

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский
Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва»**

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

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
член-корреспондент РАН,
доктор физико-математических наук, профессор
Тишкин Владимир Федорович

Саранск – 2018

Оглавление

Введение	4
1. Численный алгоритм расчета течения многокомпонентного реагирующего газа	21
1.1. Основные уравнения.....	23
1.2. Коэффициенты диффузии в газовых смесях.....	25
1.3. Теплопроводность и вязкость газов в газовых смесях.....	26
1.4. Уравнения химических реакций.....	28
1.5. Дискретизация уравнений.....	29
1.6. Метод решения уравнений химической кинетики.....	32
1.7. Методы вычисления дискретных потоков.....	32
1.8. Методика расчета газодинамических параметров.....	34
1.8.1. ENO реконструкция.....	34
1.8.2. WENO реконструкция.....	37
1.9. Дискретизация по времени.....	41
1.10. Моделирование течения газа в замкнутом реакторе на примере брутто-реакции пиролиза этана.....	41
2. Программная реализация алгоритма расчёта газодинамических течений	47
2.1. Вычислительный алгоритм на основе принципов геометрического параллелизма.....	49
2.2. Описание программного комплекса.....	52
2.2.1. Структура программного комплекса.....	52
2.2.2. Подпрограмма инициализации начальных данных.....	53
2.2.3. Подпрограмма расчета на одном вычислительном узле.....	54
2.2.4. Подпрограмма обмена данными между процессорами.....	57
2.2.5. Подпрограмма вывода результатов.....	60

2.3. Оценка эффективности параллельных вычислений.....	65
3. Моделирование потока многокомпонентного газа в проточном реакторе на примере пиролиза этана.....	69
3.1. Постановка задачи.....	71
3.2. Математическая модель радикального механизма пиролиза этана.....	73
3.3. Результаты численного моделирования.....	78
3.4. Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными.....	81
Заключение.....	82
Литература.....	84

Введение

В сырьевой базе мировой нефтехимической промышленности ведущую роль занимают низшие олефины – этилен и пропилен. Основные направления использования низших олефинов включают производства полиэтилена, полипропилена, этанола, ацетона, фенола, лаков, растворителей и другой продукции химической промышленности [1, 2]. Ведущим способом получения олефинов является процесс термического пиролиза углеводородов [1], что делает процесс пиролиза актуальным и динамически развивающимся способом нефтегазопереработки.

В промышленности распространение получили процессы термического пиролиза в трубчатых печах, проходящие с разбавлением исходного газа водяным паром [3]. Подробный обзор современных методов и особенностей переработки углеводородов с целью получения легких олефинов на установках разных мощностей представлен в [4, 5]. Исследования показали, что для достижения максимального выхода целевых продуктов время пребывания сырья в реакционной зоне необходимо сокращать, а температуру повышать [1]. На современных печах температура пиролиза углеводородов достигает 800-900°C [1, 6]. Однако при высоких температурах происходит увеличение выработки побочных продуктов реакции, поэтому стоит задача по разработке технологий для снижения пороговых температур реакции. Существующие в настоящее время технологии направлены на большие масштабы производства. Однако имеются многочисленные источники углеводородного сырья, для которых актуальна переработка малой и средней производительности. Это приводит к необходимости создания технологий переработки для невысоких производительностей, поскольку существующие оказываются экономически неэффективными [5].

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 низкотемпературной технологии переработки алканов для невысоких производительностей путем комбинирования термического и лазерного излучения [7-12]. В данных работах предлагается принципиально новая установка химического реактора для пиролиза углеводородов, в которой зарождение реакционно-способных радикалов инициируется за счет лазерного излучения, вводимого в приосевую область. Необходимым условием для применения лазера является наличие в смеси компонента, спектр поглощения которого содержит полосы, совпадающие с областью генерации лазерного излучения. В исследуемом процессе таким веществом является целевой продукт пиролиза этана – этилен. За счет поглощения энергии происходит увеличение температуры газовой смеси, которая в свою очередь ускоряет генерацию радикалов и химический процесс пиролиза.

Излучение лазера способствует повышению реакционной способности смеси за счет образования дополнительных радикалов в поле лазерного излучения [13]. Преимуществом введения лазерного излучения является возможность снижения пороговой температуры реакции и температуры выхода целевых продуктов пиролиза. При снижении рабочей температуры пиролиза этана и времени контакта происходит уменьшение выработки побочных продуктов реакции, одним из которых является кокс, и увеличение выхода целевых продуктов. По данным экспериментов пиролиза этана [9] в химическом реакторе с введением лазерного излучения конверсия этана составляет порядка 85% при температурах 600-700°C и атмосферном давлении. Таким образом, разрабатываемые технологии переработки низших алканов в режиме смешанной подачи энергии (через внешний нагрев и ввод лазерного излучения) позволяют снизить температурный порог реакции и температуры выхода целевых продуктов приблизительно на 100-150°C по сравнению с классической схемой.

Экспериментальное исследование газофазного пиролиза углеводородов (этана, пропана) проводилось в проточном металлическом реакторе (рис. 1) с внешним обогревом зоны реакции и генерацией радикалов в газовом объеме с помощью лазерного излучения [9, 10]. Конструкция лабораторного реактора

предполагает, что подвод энергии в смесь осуществляется только за счет нагрева стенок реактора, для чего нагревающиеся лазерным излучением стекла изолируются от реакционной зоны потоком метана, инертного при рабочих температурах реактора.

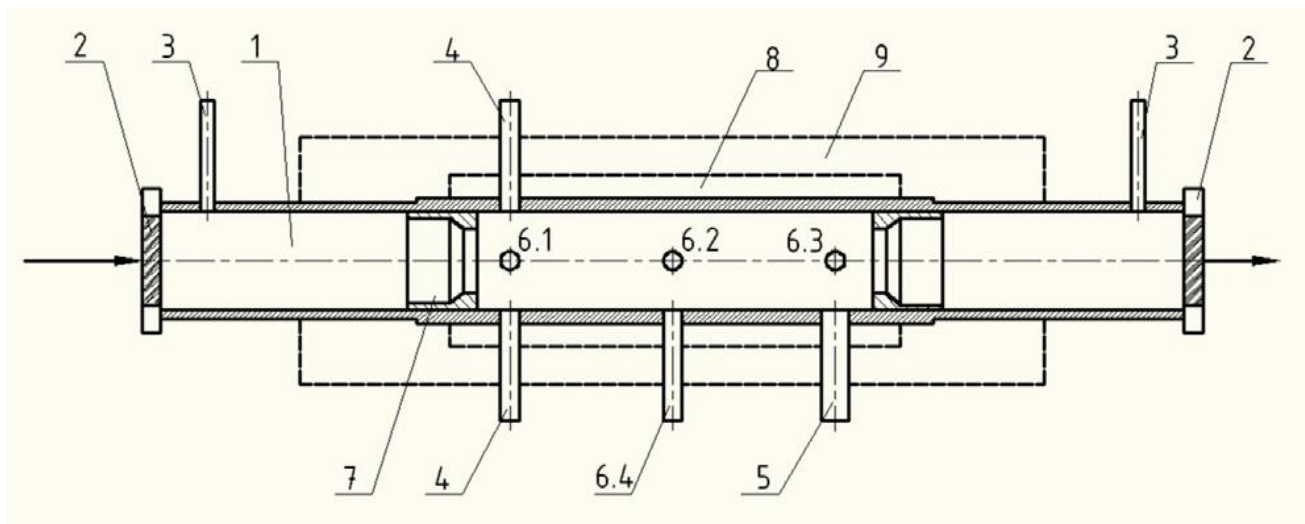


Рис. 1. Лабораторный реактор: 1) корпус из нержавеющей стали, диаметр – 21 мм, длина – 220 мм; 2) оптические окна, ZnSe; 3) вводы для подачи защитного газа метана CH_4 , диаметр – 4 мм; 4) вводы для подачи газовой смеси, диаметр – 4 мм; 5) выход газовой смеси, диаметр – 4 мм; 6) термопарные вводы; 7) диафрагмы; 8) внешний нагреватель с теплоизоляцией 9

Реактор [9-12] представляет собой трубу (1) общей длиной 220 мм и диаметром 21 мм с внешним нагревателем (8) и теплоизоляцией из минеральной ваты (9), оснащенную оптическими входным и выходным окнами (2). Ввод смеси газов производится через каналы (4). Зона реакции составляет 70 мм. Она формируется с помощью стальных диафрагм (7) и нагревательных элементов (8). Защитный газ метан подается через вводы (3). Его роль – изоляция реакционной зоны от стекол, нагреваемых лазерным излучением, что необходимо для осуществления контроля над способом подвода энергии в реакционную смесь. Выход продуктов пиролиза производится через канал (5). Измерения газовой температуры в радиальном сечении проводились с помощью термопар, установленных в вводах (6).

Чтобы понять эффективность введения лазерного излучения, стоит задача проанализировать процесс пиролиза этана, протекающий только за счет внешнего нагрева реакционной зоны.

Математическое моделирование описанных процессов является актуальной задачей, решение которой позволит изучить процессы пиролиза углеводородов в проточном реакторе при различных условиях протекания реакции. В результате расчетов можно получить картину протекающих процессов, которую в дальнейшем можно использовать при планировании экспериментальных работ. В частности, возможно изучение влияния пристеночной температуры реактора, температуры стенок входных и выходных трубок, температуры и состава исходной смеси, расхода на вводах смеси, размеров реактора на конверсию исходной газовой смеси и селективность выхода целевых продуктов реакции в ходе пиролиза углеводородов [14].

Математическая модель динамики многокомпонентного реагирующего газа описывается системой уравнений для сжимаемого вязкого теплопроводного газа [15-19], которая включает в себя уравнение неразрывности, уравнения сохранения импульса и энергии, уравнения неразрывности для каждой компоненты газовой смеси. Однако, в исследуемых в настоящей работе процессах, скорость движения смеси в реакторе много меньше скорости звука в газовой смеси, что обуславливает использование модификации уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха [20-22].

Численное решение этих уравнений является одним из наиболее ресурсоемких видов вычислительного эксперимента, так как приходится учитывать явления вязкости, процессы теплообмена, диффузии и химические превращения веществ [23-26]. В ходе пиролиза углеводородов протекают многочисленные параллельные процессы, сопровождающиеся образованием большого количества химических веществ и одновременным протеканием сотен реакций. В настоящее время для описания процессов термического разложения углеводородов применяется множество кинетических схем для широкого диапазона температур [1, 9, 27, 28]. При моделировании процесса пиролиза

углеводородов необходимо использовать детальные кинетические схемы для верного описания механизмов протекания реакции в широком диапазоне температур, так как брутто-схемы не отражают всех особенностей протекания реакции. Однако, в зависимости от требований к точности описания процесса пиролиза, механизм описания реакции может состоять из сотни стадий. Следовательно, их использование в вычислительных экспериментах приводит к колоссальным временам расчетов.

При разработке численного алгоритма для построенной математической модели необходимо использовать методы высокого порядка точности, чтобы получить вычислительные результаты, наиболее приближенные к реальным течениям реагирующего газа. Для использования таких схем требуется высокая производительность вычислительной техники.

Таким образом, актуальной является задача построения численных алгоритмов высокого порядка точности с применением суперкомпьютерных технологий для моделирования динамики многокомпонентного реагирующего газа, в частности, исследование газофазного пиролиза углеводородов в проточном реакторе.

Ведущее место среди численных методов решения уравнений Навье-Стокса занимают сеточные методы [29-33]. Одним из основных подходов является интегро-интерполяционный метод [34-36]. Его идея заключается в том, что область интегрирования разбивается на множество ячеек (элементарных объемов). Предполагается, что значение искомой величины в центре ячейки есть среднее значение этой величины по объёму ячейки расчетной сетки. Для ячейки составляется интегральная формулировка законов сохранения, их дискретный аналог получается суммированием по каждой грани ячейки потоков, определяемых каким-либо способом. Интегральная форма законов сохранения не накладывает ограничений на форму ячейки, поэтому интегро-интерполяционный метод можно применять на структурированных и неструктурированных сетках, что позволяет использовать этот метод при решении задач в областях сложной формы.

При решении уравнений Навье-Стокса для задач с существенно дозвуковыми течениями возникают значительные вычислительные трудности, о которых впервые [37] было указано в работе [38]. Первая трудность заключается в существенном отличии характерного времени конвекции и характерного времени распространения акустических возмущений. Согласно условию устойчивости Куранта-Фридрихса-Леви, шаг интегрирования по времени при использовании явных разностных схем не должен превышать характерное время наиболее быстро протекающего процесса (в случае существенно дозвуковых течений – времени распространения акустических возмущений). Однако при решении задач с дозвуковыми потоками учет акустических процессов не является необходимым [37], следовательно, использование малого шага интегрирования по времени не является оправданным. Вторая трудность при расчетах связана с характерным для дозвуковых течений чрезвычайно малым изменениям давления. При расчете градиента давления выполняется операция вычисления разностей близких между собой значений абсолютного давления, что в свою очередь приводит к ухудшению точности разностной схемы [23, 37, 39].

В настоящее время существует множество подходов к решению описанных проблем [20-22, 37, 40, 41]. В работах [21, 22, 42, 43] предложена идея метода проекций [20], которая заключается в интегрировании законов сохранения с использованием начального поля давления, в результате которого находятся значения концентраций, плотности, температуры и предварительное поле скорости. Затем рассчитывается поле поправок к давлению из решения уравнения Пуассона и корректируются поле давления и поле скорости.

Одним из главных вопросов при интегрировании уравнений Навье-Стокса является выбор алгоритма нахождения дискретных потоков на границе ячейки сетки. Наиболее распространенным способом является метод С.К. Годунова [44, 45]. Суть метода С.К. Годунова заключается в решении задачи Римана о распаде произвольного разрыва на границе между ячейками сетки с параметрами, равными газодинамическим параметрам в этих ячейках. Произвольный разрыв газа распадается на контактный разрыв, на левую волну и правую волну. В

зависимости от перепада давления левые и правые волны могут быть либо волнами сжатия, либо волнами разрежения. При решении этой задачи необходимо решать нелинейную систему уравнений итерационными методами.

Существует множество схем, основанных на различных способах приближенного решения задачи Римана. Это схемы PVRS (Primitive Variable Riemann Solvers), TSRS (Two–Rarefaction Riemann Solvers), TSRS (Two–Shock Riemann Solvers), двухволновая схема HLL (Хартена, Лакса, Ван Лира) и её модификации с добавлением третьей волны HLLC, схема Ошера, схема Роу и другие. Подробный обзор данных методов проведен в работах [25, 46-48].

Однако метод Годунова и другие методы приближенного решения задачи Римана обеспечивают только первый порядок аппроксимации. В [44] С.К. Годуновым показано, что в линейном случае только схемы первого порядка аппроксимации являются монотонными.

Однако сложность выдвигаемых задач требует разработки схем повышенного порядка точности с одновременным выполнением условия монотонности численного решения при наличии сильных и слабых разрывов. Первой работой [49], в которой описан алгоритм повышения порядка точности схемы, является работа В.П. Колгана [50]. Здесь предложен механизм перехода от немонотонной разностной схемы повышенного порядка аппроксимации в областях с гладким решением к монотонной разностной схеме первого порядка аппроксимации в областях, в которых решение является разрывным. В дальнейшем эта идея получила развитие в работах Ван-Лиры [51-54], Бориса и Бука [55].

В работах Хартена [56, 57] предложены схемы с условием неувеличения полной вариации решения. Схемы, удовлетворяющие этому свойству, в литературе получили название TVD (Total Variation Diminishing)-схем. Условие невозрастания полной вариации является более слабым по сравнению с условием монотонности, но такие схемы более точно передают характер решений вблизи разрывов. В таких схемах для повышения порядка численного решения проводятся кусочно-линейные реконструкции параметров на границах ячеек

сетки с определенными «монотонизирующими» ограничителями (limiters). Роль вводимых ограничителей – выполнение условия невозрастания полной вариации. Различные варианты ограничителей описаны в работах Ван-Лиера [51], Ошера [58] и других. Преимуществом TVD-схем является отсутствие нефизических осцилляций вблизи разрывов и выполнение условия неубывания энтропии.

В работах В.Ф. Тишкина, А.П. Фаворского [59, 60] получили развитие монотонные схемы повышенного порядка аппроксимации в областях гладкого решения. При построении таких схем к исходной монотонной схеме первого порядка добавляются антидиффузионные потоки с ограничителями, роль которых – сохранение свойства монотонности и повышения порядка аппроксимации.

Перспективным направлением в развитии схем высокого порядка точности являются схемы, способные проводить сквозной счет в областях сильных ударных волн и вместе с тем с высокой точностью моделировать гладкую часть течений, включающую многочисленные сложные структуры. Такие алгоритмы, впервые описанные в работах [61, 62], получили название ENO схемы (Essentially non-oscillatory), в работах Шу и Ошера [63, 64] они представлены в виде, пригодном для практической реализации. В ENO схемах для реконструкции параметров на границе ячейки сетки используется несколько шаблонов-кандидатов, на них строятся интерполяционные многочлены, используя данные средних значений по объему ячейки, далее выбирается тот, на котором решение является наиболее гладким.

В работе [65] предложена WENO (Weighted Essentially non-oscillatory) схема. Идея построения таких схем заключается в использовании выпуклой линейной комбинации интерполяционных многочленов, построенных на всех шаблонах-кандидатах с помощью ENO алгоритма. Весовые коэффициенты подбираются в зависимости от гладкости решения на шаблоне. Если какой-либо шаблон содержит разрыв, то весовой коэффициент должен быть близким к нулю. В работах [66, 67] предложен новый способ вычисления «индикаторов гладкости» на каждом шаблоне, значения которых используются для вычисления весовых

коэффициентов, который позволил получить схему пятого порядка точности. В работах [68-70] представлена схема с масштабированием весовых коэффициентов в ячейках, «подозрительных на экстремум». Масштабирование весовых коэффициентов позволяет рассчитывать параметры вблизи экстремальных точек с повышенным порядком точности.

Дальнейшее развитие ENO и WENO схемы получили в работах [71-73], в которых был описан способ их построения на неструктурированных треугольных и тетраэдральных сетках. В работе [74] приведена модификация весовых коэффициентов. Она заключается в расщеплении линейных весовых коэффициентов в случаях, если они являются отрицательными.

При моделировании химически реагирующих потоков возникают вычислительные трудности, связанные с жесткостью дифференциальных уравнений, описывающих химические превращения веществ. Жесткими называют задачи, решение которых содержит компоненты с резко различными характерными временами изменения [75]. Использование явных схем интегрирования не является пригодным для решения подобных задач. Для решения жестких систем ОДУ широко применяются неявные многошаговые методы Гира [76]. Численное решение на новом слое с использованием данного метода находится каким-либо итерационным процессом. Второй группой методов решения подобных систем являются схемы Розенброка [77]. При численной реализации схем данного типа необходимо решать систему нелинейных разностных уравнений с помощью итерационного метода Ньютона. Недостатком приведенных методов является их высокая трудоемкость.

В [78] Н.Н. Калиткиным и В.Я. Гольдиным была предложена специализированная явная схема, основанная на специфическом виде задач химической кинетики, данная схема имеет первый порядок точности. В работе [79] предложена схема второго порядка точности, существенно превосходящая известные методы по простоте, точности и надежности [79]. В силу того, что данная схема является явной, она обладает меньшей трудоемкостью, чем

вышеописанные методы. Это дает заметный выигрыш по времени вычислений при наличии большого числа компонент смеси.

Расчеты реальных газодинамических течений с учетом химических превращений невозможно представить без развивающихся в последние десятилетия технологий параллельных вычислений, использование которых позволяет повысить производительность расчетов в порядки раз. Многопроцессорные вычислительные системы позволяют разрабатывать программные коды на основе схем повышенного порядка точности на больших неструктурированных сетках с детальным описанием протекающих физических процессов и механизмов химических превращений, что позволяет решать более сложные и ресурсоемкие задачи. В настоящее время существует большое количество работ и электронных ресурсов, посвященных описанию и применению технологий параллельных вычислений [80-90].

