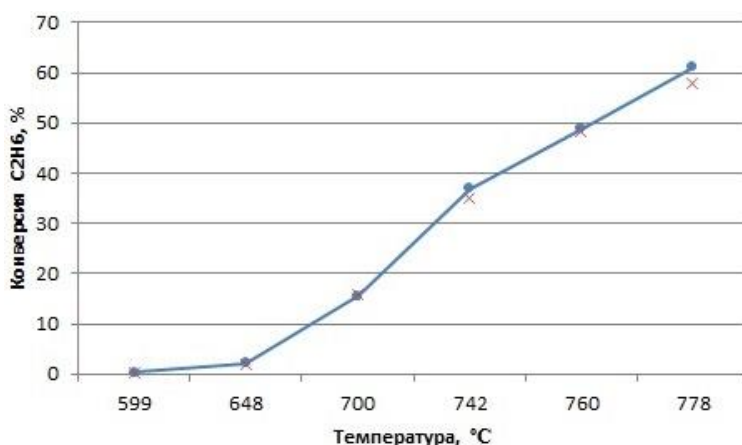


Рис. 11. Зависимость конверсии этана от пристеночной температуры. Данные экспериментов – точки, данные моделирования – крестики

Заключение. Представлены основные результаты диссертационной работы, сделаны выводы.

Основные результаты

1. Разработан численный алгоритм на основе существенно-неосциллирующих схем повышенного порядка точности (WENO схема 5-го порядка) для исследования динамики многокомпонентного реагирующего вязкого газа с учетом процессов диффузии и теплообмена, а также химических превращений. Построенный алгоритм реализован и протестирован на примере пиролиза этана в замкнутом реакторе.

Поведение газодинамических параметров соответствуют основным физико-химическим законам. Изменения концентраций химических веществ, полученные в результате расчетов, хорошо согласуются с экспериментальными исследованиями.

2. На основе построенных схем разработан параллельный вычислительный алгоритм для многопроцессорной вычислительной техники с использованием технологии MPI.
3. Создан программный комплекс для нахождения газодинамических параметров, а также концентраций химических веществ для процесса течения многокомпонентного реагирующего газа в реакторе. Проведен анализ эффективности алгоритма в случае разного количества задействованных в расчете процессоров.
4. С помощью разработанного программного комплекса проведено численное моделирование процесса пиролиза этана в проточном реакторе. Для построения математической модели пиролиза в расчетах принята кинетическая схема, описывающая радикальный механизм пиролиза этана. Проанализирована кинетика процесса, исследована динамика газового потока с учетом теплообменных и диффузионных процессов, а также химических реакций пиролиза этана. Проведено сопоставление экспериментальных и расчетных данных по конверсии исходной газовой смеси при различных температурах нагревательных элементов. Сравнение данных экспериментов по термическому пиролизу этана с данными, полученными в ходе вычислительного эксперимента, показало высокую степень достоверности полученных результатов.

Публикации по теме диссертации

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК

1. Жалнин Р.В., Каледин О.Е., Пескова Е.Е. Разработка двумерного CFD-кода для численного моделирования газодинамических течений // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2013. № 1-3. С. 301-305.
2. Горюнов В.А., Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Тишкин В.Ф. О построении WENO схем для гиперболических систем уравнений на неструктурированных сетках // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2014. № 1 (29). С. 79-87.
3. Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А., Тишкин В.Ф. Математическое моделирование динамики многокомпонентного газа с использованием WENO схем на примере пиролиза этана // Журнал Средневолжского математического общества. 2016. Т. 18. № 3. С. 98-106.
4. Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А., Тишкин В.Ф. Моделирование течения многокомпонентного химически активного газа

на примере пиролиза углеводородов // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2017. № 101. 16 с. Режим доступа:

<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2017-101>.

5. Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Язовцева О.С., Назаров В.И. Моделирование химико-технологических процессов в реакторах с использованием схем высокого порядка точности // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2017612056. Москва. Роспатент. 2017 г.

Публикации в прочих изданиях

6. Жалнин Р.В., Пескова Е.Е. О выборе интерполяционного полинома в существенно неосциллирующих схемах // Журнал Средневолжского математического общества. 2009. Т.11. №2. С. 68-77.
7. Жалнин Р.В., Пескова Е.Е. О построении ENO схем для гиперболических систем уравнений на неструктурированных сетках // Материалы VI Международной научно-технической конференции Аналитические и численные методы моделирования естественнонаучных и социальных проблем. Пенза: Приволжский дом знаний. 2011. С. 46-51.
8. Пескова Е.Е., Шаманаев П.А. О построении WENO схем для гиперболических систем уравнений на треугольной сетке // Журнал Средневолжского математического общества. 2013. Т.15. № 1. С. 121-124.
9. Масыгин В.Ф., Панюшкина Е.Н., Пескова Е.Е., Тишкин В.Ф. Решение уравнений газовой динамики с использованием технологии CUDA [Электронный ресурс]: научный журнал // Огарёв-online. 2015. № 23. Режим доступа: <http://journal.mrsu.ru/arts/reshenie-uravnenij-gazovoj-dinamiki-s-ispolzovaniem-technologie-cuda>.
10. Губайдуллин И.М., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А. Математическое моделирование реакции пиролиза этана с использованием ENO схем // Информационные технологии и нанотехнологии (ИТНТ-2016), II Международная конференция и молодежная школа, 17-19 мая 2016 г.: [материалы]. Самара: Изд-во СГАУ. 2016. С. 637-640.
11. Губайдуллин И.М., Пескова Е.Е., Язовцева О.С. Математическая модель динамики многокомпонентного газа на примере брутто-реакции пиролиза этана [Электронный ресурс]: научный журнал // Огарёв-online. 2016. № 20. Режим доступа: <http://journal.mrsu.ru/arts/matematicheskaya-model-dinamiki-mnogokomponentnogo-gaza-na-primere-brutto-reakcii-piroliza-etana>.
12. Gubaidullin I.M., Peskova E.E., Stadnichenko O.A. Mathematical modeling of ethane pyrolysis using ENO schemes // CEUR Workshop Proceedings. 2016. – Vol. 1638. P. 578-587. doi: 10.18287/1613-0073-2016-1638-578-587.
13. Губайдуллин И.М., Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А. Моделирование динамики многокомпонентного реагирующего газа с использованием алгоритмов высокого порядка точности // X Международная научно-техническая конференция «Аналитические и

численные методы моделирования естественно-научных и социальных проблем», 6 – 9 декабря 2016 г.: [материалы]. Пенза: Издательство ПГУ. 2016. С. 130–135.

14. Губайдуллин И.М., Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А., Тишкин В.Ф. Построение параллельных алгоритмов высокого порядка точности для моделирования динамики реагирующих потоков // XI международная конференция «Параллельные вычислительные технологии», ПаВТ'2017, г. Казань, 3 – 7 апреля 2017 г.: [короткие статьи и описания плакатов]. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. 2017. С. 288–296.
15. Губайдуллин И.М., Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Тишкин В.Ф. Построение алгоритма высокого порядка точности для моделирования течений многокомпонентного газа с учетом химических реакций // Аспекты развития науки, образования и модернизации промышленности: материалы Всерос. науч.-практ. конф. с международным участием, г. Ростов-на-Дону. 2017. С. 127 – 130.