Цели и задачи 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 необходимо решить следующие задачи:

- 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;
- провести вычислительный эксперимент на основе построенной схемы для брутто-реакции пиролиза этана, проанализировать адекватность полученных

результатов;

- построить параллельный вычислительный алгоритм с использованием технологии MPI на основе разработанных разностных схем и создать программный комплекс для моделирования течения газа в химическом реакторе;
- провести численное моделирование потоков многокомпонентного газа с химическими реакциями на примере пиролиза этана в проточном реакторе, сравнить результаты вычислительного эксперимента с экспериментальными данными.

Научная новизна результатов исследования

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.

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

Достоверность полученных результатов исследования 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 работы

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 диссертационного исследования опубликовано 14 статей, получено 1 свидетельство о регистрации программы для ЭВМ.

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-texnologii-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/matematiceskaya-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.

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.

Глава 1

Численный алгоритм расчета течения многокомпонентного реагирующего газа

Глава посвящена описанию математической модели динамики многокомпонентного вязкого сжимаемого газа с учетом процессов теплопроводности, диффузии, химических реакций. Математическая модель представлена системой уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха. В главе описано построение разностной схемы повышенного порядка точности для представленной математической модели. Разностная схема строится на равномерной прямоугольной сетке.

В разделе 1.1 представлены основные уравнения, описывающие исследуемые процессы течения газа.

В разделе 1.2 приведены формулы для расчета коэффициентов диффузии в газовых смесях.

В разделе 1.3 описываются коэффициенты вязкости и теплопроводности для многокомпонентных смесей и отдельных веществ.

В разделе 1.4 представлена математическая модель химических превращений, приведены основные выражения, описывающие кинетику процесса.

В разделе 1.5 приведена система уравнения, описывающая динамику многокомпонентного реагирующего газа в векторном виде. Представлена консервативная нелинейная дифференциально-разностная схема для решения уравнений.

В разделе 1.6 описана явная схема второго порядка точности для решения уравнений химической кинетики, основанная на специфике химических задач.

В разделе 1.7 подробно описываются методы вычисления дискретных потоков на границе между ячейками. Приведены схемы для вычисления конвективных, диффузионных и тепловых потоков.

В разделе 1.8 подробно описывается методика реконструкции газодинамических параметров на границе ячеек сетки с использованием существенно-неосциллирующих алгоритмов повышенного порядка точности. В подразделе 1.7.1 описывается процесс построения ENO алгоритма. В подразделе 1.7.2 описывается процесс построения WENO алгоритма.

В разделе 1.9 приведены схемы дискретизации по времени, используемые при разработке программного комплекса.

В разделе 1.10 подробно описана постановка задачи для тестового расчета о течении газа в замкнутом реакторе на примере пиролиза этана. При построении математической модели использовалась упрощенная схема реакции (брутто-реакция). Приведены и проанализированы результаты вычислительного эксперимента.

1.1 Основные уравнения

Основными уравнениями, описывающими течение многокомпонентного реагирующего газа, являются уравнения Навье-Стокса [91]. Для режимов течения с малыми числами Маха используется их модификация [20-22]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho Y_i \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{J}_i + Q_i, \\ \frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) - \nabla \pi + \nabla \cdot \bar{\tau}, \\ \frac{\partial (\rho h)}{\partial t} &= -\nabla \cdot (\rho h \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{q}.\end{aligned}\tag{1.1}$$

Давление p представляется в виде:

$$p(x, t) = p_0 + \pi(x, t).\tag{1.2}$$

Здесь p_0 – термодинамическое давление, постоянное в области, $\pi(x, t)$ – динамическая составляющая давления.

Уравнение состояния имеет вид:

$$p_0 = \rho RT \sum_i \left(Y_i / M_{wi} \right).\tag{1.3}$$

Система дополнена условием на дивергенцию вектора скорости [20]:

$$\begin{aligned}S \equiv \nabla \cdot \vec{v} &= \frac{1}{\rho C_p T} \left(\nabla \cdot \lambda \nabla T + \sum_i \rho D_{im} \nabla Y_i \nabla h_i \right) \\ &+ \frac{1}{\rho} \sum_i \frac{M_w}{M_{wi}} (\nabla \cdot \rho D_{im} \nabla Y_i) + \frac{1}{\rho} \sum_i \left(\frac{M_w}{M_{wi}} - \frac{h_i}{C_p T} \right) Q_i.\end{aligned}\tag{1.4}$$

Здесь ρ – плотность ($\text{кг}/\text{м}^3$), $\vec{v} = u\vec{i} + v\vec{j}$ – вектор скорости ($\text{м}/\text{с}$), Y_i – массовая доля i -ой компоненты, h – энтальпия смеси ($\text{Дж}/\text{кг}$), T – температура (К), R – универсальная газовая постоянная ($\text{Дж}/\text{моль} \cdot \text{К}$), M_{wi} – молярная масса

i -ой компоненты ($\text{кг}/\text{моль}$), Q_i – скорость образования или расхода i -ой компоненты ($\text{кг}/\text{м}^3 \cdot \text{с}$), \vec{J}_i – вектор диффузионного потока i -ой компоненты ($\text{кг}/\text{м}^2 \cdot \text{с}$), $\bar{\tau}$ – тензор вязких напряжений (Па), \vec{q} – вектор потока тепла для смеси ($\text{Дж}/\text{м}^2 \cdot \text{с}$).

Тензор вязких напряжений определяется следующим образом [92]:

$$\bar{\tau} = \mu(\nabla\vec{v} + (\nabla\vec{v})^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \vec{v})I, \quad (1.5)$$

где I – единичный тензор, μ – коэффициент динамической (сдвиговой) вязкости ($\text{Па} \cdot \text{с}$).

Выражения для вектора диффузионного потока компонента и вектора потока тепла для смеси зависят от вида используемой модели. Наиболее распространенной является модель средних по смеси значений (mixture-averaged) [20, 93]:

$$\vec{J}_i = -\rho D_{im} \nabla Y_i, \quad (1.6)$$

$$\vec{q} = -\lambda \nabla T - \sum_i h_i \rho D_{im} \nabla Y_i. \quad (1.7)$$

Здесь D_{im} – средний по смеси коэффициент диффузии i -ой компоненты ($\text{м}^2/\text{с}$), λ – коэффициент теплопроводности смеси ($\text{кг} \cdot \text{м}/\text{К} \cdot \text{с}^3$), h_i – энтальпия i -ой компоненты ($\text{Дж}/\text{кг}$):

$$h_i = \int_{T_0}^T C_{pi}(T) dT + h_i^0. \quad (1.8)$$

Здесь h_i^0 – энтальпия образования i -ой компоненты при стандартной температуре $T_0 = 298.15 \text{ К}$, C_{pi} – удельная теплоемкость i -ой компоненты при

постоянном давлении, задается многочленом, аппроксимирующим известные термодинамические табличные данные в нужном интервале температур:

$$C_{pi} = a_{0i} + a_{1i}T + a_{2i}T^2 + a_{3i}T^3 + a_{4i}T^4. \quad (1.9)$$

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

$$Q_i = M_{wi} \sum_n v_{in} w_n. \quad (1.10)$$

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

1.2 Коэффициенты диффузии в газовых смесях

Коэффициент диффузии бинарной смеси определяется выражением [92, 94]:

$$D_{ij} = 2.628 \cdot 10^{-7} \sqrt{\frac{T^3 (M_{wi} + M_{wj}) / 2M_{wi}M_{wj}}{p \sigma_{ij}^2 \Omega_D(T_D^*)}}. \quad (1.11)$$

Здесь p – давление в атм., σ_{ij} – диаметр сечения соударений (Å), $\Omega_D(T_D^*)$ – момент от интеграла столкновений частиц сорта i и j , является функцией приведенной температуры [91]:

$$T_D^* = \frac{k_b T}{\varepsilon_{ij}}, \quad (1.12)$$

где k_b – постоянная Больцмана, ε_{ij} – глубина потенциальной ямы Леннарда-Джонса (К). В большинстве случаев параметры потенциальной энергии взаимодействия молекул $\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}$ неизвестны, их приближенно вычисляют по формулам [91]:

$$\sigma_{ij} = \frac{(\sigma_i + \sigma_j)}{2}, \varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}. \quad (1.13)$$

Значение интеграла $\Omega_D(T_D^*)$ определяется согласно табличным данным [91]. В [95] для этой величины приведена аналитическая форма записи:

$$\Omega_D(T_D^*) = \frac{A}{(T_D^*)^B} + \frac{C}{\exp(DT_D^*)} + \frac{E}{\exp(FT_D^*)} + \frac{G}{\exp(HT_D^*)}. \quad (1.14)$$

$A = 1.06036$, $B = 0.1561$, $C = 0.1930$, $D = 0.47635$, $E = 1.03587$, $F = 1.52996$, $G = 1.76474$, $H = 3.8911$.

Средний по смеси коэффициент диффузии i -ой компоненты вычисляется по формуле через бинарные коэффициенты диффузии [92]:

$$D_{im} = \frac{1 - X_i}{\sum_{j \neq i} \frac{X_j}{D_{ji}}}. \quad (1.15)$$

Здесь X_i – мольная доля i -ой компоненты газа:

$$X_i = \frac{Y_i / M_{wi}}{\sum_j \frac{Y_j}{M_{wj}}}. \quad (1.16)$$

1.3 Теплопроводность и вязкость газов в газовых смесях

Широкое применение для расчета коэффициентов вязкости и теплопроводности многокомпонентной смеси нашла формула Уилке [96, 97]:

$$k = \sum_i \frac{X_i k_i}{\sum_j X_j \Phi_{ij}}, \quad (1.17)$$

где

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_{wi}}{M_{wj}} \right)^{-1/2} \left(1 + \left(\frac{k_i}{k_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_{wj}}{M_{wi}} \right)^{1/4} \right)^2.$$

Отметим, что при $\Phi_{ij} = 1$ формула (1.17) принимает вид

$$k = \sum_i X_i k_i. \quad (1.18)$$

Выражение (1.18) также широко используется при расчете коэффициентов теплопроводности и вязкости при моделировании течений в многокомпонентных смесях. Здесь k_i – коэффициент теплопроводности (вязкости) i -го компонента смеси.

Согласно молекулярно-кинетической теории значения коэффициентов k_i можно вычислить по формулам [92]:

$$\mu_i = \frac{5}{16} \left(\frac{\sqrt{\pi M_w k_b T}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)}} \right), \quad (1.19)$$

$$\lambda_i = \frac{25}{32} \left(\frac{\sqrt{\pi M_w k_b T}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)}} \right) \frac{c_v}{M_w}. \quad (1.20)$$

Здесь μ_i – коэффициент вязкости i -ой компоненты, λ_i – коэффициент теплопроводности i -ой компоненты, $\Omega^{(2,2)}$ – момент от интеграла столкновений, отнесенный к соответствующему значению для модели твердых тел, который определяется согласно табличным данным [92].

Для ламинарных течений коэффициенты вязкости и теплопроводности можно определить по формуле Сазерленда [91, 16]:

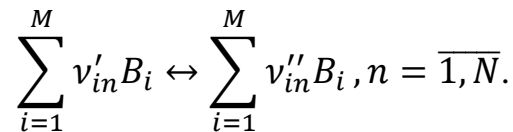
$$k = k_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{3/2} \frac{T_0 + T_S}{T + T_S}, \quad (1.21)$$

где k_0 коэффициент теплопроводности (вязкости) при температуре T_0 , T_S – константа Сазерленда.

1.4 Уравнения химических реакций

Под математическим моделированием химических процессов подразумевают определение изменения концентраций реагирующих веществ во времени.

Предположим, что реагирующая смесь состоит из M компонент. Химический процесс можно описать совокупностью N элементарных стадий:



Здесь B_i – химические компоненты, участвующие в реакции, v'_{in} , v''_{in} – стехиометрические коэффициенты компонента i в стадии n .

Скорость образования или расхода i -ой компоненты в ходе реакции рассчитываем по формуле [98, 99]:

$$Q_i = \sum_{n=1}^N Q_{in} = M_{wi} \sum_{n=1}^N (v''_{in} - v'_{in}) w_n. \quad (1.22)$$

Здесь w_n – скорость элементарной стадии реакции, которая определяется следующим образом:

$$w_n = k_n \prod_{i=1}^M (c_i)^{v'_{in}} - k_{-n} \prod_{i=1}^M (c_i)^{v''_{in}}, \quad (1.23)$$

где $c_i = \rho Y_i / M_{wi}$ (моль/м³), k_n , k_{-n} – константы скоростей n -ой прямой и обратной стадии реакции.

Константа скорости химической реакции показывает с какой скоростью протекает химический процесс при единичной концентрации реагирующих веществ. Константа скорости стадии реакции определяется из уравнения Аррениуса [100]:

$$k_n = A_n \cdot e^{\left(\frac{-E_n}{RT}\right)}. \quad (1.24)$$

Здесь A_n – предэкспоненциальный множитель, размерность которого совпадает с размерностью k_n , E_n – энергия активации (Дж/моль). Энергия активации – минимальная энергия, которую необходимо сообщить системе для запуска химической реакции.

1.5 Дискретизация уравнений

Для эффективной практической реализации используется процедура расщепления по физическим процессам [20, 98]. Учет химических превращений выделяется в отдельный шаг, на котором решается следующая система уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = Q_i, \\ \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = - \sum_i Q_i h_i. \end{cases} \quad (1.25)$$

С учетом (1.25) в векторной форме уравнения (1.1), описывающие течение многокомпонентного реагирующего газа с учетом расщепления потоков на конвективные и диффузионные составляющие, можно представить в виде [101]:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial (F^{(1)}(U) - H^{(1)}(U))}{\partial x} + \frac{\partial (F^{(2)}(U) - H^{(2)}(U))}{\partial y} = 0. \quad (1.26)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

При проведении численного моделирования реальных течений необходимо задать начальные и граничные условия в рассматриваемой области. Начальные условия определяют поведение системы в начальный момент времени $U(x, y, t_0) = U_0$. Граничные условия определяют поведение системы на границе рассматриваемой области. Это могут быть условия на входе (задается

температура и расход втекающего газа), условия на стенке (это может быть температура стенки), условия вытекания.

Для построения дискретной модели введем дискретную сетку, равномерную по каждому направлению:

$$\omega_{\Delta} = \omega_{\Delta x} \times \omega_{\Delta y},$$

$$\omega_{\Delta x} = \{\Delta_i, i = 1, \dots, N_x, \Delta_i = [x_{i-1}, x_i], |\Delta_i| = x_i - x_{i-1} = h_x, h_x N_x = L_x\},$$

$$\omega_{\Delta y} = \{\Delta_j, j = 1, \dots, N_y, \Delta_j = [x_{j-1}, x_j], |\Delta_j| = x_j - x_{j-1} = h_y, h_y N_y = L_y\},$$

где $L_{x(y)}$ – размеры расчетной области вдоль осей $\{x, y\}$.

Все газодинамические параметры рассматриваем как интегральные средние в ячейках сетки.

Для аппроксимации системы уравнений (1.25) используем следующую консервативную нелинейную дифференциально-разностную схему:

$$\begin{aligned} \frac{dU_{ij}}{dt} + \frac{\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)} - \tilde{F}_{i-1/2j}^{(1)}}{h_x} + \frac{\tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)} - \tilde{F}_{ij-1/2}^{(2)}}{h_y} \\ - \left(\frac{\tilde{H}_{i+1/2j}^{(1)} - \tilde{H}_{i-1/2j}^{(1)}}{h_x} + \frac{\tilde{H}_{ij+1/2}^{(2)} - \tilde{H}_{ij-1/2}^{(2)}}{h_y} \right) = 0. \end{aligned} \quad (1.27)$$

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-Рунанова [102, 103], $\tilde{H}_{i+1/2j}^{(1)}$, $\tilde{H}_{ij+1/2}^{(2)}$ – потоки, отвечающие за диффузионный перенос и перенос тепла, для их расчета используем схему с центральными разностями.

Вычисленное таким образом поле скорости \vec{v}^* не удовлетворяет условию на дивергенцию скорости S [98], поэтому оно должно быть скорректировано после вычисления динамической составляющей давления π :

$$\vec{v} = \vec{v}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla \pi. \quad (1.28)$$

Уравнение для динамической составляющей давления выглядит следующим образом [98]:

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho} \nabla \pi = \frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \vec{v}^* - S). \quad (1.29)$$

1.6 Метод решения уравнений химической кинетики

Для решения уравнений химической кинетики используем схему, предложенную в [79]. Систему дифференциальных уравнений, описывающую химические превращения в (1.25), можно представить в следующем виде:

$$\frac{dc_i}{dt} = -c_i \varphi_i(\mathbf{c}) + \psi_i(\mathbf{c}), \quad \mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_M). \quad (1.30)$$

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 находим простыми итерациями:

$$\hat{c}_i^{s+1} = \frac{c_i + \tau \psi_i(\bar{\mathbf{c}}^s)(1 + \tau \varphi_i(\bar{\mathbf{c}}^s)/2)}{1 + \tau \varphi_i(\bar{\mathbf{c}}^s) + (\tau \varphi_i(\bar{\mathbf{c}}^s))^2 / 2}, \quad \bar{\mathbf{c}}^s = \frac{(\mathbf{c} + \hat{\mathbf{c}})}{2}, \quad \hat{\mathbf{c}}^0 = \mathbf{c}. \quad (1.31)$$

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 схемы [79].

1.7 Методы вычисления дискретных потоков

Дискретные потоки на гранях между ячейками вычисляем как функцию, зависящую от газодинамических параметров на границах между ячейками:

$$\begin{aligned}\tilde{G}_{i+1/2j}^{(1)} &= \tilde{G}^{(1)}(U_{i+1/2j}^l, U_{i+1/2j}^r), \\ \tilde{G}_{ij+1/2}^{(2)} &= \tilde{G}^{(2)}(U_{ij+1/2}^l, U_{ij+1/2}^r),\end{aligned}\tag{1.32}$$

для которых выполнено условие согласования:

$$\begin{aligned}\tilde{G}^{(1)}(U_{ij}, U_{ij}) &= G^{(1)}(U_{ij}), \\ \tilde{G}^{(2)}(U_{ij}, U_{ij}) &= G^{(2)}(U_{ij}).\end{aligned}\tag{1.33}$$

Здесь $G = \{F, H\}^T$, $\tilde{G} = \{\tilde{F}, \tilde{H}\}^T$, $U_{i+1/2j}^l, U_{i+1/2j}^r$ – значения вектора U на грани между i и $i + 1$ ячейками слева и справа, $U_{ij+1/2}^l, U_{ij+1/2}^r$ – значение вектора U на грани между j и $j + 1$ ячейками слева и справа. Чтобы вычислить значения вектора U на гранях между ячейками введем вектор примитивных переменных $X = X(U) = (\rho Y_i, u, v, h)$, $i = 1, \dots, M$, M – количество компонент в смеси. С помощью WENO алгоритма проведем его интерполяцию на границе между ячейками, а затем пересчитаем значение искомого вектора $U = U(X)$.

Дискретные потоки, отвечающие за конвективный перенос, определяем по схеме Лакса-Фридрихса-Русанова [102, 103]:

$$\begin{aligned}\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left(\tilde{F}^{(1)}(U_{i+1/2j}^r) + \tilde{F}^{(1)}(U_{i+1/2j}^l) - \alpha_1 (U_{i+1/2j}^r - U_{i+1/2j}^l) \right), \\ \tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left(\tilde{F}^{(2)}(U_{ij+1/2}^r) + \tilde{F}^{(2)}(U_{ij+1/2}^l) - \alpha_2 (U_{ij+1/2}^r - U_{ij+1/2}^l) \right).\end{aligned}\tag{1.34}$$

При вычислении дискретных потоков $\tilde{F}_{i+1/2j}^{(1)}, \tilde{F}_{ij+1/2}^{(2)}$, будем полагать [104]:

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= \max \left(\sqrt{(u_{i+1/2j}^r)^2 + (v_{i+1/2j}^r)^2}, \sqrt{(u_{i+1/2j}^l)^2 + (v_{i+1/2j}^l)^2} \right), \\ \alpha_2 &= \max \left(\sqrt{(u_{ij+1/2}^r)^2 + (v_{ij+1/2}^r)^2}, \sqrt{(u_{ij+1/2}^l)^2 + (v_{ij+1/2}^l)^2} \right).\end{aligned}\tag{1.35}$$

Дискретные потоки на границах между ячейками, отвечающие за перенос тепла и диффузионный перенос, определяем по схеме:

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{i+1/2j}^{(1)} &= \frac{1}{2} \left(\tilde{H}^{(1)}(U_{i+1j}) + \tilde{H}^{(1)}(U_{ij}) \right), \\ \tilde{H}_{ij+1/2}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left(\tilde{H}^{(2)}(U_{ij+1}) + \tilde{H}^{(2)}(U_{ij}) \right).\end{aligned}\tag{1.36}$$

1.8 Методика расчета газодинамических параметров

1.8.1 ENO реконструкция

Пусть дана равномерная сетка:

$$x_{1/2} < \dots < x_{i-1/2} < x_{i+1/2} < \dots < x_{n+1/2}.$$

Обозначим ячейку сетки $I_i = (x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$, шаг сетки $\Delta x = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$, $i = \overline{1, N}$. Пусть заданы средние значения по ячейкам функции $u(x)$:

$$\bar{u}_i(x) = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u(x) dx, i = \overline{1, N}.\tag{1.37}$$

Для каждой ячейки I_i построим полином $p(x)$ степени не выше $K - 1$, который аппроксимирует функцию $u(x)$ внутри ячейки с порядком точности K :

$$p(x) = u(x) + O(\Delta x^K),\tag{1.38}$$

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} p(x) dx = \bar{u}_i.\tag{1.39}$$

Далее, используя построенный полином, находим значения функции на границах ячейки I_i с порядком точности K :

$$\begin{aligned}u_{i-1/2}^r(x) &= p(x_{i-1/2}) = u(x_{i-1/2}) + O(\Delta x^K), \\ u_{i+1/2}^l(x) &= p(x_{i+1/2}) = u(x_{i+1/2}) + O(\Delta x^K).\end{aligned}\tag{1.40}$$

Построить такой полином можно следующим образом [67]. Рассмотрим первообразную $U(x)$ функции $u(x)$:

$$U(x) = \int_{-\infty}^x u(\xi) d\xi.$$

Очевидно, используя (1.37)

$$U(x_{i+1/2}) = \sum_{j=-\infty}^i \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} u(\xi) d\xi = \sum_{j=-\infty}^i \bar{u}_j \Delta x_j.$$

Построим полином $P(x)$ степени K , который будет интерполировать функцию $U(x)$ в $K + 1$ точке $x_{i-r-1/2}, \dots, x_{i+s+1/2}$ и положим $p(x) = P'(x)$.

Таким способом можно построить K полиномов $p_r(x)$ на шаблонах $S_r = \{x_{i-r-1/2}, \dots, x_{i-r+K+1/2}\}$, $r = 0, \dots, K - 1$, которые удовлетворяют условиям (1.38), (1.39).

Представим интерполяционный полином $P(x)$ в виде интерполяционного полинома Лагранжа:

$$P(x) = \sum_{m=0}^K V(x_{i-r+m-1/2}) \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^K \frac{x - x_{i-r+l-1/2}}{x_{i-r+m-1/2} - x_{i-r+l-1/2}}.$$

Выполнив ряд преобразований [67], получим:

$$p(x) = \sum_{m=0}^K \sum_{j=0}^{m-1} \bar{u}_{i-r+j} \Delta x_{i-r+j} \left(\frac{\sum_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^K \prod_{\substack{q=0 \\ q \neq m, l}}^K (x - x_{i-r+q-1/2})}{\prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^K (x_{i-r+m-1/2} - x_{i-r+l-1/2})} \right).$$

При $x = x_{i+1/2}$ получаем

$$\begin{aligned} u_{i+1/2} &= p(x_{i+1/2}) = \\ &= \sum_{j=0}^{K-1} \left(\sum_{m=j+1}^K \frac{\sum_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^K \prod_{\substack{q=0 \\ q \neq m, l}}^K (x_{i+1/2} - x_{i-r+q-1/2})}{\prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^K (x_{i-r+m-1/2} - x_{i-r+l-1/2})} \right) \Delta x_{i-r+j} \bar{u}_{i-r+j}. \end{aligned}$$

Таким образом, выражения на границах ячеек представляют собой линейную комбинацию средних по ячейкам значений функции, с коэффициентами c_{rj} и \tilde{c}_{rj} , которые зависят от геометрии ячеек и заданного порядка точности:

$$\begin{aligned} u_{i+1/2}^l &= \sum_{j=0}^{K-1} c_{rj} \bar{u}_{i-r+j}, \\ u_{i-1/2}^r &= \sum_{j=0}^{K-1} \tilde{c}_{rj} \bar{u}_{i-r+j}, \\ \tilde{c}_{rj} &= c_{r-1j}. \end{aligned} \tag{1.41}$$

На равномерной сетке с шагом Δx коэффициенты c_{rj} принимают вид:

$$c_{rj} = \sum_{m=j+1}^K \frac{\sum_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^K \prod_{\substack{q=0 \\ q \neq m, l}}^K (r - q + 1)}{\prod_{\substack{l=0 \\ l \neq m}}^K (m - l)}. \tag{1.42}$$

Значения коэффициентов c_{rj} для $K = \overline{0,5}$ приведены в таблице 1.1 [66].

Основная идея алгоритма ENO [67] заключается в выборе шаблона, на котором полином является наиболее гладким на отрезке $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$. Шаблон выбирается следующим образом [67]. Сначала берем шаблон, состоящий из границ одной ячейки: $\tilde{S}_2 = \{x_{i-1/2}, x_{i+1/2}\}$. Далее рассматриваем два возможных шаблона $\tilde{S}_3^1 = \{x_{i-3/2}, x_{i-1/2}, x_{i+1/2}\}$, $\tilde{S}_3^2 = \{x_{i-1/2}, x_{i+1/2}, x_{i+3/2}\}$, если выполняется условие

$$|U[x_{i-3/2}, x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \leq U[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}, x_{i+3/2}]|,$$

то выбирается шаблон \tilde{S}_3^1 , в противном случае \tilde{S}_3^2 . Процесс продолжается, пока в шаблон не будет включена $K + 1$ точка. Разделенные разности 0-го и l -го порядка:

$$U[x_{i-1/2}] = U(x_{i-1/2}),$$

$$U[x_{i-1/2}, \dots, x_{i+l+1/2}] = \frac{U[x_{i+1/2}, \dots, x_{i+l+1/2}] - U[x_{i-1/2}, \dots, x_{i+l-1/2}]}{x_{i+l+1/2} - x_{i-1/2}}.$$

1.8.2 WENO реконструкция

Суть алгоритма WENO [65] заключается в том, что вместо использования одного шаблона для построения интерполяционного полинома, используем их выпуклую линейную комбинацию для данной ячейки:

$$u_{i+1/2} = \sum_{r=0}^{K-1} \omega_r u_{i+1/2}^{(r)}, \quad (1.43)$$

где

$$u_{i+1/2}^{(r)} = \sum_{j=0}^{K-1} c_{rj} \bar{u}_{i-r+j}, \quad r = 0, \dots, K-1. \quad (1.44)$$

Здесь ω_r – весовые коэффициенты, удовлетворяющие условиям:

$$\omega_r \geq 0, \quad \sum_{r=0}^{K-1} \omega_r = 1. \quad (1.45)$$

Если функция $u(x)$ гладкая на каждом шаблоне S_r , то можно найти константы d_r такие, что

$$u_{i+1/2} = \sum_{r=0}^{K-1} d_r u_{i+1/2}^{(r)} = u(x_{i+1/2}) + O(\Delta x^{2K-1}). \quad (1.46)$$

Эти константы можно найти из условия

$$\sum_{r=0}^{K-1} d_r u_{i+1/2}^{(r)} = u_{i+1/2}^* \quad (1.47)$$

Здесь $u_{i+1/2}^*$ – значение на границе ячейки, которое получено интерполированием на расширенном шаблоне $S^* = \{x_{i-K+1}, \dots, x_i, \dots, x_{i+K-1}\}$.

Для $1 \leq K \leq 3$, получено [67]:

$$\begin{aligned} d_0 &= 1, K = 1; \\ d_0 &= \frac{2}{3}, d_1 = \frac{1}{3}, K = 2; \\ d_0 &= \frac{3}{10}, d_1 = \frac{3}{5}, d_2 = \frac{1}{10}, K = 3. \end{aligned} \quad (1.48)$$

В гладком случае необходимо выполнение условия

$$\omega_r = d_r + O(\Delta x^{K-1}), r = 0, \dots, K-1. \quad (1.49)$$

Следовательно, получаем порядок точности $2K-1$:

$$u_{i+1/2} = \sum_{r=0}^{K-1} \omega_r u_{i+1/2}^{(r)} = u(x_{i+1/2}) + O(\Delta x^{2K-1}); \quad (1.50)$$

так как

$$\begin{aligned} \sum_{r=0}^{K-1} \omega_r u_{i+1/2}^{(r)} - \sum_{r=0}^{K-1} d_r u_{i+1/2}^{(r)} &= \sum_{r=0}^{K-1} (\omega_r - d_r) (u_{i+1/2}^{(r)} - u(x_{i+1/2})) \\ &= \sum_{r=0}^{K-1} O(\Delta x^{K-1}) O(\Delta x^K) = O(\Delta x^{2K-1}). \end{aligned}$$

Если функция $u(x)$ на шаблоне является разрывной, то соответствующий весовой коэффициент должен быть близким к нулю, чтобы сохранялись свойства

ENO схем. Используем следующие формулы для вычисления весовых коэффициентов [66]:

$$\omega_r = \frac{\alpha_r}{\sum_{s=0}^{K-1} \alpha_s}, \alpha_r = \frac{d_r}{(\varepsilon + \beta_r)^2}, r = 0, \dots, K - 1. \quad (1.51)$$

Введение малой величины ε исключает случай обращения знаменателя в ноль, β_r – индикатор гладкости [66]:

$$\beta_r = \sum_{l=0}^{K-1} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \Delta x^{2l-1} \left(\frac{\partial^l p_r(x)}{\partial x^l} \right)^2 dx, r = 0, \dots, K - 1. \quad (1.52)$$

Если функция гладкая на шаблоне S_r :

$$\beta_r = O(\Delta x^2), \omega_r = O(1).$$

Если функция имеет разрыв на шаблоне S_r :

$$\beta_r = O(1), \omega_r = O(\Delta x^4).$$

При $K = 3$, имеем:

$$\begin{aligned} \beta_0 &= \frac{13}{12} (\bar{u}_i - 2\bar{u}_{i+1} + \bar{u}_{i+2})^2 + \frac{1}{4} (3\bar{u}_i - 4\bar{u}_{i+1} + \bar{u}_{i+2})^2, \\ \beta_1 &= \frac{13}{12} (\bar{u}_{i-1} - 2\bar{u}_i + \bar{u}_{i+1})^2 + \frac{1}{4} (\bar{u}_{i-1} - \bar{u}_{i+1})^2, \\ \beta_2 &= \frac{13}{12} (\bar{u}_{i-2} - 2\bar{u}_{i-1} + \bar{u}_i)^2 + \frac{1}{4} (\bar{u}_{i-2} - 4\bar{u}_{i-1} + 3\bar{u}_i)^2. \end{aligned} \quad (1.53)$$

Таким образом, при $K = 3$ получаем WENO схему пятого порядка точности [66].

Значения коэффициентов c_{rj}

K	r	$j = 0$	$j = 1$	$j = 2$	$j = 3$	$j = 4$
1	-1	1				
	0	1				
2	-1	3/2	-1/2			
	0	1/2	1/2			
	1	-1/2	3/2			
3	-1	11/6	-7/6	1/3		
	0	1/3	5/6	-1/6		
	1	-1/6	5/6	1/3		
	2	1/3	-7/6	11/6		
4	-1	25/12	-23/12	13/12	-1/4	
	0	1/4	13/12	-5/12	1/12	
	1	-1/12	7/12	7/12	-1/12	
	2	1/12	-5/12	13/12	1/4	
	3	-1/4	13/12	-23/12	25/12	
5	-1	137/60	-163/60	137/60	-21/20	1/5
	0	1/5	77/60	-43/60	17/60	-1/20
	1	-1/20	9/20	47/60	-13/60	1/30
	2	1/30	-13/16	47/60	9/20	-1/20
	3	-1/20	17/16	-43/60	77/60	1/5
	4	1/5	-21/20	137/60	-163/60	137/60

1.9 Дискретизация по времени

Для упрощения записи, уравнение (1.26) можно представить в виде:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = L(U),$$

где $L(U)$ – пространственный оператор. Для дискретизации по времени используется схема Эйлера:

$$U^{n+1} = U^n + \Delta t \cdot L(U^n), \quad (1.54)$$

и схема Рунге-Кутты 3-го порядка [67]:

$$\begin{aligned} U^* &= U^n + \Delta t \cdot L(U^n), \\ U^{**} &= \frac{3}{4} U^n + \frac{1}{4} U^* + \frac{1}{4} \Delta t \cdot L(U^*), \\ U^{n+1} &= \frac{1}{3} U^n + \frac{2}{3} U^{**} + \frac{2}{3} \Delta t \cdot L(U^{**}). \end{aligned} \quad (1.55)$$

Шаг по времени рассчитываем, выполняя итерации по всем ячейкам сетки [85, 99, 105]:

$$\Delta t = \sigma \min \left\{ \frac{h_x}{|u|}, \frac{h_y}{|v|}, \frac{1}{2^N} \frac{\rho h_N^2}{\mu}, \frac{1}{2^N} \frac{h_N^2}{D_{im}} \right\}, \quad (1.56)$$

где $0 < \sigma < 1$ – число Куранта, $h_N = \min(h_x, h_y)$ – минимальный шаг сетки.

1.10 Моделирование течения газа в замкнутом реакторе на примере брутто-реакции пиролиза этана

Для верификации численного алгоритма рассмотрим задачу моделирования динамики многокомпонентного реагирующего газа в замкнутом реакторе для

процесса термического разложения этана [106, 107]. При построении математической модели была принята упрощенная схема пиролиза этана, состоящая из двух стадий (брутто-реакция). Расчеты с применением брутто-реакций для описания химического процесса позволяют при существенно меньших затратах вычислительных ресурсов определить начальные и граничные условия для исследуемой области, чтобы перейти к детальному изучению течения многокомпонентного реагирующего газа с использованием более точных механизмов химических реакций.

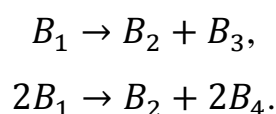
В таблице 1.2 представлена схема брутто-реакции пиролиза этана, коэффициенты для вычисления скоростей стадий реакции на основе кинетических выражений Аррениуса [1].

Таблица 1.2

Схема и кинетические параметры механизма брутто-реакции пиролиза этана

№	Стадия	$A_i, 1/c$ 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	$2C_2H_6 \rightarrow C_2H_4 + 2CH_4$	$3.16E + 16$	$2.7E + 5$

Последовательность химических превращений, с учетом введения следующих обозначений: $B_1 = [C_2H_6]$, $B_2 = [C_2H_4]$, $B_3 = [H_2]$, $B_4 = [CH_4]$, запишем следующим образом:



Кинетические уравнения для элементарных стадий реакции имеют вид:

$$w_1 = A_1 e^{(-E_1/RT)} c_1 = A_1 e^{(-E_1/RT)} \cdot \frac{\rho Y_1}{M_{w1}}, \quad (1.57)$$

$$w_2 = A_2 e^{(-E_2/RT)} (c_1)^2 = A_2 e^{(-E_2/RT)} \cdot \left(\frac{\rho Y_1}{M_{w1}} \right)^2. \quad (1.58)$$

Скорость образования или расхода каждой компоненты смеси в ходе реакции рассчитываются по закону действующих масс:

$$Q_1 = M_{w1} \cdot (-1 \cdot w_1 - 2 \cdot w_2),$$

$$Q_2 = M_{w2} \cdot (1 \cdot w_1 + 1 \cdot w_2),$$

$$Q_3 = M_{w3} \cdot (1 \cdot w_1),$$

$$Q_4 = M_{w4} \cdot (2 \cdot w_2).$$

Удельная теплоемкость каждой компоненты смеси при постоянном давлении задается многочленом, аппроксимирующим известные термодинамические табличные данные в нужном интервале температур, коэффициенты для которого рассчитаны в работе [10]:

$$C_p = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3.$$

Таблица 1.3

Коэффициенты для многочленов теплоемкости

a_i	C_2H_6	C_2H_4	H_2	CH_4
a_0	469.64	572.57	14274.97	925.55
a_1	5.194	4.002	-0.366	4.8358
$-a_2 \cdot 10^{-3}$	1.869	1.448	-1.606	1.336
$a_3 \cdot 10^{-7}$	2.365	1.829	-4.63	1.347

Параметры Леннард-Джонса, применяемые в расчетах коэффициента диффузии смеси приведены в таблице 1.4 [10].

Таблица 1.4

Параметры Леннард-Джонса

Параметры	C_2H_6	C_2H_4	H_2	CH_4
σ_i	3.512	3.33	2.827	3.7327
$(\varepsilon/k_b)_i$	139.8	137.7	59.7	149.92

Расчеты проводились для области реактора, параметры которого были описаны во введении на рис. 1. На данном этапе допускаем, что реактор замкнут и нагрет до температуры 950 К. В начальный момент времени область заполнена этаном, давление в области $p = 101325$ Па. Геометрия расчетной области приведена на рис. 1.1.

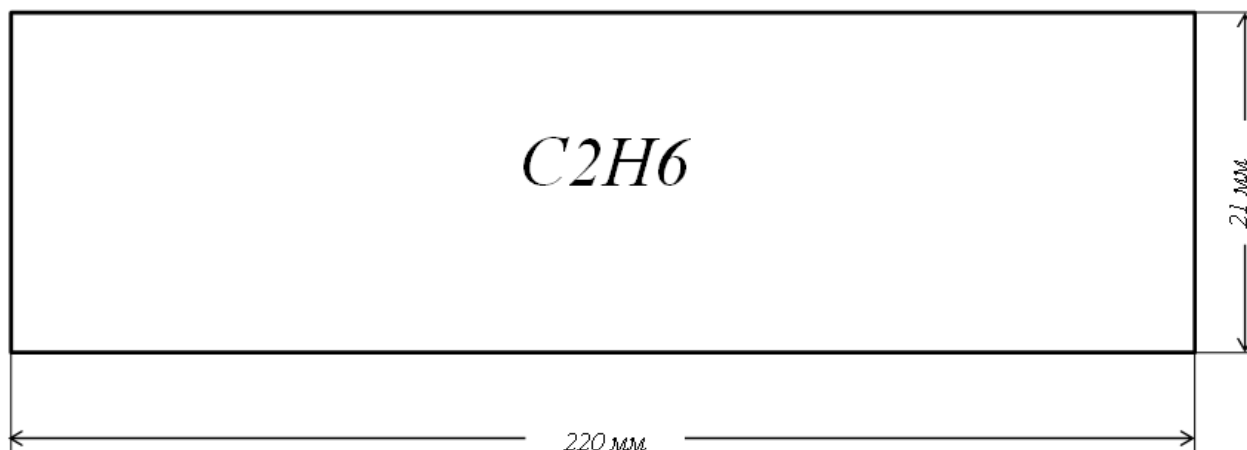


Рис. 1.1. Геометрия расчетной области

В ходе реакции в результате нагрева происходит перераспределение и образование новых элементов смеси: этилена, водорода, метана. Так как реакция эндотермическая и происходит в условиях поглощения энергии, температура в области с течением времени понижается.

Газодинамические параметры, характеризующие течение газовой смеси и изменение концентраций веществ, соответствуют основным физико-химическим законам. Степень конверсии этана к моменту установления при указанных температурах составляет около 41%, что близко к наблюдаемым в экспериментах значениям конверсии – около 40% [109].

На рисунках представлены графики изменения массовых долей продуктов реакции – этилена, водорода, метана во времени, а также конверсия исходного газа – этана.

Для более точного учета влияния пристеночной температуры на степень конверсии этана и концентрацию продуктов пиролиза в главе 3 будет рассмотрена детальная схема механизма пиролиза этана.

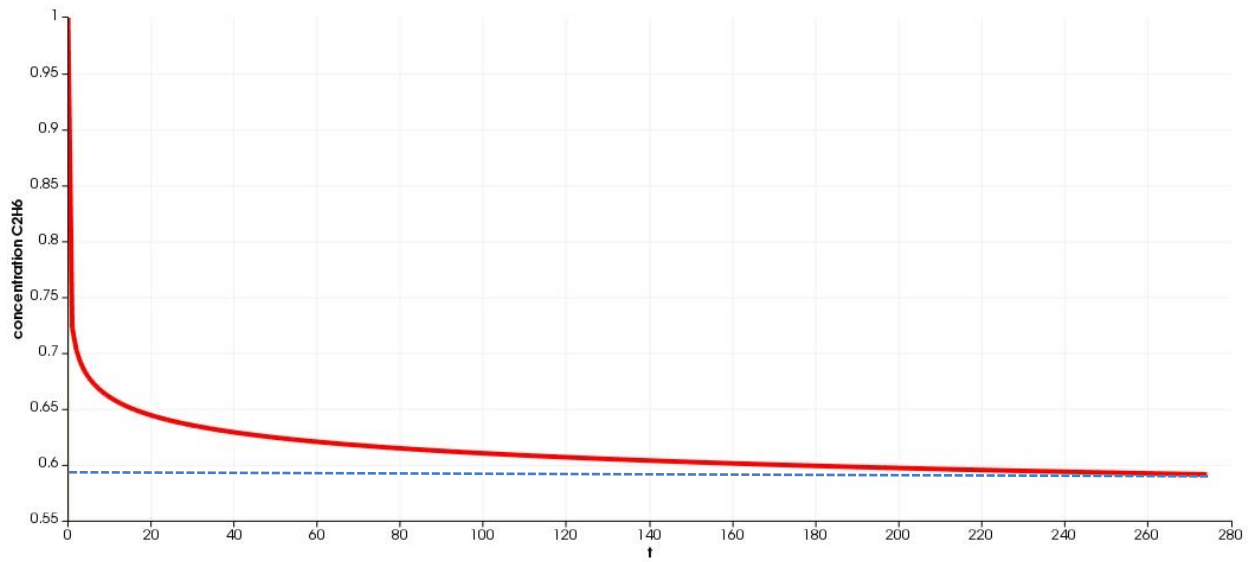


Рис. 1.2. Изменение массовой доли этана

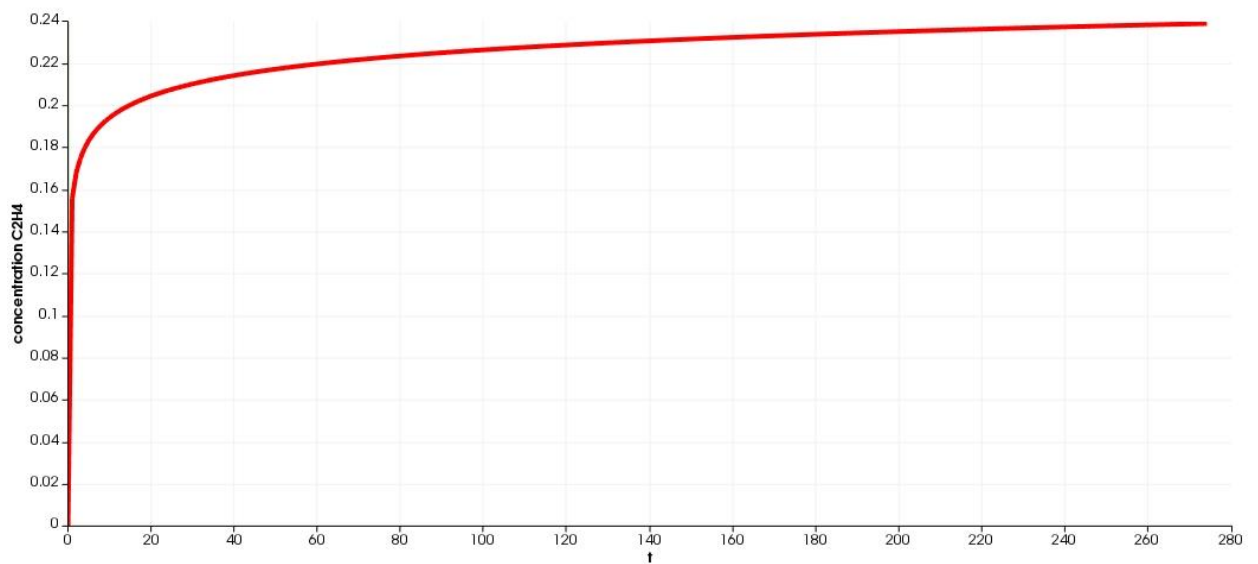


Рис. 1.3. Изменение массовой доли этилена

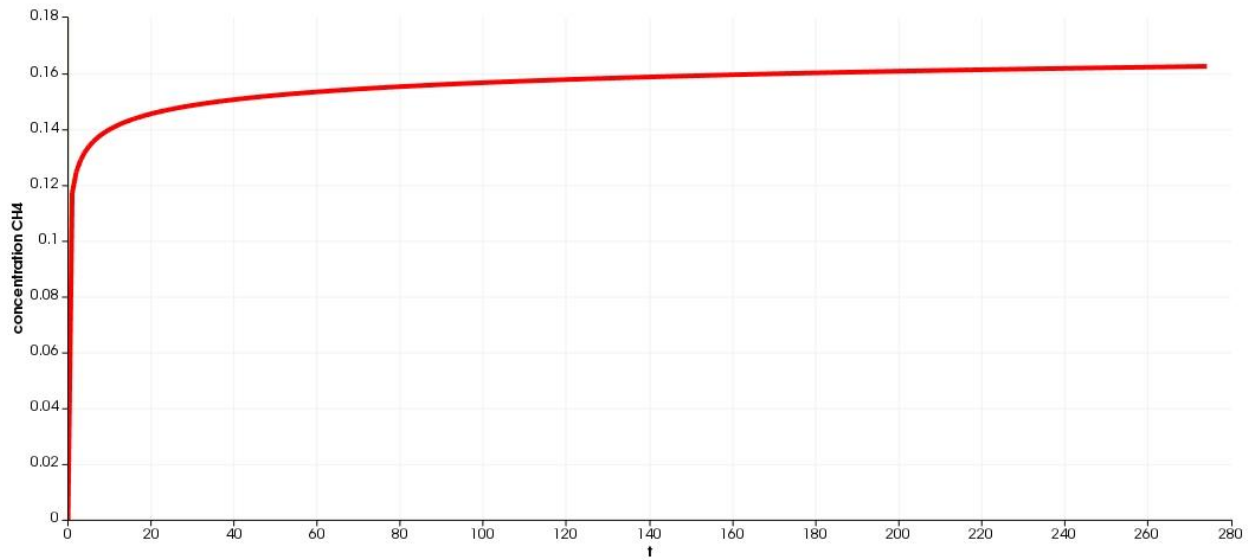


Рис. 1.4. Изменение массовой доли метана

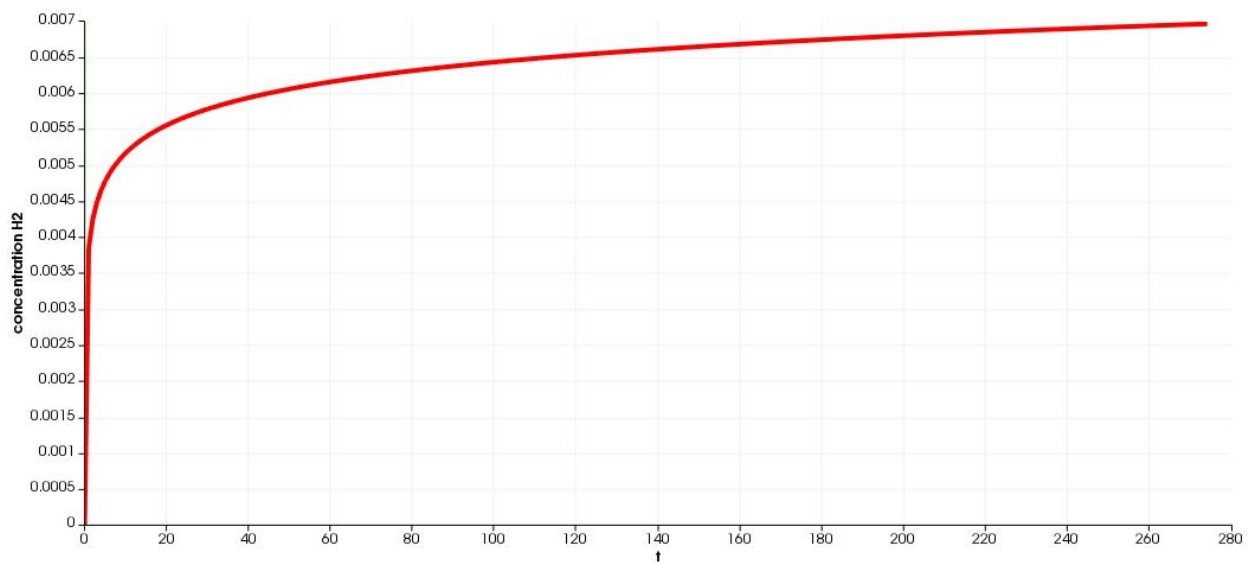


Рис. 1.5. Изменение массовой доли водорода

Глава 2

Программная реализация алгоритма расчёта газодинамических течений

Глава посвящена описанию параллельного программного комплекса, разработанного на основе построенных разностных схем для моделирования многокомпонентных реагирующих течений. Программный комплекс реализован на основе технологии для распределенных вычислений MPI.

В разделе 2.1 дается описание параллельного вычислительного алгоритма на основе принципов геометрического параллелизма. Приводятся схемы межпроцессорного взаимодействия.

В разделе 2.2 дается подробное описание разработанного программного комплекса. В подразделе 2.2.1 представлены основные модули программного комплекса, изложено их краткое описание. В подразделе 2.2.2 подробно описывается подпрограмма инициализации начальных данных, которая производит считывание из файлов параметров запуска и газодинамические параметры, производит декомпозицию расчетной области и заполнение массивов данных. В подразделе 2.2.3 приведена схема работы одного вычислительного узла, которая включает в себя программную реализацию построенных разностных схем для нахождения газодинамических параметров. В подразделе 2.2.4 подробно описана схема передачи данных между процессорами, приведены функции передачи данных, представлены части кода, отвечающие за отправку и получение газодинамических параметров в фиктивных ячейках. В подразделе 2.2.5 кратко изложены возможности пакета ParaView для визуализации и анализа результатов исследований динамики многокомпонентного газа. Рассказывается о возможности визуализации результатов, полученных в результате работы параллельных

программных комплексов. Приводятся примеры записи файлов в формате XML (VTS и PVTS) для параллельного вывода данных каждым процессором.

В разделе 2.3 проведен анализ эффективности параллельного алгоритма на примере разработанного программного комплекса для моделирования течения газа в проточном реакторе.

2.1 Вычислительный алгоритм на основе принципов геометрического параллелизма

При численном моделировании течения газа разработанным алгоритмом приходится сталкиваться с выполнением одинаковых расчетных действий для каждой ячейки сетки. Для создания параллельных алгоритмов в таких задачах рациональным является использование геометрического параллелизма (параллелизма по данным). В данном подходе расчетная область разбивается на заданное число подобластей (по количеству используемых процессоров), далее для каждой подобласти решается система уравнений с определенными для нее начальными и граничными условиями. В расчетах на каждом шаге по времени необходимо знать значения газодинамических параметров в некотором наборе (в зависимости от используемого численного алгоритма) граничных ячеек, расчеты для которых проводятся соседним процессором. На этом этапе необходимо организовывать межпроцессорные обмены. Параллельный алгоритм является эффективным, если процессоры обмениваются значениями параметров на физических границах между подобластями, так как в этом случае объем пересылаемых данных минимален.

Таким образом, для построения параллельного алгоритма для моделирования течения многокомпонентного реагирующего газа необходимо решить задачу разбиения расчетной области на части с примерно равным количеством расчетных ячеек (для равномерной нагрузки на вычислительные узлы), а также задачу минимизации количества взаимодействующих вычислительных процессов и объема передаваемых данных [108].

Так как мы решаем задачу в прямоугольной области с сеткой, равномерной по каждому направлению, то естественным является разбиение области прямыми, параллельными осям координат (рис. 2.1).

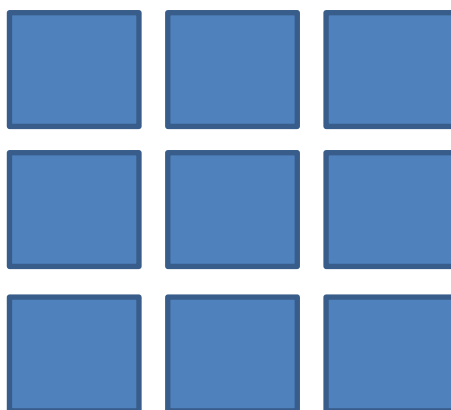


Рис. 2.1. Декомпозиция расчетной области

Как показано в [84, 89], при таком разбиении расчетной области параллельные вычисления оказываются наиболее эффективными.

Количество ячеек сетки равно N_x , N_y по соответствующему направлению. Для организации параллельных вычислений разбиваем область на N_{bx} частей по направлению оси OX и N_{by} частей по направлению оси OY . Таким образом, общее число запускаемых процессов определяется как $N_{bx} \times N_{by}$.

Для каждого процессора необходимо определить номера соседних процессоров для дальнейшей организации обмена данными.

Введем обозначения для соседних процессоров

id_{left} – номер соседа слева;

id_{right} – номер соседа справа;

id_{bottom} – номер соседа снизу;

id_{top} – номер соседа сверху.

Если $myid$ – текущий процессор, номера соседних с ним процессоров определяем следующим образом [84, 89]:

$$\begin{aligned}
 id_{left} &= \begin{cases} myid - 1 \\ -1, \text{ если } myid \text{ кратно } N_{bx} \end{cases} \\
 id_{right} &= \begin{cases} myid + 1 \\ -1, \text{ если } (myid + 1) \text{ кратно } N_{bx} \end{cases}
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

$$\begin{aligned}
 id_bottom &= \begin{cases} myid - Nbx \\ -1, \text{ если } (myid - Nbx) < 0 \end{cases} \\
 id_top &= \begin{cases} myid + Nbx \\ -1, \text{ если } (myid + Nbx) > Nbx \cdot Nby - 1 \end{cases}
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Количество расчетных ячеек на процессоре с номером $myid$ определяем следующим образом [84, 89] $Nx^{myid} \times Ny^{myid}$, где

$$Nx^{myid} = \begin{cases} Nx/Nbx, \text{ если } id_right \neq -1 \\ Nx - (Nbx - 1) \left\lfloor \frac{Nx}{Nbx} \right\rfloor, \text{ если } id_right = -1 \end{cases}. \tag{2.2}$$

$$Ny^{myid} = \begin{cases} Ny/Nby, \text{ если } id_top \neq -1 \\ Ny - (Nby - 1) \left\lfloor \frac{Ny}{Nby} \right\rfloor, \text{ если } id_top = -1 \end{cases}. \tag{2.3}$$

Для каждого процессора можно вычислить начальные координаты области [84, 89], при условии, что x_min , y_min – начальные координаты исходной расчетной области:

$$x_min^{myid} = \begin{cases} x_min + \text{mod} \left(\frac{id_left + 1}{Nbx} \right) \left\lfloor \frac{Nx}{Nbx} \right\rfloor Hx, & \text{в общем случае} \\ x_min, & \text{если } id_left = -1 \\ x_min + Nx^{myid} Hx, & \text{если } id_left = 0 \end{cases} \tag{2.4}$$

$$y_min^{myid} = \begin{cases} y_min + \text{mod} \left(\frac{id_bottom + 1}{Nbx} \right) \left\lfloor \frac{Ny}{Nby} \right\rfloor Hy, & \text{в общем случае} \\ y_min, & \text{если } id_bottom = -1 \\ y_min + Ny^{myid} Hy, & \text{если } id_bottom = 0 \end{cases} \tag{2.5}$$

Здесь Hx , Hy – шаг сетки по соответствующему направлению.

Также для каждой области необходимо определять граничные условия. В случае границы, определенной постановкой задачи, условия определяются обычным способом (втекание, вытекание, стенка). В случае образования границ в результате разбиения расчетной области, необходима организация обмена значениями в ячейках между соседними процессорами. Принимая во внимание численный алгоритм, используемый для нахождения газодинамических параметров, в межпроцессорном обмене будут участвовать несколько слоев расчетных ячеек. Подробнее реализация межпроцессорного обмена будет описана в п. 2.2.4.

Построенный параллельный алгоритм реализован на основе технологии для систем с распределенной памятью MPI (Message Passing Interface). Под параллельной программой в рамках MPI подразумевается разработка единственного программного кода, который запускается на всех процессах одновременно (модель SPMP – Single Program Multiple Processes). Исполняемый файл программного кода должен быть доступен каждому имеющемуся процессору, на одном процессоре возможно выполнение нескольких процессов, которые будут выполняться в режиме разделения памяти. Чтобы избежать выполнения одинаковых расчетов на каждом процессе, задаются разные данные для каждого процесса. С помощью средств MPI в программном коде возможно идентифицировать процесс и задать ему собственные команды, которые будут отличны от команд на других процессах.

2.2 Описание программного комплекса

2.2.1 Структура программного комплекса

Для проведения численного моделирования потоков многокомпонентного реагирующего газа с использованием описанных схем был разработан программный комплекс на основе технологии параллельных вычислений на языке C++ [109, 110]. Организация межпроцессорного обмена осуществлялась с помощью библиотеки MPICH, которая является реализацией стандарта MPI.

Исходный код программного комплекса условно можно разделить на следующие модули:

- Модуль формирования начальных данных *start_up()*. Производит чтение из файлов начальных данных, декомпозицию расчетной области и передачу входных параметров каждому вычислительному узлу.
- Модуль формирования массивов данных *init()*. Производит заполнение массивов начальными данными и формирование массивов консервативных переменных.
- Модуль интегрирования по времени *calc_one_time_step()*. Реализуется численный алгоритм расчета газодинамических величин до достижения момента времени, до которого ведется расчет.
- Модуль граничных условий *bnd_cond()*. Определяет набор условий на границе расчетной области.
- Модуль межпроцессорного обмена *bnd_exch()*. На шаге по времени процессоры обмениваются значениями в граничных ячейках, необходимыми для реализации численного алгоритма для расчета газодинамических параметров.
- Модуль сохранения данных *save_vtk()*. Запись результатов в файл в формате VTK для дальнейшей визуализации в программе ParaView.

2.2.2 Подпрограмма инициализации начальных данных

Подпрограмма *startup()* предназначена для считывания начальных данных, параметров запуска, параметров сетки, а также определения соседей для каждого вычислительного узла.

При запуске программы каждым процессом считываются следующие данные из файла *init.dat*:

- параметры сетки x_{min} , x_{max} , y_{min} , y_{max} , N_x , N_y , количество разбиений по осям OX , OY – N_{bx} , N_{by} для организации параллельных расчетов;
- набор газодинамических параметров p , T , $\vec{u} = (u, v)$, начальные значения концентраций веществ y_i ;

- молярная масса для каждой компоненты смеси M_{wi} , коэффициенты переноса μ_i , λ_i , параметры Леннард-Джонса σ_i , $(\epsilon/k_b)_i$, энтальпия образования компонент h_i^0 ;
- кинетические параметры механизмов реакции A_i , E_i .

Из файла *cp.dat* считываются данные о коэффициентах в многочлене для теплоемкости.

Далее в процедуре происходит декомпозиция расчетной области. Определяются номера соседей для каждого вычислительного узла id_left , id_right , id_bottom , id_top согласно формулам (2.1), количество расчетных ячеек на процессоре $Nx^{myid} \times Ny^{myid}$ (выражения (2.2), (2.3)), начальные координаты области $(x_min^{myid}, y_min^{myid})$ по формулам (2.4), (2.5).

Зная параметры сетки для каждого процессора вызывается процедура *init()*, отвечающая за заполнение массивов начальными данными.

2.2.3 Подпрограмма расчета на одном вычислительном узле

На каждом вычислительном узле после получения данных сетки, считывания начальных данных, заполнения массивов *init()* в цикле интегрирования по времени запускается подпрограмма *calc_one_time_step()*, которую можно представить в виде следующей последовательности:

- определение граничных условий: процедура *bnd_cond()* выполняется, если подобласть является приграничной; *bnd_exch()* – процедура межпроцессорного обмена, с помощью которой получаем данные, необходимые для расчетов, от соседних процессоров;
- расчет пространственной аппроксимации;
- сохранение результатов *save_vtk()*.

Расчет пространственной аппроксимации включает следующие этапы:

1. Решение уравнений химической кинетики *calc_chem()*.

2. Определение конвективных, диффузионных, тепловых потоков с помощью процедуры *calc_fluxes()*.
 - 2.1. Реконструкция значений газодинамических параметров на границе ячейки *weno()*.
 - 2.2. Определение коэффициента диффузии для каждой компоненты смеси слева и справа от границы ячейки *calc_dm()*.
 - 2.3. Определение энтальпии для каждой компоненты смеси слева и справа от границы ячейки *calc_h()*.
 - 2.4. Определение коэффициента теплопроводности смеси слева и справа от границы ячейки *calc_kp()*.
 - 2.5. Определение коэффициента динамической вязкости смеси слева и справа от границы ячейки *calc_ml()*.
 - 2.6. Реконструкция конвективного потока на границе ячейки.
 - 2.7. Реконструкция потока тепла на границе ячейки.
 - 2.8. Реконструкция диффузионного потока на границе ячейки.
 - 2.9. Реконструкция явления вязкости на границе ячейки.
3. Расчет результирующего потока *calc_new_fields()*.
4. Обмен данными *bnd_exch_s()* и расчет граничных условий *bnd_cond_s()*.
5. Расчет динамической составляющей давления и коррекция вектора скорости *calc_pi()*.

Схема работы одного вычислительного узла приведена на рис. 2.2.

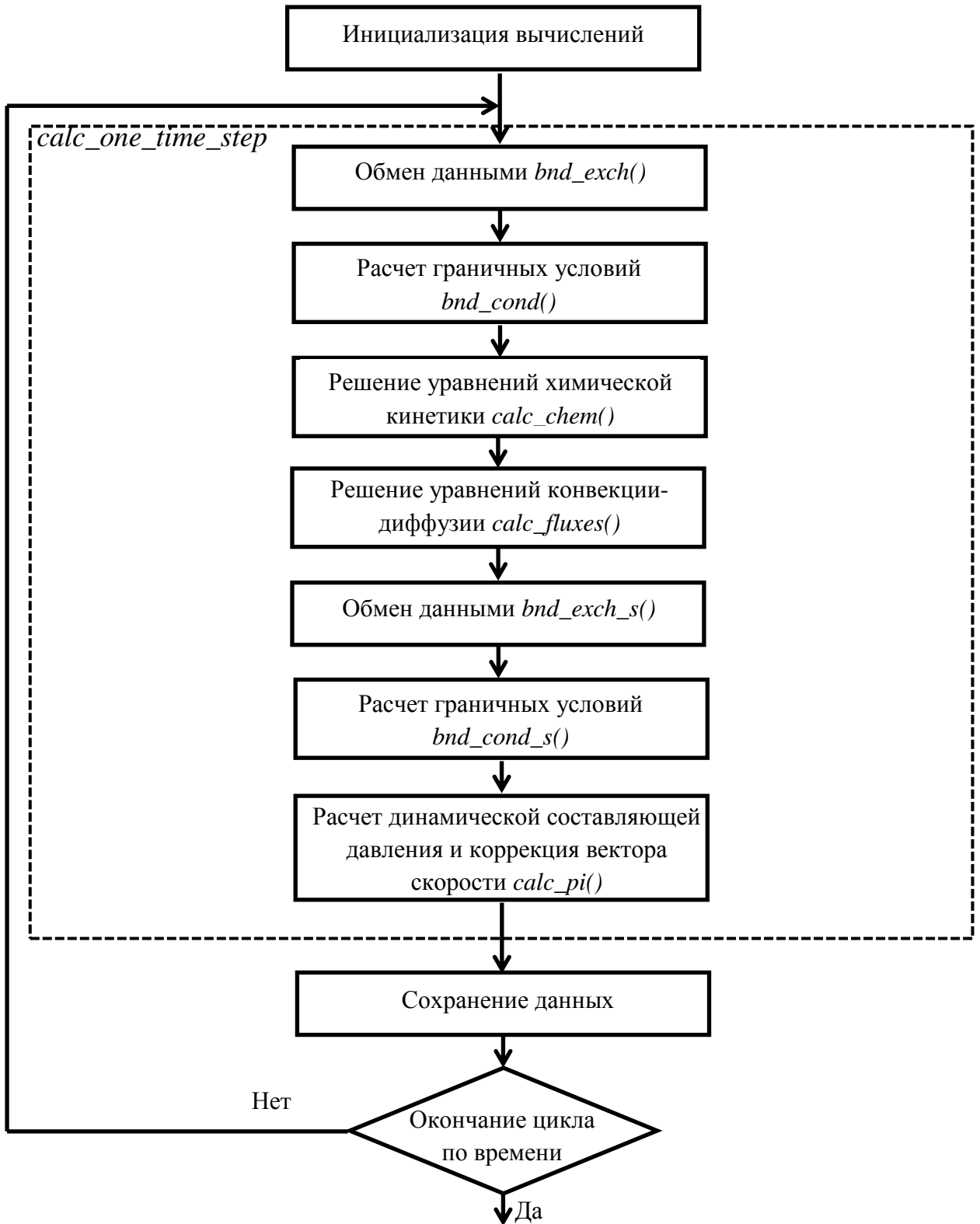


Рис. 2.2. Схема работы одного вычислительного узла

2.2.4 Подпрограмма обмена данными между процессорами

Для расчета газодинамических параметров на одном вычислительном узле требуются значения этих параметров в ячейках, принадлежащих соседним областям, количество этих ячеек зависит от используемой разностной схемы. Для организации вычислений на процессоре необходимо определить, сколько слоев ячеек необходимо получить от соседних процессоров и сколько отправить. С этой целью в каждой области вводятся слои фиктивных ячеек на границе. Если область является приграничной, то значения в фиктивных ячейках заполняются согласно граничным условиям (процедура $bnd_cond()$). В противном случае необходима организация межпроцессорного обмена (процедура $bnd_exch()$).

Обмен осуществляется следующим образом [84, 89]. Пусть U^{myid} – вектор значений газодинамических параметров в области, обрабатываемой процессором $myid$. Тогда процессор $myid$ должен получить следующие значения в фиктивных ячейках от соседних процессоров:

$$U^{myid}(N_x + K + p, j) = U^{id_{right}}(p, j) \text{ – от процессора справа;}$$

$$U^{myid}(K - 1 - p, j) = U^{id_{left}}(N_x + K - 1 - p, j) \text{ – от процессора слева;}$$

$$U^{myid}(i, N_y + K + p) = U^{id_{top}}(i, p) \text{ – от процессора сверху;}$$

$$U^{myid}(i, K - 1 - p) = U^{id_{bottom}}(i, N_y + K - 1 - p) \text{ – от процессора снизу.}$$

Соответственно, отправить процессор $myid$ должен следующие значения:

$$U^{myid}(N_x + K - 1 - p, j) \text{ – процессору справа;}$$

$$U^{myid}(p, j) \text{ – процессору слева;}$$

$$U^{myid}(i, N_y + K - 1 - p) \text{ – процессору сверху;}$$

$$U^{myid}(i, p) \text{ – процессору снизу.}$$

Здесь $i = \overline{K, N_x + K - 1}$, $j = \overline{K, N_y + K - 1}$, $p = \overline{0, K - 1}$.

Схема межпроцессорного обмена [84] приведена на рис. 2.3.

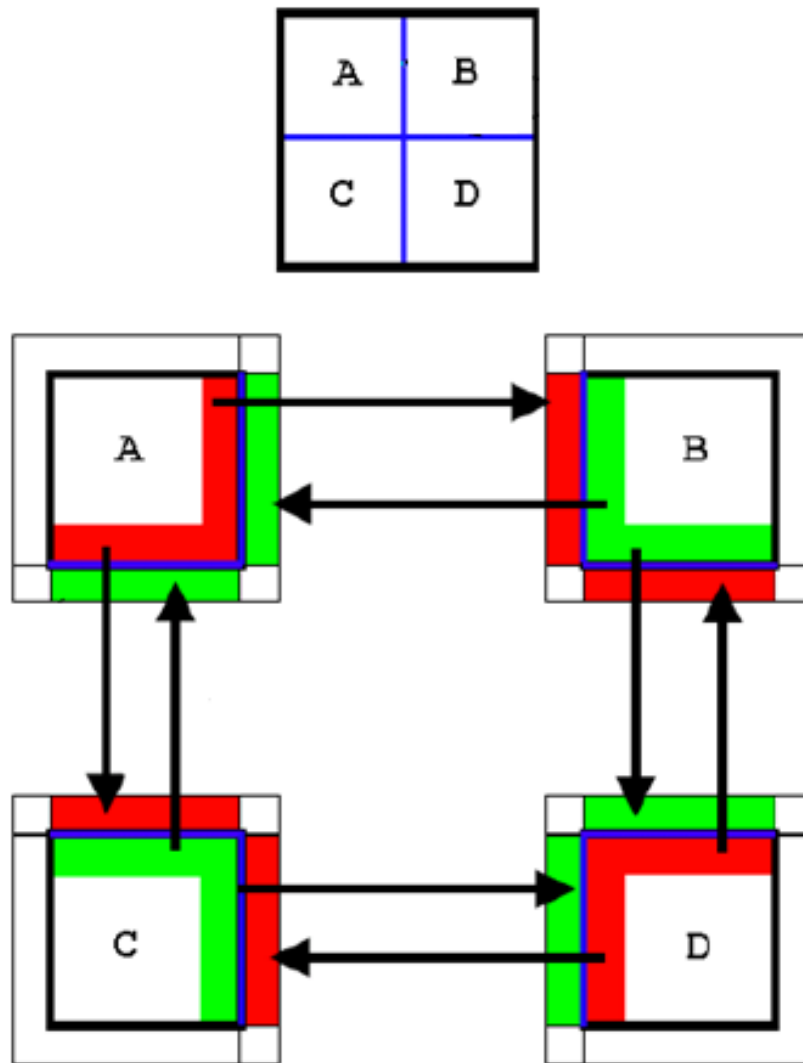


Рис. 2.3. Схема межпроцессорного обмена

Для пересылки и получения данных между процессорами в программном комплексе применяются парные (point-to-point) блокирующие функции. Выбор функций такого типа обусловлен наличием в параллельном алгоритме только обменов между двумя процессорами. Блокировка необходима для того, чтобы все процессоры достигли одной и той же точки алгоритма к началу обмена данными.

Функция передачи данных [83]:

```
int MPI_Send(void *buf, int count, MPI_Datatype type, int dest, int tag, MPI_Comm comm),
```

где

- buf – адрес буфера памяти, в котором располагаются данные отправляемого сообщения;

- `count` – количество элементов данных в сообщении;
- `type` – тип элементов данных пересылаемого сообщения;
- `dest` – ранг процесса, которому отправляется сообщение;
- `tag` – значение-тег, используемое для идентификации сообщения;
- `comm` – коммуникатор, в рамках которого выполняется передача данных.

Функция приема данных [83]:

```
int MPI_Recv(void *buf, int count, MPI_Datatype type, int source, int tag, MPI_Comm comm, MPI_Status *status),
```

где

- `buf` – адрес буфера памяти, в котором располагаются данные отправляемого сообщения;
- `count` – количество элементов данных в сообщении;
- `type` – тип элементов данных пересылаемого сообщения;
- `source` – ранг процесса, от которого должен быть выполнен прием сообщения;
- `tag` – тег сообщения, которое должно быть принято для процесса;
- `comm` – коммуникатор, в рамках которого выполняется передача данных;
- `status` – указатель на структуру данных с информацией о результате выполнения операции приема данных.

Процедура межпроцессорного обмена *bnd_exch()* запускается на каждом процессоре при инициализации начальных данных и при расчете нового шага по времени. Процедура включает 4 функции передачи данных `MPI_Send()` и 4 функции приема данных `MPI_Recv()`. Количество вызываемых функций определено по количеству соседних процессоров: *id_left*, *id_right*, *id_bottom*, *id_top*.

При передаче данных предварительно отправляемые значения помещаем в специальный буфер, а затем осуществляем отправку. После приема посылки процессором-получателем данные из буфера приема размещаются в массивах, содержащих значения газодинамических параметров в ячейках.

Ниже представлены части кода, отвечающие за буферизацию и отправку данных, а также за получение и запись данных в массив. Здесь $ro[i][j]$ – значение плотности в ячейке.

1) Буферизация и отправка данных:

```

m = 0;
for (int i = hi[0]-K+1; i <= hi[0]; i++) {
    for (int j = lo[1]; j <= hi[1]; j++) {
        buf_d[m++] = ro[i][j];
    }
}
MPI_Send(buf_d, cnt, MPI_DOUBLE, rnk_r, 0, MPI_COMM_WORLD);

```

2) Получение и запись данных в массивы газодинамических параметров:

```

MPI_Recv(buf_d, cnt, MPI_DOUBLE, rnk_l, 0, MPI_COMM_WORLD, &st);
m = 0;
for (int i = lo[0]-K; i <= lo[0]-1; i++) {
    for (int j = lo[1]; j <= hi[1]; j++) {
        ro[i][j] = buf_d[m++];
    }
}

```

2.2.5 Подпрограмма вывода результатов

Для визуализации и анализа результатов исследований используется открытый графический кросс-платформенный пакет ParaView [111]. Для анализа течения многокомпонентного газа используем следующие возможности пакета:

- Визуализация расчетных сеток.
- Визуализация распределения величин (давление, скорость, температура, плотность, концентрации веществ) в расчетной области.

- Построение срезов геометрии – плоскостью или заданной функцией.
- Построение графиков изменения величин во времени.
- Создание фильмов, демонстрирующих развитие процесса течения газа.

Для обеспечения визуализации данных ParaView использует формат данных VTK (Visualization Toolkit) [112]. Для интерпретации результатов, полученных на параллельных вычислительных системах, данный пакет использует тип формата на основе XML.

Существуют две разновидности формата данных VTK на основе XML:

- Все данные содержатся в одном файле, их запись и чтение осуществляются с помощью одного процессора.
- Данный формат применяется для интерпретации результатов, полученных на параллельных вычислительных системах. Файл не содержит данных для визуализации, он описывает структурную информацию и ссылки на файлы, в которых записаны данные, полученные при расчетах на каждом процессоре.

VTK поддерживает работу с пятью типами представления данных: *structured points* (структурированные точки), *structured grid* (структурированная сетка), *rectilinear grid* (прямоугольная сетка), *unstructured grid* (неструктурированная сетка), *polygonal data* (полигональные данные).

В зависимости от формата и типа данных создаются файлы с разными расширениями [112]. Так как численный алгоритм построен на структурированной прямоугольной сетке и программный комплекс реализован на основе технологии параллельных вычислений, создаем файлы со следующим расширением:

- *.vts. Файлы с данным расширением создаются на каждом вычислительном узле при запуске подпрограммы *save_vtk()*. Они содержат описание сетки и результаты расчетов для каждой подобласти. Таким образом, имеем количество файлов, равное количеству вычислительных узлов. Ниже представлен код для

записи данных на структурированной прямоугольной сетке. Здесь $ro[i][j]$ – значение плотности в ячейке.

```

sprintf(fName, "res_%010d_%04d.vts", num, rnk);
fp = fopen(fName, "w");
fprintf(fp, "<?xml version=\"1.0\"?>\n");
fprintf(fp, "<VTKFile type=\"StructuredGrid\" version=\"0.1\"
byte_order=\"LittleEndian\">\n");
fprintf(fp, " <StructuredGrid WholeExtent=\"%d %d %d %d %d %d\">\n",
rnk_ij[0]*NX, (rnk_ij[0]+1)*NX, rnk_ij[1]*NY, (rnk_ij[1]+1)*NY, 0, 0);
fprintf(fp, " <Piece Extent=\"%d %d %d %d %d %d\">\n", rnk_ij[0]*NX,
(rnk_ij[0]+1)*NX, rnk_ij[1]*NY, (rnk_ij[1]+1)*NY, 0, 0);
fprintf(fp, " <Points>\n");
fprintf(fp, " <DataArray type=\"Float32\" NumberOfComponents=\"3\"
format=\"ascii\">\n");
fprintf(fp, " ");
for (int j = 0; j <= NY; j++) {
    for (int i = 0; i <= NX; i++) {
        fprintf(fp, "%25.15f %25.15f %25.15f ", D_MIN[0]+i*DX[0],
D_MIN[1]+j*DX[1], 0.0);
    }
}
fprintf(fp, "\n");
fprintf(fp, "</DataArray>\n");
fprintf(fp, "</Points>\n");
fprintf(fp, "<CellData Scalars=\"Density, Pressure, Temperature, TotEnergy,
ConcentrationC2H6, ConcentrationC2H4, ConcentrationH2, ConcentrationCH4,
Proc\" Vectors=\"Velocity\">\n");
fprintf(fp, "<DataArray type=\"Float32\" Name=\"Density\"
format=\"ascii\">\n");

```

```

fprintf(fp, "      ");
for (int j = lo[1]; j <= hi[1]; j++) {
    for (int i = lo[0]; i <= hi[0]; i++) {
        fprintf(fp, "%25.16f ", ro[i][j]);
    }
    fprintf(fp, "\n");
}

```

- *.pvts. Файл содержит информацию о типах выводимых данных и ссылки на файлы с расширением *.vts, которые получены на каждом процессоре. Ниже представлена часть кода, осуществляющая запись файла данного типа, она выполняется на одном процессоре.

```

if (rnk == 0) {
    sprintf(fName, "res_%010d.pvts", num);
    fp = fopen(fName, "w");
    fprintf(fp, "<?xml version=\"1.0\"?>\n");
    fprintf(fp, "<VTKFile type=\"PStructuredGrid\" version=\"0.1\"
byte_order=\"LittleEndian\">\n");
    fprintf(fp, " <PStructuredGrid WholeExtent=\"%d %d %d %d %d %d\"
GhostLevel=\"0\">\n", 0, G_NX-1, 0, G_NY-1, 0, 0);
    fprintf(fp, "<PPoints><PdataArray type=\"Float32\" NumberOfComponents
= \"3\" /></PPoints>\n");
    fprintf(fp, "<PCellData Scalars=\"Density, Pressure, Temperature, TotEnergy,
ConcentrationC2H6, ConcentrationC2H4, ConcentrationH2,
ConcentrationCH4, Proc\" Vectors=\"Velocity\">\n");
    fprintf(fp, "<PdataArray type=\"Float32\" Name=\"Density\" format=\"ascii\"
/>\n");
    fprintf(fp, "<PdataArray type=\"Float32\" Name=\"Pressure\"
format=\"ascii\" />\n");
}

```

```

fprintf(fp, "<PdataArray type=\"Float32\" Name=\"Temperature\"
format=\"ascii\" />\n");
fprintf(fp, "<PdataArray type=\"Float32\" Name=\"TotEnergy\"
format=\"ascii\" />\n");
fprintf(fp, "<PdataArray type=\"Float32\" Name=\"ConcentrationC2H6\"
format=\"ascii\" />\n");
fprintf(fp, "<PdataArray type=\"Float32\" Name=\"ConcentrationC2H4\"
format=\"ascii\" />\n");
fprintf(fp, "<PdataArray type=\"Float32\" Name=\"ConcentrationH2\"
format=\"ascii\" />\n");
fprintf(fp, "<PdataArray type=\"Float32\" Name=\"ConcentrationCH4\"
format=\"ascii\" />\n");
fprintf(fp, "<PdataArray type=\"Float32\" Name=\"Velocity\" format=\"ascii\"
NumberOfComponents=\"3\" />\n");
fprintf(fp, "<PdataArray type=\"Int32\" Name=\"Proc\" format=\"ascii\"
/>\n");
fprintf(fp, "</PCellData>\n");

for (int pid = 0; pid < size; pid++) {
    int i = pid%sz_x;
    int j = pid/sz_x;
    fprintf(fp, "    <Piece Extent=\"%d %d %d %d %d %d\"
Source=\"res_%010d_%04d.vts\" />\n", i*NX, (i+1)*NX, j*NY, (j+1)*NY, 0, 0,
num, pid);
}
fprintf(fp, "</PStructuredGrid>\n");

fprintf(fp, "</VTKFile>\n");
fclose(fp);

```



```
printf("File '%s' saved...\n", fName);
}
```

2.3 Оценка эффективности параллельных вычислений

Для оценки эффективности и анализа правильности построенного программного комплекса с использованием технологии параллельных вычислений была принята постановка задачи, описанная в главе 3, расчет проводился в прямоугольной области, количество расчетных ячеек 70400.

Для подтверждения правильности работы параллельного варианта программы проводилось сравнение промежуточных и конечных значений по времени газодинамических параметров последовательной и параллельной версий. Были выполнены расчеты с использованием различных размеров сеток, а также на разном количестве процессоров. Полученные результаты совпали во всех случаях, следовательно, наличие ошибок в параллельной версии программы отсутствует.

Для оценки производительности программного комплекса измерялось время расчетов фиксированного числа шагов по времени для различного числа процессоров.

Анализ эффективности будем проводить на основании следующего набора критериев [83]:

- Ускорение

Ускорение S_P – это отношение времени выполнения расчетов на одном вычислительном узле к времени выполнения расчетов на P узлах. Ускорение показывает, во сколько раз быстрее вычисления выполняются в параллельном режиме.

$$S_P = \frac{T_1}{T_P}. \quad (2.6)$$

Зависимость ускорения вычислений от количества задействованных процессоров приведено на рис. 2.4.

- Эффективность

Эффективность – это отношение ускорения, полученного при запуске программы на P вычислительных узлах к количеству вычислительных узлов.

$$E = \frac{S_P}{P}. \quad (2.7)$$

Зависимость эффективности вычислений от количества задействованных процессоров приведена на рис. 2.5.

Работа программного комплекса тестировалась на кластере ФГБОУ ВО «МГУ им. Н. П. Огарёва». Время выполнения фиксированного числа итераций на разном количестве процессоров, ускорение и эффективность построенного алгоритма приведены в таблице 2.1.

Из рис. 2.4 видно, что с увеличением количества процессоров ускорение растет (ускорение расчётов в 1,99 раз при использовании 2 вычислительных процессоров и в 39,4 раза на 64 процессорах при количестве расчетных ячеек 281600). Однако, в идеальном случае ускорение на P процессорах равно P . Рис. 2.5 демонстрирует, что с увеличением количества вычислительных узлов эффективность падает (эффективность расчётов 99% при использовании 2 вычислительных процессоров и 61% на 64 процессорах).

Замедление работы параллельного алгоритма с увеличением используемых вычислительных процессоров объясняется затратами времени на пересылку данных, объем которых увеличивается с ростом количества процессоров, и выполнение операций, которые не поддаются распараллеливанию.

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	1	1	1
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

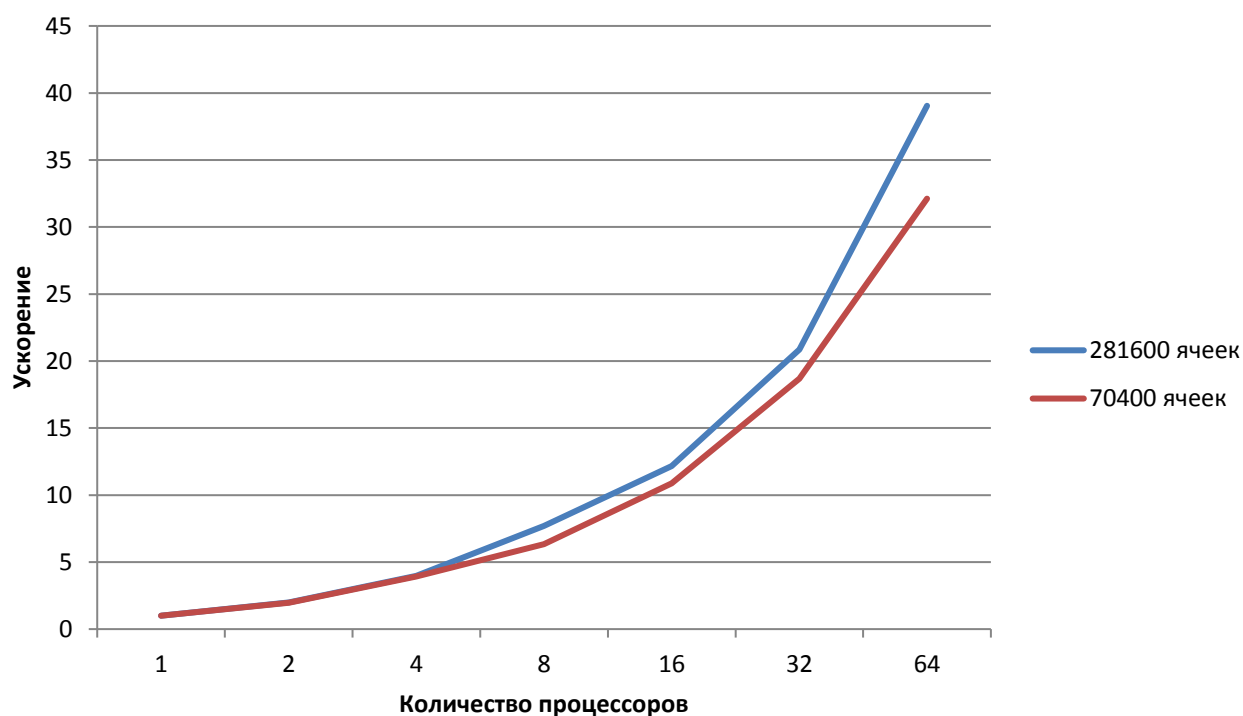


Рис. 2.4. Ускорение вычислений

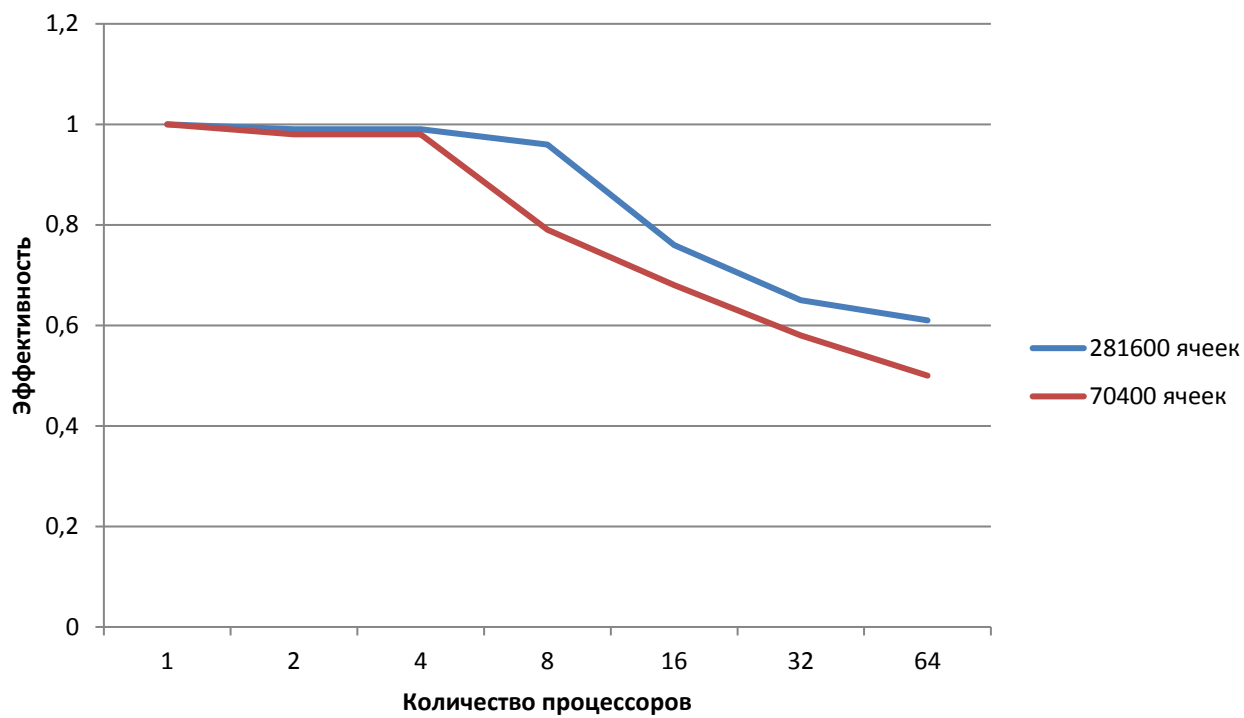


Рис. 2.5. Эффективность вычислений

Глава 3

Моделирование потока многокомпонентного газа в проточном реакторе на примере пиролиза этана

Глава посвящена применению разработанного параллельного программного комплекса для исследования динамики течения многокомпонентного сжимаемого вязкого газа с учетом процессов диффузии, теплообмена и химических превращений.

В разделе 3.1 описана решаемая практическая задача. Исследования проводятся с проточным химическим реакторе, предназначенном для термического пиролиза углеводородов за счет постоянного внешнего обогрева стенок. Представлена геометрия расчетной области. Описаны начальные и граничные условия.

В разделе 3.2 описана математическая модель процесса термического разложения этана. Была использована кинетическая схема, представляющая собой автокаталитический радикальный механизм пиролиза этана, состоящая из 15 элементарных стадий. Приведены значения характеристик отдельных компонент смеси (теплопроводность, теплоемкость, вязкость, параметры Леннард-Джонса) для более точного описания динамики газового потока.

В разделе 3.3 приводятся результаты численного моделирования: распределение массовой доли основных компонент смеси, температура, плотность смеси, направления вектора скорости в продольном сечении химического реактора, давление в области. Проанализирована динамика процесса.

В разделе 3.4 проводится сопоставление результатов вычислительного эксперимента и экспериментальных данных по зависимости конверсии этана от температуры нагревательных элементов. Делаются выводы.

3.1 Постановка задачи

В работе [12] представлены результаты численного моделирования термического пиролиза этана в проточном реакторе с постоянным нагревом внешних стенок, а также проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными. В работе [12] численная модель построена на основе пакета ANSYS Fluent. Сопоставление экспериментальных и расчетных данных проводилось на основе зависимости конверсии этана от температуры нагревательных элементов реактора. Результаты вычислительного эксперимента хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В расчетах рассматриваем следующую постановку задачи. Геометрия проточного химического реактора, разработанного в Институте катализа им. Г.К. Борескова СО РАН (рис. 1), схематично представлена на рис. 3.1. Общая длина реактора 220 мм, диаметр 21 мм, длина нагревательных элементов 70 мм.

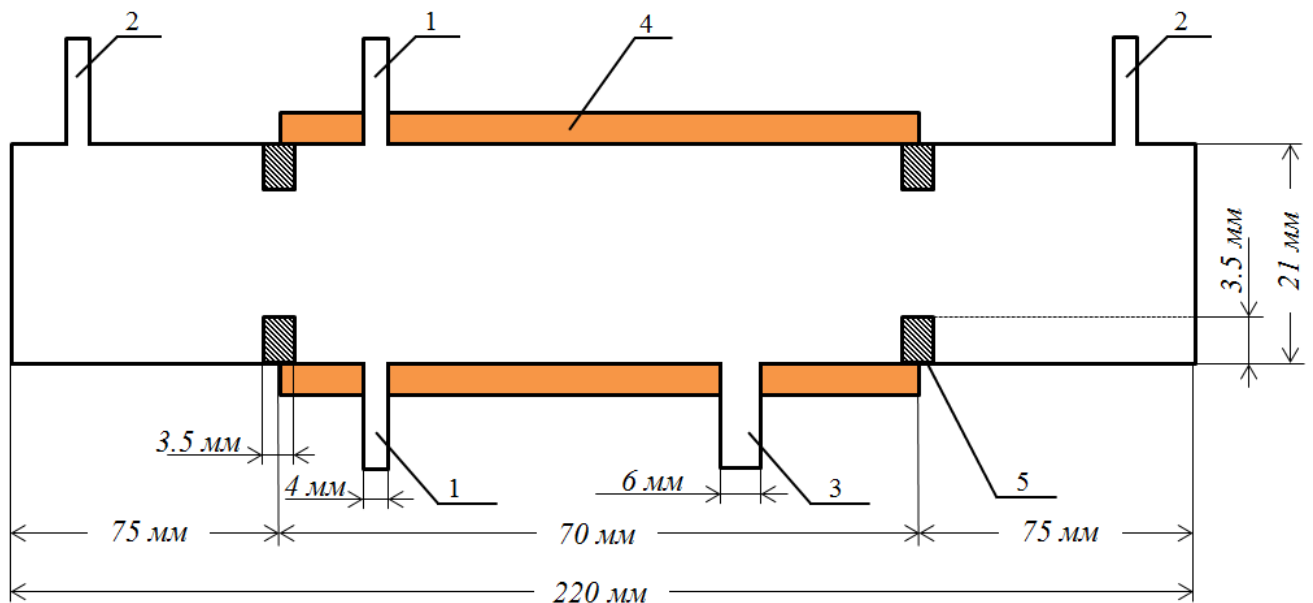


Рис. 3.1. Геометрия расчетной области

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°C. Через вводы (2) подается защитный газ метан, температура $T = 27^\circ\text{C}$. Выход продуктов пиролиза осуществляется через выход (3).

Для определения граничных условий поверхность реактора условно можно разделить на пять частей: область нагревательного элемента (4), область корпуса вне нагревателя, торцевые стенки, вводы реагирующей смеси (1), вводы защитного газа (2), вывод продуктов реакции (3).

Для стенок реактора задаются условия.

1. Температура нагревательных элементов (4) $T = 642^\circ\text{C}$.
2. Температура торцевых стенок $T = 27^\circ\text{C}$.
3. Температура корпуса вне нагревателя и торцевых стенок изменяется по линейному закону от 642°C к 27°C у торцевых стенок.

Целью расчетов является получение картины распределения плотности, температуры, массовых долей продуктов пиролиза и исходной газовой смеси при заданных начальных условиях по всему объему реактора. Для сопоставления экспериментальных и расчетных данных стоит задача выявления зависимости конверсии исходной газовой смеси от температуры нагревательных элементов.

С использованием разработанного программного комплекса проведено численное моделирование течения газа в проточном реакторе с использованием радикальной схемы реакции пиролиза этана, состоящей из 15 элементарных стадий, с начальными данными, описанными в данной главе. Исследована и проанализирована кинетика процесса, течение нестационарного газового потока в продольном срезе реактора. Проведены расчеты для различных температур нагревательных элементов, результатом которых является выявление зависимости конверсии этана от пристеночной температуры.

3.2 Математическая модель радикального механизма пиролиза этана

Случаи описания математической модели пиролиза этана с помощью упрощенных схем реакции ограничиваются низкой конверсией этана. В расчетах по таким схемам высокая конверсия этана достигается на более поздних временах, чем она наблюдается экспериментально [8]. В работе [8] показано, что пиролиз этана для его высоких конверсий хорошо описывается схемами, в которых учитывается генерация метильных радикалов по реакциям. При высоких конверсиях этана в смеси появляются компоненты C_2H_2 и C_3H_6 , содержание которых составляет выше 1%, поэтому их также необходимо учитывать при выборе схемы реакции.

В работе [28] предложена схема автокаталитического радикального механизма пиролиза этана (таблица 3.1). Поскольку данная схема учитывает метильную генерацию радикалов по реакциям, она хорошо описывает пиролиз этана для его высоких конверсий [8].

Введем следующие обозначения: $B_1 = [C_2H_6]$, $B_2 = [C_2H_4]$, $B_3 = [H_2]$, $B_4 = [CH_4]$, $B_5 = [CH_3^\bullet]$, $B_6 = [C_2H_5^\bullet]$, $B_7 = [H^\bullet]$, $B_8 = [n - C_3H_7^\bullet]$, $B_9 = [C_3H_6]$, $B_{10} = [C_2H_3^\bullet]$, $B_{11} = [C_2H_2]$, $B_{12} = [^\bullet C_2H_4]$.

Согласно обозначениям, последовательность химических превращений и кинетические уравнения можно представить в виде, представленном в таблице 3.2.

Скорость образования или расхода каждой компоненты в ходе реакции рассчитываем по закону действующих масс:

$$Q_1 = M_{w1} \cdot (-1 \cdot w_1 - 1 \cdot w_2 - 1 \cdot w_4 + 1 \cdot w_8 - 1 \cdot w_{14}),$$

$$Q_2 = M_{w2} \cdot (1 \cdot w_3 - 1 \cdot w_5 - 1 \cdot w_6 + 1 \cdot w_7 + 1 \cdot w_8 - 1 \cdot w_9 - 1 \cdot w_{10} - 1 \cdot w_{13} + 1 \cdot w_{15}),$$

$$Q_3 = M_{w3} \cdot (1 \cdot w_4 + 1 \cdot w_{12}),$$

$$Q_4 = M_{w4} \cdot (1 \cdot w_2 + 1 \cdot w_{10} + 1 \cdot w_{11}),$$

$$Q_5 = M_{w5} \cdot (2 \cdot w_1 - 1 \cdot w_2 - 1 \cdot w_6 + 1 \cdot w_7 - 1 \cdot w_{10} - 1 \cdot w_{11} + 1 \cdot w_{14}),$$

$$Q_6 = M_{w6} \cdot (1 \cdot w_2 - 1 \cdot w_3 + 1 \cdot w_4 + 1 \cdot w_5 - 2 \cdot w_8 + 1 \cdot w_9),$$

$$Q_7 = M_{w7} \cdot (1 \cdot w_3 - 1 \cdot w_4 - 1 \cdot w_5 - 1 \cdot w_{12}),$$

$$Q_8 = M_{w8} \cdot (1 \cdot w_6 - 1 \cdot w_7 - 1 \cdot w_9 + 1 \cdot w_{14}),$$

$$Q_9 = M_{w9} \cdot (1 \cdot w_9),$$

$$Q_{10} = M_{w10} \cdot (1 \cdot w_{10} - 1 \cdot w_{11} - 1 \cdot w_{12}),$$

$$Q_{11} = M_{w11} \cdot (1 \cdot w_{11} + 1 \cdot w_{12}),$$

$$Q_{12} = M_{w12} \cdot (1 \cdot w_{13} - 1 \cdot w_{14} - 1 \cdot w_{15}).$$

Удельная теплоемкость веществ задается многочленами [10]:

$$C_p = a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3.$$

Коэффициенты для многочленов теплоемкости приведены в таблице 3.3. Исключением является радикал водорода, его теплоемкость принята постоянной $C_{pH\cdot} = 20621 \text{ Дж/кг} \cdot \text{К}$ [10].

Параметры Леннард-Джонса, необходимые для расчета коэффициента диффузии представлены в таблице 3.4 [10]. В работе [10] они переопределены относительно предложенных по умолчанию [113-115].

Таблица 3.1

Схема и кинетические параметры механизма пиролиза этана

№	Стадия	$\lg A_i, 1/c$ или $л/(\text{моль} \cdot \text{с})$	$E_i, \text{кДж/моль}$
1	$C_2H_6 \rightarrow CH_3\cdot + CH_3\cdot$	16.0	360.0
2	$CH_3\cdot + C_2H_6 \rightarrow CH_4 + C_2H_5\cdot$	10.0	50.0
3	$C_2H_5\cdot \rightarrow C_2H_4 + H\cdot$	13.5	170.0
4	$H\cdot + C_2H_6 \rightarrow H_2 + C_2H_5\cdot$	11.0	40.0
5	$H\cdot + C_2H_4 \rightarrow C_2H_5\cdot$	10.4	8.4
6	$CH_3\cdot + C_2H_4 \rightarrow n - C_3H_7\cdot$	10.9	33.0

№	Стадия	$\lg A_i, 1/c$ или $л/(моль \cdot с)$	$E_i, кДж/моль$
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	$C_2H_4 \rightarrow \bullet C_2H_4^\bullet$	15.8	253.0
14	$\bullet C_2H_4^\bullet + C_2H_6 \rightarrow CH_3^\bullet + n - C_3H_7^\bullet$	14.7	216.0
15	$\bullet C_2H_4^\bullet \rightarrow C_2H_4$	5.38	0.0

Таблица 3.2

Кинетические уравнения для элементарных стадий реакции

№	Стадия реакции	Скорость стадии
1	$B_1 \rightarrow B_5 + B_5$	$w_1 = A_1 e^{(-E_1/RT)} \cdot c_1$
2	$B_5 + B_1 \rightarrow B_4 + B_6$	$w_2 = A_2 e^{(-E_2/RT)} \cdot c_1 \cdot c_5$
3	$B_6 \rightarrow B_2 + B_7$	$w_3 = A_3 e^{(-E_3/RT)} \cdot c_6$
4	$B_7 + B_1 \rightarrow B_3 + B_6$	$w_4 = A_4 e^{(-E_4/RT)} \cdot c_1 \cdot c_7$
5	$B_7 + B_2 \rightarrow B_6$	$w_5 = A_5 e^{(-E_5/RT)} \cdot c_2 \cdot c_7$
6	$B_5 + B_2 \rightarrow B_8$	$w_6 = A_6 e^{(-E_6/RT)} \cdot c_2 \cdot c_5$
7	$B_8 \rightarrow B_5 + B_2$	$w_7 = A_7 e^{(-E_7/RT)} \cdot c_8$
8	$B_6 + B_6 \rightarrow B_2 + B_1$	$w_8 = A_8 e^{(-E_8/RT)} \cdot (c_6)^2$
9	$B_8 + B_2 \rightarrow B_6 + B_9$	$w_9 = A_9 e^{(-E_9/RT)} \cdot c_2 \cdot c_8$
10	$B_5 + B_2 \rightarrow B_4 + B_{10}$	$w_{10} = A_{10} e^{(-E_{10}/RT)} \cdot c_2 \cdot c_5$

№	Стадия реакции	Скорость стадии
11	$B_5 + B_{10} \rightarrow B_4 + B_{11}$	$w_{11} = A_{11}e^{(-E_{11}/RT)} \cdot c_5 \cdot c_{10}$
12	$B_{10} + B_7 \rightarrow B_{11} + B_3$	$w_{12} = A_{12}e^{(-E_{12}/RT)} \cdot c_7 \cdot c_{10}$
13	$B_2 \rightarrow B_{12}$	$w_{13} = A_{13}e^{(-E_{13}/RT)} \cdot c_2$
14	$B_{12} + B_1 \rightarrow B_5 + B_8$	$w_{14} = A_{14}e^{(-E_{14}/RT)} \cdot c_1 \cdot c_{12}$
15	$B_{12} \rightarrow B_2$	$w_{15} = A_{15}e^{(-E_{15}/RT)} \cdot c_{12}$

Таблица 3.3

Коэффициенты для многочленов теплоемкости

	a_0	a_1	$-a_2 \cdot 10^{-3}$	$a_3 \cdot 10^{-7}$
C_2H_6	469.64	5.194	1.869	2.365
C_2H_4	572.57	4.002	1.448	1.829
H_2	14274.97	-0.366	-1.606	-4.63
CH_4	925.55	4.8358	1.336	1.347
C_2H_2	1057.9	2.391	0.965	1.412
C_3H_6	381.77	4.567	1.779	2.424
CH_3	1845.57	2.469	0.2902	-1.078
C_2H_3	511.205	4.128	2.222	4.832
C_2H_5	317.09	5.415	2.448	4.233
C_3H_7	19.37	6.476	3.566	7.774

Таблица 3.4

Параметры Леннард-Джонса

Параметры	σ_i	$(\varepsilon/k_b)_i$
C_2H_6	3.512	139.8
C_2H_4	3.33	137.7
H_2	2.827	59.7

Параметры	σ_i	$(\varepsilon/k_b)_i$
CH_4	3.7327	149.92
C_2H_2	3.55	129
C_3H_6	4.982	266.8
CH_3	3.8	144.0
C_2H_3	4.1	209.0
C_2H_5	4.302	252.3
C_3H_7	4.982	266.8
H	4.982	145.0

Исходя из начальных условий постановки задачи, разброс температур в области реактора может составлять сотни градусов. В этом случае значительно меняются величины характеристик компонент смеси, такие как теплопроводность, теплоемкость и вязкость. В работах [10, 12] предлагается использовать эффективные зависимости этих характеристик от температуры, которые были получены интерполяцией значений, представленных в справочной литературе [116, 117]. Расчеты теплопроводности, теплоемкости и вязкости компонент смеси с помощью предложенных температурных зависимостей приводят к более точному расчету температурного поля [12].

Коэффициенты теплопроводности этана, этилена, водорода, метана рассчитываются следующим образом [10]:

$$\lambda_{C_2H_6} = 1.11 \cdot 10^{-7}T^2 + 6.13 \cdot 10^{-5}T - 5.767 \cdot 10^{-3},$$

$$\lambda_{C_2H_4} = 1.07 \cdot 10^{-8}T^2 + 5.41 \cdot 10^{-5}T - 4.72 \cdot 10^{-3},$$

$$\lambda_{H_2} = 1.07 \cdot 10^{-8}T^2 + 0.00036T + 0.0827,$$

$$\lambda_{CH_4} = 8.114 \cdot 10^{-7}T^2 + 1.01 \cdot 10^{-4}T - 1.735 \cdot 10^{-3}.$$

Коэффициенты вязкости этана, этилена, водорода, метана согласно [10] имеют вид:

$$\begin{aligned}\mu_{C_2H_6} &= -9.02 \cdot 10^{-12}T^2 + 3.41 \cdot 10^{-8}T + 9.81 \cdot 10^{-9}, \\ \mu_{C_2H_4} &= -9.45 \cdot 10^{-12}T^2 + 3.67 \cdot 10^{-8}T + 0.22 \cdot 10^{-6}, \\ \mu_{H_2} &= -3.23 \cdot 10^{-12}T^2 + 1.93 \cdot 10^{-8}T + 3.77 \cdot 10^{-6}, \\ \mu_{CH_4} &= -9.85 \cdot 10^{-12}T^2 + 3.61 \cdot 10^{-8}T + 1.31 \cdot 10^{-6}.\end{aligned}$$

Для остальных компонент смеси, массовая концентрация которых мала, коэффициенты переноса приняты постоянными при $T_{ref} = 25.15^\circ\text{C}$ [118].

3.3 Результаты численного моделирования

В результате нагрева стенок реактора температура подаваемого газа становится достаточной для термического разложения этана на продукты пиролиза. Вследствие течения газа (рис. 3.2) и химических реакций происходит перераспределение компонент смеси по всему объему реактора. В результате смешения компонент газовой смеси формируется ламинарный поток вдоль реактора. На рис. 3.3-3.6 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 входы (2) (рис. 3.1), наибольшая концентрация целевых продуктов пиролиза – этилена и водорода наблюдается в правой части реакционной зоны, что объясняется движением продуктов в этом направлении и их накоплением. Диафрагмы оказывают влияние на движение газового потока, подаваемый через входы (2) метан концентрируется в «защитных» областях и предохраняет торцевые стенки от нагревания. Возникновение других элементов газовой смеси в этих областях происходит за счет диффузии газа.

На рис. 3.7 изображено распределение температуры в продольном сечении реактора. Максимальная температура газа наблюдается в пристеночных областях нагревательных элементов, а, следовательно, в этих областях химические превращения протекают наиболее интенсивно. Однако реакция пиролиза этана является эндотермической и проходит в условиях интенсивного поглощения

энергии, поэтому температура реагирующего газа всегда будет ниже температуры нагревательных элементов. В правой части реакционной зоны также наблюдается высокая температура, это объясняется нагревом стенок и удаленностью от областей ввода исходного газа, в которых газ не успевает прогреться за счет постоянной подачи этана в реакционную зону. Потоки метана, находящиеся в буферных зонах, не успевают охладить смесь в реакционной зоне, так как происходит постоянный внешний обогрев стенок.

На рис. 3.8 изображено распределение плотности, максимальное значение которой наблюдается на вводах этана и метана, а также в областях буферных зон. 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 (рис. 3.9).

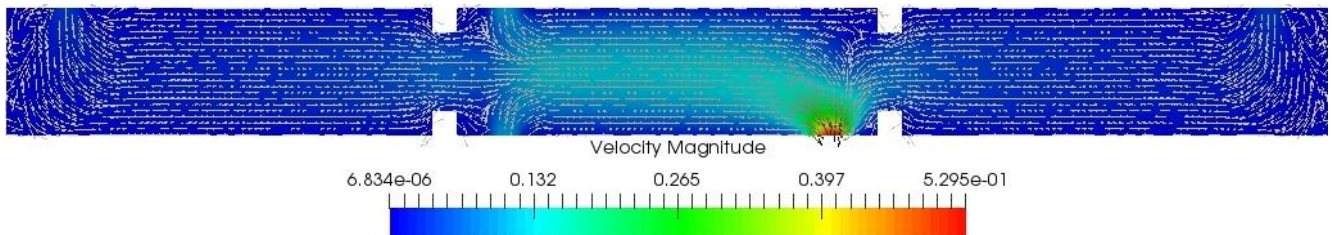


Рис. 3.2. Направление вектора скорости

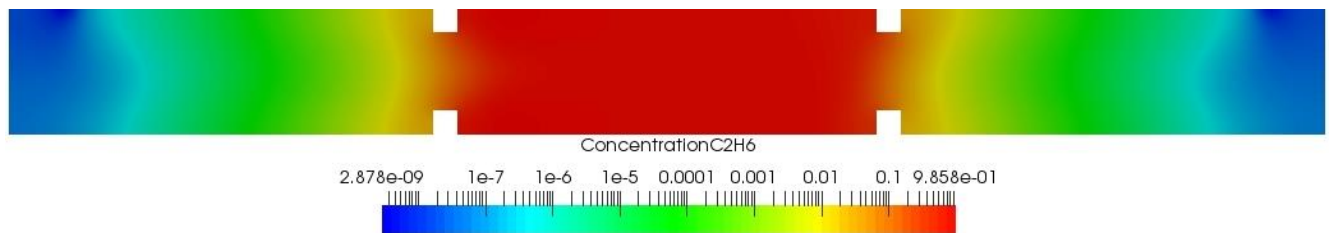


Рис. 3.3. Распределение массовой доли этана

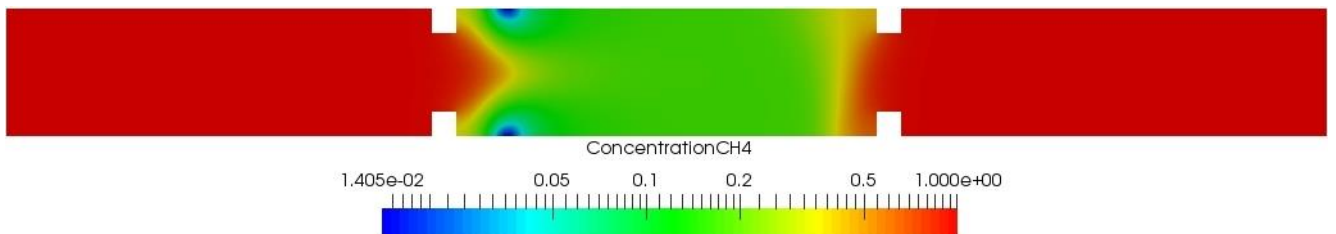


Рис. 3.4. Распределение массовой доли метана

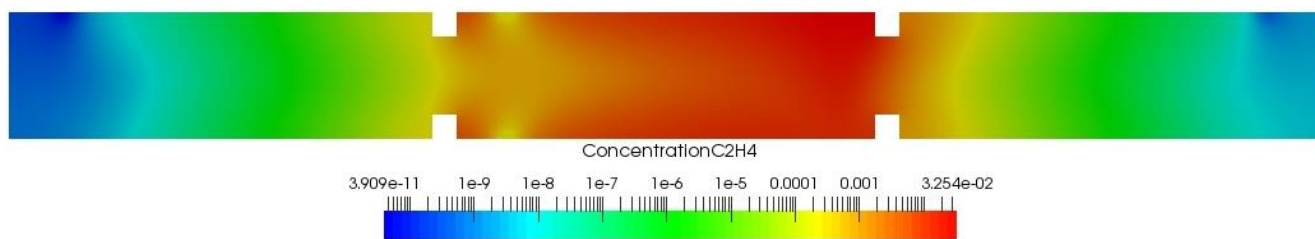


Рис. 3.5. Распределение массовой доли этилена

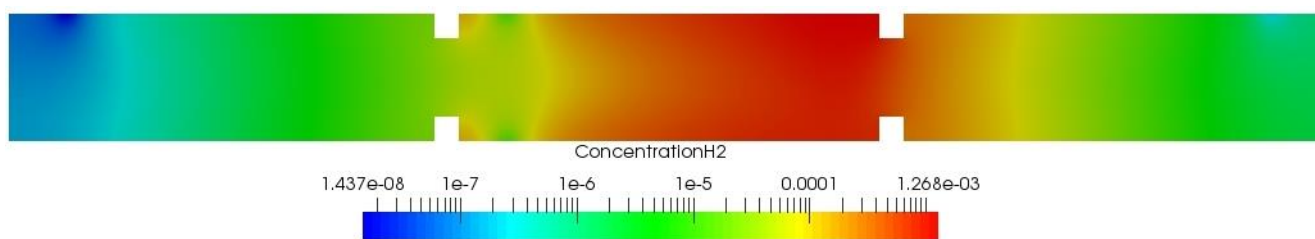


Рис. 3.6. Распределение массовой доли водорода

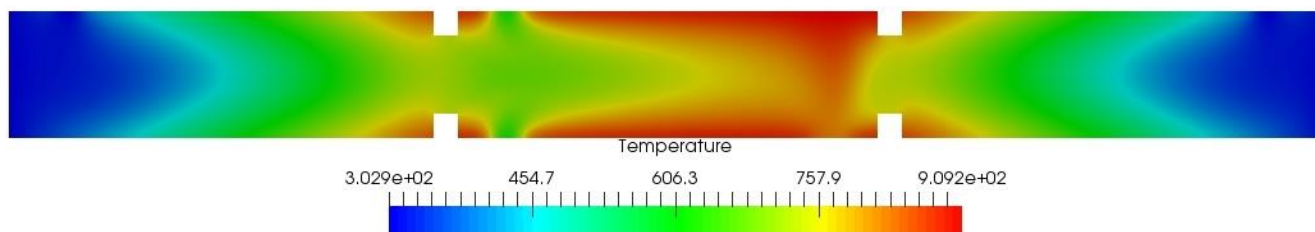


Рис. 3.7. Распределение температуры

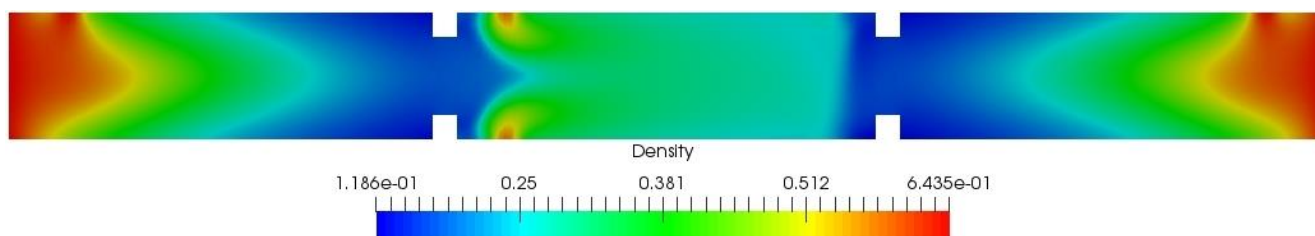


Рис. 3.8. Распределение плотности

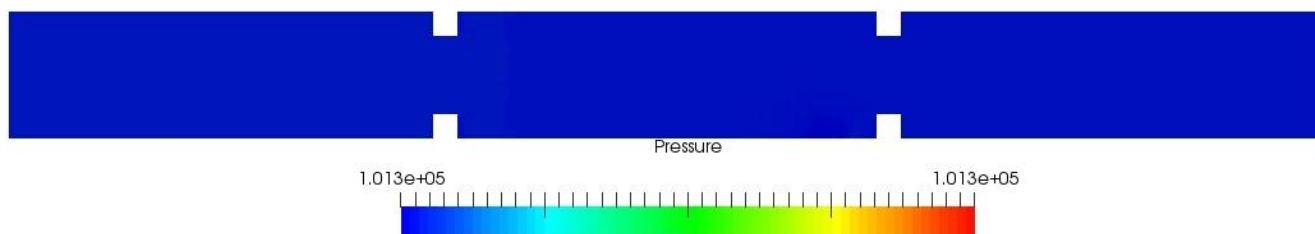


Рис. 3.9. Давление

3.4 Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными

Для сравнения результатов вычислительного эксперимента с экспериментальными данными расчеты проводились для разных температур нагревательных элементов.

Была проведена серия расчетов для следующих температур: 599°C, 648°C, 700°C, 742°C, 760°C, 778°C. На рис. 3.10 приведена зависимость конверсии этана от температуры нагревательных элементов по данным экспериментов и по результатам расчетов с помощью разработанного программного комплекса. При температуре нагревательных элементов 648°C конверсия этана составляет ниже 5%, при температуре 760°C возрастает до 48%. График зависимости демонстрирует хорошее совпадение экспериментальных данных и результатов расчетов на основе построенных численных алгоритмов.

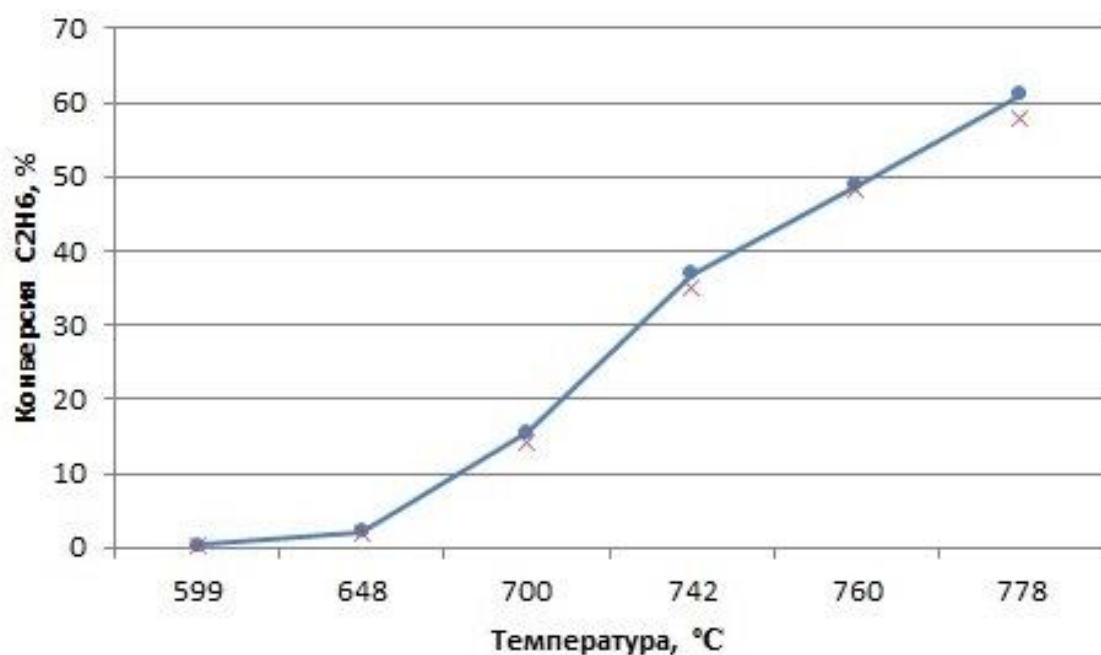


Рис. 3.10. Зависимость конверсии этана от пристеночной температуры.

Данные экспериментов – точки, данные моделирования – крестики

Заключение

- 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. Для решения системы уравнений химической кинетики использовалась схема второго порядка точности, основанная на специфическом виде химических задач. Построенный алгоритм реализован и протестирован на примере пиролиза этана в замкнутом реакторе. При построении математической модели пиролиза принята упрощенная кинетическая схема реакции пиролиза этана (брутто-реакция). Поведение газодинамических параметров соответствуют основным физико-химическим законам. Изменения концентраций химических веществ, полученные в результате расчетов, хорошо согласуются с экспериментальными исследованиями.
- На основе построенных схем разработан параллельный вычислительный алгоритм для многопроцессорной вычислительной техники с использованием технологии MPI. Создан параллельный 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.
- 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.

Литература

1. Мухина Т.Н., Барабанов Н.Л., Бабаш С.Е., Меньшиков В.А., Аврех Г.Л. Пиролиз углеводородного сырья. – Москва: Химия, 1987. – 240 с.
2. Жоров Ю.М. Кинетика промышленных органических реакций: справочник. – Москва: Химия, 1989. – 384 с.
3. Костин А. А. Популярная нефтехимия. Увлекательный мир химических процессов. – М.: Ломоносовъ, 2013. – 176 с.
4. Арутюнов В.С. Окислительная конверсия природного газа. – М.: Изд-во Красанд, 2011. – 590 с.
5. Арутюнов В.С. Новые перспективы малотоннажной газохимии // Газохимия. – 2010. - № 3 (13). – С. 16-21.
6. Богомолов А.И. Химия нефти и газа. – СПб: Химия, 1995. – 446 с.
7. Snytnikov V.N., Mischenko T.I., Snytnikov V.I.N., Chernykh I.G. A reactor for the study of homogeneous processes using laser radiation energy // Chemical Engineering Journal. – 2009. – V. 150. – P. 231-236.
8. Снытников В.Н., Мищенко Т.И., Снытников Вл.Н., Стояновская О.П., Пармон В.Н. Автокаталитическое газофазное дегидрирование этана в «бесстеночном» реакторе // Кинетика и катализ. – 2010. – Т. 51, № 1. – С. 12-20.
9. Snytnikov V.N., Mishchenko T.I., Snytnikov V.I.N., Malykhin S.E., Avdeev V.I., Parmon V.N. Autocatalytic gas-phase dehydrogenation of ethane // Research on Chemical Intermediates. – 2012. – V. 38. – P. 1133-1147.
10. Stadnichenko O.A., Snytnikov V.N., Snytnikov V.I.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.

11. Yang J., Matar O., Stadnichenko O., Snytnikov V. Numerical study of a laser-induced ethane pyrolysis in a wall-less reactor using a reduced kinetic scheme // Proceedings of the 25th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (25th ICDERS). – 2015. – P. 303-308.
12. 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.
13. Баранов В.Ю., Борисов В.М., Виноходов А.В. и др. Воздействие лазерного излучения с $\lambda = 308$ нм на пиролиз 1,2-дихлорэтана // Квантовая электроника. – 1983. – Т. 10, № 7. – С. 1406-1412.
14. Вольтер Б. В., Сальников И. Е. Устойчивость режимов работы химических реакторов. 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Химия, 1981. – 198 с.
15. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика сплошных сред. – М.: Гостехиздат, 1953. – 788 с.
16. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Наука, 1979 – 904 с.
17. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Том 1. – М.: Наука, 1970. – 492 с.
18. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том VI. Гидродинамика. – М.: Наука, 1988. – 736 с.
19. Кочин Н.Е., Кибель И.А., Розе Н.В. Теоретическая гидромеханика. Часть 2. – М.: Физматгиз, 1963. – 728 с.
20. 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.
21. 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.

22. Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // *Combustion Theory and Modelling*. P. 535-556.
23. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. – М.: Мир, 1980. – 618 с.
24. Toro E.F. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics. Berlin: Springer, 1999.
25. Патанкар С.В. Численное решение задач теплопроводности и конвективного теплообмена при течении в каналах. Пер. с англ. – М.: Издательство МЭИ, 2003. – 312 с.
26. Слинько М.Г. Основы и принципы математического моделирования каталитических процессов. – Новосибирск: Наука, 2004. – 488 с.
27. Masel R.I. *Chemical Kinetics and Catalysis* – New York: Wiley Interscience, 2001. – 952 p.
28. 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.
29. Самарский А. А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1989 – 616 с.
30. Самарский А. А., Попов Ю. П. Разностные методы решения задач газовой динамики. – М.: Наука, 1992. – 424 с.
31. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. – М.: Наука, 1978. – 532 с.
32. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. – 608 с.
33. Годунов С.К., Рябенький В.С. Разностные схемы. – М.: Наука, 1977. – 440 с.
34. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. – М.: Наука, 1971. – 552 с.

35. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М: Наука, 1983. – 616 с.
36. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – М.: Наука, 1989. – 432 с.
37. Лапин Ю.В., Стрелец М.Х. Внутренние течения газовых смесей. – М.: Наука, 1989. – 368 с.
38. Петражицкий Г.Б., Полежаев В.И. Исследование режимов теплообмена и структуры вихревого течения при свободном движении вязкого сжимаемого газа в двумерных полостях // Тр. Моск. высш. техн. уч-ща им. Н.Э. Баумана. – 1976. - №222. – С. 27-66.
39. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. – М.: Энергоатомиздат, 1984.
40. Metzner M. and Wittum G. Computing low Mach number flows by parallel adaptive multigrid // Computing and visualization in science. – 2006. – 9(4). – P. 259-269.
41. Turkel E., Radespiel R. and Kroll N. Assessment of preconditioning methods for multidimensional aerodynamics // Computers & Fluids. – 1997. – Vol 26, № 6. – P. 613-634.
42. Almgren A.S., Bell J.B., Szymczak W.G. A numerical method for the incompressible Navier-Stokes equations based on an approximate projection // SIAM J. Sci. Comput. – 1996. – 17. P. 358-369.
43. Bell J.B., Colella P., Glaz H.M. A second-order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations // J. Comput. Phys. – 1989. – 85. P. 257-283.
44. Годунов С.К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики // Матем. сб. – 1959. – 47, Вып. 3. – С. 271-306.
45. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. – М.: Наука, 1976. – 400 с.

46. Куликовский А.Г., Погорелов Н. В, Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. – М.: Физматлит, 2001. – 608 с.
47. Roe P.L. Approximate Riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes // *Journal of Computational Physics*. – 1981. – V. 43, № 2 – P. 357-372.
48. Harten A., Lax P.D., van Leer B. On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws // *SIAM Review* 25. – 1983. – 1. – P. 35-61.
49. Бондаренко Ю.А., Башуров В.В., Янилкин Ю.В. Математические модели и численные методы для решения задач нестационарной газовой динамики. Обзор зарубежной литературы // Препринт. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ. – 2003. – № 88. – 53 с.
50. Колган В.П. Применение принципа минимальных значений производной к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики // *Ученые записки ЦАГИ*. – 1972. – Т. 3, № 6. – С. 68-77.
51. Van Leer B. Towards the ultimate conservative finite difference scheme. II. Monotonicity and conservation combined in a second order scheme // *Journal of Computational Physics*. – 1974. – V. 14. – P. 361-376.
52. Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference schemes. III. Upstream-centered finite-difference schemes for ideal compressible flow // *Journal of Computational Physics*. – 1977. – V. 23, № 3. – P. 263-275.
53. Van Leer B. Towards the ultimate conservative finite difference scheme. IV. A new approach to numerical convection // *Journal of Computational Physics*. – 1977. – V. 23, № 3. – P. 276-298.
54. Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme. V. A second order sequel to Godunov's methods // *Journal of Computational Physics*. – 1979. – V. 32, № 1. – P. 101-136.

55. Boris J.P., Book D.L., Hain K. Flux-corrected transport: Generalization of the method // *Journal of Computational Physics*. – 1975. – V. 18. – P. 248-283.
56. Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws // *Journal of Computational Physics*. – 1983. – V. 49. – P. 357-393.
57. Harten A. On a class of high resolution total-variation-stable finite-difference schemes // *SIAM J. Numer. Anal.* – 1984. – V. 21. – P. 1-23.
58. Osher S. Riemann solvers, the entropy condition, and difference approximation // *SIAM J. Numer. Anal.* – 1984. – V. 21, № 2. – P. 217-235.
59. Вязников К.В., Тишкин В.Ф., Фаворский А.П. Построение монотонных разностных схем повышенного порядка аппроксимации для систем линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами гиперболического типа // *Математическое моделирование*. – 1989. – Т. 1, № 5, с.95-120.
60. Тишкин В.Ф., Никишин В.В., Попов И.В., Фаворский А.П. Разностные схемы трехмерной газовой динамики для задачи о развитии неустойчивости Рихтмайера-Мешкова // *Математическое моделирование*. – 1995. – Т. 7, № 5. – С. 15-25.
61. Harten A., Osher S. Uniformly high-order accurate essentially non-oscillatory scheme. I // *SIAM J. Numer. Anal.* – 1987. – V. 24, № 2. – P. 279-309.
62. Harten A., Engquist B., Osher S., Chakravarthy S.R. Uniformly high-order accurate essentially non-oscillatory scheme. III // *Journal of Computational Physics*. – 1987. – V. 71, № 2. P. 231-303.
63. Shu Ch.-W., Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes // *Journal of Computational Physics*. – 1988. – V. 77, № 2. – P. 439-471.
64. Shu Ch.-W., Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. II // *Journal of Computational Physics*. – 1989. – V. 83, № 1. – P.32-78.

65. Liu X.-D., Osher S., Chan T. Weighted essentially non-oscillatory schemes // Journal of Computational Physics. – 1994. – V. 115. – P. 200-212.
66. Jiang G.-S., Shu C.-W. Efficient implementation of weighted ENO schemes // Journal of computational physics. – 1996. – 126. – P. 202-228.
67. Shu C.-W. Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws // ICASE Report 97-65. – 1997. – 83 p.
68. Henrick A.K., Aslam T.D., Powers J.M. Mapped weighed essentially non-oscillatory schemes: Achieving optimal order near critical points // Journal of Computational Physics. – 2005. – 207. – P. 542-567.
69. Жалнин 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, № 10. – С. 61–66.
70. Жалнин Р.В. О построении параллельного вычислительного алгоритма высокого порядка точности для гиперболических систем уравнений // Журнал Средневолжского математического общества. – 2007. – Т. 9, № 1. – С. 145-153.
71. Hu C., Shu C.-W. Weighted essentially non-oscillatory schemes on triangular meshes // ICASE Report 98-32. – 1998. – 30 p.
72. Hu C., Shu C.-W. Weighted essentially non-oscillatory schemes on triangular meshes // Journal of Computational Physics. – 1999. – 150. P. 97-127.
73. Zhang Y.-T., Shu C.-W. Third order WENO scheme on three dimensional tetrahedral meshes // Communications in computational physics. – 2009. – 5. – P. 836-848.
74. Shi J., Hu C., Shu C.-W. A technique of treating negative weights in WENO schemes // Journal of Computational Physics. – 2002. – 175. – P. 108-127.
75. Галанин М.П., Ходжаева С.Р. Методы решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений. Результаты тестовых расчетов // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2013. – № 98. – 29 с.

76. Gear W.C. Numerical initial value problems in ordinary differential equations. – New Jersey: Prentice Hall, 1971. – 253p.
77. Rosenbrock H. H. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations // The Computer Journal. – 1963. – 5(4). – 329-330.
78. Гольдин В.Я., Калиткин Н.Н. Нахождение знакопостоянных решений обыкновенных дифференциальных уравнений // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. –1966. – Т. 6, № 1. – С. 162-163.
79. Белов А.А., Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В. Моделирование химической кинетики в газах // Математическое моделирование. – 2016. – Т 28, № 8. – С. 46-64.
80. Воеводин В. В., Воеводин Вл. В. Параллельные вычисления. – СПб.: БХВ-Петербург, 2002. – 608 с.
81. Воеводин В.В. Математические модели и методы в параллельных процессах. – М.: Наука, 1986. – 296 с.
82. Антонов А.С. Параллельное программирование с использованием технологии MPI: Учебное пособие. – М.: Изд-во МГУ, 2004. – 71 с.
83. Гергель В.П. Теория и практика параллельных вычислений: Учебное пособие. – М.: Интернет-Университет Информационных технологий; БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007. – 423с.
84. Жалнин Р.В. Построение параллельных вычислительных алгоритмов высокого порядка точности для уравнений газовой динамики: Автореф. дис. ... к.ф.-м.н.: 05.13.18. – Саранск, 2007.
85. Волков К.Н., Дерюгин Ю.Н., Емельянов В.Н., Карпенко А.Г., Козелков А.С., Тетерина И.В. Методы ускорения газодинамических расчетов на неструктурированных сетках. – М.:ФИЗМАТЛИТ, 2014. – 536 с.
86. Четверушкин Б. Н., Тишкин В. Ф. Применение высокопроизводительных многопроцессорных вычислений в газовой динамике // Мат. моделирование: проблемы и результаты. М.: Наука, 2003. С. 123–168.

87. Интернет-ресурс: <http://www.mpi-forum.org>.
88. Интернет-ресурс: <http://www.parallel.ru>.
89. Ладонкина М.Е. Численное моделирование турбулентного перемешивания с использованием высокопроизводительных систем: Автореф. дис. ... к.ф.-м.н.: 05.13.18. – ИММ РАН, Москва, 2012.
90. Чеванин В.С. Численное моделирование задач турбулентного перемешивания на основе квазимонотонной схемы повышенного порядка точности: Автореф. дис. ... к.ф.-м.н.: 05.13.18. – Москва, 2004.
91. Оран Э., Борис Дж. Численное моделирование реагирующих потоков. – М.: Мир, 1990. – 664 с.
92. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. – М.: ИЛ, 1961. – 929 с.
93. Grcar J.F. An Explicit Runge-Kutta Iteration for Diffusion in the Low Mach Number Combustion Code // Lawrence Berkeley National Laboratory Report LBNL-63375. – 2007.
94. Taylor R., Krishna R. Multicomponent mass transfer. – New York: Wiley, 1993.
95. Poling B.E., Prausnitz J.M., O'Connell J.P. The properties of gases and liquids. – New York: McGraw-Hill, 2001.
96. Bird R.B., Stewart W.E., Lightfoot E.N. Transport Phenomena. – New York: John Wiley and Sons, 2002. – 895 p.
97. Саразов А.В., Зеленский Д.К., Корчажкин Д.А., Никитин В.Ф. Моделирование процессов горения кислородно-водородной смеси в пакете программ ЛОГОС // Тезисы докладов XIV Международной конференции "Супервычисления и математическое моделирование". – 2012. – С. 513-520.
98. Борисов В.Е., Кулешов А.А., Савенков Е.Б., Якуш С.Е. Программный комплекс TCS 3D: математическая модель // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2015. – № 6 – 20 с.

99. Борисов В.Е., Кулешов А.А., Савенков Е.Б., Якуш С.Е. Программный комплекс TCS 3D: вычислительная модель // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. – 2015. – № 110 – 20 с.
100. Штиллер В. Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика. – Москва: Мир, 2000. – 176 с.
101. Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидромеханика и теплообмен: В 2-х т. Т. 2. – М.: Мир, 1990. – 728-392 с.
102. Русанов В.В. Расчет взаимодействия нестационарных ударных волн с препятствиями // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1961. – Т. 1, № 2. – С. 267-279.
103. Lax 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.
104. Klein B., Muller B., Kummer F., Oberlack M. A high-order Discontinuous Galerkin solver for low-Mach number flows // International Journal for Numerical Methods in Fluids. – 2016. – 81 (8). – P. 489-520.
105. Волков К.Н., Емельянов В.Н. Вычислительные технологии в задачах механики жидкости и газа. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. – 468 с.
106. 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. – URL: <http://journal.mrsu.ru/arts/matematiceskaya-model-dinamiki-mnogokomponentnogo-gaza-na-primere-brutto-reakcii-piroliza-etana>.
107. 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.
108. 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.

109. 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.
110. Жалнин Р.В., Пескова Е.Е., Стадниченко О.А., Тишкин В.Ф. Построение параллельных алгоритмов высокого порядка точности для моделирования динамики реагирующих потоков // Параллельные вычислительные технологии [короткие статьи и описания плакатов]. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. – 2017. – С. 288–296.
111. The ParaView Guide. Updated for ParaView version 5.0. [Электронный ресурс]: официальный сайт. – Режим доступа: <http://www.paraview.org/paraview-guide>.
112. The VTK User's Guide. 11th Edition. [Электронный ресурс]: официальный сайт. – Режим доступа: <http://www.kitware.com/products/books/VTKUsersGuide.pdf>.
113. Nwobi O.C., Long L.N., Micci M.M. Molecular dynamics studies of thermophysical properties of supercritical ethylene // Journal of Thermophysics and Heat Transfer. – 1999. – V. 13, № 3. P. 351-354.
114. Fischer J., Lustig R., Breitenfelder-Manske H., Lemming W. Influence of intermolecular potential parameters on orthobaric properties of fluids consisting of spherical and linear molecules // Molec. Phys. – 1984. – V. 52, № 2. – P. 485–497.
115. Zhang Z., Duan Z. Phase equilibria of the system methane–ethane from temperature scaling Gibbs ensemble Monte Carlo simulation // Geochim. Cosmochim. Acta. – 2002. – V. 66, № 19, P. 3431–3439.
116. Григорьев И.С., Мейлихов Е.З. Физические величины. Справочник. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
117. Кикоин И.К. Таблицы физических величин. – М.: Атомиздат, 1976. – 1008 с.

118. NIST Chemistry WebBook [Электронный ресурс]. – Режим доступа:
<http://webbook.nist.gov/chemistry/>.